

مطالعه عددی تاثیر سینتیک شیمیایی و مدل تشعشعی بر میدان دما و سرعت در احتراق گاز طبیعی-اکسیژن با استفاده از مدل احتراقی فلیملت پایا

اسماعیل ابراهیمی فردویی^۱، کیومرث مظاهری^{۲*} و فائزه احسانی درخشان^۳

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، E.Ebrahimifordoei@modares.ac.ir

۲- استادی، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، Kiumars@modares.ac.ir

۳- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، f.ehsaniderakhshan@modares.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۶/۷/۲۳، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۶/۱۰/۲۴، پذیرش: ۹۶/۱۲/۲)

چکیده: هدف مطالعه حاضر بررسی تاثیر سینتیک شیمیایی و مدل تشعشعی در شبیه‌سازی احتراق گاز طبیعی-اکسیژن با استفاده از مدل احتراقی فلیملت است. بدین منظور از سه سینتیک شیمیایی C1_C3، DRM22 و GRI3.0 جهت بررسی سینتیکی و از دو مدل تشعشعی DO و P1 به منظور بررسی تاثیر مدل تشعشعی استفاده شده است. همچنین، نتایج حاصل از در نظر گرفتن انتقال حرارت تشعشعی با شرایط بدون تشعشع نیز مقایسه شده است. نتایج حاصل از مدل فلیملت با داده‌های تجربی و مدل احتراقی PaSR مقایسه شده‌اند. مهم‌ترین مزیت استفاده از مدل احتراقی فلیملت نسبت به مدل PaSR کاهش قابل توجه هزینه محاسبات است. مطابق با نتایج به دست آمده، سینتیک C1_C3 بالاترین دقت را در پیش‌بینی توزیع دمای داخل کوره داشته و شعله ایجاد شده به وسیله آن تطابق خوبی با شبیه‌سازی انجام شده به وسیله مدل احتراقی PaSR دارد، در حالی که طول شعله حاصل از سینتیک‌های DRM22 و GRI3.0 بسیار کم پیش‌بینی شده است. علاوه بر این، استفاده از مدل تشعشعی P1 در مقایسه با مدل DO به علت پیش‌بینی بیشتر مقادیر تلفات تشعشعی در آن منجر به خطای محاسباتی بیشتر در محاسبه توزیع دما و همچنین پیش‌بینی طول ناحیه دمابالا درون کوره می‌شود.

کلیدواژگان: احتراق گاز طبیعی-اکسیژن، مدل احتراقی فلیملت، انتقال حرارت تشعشعی، سینتیک شیمیایی

مقدمه

افزایش دمای کره زمین در اثر انتشار گازهای گلخانه‌ای یکی از چالش‌های جامعه بشری در قرن حاضر است. دی‌اکسید کربن اصلی‌ترین گاز گلخانه‌ای است که سهم عمده‌ای در افزایش دمای کره زمین دارد [۱، ۲]. یکی از منابع اصلی انتشار CO₂ تامین انرژی مورد نیاز در اثر احتراق سوخت‌های فسیلی است [۳]. در سال‌های اخیر، بررسی‌های زیادی بر روی روش‌های مختلف کاهش دی‌اکسید کربن و همچنین ضبط و ذخیره آن در فرایندهای احتراقی انجام شده است. یکی از روش‌های عملی در جهت کاهش انتشار دی‌اکسید کربن استفاده از فرایند احتراقی سوخت-اکسیژن است [۱، ۳]. با توجه به غلظت بالای اکسیژن در این احتراق، محصولات احتراقی به صورت عمده شامل بخار آب و دی‌اکسید کربن‌اند که این موضوع امکان جداسازی CO₂ را با استفاده از فرایند چگالش فراهم می‌آورد. در نهایت، با جداسازی دی‌اکسید کربن امکان ضبط و ذخیره‌سازی آن به منظور استفاده در کاربردهای دیگر فراهم می‌آید. علاوه بر نقش احتراق سوخت-اکسیژن در کنترل انتشار دی‌اکسید کربن، این احتراق، به دلیل تولید دمای بالا در کوره‌های صنعتی نیز، کاربرد دارد [۴، ۵]. بنابراین، بررسی مدل‌های شبیه‌سازی، که در کنار دقت مطلوب، از هزینه محاسباتی مناسبی نیز برخوردار باشند، حائز اهمیت است. یکی از مهم‌ترین موضوعات بررسی شده در ارتباط

با شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن، بحث سینتیک‌های شیمیایی متناسب با فرایند این احتراق است. در احتراق سوخت-اکسیژن، به‌علت جایگزینی نیتروژن با اکسیژن، دمای حاصل از واکنش‌های شیمیایی بسیار بالاتر از احتراق سوخت-هواست. افزایش دمای فرایند احتراق منجر به تولید رادیکال بیشتری می‌شود که این موضوع به‌وسیله سینتیک‌های کاهش‌یافته قابل پیش‌بینی نیست و می‌تواند منجر به خطا در پیش‌بینی صحیح دما و توزیع گونه‌ها شود. با توجه به این موضوع، در زمینه اصلاح سینتیک‌های شیمیایی مورد استفاده در احتراق سوخت-هوا، به‌منظور استفاده در احتراق سوخت-اکسیژن، مطالعات مختلفی انجام شده است. سینتیک‌های سه و شش‌مرحله‌ای برای استفاده در احتراق سوخت-اکسیژن، اولین بار، توسط اندرسن و همکاران [۶] ارائه شد. در این سینتیک‌ها، ضرایب و مراحل در نظر گرفته‌شده به‌گونه‌ای لحاظ شده‌اند که قابلیت استفاده از آن‌ها در احتراق با غلظت‌های مختلف اکسیژن وجود دارد. نتایج به‌دست آمده از این سینتیک‌ها با استفاده از حلگر شعله نفوذی جریان متقابل با داده‌های تجربی مقایسه شد. در این نتایج، تطابق و دقت قابل قبول سینتیک‌های اصلاح‌شده در گستره وسیعی از غلظت‌های اکسیژن با داده‌های تجربی مشاهده شد. بین و همکاران [۷] به اصلاح سینتیک‌های شیمیایی دو مرحله‌ای وستبروک-درایر و چهار مرحله‌ای جونز-لیندستت به‌منظور استفاده در احتراق متان-اکسیژن پرداختند. در این مطالعه، ضمن اصلاح ضرایب واکنش‌ها برای استفاده از سینتیک‌های بیان‌شده در احتراق متان-اکسیژن، به‌ترتیب یک و دو مرحله واکنش تجزیه‌ای به سینتیک‌های وستبروک-درایر و جونز-لیندستت اضافه شد. نتایج به‌دست آمده با استفاده از سینتیک‌های اصلاح‌شده دقت بسیار بهتری نسبت به سینتیک‌های اولیه نشان می‌دهد (توزیع مونوکسیدکربن درون کوره با استفاده از سینتیک‌های اصلاح‌شده حدود ۵۰ درصد دقت بالاتری نسبت به سینتیک اولیه دارد).

موضوع مهم دیگری که در جریان‌های واکنشی از اهمیت بالایی برخوردار است، مدل‌سازی انتقال حرارت تشعشی است. در این جریان‌ها، به‌علت دمای بالای گازهای حاصل از احتراق، تشعشع از اهمیت بالایی برخوردار است. دو گونه بسیار مهم، که به‌علت ضرایب جذب و گسیل بالا سهم عمده‌ای در انتقال حرارت تشعشی دارند، CO_2 و H_2O هستند. در فرایند احتراق سوخت-اکسیژن، این گونه‌ها، به‌علت استفاده بیشتر از اکسیژن در اکسیدکننده، قسمت عمده‌ای از محصولات احتراقی را شامل می‌شوند که این موضوع سبب می‌شود تا تشعشع در این احتراق از اهمیت بیشتری برخوردار باشد. در ارتباط با پیش‌بینی صحیح انتقال حرارت تشعشی، دو موضوع مهم وجود دارد که شامل نوع مدل تشعشی مورد استفاده و نحوه محاسبه ضرایب جذب و گسیل است. بین و همکاران [۷-۹] مدل WSGGM^۱ ارائه‌شده توسط اسمیت [۱۰] را به‌منظور محاسبه ضرایب جذب و گسیل در احتراق سوخت-اکسیژن اصلاح کردند. مدل اصلاح‌شده در شبیه‌سازی یک کوره آزمایشگاهی با توان یک مگاوات و یک دیگ بخار واقعی با توان ۶۰۹ مگاوات به‌کار گرفته شد. نتایج به‌دست آمده نشان‌دهنده آن است که مدل WSGGM اصلاح‌شده نسبت به مدل WSGGM اسمیت در کوره آزمایشگاهی تفاوت چندانی نداشته، در حالی که در دیگ بخار واقعی منجر به تفاوت قابل توجهی شده و بهبود نتایج به‌صورت قابل توجه را نشان می‌دهد. مقایسه میان محاسبه ضرایب جذب و گسیل با استفاده از دو روش گازهای خاکستری و غیرخاکستری، به‌منظور شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن، توسط ویاتون و همکاران [۱۱] انجام گرفت. در این مطالعه، تمامی شرایط شبیه‌سازی برای دو حالت محاسبه ضرایب جذب و گسیل، از جمله مدل اغتشاشی، احتراقی و تشعشی، یکسان در نظر گرفته شده است. نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهند که تفاوت بسیار ناچیزی در پیش‌بینی توزیع دما و گونه‌ها با استفاده از دو مدل وجود داشته، در حالی که زمان شبیه‌سازی با استفاده از فرض گازهای غیرخاکستری بیشتر است.

با توجه به پژوهش‌های انجام‌گرفته، مدل تشعشی و سینتیک شیمیایی اهمیت زیادی در پیش‌بینی توزیع دما و گونه‌ها در احتراق سوخت-اکسیژن دارند. در مدل‌های احتراقی، که در آن‌ها تنها شیمی واکنش‌ها در نظر گرفته شده و آشفستگی جریان لحاظ نمی‌شود، با توجه به اهمیت بالای آشفستگی در فرایندهای احتراق صنعتی، نمی‌توان پیش‌بینی صحیحی از فرایند احتراقی

1. Weighted Sum of Gray Gases Model

سوخت-اکسیژن را فراهم آورد. از طرفی، مدل‌های احتراقی که تنها آشفستگی جریان را در نظر گرفته و فقط از سینتیک‌های شیمیایی یک یا دو مرحله‌ای در آن‌ها می‌توان استفاده کرد، به علت عدم در نظر گرفتن واکنش‌های تجزیه‌ای و رادیکال‌ها در محاسبات شیمیایی، خطای بالایی در حل عددی ایجاد می‌کنند. همچنین، در مدل‌های احتراقی، که در آن‌ها آشفستگی جریان و سینتیک شیمیایی لحاظ می‌شود، استفاده از سینتیک‌های شیمیایی کامل و مدل تشعشی فاز گسسته در سیستم‌های احتراق صنعتی منجر به هزینه محاسباتی بسیار بالایی خواهد شد.

به منظور کاهش هزینه محاسبات، در سال‌های اخیر، بر روی شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن، با استفاده از مدل احتراقی فلیملت^۱، مطالعاتی انجام شده است. مطالعه عددی استفاده از روش فلیملت پایا در محیط‌های احتراقی مختلف در کوره عملیات حرارتی به وسیله پرلیر [۱۲] انجام گرفته است. در این مطالعه، احتراق در نسبت‌های مختلف O_2/N_2 بررسی شده و نتایج به دست آمده از آن با داده‌های تجربی و شبیه‌سازی عددی با استفاده از مدل احتراقی EDC^۲ و مدل احتراقی EDM^۳ مقایسه شده است. نتایج به دست آمده نشان‌دهنده پیش‌بینی بسیار خوب (بیشینه خطای ۵ درصدی) میدان دمایی در تمامی مقادیر غلظت اکسیژن در اکسیدکننده ورودی است. علاوه بر این، شبیه‌سازی‌های انجام شده با استفاده از سینتیک‌های GRI3.0، smooke46 و smooke25 نشان‌دهنده آن است که سینتیک smooke46 بهترین نتایج را ارائه می‌دهد [۱۲]. طبق نتایج این پژوهش، مدل احتراقی EDM برای شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن نامناسب بوده و مدل EDC نیز زمان زیادی را صرف شبیه‌سازی می‌کند. مایر و همکاران [۱۳]، در مطالعه دیگری، به بررسی محدودیت‌ها و قابلیت استفاده از مدل احتراقی فلیملت پایا در احتراق سوخت-اکسیژن پرداختند. در این بررسی، به تاثیر بررسی انواع سینتیک‌های شیمیایی با استفاده از مدل فلیملت پرداخته شد. نتایج این بررسی نشان‌دهنده پیش‌بینی کمتر مقادیر دما به وسیله سینتیک GRI3.0 تحت شرایط احتراق سوخت-اکسیژن بوده و این سینتیک برای شرایط احتراق سوخت-اکسیژن با استفاده از مدل احتراقی فلیملت ناکارآمد معرفی شد. با توجه به هزینه محاسباتی پایین در مدل احتراقی فلیملت، امکان استفاده از آن در شبیه‌سازی کوره‌های صنعتی، به منظور بهینه‌سازی فرایند احتراق و انتقال حرارت در آن‌ها، وجود دارد. پرلیر و همکاران [۱۴]، در مطالعه‌ای، به شبیه‌سازی دو کوره احتراقی سوخت-اکسیژن در مقیاس‌های آزمایشگاهی و همچنین صنعتی با استفاده از مدل احتراقی فلیملت پایا پرداختند. در این مطالعه، با استفاده از پارامترهای مختلف به بهینه‌سازی فرایند انتقال حرارت درون کوره پرداخته شد. مطابق با نتایج این مطالعه، زمان شبیه‌سازی با استفاده از مدل فلیملت پایا حدود ۴ روز است که در مقایسه با شبیه‌سازی با مدل EDC، که زمان اجرای آن یک ماه است، بسیار کمتر است. مطالعه عددی شعله متان/هیدروژن در محفظه احتراق با حضور جسم مانع با استفاده از مدل‌های فلیملت پایا و ناپایا توسط چیتگرها و همکاران [۱۵] انجام شد. نتایج به دست آمده از این بررسی نشان‌دهنده اختلاف میان داده‌های تجربی و شبیه‌سازی‌های انجام شده در نزدیکی نازل‌های سوخت و هوای ورودی است. علت اختلاف نتایج در نزدیکی نازل‌های سوخت و هوای ورودی وجود اغتشاشات بیشتر در نواحی نزدیک به نازل و در نتیجه امکان نفوذ گردابه‌ها به داخل ناحیه واکنشی بیان شده است که این موضوع با فرض در نظر گرفته شده برای مدل فلیملت در تناقض است.

در مطالعه حاضر، به شبیه‌سازی کوره احتراقی سوخت-اکسیژن IFRF^۴ با استفاده از مدل اغتشاشی k-ε استاندارد و مدل احتراقی فلیملت پرداخته شده است. نتایج به دست آمده با داده‌های تجربی و داده‌های مدل احتراقی PaSR^۵ مقایسه شده‌اند. شبیه‌سازی‌های انجام شده با مدل فلیملت با استفاده از سینتیک‌های شیمیایی C1-C3، DRM22 و GRI3.0 انجام شده است که در مطالعات قبلی تنها سینتیک GRI3.0 بررسی شده است. علاوه بر این، شبیه‌سازی‌ها با در نظر گرفتن شرایط بدون تشعشع

1. Flamelet
2. Eddy Dissipation Concept
3. Eddy Dissipation Method
4. International Flame Research Foundation
5. Partially Stirred Reactor

و همچنین با استفاده از مدل‌های تشعشعی DO^1 و $P1^2$ انجام شده است که بررسی تاثیر نوع مدل تشعشعی و تاثیر آن بر نتایج به دست آمده نیز در سایر مطالعات انجام شده پیشین صورت نگرفته است.

هندسه و شبکه‌بندی کوره IFRF

کوره احتراقی سوخت-اکسیژن، که در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفته است، کوره‌ای با توان حرارتی 0.78 مگاوات و مشعلی با تکانه بالاست. کوره حاضر با عنوان پروژه OXYFLAM1 در موسسه IFRF به منظور گردآوری داده‌هایی کامل جهت بررسی احتراق سوخت-اکسیژن و همچنین امکان شبیه‌سازی آن ساخته شده و مورد بررسی تجربی قرار گرفته است [۱۶]. هندسه این کوره و ابعاد آن، به همراه قطر نازل‌های سوخت و هوا، در شکل ۱ نشان داده شده است. با توجه به شکل ۱، طول کوره 3440 میلی‌متر است که دارای سطح مقطع مربعی شکل با ابعاد 1050 میلی‌متر است. در انتهای کوره و برای خروج محصولات احتراق دودکشی به طول 740 میلی‌متر و قطر 500 میلی‌متر در نظر گرفته شده است. مشعل کوره مورد بررسی نیز شامل دو ورودی متفاوت است. قسمت مرکزی مشعل قطری برابر با 16 میلی‌متر داشته که در آن سوخت جریان دارد. همچنین، از یک قسمت حلقوی شکل هم‌محور با ورودی سوخت با قطر داخلی 28 و قطر خارجی 36 میلی‌متر، اکسیدکننده به دورن کوره تزریق می‌شود. طول لوله‌های ورودی سوخت و اکسیدکننده نیز برابر با 258 میلی‌متر است.

جهت انجام شبیه‌سازی‌ها، با توجه به تقارن هندسی و تقارن فیزیکی (که با تقریب بسیار خوبی می‌توان آن را در نتایج حاصل از داده‌های تجربی نیز مشاهده کرد [۱۷])، و به منظور کاهش حجم محاسبات عددی، یک چهارم کوره جهت شبیه‌سازی در نظر گرفته شد. در شکل ۲، محدوده حل در نظر گرفته شده در این مطالعه و شبکه‌بندی ایجاد شده نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، از شبکه‌بندی منظم و ساختاریافته غیریکنواخت در شبیه‌سازی استفاده شده است. غیریکنواختی شبکه به نحوی است که در قسمت‌های با گرادیان‌های بالاتر و در مجاورت قسمت‌های نزدیک به خروجی فواره^۳ سوخت و هوا و همچنین، در نواحی که تغییر سطح مقطع مشاهده می‌شود، از شبکه‌بندی ریزتری استفاده شده است.

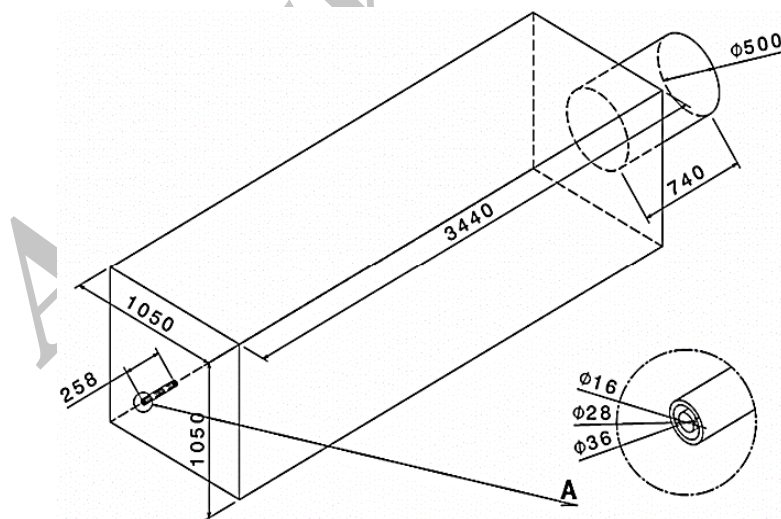


Figure 1- Geometry of oxy-fuel combustion and its dimensions

شکل ۱- هندسه کوره سوخت-اکسیژن و ابعاد آن

1. Discrete Ordinate
2. Spherical Harmonic Method (PN Approximation)
3. Jet

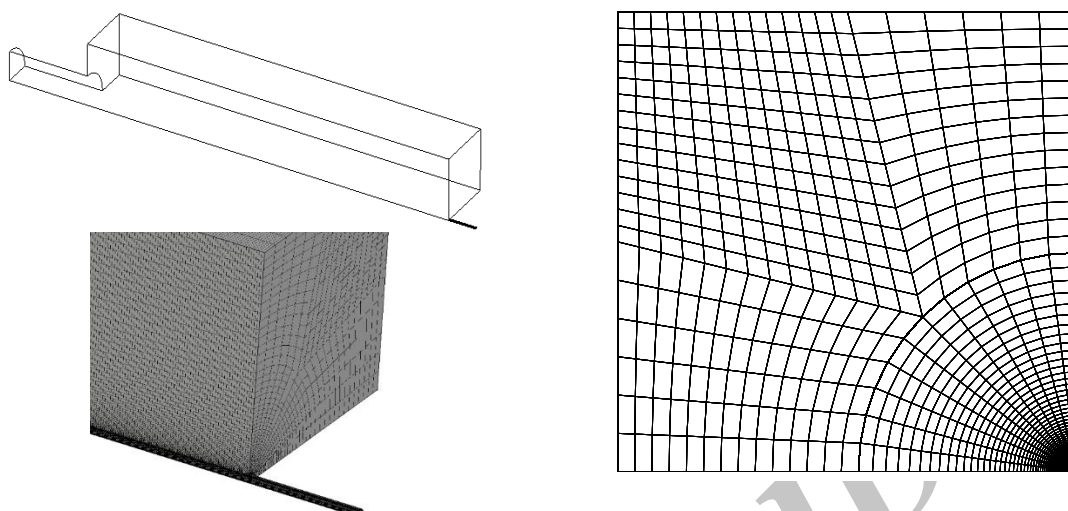


Figure 2- The mesh and numerical solution domain for numerical simulation

شکل ۲- شبکه‌بندی و محدوده حل عددی در نظر گرفته‌شده جهت انجام شبیه‌سازی‌های عددی

شرایط حاکم بر کوره

در کوره سوخت-اکسیژن مورد بررسی، از گاز طبیعی و اکسیژن به‌عنوان سوخت و اکسیدکننده استفاده شده است. طبق آنالیز گاز طبیعی استفاده‌شده در مطالعه حاضر، ترکیب سوخت مطابق با جدول ۱ فرض می‌شود [۱۷،۱۶]. همان‌طور که در این جدول مشاهده می‌شود، گاز طبیعی استفاده‌شده در مطالعه تجربی دارای درصد‌های مختلفی از هیدروکربن‌هاست که قسمت عمده آن را متان (۸۶ درصد از مجموع ۹۴ درصد هیدروکربن موجود در گاز طبیعی مورد استفاده) تشکیل می‌دهد. همچنین، ۶ درصد گاز مورد استفاده نیز به نیتروژن، دی اکسید کربن و اکسیژن اختصاص دارد. ارزش حرارتی پایین گاز طبیعی، چگالی و جرم مولکولی آن نیز در جدول ۱ آورده شده است. همان‌طور که در قسمت‌های بعدی نیز بیان خواهد شد، در مطالعه حاضر، از سینتیک چهارمرحله‌ای برای انجام شبیه‌سازی با مدل احتراقی PaSR استفاده شده است که در این سینتیک تنها شاهد هیدروکربن متان هستیم. از این رو، در شبیه‌سازی‌ها سهم سایر هیدروکربن‌ها، که حدود ۸ درصد است، به متان اختصاص داده شده است. در شبیه‌سازی‌های انجام‌شده با مدل فلیمت نیز، با توجه به استفاده از سینتیک‌هایی که دارای هیدروکربن‌هایی که شامل حداکثر سه اتم کربن‌اند، هیدروکربن‌های با چهار و پنج اتم کربن، که ۰/۷۲ درصد کسر مولی سوخت را تشکیل می‌دهد، با متان جایگزین شده‌اند. همچنین، با توجه به اینکه بیش از ۹۹/۵ درصد از اکسیدکننده را اکسیژن تشکیل می‌دهد (جدول ۲)، از اکسیژن خالص به‌عنوان اکسیدکننده استفاده شده است [۱۷،۱۶].

جدول ۱- درصد مولی گونه‌های مختلف سوخت و خواص آن

Table 1- Mole fraction of different species of fuel and its properties

| Mole Fraction(%) | CH ₄ | C ₂ H ₆ | C ₃ H ₈ | C ₄ H ₁₀ | C ₅ H ₁₂ | CO ₂ | N ₂ | O ₂ |
|-----------------------|--|-------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|-----------------|----------------|----------------|
| | 86 | 5.4 | 1.87 | 0.58 | 0.14 | 1.79 | 4.01 | 0.21 |
| Fuel Molecular Weight | Density in Standard Pressure and Temperature | | | Low Heating Value | | | | |
| 18.661 kg/kmol | 0.8335 kg/m ³ | | | 44.454 MJ/kg | | | | |

جدول ۲- درصد مولی گونه‌های مختلف موجود در اکسیدکننده

Table 2- Mole fraction of different species in oxidizer

| Mole Fraction(%) | O ₂ | N ₂ | H ₂ O | CO ₂ | C _n H _m |
|------------------|----------------|-----------------|------------------|-----------------|-------------------------------|
| | 99.5 | کمتر از 100 ppm | کمتر از 10 ppm | کمتر از 5 ppm | کمتر از 20 ppm |

شرایط مختلف حاکم بر ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده شامل دبی‌های جریان، سرعت جریان سوخت و اکسیدکننده و دما و فشار هر یک از این جریان‌ها در جدول ۳ آورده شده است. همچنین، جهت جلوگیری از نفوذ هوا به داخل محفظه احتراق، فشاری معادل با ۳ میلی‌متر آب در کوره ایجاد شده که این موضوع در شبیه‌سازی عددی نیز لحاظ شده است. سایر شرایط مرزی در شکل ۳ نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، هندسه مورد بررسی دارای دو صفحه با شرط مرزی متقارن است که برای اعمال آن گرادینان تمامی کمیت‌ها در این صفحات برابر با صفر در نظر گرفته شده است. همچنین، برای دمای دیواره‌های بالایی و جانبی کوره، با توجه به داده‌های تجربی بیان‌شده در مرجع [۱۶] و [۱۷]، از توزیع دمایی، مطابق با رابطه (۱)، استفاده شده است.

$$T(z) = 1700 \cdot 598 + 212 \cdot 5872z - 46 \cdot 66929z^2 \text{ [K]} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، Z نشان‌دهنده فاصله محوری از ابتدای کوره برحسب متر است. برای دیواره ابتدایی و انتهایی کوره، که به ترتیب در مجاورت نازل‌های ورودی سوخت و هوا و همچنین دودکش هستند، از شرط مرزی دیواره عایق، مطابق با شرایط تجربی، استفاده شده است. برای دیواره جانبی دودکش نیز از شرط مرزی عایق استفاده شده است. شرط مرزی در نظر گرفته شده برای خروجی کوره فشار ثابت و گرادینان سرعت صفر است. برای دما نیز، در این مرز شرط مرزی گرادینان صفر لحاظ شده است. ذکر این نکته لازم است که برای تمامی دیواره‌ها شرط مرزی سرعت به صورت شرط عدم لغزش در نظر گرفته شده است.

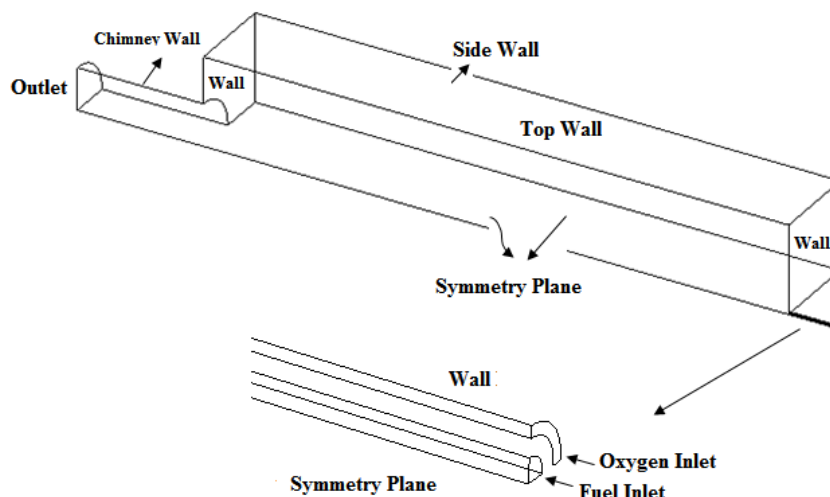


Figure 3- Governing boundary condition on the oxy-fuel furnace

شکل ۳- شرایط مرزی حاکم بر کوره سوخت-اکسیژن

جدول ۳- شرایط حاکم بر ورودی‌های سوخت و اکسیدکننده در شبیه‌سازی سوخت-اکسیژن

Table 3- Governing condition on the fuel and oxidizer inlets in oxy-fuel simulation

| Flow Type | Variable | Variable Value |
|---------------|-------------------|----------------|
| Oxidizer Flow | Flow Rate | 224.5 kg/h |
| | Velocity in Inlet | 118.53 m/s |
| | Temperature | 298.15 K |
| | Pressure | 101369.2 Pa |
| Fuel Flow | Flow Rate | 63 kg/h |
| | Velocity in Inlet | 114.19 m/s |
| | Temperature | 298.15 K |
| | Pressure | 101369.2 Pa |

شرایط حل عددی

برای انجام شبیه‌سازی عددی، از مدل احتراقی فلیملت موجود در نرم افزار فلونت همراه با سه سینتیک شیمیایی استفاده شده است. نتایج به دست آمده در قسمت‌های مختلف با نتایج مدل احتراقی PaSR و همچنین داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند. به منظور مدل‌سازی آشفستگی در هر دو مدل احتراقی از مدل $k-\varepsilon$ reliable با توجه به بررسی‌های انجام شده در مرجع [۱۸]، جهت انجام شبیه‌سازی کوره IFRF استفاده شده است. همچنین، از دو مدل تشعشعی DO و P1 به همراه شرایط احتراقی بدون تشعشع نیز در شبیه‌سازی‌های انجام گرفته با مدل احتراقی فلیملت و PaSR استفاده شده است.

به منظور گسسته‌سازی جمله‌های جابه‌جایی در معادلات انرژی، تکانه، نرخ اضمحلال و انرژی جنبشی اغتشاشی و معادله‌های کسر مخلوط و واریانس در مدل فلیملت پایا و معادله بقای گونه‌ها در مدل احتراقی PaSR از روش بالادست^۱ مرتبه دوم استفاده شده است. به منظور بررسی همگرایی حل با استفاده از مدل احتراقی مورد بررسی از دو معیار استفاده شده است. در معیار اول، مقدار باقی‌مانده معادله پیوستگی برابر با 10^{-5} و سایر معادلات (معادله انرژی، تکانه و بقای گونه‌ها در مدل احتراقی PaSR و معادله انرژی، تکانه و کسر مخلوط و واریانس آن در مدل فلیملت) برابر با 10^{-6} در نظر گرفته شده است. معیار دیگر در نظر گرفته شده به منظور بررسی همگرایی حل تغییرات دمایی کمتر از یک کلون در خروجی محفظه پس از زمان $0/05$ ثانیه در مدل PaSR و هزار تکرار در مدل فلیملت پایاست.

معادلات حاکم

همان‌طور که گفته شد، مدل احتراقی استفاده شده در این پژوهش مدل فلیملت است. در مدل احتراقی فلیملت، شعله مجموعه‌ای از شعله‌های آرام نفوذی فرض می‌شود که در هر فلیملت، دما و کسر جرمی گونه‌ها برحسب متغیرهای کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر به دست می‌آید. بنابراین، در شبیه‌سازی میدان جریان و احتراق، به غیر از معادلات بقای جرم و تکانه و متغیرهای اغتشاش، در حالت بدون تشعشع، فقط دو معادله انتقال اضافه، شامل کسر مخلوط Z و واریانس آن Z'' ، حل می‌شود و مقادیر دما و کسر جرمی گونه‌ها از جداول پیش‌ساخته استخراج می‌شود. معادلات حاکم برای کسر مخلوط، واریانس آن و نرخ اضمحلال اسکالر پس از متوسط‌گیری فاوره^۲ برای جریان مغشوش عبارت‌اند از:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Z}''^2}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \bar{Z}''^2}{\partial x_i} \right) + 2\mu_{eff} \left(\frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right)^2 - \bar{\rho} \bar{\chi} \quad (3)$$

در معادله (۲) و (۳)، $\bar{\rho}$ چگالی، \bar{Z} متوسط کسر مخلوط، \bar{u} متوسط مولفه سرعت و μ_{eff} لزجت موثر شامل دو جزء آرام و مغشوش، و \bar{Z}''^2 واریانس کسر مخلوط است. عبارت اول و دوم سمت چپ در معادله (۳) به ترتیب مربوط به جمله ناپایا و انتقال به دلیل جابجایی است. در سمت راست معادله (۳)، عبارت اول مربوط به انتقال واریانس کسر مخلوط به دلیل نفوذ، عبارت دوم جمله تولید به دلیل گرادیان‌های مقدار متوسط اسکالر کسر مخلوط و عبارت سوم مربوط به اتلاف آن است. با این فرض که نوسان‌های کسر مخلوط متناسب با نوسان‌های اغتشاش میرا می‌شوند، نرخ اتلاف اسکالر در معادله بالا را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\bar{\chi} = C_{\chi} \frac{\varepsilon}{k} \bar{Z}''^2 \quad (4)$$

k و ε انرژی جنبشی اغتشاش و اتلاف آن هستند و ثابت C_{χ} برابر ۲ است [۱۹].

برای ساخت جداول پیش‌ساخته، از حل شعله نفوذی جریان متقابل استفاده شده است. در مرحله تولید جداول، ابتدا معادلات حاکم بر شعله آرام با استفاده از قوانین تبدیل مختصات کروکو^۳ به فضای کسر مخلوط منتقل شده و سپس از گرادیان

1. Upwind
2. Favre Averaging
3. Crowcon

متغیرها در راستای مماس بر شعله در مقابل گرادیان در راستای عمود بر شعله صرف نظر می‌شود. با حل معادلات پایای دما و کسر جرمی گونه‌ها با استفاده از سه سینتیک شیمیایی بیان شده، این مقادیر برای فلیملت‌هایی با نرخ اضمحلال اسکالر متفاوت در کتابخانه فلیملت ذخیره شده است [۱۹]. در نرم‌افزار فلونتت بازه‌ای برای نرخ اضمحلال اسکالر در نظر گرفته شده و تا حد خاموشی، به‌ازای هر نرخ اضمحلال اسکالر، یک فلیملت ساخته می‌شود. مقدار این بازه طوری تغییر داده شده است که در حل احتراقی، تعداد و بازه فلیملت‌ها تاثیری بر نتایج نداشته باشد.

$$-\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_i \quad (5)$$

$$\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = \frac{-1}{c_p} \sum_{i=1}^k \dot{\omega}_i h_i \quad (6)$$

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial y} \right)^2 \quad (7)$$

متغیرهای به‌کاررفته در معادله‌های (۵) تا (۷)، شامل Y_i برای کسر جرمی گونه i ، h_i آنتالپی گونه‌های واکنش‌دهنده، c_p ظرفیت گرمایی مخصوص در فشار ثابت، که برای تمام گونه‌ها برابر فرض شده، و $\dot{\omega}_i$ جمله تولید واکنش شیمیایی، که با استفاده از سینتیک‌های شیمیایی تعیین می‌شود، هستند [۲۰]. طبق مرجع [۲۱]، در مدل فلیملت پایا، در نظر گرفتن تشعشع در معادلات فلیملت تاثیر غیرفیزیکی بر جواب‌ها خواهد گذاشت. به همین دلیل، در شبیه‌سازی تشعشع در نرم‌افزار فلونتت، از تاثیر جذب و دفع حرارت از طریق تشعشع بر توزیع گونه‌ها صرف نظر می‌شود و در نتیجه در نظر گرفتن تشعشع تاثیری بر روند تولید فلیملت‌ها نمی‌گذارد [۲۲]. در حالت وجود تشعشع، علاوه بر کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر از متغیر دیگری به نام کاهش آنتالپی^۱ نیز در تعیین وضعیت ترمودینامیکی توزیع فلیملت استفاده می‌شود. این متغیر به صورت اختلاف بین آنتالپی مخلوط آدیباتیک و غیرآدیباتیک تعریف می‌شود:

$$\varphi_H = \hat{H} - [\hat{H}_0 + Z(\hat{H}_F - \hat{H}_0)] \quad (8)$$

که در این رابطه، \hat{H}_0 و \hat{H}_F به ترتیب آنتالپی سوخت و اکسندنده‌اند. آنتالپی مخلوط برای حالت آدیباتیک تابع خطی از کسر مخلوط در نظر گرفته شده است و آنتالپی مخلوط برای حالت غیرآدیباتیک با ثابت نگه‌داشتن ضریب کاهش آنتالپی به دست می‌آید [۲۳]. از آنجا که این جداول برای شعله آرام ایجاد شده‌اند، برای اعمال تاثیر اغتشاش از توابع چگالی احتمال استفاده می‌شود. در حالت وجود تشعشع، این جداول، برای دما و چگالی برحسب چهار متغیر کسر مخلوط \tilde{Z} ، واریانس کسر مخلوط \tilde{Z}^2 ، آنتالپی متوسط \tilde{H} و نرخ اضمحلال اسکالر $\tilde{\chi}$ ، تولید و در کتابخانه فلیملت قرار می‌گیرند. در خلال حل، معادلات انتقال برای میانگین کسر مخلوط، آنتالپی متوسط و واریانس کسر مخلوط حل شده و نرخ اضمحلال اسکالر از میدان جریان مغشوش به دست می‌آید و در نهایت دما، چگالی و کسر جرمی گونه‌ها از جداول خوانده می‌شود [۲۲].

جدول ۴- مشخصات فلیملت‌ها

Table 4- Flamelet characteristics

| | |
|----------------|---------------------------------|
| 50 | Number of Flamelet Tables |
| 10^{-6} -500 | Scalar Dissipation Rate Limit |
| 0.22019 | Stoichiometric Mixture Fraction |
| 294 K | Fuel and Air Flow Temperature |

نتایج

نتایج مربوط به بررسی سینتیک‌های شیمیایی، اعمال تشعشع و مدل تشعشعی مورد استفاده و تاثیر آن بر توزیع دما و سرعت، با استفاده از مدل احتراقی فلیملت پایا، با داده‌های تجربی و همچنین نتایج به دست آمده از مدل احتراقی PaSR مقایسه شده است. نتایج مربوط به نمودارهای رسم‌شده در امتداد عرضی کوره و در فواصل محوری ۲۲، ۸۲ و ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، مطابق شکل ۴-الف، ارائه شده‌اند. نتایج مربوط به کانتورها نیز در صفحه‌ای مطابق با شکل ۴-ب نشان داده شده است.

1. Enthalpy defect

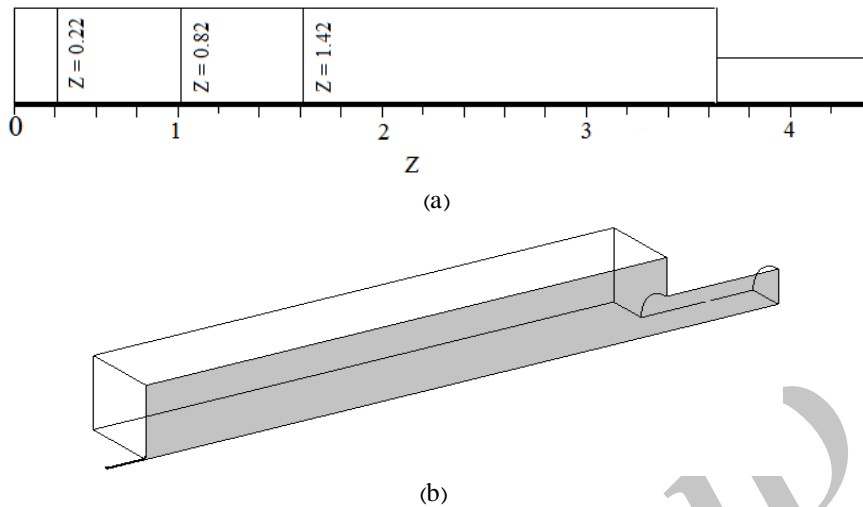


Figure 4- a) Display of Cross sectional of furnace in order to comparison result of flamelet model with experimental and PaSR combustion mode, b) Considered plane in order to presented contours by using of flamelet and PaSR models
 شکل ۴- الف) نمایش مقاطع عرضی کوره به منظور مقایسه نتایج مدل فلیمت با داده‌های تجربی و مدل احتراقی PaSR، ب) صفحه در نظر گرفته شده به منظور ارائه کانتورهای به دست آمده با استفاده از مدل فلیمت و PaSR

در مطالعه حاضر، استقلال از نتایج برای سه شبکه ۵۷۰۰۰۰، ۱۰۷۰۰۰۰ و ۲۲۰۰۰۰۰ سلولی بررسی شد. با توجه به نتایج به دست آمده از شبکه‌بندی‌های مختلف برای کوچک‌تر کردن اندازه شبکه عددی ایجاد شده، نواحی با گرادیان بالاتر، که شامل محل تشکیل شعله می‌شود، نسبت به سایر قسمت‌های محدوده حل عددی با تغییر در نرخ رشد اندازه سلول (نسبت منطقی) بیشتر از قسمت‌های دیگر ریز شده تا بدین ترتیب در سلول محاسباتی کمتری نتایج حل عددی از شبکه عددی تولید شده مستقل شوند. شکل ۵ نشان‌دهنده تغییرات سرعت و دما روی خط مرکزی کوره برای شبکه‌های مختلف است. با توجه به شکل ۵ و بررسی نتایج در مقاطع عرضی و همچنین مقایسه شکل کانتورهای سرعت و دما برای شبکه‌های مختلف، می‌توان گفت که نتایج حاصل از شبکه ۱۰۷۰۰۰۰ بیانگر نتایج مستقل از شبکه برای توزیع دما و سرعت است که در ادامه نتایج مربوط به این شبکه ارائه شده است.

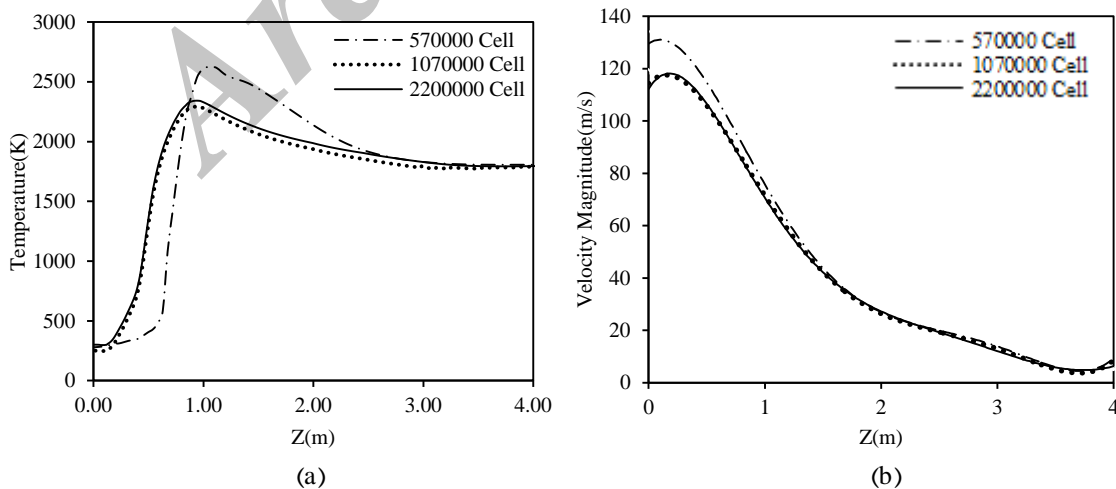


Figure 5- Results of mesh independency of generated grid on the centerline of furnace a) temperature variation, b) velocity variation
 شکل ۵- نتایج استقلال از شبکه‌بندی ایجاد شده روی خط مرکزی کوره: الف) تغییرات دما، ب) تغییرات سرعت

تأثیر نوع سینتیک شیمیایی

وقتی از مدل فلیملت برای در نظر گرفتن اندرکنش احتراق و اغتشاش استفاده می‌شود، سینتیک شیمیایی در مرحله تولید فلیملت‌ها، محاسبه دما و کسر جرمی گونه‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. حل شعله آرام جریان متقابل امکان استفاده از سینتیک‌های بزرگ را امکان‌پذیر می‌سازد که یکی از مزیت‌های این مدل نسبت به مدل‌های دیگر به‌شمار می‌آید. یکی از کارهای انجام‌شده در پژوهش حاضر، بررسی تأثیر سینتیک بر دقت شبیه‌سازی است. به این منظور، از سه سینتیک شیمیایی در مدل احتراقی فلیملت استفاده شده است. این سینتیک‌ها به ترتیب شامل سینتیک شیمیایی C1_C3 با ۱۰۷ گونه و ۲۶۴۲ واکنش شیمیایی [۲۴]، سینتیک GRI3.0 (C1-C2) با ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش شیمیایی [۲۵] و DRM22 (کاهش‌یافته GRI1.2) با ۲۲ گونه و ۱۰۴ واکنش شیمیایی هستند. سینتیک مورد استفاده برای انجام شبیه‌سازی‌های PaSR نیز سینتیک شش‌مرحله‌ای جونز-لیندستد [۶] مخصوص احتراق سوخت-اکسیژن است.

مقایسه تأثیر نتایج به‌دست آمده با استفاده از سه سینتیک بیان‌شده با داده‌های تجربی و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از مدل احتراقی PaSR در سه مقطع عرضی متفاوت از کوره در شکل ۶ نشان داده شده است.

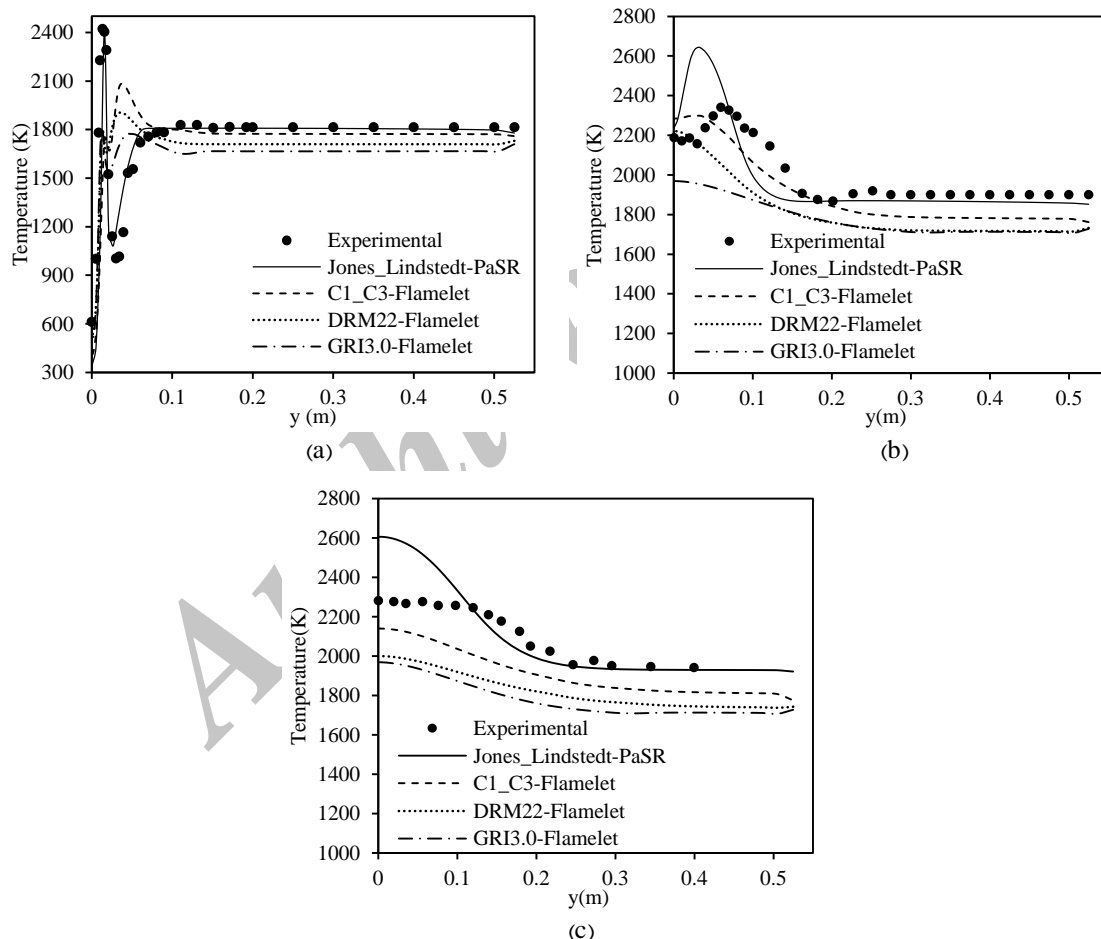


Figure 6- Comparison of temperature variation in different cross sections of furnace by using of C1_C3, DRM22 and GRI3.0 kinetics in flamelet model and Jones_Lindstedt kinetic in PaSR combustion model, a) 22cm from beginning of furnace, b) 82cm from beginning of furnace, c) 142cm from beginning of furnace

شکل ۶- مقایسه تغییرات دما در مقاطع عرضی مختلف کوره با استفاده از سینتیک‌های C1_C3، DRM22 و GRI3.0 در مدل فلیملت و سینتیک جونز-لیندستد در مدل احتراقی PaSR: الف) فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ب) فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ج) فاصله ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره

همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج حاصل از مدل احتراقی فلیملت در قسمت‌های ابتدایی کوره، که گاز طبیعی و اکسیژن وارد کوره می‌شود، نسبت به داده‌های تجربی دارای خطاست. دلیل این خطا آن است که مفهوم مدل فلیملت در حالتی معتبر است که ضخامت شعله از کمترین مقیاس موجود در جریان مغشوش یا مقیاس زمانی احتراق از مقیاس زمانی اغتشاش کوچک‌تر باشد. به عبارت دیگر، فرض شعله آرام به صورت محلی برقرار باشد. در نتیجه، انتظار می‌رود در جایی که مقیاس زمانی اختلاط بیشتر است، پیش‌بینی‌ها بهتر شود. همچنین، نرخ استهلاک اسکالر، که بیانگر تاثیر میدان جریان بر معادلات فلیملت است، همان‌طور که در شکل ۷ نشان داده شده، در نزدیک نازل دارای گرادیان شدید و مقدار آن زیاد است.

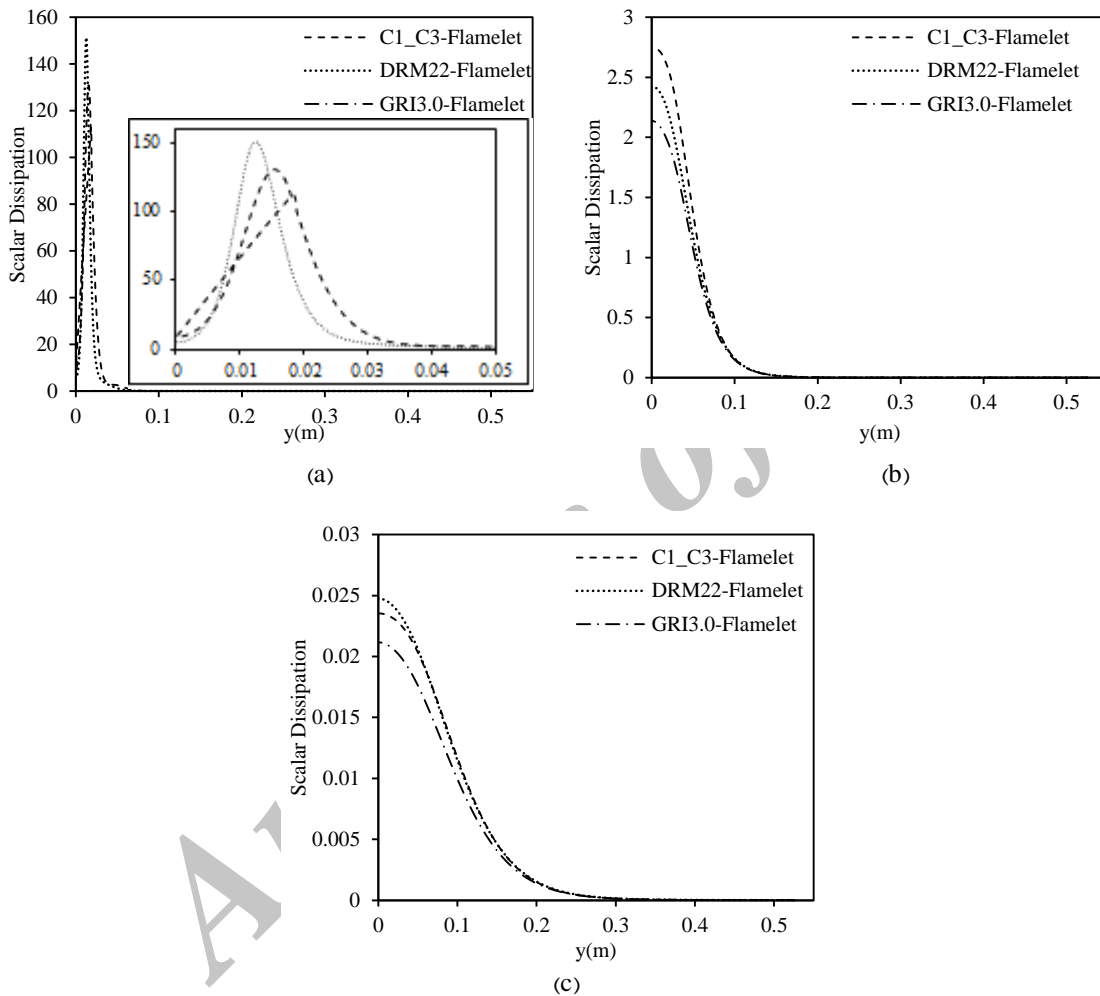


Figure 7- Variation of scalar dissipation in flamelet combustion model, a) 22cm from beginning of furnace, b) 82cm from beginning of furnace, c) 142cm from beginning of furnace

شکل ۷- تغییرات نرخ استهلاک اسکالر در مدل احتراقی فلیملت، الف) فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ب) فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ج) فاصله ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره

علاوه بر این، مدل احتراقی فلیملت پایا پاسخگوی تغییرات سریع و شدید متغیرها نیست. در نتیجه، در ناحیه نزدیک نازل، به دلیل گرادیان شدید سرعت و تغییرات آنی نرخ استهلاک اسکالر، مدل فلیملت اعتبار کمتری داشته و پیش‌بینی آن با سینتیک‌های جزئی نیز منطبق با نتایج تجربی نیست. با فاصله گرفتن از نازل، مدل احتراقی فلیملت نتایج بهتری نشان داده و به خصوص سینتیک C1_C3، به علت در نظر گرفتن گونه‌ها و واکنش‌های بیشتر، بهترین جواب را دارد. همچنین، در نتایج

به دست آمده از مدل احتراقی فلیملت، میزان دمای بیشینه در مقاطع مختلف نسبت به مدل احتراقی PaSR از خطای بسیار کمتری برخوردار است. این موضوع به علت در نظر گرفتن واکنش‌های تجزیه‌ای در سینتیک‌های مورد استفاده در مدل فلیملت است که منجر به کاهش دما شده و نتایج بهتری در مقایسه با مدل PaSR، که تنها شامل شش واکنش است، ارائه می‌دهد. در فواصل دورتر نسبت به نازل، سینتیک C1_C3، به دلیل در نظر گرفتن ترکیب کامل سوخت و همچنین بیشتر بودن واکنش‌ها، پاسخ بهتری نسبت به دو سینتیک دیگر داشته و نتایج حاصل از سینتیک‌های GRI3.0 و DRM22 تقریباً با هم یکسان است. برای پیش‌بینی میدان احتراقی، میدان اختلاط اهمیت زیادی دارد. کانتور تغییرات کسر مخلوط در شکل ۸ نشان داده شده است. در این شکل، گرادینان شدیدی برای کسر مخلوط در نزدیکی نازل مشاهده می‌شود. با دورتر شدن از این ناحیه و افزایش پدیده نفوذ آشفستگی، اختلاط بیشتری انجام شده است.

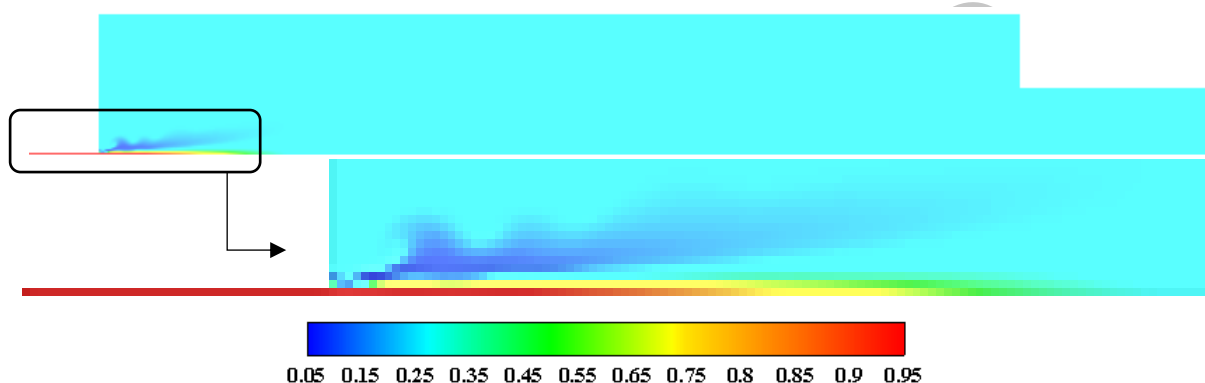


Figure 8- Mixture fraction variation contour in the symmetry plane of furnace by using of flamelet model simulation
 شکل ۸- کانتور تغییرات کسر مخلوط در صفحه تقارن کوره با استفاده از شبیه‌سازی با مدل فلیملت

در شکل ۹، تغییرات سرعت محوری برای سینتیک‌های مختلف در نظر گرفته شده با استفاده از مدل احتراقی فلیملت، با نتایج به دست آمده از مدل احتراقی PaSR و داده‌های تجربی، در مقاطع عرضی مختلف کوره مقایسه شده است. سینتیک‌های کامل‌تر روند تقریباً یکسانی برای سرعت پیش‌بینی کرده‌اند که نشان‌دهنده تفاوت اندک سینتیک‌های C1-C3، GRI3.0 و DRM22 در پیش‌بینی میدان سرعت است. اما، سینتیک کاهش یافته خطای بیشتری در مقایسه با داده‌های تجربی دارد. سینتیک احتراقی بر محاسبه دما و گونه‌ها و در نتیجه بر خواص سیال تأثیر می‌گذارد و تغییر خواص سیال نیز بر میدان جریان تأثیر خواهد گذاشت. یکی از مشخصه‌هایی که در شعله‌های جریان فواره بررسی می‌شود روند کاهش سرعت است. سینتیک کاهش یافته جونز-لیندستت، که واکنش‌های کمتری را شامل می‌شود، دما را بالاتر و گرانیوی را نیز بالاتر پیش‌بینی می‌کند. در نتیجه، همان‌طور که مشاهده می‌شود، روند کاهش سرعت جریان فواره شبیه‌سازی شده با این سینتیک بیشتر از مقدار تجربی پیش‌بینی شده است.

شکل ۱۰ نشان‌دهنده مقایسه میان بیشینه دمای احتراقی حاصل از سینتیک‌های مختلف در مدل احتراقی فلیملت و سینتیک جونز-لیندستت در مدل احتراقی PaSR با بیشینه دمای به دست آمده از نتایج تجربی مطابق با مراجع [۱۶] و [۱۷] است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، بیشینه دمای حاصل از مدل احتراقی فلیملت با استفاده از سینتیک‌های C1_C3 و GRI3.0 از دقت بالاتری نسبت به شبیه‌سازی انجام شده با استفاده از مدل احتراقی PaSR و سینتیک شش مرحله‌ای برخوردار است. این موضوع به علت توانایی سینتیک‌های جزئی در محاسبه‌ی رادیکال‌های میانی و در نتیجه دماست. زیرا، در احتراق سوخت و اکسیژن، پیش‌بینی دقیق تجزیه گونه‌های CO₂ و H₂O به CO و رادیکال‌هایی مانند OH برای به دست آوردن نتایج دقیق اهمیت بالایی دارد.

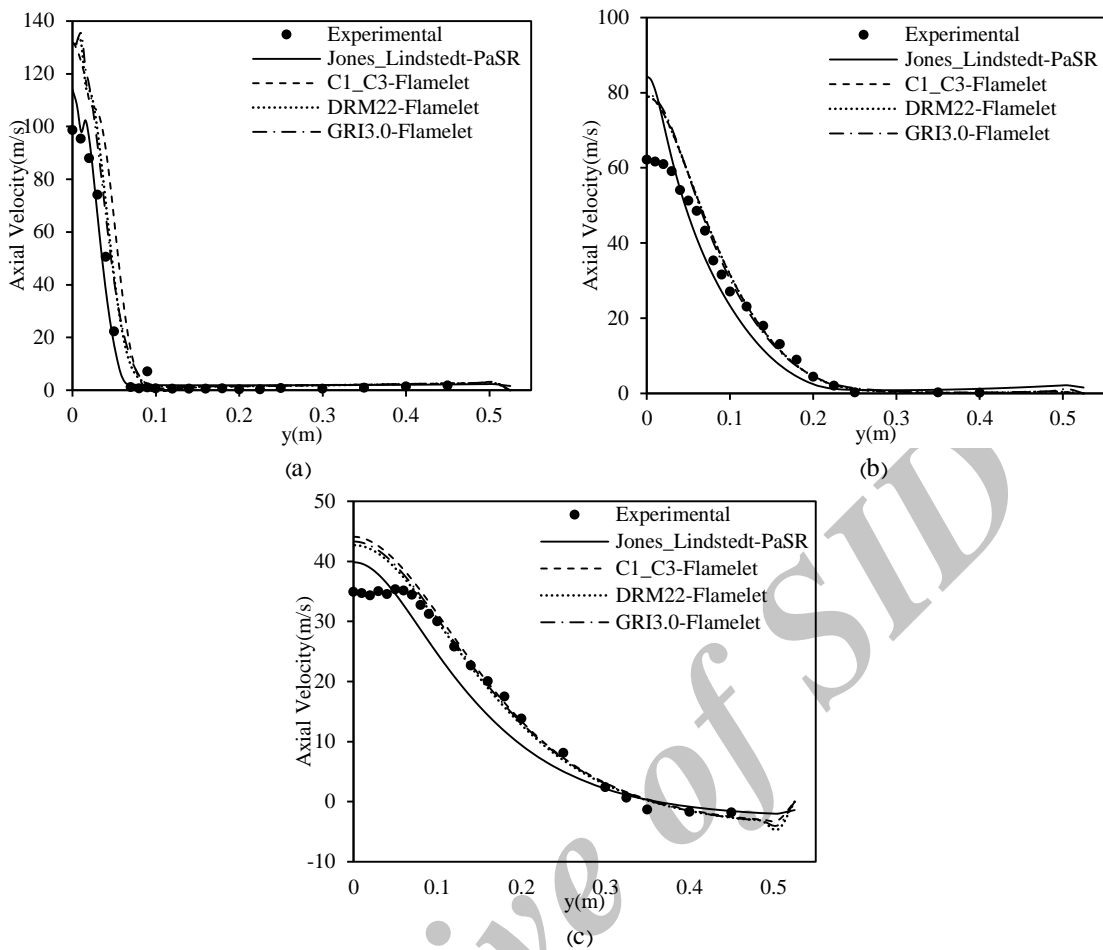


Figure 9- Comparison of velocity variation in different cross sections of furnace by using of C1_C3, DRM22 and GRI3.0 kinetics in flamelet model and Jones_Lindstedt kinetic in PaSR combustion model, a) 22cm from beginning of furnace, b) 82cm from beginning of furnace

شکل ۹- مقایسه تغییرات سرعت محوری در مقاطع عرضی مختلف کوره با استفاده از سینتیک‌های C1_C3، DRM22 و GRI3.0 در مدل فلیمیت و سینتیک جونز-لیندستد در مدل احتراقی PaSR: الف) فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ب) فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، ج) فاصله ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره

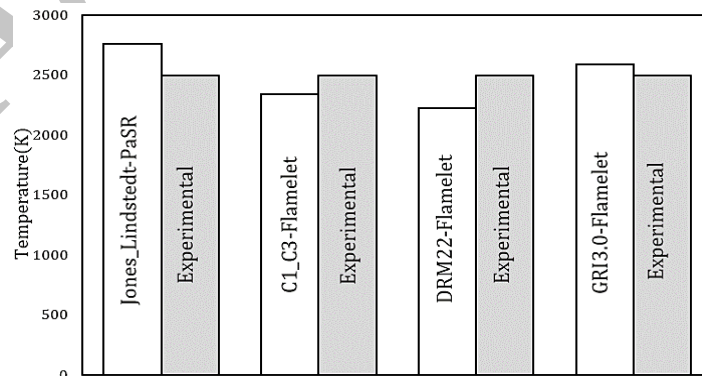


Figure 10- Comparison between maximum combustion temperature by using of C1_C3, DRM22 and GRI3.0 kinetics in flamelet combustion model and Jones_Lindstedt kinetic in PaSR combustion model with experimental data

شکل ۱۰- مقایسه میان بیشینه دمای احتراقی با استفاده از سینتیک‌های C1_C3، DRM22 و GRI3.0 در مدل احتراقی فلیمیت و سینتیک جونز-لیندستد در مدل احتراقی PaSR با داده‌های تجربی

در شکل ۱۱، کانتورهای دما حاصل از شبیه‌سازی مدل احتراقی فلیمیت و سه سینتیک بیان‌شده، با نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مدل احتراقی PaSR، مقایسه شده است. ملاحظه می‌شود که سینتیک C1-C3 کانتور دما و طول شعله را بهتر از سینتیک‌های DRM-22 و GRI3.0 پیش‌بینی کرده است. دلیل این موضوع در پیش‌بینی توزیع دمایی عرضی کوره به‌طور کامل مورد بحث و بررسی قرار گرفت.

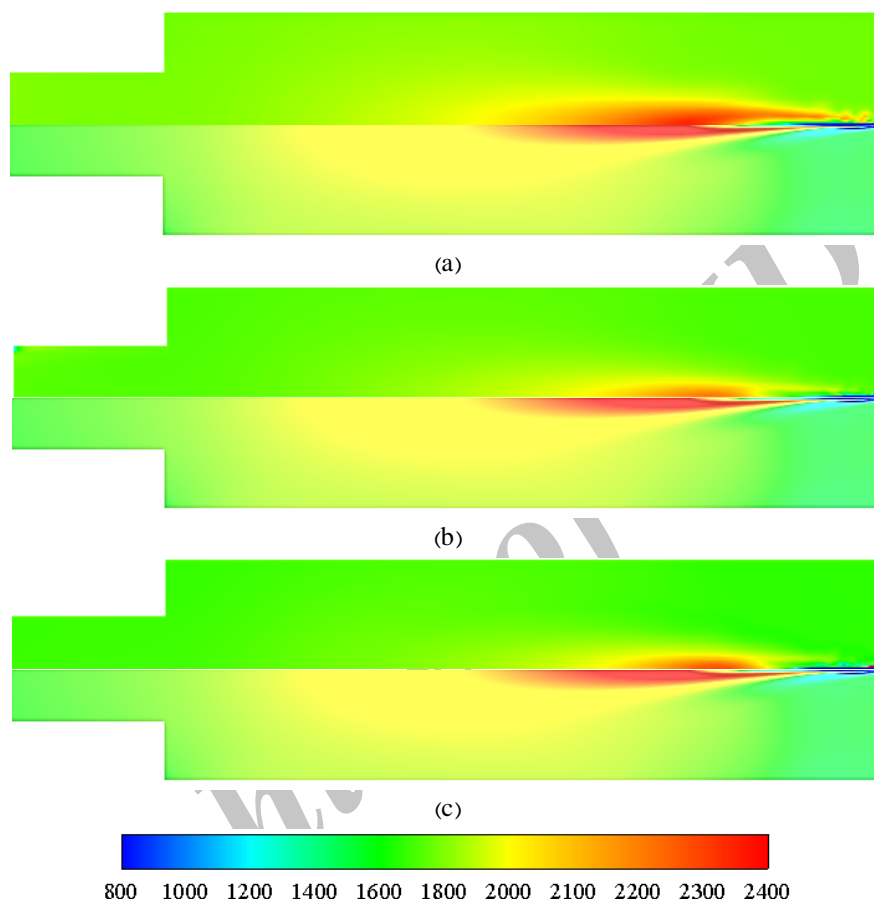


Figure 11- Comparison between temperature contours of different kinetics in flamelet combustion model with temperature contour gained with Jones_Lindstedt kinetic in PaSR combustion model, a) C1_C3 kinetic, b) DRM22 kinetic and c) GRI3.0 kinetic

شکل ۱۱- مقایسه میان کانتورهای دمایی حاصل از سینتیک‌های مختلف در مدل احتراقی فلیمیت با کانتور حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از سینتیک جونز - لیندستد در مدل احتراقی PaSR: الف) سینتیک C1_C3، ب) سینتیک DRM22 و ج) سینتیک GRI3.0

در شکل ۱۲، تغییرات کسر جرمی گونه‌های دی‌اکسید کربن، مونوکسید کربن و هیدروژن در فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره IFRF در شرایط استفاده از مدل احتراقی PaSR با استفاده از سینتیک جونز - لیندستد و مدل احتراقی فلیمیت با استفاده از مدل‌های احتراقی C1_C3، DRM22 و GRI3.0 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در پیش‌بینی گونه‌ها مدل احتراقی فلیمیت با استفاده از سینتیک شیمیایی C1_C3 دقت بالاتری نسبت به سینتیک‌های DRM22 و GRI3.0 دارد. علاوه بر این، همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج حاصل از مدل فلیمیت با استفاده از سینتیک شیمیایی C1_C3 برای گونه‌های بررسی‌شده دقت بالاتری نسبت به شبیه‌سازی انجام‌شده با استفاده از مدل احتراقی PaSR دارد. این موضوع به‌علت سینتیک‌های متفاوت مورد استفاده است. در مدل احتراقی PaSR از سینتیک چهارمرحله‌ای استفاده شده است. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، در فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره و در نواحی نزدیک به خط مرکزی کوره، شبیه‌سازی

انجام گرفته با مدل PaSR منجر به پیش بینی دما بسیار بیشتر از مقادیر به دست آمده از داده های تجربی شده است. این موضوع سبب می شود تا واکنش تجزیه CO₂ به CO در سینتیک شیمیایی جونز-لیندستد فعال تر شده و این موضوع سبب می شود تا میزان CO₂ بیشتری به CO تبدیل شود که این موضوع به خوبی در شکل ۱۲ قابل مشاهده است. این شرایط با وجود تعداد کم واکنش های تجزیه ای در سینتیک جونز-لیندستد بوده که به علت دمای بسیار بالا ایجاد شده است. با فاصله گرفتن از خط مرکزی کوره، مقدار دمای پیش بینی شده در شبیه سازی با استفاده از مدل احتراقی PaSR دقت بسیار بالاتری داشته و این موضوع سبب شده تا میزان CO₂ به دست آمده از این مدل بیشتر از مقادیر تجربی باشد؛ این امر به علت تعداد کم واکنش های تجزیه ای در سینتیک شیمیایی جونز-لیندستد است. در شبیه سازی انجام شده با استفاده از مدل فلیملت، با توجه به استفاده از سینتیک های شیمیایی کامل و بزرگ تر در شبیه سازی به منظور ساخت جداول فلیملت اثرات ناشی از واکنش های تجزیه ای کمتر مشاهده می شود. از طرفی، اختلاف میان نتایج به دست آمده با استفاده از سینتیک های شیمیایی مختلف در شبیه سازی با استفاده از مدل احتراقی فلیملت مربوط به تطبیق پذیری جداول ساخته شده در آنها با شرایط احتراق سوخت-اکسیژن است که سینتیک شیمیایی C1_C3 نتایج بهتری را ارائه می دهد.

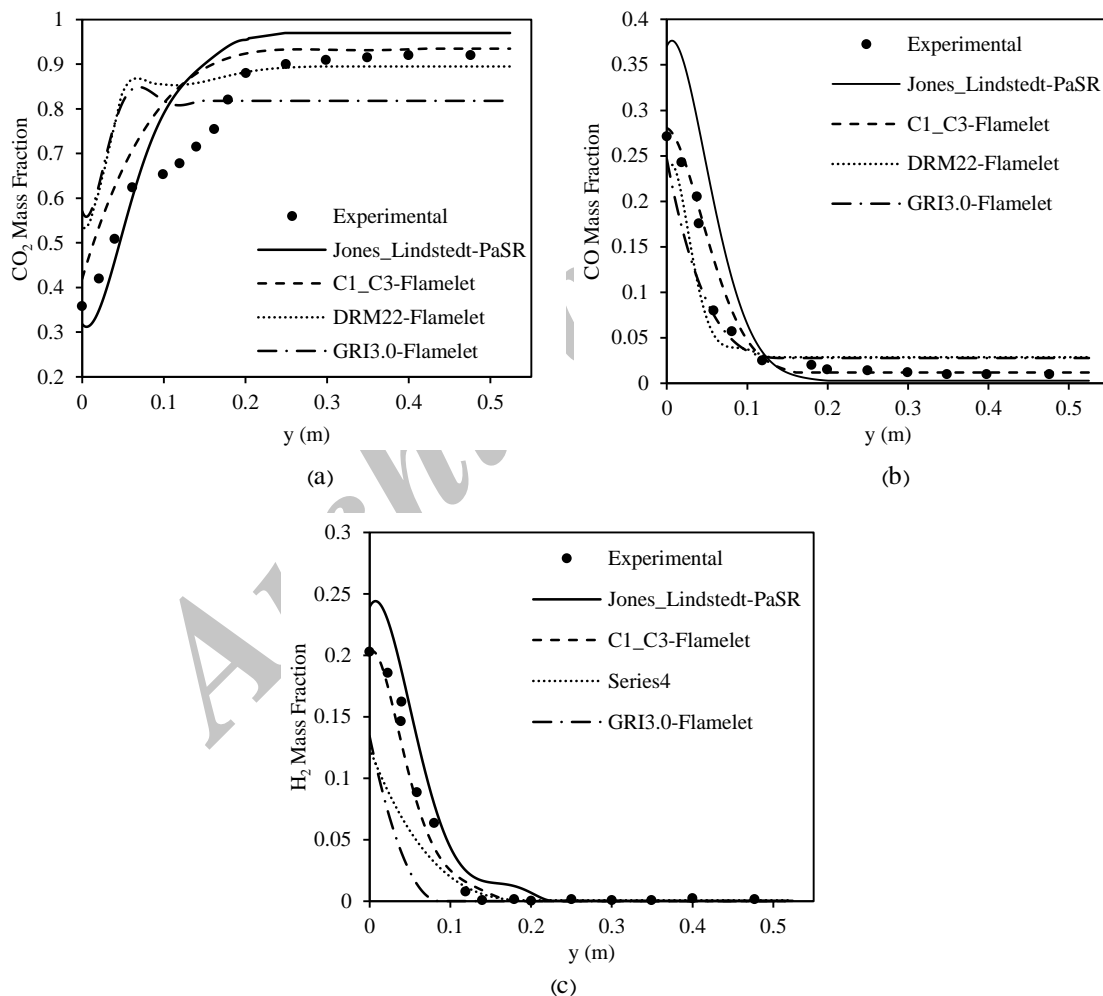


Figure 12- Carbon dioxide, carbon monoxide and hydrogen mass fraction variation in 82cm distance from furnace for PaSR and flamelet combustion models by using wirh C1_C3, DRM22 and GRI3.0 chemical kinetics

شکل ۱۲- تغییرات کسر جرمی دی اکسید کربن، مونوکسید کربن و هیدروژن در فاصله ۸۲ سانتی متری از کوره برای مدل احتراقی PaSR و فلیملت با استفاده از سینتیک های C1_C3، DRM22 و GRI3.0

تأثیر مدل تشعشی

در فرایندهای احتراقی، به علت دمای بالای گازهای حاصل از احتراق، انتقال حرارت تشعشی اهمیت زیادی دارد. این موضوع در احتراق سوخت-اکسیژن، به دلیل افزایش دمای ناشی از به کار بردن اکسیژن خالص در اکسیدکننده و همچنین تشکیل دی اکسید کربن و بخار آب به عنوان گونه‌های اصلی محصولات احتراقی، از اهمیت بالاتری برخوردار است. یکی از موضوعات مهم در پیش‌بینی صحیح میزان انتقال حرارت تشعشی در فرایند احتراق تعیین مدل تشعشی مناسب است. دو مدل تشعشی پرکاربرد، به منظور پیش‌بینی انتقال حرارت تشعشی، مدل‌های DO و P1 هستند. نتایج مربوط به این دو مدل تشعشی با استفاده از مدل اغتشاشی $k-\epsilon$ استاندارد و سینتیک C1_C3 در مطالعه حاضر، با داده‌های تجربی و داده‌های حاصل از مدل احتراقی PaSR با استفاده از سینتیک‌ها و مدل‌های تشعشی مشابه با مدل فلیمیلت و استفاده از سینتیک شش‌مرحله‌ای جونز-لیندستت، مقایسه شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌ها محاسبه ضرایب جذب و گسیل با استفاده از مدل WSGGM انجام شده است. در شکل ۱۳، تأثیر اعمال تشعشع بر حل احتراق گاز طبیعی-اکسیژن نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با توجه به دمای بالای گازهای احتراقی و همچنین مقادیر بالای دی اکسید کربن و بخار آب درون کوره، به علت استفاده از اکسیژن خالص در اکسیدکننده و ضرایب جذب و گسیل بالای این دو گونه احتراقی، اعمال تشعشع منجر به تفاوت‌های جدی (حدود ۴۰۰ کلوین به‌طور متوسط در کل کوره) در محاسبه توزیع دمای داخل کوره می‌شود.

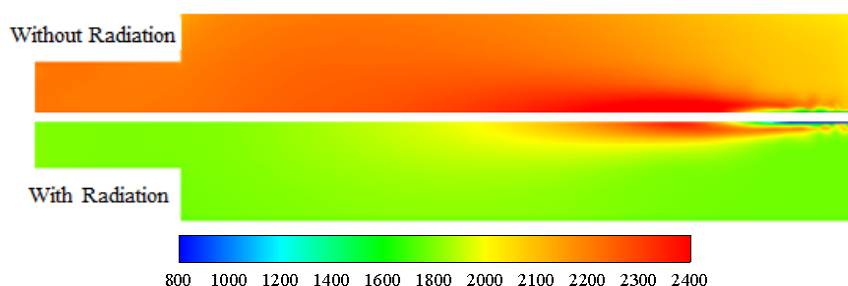


Figure 13- Temperature contours in applying radiation heat transfer and without radiation heat transfer
شکل ۱۳- کانتورهای دما در دو حالت در نظر گرفتن تشعشع و بدون در نظر گرفتن انتقال حرارت تشعشی

شکل ۱۴ نتایج مربوط به دو مدل تشعشی P1 و DO را در مقاطع عرضی مختلف کوره نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در هر دو مدل احتراقی نتایج مربوط به مدل P1 در قسمت‌های دمابالا (محل تشکیل شعله در قسمت مرکز کوره) به میزان قابل توجهی (حدود ۲۵۰ کلوین) دما را نسبت به مدل DO کمتر پیش‌بینی می‌کند. این موضوع به علت مشکل مدل P1 در محاسبه بیش از اندازه اتلاف حرارت تشعشی در نواحی دمابالاست. در قسمت‌های نزدیک به دیواره کوره (فاصله ۰/۲ متری تا قسمت انتهایی نمودارها) به علت دمای پایین گازها در این ناحیه، هر دو مدل تشعشی دقت بسیار خوبی داشته و نتایجی مطابق با داده‌های تجربی ارائه می‌دهند. اختلاف میان مدل‌های تشعشی P1 و DO هنگام استفاده از مدل احتراقی فلیمیلت کمتر از حالتی است که از مدل احتراقی PaSR استفاده می‌شود که این موضوع به علت دمای بسیار پایین‌تر پیش‌بینی شده در مدل احتراقی فلیمیلت (حدود ۴۰۰ کلوین در ناحیه تشکیل شعله که ۰/۱ متر اول نمودارها را شامل می‌شود) است. در واقع خطای ناشی از اتلاف حرارتی پیش‌بینی شده به وسیله مدل P1 در نواحی دمابالا کاهش می‌یابد.

شکل ۱۵ مقایسه میان کانتورهای دما در دو حالت استفاده از مدل تشعشی DO و P1 با استفاده از مدل احتراقی فلیمیلت را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در قسمت‌های ابتدایی کوره، حل عددی انجام شده با استفاده از مدل DO منجر به ایجاد قسمت‌های منقطع در شعله شده که این موضوع در حالت شبیه‌سازی با مدل تشعشی P1 به میزان بسیار ناچیزی وجود دارد. این موضوع به علت وجود خطای پخش و پراکندگی کاذب در حل با استفاده از مدل DO در نواحی با گرادیان دمایی بسیار بالاست که با وجود استفاده از شبکه‌بندی ریزتر، با توجه به مرجع [۲۶]، به‌منظور برطرف شدن این

مشکل، نتایج مشابهی حاصل شد. از طرفی، طول ناحیه دمابالا (دمای بیش از ۲۲۰۰ کلوین) در شبیه‌سازی با استفاده از مدل P1 کوتاه‌تر از مدل DO بوده که با توجه به نتایج به‌دست آمده از حل با مدل احتراقی PaSR که در شکل ۹ نشان داده شده است و همچنین طول شعله بیان شده در مطالعه تجربی، نتایج حل با استفاده از مدل DO از دقت بالاتری برخوردار است. این موضوع به‌علت مشکل مدل P1 در پیش‌بینی بیش از اندازه اتلاف حرارت تشعشی است.

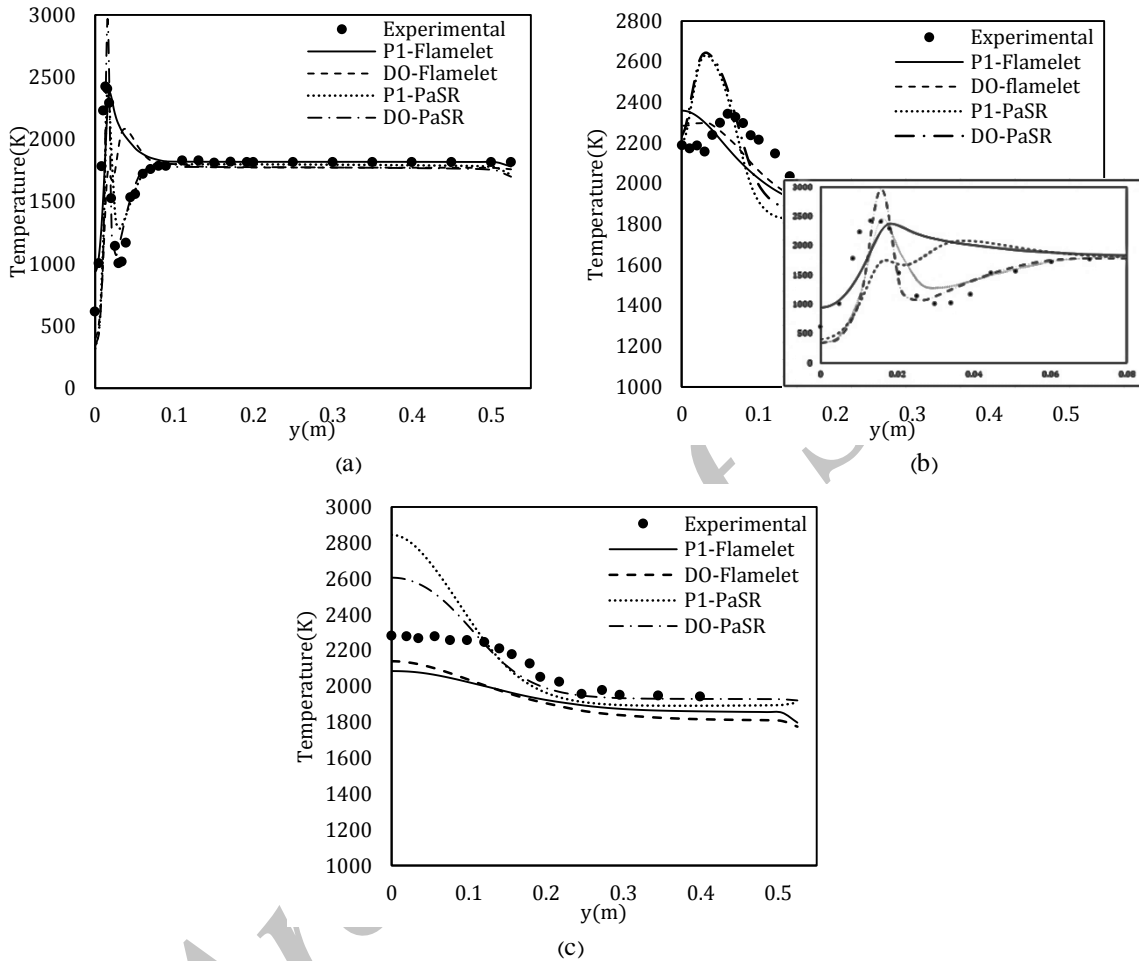


Figure 14- P1 and DO radiation models used in order to radiation heat flux modelling for flamelet and PaSR combustion model, a) 22cm from beginning of furnace, b) 82cm from beginning of furnace, a) 142cm from beginning of furnace

شکل ۱۴- استفاده از مدل‌های تشعشی P1 و DO به منظور مدل‌سازی شار حرارت تشعشی برای دو مدل احتراقی فلیمیت و PaSR: (الف) فاصله ۲۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، (ب) فاصله ۸۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره، (ج) فاصله ۱۴۲ سانتی‌متری از ابتدای کوره

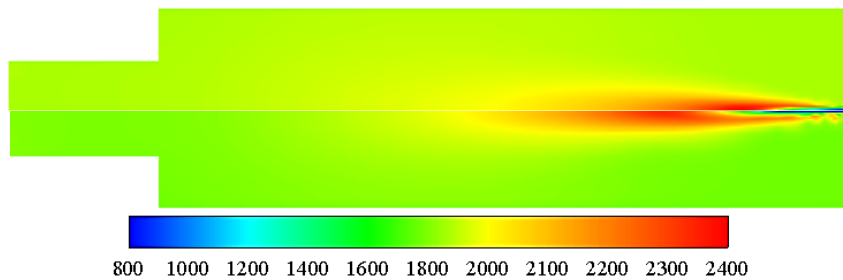


Figure 15- Temperature contour by using of P1 and DO radiation models with solution by flamelet combustion model
 شکل ۱۵- کانتور دما با استفاده از مدل‌های تشعشی P1 و DO با حل به‌وسیله مدل احتراقی فلیمیت

زمان لازم برای شبیه‌سازی‌های انجام‌شده

یکی از موضوعات مهم در شبیه‌سازی فرایندهای احتراق صنعتی، با توجه به حجم بالای شبکه محاسباتی و حل همزمان تعداد زیادی از معادلات، زمان لازم برای انجام شبیه‌سازی‌هاست. یکی از ویژگی‌های اصلی مدل فلیملت، که در شبیه‌سازی فرایندهای احتراق صنعتی مورد توجه قرار گرفته است، زمان محاسباتی کمتر در انجام شبیه‌سازی به‌وسیله این مدل با وجود استفاده از سینتیک‌های بزرگ است. در شکل ۱۶، مدت زمان لازم برای انجام شبیه‌سازی‌های انجام‌شده در مطالعه حاضر با استفاده از مدل فلیملت و سینتیک شیمیایی C1_C3 با زمان اجرای شبیه‌سازی با استفاده از مدل احتراقی PaSR به‌کمک یک سیستم محاسباتی هشت‌هسته‌ای مقایسه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، زمان لازم برای انجام شبیه‌سازی با استفاده از مدل فلیملت بسیار کمتر از مدل احتراقی PaSR است. در مدل احتراقی فلیملت، فلیملت‌ها (که ساختار محلی شعله مغشوش را توصیف می‌کنند) و جریان سیال مغشوش فقط با متغیرهای کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر به هم مرتبط می‌شوند. بنابراین، به‌جای حل تعداد زیادی معادله برای کسر جرمی گونه‌ها، معادلات کسر مخلوط و واریانس آن حل می‌شود و در نتیجه در این مدل قابلیت حل احتراق آشفته به‌وسیله سینتیک‌های کامل با هزینه محاسباتی پایین به وجود می‌آید. با توجه به این هزینه محاسباتی پایین، امکان استفاده از سینتیک‌های دقیق، که امکان بررسی گونه‌های میانی را امکان‌پذیر می‌سازد، و همچنین، مدل تشعشی فاز گسسته همراه با محاسبه ضرایب جذب و گسیل با استفاده از روش‌های با دقت بالا نیز امکان‌پذیر شده است.

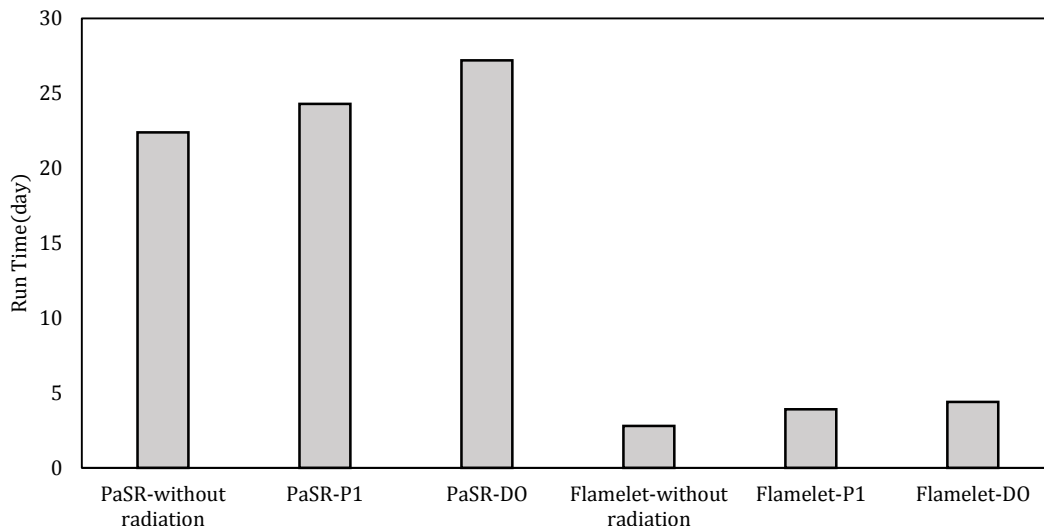


Figure 16- Run time of numerical solution by using of different combustion and radiation models

شکل ۱۶- زمان اجرای حل عددی در شرایط استفاده از مدل‌های احتراقی و تشعشی متفاوت

جمع‌بندی

در مطالعه حاضر، به بررسی تاثیر سینتیک شیمیایی و مدل تشعشی در شبیه‌سازی احتراق سوخت-اکسیژن پرداخته شد. بدین منظور، اثر سه سینتیک شیمیایی C1_C3، DRM22 و GRI3.0 و دو مدل تشعشی P1 و DO بر روی نتایج به‌دست آمده مورد بحث و بررسی قرار گرفته و داده‌های حاصل با نتایج تجربی و داده‌های حاصل از شبیه‌سازی به‌وسیله مدل احتراقی PaSR مقایسه شد. نتایج به‌دست آمده با سینتیک شیمیایی C1_C3 دقت بیشتری نسبت به سینتیک‌های DRM22 و GRI3.0 داشتند. سینتیک C1_C3 طول ناحیه دمابالا را بسیار بهتر از دو سینتیک دیگر پیش‌بینی کرده و در واقع می‌توان گفت که شکل شعله را بهتر پیش‌بینی می‌کند. دقت پیش‌بینی سرعت نیز با استفاده از این سینتیک بهتر از سینتیک‌های

DRM22 و GRI3.0 است. بررسی مدل تشعشعی نیز نشان‌دهنده آن است که استفاده از مدل P1، به‌علت پیش‌بینی بیشتر اتلاف حرارت تشعشعی نسبت به مقدار واقعی، دقت پایین‌تری نسبت به مدل DO دارد. همچنین، پیش‌بینی اتلاف حرارت تشعشعی منجر شده تا طول شعله پیش‌بینی‌شده به‌وسیله مدل P1 نیز کوتاه‌تر از مدل DO باشد. مقایسه میان زمان اجرای حل عددی با استفاده از دو مدل احتراقی فلیملت و PaSR نشان‌دهنده آن است که در صورت استفاده از سینتیک شیمیایی و مدل تشعشعی مناسب در فرایند احتراق سوخت-اکسیژن با استفاده از مدل احتراقی فلیمیت می‌تواند منجر به کاهش زمان شبیه‌سازی‌های عددی به‌صورت قابل توجهی شود.

منابع

1. M. M. Maroto-Valer, *Developments and Innovation in Carbon Dioxide (CO₂) Capture and Storage Technology: Carbon Dioxide (CO₂) Storage and Utilisation*, Elsevier, Amsterdam, 2010.
2. C. E. Baukal Jr, *Oxygen-enhanced combustion*, CRC press, New York, 2010.
3. M. Kanniche and et al., "Pre-combustion, post-combustion and oxy-combustion in thermal power plant for CO₂ capture," *Applied Thermal Engineering*, 30, No. 1, 2010, pp. 53-62.
4. A. A. Bhuiyan, and J. Naser, "Numerical modelling of oxy fuel combustion, the effect of radiative and convective heat transfer and burnout," *Fuel*, 139, 2015, pp. 268-284.
5. B. Mayr and et al., "CFD and experimental analysis of a 115kW natural gas fired lab-scale furnace under oxy-fuel and air-fuel conditions," *Fuel*, 159, 2015, pp. 864-875.
6. J. Andersen and et al., "Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions," *Energy & Fuels*, 23, 3, 2009, pp. 1379-1389.
7. C. Yin, L. A. Rosendahl and S. K. Kær, "Chemistry and radiation in oxy-fuel combustion: a computational fluid dynamics modeling study," *Fuel*, 90, No. 7, 2011, pp. 2519-2529.
8. C. Yin, "Nongray-gas effects in modeling of large-scale oxy-fuel combustion processes," *Energy & Fuels*, 26, No. 6, 2012, pp. 3349-3356.
9. C. Yin and et al., "New weighted sum of gray gases model applicable to computational fluid dynamics (CFD) modeling of oxy-fuel combustion: derivation, validation, and implementation," *Energy & Fuels*, 24, No. 12, 2010, pp. 6275-6282.
10. T. Smith, Z. Shen and J. Friedman, "Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model," *Journal of Heat Transfer*, 104, No. 4, 1982, pp. 602-608.
11. Z. Wheaton and et al., "A comparative study of gray and non-gray methods of computing gas absorption coefficients and its effect on the numerical predictions of oxy-fuel combustion," *IFRF Combustion Journal*, 13, 2013, pp. 1-14.
12. R. Prieler and et al., "Numerical investigation of the steady flamelet approach under different combustion environments," *Fuel*, 140, 2015, pp. 731-743.
13. B. Mayr and et al., "The usability and limits of the steady flamelet approach in oxy-fuel combustions," *Energy*, 90, 2015, pp. 1478-1489.
14. R. Prieler and et al., "Evaluation of a steady flamelet approach for use in oxy-fuel combustion," *Fuel*, 118, 2014, pp. 55-68.
15. F. Chitgarha, M. D. Emami and M. Farshchi, "Simulation of a CH₄/H₂ diffusion flame using unsteady and steady flamelet combustion models," *Fuel and Combustion*, 8, No. 2, 2015, pp. 71-84.
16. U. Bolletini and et al., *Mathematical modeling of oxy-natural gas flames*, IFRF Report, International Flame Research Foundation, IJmuiden, Velen, Netherland, 1997.
17. N. Lallemand, J. Dugue and R. Weber, *Analysis of the experimental data collected during the OXYFLAM-1 and OXYFLAM-2 experiments*, IFRF Report, International Flame Research Foundation, IJmuiden, Velen, Netherland, 1997.
18. C. Yin, *RANS Simulation of Oxy-Natural Gas Combustion*, Master Thesis, Board of Studies in Energy, Alborg University, Alborg, 2010.
19. H. Müller, F. Ferraro and M. Pfitzner, "Implementation of a Steady Laminar Flamelet Model for non-premixed combustion in LES and RANS simulations," *8th International OpenFOAM Workshop*, Jeju, South Korea, 2013.
20. H. Pitsch, *Combustion Theory*, Princeton-CEFRC Summer School On Combustion, Princeton University, USA, Princeton, 2012.
21. H. Pitsch, M. Chen and N. Peters, "Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames," *Symposium (international) on combustion*, University of Colorado at Boulder, USA, Colorado, August 1998.
22. ANSYS, A.F., *12.0 Theory Guide T 16. Multiphase Flows*, Last Access Oct. 2010.
23. B. Kashir, S. Tabejamaat and N. Jalalatian, "The impact of hydrogen enrichment and bluff-body lip thickness on characteristics of blended propane/hydrogen bluff-body stabilized turbulent diffusion flames," *Energy Conversion and Management*, 103, 2015, pp. 1-13.
24. E. Ranzi and et al., "Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels," *Progress in Energy and Combustion Science*, 38, No. 4, pp. 468-501.

25. G. P. Smith and et al., *GRI 3.0 Mechanism*, Gas Research Institute ([http://www. me. berkeley. edu/gri_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech)), Accessed 21 September 2017.
26. M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer*, Third Edition, Amsterdam, Academic press, 2013.

English Abstract

Numerical Study of the Effects of Chemical Kinetics and Radiation Model on the Velocity and Temperature Fields in Natural Gas-Oxygen Combustion using Steady Flamelet Model

Esmail Ebrahimi Fordoei¹, Kiumars Mazaheri^{2*} and Faeze Ehsani Derakhshan

1- Department of Mechanical Engineering, TarbiatModares University, Tehran, Iran, E.Ebrahimifordoei@modares.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, TarbiatModares University, Tehran, Iran, Kiumars@modares.ac.ir

3- Department of Mechanical Engineering, TarbiatModares University, Tehran, Iran, f.ehsaniderakhshan@modares.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2017.10.15, Received in revised form: 2018.01.14, Accepted: 2018.02.21)

The aim of this study is to investigate the effects of chemical kinetics and radiation model on the combustion of natural-gas-oxygen mixture using flamelet combustion model. For this purpose, C1_C3, DRM22 and GRI3.0 chemical kinetics mechanisms are combined with DO and P1 radiation models in the simulations. In addition, results with and without modelling radiative heat transfer are compared. The results of flamelet combustion model are also compared with the experimental data and PaSR combustion model. The most important advantage of using flamelet combustion model over the PaSR model is significant reduction in the cost of calculation. According to the obtained results, C1_C3 chemical mechanism predicts the temperature distribution in the furnace with highest accuracy and the predicted flame shape is a good match with that obtained using PaSR model. The flame length obtained using DRM22 and GRI3.0 chemical mechanisms, however, is very small. In addition, using P1 radiation model in comparison with DO leads to more computational errors in calculating the temperature distribution and the length of the high temperature region in the furnace, due to over-predicting the radiation losses.

Keywords: Natural gas- oxygen combustion, Flamelet combustion model, Radiation model, Chemical kinetic