

مقایسه بین عملکرد مدلهای مختلف NO_x گرمایی در شعله جت مغشوش غیر پیش مخلوط مونواکسید کربن

محسن دوازدهامامی^۱، حمیدرضا شهبازیان^۲ دانشکده مهندسی مکانیک – دامشگاه صنعتی اصفهان mohsen@cc.iut.ac.ir

چکیدہ

در این مقاله به مطالعه و بررسی تشکیل اکسیدهای نیتروژن در شعله جت ساده مغشوش مونواکسید کربن پرداخته شده است. به همین منظور ابتدا مدلها پیشنهادی مختلف جهت تخمین NO گرمایی ارائه شده و سپس میزان NOx تخمین زده شده است. جهت تعیین مقادیر متوسط کمیتهای اصلی جریان و گونههای اصلی احتراقی معادلات پیوستگی، مومنتم و انرژی با استفاده از روش حجم محدود حل شدهاند. جهت بستن معادلات از مدل ٤-K استاندارد و از مدل کسر مخلوط و واریانس آن نیز برای شبیهسازی میدان احتراقی استفاده شده است. به علت غلظت پایین اکسیدهای نیتروژن و کند بودن سینتیکهای شیمیایی مربوطه حل معادله انتقال آن به صورت پس پردازش انجام میشود. جهت تخمین ترم منبع در معادله انتقال اکسید نیتروژن فقط مکانیزم گرمایی در نظر گرفته شده است که مکانیزم غالب در شعلههای غیر هیدروکربنی می باشد. دما، غلظت رادیکالهایی مانند اکسیژن و نوسانات توربولانس مهمترین عوامل تاثیر گذار بر این مکانیزم می باشد. نتایج این تحقیق نشان میدهند که مدل پیشنهادی زادوویج به علت پیش بینی مناسب رادیکال O که در نرخ تشکیل _xNO در دماهای بالا تاثیر زیادی دارد از مدلهای دیگر بهتر است. همچنین مدل راک در ای تراک در ایتر تریادی دارد از مدل همیترین عوامل تاثیر از تقریب قابل قبولی برخوردار است.

واژههای کلیدی: اکسید نیتروژن - مکانیزم گرمایی - زمان اقامت - شعله دیفیوژن مغشوش

1– مقدمه

آلایندههای محیط زیست از جمله معضلات بزرگ ناشی از توسعه صنعتی هستند. از جمله فرآیندهائی که منجر به ایجاد این آلاینده ها میشوند، فرآیند احتراق است. بهینه سازی این فرآیند نه تنها بایستی مسئله راندمان احتراق و کاهش مصرف سوخت را دربر داشته باشد، بلکه حفظ محیط زیست و کاهش آلایندهها باید مورد توجه خاصی قرار گیرد. بدین منظور، جهت صرفهجویی در مصرف انرژی و حصول راندمان بالا و از همه مهمتر کنترل و کاهش آلودگی ناشی از آن، تحقیقات گسترده در این زمینه انجام شده است. از جمله آلایندههای محیط زیست، اکسیدهای نیتروژن (NO_x) هستند که طی فرآیندهای احتراقی با واکنش شیمیایی نیتروژن هوای احتراقی و یا نیتروژن موجود در سوخت تشکیل میشوند. گونههای آلاینده تشکیل شده به طور اهم وابسته به دما و نسبت سوخت به هوا در ناحیه احتراق می باشند. به مجموعه ON و NO در این فرایندها NO گفته میشود. تقریبا 90 تا 25 درصد NO طی این فرایندها ON می باشد و مابقی NO در این فراینده به توجه به نوع

> 1- استادیار دانشکده مکانیک 2- کارشناسی ارشد تبدیل انرژی



شعله و سایر عوامل وابسته سهم هر یک از این گونهها در یک فرآیند احتراقی میتواند تغییر کند[1]. لذا با توجه به اهمیت NO، شبیهسازی و بررسی آن بسیار مورد توجه قرار گرفته است.

فرآیند های مربوط به تشکیل و کاهش NOx بسیار پیچیده هستند و مدلسازی جامع آنها در سیستمهای احتراقی نیازمند شبیهسازی دینامیک سیال مغشوش و سینتیکهای شیمیایی میباشد. صدها واکنش اولیه جهت توصیف کامل واکنش NO_x در سیستمهای احتراقی آرام مورد نیاز میباشد. کوپل میدان جریان مغشوش با تعداد زیادی واکنش در عمل شدنی نیست، در نتیجه از واکنشهای کلی یا مکانیزمهای کاهش یافته در کدهای احتراقی جامع استفاده می شود.

در چند دههٔ اخیر محققین زیادی سعی در شناخت دقیق وکامل انواع مکانیزم های مؤثر بر تشکیل ونابودی NO در هریک از آنها در انواع فرآیند های احتراقی داشتهاند. مونیر و کاروالهو⁽ [1] در سال 1998 به مطالعه تشکیل و نابودی NO در شعلههای مغشوش دیفیوژن پروپان به کمک مدل سازی عددی و نتایج آزمایشگاهی پرداختند. برای محاسبات NO نیز از سه معلههای مغشوش دیفیوژن پروپان به کمک مدل سازی عددی و نتایج آزمایشگاهی پرداختند. برای محاسبات NO نیز از سه معد واکنشی استفاده شد مهم ترین نتایجی آنها غالب بودن مکانیزم انگیخته در تشکیل NO و نقش مهم واکنشهای نابودی NO از طریق سوخت در هیدروکربنهای مرتبه بالا بود. بوومن و میلر⁷[2] یک مکانیزم کامل متشکل از 234 واکنش برای معنیتک شینتیک شیمیایی نیتروژن در نظر گرفتهاند و سپس با استفاده از تکنیکهای آنالیز حساسیتها به توصیف مسیرهای اصلیتشکیل NO پرداختهاند. بر این اساس به طور عمده سه مکانیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می باشند: مکانیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می باشند: مکانیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می باشند: مکانیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می با سنداند و سپس با استفاده از تکنیکهای آنالیز حساسیتها به توصیف مسیرهای می باشند: مکانیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می باشند: مکانیزم گرمایی، مکانیزم انگیخته و مکانیزم ایلیزم برای تولید _xNO در احتراق سوختهای گازی مطرح می باشد: مکانیزم برای تولیز ماز دوویچ⁷ در سال 1946 مطرح شد. دما عامل مهم در این مکانیزم شاخته شده است. این مکانیزم برای اولین بار توسط زلدوویچ⁷ در سال 1946 مطرح شد. دما عامل مهم در این مکانیزم می باشد و تقریباً در اثر برفرزی برخورد بین مولکولهای سوختهای می می بوجود می آید و بابراین در احتراق سوختهای مکانیزم در از برخورد بین مولکولهای نیتروژن و رادیکالهای هیدروکربنی بوجود می آید و بابراین در احتراق سوختهای میدروکربنی مطرح می باشد. و باز ایل احراق سوختهای می می بوجود در ای برخورد این مطرح می باشد. و اینش مطرح می باشد و از اهمیت کمتری نسبت به دو مکانیزم قبلی برخوردار می باشد. و اینش می مولخو می باز مطرح می باشد و از همی می شیمیایی نسبت به دو مکانیزم تحت شرایظ احتراقی می مول و نیز مر بخورد می و می مربوط به این فرایندهای بالا مطرح می باشد و می میم شی

استفادهاز شعلههای جت ساده جهت بررسی سهم هریک از مکانیزمهای فوق در انتشار NO در چند دههٔ اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. شعله جت ساده مونواکسید کربن یکی از شعلههایی میباشد که به وفور توسط محققین مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. شعله جت ساده مونواکسید کربن یکی از شعلههایی میباشد که به وفور توسط محققین مختلف نوع شعله ممار گرفته است. یکی از مزایای این نوع شعله عدم تولید NO- انگیخته در آن است. در واقع مکانیزم غالب در این نوع شعله مدم تولید NO- انگیخته در آن است. در واقع مکانیزم غالب در این نوع شعله مکانیزم است. یکی از مزایای این نوع شعله عدم تولید NO- انگیخته در آن است. در واقع مکانیزم غالب در این نوع شعله مکانیزم NO- انگیخته در آن است. در واقع مکانیزم غالب در این نوع شعله مکانیزم NO- گرمایی میباشد (البته مکانیزم PN- واسطه نیز در NO ناشی از این شعله نیز اندکی تاثیر دارد.) و معله مکانیزم NO گرمایی میباشد (البته مکانیزم PN- واسطه نیز در NO ناشی از این شعله نیز اندکی تاثیر دارد.) و معن شعله مکانیزم NO گرمایی میباشد (البته مکانیزم PN- واسطه نیز در NO ناشی از این شعله نیز اندکی تاثیر دارد.) و معله محان براین امکان بررسی عوامل مختلف مؤثر بر این مکانیزم وجود دارد. محققین مختلف با انجام آزمایشات و محاسبات مختلف ضمن بررسی عوامل مختلف، جهت جلوگیری از انجام محاسبات مکانیزمهای تفضیلی به ارائه روابطی کلی در این زمینه فرمن برد این زمینه این رابطه بعدها محن بررسی عوامل مختلف، جهت جلوگیری از انجام محاسبات مکانیزمهای تفضیلی به ارائه داد. این رابطه بعدها پرداختهاند. زلدوویچ برای احتراق پیش مخلوط و تحت شرایط تعادلی نخستین رابطه را در این زمینه ارائه داد. این رابطه بعدها تکمیل گردید و مهمترین رابطهای است که در حال حاضر جهت تخمین NO گرمایی وجود دارد. تاثیر عوامل مختلف بر این مین ایم گرمایی وجود دارد. میش در این زمینه می مین را مین زمینه بر این مین ایم ایم را در این زمینه میاشد.

دریک⁶ و پیتز⁵ [3] به بررسی اثر غلظتهای فوق تعادلی بر تشکیل NO در شعله آرام غیر پیش مخلوط مونواکسیدکربن پرداختهاند. نتایج حاکی از آن است که وجود این رادیکالها در محدوده وسیعی از کسر مخلوط باعث افزایش 2/5 برابری NO در فشار atm 1 و افزایش 1/4 برابری در فشار 10atm می گردد. همچنین ماکزیمم میزان NO در نواحی نزدیک به نسبت

- 3 Zeldovich
- 4 Fenimore
- 5 Drake.
- 6 Pitz

¹ Munier and Carvalho

² Miller and Bowman



سوخت به هوای استوکیومتریک و ماکزیمم دما اتفاق میافتد. دریک و بلینت⁽ [4]با استفاده از مکانیزمهای تفضیلی و نتایج آزمایشگاهی اثر کشیدگی را در شعله آرام مونواکسیدکربن مورد بررسی قرار دادهاند. نتایج آنها نشان میدهند که مکانیزم گرمایی در شعلههای با کشیدگی پایین مکانیزم غالب می باشد و با بالارفتن میزان کشیدگی شعله، به علت کاهش دما و زمان آسایش مکانیزم N₂O-واسطهای غالب می گردد، ولی به هر حال سهم این مکانیزم بسیار اندک و بیشتر از 10ppm نمی باشد. دریک در تحقیقی دیگر [5] نیز با بررسی اهمیت مکانیزمهای تشکیل NO در شعلههای آرام دیفیوژن متان و مونواکسید کربن نشان می دهد که در شعله مونواکسید کربن ماکزیمم میزانNO و ماکزیمم نرخ خالص تشکیل NO در محدوده وسیعی از کسر مخلوط ماکزیمم دما اتفاق میافتند. نتایج تحقیق وی نشان می دهد که تشکیل خالص NO در محدوده وسیعی از کسر مخلوط NO در محدوده دمایی NO در محدوده دمایی از NO در شعلههای آرام دیفیوژن متان و مونواکسید کربن ماکزیمم دما اتفاق می فتند. نتایج تحقیق وی نشان می دهد که تشکیل خالص NO در محدوده وسیعی از کسر مخلوط به جز در شعلههای با میزان کشیدگی بسیار پایین مهم نمی این ای 1800(منطقه غنی) مهم می باشد. NO

هدف از این تحقیق تخمین NO گرمایی در شعلههای مغشوش دیفیوژن مونواکسیدکربن و همچنین بررسی اثر غلظتهای فوق تعادلی و دما بر تشکیل و انتشار NO میباشد.

2– مدلسازی ریاضی

برای تخمین میزان NO ناشی از فرآیندهای احتراقی بایستی شناخت کافی نسبت به میدان جریان احتراقی داشته باشیم. از آنجا که سینتیکهای شیمیایی NO بسیار کند میباشند و غلظت این نمونه نسبت به سایر نمونهها در فضای محفظه احتراقی بسیار پایین میباشد، حل معادله انتقال آن به صورت پس پردازش و مستقل از میدان اصلی جریان و معادلات احتراقی صورت می گیرد، لکن واضح است که حل صحیح میدان جریان و تخمین صحیح گونههای اصلی احتراقی چقدر بر دقت پیش بینی میزان NO منتشره بسیار مؤثر است.

3- حل ميدان اصلي جريان و معادلات احتراقي

برای مشخص کردن میدان جریان و به دست آوردن سرعتها، فشار، دما، دانسیته و نمونههای جرمی، نیاز به حل معادلات حاکم است. این معادلات در جریان مغشوش شامل بقاء جرم، مومنتم، انرژی، انرژی توربولانس و استهلاک آن، کسر مخلوط و واریانس کسر مخلوط است. شرایط مرزی نیز بر حسب نوع مساله بایستی به کار رود.

در جریان دائم، کلیه معادلات مذکور را میتوان به فرم عمومی (1) نوشت، که این فرم در سیستم استوانهای سه بعدی نوشته شده است و با قرار دادن r=1 و $(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial y})$ در این معادله میتوان آن را در سیستم کارتزین داشت.

 $\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho \partial \phi \partial \phi + \frac{1}{4}\frac{\partial}{\partial \theta}(\rho \partial \phi \partial \phi + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \partial \phi - \frac{\partial}{$

که در آن ϕ نماینگر متغیر اصلی در معادلات انتقال میباشد. Γ_{ϕ} ضریب دیفیوژن موثر و S_{ϕ} ترم منبع میباشد. جدول(1) خلاصهای از متغیرهای و ضرایب دیفیوژن و ترم منبع را در تحقیق حاضر مورد استفاده قرار گرفتهاند، نشان میدهد.



جدول (1): معادلات حل شده در شبیه سازی عددی

| ترم منبع (S_{ϕ}) ترم منبع | ϕ | معادله |
|---|--------|------------------------|
| 0 | 0 | پيوستگى |
| $\left[-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial v}{\partial z}\right) - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial z}\left[\mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial(rv)}{\partial r}\right)\right]$ | w | مومنتم محورى |
| $-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rv)}{\partial r} \right) \right]$ | и | مومنتم شعاعى |
| ${}^*\!G_k- ho.m{arepsilon}$ | k | انرژی جنبشی توربولانس |
| $C_{1\varepsilon} \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot G_k - C_{2\varepsilon} \cdot \rho \cdot \frac{\varepsilon^2}{k}$ | ε | نرخ استهلاک توربولانس |
| 0 | f | کسر مخلوط |
| $C_{g} \cdot \mu_{t} \cdot (\frac{\partial f}{\partial x_{i}})^{2} - C_{d} \cdot \rho \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot g$ | g | واريانس كسر مخلوط |
| ۱& ۲ (نرخ تولید یا نابودی نمونه جرمی) | Y_i | کسر جرمی گونهها |
| 0 (بدون اثر تشعشع) | h | آنتالپی |
| $1\left(\frac{\partial u_i}{\partial u_i}, \frac{\partial u_i}{\partial u_i}\right) = a_i k^2$ | | ضرایب مربوط به معادلات |
| * $G_k = 2.\mu_l S_{ij} S_{ij}$ $S_{ij} = 2\left(\frac{1}{\alpha x_j} + \frac{1}{\alpha x_i}\right)$ $\mu_l = C_{\mu} \mathcal{B}_{\mathcal{B}}$ $C_{\mu} = 0.09$ | | ترانسپورت جريان مغشوش |
| ** $C_{1\mathcal{E}} = 1.44$ $C_{2\mathcal{E}} = 1.92$ | | |
| $\Gamma_{\phi,eff} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \qquad \sigma_t = \Pr_t or \sigma_t = Sc_t$ | | |

4- مدلسازي اکسید نیتروژن

برای تخمین NO نیاز به حل معادله انتقال کسر جرمی آن (Y_{NO}) میباشد. همانگونه که قبلاً اشاره شد، این معادله به صورت پس پردازش و پس از تعیین میدان اصلی جریان و گونههای اصلی، حل میشود. فرم معادله همان معادله (1) میباشد. گام مهم در این مرحله تخمین صحیح جمله چشمه/چاه میباشد. به همین دلیل وجود شناخت کافی نسبت به مکانیزمهای تشکیل و نابودی و ارائه مدل ریاضی مناسب مربوطه جهت تخمین این ترم بسیار مهم میباشد.

با توجه به اینکه سوخت مورد مطالعه مونواکسید کربن میباشد، مکانیزم گرمایی تنها مکانیزم مطرح در این مدل میباشد. در این مکانیزم NO از اکسیداسیون مولکولهای نیتروژن موجود در اتمسفر (N2) در دماهای نسبتاً بالا و در محیطهای سوخت فقیر تشکیل میشود. این مکانیزم توسط سه واکنش اساسی ذیل تحت عنوان مکانیزم «زلدوویچ توسعه یافته» بیان میگردد[2]:

| $O + N_2 \xleftarrow{k_{\pm 1}} NO + N$ | (2) |
|---|-----|
| $N + O_2 \xleftarrow{k_{\pm 2}} NO + O$ | (3) |
| $N + OH \xleftarrow{k_{\pm 3}} NO + H$ | (4) |

که k_{\pm} ثوابت رو به جلو و رو به عقب واکنش است.

تشکیل اکسید نیتروژن از طریق مولکول نیتروژن N₂ نیازمند شکسته شدن پیوند قوی بین اتم های نیتروژن می باشد و همین امر موجب وابستگی شدید این مکانیزم به درجه حرارت می گردد. واکنش (2) دارای انرژی اکتیواسیون بالایی می باشد و عامل محدود کننده نرخ واکنش در مکانیزم زلدوویچ می باشد. واکنش سوم نیز تحت شرایط سوخت غنی و نزدیک نواحی استوکیومتریک مهم می باشد. با توجه به اینکه انرژی اکتیواسیون برای اکسیداسیون اتمهای N کوچک میباشد، هنگامی که اکسیژن به اندازه کافی وجود دارد (مانند مناطق سوخت-فقیر) نرخ مصرف این اتمها با نرخ تولیدشان برابر شده و بنابراین میتوان از فرض حالت-پایدار در معادلات مربوطه استفاده کرد. بنابراین نرخ تشکیل NO گرمایی را میتوان چنین نوشت[6]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{+1}[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{-1}k_{-2}[NO]^2}{k_{+1}[N_2]k_{+2}[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{-1}[NO]}{k_{+2}[O_2] + k_{+3}[OH]}\right)}$$
(5)

برای محاسبه رابطه (5) نیاز به تعیین غلظت رادیکالهای O و OH میباشد. با توجه به اینکه سینتیکهای شیمیایی تشکیل NO کند میباشد و پس از تشکیل نمونههای اصلی احتراقی صورت میگیرد، میتوان از فرض تعادل برای تعیین غلظت رادیکال O استفاده کرد. بر این اساس از رابطه ذیل جهت محاسبه غلظت O استفاده میگردد[6]:

$$[O] = k_p [O_2]^{0.5} = 3.97 \times 10^5 T^{-0.5} [O_2]^{0.5} \exp(-31090/T)$$
(6)

استفاده از غلظت های تعادلی باعث پیش بینی پایین این رادیکال ها، به خصوص در نواحی داخل شعله و دما بالا می گردد، که این نیز به نوبه خود باعث ایجاد خطای قابل توجه در پیش بینی NO می گردد. برخی از محققین به بررسی تاثیر غلظتهای فوق تعادلی رادیکال های O و OH پرداختهاند. به همین منظور با کمک یک سری ساده سازی از تقریب های تعادل جزئی جهت پیش بینی غلظت این رادیکال ها استفاده شده است [7]:

$$[O] = 36.64 T^{0.5} [O_2]^{0.5} \times \exp(-27123/T)$$
⁽⁷⁾

$$[OH] = 2.129 \times 10^2 T^{-0.57} [O]^{1/2} [H_2 O]^{1/2} \times \exp(-4595/T)$$
⁽⁸⁾

به جز رابطه اساسی (5) جهت محاسبه NO گرمایی محققین دیگری نیز با انجام برخی ساده سازیها و در نظر گرفتن برخی ملاحظات به ارائه روابطی جهت تشکیل NO گرمایی پرداختهاند، که در این قسمت به برخی از آنها اشاره میکنیم: بوومن (1975) رابطه ساده شده ذیل را پیشنهاد نمود [9]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 6 \times 10^{16} T^{-0.5} \exp\left(\frac{-69090}{T}\right) [O_2]^{0.5} [N_2]$$
(9)

e under (9)

e un

$$\frac{d[NO]}{dt} = 10^{15.6} T^{-1} \exp\left(\frac{-68400}{T}\right) [O_2]^{0.5} [N_2] P^{0.5}$$
(10)

راكِ أنيز با اقتباس از مكانيزم زلدوويچ، رابطه ذيل را ارائه نموده است[11]:

1Sawyer 2 Rǿkke

Røkke

دومین کنفرانس احتراق ایران بهمن ماه 1386 - مشهد- دانشگاه آزاد اسلامی مشهد



$$\frac{d[NO]}{dt} = 9 \times 10^{12} T^{0.3} \left(\frac{-38440}{T}\right) [N_2] [O_2]$$
⁽¹¹⁾

در دو فرمول بوومن و راک غلظت گونهها بر حسب gmol/cm³.s و در فرمول ساویر غلظت گونهها بر حسب mole fraction/s می باشند.همچنین دما در هر سه فرمول بر حسب درجه کلوین و فشار نیز بر حسب اتمسفر است.

پس از محاسبه ترم منبع با استفاده از روابط ذکر شده جهت در نظر گرفتن اثر اغتشاشات از تابع چگالی احتمال استفاده شده است، که به صورت پیش فرض تابع توزیع بتا مورد استفاده قرار گرفته است :

$$\mathcal{B}_{NO}^{\prime} = \int_{0}^{1} M_{NO} \times \frac{d[NO]}{dt} \cdot \beta(f) df$$
⁽¹²⁾

در رابطه فوق eta(f) تابع چگالی احتمال است که به صورت زیر تعریف می شود[8]:

$$\beta(f) = \frac{f^{a-1}(1-f)^{b-1}}{\int_0^1 f^{a-1}(1-f)^{b-1}}$$
(13)

که a و b پارامترهایی هستند که از مقدار متوسط کسر مخلوط و واریانس کسر مخلوط چنین محاسبه میشوند[9]:

$$a = \left[\frac{\frac{g}{f_0} - \frac{g}{f_0}}{\frac{g}{f_0} - 1}\right] \frac{g_0}{f_0}$$
(14)

$$b = \left[\frac{f'(1-f')}{f'v^2} - 1\right](1-f')$$
(15)

$CO-H_2-N_2$ -5 شبیهسازی شعله-5

مونواکسید کربن در فرآیند اکسیداسیون انواع هیدروکربنها نقش مهمی ایفا میکند. بررسی ها نشان میدهد که حتی در احتراق سادهترین هیدروکربنها، مانند متان تعداد زیادی از گونهها حضور دارند و واکنشهای زیادی صورت میگیرند. لکن برای سادگی، در بسیاری از مدلهای احتراق از مدل دو مرحلهای استفاده میشود، که مرحله اول شامل شکسته شدن سوخت به مونواکسید کربن و مرحله دوم شامل اکسیداسیون نهایی مونواکسید کربن به دیاکسیدکربن می باشد.

در این تحقیق شعله جت ساده مغشوش مونواکسید کربن مورد بررسی قرار گرفتهاند. مقادیر آزمایشگاهی دما وکمیتهای اسکالر این شعلهها مربوط به آزمایشگاههای بینالمللی سندیا^۱ و مقادیر آزمایشگاهی سرعت مربوط به ETH زوریخ میباشندکه توسط بارلو^۲ و همکارانش تحت چند وضعیت مختلف اندازه گیری و جمع آوری شدهاند[10].

ترکیب سوخت و هوا برای شعله مونواکسید کربن بر مبنای درصد حجمی مطابق جدول (2) میباشد. مشخصات عمومی شعله نیز در جدول (3) ارائه شده است.

1 Sandia

2 R.S. Barlow



| | CO(%) | H2(%) | N ₂ (%) | O2(%) |
|------|-------|-------|--------------------|-------|
| هوا | | | 79 | 21 |
| سوخت | 40 | 30 | 30 | |

جدول (2): ترکیبات سوخت و هوا بر مبنای درصد حجمی [10]

جدول (3) مشخصات جریان سوخت و هوا [10]

| شعله CO | |
|---------|--------------------|
| 4.58mm | قطر داخلی نازل(d) |
| 6.34mm | قطر خارجی نازل(do) |
| 76±1.5 | سرعت جت سوخت(m/s) |
| 0.7 | سر عت هوا(m/s) |
| 292±2 | دمای سوخت(K) |
| 290±2 | دمای هوا(K) |
| 16700 | عدد رينولدز |

آزمایشات در شرایط آزاد و بدون هیچگونه حصاری صورت گرفتهاند. قطر نازلها متفاوت هستند ولی اعداد رینولدز بر مبنای شرایط خروجی جت سرد میباشد. ضخامت دیواره نازل باعث ایجاد یک منطقه چرخشی کوچک گردیده که در نتیجه باعث پایداری شعلهها بدون استفاده از پیلوت می گردد. شعلهها کاملاً متصل به نازل بوده و هیچ گونه اثر خاموشی و خفگی در آنها وجود ندارد و بنابراین هیچگونه گواهی مبنی بر ورود اکسیژن به جت سوخت از طریق نواحی خفگی نزدیک به شعله وجود ندارد.

در این تحقیق گسسته سازی معادلات فوق با استفاده از روش حجم محدود صورت گرفتهاست. حل در دستگاه مختصات استوانهای به صورت دو بعدی و با شرط تقارن محوری انجام گرفته است. شکل(1) شماتیک محفظه احتراق مدل را نشان می دهد. محفظه به صورت استوانه می باشد و ابعاد آن به گونهای انتخاب شده، که تاثیرات دیواره بر روی شعله حذف گردد.



شکل (1). شماتیک محفظه احتراق مدل

دامنه حل برای شعله نصف محفظه احتراق مدل به ابعاد (2×0/1) متر و ابعاد شبکه محاسباتی برای شعله مذکور 90×90 میباشد. لازم به توضیح است که شبکه برای شعله غیر یکنواخت بوده و تعداد گرههای شبکه محاسباتی پس از چند سعی و خطا و اطمینان از عدم وابستگی جوابها به شبکه به دست آمده است.

جهت مدلسازی احتراق با استفاده از تقریب تعادل شیمیایی ٔ از کد تجاری فلوئنت ٔ [12] با در نظر گرفتن 12 نمونه جرمی (سوخت، اکسیژن، نیتروژن و انواع رادیکالهای C_xHy) استفاده شده است.

¹ Chemical Equilibrium



برای توربولانس در معادلات جریان اصلی از مدل k-ɛ استفاده شده و الگوریتم بکار رفته برای حل SIMPLE میباشد. جهت اعمال توربولانس در معادله گونههای جرمی از تابع دانسیته احتمال بتا (β-Pdf) استفاده می شود[8]،

شرایط به کار رفته مرزی عبارتند از: شرط سرعت معلوم در ورودی، شرط جریان خروجی(outflow) در خروجی، شرط تقارن در روی محور تقارن و شرط عدم لغزش روی دیوارههای صلب.

روش حل بدین صورت است که ابتدا با استفاده از کد احتراقی فلوئنت حل جریان احتراقی انجام شده است و سپس تولید و انتشار آلایندههای NO_x توسط کد پس پردازنده تدوین شده شبیهسازی شده است.

6- بحث و بررسی

شکلهای(2)، (3) و (5) نمودارهای مقایسهای مقادیر تجربی و محاسباتی کسرمخلوط، واریانس کسر مخلوط و دما را در امتداد محور مرکزی برای شعله مونواکسید کربن را نشان میدهند. همانطور که در شکل(2) ملاحظه میشود، مقادیر محاسباتی کسر مخلوط در سرتاسر نواحی شعله از دقت قابل قبولی در برابر مقادیر تجربی برخوردار میباشد. همچنین شکل(3) نشان می دهد که واریانس کسر مخلوط به جز در نواحی نزدیک به نازل ورودی و ابتدای جت در سایر نواحی به خوبی پیشبینی شده است. در نواحی نزدیک به جت سوخت که سرعت بالا میباشد، میزان واریانس کسر مخلوط همواره بالاتر از مقادیر تجربی میباشد. اختلاف موجود در مقادیر واریانس کسر مخلوط، خصوصاً در نواحی نزدیک به جت عمدتاً ناشی از مدل توربولانس مورد استفاده در این تحقیق میباشد. اشکال عمده مدل k-٤ در شعلههای محوری متقارن دوبعدی، عدم تخمین صحیح نرخ دیفیوژن روی محور تقارن است[13]. این مورد در شعلههای جت تخت وجود ندارد، زیرا ضرائب مدل k-٤ با استفاده از آزمایش روی جتهای تخت استخراج شدهاند. نکته دیگری که باعث اختلاف بین نتایج آزمایش و نتایج شبیهسازی است، اثر تداخل ٌ در نزدیکی لبه جت است که توسط مدلهای متداول توربولانس به خصوص مدلهای دو معادلهای قابل تحلیل نیست و همین نکته باعث میشود در نزدیکی لبههای جت و بر حسب شدت تداخل، جوابها نزدیک یا دور از جوابهای آزمایش شود. این پدیده توسط کوزنتسوو و سابلنیکو^۳ شرح داده شده است [14].

در شبیه سازی دقیق جریان های احتراقی، مدل احتراقی نقش اساسی دارد زیرا علاوه بر تعیین مقدار گونه ها و محصولات احتراق، نرخ آزاد شدن انرژی حاصل از ترکیب سوخت و اکسید کننده را نیز تعیین میکند. در تحقیق حاضر، فرآیند احتراق شعله ها با استفاده از مدل تقریب تعادل شیمیایی انجام شده است. در این مدل اثر نمونههای جرمی میانی نظیر OH،CO، نیز در تعیین کمیتهای ترموشیمیایی دخالت دارد. بنابراین همانطر که در شکلهای (4) تا (9) ملاحظه می شود دما و گونههای جرمی مختلف به علت قابلیت خوب این مدل به خوبی تخمین زده شده است.

با مقایسه پروفیلهای کسر مخلوط و دما در کلیه شعلهها دیده می شود که در صورتی که کاهش و یا افزایش کسر مخلوط به سمت کسر مخلوط استوکیومتریک باشد دما افزایش مییابد و در غیر این صورت دما کاهش پیدا میکند. این موضوع از پروفیلهای محوری کاملاً مشهود میباشد. این نکته به این معنی است، که حداکثر در دما در جائی اتفاق میافتد که كسر مخلوط استوكيومتريك اتفاق بيفتد.

پس از بررسی نتایج میدان احتراقی می توانیم به بررسی غلظتهای NO بپردازیم. قبل از آنکه وارد این بحث شویم، لازم به توضيح است كه در اين شعلهها با توجه به عدم وجود مناطق بسيار غني سوخت، تاثير راديكال OH بسيار ناچيز ميباشد، لذا می توان از آن صرفنظر کرد. همانطور که در شکلهای (2) و (5) مشاهده می شود، ماکزیمم دمای محاسباتی و کسر مخلوط استوکیومتریک در موقعیتهای محوری مشابهی اتفاق میافتند. بنابراین انتظار این است که با توجه به وابستگی شدید مکانیزم گرمایی به دما، ماکزیمم نرخهای تشکیل NO در موقعیتهایی که ماکزیمم دما قرار دارد، اتفاق بیفتد. دریک[15] در شعله

3 Kuznetsov & Sabelnikov

¹ Fluent Code

² Intermittency

Chemical Equilibrium model



آرام غیر پیشمخلوط مونواکسیدکربن با استفاده از نتایج تجربی و محاسباتی نشان میدهد که کسر مخلوط استوکیومتریک، ماکزیمم دما و همچنین ماکزیمم غلظت NO در موقعیتهای یکسانی رخ میدهند، لکن همانگونه که شکلهای (12) و (15) نشان میدهند، به نظر میرسد که این امر در شعلههای مغشوش متفاوت میباشد. در این حالت ماکزیمم نرخ تشکیل در این شعله اندکی دورتر نسبت به محل ماکزیمم دما (35=x/x) در موقعیت محوری (36=60) اتفاق افتاده است. به نظر میرسد این امر به دلیل سرعت زیاد جت در این شعله میباشد. البته این موضوع میتواند متاثر از میزان رادیکال O نیز باشد، زیرا همانطور که بیان شد، غلظت این رادیکالها بیش از آن که وابسته به دما باشد نسبت به زمان اقامت از حساسیت بیشتری برخوردار میباشد. لکن همان گونه که ملاحظه میشود ماکزیمم غلظت NO به دلیل اثرات اغتشاش جریان و نوسانات کسر مخلوط در موقعیتهای شعاعی و محوری دورتری نسیت به محل ماکزیمم دما اتفاق افتاده است. به نظر میرسد که در این شعلهها انتقال توربولانس به هنگام پیشروی جریان به سمت پاییندست به سمت بیرون شعله میباشد و همین امر باعث

مقایسه بین پروفیلهای کسر جرمی NO به دست آمده از مدلهای زلدوویچ، راک، بوومن و ساویر در شکلهای (10)، (11) و (12)، در مقاطع مختلف برای شعله CO نشان میدهند که مدل Zeldovich، مدل بهتری نسبت به سایر مدلها میباشد. همچنین مدل Rokke تقریباً نزدیک به مدل Zeldovich محاسبه شده به وسیله غلظتهای تعادلی O میباشد. مدلهای بوومن و ساویر نیز بسیار نزدیک به هم میباشند و میزان NO را بسیار پایین پیش بینی می کند.

NO بررسی منحنیهای غلظتهای NO نشان می دهد که استفاده از تقریب تعادلی جزئی O برای محاسبه نرخ تشکیل NO در رابطه زلدوویچ در مقایسه با دو روش تقریب تعادلی O و حل همزمان معادله انتقال گونه جرمی اکسیژن بسیار مناسب تر می باشد، لکن با توجه به پیش بینی پایین میزان NO در ناحیه داخل شعله به نظر می رسد این رابطه در تخمین واقعی میزان O خصوصاً در ناحیه داخل شعله هنوز دچار نقصان می باشد. ولی در فواصل شعاعی دورتر در هر مقطع، استفاده از غلظتهای تعادلی جزئی O با دقت مطلوبی میزان فلظت NO را تخمین خواهد زد. پس به طور کلی استفاده از غلظتهای تعادلی O،

مقایسه بین پروفیلهای محوری و شعاعی غلظت NO در شکل (10) الی (15) برای شعله CO در هر مقطع، در دو حالت با استفاده از انتگرال PDF و بدون استفاده از آن نشان میدهد که استفاده از انتگرال PDF موجب افزایش اثر نرخ تشکیل بر محدوده وسیعتری می شود. این مورد با کاهش ماکزیمم مطلق غلظت NO در راستای محوری همراه است ولی در مقاطع عرضی موجب افزایش ماکزیمم غلظت نسبی NO خواهد شد. به طور کلی استفاده از انتگرال PDF جهت اعمال اثرات اغتشاش جربان باعث نزدیک ترشدن جوابها به مقادیر آزمایشگاهی و افزایش اثر نرخ تشکیل بر محدوده وسیعتری می شود. این نتیجه با نتایج کرافت و فی [16] که در تحقیق خود اثر شدت اختلاط را بر روی میزان NO تولیدی بررسی کرده بودند مطابقت دارد.

مقایسه بین پروفیلهای شعاعی کسر جرمی NO در شکلهای (10) تا (15) برای شعله مونواکسید کربن در دو حالت با استفاده از متد PDF و بدون استفاده از آن، نشان می دهند که در هر مقطع استفاده از این متد ضمن افزایش غلظت NO و بهبود شگرف نتایج موجب تغییر موقعیت ماکزیمم غلظت به سمت بیرون شعله یعنی در فواصل شعاعی دورتر از محور مرکزی (خصوصاً در نواحی داخلی شعله) می شود. البته همانطور که ملاحظه می شود در حالتی که از متد PDF استفاده نمی شود محل ماکزیمم غلظت در هر مقطع تقریباً منطبق با نتایج آزمایشگاهی می باشد. این مقایسه در پروفیل های محوری نیز حاکی از جابجایی محل وقوع ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی تر می باشد. این مقایسه در پروفیل های محوری نیز حاکی از جابجایی محل وقوع ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی تر می باشد، لکن در این حالت ماکزیمم غلظت NO محاسبه شده به وسیله PDF به ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی تر می باشد، لکن در این مالت ماکزیمم غلظت NO بابجایی محل وقوع ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی تر می باشد، نمان در این حالت ماکزیمم فلطت NO محاسبه شده به وسیله PDF به ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی تر می باشد، این در این حالت ماکزیمم این نسبت به حالتی که از انتگرال PDF استفاده نشده است کاهش پیدا کرده است به نظر می رسد در این شعلهها انتقال توربولانس به سمت بیرون شعله می باشد، به همین دلیل استفاده از مدل اختلاط PDF با توجه به وابستگی آن به واریانس کسر مخلوط موجب می شود ماکزیمم غلظت NO به سمت نواحی بیرونی انتقال یا بد.



مقایسه منحنیهای غلظتهای NO در مقاطع نزدیک به جت (x/d=30) و دور از آن (x/d=60) نشان دهنده تاثیرات زمان اقامت بر میزان رادیکال O و در نتیجه میزان تشکیل NO میباشد. بالا بودن سرعت جت در شعله CO موجب کاهش زمان اقامت در این شعله میشود. این امر باعث کاهش غلظت O در ناحیه نزدیک به جت و افزایش غلظتهای O در ناحیه پس شعله شده و به همین دلیل استفاده از رابطه تعادلی جزئی در این شعله منجر به پیش بینی مناسب تر NO در ناحیه دور از جت خواهد شد.

NO به طور کلی بررسی نمودارها کسر جرمی NO در نواحی داخل شعله و نزدیک به جت نشان میدهند که میزان NO دراین نواحی برای هر دو شعله پایین پیش بینی شده است. به غیر از خطاهایی که ناشی از حل احتراقی می باشند، دو عامل می توانند جهت توجیه این تخمین پایین مطرح شوند. اول این که غلظت رادیکال های O در این منطقه به درستی پیش بینی نشده و استفاده از رابطه تعادل جزئی از اعتبار لازم در این منطقه برخوردار نمی باشد و عامل دوم صرفنظر کردن از مکانیزم می نشده و استفاده از رابطه ای می این می می می می می توانند جهت توجیه این تخمین پایین مطرح شوند. اول این که غلظت رادیکال های O در این منطقه به درستی پیش بینی نشده و استفاده از رابطه تعادل جزئی از اعتبار لازم در این منطقه برخوردار نمی باشد و عامل دوم صرفنظر کردن از مکانیزم NO می می این می باشد. هر چند که سهم این مکانیزم بسیار اندک است ولی به هر حال این مکانیزم در نواحی اولیه جت که دم می باشد، موجب تشکیل NO می شود.

7- نتيجەگىرى

در این تحقیق به بررسی تشکیل و انتشار NO در شعله مغشوش غیر پیش مخلوط مونواکسید کربن پرداخته شد. با توجه به عدم حضور رادیکالهای هیدروکربنی در این شعلهها تنها مکانیزم غالب مکانیزم گرمایی میباشد. مدلهای مختلف پیشنهادی برای تخمین NOx گرمایی در این تحقیق مقایسه گردید. این مکانیزم به شدت وابسته به دما و غلظت رادیکال اکسیژن میباشد. حل معادله انتقال برای کسر جرمی NO به صورت پس پردازنده انجام گرفته و جهت در نظر گرفتن اثر اغتشاشات نیز از مدل PDF پیش فرض شده استفاده شده است. بررسیها بر روی بر روی مدلهای NOX گرمایی نشان میدهد که مدل زلدوویچ به علت پیش بینی مناسب تر رادیکال O، مدل بهتری نسبت به سایر مدلها میباشد. زمان اقامت و تاثیر آنها بر روی رادیکال O تاثیر زیادی بر نرخ تشکیل NO از طریق مکانیزم گرمایی در دماهای بالا دارد که این تاثیر در مدل پیشنهادی زلدوویچ در نظر گرفته شده است. همچنین مدل راک نیز از تقریب قابل قبولی برخوردار است. مدلهای بوومن

8- مراجع

- 1- Meunier, M., Karvalho, M.G., "The formation and destruction of NO in turbulent propane diffusion flames ", *Fue.l*, Vol. 77, pp. 1705-1714, 1998.
- 2- Miller, J.A., and Bowman, C., "Mechanism and modeling of Nitrogen Chemistry in combustion", progress in Energy and combustioScienc., Vol. 15, pp. 287-388, 1989.
- 3- Drake, M.C., and Pitz, R.W., Correa, S.M., SHYY, W., "Superequilibrium and Thermal Nitric Oxide Formation in Turbulent Diffusion Flames", Combustion and Flame, Vol. 83, pp. 185-203, 1991.
- 4- Drake, M.C., and Blint, R.J., "Thermal NOx in stretched laminar opposed flow diffusion flames with CO/H2/N2 fuels", Combust. and Flame, Vol. 76, pp. 151-167, 1989.
- 5- Drake, M.C., and Blint, R.J., "Relative Importanc of Nitric Oxide Formation Mechanisms in Laminar Opposed-flow Diffusion Flames", Combustion and flame, Vol. 83, pp. 185-203, 1991.
- 6- Hill S.C., and Douglas S.L., "Modeling of nitrogen oxides formation and destruction combustion systems", Progress in Energy And Combustion Science., Vol. 26, pp. 417-48, 2000.
- 7- Padmabhushana, R., Subgrid Scale Model Development and Validation for Thermal Nitric Oxide Prediction in Glass Furnaces Department of Mechanical Engineering, University of Utah, PHD Thesis, 2004.
- 8- Richardson, J.M., and Howard, H.C., and Smith, R.W., "The Relation Between Sampeling Tube Measurments and Concenteration Fluctuation in a Turbulent Gas Jet", IV Symposium on Combustion., pp. 814, 1953.

9- شریفی ح. "شبیه سازی جریان های احتراقی مغشوش به روش شبکه های عصبی مصنوعی"، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، پایان نامه کارشناسی ارشد، 1380.

- 10- http://www.ca.sandia.gov/TNF/DataArch/SANDchn.html
- 11- Røkke, N. A., Hustad, J. E., Sønju, O. K., and Williams F.A., Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion., pp. 385–393, 1992.

دومین کنفرانس احتراق ایران بهمن ماه 1386 - مشهد- دانشگاه آزاد اسلامی مشهد



- 12- Fluent softWare. Rev 6.
- 13- Kuznetsov, V.R., Turbulent and Combustion, Hemisphere Pub. Corp, 1990.
- 14- Jones, W.P., "Models for Turbulent Flows with Variables Density and Combustion", Prediction Methods for Turbulent Flow, VKI-Lecture Series, 1979.
- 15- Drake, M.C., Blint, R.J., "Thermal NOx in stretched laminar opposed flow diffusion flames with CO/H2/N2 fuels", *Combust. and Flame*, Vol. 76, pp. 151-167, 1989
- Chen, L.K., Sarofim, A.F., Beer, J.M., "Kinetics of the NO-Carbon reaction at fluidized bed combustor conditions ", Combustion and Flame, pp. 37-52, 1983.





شکل (3). پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی واریانس کسرمخلوط



شکل (5). پروفیل های محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی دما



شکل (7). پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی نیتروژن



شکل (2). پروفیل های محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسرمخلوط



شکل (4). پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسرجرمی اکسیژن



شکل (6). پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی دیاکسید کربن

3E-0





شکل (9). پروفیل های محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی مونواکسید کربن



شکل (8). پروفیل های محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی آب





شکل (10) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسرجرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی در (x/d= 60)

شکل (11) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسرجرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی در (x/d= 30)



شکل (12) پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی



کسرجرمی NO گرمایی با در نظر گرفتن اثرات اغتشاش در

(x/d = 60)



شکل (14) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسرجرمی NO گرمایی با در نظر گرفتن اثرات اغتشاش در (x/d= 30)



شکل (15) پروفیلهای محوری مقادیر تجربی[10] و محاسباتی کسر جرمی NO گرمایی با در نظر گرفتن اثرات اغتشاش