



بررسی انتشار آلاینده ها در سیستم گرمایشی جریان متقابل نفوذی با مدل سازی واکنش های چند مرحله ای در نرم افزار OpenFoam

علی عدالتی نژاد¹، سید ابوزر فناهی^{2*}، جواد خادم³

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

3- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

* بیرجند، صندوق پستی 97175376، sab.famech@birjand.ac.ir

چکیده

بررسی ساختار شعله یک سیستم گرمایشی از نقطه نظر دمایی، نرخ مصرفی گونه ها و خروج آلاینده ها امری لازم و ضروری است. در این مقاله، سیستم گرمایشی با شعله نفوذی جریان متقابل متان هوا به کمک نرم افزار این فوم مورد بررسی حرارتی قرار گرفته است. برای این مدل سازی از مکانیزم چند مرحله ای GRI3.0 در 324 مرحله با 53 گونه رادیکالی استفاده شده است. در این حل همگرایی حالت های ناپایا با تقریب 10^{-6} برای زمان و باقیمانده پارامترهای فیزیکی در نظر گرفته شده است. مقایسه نتایج حل حاضر با نتایج آزمایشگاهی در حالت مشابه انطباق خوبی با حداکثر خطای 21% را نشان می دهد. نتایج همچنین نشان می دهد که در این نوع از سیستم های گرمایشی میزان تولید آلاینده های کربنی که برای سلامت انسان مضر هستند نسبتاً بحرانی می باشند.

کلید واژگان: جریان متقابل، شعله نفوذی، احتراق متان هوا.

The investigation of pollutants emission on counterflow diffusion heating system with multi-step reactions modeling using OpenFoam software

Ali Edalati nejad, Seyyed Abouzar Fanaei*, Javad Khadem

Department of Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran

* P.O.B. 97175376 Birjand, Iran, sab.famech@birjand.ac.ir

ABSTRACT

It is necessary to study the flame structure from the approach of its temperature, species consumption rate and pollutants emission. In this paper, the combustion of Methane/Air was investigated with the counterflow diffusion flame model using OpenFoam software. In order to model the problem, Multi-step GRI3.0 mechanism in 324 steps and 53 radical species was used. In this solution, the convergence of unsteady states was considered 10^{-6} for each time step and residual physical parameters. With the maximum error of 21%, it is an acceptable agreement in the comparison between numerical model and experimental data in the similar state. The results show that in this type of heating system, the amount of the production of carbon emissions that are harmful to human's health are almost critical.

Keywords: Counterflow, Diffusion flame, Combustion of methane-air.

شود.

1- مقدمه

یامائوکا و همکاران [1] بر روی ساختار و خاموشی شعله نفوذی جریان متقابل متان و متان خیلی رقیق با هوا تحقیق کردند. آن ها دریافتند افزایش استحکام شعله با نسبت هم آروزی مخلوط خیلی رقیق به وسعت ناحیه دما بالا و افزایش دمای شعله، نسبت داده می شود. فوز و همکاران [2] انتشار اکسیدهای نیتروژن در جریان ناهمسوی نفوذی متان-هوا در دماهای بالا را مورد بررسی قرار دادند. آن ها دریافتند که غلظت اکسیدهای نیتروژن، به وسیله سیستم نمونه برداری را نمی توانند به صورت جداگانه به دست آورند، اما مقادیر مجموع اندازه گیری شده NO_x ($\text{NO} + \text{NO}_2$) به اندازه کافی با مقادیر پیش بینی شده مطابقت داشت. سان و همکاران [3] به مطالعه عددی تاثیرات فشار و رقیق سازی با هوا روی تولید NO در شعله ی نفوذی جریان متقابل متان و هوای دما بالا پرداختند. آن ها دریافتند افزایش فشار، با کاهش انتشار NO، دمای بالا و با هوا رقیق شده همراه است. و به این معناست که ترکیب مناسب رقیق سازی با هوا و فشار، توان تولیدی و انتشار

استفاده از هوای پیش گرم شده (به دمایی بالاتر از دمای اتمسفر)، برای بازیابی حرارت کاربرد قابل توجهی در صنایع گوناگون دارد که از آن جمله می توان به استفاده از آن در توربین های گازی و موتورهای دیزل اشاره کرد. وقتی که دمای هوا بالاتر می رود، نرخ تعدادی از واکنش های رادیکالی اولیه افزایش می یابد، در حالی که نرخ سایر واکنش های کاهش می یابد. این تغییرات بر ساختار شعله (چگونگی توزیع گونه ها و درجه حرارت در سرتاسر شعله) و انتشار آلاینده ها (دوده، منوکسید کربن و منواکسید نیتروژن) تاثیر دارد.

استفاده از هوای پیش گرم شده به خصوص در شعله های نفوذی (دیفیوژن) کاربرد بسیاری داشته که برای مدل سازی این مسایل روش های گوناگونی ارائه شده است. شعله های نفوذی به دو دسته اصلی با جریان همسو و ناهمسو تقسیم بندی می شوند که در نوع ناهمسوی این شعله ها به طور معمول از شعله ای با جریان متقاطع استفاده می شود. برای بررسی چنین مسالهای از روش های مختلف مدل سازی و روش آزمایشگاهی استفاده می -

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

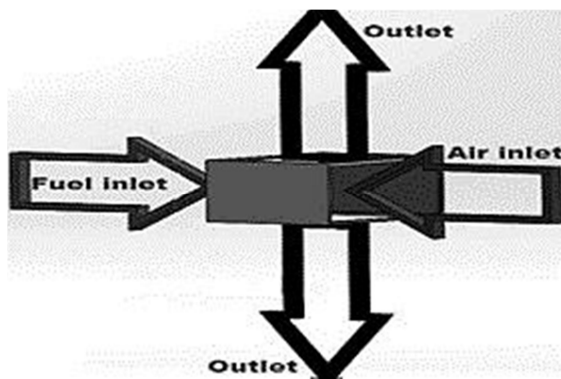


Fig. 1 The schematic model of diffusion flame at heat generator accessories

شکل 1 نمای شماتیک شعله نفوذی تجهیزات گرمایشی

جرم، مومنتوم، انرژی و گونه‌ها می‌باشند که به صورت جفت با یکدیگر حل می‌شوند. از آنجایی که جریان‌های احتراقی معمولاً آشفته هستند از معادلات مذکور متوسط‌گیری زمانی یا مکانی گرفته می‌شود که در این صورت معادلات به شکل زیر بازنویسی می‌شوند:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu_{eff} [\bar{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{S}_{kk}]) \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{Y}_{kk}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu_{eff} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j}) + \bar{\omega}_k \quad (3)$$

$$k = 1, \dots, N \quad (4)$$

در این معادلات u_i مولفه‌ی سرعت در راستای i ، فشار p ، چگالی، ρ ، چگالی، Y_k کسر جرمی گونه‌ی k ام و h_s آنتالپی محسوس می‌باشند. همچنین μ_{eff} لزجت موثر (مجموع لزجت دینامیکی و لزجت اغتشاشی)، α_{eff} ضریب نفوذ حرارتی موثر (مجموع نفوذ حرارتی مولکولی و اغتشاشی)، δ_{ij} دلتای کرونکر و S_{ij} تانسور نرخ کرنش می‌باشند که به صورت رابطه (5) تعریف می‌شود:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (5)$$

و جمله‌ی چشمه $\bar{\omega}_k$ و $\bar{\omega}_T$ که در معادلات ظاهر شده حاصل از احتراق هستند و به ترتیب نرخ متوسط واکنش و نرخ متوسط گرمای حاصل از احتراق می‌باشند.

4- نتایج

در این حل همگرایی حالت‌های ناپایا با تقریب 10^{-6} برای زمان و باقیمانده پارامترهای فیزیکی در نظر گرفته شده است. در هر حالت ناپایا، محاسبات تا زمانی که به حالت همگرایی برسد، ادامه داده می‌شود. برای این محاسبات، از حلگر ری اکتینگ فوم¹ نرم‌افزار این فوم² استفاده شده است. که در آن جفت سرعت- فشار با استفاده از ترکیب الگوریتم های پیرو³ (فشار ضمنی با تقسیم اپراتور) و سیمپل⁴ (روش نیمه ضمنی برای فشار - معادلات مرتبط)

NO را در کاربردهای صنعتی کنترل می‌کند. سونگ و همکاران [4] بر روی ساختار و محدوده‌ی خروج دوده در جریان متقابل شعله نفوذی اتان/متان-هوا در فشار یک تا پنج اتمسفر تحقیق کردند. آنها تطابق خوبی را بین داده‌های آزمایشگاهی و کار عددی برای پروفیل دما و غلظت گونه‌های عمده برای متان و اتان در شعله نفوذی، شاهد بودند. نیمان و همکاران [5] تاثیرات فشار را در شعله‌ی نفوذی متان هوا را بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که فشار تاثیر مهمی در نقاط بحرانی خاموشی در شعله‌های نفوذی سوخت‌های هیدروکربنی دارد. درجه حرارت شعله به‌عنوان یکی از متغیرهای قابل توجه که دوده‌ی انتشار یافته از شعله‌ی نفوذی را تحت تاثیر قرار می‌دهد، شناسایی شده است. گولدر و اسنلینگ [6] هوا و سوخت را تا دمای 623 کلون در جریان متقابل پروپان- هوا و هپتان- هوا در شعله‌ی نفوذی به منظور مطالعه تاثیر پیش گرم‌سازی روی تشکیل دوده‌ها، گرم کردند. اندازه‌گیری‌های آن‌ها نشان داد که کسر حجمی دوده به‌طور متوسط با دما افزایش می‌یابد (30% از دمای 300 تا 623 کلون). آکسلیم و لائو [7] دریافتند غلظت سوخت و دمای شعله با تولید دوده در شعله‌ی نفوذی جریان متقابل ارتباط نسبی دارد. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که در شعله‌ی نفوذی جریان متقابل تاثیر کاهش غلظت سوخت به‌صورت قابل توجهی بیشتر از درجه حرارت شعله است. دمای شعله بر روی تولید NO به میزان قابل توجهی تاثیر دارد. لیم و همکاران [8] دریافتند در محدوده‌ی شرایط دمایی 300 تا 560 کلون کسر مولی CH₄، O₂، CO₂ و N₂ به‌صورت تابع نسبت هم‌ارزی محلی و مستقل از پیش گرم کردن هوا، کاهش پیدا می‌کند. پوری و همکاران [9] به مقایسه عددی و تجربی ساختار شعله نفوذی جریان متقابل متان هوا پرداختند و دریافتند با افزایش نرخ کرنش، درجه حرارت کاهش می‌یابد. اسموک و همکاران [10] به مقایسه عددی و تجربی ساختار شعله نفوذی جریات متقابل متان رقیق- هوای رقیق پرداختند. آن‌ها بین اندازه‌گیری‌های تجربی و کار عددی تطابق بسیار خوبی را بجز برای گونه‌های H₂ و CO شاهد بودند.

هدف از پژوهش حاضر بررسی اثرات تغییر درجه حرارت هوا و سوخت ورودی در ساختار شعله است. برای حل معادلات حاکم بر این مسئله از نرم‌افزار این فوم استفاده شده که فرضیات به کار برده شده در این حل مطابق با مسئله موجود در مرجع [11] در نظر گرفته شده است.

2- مدل فیزیکی مساله و فرضیات

هندسه مسئله متشکل از یک محفظه مکعبی بوده که سوخت و هوا به ترتیب از سمت چپ و راست محفظه وارد شده و پس از اختلاط و واکنش از پایین و بالای محفظه خارج می‌شوند. نمایش این ساختار شعله در "شکل 1" نشان داده شده است.

مطابق "شکل 1"، جهت ورود سوخت و هوا به محفظه عمود بر سطح مقطع‌های ورودی فرض شده که همین فرض نیز در مورد خروجی‌های سوخت و هوا نیز در نظر گرفته می‌شود. همچنین جریان‌های ورودی سوخت و هوا به‌صورت یکنواخت بوده و عمق محفظه نیز در راستای محور Z در تمام نقاط آن به‌طور یکنواخت در نظر گرفته شده است. عرض دهانه‌ی ورودی سوخت و هوا برابر بوده و مقدار آن در دو حالت انتخاب شده برابر با 10 و 20.1 میلی‌متر است. فاصله بین ورودی هوا و سوخت نیز برابر با مقدار ثابت 15 میلی‌متر می‌باشد.

3- معادلات حاکم

معادلات حاکم بر جریان‌های احتراقی تراکم پذیر همان معادلات لحظه‌ای بقا

¹ ReactingFoam

² OpenFoam

³ PISO

⁴ SIMPLE

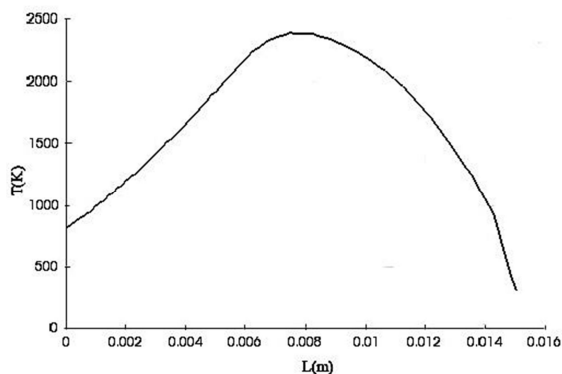


Fig. 3 Temperatures for the case, 10mm diameter of fuel and air inlet, 0.001 m/s initial velocity of fuel and air, and initial temperature for fuel 800 and air 300 K

شکل 3 منحنی تغییرات دما برحسب فاصله بین ورودی سوخت و هوا، برای اندازه دهانه ورودی 10 میلی‌متر، سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه و دمای اولیه سوخت 800 و هوا 300 کلوین

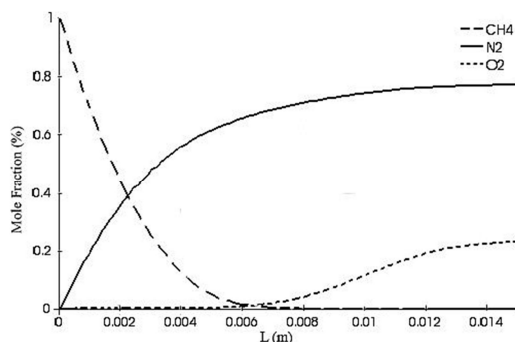


Fig. 4 The mole fraction of basic species for the case, 10mm diameter of fuel and air inlet, 0.001 m/s initial velocity of fuel and air, and initial temperature for fuel 800 and air 300 K

شکل 4 نمودار کسر مولی گونه‌های پایه برحسب فاصله بین ورودی سوخت و هوا، برای اندازه دهانه ورودی 10 میلی‌متر، سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه و دمای اولیه سوخت 800 و هوا 300 کلوین

محفظه در "شکل 6" آمده است. همان‌طور که در شکل مشخص است، ماکزیمم دمای شعله‌ی 2335 کلوین و محل آن در فاصله 7.5 میلی‌متری از محل ورود سوخت می‌باشد.

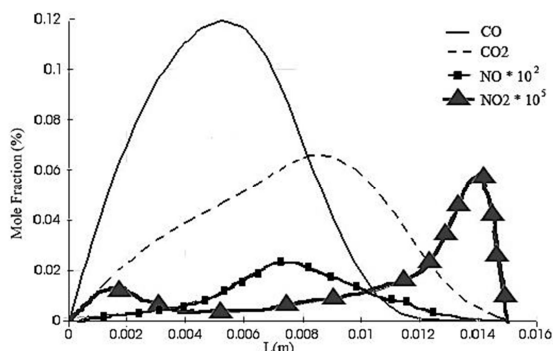


Fig. 5 The mole fraction of some radicals for the case, 10mm diameter of fuel and air inlet, 0.001 m/s initial velocity of fuel and air, and initial temperature for fuel 800 and air 300 K

شکل 5 نمودار کسر مولی برخی از رادیکال‌ها برحسب فاصله بین ورودی سوخت و هوا، برای اندازه دهانه ورودی 10 میلی‌متر، سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه و دمای اولیه سوخت 800 و هوا 300 کلوین

فراهم شده است. در حل این مسئله از مکانیزم GRI که شامل 324 واکنش و 53 گونه می‌باشد، استفاده شده است. برای حل نرم‌افزاری مساله از شبکه بندی مربعی استفاده شده که برای بررسی استقلال حل از تعداد نقاط انتخابی شبکه همواره حل‌ها در سه حالت به ترتیب با تعداد مش‌های پایه 1.5 و 2 برابر آن بررسی شده که تقریباً جواب‌ها انطباق خوبی داشته است. برای اعتبارسنجی این مساله جریان متقابل متان-هوا در شرایطی مشابه با [8]، دهانه 20.1 میلی‌متر فاصله ورودی سوخت و هوای 15 میلی‌متر، دمای سوخت 300، دمای هوا 560 کلوین و سرعت ورودی هوا و سوخت 0.52 و 0.7 متر بر ثانیه با نتایج گزارش شده مقایسه شده است که این مقایسه در "شکل 2" دیده می‌شود. همان‌طور که در شکل مشخص است نتایج عددی کار حاضر با نتایج آزمایشگاهی گزارش شده در مرجع [8]، تطابق نسبتاً خوبی با حداکثر خطای 14% برای گونه نیتروژن، 7% برای اکسیژن و 21% برای متان دارند.

برای بررسی و مقایسه خواص سیستم گرمایشی جریان متقابل شعله نفوذی با دهانه 10 میلی‌متر، سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه، مدل‌سازی شده‌اند. نمودار دمای مرکز محفظه در دمای اولیه سوخت 800 و هوا 300 کلوین در "شکل 3" نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشخص است، ماکزیمم دمای شعله‌ی 2381 کلوین و محل آن در فاصله 7.5 میلی‌متری از محل ورود سوخت می‌باشد.

نمودار کسر مولی گونه‌های پایه نیز برای حالت فوق در "شکل 4" گزارش شده است. گونه‌های پایه در شکل بالا با توجه به واکنش استوکیومتریک مشابه در حالت تک واکنشی انتخاب شده‌اند. همان‌طور که در شکل ملاحظه می‌شود، کسر مولی اکسیژن در فاصله 5.5 میلی‌متری از محل ورودی سوخت، صفر می‌شود در حالی که کسر مولی گونه متان در فاصله 7 میلی‌متر از ورودی سوخت صفر شده است.

در "شکل 5" نمودار کسر مولی برخی رادیکال‌ها نیز برای همان حالت گزارش شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود، کسر مولی مونواکسیدکربن از سایر موارد بیشتر و بعد از آن دی‌اکسیدکربن بیشترین مقدار را دارد. که این امر نشان می‌دهد در این سیستم گرمایشی میزان تولید آلاینده‌های کربنی که برای سلامت انسان مضر هستند نسبتاً بحرانی می‌باشند. در مقاله حاضر، جریان متقابل شعله نفوذی با فاصله دهانه سوخت و هوا 10 میلی‌متر و سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه و دمای اولیه سوخت 300 و هوا 560 کلوین نیز مدل‌سازی شده که نمودار دمای مرکز

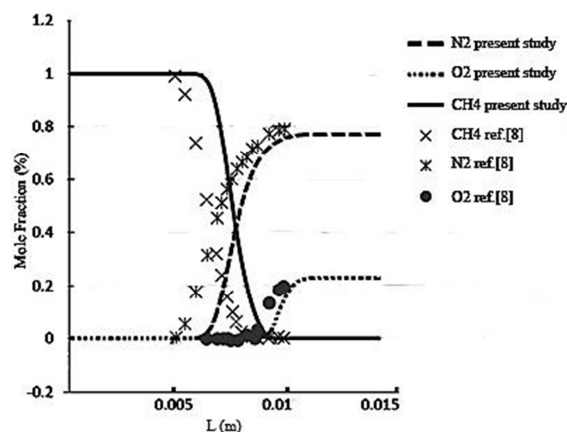


Fig. 2 Comparison between the presented data and published experimental data [8]

شکل 2 مقایسه بین داده‌های ارائه شده با نتایج گزارش شده در مرجع [8]

6- مراجع

- [1] I. Yamaoka, H. Tsuji, Y. Harigaya, Extinction and structure of Methane/very lean Methane-Air counterflow diffusion flames, *Twenty-First Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1837-1843, 1986.
- [2] R. Fuse, H. Kobayashi, Y. Ju, K. Maruta, T. Niioka, NOx emission from high-temperature air/methane counterflow diffusion flame, *Thermal Sciences*, Vol. 41, pp. 693-698, 2002.
- [3] C. H. Sohn, I. M. Jeong, S. H. Chung, Numerical study of the effects of pressure and air-dilution on no formation in laminar counterflow diffusion flames of methane in high temperature air, *Combust. Flame*, Vol. 130, pp. 83-93, 2002.
- [4] C. J. Sung, B. Li, H. Wang, C. K. Law, Structure and sooting limits in counterflow Methane/Air and propane/Air diffusion flames from 1 to 5 atmospheres, *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, pp. 1523-1529, 1998.
- [5] U. Niemann, K. Seshadri, F. A. Williams, Methane, ethane, and ethylene laminar counterflow diffusion flames at elevated pressures: Experimental and computational investigations up to 2.0 MPa, *Combustion and Flame*, Vol. 161, pp. 138-146, 2014.
- [6] O. I. Gülder, D. R. Snelling, Formation and Temperature of Soot Particles in Laminar Diffusion Flames with Elevated Temperatures, *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 1509, 1990.
- [7] I. Glassman, P. Yaccarino, The Temperature Effect in Sooting Diffusion Flames, *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 1175, 1981.
- [8] Lim, J., Gore, J., Viskanta, R., A Study of the Effects of Ai Preheat on the Structure of Methane/Air Counterflow Diffusion Flames, *Combustion and Flame*, Vol. 121, pp. 262-274, 2000.
- [9] I. K. Puri, K. Seshadri, M. D. Smooke, D. E. Keys, A Comparison Between Numerical Calculations and Experimental Measurements of the Structure of a Counterflow Methane-Air Diffusion Flame, *Combustion Science and Technology*, Vol. 56, pp. 1-12, 1987.
- [10] M. D. Smooke, I. K. Puri, K. Seshadri, A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air, *Twenty-first Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, pp. 1783-1792, 1986.
- [11] K. Kuwana, S. Kato, A. Kosugi, T. Hirasawa, Y. Nakamura, Experimental and theoretical study on the interaction between two identical micro - slot diffusion flames: Burner pitch effects, *Combustion and Flame*, Vol. 165, pp. 346-353, 2016.

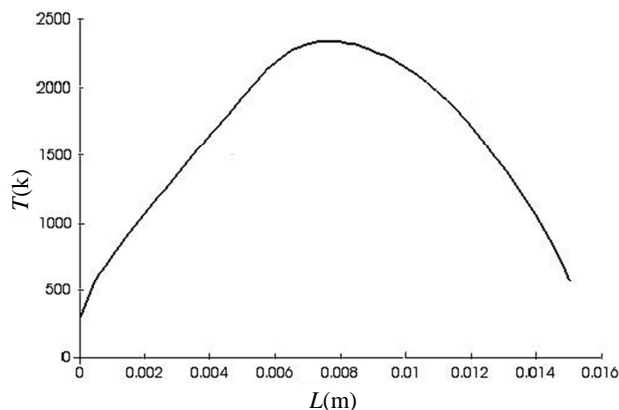


Fig. 6 Temperatures for the case, 10mm diameter of fuel and air inlet, 0.001 m/s initial velocity of fuel and air, and initial temperature for fuel 300 and air 560 K.

شکل 6 منحنی تغییرات دما برحسب فاصله بین ورودی سوخت و هوا، برای اندازه دهانه ورودی 10 میلی‌متر، سرعت ورودی هوا و سوخت 0.001 متر بر ثانیه و دمای اولیه سوخت 300 و هوا 560 کلوین

5- جمع‌بندی

- نتایج عددی کار حاضر با نتایج آزمایشگاهی تطابق نسبتاً خوبی با حداکثر خطای 14% برای گونه نیتروژن، 7% برای اکسیژن و 21% برای متان دارند.
- مدل‌سازی جریان برای دو حالت دمایی سوخت هوای 300-800 و 300-560 نتایج تقریباً مشابهی به لحاظ انتشار آلاینده‌ها نشان می‌دهد اما پیشینه‌ی دما که برای که برای کارکرد این سیستم گرمایشی مهم می‌باشد در حالت اول بزرگتر از حالت دوم خواهد بود.
- در این سیستم گرمایشی تولید مونواکسیدکربن بیشتر از سایر آلاینده‌ها بوده که این امر نشان می‌دهد در این نوع سیستم گرمایشی میزان تولید آلاینده‌های کربنی که برای سلامت انسان مضر هستند نسبتاً بحرانی می‌باشند.