

مروری بر کاربرد ابزار ترکیبی شبکه راکتور شیمیایی و دینامیک سیالات محاسباتی به منظور پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها

امروزه، کاهش انتشار آلاینده‌های حاصل از فرایندهای احتراقی امری جدایی‌ناپذیر در روند طراحی محفظه‌های احتراق است. رویکرد شبکه راکتور شیمیایی به دلیل کاهش هزینه‌ها، سرعت زیاد و همچنین دقت مناسب در نتایج، روشی مناسب برای تخمین میزان انتشار آلاینده‌هایی نظیر NOx در سیستم‌های احتراقی است. این روش نیازمند داده‌های اولیه از میدان جریان به‌منظور ساخت شبکه راکتورها است. در این مقاله کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی به‌عنوان یکی از پرستفاده‌ترین روش‌ها در تخمین میدان جریان و ارائه داده‌های اولیه برای ساخت شبکه راکتورها بررسی شده است. در مطالعه حاضر رویکردهای مختلف مدل‌سازی آشفته‌گی جریان، مکانیسم‌های به‌کار رفته و مدل‌های احتراقی در دینامیک سیالات محاسباتی به‌منظور استفاده از نتایج در ساخت شبکه راکتورها مورد مطالعه قرار گرفته است. می‌توان بیان کرد که شبکه راکتورها حتی با تعداد کمیته راکتورها می‌توانند نتایج مناسبی از غلظت محصولات احتراق ارائه کنند. پس، باید در نظر داشت که افزایش دقت در حل دینامیک سیالات محاسباتی نباید به حدی باشد که هزینه‌های محاسباتی را بی‌هدف بیفزاید.

واژه‌های کلیدی: انتشار آلاینده‌ها، محفظه احتراق، شبکه راکتور شیمیایی، NOx، دینامیک سیالات محاسباتی، آشفته‌گی.

A Review on the Applications of Chemical Reactor Network via Computational Fluid Dynamics Hybrid Method in Order to Predict the Pollutant Emissions

Nowadays, the reduction of pollutants emission from combustion processes is integrated to the design of combustors. The chemical reactor network approach is a applicable method for estimating the emission of pollutants such as NOx in combustion systems due to cost reductions, fast and appropriate accuracy in results. This method requires the initial flow field data to build the reactors network. In this paper, the application of computational fluid dynamics as one of the most commonly used methods in determining the flow field characteristics and providing basic information for the construction of reactors networks was investigated. In this paper various approaches of turbulent flow modeling, applied chemical mechanisms and combustion regimes were studied in order to use the results in constructing CRNs. Although CFD can enhance the construction of CRNs and improve the results but it should be noted that increasing the fidelity of CFD results should not be the cause of adding computational costs because CRNs can provide appropriate results even with a minimal number of reactors.

Keyword: Pollutant Emissions, Combustion Chamber, Chemical Reactor Network, NOx, Computational Fluid Dynamics, Turbulence

فتح‌اله امی^{۱*}، استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس
زهیر صبوحی^۲، استادیار، پژوهشگاه هوافضا، وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
حمیدرضا خدایاری^۳، دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

*نویسنده مخاطب، آدرس تهران، صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۱۱۱

fommi@modares.ac.ir

F. Ommi^{1*}, Professor, Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University

Z. Saboohi², Assistant Professor, Aerospace Research Institute, Ministry of Science, Research and Technology

H.R. Khodayari³, PhD Student, Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University

*Corresponding Author, Postal Code: 14115-111, Tehran, IRAN

fommi@modares.ac.ir

علائم و اختصارات

Chemical Reactor Network (CRN)	شبکه راکتور شیمیایی
Computational Fluid Dynamics (CFD)	دینامیک سیالات محاسباتی
Perfectly Stirred Reactor (PSR)	راکتور کاملاً آمیخته
Reactor Network Analysis (RNA)	تحلیل شبکه راکتورها
Equivalent Reactor Network (ERN)	شبکه راکتور معادل
Fuel Air Ratio (FAR)	نسبت‌های هوا
Da	عدد دامکوهلر
τ	مقیاس زمان
M_j	وزن مولکولی گونه J
R	ثابت گازها
P	فشار
Re	عدد رینولدز
T	دما
u	سرعت
ϕ	رخ تعادلی

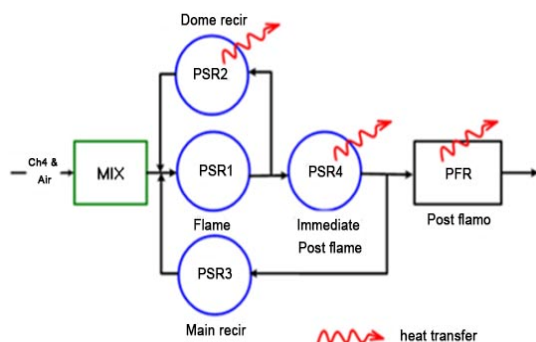
مقدمه

امروزه، احتراق سوخت‌های فسیلی هنوز هم به‌عنوان منبع اصلی تولید انرژی می‌باشد [۱، ۲]. با این حال آلاینده‌های آزاد شده در اثر احتراق این‌گونه سوخت‌ها برای سلامت انسان و محیط‌زیست مضر است [۳]. بنابراین، طراحی محفظه احتراقی مطلوب است که بتواند هم‌زمان حداکثر توان حرارتی خروجی را تولید کرده و در عین حال کمترین میزان انتشار آلاینده‌ها نظیر NO_x ، CO و غیره را دارا باشد [۴]. در گذشته، طراحی محفظه احتراق به کمک مجموعه‌ای از داده‌های تجربی و گسترش روابط تحلیلی صورت می‌پذیرفت که فرایندی پرهزینه بود. امروزه، شبیه‌سازی‌های عددی تبدیل به ابزاری مهم در طراحی و مطالعه روی محفظه احتراق شده است. شبیه‌سازی‌های عددی اجازه می‌دهد تا بتوان روی سیستم‌های احتراقی در شرایط بحرانی و فراتر از محدودیت‌های عملکردی، مطالعاتی صورت داد. این کار در مقایسه با مطالعات تجربی کم‌هزینه‌تر و بسیار سریع‌تر می‌باشد.

شبکه راکتورهای شیمیایی یکی از روش‌هایی است که در مدل‌سازی فرایندهای احتراق کاربرد دارد. احتراق فرایندی چند فیزیکی است که در شناخت و مدل‌سازی آن دانشی جامع راجع به میدان جریان و همچنین فعل و انفعالات شیمیایی رخ داده میان گونه‌ها ضروری است. رویکرد شبکه راکتور شیمیایی براساس تقسیم فضای داخلی محفظه احتراق به چندین ناحیه است، تنوع پارامترهای فیزیکی و شیمیایی در این نواحی نسبتاً

اندک است و لذا هر ناحیه با یک راکتور ایده‌آل و با مجموعه‌ای از واکنش‌های شیمیایی قابل مدل‌سازی است. هر ناحیه کلی از محفظه احتراق را می‌توان با استفاده از یک یا چند واحد از راکتورهای شیمیایی ایده‌آل مدل‌سازی کرد. نوع راکتورها و اتصالات آن‌ها تحت تأثیر میدان جریان و سرعت واکنش احتراق است. در یک جمع‌بندی کلی می‌توان بیان کرد که در این روش محاسبات شیمیایی رخ داده در فرایند احتراق به بهای کاهش دقت محاسبات جریان، دقت قابل قبولی دارد. در این بخش مروری مختصر بر مبحث مدل‌سازی احتراق با استفاده از رویکرد شبکه راکتورهای شیمیایی انجام شده است. سپس، المان‌های به‌کار رفته در ساخت شبکه به‌منظور شناخت مهم‌ترین موضوعات تأثیرگذار بر ساخت و حل شبکه‌های راکتور شیمیایی معرفی خواهد شد.

در یک شبکه راکتور شیمیایی مشخصات هر راکتور و ارتباط آن با سایر راکتورها وابسته به میدان جریان می‌باشد [۵]. راکتورها به‌واسطه جریانی که از سایر راکتورها می‌آید، به یکدیگر متصل می‌باشند. پس از ساخت شبکه راکتورها، مکانیسم احتراق سوخت در شبکه معرفی می‌شود. معادلات حاکم نسبتاً ساده و شامل معادلات جبری و دیفرانسیلی است. حل معادلات حاکم شبکه راکتورها به محاسبه غلظت محصولات و دمای خروجی راکتور منجر می‌شود. مدل‌های CRN به زمان بیشتری نسبت به مدل‌های بر پایه روابط تجربی برای اجرا نیازمندند، ولی آن‌ها از CFD سریع‌تر هستند. در تقابل با مدل‌های CFD که تحلیلی مناسب و با دقت از میدان جریان داخلی ارائه می‌کنند اما در تحلیل واکنش‌های شیمیایی احتراق ضعیف هستند. مدل‌های CRN میدان جریان را ساده‌تر در نظر می‌گیرند ولی واکنش‌های شیمیایی را با جزئیات مدل‌سازی می‌کنند. شکل ۱ نشان‌دهنده یک نمونه شبکه راکتور به‌منظور مدل‌سازی احتراق درون محفظه احتراق توربین گاز است.



شکل ۱- نمونه‌ای از شبکه راکتورهای شیمیایی [۶].

با صرف نظر از خواص هندسی تقسیم شد. در این مرحله تعداد نواحی تولید شده برای محاسبه شیمی دقیق بسیار زیاد بود، اما این تعداد به فواصل انتخاب شده برای مقادیر دما و استوکیومتری بستگی داشت. شاخص عدم اختلاط^۵ که با توجه به خواص مخلوط هر یک از مناطق، تعریف شده است و مورد استفاده قرار می‌گیرد تا رده‌های مجدد را طبقه‌بندی کند. سپس، کل دامنه در مناطق همگن متصل طبقه‌بندی شده و هر منطقه به‌عنوان یک PSR هم دما مدل‌سازی می‌شود.

مطالعات دقیق جریان‌های واکنشی در اواخر قرن بیستم به دلیل توسعه ابزارهای پیشرفته تحقیقاتی نظیر روش‌های اندازه‌گیری غیرمستقیم و دینامیک سیالات محاسباتی ممکن شد. کدهای CFD، بر پایه روش حجم محدود، المان محدود و یا ترکیبی از دو راه کار کلی یادشده، شرح دقیقی از میدان جریان ارائه می‌دهند. اما، عملکرد این کدها در پیش‌بینی گونه‌های با غلظت کم مانند NOx، به دلیل محدودیت‌های توان محاسباتی مورد نیاز برای حل هم‌زمان معادلات پیوستگی، انرژی، مومنتم، و گونه‌های شیمیایی محدود است [۱۶].

دو روش کلی تحلیل برای تحلیل میدان جریان داخلی محفظه احتراق، بسته به میزان دقت و منابع محاسباتی، وجود دارد. روش اول که جریان سرد نام دارد، میدان جریان را بدون در نظر گرفتن اثرات حرارت آزادشده از احتراق مدل‌سازی می‌کند. در این روش هزینه‌های محاسباتی با فرض مستقل بودن پارامترهای جریان از فرایند احتراق کاهش می‌یابد. رویکرد دوم، با نام جریان واکنشی شناخته می‌شود که اثرات انتقال حرارت حاصل از احتراق را بر میدان جریان با افزودن ترم چشمه در معادله انرژی در نظر می‌گیرد. افزودن این ترم چشمه، باید به همراه افزودن معادله پایستگی گونه‌های واکنش‌دهنده در میدان جریان باشد.

در حال حاضر استفاده از CFD در احتراق به‌صورت یک استاندارد در صنعت تبدیل شده است. رایانه‌های سریع‌تر و دانش بهتر در مورد دینامیک سیالات و شیمی احتراق اجازه می‌دهد تا CFD به جزئی از فرآیند طراحی محفظه‌های احتراق تبدیل شود. کدهای مدرن CFD قادر به حل مدل‌های مربوط به هندسه‌های پیچیده محفظه احتراق و شبیه‌سازی میدان‌های پیچیده جریان و دما هستند، اما اطلاعات شیمیایی محدودی را ارائه می‌دهند. درحالی‌که توان پردازش کامپیوترهای امروزی ارتقای چشمگیری داشته تا بتوانند مدل‌سازی میدان جریان محفظه را با چندین میلیون سلول محاسباتی اداره کنند، اما هنوز هم به اندازه کافی سریع نیستند تا همه زیر واکنش‌های فرایند احتراق را در هندسه یک محفظه احتراق صنعتی شامل

در راه‌کار شبکه راکتورهای شیمیایی و به‌منظور مدل‌سازی انتشار گونه‌های حاصل از احتراق حداقل دو ویژگی اصلی جریان باید شناخته شود. اولین ویژگی میدان جریان داخلی محفظه احتراق و ویژگی دوم احتراق یا فرایند شیمیایی است [۷-۹]. روبین و پرات [۱۰] آزمایش تونل آب را انجام دادند تا قبل از تولید شبکه راکتور خود، با میدان جریان در محفظه احتراق ALF-502 GT آشنا شوند. انجام تست‌های احتراق فرایندهای تشکیل و حذف گونه‌ها در محفظه احتراق بستگی به میدان جریان داخلی دارد و بدون در نظر گرفتن دیگر ویژگی جریان قابل تحلیل نیست. علاوه‌براین، تست محفظه احتراق در شرایط اتمسفریک و شرایط عملکردی موتور کاری پرهزینه بوده و نیازمند تلاش فراوانی برای این منظور است. در عوض، مدل‌سازی میدان جریان برای ایجاد شبکه راکتورها نه تنها زمان زیادی نمی‌برد، بلکه می‌تواند در تمامی مراحل طراحی محفظه احتراق به خدمت گرفته شود که باعث کاهش هزینه‌ها در طراحی انواع محفظه‌های کم‌آلاینده است [۱۱، ۱۲]. ابزار شبیه‌سازی، به نام تحلیل شبکه راکتورها (RNA)، روشی است که در آن برای ایجاد شبکه راکتورها، استفاده از سینتیک جزئی واکنش‌ها و پیش‌بینی تعامل بین گونه‌های درگیر در احتراق از اطلاعات زمینه‌ای جریان حاصل شده از شبیه‌سازی CFD استفاده می‌کند. این روش امکانی را ایجاد می‌کند که بتوان منابع محاسباتی را برای یک شبیه‌سازی دقیق جریان سیال، دما و غلظت گونه‌های برجسته‌تر شیمیایی و طرح‌های واکنش شیمیایی دقیق احتراق، به اشتراک گذاشت. این راهکار برای حل مسائل صنعتی بسیار کارآمد است. این روش بیشتر برای تحلیل عملکرد و توسعه سیستم‌هایی که در آن‌ها داده‌های اصلی هندسی محفظه با جزئیات مشخص است، به کار برده می‌شود. فلسیتلی^۲ و همکاران [۱۳، ۱۴] یک الگوریتم کلی برای ایجاد CRNها پیشنهاد کردند. الگوریتم بر دیگ‌های بخار صنعتی و کوره‌ها برای تولید یک شبکه راکتور ساده از شبیه‌سازی CFD و پیش‌بینی NOx استفاده شد. مانچینی^۳ و همکاران [۱۵]، همان روش را برای پیش‌بینی انتشار NOx برای احتراق بی‌شعله^۴ گاز طبیعی در یک آزمایش صنعتی با استفاده از یک شبکه ساده با ۱۲ PSR استفاده کردند. فلسیتلی و همکاران [۱۶] یک الگوریتم پیچیده‌تر را همانند آثار قبلی خود [۱۳، ۱۴]، براساس شاخص‌های مخلوط و عوامل شکل برای استخراج CRN از شبیه‌سازی CFD یک ژنراتور بخار توسعه دادند. با توجه به الگوریتم جدید آن‌ها، میدان جریان به چندین منطقه کوچک براساس مقادیر دما و استوکیومتری در هر سلول

2. Falcitelli
3. Mancini
4. Flameless

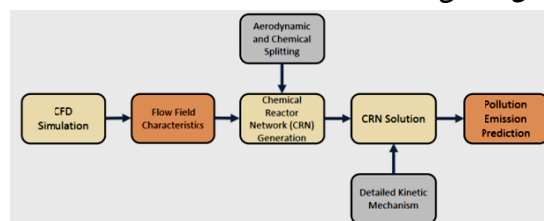
5. Unmixedness

کولرادو^۶ و مکدونل^۷ [۲۷] مدل‌سازی انتشار آلاینده‌های NOx و محدودیت‌های پایداری محفظه احتراق LBO^۸ را به صورت تجربی و عددی مطالعه کردند. آن‌ها یک راهکار برای تنظیم شبکه راکتورها براساس نتایج تجربی و عددی بیان کردند. شبکه راکتور مورد استفاده ترکیبی از راکتورهای PSR و PFR بود. آن‌ها بیان کردند که با تحلیل نتایج CFD و CRN امکان داشتن دید کلی در رابطه با جریان‌های بازچرخشی، افت حرارت، متغیرهای هندسی و همچنین تأثیر ترکیب سوخت بر انتشار NOx و پایداری احتراق وجود دارد. نتایج آن‌ها نشان داد که در روند طراحی باید بین انتشار NOx و محدوده پایداری مصالحه صورت گیرد. هرگونه تلاش برای کاهش انتشار NOx محدوده پایداری را کاهش می‌دهد.

مکانیسم‌های شیمیایی سوخت در CFD

در این بخش مکانیسم‌های مورد استفاده در تجزیه و تحلیل CFD با کاربرد در ایجاد دانش اولیه در مورد زمینه جریان و غلظت گونه‌های اصلی درگیر در احتراق توضیح داده می‌شود. در بیشتر مواقع، تعداد گونه‌های استفاده شده در شبیه‌سازی CFD به واکنش‌گرها و محصولات اصلی محدود شده است تا پیچیدگی مدل‌سازی و زمان اجرا را کاهش دهد. این موضوع تأثیر مستقیمی بر میزان همگرایی نتایج شبیه‌سازی به جواب نهایی دارد. روش‌های حل دینامیک سیالات محاسباتی به‌عنوان جزئی‌ترین مدل‌های مورد استفاده در تجزیه و تحلیل میدان جریان محسوب می‌شوند. با توجه به وجود محدودیت در دسترسی به منابع محاسباتی، دقت نتایج میدان جریان نسبت به دقت مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی در احتراق در اولویت است. بنابراین، سینتیک‌های احتراقی که در مدل‌های CFD مورد استفاده قرار می‌گیرند، معمولاً به چند گونه واکنش‌های ابتدایی به‌جای مکانیسم‌های سینتیکی مفصل‌تر محدود می‌شود. در روش‌های CFD، تجزیه و تحلیل سینتیک ساده شده است. درحالی‌که در روش‌های دیگر، تجزیه و تحلیل جریان ساده می‌شود تا تجزیه و تحلیل شیمیایی با وضوح بالاتر حاصل شود. واضح است که با استفاده از منابع محاسباتی در دسترس فعلی امکان مدل‌سازی کامل گونه‌های تأثیرگذار بر روند شیمیایی جریان واکنشی وجود ندارد. به‌عنوان اولین ساده‌سازی، معادلات سینتیک شیمیایی چندمرحله‌ای می‌تواند به چند معادله «جهانی» که به‌طور چشمگیری غالب هستند، کاهش یابد (با توجه به پایداری و اثر گونه‌های شیمیایی درگیر روی زمینه دما). این مکانیسم‌های کاهش‌یافته شامل گونه‌های اصلی (با غلظت

شوند. در نتیجه، استفاده از سینتیک دقیق محصولات احتراق در شبیه‌سازی مستلزم ساده‌سازی هندسی است. در دو دهه گذشته، توسعه CRN‌ها بر پایه کدهای CFD، که اطلاعات گسترده‌ای در مورد اختلاط آشفته و توزیع زمان اقامت در جریان‌های پیچیده واکنشی فراهم می‌کنند [۱۷-۲۱]، باعث توسعه رویکرد CFD-to-CRN شده است [۱۳]. هندسه پیچیده محفظه و میدان جریان آن را می‌توان به‌طور مؤثر به ERN تبدیل کرد. هنگامی که ERN به‌وسیله پردازش دقیق میدان جریان محفظه احتراق ایجاد می‌شود، یک مکانیسم شیمیایی کاملاً دقیق می‌تواند برای درک رفتار شیمیایی و عملکرد استفاده شود. برای موفقیت رویکرد یادشده ضروری است ERN یک مدل هر چه دقیق‌تر از میدان جریان محفظه احتراق باشد. استفاده از شبکه راکتورهای معادل با شیمی دقیق تأثیر نتایج مناسبی در افزایش دقت پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها برای انواع مختلف سیستم‌های احتراق را نشان داده است [۱۳، ۲۲]. روش ERN ثابت کرده است که تطابق بین پیش‌بینی انتشار NOx از ۲ تا ۱۰ درصد در سیستم‌های مختلف مانند دیگ‌های بخار زغال‌سنگ [۲۳، ۲۴]، کوره‌های ذوب شیشه [۱۴] و بویلرهای گاز طبیعی و نفت [۲۵، ۲۶] دارای خطا می‌باشد. لازم به توضیح است که دستیابی به روش‌های سیستماتیک برای تولید شبکه‌های قابل قبول همچنان مورد بحث است. ساختار کلی الگوریتم پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها با استفاده از روش RNA در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲- ساختار کلی پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها با استفاده از روش RNA [۲۷].

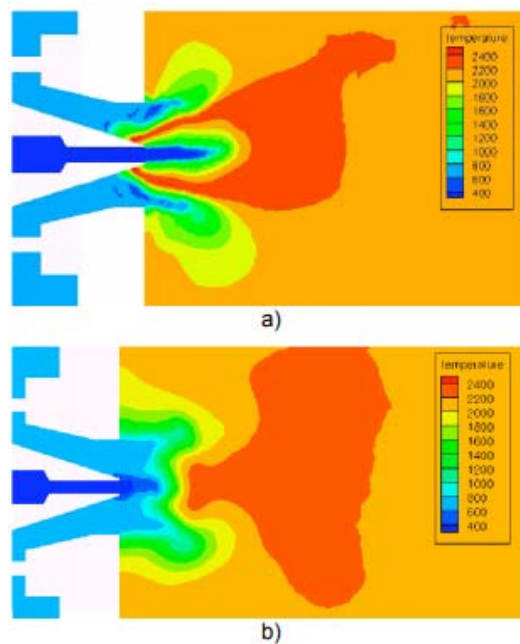
برخی از رویکردها به نحوی توسعه یافته‌اند که در آن میدان جریان توسط CFD مدل می‌شود و این جریان به‌صورت خودکار به یک CRN تبدیل می‌شود. در این رویکرد ساختار شبکه توسط فیلترهای مختلف از پارامترهای جریان و شعله تعیین می‌شود [۱۸، ۲۰، ۲۱]. اغلب مطالعات انجام شده با استفاده از این روش عموماً بر اساس یک راهکار دو مرحله‌ای است. در ابتدا، یک حل CFD شامل سینتیکی کلی برای شبیه‌سازی میدان جریان و احتراق استفاده می‌شود. سپس، الگوریتم‌های پالایش‌گر میدان، جریان CFD را به چند منطقه نسبتاً یکنواخت تقسیم می‌کنند و هر منطقه با یک راکتور ایده‌آل شیمیایی مدل‌سازی شده است و محاسبات با شیمی دقیق اجرا می‌شود.

6. Colorado
7. McDonell
8. Lean Blow Off

سینتیک گونه‌ها اجتناب شود. همچنین، فیزیک محفظه احتراق نیز باید در نظر گرفته شود. برای مثال، آیا هدف مطالعه صرفاً به‌دست آوردن یک نظریه کیفی است یا شبیه‌سازی وقایع خاص مانند اشتعال خودکار (در این صورت تعداد زیادی از گونه‌ها لازم است)، خاموش شدن، اشتعال مجدد و غیره. با این‌حال، معمولاً توجه اصلی در رژیم احتراق حالت پایا است و مطالعات [۳۴، ۳۵] نشان‌دهنده نتایج خوبی از انتقال صریح گونه‌ها با کمتر از ۲ مرحله مکانیسم احتراق است. مقایسه‌ای میان مکانیسم‌های دو و چهار مرحله‌ای توسط بیسیرس^{۱۶} و همکاران [۳۶] انجام و مشخص شد که مکانیسم چهار مرحله‌ای نسبت به مکانیسم دومرحله‌ای، پایداری شعله متان را در نسبت‌های هوا (FAR) بزرگ‌تر و بهتر پیش‌بینی می‌کند. نمایی از مقایسه نتایج در مطالعه یاد شده در شکل ۳ نشان داده شده است. جدول ۱ نشان‌دهنده تعداد گونه و مراحل به کار برده شده در رویکرد CFD-CRN است.

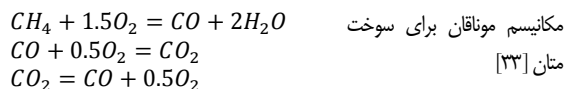
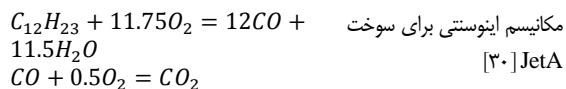
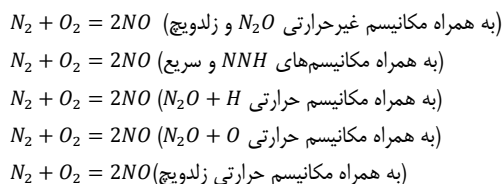
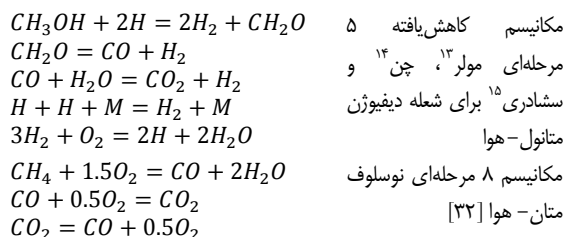
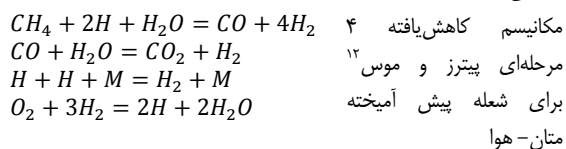
جدول ۱- خلاصه تعداد گونه‌ها و مراحل مکانیسم‌های شیمیایی بکار رفته در پیش‌بینی زمینه جریان برای ایجاد CRN.

مرحله	تعداد گونه‌ها	سال	نویسنده
۲	۵	۲۰۱۸	Innocenti [30]
۱	۴	۲۰۱۵	Amzin
۳	۵	۲۰۱۴	Monaghan



شکل ۳- نمایی از میدان دما حاصل‌شده از روش واکنشی LES- (a) میدان جریان با مکانیسم ۲ مرحله‌ای (b) میدان جریان با مکانیسم ۴ مرحله‌ای [۳۶].

بیشتر) بوده و اکثر محصولات تشکیل‌شده میانی، واکنش‌های تشکیل/جداسازی رادیکال‌ها و غیره حذف شده‌اند. به‌عنوان مثال‌هایی در آن حوزه‌ها، مکانیسم شناخته‌شده برای متان که قابل‌استفاده برای محاسبات در روش‌های انتقال گونه‌ها می‌باشد از نوع ۵ گونه، ۲ مرحله مکانیسم متان- هوا [۲۸] و مکانیسم چهار مرحله‌ای پیترز^۹ [۲۹] است. اینوستی^{۱۰} [۳۰] از سوخت JetA-1 به‌منظور شبیه‌سازی احتراق مکانیسمی که در مطالعه خود استفاده کرد، دومرحله‌ای بود. موناگان^{۱۱} [۳۱] از مکانیسم سه مرحله‌ای متان با ۵ گونه استفاده کرد. برای پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها، موارد ذکرشده دارای گونه NOx نیست، بنابراین نیازمند مکانیسم ۸ یا ۹ مرحله‌ای همانند مکانیسم‌های مورد استفاده نووسلوف [۱۸] است که این گونه‌ها در حداقل مرحله ممکن است.



انحراف در عملکرد این مکانیسم‌ها می‌تواند بسته به عواملی مانند فشار بالا، نسبت تعادلی و غیره نشان داده شود. به‌منظور شبیه‌سازی باید توجه داشت که محدوده نسبت تعادلی و فشاری که این مکانیسم‌ها معتبر هستند، مورد بررسی قرار گیرند. در هر حال، ضروری است که از ساده‌سازی بیش حد

9. Peters
 10. Innocenti
 11. Monaghan
 12. Mauss
 13. Muller
 14. Chen
 15. Seshadri

محصولات و محصولات میانه حاکم است. می‌توان بیان کرد که این روش برای مکانیسم‌های بسیار بزرگ شیمیایی که شامل ده‌ها مرحله هستند مثل هیدروکربن‌های سنگین‌تر، قابل قبول نیست.

مدل‌سازی آشفستگی

برای درک وضعیت تحول مطالعات در زمینه آشفستگی در چند دهه گذشته می‌توان به مقاله مروری لوملی و یگلوب [۳۹] اشاره کرد. بنابراین می‌توان گفت که پس از ۱۰۰ سال مطالعه در زمینه آشفستگی، این احتمال وجود دارد که مطالعه در این زمینه باز هم مدت‌زمان زیادی به طول بکشد، زیرا هنوز در مراحل ابتدایی است و با پیشرفت‌های غیرمنتظره بسیار اندک تبدیل به شاخه‌ای مجزا در علم فیزیک شده است. کیفیت مدل‌سازی/شبیه‌سازی به علت چند دلیل شناخته شده متفاوت است که عبارتند از: عدم توانایی محاسباتی یا زمان طولانی مورد نیاز برای مدل‌سازی آشفستگی، فقدان مدل احتراق دقیق و غیره. روش‌های CFD برای مدت طولانی محدود به ارزیابی اجزای فردی^{۱۸} با پروفیل‌های مرزی مناسب یا به دست آوردن نتایج اولیه یا ارزیابی تغییرات ظریف در هندسه یا عیب‌یابی، به جای کمک به سرعت بخشیدن به تغییرات عمده در طراحی بود. با این حال، با ظهور سوپر کامپیوترها در سال‌های اخیر استفاده از چنین مدل‌های آشفستگی گران‌قیمت محاسباتی در شبکه‌های متراکم برای پیش‌بینی کارآمد و دقیق جریان‌های آشفته و واکنشی ممکن شده است تا از انجام تست‌هایی که به دلیل کمبود داده‌ها صورت می‌پذیرد (مانند مدل LES) جلوگیری شود. جریان در یک محفظه احتراق در یک پیش مخلوط‌کننده که (معمولاً) حاوی نقاط تزریق سوخت چندگانه است، به چرخش درمی‌آید. ماهیت پیچیده جریان نهایی به دلیل ایجاد ساختارهای بزرگ چرخشی^{۱۹} بر اثر طبیعت چرخشی ورود سوخت و هوا به محفظه احتراق است. منطقه بازچرخش^{۲۰} مرکزی به عنوان یک تثبیت‌کننده آترو دینامیکی شعله عمل می‌کند که نیاز به نگهدارنده فیزیکی شعله را حذف می‌کند.

مکانیسمی که دقیقاً باعث شکست یک گردابه می‌شود، پیچیده است و با اینکه برای دهه‌ها مورد مطالعه قرار گرفته به وضوح درک نشده است [۴۰]. پیچیدگی بعدی تأثیر متقابل احتراق در این مناطق چرخشی (گردابه‌ای) می‌باشد. آزمایش‌های اشمیتل^{۲۱} [۴۱] نشان می‌دهد که شکل شعله بسته به عدد چرخش یا درجه تزریق هوای مرکزی یا سوخت به شدت تغییر می‌کند. نسل فعلی محفظه‌های احتراق شامل جریان‌های قوی

روش انتقال گونه‌ها می‌تواند به سه روش برای جریان کاملاً آشفته، به ترتیب افزایش پیچیدگی محاسبات، بیان شود، که عبارتند از:

۱- با در نظر گرفتن فرایندهای شیمیایی بی‌نهایت سریع که مناسب برای احتراق غیر پیش‌آمیخته و فرض مخلوط محترق است. این رویکرد فرض می‌کند که مصرف سوخت تابعی از درجه آشفستگی محلی جریان است و انرژی گرمایی در هر جایی که آشفستگی وجود دارد، آزاد می‌شود. با این وجود، این رویکرد [۳۷] باعث می‌شود مخلوط سوخت و هوا به سرعت و با ورود به ناحیه اختلاط مشتعل شده و در نتیجه باعث ایجاد اشتعال خودکار عددی در مجرای اختلاط، قبل از محفظه اصلی شود. این مدل به وسیله اسپالدینگ مدل شکست ادی نامیده می‌شود [۳۷].

۲- با توجه به اینکه شیمی توسط اختلاط کنترل می‌شود، اثرات نرخ واکنش آرنیوس^{۱۷}، که توضیحی برای وابستگی نرخ واکنش شیمیایی به دماست، در پشت جبهه شعله نادیده گرفته و محاسبات با توجه به روش قیل انجام می‌شود. رویکرد اصلی این روش استفاده از نرخ آرنیوس به عنوان یک سوئیچ برای جدا کردن مناطق احتراقی از غیراحتراقی (به عنوان مثال، کانال‌های پیش مخلوط) است [۳۸]. این سوئیچ با در نظر گرفتن حداقل مقیاس زمانی نرخ واکنش آرنیوس و سرعت واپاشی گردابه‌ها عمل می‌کند. ایراد اصلی این روش ناتوانی این راهکار برای پیش‌بینی گونه‌های رادیکال به دلیل قابلیت محدود آن برای شبیه‌سازی مکانیسم‌های شیمیایی چندمرحله‌ای است. با این وجود، این روش چندین دهه است که در صنعت رواج داشته و ثابت کرده است که یک رویکرد منطقی بین رویکردهای اول و سوم است.

۳- با در نظر گرفتن اثرات کامل سینتیک نرخ محدود شیمیایی آرنیوس و همچنین اثرات آشفستگی، این رویکرد اغلب کمبودهای دو روش بالا را برطرف می‌کند، اما دارای هزینه‌های محاسباتی زیادی می‌باشد. زمان محاسباتی زیاد مورد نیاز از آنجایی است که مجموعه‌ای کامل از سینتیک شیمیایی در نظر گرفته شده است و نرخ آرنیوس به صورت غیرخطی تغییر می‌کند و نیازمند روش‌های حل خاصی می‌باشد. ماهیت این نوع شبیه‌سازی احتراق در مقیاس‌های مناسب، با فرض هر سلول به عنوان یک راکتور فشار ثابت، با شرایط اولیه اختصاص داده شده به گونه‌های فعلی سلول و درجه حرارت و حجم آن می‌باشد. نرخ واکنش آرنیوس در سراسر مدت زمان اقامت (زمان مشخصه) بر تشکیل

18. Single component
19. Vertical
20. Recirculation
21. Schmittel

17. Arrhenius

معمولاً برای تجزیه و تحلیل و طراحی و تولید محصولات جدید زمان بر نیستند. مدل‌های آشفتگی RANS برای جریان‌های ساده دقیق هستند و می‌توانند پیش‌بینی‌های مناسب نسبت به ویژگی‌های اصلی جریان مانند میدان‌های فشار، دما و سرعت را ارائه دهند. با این حال، معایب تجربی که در شکل‌گیری این مدل‌ها وجود داشت، با افزایش نیازمندی به سطح بالای وضوح نتایج بر اثر نیاز به دقت بیشتر در سطوح پایین‌تر بیشتر آشکار شد؛ به‌عنوان مثال، پیش‌بینی‌های نوع مواد شیمیایی، شدت آشفتگی، میزان تخریب اسکالر و غیره. هنجالیک^{۲۶} [۴۹] نشان می‌دهد که اگرچه به نظر می‌رسد که آینده روش‌های RANS خاص در مواجهه با انتظارات اصلی شکست‌خورده است ولی استفاده گسترده CFD در صنعت همچنان بستگی به مدل‌های رایج و متعارف دارد و احتمالاً شامل نوعی ترکیب با مدل LES است که به‌طور گسترده‌ای به نام DES^{۲۷} نامیده می‌شود.

شبیه‌سازی مستقیم عددی (DNS^{۲۸}) طیف وسیعی از مقیاس‌های مکانی و زمانی را برای آشفتگی حل می‌کند، بنابراین هزینه محاسباتی DNS بسیار بالا است. از این رو، DNS حتی در اعداد رینولدز کم و تقریباً برای تمام سیستم‌ها، راه‌حلی گران‌قیمت می‌باشد. DNS یک ابزار مفید در تحقیقات بنیادی در آشفتگی است. استفاده از DNS و LES اجازه می‌دهد تا به‌صورت دینامیک نواحی کوئچینگ^{۲۹} و باز اشتعال را در نظر گرفت، پدیده‌هایی که بر اثر عبور سوخت‌های مصرف نشده از ناحیه شعله و تجزیه در ناحیه با دمای بالا در پایین دست جریان ایجاد می‌شوند. این موضوع نشان‌دهنده برتری روش‌های DNS/LES نسبت به RANS می‌باشد، زیرا ناپایایی‌های جریان در نظر گرفته شده است. مدل‌سازی جریان‌های واکنشی با چرخش کم با استفاده از LES و DNS در مراجع [۵۰-۵۳] مورد توجه قرار گرفته است. با این وجود، مدل‌های ارزان‌قیمت محاسباتی همچنان قادر به ردیابی ویژگی‌های اصلی ساختار واکنش و میدان جریان واکنشی هستند. نیومایر^{۳۰} و همکاران [۵۴] با موفقیت واکنش‌های پایدار شده در یک جریان با چرخش اندک را با استفاده از RANS حالت پایا و کوپل شده با مدل TFC^{۳۱}، مدل‌سازی کردند. بر این اساس، شبیه‌سازی RANS می‌تواند برای تحلیل میدان بازچرخش گاز خروجی محفظه احتراق [۵۵] و ویژگی‌های کلی واکنش‌ها در طول حالت پایدار استفاده می‌شود. از لحاظ جزئیات پایداری و انتشار، شبیه‌سازی CFD به هدایت ساختمان CRN کمک می‌کند اما انتظار نمی‌رود که اثر

چرخشی (به اندازه کافی قوی برای «شکستن گردابه» که منجر به منطقه بازگردشی) به‌منظور افزایش اختلاط سوخت و هوا در منطقه اولیه احتراق می‌باشند. با توجه به مشخصات پیچیده آئرو‌دینامیک محفظه احتراق، هیچ‌یک از مدل‌های RANS نمی‌تواند به‌دقت پویایی (دینامیک) میدان جریان را ردیابی کنند [۴۲]. مزیت استفاده از رویکرد LES این است که تعداد شبیه‌سازی‌ها افزایش یافته درحالی‌که تعداد مدل‌سازی کاهش می‌یابد. چندین مطالعه در این زمینه نشان‌دهنده مناسب بودن رویکرد LES در مورد پیش‌بینی انتشار در کوره‌های کاربردی و پیچیده است [۳۴، ۳۵، ۴۳-۴۶].

آشفتگی زمانی رخ می‌دهد که نیروهای اینرسی در سیال در مقایسه با نیروهای ویسکوز قابل توجه است و با اعداد رینولدز بالا شناخته می‌شود. معادلات NS^{۳۲} برای هر دو جریان آرام و آشفتنه معتبر است. شبیه‌سازی مستقیم به مدل‌سازی ترجیح داده می‌شود، اما موانع برای شبکه‌های پیچیده و متراکم که برای حل طیف وسیعی از مقیاس‌های طولی و زمانی که در یک جریان کاملاً متلاطم وجود دارد به همراه پیچیدگی واکنش‌های شیمیایی غیرقابل عبور است. معادلات NS در نوع متوسط‌گیری شده زمانی یا کلی استفاده می‌شوند، این موضوع باعث افزایش ترم‌های اضافی «تنش رینولدز» می‌شود که نیاز به مدل‌سازی دارند تا مجموعه معادلات توصیف‌گر میدان جریان آشفتنه را تکمیل کنند. برای تقریب اول، مدل‌های آشفتگی RANS میدان جریان را به قسمت «میانگین» و «نوسانی» تقسیم می‌کنند و یک مدل آماری به‌صورت یکپارچه با فرض ویسکوزیته گردابه ای ایزوتروپیک استفاده می‌شود و بنابراین شرایط تنش رینولدز را در معادلات NS تکمیل می‌کند. هیچ تعریف دقیقی در رابطه با طیف گسترده‌ای از مقیاس‌های طولی موجود در جریان واقعی وجود ندارد و به همین دلیل این مدل از عدم صحت در پیش اختلاط رنج می‌برد. روش LES به‌طور مستقیم ساختار ادی‌های بزرگ و آنیزوتروپیک را در یک جریان متلاطم حل می‌کند. مشابه روش RANS، می‌توان میدان سرعت را به قسمت باز حل^{۳۳} و یک بخش فیلتر شده^{۳۴} تقسیم کرد. اکثریت مقیاس‌های طولی آشفتگی به‌طور مستقیم حل می‌شود، درحالی‌که مقیاس طول کوچک‌تر و ادی‌های ایزوتروپیک‌تر، با استفاده از یک مدل آشفتگی جبری مانند مدل اسمگورینسکی^{۳۵} [۴۷، ۴۸] مدل‌سازی می‌شود.

برای بیش از سه دهه، مدل‌های RANS به‌عنوان ابزاری کاربردی به‌ویژه در صنعت مورد استفاده قرار گرفته‌اند که

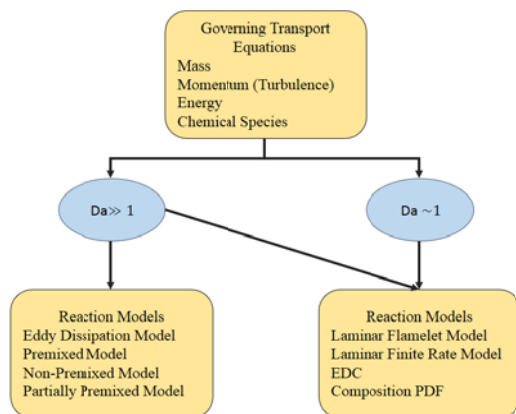
26. Hanjalic
27. Detached Eddy Simulation
28. Direct Numerical Simulation
29. Quenching
30. Neumayer
31. Turbulent Flame Speed Closure Model

22. Navier-Stokes
23. Resolved
24. Filtered
25. Smagorinsky

واکنش در مدل را ایجاب می‌کند. فرض‌هایی نظیر فلیملت^{۳۲} آرام که واکنش‌ها را بی‌نهایت سریع را در نظر می‌گیرد یا واکنش تعادلی که می‌تواند پیچیدگی جریان واکنشی در CFD را کاهش دهد، موجود است. لفور^{۳۳} از مدل تعادلی برای به‌دست آوردن توزیع دما و کسر جرمی درون محفظه با سوخت متان استفاده کرد [۵۶].

برای ساده‌سازی مدل احتراق و کاهش حجم کار CFD، از فرض‌های ساده‌سازی استفاده می‌شود. مدل‌های شناخته‌شده‌ای که در شبیه‌سازی جریان واکنشی (به‌ویژه جریان آشفته) استفاده می‌شوند که عبارت‌اند از: شیمی سریع^{۳۴}، فلیملت و مدل‌های تعادلی [۵۷]. در دو مدل اول، فرض می‌شود که عدد دامکوهر^{۳۵} بزرگ است. همان‌طور که در رابطه ۱ نشان داده شده است. یک عدد بزرگ دامکوهر بدین معنی است که مقیاس زمان واکنش بسیار کوتاه‌تر از مقیاس زمان جریان است. تأثیر عدد دامکوهر در انتخاب مدل واکنشی برای شبیه‌سازی میدان جریان در شکل ۴ نشان داده شده است.

$$Da = \frac{\tau_{fluid}}{\tau_{reaction}} \quad (1)$$



شکل ۴- ارتباط مدل‌های واکنشی با عدد دامکوهر.

صنعت همچنان به شیمی سریع و رویکردهای با مخلوط کنترل‌شده^{۳۶} برای پیش‌بینی میانگین حرارت آزادشده، تکیه کرده است. درحالی‌که، میدان‌های دما با روش‌های مختلفی از قبیل روش EBU^{۳۷} به میزان مناسبی پیش‌بینی می‌شوند [۳۸]. بسیاری از مطالعات انجام‌شده با استفاده از CFD برای توصیف میدان‌های جریان در سیستم‌های احتراق توربین گاز انجام شده است [۲۱، ۵۸-۶۳]. برای یک منبع محاسباتی ثابت که نیازمند یک مصالحه بین سینتیک واکنش‌ها و دقت میدان جریان است،

ترکیب سوخت را بر شکل‌گیری آلاینده‌ها پیش‌بینی کند. بنابراین، برای به دست آوردن راه‌حلی سریع، که بتواند نتایج مورد نیاز میدان جریان را که ساخت شبکه راکتورهای شیمیایی به آن نیاز دارد، مهیا کند، می‌توان از روش‌های بر پایه RANS استفاده کرد. در جدول ۲ گزارشی از روش‌های حل میدان جریان، مدل آشفتگی و تعداد سلول‌های محاسباتی استفاده‌شده در حل CFD به‌منظور استخراج نتایج برای ساخت CRN نشان داده شده است. در این جدول به وضوح می‌توان گستردگی استفاده از روش‌های RANS در ایجاد شبکه راکتورها را دید.

جدول ۲- مقایسه روش‌های حل میدان جریان CFD، مدل آشفتگی و تعداد سلول شبکه محاسباتی.

نویسنده	سال	مدل آشفتگی	روش حل میدان	تعداد سلول شبکه محاسباتی
Innocenti [30]	۲۰۱۸	K-w (SST) Wall function	RANS Finite Volume Method	60000
Colorado [27]	۲۰۱۸	RANS With Wall function	RANS Turbulent flame speed: zimont	50000 unstructured quadrilateral
Amzin	۲۰۱۵	K-e RSM	RANS	560000
Monaghan	۲۰۱۴	K-w (SST)	RANS	1.78 million Structured-unstructured
54	۲۰۱۳	k-e modified by pope	RANS	20440
Lyra	۲۰۱۳	Standard k-e	RANS Finite Volume Method	—

مدل‌سازی احتراق

مدل‌سازی احتراق زمینه بسیاری از تحقیقات بوده و بعد از سی سال به نظر می‌رسد که بیشتر مدل‌سازی‌ها مشابه تحقیقات در زمینه مدل‌سازی آشفتگی است- شبیه به مسئله تکمیل تنش‌های رینولدز در آشفتگی- در زمینه احتراق نیز با مسئله تکمیل ترم‌های چشمه سینتیک در معادله انتقال کسر جرمی گونه‌ها مواجه هستیم. ترم‌های چشمه سینتیک برای تبدیل، انتشار، تولید و اضمحلال گونه‌های شیمیایی درگیر در واکنش‌ها در معادلات انتقال برای متغیرهای پیشرفت ظاهر می‌شوند.

مدل‌سازی احتراق و میدان جریان نسبت به روش‌هایی که فقط می‌توانند به دقت غلظت گونه‌ها را در رژیم‌های تعریف‌شده احتراق پیش‌بینی کنند، ارجح‌تر است. با این حال، این روش به وسیله نیازمندی‌های محاسباتی محدود شده است. در نظر گرفتن جریان واکنشی در تحلیل CFD، انتخاب نوع

32. Flamelet
33. Lefebvre
34. Fastchemistry
35. Damochler
36. Mixing-Controlled Approaches
37. Eddy Break-Up

روش‌های شبیه‌سازی سرعت محدود شامل مدل نرخ محدود آرام^{۴۲} و EDC^{۴۳} است. در مدل سرعت محدود لایه‌ای، اثرات نوسانات آشفته نادیده گرفته و نرخ واکنش توسط عبارات جنبشی آرنیوس تعیین می‌شود. در مدل EDC، سینتیک شیمیایی آرنیوس دقیق را می‌توان در یک شعله آشفته یکپارچه کرد که باعث می‌شود این مدل در محاسبات پرهزینه باشد. مدل انتشار ناپایای فلیمنت^{۴۴} برای کاربردهای غیرپیش‌آمیخته می‌تواند گونه‌های با سرعت شکل‌گیری آهسته مانند آلاینده‌های گازی را پیش‌بینی کند و دارای دقت بهتری نسبت به انتشار پایای فلیمنت می‌باشد. در این مدل، سینتیک شیمیایی پرهزینه از لحاظ محاسباتی به یک بعد کاهش می‌یابد و مدل به‌طور قابل‌توجهی سریع‌تر از مدل‌های نرخ محدود آرام، EDC و PDF است. بر این اساس می‌توان مدل‌های مورد استفاده برای احتراق را بر اساس فیزیک مسئله و سرعت واکنش‌ها تقسیم‌بندی کرد که این موضوع در جدول ۳ نشان داده شده است.

جدول ۳- تقسیم‌بندی مدل‌های مورد استفاده برای احتراق بر اساس فیزیک مسئله و سرعت واکنش‌ها.

Chemistry	Fast Chemistry	Premixed Combustion	Non-Premixed Combustion	Partially Premixed Combustion
		Eddy Dissipation Model (Species Transport)		
Finite Rate Chemistry		Premixed Combustion Model	Non-Premixed Equilibrium Model	Partially Premixed Model
		Laminar Finite-Rate Model		
		Eddy-Dissipation Concept (EDC) Model		
		Composition PDF Transport Model		
Laminar Flamelet Model (Steady/Unsteady)				

مدل‌سازی احتراق بر رویکردهای احتراق پیش‌آمیخته، غیرپیش‌آمیخته و همچنین مدل‌های قابل استفاده برای وضعیت چالش‌برانگیزتر یعنی احتراق بخشی پیش‌آمیخته تمرکز دارد. بیان جزئیات در هر مورد فراتر از محدوده این مطالعه است، زیرا اطلاعات مربوط به هر کدام در مراجع به‌صورت کامل بیان شده است. بنابراین، اکنون مدل‌هایی وجود دارد که دقیق‌تر بوده و بیشتر شامل اثرات فیزیکی است و از لحاظ هزینه‌های محاسباتی ارزان‌تر از مدل‌های ساده است که به‌طور معمول به‌کار گرفته می‌شوند. باید توجه داشته باشیم که در مدل‌های استفاده شده، کیفیت پیش‌بینی غلظت گونه‌ها به‌طور مستقیم به کیفیت پیش‌بینی مقدار آشفته‌گی بستگی دارد تا پیش‌بینی اختلاط جریان اصلی. اغلب یک مدل احتراق مناسب، به‌دلیل مدل‌سازی نادرست مناطق اصلی اختلاط، بسیار ضعیف عمل

سینتیک معمولاً در روش‌های CFD ساده‌تر می‌باشد. مدل‌های شیمی سریع به‌طور گسترده برای مدل‌سازی شعله‌های دیفیوژن استفاده می‌شود که در آن مقدار عدد دامکوهلر بسیار بزرگ فرض شده و به معنی این است که مقیاس زمان واکنش بسیار کوتاه‌تر از مقیاس زمان جریان است. مدل‌های شیمی سریع شامل مدل EBU [۳۷]، مدل اضمحلال ادی EDM^{۳۸} [۳۸]، مدل تعادلی، مدل دیفیوژن پایا^{۳۹} و مدل FGM^{۴۰} [۶۴] می‌باشد. در EDM فرض می‌شود که سرعت واکنش توسط مخلوط آشفته کنترل شود، بنابراین محاسبات سینتیکی آرنیوس با هزینه محاسباتی زیاد اجتناب‌ناپذیر است و می‌توان از مکانیسم‌های انتقال حرارت یک یا دومرحله‌ای استفاده کرد. این مدل برای طیف گسترده‌ای از برنامه‌های کاربردی برای سیستم‌های احتراق با شعله‌های پیش‌آمیخته، غیر پیش‌آمیخته و ترکیب آن‌ها مناسب است [۶۵]. مدل‌های فلیمنت برای شعله‌های دیفیوژن، پیش‌آمیخته و بخشی پیش‌آمیخته که در آن فلیمنت نازک به‌وسیله اغتشاشات جریان دچار اعوجاج می‌شود، مورد استفاده قرار می‌گیرد [۶۶-۶۸]. در مدل فلیمنت، شعله‌های آشفته با استفاده از سازه‌های نازک، آرام و محلی یک‌بعدی شبیه‌سازی می‌شوند. این فلیمنت‌های آرام را می‌توان با استفاده از روش‌های تابع توزیع تراکم احتمال (PDF) مدل کرد. روش‌های فلیمنت آرام، پیشنهاد شده توسط پترز [۵۷] درحالی‌که ترکیب پاسخ شعله به تنش آیرودینامیکی را به‌صورت واکنش سریع فرض می‌کند، ولی نمی‌تواند پدیده‌های غیرتعادلی را پیش‌بینی کند. مدل فلیمنت انتشار ثابت می‌تواند برای کاربردهای غیرپیش‌آمیخته استفاده شود و محدود به مدل‌سازی احتراق با شیمی نسبتاً سریع است. فرض بر این است که شعله به‌سرعت به فشار آیرودینامیکی واکنش نشان می‌دهد، بنابراین این مدل نمی‌تواند اثرات غیرتعادلی عمیق نظیر شروع اشتعال، خاموشی^{۴۱} و فرایندهای آهسته مانند بعضی مکانیسم‌های تأثیرگذار بر تشکیل NOx را ردیابی کند. برای احتراق بخشی پیش‌آمیخته، مدل FGM فرض می‌کند که تحول اسکالر در یک شعله آشفته می‌تواند به‌وسیله تحول اسکالر در یک شعله آرام تقریب یابد. در مدل‌های فلیمنت آرام و FGM، گونه‌ها و درجه حرارت با استفاده از کسر مخلوط، تجزیه اسکالر و یا متغیرهای پیشرفت پارامترندی می‌شوند و معادلات انتقال برای این پارامترها را در یک شبیه‌سازی سه‌بعدی حل می‌کنند. مدل‌های دیگری برای تجزیه و تحلیل دقیق سینتیک در شبیه‌سازی CFD جریان‌های واکنشی وجود دارد. این

38. Eddy Dissipation Model
39. Steady Diffusion Model
40. Flamelet Generated Manifold
41. Extinction

42. Laminar Finite Rate Model
43. Eddy Dissipation Concept
44. Unsteady Diffusion Flamelet

CFD صورت می‌پذیرد. به‌منظور طراحی جزئیات، بهبود هندسه محفظه، در نظر گرفتن اثرات سه‌بعدی چرخش جریان، آشفتگی و احتراق استفاده از CFD بسیار رضایت‌بخش است و نتایج حاصل از آن برای ساخت شبکه راکتورهای شیمیایی نسبت به روش‌های تجربی بسیار کم‌هزینه می‌باشد. در سال‌های اخیر با گسترش توان محاسباتی، کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی در صنعت و همچنین مطالعه روی رفتار شعله به‌شدت افزایش پیدا کرده است. از همین روی در این نوشتار مروری بر روش‌های مختلف مدل‌سازی میدان جریان احتراقی و همچنین، ویژگی‌های جدایی‌ناپذیر میدان نظیر اغتشاشات، مدل‌های واکنشی و سینتیک شیمیایی به‌منظور پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها انجام شد. در شبیه‌سازی میدان جریان احتراقی با استفاده از CFD مکانیسم‌های شیمیایی سوخت مورد نیاز است. در CFD به دلیل محدودیت‌های محاسباتی از واکنش‌های با تعداد مراحل محدود استفاده شده است زیرا با استفاده از شبکه راکتورها می‌توان با ساده‌سازی میدان جریان واکنش‌های زیادی را در شبکه مدل‌سازی کرد. علاوه بر این، انواع روش انتقال گونه‌ها نیز شرح داده شده است. به‌منظور مدل‌سازی اغتشاشات میدان جریان نیز بررسی کلی در مورد روش‌های DNS، LES و RANS و کاربرد آن‌ها صورت پذیرفت. گرچه روش‌های DNS و LES با دقت بسیار زیادی اغتشاشات میدان جریان را مدل‌سازی می‌کنند، اما هزینه‌های محاسباتی باعث شده است تا این روش‌ها برای کاربردهای خاص مورد استفاده قرار گیرند. با مروری بر مطالعات صورت‌پذیرفته در رابطه با پیش‌بینی انتشار آلاینده با رهیافت CFD-CRN مشاهده شد که به‌رغم ساده‌سازی‌های مدل‌های RANS و وجود خطا در پیش‌بینی نواحی بازچرخشی، باز هم این روش، رویکرد غالب در شبیه‌سازی CFD است. همچنین، باید بیان کرد که بسته به فیزیک مسئله تحت بررسی می‌توان از مدل‌های مختلفی برای شبیه‌سازی احتراق استفاده کرد. برای شعله‌های دیفیوژن مدل‌های شیمی سریع به‌طور گسترده استفاده شده‌اند. مدل EBU، مدل اضمحلال ادی EDM، مدل تعادلی، مدل دیفیوژن پایا و مدل FGM زیرمجموعه‌های مدل‌های شیمی سریع می‌باشند. مدل‌های دیگری برای تجزیه و تحلیل دقیق سینتیک در شبیه‌سازی CFD جریان‌های واکنشی وجود دارد. این روش‌های شبیه‌سازی سرعت محدود شامل مدل نرخ محدود آرام و EDC است. علی‌رغم توسعه مدل‌های مختلف برای شبیه‌سازی میدان جریان‌های احتراقی با استفاده از CFD در سال‌های گذشته، این روش‌ها دارای کاستی‌هایی در دقت و همچنین، پیش‌بینی غلظت تمامی گونه‌های موجود در محفظه احتراق می‌باشند. رویکرد CFD-CRN به‌عنوان روشی جایگزین و ترکیبی می‌تواند این ضعف را پوشش دهد و فرایند تحلیل میدان‌های جریان احتراقی را تکمیل کند.

می‌کند. راه‌حل این است که شرایط مرزی دور از منطقه مورد نظر قرار گیرد. همچنین، قبل از شبیه‌سازی جریان واکنش، یک پیش‌بینی جریان سرد صحت‌سنجی شده انجام شود. در حالی که، این مسئله ممکن است به دلیل کمبود داده‌های تجربی همیشه ممکن نباشد. پریپگنان و همکاران [۶۹] از مدل FGM برای مدل‌سازی احتراق بهره جستند و دلیل آن را بدین صورت بیان کردند که هزینه‌های محاسباتی آن کمتر از دیگر مدل‌ها نظیر EDC است. همچنین، آن‌ها از میان سه مدل آشفتگی K-e، k-w SST و RST مدل K-e را انتخاب کردند زیرا به گفته آن‌ها تأثیر چندانی بر زمینه پیش‌بینی انتشار NOx ندارند.

همان‌طور که در تجزیه و تحلیل مقایسه‌های (غیرواکنشی) توسط یاکارینو^{۴۵} [۷۰] نشان داده شده است، امروزه، کدهای تجارتي CFD، کاربر را با مجموعه‌ای بی‌نظیر از انتخاب‌های زیرمجموعه‌های آشفتگی و احتراق که به‌خودی‌خود چالش‌برانگیز است، مواجه می‌کند. جدول ۴ نشان‌دهنده چند مورد از تحقیقات اخیر در مورد مدل‌های احتراقی مورد استفاده در مدل‌سازی میدان جریان به‌منظور ساخت شبکه راکتورهای شیمیایی است.

جدول ۴- مدل‌های احتراقی مورد استفاده توسط محققان برای مدل‌سازی میدان جریان برای کاربرد در ساخت CRN.

مدل احتراق	سال	نویسنده
Eddy Dissipation Concept	۲۰۱۸	Innocenti [30]
Eddy Dissipation Concept	۲۰۱۵	Amzin
Eddy Dissipation Concept	۲۰۱۴	Monaghan
Steady Laminar Flamelet Model	۲۰۱۳	54
Partially premixed combustion	۲۰۱۳	Lyra

نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر رویکرد شبکه راکتورهای شیمیایی برای پیش‌بینی انتشار آلاینده‌ها در محفظه‌های احتراق بررسی شده است. مزیت اصلی استفاده از این رویکرد به‌کارگیری مکانیسم‌های دقیق شیمیایی با تعداد زیاد واکنش‌ها می‌باشد که بدین ترتیب تخمین انتشارگونه‌های جزئی مانند NOx ممکن خواهد شد. اولین مرحله در مدل‌سازی دقیق انتشار آلاینده‌ها در سیستم‌های احتراقی با استفاده از شبکه راکتورهای شیمیایی، مدل‌سازی میدان جریان می‌باشد. مدل‌سازی میدان جریان در مراحل نهایی طراحی و جایی که طرح محفظه احتراق تا حدودی نهایی شده است به کمک

مراجع

- [14] Falcitelli, M., Tognotti, L. and Pasini, S., "An algorithm for extracting chemical reactor network models from cfd simulation of industrial combustion systems," *Combustion Science and Technology*, Vol. 174, No. 11-12, 2002, pp. 27-42.
- [15] Mancini, M. and et al., "On mathematical modelling of flameless combustion," *Combustion and flame*, Vol. 150, No. 1-2, 2007, pp. 54-59.
- [16] Falcitelli, M., S. Pasini, and L. Tognotti, "Modelling practical combustion systems and predicting NOx emissions with an integrated CFD based approach," *Computers & Chemical Engineering*, Vol. 26, No. 9, 2002, p. 1171-1183.
- [17] Pedersen, L.S., et al., *Residence Time Distributions in Confined Swirling Flames*. Combustion Science and Technology, Vol. 127, No. 1-6, 1997, p. 251-273.
- [18] Novoselov, I.V. and P.C. Malte, "Development and Application of an Eight-Step Global Mechanism for CFD and CRN Simulations of Lean-Premixed Combustors," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 130, No. 2, 2008, p. 021502-021502-9.
- [19] Van der Lans, R.P. and et al., "Residence time distributions in a cold, confined swirl flow: Implications for chemical engineering combustion modelling," *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, No. 16, 1997, p. 2743-2756.
- [20] Drennan, S.A. and et al., *Flow Field Derived Equivalent Reactor Networks for Accurate Chemistry Simulation in Gas Turbine Combustors*, Vol. 2, 2009, p. 647-656.
- [21] Fichet, V. and et al., "A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines," *Fuel*, Vol. 89, No. 9, 2010, pp. 2202-2210.
- [22] Novoselov, I. and et al., "Chemical reactor network application to emissions prediction for industrial gas turbine", *American Society of Mechanical Engineers, Vol. 1*, 2006, pp. 221-235
- [23] Niksa, S. and G.-S. Liu, "Incorporating detailed reaction mechanisms into simulations of coal-nitrogen conversion in pf flames," *Fuel*, Vol. 81, No. 18, 2002. p. 2371-2385.
- [24] Niksa, S., G.-s. Liu, and R.H. Hurt, "Coal conversion submodels for design applications at elevated pressures. Part I. devolatilization and char oxidation," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 29, No. 5, 2003, pp.425-477.
- [25] Faravelli, T., A. Frassoldati, and E. Ranzi, *Kinetic modeling of the interactions between NO and hydrocarbons in the oxidation of hydrocarbons at low temperatures*. Combustion and Flame, Vol. 132, No. 1, 2003, pp. 188-207.
- [26] Benedetto, D., et al., "NOx emission prediction from 3-D complete modelling to reactor network analysis," *Combustion science and technology*, Vol. 153, No. 1, 2000, pp. 279-294.
- [27] Colorado, A. and V. McDonnell, "Emissions and stability performance of a low-swirl burner operated on simulated biogas fuels in a boiler environment," *Applied Thermal Engineering*, 2018, Vol. 130, pp. 1507-1519.
- [28] Westbrook, C.K. and F.L. Dryer, *Simplified reaction mechanisms for the oxidation of*
- [1] Rostami, E. and et al., "Investigation of the effect of liquid viscosity on the primary break up lengths and droplet diameter and ligament diameter and instability of a swirling annular liquid sheet," *Journal of Advanced Physics*,. Vol. 3, No. 2, 2014, pp. 171-178.
- [2] Saboohi, Z., Ommi, F. and Akbari, M., "Multi-objective optimization approach toward conceptual design of gas turbine combustor," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 148, 2019, pp. 1210-1223.
- [3] Rostami, E. and et al., "Effect of gas-to-liquid density ratios at different liquid viscosity on the atomization of the air-blast atomizer," *Australian Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 2, 2017, pp. 125-136.
- [۴] خداياری، ح. و دیگران، «شبیه‌سازی و بررسی اثرات انتقال گرمای فیلم خنک‌کننده تیغه توربین»، مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز، ۲۰۱۶. دوره ۴۶، شماره ۳، صفحات ۹۹-۱۰۷.
- [۵] صبوحي، زهیر، طراحی مفهومی محفظه احتراق توربین گاز هوایی متعارف با استفاده از رویکرد بهینه‌سازی چندهدفه. رساله دکتری، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۹۶.
- [6] Lee, D. and et al., "A simulation for prediction of nitrogen oxide emissions in lean premixed combustor," *Journal of mechanical science and technology*, Vol. 25, No. 7, 2011, pp. 1871.
- [۷] امی، فتح‌اله و دیگران، «طراحی مفهومی محفظه احتراق متعارف توربین گاز در راستای تخمین انتشار آلاینده‌ها»، مهندسی مکانیک مدرس، ۲۰۱۶، دوره ۱۶، شماره ۱۰، صفحات ۴۲۹-۴۴۰.
- [8] Saboohi, Z., F. Ommi and A. Fakhrtabatabaei, "Development of an augmented conceptual design tool for aircraft gas turbine combustors," *The International Journal of Multiphysics*, Vol. 10, No. 1, 2016.
- [9] Ommi, F. and Z. Saboohi, "Conceptual Design of Conventional Gas Turbine Combustors Aiming at Pollutants Emission Prediction," *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 10, 2016, p. 429-440.
- [10] Rubins, P.M. and Pratt, D.T., ASME Technical Paper: JGCG/FACT, 1991, New York, NY: The American Society of Mechanical Engineers.
- [11] Saboohi, Z. and Ommi, F. "Emission prediction in conceptual design of the aircraft engines using augmented CRN." *The Aeronautical Journal*, Vol. 121, Issue 1241, 2017.
- [۱۲] حبیبی و دیگران، «بررسی اثرات افزودن بخار بر طراحی مفهومی و میزان انتشار آلاینده‌های محفظه احتراق توربین گاز»، مهندسی مکانیک مدرس، دوره ۴، شماره ۱۸، ۲۰۱۸، صفحات ۶۱۸-۶۰۷.
- [13] Falcitelli, M. and et al., "CFD+reactor network analysis: an integrated methodology for the modeling and optimisation of industrial systems for energy saving and pollution reduction," *Applied Thermal Engineering*, Vol. 22, No. 8, 2002, pp. 971-979.

- Geometries," The American Society of Mechanical Engineers*, Vol. 73, No. 3, 2005, pp. 374-381.
- [44] Schmitt, P. and et al., "Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 570, 2007, pp. 17-46.
- [45] Wang, S., et al., "Large-eddy simulations of gas-turbine swirl injector flow dynamics," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 583, 2007, pp. 99-122.
- [46] Sengissen, A.X. and et al., *Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames*, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31, No. 2, 2007, pp. 1729-1736.
- [47] Smagorinsky, J., "General Circulation Experiments with The Primitive Equations," *Monthly Weather Review*, Vol. 91, No. 3, 1963, pp. 99-164.
- [48] Germano, M. and et al., "A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model," *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, Vol. 3, No. 7, 1991, pp. 1760-1765.
- [49] Hanjalic, K., "Will RANS Survive LES? A View of Perspectives," *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 127, No. 5, 2005, p. 831-839.
- [50] Nogenmyr, K.-J., et al., "Large eddy simulation and experiments of stratified lean premixed methane/air turbulent flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31, No. 1, 2007, pp. 1467-1475.
- [51] Carlsson, H. and et al., "Large eddy simulations and rotational CARS/PIV/PLIF measurements of a lean premixed low swirl stabilized flame," *Combustion and Flame*, Vol. 161, No. 10, 2014, pp. 2539-2551.
- [52] Bell, J., Day, M. and Lijewski, M., "Simulation of nitrogen emissions in a premixed hydrogen flame stabilized on a low swirl burner," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 34, No. 1, 2013, pp. 1173-1182.
- [53] Day, M. and et al., "A combined computational and experimental characterization of lean premixed turbulent low swirl laboratory flames II. Hydrogen flames," *Combustion and Flame*, Vol. 162, No. 5, 2015, pp. 2148-2165.
- [54] Neumayer, M. and C. Hirsch, RANS Simulation of Methane Combustion in a Low Swirl Burner, (M. Sc. Thesis) Technische Universität München, 2013, Munich-Germany.
- [55] Lezcano, C., Amell, A. and Cadavid, F., "Numerical Calculation of the Recirculation Factor in Flameless Furnaces," *Dyna*, Vol. 80, No. 180, 2013, pp. 144-151.
- [56] Lefebvre, A.H. and Ballal, D.R. *Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions, Third Edition*, Taylor & Francis, 2010.
- [57] Peters, N., *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. 2000, Cambridge: Cambridge University Press.
- [58] Novoselov, I., *Chemical Reactor Networks for Combustion Systems Modeling*, 2018.
- [59] Bulat, G., Jones, W. and Marquis, A., "NO and CO Formation In an Industrial Gas-Turbine hydrocarbon fuels in flames. Combustion science and technology, Vol. 27, No. 1-2, 1981, pp. 31-43.
- [29] Peters, N. and B. Rogg, *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications In Combustion Systems*, Vol. 15. Springer Science & Business Media, 2008.
- [30] Innocenti, A., et al., "Turbulent Flow-Field Effects in A Hybrid CFD-CRN Model for The Prediction of NO X and CO Emissions In Aero-Engine Combustors," *Fuel*, Vol. Vol. 215, 2018, pp. 853-864.
- [31] Monaghan, R.F., et al., "Detailed Emissions Prediction for a Turbulent Swirling Nonpremixed Flame," *Energy & Fuels*, Vol. 28, No. 2, 2014, pp. 1470-1488.
- [32] Novoselov, I., *Eight-Step Global Kinetic Mechanism on Methane Oxidation with Nitric Oxide Formation for Lean Premixed Combustion Turbines*. 2018.
- [33] Monaghan, R.F., et al., "Detailed Multi-Dimensional Study of Pollutant Formation in a Methane Diffusion Flame," *Energy & fuels*, Vol. 26, No. 3, 2012, pp. 1598-1611.
- [34] Selle, L. and et al., "Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes," *Combustion and Flame*, 137, No. 4, 2004, pp. 489-505.
- [35] Roux, S. and et al., Studies of Mean and Unsteady Flow in a Swirled Combustor using Experiments, *Acoustic Analysis and Large Eddy Simulations*, Vol. 141, 2005, pp. 40-54.
- [36] Bissières, D., Bérat, C. and Gicquel, L., "Large Eddy Simulation Predictions and Validations of a Gas Turbine Combustion Chamber," *Proceedings of 17th International Symposium on Airbreathing Engines (ISABE)*, Munich, Allemagne, paper ISABE-2005-1060. 2005.
- [37] Spalding, D.B., "Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames," *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 13, No. 1, 1971, pp. 649-657.
- [38] Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H. "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion," *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 16, Issue 1, 1977, pp. 719-729.
- [39] Lumley, J. and A. M. Yaglom, *A Century of Turbulence*. Vol. 66. 2001. pp. 241-286.
- [40] Lucca-Negro, O. and O'Doherty, T., *Vortex breakdown: a review*, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 27, No. 4, 2001, pp. 431-481.
- [41] Schmitt, P. and et al., "Turbulent swirling Flames: Experimental Investigation of the Flow Field and Formation of Nitrogen Oxide," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 28, No. 1, 2000, pp. 303-309.
- [42] Biagioli, F., "Stabilization mechanism of turbulent premixed flames in strongly swirled flows," *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 10, No. 3, 2006, pp. 389-412.
- [43] Mahesh, K. and et al., "Large-Eddy Simulation of Reacting Turbulent Flows in Complex

- [65] ANSYS *Fluent Theory Guide*. Release v.14.
- [66] Held, T. and Mongia, H., "Application of a Partially Premixed Laminar Flamelet Model to a Low Emissions Gas Turbine Combustor," *ASME 1998 International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exhibition*, American Society of Mechanical Engineers, 1998.
- [67] Stevens, E., Held, T. and Mongia, H., "Swirl cup modeling part VII: partially-premixed laminar flamelet model validation and simulation of a single-cup combustor with gaseous n-heptane," *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2003.
- [68] Held, T. and et al., "A data-driven model for NO (x), CO and UHC emissions for a dry low emissions gas turbine combustor," *37th Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 2001.
- [69] Perpignan, A.A. and et al., "Emission Modeling of an Interturbine Burner Based on Flameless Combustion," *Energy & Fuels*, Vol. 32, No. 1, 2018, pp. 822-838.
- [70] Iaccarino, G., "Predictions of a turbulent separated flow using commercial CFD codes," *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 123, No. 4, 2001, pp. 819-828.
- Combustion Chamber Using LES with the Eulerian Sub-grid PDF Method," *Combustion and Flame*, Vol. 161, No. 7, 2014, pp. 1804-1825.
- [60] Frassoldati, A. and et al., "Experimental and modeling study of a low NOx combustor for aero-engine turbofan," *Combustion Science and Technology*, Vol. 181, No. 3, 2009, pp. 483-495.
- [61] Hao, N.T., "A chemical reactor network for oxides of nitrogen emission prediction in gas turbine combustor," *Journal of Thermal Science*, Vol. 23, No. 3, 2014, pp. 279-284.
- [62] Kanniche, M., "Coupling CFD with chemical reactor network for advanced NOx prediction in gas turbine," *Clean Technologies and Environmental Policy*, Vol. 12, No. 6, 2010, pp. 661-670.
- [63] Russo, C. and et al. "Micro gas turbine combustor emissions evaluation using the chemical reactor modelling approach," Vol. 2: Turbo Expo 2007, *Conference Sponsors: International Gas Turbine Institute*, pp. 531-542.
- [64] van Oijen, J.A., Lammers, F.A. and de Goey, L.P.H. "Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds," *Combustion and Flame*, Vol. 127, No. 3, 2001, pp. 2124-2134.