

شبیه‌سازی احتراق MILD میکرو ذرات زغال سنگ

دکتر، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران، amin.jalalian@gmail.com

استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران، kiumars@modares.ac.ir

امین جلالیان

کیومرث مظاهری*

چکیده

در کار حاضر احتراق MILD ذرات پودر شده زغال سنگ توسط مجموعه کد متن باز OpenFOAM، به‌طور سه‌بعدی شبیه‌سازی شد. هدف از این کار، بررسی توانایی مدل احتراقی واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی برای مدل‌سازی احتراق MILD ذرات زغال سنگ است. این مدل دارای قابلیت احتراق آهنگ محدود است. مطابق مطالعات انجام‌شده، این امر تاکنون گزارش نشده است. این مطالعه عددی با معیار نتایج آزمایشگاهی محفظه احتراق IFRF انجام می‌شود و معادلات بقا به‌طور همزمان حل می‌گردند؛ اثرات تقابل فازها با رویکرد اولپر-لاگرانژ، برهم‌کنش آشفتنگی و احتراق در فاز گازی با روش واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی، تولید و مصرف گونه‌ها توسط سینتیک کلی ۴ مرحله‌ای جونز و لیندستد محاسبه می‌شوند. نتایج نشان داد که ترکیب مدل‌های فوق، خصوصاً مدل واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی، توانایی خوبی در تخمین سرعت، دما و گونه‌ها در شرایط احتراق MILD ذرات زغال سنگ دارد. دقت دما بیشتر از گونه‌هاست، سینتیک کلی می‌تواند یکی از علل آن باشد.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی احتراق، ذرات زغال سنگ، OpenFOAM، IFRF، واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی، MILD.

Simulation of micro size coal particles MILD combustion

A. Jalalian
K. Mazaheri

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

Abstract

At this work, 3D combustion of coal pulverised particles in the MILD state has been simulated by OpenFOAM open source code. The target of this work is the study of partially stirred reactor combustion model in simulating of coal particles MILD combustion. This model can consider the finite rate chemistry. According to studies, there have been no reports on this subject so far. This numerical study is done with criterion of IFRF experimental results and the conservative equations are solved simultaneously. Interaction between phases by Euler-Lagrange approach, interaction between turbulence and combustion in continuous phase by Partially stirred reactor, production/consumption of species by 4 step Jones and Lindstedt global mechanism has been modeled. Results show that forenamed models specially partially stirred reactor can estimate the velocity, temperature, and species in MILD combustion of coal particles truly. Accuracy of temperature is better than species. Global kinetic could be one reason of this case.

Keywords: Combustion simulation, Coal particles, OpenFOAM, IFRF, Partially stirred reactor, MILD.

نامیده و عموماً مترادف در نظر گرفته می‌شوند [۳ و ۵]؛ تحت شرایط MILD می‌توان آلاینده‌ها را تا ۵۰٪، حجم محفظه احتراق را تا ۲۵٪ [۶] و مصرف سوخت را تا ۵۰٪ کاهش داد [۷] و نیز بازده گرمایی [۸] و پایداری احتراق [۹] را افزایش داد. در رژیم احتراقی MILD در مقایسه با احتراق متعارف، نوسان‌های دما و غلظت گونه‌ها، کوچک‌تر و منطقه واکنش وسیع‌تر است [۱۰] و آرایش یکنواختی از دما و گونه‌ها وجود دارد [۳] و محل دقیق جبهه شعله به‌صورت تغییرات شدید متغیرها یا آهنگ (نرخ) بالای اتلاف آن‌ها نیست [۱۱]. محققانی چون گالتی گزارش نمودند که در احتراق گازی، با افزایش دمای واکنش‌دهنده‌ها تا بالای دمای خود اشتعالی و بازگشت دادن محصولات برای ایجاد رقت لازم، جبهه شعله قابل دیدن نیست [۱۱]. احتراق MILD ابتدا برای سوخت‌های گازی ایجاد و سپس برای سوخت‌های غیرگازی هم بکار رفت. مراجعی مثل [۶ و ۷ و ۱۰ و ۱۱] به احتراق MILD با سوخت گازی پرداختند و مراجعی مانند [۱ و ۳ و ۵ و ۹ و ۱۲] احتراق MILD را در سوخت زغال سنگ بررسی نمودند.

۱- مقدمه

زغال سنگ یکی از منابع فسیلی تولید انرژی در جهان است. احتراق پودر زغال سنگ بزرگ‌ترین منبع تولید توان برای برق است. با وجود تلاش برای جایگزینی سوخت‌های فسیلی با انرژی‌های تجدیدپذیر، سوخت زغال سنگ در کشورهای توسعه‌یافته همچنان دارای اهمیت خواهد بود [۱ و ۲]. کشور ایران از نظر منابع زغال سنگ در رتبه ۳۰ جهان [۴] و رتبه اول خاورمیانه است. توسعه فناوری‌های افزایش بازده و کاهش آلاینده‌های احتراق زغال سنگ از اهداف مهم پژوهشگران احتراق جهت کاهش مشکلات زیست‌محیطی است [۳].

فناوری احتراق MILD از دستاوردهای احتراقی در سال‌های اخیر است [۳]. اصطلاح MILD، مخفف عبارت رقیق‌سازی معتدل یا به شدت کم اکسیژن^۱ است. این فناوری به نام‌های احتراق دما بالا^۲، احتراق با هوای دما بالا^۳، احتراق بی‌شعله^۴ و اکسیداسیون بی‌شعله^۵ نیز

^۱ Moderate or Intense Low Oxygen Dilution

^۲ HiCOT (High temperature combustion)

^۳ HiTAC (High Temperature Air Combustion)

^۴ Flameless Combustion

^۵ FLOX (FLameless Oxidation)

جهت جلوگیری از اتلاف گرما به واسطه خروج محصولات، می توان از گرمای آن ها برای گرمایش مواد اولیه استفاده کرد که صرفه جویی سوخت را به دنبال دارد [۱۰]. با پیش گرمایش، دمای بیشینه احتراق افزایش یافته و موجب افزایش آلاینده ها مخصوصاً NOx گرمایی می شود و همچنین از جنبه ایمنی ممکن است مشکلاتی برای سیستم ایجاد نماید بنابراین باید به طریقی دمای بیشینه احتراق را کاهش داد، این کار به وسیله کاهش گرمای تولیدی توسط واکنش، یعنی کاهش دادن آهنگ واکنش، امکان پذیر است، بدین منظور، رقیق سازی مخلوط واکنشگر و اصطلاحاً رقیق سوزی به وسیله بازگشت محصولات پیشنهاد شده است [۱۰] در این حالت، هوا و سوخت با مقادیر زیادی از محصولات، مخلوط می شوند [۸] و رقیق می گردند. برای تأمین انرژی پیش گرمایش، می توان از سامانه ی بازیاب و یا اختلاط محصولات با مواد اولیه (به وسیله بازچرخش قوی داخل محفظه احتراق) استفاده کرد. بازچرخش محصولات می تواند توسط مومنتوم بالای هوای احتراق یا طراحی خاص هندسی محفظه [۷] یا القای چرخش به هوای ثانویه در مشعل ایجاد شود. بنابراین اساس فناوری MILD بر ترکیبی از پیش گرمایش هوا و کاهش غلظت سوخت به وسیله محصولات احتراق با غلظت اکسیژن کم استوار است [۸]؛ یا به عبارتی دیگر پیش گرمایش هوا یا سوخت یا هر دو، به انضمام رقیق سازی اکسیژن. تعریف دقیق تری نیز توسط «کالوایر» ارائه شد [۱۳] احتراقی که در آن دمای ورودی مخلوط واکنش دهنده بالاتر از دمای خود اشتعالی مخلوط باشد درحالی که بیشینه افزایش دمای قابل دسترسی، نسبت به دمای ورودی در حین احتراق، کمتر از دمای خود اشتعالی به کلین باشد ($\Delta T < T_{si} < T_{in}$). و بر [۵] برخی شرایط و خواص اصلی احتراق MILD را برشمرد: ۱- احتراق به طور کلی در کل محفظه روی دهد و به طور معمول شعله قابل رؤیت نباشد. ۲- توزیع دما و اکسیژن نسبتاً یکنواخت باشد اگرچه در نزدیکی مشعل گرادیان اندکی دارند. بنابراین نامشهود بودن شعله در شرایط MILD الزامی نیست.

با توجه به مطالب فوق، از ویژگی های احتراق MILD، افزایش بازده گرمایی و پایداری احتراق، سرعت پایین واکنش، یکنواختی نسبی دما و گونه ها، کاهش قله دمایی، آلاینده ها، حجم محفظه احتراق و مصرف سوخت است؛ بنابراین این فناوری بسیار کارآمد بوده و آینده امیدوار کننده ای دارد و مطالعه فرایندها و بررسی عددی آن، ارزش فراوانی دارد. مطابق مطالعات حاضر، بررسی های انجام شده در احتراق MILD ذرات زغال سنگ، نسبت به احتراق گازی دایره محدودتری دارد و نیاز به مطالعات بیشتری دارد. در ادامه به بررسی کارهای عددی و تجربی در احتراق ذرات زغال سنگ، خصوصاً در حالت MILD پرداخته می شود. «لاکوود» در سال ۱۹۹۸ به شبیه سازی احتراق پودر زغال سنگ پرداخت [۱۴]. وی نتیجه گیری نمود که روش k-ε برای جریانات شدیداً چرخشی، ناکارآمد است و مشخصاً اندازه و قدرت ناحیه بازچرخش داخلی را به درستی بازسازی نمی کند. «آرسینو» در سال ۲۰۰۰ در یک کار آزمایشگاهی به احتراق پودر زغال سنگ گواسیر^۱ در محفظه احتراق IFRF NO.1 در شرایط MILD پرداخت [۱۲] که شاید اولین کار تجربی روی احتراق MILD زغال سنگ باشد [۳]. مشاهده شد

که تقریباً تمام حجم محفظه از محصولات احتراق با ۳٪ اکسیژن پر شده است. دما تقریباً در تمام حجم محفظه غیر از نزدیکی انژکتورهای سوخت یکنواخت است و شعله زغال سنگ قابل رؤیت است. «کیم» در سال ۲۰۰۷ به شبیه سازی مساله IFRF [۱۲] پرداخت [۸]. در این کار از مدل های احتراقی EDC، آشفنگی Standard k-ε، تابشی DO، فرارزدایی^۲ FG-DVC و سینتیک کلی واکنش های گازی استفاده شد. نتایج سرعت، دما و گونه ها به جز در نزدیکی انژکتورهای سوخت و هوا دارای دقت خوبی است، البته گونه CO در کل دارای اختلاف قابل توجهی است و زیاد تخمین زده شده است و علت آن استفاده از سینتیک کلی دانسته شد. از نقاط قوت این شبیه سازی تخمین قابل قبول هیدروکربن است که در شبیه سازی های دیگران روی مساله IFRF، گزارشی از آن ارائه نشده است، بنابراین تنظیمات مربوط به هیدروکربن های سبک در این شبیه سازی، قابل اتکا است. «شفل» در سال ۲۰۰۹ با نرم افزار Fluent به شبیه سازی مساله معیار IFRF [۱۲] پرداخت [۳]. وی از مدل های واکنش سطحی ذاتی^۳ و سینتیک تک مرحله ای برای تکمیل سوزش ماده نیم سوز، k-ε، DO، CPD برای فرارزدایی، مدل احتراقی EBU و رویکرد اوپلر-لاگرانژ بهره گرفت. ماده فرار به صورت گونه مصنوعی^۴ منظور و از واکنش دو مرحله ای برای احتراق آن استفاده شد. نتایج شبیه سازی در کل تطابق خوبی با نتایج تجربی داشت، بنابراین مدل های مذکور، در کل کارایی قابل قبولی دارند. «استدلر» در سال ۲۰۱۰ به آزمایش و شبیه سازی احتراق پودر زغال سنگ با شرایط احتراق بی شعله با نرم افزار Fluent پرداخت [۱۵]. در این کار از مدل های استاندارد و k-ε realizable، اوپلر-لاگرانژ، مدل دو واکنش رقیب فرارزدایی، مدل احتراقی EDM/Finite rate، DO، گونه مصنوعی برای مواد فرار و سینتیک ۴ مرحله ای استفاده شد. نتایج مدل k-ε realizable در تخمین سرعت بهتر از مدل استاندارد بود. نتایج عددی گونه ها در نزدیکی مشعل برای O₂ و CO دقیق نبود گرچه نتایج CO₂ قابل قبول است. همچنین در این آزمایش، گزارش شد که برای رسیدن به شرایط بی شعله، یعنی کم بودن شدت واکنش و وسیع بودن ناحیه آن، نیاز به گاز خنثای N₂ به عنوان ناقل است. «مردانی» [۱۰] در سال ۲۰۱۰ به طور عمیق به بررسی احتراق MILD پرداخت و با بررسی توزیع عدد دامکوهرل در یک کار تجربی، نتیجه گیری نمود که در احتراق MILD سرعت انجام واکنش های شیمیایی در مقایسه با احتراق متعارف بسیار کمتر است؛ گرچه با فاصله گرفتن از دهانه نازل، به واسطه نفوذ اکسیژن اضافی به منطقه واکنش، عدد دامکوهرل افزایش یافت و تنها فواصل کمی از دهانه نازل در مشعل مذکور، مناسب مطالعه احتراق MILD است [۱۰]. از کار وی نتیجه گیری می شود که الزاماً تمام فضای احتراق دارای شرایط MILD نخواهد بود و نیز مدل های احتراق سریع برای شرایط MILD مناسب نیستند. «واسیلاری» در سال ۲۰۱۲ با Fluent به مساله معیار IFRF پرداخت [۱۶]. وی از مدل های realizable k-ε، CPD، P-1، اوپلر-لاگرانژ، مدل محدود به سینتیک/نفوذ^۵ و سینتیک سه مرحله ای برای تکمیل سوزش، استفاده کرد و از نفوذ

² Devolatilization

³ Intrinsic

⁴ Pseudo-volatile

⁵ Kinetic/diffusion limited

¹ Guasare

می‌کند: ۱. گرمایش ذره، ۲. خشک شدن ذره، ۳. تشکیل و آزاد شدن مواد فرار ۴. احتراق مواد فرار (واکنش همگن)، ۵. احتراق مواد نیم‌سوز^۲ (واکنش ناهمگن) و ۶. ایجاد خاکستر. ترکیب ماده نیم‌سوز متناسب با نوع زغال‌سنگ، اندازه و خصوصاً آهنگ گرمایش و دمای فرارزدایی است و مقدار عمده‌اش، کربن است [۲۰]. پس از احتراق نیم‌سوز، خاکستر باقی می‌ماند که از نظر احتراقی ماده‌ای خنثی است و با سیال اطراف تبادل مومنتوم و انرژی دارد. در شبیه‌سازی کار حاضر، معادلات بقای جرم، مومنتوم، گونه‌ها و انرژی به‌طور همزمان حل شدند. برای بستن مساله و تکمیل معادلات، از روش SST k- ω برای آشفتگی، مدل P1 برای تابش، مدل PaSR برای احتراق، سینتیک ۴ مرحله‌ای LL، مدل فرارزدایی تک سینتیکی و مدل سینتیک/نفوذ برای تکمیل سوزش استفاده شد. در جریانات دوفازی با رویکرد اوپلر-لاگرانژ، معادلات اصلی برای ذره به‌صورت معادلات دیفرانسیل معمولی است که به روش اوپلر مورد محاسبه قرار گرفت. تبادل جرم، مومنتوم و انرژی بین فازها به‌صورت جمله چشمه در معادلات وارد شد. در ادامه به تشریح این معادلات و بیان علل انتخاب مدل‌های مذکور پرداخته می‌شود.

۲-۱- معادلات فاز پیوسته (جریان سیال)

در کار حاضر با توجه به مغشوش بودن جریان، معادلات متوسط‌گیری شده فاور در جریان سیال به کار رفت. معادله پیوستگی در حالت دو فازی به فرم موجود در [۲۰] نوشته شد. به‌واسطه اندرکنش سیال و ذرات، جمله چشمه در این معادله به وجود می‌آید [۲۱]. معادله بقای مومنتوم به فرم ارائه‌شده در [۲۲] استفاده شد. برای محاسبه لزجت دینامیکی از روش ساترلند^۳ و برای تخمین جملات جابجایی، از روش وتلیبر^۴ استفاده شد. این روش نسبت به روش پادبادسو^۵، خطای نفوذ عددی کمتری دارد و نسبت به روش کوئیک، خطای زیاد یا کم برآورد کردن ندارد [۲۳]. مطابق بررسی‌های [۲۴] روش ونلیر در احتراق گاز متان، دقت بالاتری نسبت به پادبادسو دارد. برای کوپل کردن سرعت و فشار، روش PISO [۲۵] انتخاب شد. در مدل‌سازی آشفتگی، مطابق مطالعات هیکنین [۲۶]، روش k- ϵ روش غالب شبیه‌سازی‌ها در احتراق سوخت‌های پودری است، اما این مدل در جریانات چرخشی خطای زیادی دارد. مدل SST k- ω نزدیک مرز جامد از k- ω و دور از مرز از k- ϵ استفاده می‌کند لذا در کار حاضر از این مدل استفاده شد. روابط مربوط به این مدل در مرجع [۲۰] قابل رؤیت است. معادله بقای انرژی پس از مدل‌سازی و تقریب برخی جملات و نیز صرف‌نظر از برخی جملات کم‌اهمیت به فرم زیر تبدیل می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \left(\bar{e}_s + \frac{1}{2} \bar{u}_i \bar{u}_i \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{u}_j \left(\bar{e}_s + \frac{1}{2} \bar{u}_i \bar{u}_i \right) + \bar{u}_j \bar{p} \right) = \frac{d\bar{p}}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \alpha_{\text{eff}} \frac{\partial \bar{e}_s}{\partial x_j} \right] + S_{\text{rad}} + \bar{\omega}_T + S_{p,h} \quad (1)$$

که e_s انرژی داخلی محسوس، S_{rad} اثر تابش، ω_T آهنگ آزاد شدن انرژی احتراق همگن و $S_{p,h}$ اثر گرمایی فاز گسسته است. مکانیزم غالب

حفره‌ای صرف‌نظر نمود. وی در بررسی برهم‌کنش اغتشاش و احتراق روش‌های EDM (با سینتیک دومرحله‌ای برای گونه مصنوعی) و EDC (با سینتیک چهارمرحله‌ای LL و سینتیک تشریحی DRM برای گازهای سبک) را مقایسه نمود. نتایج وی به‌جز در نزدیکی جت سوخت تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی داشت. وی مشاهده کرد که مدل EDM-2S دما را بیشتر از روش‌های دیگر پیش‌بینی می‌کند زیرا با فرض شیمی بی‌نهایت سریع، آهنگ واکنش بیشتر می‌شود. مطابق داده‌های وی، مدل EDC-JL در تخمین گونه‌ها تفاوت چندانی با مدل EDC-DRM ندارد گرچه در تخمین دما خطای بیشتری دارد. وی نتیجه‌گیری نمود که در احتراق MILD زغال‌سنگ، چون فقط مواد فرار در فاز گازی می‌سوزند، تأثیر مدل احتراقی، نسبت به سوخت‌های گازی، کمتر است و اگر دقت خیلی بالایی نیاز نیست از مکانیزم‌های کلی هم می‌توان استفاده نمود. «می» در سال ۲۰۱۳ به بررسی اثر تغییر سرعت هوای اولیه و ثانویه با دبی ثابت در مساله IFRF پرداخت [۱۷]. وی از مدل‌های EDC، P1، CPD، realizable k- ϵ سینتیک ۴ مرحله‌ای LL، استفاده نمود و نتایج قابل قبولی در تخمین دما، گونه‌ها و خصوصاً سرعت گرفت. «ویدمان» در سال ۲۰۱۶ به آزمایش مشعل احتراق MILD ذرات زغال‌سنگ پرداخت [۱۸]. وی گزارش نمود که اگرچه در نواحی احتراق مواد فرار حالت بی‌شعله برقرار است اما در نواحی احتراق مواد نیم‌سوز، نقاط سوزش ذرات مشهود است.

همان‌گونه که بیان شد، مطابق نتایج اکثر کارها، در مدل‌سازی احتراق MILD نیاز به مدل‌های احتراقی آهنگ محدود است. این‌گونه مدل‌ها شامل مدل‌های EDC و PaSR^۱ می‌شوند. در کارهای عددی انجام‌شده بر احتراق ذرات زغال‌سنگ از مدل‌های احتراقی مختلف استفاده شده است. از جمله EBU در کار شفل [۳]، EDM توسط واسلاری [۱۶] و استدلر [۱۵]، EDC توسط کیم [۸]، واسلاری [۱۶] و می [۱۷]، اما استفاده از روش PaSR در شبیه‌سازی احتراق MILD ذرات زغال‌سنگ مشاهده نشد. با توجه به اینکه مطابق گزارش منابع گوناگون مثل [۱۹] مدل احتراقی PaSR دقت خوبی در مدل‌سازی احتراق MILD گازی دارد، آزمایش نتایج این مدل احتراقی در احتراق MILD ذرات و الزامات آن جای بررسی دارد. در کار حاضر از این مدل احتراقی به همراه سینتیک کلی و برای صحت‌سنجی نتایج، از مساله معیار IFRF که دارای شرایط MILD است، استفاده می‌شود. در مدل‌سازی احتراق MILD پودر زغال‌سنگ، علاوه بر بررسی مدل احتراقی آهنگ محدود PaSR، نیاز به مطالعه و شبیه‌سازی بسیاری از پدیده‌های درگیر در این مساله پیچیده است. پدیده‌های متنوع از جمله آشفتگی، جریان دوفازی، تبخیر، تابش، تغییر فاز سوخت جامد (فرارزدایی)، احتراق مواد فرار، احتراق مواد نیم‌سوز، برهم‌کنش احتراق و آشفتگی، تولید گونه‌های مختلف، واکنش‌های شیمیایی، وجود سوخت‌های مختلف (متان، هیدروژن، کربن) و وقوع شرایط MILD، ذاتاً پیچیده‌اند.

۲- معادلات حاکم و روش عددی

زغال‌سنگ پس از ورود به محفظه‌ی احتراق، ۶ مرحله زیر را طی

^۱ Partially stirred reactor

^۲ Char

^۳ Sutherland

^۴ Vanleer

^۵ Upwind

انتقال گرما در احتراق زغال‌سنگ، تابش است [۲۷]. ذرات علاوه بر جذب و صدور تابش، اشعه‌های تابش را پراکنده می‌کنند. جمله تابش، به شکل زیر ساده می‌شود. تشریح مطلب در [۲۷ و ۲۸] موجود است.

$$S_{rad} = \kappa G - 4\sigma\kappa T^4 \quad (2)$$

σ ثابت بولتزمن و G کل تابش ورودی است که نیاز به محاسبه شدت تابش I_{η} دارد که آن نیز از حل معادله انتقال تابش RTE محاسبه می‌شود. روش‌های مختلفی جهت حل معادله RTE ارائه شده است. انتخاب مدل عددی بستگی به مساله (هندسه، شرایط کاری، دقت موردنظر و میزان دسترسی به خواص تابشی محیط و سطوح) و زمان محاسبات و تجهیزات دارد [۲۶]. در شبیه‌سازی تابش به‌طور عموماً از چهار روش P1، DO، DTRM و رزولند استفاده می‌شود. روش‌های DO و DTRM هزینه محاسباتی بالایی دارند. از بین مدل‌های مذکور فقط P1 و DO برهم‌کنش تابشی گاز و ذرات را در نظر می‌گیرند [۲۹]. مطابق گزارش کریست [۲۰] در مدل‌سازی احتراق ذرات زغال‌سنگ عموماً از این دو مدل استفاده می‌شود اما معادلات DO موجود در OpenFOAM برای اثرات ذرات مناسب نیست و نیز شامل عبارت انتگرالی که مربوط به پراکندگی ورودی می‌باشد، نیست لذا پراکندگی به‌درستی حساب نمی‌شود. اگرچه P1 اتلاف در انتقال تابش را زیاد تخمین می‌زند. همچنین زمان محاسبات P1 خیلی کمتر از DO است [۲۴] بنابراین در کار حاضر از مدل P1 استفاده شد.

۲-۲- روش P1

این روش یک حل تقریبی است و معادله RTE را به مجموعه‌ای نسبتاً ساده از PDE تبدیل می‌کند. در این روش وابستگی معادله شدت تابش به جهت، انتگرالگیری شده و کاهش می‌یابد [۲۷]. در روش P1 با فرض چندجمله‌ای لژاندر برای شدت تابش، مقدار G محاسبه می‌شود. در نهایت با احتساب نقش ذرات، رابطه زیر به دست می‌آید [۲۰ و ۳۰].

$$\frac{1}{3\kappa + \sigma_{eff}} \nabla^2 G - \kappa G = -4(\kappa\sigma T^4) - E \quad (3)$$

σ_{eff} ضریب پراکندگی ذرات است. κ مجموع قابلیت جذب گازها و ذرات است. E صدور تابشی ذرات است. در محاسبات تابشی علاوه بر دقت روش حل معادله تابش، دقت خواص تابشی محیط نیز دارای اهمیت است [۲۹]. در OpenFOAM برای محاسبه ضرایب جذب و صدور گاز، مدلی به نام greyMeanAbsorptionEmission توسط مجموعه ساندا [۳۰] نگاشته شد که در آن، قابلیت جذب فاز گازی برابر برهم‌نهی قابلیت جذب گونه‌های گازی است و قابلیت جذب هرگونه با چندجمله‌ای وابسته به دما محاسبه می‌گردد، مطابق رابطه زیر [۲۰].

$$a_g = \frac{p}{p_{atm}} \sum_i X_i (b_{0,i} + b_{1,i} T^{S_i} + b_{2,i} T^{2S_i} + b_{3,i} T^{3S_i} + b_{4,i} T^{4S_i} + b_{5,i} T^{5S_i}) \quad (4)$$

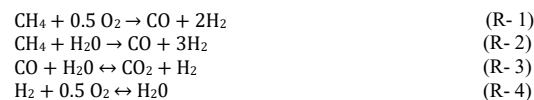
X_i غلظت گونه است و مقادیر ضرایب b از ساندا [۴۶] گرفته شد. توان‌ها نیز ۱ یا ۱- هستند که در مرجع فوق تعریف شده‌اند. هیکنین [۲۶] مشاهده نمود که اثر دوده بر دما و غلظت‌ها ناچیز است، بنابراین در کار حاضر از اثرات دوده صرف‌نظر شد.

برای مدل‌سازی انتقال گونه‌ها از معادله بقای گونه‌ی k از فرم موجود در مراجع [۳۱ و ۳۲] استفاده شد.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \right] + \bar{\omega}_k + S_{p,Y_k} \quad (5)$$

در این معادله، $\bar{\omega}_k$ آهنگ خالص تولید/مصرف گونه k و S_{p,Y_k} تغییرات گونه‌گازی حاصل از اثر ذرات (تبخیر، فرارزادایی و واکنش‌های ناهمگن) است. آهنگ خالص واکنش را می‌توان در جریان‌های لایه‌ای از مدل آرنیوس و در جریان‌های آشفته از مدل‌های احتراقی آشفته (مانند PaSR) به دست آورد. در محاسبه این جمله، با فرض شیمی آهنگ محدود، مکانیزم (سینتیک) شیمیایی تأثیر زیادی بر نتایج دارد. سینتیک‌های تفصیلی گرچه دقت بیشتر نسبت به سینتیک‌های کاهش‌یافته^۱ و کلی^۲ دارند اما به مراتب دارای زمان محاسبات بیشتری هستند. مطابق نتایج واسلاری [۱] و مئی [۱۷] مکانیزم کلی ۴ مرحله‌ای JL نتایج قابل قبولی در احتراق ذرات زغال‌سنگ دارد. ۴ واکنش مکانیزم JL برای متان مطابق واکنش‌های (R-1) تا (R-4) است. پارامترهای آرنیوسی و مرتبه واکنش‌های JL در

جدول ۱ دیده می‌شود. جزئیات بیشتر در این مورد در مرجع [۲۴] قابل رؤیت است. نتایج این مکانیزم با چند مکانیزم کلی دیگر در [۲۴] مقایسه و در مجموع تخمین بهتری از دما و گونه‌ها دیده شد. از آنجا که گازهای فرار عموماً شامل H_2 ، CO_2 ، CH_4 هستند و مکانیزم مذکور دارای این گونه‌ها و واکنش‌های تجزیه‌ای است و در کارهای مشابه، [۱ و ۱۷]، استفاده و تأیید شده است، در کار حاضر از این مکانیزم استفاده شد.



جدول ۱- پارامترهای آرنیوسی و مرتبه واکنش‌های JL [۲۴]

واکنش	A	b	E (cal/mol)	مرتبه‌های واکنش
(R-1)	4.4e13.25	0	30000	$[CH_4]^{0.5} [O_2]^{1.25}$
(R-2)	3e11	0	30000	$[CH_4][H_2O]$
(R-3)	2.75e12	0	20000	$[CO][H_2O]$
(R-4)	6.8e17.25	-1	40000	$[H_2]^{0.25} [O_2]^{1.5}$

۲-۳- مدل‌سازی اندرکنش آشفته‌گی و احتراق

برای پدیده اندرکنش آشفته‌گی و احتراق باید مدل‌های با دقت مناسب در نظر گرفت. در کار مردانی [۱۰] دیده شد که در احتراق MILD در صورت عدم ایجاد رابطه مناسب بین آشفته‌گی و شیمی، خطای محاسباتی مخصوصاً در غلظت گونه‌ها افزایش می‌یابد. وی از کانتور عدد دامکوهرل استنتاج نمود که استفاده از نظریه‌های آهنگ محدود برای مدل‌سازی احتراق MILD ضرورت دارد، در کار سوچی [۶] نیز به این مطلب اشاره شد. از جمله مدل‌های رایج در مدل‌سازی این پدیده می‌توان به مدل‌های EBU، EDM، EDC، PaSR که بر پایه‌ی اتلاف گردابه‌های آشفته هستند اشاره کرد. تاکنون هیچ مدلی برای شبیه‌سازی احتراق MILD به‌طور ویژه معرفی نشده و بنابراین از مدل‌های احتراقی موجود، استفاده شده و سعی بر تطبیق مناسب آن‌ها با واقعیت بوده است [۱۰]. در روش‌های EBU و EDM فرض می‌شود که شیمی نقش صریحی در آهنگ واکنش‌ها دارا نیست و آهنگ واکنش

¹ Reduced

² Global

۲-۶- معادلات انتقال گرما، انتقال جرم و احتراق ذرات

مراحل ۱، ۲، ۳ و ۵ از ۶ مرحله مذکور در بخش ۲، باعث تغییر دمای ذره می‌شوند. رابطه تعادل انرژی در ذره در حالت کلی به شکل زیر است [۳ و ۳۹].

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_g - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma \left(\frac{G}{4\sigma} - T_p^4 \right) + \frac{dm_{H_2O}}{dt} h_{fg} + \frac{dm_{Vol}}{dt} h_{Devol} + f_h \cdot \frac{dm_{char}}{dt} \cdot h_{reac} \quad (10)$$

جملات سمت راست به ترتیب حاصل از جابجایی، تابش، تبخیر، فرارزدایی و احتراق نیم‌سوز است. h ضریب انتقال گرمای جابجایی از رابطه رتنز مارشال به دست می‌آید. ϵ_p قابلیت صدور ذره است، با توجه به داده‌های مودست [۲۷] قابلیت صدور زغال‌سنگ و ماده نیم‌سوز برابر ۱ منظور شد [۲۰]. h_{fg} گرمای نهان تبخیر و h_{Devol} گرمای نهان فرارزدایی است که طبق گزارش کریست [۲۰] به خاطر کم بودنش می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. f_h بخشی از انرژی واکنش‌های سطحی است که توسط ذره نیم‌سوز جذب می‌شود [۳]. با توجه به توصیه شغل [۳] مقدار f_h برابر ۰٫۳ انتخاب شد. h_{reac} گرمای حاصل از احتراق ماده نیم‌سوز است.

مراحل ۲، ۳ و ۵ که در ادامه تشریح خواهند شد، باعث کاهش جرم ذره می‌شوند. تغییر جرم ذره از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۲]:

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{dm_{p,H_2O}}{dt} + \frac{dm_{p,Vol}}{dt} + \frac{dm_{p,Char}}{dt} \quad (11)$$

آهنگ تبخیر از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۰].

$$\frac{dm_{p,H_2O}}{dt} = A_p M_{H_2O} h_m (C_{H_2O,p} - C_{H_2O,g}) \quad (12)$$

$C_{H_2O,g}$ و $C_{H_2O,p}$ غلظت مولی بخار روی سطح ذره و فاز گازی است. محاسبه هر یک از پارامترهای این معادله در [۳۹] تشریح شده است. به‌طور کلی برای مدل‌سازی فرآیند آزاد شدن گازهای فرار، دو نوع رویکرد ساختاری^۵ و تجربی^۶ ارائه شده است. در رویکرد تجربی از عباراتی عمومی که بر پایه واکنش‌های شیمیایی کاهش یافته هستند، استفاده می‌شود و پیچیدگی کمتری نسبت به رویکرد ساختاری دارد و بر اساس زغال‌سنگ بیتومینوس گسترش یافته است [۴۰] و به‌طور رایج در CFD استفاده می‌شوند [۲]. از انواع روش‌های تجربی می‌توان به روش‌های آهنگ ثابت^۷ و آهنگ تک سینتیکی^۸ اشاره نمود. روش آهنگ تک سینتیکی توسط بدزیوچ [۴۰] ارائه شد. در این روش فرض می‌شود که در طی یک تجزیه کلی، سوخت جامد به گاز فرار و جامد باقیمانده تبدیل می‌شود. این مدل، در کاربردهای مهندسی رایج است [۲۶]. در این روش آهنگ آزاد شدن گاز فرار به مقدار گازهای فرار ذره و دمای آن وابسته است و از طریق رابطه زیر محاسبه می‌شود [۴۰].

$$\frac{dm_{p,Vol}}{dt} = -\frac{dV}{dt} = -A_p \cdot \exp\left(\frac{-E_v}{R_u T_p}\right) (V^* - V_t) \quad (13)$$

V^* کل ماده فرار قابل خروج از ذره است که شدیداً تابع آهنگ گرمایش و دمای نهایی ذره بوده [۲] و با ضریب Q مقدار مواد فرار در تجزیه تقریبی متناسب است. مقدار Q از نمودارهای ارائه‌شده در [۴۰]، برای زغال‌سنگ گواسیر حدود ۱٫۳۶ است. V_t ماده فراری است که تا

متوسط، به‌طور عمده توسط حرکت‌های آشفته کنترل می‌شود. اگرچه مدل EDM را می‌توان به‌طور ترکیبی با روش آرنیوس استفاده کرد تا اثرات سینتیک وارد شود. مدل EDC بر اساس تشریح تفصیلی اتلاف گردابه‌های آشفته است و سلول‌های محاسباتی به دو قسمت ریزساختار^۱ و سیال اطراف^۲ تقسیم می‌گردد و واکنش‌های شیمیایی فقط در ریزساختارها، که محل اتلاف گردابه‌ها است، روی می‌دهد [۲۳]. این مدل احتراقی گزینه مناسبی برای استفاده در شرایط احتراقی MILD است [۱۰]. مدل PaSR (واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی) بر مبنای مدل EDC شکل گرفت و در آن هر سلول محاسباتی به دو ناحیه غیر واکنشی و واکنشی تقسیم می‌شود [۳۴]. ناحیه واکنشی به‌صورت واکنش‌گاه کاملاً آمیخته در نظر است [۳۵]. در این مدل کل فرایند به‌صورت دو گام موازی در نظر گرفته می‌شود: (۱) غلظت اولیه در ناحیه واکنشی از C_0 به C تغییر می‌کند. (۲) در اثر آشفته‌گی کسر واکنشی با کسر غیرواکنشی مخلوط و غلظت متوسط C_1 ایجاد می‌شود [۳۶]. آهنگ خالص تولید گونه i از ضرب پارامتر κ در آهنگی که توسط روش آرنیوس محاسبه می‌شود به دست می‌آید [۳۶ و ۳۷].

$$\dot{\omega}_i = \kappa \dot{\omega}_{i,Arr} \quad (6)$$

$$\kappa = \frac{\tau_{ch}}{\tau_{ch} + \tau_{mix}} \quad (7)$$

τ_{ch} زمان واکنش شیمیایی و τ_{mix} زمان اختلاط است [۳۶] که از روابط زیر به دست می‌آید [۳۴].

$$\frac{1}{\tau_{ch}} = \max\left\{\frac{-\dot{\omega}_F}{\rho Y_F}, \frac{-\dot{\omega}_{O_2}}{\rho Y_{O_2}}\right\}; \quad \tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \epsilon}} \quad (8)$$

Y_F کسر جرمی سوخت و C_{mix} ثابت آهنگ اختلاط است و مقادیر آن در بازه ۰٫۰۳-۰٫۱۰ پیشنهاد شده است [۳۶].

۲-۴- معادلات حاکم بر ذرات از دیدگاه لاگرانژی

در جریان رقیق ذرات، که ذرات دارای کسر حجمی بین 10^{-6} تا 10^{-3} هستند، برای شبیه‌سازی حرکت ذرات به‌طور عموم از چارچوب اویلری-لاگرانژی با تقابل دو سویه ذره-سیال استفاده می‌شود [۳۸]. ذرات حاصل از آسیاب شدن زغال‌سنگ در بویلرهای پودری حالت چنددانه‌ای^۳ دارند با توجه به نتایج خوب شغل [۳]، در کار حاضر از تابع توزیع اندازه رزین راملر^۴ استفاده شد.

۲-۵- معادلات حرکت ذرات

برای یافتن خط سیر ذرات، از معادله توازن نیروهای وارد بر ذره انتگرال‌گیری می‌شود. نیروهای وارد در این‌گونه مسائل، شامل وزن ذره و نیروی پسا است [۳ و ۲۸].

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = f_{D,i} + g_i \left(\frac{\rho_p - \rho_g}{\rho_p} \right), \quad i = x, y, z \quad (9)$$

$u_{p,i}$ مؤلفه سرعت ذره در جهت i ، $f_{D,i}$ نیروی پسا (با واحد نیوتن بر کیلوگرم)، g شتاب گرانش، ρ_p و ρ_g به ترتیب چگالی ذره و سیال است.

⁵ Retention coefficient

⁶ Structural method

⁷ Empirical method

⁸ Constant Rate Devolatilization Model

⁹ Single Kinetic Rate Model

¹ Fine structures

² Surrounding fluid

³ Poly-disperse

⁴ Rosin-rammler distribution function

جدول ۳- برخی ثوابت مورد استفاده در شبیه سازی

P_{r_t}	Sc	Sc_t	C_{mix}
۰٫۷	۰٫۷	۰٫۷	۰٫۱

برای حل معادلات از کد متن باز OpenFOAM نسخه ۱۶۱۲ [۳۲] با زبان برنامه نویسی شیء گرا ++C استفاده شد. برای حل این مساله از حل گر ناپایای coalChemistryFoam از دسته حل گرهای لاگرانژی استفاده شد.

۳- تشریح مسأله نمونه

بخش های مختلف این محفظه در شکل ۱ از بالا دیده می شود. مطابق گزارش [۱۲] ارتفاع و عرض این محفظه ۲ m و طول آن ۶٫۲۵ m است. مشعل شامل یک لوله مرکزی با قطر ۱۲۵ mm است که هوای ثانویه را وارد می کند. در این آزمایش، بازیاب با پیش محترق کننده^۱ جایگزین شد، که در آن هوا با گاز طبیعی می سوزد و تا دمای ۱۶۲۳ K پیش گرم می شود. سپس O_2 به گازهای خروجی از آن اضافه می گردد تا شرایط کسر O_2 اتمسفر را پیدا کند و به عنوان هوای ثانویه وارد محفظه احتراق اصلی شود. این امر باعث تأمین پیش گرمایش و محصولات لازمه جهت ایجاد شرایط MILD می شود. همچنین از طریق دو لوله جانبی، با قطر ۲۷٫۳ mm هوای اولیه با دمای ۳۱۳ K همراه ذرات وارد می شود. سرعت هوای اولیه و ثانویه به ترتیب ۲۶ m/s و ۶۵ است. آهنگ ورود زغال سنگ ۶۶ kg/h است [۱۲]. دمای دیوارها حدود ۱۵۲۳ K است. این کار توسط [۱ و ۳ و ۸ و ۱۶ و ۱۷] شبیه سازی شده است. در کار حاضر لوله ای به طول ۲۰ cm به ورودی ها اضافه گردید. این مسیر اضافه باعث خشک شدن ذرات در این ناحیه می شود. ورود ذرات به صورت مرطوب به محفظه احتراق، می تواند باعث اختلاف نتایج گردد. با توجه به تقارن نسبی در این مساله (دو صفحه تقارن)، می توان یک چهارم از محفظه را حل کرد [۱ و ۳ و ۸ و ۱۷]. ترسیم هندسه مطابق شکل ۲ و شبکه بندی کاملاً ساختاریافته توسط نرم افزار گمبیت انجام شد. در این آزمایش از زغال سنگ گواسیر استفاده شد که از نوع بیتومینوس A با مواد فرار زیاد و خاکستر کم است. تجزیه و تحلیل تقریبی و نهایی این زغال سنگ در جدول ۴ دیده می شود.

زمان t از ذره خارج شده است. A_v و E_v ضریب پیش توانی و انرژی فعال سازی و R_u ثابت جهانی گازها است [۴۰]. در کار حاضر از ضرایب فرانچتی [۴۱] برای زغال سنگ بیتومینوس با مقادیر $(1/s) A_v = 4470$ و $E_v = 19188 \times 10^7 (J/kmol)$ استفاده شد. ترکیب گازهای فرار گواسیر بطور کامل در مقالات ذکر نشده است. در کار حاضر گازهای فرار شامل ۳ گونه $CH_4/CO_2/H_2$ منظور شد. عموماً هیدروکربن های سبک فرار با متان تقریب زده می شوند، مانند کارهای کیم، کو و هیکنین [۸ و ۲۲ و ۲۶]. کسر متان مشابه کار کیم [۸] که در بازسازی متان در این مساله موفق بود، ۵٪ منظور شد. با توجه به قله اندک متان ۱۵۰۰ ppm در کار آزمایشگاهی [۱۲] روی گواسیر، این مقدار مناسب می نماید. گونه H_2 با کسر ۸٪ منظور شد که نزدیک به مقدار کار منی [۱۷] است و مقدار باقیمانده برای CO_2 منظور شد که با درصد بالای کربن غیر ثابت و O_2 در گواسیر همخوانی دارد. از گونه های دارای گوگرد و نیتروژن به خاطر ناچیز بودن، مانند اکثر شبیه سازی ها، صرف نظر شد. به محض اتمام فرارزدایی، ماده نیم سوز شروع به سوزش می کند [۴۲]. عموماً در شبیه سازی ها، ماده نیم سوز، کربن خالص فرض می شود که با اکسیژن واکنش داده و CO یا CO_2 تشکیل خواهد شد. این احتراق نیاز به نفوذ اکساینده و رسیدن به سطح مواد نیم سوز از طریق نفوذ در لایه مرزی دارد [۲۶]. مطابق گزارش [۲۶ و ۴۲] در بویلرهای پودری، آهنگ احتراق مواد نیم سوز وابسته به سینتیک و نفوذ است و در کارهای [۴۳ و ۴۴] با استفاده از مدل محدود به سینتیک/نفوذ تطابق خوبی بین نتایج عددی و تجربی دیده شد؛ لذا در کار حاضر از این مدل استفاده شد. در این مدل، آهنگ واکنش ماده نیم سوز تابعی از ضریب آهنگ شیمیایی و ضریب آهنگ نفوذ است [۲۶]. آهنگ کاهش جرم ذره در این مدل از روابط زیر به دست می آید.

$$\frac{dm_{p,Char}}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{DR_k}{D + R_k} \quad (14)$$

$$D = C_1 \left[\frac{(T_p + T_g)}{2} \right]^{0.75} / d_p \quad (15)$$

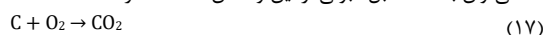
$$R_k = C_2 \exp\left(-\frac{E}{R_u T_p}\right) \quad (16)$$

A_p سطح ذره و p_{ox} فشار جزئی اکسیدکننده است. اثر نفوذ توسط D و اثر سینتیک توسط R_k وارد می شود [۳۲ و ۳۹]. ثوابت C_1 ، C_2 و E با توجه به مطالعات [۲۶]، از مرجع [۴۵] در جدول ۲ دیده می شود.

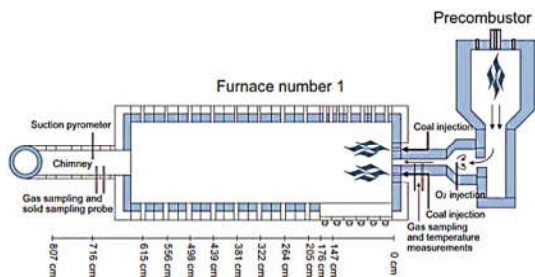
جدول ۲- ثوابت مدل سینتیک/نفوذ [۴۵]

C_1	C_2	E	S_b
5×10^{-12}	3×10^{-3}	799×10^7	۱

با توجه به گزارش شفل [۳] قطر ذره در حین احتراق ماده نیم سوز ثابت فرض شد. ساده ترین واکنش احتراق ماده نیم سوز در شرایط با دمای بالا، واکنش دما بالای ایجاد CO_2 موسوم به واکنش «احتراق کامل» است [۲۰]. در کارهای ژانو و شفل [۳ و ۲۱] از این فرض استفاده شد. این واکنش در دماهای بالاتر از حدود ۱۳۰۰ K شدیدتر از واکنش های مشابه برای کربن، مانند تبدیل آن به CO می شود [۴۶]. لذا می توان با دقت قابل قبولی از این واکنش استفاده کرد.



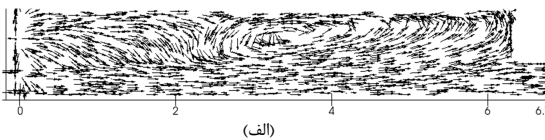
برخی ثوابت مورد استفاده در کار حاضر در جدول ۳ آمده است.



شکل ۱- محفظه احتراق IFRF No.1 MILD (دید از بالا) [۶]

¹ Precombustor

ناحیه در تمام صفحات موازی صفحه مینا وجود دارد. اگرچه در صفحه قطری شکل ۳ (ب) مابین دو صفحه تقارن، بازچرخش در تمام طول محفظه رخ می‌دهد. بردارهای سرعت در صفحات تقارن، از محل ورود تا فاصله حدود ۲ متر، هم‌جهت با جریان ورودی است و از این جهت متفاوت از صفحه قطری است. وجود این الگوهای جریان به همراه شرایط گرمایی و شیمیایی هوای ثانویه، از علل ایجاد احتراق MILD است. در شکل ۴ نمودار مؤلفه محوری سرعت برحسب راستای عرضی در مقطع چهارم با فاصله ۱٫۳۲ m از ورودی که داخل شعله است و در مقطع هفتم که در نواحی انتهایی محفظه احتراق است، ارزیابی شد که تطابق خوبی با نتایج تجربی دارد. در این نمودارها محور x در جهت محور اصلی محفظه و محور z در جهت عرضی کانال در صفحه مینا است. در مقطع چهارم، اختلافات در ناحیه جت هوای اولیه و ثانویه و نیز در نزدیکی دیوار دیده می‌شود. ولی در مقطع هفتم این اختلاف تنها در راستای جت هوای اولیه و ثانویه است.

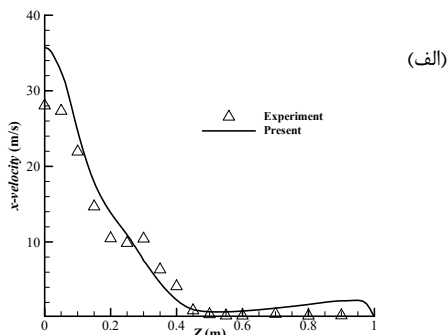


(الف)

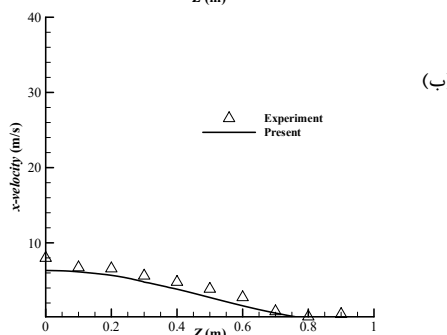


(ب)

شکل ۳- بردارهای سرعت در (الف) صفحه مینا و (ب) صفحه قطری

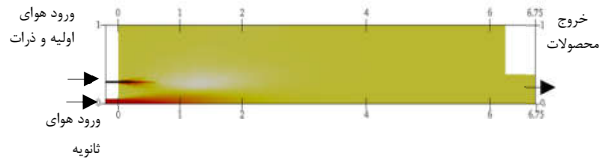


(الف)



(ب)

شکل ۴- نمودار ارزیابی سرعت در مقاطع (الف) چهارم و (ب) هفتم



شکل ۲- نمای ناحیه یک‌چهارم از میدان (خلاف جهت شکل تجربی)

جدول ۴- تجزیه تقریبی و نهایی (درصد وزنی) [۱۲]

تجزیه نهایی		تجزیه تقریبی	
درصد (db)	عنصر		
۷۸٫۴۱	کربن	۳۷٫۱	ماده فرار
۵٫۲۲	هیدروژن	۵۶٫۷	کربن ثابت
۱۰٫۹	اکسیژن	۳٫۳	خاکستر
۱٫۴۹	نیترژن	۲٫۹	رطوبت
۰٫۸۲	گوگرد	۳۱٫۷۴ MJ/kg	LHV

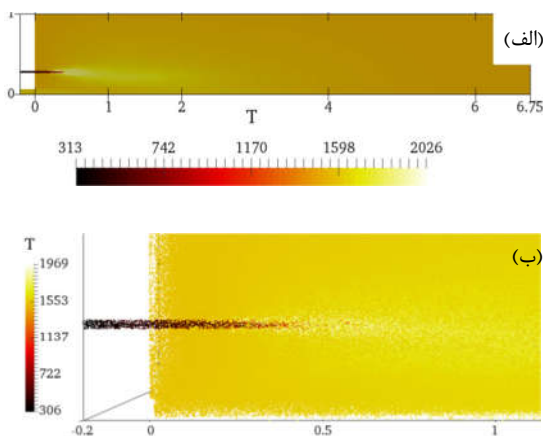
۴- نتایج عددی

پایا شدن نتایج پس از شبیه‌سازی بیش از ۱۰۰ s از زمان واقعی احتراق، حاصل شد. علت این زمان زیاد از طرفی طولانی لازم جهت پخش محصولات بازگشتی در کل محفظه و برقراری شرایط MILD است. از طرف دیگر ذرات سوخت جامد برای توزیع کامل در محفظه، زمان بیشتری نسبت به سوخت گازی لازم دارند زیرا حرکت آن‌ها نسبت به گاز کندتر است همچنین دبی حجمی آن‌ها کمتر از گازهاست و تا ثابت شدن تعداد ذرات، یعنی برابری تقریبی تعداد ذرات ورودی و خروجی از محفظه، زمان بیشتری لازم است. این محاسبات با پردازشگر ۲۴ هسته‌ای حدود یک سال به طول انجامید. در کار حاضر گام زمانی در بخشی از زمان اجرا تا مرتبه 1×10^{-4} s (با شرط کمتر از ۱ بودن عدد کورانت) افزایش داده شد و خاموشی شعله رخ نداد. پس از ایجاد شرایط شبه‌پایا، برای منظور شدن دقیق تمام پدیده‌های دخیل در مساله، گام زمانی تا مقدار 5×10^{-6} s کاسته شد. همچنین عدد کورانت ذرات 0.3 منظور شد. برای بررسی استقلال از شبکه، نتایج با تعداد سلول 700000 ، 207000 و 158000 مقایسه و نتایج 700000 و 158000 سلول تقریباً یکسان شد. نتایج آزمایشگاهی شامل سرعت‌های محوری، دمای گاز و کسر مولی گونه‌ها در صفحه میانی عبورکننده از جت‌های زغال‌سنگ (صفحه مینا) و در ۷ مقطع اندازه‌گیری شده است. این مقاطع به ترتیب دارای فاصله 0.15 ، 0.44 ، 0.735 ، 1.32 ، 2.705 ، 3.22 و 4.97 متر از ورودی است. در مقاله حاضر به فراخور اهمیت هر مقطع در نتایج یک متغیر، بحث و تحلیل روی مقطع مناسب انجام شد. بردارهای سرعت در صفحه مینا در شکل ۳ ترسیم شده‌اند. مطابق شکل، یک ناحیه بازچرخشی حول بردار عمود بر صفحه مینا (الف) روی می‌دهد که طولی بیش از ۴ m دارد و از خروجی محفظه تا فاصله نزدیک به ۲ m از انژکتورها امتداد می‌یابد و باعث بازچرخش محصولات می‌شود. این الگو در کار منی [۱۷] گزارش شده است. الگوی جریان نتیجه‌ی هندسه تنگ‌شونده در خروجی محفظه و نیز همراه شدن سیال اطراف با جت ورودی جریان اصلی است.^۱ این

^۱ Entrainment

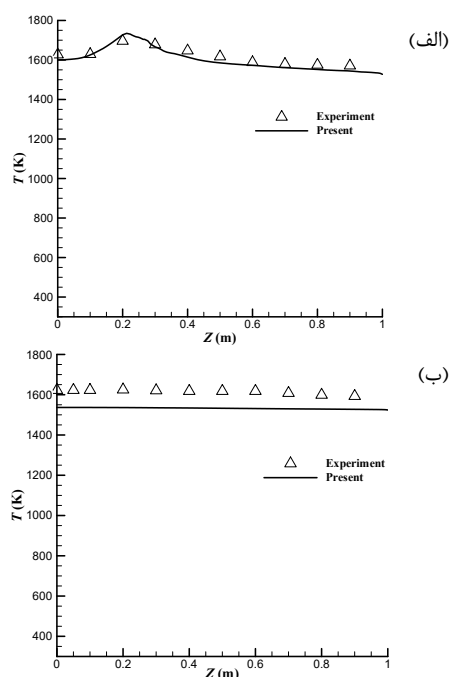
با ورود جت سوخت به مخلوط محصولات داغ، گرمایش و فرارزدایی ذرات با سرعت زیاد انجام می‌شود. مطابق نتایج آزمایش، بیشترین گرادیان دما در مقطع اول و دوم است. در مابقی میدان گرادیان دما خیلی کم بوده و احتراق با سرعت کم رخ داده که نشانه حالت MILD است. توزیع دما در شبیه‌سازی حاضر در صفحه مینا، در شکل ۵ (الف) مؤید یکنواختی دما در ناحیه وسیعی از محفظه است. توزیع دما در صفحه تقارن دوم بسیار یکنواخت‌تر است. مطابق شکل ۵، ناحیه دمابالا تا فاصله حدود ۲ m از نازل امتداد دارد که ناحیه شعله است. در کار آزمایشگاهی نیز طول ۲ m برای شعله گزارش شده است. آرایش دمایی ذرات در شکل ۵ (ب) دیده می‌شود که گویای گرمایش سریع ذرات است. دمای ذرات به‌جز در نزدیکی جت ورودی تقریباً یکنواخت است. مطابق نتایج کار حاضر، توزیع دمای گازی در ناحیه ابتدایی شعله رفتاری نوسانی دارد و با گذشت زمان مرتفع نمی‌شود و ظاهراً جزو طبیعت شعله در این ناحیه است که می‌تواند ناشی از ضربات ذرات ورودی به این ناحیه باشد که در حال گرمایش هستند. نمودار دما در مقطع ۴ که داخل شعله و مقطع ۷ که در نواحی انتهایی محفظه احتراق است، در شکل ۶ دیده می‌شوند، اختلاف متوسط دما با نتایج تجربی در این دو مقطع به ترتیب برابر ۱/۳۶٪ و ۵/۰۸٪ است. با وجود استفاده از سینتیک کلی ۴ مرحله‌ای که دارای رادیکال نیست و فقط ۷ گونه را در نظر دارد، آرایش دمایی، خوب بازسازی شده است؛ بنابراین برای شبیه‌سازی این‌گونه مسائل، این سینتیک کلی نتایج خوبی در تخمین دما دارد. یکنواختی دما در مقطع ۴، گویای آهنگ آرام واکنش‌ها و برقراری حالت MILD است. تغییرات دما خصوصاً در مقطع هفتم دارای شیب بسیار کمی است که با گزارش مراجع مختلف مانند سوچی [۶] در مورد مشخصه دمایی احتراق MILD، مطابق است.

مطابق نتایج تجربی، گاز متان در فاصله اندکی از ورودی ذرات سوخت، ایجاد و سپس مصرف می‌شود. در شکل ۷ نمودار کسر مولی متان در مقاطع اول و دوم ترسیم شد. هم‌خوانی قابل قبولی بین نتایج مدل‌سازی و تجربی دیده می‌شود، مکان و مقدار قله متان به‌خوبی تخمین زده شده که از نقاط قوت کار حاضر است، زیرا در اکثر مراجعی که شبیه‌سازی روی این مساله انجام داده‌اند (به‌جز کیم [۸]) هیچ گزارشی از تخمین گونه متان مشاهده نمی‌شود.

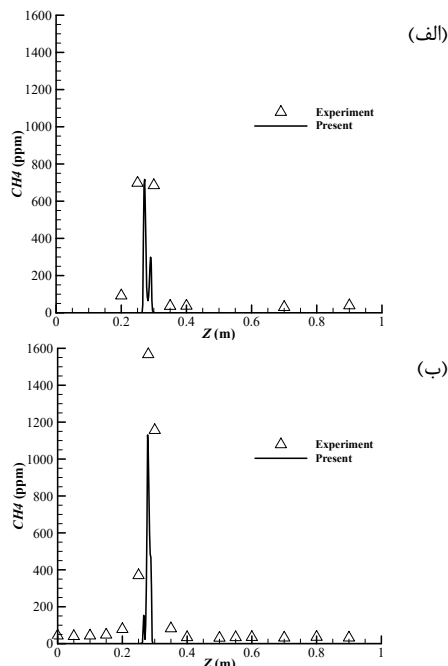


شکل ۵- توزیع دمای (الف) سیال و (ب) ذرات در صفحه مینا

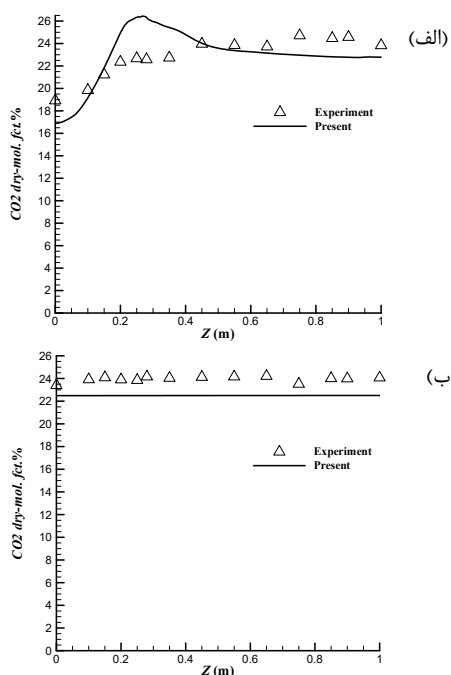
مطابق نتایج، نفوذ گونه‌ی متان کمتر از مقدار واقعی بوده و متان سریع‌تر مصرف شده و قبل از مقطع سوم به اتمام رسیده است، درحالی‌که مطابق نتایج آزمایشگاهی در این مقطع، کسر مولی در حدود ۲۰۰ ppm است. علت این اختلاف، استفاده از سینتیک کلی یا مدل فرارزدایی تجربی یا ضعف در تخمین نفوذ گونه‌ها می‌تواند باشد. اگرچه با توجه به نتایج [۲۴] سینتیک LL در تخمین مصرف متان دقت خوبی دارد. گونه CO₂ جزو محصولات نهایی احتراق است و در شرایط MILD، همراه با بازچرخش جریان، تمایل دارد که محفظه احتراق را به‌طور یکنواخت دربرگیرد بنابراین مدت زمان زیادی برای پایا شدن آن در میدان مورد نیاز است. طبق نتایج کار حاضر، مقادیر CO₂ نسبت به گونه‌های دیگر خیلی دیرتر پایا گردید. تغییرات این متغیر، نسبتاً آرام و روند افزایشی آن به واسطه بازچرخش محصولات بود. مقدار CO₂ در کل میدان غیر از مجاورت ورودی سوخت و هوا، تقریباً یکسان است. نمودار ارزیابی تخمین CO₂ در شکل ۸ دیده می‌شود. اختلاف نسبی متوسط در مقطع چهارم و هفتم برابر ۷/۳۶٪ و ۶٪ است که نشان‌دهنده تخمین عددی خوبی است. اگر چه در مقطع چهارم، در مسیر جت هوای اولیه، ثانویه و نزدیک دیوار اختلاف دیده می‌شود که اختلاف در مسیر هوای اولیه می‌تواند ناشی از تخمین نادقیق فرارزدایی، استفاده از سینتیک‌های کلی یا خطا در تخمین نفوذ گونه‌ها باشد. اختلاف در مسیر جت هوای ثانویه می‌تواند ناشی از نادقیق بودن نفوذ گونه‌ها باشد. در کار [۳] نیز خطای نفوذ گونه‌ها گزارش شده است. مطابق نتایج مانسینی [۴۷] برخی از مدل‌های RANS، در محاسبه میزان نفوذ گازهای محیط در جت سوخت دچار خطا هستند. در مقطع هفتم مقدار CO₂ دارای اختلاف است. طبق نتایج عددی، مقدار O₂ در محفظه کمی بیشتر از مقدار واقعی است، لذا به نظر می‌آید درصورتی‌که با استفاده از سینتیک ۳ مرحله‌ای برای احتراق ماده نیم‌سوز، گونه CO نظر گرفته می‌شد، درصد O₂ کاهش و درصد CO₂ افزایش می‌یافت.



شکل ۶- نمودار ارزیابی تخمین دما در مقاطع (الف) چهارم و (ب) هفتم



شکل ۷- نمودار ارزیابی تخمین متان در مقاطع (الف) اول و (ب) دوم



شکل ۸- نمودار ارزیابی CO₂ در مقاطع (الف) چهارم و (ب) هفتم

۶- مراجع

- [1] Vascellari M., et al., Numerical simulation of pulverized coal MILD combustion using a new heterogeneous combustion submodel, *Flow Turbul. Combust.*, Vol. 92, pp. 319–345, 2014.
- [2] Toporov D., *Combustion of pulverised coal in a mixture of oxygen and recycled flue gas*, Waltham: Elsevier, 2014.
- [3] Schaffel N., et al., Mathematical modeling of MILD

همچنین محتمل است که اختصاص کسری از گازهای فرار به CO می‌تواند باعث واکنش با O₂ و تشکیل مقادیر بیشتری از CO₂ و در مجموع افزایش کسر مولی آن شود. شایان‌ذکر است در صحت‌سنجی، باند عدم قطعیت اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی^۱ را باید در نظر گرفت [۴۸] که در کار تجربی مورد نظر، مقادیر آن قید نشده است. امکان وقوع خطا در اندازه‌گیری‌های تجربی^۲ را نیز باید در نظر داشت [۴۸]. گرادیان کم CO₂ به‌جز در راستای مسیر جت‌های ورودی در مقاطع ابتدایی، نشان‌دهنده توزیع یکنواخت این‌گونه در فضای محفظه احتراق است و مقدار بالای متوسط کسر مولی بدون رطوبت آن در محفظه احتراق، حدود ۲۳٪، برای دربرگیری واکنشگرها و ایجاد شرایط MILD ضروری است. با توجه به توزیع یکنواخت دما و گونه‌ها در بخش اعظم محفظه احتراق، دیده می‌شود که حالت MILD برقرار است. در جدول ۵ مقایسه نتایج تجربی و عددی در خروجی محفظه دیده می‌شود. نتایج دما دقت خوبی دارد. اختلاف CO₂ نیز مورد تحلیل قرار گرفت.

۵- نتیجه‌گیری

در کار حاضر احتراق MILD ذرات پودر شده زغال‌سنگ توسط مجموعه کد متن‌باز OpenFOAM به‌طور سه‌بعدی در مساله معیار شبیه‌سازی IFRF هدف از این کار، بررسی توانایی مدل احتراقی واکنش‌گاه آمیخته‌ی جزئی PaSR برای مدل‌سازی احتراق MILD ذرات زغال‌سنگ است. از کار حاضر نتایج زیر به دست آمد.

۱. ترکیب مدل‌های عددی کار حاضر در تخمین سرعت، دما و گونه‌ها نتایج قابل قبولی داشته است؛ بنابراین مدل احتراقی PaSR به همراه سینتیک کلی LL در شبیه‌سازی احتراق MILD ذرات موفق بوده است.
۲. تخمین دما نسبت به گونه‌ها دقیق‌تر است، استفاده از سینتیک کلی برای احتراق همگن و یا سینتیک تک‌مرحله‌ای برای احتراق ناهمگن می‌تواند یکی از علل آن باشد.
۳. نفوذ گونه‌ها در این شبیه‌سازی دقیق محاسبه نشده است. در برخی کارها به ضعف روش‌های RANS در محاسبه میزان نفوذ گازهای محیط در جت سوخت اشاره شده است. همچنین مطابق نتایج مردانی [۱۰] در احتراق MILD نفوذ مولکولی دارای اهمیت بیشتری می‌شود. به نظر می‌آید در کار حاضر استفاده از روش RANS و یکسان بودن عدد اشمیت برای همه گونه‌ها، از علل ضعف در نفوذ گونه‌ها باشد.
۴. ترکیب گازهای فرار در شبیه‌سازی زغال‌سنگ مهم است. ترکیب در نظر گرفته‌شده در کار حاضر در تخمین هیدروکربن‌های فرار نتایج بسیار خوبی داده است اما در تخمین CO₂ خصوصاً در خروجی، نیاز به بازنگری در ترکیب گازهای فرار است.

جدول ۵- نتایج عددی و تجربی در خروجی محفظه احتراق

پارامتر	واحد	مقدار تجربی	مقدار عددی	درصد اختلاف
CO ₂	%Vol	۲۰٫۸	۱۸٫۳	-۱۲٫۳
دما	کلوین	۱۵۰۳	۱۵۲۹	۱٫۷۳

^۱ Error bar or uncertainty band

^۲ Experimental uncertainty

- [26] Heikkinen J., *Characterisation of supplementary fuels for co-combustion with pulverised coal*, PhD Thesis, Delft University of Technology, 2005.
- [27] Modest M., *Radiative heat transfer*, 2nd ed. California: Academic Press, 2003.
- [۲۸] جلالیان، ا.، مطالعه عددی اثر هندسه‌ی محفظه‌ی پیش‌گرمایش مشعل PRP بر آلاینده‌ی NOx در بویلر زغال‌سنگ، تربیت مدرس، ۱۳۹۷.
- [29] Bidi M. et al., Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect, *Energy Convers. Manag.*, Vol. 49, No. 12, pp. 3634-3647, 2008.
- [30] S. Workshop, Submodels radiation, Sandia National Laboratories, 2012.
- [31] Poinso T. and D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*. Philadelphia: RT Edwards, 2005.
- [32] ESI Group (OpenFOAM), OpenCFD Release OpenFOAM® v1612+, OpenCFD Ltd, 2016.
- [33] Magnussen B., Modeling of nox and soot formation by the eddy dissipation concept, *International Flame Research Foundation First Topic*, pp. 26-29, October 17-19, 1989.
- [34] Chomiak J., et al., Flame liftoff in diesel sprays, *Symposium on Combustion*, Vol. 26, No. 2, pp. 2557-2564, 1996.
- [۳۵] لاهیجانی م. و امامی س.، بررسی تاثیر تعداد حفره بر بازده احتراقی و ضریب بازیافت فشار سکون در محفظه احتراق مافوق صوت، نشریه علمی - پژوهشی سوخت و احتراق، س ۱۳، ش ۱، ص ۹۸-۱۱۷، ۱۳۹۹.
- [36] Nordin N., *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*, PhD Thesis, Göteborg, CTH, 2001.
- [37] Afarin Y. et al., The effect of fuel inlet turbulence intensity on H₂/CH₄ flame structure of mild combustion using the LES method, *Comb. Theory Model.*, Vol. 17, No.3, pp.1-28, 2012.
- [38] Yeoh G., *Computational techniques for multiphase flows*, Oxford: Butterworth-Heinemann, 2010.
- [۳۹] ا. کاردگر، شبیه سازی احتراق سوخت های مشتق شده از زباله ها به منظور بررسی پارامترهای احتراقی آنها، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۹۱.
- [40] Badzioch S. et al., Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 9, No. 4, pp. 521-530, 1970.
- [41] Franchetti B. et al., Large eddy simulation of a pulverised coal jet flame, *Proc. Comb. Inst.*, Vol. 34, pp. 2419-2426, 2013.
- [42] Glassman I., Yetter R., *Combustion*, 4th ed. California: Elsevier Inc., 2008.
- [43] Choi C., Kim C., Numerical investigation on the flow, combustion and NOx emission characteristics in a 500 MWe tangentially fired pulverized-coal boiler, *Fuel*, Vol. 88, No. 9, pp. 1720-1731, 2009.
- [44] Kuang M. et al., Numerical investigation on combustion and NOx emissions of a down-fired 350 MWe utility boiler with multiple injection and multiple staging, *Fuel Processing Technology*, Vol. 109, pp. 32-42, 2013.
- [45] Smoot L., Pulverized coal diffusion flames: A perspective through modeling, *Symp. Combust.*, Vol. 18, pp. 1185-1202, 1981.
- [46] Li Z. et al., Kinetic characteristics of pulverized coal combustion in the two-phase flow, *Energy*, Vol. 55, pp. 585-593, 2013.
- [47] Mancini M. et al., On mathematical modelling of flameless combustion, *Comb. Flame*, Vol.150, No.1-2, pp.54-59, 2007.
- [48] Wang H., et al., Combustion kinetic model uncertainty quantification, propagation and minimization, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 47, pp. 1-31, 2015.
- combustion of pulverized coal, *Comb. Flame*, Vol. 156, No. 9, pp. 1771-1784, 2009.
- [۴] ملکی آ. و آگاه ا.، بررسی وضعیت زغال سنگ ایران نسبت به جهان، دومین کنفرانس ملی زغال سنگ ایران، کرمان، ایران، ۲۰۱۴.
- [5] Weber R., et al., On the (MILD) combustion of gaseous, liquid, and solid fuels in high temperature preheated air, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 30, No. 2, pp. 2623-2629, 2005.
- [6] Tsuji H. et al., *High temperature air combustion From Energy Conservation topollution reduction*, CRC, 2003.
- [7] Katsuki M. et al., The science and technology of combustion in highly preheated air, *Symposium on combustion*, Vol. 27, No. 2, pp. 3135-3146, 1998.
- [8] Kim J. et al., Numerical modelling of MILD combustion for coal, *Prog. Comput. Fluid Dyn.*, Vol. 7, No. 6, 2007.
- [9] Zhang H. et al., Development of high temperature air combustion technology in pulverized fossil fuel fired boilers, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 31, No. 2, pp. 2779-2785, 2007.
- [۱۰] مردانی ا.، اثر دینامیک جریان و مکانیزم شیمیایی بر شعله در رژیم احتراقی HiTAC رساله دکتری، دانشگاه امیرکبیر، ۱۳۸۹.
- [11] Galletti C. et al., Numerical and experimental investigation of a mild combustion burner, *Comb. Flame*, Vol. 151, pp. 649-664, 2007.
- [12] Orsino S. et al., Excess enthalpy combustion of coal, *IFRR Doc*, No. F46/y/3, 2000.
- [13] Cavaliere A. et al., Mild combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 30, No. 4, pp. 329-366, 2004.
- [14] Lockwood F., Simulation of pulverised coal test furnace performance, *Fuel*, Vol. 77, No. 12, pp. 1329-1337, 1998.
- [15] Stadler H., *Experimental and numerical investigation of flameless pulverised coal combustion*, PhD thesis, RWTH Aachen University, 2010.
- [16] Vascellari M. et al., Influence of turbulence-chemical interaction on CFD pulverized coal MILD combustion modeling, *Fuel*, Vol. 101, pp. 90-101, 2012.
- [17] Mei Z. et al., Influences of reactant injection velocities on moderate or intense low-oxygen dilution coal combustion, *Energy & Fuels*, Vol. 28, No. 1, pp. 369-384, 2013.
- [18] Weidmann M. et al., Experimental characterization of pulverized coal MILD flameless combustion from detailed measurements in a pilot-scale facility, *Comb. Flame*, Vol. 168, pp. 365-377, 2016.
- [19] Iavarone S. et al., An a priori assessment of the Partially Stirred Reactor (PaSR) model for MILD combustion, *Proceedings of the Combustion Institute*, pp. 1-12, 2020.
- [20] Christ D., *The effect of char kinetics on the combustion of pulverized coal under oxyfuel conditions*, PhD Thesis, RWTH Aachen University, 2013.
- [21] Zhao X., Transported PDF modeling of pulverized coal jet flames, *Comb. Flame*, Vol. 161, No. 7, pp. 1866-1882, 2014.
- [22] Ku X. et al., Eulerian-lagrangian simulation of biomass gasification behavior in a high-temperature entrained-flow reactor, *Energy and Fuels*, Vol. 28, pp. 5184-5196, 2014.
- [23] Versteeg H., Malalasekera W., *An introduction to computational fluid dynamics*, England: Pearson, 2007.
- [۲۴] جلالیان ا. و مظفری ک.، مقایسه اثرات چند سینتیک شیمیایی کلی بر شبیه سازی سه بعدی شعله برخاسته متان، مجله مهندسی مکانیک مدرس، د. ۱۷، ش. ۸، ص ۱۰۵-۱۱۶، ۱۳۹۶.
- [25] ANSYSInc, ANSYS fluent theory guide, release 17, USA, 2015.