

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

چکیده

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 NO_x 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 $k-\varepsilon$ 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 پس‌پردازش 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 می‌باشد. دما، غلظت رادیکال‌هایی مانند اکسیژن و نوسانات توربولانس مهم‌ترین عوامل تاثیر گذار بر این مکانیزم می‌باشند. نتایج این تحقیق نشان می‌دهند که مدل پیشنهادی زلدوویچ به علت پیش بینی مناسب رادیکال O که در نرخ تشکیل NO_x در دماهای بالا تاثیر زیادی دارد از مدل‌های دیگر بهتر است. همچنین مدل راک نیز 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 فرآیندهایی که منجر به ایجاد این آلاینده‌ها می‌شوند، فرآیند احتراق است. بهینه‌سازی 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 می‌باشند. به مجموعه NO و NO_2 در این فرایندها NO_x گفته می‌شود. تقریباً 90 تا 95 درصد NO_x طی این فرایندها NO می‌باشد و مابقی NO_2 می‌باشد. البته با 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 NOx 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 می‌شود.

در چند دهه اخیر محققین زیادی سعی در شناخت دقیق و کامل انواع مکانیزم های مؤثر بر تشکیل و نابودی NO و سهم هریک از آنها در انواع فرآیند های احتراقی داشته‌اند. مونیر و کاروالهو¹ [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 متد واکنشی استفاده شد مهم‌ترین 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 میلر² [2] یک مکانیزم کامل متشکل از 234 واکنش برای سینتیک شیمیایی نیتروژن در نظر گرفته‌اند و سپس با استفاده از تکنیک‌های آنالیز حساسیت‌ها به توصیف مسیرهای اصلی تشکیل NO پرداخته‌اند. بر این اساس به طور عمده سه مکانیزم برای تولید NOx در احتراق سوخت‌های گازی مطرح می‌باشند: مکانیزم گرمایی، مکانیزم انگیخته و مکانیزم N₂O-واسطه‌ای. مکانیزم گرمایی مهم‌ترین مکانیزمی است که تاکنون شناخته شده است. این مکانیزم برای اولین بار توسط زلدوویچ³ در سال 1946 مطرح شد. دما عامل مهم در این مکانیزم می‌باشد و تقریباً در اکثر فرآیندهای احتراقی مطرح می‌باشد. مکانیزم انگیخته در سال 1971 توسط فنیمور⁴ مطرح گردید. این مکانیزم در اثر برخورد بین مولکول‌های نیتروژن و رادیکال‌های هیدروکربنی بوجود می‌آید و بنابراین در احتراق سوخت‌های هیدروکربنی مطرح می‌باشد. مکانیزم N₂O-واسطه‌ای نیز در سال 1970 مطرح گردید. این مکانیزم تحت شرایط احتراقی خاصی در دمای پایین و فشارهای بالا مطرح می‌باشد و از اهمیت کمتری نسبت به دو مکانیزم قبلی برخوردار می‌باشد. واکنش های مربوط به این فرایندها نسبت به واکنش سایر گونه های مهم شیمیایی نسبتاً کند می‌باشند. بنابراین عبارات نرخ سینتیکی بایستی جهت مدلسازی این فرایندها به کار برده شوند.

استفاده از شعله‌های جت ساده جهت بررسی سهم هریک از مکانیزم‌های فوق در انتشار NO در چند دهه 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. یکی از مزایای این نوع شعله عدم تولید NO-انگیخته در آن است. در واقع مکانیزم غالب در این نوع شعله مکانیزم NO گرمایی می‌باشد (البته مکانیزم N₂O- واسطه نیز در NO ناشی از این شعله نیز اندکی تاثیر دارد.) و بنابراین 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 تفصیلی به ارائه روابط کلی در این زمینه پرداخته‌اند. زلدوویچ برای احتراق پیش‌مخلوط 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 مکانیزم نیز از دیگر موضوعات تحقیقاتی مهم در این زمینه می‌باشد.

دریک⁵ و پیتز⁶ [3] به بررسی اثر غلظت‌های فوق تعادلی بر تشکیل NO در شعله آرام غیر پیش‌مخلوط 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 1 atm و افزایش 1/4 برابری در فشار 10atm می‌گردد. همچنین ماکزیمم میزان NO در نواحی نزدیک به نسبت

1 Munier and Carvalho
2 Miller and Bowman
3 Zeldovich
4 Fenimore
5 Drake.
6 Pitz

سوخت به هوای استوکیومتری و ماکزیمم دما اتفاق می‌افتد. دریک و بلینت¹ [4] با استفاده از مکانیزم‌های تفصیلی 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 می‌باشد و با بالا رفتن میزان کشیدگی شعله، به علت کاهش دما و زمان آسایش مکانیزم N_2O -واسطه‌ای غالب می‌گردد، ولی به هر حال سهم این مکانیزم بسیار اندک و بیشتر از 10ppm نمی‌باشد. دریک در تحقیقی دیگر [5] نیز با بررسی اهمیت مکانیزم‌های تشکیل NO در شعله‌های آرام دیفیوژن متان و مونواکسید کربن نشان می‌دهد که در شعله مونواکسید کربن ماکزیمم میزان NO و ماکزیمم نرخ خالص تشکیل NO در موقعیت‌های مشابه ماکزیمم دما اتفاق می‌افتند. نتایج تحقیق وی نشان می‌دهد که تشکیل خالص NO در محدوده وسیعی از کسر مخلوط ($f=0/19-0/42$) در محدوده دمایی $1500^\circ K$ (منطقه فقیر) تا $1800^\circ K$ (منطقه غنی) مهم می‌باشد. همچنین نابودی NO به جز در شعله‌های با میزان کشیدگی بسیار پایین مهم نمی‌باشد [5].

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- مدل سازی 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 می‌گیرد، لکن واضح است که حل صحیح میدان جریان و تخمین صحیح گونه‌های اصلی احتراقی چقدر بر دقت پیش‌بینی میزان NO منتشره بسیار مؤثر است.

3- حل میدان اصلی جریان و معادلات احتراقی

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 $\Gamma=1$ و $(\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x})$ در این معادله می‌توان آن را در سیستم کارتزین داشت.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho v \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\rho v \theta \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho v_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + S_{\phi} \quad (1)$$

Convection Diffusion Source

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

معادله	ϕ	ترم منبع (S_ϕ)
پیوستگی	0	0
مومنتم محوری	w	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial w}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rv)}{\partial r} \right) \right]$
مومنتم شعاعی	u	$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rv)}{\partial r} \right) \right]$
انرژی جنبشی توربولانس	k	$G_k - \rho \cdot \varepsilon$
نرخ استهلاک توربولانس	ε	$C_{1\varepsilon} \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot G_k - C_{2\varepsilon} \cdot \rho \cdot \frac{\varepsilon^2}{k}$
کسر مخلوط	f	0
واریانس کسر مخلوط	g	$C_g \cdot \mu_t \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 - C_d \cdot \rho \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot g$
کسر جرمی گونه ها	Y_i	Γ_i (نرخ تولید یا نابودی نمونه جرمی)
انتالپی	h	0 (بدون اثر تشعشع)
ضرایب مربوط به معادلات ترانسپورت جریان مغشوش	—	$* G_k = 2.44 S_{ij} S_{ij} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \mu_t = C_\mu \cdot \rho \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad C_\mu = 0.09$ $** C_{1\varepsilon} = 1.44 \quad C_{2\varepsilon} = 1.92$ $\Gamma_{\phi, eff} = \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \quad \sigma_\phi = Pr_\phi \quad \text{or} \quad \sigma_\phi = Sc_\phi$

4- مدل سازی اکسید نیتروژن

برای تخمین NO نیاز به حل معادله انتقال کسر جرمی آن (Y_{NO}) می باشد. همانگونه که قبلاً اشاره شد، این معادله به صورت پس پردازش و پس از تعیین میدان اصلی جریان و گونه های اصلی، حل می شود. فرم معادله همان معادله (1) می باشد. گام مهم در این مرحله تخمین صحیح جمله چشمه/چاه می باشد. به همین دلیل وجود شناخت کافی نسبت به مکانیزم های تشکیل و نابودی و ارائه مدل ریاضی مناسب مربوطه جهت تخمین این ترم بسیار مهم می باشد. با توجه به اینکه سوخت مورد مطالعه مونواکسید کربن می باشد، مکانیزم گرمایی تنها مکانیزم مطرح در این مدل می باشد. در این مکانیزم NO از اکسیداسیون مولکول های نیتروژن موجود در اتمسفر (N_2) در دماهای نسبتاً بالا و در محیط های سوخت فقیر تشکیل می شود. این مکانیزم توسط سه واکنش اساسی ذیل تحت عنوان مکانیزم «زلدوویچ توسعه یافته» بیان می گردد [2]:



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

تشکیل اکسید نیتروژن از طریق مولکول نیتروژن N_2 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 استوکیومتریکی 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]:

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

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]:

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

استفاده از غلظت‌های تعادلی باعث پیش‌بینی پایین این رادیکال‌ها، به خصوص در نواحی داخل شعله و دما بالا می‌گردد، که این نیز به نوبه خود باعث ایجاد خطای قابل توجه در پیش‌بینی NO می‌گردد. برخی از محققین به بررسی تاثیر غلظت‌های فوق تعادلی رادیکال‌های O و OH پرداخته‌اند. به همین منظور با کمک یک سری ساده‌سازی از تقریب‌های تعادل جزئی جهت پیش‌بینی غلظت این رادیکال‌ها استفاده شده‌است [7]:

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

$$[OH] = 2.129 \times 10^2 T^{-0.57} [O]^{1/2} [H_2O]^{1/2} \times \exp(-4595/T) \quad (8)$$

به جز رابطه اساسی (5) جهت محاسبه NO گرمایی محققین دیگری نیز با انجام برخی ساده‌سازی‌ها 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]:

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

و ساویر¹ نیز رابطه با در نظر گرفتن تاثیر فشار محفظه رابطه ذیل را پیشنهاد نموده است [9]:

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

راک² نیز با اقتباس از مکانیزم زلدوویچ، رابطه ذیل را ارائه نموده است [11]:

1 Sawyer
2 Rökke

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

در دو فرمول بوومن و راک غلظت گونه‌ها بر حسب $\text{gmol/cm}^3 \cdot \text{s}$ و در فرمول ساویر غلظت گونه‌ها بر حسب mole fraction/s می‌باشند. همچنین دما در هر سه فرمول بر حسب درجه کلون 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:

$$S_{NO}^{\%} = \int_0^1 M_{NO} \times \frac{d[NO]}{dt} \cdot \beta(f) df \quad (12)$$

در رابطه فوق $\beta(f)$ تابع چگالی احتمال است که به صورت زیر تعریف می‌شود [8]:

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

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

$$a = \left[\frac{\%f(1-\%f)}{\%f^2} - 1 \right] \%f \quad (14)$$

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

5- شبیه‌سازی شعله CO-H₂-N₂

مونواکسید کربن در فرآیند اکسیداسیون انواع هیدروکربن‌ها نقش مهمی ایفا می‌کند. بررسی‌ها 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 دی‌اکسید کربن می‌باشد.

در این تحقیق شعله جت ساده مغشوش مونواکسید کربن مورد بررسی قرار گرفته‌اند. مقادیر آزمایشگاهی دما و کمیت‌های اسکالر این شعله‌ها مربوط به آزمایشگاه‌های بین‌المللی سندیا¹ و مقادیر آزمایشگاهی سرعت مربوط به ETH زوریخ می‌باشند که توسط بارلو² و همکارانش تحت چند وضعیت مختلف اندازه‌گیری و جمع‌آوری 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

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

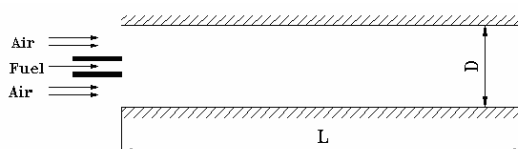
O ₂ (%)	N ₂ (%)	H ₂ (%)	CO(%)	
21	79	----	----	هوا
----	30	30	40	سوخت

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	سرعت هوا (m/s)
292±2	دمای سوخت (K)
290±2	دمای هوا (K)
16700	عدد رینولدز

آزمایشات در شرایط آزاد و بدون هیچگونه حصارى 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 می‌گردد. 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 می‌دهد. محفظه به صورت استوانه می‌باشد و ابعاد آن به گونه‌ای انتخاب شده، که تأثیرات دیواره بر روی شعله حذف گردد.



شکل (1). شماتیک محفظه احتراق مدل

دامنه حل برای شعله نصف محفظه احتراق مدل به ابعاد (0/15×2) متر و ابعاد شبکه محاسباتی برای شعله مذکور 50×90 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 شیمیایی¹ از کد تجاری فلونت¹ [12] با در نظر گرفتن 12 نمونه جرمی (سوخت، اکسیژن، نیتروژن و انواع رادیکالهای C_xH_y) استفاده شده است.

برای توربولانس در معادلات جریان اصلی از مدل $k-\epsilon$ 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 می‌شود [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 پس‌پردازنده تدوین شده شبیه‌سازی شده است.

6- بحث و بررسی

شکل‌های (2)، (3) و (5) نمودارهای مقایسه‌ای مقادیر تجربی و محاسباتی کسر مخلوط، 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 می‌دهد 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 $k-\epsilon$ 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 $k-\epsilon$ با استفاده از آزمایش روی جت‌های تخت استخراج شده‌اند. نکته دیگری که باعث اختلاف بین نتایج آزمایش و نتایج شبیه‌سازی است، اثر تداخل^۲ 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 شبیه‌سازی دقیق جریان‌های احتراقی، مدل احتراقی نقش اساسی دارد زیرا علاوه بر تعیین مقدار گونه‌ها و محصولات احتراق، نرخ آزاد شدن انرژی حاصل از ترکیب سوخت و اکسید کننده را نیز تعیین می‌کند. در تحقیق حاضر، فرآیند احتراق شعله‌ها با استفاده از مدل تقریب تعادل شیمیایی^۴ انجام شده است. در این مدل اثر نمونه‌های جرمی میانی نظیر CO ، OH نیز در تعیین کمیت‌های ترموشیمیایی دخالت دارد. بنابراین همان‌طور که در شکل‌های (4) تا (9) ملاحظه می‌شود 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 می‌شود 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 جایی اتفاق می‌افتد که کسر مخلوط استوکیومتریک اتفاق بیفتد.

پس از بررسی نتایج میدان احتراقی می‌توانیم به بررسی غلظت‌های NO بپردازیم. قبل از آنکه وارد این بحث شویم، لازم به توضیح است که در این شعله‌ها با توجه به عدم وجود مناطق بسیار غنی سوخت، تاثیر رادیکال OH بسیار ناچیز می‌باشد، لذا می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. همان‌طور که در شکل‌های (2) و (5) مشاهده می‌شود، 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

1 Fluent Code

2 Intermittency

3 Kuznetsov & Sabelnikov

4 Chemical Equilibrium model

آرام غیر پیش مخلوط مونواکسیدکربن با استفاده از نتایج تجربی و محاسباتی نشان می‌دهد که کسر مخلوط استوکیومتریکی، 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 ($x/d=35$) در موقعیت محوری ($x/d=60$) اتفاق افتاده است. به نظر می‌رسد این امر به دلیل سرعت زیاد جت در این شعله می‌باشد. البته این موضوع می‌تواند متأثر 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 نسبت به محل ماکزیمم دما اتفاق افتاده است. به نظر می‌رسد که در این شعله‌ها انتقال توربولانس به هنگام پیشروی جریان به سمت پایین دست به سمت بیرون شعله می‌باشد و همین امر باعث می‌شود غلظت‌های NO در فواصل شعاعی دورتری حداکثر باشند.

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 پیش‌بینی می‌کند.

بررسی منحنی‌های غلظت‌های NO نشان می‌دهد 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 مناسب‌تر می‌باشد، لکن با توجه به پیش‌بینی پایین میزان NO در ناحیه داخل شعله به نظر می‌رسد این رابطه در تخمین واقعی میزان O خصوصاً در ناحیه داخل شعله هنوز دچار نقصان می‌باشد. ولی در فواصل شعاعی دورتر در هر مقطع، استفاده از غلظت‌های تعادلی جزئی O با دقت مطلوبی میزان غلظت NO را تخمین خواهد زد. پس به طور کلی استفاده از غلظت‌های تعادلی O، موجب پیش‌بینی بهتر NO می‌شوند.

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 می‌شود. 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 جریان باعث نزدیک‌تر شدن جواب‌ها به مقادیر آزمایشگاهی و افزایش اثر نرخ تشکیل بر محدوده وسیع‌تری می‌شود، 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 می‌دهند 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) می‌شود. البته همانطور که ملاحظه می‌شود در حالتی که از متد PDF استفاده نمی‌شود محل ماکزیمم غلظت در هر مقطع تقریباً منطبق با نتایج آزمایشگاهی می‌باشد. این مقایسه در پروفیل‌های محوری نیز حاکی از جابجایی محل وقوع ماکزیمم غلظت به سمت نواحی بیرونی‌تر می‌باشد، لکن در این حالت ماکزیمم غلظت NO محاسبه شده به وسیله PDF به ماکزیمم غلظت NO تجربی نزدیک‌تر شده است ولی بر خلاف پروفیل‌های شعاعی ماکزیمم آن نسبت به حالتی که از انتگرال PDF استفاده نشده است کاهش پیدا کرده است به نظر می‌رسد در این شعله‌ها انتقال توربولانس به سمت بیرون شعله می‌باشد، به همین دلیل استفاده از مدل اختلاط PDF با توجه به وابستگی آن به واریانس کسر مخلوط موجب می‌شود ماکزیمم غلظت NO به سمت نواحی بیرونی انتقال یابد.

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 پس‌شعله شده و به همین دلیل استفاده از رابطه تعادلی جزئی در این شعله منجر به پیش‌بینی مناسب‌تر NO در ناحیه دور از جت خواهد شد.

به طور کلی بررسی نمودارها کسر جرمی NO در نواحی داخل شعله و نزدیک به جت نشان می‌دهند که میزان NO در این نواحی برای هر دو شعله پایین پیش‌بینی شده است. به غیر از خط‌هایی که ناشی از حل احتراقی می‌باشند، دو عامل می‌توانند جهت توجیه این تخمین پایین مطرح شوند. اول این که غلظت رادیکال‌های O در این منطقه به درستی پیش‌بینی نشده و استفاده از رابطه تعادل جزئی از اعتبار لازم در این منطقه برخوردار نمی‌باشد و عامل دوم صرف‌نظر کردن از مکانیزم N_2O واسطه‌ای می‌باشد. هر چند که سهم این مکانیزم بسیار اندک است ولی به هر حال این مکانیزم در نواحی اولیه جت که دما کم می‌باشد، موجب تشکیل NO می‌شود.

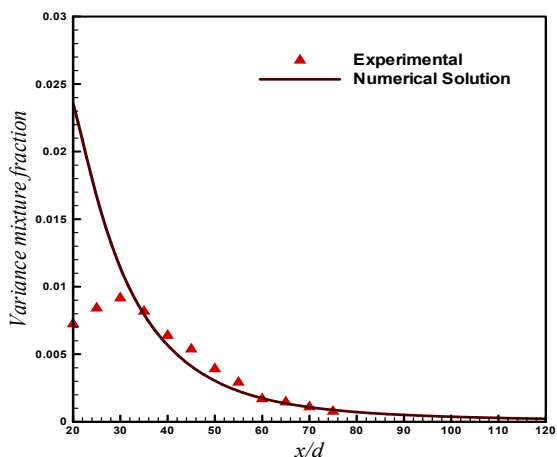
7- نتیجه‌گیری

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 پس‌پردازنده 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 پیش‌بینی مناسب‌تر 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 و ساویر نیز بسیار نزدیک به هم می‌باشند و میزان NO را بسیار پایین پیش‌بینی می‌کند.

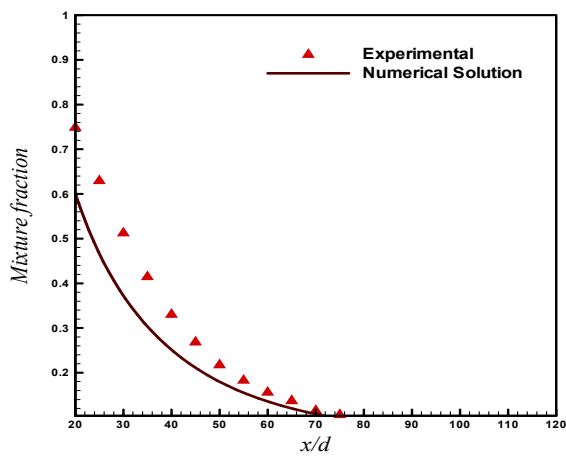
8- مراجع

- 1- Meunier, M., Karvalho, M.G., "The formation and destruction of NO in turbulent propane diffusion flames", *Fuel*, 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 Concentration Fluctuation in a Turbulent Gas Jet", *IV Symposium on Combustion.*, pp. 814, 1953.
- 9- شریفی ح. "شبیه‌سازی جریان‌های احتراقی مغشوش به روش شبکه‌های 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.

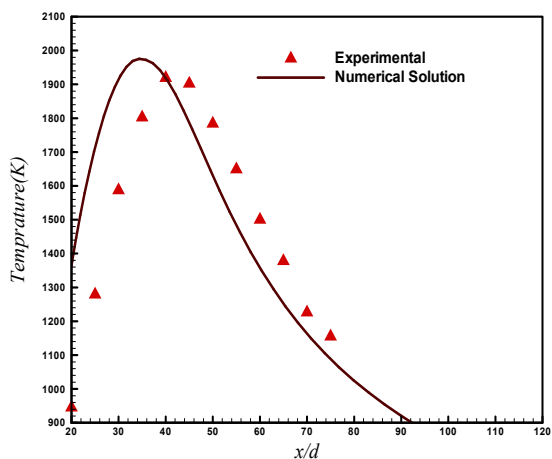
- 12- Fluent softWare. Rev 6.
- 13- Kuznetsov, V.R., Turbulent and Combustion, Hemisphere Pub. Corp, 1990.
- 14- Jones, W.P., "Models for Turbulent Flows with Variables Density and Combustion", Prediction Methods for Turbulent Flow, VKI-Lecture Series, 1979.
- 15- Drake, M.C., Blint, R.J., "Thermal NO_x in stretched laminar opposed flow diffusion flames with CO/H₂/N₂ fuels", *Combust. and Flame*, Vol. 76, pp. 151-167, 1989
- 16- 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.



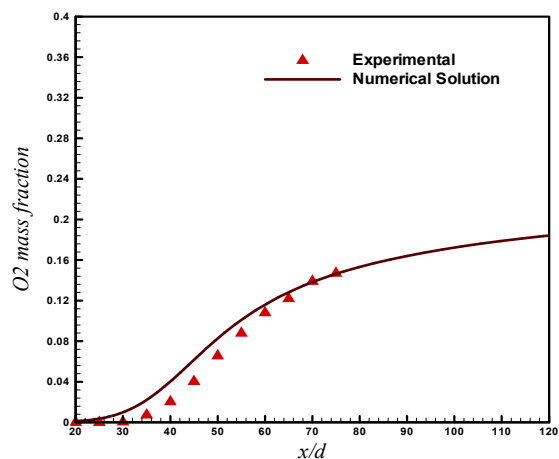
شکل (3). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی واریانس کسر مخلوط



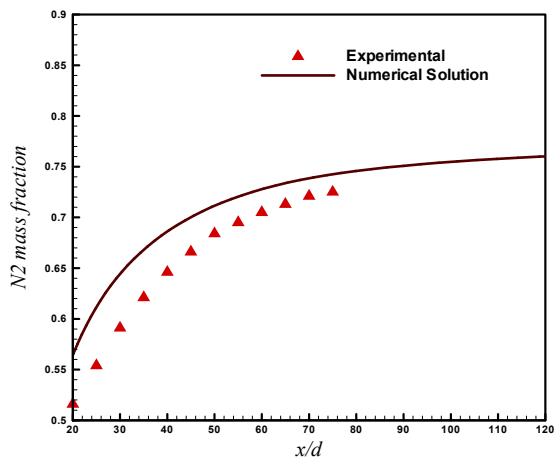
شکل (2). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر مخلوط



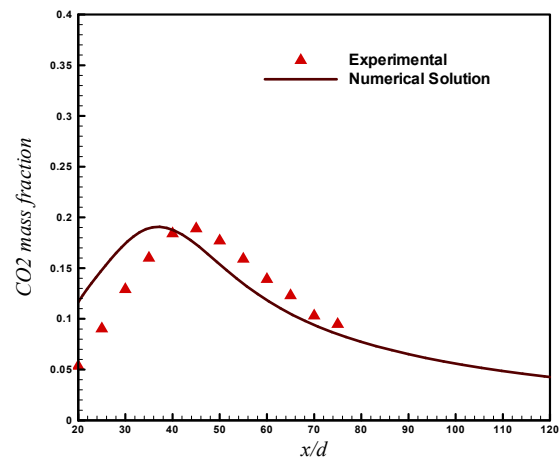
شکل (5). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی دما



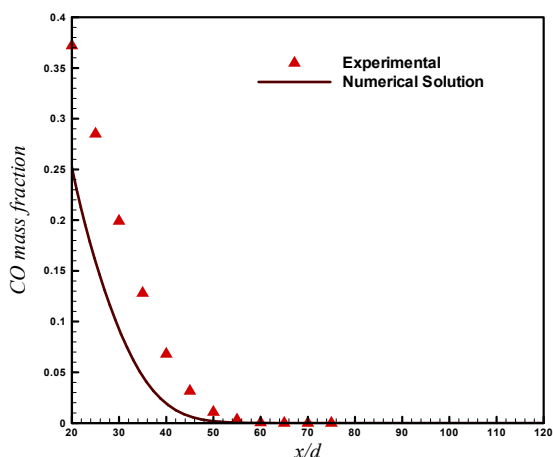
شکل (4). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی اکسیژن



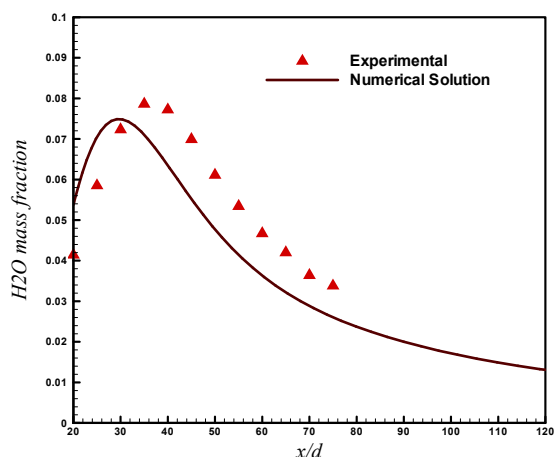
شکل (7). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی نیتروژن



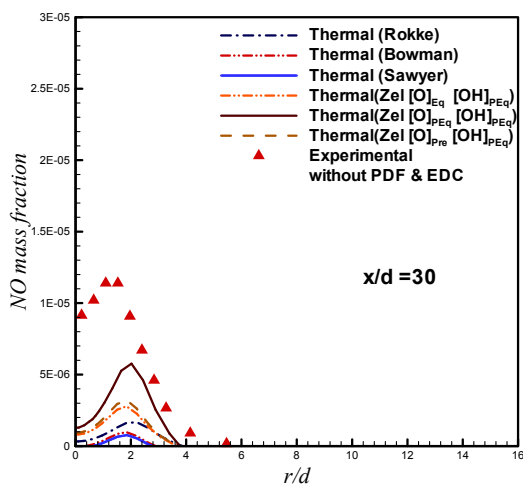
شکل (6). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی دی اکسید کربن



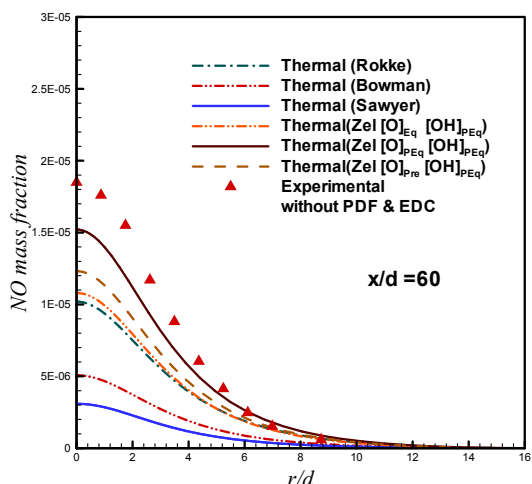
شکل (9). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی مونواکسید کربن



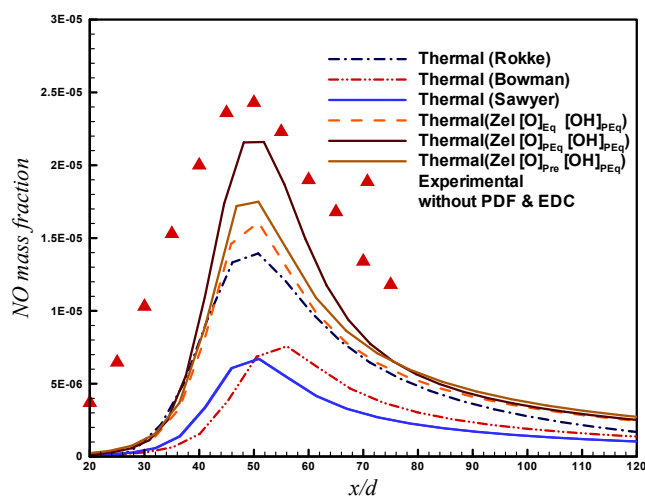
شکل (8). پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی آب



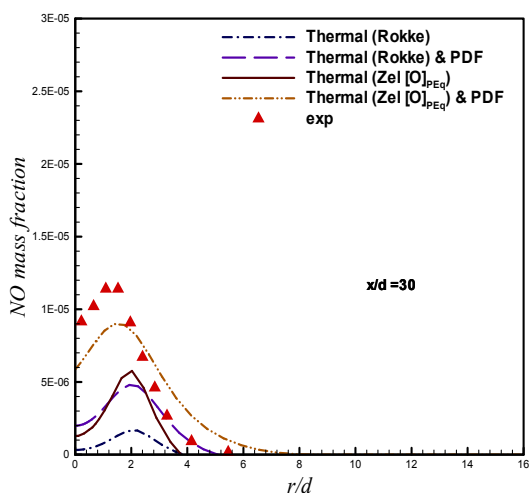
شکل (11) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی در ($x/d = 30$)



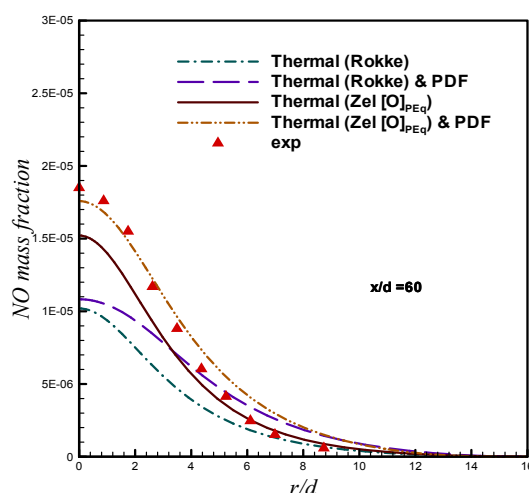
شکل (10) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی در ($x/d = 60$)



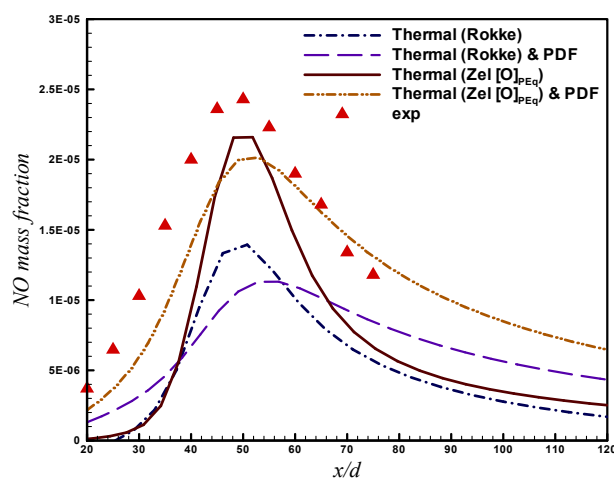
شکل (12) پروفیل های محوری مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی NO با استفاده از روابط مختلف برای مکانیزم گرمایی



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



شکل (13) پروفیل های شعاعی مقادیر تجربی [10] و محاسباتی کسر جرمی NO گرمایی با در نظر گرفتن اثرات اغتشاش در ($x/d=60$)



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