

## شبیه‌سازی عددی، دوبعدی و متقارن محور احتراق پیش‌آمیخته‌ی متان- هوا در مشعل‌های محیط متخلخل با در نظر گرفتن تغییر تخلخل پیوسته و مکانیزم‌های احتراقی چند مرحله‌ای

دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی سهند

ایمان محمدی

دانشیار دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند

سیامک حسین پور

### چکیده

در این مقاله به بررسی احتراق مخلوط پیش‌آمیخته هوا- متان در حالت دو بعدی و متقارن محور همراه با پروفیل تغییر تخلخل متغیر با استفاده از روش‌های عددی پرداخته شده است برای این کار از مکانیزم‌های چند مرحله‌ای شامل GRI.1.2، GRI.2.11، GRI.3.0 مکانیزم اسکلتال و مکانیزمی با ۱۷ گونه و ۵۸ واکنش شیمیایی استفاده شده است و اثرات این مکانیزم‌ها بر روی پروفیل‌های دما، کسر جرمی گونه‌ها و انتشار آلاینده‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. معادله‌ی پیوستگی، معادلات ناویر استوکس، معادلات انرژی فاز گاز و جامد و معادلات حاکم بر گونه‌های شیمیایی با استفاده از روش حجم محدود حل شده و برای ارتباط بین سرعت و فشار از الگوریتم SIMPLE استفاده شده است. نتایج نشان داد که مکانیزم‌های احتراقی حاضر دارای دقت تقریباً یکسان در پیش‌بینی دما و کسر جرمی گونه‌ها می‌باشند. به عبارت دیگر مکانیزم‌های GRI.1.2، GRI.2.11، GRI.3.0 دارای دقت یکسان و مکانیزم‌های اسکلتال و ۱۷ جزئی نیز دارای پیش‌بینی‌های نزدیک به هم برای پروفیل دما و کسر جرمی گونه‌های شیمیایی، می‌باشند. علاوه بر آن اثرات افزایش در سرعت ورودی و ضریب انتقال گرمای حجمی ناحیه‌ی احتراقی درحالی که از پروفیل تغییر تخلخل متغیر استفاده شده است، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش سرعت ورودی دمای بیشینه گاز کاهش پیدا می‌کند و به تبع آن میزان انتشار  $NO_x$  نیز کاهش می‌یابد و همچنین با کاهش ضریب انتقال گرمای حجمی دمای بیشینه کاهش می‌یابد.

کلمات کلیدی: محیط متخلخل، تخلخل متغیر، احتراق متقارن محور، مکانیزم‌های شیمیایی، انتقال حرارت، حجم محدود

## Numerical Simulation of Two Dimensional and Axisymmetric of Premixed Methane- Air Combustion in Porous Media Burner with Variation of Porosity and Multi Step Mechanisms

I. Mohammadi  
S. Hossainpour

M.Sc Student, Sahand University of Technology  
Associate Professor, Sahand University of Technology

### Abstract

In this paper a two-dimensional axisymmetric numerical model with variable porosity for premixed methane/air combustion in porous media has been developed. For this purpose, multi step mechanisms such as GRI.1.2, GRI.2.11, GRI.3.0, Skeletal and a mechanism with 17 species and 58 chemical reactions has been used and the effects of the mechanisms on the temperature profile, mass fraction of species and emission of pollutants have been investigated. This model solves the continuity, Navier Stokes, the gas and solid energy and the chemical species transport equations by using the finite volume method. The pressure and velocity have been coupled with the SIMPLE algorithm. The results showed that the combustion mechanisms have the same accuracy in predicting of temperature profile and mass fraction of species in order to the GRI.1.2, GRI.2.11, GRI.3.0 mechanisms are the same accuracy and also the skeletal and 17 species mechanisms are the same in predicting of temperature profile and mass fraction of species. Also the effects of increasing the inlet velocity and the volumetric heat transfer coefficient at combustion zone with variation porosity are investigated. The results showed that by increasing in inlet velocity, the peak temperature and the amount of  $NO_x$  emission will be decreased and also by decreasing in volumetric heat transfer, the peak temperature will be decreased.

**Keywords:** Porous Media, Porosity Variation, Axisymmetric Combustion, Chemical Kinetic, Heat Transfer, Finite Volume

## ۱- مقدمه

اخیراً احتراق در محیط متخلخل به علت افزایش بازده احتراق و کاهش میزان انتشار آلاینده‌هایی هم‌چون  $NO_x$  و CO مورد توجه بسیاری از متخصصان فن قرار گرفته است. مهم‌ترین تفاوت بین سیستم‌های احتراقی متداول و سیستم‌های احتراقی در محیط متخلخل این است که در سیستم‌های احتراقی متداول، احتراق در یک محیط گازی اتفاق می‌افتد در حالی که در محیط متخلخل، احتراق در یک ماتریس جامد سه بعدی اتفاق می‌افتد. به علاوه چون استفاده از محیط متخلخل سبب افزایش سطح تماس و اختلاط خوب سوخت و اکسید کننده خواهد شد، انتقال گرمای موثر بین جامد و گاز افزایش یافته و راندمان سیستم احتراقی افزایش می‌یابد.

استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی و آزمایشگاهی برای بهبود و بهینه‌سازی سیستم‌های احتراقی ضروری به نظر می‌رسد و این در حالی است که روش‌های آزمایشگاهی نیازمند صرف وقت و هزینه خواهد بود. همچنین تنوع انجام محاسبات به روش‌های آزمایشگاهی پایین است و به همین دلیل بیشتر محققان برای شبیه‌سازی احتراق، از مدل‌سازی‌های عددی بهره گرفته‌اند.

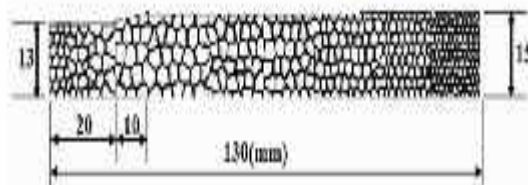
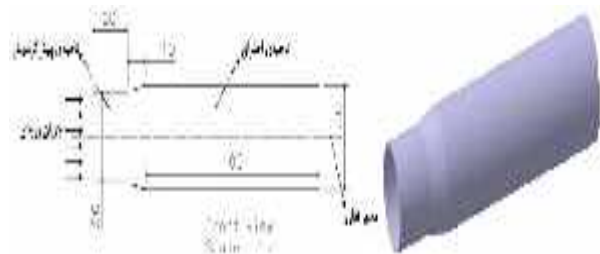
یاشیزاوا [۱]، در سال ۱۹۸۸ شبیه‌سازی عددی یک بعدی همراه با مکانیزم تک مرحله‌ای را انجام داد و به بررسی اثرات خصوصیات انتقال گرما بر روی نرخ سوختن و ساختار شعله پرداخت. در سال ۱۹۹۳ سو و متتیو [۲] دریافتند که با استفاده از مکانیزم چند مرحله‌ای دقت انجام محاسبات در پیش‌بینی توزیع دما، نرخ آزاد سازی انرژی، پروفیل کسر جرمی گونه‌های شیمیایی و انتشار آلاینده‌ها بیشتر خواهد شد. در سال ۱۹۹۸ پیرا و زو [۳]، احتراق گاز متان را با استفاده از چهار مدل احتراقی، Full Mechanism، که شامل ۴۹ گونه و ۲۲۷ واکنش شیمیایی، Skeletal، که شامل ۲۷ گونه و ۷۳ واکنش شیمیایی، 4-step reduced mechanism، که شامل ۹ گونه و ۴ واکنش شیمیایی و IGM که شامل ۴ گونه و یک واکنش کلی است بررسی نمودند. آنها همچنین اثرات مدل‌های مختلف را بر دمای ذرات، سرعت سوختن و میزان آلاینده‌ها را مورد مطالعه قرار دادند و با مقایسه نتایج حاصل از آنها با نتایج آزمایشگاهی دریافتند که مدل 4RM بیشترین تطابق را با FM خواهد داشت و به زمان محاسبات کامپیوتری کمتری نیاز دارد. مالیکو [۴] و همکاران در سال ۱۹۹۹ از تحلیل عددی دو بعدی برای بررسی احتراق و انتشار آلاینده‌ها در محیط متخلخل، بررسی اثرات نسبت هوای اضافی، ضریب هدایت رسانش گرمایی، ضریب انتقال گرمای همرفتی و خواص تابشی استفاده نمودند. نتایج نشان داد که با در نظر نگرفتن اثرات جذب، جبهه‌ی شعله به سمت پایین دست جریان حرکت کرده، دما بیشینه افزایش

یافته و در نتیجه انتشار آلاینده‌ها افزایش می‌یابد. چانگ‌جن [۵] در سال ۲۰۰۲ از یک مدل عددی یک بعدی برای بررسی اثرات افزودن هیدروژن بر روی احتراق متان در یک کوره متخلخل استفاده نمود. نتایج نشان داد که با افزودن هیدروژن به سوخت، سرعت شعله و انتشار CO افزایش پیدا می‌کند. در سال ۲۰۰۶ میشر و همکاران [۶]، برای آنالیز گرمایی مشعل‌های متخلخل تابشی چهار گوش یک سیستم دو بعدی با ۱۶۴ واکنش و ۲۰ جزء در نظر گرفتند و معادلات انرژی جداگانه‌ای برای فاز گاز و جامد حل شد. در سال ۲۰۰۷ لاری [۷]، به آنالیز گرمایی مشعل‌های متخلخل در حالت گذرا با استفاده از مدل دو شار گرمایی پرداخت و اثر پارامترهای مختلف بر عملکرد سیستم را مورد مطالعه قرار داد. نتایج نشان داد که مشعل‌های با ضخامت اپتیکال بیش‌تر، دارای پیک دمایی پایین‌تر می‌باشند. همچنین تشعشع خروجی از مشعل افزایش پیدا نموده و به تبع آن بازده مشعل افزایش می‌یابد. حسین‌پور و حدادی [۸] در سال ۲۰۰۸ اثرات پارامترهای کوره متخلخل را بر روی احتراق و تشکیل آلاینده‌ها با استفاده از یک مدل یک بعدی و مکانیزم چند مرحله‌ای مورد بررسی قراردادند. نتایج نشان داد که با کاهش ضریب انتقال گرمای حجمی، اختلاف دمایی بین گاز و جامد کاهش می‌یابد و همچنین با کاهش تخلخل، سرعت افزایش می‌یابد. در سال ۲۰۱۰ بیدی و نوبری [۹] به بررسی پایداری شعله با استفاده از روش کمینه کردن انرژی تولیدی (EGM) پرداختند و دریافتند که زمانی که شعله در بالا دست جریان اتفاق می‌افتد، پایدارتر می‌باشد. آنها همچنین اثرات نسبت هم ارزی و تخلخل را مورد بررسی قرار دادند و دریافتند که با افزایش نسبت هم ارزی بازگشت ناپذیری‌ها افزایش می‌یابد. در کار حاضر سعی بر این است تا تأثیر پروفیل تغییر تخلخل را بر عملکرد مشعل‌های محیط متخلخل مورد بررسی قرار دهیم که برای این کار برنامه‌ای به زبان فورتن برای حالت دو بعدی و متقارن محور و مکانیزم‌های چند مرحله‌ای ایجاد شده است. امروزه با پیشرفت علم و تکنولوژی در عرصه‌ی ساخت مواد متخلخل، امکان تولید موادی با تخلخل متغیر دور از دسترس نخواهد بود [۱۰]. استفاده از تخلخل متغیر امکان تنظیم دمای بیشینه شعله را فراهم می‌آورد که به تبع آن می‌توان تولید مواد آلاینده را نیز کاهش داد.

## ۲- مشعل مورد مطالعه

در شکل ۱ یک مشعل با تخلخل متغیر نشان داده شده است. در نمونه نشان داده شده، تخلخل از ابتدای مشعل ابتدا افزایش و مجدداً به سمت انتهای آن کاهش می‌یابد.

مخلوط سوخت و هوا ابتدا وارد ناحیه‌ی پیش‌گرمایش می‌شود چون دمای مواد جامد بالاتر از دمای گاز است، گازهای پیش مخلوط در حین عبور از خلل و فرج این ناحیه به واسطه‌ی انتقال گرما جابه‌جایی پیش گرم شده و به دمای اشتعال نزدیک می‌شوند در این هنگام مخلوط وارد ناحیه‌ی احتراق شده و به دمای احتراق می‌رسد و واکنش شیمیایی اتفاق می‌افتد. با انجام واکنش شیمیایی، آنتالپی احتراق آزاد می‌شود، قسمتی از گرمای واکنش بوسیله‌ی انتقال گرمای تابشی از طریق مواد جامد به ناحیه‌ی ورودی منتقل می‌شود و مابقی گرمای واکنش از طریق مواد جامد و گازهای محصولات احتراق به واسطه‌ی انتقال رسانش گرمایی، تابش، جابه‌جایی به پایین دست جریان واگذار می‌شود [۱۱].



شکل ۱- طرحواره از مشعل متخلخل همراه با تخلخل متغیر

## ۳- فرضیات بکار رفته در حل مسئله

- ۱- جریان سیال پایدار، آرام و نیوتنی است.
  - ۲- با وجود تغییر تخلخل، برای محاسبه‌ی افت فشار و بقیه پارامترها در ماتریس متخلخل همچنان معادله‌ی داریسی و فورهایمر برقرار است.
  - ۳- اثر لزجت و نیروی حجمی ناچیز است.
  - ۴- از اثرات کاتالیزوری ماده‌ی متخلخل در دمای بالا صرف نظر شده است.
  - ۵- از اثرات انتقال گرمای تابشی صرف نظر شده است.
- دو معادله جداگانه برای فاز جامد و گاز حل شده است که این دو معادله به وسیله ضریب انتقال گرمای همرفتی، که دلالت

بر انتقال گرمای جابجایی بین دو فاز دارد، به هم مرتبط می‌شوند [۱۲].

### ۴- معادلات حاکم

با توجه به فرضیات مسئله معادلات حاکم به صورت زیر می‌باشند

#### معادله‌ی پیوستگی

$$\nabla \cdot (\rho v V_s) = 0 \quad (۱)$$

#### معادلات مومنتم

$$\nabla \cdot (\rho u V_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \frac{\partial p}{\partial x} - \left( \frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_x \quad (۲)$$

$$\nabla \cdot (\rho v V_s) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \frac{\partial p}{\partial y} - \left( \frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_y \quad (۳)$$

در این معادلات جمله مربوط به افت فشار بصورت زیر محاسبه می‌گردد.

$$\left( \frac{\Delta P}{\Delta L} \right)_i = \frac{\mu}{K_1} V_s + \frac{\mu}{K_2} V_s |V_s| \quad (۴)$$

که در آن  $K_1$  و  $K_2$  به ترتیب تانسورهای نفوذ پذیری برای جریان آرام و درهم می‌باشند و  $V_s$  بیانگر سرعت ظاهری (Superficial) است که در محیط متخلخل بصورت زیر تعریف می‌شود

$$V_s = \varepsilon V \quad (۵)$$

که  $\varepsilon$  بیانگر تخلخل ماده‌ی متخلخل می‌باشد.

#### معادله‌ی انرژی فاز گاز

$$\nabla \cdot (\rho V_s C_p T_f) = \nabla \cdot (\varepsilon \lambda_f \nabla T_f) + H(T_s - T_f) - \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k h_k \quad (۶)$$

که  $H$  ضریب انتقال گرمای حجمی،  $T_s$  دمای ماده متخلخل،  $T_f$  دمای مخلوط گاز،  $C_p$  ظرفیت گرمایی ویژه مخلوط گاز،  $\lambda_f$  و  $\rho$  به ترتیب ضریب رسانش گرمایی و چگالی مخلوط گاز هستند.

#### معادله‌ی انرژی فاز جامد

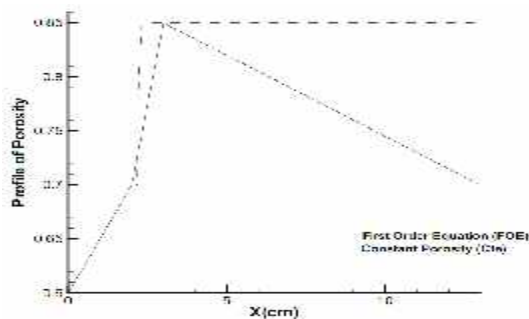
$$\nabla \cdot ((1 - \varepsilon) \lambda_{eff_i} \nabla T_s) + H(T_f - T_s) = 0 \quad (۷)$$

که ضریب انتقال گرمای رسانش موثر ( $\lambda_{eff_i}$ ) بصورت زیر تعریف می‌گردد.

$$\lambda_{eff_i} = \lambda_{eff}^\circ + \frac{\dot{m}}{A} \cdot C_p \cdot d \quad (۸)$$

که در آن  $\lambda_{eff}^\circ$  انتقال گرمای رسانش بدون وجود جریان و قسمت دوم مربوط به اثرات نفوذ همرفت می‌باشد که در آن  $\frac{\dot{m}}{A}$  شار جرمی بر واحد سطح،  $C_p$  ظرفیت گرمایی ویژه،  $d$

نمودار تغییرات تخلخل در طول مشعل در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲- نمودار تغییر تخلخل در طول مشعل

### ۵- شرایط مرزی

شرایط مرزی وارد بر هندسه‌ی مشعل به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود.

#### ۵-۱- شرط مرزی ورودی

سرعت، دما و غلظت گونه‌ها، در ورود به مشعل داده شده فرض می‌شود و بقیه متغیرها در ورودی مشعل به صورت معادلات ۱۴ می‌باشند.

$$u = u_{in}, \quad V = 0, \quad T_g = T_{g,in},$$

$$Y_i = Y_{i,in}, \quad (1 - \varepsilon) \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\varepsilon_r \sigma (T_s^4 - T_o^4) \quad (14)$$

که در آن  $\sigma$  ثابت استفان بولتزمن که برابر  $5.67 \times 10^{-8}$  است،  $\varepsilon_r$  ضریب انتشار سطح و  $T_o$  دمای محیط که برابر ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته می‌شود.

#### ۵-۲- شرط مرزی خروجی

کلیه متغیرها شامل سرعت محوری، سرعت شعاعی، دمای گاز و غلظت گونه‌ها در خروجی مشعل به صورت توسعه یافته فرض می‌شوند که به صورت معادلات ۱۵ در برنامه اعمال می‌شوند.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0, \quad (15)$$

$$(1 - \varepsilon) \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} = -\varepsilon_r \sigma (T_s^4 - T_o^4)$$

#### ۵-۳- شرط مرزی دیوار

بر روی دیوار شرط عدم لغزش را اعمال نموده و گرادیان جزء جرمی برابر صفر در نظر گرفته می‌شود همچنین دمای دیواره ثابت و برابر با ۱۴۱۰ کلوین فرض می‌شود.

#### ۵-۴- شرط مرزی تقارن

معادله ۱۶ روابط مربوط به شرط مرزی محور تقارن را نشان می‌دهد که در آن تغییرات کلیه پارامترها در جهت شعاعی

قطر مشخصه و  $(K_1, K_2)$  ضرایب پخش گرمایی مدل می‌باشند [۱۳، ۱۴].

### معادله‌ی بقاء گونه‌های شیمیایی

$$\nabla \cdot (\rho V_s Y_k) = \nabla \cdot (\rho \varepsilon D_{km} \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad K \in [1, N_s] \quad (9)$$

که  $N_s$  تعداد گونه‌های شیمیایی و  $D$  ضریب نفوذ جرم مخلوط گازی است.

ویژگی‌های ترموشیمیایی و ترموفیزیکی برای مخلوطی با  $N_s$  گونه توسط زیر برنامه‌ی Tranfit و اطلاعات ترمودینامیکی پایه Chemkin بدست می‌آید. نرخ تولید و یا از بین رفتن گونه‌ها به دلیل واکنش‌های شیمیایی به عنوان جمله چشمه و چاه در معادلات انرژی گاز و انتقال گونه‌های شیمیایی وارد می‌شود.

$$\dot{\omega}_k = M_k \sum_{k=1}^{N_s} (v_{kl}''' - v_{kl}') K_1 \quad (10)$$

$$\Pi_{react} \tan t C v_{kl}' - \frac{1}{k_c} \Pi_{product} C v_{kl}''$$

که  $N_R$  تعداد واکنش‌های شیمیایی،  $M_k$  وزن مولکولی،  $K_C$  ثابت تعادل شیمیایی،  $v_{kl}''$  و  $v_{kl}'$  ضرایب استوکیومتری گونه‌های شیمیایی است که ضرایب استوکیومتری از طریق یک مکانیزم واکنشی به صورت معادله ۱۱ به هم مرتبط می‌شوند.

$$\sum_{k=1}^{N_s} v_{kl}' A_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_s} v_{kl}'' A_k \quad (11)$$

ثابت ویژه سرعت واکنش  $K_1$  از رابطه‌ی آرنیوس بصورت زیر بدست می‌آید [۱۵].

$$K_1 = K_1^0 T^{\beta_1} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) \quad (12)$$

$K_1^0$  ضریب فرکانس برخورد (Collision frequency)،  $\beta_1$  توان دما و  $E_1$  انرژی فعال سازی برای هر واکنش می‌باشد که در مکانیزم احتراقی مناسب تعیین شده است.

### معادله‌ی تغییر تخلخل

برای مشعل با تخلخل متغیر تابع ۱۳ استفاده شده است که در آن  $X$  نشان‌دهنده‌ی طول مشعل می‌باشد.

$$\begin{cases} 0.05X + 0.6 & 0 \leq X \leq 2 \\ 0.15X + 0.4 & 2 < X \leq 3 \\ -0.015X + 0.895 & 3 < X \leq 13 \end{cases} \quad (13)$$

شده است. کافمن (Kaufman) در سال ۱۹۸۲ در مقاله‌ای که ارائه نمود به این نکته اشاره کرد که در بازه زمانی سال‌های ۱۹۷۰ تا ۱۹۸۲ مکانیزم احتراقی متان نمو چشمگیری داشته است، به طوری که از کمتر از ۱۵ مرحله ابتدایی که شامل ۱۲ جزء شیمیایی بوده به ۷۵ مرحله ابتدایی با ۷۵ مرحله برگشتی که شامل ۲۵ جزء شیمیایی است، رسیده است [۲۱].

گروه‌های تحقیقاتی متعددی با همکاری یکدیگر در زمینه ایجاد یک مکانیزم بهینه سینتیک شیمیایی فعالیت می‌کنند. مهمترین این گروه‌ها GRI می‌باشد (Gas Research Institute) موسسه تحقیقات گاز در امریکا است که با همکاری دانشگاه برکلی (Berkeley) در کالیفرنیا، دانشگاه استنفورد (Stanford)، دانشگاه آستون (Austin) در تگزاس و سازمان (Stanford Research Institute) SRI تشکیل شده است. این سازمان بر روی احتراق و واکنش‌های آن تحقیق و آزمایش می‌کند.

GRI-Mech در اصل شامل یک لیست از واکنش‌های ابتدایی شیمیایی و نرخ ثابت عبارات مربوط به آنها است. بیش‌تر واکنش‌های لیست شده در آن از طریق راه‌های مختلف در آزمایشگاه مورد مطالعه قرار گرفته‌اند.

لذا پارامترهای ثابتی که در آن وجود دارد، از طریق نتایج آزمایشگاهی که به طور دقیق انجام گرفته‌اند، به دست آمده‌اند که مهم‌ترین آنها ضرایب ثابت رابطه‌ی آرنیوس می‌باشد. این آزمایشات شامل موارد متعددی است که برای به دست آوردن داده‌ها در جرقه‌زدن و سوختن گاز باید انجام شود. انجام این آزمایشات مشخص می‌کنند که نرخ کدامین پارامتر باید تغییر نماید تا به حالت بهینه برای داده‌های واکنش‌ها برسیم. در صورت تغییر پارامتری سایر پارامترها نیز تغییر خواهند کرد و این عمل توسط محاسبات کامپیوتری به طور خودکار انجام می‌شود. این لیست سپس به عنوان ورودی برنامه CHEMKIN به کار رفته و داده‌های خروجی را در فایل جهت استفاده در برنامه مربوطه، ذخیره می‌نماید.

موسسه تحقیقات گاز در امریکا تاکنون سه نسخه اصلی از GRI-Mech را منشر نموده‌اند که عبارتند از: GRI.1.2، GRI.2.11 و GRI.3.0 که آخرین نسخه آن GRI.3.0 می‌باشد [۲۰].

### مکانیزم اسکلتال (Sk):

ایجاد این مکانیزم به دو طریق امکان‌پذیر می‌باشد

۱- ایجاد مکانیزم کوتاه که دارای کمترین زیر مجموعه از مکانیزم کامل است.

۲- گسترش مکانیزم کاهیده شده از مکانیزم اسکلتال با

فرض حالت دائم و معادلات جزئی

صفر می‌باشد و سرعت شعاعی برابر صفر در نظر گرفته شده است.

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial T_g}{\partial y} = \frac{\partial T_s}{\partial y} = \frac{\partial Y_i}{\partial y} = 0, \quad v = 0 \quad (16)$$

### ۶- مدل سازی عددی

در این مقاله معادلات حاکم شامل معادله‌ی پیوستگی، مومنتم، معادله‌ی انرژی فاز جامد (ماتریس متخلخل)، معادله‌ی انرژی فاز گاز و معادلات بقاء گونه‌های شیمیایی براساس روش حجم محدود گسسته‌سازی شده اند و فشار و سرعت از طریق الگوریتم سیمپل (SIMPLE) به هم ارتباط داده شده اند. به دلیل سخت بودن (Stiffness)، معادلات انرژی گاز و انتقال گونه‌های شیمیایی، جملات چشمه مربوط به این معادلات توسط زیربرنامه‌ی DVODE حل می‌شوند [۱۶]. جملات مربوطه به صورت معادلات (۱۷) و (۱۸) تعریف می‌گردند.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) = \dot{\omega}_k \cdot W_k \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T_f) = - \sum_{k=1}^{N_s} \dot{\omega}_k h_k W_k \quad (18)$$

زیربرنامه DVODE معادلات دیفرانسیل مرتبه‌ی اول را بر اساس الگوریتم هیندرمارش-گیر [۱۷] (Hindmarsh-Gear) حل می‌کند. که این الگوریتم به صورت معادلات ۱۹ و ۲۰ تعریف می‌شود.

$$[Y_i]^{new} = [Y_i]^{old} + [\Delta Y_i]^{transport} + [\Delta Y_i]^{source} \quad (19)$$

$$[T_g]^{new} = [T_g]^{old} + [\Delta T_g]^{transport} + [\Delta T_g]^{source} \quad (20)$$

که در آن  $[Y_i]^{old}$  و  $[T_g]^{old}$  به ترتیب جزء جرمی و دمای گاز در تکرار قبلی،  $[\Delta Y_i]^{transport}$  و  $[\Delta T_g]^{transport}$  به ترتیب تفاضل جزء جرمی و دما قبل و بعد از حل معادلات (۶) و (۹) با صرف‌نظر نمودن از جمله‌های مربوطه و  $[\Delta Y_i]^{source}$  و  $[\Delta T_g]^{source}$  تفاضل جزء جرمی و دما قبل و بعد از حل معادلات (۱۷) و (۱۸) می‌باشد در آن برای اعمال مکانیزم شیمیایی و ویژگی‌های ترمو فیزیکی و ترمو شیمیایی و نرخ پیشرفت واکنش از زیربرنامه‌ی Tranfit و Chemkin استفاده شده است [۱۸].

برای شبیه سازی فرایند احتراق از پنج مکانیزم Skeletal [۱۹] و مکانیزمی با ۱۷ گونه و ۵۸ واکنش شیمیایی و مکانیزم GRI-3.0 و مکانیزم GRI-2.11 و GRI-1.2 [۲۰]، استفاده شده است. که در ادامه به اختصار توضیح داده می‌شود.

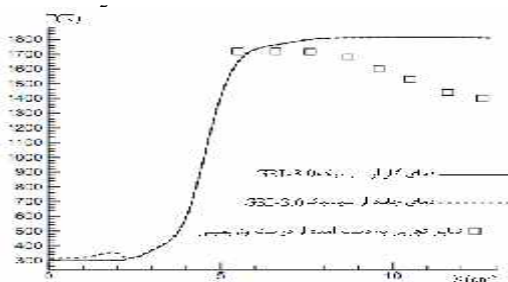
### GRI-Mech

مکانیزم شیمیایی متان به طور گسترده در مراکز تحقیقاتی مختلف دنیا در حال مطالعه می‌باشد، از این رو به خوبی شناخته

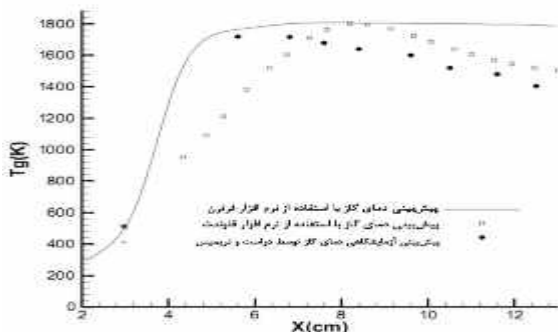
شرایط مرزی خروجی و دمای دیواره بالای در نظر گرفته شده برای مشعل جستجو نمود.

### ۸- نتایج و بحث

در این مقاله معادلات حاکم شامل معادله پیوستگی، معادلات مومنتم، معادله انرژی فاز جامد (ماتریس متخلخل)، معادله انرژی فاز گاز و معادلات بقاء گونه‌های شیمیایی براساس روش حجم محدود گسسته‌سازی شده‌اند و فشار و سرعت از طریق الگوریتم سیمپل (SIMPLE) به هم ارتباط داده شده‌اند. به دلیل سخت بودن (Stiffness)، معادلات انرژی گاز و انتقال گونه‌های شیمیایی، جملات چشمه مربوط به این معادلات توسط زیربرنامه DVODE حل می‌شوند و در آن برای اعمال مکانیزم شیمیایی و ویژگی‌های ترموفیزیکی و ترموشیمیایی و نرخ پیشرفت واکنش از زیربرنامه‌های TRANFIT و CHEMKIN استفاده شده است و برای شبیه‌سازی فرایند احتراق از چند مکانیزم احتراقی مختلف شامل GRI 1.2 (۳۲ گونه و ۱۷۷ واکنش شیمیایی)، GRI 2.11 (۴۹ گونه و ۲۷۹ واکنش شیمیایی)، GRI 3.0 (۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش شیمیایی)، اسکنتال (۲۷ گونه و ۷۷ واکنش شیمیایی) و مکانیزم ۱۷ گونه و ۵۸ واکنش شیمیایی، استفاده شده است. در این مقاله همچنین اثرات نسبت هوای اضافی و تغییر مکانیزم، برای دو حالت تخلخل ثابت و تخلخل متغیر پیوسته مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده مطابقت نسبتاً خوبی با کارهای دورست و تریمیس دارند که این مطلب در اشکال ۳ و ۴ نشان داده شده است.



شکل ۳- توزیع دمای بدست آمده از مکانیزم GRI-3.0 و نتایج تجربی در مشعل محیط متخلخل با نسبت هوای اضافی ۱٫۵



شکل ۴- توزیع دمایی حاصل از روش‌های عددی و نتایج تجربی با استفاده از مکانیزم ۱۷ جزئی با نسبت هوای اضافی ۱٫۵

هدف از این مکانیزم ارائه توصیف خوبی از اکسیداسیون متان است که واکنش‌های نیتروژن در دمای بالا (بیشتر از ۱۵۰۰) را دارد، ولی برای احتراق مخلوط غلیظ مناسب نمی‌باشد. در مقایسه با مکانیزم کامل مهم‌ترین ساده‌سازی صورت گرفته، صرف‌نظر کردن از واکنش  $C_2H_2$  - هیدروکربن است ولی مهم‌ترین گام واکنش برای اکسیداسیون شیمیایی متان و نیتروژن را در بردارد.

### مکانیزم ۱۷ جزئی

مکانیزم ۱۷ جزئی که از مکانیزم کامل به دست می‌آید دارای ۵۸ واکنش شیمیایی بوده و نتایج نزدیکی را به مکانیزم GRI-3.0 ارائه می‌دهد.

### ۷- بررسی استقلال از مش بندی

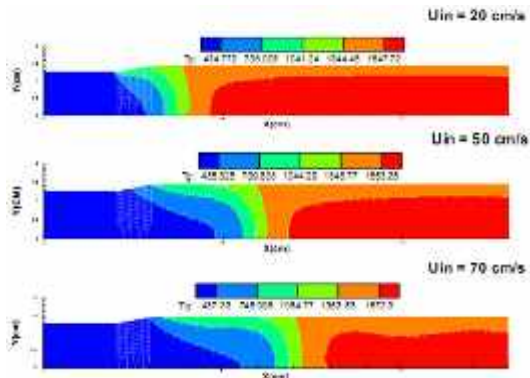
در این مقاله برای بررسی استقلال از شبکه، مش بندی‌های مختلفی را مورد بررسی قرار دادیم و نتایج نشان داد که تغییرات متغیرها با ریز تر شدن شبکه از مش  $26 \times 26$  بسیار ناچیز و در حدود ۰٫۴٪ خواهد بود در حالی که مدت زمان انجام محاسبات (جدول ۱) با ریز تر شدن شبکه افزایش می‌یابد. به همین دلیل کلیه نتایج محاسبات براساس مش ذکر شده گزارش شده است.

### جدول ۱- مدت زمان انجام محاسبات مربوطه با توجه به مش-

مش	بندی‌های متفاوت				
	$26 \times 26$	$26 \times 26$	$13 \times 26$	$26 \times 16$	$13 \times 16$
دما	Tg,Ts	Tg,Ts	Tg,Ts	Tg,Ts	Tg,Ts
زمان همگرایی	۹۲۰	۸۰۲	۶۷۲	۴۳۳	۳۷۵
Min					

### صحت سنجی نتایج

شکل ۳ نمودار مربوط به دمای گاز و ماتریس جامد را برای مکانیزم GRI-3.0 در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده از دراست و تریمیس [۲۲] نشان می‌دهد. همانگونه که مشاهده می‌شود بین نتایج به دست آمده از مدل سازی عددی و نتایج آزمایشگاهی تطابق قابل قبولی وجود دارد. در شکل ۴ نمودار مربوط به دمای گاز برای مکانیزم ۱۷ جزئی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود در این نمودار نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از نرم افزار فلوئنت نیز آورده شده است. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از این نرم افزار به نتایج تجربی نزدیک‌تر می‌باشد. علت آن را می‌توان در نظر گرفتن دمای متغیر در طول مشعل برای دیواره در نظر گرفت. علت این اختلاف در بین مقادیر آزمایشگاهی و نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی را می‌توان در اختلاف بین بعضی از خواص مواد متخلخل مانند ضریب انتقال گرمای حجمی، رسانش گرمایی و همچنین

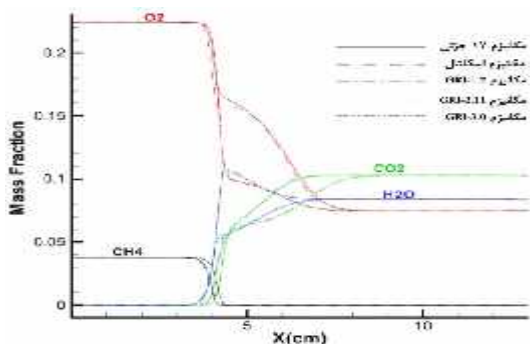


شکل ۷- کانتورهای دمای گاز برای مقادیر مختلف سرعت‌های ورودی

### سینتیک شیمیایی

در این مقاله برای مدل کردن احتراق مخلوط پیش آمیخته‌ی سوخت متان- هوا، از پنج مکانیزم استفاده شده است که عبارتند از: مکانیزم GRI.1.2، مکانیزم GRI.2.11، مکانیزم GRI.3.0، مکانیزم اسکلتال و مکانیزمی شامل ۱۷ گونه و ۵۸ واکنش شیمیایی.

شکل ۸ نمودار مربوط به کسر جرمی گونه‌های  $CO_2$ ،  $O_2$ ،  $CH_4$ ،  $H_2O$  را برای چند مکانیزم احتراقی مختلف نشان می‌دهد. همان‌طوری که مشاهده می‌شود تفاوت بین این مکانیزم‌ها بسیار ناچیز می‌باشد اما بین مکانیزم‌های GRI.1.2، GRI.2.11، GRI.3.0 و مکانیزم‌های اسکلتال و ۱۷ جزئی تفاوت‌هایی مشاهده می‌شود که از آن جمله می‌توان به این نکته اشاره نمود که در پیش‌بینی میزان  $H_2O$  در مکانیزم‌های اسکلتال و ۱۷ جزئی، واکنشی برای برگشت  $H_2O$  وجود ندارد در حالی که در مکانیزم‌های دیگر، واکنش‌های برگشت نیز در نظر گرفته شده است. این تفاوت در بقیه گونه‌ها نیز به ندرت دیده می‌شود، اما در حالت کلی مکانیزم‌های GRI.1.2، GRI.2.11، GRI.3.0 دارای دقت تقریباً یکسان در پیش‌بینی کسر جرمی گونه‌های شیمیایی و مکانیزم‌های اسکلتال و ۱۷ جزئی دارای رفتار مشابه یکدیگر می‌باشند.

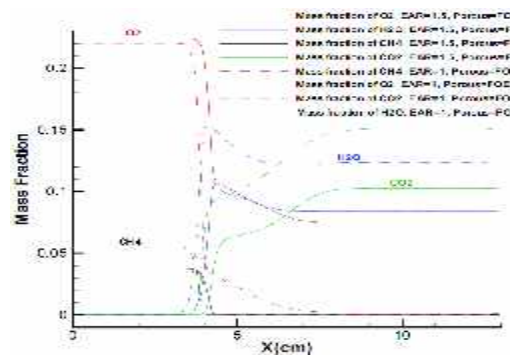


شکل ۸- کسر جرمی گونه‌ها با مکانیزم‌های متفاوت

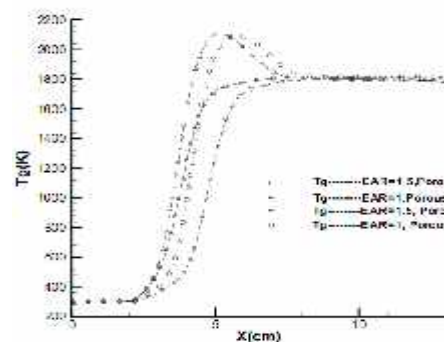
شکل ۵ نمودار مربوط به کسر جرمی گونه‌های  $CO_2$ ،  $O_2$ ،  $CH_4$ ،  $H_2O$  را برای دو حالت نسبت هوای اضافی ۱/۵ و ۱ نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت هوای اضافی، جبهه‌ی شعله به سمت پایین‌دست جریان حرکت می‌کند. و همچنین میزان انتشار  $CO_2$  در حالت استوکیومتری، مقدار بیشتری را نسبت به حالتی که از ۵۰٪ هوای اضافی استفاده می‌کنیم، از خود نشان می‌دهد.

شکل ۶ نمودار دمای گاز را برای دو حالت تخلخل ثابت و متغیر و برای نسبت‌های هوای اضافی ۱ و ۱/۵ نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با تغییر پروفیل تخلخل دمای بیشینه کاهش پیدا می‌کند و از طرفی با افزایش نسبت هوای اضافی چون نرخ جریان افزایش پیدا نموده و در نتیجه مواد متخلخل در منطقه‌ی بالادست بهتر خنک می‌شوند، سبب می‌شود که دمای بیشینه کاهش پیدا کند.

شکل ۷ کانتورهای دمای گاز را برای مقادیر مختلف سرعت ورودی نشان می‌دهد همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش سرعت ورودی دمای گاز افزایش پیدا می‌کند. با افزایش سرعت ورودی چون بعضی از واکنش‌های برگشت گرماگیر، فرصت کافی برای وقوع پیدا نمی‌کنند در نتیجه دمای گاز در خروجی از مشعل افزایش پیدا خواهد نمود. در اشکال به خوبی دیده می‌شود که با افزایش سرعت ورودی جبهه‌ی شعله به سمت پایین‌دست جریان حرکت می‌کند.



شکل ۵- کسر جرمی گونه‌های  $CH_4$ ،  $O_2$ ،  $CO_2$ ،  $H_2O$  برای نسبت‌های هوای اضافی ۱ و ۱/۵

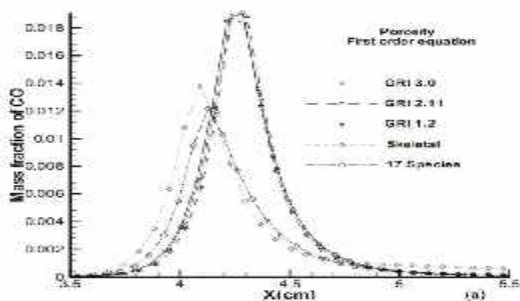


شکل ۶- دمای گاز برای دو حالت تخلخل ثابت و متغیر و نسبت‌های هوای اضافی ۱ و ۱/۵



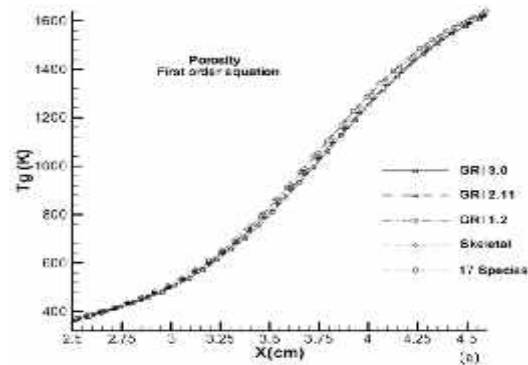
GRI.2.11, GRI.3.0 و هم‌چنین نزدیکی مقادیر پیش‌بینی شده برای مکانیزم‌های اسکلتال و ۱۷ جزئی به خوبی دیده می‌شود.

شکل ۱۲ نمودار دمای گاز را برای مقادیر مختلف ضریب انتقال گرمای حجمی در ناحیه‌ی احتراقی و برای دو حالت تخلخل ثابت و متغیر نشان می‌دهد. با افزایش ضریب انتقال گرمای حجمی چون مقدار انتقال حرارت از ناحیه‌های پایین دست جریان به مناطق بالادست جریان افزایش می‌یابد دمای بیشینه افزایش می‌یابد. تغییر پروفیل تخلخل سبب کاهش دمای بیشینه در مشعل خواهد شد و همانطور که مشاهده می‌شود میزان این کاهش دما برای مقادیر پایین تر ضریب انتقال گرمای حجمی بیشتر خواهد بود.



شکل ۱۰- توزیع دمای گاز برای مکانیزم‌های احتراقی متفاوت

شکل ۱۱ نمودار مربوط به کسر جرمی گونه‌ی  $NO_x$  را نشان می‌دهد. با توجه به شکل میزان تولید این آلاینده با استفاده از مکانیزم اسکلتال بسیار بیشتر از دو مکانیزم دیگر خواهد بود و میزان انتشار آن نیز با توجه به این مکانیزم برابر صفر می‌باشد در حالی که مکانیزم‌های GRI.2.11، GRI.3.0 میزان خروجی آن را مقداری بیشتر از صفر پیش‌بینی می‌کنند. علت این امر را می‌توان در عدم پیش بینی صحیح واکنش‌های مربوط به گونه‌ی NO در مکانیزم اسکلتال دانست.



شکل ۱۱- تغییرات  $CO$  در مکانیزم‌های احتراقی متفاوت

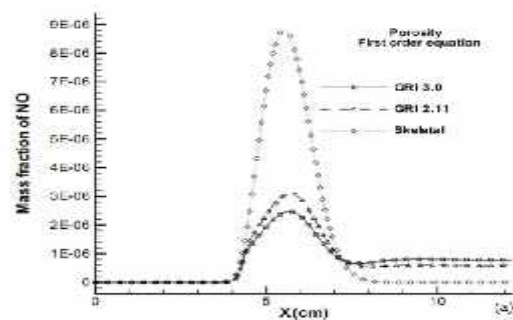
شکل ۱۲ تأثیر ضریب انتقال گرمای حجمی در ناحیه‌ی احتراقی بر روی دمای گاز برای دو حالت تخلخل ثابت و متغیر می‌کند.

شکل ۱۲- تأثیر ضریب انتقال گرمای حجمی در ناحیه‌ی احتراقی بر روی دمای گاز برای دو حالت تخلخل ثابت و متغیر

### ۹- نتیجه‌گیری

\* با افزایش نسبت هوای اضافی (EAR)، جبهه‌ی شعله به سمت پایین دست جریان حرکت کرده و بیشینه دما کاهش پیدا می‌کند.

\* با افزایش سرعت ورودی، جبهه‌ی شعله به سمت پایین دست جریان منتقل می‌شود و دمای بیشینه کاهش می‌یابد.



شکل ۱۲- تغییرات  $NO_x$  در مکانیزم‌های متفاوت

شکل ۱۱ نمودار شکل ۱۱ کسر جرمی گونه‌ی  $CO$  را نشان می‌دهد. با توجه به شکل بیشتر میزان  $CO$  تولیدی در نزدیکی نواحی می‌باشد که در آن جبهه‌ی شعله تشکیل می‌شود. در این شکل نزدیک بودن مقادیر پیش‌بینی شده برای مکانیزم‌های GRI.1.2،



Media by EGM (Entropy Generation Minimization)" Energy 35 (2010) 3483-3500, 2 June 2010.

[10] Donald A. Neild and Adrian Bejan, "Convection in Porous Media", Third Edition.

[11] Durst, F., Trimis, D., "Compact Low Emission Combustion Reactors with Integrated Heat Exchanger Using Porous Medium Combustion" in: Proceedings of the first European Conference on Small Burner Technology and Heating Equipment, Zurich, Switzerland, September 25-26, 1996.

[12] Malico, I, Zhou, X, Y, and Pereira, J, C, F, "Two-Dimensional Numerical Study on Combustion and Pollutants Formation in Porous Burner," Combust, Sci and Tech, 152, pp.57-59, 2000.

[13] Vafai, K, Handbook of Porous Media, Taylor & Francis Group, LLC, 2005.

[14] Nemoda, S, Trimis, D, and Zivkovich, G, "Numerical Simulation of Porous Burners and Hole Plate Surface Burners" 8, No. 1, pp.3-17, 2004.

[15] Kee, R, J, Rupley, F, M, and Miller, J, A, The Chemkin Thermodynamic Data Base. Sandia National Laboratories. Rept. SAND-8215B, 1992.

[16] Brown, P. N., Byrne, G. D., and Hindmarsh, A. C., "VODE: a Variable Coefficient ODE Solver," SIAM J. Sci. Stat. Comput., 10, pp. 1038-1051, 1989

[17] Malico, I, Zhou, X, Y, and Pereira, J, C, F, "Two-dimensional Numerical Study on Combustion and Pollutants formation in Porous Burner," Combust, Sci and Tech, 152, pp.57-59, 2000.

[18] Kee, R, J., Dixon-LEWIS, G., Warnatz, J, Coltrin, M, E, and miller, J, A, "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas Phase Multi-Component Transport Properties," Sandia National lab. Report SAND 86-8246, 1996.

[19] Glarborg, P., Lilleheie, N.I., Byggstoyl, S., Magnussen, B, F., Kilpinen, P, and Hupa, M., "A Reduced Mechanism for Nitrogen Chemistry in Methane Combustion," 24<sup>th</sup> Symposium (international) on Combustion, The Combustion Institute, 24, No. 1, pp.889-890, 1992.

[20] Smith, G, P., Golden, D, M., Frenklach, M., Moriarty, N, W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C, T., Hanson, R, K., Song, S., Gardiner Jr, W, C., Lissianski, V., and Qin, Z., Available at :<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech>.

[21] Kaufman, F., "Chemical Kinetics and Combustion : Indicate Paths and Simple steps," Nineteenth Symposium (International) on Combustion, the Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp.1-10, 1982.

[22] Durst, and Trimis, D., "Compact Porous Medium Burner and Heat Transfer Exchanger for Household Applications" Ec Project Report, Contact no. JOEC-CT95-0019, 1996.

\* هنگامی که از تخلخل متغیر پیوسته استفاده می شود نتایج ناشی از هر ۵ مکانیزم شیمیایی مورد استفاده تقریباً یکسان خواهد بود.

\* با توجه به نزدیک بودن نتایج به دست آمده می شود از مکانیزم GRI.2.11 که تعداد واکنش‌های در نظر گرفته در آن از مکانیزم GRI.3.0 کمتر است، استفاده نمود و به این طریق در وقت و هزینه انجام محاسبات صرفه جویی کرد.

\* با افزایش ضریب انتقال گرمای حجمی، دمای بیشینه افزایش می یابد و تغییر پروفیل تخلخل از حالت ثابت به متغیر پیوسته، سبب کاهش دمای بیشینه در مشعل خواهد شد و همانطور که مشاهده می شود میزان این کاهش دما برای مقادیر پایین تر ضریب انتقال گرمای حجمی بیش تر خواهد بود.

### مراجع

[1] Yoshizawa, Y., Sasaki, K., and Echigo, R., "Analytical Study of the Structure of Radiation Controlled Flame", Int. J- Heat Mass Transfer 31, 311-319 1988.

[2] 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, 457-466 1993.

[3] Zhou, X, Y., J. C. F Pereira, "Comparison of Four Combustion Models for Simulating the Premixed Combustion in Inert Porous Media", Fire and Materials, 22, 187-197 1998.

[4] Malico, I. "Two-dimensional Numerical Study and pollutants Formation in P.M." Combust. Sci. and Tech, vol. 152, pp 57-79, 1999.

[5] Chung-jen Tseng. "Effect of Hydrogen Addition on Methane Combustion in a Porous Medium Burner" International Journal of Hydrogen Energy 27, pp.699-707, 2002.

[6] Mishra S.C., Steven M., Nemoda S., Talukdar P., Trimis D., Durst F., "Heat Transfer Analysis of a Two-Dimensional Rectangular Porous Radiant Burner". International Communication in Heat and Mass Transfer 33, pp.467-474, 2006.

[7] Lari K., Ganjalikhannassab S.A. "Transient Thermal Characteristics of Porous Radiant burners". Iranian Journal of Science and Technology, transaction b:engineering Vol.31, Number b4, 407-420, 2007.

[8] Hossainpour, S & Haddadi, B. "Numerical Study of the Effects of Porous Burner Parameters on Combustion and Pollutants Formation." WCE, pp.1505-1509, April, 21, 2008.

[9] Bidi. M, Nobari. M.R.H, Saffar Avval. M. "A numerical Evaluation of Combustion in Porous