



Comparison of DRM22 and GRI3.0 Combustion Mechanisms in Creating Flameless Combustion in a Lab-Scale Furnace

Mohamad Amin Zamani¹, Mohamad Hasan Saidi^{2*}

¹ PhD candidate in mechanical engineering, Sharif University of Technology

² Professor in mechanical engineering, Sharif University of Technology

Received: 11 Jan 2023

Accepted: 17 May 2023

Abstract

With the progress of science and technology, new processes were created in combustion, the most important goal of which was to optimize fuel consumption, increase efficiency, and specifically reduce the amounts of gaseous pollutants (such as nitrogen oxides and carbon monoxide). One of these new technologies is flameless combustion, which is based on the preheating of fuel and air and the dilution of oxygen in the air with the recirculation of combustion gases to create a proper mixing of the reactants. In the present study, the flameless combustion of methane gas is simulated in a laboratory combustion chamber. Its results are compared in two modes of using DRM22 (as a reduced mechanism) and GRI3.0 (as a complete mechanism). The results show that the mentioned mechanisms are able to calculate the distribution of temperature and chemical species with an error of 1.66% and 4.7% respectively, and with good accuracy compared to the experimental results. In the case of NOX, despite the 26% difference between the two mechanisms, the GRI3.0 mechanism calculated its concentration slightly more than expected. On average, the DRM22 mechanism is closer to the experimental results and has less calculation time.

Keyword: Flameless Combustion, Fuel Consumption, Recirculation of Combustion Gases Gaseous Pollutants, Combustion Mechanisms.

* saman@sharif.edu

Please Cite This Article Using:

Zamani, M.A., Saidi, M.H, "Comparison of DRM22 and GRI3.0 Combustion Mechanisms in Creating Flameless Combustion in a Lab-Scale Furnace, Vol. 18, No. 81, pp. 89-104, In Persian, (2023).

مقایسه مکانیزم‌های احتراقی DRM22 و GRI3.0 در ایجاد احتراق بدون شعله در یک کوره آزمایشگاهی

محمد امین زمانی^۱، محمد حسن سعیدی^{۲*}

^۱ دانشجوی دکتری تخصصی، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

^۲ استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

دریافت: ۱۴۰۱/۱۰/۲۱ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۲۷

چکیده

با پیشرفت علوم و توسعه فناوری، فرایندهای نوینی در حوزه احتراق بوجود آمدند که مهم‌ترین هدف آن‌ها بهینه سازی مصرف سوخت، افزایش بازده و خصوصاً کاهش میزان آلاینده‌های گازی (نظیر اکسیدهای نیتروژن و مونواکسید کربن) بوده است. یکی از این فناوری‌های جدید، فرایند احتراق بدون شعله می‌باشد که بر پایه پیش گرمایش سوخت و هوا و رقیق سازی اکسیژن موجود در هوا به کمک بازچرخانی گازهای احتراقی به منظور ایجاد اختلاط مناسب واکنش‌دهنده‌ها بنا شده است. در پژوهش حاضر، احتراق بدون شعله گاز متان در یک محفظه احتراق آزمایشگاهی شبیه‌سازی شده و نتایج آن در دو حالت استفاده از مکانیزم‌های احتراقی DRM22 (مکانیزم کاهش یافته) و GRI3.0 (مکانیزم کامل) مقایسه شده است. نتایج حاکی از آن است که مکانیزم‌های ذکر شده قادر هستند توزیع دما و گونه‌های شیمیایی را به ترتیب با خطای ۱/۶۶ و ۴/۷ درصد و با دقت خوبی نسبت به نتایج تجربی محاسبه کنند. در مورد NO_x نیز با وجود ۲۶ درصد اختلاف بین دو مکانیزم، مکانیزم GRI3.0 کمی بیشتر از حد انتظار غلظت آن را محاسبه می‌نمود. به صورت متوسط مکانیزم DRM22 به نتایج تجربی نزدیکتر بوده و زمان محاسبات کمتری دارد.

کلمات کلیدی: احتراق بدون شعله، مصرف سوخت، بازچرخانی گازهای داغ احتراقی، آلاینده‌های گازی، مکانیزم‌های احتراقی.

* saman@sharif.edu

۱- مقدمه

احتراق به عنوان نوعی واکنش شیمیایی تعریف می‌شود که در آن مقدار مشخصی از سوخت و هوا، به عنوان واکنش دهنده‌ها، با یکدیگر ترکیب شده و محصولات احتراقی به صورت ترکیب‌های مختلف شیمیایی به همراه آزادسازی مقدار زیادی انرژی به صورت نور و حرارت بوجود می‌آید. انتشار مقادیر زیادی از آلاینده‌های گازی نظیر اکسیدهای نیتروژن (NO_x)، مونواکسید کربن (CO) و هیدروکربن‌های نسوخته (HC) و اثرات سوء بر محیط زیست نظیر گرمایش بی‌رویه زمین با انتشار گاز گلخانه‌ای دی اکسید کربن (CO_2) از تاثیرات منفی احتراق سوخت‌های فسیلی است؛ بنابراین لازم است روش‌های نوینی در افزایش بازده و کیفیت فرایند احتراق بوجود آیند که به نمونه‌هایی از آن در ادامه اشاره می‌شود: مشعل‌های چرخشی^۱ و مشعل‌های سوخت - اکسیژن^۲ با افزایش دمای شعله و پایداری احتراق باعث کاهش آلاینده‌ی خصوصاً گونه‌ی NO_x می‌شوند. فناوری احتراق مرحله‌ای^۳ بوسیله ایجاد سوخت رقیق و اکسیژن رقیق در ناحیه احتراق، آلاینده NO_x را همزمان با شدت احتراق و بازده کاهش می‌دهد. به طور مشابه، فناوری خنک کردن شعله^۴، انتشار آلاینده NO_x را با کاهش دمای منطقه واکنش، کاهش می‌دهد این امر ممکن است سبب ناپایداری شعله شده و با اختلاط ناقص سوخت و هوا، انتشار آلاینده CO را افزایش دهد.

یکی از روش‌های نوین احتراق در این حوزه، فناوری احتراق بدون شعله می‌باشد. این پدیده برای نخستین بار در سال ۱۹۸۹ در آزمایش‌های وونینگ^۵ مشاهده شد. طی آزمایش‌های صورت گرفته بر روی یک نمونه مشعل احیا کننده با دما $1000^\circ C$ و نیز هوای پیش گرم $650^\circ C$ ، مشاهده شد سوخت بدون انتشار شعله و به طور کامل مصرف شد و طی آن احتراق پایدار و ملایم همراه با مقدار ناچیزی مونواکسید کربن و اکسیدهای نیتروژن در دودکش مشاهده شد [۱].

برای دستیابی به احتراق بدون شعله، اجرای مراحل زیر ضروری است:

۱- پیش گرم کردن واکنش دهنده‌ها (سوخت و اکسنده) تا دمای بالاتر از دمای خود اشتعالی سوخت؛ به طوری که افزایش دمای ناشی از احتراق، کمتر از دمای خوداشتعالی سوخت باشد. به عبارت دیگر، لازم است نامساوی دمایی زیر برقرار گردد:

$$\Delta T < T_{AI} < T_{In} \quad (1)$$

که در آن T_{AI} دمای خوداشتعالی، T_{In} دمای پیش گرم واکنش دهنده‌ها و ΔT نیز افزایش دمای حاصل از احتراق (اختلاف دمای بین واکنش دهنده‌ها و محصولات احتراق) است.

۲- رقیق‌سازی اکسیژن موجود در هوای احتراق، به زیر ۱۰٪ مقدار اولیه آن

۳- اختلاط مناسب سوخت و هوا

¹ Swirl Burners

² Oxy – Fuel burners

³ Staged Combustion

⁴ Cooling Flame

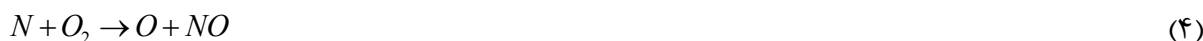
⁵ Wunning

برای دستیابی توامان سه شرط فوق، می‌توان از بازیافت حرارتی دود داغ ناشی از محصولات احتراق می‌باشد که عمدتاً در صنعت با نام FGR^۶ شناخته می‌شود بهره برد (در پژوهش حاضر از آن به عنوان بازچرخانی گازهای داغ حاصل از احتراق یاد می‌شود). می‌توان گفت بازچرخانی گازهای داغ حاصل از احتراق امری بسیار کلیدی در فرایند احتراق بدون شعله است که می‌تواند ضمن پیش‌گرم کردن واکنش دهنده‌ها (از طریق تبادل حرارت مستقیم یا غیرمستقیم) و رقیق‌سازی جریان هوا (کاهش کسر مولی اکسیژن هوا از طریق ترکیب شدن واکنش دهنده‌ها با محصولات احتراقی، طبق رابطه (۲))، سبب اختلاط مناسب سوخت و هوا شود؛ به گونه‌ای که با افزایش زمان ماند^۷ محصولات سبب می‌شود هیچ سوخت سوزانده نشده و یا اکسیژن اضافی در محفظه احتراق باقی نماند. این باز چرخانی به دو روش داخلی و خارجی امکان‌پذیر است که امنیای و همکاران نشان دادند سهم بازچرخانی داخلی به نسبت کمتر از چرخانی خارجی است [۲].

میزان بازچرخانی گازهای داغ با عدد بدون بعد K_v به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$K_v = \frac{M_E}{M_F + M_A} \quad (۲)$$

که در آن M دبی جرمی و زیروند E گازهای خروجی بازگرداننده، F سوخت و A هوا می‌باشد. یکی از آلاینده‌های رایج احتراق، اکسیدهای نیتروژن (NO_x) هستند. این آلاینده توسط واکنش‌های زنجیره‌ای (مرسوم به مکانیزم زلدویچ) در دماهای بالا فعال شده و با پیشرفت این دسته واکنش‌های گرما دوست، مقدار زیادی آلاینده اکسیدهای نیتروژن تولید می‌شود. این دسته واکنش، شامل سه تک واکنش به صورت زیر می‌باشد [۳]:



تشکیل اکسید نیتروژن از طریق مولکول نیتروژن نیازمند شکسته شدن پیوند قوی بین اتم‌های نیتروژن است؛ از آنجایی که پیوند بین دو اتم نیتروژن، سه گانه است، طول پیوند کم و شکسته شدن آن نیازمند انرژی بالایی است و همین امر موجب وابستگی شدید مکانیزم زلدویچ به حرارت در دماهای بالا می‌شود. واکنش (۴) به دلیل انرژی فعال سازی بالا، عامل محدود کننده نرخ واکنش در مکانیزم زلدویچ است. واکنش (۵) نیز در شرایط نزدیک به استوکیومتری و سوخت غنی منجر به تشکیل اکسید نیتروژن می‌شود. نرخ تولید اکسید نیتروژن در مکانیزم حرارتی از رابطه (۶) به دست می‌آید:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{f,1}[O][NO] \frac{\left(1 - \frac{k_{r,3}k_{r,4}[NO]^2}{k_{f,3}k_{f,4}[N_2][O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{r,3}[NO]}{k_{f,4}[O_2] + k_{f,5}[OH]}\right)} \quad (۶)$$

که در آن k_f و k_r به ترتیب نرخ ثابت واکنش‌های تعادلی رفت و برگشت می‌باشند.

^۶ Flue Gas Recirculation (FGR)

^۷ Residence Time

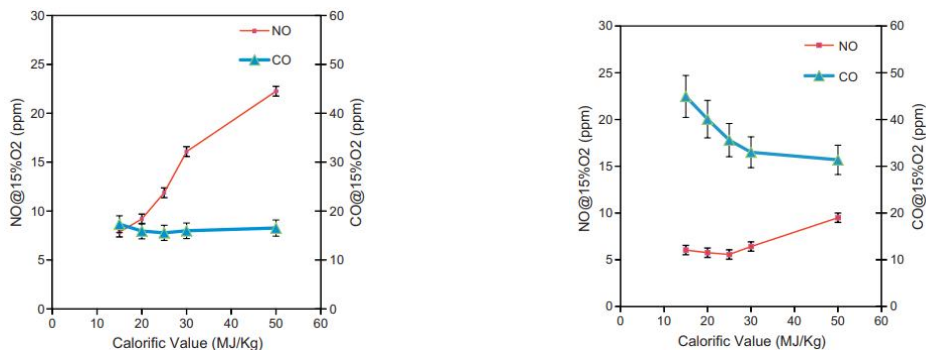
در احتراق بدون شعله، چون اختلاف دمای ناشی از احتراق کمتر از دمای خود اشتعالی سوخت می‌باشد و عموماً احتراق در دمای پایین صورت می‌گیرد و نیز به دلیل حذف گرادیان‌های دمایی و در نتیجه یکنواخت شدن توزیع دما در محفظه (به دلیل حذف شعله و گسترش منطقه واکنش در کل محفظه)، نرخ انجام واکنش‌های منجر به تولید اکسیدهای نیتروژن کاهش یافته و به نوعی می‌توان گفت مکانیزم‌های غالب، نظیر زدویچ، در محدوده‌ی دمایی احتراق بدون شعله غیر فعال می‌شوند. از طرفی نیز به دلیل رقیق سازی اکسیژن موجود در هوا قبل از اختلاط، مقدار اکسیژن مورد نیاز و در دسترس برای انجام این واکنش‌ها کاهش می‌یابد و در نتیجه غلظت اکسیدهای نیتروژن اندازه‌گیری شده در خروجی محفظه، عددی بسیار پایین و گاهی نزدیک به صفر گزارش می‌شود.

کاهش آلاینده گازی مونواکسید کربن (CO) و نیز کاهش تولید دوده از دیگر دستاوردهای احتراق بدون شعله است. در توجیه کاهش انتشار مونواکسید کربن می‌توان گفت: به دلیل اختلاط مناسب سوخت و هوا (مثلاً به دلیل بازچرخانی گازهای داغ حاصل از احتراق) و افزایش زمان ماند، شرایط برای کامل مصرف شدن کربن موجود در سوخت فراهم می‌شود و از ناقص‌سوزی آن جلوگیری می‌گردد؛ لذا تولید و انتشار آلاینده مونواکسید کربن کاهش می‌یابد.

در طول دو دهه اخیر، تحقیقات بسیار زیادی با هدف ایجاد احتراق بدون شعله در کوره‌های آزمایشگاهی و صنعتی انجام شده است که اساس همه‌ی آنها، افزایش بازچرخشی داخلی گازهای داغ با دمای بالا بود. در رژیم احتراق بدون شعله، بازچرخانی شدید گازهای داغ حاصل از احتراق و اختلاط بسیار بالای این گازها با واکنش‌دهنده‌ها باعث کاهش موضعی غلظت اکسیژن در محفظه‌ی احتراق می‌شود که موجب کندتر شدن واکنش‌های شیمیایی احتراق و کنترل فرآیند احتراق توسط شیمی می‌شود.

در ادامه، تعدادی از پژوهش‌های صورت گرفته در این زمینه مرور می‌شوند:

خلیل و همکاران [۴] در سال ۲۰۱۲ به صورت آزمایشگاهی اثر رقیق سازی متان با نیتروژن و ایجاد یک سوخت گازی کم انرژی را در رژیم احتراق بدون شعله پیش‌آمیخته، بر ساختار ناحیه واکنش و غلظت آلاینده‌های خروجی مونواکسید کربن و اکسید نیتروژن را در محصولات احتراقی یک محفظه احتراق توربین گاز بررسی کردند. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهد به دلیل رقیق سازی سوخت توسط اجزای غیر قابل اشتعال و اثر جذب حرارت آزاد شده احتراق توسط این گازها و کاهش دمای محصولات احتراق، معمولاً آلاینده‌ی اکسیدهای نیتروژن این سوخت‌ها در احتراق بدون شعله از سوخت‌های معمول کمتر است که در شکل ۱ قابل مشاهده است. به علاوه آلاینده‌ی مونواکسید کربن در احتراق بدون شعله متان رقیق شده، معمولاً با کاهش ارزش حرارتی گاز به دلیل کاهش دمای محصولات احتراق و افزایش دبی جرمی و سرعت سوخت (برای ثابت ماندن بار حرارتی با کاهش ارزش حرارتی) و در نتیجه کاهش زمان ماند گازها، افزایش می‌یابد. همچنین پیش گرمایش هوای ورودی محفظه احتراق، به طور معمول باعث افزایش اکسیدهای نیتروژن تولیدی و کاهش مونواکسید کربن می‌شود و پایداری احتراق بدون شعله را بهبود می‌بخشد. به علاوه رقیق‌سازی متان با نیتروژن (کاهش ارزش حرارتی سوخت) در شرایط بار حرارتی ثابت محفظه احتراق، به دلیل افزایش دبی جرمی و سرعت جت سوخت با افزایش مومنتوم جریان داخل محفظه احتراق و افزایش بازچرخانی داخلی گازها، باعث گسترده‌گی بیشتر ناحیه واکنش و نفوذ بیشتر آن به نواحی مرکزی محفظه احتراق می‌شود.



شکل ۱- غلظت آلاینده های خروجی NO و CO برحسب ارزش حرارتی معادل سوخت حاصل در رژیم احتراق بدون

شعله در حالت غیر پیش آمیخته بدون پیش گرمایش و با پیش گرمایش هوا تا ۶۰۰ کلوین [۴]

لی^۸ و همکاران [۵] در سال ۲۰۲۱ با استفاده از نرم افزار متن باز Openfoam به مقایسه نتایج تجربی با نتایج عددی مدل های مفهوم اضمحلال گردابه^۹ و اختلال جزئی همزن^{۱۰} در یک کوره آزمایشگاهی ۱۰ کیلوواتی احتراق بدون شعله با یک نازل محوری هوای گرم ۶۷۳ کلوین به قطر ۱۰ میلیمتر و ۱۶ نازل مماسی سوخت متان سرد با دمای ۲۵°C با قطر ۲ میلیمتر و نسبت هوای اضافه ۳۰٪ ($\lambda = 1.3$) پرداختند. توزیع دمای عددی و تجربی در کل کوره، توزیع دما، گاز اکسیژن و گاز کربن دی اکسید در مقاطع مختلف برای مدل های مختلف احتراقی در شکل ۲ آورده شده است. نتایج نشان داد که مدل اختلال جزئی همزن مقادیر متوسط دما و دی اکسید کربن را کمتر از واقعیت و مدل مفهوم اضمحلال گردابه بیشتر از واقعیت پیش بینی می کند که تفاوت در نحوه محاسبه ضریب اختلاط در این دو مدل است.

هانگ و همکاران^{۱۱} [۶] در سال ۲۰۲۱، دو حالت اختلاط پیش آمیخته^{۱۲} و غیرپیش آمیخته^{۱۳} سوخت و هوا را در شکل گیری احتراق بدون شعله مقایسه نمودند. در حالت احتراق بدون شعله غیر پیش آمیخته، سوخت از طریق سه نازل کوچک و هوا از طریق سه نازل بزرگ در کنار یکدیگر وارد کوره می شدند. همچنین در حالت احتراق بدون شعله پیش آمیخته، سوخت و هوا با نسبتی مشخص از طریق سه نازل بزرگ وارد کوره می شدند. تغییرات اکسیدهای نیتروژن و مونواکسید کربن برای حالات مختلف در شکل ۳ آورده شده است. مشعل پیش آمیخته دارای اکسیدهای نیتروژن کمتر ولی مونواکسید کربن بیشتری نسبت به مشعل غیر پیش آمیخته است که کاهش اکسیدهای نیتروژن به دلیل کاهش دمای آدیاباتیک شعله ولی افزایش مونواکسید کربن به دلیل افزایش اکسیژن، کاهش نرخ باز چرخانی و کاهش اختلاط در مشعل پیش آمیخته است.

⁸ Li

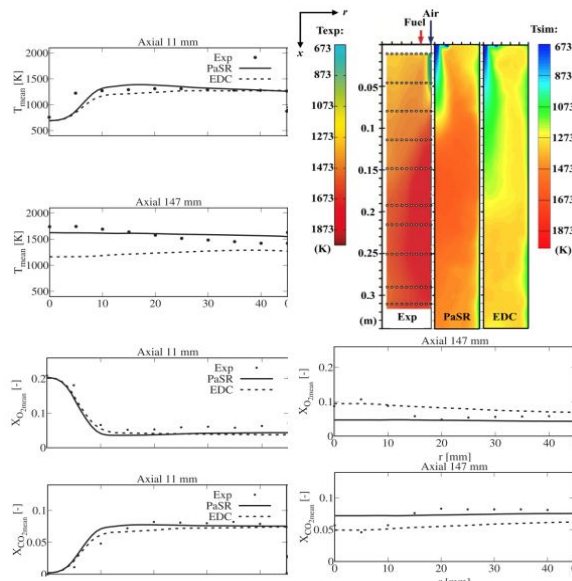
⁹ Eddy Dissipation Concept (EDC)

¹⁰ Partially Stirred Reactor (PaSR)

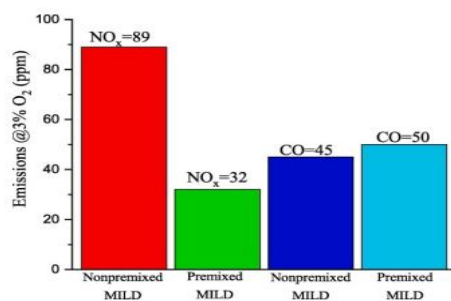
¹¹ Huang

¹² Premixed

¹³ Non-Premixed



شکل ۲- توزیع دمای عددی و تجربی در کل کوره، توزیع دما، گاز اکسیژن و گاز دی اکسید کربن در مقاطع مختلف برای مدل‌های مختلف احتراقی [۵]

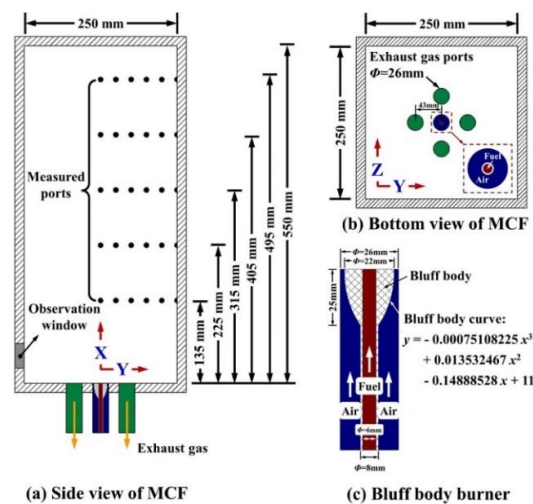


شکل ۳- تغییرات اکسیدهای نیتروژن و مونواکسید کربن برای حالات مختلف [۶]

در این مقاله، احتراق بدون شعله در یک محفظه احتراق آزمایشگاهی به صورت عددی شبیه‌سازی می‌شود و هدف اصلی در آن مقایسه عملکرد دو مکانیزم مختلف GRI3.0 (مکانیزم کامل) و DRM22 (مکانیزم کاهش یافته بر پایه مکانیزم کامل GRI2.11 [۷]) در پیش بینی دقیق توزیع دما، آلاینده‌ها و گونه‌های شیمیایی است. مکانیزم‌های کامل عمدتاً دارای تعداد گونه‌ها و واکنش‌های اولیه زیادی هستند و لازم است برای هر کدام، معادلات بقا و سینتیک شیمیایی جدا حل شود و این امر سبب افزایش زمان محاسبه می‌شود ولی دقت قابل اطمینانی دارد. از طرف دیگر مکانیزم‌های کاهش یافته، که عمدتاً از حذف گونه‌های کم اهمیت و میانی در مکانیزم‌های کامل به دست می‌آیند، به دلیل کم بودن تعداد گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی سرعت محاسبه را بالا می‌برند ولی قادر به پیش‌گویی برخی گونه‌های شیمیایی مانند NO_x نیستند و برای محاسبه گونه‌های غائب می‌توان از روش تعادل کمک گرفت. نوآوری پژوهش حاضر در بررسی عملکرد مکانیزم کاهش یافته و دقت محاسبات تعادلی در پیش‌بینی برخی گونه‌های غائب است که کمتر در کارهای شبیه‌سازی به آن توجه شده است.

۲- الگوسازی نظری یا تجربی

شبیه سازی در پژوهش حاضر بر روی کوره معروف "دکتر بسام دالی" در دانشگاه آدلاید انجام می شود (شکل ۴). این محفظه احتراق، مکعب مستطیل و دارای ابعاد $250 \text{ mm} \times 250 \text{ mm} \times 550 \text{ mm}$ می باشد. همچنین دارای یک ورودی سوخت و هوا (غیر پیش آمیخته) با دمای 306 کلوین و دو خروجی محصولات احتراق در همان سمت ورودی است.

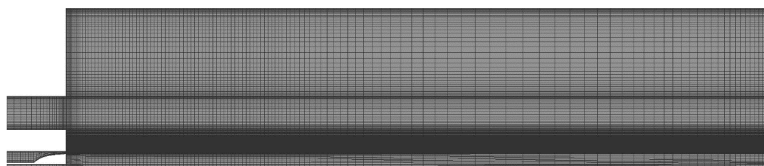


شکل ۴- هندسه محفظه احتراق مورد مطالعه [۸]

برای اعتبارسنجی شبیه سازی از نتایج مقاله وانگ و همکاران [۹]، که در سال ۲۰۲۲ در مورد ضرایب مدل EDC در پیش بینی احتراق بدون شعله متان انجام گرفت، استفاده خواهد شد. مقادیر ورودی هندسه فوق برای اعتبارسنجی و شبیه سازی در جدول ۱ آورده شده است. (لازم به ذکر است شبیه سازی به صورت کامل در نرم افزار تجاری Ansys fluent2022-R2 انجام می شود). شکل ۵، شبکه تولید شده با 22446 سلول (در حالت استقلال از شبکه) را نشان می دهد. شبکه در کنار دیوارها برای برقراری محدوده مناسب $\gamma+$ ، در نزدیک ورودی ها و خروجی ها جهت جلوگیری از ایجاد گرادیان در سرعت و فشارها و در نزدیکی دیوارهای نازل ریزتر شده است. جهت ریزتر کردن در نزدیکی دیوارهای نازل های ورودی و دیوارهای خروجی از شبکه لایه مرزی استفاده شده است.

جدول ۱- تنظیمات ورودی سوخت و هوا برای شبیه سازی [۸]

پارامتر	سوخت	هوا
ترکیب شیمیایی	CH_4	$79\% \text{ N}_2 + 21\% \text{ O}_2$
دما (K)	۳۰۶	۳۰۶
دبی جرمی (Kg/h)	۰/۶۸	۱۳/۶۲
سرعت (m/s)	۹/۳۲	۲۲/۳۸
هوای اضافی		$\lambda = 1/25$



شکل ۵- شبکه تولید شده در هندسه و بخش‌های مختلف آن

در این هندسه، دمای دیواره ۱۵۰۰ کلوین بوده و برای سرعت از شرط عدم لغزش استفاده شده است. علاوه بر این، در نزدیکی دیوارها فشار، دما و کسر جرمی گونه‌ها دارای شرط گرادیان صفر بر روی شرط مرزی دیوارها هستند ولی سرعت، انرژی جنبشی و نرخ اضمحلال انرژی از طریق توابع دیوار مخصوص محاسبه می‌شوند.

۲-۱- معادلات حاکم

در این هندسه، برای مطالعه احتراق مایلد باید به ترتیب معادلات پیوستگی جرم، مومنتوم، انرژی و بقای گونه‌ها به‌همراه واکنش‌های شیمیایی حل گردند (معادلات ۷ تا ۱۰). در این معادلات، سیال نیوتنی و تراکم‌پذیر در نظر گرفته شده است. با توجه به آشفته بودن جریان سیال در کوره‌های احتراق مایلد، از متوسط‌گیری زمانی متغیرها استفاده شده است. همچنین با توجه به وجود چند نوع گاز مختلف در محفظه، از متوسط‌گیری جرمی نیز برای بعضی متغیرها استفاده شده است.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{u}) = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u})}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) (\bar{\rho} \bar{u}) = \nabla \cdot [(\bar{\mu} + \mu_T) \nabla \bar{u}] - \nabla \bar{P} + \nabla \cdot \left[-\frac{2}{3} (\bar{\mu} + \mu_T) \nabla \bar{u} \right] + \bar{\rho} \bar{g} \quad (8)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} h)}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) (\bar{\rho} h) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mu}}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \right) \nabla h \right] + \nabla \bar{P} - \nabla q + \dot{\omega}_T + S_h \quad (9)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} Y_i)}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) (\bar{\rho} Y_i) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mu}}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \nabla Y_i + D_T \frac{\nabla T}{T} \right] + \dot{\omega}_i \quad (10)$$

که در اینجا، P فشار، μ لزجت دینامیکی مولکولی، μ_T لزجت دینامیکی اغتشاشی، S_h ترم منبع تشعشعی، $\dot{\omega}_T$ نرخ گرمای آزاد شده‌ی انرژی حاصل از واکنش‌های شیمیایی، Pr عدد پرانتل مولکولی، Pr_t عدد پرانتل اغتشاشی، $\dot{\omega}_i$ نرخ تولید یا مصرف گونه‌ی k ام، Sc عدد اشمیت مولکولی و Sc_t عدد اشمیت اغتشاشی هستند.

برای اغتشاش جریان از مدل دو معادله‌ای $RANS^{14}$ نوع دو معادله‌ای $k-\epsilon$ (با ضرایب جدول ۲)، برای محاسبه شدت تشعشع، مدل جهات گسسته (DO^{15}) در طول موج‌ها و زوایای مختلف (با تقسیم بندی سه‌تایی و ۷۲ پرتو)، جهت محاسبه نرخ تشکیل و مصرف گونه‌ها $(\dot{\omega}_k)$ ، از مدل امضحلال گردابه‌ای (EDC) و همچنین از الگوی سیمپل^{۱۶} برای کوپلینگ معادلات سرعت و فشار استفاده می‌شود. همان‌طور که ذکر شده بود برای احتراق گاز متان، به‌ترتیب از دو

¹⁴ Reynolds Average Navier Stocks Equation

¹⁵ Discrete Ordinate

¹⁶ Semi-Implicit Method Pressure-Linked Equation (SIMPLE)

مکانیزم DRM22 شامل ۲۲ گونه و ۱۰۴ واکنش (کاهش یافته) و GRI3.0 شامل ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش استفاده می شود.

جدول ۲- ضرایب مدل $k-\epsilon$

C_1	C_2	$C_{3,RDT}$	σ_k	σ_ϵ
۱/۶	۱/۹۲	۰	۱/۰	۱/۳

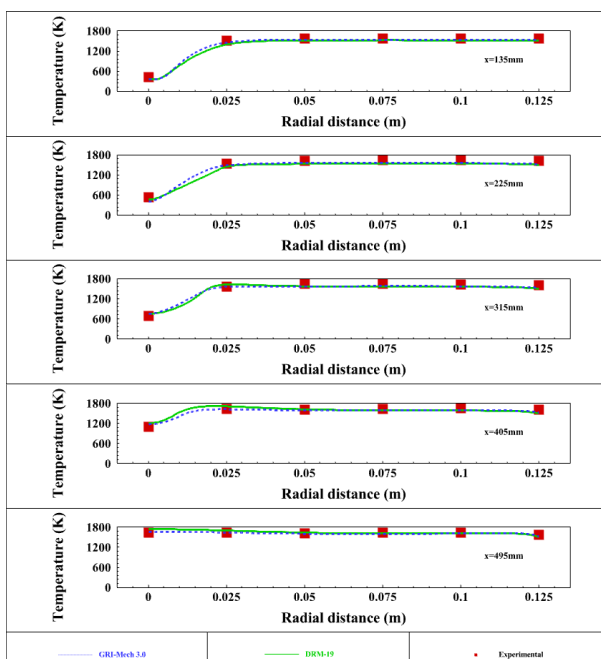
۳- نتایج و بحث

در گام اول برای اعتبارسنجی حل عددی، نتایج مدل شبیه سازی با نتایج تجربی مقاله مرجع [۹] مقایسه می شوند. به این منظور، نتایج دمای حاصل از شبیه سازی با نتایج تجربی دما در مقاطع و عرض های مختلف در شکل ۶ آورده شده است. برای مقایسه خطای نتایج شبیه سازی با نتایج تجربی، از رابطه زیر استفاده می شود:

$$\text{درصد خطا} = \frac{\text{مقادیر تجربی} - \text{مقادیر شبیه سازی}}{\text{مقادیر تجربی}} \times 100 \quad (11)$$

مقایسه نتایج نشان می دهد که اختلاف بین نتایج شبیه سازی با داده های تجربی بسیار کم است؛ به طوری که میانگین خطا بین نتایج تجربی و عددی در DRM22 و GRI3.0 به ترتیب ۳/۲۱ و ۱/۶۶ درصد است و مکانیزم DRM22 دما را ۱/۷ درصد بیشتر از مکانیزم GRI3.0 نشان می دهد. این خطا را می توان در مرتبه گسسته سازی معادلات بقا، دقت مدل های حاکم، دقت نرم افزار در حل عددی و سرعت همگرایی محاسبات دانست؛ زیرا همانطور که اشاره شد برای حل معادلات حاکم از تقریب مرتبه دوم استفاده شده است و در صورت استفاده از دقت مراتب بالا و یا حل عددی مستقیم^{۱۷} (DNS) می توان این خطا را کاهش داد (البته نیازمند هزینه محاسباتی بالایی است). پس می توان گفت که شبیه سازی عددی انجام شده در میدان دما دارای دقت بسیار خوب و مناسبی است. همان طور که در شکل ۷ مشاهده می شود دما در تمامی مقاطع و خصوصاً در فاصله بالاتر به حدود ۱۵۰۰ کلوین می رسد و با حذف گرادیان دمایی، دما در کل محفظه یکنواخت شده و نقاط داغ که موجب برهم زدن نرخ واکنش های شیمیایی شده و با بروز اتلاف حرارتی، بازده را کاهش می دهد کاملاً حذف شده اند. همچنین در این شکل تطابق خوبی بین نتایج DRM22 و GRI3.0 دیده می شود و محاسبات دما در این دو مکانیزم در فاصله بالاتر باهم برابر می باشند.

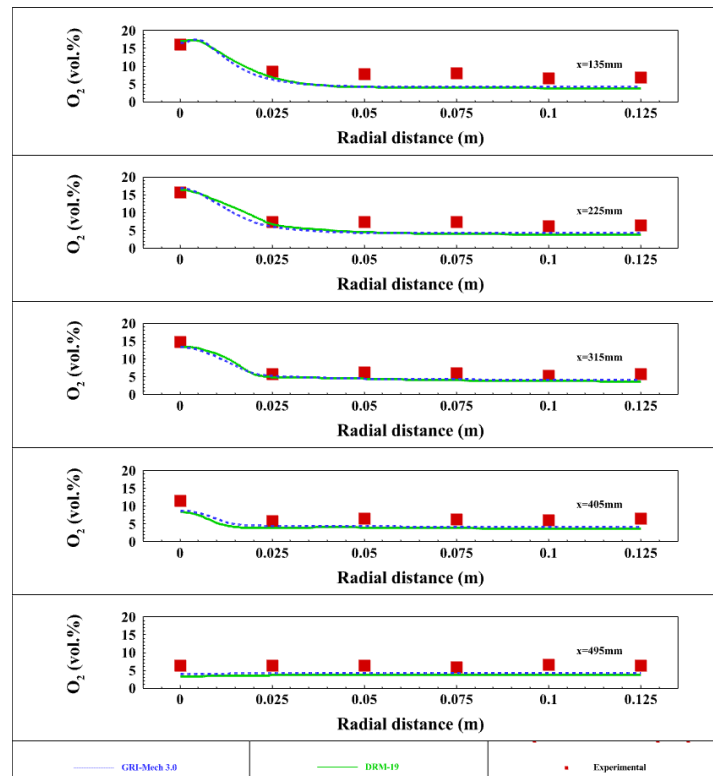
¹⁷ Direct Numerical Solution



شکل ۶- مقایسه بین مقادیر دما حاصل از نتایج شبیه‌سازی عددی و داده‌های تجربی مقاله مرجع

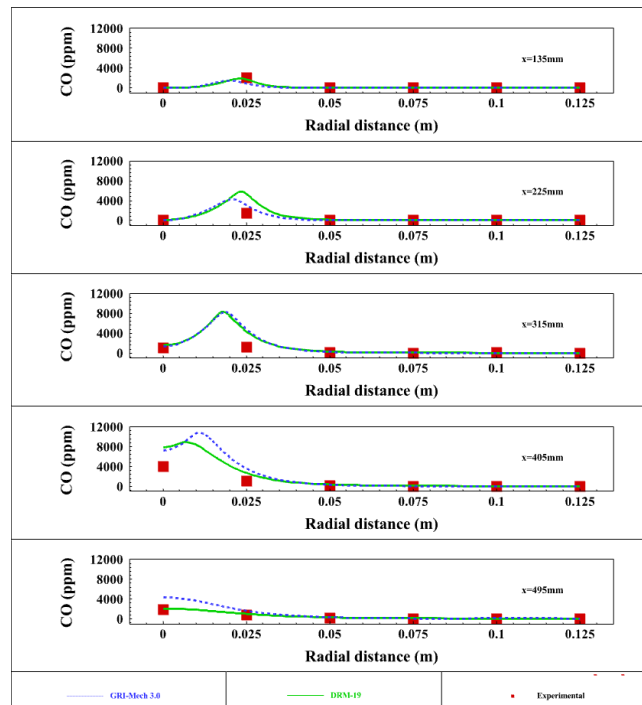
در ادامه نتایج شبیه‌سازی غلظت اکسیژن و مونوآکسید کربن در مقاطع مختلف آورده شده و با یکدیگر و نتایج تجربی مقایسه شده‌اند.

در شکل ۷، انطباق قابل قبولی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی مشاهده می‌شود. عملکرد دو مکانیزم احتراقی در GRI3.0 و DRM22 در پیش بینی غلظت اکسیژن، بسیار به یکدیگر نزدیک می‌باشند؛ میانگین خطا بین نتایج تجربی و عددی در GRI3.0 و DRM22 به ترتیب ۴/۷ و ۳۴/۲ درصد است و مکانیزم DRM22 غلظت اکسیژن را ۱۳ درصد کمتر از مکانیزم GRI3.0 پیش بینی می‌کند. هرچند اندازه‌گیری مقادیر تجربی نسبت به مقادیر عددی کمی بیشتر است و در فواصل دور از ورودی اختلاف بین این مقادیر کاهش می‌یابد؛ زیرا با کاهش دما شعله در طول محفظه احتراق، اکسایش غالب شده و میزان اکسیژن موجود کاهش می‌یابد. ضمناً مقدار اکسیژن در محفظه احتراق به مقدار تعادلی حدود ۵٪ رسیده است که از شرایط اصلی وقوع احتراق بدون شعله می‌باشد.



شکل ۷- مقایسه بین مقادیر غلظت حجمی اکسیژن حاصل از نتایج شبیه‌سازی عددی و داده‌های تجربی مقاله مرجع

در شکل ۸، در مورد مونواکسید کربن نیز در برخی نقاط، خصوصاً فاصله پایین‌تر و نزدیک ورودی، بین نتایج عددی و شبیه‌سازی اختلاف مشاهده می‌گردد. به صورت میانگین، خطا بین نتایج تجربی و عددی در DRM22 و GRI3.0 به ترتیب ۳۶/۶ و ۴۵/۶ درصد و مکانیزم DRM22 غلظت مونواکسید کربن را ۲۵ درصد کمتر از مکانیزم GRI3.0 پیش‌بینی می‌کند. در توجیه آن می‌توان گفت: از آنجایی که اندازه‌گیری تجربی مقدار CO حتی با دستگاه‌های پیشرفته نیز کاری بسیار دشوار است؛ پس وجود خطای زیاد در بعضی از نقاط قابل انتظار است؛ به‌ویژه در فاصله نزدیک به ورودی زیرا در این ناحیه به علت دمای زیاد، تشکیل مونواکسید کربن بر اکسایش آن غلبه دارد و هرچه در طول محفظه پیش برویم، با کاهش دما، اکسایش بر تشکیل آن غلبه یافته و گونه مونواکسید کربن به دی‌اکسید کربن تبدیل می‌شود و لذا مطابق شکل ۸، مقدار CO در طول محفظه کاهش می‌یابد و حدوداً زیر ۵ ppm می‌رسد. عملکرد دو مکانیزم احتراقی DRM22 و GRI3.0 بسیار به هم نزدیک هستند، هرچند در فاصله پایین DRM22 و در فاصله بالاتر GRI3.0 بیشتر از حد انتظار تجربی مقدار CO را محاسبه می‌کنند. در هر حالت مقدار CO در رژیم احتراق بدون شعله زیر ۵ ppm بوده که نسبت به احتراق معمولی بسیار کمتر است.



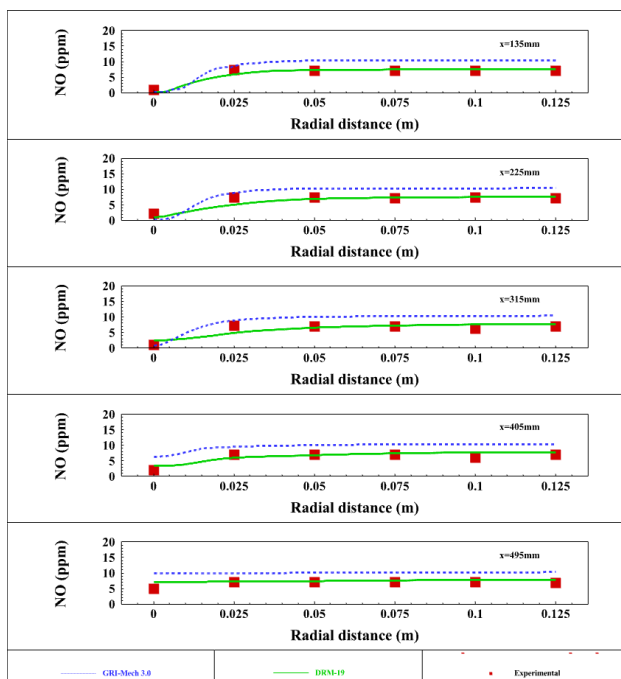
شکل ۸- مقایسه بین مقادیر مونواکسید کربن حاصل از نتایج شبیه‌سازی عددی و داده‌های تجربی مقاله مرجع

با توجه به شکل‌های ۶ تا ۸، می‌توان گفت مکانیزم‌های DRM22 و GRI3.0 به صورت مستقیم و با دقت قابل قبولی توزیع دما، جریان و گونه‌های اصلی و رادیکالی را محاسبه می‌کنند و اختلاف قابل قبولی بین مقادیر شبیه‌سازی و تجربی در آن‌ها دیده می‌شود. اکسیدهای نیتروژن (NO_x) در مکانیزم GRI3.0 به صورت مستقیم و با حل عددی محاسبه شده در حالیکه مکانیزم DRM22 قادر به محاسبه مستقیم آن نیست؛ لذا جهت محاسبه اکسیدهای نیتروژن، در مکانیزم‌های کاهش‌یافته راه‌های دیگری نیز وجود دارند. یکی از این راه‌ها، مدل‌سازی تعادلی گونه NO است. اساس استفاده از مدل‌سازی تعادلی بر تشکیل بسیار آهسته گونه NO نسبت به کل فرآیند احتراق است. با این فرض که میزان NO نسبت به دیگر گونه‌ها بسیار کم و ناچیز است و میزان NO نمی‌تواند بر کل میدان جریان، دما و گونه‌های اصلی احتراقی تأثیر چشمگیری داشته باشد. بنابراین، اگر میزان تشکیل NO وابسته به زمان نباشد و نتایج یک مسئله احتراقی به صورت پایا نیاز باشد، می‌توان میزان تشکیل آلاینده NO را جدا از واکنش‌های اصلی احتراقی محاسبه کرد. در واقع، می‌توان از طریق تعادل شیمیایی واکنش تولید NO ، میزان NO را محاسبه کرد.

در شکل ۹، مقادیر حاصل از شبیه‌سازی و مقادیر تجربی آورده شده‌اند. طبق آن، بین نتایج مکانیزم DRM22 و نتایج تجربی سازگاری خوبی مشاهده می‌شود ولی GRI3.0 بیشتر از آن‌ها نشان می‌دهد. میانگین خطا بین نتایج تجربی و عددی در DRM22 و GRI3.0 به ترتیب $14/3$ و $57/8$ درصد است. مکانیزم DRM22 غلظت اکسیدهای نیتروژن تعادلی را ۲۶ درصد کمتر از مکانیزم GRI3.0 پیش بینی می‌کند؛ در توجیه این امر می‌توان گفت دلیل اصلی در نحوه محاسبه غلظت اکسیدهای نیتروژن در دو مکانیزم است چون اکسیدهای نیتروژن با ۴ مکانیزم (حرارتی)^{۱۸}،

¹⁸ Thermal

سریع^{۱۹}، سوختی^{۲۰} و گونه میانی (N₂O^{۲۱}) تشکیل می‌شود، تعادل به شدت به واکنش‌های تعادلی آن ۴ مکانیزم حساس است و حلگر عددی همواره پاسخ تعادل را به سمتی می‌برد که نتایج پیش پردازش با آن سازگاری داشته باشند اما در GRI3.0 چون تمامی گونه‌ها به صورت مستقیم و از طریق معادلات بقا محاسبه می‌شوند و اثرات مستقیم ترمودینامیکی و شیمیایی در محاسبه هرگونه (از جمله NO) دیده می‌شود. با این وجود، حداکثر مقدار NO_x حدوداً زیر ۱۰ ppm می‌رسد که طبق انتظار، کاهش قابل ملاحظه‌ای نسبت به احتراق معمولی دارد.



شکل ۹- مقایسه بین مقادیر اکسیدهای نیتروژن حاصل از نتایج شبیه‌سازی عددی و داده‌های تجربی مقاله مرجع

۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله، احتراق بدون شعله و شرایط دست‌یابی به آن معرفی شده و در ادامه با هدف بررسی تاثیر و دقت مکانیزم‌های احتراقی (کامل یا کاهش یافته)، بر روی یک نمونه آزمایشگاهی شبیه‌سازی شد. به این منظور، به ترتیب از دو مکانیزم DRM22 (۲۲ گونه و ۱۰۴ واکنش) و GRI3.0 (۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش) استفاده شد. نتایج حاکی از آن است که مکانیزم‌های ذکر شده قادر هستند توزیع دما، گونه‌های شیمیایی و جریان را به ترتیب با خطای ۱/۶۶، ۴/۷ و ۳۶/۶ درصد و با دقت خوبی نسبت به نتایج تجربی محاسبه کنند. در مورد NO_x نیز با وجود ۲۶ درصد اختلاف بین دو مکانیزم، مکانیزم GRI3.0 کمی بیشتر از حد انتظار غلظت آن را محاسبه می‌نمود و نتایج DRM22 به نتایج تجربی نزدیکتر بوده است. خطاهای ذکر شده را می‌توان در مرتبه گسسته سازی معادلات بقا، دقت مدل‌های حاکم، دقت نرم‌افزار در حل عددی و سرعت همگرایی حل دانست؛ به گونه‌ای که هرچه معادلات لازم برای حل افزایش یابد، انتشار خطا نیز گسترش می‌یابد به همین دلیل خطا در نتایج آلاینده‌های گازی بیشتر از خطای توزیع دما است. به

¹⁹ Prompt

²⁰ Fuel

²¹ N₂O-Intermediate

طور کلی در این مورد خاص، نتایج مکانیزم کاهش یافته DRM22 از GRI3.0 به نتایج تجربی نزدیک تر می باشد. بنابراین می توان گفت از آنجائیکه مکانیزم کامل به دلیل تعداد گونه های شیمیایی زیاد (در نتیجه نیاز به حل تعداد زیاد معادلات بقا) دارای زمان محاسبه طولانی است، می توان از مکانیزم های کاهش یافته که با حذف گونه های کم اهمیت از مکانیزم های کامل به دست آمده اند کمک گرفت و سپس گونه های حذف شده، مانند NO_x را از طریق تعادل محاسبه نمود. این امر سبب شده ضمن حفظ دقت محاسبات، سرعت پردازش نیز افزایش یابد.

۵- فهرست علائم

علائم انگلیسی

شتاب گرانش، N/kg	g
انتالپی مخصوص، kJ/kg	h
فشار، Pa	P
شار حرارتی، W/m ²	q
دما، K	T
زمان، s	t
سرعت، m/s	u
کسر مولی، -	Y

علائم یونانی

هوا اضافی، -	λ
ویسکوزیته دینامیکی، Pa.s	μ
چگالی، kg/m ³	ρ
نرخ تولید یا مصرف گونه های شیمیایی، kmol/s	ω

زیرنویس

شمارنده	i
توربولانس	T

بالانویس

متوسط	-
بردار	→

۶- منابع

- [1] JA. Wüning, JG. Wüning, "Flameless oxidation to reduce thermal NO formation," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 23, No. 1, pp. 81-94, 1997.
- [۲] قاسم. خبازیان، جواد. امینیان، رامین. حقیقی خوشخو، "پیاده سازی و تحلیل اقتصادی احتراق بدون شعله در یک دیگ بخار آزمایشگاهی"، نشریه علمی- پژوهشی سوخت و احتراق، سال دوازدهم، شماره سوم، ۱۳۹۷.
- [3] Ullmann, "Nitric acid, Nitrogen Oxides", *Encyclopedia of Industrial Chemistry*, vol. A, Germany: VCH Publishers, pp. 297-340, 1989.



- [4] AEE. Khalil, VK. Arghode, AK. Gupta, SC. Lee, "Low calorific value fuelled distributed combustion with swirl for gas turbine applications", *Applied energy*, vol. 98, pp. 69-78, 2012.
- [5] Zhiyi. Li, Stefanie Tomasch, Zhi X. Chen, Alessandro Parente, Ivar S. Ertesvå, Nedunchezian Swaminathan, "Study of MILD combustion using LES and advanced analysis tools", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 38, No.4 ,pp. 5423-5432, 2021.
- [6] Mingming. Huang, Ruichuan Li, Jikang Xu, Shen Cheng, Haoxin Deng, Bing Zhang, Zhiyu Rong, Yue Li, "Effect of thermal input, excess air coefficient and combustion mode on natural gas MILD combustion in industrial scale furnace", *Fuel*, vol. 302, pp. 121-179, 2021.
- [7] M. F. A. Kazakov, Reduced Reaction Sets Based on GRI-Mech 1.2, a 19- species Reaction Set. 2019.
- [8] S. Cao, C. Zou, Q Han, Y Liu, D Wu, C Zheng, "Numerical and experimental studies of NO formation mechanisms under methane moderate or intense low-oxygen dilution (MILD) combustion without heated air", *Energy & Fuels*, vol. 29, No. 3, pp. 1987-1996, 2015.
- [9] D. He, Y Yu, Y Kuang, C Wang, "Analysis of EDC constants for predictions of methane MILD combustion", *Fuel*, vol. 324, pp. 124542, 2022