

## مقایسه‌ی سازوکارهای کامل و کاهش‌یافته‌ی سینتیک احتراق متان

### در مدل‌سازی عددی مشعل متخلخل

مصطفی خسروی‌الحسینی (دانشجوی دکتری)

مهدی معرفت (دانشیار)

کیومرث مظاهری (دانشیار)

دانشکده‌ی فنی و مهندسی - بخش مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

در این نوشتار، سازوکارهای احتراق کامل و کاهش‌یافته از نقطه‌نظر کاربرد در مشعل متخلخل مقایسه شده است. از آنجا که سازوکارهای احتراق کامل تنوع گسترده‌ی دارند و نیز با توجه به احتراق متان، در گام نخست معروف‌ترین آنها یعنی سازوکار احتراقی GRI3.0 و سازوکار پیشنهادی میلر انتخاب شده‌اند. در گام دوم سازوکارهای کاهش‌یافته‌ی حاصل از دو سازوکار کامل مذکور مورد بررسی قرار گرفته‌اند که از آن میان سازوکار پیشنهادی ۱۶ واکنشی برای سازوکار کامل میلر، و سازوکار کاهش‌یافته‌ی ۱۵ واکنشی برای سازوکار کامل GRI3.0 انتخاب شده است. نتایج شبیه‌سازی عددی حاکی از تطابق قابل قبول سازوکارهای کاهش‌یافته با سازوکارهای اصلی در مدل‌سازی مشعل متخلخل است. در مورد پروفیل دمایی تقریباً تمامی سازوکارها تقریب یکسانی ارائه داده‌اند. در خصوص پروفیل غلظت CO در طول مشعل، تفاوت اندکی بین دو سازوکار احتراق کامل مشاهده شد که به نظر می‌رسد علت آن تفاوت تخمین غلظت گونه‌های HCO و HO<sub>۲</sub> باشد. در آلاینده‌ی NO تفاوت محسوسی بین تخمین دو سازوکار مشاهده شده است که علت آن تفاوت در تخمین NO فنی‌مور است. سرعت اشتعال تعیین‌شده توسط دو سازوکار تفاوت محسوسی با نتایج تجربی دارد. دو سازوکار کامل احتراقی تخمین یکسانی در ناحیه‌ی احتراق رقیق نشان می‌دهند در حالی که در ناحیه‌ی احتراق غنی، سرعت اشتعال سازوکار میلر بیشتر از سازوکار GRI3.0 به دست آمده است.

### فهرست علائم

$C_p$ : ظرفیت حرارت ویژه

$I$ : شدت تشعشع

$h$ : آنتالپی ویژه - ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی

$H_v$ : ضریب انتقال حرارت حجمی

$\dot{m}$ : دبی جرمی به‌ازای واحد سطح

$q_r$ : شار تشعشعی

$T$ : دما

$U$ : سرعت محوری

$V$ : سرعت توزیع

$X$ : محور طول مشعل

$Y$ : کسر جرمی

$\dot{S}$ : بردار جهت شار تشعشعی

$w$ : وزن تفکیک زاویه‌ی در روش عرض مجزا (DOM)

$e$ : بردار یکه سطح

### نشانه‌های لاتین

$\varepsilon$ : ضریب صدور

$\phi$ : نسبت تخلخل

$\Phi$ : تابع فاز انتشار

$k$ : ضریب هدایت حرارت

$\lambda$ : نسبت اختلاط سوخت به هوا

$\mu$ : کسینوس زاویه شار تشعشعی

$\rho$ : جرم حجمی

$\sigma$ : ثابت استفان - بولتزمن

$\dot{w}$ : نرخ تولید مولی

$\beta$ : ضریب خاموشی

$\sigma_s$ : ضریب انتشار

### ۱. مقدمه

احتراق متان به‌دلیل کاربرد آن در مسائل صنعتی یکی از موضوعات قابل توجه محققین بوده است. مدل‌سازی‌های اولیه‌ی احتراق بر مبنای سازوکار تک‌مرحله‌ی به‌عنوان تقریبی قابل قبول، توصیفی از احتراق گاز طبیعی در برخی مسائل مهندسی به‌دست داده است. نیاز به تعیین سرعت شعله، آلاینده‌های زیست‌محیطی، کارایی احتراق و مجهولاتی از این دست باعث پیشنهاد سازوکارهای کامل‌تر احتراقی شده است.

۳. اضافه کردن معادلات انتقال حرارت تشعشع (هشت معادله)؛
۴. اصلاح معادلات بقای ذرات و پیوستگی (در نظر گرفتن تداخل در آنها)؛
۵. اصلاح معادله‌ی بقای انرژی فاز گاز (اضافه کردن عبارت انتقال حرارت جابه‌جایی و در نظر گرفتن تداخل)؛
۶. اضافه کردن معادله‌ی بقای انرژی فاز جامد؛
۷. اضافه کردن یا اصلاح شرایط مرزی؛
۸. حل معادلات اضافه شده با استفاده از روش بهبودیافته‌ی نیون به صورت ضمنی.

از آنجا که کد مذکور برای محاسبات شعله‌ی آرام پیش‌آمیخته‌ی آزاد کاملاً شناخته شده و مورد اطمینان است، با تغییرات داده شده در آن، کد قابل اطمینانی برای مدل‌سازی احتراق درون محیط متخلخل به دست آمده است.

## ۲. معادلات حاکم و روش حل

مشعل متخلخل مورد استفاده در این تحقیق به صورت یک‌بعدی در نظر گرفته شده است (شکل ۱). از آنجا که هدف بررسی سازوکارهای احتراقی است، انتقال حرارت از دیواره‌های جانبی مشعل ناچیز فرض شده و در نتیجه می‌توان از معادلات حاکم یک‌بعدی در مدل‌سازی استفاده کرد. تفاوت معادلات حاکم بر احتراق در محیط متخلخل با معادلات حاکم بر احتراق در فضای آزاد در اضافه شدن معادلات بقای انرژی فاز جامد است. در این مدل‌سازی به دلیل طول نسبتاً کوتاه مشعل متخلخل از افت فشار در جهت حرکت جریان صرف نظر شده و جریان سیال نیز آرام در نظر گرفته شده است. معادلات حاکم در مشعل متخلخل که از متوسط‌گیری حجمی به دست آمده‌اند عبارتند از:

معادله‌ی پیوستگی یا بقای جرم:

$$\frac{\partial(\rho_g \phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g \phi U)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

معادله‌ی بقای گونه‌های شیمیایی:

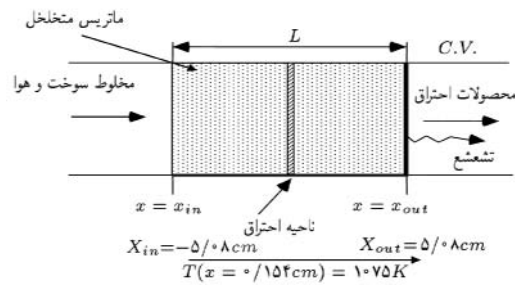
$$\rho_g \phi \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho_g \phi U \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_g \phi Y_k V_k) - \phi \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (2)$$

انتخاب سازوکار احتراقی مناسب با توجه به شرایط عملکردی مشعل و همچنین نوع شعله مستلزم توجهی خاص است. شعله‌ی مشعل متخلخل به دلیل تبادل حرارتی که گاز با ماتریس متخلخل دارد پروفیل دمایی متفاوتی نسبت به شعله‌ی آزاد آرام دارد. این مسئله باعث متفاوت بودن رفتار غلظت گونه‌های شیمیایی در این نوع مشعل می‌شود. خصوصیات متفاوت احتراق و انتقال حرارت در محیط متخلخل نسبت به شعله‌ی آزاد، و نقش کلیدی سینتیک احتراق در پیشرفت واکنش‌ها، بررسی و مقایسه‌ی کارایی سازوکارهای پیشنهادی سینتیک احتراق در مشعل‌های متخلخل را ضروری ساخته است. در تحقیق انجام شده توسط هو و همکاران، عدم استفاده از سازوکارهای عمومی تک‌مرحله‌ی در مدل‌سازی مشعل متخلخل پیشنهاد شده است. [۱] در تحقیقی دیگر، زو و پیرا چهار نوع سازوکار مختلف احتراقی در مدل مشعل متخلخل با یکدیگر مقایسه کرده‌اند. [۲] این سازوکارها عبارت بودند از: سازوکار کامل میلر، سازوکار اسکلتی حاصل از سازوکار میلر، سازوکار کاهش‌یافته‌ی چهارمرحله‌ی، و سازوکار تک‌مرحله‌ی احتراق متان. محققین دیگری، به‌استناد سازوکار کامل GRI2.1 و سازوکار کاهش‌یافته‌ی ۱۰ واکنشی که از روش اغتشاش تکین محاسباتی به دست آمده، صحت استفاده از سازوکارهای کاهش‌یافته را مورد بررسی قرار داده‌اند. [۳] برخی از آنان نیز بدون بررسی سازوکارهای احتراقی، یک نمونه از آنها را انتخاب کرده‌اند و به بررسی سایر خصوصیات مشعل متخلخل پرداخته‌اند. [۴]

از آنجا که تقریباً تمامی محققین یکی از دو سازوکار کامل احتراقی یا میلر را انتخاب کرده‌اند، این نوشتار دقت این دو سازوکار در تعیین عملکرد مشعل متخلخل را مورد مقایسه قرار می‌دهد. از طرفی سازوکارهای کاهش‌یافته به‌عنوان ابزاری قدرت‌مند برای کاهش حجم محاسبات بدون کاستن از دقت نتایج یکی از موضوعات تحقیقات سال‌های اخیر بوده است. در تحقیق حاضر صحت کاربرد سازوکارهای کاهش‌یافته‌ی مبتنی بر دو سازوکار کامل مذکور در مدل‌سازی مشعل متخلخل مورد بررسی قرار گرفته است. این مقایسه با توجه به پارامترهای عملکردی مشعل — مانند دما، سرعت اشتعال و میزان ترکیبات حاصل از احتراق، خصوصاً منوکسید کربن و منوکسید نیتروژن — صورت پذیرفته است.

در تحقیق حاضر کد معروف *PREMIX* از مجموعه کدهای *CHEMKIN* برای مدل‌سازی احتراق در محیط متخلخل توسعه یافته است که موارد اعمال شده در آن عبارت‌اند از:

۱. اضافه کردن خواص محیط متخلخل (فاز جامد)؛
۲. محاسبه‌ی ضرایب انتقال حرارت محیط متخلخل مانند ضرایب انتقال حرارت تشعشعی و ضریب انتقال حرارت حجمی در حالتی که این ضرایب ثابت نیستند؛



شکل ۱. شماتیک مشعل متخلخل مورد بررسی در تحقیق حاضر.

جدول ۱. خواص ترموفیزیکی ماتریس متخلخل مورد استفاده در مدل. [۱۵]

$\beta = 27 \cdot m^{-1}$	$\sigma_s = 216 m^{-1}$
$H_v = 10^4 W/m^2 - K$	$\lambda_s = 1.2 W/m - K$
$\rho_s = 5.56 \times 10^3 kg/m^3$	$\phi = 0.87, for, PSZ$ with, 3/9, Pore per cm
$c_{p,s} = 824 J/kg - K$	

$$\frac{\partial T_g}{\partial x} = 0 \quad \text{at} \quad x = L \quad (6)$$

شرایط مرزی معادله انرژی ماتریس متخلخل در ورودی و خروجی مشعل با توجه به بقای انرژی در حجم کنترل سلول‌های مرزی جامد عبارت‌اند از:

$$\left[ h_i(T_{g,i} - T_s) + \sigma \varepsilon_i(T_{i,surround} - T_s) \right] (1 - \phi) = -k_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{at} \quad x = 0 \quad (7)$$

$$\left[ h_o(T_{g,o} - T_s) + \sigma \varepsilon_o(T_{o,surround} - T_s) \right] (1 - \phi) = -k_{eff,s} \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{at} \quad x = L \quad (8)$$

که در آن‌ها،  $h_i$  و  $h_o$  ضرایب انتقال حرارت جابه‌جایی در ناحیه‌ی ورودی و خروجی مشعل هستند که به صورت تجربی تخمین زده شده و معمولاً ثابت در نظر گرفته می‌شوند؛ و در اینجا هر دو آنها برابر  $500 W/m^2$  هستند. [۲] با توجه به بررسی‌های انجام گرفته، نرخ انتقال حرارت تشعشی نشان داده شده در معادلات ۷ و ۸ نسبت به انتقال حرارت جابه‌جایی غالب است و از این رو در برخی از محاسبات انجام شده در گذشته از عبارت جابه‌جایی در شرایط مرزی صرف نظر شده است. [۲۱]

در خصوص معادله انتقال تابشی (RTE) فرض شده است که محیط اطراف مشعل متخلخل مانند جسم سیاه عمل می‌کنند. دمای محیط خروجی مشعل نزدیک به دمای گازهای خروجی از مشعل فرض می‌شود و دمای محیط ورودی نیز معادل دمای مخلوط احتراق در نظر گرفته می‌شود. چون در حل معادله انتقال تابشی از تقریب DOM

معادله بقای انرژی فاز گاز:

$$\rho_g \phi C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial t} + \rho_g \phi U C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \phi \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \phi \sum_{k=1}^N \rho Y_k V_k C_{p,k} \frac{\partial T_g}{\partial x} + \phi \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k + H_v(T_g - T_s) = 0 \quad (3)$$

معادله بقای انرژی فاز جامد:

$$\rho_s \phi C_{p,s} \frac{\partial T_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( (1 - \phi) \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + H_v(T_g - T_s) - \frac{dq_r}{dx} = 0 \quad (4)$$

در روابط فوق  $\phi$  نسبت تخلخل،  $U$  سرعت جریان،  $H_v$  ضریب انتقال حرارت حجمی و  $\lambda_s$  ضریب هدایت حرارتی است. همچنین  $V_k$ ،  $Y_k$ ،  $h_k$  و  $W_k$  به ترتیب کسر جرمی، سرعت انتشار، نرخ تولید مولی، جرم مولکولی و آنتالپی مولی گونه‌ی شیمیایی  $k$  هستند. از اندیس  $g$  برای نشان دادن فاز گاز، و از اندیس  $s$  برای نشان دادن فاز جامد استفاده شده است. یک نمونه مشعل متخلخل تک‌لایه که برای آن نتایج تجربی به منظور مقایسه‌ی صحت نتایج عددی موجود بود، انتخاب شده است. این مشعل از جنس زیرکونیا و به ضخامت  $10/16$  سانتی‌متر ساخته شده است. خواص ماتریس متخلخل در جدول ۱ آمده است. چون در تحقیقات انجام شده بر پایه‌ی این مشعل ضریب انتقال حرارت حجمی و ضریب هدایت به صورت ثابت در نظر گرفته شده، در اینجا نیز مبنای اولیه همان مقادیر ثابت است. [۲۱]

معمولاً دو روش برای مدل‌سازی عددی احتراق پیش‌آمیخته وجود دارد: شعله‌ی پایدار شده توسط دبی مشخص ورودی، و شعله‌ی پایدار شده از طریق ثابت نگهداشتن دمای یک نقطه از حجم کنترل. [۵] در حالت اول دبی ورودی باید چنان انتخاب شود که ناحیه‌ی احتراق در داخل حجم کنترل تشکیل شود، و در حالت دوم دمای نقطه‌ی انتخاب شده از حجم کنترل باید احتراق داخل حجم کنترل را نتیجه دهد. در این محاسبات دمای نقطه‌ی از ناحیه‌ی پیش‌گرمایش ( $x = 0.175$ ) ثابت فرض شده است ( $1075 K$ ) و با توجه به این دما، دیگر پارامترها محاسبه می‌شوند. معیار انتخاب  $x = 0.175$  برای نقطه‌ی مرجع لزوم مطابقت با نتایج تجربی بوده است و این نقطه با توجه به برازش منحنی تجربی دما انتخاب شده است. [۱۵]

معمولاً غلظت ترکیبات ورودی به مشعل را می‌توان به صورت جزء مولی یا جرمی مشخص کرد. در خروجی، غلظت گونه‌های شیمیایی از طریق انفصال معادله بقای گونه‌های شیمیایی به دست می‌آید. دمای گاز در ورودی و خروجی از روابط ۵ و ۶ محاسبه می‌شوند. [۶]

$$m c_{p,g} (T_{g,i} - T_g) = -k_g \frac{\partial T_s}{\partial x} \quad \text{at} \quad x = 0 \quad (5)$$

استفاده شده است: [۷]

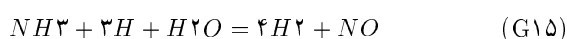
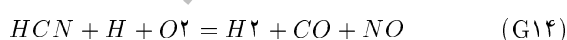
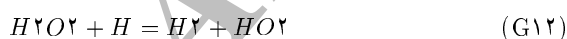
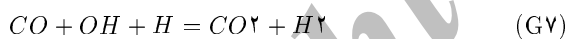
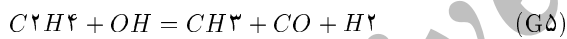
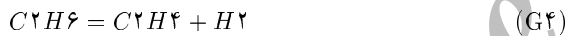
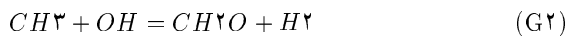
واکنش و ۵۳ گونه‌ی شیمیایی شده است. این سازوکار شامل اکسایش هیدروکربن‌های  $C_1$  و  $C_2$ ،  $HCN$  و  $NH_3$  و دیگر واکنش‌های میانی بین گونه‌های هیدروکربنی و نیتروژن است.

### ۲.۳. سازوکار GRI-Mech 3.0

این سازوکار که در سال ۱۹۹۹ توسط دانشگاه برکلی در کالیفرنیا پیشنهاد شد، برای گاز طبیعی بهینه شده است و دارای ۳۲۵ واکنش و ۵۳ گونه‌ی شیمیایی است. سازوکار فوق شامل اکسایش هیدروکربن‌های سبک و نیتروژن است؛ و همچنین در آن واکنش‌های سوزش مجدد در نظر گرفته شده است. محدوده‌ی دمایی کاربرد آن بین  $1000 K - 2500 K$ ، و محدوده‌ی فشار ۱ تا  $1000$  کیلوپاسکال است. نسبت اختلاط معتبر برای آن بین ۰٫۱ تا ۵ است. سازوکار مورد نظر سومین نسخه‌ی پیشنهاد شده توسط انیستیتو تحقیقات گاز است. [۹]

### ۳.۳. سازوکار کاهش‌یافته‌ی مبتنی بر GRI3.0

این سازوکار دارای ۱۵ واکنش و ۱۹ گونه‌ی شیمیایی است. واکنش‌های این سازوکار عبارت‌اند از: [۱۰]



واکنش‌های  $G_1$  تا  $G_3$  بیان‌گر تبدیل  $CH_4 \rightarrow CH_3 \rightarrow CH_2$  و  $CO$  &  $H_2 \rightarrow CH_2O$  هستند. واکنش‌های  $G_4$  تا  $G_6$  به تشکیل ترکیبات  $C_2$  مانند  $C_2H_6$ ،  $C_2H_4$ ،  $C_2H_2$  و همچنین اکسایش آنها می‌پردازند. واکنش‌های  $G_7$  و  $G_8$  به ترتیب بیان‌گر تشکیل  $CO_2$

$$I(x = 0, \mu_i) = \varepsilon_i I_b + \frac{1 - \varepsilon_i}{\pi} \sum_{\hat{s}_j \cdot \hat{e}_x} w_j \Phi(\mu_i, \mu_j) I(x, \mu_i, \mu_j) \mu_j \hat{s}_j \cdot \hat{e}_x < 0 \quad (9)$$

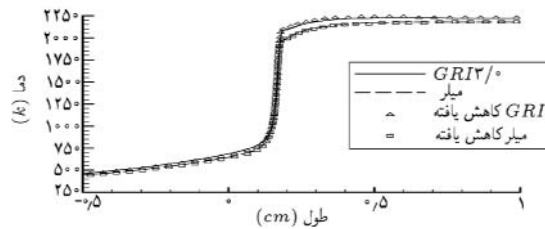
$$I(x = L, \mu_i) = \varepsilon_i I_b + \frac{1 - \varepsilon_i}{\pi} \sum_{\hat{s}_j \cdot \hat{e}_x} w_j \Phi(\mu_i, \mu_j) I(x, \mu_i, \mu_j) \mu_j \hat{s}_j \cdot \hat{e}_x > 0 \quad (10)$$

برای حل معادلات ۱ تا ۴ از کد *PREMIX* که برای مدل‌سازی احتراق شعله‌ی پیش‌آمیخته‌ی آرام در یک بعد به‌کار می‌رود استفاده شده است. برای استفاده از این کد در مدل‌سازی مشعل متخلخل تغییراتی در آن ایجاد شده تا معادلات مذکور به‌همراه شرایط مرزی ۵ تا ۱۰ حل شوند. ابتدا معادلات بقای گونه‌های شیمیایی با در نظر گرفتن پروفیل اولیه‌ی دمایی که به‌عنوان حدس اولیه داده شده، حل می‌شوند. در این حالت دمای گاز و جامد در هر نقطه یکسان فرض شده‌اند. در مرحله‌ی دوم، معادله‌ی انرژی با استفاده از تقریب اولیه‌ی به دست آمده از مرحله‌ی قبل در خصوص گونه‌های شیمیایی حل می‌شود. در این مرحله، معادلات بقای گونه‌های شیمیایی، بقای انرژی فاز گاز، و بقای انرژی فاز جامد بدون در نظر گرفتن عبارت انتقال حرارت تشعشعی حل می‌شوند. پس از هم‌گرایی این مرحله، مرحله‌ی سوم با محاسبه‌ی گرادیان تشعشع از تقریب *DOM* که دارای ۸ معادله‌ی دیفرانسیل مرتبه‌ی اول است و قراردادن در معادله‌ی بقای انرژی فاز جامد شروع خواهد شد. با هم‌گرایی این مرحله جواب نهایی کد به دست خواهد آمد. شبکه‌ی مورد استفاده در کد *PREMIX* از نوع تطبیق‌یافته است. برای این منظور جواب به دست آمده از شبکه‌ی اولیه بر روی شبکه‌ی که در گرادیان‌های شدید پارامترها ریز شده است، به‌عنوان توزیع اولیه مورد استفاده قرار می‌گیرد و مراحل یادشده تا رسیدن به جواب نهایی انجام می‌شود. این روند تا زمانی که تغییرات پارامترها در دو شبکه‌ی متوالی از مقدار مشخصی کم‌تر شود تکرار می‌شود.

### ۳. سازوکارهای احتراقی

#### ۱.۳. سازوکار میلر

این سازوکار در سال ۱۹۸۹ برای احتراق متان پیشنهاد شده است. سازوکار اولیه دارای ۲۲۷ واکنش و ۴۹ گونه‌ی شیمیایی بوده است که با اندک تغییراتی برای بهبود تخمین اکسیدهای نیتروژن دارای ۲۳۵



شکل ۲. مقایسه‌ی پروفیل دمایی به دست آمده از سازوکارهای مختلف در حالت استوکیومتری یک ( $\lambda = 1$ ) برای دمایی ثابت نقطه  $T(0, 154\text{cm}) = 1075\text{K}$ .

#### ۴. نتایج

##### ۱.۴. پروفیل دما

در شکل ۲ پروفیل تغییرات دما در طول مشعل متخلخل نشان داده شده است. این پروفیل نتایج چهار سازوکار احتراقی در محیط متخلخل را مقایسه می‌کند. در شکل از نشان دادن طول ابتدایی و انتهایی مشعل صرف نظر شده و فقط بخش مرکزی آن (ناحیه‌ی احتراق) نشان داده شده است. از آنجا که ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی مقدار نسبتاً بزرگی است، دمای فاز جامد و فاز گاز در محیط متخلخل، به غیر از مقدار ناچیزی در ناحیه‌ی پیش‌گرمایش، یکسان است. بنابراین در شکل ۲ فقط یک دما (دمای فاز گاز) برای هر سازوکار مشاهده می‌شود.

چنان که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، مقدار به دست آمده توسط دو سازوکار احتراقی کاهش یافته تطابق قابل قبولی با مقادیر به دست آمده از سازوکارهای کامل دارد. تفاوت اندکی نیز بین دو پروفیل دمایی حاصل از دو سازوکار کامل مشاهده می‌شود. در ناحیه‌ی خروجی اختلاف دما بین دو نوع سازوکار حداکثر  $20^\circ$  درجه‌ی سانتی‌گراد است که چندان قابل توجه نیست. این درحالی است که اختلاف تخمین در بیشینه اختلاف دمایی بین دو سازوکار کامل حدود  $125^\circ$  درجه کلوین است که انتظار می‌رود تأثیر آن بر غلظت گونه‌های شیمیایی نمایان شود. در ادامه، پروفیل دمایی به دست آمده از چهار سازوکار برای دو مخلوط احتراق رقیق ( $\lambda = 0.6$ ) و غنی ( $\lambda = 1.2$ ) آورده شده است. در شکل ۳ پروفیل دمایی برای حالت  $\lambda = 0.6$  آورده شده است. چنان که مشاهده می‌شود تطابق خوبی بین سازوکارهای مختلف وجود دارد. اختلاف بیشینه بین دو سازوکار کامل در اختلاف دمایی بیشینه حدود  $30^\circ$  درجه کلوین است.

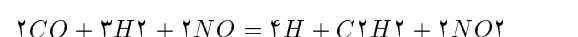
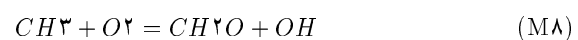
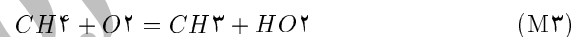
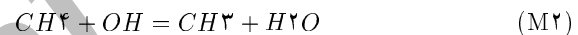
در شکل ۴ پروفیل دمایی برای  $\lambda = 1.2$  نشان داده شده است. سازوکارهای کاهش یافته توافق خوبی با مقادیر به دست آمده از سازوکارهای کامل مربوطه نشان می‌دهند ولی دو سازوکار کامل تخمین دمایی متفاوتی را نشان می‌دهند. اختلاف بیشینه بین دو سازوکار کامل در دمای بیشینه، حدود  $110^\circ$  درجه کلوین است. این اختلاف در انتهای مسیر کاهش می‌یابد، به گونه‌ی که مقادیر دما در خروجی مشعل به یک میزان است.

$H_2O$  هستند و  $G9$  تا  $G12$  سازوکارهای فرعی اکسایش  $H_2$  در واکنش با  $H_2O_2$  و  $HO_2$  را به نمایش می‌گذارند. سازوکار کلی  $G13$  بیان‌گر تشکیل  $NO$  حاصل از واکنش‌های  $NO$  حرارتی، واسط  $N_2O$  و  $NO$  سریع است. واکنش  $G14$  بیان‌گر واکنش‌های سوختن مجدد و  $NO$  سریع است. واکنش  $G15$  برای بهبود وضعیت فرض نیمه متعادل گونه‌ی  $NH_2$  آورده شده است.

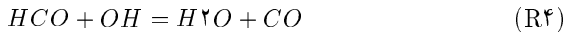
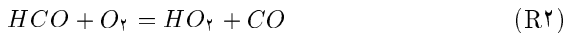
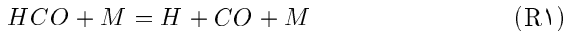
##### ۴.۳. سازوکار کاهش یافته‌ی مبتنی بر Miller 89

این سازوکار نیز با فرض حالت نیمه متعادل بین  $28$  گونه‌ی شیمیایی ( $NH_2, CH_2OH, C_2H_3, NCO, HCO, NH_2, CH_2, CN, NNH, CH_2(s), CH, C_2H, C, C_2H_5, CH_3O, HCNO, N_2O, H_2O_2, NH, HCCO, H_2CN, N$  آمده است. [۱۱])

در مجموع سازوکار مورد استفاده دارای  $20$  گونه‌ی شیمیایی و  $16$  واکنش است. واکنش‌های این سازوکار عبارت‌اند از:



— بر مبنای سازوکار پیشنهادی میلر و GRI3.0 — عبارت‌اند از:

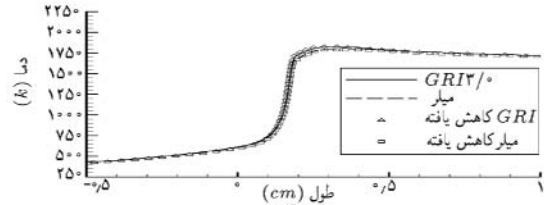


این واکنش‌ها در هر دو سازوکار یکسان‌اند، ولی ضرایب آریونیوسی متفاوتی دارند.

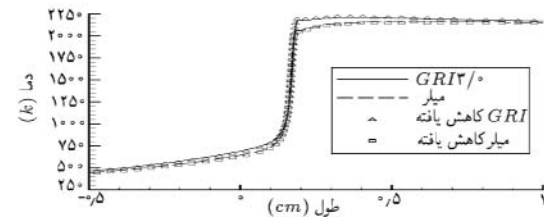
ترکیبات دارای هیدروژن در واکنش‌های اولیه‌ی فوق به شدت بر تولید  $CO$  تأثیرگذارند. تحقیقات انجام‌شده در این زمینه نشان داده است که تخمین دقیق  $H$  و  $OH$  باعث تعیین دقیق غلظت  $CO$  می‌شود.<sup>[۱۲]</sup>

در شکل ۵ تغییرات کسر مولی گونه‌ی  $CO$  در طول محور مشعل نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود تفاوت محسوس بین دو سازوکار کامل احتراق وجود دارد. سازوکارهای کاهش‌یافته نیز تطابق خوبی با سازوکارهای کامل مربوطه نشان می‌دهند. در نسبت اختلاط  $0.6$ ، پیک کسر مولی  $CO$  تقریباً در یک نقطه برای دو سازوکار به دست آمده است. در سازوکار GRI3.0 پیک  $CO$  در فاصله‌ی  $0.1842$  سانتی‌متری از مرکز مشعل و برابر  $0.329$  به دست آمده، در حالی که کسر مولی بیشینه‌ی  $CO$  در سازوکار میلر در فاصله‌ی  $0.1833$  سانتی‌متری از مرکز مشعل و برابر  $0.376$  به دست آمده است. در نسبت اختلاط  $1.2$  پیک بیشینه‌ی کسر مولی  $CO$  در سازوکار GRI3.0 اندکی جلوتر از سازوکار میلر محاسبه شده است. این مقادیر بیشینه برای سازوکار GRI3.0 در فاصله‌ی  $0.1869$  سانتی‌متر از مرکز مشعل و برابر  $0.743$ ، و در سازوکار میلر در فاصله‌ی  $0.1817$  سانتی‌متری برابر  $0.793$  است. اما به هر حال نتیجه‌ی مهمی که می‌توان از مقایسه‌ی پروفیل کسر مولی  $CO$  گرفت آن است که سازوکارهای کاهش‌یافته تطابق بسیار خوبی با سازوکارهای کامل مربوطه دارند. به‌عنوان مثال سازوکار کامل GRI3.0 و سازوکار کاهش‌یافته‌ی آن، در مقطع خروجی اختلافی کم‌تر از  $18\%$  دارند.

تفاوت در تخمین غلظت‌ها به‌طور نسبی می‌تواند مبنای قضاوت قرار گیرد. به بیان دیگر چنانچه تفاوت در تخمین غلظت‌ها به نسبت غلظت یکی از سازوکارها در نظر گرفته شود می‌توان اندازه‌ی بزرگی اختلاف را مؤثر یا ناچیز دانست. به‌عنوان مثال در خصوص تفاوت کسر مولی  $CH_2$  حاصل از تخمین‌های دو نوع سازوکار کامل  $3e-09$  در بیشترین میزان تخمین غلظت با توجه به غلظت پایه‌ی  $3e-03$  سازوکار میلر به دست آمده است که به‌طور نسبی برابر  $0.63e-07$  است. در مورد گونه‌ی  $HCO$  تفاوت تخمین دو سازوکار  $5e-03$  -  $3.62e-03$



شکل ۳. مقایسه‌ی پروفیل دمایی به دست آمده از سازوکارهای مختلف در  $T(0.154cm) = 1075K$  ( $\lambda = 0.6$ ) برای دمای ثابت نقطه‌ی  $T(0.154cm) = 1075K$ .



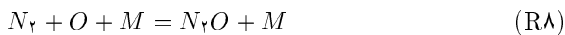
شکل ۴. مقایسه‌ی پروفیل دمایی به دست آمده از سازوکارهای مختلف در  $T(0.154cm) = 1075K$  ( $\lambda = 1.2$ ) برای دمای ثابت نقطه‌ی  $T(0.154cm) = 1075K$ .

در شکل‌های ۲ تا ۴ علت اصلی اختلاف دو نوع سازوکار کامل و در نتیجه سازوکارهای کاهش‌یافته‌ی حاصل از آنها، در تخمین توزیع دمایی مشعل متخلخل، به تخمین‌های متفاوت ترکیبات کربنی بازمی‌گردد. از جمله‌ی مهم‌ترین و تأثیرگذارترین این ترکیبات می‌توان به  $CO$  اشاره کرد که در بخش‌های بعدی به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته است. البته چنان که مشاهده می‌شود این عدم تطابق در ناحیه‌ی کوچکی اطراف جبهه‌ی شعله و عمدتاً بعد از آن قرار دارد و در انتهای مشعل که بیان‌گر عملکرد حرارتی آن است یک دما به دست آمده است. معمولاً در آزمایشات تجربی<sup>[۱۵]</sup>، دما در محیط بیرونی مشعل متخلخل اندازه گرفته می‌شود. به دلیل افت حرارت در راستای شعاع، پروفیل دما در سطح خارجی مشعل با پروفیل در راستای محور آن که در محاسبات یک‌بعدی منظور شده است، متفاوت است. از این رو در شکل‌های ۲ تا ۴ نتایج تجربی نشان داده نشده‌اند.

#### ۲.۴. انتشار $CO$

تشکیل  $CO$  به دلیل واکنش‌های سریع مربوط به مصرف متان در ناحیه‌ی اولیه‌ی شعله است. درون این ناحیه گونه‌های  $CH_x$  بسیار سریع‌تر از  $CO$  با رادیکال‌های اکسایند و واکنش انجام می‌دهند و بنابراین تا زمانی که غلظت  $CH_x$  با خروج گاز از این ناحیه پایین نیاید،  $CO$  نمی‌تواند اکسید شود. این اکسایش‌کننده  $CO$  در ناحیه‌ی ثانویه‌ی شعله از لحاظ سینتیکی در احتراق پیش‌آمیخته قابل توجه است. واکنش‌هایی که بر تشکیل  $CO$  در احتراق پیش‌آمیخته مؤثرند

احتراقی پیش‌آمیخته‌ی فقیر است.<sup>[۱۴]</sup> واکنش‌های آن عبارت‌اند از:

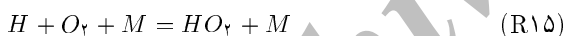


در این دسته واکنش‌های اولیه (R8 تا R11) ابتدا  $H_2O$  تشکیل می‌شود و سپس به  $NO$  تبدیل می‌گردد. همچنین  $N_2O$  می‌تواند به کمک اتم‌های  $H$  و  $O$  تبدیل به  $N_2$  شود. این سازوکار اصلی‌ترین عامل تولید  $NO$  در دماهای پایین است.

$NO$  سریع حاصل از اکسایش گونه‌های آمین یا سیانید<sup>۲</sup> و اتم‌های نیتروژن است. اتم‌های نیتروژن و سیانید از رادیکال‌های هیدروکربن بر مبنای واکنش زیر حاصل می‌شوند:

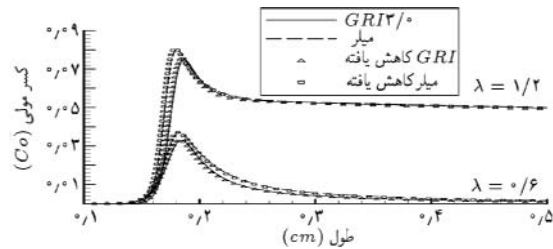


اکسیداسیون  $HCN$  به  $NO$  شامل زنجیره‌ی  $HCN \rightarrow CN \rightarrow NO$  و اکسایش  $N$  به  $NO$  است. کورا و اسموک واکنش‌های زیر را بر سرعت شعله و دمای آن، و در نتیجه بر واکنش‌های  $NO$  مؤثر دانسته‌اند. در تحقیق دیگری که توسط کلار بورگ و همکارانش انجام شده، تأثیر پذیری تولید  $NO$  از غلظت  $OH$  اثبات شده است.<sup>[۱۴]</sup>



تمامی سازوکارهای R5 تا R15 بین دو سازوکار کامل احتراقی مورد بحث مشترک‌اند، ولی ضرایب آرینوسی آنها متفاوت است. در خصوص سازوکارهای سه‌جزئی که گونه‌ی سوم آن ( $M$ ) باید تعریف شود نیز دو سازوکار گونه‌های شیمیایی مختلفی را در نظر گرفته‌اند.

تغییرات غلظت  $NO$  بر حسب کسر مولی در طول مشعل متخلخل برای سه حالت مخلوط فقیر، استوکیومتریکی و غنی در شکل‌های ۱۱ تا ۱۳ آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در حالت احتراق فقیر و غنی، بین دو سازوکار کامل مورد بررسی تفاوت محسوسی وجود دارد. سازوکارهای کاهش‌یافته نیز به جز سازوکار کاهش‌یافته‌ی GRI3.0 در حالت مخلوط فقیر ( $\lambda = 0.6$ ) به صورت قابل قبولی از سازوکارهای کامل تبعیت کرده‌اند (شکل ۱۱). به طور کلی مقادیر به دست آمده برای کسر مولی  $NO$  حاصل از سازوکار GRI3.0 تخمین بیشتری نسبت به سازوکار میلر به دست می‌دهد. برای تعیین علت این اختلاف، بررسی دیگر گونه‌های شیمیایی مؤثر در تولید  $NO$  ضروری است.



شکل ۵. تغییرات کسر مولی  $CO$  در طول محور مشعل حاصل از سازوکارهای مورد بررسی و دو مخلوط احتراق غنی و رقیق در نسبت اختلاط‌های  $\lambda = 0.6$  و  $\lambda = 1/2$ .

بیشترین میزان غلظت و غلظت پایه‌ی  $5 - 3.4e$  حاصل از سازوکار میلر به طور نسبی برابر  $1/0.6$  به دست می‌آید. بنابراین این اختلافات به صورت نسبی مبنای قضاوت قرار گرفته‌اند.

با مراجعه به معادلات R1 تا R4 و مشاهده‌ی تغییرات هریک از گونه‌های مؤثر در غلظت  $CO$  در شکل‌های ۶ تا ۱۰ آورده شده، می‌توان نتیجه گرفت که در حالت مخلوط فقیر ( $\lambda = 0.6$ ) تفاوت چندانی در دو سازوکار بین گونه‌های  $H$ ،  $OH$ ،  $CH_2$  حاصل از دو سازوکار وجود ندارد. زیرا چنان که در شکل‌های ۷ و ۸ مشاهده می‌شود، دو سازوکار تقریباً تخمین مشابهی از این گونه‌های شیمیایی ارائه داده‌اند، اما تفاوت محسوسی بین تخمین دو سازوکار برای دو گونه‌ی  $HCO$  و  $HO_2$  (واکنش R2) وجود دارد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تفاوت حاصله از دو سازوکار کامل میلر و GRI3.0 ناشی از تفاوت در تعیین گونه‌های  $HCO$  و  $HO_2$  است. در حالت مخلوط غنی ( $\lambda = 1/2$ ) علاوه بر دو گونه‌ی اشاره شده، غلظت گونه‌های  $CH_2$  و  $H$  نیز بر تفاوت غلظت به دست آمده‌ی  $CO$  در دو سازوکار احتراق مؤثر است.

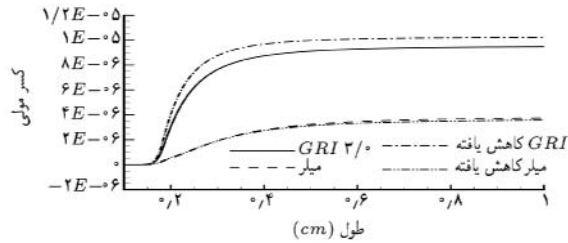
#### ۳.۴. انتشار $NO$

یکی دیگر از گونه‌های شیمیایی مهم در احتراق پیش‌آمیخته، آلانده‌ی  $NO$  است. واکنش‌های تولید  $NO$  با نرخ بسیار کندتری نسبت به آزادسازی انرژی احتراق انجام می‌شوند. تشکیل  $NO$  در شعله‌ی متان حاصل از سه سازوکار حرارتی،  $N_2O$  واسط و فنی‌مور یا سریع است. تشکیل  $NO$  حرارتی به دلیل واکنش اتم‌های  $O$  و  $N$  است.

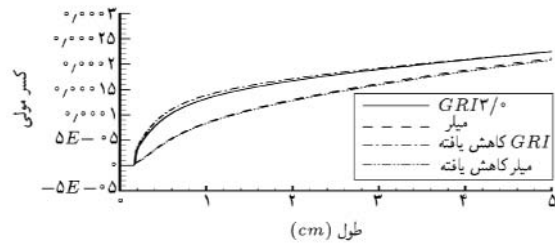


$NO$  حرارتی که منبع اصلی  $NO$  در دمای بالاست معمولاً در دماهای بالاتر از  $1800 K$  رخ می‌دهد.

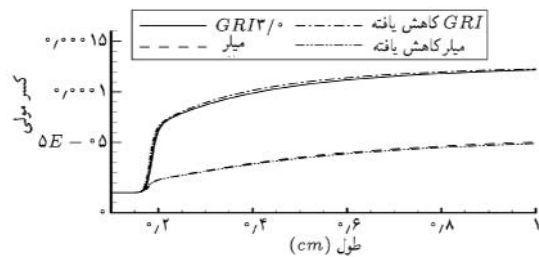
سازوکار  $N_2O$  واسط موثرترین عامل تولید  $NO$  در سیستم‌های



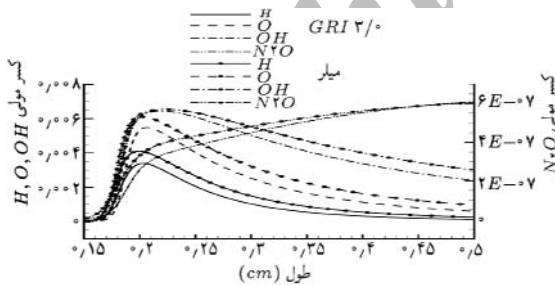
شکل ۱۱. تغییرات غلظت گونه‌ی  $NO$  در امتداد محور مشعل حاصل از سازوکارهای مورد بررسی در  $\lambda = 0.6$ .



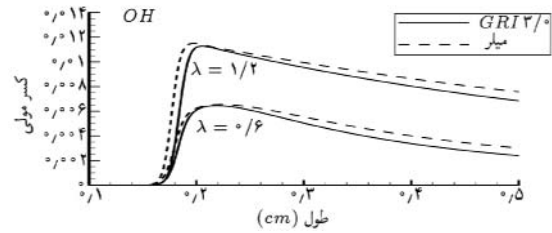
شکل ۱۲. تغییرات غلظت گونه‌ی  $NO$  در امتداد محور مشعل حاصل از سازوکارهای مورد بررسی در  $\lambda = 1.0$ .



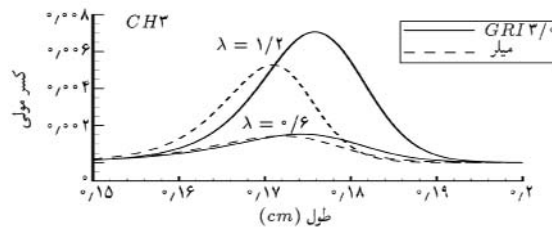
شکل ۱۳. تغییرات غلظت گونه‌ی  $NO$  در طول محور مشعل حاصل از سازوکارهای مورد بررسی در حالت  $\lambda = 1.2$ .



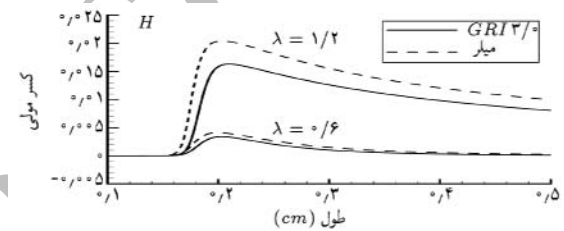
شکل ۱۴. تغییرات غلظت گونه‌های  $H$ ،  $O$ ،  $OH$  و  $N_2O$  در دو سازوکار کامل در حالت  $\lambda = 0.6$ .



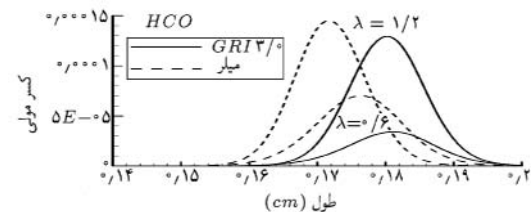
شکل ۶. تغییرات غلظت گونه‌ی  $OH$  در طول محور مشعل.



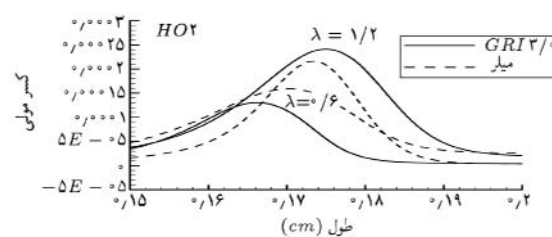
شکل ۷. تغییرات غلظت گونه‌ی  $CH_3$  در طول محور مشعل.



شکل ۸. تغییرات غلظت گونه‌ی  $H$  در طول محور مشعل.



شکل ۹. تغییرات غلظت گونه‌ی  $HCO$  در طول محور مشعل.

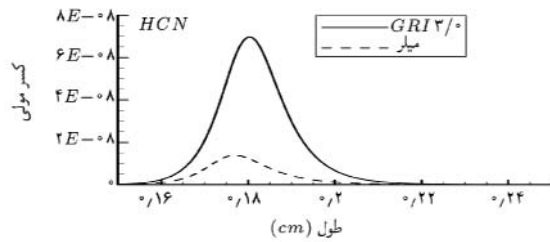


شکل ۱۰. تغییرات غلظت گونه‌ی  $HO_2$  در طول محور مشعل.

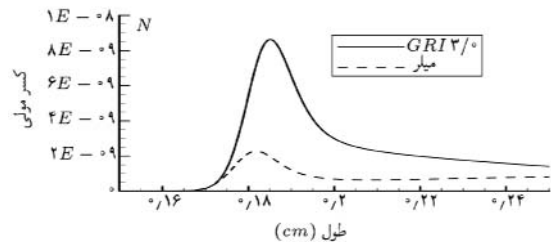
مشابه این رفتار در دو مخلوط احتراقی دیگر نیز وجود دارد. چنان که مشاهده می‌شود، اختلاف محسوسی بین این گونه‌های شیمیایی حاصل از دو سازوکار کامل احتراقی به چشم نمی‌خورد. این گونه‌ها در شکل‌گیری  $NO$  حرارتی و  $N_2O$  واسط مؤثرند. بررسی سازوکار  $NO$  فنی موربا مقایسه‌ی دو گونه‌ی شیمیایی  $H$  و  $HCN$  انجام شده

چنان که پیش‌تر اشاره شد، تعیین علت اختلاف در کسر مولی  $NO$  به دست آمده از دو سازوکار نیازمند بررسی دیگرگونه‌های مؤثر در سه دسته سازوکار تولید  $NO$  است. در شکل ۱۴ تغییرات چهار گونه‌ی  $O$ ،  $H$ ،  $OH$  و  $N_2O$  برای مخلوط فقیر آورده شده است.

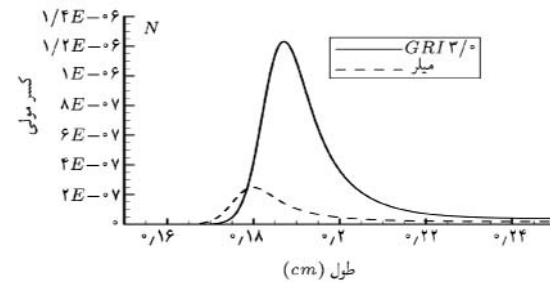




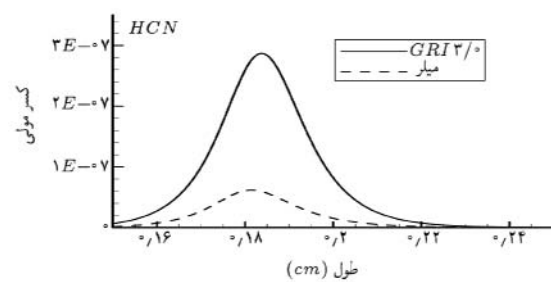
شکل ۱۸. تغییرات کسر مولی HCN در HCN در  $\lambda = 1^\circ$



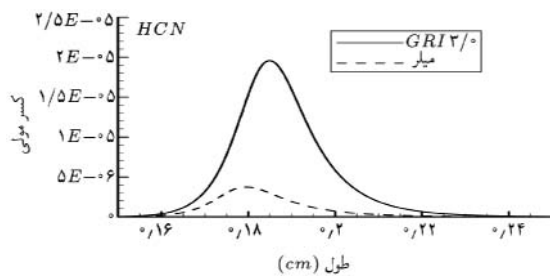
شکل ۱۵. تغییرات کسر مولی N در  $\lambda = 0.6^\circ$



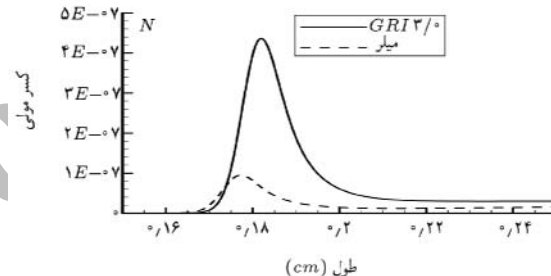
شکل ۱۹. تغییرات کسر مولی N در  $\lambda = 1.2^\circ$



شکل ۱۶. تغییرات کسر مولی HCN در  $\lambda = 0.6^\circ$



شکل ۲۰. تغییرات کسر مولی HCN در  $\lambda = 1.2^\circ$



شکل ۱۷. تغییرات کسر مولی N در  $\lambda = 1^\circ$

متداخل را برای نسبت اختلاط‌های مختلف نشان می‌دهد. چنان که مشاهده می‌شود، نتایج با مقادیر تجربی به خوبی مطابقت دارند و از بین دو سازوکار کامل احتراقی، سازوکار GRI3.0 از دقت بیشتری برخوردار است. اختلافی که بین سازوکارهای کاهش‌یافته و سازوکارهای کامل مشاهده می‌شود به دلیل استفاده از شبکه‌ی محاسباتی با تعداد نقاط بیشتر در سازوکارهای کاهش‌یافته است. قابل ذکر است که شکل ۲۱ با استفاده از ۳۵۰ نقطه‌ی محاسباتی برای سازوکارهای کامل و ۱۰۰۰ نقطه برای سازوکارهای کاهش‌یافته به دست آمده است.

بزرگ‌ترین عامل در کاهش تعداد نقاط شبکه‌ی محاسباتی سازوکارهای کامل، حجم محاسبات و در نتیجه زمان لازم برای هم‌گرایی است. از این رو با اطمینان می‌توان گفت که استفاده از سازوکارهای کاهش‌یافته از لحاظ هزینه‌ی محاسبات مقرون به صرفه‌تر از سازوکارهای کامل است. در مدل‌سازی شعله‌آزاد به دلیل نیاز به تعداد شبکه‌ی محاسباتی کم‌تر، این موضوع در حالت یک‌بعدی قابل توجه نیست. طبق مقایسه‌ی انجام شده، تعداد سلول‌های مورد نیاز برای رسیدن به جواب مستقل از

است. شکل‌های ۱۵ تا ۲۰ بیان‌گر کسر مولی حاصل از دو سازوکار کامل مورد بحث برای گونه‌های شیمیایی HCN و N در مخلوط رفیق، استوکیومتریک و غنی است.

چنان که در شکل‌های ۱۵ تا ۲۰ مشاهده می‌شود تفاوت قابل توجهی بین گونه‌های HCN و N حاصل از دو سازوکار وجود دارد. این تفاوت بیان‌گر اختلاف دو سازوکار در تخمین  $NO$  فنی موراست. از مقایسه‌ی مقادیر به دست آمده از دو سازوکار با نتایج تجربی می‌توان صحت هریک از آنها را بررسی کرد.

#### ۴.۴. مقایسه با نتایج تجربی

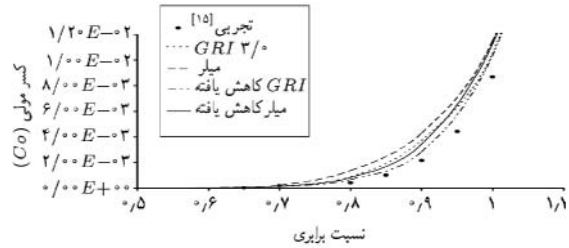
مقایسه‌ی نتایج مدل‌سازی عددی با نتایج تجربی برای گونه‌های CO و NO بیان‌گر دقت هریک از سازوکارهای مورد بررسی است. در شکل ۲۱ نتایج حاصل از حل عددی سازوکارهای مختلف احتراقی مورد نظر با مقادیر تجربی به دست آمده از تحقیقات موجود<sup>[۱۵]</sup> نشان داده شده‌اند. شکل ۲۱ مقدار کسر مولی منوکسیدکربن در مقطع خروجی مشعل

سازوکار زلدوویچ توسعه‌یافته به دلیل اینکه فقط  $NO$  حرارتی را در نظر می‌گیرد تخمین کم‌تری را نشان داده است. بررسی استفاده از سازوکارهای مختلف  $NO$  در تحقیق دیگری که به صورت عددی و آزمایشگاهی انجام شده، ارائه شده است. [۱۶] با توجه به تحقیقات انجام‌گرفته نتیجه گرفتن این موضوع که سازوکارهای میلر و GRI3.0 در مقایسه با سازوکار زلدوویچ برای تخمین اکسید نیتروژن ناتوان‌ترند، صحیح نیست زیرا در این مدل‌سازی برخی کمیت‌های ترموفیزیکی، مانند خصوصیات تشعشعی بستر متخلخل، ضریب انتقال حرارت حجمی، و ضریب انتقال حرارت هدایت دارای تقریبی هستند که هر یک در محاسبات خطایی را وارد می‌کنند. به عنوان مثال افزایش ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی باعث افزایش نرخ انتقال حرارت به ناحیه‌ی پیش‌گرمایش می‌شود و در نتیجه سرعت اشتعال افزایش می‌یابد. افزایش سرعت اشتعال باعث کاهش مقدار تولید اکسیدهای نیتروژن می‌شود. [۱۷، ۱۸] بنابراین نمی‌توان این نتیجه‌گیری را با وجود خطاهای مختلف در کمیت‌های ترموفیزیکی و در نتیجه تغییر پروفیل دمایی، خصوصاً در ناحیه‌ی احتراق، و اثر آن بر تولید اکسیدهای نیتروژن صحیح دانست.

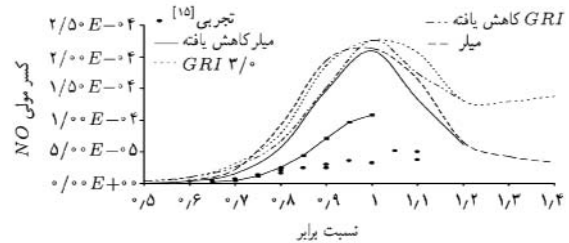
#### ۵.۴. سرعت اشتعال

یکی از پارامترهای مؤثر در عملکرد مشعل متخلخل سرعت سوزش<sup>۳</sup> است؛ و آن عبارت است از سرعت ورود مخلوط اولیه به ماتریس متخلخل بدون آن که دمای اولیه‌ی آن افزایش یابد. در شکل ۲۳ سرعت اشتعال در مشعل متخلخل مورد تحقیق برای نسبت اختلاط‌های مختلف نشان داده شده است. مقایسه‌ی سرعت سوزش حاصل از سازوکارهای مختلف سینتیک حاکمی از مطابقت خوب آنها، به‌استثنای ناحیه احتراق غنی، است. در ناحیه‌ی احتراق غنی سرعت سوزش سازوکار میلر بیشتر از سازوکار GRI3.0 است. علت این اختلاف را می‌توان در تفاوت پروفیل دما در دو سازوکار، در حالت اختلاط غنی دانست (شکل ۴). سرعت سوزش محاسبات انجام شده توسط هسو، که قبلاً به آن اشاره شد، کم‌تر از چیزی است که در این تحقیق به‌دست آمده است. علت این موضوع را می‌توان تفاوت در مدل‌سازی مسئله دانست. (تفاوت در مدل‌سازی به دلیل سرعت مؤثر متفاوت در فاز گاز و همچنین شرایط مرزی مختلف است.)

نکته‌ی قابل توجه در این شبیه‌سازی‌ها، اختلاف مشهود بین نتایج عددی و نتایج آزمایشگاهی است. از جمله عوامل این عدم تطابق، می‌توان به عدم قطعیت در خواص ترموفیزیکی و ضرایب انتقال حرارت حجمی بین فاز جامد و گاز اشاره کرد. به‌عنوان مثال در تحقیق حاضر از ضریب انتقال حرارت حجمی ثابت استفاده شده است در حالی که در عمل این ضریب با تغییر سرعت و دمای محلی گاز تغییر می‌کند.



شکل ۲۱. مقایسه‌ی متوکسیدکربن در مقطع خروجی مشعل، حاصل از سازوکارهای مختلف احتراق با نتایج تجربی.



شکل ۲۲. مقایسه‌ی اکسید نیتروژن در مقطع خروجی مشعل حاصل از سازوکارهای مختلف احتراق با نتایج تجربی.

شبکه‌ی محاسباتی برای شعله آزاد (با استفاده از سازوکار GRI-3.0) در حدود ۱۰۰ نقطه است؛ در حالی که در شعله درون محیط متخلخل این تعداد نقاط با توجه به سازوکار انتخابی بین ۸۰۰ تا ۱۰۰۰ نقطه است. در شکل ۲۲ تغییرات کسر مولی  $NO$  با نسبت اختلاط در مقطع خروجی مشعل برای سازوکارهای مختلف سینتیک مورد مقایسه قرار گرفته است. در این شکل همچنین نتایج تجربی و محاسبات انجام شده توسط هسو و ماتئو [۱] نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج تجربی و نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی تفاوت آشکاری دارند. پیش‌تر اشاره شد که جواب سازوکارهای کامل احتراقی به دلیل تعداد نقاط شبکه‌ی محاسباتی کم‌تر اندکی با سازوکارهای کاهش‌یافته‌ی مربوطه متفاوت است. با افزایش تعداد نقاط شبکه‌ی محاسباتی، جواب حاصل از سازوکارهای کامل و کاهش‌یافته‌ی مربوطه به یکدیگر نزدیک می‌شوند. برای اثبات این موضوع در حالت احتراق استوکئومتریک تعداد نقاط شبکه‌ی محاسباتی سازوکارهای کامل تا حدود ۸۸۰ نقطه به‌صورت شبکه‌ی تطبیق‌یافته افزایش یافته است؛ و چنان که در شکل‌های ۲۱ و ۲۲ مشاهده می‌شود جواب سازوکارهای کامل و سازوکارهای کاهش‌یافته یکسان شده‌اند. در تحقیق انجام شده توسط هسو و ماتئو، از سازوکار پیشنهادی محققین در سال ۱۹۸۵ که دارای ۵۸ واکنش و ۱۷ گونه‌ی شیمیایی بود، استفاده شده است. از آنجا که در این سازوکار احتراقی، واکنش‌های نیتروژن موجود نبوده است لذا در مدل‌سازی مشعل متخلخل از سازوکار فوق با اضافه‌کردن سازوکار زلدوویچ توسعه‌یافته استفاده کرده‌اند. در شکل ۲۲ دیده می‌شود که

آزاد آرام پیش مخلوط است، لزوم استفاده از سازوکارهای کاهش یافته را آشکار می سازد.

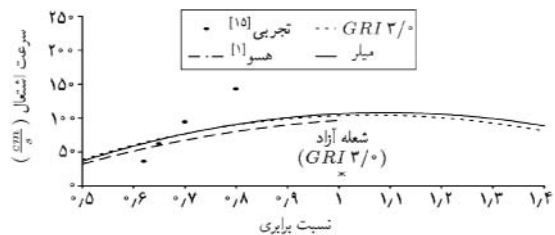
## ۵. نتیجه گیری

نتایج شبیه سازی عددی از نظر پیش بینی عملکرد و تولید آلاینده های مشعل متخلخل، حاکی از مطابقت خوب میان سازوکارهای کاهش یافته و سازوکارهای اصلی مربوطه است. این تطابق با توجه به حجم کم محاسبات سازوکارهای کاهش یافته اهمیت استفاده از آنها را در مدل سازی مشعل متخلخل مشخص می کند. درخصوص پروفیل دما تقریباً تمامی سازوکارها تقریب یکسانی به دست داده اند. برای پروفیل غلظت  $CO$  در امتداد محور مشعل، تفاوت اندکی بین دو سازوکار کامل احتراقی وجود دارد که علت آن ناشی از تفاوت تخمین غلظت گونه های  $HCO$  و  $HO_2$  است.

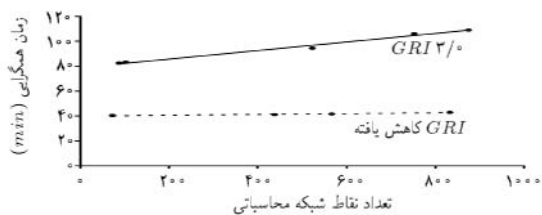
همچنین در مخلوط غنی علاوه بر دو گونه ی شیمیایی مذکور، گونه های شیمیایی  $H$  و  $CH_2$  نیز، که بر غلظت  $CO$  مؤثرند، دارای تخمین های متفاوتی بوده اند. میزان کسر مولی  $CO$  حاصل از دو سازوکار کامل احتراقی با افزایش فاصله از ناحیه ی احتراق به سمت یک مقدار مشخص میل می کند. نتایج تجربی مقدار آلاینده ی  $CO$  را فقط در ناحیه ی خروجی مشعل مشخص کرده اند که از این رو نمی توان بخشی بر روی صحت تخمین  $CO$  حاصل از دو سازوکار در طول مشعل کرد. درخصوص آلاینده ی  $NO$ ، تفاوت محسوسی بین تخمین دو سازوکار مشاهده شده است که علت آن ممکن است تفاوت در تخمین  $NO$  فنی مور باشد. از آنجا که این اختلاف در تعیین  $NO$  تا انتهای مشعل ادامه می یابد، مقایسه ی آن با نتایج تجربی دقت بیشتری را برای سازوکار احتراقی میسر نشان می دهد. مقایسه ی سرعت اشتعال به دست آمده توسط دو سازوکار تفاوت محسوسی را با نتایج تجربی نشان می دهد که دلیل آن را می توان در عدم قطعیت خواص انتقال حرارت ماده ی متخلخل دانست. دو سازوکار کامل احتراقی تخمین یکسانی از سرعت اشتعال در ناحیه ی احتراق رقیق نشان می دهند در حالی که در ناحیه ی احتراق غنی، سرعت اشتعال سازوکار میسر بیشتر از سازوکار  $GRI3.0$  به دست آمده است.

## پانویس

1. computational singular perturbation method
2. cyano
3. burning velocity



شکل ۲۳. مقایسه ی سرعت اشتعال حاصل از سازوکارهای مختلف احتراق و نتایج تجربی.



شکل ۲۴. مقایسه ی سرعت هم گرایی سازوکار کامل  $GRI3.0$  با سازوکار کاهش یافته ی آن در حالت احتراق استوکیومتریکی در مشعل متخلخل.

## ۶.۴. بررسی هزینه محاسبات

یکی از موضوعات مهم در شبیه سازی رایانه یی «هزینه ی انجام محاسبات» است. از راهکارهای مؤثر برای کاهش هزینه ی محاسبات استفاده از سازوکارهای کاهش یافته است. چنان که مشاهده شد با استفاده از سازوکارهای کاهش یافته، و با توجه به محدودی کاربردی آنها، می توان به همان نتایج به دست آمده از سازوکارهای کامل احتراقی دست یافت. در شکل ۲۴ سرعت هم گرایی یکی از این سازوکارهای کاهش یافته با سازوکار کامل اصلی مربوطه مقایسه شده است. چنان که مشاهده می شود با افزایش تعداد شبکه ی محاسباتی زمان هم گرایی سازوکار کامل به صورت تقریباً خطی افزایش یافته است. سازوکار کاهش یافته علاوه بر داشتن زمان هم گرایی کم تر، رفتاری مستقل از تعداد نقاط شبکه را نشان می دهد. به بیان دیگر زمان هم گرایی آن تقریباً با افزایش تعداد نقاط شبکه ی محاسباتی بدون تغییر باقی مانده است.

توجه به این نکته که در مدل سازی مشعل متخلخل تعداد نقاط شبکه ی محاسباتی مورد نیاز برای رسیدن به جوابی مستقل از تعداد نقاط شبکه، بسیار بیشتر از تعداد نقاط مورد نیاز برای مدل سازی شعله

## منابع

1. Hsu, P.F. and Matthews, R.D. "The necessity of using detailed kinetics in models for premixed combustion within porous media", *Combustion*

- and *Flame*, **93**, pp. 457- 466 (1993).
2. Zhou, X.Y. and Pereira, J.C. "Comparison of four combustion models for simulating the pre-mixed combustion in inert porous media", *Fire and Materials*, **22**, pp. 187-197, (1998).
  3. Diamantis, D.J., Mastorakos, E. and Goussis, D.A. "Simulation of premixed combustion in porous media", *Comb. Theory & modeling*, **6**, pp. 383-411 (2002).
  4. Howell, J., Hall, M. and Ellzey, L. "Combustion of hydrocarbon fuel within porous inert media", *Prog. Energy Combustion Sci.*, **22**, pp. 121-145 (1996).
  5. Kee, R., Grcar, J., Smooke, M. and Miller, J. "A FORTRAN program for modeling steady laminar one dimensional premixed flames" Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories (1985).
  6. Leonardi, S.A., Viskanta, R. and Gore, J.P. "Analytical and experimental study of combustion and heat transfer in submerged flame metal fiber burner / heater", *J. Heat Transfer*, **125**, pp. 118-125 (2003).
  7. Modest, M.F. "Radiative heat transfer", New York: McGraw-Hill (1993).
  8. Miller, J.A. and Bowman, C.T. "Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, **15**, pp. 287-338 (1989).
  9. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
  10. SUNG, C.J., LAW, C.K. and CHEN, J.Y. "Augmented reduced mechanisms for NO emission in methane oxidation", *Combustion and Flame*, **125**, pp. 906-919 (2001).
  11. Homma, R. and Chen, J.Y. "Reduced mechanisms for prediction of NO<sub>2</sub> formation in methane-air combustion", ASPACC (1999).
  12. Cannon, S.M., Brewster, B.S. and Smoot, L.D. "Stochastic modeling of CO and NO in premixed methane combustion", *Combustion and Flame*, **113**, pp. 135-146 (1998).
  13. Correa, S.M. and Smooke, M.D. "NO<sub>x</sub> in parametrically varied methane flames", 23th Symposium (International) In Combustion, The Combustion Institute, pp. 289-295, (1990).
  14. Glarborg, B., Lilleheie, N.I., Byggstoyl, S., Magnussen, B.F., Kilpinen, P. and Hupa, M. "A reduced mechanism for nitrogen chemistry in methane combustion", 24th Symposium (International) In Combustion, The Combustion Institute, pp. 889-898, (1992).
  15. Chaffin, C., Koenig, M., Koeroghlian, M., Matthews, R., Hall, M., Nichols, S., and Lim, I. "Experimental investigation of premixed combustion within highly porous media", *Proceeding of the ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference*, **4**, pp. 219-224 (1991).
  16. Bouma, P.H., Eggels, R.L.G.M., de Goey, L.P.H., Nieuwenhuizen, J.K. and van der Drift, A. "A numerical and experimental study of the NO emission of ceramic foam surface burners", *Combust. Sci. and Tech.* pp. 108, 193-203 (1995).
۱۷. خسروی‌الحسینی، مصطفی؛ معرفت، مهدی. و مظاهری، کیومرث. «مقایسه عددی فرایند احتراق در محیط متخلخل با شعله آزاد پیش‌آمیخته آرام»، نشریه‌ی پژوهشی مهندسی مکانیک ایران، **۸**، صص. ۷۳-۸۹ (۱۳۸۵).
۱۸. خسروی‌الحسینی، مصطفی؛ معرفت، مهدی. و مظاهری، کیومرث. «بررسی اثر مدل‌های ضرایب انتقال حرارت بر شبیه‌سازی عملکرد مشعل متخلخل»، نشریه علمی - پژوهشی مدرس، زیر چاپ.