

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΚΑΙ ΑΕΡΟΝΑΥΠΗΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

Εργαστήριο Τεχνικής Θερμοδυναμικής και Εφαρμογών Στατιστικής Μηχανικής

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Υπολογιστική προσομοίωση τυρβωδών διαστρωματωμένων φλογών προπανίου – αέρα υπό την επίδραση προθέρμανσης, με χρήση του μοντέλου των μεγάλων δινών και των μοντέλων χημικής κινητικής πεπερασμένου ρυθμού αντιδράσεων και μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα.

Μιχαήλ Μανουδάκης

1054357

Κούτμος Παναγιώτης, Καθηγητής

Διπλωματική εργασία υποβληθείσα στο Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών

του Πανεπιστημίου Πατρών

ΠΑΤΡΑ, Ιούλιος/2022

Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών Μιχαήλ Μανουδάκης ©2022-Με την επιφύλαξη παντός δικαιώματος

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ



ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΚΑΙ ΑΕΡΟΝΑΥΠΗΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

Εργαστήριο Τεχνικής Θερμοδυναμικής και Εφαρμογών Στατιστικής Μηχανικής

Η παρούσα διπλωματική εργασία παρουσιάστηκε

από τον

Μιχαήλ Μανουδάκη

1054357

την 13^{η} Ιουλίου 2022

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας δεν υποδηλοί την αποδοχή των γνωμών του συγγραφέα. Κατά τη συγγραφή τηρήθηκαν οι αρχές της ακαδημαϊκής δεοντολογίας.

Υπολογιστική προσομοίωση τυρβωδών διαστρωματωμένων φλογών προπανίου – αέρα υπό την επίδραση προθέρμανσης, με χρήση του μοντέλου των μεγάλων δινών και των μοντέλων χημικής κινητικής πεπερασμένου ρυθμού αντιδράσεων και μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα.

Μιχαήλ Μανουδάκης

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην σημερινή εποχή, υπάρχει τεράστια ανάγκη για πιο αποδοτικά και λιγότερο ρυπογόνα συστήματα καύσης. Για να επιτευχθεί αυτό, η ακαδημαϊκή κοινότητα έχει στραφεί στα φτωχά(lean) και πολύ-φτωχά(super-lean) μίγματα καυσίμου-αέρα. Έχοντας αυτό υπόψη, η σταθεροποίηση φλογών γύρω από στερεά σώματα προσβλέπει σε καλύτερη κατανόηση του φαινομένου της καύσης και σημαντική μείωση στους ρύπους, μέσα από καινοτόμες διατάξεις καύσεις. Η σταθεροποίηση φλογών σε στερεά σώματα αποτελεί ένα διαδεδομένο ερευνητικό πρόβλημα, αν και οι συνθήκες πίεσης και αριθμών Reynolds που συναντώνται σε τέτοιες εργαστηριακές διατάξεις δεν είναι πάντα αντιπροσωπευτικές των βιομηχανικών εφαρμογών, τα ερευνητικά αποτελέσματα έχουν συνεισφέρει στην εξέλιξη των υπολογιστικών μεθόδων για γενικά προβλήματα καύσης.

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως αντικείμενο μελέτης την μοντελοποίηση μιας τυρβώδης διαστρωματωμένης φλόγας προπανίου, η οποία σταθεροποιείται σε στερεό σώμα (bluff body) τύπου δίσκου. Η φλόγα σταθεροποιείται σε μία ζώνη ανακυκλοφορίας η οποία βρίσκεται κατάντι του στερεού σώματος. Το τυρβώδες ροϊκό πεδίο μοντελοποιήθηκε με χρήση του μοντέλου LES (των μεγάλων δινών) και η καύση του προπανίου επιλύθηκε με έναν γενικό χημικό μηχανισμό 22 χημικών στοιχείων. Η χημική κινητική μοντελοποιήθηκε με το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα (PaSR) μία προσέγγιση που το εμπορικό πακέτο Fluent της Ansys εκχώρησε στην πρόσφατη έκδοση. Το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα πιστεύεται ότι αντιμετωπίζει καλύτερα τα προβλήματα της τυρβώδης καύσης έναντι των άλλων μοντέλων που υπάρχουν, διότι οι υποθέσεις του και ο

τρόπος δόμησης του μοντέλου PaSR έρχεται σε μεγαλύτερη συνάφεια με την φύση του προβλήματος. Συγκεκριμένα το μοντέλο θεωρεί την ύπαρξη μιας ιδεατής δομής στην οποία τα φαινόμενα της χημικής κινητικής και του τυρβώδους ροϊκού πεδίου αλληλεπιδρούν και συνυπάρχουν. Αντίθετα το μοντέλο του στρωτού ρυθμού αντίδρασης θεωρεί ότι στην ιδεατή δομή κυρίαρχο ρόλο έχει η χημική κινητική, αγνοώντας την μίξη από την τύρβη. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν θα συγκριθούν με αποτελέσματα μοντελοποίησης με στρωτό ρυθμό αντίδρασης (ILES) για την προσέγγιση της χημικής κινητικής αλλά και με πειραματικές μετρήσεις στο πεδίο των ταχυτήτων, θερμοκρασιών και τύρβης. Η μοντελοποίηση αυτή δίνει την δυνατότητα να εκτιμηθούν τα μοντέλα χημικής κινητικής PaSR και ILES.

Οι προσομοιώσεις της εργασίας επιλύθηκαν με το εμπορικό πακέτο Fluent της Ansys.

Λέξεις Κλειδιά:

Μοντέλο Μεγάλων Δινών (LES), Μοντέλο ημι-αναδευμένου Αντιδραστήρα(PaSR), Καύση Προπανίου, Τυρβώδη Φλόγα διαστρωμάτωσης, Στερεά Σώματα (Bluff Bodies)

Large Eddy Simulations of turbulent, stratified propane - air flames under inlet preheat using the finite rate chemistry and partially stirred reactor closures.

Michail Manoudakis

ABSTRACT

Nowadays, there is a huge demand for more efficient and less polluting combustion systems. To achieve this, the academic community has turned to lean and super-lean fuel-air mixtures. With this in mind the study of flame stabilization around bluff bodies aims at better understanding combustion phenomena and reducing pollutants, through innovative combustion devices. Although, in these laboratory scale flames, the Reynolds numbers and pressure levels may not always be representative of technical systems bluff-body flame research results have contributed to the development of computational methods for general combustion problems.

The object of the present thesis is the simulation of a turbulent, stratified propane flame, which is stabilized on an axisymmetric disk baffle. The flame is stabilized on a recirculation zone located downstream of the bluff body. The turbulent flow field was modeled using the LES (Large Eddies Simulations) model and the propane combustion was solved by a general chemical mechanism with 22 species. Chemical kinetic was modeled on the Partially Stirred Reactor (PaSR) model, an approach that Fluent, Ansys's commercial package, incorporated in the latest version. The Partially Stirred Reactor model is believed to tackle turbulent combustion phenomena better than other existing models because its partially stirred assumption in the finer scales is more relevant to the nature of the problems studied here. Specifically, the model considers the existence of an ideal structure in which the phenomenon of chemical kinetics and turbulent flow field interact and co-exist. On the contrary, the Implicit LES model considers that chemical kinetic dominate in the ideal structure, ignoring the subgrid mixing by turbulence. The results obtained will be compared with simulations with the ILES model, for the approach of chemical kinetics, but also with

experimental measurements of the velocity and temperature fields. The modeling attempts to evaluate the chemical kinetics models PaSR and ILES.

Simulations were solved with the software Fluent, Ansys's commercial package.

Keywords:

Large Eddies Simulations (LES), Partially Stirred Reactor (PaSR), Propane Combustion, Stratified Turbulent Flame, Bluff Bodies

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1.	Ταξινόμηση προβλημάτων καύσης	σελ.6
Πίνακας 2.	Σύντομη ανασκόπηση μοντέλων τύρβης του προγράμματος Fluent της Ansys	σελ.52
Πίνακας 3.	Περιγραφή των μοντέλων χημικής κινητικής του πακέτου Fluent της Ansys	σελ.54
Πίνακας 4.	Γενικός μηχανισμός καύσης προπανίου που χρησιμοποιείται στην υπολογιστική μοντελοποίηση	σελ.65
Πίνακας 5.	Σύνοψη των υπολογιστικών προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν	σελ.69

Κατάλογος Εικόνων

Εικόνα 1.	Κινητήρας ΜΕΚ τύπου Boxer		
Εικόνα 2.	Τομή Αεριοστρόβιλου		
Εικόνα 3.	Πειραματική Απεικόνιση Στρωτής Φλόγας Προπανίου, (Souflas, et. al., 2015)		
Εικόνα 4.	Φλόγα Διάχυσης από αναπτήρα	σελ.11	
Εικόνα 5.	Όρια Ευφλεκτότητας και Ενέργεια Ανάφλεξης, [1]		
Εικόνα 6.	Το Φαινόμενο του Θερμοκηπίου,(www.gvs.com)		
Εικόνα 7.	Ρύποι σε σχέση με τον λόγο ισοδυναμίας Φ,(www.intechopen.com)		
Εικόνα 8.	Μελάνι σε κανάλι τυρβώδους ροής, (Stewart), (British Columbia)		
Εικόνα 9.	Τυρβώδη Φλόγα Αιθυλενίου, (M. G. Mungal), (Combustion and Flame, p.126)		
Εικόνα 10.	Διάγραμμα Ενέργειας Ενεργοποίησης σε εξώθερμη αντίδραση	σελ.35	
Εικόνα 11.	Τα μόρια στην θεωρία των συγκρούσεων για την μονοδιάστατη περίπτωση		
Εικόνα 12.	Φάσμα Εκπομπών Χημειοφωταυγάζοντων Στοιχείων σε Φλόγα Υδρογονάνθρακα, (www.wikipedia.org/wiki/File:Spectrum_of_blue_Flame.png)	σελ.39	
Εικόνα 13.	Πειραματική Μέτρηση Χημειοφωταύγειας σε Φλόγα Μεθανίου, (M. G. Mungal), (1990)	σελ.40	
Εικόνα 14.	Απεικόνιση των σταδίων μιας υπολογιστικής προσομοίωσης	σελ.45	
Εικόνα 15.	Όγκος Ελέγχου σε τομή	σελ.47	
Εικόνα 16.	Τομή δομημένου πλέγματος της γεωμετρίας	σελ.48	
Εικόνα 17.	Τομής της γεωμετρίας με τους δύο σωλήνες, τις κοιλότητες και το στερεό σώμα	σελ.69	
Εικόνα 18.	Ροϊκό πεδίο γύρω από τις κοιλότητες	σελ.75	
Εικόνα 19.	Ροϊκό πεδίο γύρω από το στερεό σώμα	σελ.75	
Εικόνα 20.	Πεδίο μίξης του καυσίμου με τον αέρα για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου δ3%,δ25%	σελ.75	

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

	Προφίλ του μέσου λόγου ισοδυναμίας Φ για τις υπολογιστικές		
Εικόνα 21.	προσομοιώσεις στο ακτινικό διάκενο μεταξύ bluff body και	σελ.76	
	κεντρικού σωλήνα		
Encána 22	Αξονικές υπολογιστικές τιμές του λόγου ισοδυναμίας Φ για	a c) 76	
LIKUVU 22.	παροχή καυσίμου δ3%	081.70	
Εικόνα 23	Αξονικές υπολογιστικές τιμές του λόγου ισοδυναμίας Φ για	σελ.77	
LIKUVU 23.	παροχή καυσίμου δ25%		
	Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ του λόγου ισοδυναμίας Φ για		
Εικόνα 24.	παροχή καυσίμου δ3% σε αποστάσεις από το bluff body:	σελ.77	
	x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2		
	Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ του λόγου ισοδυναμίας Φ για		
Εικόνα 25.	παροχή καυσίμου δ25% σε αποστάσεις από το bluff body:	σελ.78	
	x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2.		
Εικόνα 26	Πειραματικές και υπολογιστικές τιμές της μέσης αξονικής	<u>σελ</u> 79	
Etrova 20.	ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ3%	000.79	
Εικόνα 27	Πειραματικές και υπολογιστικές τιμές της μέσης αξονικής	ac) 79	
LIKUVU 27.	ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ25%	000.79	
	Ακτινικά πειραματικά και υπολογιστικά προφίλ της μέσης		
Εικόνα 28	αξονικής ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ3% σε αποστάσεις	άσεις =1, σελ.80	
Likova 20.	από το bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1,		
	x/Db=2		
	Ακτινικά πειραματικά και υπολογιστικά προφίλ της μέσης		
Εικόνα 29.	αξονικής ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ25% σε		
	αποστάσεις από το bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5,		
	x/Db=1, x/Db=2		
	Τοπολογία του υπολογιστικού πεδίου μέσης αξονικής		
Εικόνα 30.	ταχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας	σελ.82	
Likuvu Ju.	για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου με το μοντέλο	00.002	
	ILES		
	Τοπολογία του υπολογιστικού πεδίου μέσης αξονικής		
Εικόνα 31.	αχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας		
	για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου με το μοντέλο		
Τμήμα Μηχο	ανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-		

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

PaSR

	Τοπολογία του πειραματικού πεδίου μέσης αξονικής		
Εικόνα 32.	ταχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας		
	για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου		
Eucóna 22	Αξονικά υπολογιστικά και πειραματικά προφίλ μέσης	T C) 83	
LIKUVU JJ.	θερμοκρασίας για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ3%		
Εικόνα 34.	Αξονικά υπολογιστικά και πειραματικά προφίλ μέσης	T C) 83	
	θερμοκρασίας για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ25%		
	Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ μέσης θερμοκρασίας για		
Εικόνα 35.	παροχή καυσίμου δ3% σε αποστάσεις από το bluff body:	σελ.84	
	x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2		
	Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ μέσης θερμοκρασίας για		
Εικόνα 36.	παροχή καυσίμου δ25% σε αποστάσεις από το bluff body:	σελ.85	
	x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2		
Eucóna 27	Τοπολογία πειραματικών και υπολογιστικών πεδίων RMS	σελ.86	
Elkova 57.	αξονικής ταχύτητας για την παροχή καυσίμου δ3%		
Euróna 29	Τοπολογία πειραματικών και υπολογιστικών πεδίων RMS		
Elkova 38.	αξονικής ταχύτητας για την παροχή καυσίμου δ25%	LEVO /	
	Τοπολογία της υπολογιστικής συγκέντρωσης του		
Εικόνα 39.	χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου CH [*] για την περίπτωση	σελ.88	
	παροχής καυσίμου δ3%.		
	Τοπολογία της υπολογιστικής συγκέντρωσης του		
Εικόνα 40.	χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου CH [*] για την περίπτωση παροχής σελ.		
	καυσίμου δ25%		
	Τοπολογία της υπολογιστικής και πειραματικής συγκέντρωσης του		
Εικόνα 41.	χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου ΟΗ για την περίπτωση παροχής	σελ.89	
Εικόνα 47	ι οπολογια της υπολογιοτικής και πειραματικής συγκεντρωσής του νημειοφωταυνάζοντος στοινείου OH^* νια την περίπτωση παρογής	00 (sc	
LINUVU 74.	καυσίμου δ25%	064.70	
	1000100002070		

Συμβολισμοί

Σύμβολο	Ορισμός	
$S_L [m/s]$	Ταχύτητα διάδοσης μετώπου στρωτής	
	φλόγας	
H [kJ/kg]	Θερμογόνος δύναμη	
T _{max} [K]	Θερμοκρασία αδιαβατικής φλόγας	
A/F [-]	Λόγος μάζας καυσίμου-αέρα	
F/O [-]	Λόγος μάζας καυσίμου-οξειδωτικού	
(F/O) _{st} [-]	Στοιχειομετρική αναλογία καυσίμου	
	οξειδωτικού	
y [-]	Κλάσμα μάζας	
x [-]	Γραμμομοριακό κλάσμα	
Φ[-]	Λόγος ισοδυναμίας ή σχετικός λόγος	
	καυσίμου-αέρα	
P [N/m ²]	Στατική πίεση	
$v'_{i,r}$	Στοιχειομετρικός συντελεστής	
	αντιδρώντων	
$v''_{i,r}$	Στοιχειομετρικός συντελεστής προϊόντων	
<i>M_i</i> [kg/kmol]	Γραμμομοριακό Βάρος i συστατικού	
$c_i [\text{kmol/m}^3]$	Γραμμομοριακή συγκέντρωση i	
	συστατικού	
N _s	Αριθμός συστατικών σε αντίδραση	
<i>t</i> [s]	Χρόνος	
$\dot{\omega}_i [\text{kmol/m}^3 \text{s}]$	Ρυθμός μεταβολής i συστατικού	
$\omega [\text{kmol/m}^3\text{s}]$	Ρυθμός αντίδρασης	
k _f	Ειδική σταθερά ρυθμού αντίδρασης	
$ au_{ch}[s]$	Χρονική κλίμακα μιας αντίδρασης	
k _b	Ειδική σταθερά ρυθμού αντίστροφης	
	αντίδρασης	
$K_c[-]$	Σταθερά χημικής ισορροπίας	

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

E_a [cal/mole]	Ενέργεια ενεργοποίησης	
<i>R^o</i> [J/kmol K]	Παγκόσμια σταθερά αερίων	
A[-]	Προ-εκθετικός παράγοντας	
$T_a[K]$	Θερμοκρασία ενεργοποίησης	
B[-]	Σταθερά στον νόμο Arrhenius	
Ar[-]	Αριθμός Arrhenius	
\overline{V}_i [m/s]	Μέση ταχύτητα συστατικού <i>i</i>	
m _i [kg]	Μάζα συστατικού ί	
k	Σταθερά Boltzmann	
Z _{i,j}	Αριθμός συγκρούσεων μεταξύ <i>i, j</i>	
A ^o	Αριθμός Avogadro	
<i>E</i> * [J]	Ενέργεια σύγκρουσης μεταξύ μορίων	
h[Js]	Σταθερά Plank	
exp	Ο δείκτης στα διαγράμματα για τις	
	πειραματικές τιμές	
$\bar{\rho}$ [kg/m3]	Μέση πυκνότητα κατά Favre	
$\widetilde{u_i}$	Μέση ταχύτητα κατά Favre στην διεύθυνση i	
<i>g</i> _{<i>i</i>} [m/s2]	Επιτάχυνση της βαρύτητας	
$\overline{ au_{ij}}$	Τανυστής τάσεων	
$ au^{sgs}_{ij}$	Υποπλεγματικός τανυστής τάσεων	
$ ilde{S}_{ij}$	Τανυστής ρυθμού παραμόρφωσης	
$S_{Ct}[-]$	Ο τυρβώδης αριθμός Schmidt	
Pr _t	Ο τυρβώδης αριθμός Prandtl	
ν _t	Υποπλεγματικό ιξώδες τύρβης	
Da	Η σταθερά Damkohler	
t _{mix} [s] Χρονική κλίμακα μίξης		

Περιεχόμενα

ПЕРІ	ΛНΨНν
ABST	ractvii
Κατάλ	λογος Πινάκων
Κατάλ	λογος Εικόνων
Συμβο	ολισμοίxiv
Περιε	χόμεναxvi
Πρόλ	ογος1
ΚΕΦΑΛ	ΔΑΙΟ 1 ⁰ -ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΚΑΙ ΘΕΩΡΙΑΣ ΤΗΣ
ΚΑΥΣΗ	Σ3
1.1	Ορισμός του Φαινομένου της Καύσης3
1.2	Καύσιμα3
1.3	Σύγχρονες Τεχνολογικές Εφαρμογές της Καύσης4
1.4	Ταξινόμηση των Φαινομένων Καύσης6
1.5	Φλόγες Πλήρους Προανάμιξης8
1.6	Φλόγες Διάχυσης9
1.7	Φλόγες Μερικής Προανάμιξης και Φλόγες Διαστρωμάτωσης11
1.8	Χαρακτηριστικά Μεγέθη της Καύσης12
1.9	Επίδραση Φυσικών και Χημικών Μεταβλητών στην Ταχύτητα Διάδοσης της
Φλόγο	ας14
1.9.1	Επίδραση Φυσικών Μεταβλητών14
1.9.2	Επίδραση Χημικών Μεταβλητών15
1.10	Τα Φαινόμενα της Αναστροφής και του Εκφυσήματος μιας Φλόγας15
1.11	Το Φαινόμενο της Αποκόλλησης μιας Φλόγας16

1.12	Επίπτωση της Καύσης στο Περιβάλλον-Ρύποι16
1.12.1	Διοξείδιο του άνθρακα-CO217
1.12.2	Μονοξείδιο του Άνθρακα-CO17
1.12.3	Άκαυστοι Υδρογονάνθρακες-UHC18
1.12.4	Αιθάλη-Soot19
1.12.5	Οξείδια του Θείου-SO _x 20
1.12.6	Οξείδια του Αζώτου-ΝΟ _x 21
1.13	Ροϊκά Πεδία-Τυρβώδη Καύση22
1.13.1	Στρωτό Ροϊκό Πεδίο- Laminar Flow
1.13.2	Τυρβώδη Ροϊκό Πεδίο-Turbulence Flow23
1.13.3	Τυρβώδη Καύση25
ΚΕΦΑΛΑ	JO 2 ⁰ - Χημική Κινητική –Χημειοφωταύγεια και Χημικοί Μηχανισμοί27
2.1 2	ζημική Κινητική27
2.1.1	Ο Νόμος της Δράσης των Μαζών27
2.1.2	Αμφίδρομες Αντιδράσεις28
2.1.3	Αντιδράσεις Πολλαπλών Βημάτων29
2.1.4	Προσέγγιση της Μόνιμης Κατάστασης30
2.1.5	Προσέγγιση της Μερικής Ισορροπίας31
2.1.6	Προσέγγιση των Συνολικών ή Ημι-Συνολικών Αντιδράσεων
2.2	Θεωρίες Ρυθμών Αντίδρασης33
2.2.1	Ο Νόμος του Arrhenius
2.2.2	Ενέργεια Ενεργοποίησης34
2.2.3	Η Θεωρία των Συγκρούσεων35
2.3 X	Κημειοφωταύγεια38
ΚΕΦΑΛΑ	ΔΙΟ 3 ⁰ – ΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΣΗ ΜΙΑΣ ΦΛΟΓΑΣ41
3.1 Σ	Σταθεροποίηση σε Στρωτές Φλόγες41
Τμήμα Μι	ηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-
Τομέας Εν	νέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος xvii

3.2	Σταθεροποίηση σε Τυρβώδη Φλόγα	41
3.3	Σταθεροποίηση με Στερεά Σώματα-Bluff Bodies Stabilization	43
ΚΕΦΑΛ	ΔΑΙΟ 4 ⁰ - ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	45
4.1	Κατασκευή Γεωμετρίας	45
4.2	Όγκος Ελέγχου	46
4.3	Πλέγμα του Όγκου Ελέγχου	47
4.3.1	Δομημένα και Αδόμητα Πλέγματα	48
4.3.2	Κριτήρια Πλέγματος	50
4.4	Μοντέλα Τύρβης και Χημείας	51
4.4.1	Μοντέλα Τύρβης	51
4.4.2	Μοντέλα Χημικής Κινητικής	54
4.5	Εκτέλεση Προσομοίωσης και Σύγκλιση	57
ΚΕΦΑΛ	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ	
КЕФАЛ КІNНТІ	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ	59
ΚΕΦΑΛ KINHTI 5.1	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES	59 59
КЕФАЛ КІNНТІ 5.1 5.2	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής	59 59 61
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES	59 59 61 61
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2	ΔΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR	59 61 61 61
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3	ΑΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων	59 61 61 61 62 63
КЕФАЛ КІNНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3 КЕФАЛ	ΑΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων	59 61 61 62 63
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3 КЕФАЛ ПРОПА	ΑΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων ΑΙΟ 6 ⁰ -ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΔΙΑΣΤΡΩΜΑΤΩΜΕΝΗΣ ΦΛΟΓΑΣ ΝΙΟΥ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΣΩΜΑ ΤΥΠΟΥ ΔΙΣΚΟ	59 61 61 62 63
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3 КЕФАЛ ПРОПА 6.1	ΑΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων ΑΑΙΟ 6 ⁰ -ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΔΙΑΣΤΡΩΜΑΤΩΜΕΝΗΣ ΦΛΟΓΑΣ ΝΙΟΥ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΣΩΜΑ ΤΥΠΟΥ ΔΙΣΚΟ Επισκόπηση Υπολογιστικής Προσομοίωσης	59 61 61 62 63 67 67
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3 КЕФАЛ ПРОПА 6.1 6.2	ΑΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων ΑΙΟ 6 ⁰ -ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΔΙΑΣΤΡΩΜΑΤΩΜΕΝΗΣ ΦΛΟΓΑΣ ΝΙΟΥ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΣΩΜΑ ΤΥΠΟΥ ΔΙΣΚΟ Επισκόπηση Υπολογιστικής Προσομοίωσης Παρουσίαση Αποτελεσμάτων	59 61 61 62 63 67 67 67
КЕФАЛ КІМНТІ 5.1 5.2 5.2.1 5.2.2 5.2.3 КЕФАЛ ПРОПА 6.1 6.2 6.3	ΑΙΟ 5 ⁰ - ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΙΚΗΣ Εξισώσεις LES Εξισώσεις Χημικής Κινητικής Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων ΑΙΟ 6 ⁰ -ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΔΙΑΣΤΡΩΜΑΤΩΜΕΝΗΣ ΦΛΟΓΑΣ ΝΙΟΥ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΣΩΜΑ ΤΥΠΟΥ ΔΙΣΚΟ Επισκόπηση Υπολογιστικής Προσομοίωσης Παρουσίαση Αποτελεσμάτων	59 61 61 62 63 67 67 67 67 67

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

xviii

Πρόλογος

Η διπλωματική εργασία είναι η πρώτη σημαντική εργασία για κάθε φοιτητή και μελλοντικό επιστήμονα, οπότε θεωρώ χρέος μου να ευχαριστήσω κάποιους ανθρώπους, οι οποίοι με βοήθησαν στην μέχρι τώρα φοιτητική μου πορεία. Πρώτα απ' όλα θα ήθελα να δηλώσω την ιδιαίτερη εκτίμηση μου απέναντι στον επιβλέποντα καθηγητή κύριο Παναγιώτη Κούτμο. Τον ευχαριστώ θερμά για την εποικοδομητική συνεργασία μας και για την προσφορά των συμβουλευτικών του οδηγιών όλο αυτό το χρονικό διάστημα. Ακόμα, ευχαριστώ τον διδακτορικό ερευνητή Ευάγγελο Μητσόπουλο, του οποίου η καθοδήγηση και η βοήθεια ήταν πολύ σημαντική για την εκπόνηση της παρούσας εργασίας. Επιπλέον ευχαριστώ την οικογένεια μου, οι οποίοι με στήριζαν μέχρι τώρα στην φοίτηση μου. Τέλος, τους συναδέλφους μου και τους διδακτορικούς ερευνητές με τους οποίους είχα συνεργασία τόσο στο Εργαστήριο Τεχνικής Θερμοδυναμικής και Εφαρμογών Στατιστικής Μηχανικής όσο και γενικά στο Πανεπιστήμιο.

κεφαλαίο 1⁰-εισαγΩγή στη βασικές άρχες και Θεωρίας της καύσης

Σε αυτό το κεφάλαιο θα γίνει προσπάθεια να παρουσιαστούν οι βασικές έννοιες της καύσης και η θεωρία που διέπει αυτό το επιστημονικό φαινόμενο[1]. Στην συνέχεια θα ταξινομηθούν τα καύσιμα, θα δοθούν ορισμοί για τα χαρακτηριστικά μεγέθη της καύσης και θα συζητηθούν οι κύριες τεχνολογικές εφαρμογές. Στην καύση συνυπάρχουν διάφορα επιστημονικά πεδία όπως η χημική κινητική, η μηχανική των ρευστών, η μετάδοση θερμότητας και μάζας, της τύρβης καθώς και της επιστήμης των υλικών.

1.1 Ορισμός του Φαινομένου της Καύσης

Με τον όρο καύση μπορεί να οριστεί κάθε χημική αντίδραση η οποία απελευθερώνει σημαντικό ποσό θερμότητας και φωτός. Η καύση είναι μια εξώθερμη οξειδοαναγωγική αντίδραση. Αν και παλαιότερα υπήρχε η αντίληψη ότι καύση είναι κάθε αντίδραση με οξυγόνο (O₂) που απελευθερώνει θερμότητα και φως, σήμερα στοιχεία όπως το φθόριο (F₂) και το χλώριο (Cl₂) προκαλούν διάφορες καύσεις. Όμως, έχει επικρατήσει ότι ο όρος καύση χωρίς άλλη διευκρίνιση να παραπέμπει σε αντίδραση με οξυγόνο ή αέρα.

1.2 Καύσιμα

Καύσιμο θεωρείται η ουσία που με παρουσία ενός οξειδωτή σε μια εξώθερμη χημική αντίδραση, εκλύεται θερμότητα. Τα καύσιμα χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές για παραγωγή θερμικής ενέργειας. Το πιο διαδεδομένο καύσιμο από την αρχαιότητα είναι το ξύλο. Ανάλογα με την κατάσταση τους χωρίζονται σε κατηγορίες:

- Στερεά Καύσιμα: λιθάνθρακες, λιγνίτης, ξύλο, βιομάζα, κάρβουνο, pellets
 ξύλου κ.α.
- Υγρά Καύσιμα: diesel, κηροζίνη, αργό πετρέλαιο, βενζίνη, αλκοόλες κ.α.

• Αέρια Καύσιμα: φυσικό αέριο, υδρογόνο, βιοαέριο, φωταέριο κ.α.

Μια άλλη κατηγοριοποίηση είναι τα φυσικά καύσιμα τα οποία είναι διαθέσιμα πρωτογενώς (ξύλο, λιγνίτης, αργό πετρέλαιο κ.α.) και τα τεχνητά καύσιμα τα οποία έχουν προκύψει από επεξεργασία (diesel, κηροζίνη, υδρογόνο, φωταέριο κ.α.).

Το ουράνιο θεωρείται πυρηνικό καύσιμο και είναι σε δικιά του κατηγορία, σε αντίθεση με όλα τα καύσιμα που αναφέρθηκαν προηγουμένως τα οποία θεωρούνται συμβατά.

1.3 Σύγχρονες Τεχνολογικές Εφαρμογές της Καύσης

Η καύση χρησιμοποιείται σε πληθώρα εφαρμογών στις οποίες απαιτείται έκλυση θερμότητας και παραγωγή μηχανικής ενέργειας. Η παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας με καύση, παρά την μεγάλη ανάπτυξη των εναλλακτικών πηγών ενέργειας, καλύπτει πάνω από το 80% της συνολικά καταναλωθείσας ηλεκτρικής ενέργειας. Επίσης, καύση χρησιμοποιείται στα επίγεια, θαλάσσια και εναέρια μέσα μεταφοράς με χρήση μηχανών εσωτερικής καύσης (MEK). Με την θεωρία της καύσης μπορούν να σχεδιάζονται από τους μηχανολόγους επιτυχώς διάφορες γεωμετρίες θαλάμων καύσης. Είναι δυνατόν να μελετηθούν οι ιδιότητες του καυσίμου, τα χαρακτηριστικά του σπινθήρα και η μείωση στις απαιτήσεις των προδιαγραφών για τους εκπεμπόμενους ρύπους.



Εικόνα 1. Κινητήρας ΜΕΚ τύπου Boxer

Οι αεριοστρόβιλοι είναι μηχανές συνεχούς ροής και χρησιμοποιούνται κυρίως στις αερομεταφορές. Από την θεωρία της καύσης υπολογίζονται τα χαρακτηριστικά λειτουργίας του θαλάμου καύσης. Ονομαστικά παραδείγματα είναι η σταθερότητα της καύσης, η επίδραση του ψεκαστή σταγονιδίων(spray) στην λειτουργία του καυστήρα, οι εκπομπές ρύπων και οι κατανομή θερμοκρασίας στην μηχανή. Σε διαστημικά οχήματα χρησιμοποιούνται προωθητικές μηχανές τύπου ramjet.



Εικόνα 2. Τομή Αεριοστρόβιλου

Στην βιομηχανία γίνεται χρήση συσκευών καύσης (λέβητες, κλίβανοι, φούρνοι, ξηραντήρια κ.α.) . Μερικές εξ αυτών είναι οι βιομηχανίες τροφίμων, δομικών υλικών, πλαστικών, καταναλωτικών προϊόντων. Στην μεταλλουργία γίνεται χρήση φούρνων για θερμικές κατεργασίες.

Η θέρμανση των εσωτερικών χώρων στην πλειοψηφία των εγκαταστάσεων θέρμανσης γίνεται καύση στερεών ,υγρών ή αέριων καυσίμων. Τέλος, οι ανεξέλεγκτες καύσεις (πυρκαγιές) είναι πολύ επικίνδυνες για τον άνθρωπο και το φυσικό περιβάλλον. Διακρίνονται σε εσωτερικού χώρου(κτίρια, εγκαταστάσεις) όσο και σε εξωτερικούς (δάση). Με την μελέτη της θεωρίας της καύσης είναι δυνατόν να βρεθούν μέθοδοι πρόληψης για πυρασφάλεια και συστήματα αντιπυρικής προστασίας.

1.4 Ταξινόμηση των Φαινομένων Καύσης

Τα φαινόμενα της καύσης μπορούν να ταξινομηθούν με μια ποικιλία κριτηρίων, ανάλογα με τα φυσικά φαινόμενα που συμβαίνουν σε κάθε περίπτωση. Τα προβλήματα καύσης διαχωρίζονται, όπως φαίνεται και στον Πίνακα [1], ανάλογα με τα χαρακτηριστικά του πεδίου ροής, της εμφάνισης φλόγας, τον τρόπο ανάμειξης των αντιδρώντων, την χρονική και χωρική εξάρτηση των μεταβλητών, την φάση των αντιδρώντων, την τοπολογία των αντιδρώντων, το ρυθμό της αντίδρασης, την κατάσταση μεταφοράς θερμότητας, την ταχύτητα του κύματος καύσης και τον βαθμό συμπιεστότητας της ροής.

Πίνακας 1. Ταξινόμηση προβλημάτων καύσης

Συνθήκη της Καύσης	Ταξινόμηση		
Εμφάνιση φλόγας	Με φλόγα	Χωρίς φλόγα	
Χρονική εξάρτηση	Μόνιμη	Μη μόνιμη	
Χωρική εξάρτηση	Μονοδιάστατη	Δισδιάστατη/Τρισδιάστατη	
Ανάμειξη αρχικών	Προαναμεμιγμένα	Μη Προαναμεμιγμένα	
αντιδρώντων	αντιδρώντα		
Πεδίο ροής	Στρωτό	Τυρβώδες	

Φάση των αντιδρώντων	Μονοφασική	Πολυφασική
Μετάδοση θερμότητας	Φυσική	Εξαναγκασμένη
Συμπιεστότητα	Ασυμπίεστη	Συμπιεστή
Ρυθμός αντίδρασης	Χημική ισορροπία	Πεπερασμένος ρυθμός
		αντίδρασης
Ταχύτητα του κύματος καύσης	Υποηχητική	Υπερηχητική

Μια ακόμη ταξινόμηση γίνεται με τον εάν το φαινόμενο της καύσης εξαρτάται κυρίως από την διάχυση ή την χημική κινητική. Επομένως, δημιουργούνται οι τρεις κατηγορίες:

• Φαινόμενα καύσης που κυρίαρχο ρόλο έχει η χημική κινητική.

Αυτά τα φαινόμενα συνήθως αντιμετωπίζουν φλόγες πλήρως προαναμεμιγμένες (fully-premixed flames). Δηλαδή τα αντιδρώντα και το οξειδωτικό έχουν αναμειχθεί πριν γίνει η εισαγωγή τους στο χώρο καύσης. Σε αυτή την περίπτωση, ο ρυθμός αντίδρασης είναι πιο αργός από τον ρυθμό διάχυσης θερμότητας και συστατικών. Τα φαινόμενα που συναντώνται στις φλόγες προανάμιξης είναι:

- \rightarrow Έναυση (ignition)
- → Σταθεροποίηση της φλόγας (stabilization)
- Μετάδοση της φλόγας (flame spread) και η έκρηξη ή μετάδοση σε υψηλές
 ταχύτητες διάδοσης (explosion ή detonation)
- → Ψύξη και το σβήσιμο της φλόγας (quenching ή blow-off)
- Φαινόμενα καύσης που κυρίαρχο ρόλο έχει η διάχυση.

Το οξειδωτικό και το καύσιμο αναμιγνύονται στο χώρο καύσης και έτσι η διάχυση μάζας, ορμής και διεργασίες ανάμειξης ρυθμίζουν την καύση. Για αυτό, τέτοιες φλόγες είναι γνωστές ως φλόγες διάχυσης (diffusion flames). Ο ρυθμός αντίδρασης είναι πολύ πιο γρήγορος από τους ρυθμούς διάχυσης. Τα φαινόμενα που ανήκουν σε αυτήν την κατηγορία είναι τα παρακάτω:

→ Καύση σταγονιδίων ή στερεών σωματιδίων

- Στρωτές και τυρβώδεις φλόγες διάχυσης
- Ανωστικές και λιμνώδεις φλόγες
- Φαινόμενα καύσης που ο ρόλος που έχει η χημική κινητική και η διάχυση είναι της ίδιας σημασίας.

Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν φαινόμενα:

- Στρωτές ή τυρβώδεις φλόγες μερικής ή πλήρους
 προανάμιξης
- → Καύση στις ΜΕΚ
- → Καύση σε κινητήρες Ramjet
- → Πυρκαγιές

1.5 Φλόγες Πλήρους Προανάμιξης

Φλόγα ονομάζεται ο γεωμετρικός τόπος της ζώνης αντίδρασης, διαδίδεται με ταχύτητα υποηχητική και αποτελείται από αντιδράσεις καύσεις. Λόγω της υψηλής θερμοκρασίας ακτινοβολεί και είναι το ορατό μέρος της καύσης που διακρίνουμε. Άκαυστο μίγμα και οξειδωτικό έχουν αναμιχθεί σε μοριακό επίπεδο πριν εισέρθουν στον χώρο καύσης. Στις φλόγες πρόμιξης, η καύση εκδηλώνεται ως μέτωπο φλόγας και διαδίδεται από το άκαυστο μίγμα. Μερικές εφαρμογές που συναντάται φλόγα πρόμιξης είναι οι κινητήρες εσωτερικής καύσεις και οι αεριοστρόβιλοι με πτωχό προαναμεμιγμένο καύσιμο.





Αυτές οι φλόγες είναι πιο δύσκολο να μοντελοποιηθούν από τις φλόγες διάχυσης. Αυτό συμβαίνει διότι η φλόγα έχει μικρό πάχος αλλά είναι μεγάλη σε έκταση με αποτέλεσμα να παραμορφώνεται από τύρβη. Το ποσοστό της διάδοσης της φλόγας εξαρτάται από την ταχύτητα της στρωτής φλόγας και από την τύρβη. Η ταχύτητα στρωτής φλόγας εξαρτάται από τα αντιδρώντα που παίρνουν μέρος στην καύση και από την μεταφορά θερμότητας σε αυτά. Είναι απαραίτητος ο αναλυτικός υπολογισμός της δομής της φλόγας, συγκεκριμένα η λύση της χημικής κινητικής και οι διαδικασίες διάχυσης σε μοριακό επίπεδο, για να υπολογιστεί η ταχύτητα διάδοσης της στρωτής φλόγας. Εξαιτίας ότι το πάχος του μετώπου της φλόγας είναι της τάξης του χιλιοστού και μικρότερο, το υπολογιστικό κόστος είναι πολύ υψηλό. Επιπλέον, η τύρβη «ρυτιδώνει» την φλόγα με αποτέλεσμα να επιμηκύνει την επιφάνεια του μετώπου και να αυξάνει την ταχύτητα διάδοσης της φλόγας.

1.6 Φλόγες Διάχυσης

Φλόγα διάχυσης ονομάζεται η φλόγα η οποία το καύσιμο και το οξειδωτικό εισέρχονται χωριστά στον θάλαμο καύσης και αντιδρούν καθώς αναμιγνύονται. Η ζώνη της φλόγας εντοπίζεται στην περιοχή όπου το καύσιμο και το οξειδωτικό είναι σε στοιχειομετρική αναλογία. Η θέση της φλόγας καθορίζεται από την ανάμειξη και η θερμοκρασία στο μπροστινό άκρο της φλόγας είναι σχεδόν ίδια, αλλά μικρότερη, με την αδιαβατική θερμοκρασία της φλόγας. Η εισροή καυσίμου και η εισροή

οξειδωτικού διαχωρίζονται από την ζώνη της φλόγας. Η μίξη ελέγχει τον ρυθμό καύσης γιατί ο ρυθμός ανάμιξης είναι πολύ πιο αργός από τον ρυθμό της χημικής αντίδρασης. Το πλάτος του μετώπου της φλόγας διάχυσης είναι πλατύτερο από την φλόγα πρόμιξης. Αυτό προκύπτει από την διάχυση των αντιδρώντων και των προϊόντων, αφού η πραγματική αντίδραση συμβαίνει σε μια πολύ λεπτή ζώνη. Για αυτό η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας στις φλόγες διάχυσης δεν έχει νόημα όπ ∞ ς στην περίπτωση στις φλόγες προανάμιξης. Η φλόγες διάχυσης περιγράφονται από τον ρυθμό καύσης του καυσίμου, το ύψος της φλόγας ή τον βαθμό σκέδασης του βαθμωτού μεγέθους (scalar dissipation). Μία σημαντική παράμετρος για να γαρακτηριστεί η τυρβώδη φλόγα διάγυσης είναι η αναλογία του γρόνου των μικρών δινών (Kolmogorov) προς τον χρόνο της χημικής διεργασίας. Αυτή η παράμετρος είναι ο αντίστροφος αριθμός Karlovitz. Αν η χρονική παράμετρος της χημείας είναι μικρή σε σχέση με την κλίμακα Kolmogorov μπορεί να θεωρείται σταθερή. Όμως, όταν η κλίμακα χρόνου μικρών δινών είναι ίδιας τάξης ή μικρότερη από την χρονική παράμετρο της χημείας, υπάρχουν περιοχές υψηλής ανάμιξης και αντίδρασης. Οι περιοχές αυτές ονομάζονται περιοχές κατανεμημένης (distributed) ζώνης αντίδρασης, όπως και στην προαναμεμιγμένη καύση. Οι φλόγες διάχυσης χωρίζονται σε στρωτές και τυρβώδεις φλόγες. Οι παράγοντες που επηρεάζουν τον αν μια φλόγα είναι στρωτή ή τυρβώδης είναι οι εξής:

- Η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας
- Η διάμετρος του σωλήνα
- Το ιξώδες του μίγματος
- Η τραχύτητα των τοιχωμάτων



Εικόνα 4. Φλόγα Διάχυσης από αναπτήρα

1.7 Φλόγες Μερικής Προανάμιξης και Φλόγες Διαστρωμάτωσης

Υπάρχουν δύο υποκατηγορίες φαινομένων, τα οποία συνδυάζουν χαρακτηριστικά της καύσεις προανάμιξης και της διάχυσης. Στην περίπτωση της μερικής προανάμιξης (partial premixing), το αντιδρών μίγμα συνθέτεται πριν την προσαγωγή του στην ζώνη αντίδρασης. Το μίγμα μπορεί να κυμαίνεται από πολύ φτωχό έως πολύ πλούσιο λόγο ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα, χωρίς να αποκλείεται η πιθανότητα μέρος του μίγματος να είναι εκτός των ορίων ευφλεκτότητας. Οι φλόγες μερικής προανάμιξης βρίσκονται σε πολλές πρακτικές εφαρμογές, ονομαστικά παραδείγματα είναι οι ΜΕΚ με πολλαπλή έγχυση καυσίμου ή οι καυστήρες αερίων καυσίμων με υψηλό σε ένταση στροβιλισμό.

Η δεύτερη υποκατηγορία είναι οι φλόγες με διαστρωμάτωση του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα στο μίγμα. Στις φλόγες διαστρωμάτωσης, ο λόγος ισοδυναμίας Φ έχει διακυμάνσεις αλλά δεν ξεπερνά τα όρια ευφλεκτότητας του αντιδρώντος μίγματος.

Τα πλεονεκτήματα από την αξιοποίηση τέτοιων φλογών είναι ότι αποφεύγεται ο κίνδυνος της οπισθοχώρησης (flashback) του μετώπου της φλόγας και δεν δημιουργούνται προϋποθέσεις κρουστικής καύσεις (σε κυλίνδρους ΜΕΚ με μεγάλα φορτία). Παρατηρείται με την χρήση φλόγας διαστρωμάτωσης, αύξηση της απόδοσης της καύσης στην θερμική εγκατάσταση και μείωση των εκπομπών ρυπογόνων ρύπων, όπως αιθάλη, οξείδια αζώτου (NO_x) και άκαυστοι υδρογονάνθρακες. Μεγάλη

πρόκληση αποτελεί η σταθεροποίηση φλογών διαστρωμάτωσης, διότι είναι ευαίσθητες σε ροϊκές διακυμάνσεις, οι οποίες δημιουργούνται στα τυρβώδη ροϊκά πεδία πρακτικών εφαρμογών, σε σχέση με τις φλόγες διάχυσης. Για να σταθεροποιηθούν αυτές οι φλόγες χρησιμοποιούνται αρκετά συχνά τοπικοί στροβιλισμοί. Για να περιγράψουμε και να αναλύσουμε τις φλόγες μερικής προανάμιξης ή διαστρωμάτωσης χρειάζεται να αντλήσουμε στοιχεία από της φλόγες διάχυσης και φλόγες προανάμιξης.

1.8 Χαρακτηριστικά Μεγέθη της Καύσης

Αυτή η ενότητα περιέχει τα κυριότερα μεγέθη που απαιτούνται για να περιγράψει κανείς το φαινόμενο της καύσης.

• T_{max}: Θερμοκρασία αδιαβατικής φλόγας.

Πρόκειται για την τελική θερμοκρασία που φθάνουν τα προϊόντα σε ένα φαινόμενο καύσης, το οποίο πραγματοποιείται σε αδιαβατικές συνθήκες, χωρίς να παράγεται έργο ή να μεταβάλλεται η κινητική ή η δυναμική ενέργεια του συστήματος.

- F/O: Είναι ο λόγος της μάζας του καυσίμου προς την μάζα του οξειδωτικού.
- **Α/F:** Είναι η αναλογία της μάζας του αέρα προς την μάζα του καυσίμου.
- (F/O)_{st}: Είναι η στοιχειομετρική αναλογία καυσίμου-οξειδωτικού. Όταν τα αντιδρώντα είναι σε αυτή την αναλογία πραγματοποιείται πλήρης (τέλεια) καύση και δεν υπάρχει καθόλου οξειδωτικό στα προϊόντα.
- Η: Θερμογόνος δύναμη (ενέργεια) του καυσίμου. Η Θερμογόνος δύναμη ορίζεται σαν την ενέργεια που θα απελευθερωθεί κατά την τέλεια καύση ενός καυσίμου, όταν τα προϊόντα ψυχθούν και επανέλθουν στην αρχική θερμοκρασία. Τα καύσιμα συνήθως περιέχουν υδρογόνο και επομένως στα προϊόντα θα υπάρχει H₂O.
- *x*: Κλάσμα mol
- **γ:** Κλάσμα μάζας

• $\boldsymbol{\Phi} = \frac{\binom{\mathbf{F}}{\mathbf{A}}}{\binom{\mathbf{F}}{\mathbf{A}}_{st}}$: Λόγος ισοδυναμίας ή σχετικός λόγος καυσίμου-αέρα. Με τον

λόγο ισοδυναμίας προσδιορίζεται η αναλογία καυσίμου-αέρα σε σχέση με την στοιχειομετρική αναλογία. Για Φ=1 υπάρχει στοιχειομετρικό μίγμα, για Φ<1 υπάρχει φτωχό μίγμα καυσίμου-αέρα (lean) και για Φ>1 το μίγμα καυσίμου-αέρα είναι πλούσιο (rich).

- S_L :Ταχύτητα διάδοσης του μετώπου της στρωτής φλόγας (Flame Speed).
 Είναι η ταχύτητα αυτή με την οποία ένα επίπεδο μέτωπο φλόγας
 διαδίδεται ως προς τα άκαυστα αντιδρώντα, σε κάθετη διεύθυνση προς
 την επιφάνεια της φλόγας.
- Θερμοκρασία ανάφλεξης ή έναυσης (Flash point ή Ignition Temperature): Είναι η ελάχιστη θερμοκρασία στην οποία μπορεί να ξεκινήσει καύση και να συντηρηθεί εντός ομογενούς μίγματος.
- Θερμοκρασία αυτανάφλεξης (Auto-ignition Temperature): Η ελάχιστη θερμοκρασία στην οποία ένα μίγμα καυσίμου-αέρα μπορεί να αναφλεγεί αυτόματα, χωρίς την παρουσία σπίθας.
- Όρια ευφλεκτότητας (Flammability limits): Τα όρια ευφλεκτότητας καθορίζουν το εύρος τιμών του λόγου ισοδυναμίας μέσα στο οποίο μπορεί να πραγματοποιηθεί καύση. Για να υπάρξει φλόγα στην πράξη πρέπει να υπάρχουν κατάλληλες συνθήκες πίεσης, θερμοκρασίας και λόγου καυσίμου-αέρα. Για κάθε καύσιμο υπάρχει διάγραμμα που ορίζει τα όρια ευφλεκτότητας με παραμέτρους τον λόγο ισοδυναμίας, την θερμοκρασία και την πίεση. Η πιο σημαντική παράμετρος είναι ο λόγος ισοδυναμίας. Αυτές οι παράμετροι οριοθετούν μία περιοχή στην οποία το μίγμα μπορεί να αναφλεχθεί, εάν του δοθεί ένα ποσό ενέργειας (spark ignition).



Εικόνα 5. Όρια Ευφλεκτότητας και Ενέργεια Ανάφλεξης, [1]

1.9 Επίδραση Φυσικών και Χημικών Μεταβλητών στην Ταχύτητα Διάδοσης της Φλόγας

Αυτό το κεφάλαιο εξετάζει βασικές παραμέτρους οι οποίες επηρεάζουν την ταχύτητα διάδοσης της φλόγας.

1.9.1 Επίδραση Φυσικών Μεταβλητών

- Πίεση: Η ταχύτητα διάδοσης στρωτής φλόγας εξαρτάται από την πίεση ως εξής: $S_L \approx p^{\frac{n-2}{n}}$, η είναι η τάξη της αντίδρασης.
- Θερμοκρασία της φλόγας και μίγματος: Η αύξηση της αρχικής θερμοκρασίας έχει κυρίαρχη επιρροή στην στρωτή ταχύτητα διάδοσης της φλόγας και ακολουθεί την κινητική εξίσωση του Arrhenius. Με την αύξηση της θερμοκρασίας ευνοούνται οι αντιδράσεις διαστάσεων και παράγονται ριζικά στην φλόγα.

1.9.2 Επίδραση Χημικών Μεταβλητών

- Λόγος καυσίμου-οξειδωτή: Η ταχύτητα διάδοσης στρωτής φλόγας επηρεάζεται από τις μεταβολές της θερμοκρασίας σε σχέση με τον λόγο καυσίμου οξειδωτικού. Στους υδρογονάνθρακες, μέγιστη ταχύτητα υπάρχει στα ελαφρώς πλούσια σε καύσιμο μίγματα.
- Μοριακή δομή του καυσίμου: Έχει αποδειχθεί ότι ο αριθμός των ατόμων άνθρακα στο δεσμό του μορίου του καυσίμου επηρεάζει την μέγιστη ταχύτητα καύσης[]. Στις παραφίνες έχει μικρή επίδραση ενώ στους ακόρεστους υδρογονάνθρακες η επίδραση είναι σημαντικότερη.
- Προσθετικά: Διάφορα ανενεργά συστατικά όπως CO₂, N₂, Ar αλλάζουν τον συντελεστή θερμικής διαχυτότητας και έτσι επηρεάζεται και η ταχύτητα στρωτής φλόγας. Εάν προστεθεί επιπλέον καύσιμο ή οξειδωτικό η επίδραση θα είναι παρόμοια με αυτήν από τα ανενεργά συστατικά. Όταν αναμειγνύονται καύσιμα συστατικά με ίσες ταχύτητες καύσης, σύμφωνα με τον νόμο Mallard-Le Chatelier, σε οποιαδήποτε αναλογία η ταχύτητα διάδοσης στρωτής φλόγας στο τελικό μίγμα παραμένει αναλλοίωτη.

1.10 Τα Φαινόμενα της Αναστροφής και του Εκφυσήματος μιας Φλόγας

Το φαινόμενο της αναστροφής της φλόγας (flash-back) συμβαίνει όταν η ταχύτητα διάδοσης της φλόγας είναι μεγαλύτερη από την ταχύτητα του ακαύστου καυσίμου. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η φλόγα να διαχυθεί προς το φρέσκο μίγμα. Το αντίθετο φαινόμενο είναι το εκφύσημα της φλόγας (blow-off). Η ταχύτητα της διάδοσης της φλόγας είναι μικρότερη από αυτή του φρέσκου μίγματος, με συνέπεια η φλόγα να ωθείται στην μεριά των καυσαερίων. Αυτά τα φαινόμενα έχουν αναλυθεί διεξοδικά στην συσκευή που ονομάζεται λυχνίας Bunsen στον οποίο το αέριο καύσιμο εκχωρείται στην βάση του σωλήνα που με την σειρά του μέσω διάφορων οπών αναρροφά και αέρα περιβάλλοντος. Αυτή η συσκευή, αν και απλή σε λειτουργία,

μπορεί να παρέχει πειραματικά πολλά θεμελιώδη μεγέθη για την διεργασία της καύσης.

1.11 Το Φαινόμενο της Αποκόλλησης μιας Φλόγας

Όταν σε μία φλόγα αυξάνεται η ταχύτητα του άκαυστου μίγματος το οποίο εκρέει από έναν σωλήνα, τότε η φλόγα θα αποκολλήσει από το στόμιο του σωλήνα και θα αιωρείται σε κάποιο ύψος. Αυτή είναι το φαινόμενο της αποκόλλησης (lift-off) και εξαρτάται από τις ιδιότητες της φλόγας αλλά και από τις τοπικές ιδιότητες της ροής κοντά χείλος του σωλήνα. Για να φανεί το φαινόμενο της αποκόλλησης αρκεί να έχουμε στην αρχή μία σταθεροποιημένη φλόγα σε αγωγό κυκλικής διατομής. Σε μικρές ταχύτητες άκαυστου μίγματος, η φλόγα είναι αγκιστρωμένη (attached) κοντά στο χείλος του σωλήνα. Αν αυξηθεί η ταχύτητα και επιτευχθεί μία κρίσιμη ταχύτητα, η φλόγα θα αιωρείται(lifted) μακριά από το χείλος του καυστήρα και θεωρείται αποκολλημένη. Σε περαιτέρω αύξηση από την κρίσιμη τιμή της ταχύτητας, η απόσταση από το χείλος του σωλήνα θα αυξηθεί και η φλόγα θα σβήσει απότομα(blow-off).

1.12 Επίπτωση της Καύσης στο Περιβάλλον-Ρύποι

Τα τελευταία χρόνια, η εκπομπή ρύπων από την καύση υδρογονανθράκων έχει γίνει από τα σημαντικότερα προβλήματα του σύγχρονου κόσμου. Οι ρύποι έχουν βλαπτική επίδραση στην ανθρώπινη υγεία, στους ζωντανούς οργανισμούς αλλά και στο περιβάλλον. Η έρευνα πάνω στο φαινόμενο της καύσης είναι επιτακτική για την εύρεση καινούργιων μεθόδων και τεχνικών ελάττωσης των εκπομπών ρύπων αλλά και για αποδοτικότερες θερμικές μηχανές. Υπάρχει σαφώς κινητοποίηση από την πολιτεία για να προστατευθεί το φυσικό περιβάλλον και να αποτραπεί όσο γίνεται η κλιματική αλλαγή. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι οι συνθήκες του Kyoto (1997) και του Παρισιού (2016). Οι σημαντικότεροι ρυπαντές αναφέρονται στην συνέχεια [1].

1.12.1 Διοξείδιο του άνθρακα-CO2

Το διοξείδιο του άνθρακα έχει το μεγαλύτερο βαθμό ευθύνης ανάμεσα στους ρύπους για το φαινόμενο του θερμοκηπίου και ως εκ τούτου την υπερθέρμανση του πλανήτη. Απορροφά μεγάλου μήκους ακτινοβολία η οποία δεν μπορεί να απομακρυνθεί από την γη. Παράγεται από την καύση όλων των ορυκτών καυσίμων. Για να μειωθεί λοιπόν, απαιτείται μείωση της καταναλισκόμενης ενέργειας. Ο χημικός τύπος για έναν υδρογονάνθρακα με οξειδωτικό τον αέρα είναι ο εξής:

$$C_{x}H_{y} + \left(x + \frac{y}{4}\right)O_{2} + 3.76\left(x + \frac{y}{4}\right)N_{2} => xCO_{2} + \left(\frac{y}{2}\right)H_{2}O + 3.76\left(x + \frac{y}{4}\right)N_{2}$$

Είναι αδύνατο να υπάρχει καύση ορυκτών χωρίς την παραγωγή του CO₂. Είναι όμως εφικτό να αυξηθούν οι αποδόσεις των εγκαταστάσεων καύσης και να χρησιμοποιηθούν παράλληλα ανανεώσιμες πηγές ενέργειας.



Εικόνα 6. Το Φαινόμενο του Θερμοκηπίου,(www.gvs.com)

1.12.2 Μονοξείδιο του Άνθρακα-CO

Το μονοξείδιο του άνθρακα είναι προϊόν ατελής καύσης και συμβαίνει όταν ο λόγος ισοδυναμίας είναι μεγάλος. Στις πλούσιες σε μίγμα καυσίμου-αέρα καύσεις ο ανεπαρκής αέρας δεν φτάνει για να μετατρέψει όλο τον άνθρακα σε διοξείδιο του άνθρακα και έτσι υπάρχει στα προϊόντα CO. Επίσης μονοξείδιο του άνθρακα

προκύπτει και από την αλληλεπίδραση της φλόγας με τα τοιχώματα ή με τύρβη τα οποία προκαλούν ψύξη της φλόγας (quenching). Το CO είναι τοξικό για τον άνθρωπο, προσβάλλοντας το νευρικό σύστημα και την καρδιά. Σε μεγάλες συγκεντρώσεις προκαλεί ασφυξία και θάνατο.

Στις υψηλές θερμοκρασίες η κύρια εξίσωση παραγωγής CO είναι η γρήγορη αντίδραση «υδρατμών αερίου» ή «υγρή οδός» :

$$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$$

Σε χαμηλές θερμοκρασίες το μονοξείδιο του άνθρακα παράγεται κύρια από αυτήν την πιο αργή αντίδραση:

$$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$$

Το μονοξείδιο του άνθρακα είναι σε μεγάλες συγκεντρώσεις στις περιοχές χαμηλών θερμοκρασιών. Παράγοντες που επηρεάζουν την παραγωγή του είναι η διεργασία της καύσης να εκτελείται είτε σε χαμηλούς είτε σε υψηλούς λόγους ισοδυναμίας, η ανεπαρκής ανάμιξη και ο μικρός χρόνος παρουσίας του αντιδρώντος μίγματος στην ζώνη αντίδρασης. Για να ελαχιστοποιείται η εκπομπή του μονοξειδίου του άνθρακα θα πρέπει να μειωθεί ο χρόνος και ο χώρος που η φλόγα εργάζεται σε πλούσιο μίγμα.

1.12.3 Άκαυστοι Υδρογονάνθρακες-UHC

Οι άκαυστοι υδρογονάνθρακες (unburned hydrocarbons-UHC) δημιουργούνται σε ένα ποσοστό από καύσιμο που δεν κάηκε και δεν πέρασε από την ζώνη αντίδρασης. Ένα άλλο ποσοστό είναι μικρότερης ή μεγαλύτερης αλυσίδας υδρογονάνθρακες που δημιουργούνται από τις χημικές αντιδράσεις στην ζώνη αντίδρασης. Εκεί, το αρχικό καύσιμο υπόκειται σε απανωτές αντιδράσεις και διασπάσεις. Η παραγωγή τους μπορεί να οφείλεται σε ελλιπή ή καθόλου καύση, σε εναπόθεση καυσίμου σε εσοχές ή στο στρώμα λαδιού και η ψύξη(quenching) στα τοιχώματα. Εμφανίζονται με την μορφή ατμών, σταγονιδίων αλλά και ως παράγωγα θερμικής επεξεργασίας των καυσίμων. Είναι ιδιαίτερα τοξικοί και μειώνουν τον βαθμό απόδοσης της θερμικής
μηχανής. Όπως φαίνεται και στο εικόνα[7], υπάρχουν πολλές ομοιότητες του μονοξειδίου του άνθρακα με τους άκαυστους υδρογονάνθρακες.



Εικόνα 7. Ρύποι σε σχέση με τον λόγο ισοδυναμίας Φ,(www.intechopen.com)

1.12.4 Αιθάλη-Soot

Η καπναιθάλη είναι καπνός από σωματίδια άνθρακα. Παράγεται κατά την διεργασία καύσης υδρογονανθράκων και κυρίως συναντάται σε μη προαναμεμιγμένες φλόγες. Τα σωματίδια λόγω της υψηλής θερμοκρασίας πυρακτώνουν και ακτινοβολούν. Το αποτέλεσμα αυτής της θερμικής ακτινοβολίας είναι η κιτρινωπή χροιά μιας φλόγας. Όσο μεγαλύτερος είναι ο λόγος C/H στο αρχικό καύσιμο, τόσο μεγαλύτερη τάση έχει να παράγει το καύσιμο καπνό. Πάνω στην επιφάνεια των σωματιδίων επικολλούνται καρκινογόνες ουσίες όπως πολυκυκλικοί αρωματικοί άνθρακες, νιτρικά και θειικά άλατα και βαρέα μέταλλα. Επιπλέον, μικρής διαμέτρου σωματίδια εισπνέονται από τον άνθρωπο ευκολότερα και προκαλούν σοβαρές αναπνευστικές και καρδιολογικές επιπτώσεις στην υγεία του.

Η καπναιθάλη αποτελείται κυρίως από άνθρακα αλλά περιέχει και περίπου 10% υδρογόνο. Παράγεται σε ένα εύρος θερμοκρασιών από 1350K και 1650K. Αν και η διεργασία παραγωγής του καπνού είναι αρκετά περίπλοκη και είναι πεδίο συνεχιζόμενης έρευνας, υπάρχουν τέσσερα διακριτά στάδια σε αυτήν. Αρχικά, δημιουργούνται συστατικά οι οποίοι λειτουργούν ως προπομποί για την όλη

διεργασία (πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες όπως βενζόλιο, ασετιλίνη κ.α.). Στην συνέχεια σχηματίζονται τα πρώτα στερεά σωματίδια άνθρακα, αυξάνονται οι επιφάνειες των σωματιδίων και γίνεται και συσσωμάτωση σωματιδίων. Στο τέλος, οξειδώνονται τα σωματίδια και παράγεται η αιθάλη.

Εκτός των μεγάλων επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία και το περιβάλλον, η αιθάλη (soot) μολύνει το λάδι της μηχανής μειώνοντας την αποδοτικότητα του και αυξάνει την θερμοκρασία στα τοιχώματα της θερμικής μηχανής λόγω της ακτινοβολίας.

Η συγκέντρωση του καπνού στα προϊόντα της καύσης εξαρτάται από την χημική δομή του καυσίμου, τον λόγο καυσίμου-αέρα, την θερμοκρασία, την πίεση, τους διαθέσιμους χρόνους για να ολοκληρωθούν οι χημικές αντιδράσεις και το επίπεδη ανάμιξης σε τυρβώδες πεδίο.

1.12.5 Οξείδια του Θείου-SO_x

Το θείο S σαν στοιχείο είναι αδρανές για τον άνθρωπο και απαραίτητο σε μικρές ποσότητες για την ύπαρξη ζωής. Τα οξείδια όμως του θείου θεωρούνται ρυπογόνες ουσίες. Στις υψηλές θερμοκρασίες σχηματίζεται το διοξείδιο του θείου:

$$S + O_2 \rightarrow SO_2$$

Σε χαμηλότερες θερμοκρασίες σχηματίζεται το τριοξείδιο του θείου:

$$SO_2 + 0.5O_2 \rightarrow SO_3$$

Το τριοξείδιο έχει την δυνατότητα να σχηματιστεί στον θάλαμο καύσης αλλά και στα καυσαέρια. Τα δύο οξείδια του θείου που αναφέρονται είναι τα επικρατέστερα, χωρίς να αναιρείται ο σχηματισμός και άλλων οξειδίων. Τα οξείδια αντιδρούν με τον νερό της ατμόσφαιρας και δημιουργούν τον θειικό οξύ SO₄. Αυτό με την σειρά του είναι πολύ διαβρωτικό και προκαλεί φθορές στα φυτά και στα ζώα. Το θειικό οξύ στην ατμόσφαιρα είναι αυτό που προκαλεί την «όξινη βροχή».

1.12.6 Οξείδια του Αζώτου-ΝΟ_x

Από τους πιο σημαντικούς ρυπαντές του περιβάλλοντος. Τα οξείδια του αζώτου είναι υπεύθυνα για το φωτοχημικό νέφος, στην παραγωγή όζοντος στην ατμόσφαιρα και συνεισφέρουν στην όξινη βροχή. Τα σημαντικότερα οξείδια είναι το μονοξείδιο και το διοξείδιο του αζώτου. Πιστεύεται ότι τα NO_x προκαλούν άσθμα και την αιθαλομίχλη στις μεγάλες πόλεις. Στην διάρκεια της καύσης υπάρχουν τέσσερις μηχανισμοί οι οποίοι παράγουν NO_x.

• Μηχανισμός Θερμικού NO_x-Μηχανισμός Zeldovich

Το θερμικό NO_x παράγεται από την οξείδωση του ατμοσφαιρικού αζώτου N₂ σε υψηλές θερμοκρασίες. Αυτός ο μηχανισμός παράγει μονοξείδια του αζώτου και εξαρτάται εκθετικά από την θερμοκρασία της φλόγας. Σημαντικό ρόλο στο μηχανισμό έχει αν χρησιμοποιείται προθερμασμένος αέρας που αυξάνει την θερμοκρασία της φλόγας. Άλλοι παράγοντες για τον μηχανισμό Zeldovich είναι η περιεκτικότητα αζώτου στο οξειδωτικό, ο σχεδιασμός της ανάμιξης του μίγματος καυσίμου-αέρα, η ένταση του στροβιλισμού κ.α.

• Μηχανισμός «Άμεσου» NO_x-Μηχανισμός Fenimore

Αυτός ο μηχανισμός παράγει οξείδια του αζώτου σε μια πολύ γρήγορη αντίδραση που συμμετέχουν το ατμοσφαιρικό άζωτο και τα ριζικά του καυσίμου. Ένα ενδεικτικό παράδειγμα ριζικού που συμμετέχει στην αντίδραση είναι το CH, το οποίο βρίσκεται κοντά στο μέτωπο της φλόγας. Ο μηχανισμός ενεργοποιείται στα πρώτα στάδια της καύσης, σε πλούσιες περιοχές καυσίμου. Σε φλόγες υδρογόνου δεν λειτουργεί αυτός ο μηχανισμός γιατί δεν υπάρχουν ριζικά υδρογονάνθρακα.

• Μηχανισμός ΝΟ και Ν2Ο

Σε πολύ υψηλές πιέσεις έχει παρατηρηθεί ότι το άζωτο πραγματοποιεί αντίδραση ανασύνθεσης και δημιουργεί N₂O.

$$N_2 + O + M \rightarrow N_2O + M$$

Το Μ στην αντίδραση είναι ένα «τρίτο στοιχείο». Το υποξείδιο του αζώτου N₂O αντιδρά με οξυγόνο και σχηματίζει μονοξείδιο του αζώτου.

• Άζωτο που προέρχεται από το καύσιμο

Οξείδια του αζώτου μπορούν να δημιουργηθούν από καύσιμα που έχουν στην μοριακή δομή τους δεσμευμένο άζωτο. Συνήθως τέτοια καύσιμα είναι ανθρακούχα στερεά ή βαρέα υγρά. Αέρια καύσιμα όπως το φυσικό αέριο δεν παράγουν από αυτού του τύπου τον μηχανισμό NO_x. Στην διαδικασία της καύσης οι μοριακοί δεσμοί σπάνε και σχηματίζουν άμεσα ριζικά που δημιουργούν N₂, NO.

1.13 Ροϊκά Πεδία-Τυρβώδη Καύση

Σε αυτή την ενότητα θα γίνει προσπάθεια για να περιγραφούν τα ροϊκά πεδία. Μετά την περιγραφή της στρωτής ροής, θα συνεχιστεί η ενότητα με την τυρβώδη ροή και τα χαρακτηριστικά της. Η τυρβώδης ροή είναι πολύ σημαντική στην καύση γιατί είναι συνυφασμένη με αυτήν στις πρακτικές εφαρμογές του μηχανολόγου μηχανικού.

1.13.1 Στρωτό Ροϊκό Πεδίο- Laminar Flow

Το στρωτό ροϊκό πεδίο θα μπορούσε να χαρακτηρίζει μία ομαλή, κανονική ροή. Μία ροή που σε μεγάλο βαθμό είναι ομαλή και σε τάξη αποκαλείται στρωτή ροή. Η ονομασία στρωτή προέρχεται από ότι τα σωματίδια στο ρευστό κινούνται ως μια ομάδα, σαν να ανήκουν στο ίδιο στρώμα. Για να είναι μια ροή στρωτή απαιτείται ένα μικρός αριθμός Reynolds. Στις πρακτικές εφαρμογές ροή ρευστών με υψηλό ιξώδες και μικρή ταχύτητα, όπως το λάδι, είναι συνήθως στρωτή.

Ο Reynolds το 1883 μέσω πειραμάτων σε κυκλικούς αγωγούς κατάφερε να δει αυτές τις δύο κατηγορίες ροών[11]. Σε κυλινδρικούς σωλήνες όπου μέσα έρεε νερό διοχέτευε με την βοήθεια σωληνίσκων χρωματισμένο υγρό. Το χρώμα ήταν ορατό μέσα από τα διάφανα τοιχώματα του αγωγού. Σε μικρές ροϊκές ταχύτητες σχηματιζόταν ένα ευθύγραμμο νήμα χρωματισμένου υγρού, το οποίο κινούταν

παράλληλα στον άξονα του αγωγού. Το ρευστό στην στρωτή περίπτωση κινείται χωρίς έντονες ανταλλαγές στοιχείων μέσω διάχυσης.

Η στρωτή ροή έχει ερευνηθεί σε μεγάλο βαθμό λόγω της ευκολίας της λύσης της σε σχέση με την τυρβώδη ροή. Θα πρέπει να είναι ξεκάθαρο όμως, ότι στην πράξη η στρωτή ροή είναι η εξαίρεση και όχι ο κανόνας. Για να συναντηθεί στρωτή ροή θα πρέπει να υπάρχουν συνήθως μικρές διαστάσεις και μεγάλα ιξώδη. Ένα παράδειγμα εφαρμογής στρωτής ροής είναι το λάδι που ρέει σε ένα ρουλεμάν.

1.13.2 Τυρβώδη Ροϊκό Πεδίο-Turbulence Flow

Οι περισσότερες ροές που συμβαίνουν στην φύση ή έχουν ενδιαφέρον για εφαρμογές είναι τυρβώδη. Η ροή jet πάνω από την τροπόσφαιρα είναι υπό τυρβώδη ροή. Τα πυκνά σύννεφα ή τα ρεύματα στην θάλασσα κάτω από την επιφάνεια των ωκεανών ταξιδεύουν σε τυρβώδη κίνηση. Σε πρακτική εφαρμογή ένα παράδειγμα είναι τα οριακά στρώματα που υπάρχουν στα πτερύγια ενός αεροσκάφους. Επίσης, οι περισσότερες εφαρμογές με καύση εξελίσσονται με τύρβη και συχνά εξαρτάται το φαινόμενο της καύσης από αυτήν. Με την τύρβη οι μηχανικοί είναι σε θέση να αναμιγνύουν και να ομογενοποιούν πιο γρήγορα μίγματα ρευστών αλλά και να επιταχύνονται οι χημικοί ρυθμοί αντίδρασης[3].



Εικόνα 8 Μελάνι σε κανάλι τυρβώδους ροής, (Stewart), (British Columbia)

Είναι αξιοσημείωτο ότι ενώ όλοι αντιλαμβάνονται ή έχουν παρατηρήσει μια τυρβώδη ροή, είναι πολύ δύσκολο να δοθεί ένας ακριβής ορισμός της τύρβης. Έχει επικρατήσει η τυρβώδης ροή να περιγράφεται από κάποια χαρακτηριστικά της[3].

- Αταξία (irregularity): Ένα από τα χαρακτηριστικά της τυρβώδης ροής είναι η τυχαιότητα, χαοτικότητα. Αυτή η αταξία κάνει μία ντετερμινιστική προσέγγιση στα τυρβώδη προβλήματα απίθανη. Για αυτό βασιζόμαστε σε στατιστικές μεθόδους τις περισσότερες φορές.
- Διαχυτότητα (diffusivity): Η διαχυτότητα στην τυρβώδη ροή προκαλεί μεγάλη ανάμιξη και αυξάνει τους ρυθμούς της ορμής, της μετάδοσης θερμότητας και της μεταφοράς μάζας. Εάν σε μία ροή φαίνεται να είναι τυχαία η κίνηση της αλλά δεν απλώνονται οι διακυμάνσεις της ταχύτητας σε όλες τις διευθύνσεις σε όλο το ρευστό, τότε σίγουρα αυτή η ροή δεν είναι τυρβώδης. Η διαχυτότητα της τύρβης είναι το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό της τύρβης για της πρακτικές εφαρμογές του μηχανικού. Με την διαχυτότητα αποφεύγεται η αποκόλληση στα οριακά στρώματα σε πτερύγια αεροσκαφών, αυξάνονται οι ρυθμοί μετάδοσης θερμότητας σε όλες τις εφαρμογές και είναι η πηγή της αντίστασης σε ροές αγωγών μεγάλης κλίμακας (pipelines).
- Μεγάλοι Αριθμοί Reynolds: Η τυρβώδη ροή πάντα υφίσταται σε υψηλούς αριθμούς Reynolds. Η τυρβώδη ροή συχνά ξεκινά από μία αστάθεια της ροής σε στρωτή κατάσταση με μεγάλο αριθμό Reynolds. Αυτές οι αστάθειες συσχετίζονται με την αλληλεπίδραση των όρων του ιξώδους με τους όρους αδράνειας στις εξισώσεις κίνησης. Αυτή η αλληλεπίδραση είναι πολύ περίπλοκη γιατί βασίζεται σε μη γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις οι οποίες ακόμα δεν έχουν μαθηματική αναλυτική λύση. Ο συνδυασμός της αταξίας με την μη γραμμικότητα των όρων κάνει την τύρβη ένα πολύ δύσκολο φαινόμενο για λύση.
- Τρισδιάστατες Διακυμάνσεις Στροβιλότητας (3D vorticity fluctuations): Η τυρβώδης ροή είναι πάντα περιστροφική και τρισδιάστατη και χαρακτηρίζεται από υψηλά επίπεδα διακυμάνσεων της στροβιλότητας. Αυτές οι τρισδιάστατες διακυμάνσεις της στροβιλότητας με έντονο τυχαίο χαρακτήρα δεν θα μπορούσαν να υπάρχουν αν δεν υπήρχαν οι διακυμάνσεις της ταχύτητας. Για αυτό η περίπλοκη κίνηση των κυμάτων στην επιφάνεια της θάλασσας δεν μπορεί να χαρακτηριστεί ως τυρβώδης γιατί δεν υπάρχει διακύμανση στροβιλότητας.

- Εκφυλισμός (Dissipation): Οι τυρβώδεις ροές είναι πάντα εκφυλιστικές. Οι
 ιξώδεις διατμητικές τάσεις αυξάνουν την εσωτερική ενέργεια της ροής
 αποδεσμεύοντας ποσά τυρβώδους κινητικής ενέργειας. Η τύρβη χρειάζεται
 μια συνεχή προμήθεια σε κινητική ενέργεια για να αντισταθμίζει τις απώλειες
 από το ιξώδες. Εάν δεν δοθεί αυτή η ενέργεια, η τυρβώδη ροή θα εκφυλιστεί
 γρήγορα.
- Συνεχές Πεδίο (Continuum): Η τύρβη είναι ένα συνεχές φαινόμενο που κυβερνάται από τις εξισώσεις της μηχανικής των ρευστών. Ακόμα και οι πιο μικρές κλίμακες της ροής που υπάρχουν στη τύρβη είναι κανονικά πολύ πιο μεγάλες από την κλίμακα της μοριακής δομής του ρευστού.
- Χαρακτηριστικό της Ροής: Η τύρβη είναι ένα χαρακτηριστικό της ροής και όχι του ρέοντος ρευστού. Οι περισσότερες τυρβώδεις ροές είναι ίδιες για διαφορετικά ρευστά, είτε είναι αέρια ή υγρά, αρκεί ο αριθμός Reynolds να είναι μεγάλος. Τα χαρακτηριστικά της τύρβης δεν ελέγχονται από τις μοριακές ιδιότητες του ρευστού που κινείται σε τυρβώδη ροϊκό πεδίο. Εφόσον οι εξισώσεις κίνησης δεν είναι γραμμικές, κάθε ξεχωριστή περίπτωση ροής θα έχει δικά της χαρακτηριστικά που θα σχετίζονται με τις αρχικές και τις οριακές συνθήκες.

Οι εξισώσεις Navier-Stokes δεν έχουν κατορθωθεί να λυθούν αναλυτικά και να υπάρχει μία γενική λύση. Στην τυρβώδη ροή υπάρχουν διακυμάνσεις και διαταραχές με ένα εύρος συχνοτήτων. Για να λυθούν τα τυρβώδη ροϊκά πεδία έχουν χρησιμοποιηθεί στατιστικές μέθοδοι που περιλαμβάνουν:

- Εύρεση μέσων τιμών για τις διάφορες ποσότητες και των ροπών τους (moments)
- Με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (Probability Density Function)

1.13.3 Τυρβώδη Καύση

Οι τυρβώδεις φλόγες διακατέχονται, σε αντίθεση με τις στρωτές, από θόρυβο και διαταραχές στα όρια της φλόγας. Η ταχύτητα διάδοσης της στρωτής φλόγας

εξαρτάται μόνο από το μίγμα καυσίμου-αέρα (Φ) και τις ιδιότητες του ρευστού (k,μ, D) ενώ στις τυρβώδεις φλόγες παίζει ρόλο και οι συνθήκες του τυρβώδους ροϊκού πεδίου[1]. Σημαντικό χαρακτηριστικό για την τυρβώδη καύση είναι η ένταση της τύρβης και το μέγεθος των μικρό-στροβίλων. Στην γενική περίπτωση, οι ρυθμοί αντίδρασης της καύσεις αυξάνονται όσο αυξάνεται και η ένταση της τύρβης. Υπάρχει μία αλληλεπίδραση στις κλίμακες της τυρβώδους ροής με τις κλίμακες που χαρακτηρίζουν ένα μέτωπο φλόγας. Το μέτωπο της φλόγας αλληλεπιδρά με τις μεγάλες δίνες αλλά και με τους μικρούς στροβίλους.



Εικόνα 9. Τυρβώδη Φλόγα Αιθυλενίου, (M. G. Mungal) ,(Combustion and Flame, p.126)

Τα κύρια χαρακτηριστικά της τυρβώδης καύσης είναι:

- Η ταχύτητα του μετώπου της τυρβώδης φλόγας είναι πολύ μεγαλύτερη από της ταχύτητα της στρωτής λόγω αύξηση των ιδιοτήτων μεταφοράς ορμής, θερμότητας και διάχυσης μάζας.
- Το πάχος αντίδρασης της τυρβώδους φλόγας είναι πιο παχύ από αυτό της στρωτής φλόγας.
- Η ταχύτητα διάδοσης του στρωτού μετώπου S_L αυξάνεται όσο αυξάνεται ο αριθμός Reynolds.
- Στο τυρβώδες μέτωπο φλόγας εμφανίζει «ζάρωμα» (wrinkling) αυξάνοντας την επιφάνεια της φλόγας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2⁰- Χημική Κινητική –Χημειοφωταύγεια και Χημικοί Μηχανισμοί

2.1 Χημική Κινητική

Η χημική κινητική είναι περίπλοκο επιστημονικό θέμα και ειδικά για τα συστήματα καύσης στα οποία υπάρχουν μία μυριάδα χημικών στοιχείων, καθ' ένα από αυτά έχει την δυνατότητα να αλληλεπιδράσει με τα υπόλοιπα. Για να αποσαφηνιστεί η δυσκολία της χημικής κινητικής, σήμερα, μόνο το μεθάνιο και το υδρογόνο έχουν χημικούς μηχανισμούς οι οποίοι επιτρέπουν την εύρεση χαρακτηριστικών για στρωτές ροές, με την προϋπόθεση ότι η πίεση δεν είναι πολύ μεγάλη [6].

2.1.1 Ο Νόμος της Δράσης των Μαζών

Για μία πρόσθια χημική αντίδραση που μπορεί γραφεί σε παραγοντική μορφή ως:

$$\sum_{i}^{N_s} v'_i M_i \stackrel{\mathrm{k}_{\mathrm{f}}}{\to} \sum_{i}^{N_s} v''_i M_i \qquad 2.1$$

Τα $v_{i,r}^{'}$, $v_{i,r}^{''}$ είναι οι στοιχειομετρικοί συντελεστές, M_i το κάθε χημικό στοιχείο και N_s ο συνολικός αριθμός των συστατικών. Ο ρυθμός της γραμμομοριακής συγκέντρωσης c_i για κάθε στοιχείο *i* είναι:

$$\dot{\omega}_i = \frac{dc_i}{dt}$$
 2.2

Για ένα στοιχείο j με $\dot{\omega}_j$ ισχύει η σχέση:

$$\frac{\dot{\omega}_i}{v_i^{"}-v_i^{'}} = \frac{\dot{\omega}_j}{v_i^{"}-v_i^{'}} = \omega$$
 2.3

Το ω είναι ανεξάρτητος από τα στοιχεία και μπορεί να χαρακτηριστεί ως ο ρυθμός αντίδρασης. Τότε ο φαινομενολογικός νόμος της δράσης των μαζών, για τον ρυθμό αντίδρασης ω, είναι ένα γινόμενο των συγκεντρώσεων των αντιδρώντων:

$$\omega = k_f(T) \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{\nu_i}$$
 2.4

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

27

Ο παράγοντας k_f εξαρτάται από την θερμοκρασία, ονομάζεται ειδική σταθερά ρυθμού αντίδρασης και έχει το f για να δείξει την φορά της αντίδρασης(forward). Ένα απαραίτητο μέγεθος για τις χημικές αντιδράσεις είναι το χρονικό διάστημα που διαρκούν, το οποίο ανάλογα με τις συνθήκες της αντίδρασης μπορεί να μεταβάλλεται. Η χρονική κλίμακα μιας χημικής αντίδρασης $\tau_{ch,i}$ μπορεί να προσδιοριστεί από την σχέση:

$$\tau_{ch,i} = \frac{c_i}{\omega_i} = \frac{c_i}{\sum_i^{N_s} (v_i^{''} - v_i^{'})\omega}$$
 2.5

Οι κλίμακες χρόνου των χημικών αντιδράσεων συγκρίνονται με τις χρονοκλίμακες των διεργασιών διάχυσης ορμής, θερμότητας και μάζας. Με αυτό τον τρόπο αναλύεται η επίδραση που μπορεί να έχει η χημική διεργασία με τα υπόλοιπα φαινόμενα που εξελίσσονται στο μέτωπο της φλόγας[1,6].

2.1.2 Αμφίδρομες Αντιδράσεις

Κάθε πρόσθια αντίδραση είναι συσχετισμένη και με την αντίστοιχη «προς τα πίσω» αντίδραση (backward) :

$$\sum_{i}^{N_{s}} v_{i}^{''} M_{i} \xrightarrow{k_{b}} \sum_{i}^{N_{s}} v_{i}^{'} M_{i} \qquad 2.6$$

Мια τέτοια αντίδραση που μετακινείται και πρόσθια και αντίστροφα ονομάζεται αμφίδρομη αντίδραση[1,6]. Ο καθαρός ρυθμός αντίδρασης μιας αμφίδρομης αντίδρασης είναι $\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_{i,f} + \dot{\omega}_{i,b} = (v_i^{"} - v_i^{'})(\omega_f - \omega_b) = (v_i^{"} - v_i^{'})\omega$, με το ω να υπολογίζεται από την σχέση :

$$\omega = k_f(T) \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v'_i} - k_b(T) \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v''_i}$$
 2.7

Από αυτήν την αντίδραση είναι απαραίτητο να υπολογιστεί μόνο μία από τις δύο σταθερές του ρυθμού αντίδρασης k_f , k_b . Αυτό ισχύει γιατί σε κατάσταση ισορροπίας $\omega \equiv 0$ οι ρυθμοί αντίδρασης της πρόσθιας και της αντίστροφης είναι ίσοι. Στο ισοζύγιο προκύπτει η σχέση:

$$\frac{k_{\rm f}}{k_{\rm b}} = \prod_{i=1}^{\rm N_{\rm s}} c_i^{(v_i^{''} - v_i^{'})}$$
 2.8

Αυτό το κλάσμα είναι η γνωστή σταθερά χημικής ισορροπίας $K_c = \frac{k_f}{k_b}$. Τότε, η σχέση για τον ρυθμό αντίδρασης της αμφίδρομης αντίδρασης γίνεται:

$$\omega = k_f(T) (\prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v'_i} - K_c^{-1} \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v''_i})$$
 2.9

Η σταθερά της χημικής ισορροπίας μπορεί να βρεθεί με μεγάλη ακρίβεια αντίθετα της σταθεράς για την αντίστροφη αντίδραση. Σε μερικές περιπτώσεις η αντίστροφη αντίδραση(backward) έχει πολύ πιο αργό ρυθμό από την πρόσθια(forward). Αυτό συμβαίνει σε αμφίδρομες αντιδράσεις που στα προϊόντα υπάρχουν ριζικά τα οποία είναι γνωστό ότι θα είναι σε μικρότερες ποσότητες. Η συχνότητα των αντιδράσεων αντίστροφης αντίδρασης θα είναι πολύ μικρότερη από την πρόσθια αντίδραση. Ένα παράδειγμα τέτοιας αντίδρασης είναι $H + O_2 \rightarrow OH + O$. Σε αυτή την εξίσωση τα προϊόντα έχουν δύο ριζικά ενώ τα αντιδρώντα έχουν ένα ριζικό. Ακόμη, σε διεργασίες καύσης υπάρχουν φορές όπου τα προϊόντα απομακρύνονται συνεχώς από την ζώνη αντίδρασης και ισχύει $C_{pro \ ducts} \approx 0$. Η εξίσωση για τον ρυθμό αντίδρασης μπορεί να απλοποιηθεί στην σχέση:

$$\omega \cong \mathbf{k}_{\mathrm{f}}(\mathrm{T}) \prod_{i=1}^{\mathrm{N}_{\mathrm{s}}} \mathbf{c}_{i}^{\nu_{i}}$$
 2.10

Τέτοιες αντιδράσεις καλούνται μη αντιστρεπτές. Η προσέγγιση ότι ο ρυθμός αντίδρασης της πρόσθιας αντίδρασης είναι πολύ μεγαλύτερος από την αντίστροφη θα έχει μεγάλα σφάλματα όσο η αντίδραση πλησιάζει την χημική ισορροπία, στην οποία εκεί οι δύο ρυθμοί είναι ίσοι.

2.1.3 Αντιδράσεις Πολλαπλών Βημάτων

Υπάρχουν ελάχιστες αντιδράσεις στις οποίες τα αντιδρώντα αλληλεπιδρούν σε μοριακό επίπεδο και παράγουν προϊόντα σε μία χημική εξίσωση[1,6]. Για παράδειγμα, η αναπαράσταση μιας στοιχειομετρικής οξείδωσης προπανίου είναι μία απλούστευση:

$$C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$$

Στην πραγματικότητα στην οξείδωση παίρνουν μέρος πολλά ενδιάμεσα στοιχειώδη βήματα με ενδιάμεσα στοιχεία προτού τα τελικά προϊόντα πάρουν μορφή. Στα προϊόντα θα υπάρχουν και άλλα στοιχεία πέρα από το διοξείδιο του άνθρακα και τους ατμούς. Αν θέλαμε να ορίσουμε τον νόμο δράσης των μαζών για μία πολλαπλών βημάτων αντίδραση με Κ ενδιάμεσα βήματα:

$$\sum_{i}^{N_{s}} v_{i,k}^{'} M_{i} \stackrel{\to k_{k,f}}{\leftarrow} \sum_{k,b}^{N_{s}} v_{i,k}^{''} M_{i}, k = 1, 2, \dots, K$$
 2.11

$$\omega_{k} = \mathbf{k}_{k,f}(\mathbf{T}) \prod_{i=1}^{N_{s}} \mathbf{c}_{i}^{\nu_{i,k}'} - \mathbf{k}_{k,b}(\mathbf{T}) \prod_{i=1}^{N_{s}} \mathbf{c}_{i}^{\nu_{i,k}'}, k = 1, 2, ..., K \qquad 2.12$$

Για να επιλυθεί ένα τέτοιο σύστημα εξισώσεων θα πρέπει να είναι γνωστά τα Κ ενδιάμεσα βήματα και οι ρυθμοί αντίδρασής τους. Με αυτόν τρόπο είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι ρυθμοί παραγωγής και καταστροφής για οποιοδήποτε στοιχείο στη πολύ-βηματική αντίδραση. Ωστόσο, είναι πολύ δύσκολο να εξακριβωθούν αυτά τα ενδιάμεσα στοιχειώδη βήματα και οι ειδικές σταθερές του ρυθμού αντίδρασης. Επιπρόσθετα, αν ήταν γνωστά όλα τα ενδιάμεσα βήματα, το να λυθεί ένα πρόβλημα καύσης σε πεδίο ροής συμπεριλαμβανομένων όλων των αντιδράσεων και των στοιχείων είναι κάτι το εξαιρετικά δύσκολο, ακόμα και για τους ισχυρότερους υπολογιστές. Για αυτό το πρόβλημα της καύσης προς επίλυση αποκαλείται δύσκαμπτο (stiffness problem). Υπάρχουν αρκετές τεχνικές οι οποίες προσπαθούν να προσεγγίσουν το πρόβλημα της καύσης μέσω απλοποιήσεων οι οποίες θα αναφερθούν στην συνέχεια.

2.1.4 Προσέγγιση της Μόνιμης Κατάστασης

Κατά την διάρκεια μιας πολύπλοκης χημικής διεργασίας, όπου τα αντιδρώντα μετατρέπονται σε προϊόντα, εμφανίζονται ενδιάμεσα συστατικά[1,6]. Κάποια από αυτά είναι πολύ σημαντικά για την εξέλιξη αυτής της διεργασίας γιατί συμβάλουν στην σύνδεση των επιμέρους ανεξάρτητων αντιδράσεων. Σε αυτές τις αντιδράσεις τα ενδιάμεσα συστατικά που συμμετέχουν έχουν μικρές συγκεντρώσεις και ο ολικός ρυθμός αντίδρασης είναι σχετικά μικρός. Με άλλα λόγια μπορούμε να πούμε ότι η

κατανάλωση και η παραγωγή αυτών των ενδιάμεσων συστατικών συμβαίνει αστραπιαία και με ίσους σχετικούς ρυθμούς βοηθώντας την υπόθεση ότι οι συγκεντρώσεις παραμένουν σταθερές. Άρα για ένα ενδιάμεσο στοιχείο *i* ο ρυθμός αντίδρασης θα είναι :

$$\dot{\omega}_i = \frac{dc_i}{dt} = \dot{\omega}_i^+ - \dot{\omega}_i^- \qquad 2.13$$

Τα $\dot{\omega}_i^+$, $\dot{\omega}_i^-$ αναπαριστούν τις παραγωγές και τις καταναλώσεις αντίστοιχα. Με την υπόθεση της μόνιμης κατάστασης(steady state) γίνεται :

Με αυτήν την προσέγγιση γίνεται εύκολα αντιληπτό ότι η λύση μιας διαφορικής εξίσωσης, πλέον έχει μετατραπεί σε λύση μιας αλγεβρικής εξίσωσης. Οι αλγεβρικές εξισώσεις λύνονται με επαναληπτικές μεθόδους, οι οποίες μπορεί να είναι και αυτές υπολογιστικά χρονοβόρες αν δεν συγκλίνει το σύστημα.

Μια παρατήρηση για αυτήν την μέθοδο είναι ότι η αναγνώριση των ενδιάμεσων συστατικών δεν είναι εύκολη διαδικασία ούτε και προφανής. Είναι απαραίτητη μία μελέτη και ένας έλεγχος για την ορθότητα του αποτελέσματος. Η αξιολόγηση που μπορούμε να κάνουμε είναι το $\frac{dc_i}{dt}$ να είναι αρκετά μικρότερο από τους ρυθμούς παραγωγής και κατανάλωσης $\dot{\omega}_i^{+}$, $\dot{\omega}_i^{-}$.

2.1.5 Προσέγγιση της Μερικής Ισορροπίας

Η προσέγγιση της μερικής ισορροπίας(partial equilibrium) υποθέτει ότι οι ρυθμοί αντίδρασης πρόσθιας και αντίστροφης φοράς μιας αντίδρασης k, είναι πολύ μεγαλύτεροι από τον καθαρό ρυθμό αντίδρασης θέτοντας τον $\omega_k \approx 0$. Με αυτήν την υπόθεση προκύπτει ότι:

$$k_{k,f}(T) \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v'_{i,k}} \cong k_{k,b}(T) \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{v''_{i,k}}$$
 2.15

Πρέπει να επισημανθεί ότι το ω_k είναι μικρό μόνο εάν συγκριθεί με τους ρυθμούς της αμφίδρομης αντίδρασης. Δεν μπορεί απευθείας να εφαρμόζεται ότι $\omega_k = 0$, γιατί δεν είναι απαραίτητα μικρό μέγεθος.

2.1.6 Προσέγγιση των Συνολικών ή Ημι-Συνολικών Αντιδράσεων

Οι προσεγγίσεις της μόνιμης κατάστασης και της μερικής ισορροπίας κάνουν συστηματικές μειώσεις του χημικού μηχανισμού σε ένα σύστημα το οποίο θα συμπεριλαμβάνει λιγότερες αντιδράσεις και μικρότερο αριθμό στοιχείων που δεν βρίσκονται σε ισορροπία. Τα τελικά αποτελέσματα θα έχουν εξάρτηση από τους συντελεστές της χημικής κινητικής και από τα αρχικά ενδιάμεσα βήματα.

Η μέγιστη μείωση που μπορεί να υπάρξει για ένα χημικό μηχανισμό είναι μια μονόβηματική αντίδραση που να περιέχει τα αρχικά αντιδρώντα. Μια τέτοια αντίδραση ονομάζεται συνολική(global) αντίδραση. Η συνολική αντίδραση θα πρέπει να περιέχει τα αρχικά αντιδρώντα σε μία μονό-βηματική αντίδραση:

Καύσιμο + Oξειδωτικό $\stackrel{k}{\rightarrow}$ Προϊοντα

Ο ρυθμός αντίδρασης θα είναι:

$$\omega = k \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{n_i}$$
 2.16

Ο εκθέτης n_i της συγκέντρωσης c_i , ονομάζεται τάξη της αντίδρασης και δεν πρέπει να συγχέεται με το v'_i όπου ήταν η στοιχειομετρική σταθερά.

Εάν, σε αντίθεση με την συνολική αντίδραση, κρατηθούν τα αρχικά αντιδρώντα και κάποια σημαντικά στοιχεία που συμμετέχουν σε έναν αριθμό βημάτων, αυτός ο μειωμένος μηχανισμός λέγεται ότι έχει ημι-συνολικές(semi global) αντιδράσεις. Ακόμα όμως και ο μηχανισμός των ημι-συνολικών αντιδράσεων είναι πιθανό να είναι αλγεβρικά δυσκίνητος και δύσκαμπτος, διότι οι σχέσεις μεταξύ των συγκεντρώσεων *c_i* των στοιχείων είναι συχνά μη-γραμμικές και δεν μπορούν να εκφραστούν άμεσα.

Μία άλλη εναλλακτική προσέγγιση θα ήταν να παρασταθεί ο λεπτομερής χημικός μηχανισμός από κάποιες προτεινόμενες αντιδράσεις που να περιέχουν τα σημαντικά

στοιχεία της χημικής διεργασίας και οι σταθερές της χημικής κινητικές να προσδιοριστούν εμπειρικά.

Είναι προφανές ότι δεν μπορούν όλες οι αντιδράσεις πολλαπλών βημάτων να προσεγγιστούν με μία συνολική αντίδραση. Για να περιγραφεί η συμπεριφορά ενός πολύπλοκου χημικού μηχανισμού συχνά απαιτούνται δύο, τρία η και παραπάνω βήματα, τα οποία αποτελούν ημι-συνολικές αντιδράσεις. Το εύρος εφαρμογών της συνολικής αντίδρασης και των ημι-συνολικών αντιδράσεων καθορίζονται από το εκάστοτε φαινόμενο καύσης που είναι προς μελέτη.

2.2 Θεωρίες Ρυθμών Αντίδρασης

2.2.1 Ο Νόμος του Arrhenius

Ο ειδικός ρυθμός αντίδρασης k(T) είναι ο λόγος που οι ρυθμοί αντίδρασης έχουν μεγάλη εξάρτηση από την θερμοκρασία. Για μία στοιχειώδη αντίδραση ο νόμος του Arrhenius γράφεται:

$$\frac{dlnk(t)}{dT} = \frac{E_a}{R^o T^2}$$
 2.17

Στην εξίσωση το E_a καλείται ενέργεια ενεργοποίησης και οι μονάδες της ενέργειας αυτής είναι σε cal/mole. Αν η ενέργεια ενεργοποίησης είναι σταθερή με την θερμοκρασία τότε μπορεί να γίνει ολοκλήρωση και να προκύψει:

$$k(T) = Ae^{\frac{-E_a}{R^o T}}$$
 2.18

Η *R^o* είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων και το Α ονομάζεται παράγων συχνότητας ή προ-εκθετικός παράγοντας. Εφόσον και τα δύο μεγέθη είναι σταθερά μπορεί να οριστεί μία νέα ποσότητα η οποία ονομάζεται θερμοκρασία ενεργοποίησης:

$$T_a = \frac{E_a}{R^o}$$
 2.18

Επειδή ο προ-εκθετικός παράγοντας Α είναι και αυτός συνάρτηση της θερμοκρασίας έχει καθιερωθεί να διατυπώνεται ο νόμος του Arrhenius με τον εξής τρόπο:

$$k(T) = BT^a e^{\frac{-E_a}{R^o T}}$$
 2.19

Το Β είναι μία σταθερά και ο εκθέτης α μεταβάλλεται από 0 έως 1. Αυτοί σταθεροί όροι στον νόμο του Arrhenius μπορούν να προσδιοριστούν από πειραματικά δεδομένα. Όταν χρησιμοποιούνται τέτοιες εκφράσεις για τους ρυθμούς αντίδρασης, είναι απαραίτητο να προσδιορίζεται το εύρος της θερμοκρασίας.

Για συνολικές ή ημι-συνολικές αντιδράσεις, οι εκφράσεις των ρυθμών αντίδρασης είναι πιο πολύπλοκες από αυτές των στοιχειωδών αντιδράσεων. Αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι γίνεται προσπάθεια με αριθμητικές προσαρμογές στα πειραματικά δεδομένα ένας χημικός μηχανισμός να συμμορφώνεται με μια πιο απλή μορφή. Κάθε στοιχειώδης αντίδραση έχει την δικιά της ενέργεια ενεργοποίησης η οποία υπαγορεύει το εύρος θερμοκρασιών στο οποίο η αντίδραση είναι πιο αποτελεσματική. Άρα για ημι-συνολικές αντιδράσεις κάθε αντίδραση έχει την δικιά της προ-εκθετική σταθερά, εκθέτη θερμοκρασίας, ενέργεια ενεργοποίησης και εύρος θερμοκρασίας στο οποίο είναι έγκυρη.

2.2.2 Ενέργεια Ενεργοποίησης

Η ευαισθησία μιας χημικής αντίδρασης από την μεταβολή της θερμοκρασίας εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την ενέργεια ενεργοποίησης, η οποία είναι η ελάχιστη ποσότητα ενέργειας όπου τα συγκρουόμενα μόρια πρέπει να αποκτήσουν για να γίνει πιθανή η αντίδραση[6,11]. Το σχήμα [10] δείχνει την ενέργεια ενεργοποίησης μιας πρόσθιας εξώθερμης αντίδρασης, στην οποία τα αντιδρώντα πρέπει να περάσουν από μία υψηλή ενεργειακά στάθμη, πριν μετατραπούν σε προϊόντα. Για δεδομένη θερμοκρασία ο εκθετικός παράγοντας $e^{\frac{-E_a}{R^0T}}$ στον νόμο του Arrhenius θα μειωθεί αν αυξηθεί η ενέργεια ενεργοποίησης. Σε μεγάλες ενέργειες ενεργοποίησης, η αντίδραση γίνεται πολύ ευαίσθητη σε μεταβολές της θερμοκρασίας.



Reaction Coordinate

Εικόνα 10. Διάγραμμα Ενέργειας Ενεργοποίησης σε εξώθερμη αντίδραση

Τα αντιδρώντα στο σχήμα [10] έχουν αποθηκευμένη μια ποσότητα ενέργειας η οποία είναι η θερμότητα που θα απελευθερωθεί στην αντίδραση. Για την αντίστροφη αντίδραση η ενέργεια ενεργοποίησης θα ήταν το ποσό ενέργειας που έχουν αποθηκευμένα τα αντιδρώντα και η πρόσθια ενέργεια ενεργοποίησης. Είναι φανερό ότι επειδή πρόκειται για μία εξώθερμη αντίδραση η αντίστροφη διαδικασία είναι πιο αργή επειδή έχει μεγαλύτερη ενέργεια ενεργοποίησης.

Το πόσο μεγάλη είναι η ενέργεια ενεργοποίησης μπορεί να μετρηθεί από τον αριθμό Arrhenius:

$$Ar = \frac{E_a}{R^o T_{max}} = \frac{T_a}{T_{max}}$$
 2.20

Η T_{max} είναι μία θερμοκρασία αναφοράς, η μέγιστη σε ένα πεδίο ροής, όπως για παράδειγμα η θερμοκρασία στο μέτωπο της φλόγας. Ο αριθμός Ar είναι ο λόγος της ενέργειας ενεργοποίησης με την μέγιστη θερμική ενέργεια της ροής. Αυτός ο λόγος είναι μεγάλος στα περισσότερα φαινόμενα καύσης.

2.2.3 Η Θεωρία των Συγκρούσεων

Η θεωρία των συγκρούσεων (collision theory) συσχετίζει τον ρυθμό αντίδρασης μιας εξίσωσης με τον ρυθμό των μοριακών συγκρούσεων[6,11]. Για να είναι επιτυχής μια

σύγκρουση χρειάζεται μία ενέργεια σύγκρουσης η οποία είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια ενεργοποίησης. Για τις διεργασίες των χημικών αντιδράσεων της καύσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί η συνάρτηση κατανομής της ταχύτητας του Maxwell. Ο ρυθμός αντίδρασης μπορεί να βρεθεί αν αθροιστούν όλες οι πιθανές συγκρούσεις των στοιχείων ικανοποιώντας το κριτήριο για την ελάχιστη ενέργεια συγκρούσεων.

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας παρατίθεται η απλή μονοδιάστατη περίπτωση των μοριακών συγκρούσεων. Γίνεται υπόθεση όγκου με n_i μόρια από i συστατικά και n_j από j συστατικά. Αυτά τα μόρια θα είναι δύσκαμπτες σφαίρες μάζας m_i, m_j και διαμέτρου σ_i, σ_j . Την στιγμή της σύγκρουσης μεταξύ ενός στοιχείου i και j τα σφαιρίδια θα απέχουν $\sigma_{i,j} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$ και μία μέση ταχύτητα $\overline{V}_{i,j}$. Αυτή η ταχύτητα μπορεί να υπολογιστεί από την κατανομή Maxwell για μία θερμοκρασία Τ:

$$\overline{V}_{i,j} = \left(\frac{8kT}{\pi m_{i,j}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
 2.21

Το k είναι η σταθερά Boltzmann και το μέγεθος $m_{i,j} = \frac{m_i m_j}{(m_i + m_j)}$ είναι η μειωμένη μάζα. Αθροίζοντας για όλα τα μόρια, ο συνολικός αριθμός των συγκρούσεων ανά όγκο και ανά μονάδα χρόνου ανάμεσα στα συστατικά *i*, *j* είναι:

$$Z_{i,j} = \pi \sigma_{i,j}^2 n_i n_j \left(\frac{8kT}{\pi m_{i,j}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
 2.22



Εικόνα 11. Τα μόρια στην θεωρία των συγκρούσεων για την μονοδιάστατη περίπτωση

Δεν είναι όμως όλες οι συγκρούσεις ικανές για να προκαλέσουν μία χημική αντίδραση. Η κατανομή Boltzmann έχει την ικανότητα να δείξει τον αριθμό των μορίων *n**τα οποία υπερβαίνουν ενεργειακά την ενέργεια σύγκρουσης *E**:

$$\frac{n^*}{n} = e^{\frac{-E^*}{TR^0}}$$
 2.23

Τώρα μπορεί να οριστεί η συχνότητα των ικανών συγκρούσεων για τα συστατικά i,j με ενέργειες E_i^*, E_j^* και να τεθεί $E_{\alpha} = E_i^* + E_j^*$ ως η ελάχιστη ποσότητα ενέργειας που θα προκαλέσει αντίδραση:

$$Z_{i,j}^* = Z_{i,j} e^{\frac{-E_{\alpha}}{TR^{o}}}$$
 2.24

Προσδιορίζοντας ως:

$$Z_{i,j}^* = -\frac{dn_i}{dt} = -\frac{dn_j}{dt}$$
 2.25

Και έχοντας υπόψη ότι $c_i = n_i/A^o$, όπου $A^o = 6.022 * 10^{23}$ είναι ο αριθμός Avogadro, τότε ο ρυθμός αντίδρασης θα είναι:

$$\omega = -\frac{dc_i}{dt} = -\frac{dc_j}{dt}$$
 2.26

$$= A^{o} \sigma_{i,j}^{2} \left(\frac{8kT}{\pi m_{i,j}}\right)^{\frac{1}{2}} c_{i} c_{j} e^{\frac{-E_{\alpha}}{TR^{o}}}$$
 2.27

Στην εξίσωση μπορεί να οριστεί ένας παράγοντας συχνότητας A(T) που εξαρτάται από την θερμοκρασία και ο οποίος θα είναι:

$$A(T) = A^o \sigma_{i,j}^2 \left(\frac{8kT}{\pi m_{i,j}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
 2.28

Με τον παράγοντα αυτό ο ρυθμός αντίδρασης γράφεται σε μία μορφή που θυμίζει τον νόμο δράσης των μαζών:

$$\omega = A(T)c_i c_j e^{\frac{-L_{\alpha}}{TR^{o}}}$$
 2.29

Για να βρεθεί το αποτέλεσμα αυτό έχουν γίνει ένα σωρό υποθέσεις. Τα μόρια δεν είναι κατά ανάγκη τέλειες σφαίρες και η συχνότητα των συγκρούσεων θα σχετίζεται

με την γεωμετρία και της διεύθυνση του κάθε μορίου στην στιγμή της σύγκρουσης. Επιπλέον τα μόρια περιστρέφονται και ταλαντεύονται ταυτόχρονα με την μεταφορική τους κίνηση, δίνοντας τους και άλλες μορφές ενέργειας.

2.3 Χημειοφωταύγεια

Η καύση είναι ένα βίαιο φαινόμενο με πολλές χημικές αντιδράσεις και μικρούς χρόνους αντίδρασης. Στην διάρκεια του φαινομένου, τα αντιδρώντα συγκρούονται και κάποια στοιχεία μεταβαίνουν σε υψηλή(μεταβατική) ενεργειακή κατάσταση. Όταν η ενθαλπία αυτής της μεταβατικής κατάστασης είναι ίση ή μεγαλύτερη από ένα συγκεκριμένο ποσό ενέργειας, ένα ηλεκτρικά διεγερμένο στοιχείο δημιουργείται[2,7,8,9,10].

Η χημειοφωταύγεια(chemiluminescence) προέρχεται από την χημεία(chemical) και το φως(luminescence). Ο όρος chemical αναφέρεται σε χημική αντίδραση και ο όρος luminescence από το φως που εκπέμπει ο εκφυλισμός ενός διεγερμένου στοιχείου από την υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση στην κατάσταση ισορροπίας. Το περισσευούμενο ποσό ενέργειας μετασχηματίζεται σε ένα φωτόνιο. Το διεγερμένο στοιχείο δεν είναι απαραίτητο ότι θα αποβάλλει φωτόνιο. Η άλλη διαδρομή του εκφυλισμού αυτής της παραπανίσιας ενέργειας είναι μέσω συγκρούσεων μεταξύ των στοιχείων και την απόσβεση(quenching). Στην περίπτωση της απόσβεσης το περισσευούμενο ποσό ενέργειας μετατρέπεται σε θερμότητα. Η αποτελεσματικότητα των συγκρούσεων και της απόσβεσης των διεγερμένων ηλεκτρικά στοιχείων είναι συχνά συνάρτηση της θερμοκρασίας. Το μήκος κύματος της ακτινοβολίας που εκπέμπεται είναι χαρακτηριστικό για κάθε διεγερμένο στοιχείο. Για παράδειγμα τα γημειοφωταυγάζοντα ριζικά ΟΗ*, CH*, που εμφανίζονται σε φλόγες υδρογονανθράκων, εκπέμπουν ένα φάσμα ακτινοβολίας με διακριτές κορυφές. Όσο πιο πολύπλοκη είναι η δομή ενός ριζικού τόσο πιο περίπλοκο είναι και το φάσμα ακτινοβολίας του. Στις φλόγες υδρογονανθράκων τα πιο σημαντικά χημειοφωταυγάζοντα ριζικά είναι τα OH*, CH*, C_2^* και CO₂*. Τα τρία πρώτα ριζικά έχουν διακριτές κορυφές στο φάσμα ακτινοβολίας, ενώ το διεγερμένο διοξείδιο του

άνθρακα είναι συνεχές σε όλο το φάσμα ακτινοβολίας (broadband wave length range). Στις φλόγες υδρογόνου συναντάται μόνο το ριζικό OH*.



Εικόνα 12, Φάσμα Εκπομπών Χημειοφωταυγάζοντων Στοιχείων σε Φλόγα Υδρογονάνθρακα, (www.wikipedia.org/wiki/File:Spectrum_of_blue_Flame.png)

Οι αντιδράσεις για τα διεγερμένα ριζικά περιγράφονται από τρεις εξισώσεις:

- Σ_{χ} ηματισμού: $A + B = C + E^*$ (R 1-1)
- Αποβολή ακτινοβολίας: $E^* -> E + hv$ (R 1-2)
- Απόσβεση(quenching): *E*^{*} + *M*-> *E* + *M* (1-3)

Τα στοιχεία A,B,C μπορούν να είναι οποιαδήποτε χημικά στοιχεία και το E* είναι το ηλεκτρικά διεγερμένο στοιχείο. Το E, χωρίς τον αστερίσκο, εννοεί το στοιχείο στην ουδέτερη ενεργειακά κατάσταση. Το στοιχείο M είναι αυτό που θα συγκρουστεί με το διεγερμένο στοιχείο, h είναι η σταθερά Plank και ν η συχνότητα εκπομπής του φωτονίου. Στην καύση κάποια στοιχεία, για παράδειγμα CH* έχουν πάνω από μία διεγερμένη ενεργειακά κατάσταση.

Η χημειοφωταύγεια έχει χρησιμοποιηθεί σαν διαγνωστικό εργαλείο για την επιστήμη της καύσης για ενεργό έλεγχο της λόγω του διακριτικού χαρακτήρα της (nonintrusive) στη διαδικασία της καύσης αφού είναι οπτικός ο έλεγχος μέσω ειδικών φακών και οπτικών μέσων. Ακόμα όμως, δεν είναι ξεκάθαρος ο λεπτομερής χημικός

μηχανισμός της χημειοφωταύγειας[2]. Η σύνδεση ανάμεσα στις εκπομπές χημειοφωταύγειας και στους χημικούς μηχανισμούς είναι μία δύσκολη πρόκληση.



Εικόνα 13. Πειραματική Μέτρηση Χημειοφωταύγειας σε Φλόγα Μεθανίου, (M. G. Mungal), (1990)

Όπως αναφέρεται και στην βιβλιογραφία [2,8] οι συγκεντρώσεις των χημειοφωταυγάζοντων ριζικών είναι αρκετές τάξεις μικρότερες από αυτές των στοιχείων στην κατάσταση ισορροπίας. Για αυτό, ο μηχανισμός της χημειοφωταύγειας είναι αμελητέος μπροστά στον βασικό χημικό-κινητικό μηχανισμό. Η αλληλεπίδραση του χημικού μηχανισμού με τον σχηματισμό χημειοφωταύγειας, η σωστή απεικόνιση των αντιδράσεων αυτών που σχηματίζουν χημειοφωταυγάζοντα στοιχεία περιορίζονται από την κατανόηση μας γύρω από τον χημικό-κινητικό μηχανισμό στην ουδέτερη ενεργειακά κατάσταση και στα ενδιάμεσα βήματα που σχηματίζουν τα στοιχεία τα οποία με την σειρά τους θα παράγουν διεγερμένα ριζικά. Επομένως, το κρίσιμο θέμα είναι να βρεθούν τα μονοπάτια των αντιδράσεων, οι ρυθμοί των αντιδράσεων και οι συντελεστές των αντιδράσεων, τα οποία πυροδοτούν την χημειοφωταύγεια για κάθε διαφορετικό καύσιμο. Το επόμενο μεγάλο βήμα για την χημειοφωταύγεια είναι να προβλεφθούν με ακρίβεια τα ενδιάμεσα είδη που σχηματίζουν τα χημειοφωταυγάζοντα στοιχεία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3⁰ – ΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΣΗ ΜΙΑΣ ΦΛΟΓΑΣ

3.1 Σταθεροποίηση σε Στρωτές Φλόγες

Η μελέτη σταθεροποίησης στρωτής φλόγας γίνεται για να βγουν χρήσιμα συμπεράσματα για την δομή του αντιδρώντος πεδίου αφού για πρακτική εφαρμογή δεν υπάρχει κάπου ενδιαφέρον. Η λυχνία Bunsen που έχει προαναφερθεί και στο 1° Κεφάλαιο μπορεί να βοηθήσει στην μελέτη σταθεροποίησης της φλόγας. Ουσιαστικά η φλόγα έχει σταθερή θέση σε σχέση με τον σωλήνα του λυχνία. Το φαινόμενο της σταθεροποίησης εξαρτάται από:

- Την διάμετρο του σωλήνα
- Τις ιδιότητες του καυσίμου
- Την ταχύτητα του μίγματος καυσίμου-αέρα
- Την ταχύτητα της διάδοσης του μετώπου της φλόγας

Σε αυτήν την περίπτωση μπορεί να γίνει διάκριση τριών περιπτώσεων. Όταν η ταχύτητα του μίγματος είναι χαμηλή, το κύμα καύσης διαδίδεται μέσα στον αγωγό (flashback). Για μεγάλες ταχύτητες μίγματος καυσίμου-αέρα η φλόγα θα αποσβήσει(blow-off). Η τρίτη περίπτωση είναι όταν υπάρχει ισορροπία και η φλόγα ισορροπεί (αγκιστρώνεται) στο χείλος του σωλήνα(rim).

3.2 Σταθεροποίηση σε Τυρβώδη Φλόγα

Η σταθεροποίηση τυρβωδών φλογών κρίνεται απαραίτητη στις πρακτικές εφαρμογές (όπως για παράδειγμα κινητήρες αεριοστροβίλων, ramjets, scramjets, οικιακοί καυστήρες) γιατί η ανάγκη για υψηλούς ρυθμούς ογκομετρικής απόδοσης, για παραγωγή απαιτούμενης ισχύος, οδηγεί σε υψηλές ταχύτητες αέρα, της τάξης των 50m/s. Η ταχύτητα διάδοσης του μετώπου στρωτής ή τυρβώδης φλόγας κυμαίνεται από 0.4-5 m/s ανάλογα με το μίγμα καυσίμου[1]. Γίνεται σαφές ότι χρειάζεται να διαμορφωθεί μια κατάλληλη περιοχή μέσα στην ροή που να επιτρέπει την ύπαρξη

φλόγας αλλά και την διαρκή αγκίστρωσή της. Οι δύο κύριες τεχνικές σταθεροποίησης είναι:

- Σταθεροποίηση μέσω διαμόρφωσης ευνοϊκών ρευμάτων στην ροή του μίγματος
- Σταθεροποίηση μέσω τοποθέτησης κατάλληλων στερεών επιφανειών στην ροή

Η δεύτερη μέθοδος χρησιμοποιεί την θεωρία του οριακού στρώματος. Μια θερμή επιφάνεια μεταφέρει θερμότητα στην ροή και όταν η θερμοκρασία είναι αρκετά μεγάλη γίνεται η έναυση του μίγματος. Αν η στερεή επιφάνεια έχει κατάλληλο μήκος μπορεί να διατηρήσει σταθερή φλόγα. Το μείζον πρόβλημα με αυτήν την μέθοδο είναι οι υψηλές θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στο υλικό της στερεής επιφάνειας.

Συνήθως, χρησιμοποιείται η πρώτη κατηγορία για την σταθεροποίηση μιας φλόγας μέσω ανακυκλοφορίας (recirculation) και εκμετάλλευσης των χαρακτηριστικών της ροής. Τέτοιες ροές εμφανίζονται:

- Σε περιοχές απορρεεύματος (wakes) πίσω από στερεά σώματα (κυλίνδρους, σφαίρες, δίσκους κ.λπ.)
- Σε κοιλότητες μέσα σε στερεά υλικά
- Σε δέσμες ρευστού με χρήση στροβιλισμού και περιδίνησης

Από την μηχανική των ρευστών είναι γνωστό ότι πίσω από στερεά σώματα (κυλίνδρους) εμφανίζονται δίνες, οι οποίες έχουν εξάρτηση από τον αριθμό Reynolds. Σε φαινόμενα καύσης αυτές οι δίνες αλλάζουν και εμφανίζονται δύο μόνιμες δίνες στο απόρρεμα. Έτσι, υπάρχει μία σταθεροποίηση διότι οι δίνες αυτές στην περιοχή της επανακυκλοφορίας εγκλωβίζουν υπέρθερμα καυσαέρια τα οποία όταν βρίσκονται σε περιοχή με φρέσκο μίγμα προκαλούν έναυση. Η κρίσιμη συνθήκη για τον ασφαλή σχεδιασμό τέτοιων συστημάτων καύσης είναι η συνθήκη απόσβεσης (blow-off), όπου λόγω της μεγάλης ταχύτητας η φλόγα σβήνει.

3.3 Σταθεροποίηση με Στερεά Σώματα-Bluff Bodies Stabilization

Η επιλογή στερεών σωμάτων είναι αντικείμενο συνεχιζόμενης έρευνας και υπάρχει εξαιρετικά μεγάλο ενδιαφέρον σε φλόγες με υψηλές ροϊκές ταχύτητες. Ως στερεό σώμα μπορεί να είναι οποιοδήποτε σώμα υπάρχει στη ροή όπου η γεωμετρία του ευνοεί, στο κατάντι, να δημιουργείται περιδίνηση. Αυτό το φαινόμενο θα ήταν χρήσιμο σε καυστήρες για να αγκιστρώνεται η φλόγα στο κατάντι του στερεού σώματος.

Πίσω από τα στερεά σώματα δημιουργείται μία ανακυκλοφορία(recirculation), η οποία βελτιώνει την σταθεροποίηση της φλόγας, τη διάδοσης της, και το όριο απόσβεσης. Αυτό συμβαίνει γιατί τα προϊόντα της καύσης που υπάρχουν στην ανακυκλοφορία θερμαίνουν το μίγμα καυσίμου-αέρα εμπλουτίζοντας την ανάμιξη αλλά και αναφλέγοντας το. Η σταθεροποίηση της φλόγας εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τον χρόνο που το αντιδρών μίγμα καυσίμου-αέρα παραμένει στην ανακυκλοφορία. Το εύρος του λόγου ισοδυναμίας (σχετικού λόγου καυσίμου-αέρα) όπου η φλόγα διατηρείται σταθερή χαρακτηρίζει την σταθεροποίηση. Η θερμοκρασία μέσα στην ανακυκλοφορία είναι λίγο πιο κάτω από την αδιαβατική θερμοκρασία της φλόγας[1], ενώ πειραματικά δεδομένα δείχνουν ότι οι χημικές αντιδράσεις της καύσης πραγματοποιούνται στα σύνορα της ανακυκλοφορίας και προς το εσωτερικό της συναντώνται μόνο καυσαέρια.

Για την απόσβεση της φλόγας υπάρχουν τρεις μέθοδοι για τον προσδιορισμό συνθήκης που θα οδηγήσει στο σβήσιμο της φλόγας:

- Η μέθοδος του χαρακτηριστικού χρόνου(Zukoski, Marble). Με αυτήν την μέθοδο η απόσβεση εμφανίζεται όταν το άκαυστο μίγμα καυσίμου-αέρα δεν παραμένει αρκετό χρόνο στην τυρβώδη ζώνη ανάμιξης (μεταξύ καυσαερίων που επανακυκλοφορούν και του άκαυστου μίγματος) ώστε να γίνει πλήρης ανάφλεξη. Η συνθήκη είναι ο χρόνος καθυστέρησης(ignition delay) να είναι ίσος με τον χρόνο που παραμένει το μίγμα στην ζώνη.
- Η μέθοδος Spalding υποθέτει ότι η περιοχή απορρεύματος έχει σταθερή μετάδοση θερμότητας και σταθερό ρυθμό χημικών αντιδράσεων.

Η μέθοδος του πλήρους αναδευμένου αντιδραστήρα (well stirred reactor)
 υποθέτει την ανακυκλοφορία σαν έναν ομοιογενή πλήρως αναυδευμένο
 αντιδραστήρα. Όταν ο αντιδραστήρας υποχρεώνεται σε ρυθμούς μετάδοσης
 θερμότητας πάνω από τις δυνατότητες του επέρχεται απόσβεση.

κεφαλαίο 4°- επισκοπήση υπολογιστικής προσομοιώσης

Σε αυτό το κεφάλαιο θα γίνει ανάλυση των σταδίων που ακολουθούνται για να μοντελοποιηθεί ένα απτό πρόβλημα στον υπολογιστή. Θα γίνει προσπάθεια περιγραφής των βημάτων και των αποφάσεων που χρειάζεται να ληφθούν προκειμένου η υπολογιστική προσομοίωση να είναι όσο το δυνατόν γίνεται πετυχημένη. Τα στάδια της υπολογιστικής προσομοίωσης είναι :



Εικόνα 14. Απεικόνιση των σταδίων μιας υπολογιστικής προσομοίωσης

4.1 Κατασκευή Γεωμετρίας

Το πρώτο στάδιο για την μοντελοποίηση είναι η κατασκευή της γεωμετρίας. Στην υπολογιστική ρευστοδυναμική γεωμετρία θεωρείται ο χώρος όπου θα μοντελοποιηθεί μια ροή. Παραδείγματα είναι η πτέρυγα ενός αεροσκάφους, ένας εναλλάκτης θερμότητας, η φτερωτή μιας αντλίας ή ένα στερεό που μελετάται η αεροδυναμική του αντίσταση.

Ο σχεδιασμός των γεωμετριών μπορεί να γίνει με εμπορικά προγράμματα όπως το Solidworks ή το Catia, τα οποία διανέμονται από την εταιρία Dassault Systems, ή ενσωματωμένα σχεδιαστικά προγράμματα που παρέχει η Ansys, όπως το Spaceclaim και το Design Modeler.

4.2 Όγκος Ελέγχου

Στην υπολογιστική ρευστοδυναμική είναι πολύ σημαντική η επιλογή του όγκου ελέγχου. Ως όγκος ελέγχου θεωρείται ο χώρος εντός του οποίου θα υπάρχει πλέγμα και θα επιλυθεί η ροή. Η επιλογή του όγκου ελέγχου είναι κάπως αυθαίρετη και άγεται στην κρίση και στην εμπειρία του κάθε χρήστη. Πρέπει να υποτεθούν τα σημαντικά σημεία της ροής και να αγνοηθούν άλλα που θα «βαρύνουν» το πλέγμα αυξάνοντας το υπολογιστικό φορτίο.

Για την μοντελοποίηση σταθεροποιημένων φλογών γύρω από bluff bodies συνηθίζεται να εκτείνεται ο όγκος ελέγχου μερικές διαμέτρους bluff body ανάντι του στερεού σώματος και μερικές διαμέτρους κατάντι αυτού. Γίνεται προσπάθεια το πλέγμα να επιλύσει την περιοχή της ανακυκλοφορίας και όλη την ζώνη του μετώπου της φλόγας. Για εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων οι μεγάλοι όγκοι ελέγχου αποφεύγονται.

Κάθε φαινόμενο καύσης και τύπος φλόγας έχει άλλη αντιμετώπιση για την εύρεση του βέλτιστου όγκου ελέγχου. Σημαντική παράμετρος για το μέγεθος του όγκου ελέγχου είναι και οι ταχύτητες που αναπτύσσονται στη ροή.

Στην εικόνα (15) παρουσιάζεται ο όγκος ελέγχου της γεωμετρίας που μοντελοποιείται για την παρούσα διπλωματική εργασία.



Εικόνα 15. Όγκος Ελέγχου σε τομή

4.3 Πλέγμα του Όγκου Ελέγχου

Οι εξισώσεις μεταφοράς και διατήρησης όπως και της χημικής κινητικής επιλύονται στους κόμβους του πλέγματος. Η κατασκευή ενός σωστά δομημένου πλέγματος ίσως είναι και το σημαντικότερο βήμα σε μια υπολογιστική μοντελοποίηση. Το πλέγμα θα δημιουργηθεί στον όγκο ελέγχου και η πυκνότητα του εξαρτάται από το σημείο ενδιαφέροντος, το μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιείται και την υπολογιστική ισχύς που είναι διαθέσιμη.

Η διαδικασία κατασκευής του πλέγματος πρέπει να γίνεται έχοντας υπόψη τα εξής:

- Ο χρόνος που χρειάζεται ένα πλέγμα να κατασκευαστεί εξαρτάται από την μέθοδο πλεγματοποίησης. Τα δομημένα πλέγματα σε πολύπλοκες γεωμετρίες απαιτούν περισσότερο χρόνο για την πλεγματοποίηση από ότι ένα μηδομημένο πλέγμα.
- Η υπολογιστική ισχύς που έχει ο υπολογιστής περιορίζει και τον αριθμό των κόμβων που μπορούν να υπάρχουν. Με αδόμητο πλέγμα μπορεί να αραιωθεί

σε σημεία χαμηλού ενδιαφέροντος το πλέγμα, μειώνοντας αποτελεσματικά τον χρόνο ολοκλήρωσης της μοντελοποίησης.

Οι υπολογιστικές λύσεις επηρεάζονται από την αριθμητική διάχυση, η οποία επηρεάζει την ακρίβεια της λύσης αλλά και την ταχύτητα σύγκλησης αυτής.
 Συνήθως θεωρείται ότι τα δομημένα πλέγματα συγκλίνουν καλύτερα και είναι πιο ακριβή.



Εικόνα 16. Τομή δομημένου πλέγματος της γεωμετρίας

4.3.1 Δομημένα και Αδόμητα Πλέγματα

Για τις τρισδιάστατες γεωμετρίες, τα δομημένα πλέγματα γίνονται με εξάεδρα κελία. Το πλέγμα μπορεί να κατασκευάζεται εύκολα σε απλές γεωμετρίες, αλλά γίνεται δύσκολο έως και αδύνατο σε όγκους ελέγχους με πολύπλοκες γεωμετρίες. Ένα άλλο χαρακτηριστικό είναι ότι για διαμορφώσεις με κάποια καμπυλότητα, όπως για παράδειγμα μια κυλινδρική γεωμετρία ή μια κυκλική οπή, χρειάζεται μεγάλος αριθμός κόμβων ώστε τα εξάεδρα να τείνουν να δημιουργήσουν την γεωμετρία. Ένα

άλλο μειονέκτημα που λαμβάνεται σοβαρά υπόψη είναι ότι δεν είναι δυνατή η μεγάλη αραίωση με δομημένο πλέγμα σε σημεία μη ενδιαφέροντος και αυτό έχει ως αποτέλεσμα μεγάλα πλέγματα και μεγαλύτερα υπολογιστικά κόστη. Το εμπορικό πακέτο Fluent, βέβαια, δίνει την δυνατότητα να προστεθούν κόμβοι (hanging nodes) σε σημεία ενδιαφέροντος για τοπική πύκνωση.

Τα δομημένα πλέγματα φαίνεται να παρέχουν μεγαλύτερη αριθμητική ευστάθεια από τα αδόμητα πλέγματα και να έχουν μικρότερη αριθμητική διάχυση. Για μοντελοποίηση με LES συνίστανται για μεγαλύτερη ευστάθεια και ταχύτερη σύγκλιση.

Τα αδόμητα πλέγματα είναι αυτά που γίνονται με τετράεδρα κελία ή και με παραμορφωμένα εξάεδρα. Ανεξάρτητα της γεωμετρίας θεωρείται αρκετά εύκολη η δημιουργία αδόμητου πλέγματος. Τα αδόμητα πλέγματα δίνουν στον χρήστη την ευκαιρία να πυκνώσει όπου κρίνει απαραίτητο και να αραιώσει σε περιοχές μη ενδιαφέροντος.

Ωστόσο, τα στοιχεία των αδόμητων πλεγμάτων, εν αντιθέσει με τα στοιχεία των δομημένων πλεγμάτων, δεν μπορούν να ευθυγραμμιστούν με την ροή και υπάρχει αριθμητική αστάθεια.

Συμπερασματικά, προκύπτει ότι για την δημιουργία ενός καλού πλέγματος ο χρήστης θα πρέπει να επιλέξει:

- Δομημένο πλέγμα εξάεδρων για απλές σχετικά γεωμετρίες
- Αδόμητο πλέγμα με εξάεδρα για πιο πολύπλοκες γεωμετρίες
- Αδόμητο πλέγμα με πρισματικά στοιχεία στα οριακά στρώματα σε πολύ πολύπλοκες γεωμετρίες.
- Αδόμητο πλέγμα με χρήση αποκλειστικά τετράεδρα στις πλέον πολύπλοκες γεωμετρίες

Να σημειωθεί ότι το μέγεθος του πλέγματος δεν είναι κάτι που είναι σταθερό και ανάλογα με το εκάστοτε πρόβλημα πρέπει να βρεθεί το ιδανικό πλέγμα συναρτήσει του μοντέλου τύρβης, της επιθυμητής ακρίβειας, της υπολογιστικής ισχύς και από άλλους παράγοντες. Η διαδικασία επιλογής του ιδανικού μεγέθους του πλέγματος

ιδανικά απαιτεί την μοντελοποίηση με πλέγματα με διαφορετικό αριθμό κόμβων ώστε να βρεθεί ο ελάχιστος απαιτούμενος αριθμός κόμβων για την εκάστοτε ακρίβεια που επιθυμείται.

Η διαδικασία κατασκευής ενός πλέγματος δεν είναι μεθοδευμένη διαδικασία. Εν απόκειται στον χρήστη ανάλογα με την εμπειρία του και τις γνώσεις του να αξιολογεί και να επιλέγει τις μεθόδους και τους τύπους πλεγμάτων που έχει στην διάθεση του για να κατασκευάζει ένα βέλτιστο πλέγμα.

4.3.2 Κριτήρια Πλέγματος

Σε αυτό το σημείο θα γίνει αναφορά κάποιων κριτήριων ποιότητας των πλεγμάτων[18]. Ο χρήστης όταν σχεδιάζει ένα πλέγμα θα πρέπει να έχει στο νου του αυτά τα κριτήρια γιατί έχουν άμεση επίπτωση στην αριθμητική αστάθεια, την αργή σύγκλιση και στα σφάλματα διακριτοποίησης.

Κριτήριο στρέβλωσης του πλέγματος

Το κριτήριο αυτό αναφέρεται στην απόκλιση από την ορθογωνιότητα μεταξύ τεμνουσών γραμμών του μη-Καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων. Την καλύτερη ποιότητα με αυτό το κριτήριο την έχουν τα δομημένα πλέγματα με εξάεδρα. Όταν τα στοιχεία έχουν μεγάλη λοξότητα και οι γωνίες του έχουν στρεβλωθεί μπορεί να υπάρχουν προβλήματα σύγκλισης.

• Κριτήριο του λόγου των επιμηκών κελιών (Aspect Ratio)

Το κριτήριο αυτό είναι ένα μέτρο για την επιμήκυνση του στοιχείου του πλέγματος. Γενικά, οι μεγάλες ανισοτροπίες στα πλέγματα πρέπει να αποφεύγονται και για αυτό υπάρχει ένας εμπειρικός κανόνας που ορίζει ως μέγιστο Aspect Ratio 35:1 και έναν μέσο όρο 5:1 για δομημένα και αδόμητα πλέγματα αντίστοιχα. Ο λόγος των επιμήκους κελιών είναι η απόσταση μεταξύ του κεντροειδούς του στοιχείου με τους κόμβους αυτού. Ροές που χαρακτηρίζονται από υψηλές ταχύτητες στην μία διεύθυνση και μεγάλες

κλίσεις στις άλλες δύο διευθύνσεις, για παράδειγμα ροή οριακού στρώματος, είναι ανεκτός ο μεγάλος λόγος επιμήκους κελιών.

4.4 Μοντέλα Τύρβης και Χημείας

Σε αυτό το στάδιο με την δοθείσα γεωμετρία κατασκευασμένη και το πλέγμα να ικανοποιεί τα διάφορα κριτήρια που έχουν αποφασιστεί, γίνεται ανασκόπηση διάφορων μοντέλων τύρβης και χημείας για να επιλεγεί το σετ αυτών που θα επιλύσει τις εξισώσεις τύρβης και χημείας στο πλέγμα[2,4]. Στα φαινόμενα καύσης είναι αναγκαία η λύση των εξισώσεων τύρβης και των χημικών αντιδράσεων οι οποίες συμβαίνουν.

4.4.1 Μοντέλα Τύρβης

• Direct Numerical Simulation-DNS

Ένα μοντέλο Άμεσης Αριθμητικής Προσομοίωσης σημαίνει ότι λύνει πλήρως το τρισδιάστατο και γρονικά-εξαρτημένο σετ εξισώσεων Navier-Stokes και τις εξισώσεις συνέχειας. Είναι φανερό ότι τέτοιες προσομοιώσεις είναι αριθμητικά ακριβείς γιατί λύνουν τις εξισώσεις κίνησης καθαυτές και προσεγγίζουν καλύτερα από τα άλλα μοντέλα την τύρβη. Από πρακτική άποψη, τα αποτελέσματα DNS μπορούν να γρησιμοποιηθούν ώστε να προτείνονται διάφορες προσεγγίσεις για πιο απλά μοντέλα. Η Άμεση Αριθμητική Προσομοίωση θεωρείται πρόσθετη πηγή πειραματικών δεδομένων. Όλα αυτά προϋποθέτουν ότι οι υπολογισμοί δεν έγουν σημαντικά αριθμητικά σφάλματα. Για να επιτευχθεί το μοντέλο απαιτείται πλέγμα μικρότερο από τις δομές τις τύρβης και έχει βρεθεί ότι οι κόμβοι του πλέγματος πρέπει να είναι [4] $N_{DNS} \approx (3R_{e_T})^{\frac{9}{4}}$. Στους υπολογιστές του σήμερα δεν είναι δυνατή η μοντελοποίηση πρακτικών ροών με DNS εξαιτίας της έλλειψης υπολογιστικής ισχύς, περιορίζοντας το συγκεκριμένο μοντέλο σε απλές γεωμετρίας για ερευνητικούς σκοπούς.

• Large Eddy Simulation- LES

Μία προσομοίωση των μεγάλων δινών, LES, υπολογίζει άμεσα τις μεγάλες δίνες και τις μικρότερες τις μοντελοποιεί. Αποτελεί ουσιαστικά την μέση λύση ανάμεσα στο DNS και στα μοντέλα RANS που θα παρουσιαστούν στην συνέχεια. Η σημαντικότητα αυτού του μοντέλου έγκειται στο γεγονός ότι οι μεγάλες δίνες επηρεάζονται από τις συνοριακές συνθήκες, έχουν μεγάλες τάσεις Reynolds σε αντίθεση με τις μικρές δίνες οι οποίες έχουν ένα ισοτροπικό χαρακτήρα που ευνοεί την μοντελοποίηση. Για φαινόμενα καύσης που οι μικρές δίνες έχουν αλληλεπίδραση με την φλόγα, η χρήση του LES έχει καλύτερα αποτελέσματα από τα μοντέλα RANS.

Reynolds Averaged Navier-Stokes-RANS

Η μοντελοποίηση με RANS δεν υπολογίζει άμεσα τις εξισώσεις ορμής, αλλά τις μέσες τιμές των μεταβλητών μοντελοποιώντας την μέση τιμή των διακυμάνσεων ταχύτητας που προκύπτει. Υπάρχουν αρκετά μοντέλα RANS και ξεχωρίζονται από την μέθοδο που ακολουθούν για να μοντελοποιήσουν την μέση τιμή των διακυμάνσεων ταχύτητας.

Στην συνέχεια παρουσιάζεται πίνακας [2] με τα κυριότερα μοντέλα RANS και LES:

Τύπος	Όνομα	Αριθμός	Περιγραφή
Μοντέλου	Μοντέλου	Εξισώσεων	Χρήση
RANS	Spallart- Allmaras	1	Επιλύει το τυρβώδες ιξώδες με μια εξίσωση μεταφοράς. Σχεδιασμένο για εφαρμογές αεροναυτική. Έχει καλά αποτελέσματα για χαμηλούς αριθμούς Re, αλλά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για γενικές βιομηχανικές εφαρμογές
	Standard k-ε	2	Το μοντέλο λύνει δύο εξισώσεις για την τυρβώδη κινητική ενέργεια και τον εκφυλισμό αυτής. Πολύ χρησιμοποιημένο μοντέλο λόγω της απλότητας

Πίνακας 2. Σύντομη	ανασκόπηση μ	ιοντέλων τύρ	βης του προγ	ράμματος Η	Fluent της Ansys
--------------------	--------------	--------------	--------------	------------	------------------

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

			του και του υπολογιστικού χρόνου. Έχει ημι-
			εμπειρικές σταθερές και πλέον συστήνεται για μια
			αρχική εκτίμηση.
			Είναι μία εξέλιξη του βασικού μοντέλου.
		2	Βασίζεται σε στατιστικά τεχνικές όπου με αυτές
	RNG k-ε Realizable k-ε		υπολογίζονται αναλυτικά κάποιες σταθερές.
			Καλύτερο από το βασικό μοντέλο σε ροές με
			διαταραχές και μεγάλες διατμητικές τάσεις.
			Το πλέον ακριβέστερο μοντέλο k-ε. Η εξίσωση
			για τον εκφυλισμό έχει μαθηματικούς
			περιορισμούς, οι οποίοι έχουν να κάνουν με την
			φύση των τυρβωδών ροών. Το μειονέκτημα του
			όπως και όλων των μοντέλων k-ε βρίσκεται στην
			εξίσωση μεταφοράς του εκφυλισμού της
			τυρβώδους κινητικής ενέργειας.
		6	Θεωρείται το πιο αξιόπιστο από τα RANS
			μοντέλα, αφού αποτελείται από 6 εξισώσεις. Δεν
			γίνεται παραδοχή ισότροπου τυρβώδους ιξώδους,
	Reynolds Stresses		αλλά επιλύεται άμεσα. Η χρήση του γίνεται σε
			ροές με υψηλό στροβιλισμό. Έχει μεγάλο
			υπολογιστικό κόστος σε σχέση με τα υπόλοιπα
			RANS μοντέλα.
			Είναι το καλύτερο μοντέλο μετά το DNS. Έρχεται
			σε μεγαλύτερη συμφωνία από τα υπόλοιπα με την
LES			φυσική των προβλημάτων. Είναι πολύ απαιτητικό
			ως προς την υπολογιστική ισχύ και απαιτεί πυκνό
			πλέγμα. Μπορεί να υπολογίσει στιγμιαίες τιμές
			μεγεθών σε αντίθεση με τα μοντέλα RANS που
			βρίσκουν μέσες τιμές. Εξαιτίας του μεγάλου
			υπολογιστικού φορτίου που απαιτεί το LES
			χρησιμοποιείται κυρίως από ερευνητές και
			θεωρείται το βέλτιστο για πολύπλοκες ροές με
			ανάμιξη και καύση.

Γίνεται αντιληπτό από τα παραπάνω ότι τα καλύτερα αποτελέσματα θα τα περίμενε κανείς από το LES. Όταν ο χρήστης έχει να αντιμετωπίσει σταθεροποίηση φλόγας και την αλληλεπίδραση που έχει η φλόγα με την τύρβη το LES αποτελεί πρακτικά, τουλάχιστον σε ερευνητικό επίπεδο το καλύτερο μοντέλο. Για σταθεροποίηση φλόγας όπως αυτήν που γίνεται στα προβλήματα με στερεά σώματα (bluff bodies) θα επιλέγαμε το μοντέλο LES.

4.4.2 Μοντέλα Χημικής Κινητικής

Το εμπορικό υπολογιστικό πρόγραμμα Fluent της ANSYS περιέχει πολλά χημικά μοντέλα που με αυτά ο χρήστης μπορεί να μοντελοποιήσει φλόγες. Γενικά, τα μοντέλα χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, αυτά που υποθέτουν της χημικές αντιδράσεις απειροστά γρήγορες και εκείνα που τις υποθέτουν αργές. Στον παρακάτω πίνακα διακρίνονται κάποια διαθέσιμα μοντέλα[18]:

Όνομα	Προσέγγιση	Χαρακτηριστικά	Συμπεριφορά
Μοντέλου	Φαινομένου		
Species	Finite Rate-	Αυτά τα μοντέλα	Αγνοείται η αλληλεπίδραση τύρβης-
Transport	No	χρη σ ιμοποιούν	χημείας και οι ρυθμοί αντίδρασης
	Turbulence	πολυβηματική χημεία	προέρχονται από τον νόμο του
	Chemistry	για να	Arrhenius. Θεωρεί ότι τα στοιχεία του
	Interaction	μοντελοποιήσουν την	πλέγματος είναι ένας τέλεια
		καύση. Μπορούν να	αναδευμένος αντιδραστήρας.
		χρησιμοποιηθούν και	Ενδείκνυται για πολύπλοκα συστήματα
		απλά για μελέτη	μιας και χρησιμοποιεί τον Stiff
		ανάμειξης χωρίς	Chemistry Solver.
	Finite	καύση.	Αυτό το μοντέλο υπολογίζει τον ρυθμό
	Rate/Eddy-		μείξης και την ταχύτητα αντίδρασης από
	Dissipation		τον νόμο του Arrhenius και επιλέγει το
			πιο αργό. Δεν συνιστάται γενικά, γιατί
			χρησιμοποιεί την μέθοδο Relax to

Πίνακας 3. Περιγραφή των μοντέλων χημικής κινητικής του πακέτου Fluent της Ansys
			Chemical Equilibrium και δεν μπορεί να
			λύσει πολυβηματική χημεία.
	Eddy-		Αυτό το μοντέλο χρησιμοποιείται όταν
	Dissipation		η καύση ελέγχεται από τον ρυθμό
			μείξης. Ο μηχανισμός της χημείας
			πρέπει να είναι μέχρι δύο βημάτων
			καθιστώντας το ιδανικά για μια πρώτη
			εκτίμηση
	Eddy-		Είναι μία εξέλιξη του απλού μοντέλου
	Dissipation		Eddy-Dissipation. Χρησιμοποιείται
	Concept		περισσότερο γιατί μπορεί να
			μοντελοποιήσει και πολυβηματική
			χημεία στις μικρότερες τυρβώδεις δομές
			που τις καλεί fine scales.
	Partially		Μπορεί να μοντελοποιήσει ροές που το
	Stirred		EDC υπερεκτιμά. Αυτό γιατί λαμβάνει
	Reactor		υπόψη τις χρονικές κλίμακες μείξης και
			χημείας και μέσω μίας σύγκρισης
			αντιλαμβάνεται πιο θα υπερισχύσει.
			Κατά πολλούς ερευνητές είναι πολύ
			κοντά στο φυσικό πρόβλημα της
			τυρβώδους καύσης.
Non-	Chemical	Αυτά τα μοντέλα	Τα μοντέλα αυτά χρησιμοποιούνται για
Premixed	Equilibrium	θεωρούν ότι το μείγμα	φλόγες διάχυσης. Δεν μπορούν να
Combustion	Steady	καίγεται εντός	μοντελοποιήσουν δυναμικές μεταβολές
	Diffusion	κάποιων ορίων	όπως η απόσβεση (blow off) της
	Flamelet	ευφλεκτότητας και	φλόγας.
		όλη η διαδικασία της	
		καύσης εξαρτάται από	
		αυτά τα όρια.	
Premixed		Χρησιμοποιείται	Αυτό το μοντέλο δεν μπορεί να
Combustion		αποκλειστικά για	μοντελοποιήσει δυναμικές μεταβολές.
		φλόγες πρόμιξης. Δεν	
		μπορεί να	

		χρησιμοποιηθεί με	
		πολυβηματική χημική	
Dontiolly	Standy	Θεφορί ότι το μποοστά	Μπορούνιμα αυταποξόλθουνικαλά πο
	Diff		
Premixed	Diffusion	απο το μετωπο της	προβληματα με απλες φλογες. Ομως οι
Combustion	Flamelet	φλόγας υπάρχουν	ροές με καύση είναι συχνά να
		καυσαέρια και πίσω	εμφανίζουν αστάθειες και η φλόγα να
		από αυτό μόνο	έχει δυναμικό χαρακτήρα. Αυτά τα
		άκαυστο μείγμα.	μοντέλα θα έχουν αστάθεια αν σε μια
	Flamelet	Χρειάζονται πολλές	φλόγα υπάρχει μεταβολή του σχετικού
	Generated	παράμετροι να	λόγου καυσίμου-αέρα.
	Manifold	ρυθμιστούν για να	
		είναι έτοιμο για χρήση.	
		Πολλές παράμετροι	
		δεν είναι άμεσες	
		διαθέσιμοι για πολλά	
		προβλήματα καύσης.	
	Chemical	Εξαρτάται η καύση	
	Equilibrium	από τα όρια	
		ευφλεκτότητας.	
Composition		Είναι πάρα πολύ	Όπως και τα Finite-Rate θεωρούν
PDF		απαιτητικά σε	αντιδραστήρες καλά αναδευμένους.
Transport		υπολογιστική ισχύ και	Όμως σε κάθε σημείο τα στοιχεία και οι
		προτείνονται για	εξισώσεις μεταφοράς υπολογίζονται από
		δισδιάστατη χρήση.	συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας.

Για να μοντελοποιηθεί κατάλληλα ένα πρόβλημα καύσης καλό θα ήταν να χρησιμοποιείται ένας πολυβηματικός μηχανισμός για την χημική κινητική τουλάχιστον για ερευνητικούς σκοπούς. Ένας τέτοιος μηχανισμός μπορεί να εκχωρηθεί στο πρόγραμμα Fluent και θα λύνεται η εξίσωση μεταφοράς για το κάθε χημικό στοιχείο. Αυτό μπορεί να συμβεί με το μοντέλο Species Transport.

Για την περίπτωση σταθεροποίησης φλόγας με στερεό σώμα (bluff body) ο καλύτερος μέχρι τώρα συνδυασμός είναι το Finite Rate Chemistry με τον Stiff

Chemistry Solver. Με την επιλογή για τις εξισώσεις τύρβης του LES, το σύνολο των εξισώσεων αναφέρεται στην βιβλιογραφία ως ILES, δηλαδή Implicit LES.

Η καινούργια έκδοση του εμπορικού πακέτου Fluent παρέχει και την μέθοδο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα (PaSR) και είναι μεγάλη η ευκαιρία να αξιοποιηθεί και να μελετηθεί σε τυρβώδη καύση. Όπως ειπώθηκε και στον πίνακα το μοντέλο Partially Stirred Reactor κατανοεί καλύτερα την φύση του προβλήματος από τα απλά μοντέλα Eddy-Dissipation και Eddy-Dissipation Concept. Το μοντέλο θα παρουσιαστεί και στο επόμενο κεφάλαιο.

4.5 Εκτέλεση Προσομοίωσης και Σύγκλιση

Με αυτήν την ενότητα τελειώνει και η δεύτερη φάση που φαίνεται στην εικόνα(14), της μοντελοποίησης μια ροής. Έχει γίνει επιλογή η μοντελοποίηση της σταθεροποίησης της φλόγας με στερεό σώμα να γίνει σε συνάρτηση με τον χρόνο(transient). Υπάρχει έντονο ενδιαφέρον για φαινόμενα δυναμικά που έχει σχέση με τον χρόνο, όπως η έναυση μιας φλόγας και η απόσβεση της. Καίριας σημασίας είναι να επιλεγεί το χρονικό βήμα της λύσης και ο αριθμός των επαναλήψεων για να συγκλίνει η προσομοίωση.

Χρονικό βήμα είναι ουσιαστικά το άλμα που θα κάνει στο χρόνο η μοντελοποίηση κάθε επανάληψη. Για το μοντέλο LES μια αποδεκτή τιμή είναι η εξής:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{2U} \tag{4.1}$$

Το Δx είναι το μήκος των κελιών του πλέγματος στην περιοχή ενδιαφέροντος και U η ταχύτητα της ροής στο συγκεκριμένο σημείο. Μία άλλη μέθοδος είναι να προσδιοριστεί το χημικό στοιχείο που εξαφανίζεται ποιο γρήγορα και να επιλεγεί το χρονικό βήμα ίσο ή μια τάξη μεγέθους μικρότερο από τον χρόνο ζωής αυτού του στοιχείου. Το χρονικό βήμα επηρεάζει πάρα πολύ την συμπεριφορά του επιλύτη και ίσως μεγάλα χρονικά βήματα να κάνουν τα μοντέλα να αποκλίνουν.

Ο αριθμός των επαναλήψεων συνήθως βρίσκεται με την διαδικασία που ονομάζεται χρόνος προσπέλασης της ροής. Αυτός ο όρος σημαίνει ότι ο χρόνος που θα κάνει ένα

σωματίδιο από την αρχή του όγκου ελέγχου, να ταξιδέψει σε όλο το μήκος και να εξέλθει από αυτόν. Για να βρεθεί αυτός ο χρόνος πρέπει αρχικά να σταθεροποιηθεί η ροή, οπότε αφήνεται μερικούς χρόνους προσπέλασης για να περάσουν τα μεταβατικά φαινόμενα. Στην συνέχεια πραγματοποιούνται λήψεις στατιστικής[2] από 5-25 χρόνους προσπέλασης γιατί ενώ οι μέσες τιμές των μεγεθών συγκλίνουν έπειτα από 5 χρόνους προσπέλασης περίπου, οι διακυμάνσεις χρειάζονται από 10 έως 20 χρόνους προσπέλασης για να συγκλίνουν.

Όλα τα παραπάνω ασφαλώς αποτελούν μια μεθοδολογία που ακολουθήθηκε για την συγκεκριμένη εργασία και δεν ισχύουν για οποιοδήποτε πρόβλημα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Το πιο σημαντικό κριτήριο είναι η λύση να συγκλίνει. Μια λύση θεωρείται ότι έχει συγκλίνει όταν οι ποσότητες των υποπλεγματικών μεγεθών του πεδίου έχουν γίνει αρκετά μικρές και όταν τα μεγέθη από τις εξισώσεις μεταφοράς δεν μεταβάλλονται πολύ από επανάληψη σε επανάληψη. Αποδεκτές μεταβολές των τιμών είναι συνήθως της τάξης κάτω από 10⁻¹, αλλά εναπόκεινται στον χρήστη να επιλέξει την ακρίβεια που επιθυμεί.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5⁰- ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΤΥΡΒΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ

Στην παρούσα εργασία θα γίνει χρήση του μοντέλου LES για να μοντελοποιηθεί η τύρβη. Αυτό το μοντέλο έχει μεγάλη ακρίβεια προσομοίωσης και θα μοντελοποιηθεί στο βέλτιστο η σταθεροποιημένη φλόγα με χρήση bluff body.

Η χημική κινητική θα επιλυθεί με την μέθοδο finite rate chemistry(ή αλλιώς Implicit LES) και με το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα (Partially Stirred Reactor).

Οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται σε αυτά τα μοντέλα θα παρουσιαστούν σε αυτό το κεφάλαιο[2,18].

5.1 Εξισώσεις LES

Κάθε μεταβλητή της ροής, στο μοντέλο LES, αναλύεται σε αυτό που επιλύεται άμεσα (resolvable) και στο υποπλεγματικό μέρος (subgrid scale) μέσω ενός σταθμισμένου φίλτρου. Οι άμεσες επιλυόμενες μεταβλητές είναι αυτές που ακολουθούν εφαρμόζοντας τον νόμο διάχυσης του Fick, τον νόμο διάχυσης ενέργειας του Fourier και τον νόμο του Sutherland για το ιξώδες του μίγματος[2,18] :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0$$
5.1

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j) = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\tau_{ij}} - \bar{\rho}(\widetilde{u_i}\widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i\widetilde{u}_j)) + \bar{\rho}g_i \qquad 5.2$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \widetilde{Y}_{k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{\mu}{S_{Ck}} \frac{\partial \widetilde{Y}_{k}}{\partial x_{j}} - \bar{\rho} (\widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{k} - \widetilde{u}_{j} \widetilde{Y}_{k}) \right) + \overline{\dot{\omega}_{k}}$$

$$5.3$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \tilde{h} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{P_r} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} - \bar{\rho} (\tilde{u}_j \tilde{h} - \tilde{u}_j \tilde{h}) \right) + \tilde{\omega}_T$$
5.4

Η πίεση εκφράζεται και με την σχέση $\bar{p} = \rho R^o \tilde{T} \sum (\frac{Y_k}{M_k})$, R^o , Y_k , M_k , ρ είναι η παγκόσμια σταθερά αερίων, το κλάσμα μάζας και το μοριακό βάρος στοιχείου k και η

πυκνότητα. Επίσης, από τις εξισώσεις μ,u, h, ώ_k είναι το ιξώδες, η ταχύτητα, η ενθαλπία και ο ρυθμός αντίδρασης του χημικού στοιχείου.

Εάν ονομάσουμε Φ μία μεταβλητή που εμφανίζεται στις παραπάνω εξισώσεις, η έκφραση της υποπλεγματικής συνιστώσας εκφράζεται ως $\bar{\rho}(\widetilde{u_i} \Phi - \widetilde{u_j} \tilde{\Phi})$. Το φίλτρο είναι κατά Favre και η μοντελοποίηση των υποπλεγματικών παραμέτρων γίνεται με την υπόθεση μεταφοράς κατά την διεύθυνση της βαθμίδας. Επομένως, ο υποπλεγματικός τανυστής των τάσεων θα είναι:

$$-\tau_{ij}^{sgs} = \nu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \nu_t \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_k} \delta_{ij}$$
 5.5

Στην πίεση μπορούν να προστεθούν οι διαγώνιοι όροι του τανυστή των τάσεων και το ανισότροπο μέρος του τ_{ij}^{sgs} μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\bar{P} = \bar{p} + \frac{1}{3}\bar{\rho}\tau_{kk}^{sgs} \qquad 5.6$$

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3}\tau_{kk}^{sgs}\delta_{ij} = -2\nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij}\right)$$
 5.7

Όπου \tilde{S}_{ij} είναι ο τανυστής του ρυθμού παραμόρφωσης: $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \right)$.

Οι υποπλεγματικές συνιστώσες των εξισώσεων μεταφοράς του κλάσματος μάζας και της ενθαλπίας μετασχηματίζονται με την υπόθεση μεταφοράς κατά την διεύθυνση της βαθμίδας [2,18]:

$$\widetilde{u_j Y_k} - \widetilde{u_j} \widetilde{Y_k} = -\frac{v_t}{S_{Ct}} \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_j}, \qquad \widetilde{u_j h} - \widetilde{u_j} \widetilde{h} = -\frac{v_t}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_j} \qquad 5.8$$

 S_{Ct} , Pr_t είναι οι τυρβώδεις αριθμοί Schmidt και Prandtl αντίστοιχα. Το υποπλεγματικό ιξώδες τύρβης εκφράζεται από την σχέση $v_t = (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}|$, με $|\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$. Στην σχέση αυτή το C_s είναι η σταθερά Smagorinsky και Δ μια ποσότητα που συνδέεται με το πλέγμα: $\Delta = \sqrt{\Delta x_i \Delta y_i \Delta z_i}$. Στο απλό μοντέλο του Smagorinsky η σταθερά επιλέγεται μία φορά από τον χρήστη στην αρχή. Αντιθέτως, στο δυναμικό μοντέλο Smagorinsky-Lilly[18], η σταθερά C_s υπολογίζεται κάθε φορά κατά την διάρκεια της μοντελοποίησης.

Ένα εξίσου αποδεκτό μοντέλο όπως το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky-Lilly είναι και το μοντέλο WALE(Wall Adapting Local Eddy-Viscosity). Στην μοντελοποίηση με χρήση του LES αυτά τα δύο μοντέλα για το υποπλεγματικό πεδίο θεωρούνται πολύ ακριβή. Το μοντέλο WALE έχει πλεονέκτημα όταν στην ροή εμφανίζεται στρωτή διατμητική ροή γιατί μηδενίζει το τυρβώδες ιζώδες, ενώ το μοντέλο Smagorinsky-Lilly θα επιστρέφει πάντα μη μηδενική τιμή. Το μοντέλο WALE υπολογίζει το υποπλεγματικό ιζώδες τύρβης ως:

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{\left(\underline{S}_{ij}^d \underline{S}_{ij}^d\right)^{\frac{5}{2}}}{\left(\underline{S}_{ij} \underline{S}_{ij}\right)^{\frac{5}{2}} + \left(\underline{S}_{ij}^d \underline{S}_{ij}^d\right)^{\frac{5}{4}}}$$
5.9

To C_w είναι η σταθερά του μοντέλου, που το ίδιο το πρόγραμμα την δίνει 0.325 και $\Delta = (\dot{o} γ κος στοιχείου)^{\frac{1}{3}}. Ο όρος \underline{S}_{ij}^d βρίσκεται από την σχέση \underline{S}_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\underline{\tilde{g}}_{ij}^2 + \underline{\tilde{g}}_{ij}^2 \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \underline{\tilde{g}}_{ij}^2, όπου \underline{\tilde{g}}_{ij} = \nabla \tilde{u}.$

5.2 Εξισώσεις Χημικής Κινητικής

Στο παρών κεφάλαιο θα αναφερθούν οι δύο μηχανισμοί επίλυσης της χημικής κινητικής. Η πρώτη μέθοδος είναι το ILES και η δεύτερη είναι ο μερικώς αναδευμένος αντιδραστήρας (PaSR)

5.2.1 Μοντέλο Πεπερασμένου Ρυθμού Αντιδράσεων-ILES

Το μοντέλο ILES υπολογίζει τους όρους πηγής (εξισώσεις 5.3, 5.4) χρησιμοποιώντας το νόμο του Arrhenius που έχει συζητηθεί στο κεφάλαιο 2. Το μοντέλο αγνοεί τις τυρβώδεις διακυμάνσεις και είναι κατάλληλο για στρωτές φλόγες ή για μηχανισμούς με αργή χημεία. Επιλύει τις εξισώσεις (2.4), (2.12) και (2.18).

Αυτό που υποθέτει το μοντέλο ILES και έρχεται σε πλήρη αντίθεση με το επόμενο μοντέλου που ακολουθεί είναι ότι κάθε στοιχείο του πλέγματος είναι ένας καλά αναδευμένος αντιδραστήρας (Well-Stirred Reactor). Για την συγκεκριμένη παραδοχή

απαιτείτο το πλέγμα να είναι μεγάλο. Επίσης, η ταχύτητα εκτέλεσης των αντιδράσεων έχει κάποια πεπερασμένη ταχύτητα και δεν είναι απειροστά γοργή.

Η απλή χρήση του νόμου του Arrhenius επιτρέπει στο μοντέλο να είναι ικανό να ανταπεξέλθει με πολύπλοκες χημικές αντιδράσεις και χημικούς μηχανισμούς με πολλά στοιχεία και αντιδράσεις. Ένα μειονέκτημα του είναι ότι δεν συμπεριλαμβάνει την αλληλεπίδραση που έχει η τύρβη με την χημική κινητική.

5.2.2 Μοντέλο του Μερικώς Αναδευμένου Αντιδραστήρα-PaSR

Το μοντέλο PaSR προέρχεται από την εξέλιξη του μοντέλου EDC[18]. Στο EDC θεωρείται ότι κάθε στοιχείο του πλέγματος είναι μια ιδεατή δομή όπου γίνεται η ανάμειξη και οι χημικές αντιδράσεις (fine structure) και το περιβάλλον γύρω από αυτή την δομή δεν παίζει κάποιο ρόλο στις διεργασίες της δομής. Γίνεται υπόθεση ότι η χημεία εξελίσσεται πολύ γρήγορα και οι χρόνοι παραμονής και η ροή μάζας στα fine structures βρίσκονται λαμβάνοντας υπόψη τις μικρές και τις μεγάλες δίνες. Αποτελείται από ένα κομμάτι εκφυλισμού που συνδέεται με το τυρβώδες ροϊκό πεδίο και από το κομμάτι των χημικών αντιδράσεων. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως το EDC μπορεί να χρησιμοποιήσει πολυβηματική χημεία. Το μεγάλο μειονέκτημα του είναι ότι η σταθερές για το μήκος της ιδεατής δομής και του χρόνου παραμονής δεν εξαρτώνται από τοπικές ροϊκές και χημικές μεταβλητές[18]. Για αυτό έχει παρατηρηθεί ότι σε συστήματα με φτωχά μείγματα και μεγάλους ρυθμούς διάχυσης το EDC υπερεκτιμά την θερμοκρασία.

Το PaSR πιστεύεται ότι μπορεί να ανταπεξέλθει σε αυτό το σημαντικό μειονέκτημα γιατί αντιλαμβάνεται καλύτερα την φύση του προβλήματος και την αλληλεπίδραση που έχει η ανάμιξη(τυρβώδες ροϊκό πεδίο) με τις χημικές αντιδράσεις. Τώρα αυτή η δομή δεν θεωρείται τέλεια αναδευμένη και υπάρχει ένας συντελεστής κ , ο οποίος συγκρίνει αυτήν την αλληλεπίδραση. Αυτό γίνεται ορίζοντας μία χρονική κλίμακα για την ανάμιξη t_{mix} και μία για την χημεία t_c .

$$\kappa = \frac{t_c}{t_c + t_{mix}} = \frac{1}{1 + Da}$$
 5.10

Όπου Da είναι η σταθερά Damkohler και εκφράζεται ως:

$$Da = \frac{t_{mix}}{t_c}$$
 5.11

Αυτές οι κλίμακες χρόνου αντιπροσωπεύουν τα δύο φαινόμενα που γίνονται σε κάθε μικρή δομή του πλέγματος και είναι καίριας σημασίας να βρίσκονται οι τιμές τους σε κάθε τέτοια δομή. Το Fluent προτείνει η χρονική κλίμακα χημείας να είναι:

$$t_c = \max(\frac{\rho y_i}{\omega_i})$$
 5.12

Ουσιαστικά πηγαίνει στα πιο αργά και επικρατέστερα στοιχεία της ιδεατής δομής όπως είναι το μεθάνιο, το υδρογόνο, το οξυγόνο, οι υδρατμοί και το διοξείδιο του άνθρακα και από το πιο αργό βρίσκεται η κλίμακα χρόνου.

Η χρονική κλίμακα μίξης βρίσκεται από τις μικρές δίνες της ροής ως εξής:

$$t_{mix} = C_{mix} \frac{k}{s}$$
 5.13

Το ε είναι ο εκφυλισμός της τυρβώδους κινητικής ενέργειας, k η τυρβώδης κινητική ενέργεια και *C_{mix}* μία σταθερά η οποία μπορεί είτε να παραμένει σταθερά επιλεγμένη από την αρχή της προσομοίωσης, είτε να υπάρχει μία εξίσωση συναρτήσει του τοπικού τυρβώδους αριθμού Reynolds:

$$C_{mix} = (Re_T)^{\frac{a-1}{2}}$$
 5.14

Το α είναι μία σταθερά και υπολογίζεται από την έκφραση:

$$\alpha = \frac{3(D-3)}{1+D} \tag{5.15}$$

Η μεταβλητή D έχει να κάνει με την χρονική κλίμακα δινών, σε κλίμακα μικρών δινών (Kolmogorov) αντιστοιχεί σε 3 ενώ γίνεται 5 για την ολοκληρωτική κλίμακα.

5.2.3 Μηχανισμός Χημικών αντιδράσεων

Για να μοντελοποιηθεί το φαινόμενο της καύσης επιτυχώς ,απαιτείται να προσδιοριστεί το σύνολο των χημικών αντιδράσεων που πραγματοποιούνται. Οι κάθε

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-

Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

επιμέρους αντίδραση θα έχει έναν διαφορετικό ρυθμό αντίδρασης. Το σύνολο των στοιχείων και το πλήθος των χημικών αντιδράσεων που επιλέγει κάποιος να μοντελοποιήσει έχει αντίκτυπο στην ακρίβεια και στην υπολογιστική ισχύς που απαιτείται. Οι μηχανισμοί των χημικών αντιδράσεων ανάλογα με τον αριθμό των στοιχείων διακρίνονται σε:

- Γενικούς Μηχανισμούς (Global Mechanisms): Εμπεριέχουν λιγότερα από 10 χημικά είδη και λίγες χημικές αντιδράσεις. Θα χρησιμοποιηθεί στην μοντελοποίηση της καύσης προπανίου γιατί έχει μια ικανοποιητική ακρίβεια και έναν λογικό υπολογιστικό χρόνο επίλυσης.
- Λεπτομερούς Μηχανισμούς (Detailed Mechanisms): Είναι οι πιο ακριβείς αφού έχουν εκατοντάδες χημικές ενώσεις και χιλιάδες στοιχειώδεις αντιδράσεις. Χρειάζονται πολύ χρόνο για να ολοκληρώσουν τον υπολογισμό και συνήθως χρησιμοποιούνται μέχρι τα μονοδιάστατα προβλήματα.
- Μειωμένους Μηχανισμούς (Reduced Mechanisms): Πρόκειται για μηχανισμούς οι οποίοι προέρχονται από λεπτομερούς μηχανισμούς μέσω κάποιον μεθόδων απλοποίησης. Συνήθως αποτελούνται από δεκάδες χημικές ενώσεις και από εκατοντάδες χημικές αντιδράσεις.
- Σκελετικούς Μηχανισμούς (Skeletal Mechanisms) : Προέρχονται από μεγαλύτερη απλοποίηση και ομαδοποιήσεις χημικών ενώσεων.

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας θα χρησιμοποιηθεί ένας γενικός χημικός μηχανισμός προπανίου για να μοντελοποιηθεί η καύση. Στον Πίνακα[4] παρουσιάζεται ο μηχανισμός.

Πίνακας 4. Γενικός μηχανισμός καύσης προπανίου που χρησιμοποιείται στην υπολογιστική μοντελοποίηση

ΑΡΙΘΜΟΣ ΑΝΤΙΑΡΑΣΗΣ	ELEMENTS: O, H, C, N			
	Species: H O OH H2 H2O O2 CO			
	CO2 C2H2 C2H4 C3H8 N2			
1	H+O2<=>O+OH			
2	O+H2<=>H+OH			
3	OH+H2<=>H+H2O			
4	20H<=>O+H2O			
5	2H+M<=>H2+M			
6	H+OH+M<=>H2O+M			
7	O+H+M<=>OH+M			
8	2O+M<=>O2+M			
9	CO+O(+M)<=>CO2(+M)			
10	CO+OH<=>CO2+H			
11	CO+O2<=>CO2+O			
12	C2H2+5OH=>2CO+3H2O+H			
13	C2H2+2O=>2CO+2H			
14	C2H4+O=>C2H2+H+OH			
15	C2H4+2OH<=>C2H2+2H2O			
16	C3H8+2H+4OH=>C2H4+CO+3H2O+2H2			
17	C3H8+OH+2O=>C2H4+CO+H+2H2O			
18	C3H8+3O2<=>C2H4+CO2+3OH+O+H			

ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΠΡΟΠΑΝΙΟΥ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6⁰-ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΔΙΑΣΤΡΩΜΑΤΩΜΕΝΗΣ ΦΛΟΓΑΣ ΠΡΟΠΑΝΙΟΥ ΜΕ ΣΤΕΡΕΟ ΣΩΜΑ ΤΥΠΟΥ ΔΙΣΚΟ

Στο έκτο κεφάλαιο της εργασίας θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της υπολογιστικής προσομοίωσης της φλόγας προπανίου-αέρα με στερεό σώμα. Η συγκεκριμένη διάταξη μελετήθηκε για δύο διαφορετικές παροχές καυσίμου. Τα πειραματικά αποτελέσματα έχουν προκύψει από [20] και θα συγκριθούν με τα αποτελέσματα των δύο διαφορετικών προσεγγίσεων της χημικής κινητικής της μοντελοποίησης.

6.1 Επισκόπηση Υπολογιστικής Προσομοίωσης

Η γεωμετρία που έχει προσομοιωθεί απεικονίζεται σε πλάγια όψη στην εικόνα (17). Αποτελείται από έναν κύριο σωλήνα διαμέτρου 52 χιλιοστών και στον οποίον εισέρχεται το ρεύμα αέρα. Μέσα στον μεγάλο σωλήνα υπάρχει ένας δεύτερος στον οποίο είναι τοποθετημένοι τρεις δίσκοι, με τον τελευταίο να είναι το στερεό σώμα που θα σταθεροποιηθεί η ροή. Ανάμεσα από τους τρεις δίσκους δημιουργούνται δύο κοιλότητες, οι οποίες είναι απαραίτητες για την ανάμιξη του καυσίμου με τον αέρα και τον σχηματισμό διαστρωματωμένης φλόγας. Το καύσιμο εγχέεται από το δεύτερο σε σειρά δίσκο από ένα διάκενο σχήματος δακτυλίου και πάχος 1 χιλιοστού. Η ταχύτητα του αέρα που εισέρχεται από τον μεγάλο αγωγό συμβολίζεται με U_c και παρουσιάζεται στον Πίνακα [5]. Το συγκεκριμένο πρόβλημα επιλύθηκε για δύο τιμές παροχής καύσιμου, στις οποίες υπήρχαν και οι αντίστοιχες πειραματικές τιμές. Αυτή η παροχή διακριτοποιείται με μία παράμετρο δ και ένα ποσοστό και οι τιμές τις φαίνονται στον Πίνακα [5]. Το ποσοστό συμβολίζει το πόσο απέχει αυτή η παροχή ώστε η φλόγα προπανίου να αποσβήσει (blow-off).

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα η κατασκευή ενός δομημένου πλέγματος θεωρήθηκε υψίστης σημασίας διότι το μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιείται (LES) προτιμάται με δομημένα πλέγματα. Ο αριθμός των κόμβων κατέληξε να είναι 1190826. Αρκετά πυκνό το πλέγμα έγινε στην περιοχή της σταθεροποίησης της φλόγας, κατάντι του

στερεού σώματος και στην περιοχή έγχυσης του καυσίμου για να μοντελοποιηθεί σωστά η ανάμιξη και η έγχυση.

Η επιλογή του όγκου ελέγχου κρίνεται πολύ σημαντική για την επιτυχία μιας μοντελοποίησης. Για την συγκεκριμένη διάταξη ο όγκος ελέγχου ανάντι του στερεού σώματος είναι 3.6 Db αυτού, ενώ εκτείνεται 12 Db κατάντι αυτού. Η εν' λόγω διάταξη βρίσκεται σε έναν κωνικής μορφής όγκο με μικρή διάμετρο 4Db και μεγάλη διάμετρο 8Db.

Ο επιλύτης του προβλήματος επιλέχθηκε να είναι ο Pressured-Based, γιατί η ροή που μοντελοποιείται είναι ασυμπίεστη και προτιμάται σε προβλήματα καύσης. Το πεδίο βαρύτητας είναι κατά τα αρνητικά του x άξονα (εικόνα (17)). Το μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιήθηκε είναι το LES με το δυναμικό μοντέλο Smagorinsky για το υποπλεγματικό κομμάτι των εξισώσεων. Ο αλγόριθμος για την αλληλεπίδραση των πεδίων πίεσης και ταχύτητας που επιλέχθηκε ήταν ο SIMPLE. Για τον υπολογισμό των βαθμίδων χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος Green-Gauss Node Based και για την διακριτοποίηση των βαθμίδων ορμής, συστατικών, ενέργειας επιλέχθηκαν κεντρικές διαφορές (Central Differencing).

Για την χημική κινητική χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο Species Transport και ο Stiff Chemistry Solver. Ο χημικός μηχανισμός της καύσης του προπανίου (Πίνακας (5)), έτρεξε με την μέθοδο Finite Rate αλλά και με την μέθοδο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα (PaSR).

Τα συγκεκριμένα υπολογιστικά τρεξίματα είχαν χρονικό βήμα 5 * 10⁻⁵ s. Τα στατιστικά μεγέθη για το μέσο ροϊκό πεδίο αντλήθηκαν σε ένα φάσμα 40000 χρονικών βημάτων.



Εικόνα 17. Τομής της γεωμετρίας με τους δύο σωλήνες, τις κοιλότητες και το στερεό σώμα

Αριθμός	Παροχή	Ταχύτητα	U _c	Μοντέλο
Προσομοίωσης	καυσίμου	Καυσίμου	(m/s)	Χημικής
		(m/s)		Κινητικής
1	δ25%	2.04	4.67	Finite-Rate TCI
2	δ25%	2.04	4.67	PaSR, fractal 3
3	δ25%	2.04	4.67	PaSR, fractal 4
4	δ3%	1.68	4.67	Finite-Rate TCI
5	δ3%	1.68	4.67	PaSR, fractal 3

Πίνακας 5. Σύνοψη	των υπολογιστικών	προσομοιώσεων που	πραγματοποιήθηκαν

6.2 Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

Σε αυτό το σημείο θα παρουσιαστούν συνοπτικά τα υπολογιστικά αποτελέσματα για την συγκεκριμένη διάταξη που μελετάται καθώς και θα γίνει συσχέτιση με πειραματικά δεδομένα σε ορισμένα διαγράμματα, όπου αυτά ήταν διαθέσιμα [20].

Στην εικόνα (18) φαίνεται το ροϊκό πεδίο όπως σχηματίζεται στις κοιλότητες και στο δίσκο που σταθεροποιεί την φλόγα. Διακρίνεται ότι εντός των κοιλοτήτων δημιουργούνται ανακυκλοφορίες, οι οποίες έχουν δραστικό ρόλο για την ανάμιξη του

καυσίμου με το κύριο ρεύμα αέρα. Αυτές οι κοιλότητες θα βοηθήσουν το μίγμα να περάσει από το στερεό σώμα τύπου δίσκου με ένα διαστρωματομένο προφίλ. Αυτό σημαίνει ότι ο λόγος ισοδυναμίας Φ θα είναι μεγαλύτερος προς την μεριά του δίσκου, εκεί που θα σταθεροποιηθεί και η φλόγα, και όσο απομακρύνεται από το bluff body θα μειώνεται. Η διαστρωμάτωση επαληθεύεται και στην εικόνα (21) όπου φαίνεται το προφίλ του λόγου ισοδυναμίας Φ στο ακτινικό διάκενο, από το bluff body μέχρι τον εξωτερικό σωλήνα.

Στην εικόνα (19) φαίνεται η κατά το ήμισυ ροή στο κατάντι του bluff body. Η ανακυκλοφορία είναι το βασικό χαρακτηριστικό στις φλόγες με σταθεροποίηση σε στερεά σώματα. Τα υπέρθερμα καυσαέρια, ρέοντας στην ανακυκλοφορία, αναμιγνύονται με το μίγμα προπανίου-αέρα αναφλέγοντας το και διατηρώντας την φλόγα σταθερή. Αυτή η ανάμιξη που ενισχύεται από την τύρβη και τα υπέρθερμα καυσαέρια εξασφαλίζει να συντηρείται μία φλόγα σταθερή χωρίς ταλαντώσεις με πολύ μικρούς λόγους ισοδυναμίας, αγγίζοντας τα κάτω όρια ευφλεκτότητας. Αυτό το γεγονός κρίνεται αρκετά σπουδαίο για την σύγχρονη αναγκαιότητα της μείωσης των ρύπων αλλά και την μείωση της κατανάλωσης.

Στην εικόνα (20) φαίνονται οι λόγοι ισοδυναμίας για τις δύο περιπτώσεις με δ25%, δ3% ,που προέκυψαν υπολογιστικά με τον μερικώς αναδευμένο αντιδραστήρα. Φαίνεται η ανάμιξη του προπανίου με τον ρέοντα αέρα μέσα στις κοιλότητες και η σημαντική μείωση της τιμής του Φ στην περιοχή του στερεού σώματος. Εκτός από τα προτερήματα που προαναφέρθηκαν, η διαστρωματωμένη φλόγα που σταθεροποιείται στο κατάντι του στερεού σώματος δεν μπορεί να εξελιχθεί στο ανάντι και να προχωρήσει στις αντλίες καυσίμου, κάτι το πολύ επικίνδυνο, παρά τις μικρές τιμές του Φ στην περιοχή της καύσης γιατί δεν ευνοείται η φλόγα προς τα πίσω εξαιτίας των ορίων ευφλεκτότητας. Οι μοντελοποιήσεις με το μοντέλο Implicit-LES υπερεκτιμά τα προφίλ του Φ σε σχέση με τον μερικώς αναδευμένο αντιδραστήρα όπως φαίνεται και από την εικόνα (21). Το μοντέλο PaSR για την ίδια παροχή καυσίμου έχει μεγαλύτερο μέγιστο σημείο όμως η καμπύλη στο μέγιστο έχει πιο οξύ χαρακτήρα. Αντίθετα, το μοντέλο ILES σχηματίζει ένα παραβολικό προφίλ με μεγαλύτερη ακτίνα καμπυλότητας.

Στις εικόνες (22,23) φαίνεται οι αξονικές υπολογιστικές τιμές του Φ κατάντι του bluff body. Εξαιτίας ότι υπάρχει καύση, αυτά τα διαγράμματα του Φ δηλώνουν το μίγμα καυσίμου που δεν κάηκε. Χαρακτηριστικό είναι οι πολύ μικρότερες τιμές Φ με το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα. Αυτό φανερώνει ότι το PaSR θεωρεί ότι περισσότερο μίγμα καίγεται εξαιτίας ότι η καύση ευνοείται από την τυρβώδη ανάμιξη. Στις εικόνες (24,25) φαίνονται τα ακτινικά υπολογιστικά Φ κατάντι του στερεού σώματος. Εξαιτίας της καύσης τα διαγράμματα δείχνουν το αντιδρών μίγμα καυσίμου που δεν καίγεται. Αυτό που διαπιστώνεται είναι κάποιες ανομοιομορφίες στα προφίλ τα οποία θα έπρεπε να μην υπάρχουν λόγω της συμμετρικότητας της διάταξης και της ροής. Επομένως, αυτός είναι ένας δείκτης σύγκλισης της ροής και ενδεχομένως θα χρειαζόταν περισσότερος υπολογιστικός χρόνος ώστε να έρθουν σε μια ισορροπία τα διαγράμματα. Αυτό όμως δεν ήταν εφικτό λόγω του περιορισμένου υπολογιστικού χρόνου και υπολογιστικής ισχύς που υπήρχε για την συγκεκριμένη εργασία.

Στις εικόνες (26,27) διακρίνονται οι αξονικές υπολογιστικές τιμές της μέσης αξονικής ταχύτητας με τις πειραματικές τιμές. Είναι φανερό η υπεροχή του μοντέλου PaSR έναντι του ILES, καθώς συσχετίζονται πολύ με τις πειραματικές τιμές. Πρέπει να επισημανθεί ότι οι πειραματικές τιμές πάνω στο στερεό σώμα εσφαλμένα δεν είναι μηδέν. Οι καμπύλες των πειραματικών με αυτές του μοντέλου PaSR είναι σχεδόν όμοιες. Αντίθετα οι καμπύλες των αξονικών ταχυτήτων με το μοντέλο ILES δείχνουν την υπερεκτίμηση που κάνει το μοντέλο στο μέγεθος την ανακυκλοφορίας. Η μέγιστη αρνητική τιμή και η ύπαρξη της μηδενικής τιμής στο διάγραμμα των αξονικών ταχυτήτων μέσων τιμών των αξονικών ταχυτήτων μπορούν να βοηθήσουν ώστε να εκτιμηθούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της ανακυκλοφορίας.

Στην εικόνα (28) είναι τα διαγράμματα των ακτινικών προφίλ των μέσων τιμών των αξονικών ταχυτήτων για την περίπτωση κοντά στην απόσβεση δ3% (blow-off), τόσο υπολογιστικά όσο και πειραματικά. Φαίνεται ότι και τα δύο υπολογιστικά μοντέλα σχετίζονται με τις πειραματικές τιμές έχοντας ασφαλώς κάποιες αποκλίσεις. Το μοντέλο ILES φαίνεται αρκετά αξιόπιστο μέχρι το x/Db=0.5, ενώ από τις επόμενες καμπύλες φαίνεται να υποεκτίμα το ολικό ελάχιστο σε αντίθεση με το μοντέλο PaSR, το οποίο υπερεκτιμά τα συμμετρικά μέγιστα σε κοντινή απόσταση από το bluff body.

Στην εικόνα (29) φαίνονται τα αντίστοιχα διαγράμματα για την περίπτωση δ25%. Στην περιοχή x/Db=0 τα προφίλ ταυτίζονται για τα δύο μοντέλα. Στα επόμενα όμως, φαίνεται και πάλι μεγαλύτερη συσχέτιση των υπολογιστικών τιμών του μοντέλου PaSR με τα πειραματικά δεδομένα. Από αυτά τα αποτελέσματα, το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα μοντελοποιεί ακριβέστερα το πεδίο των ταχυτήτων.

Στις εικόνες (30,31,32) είναι τα πεδία των αξονικών μέσων τιμών ταχυτήτων. Οι εικόνες αυτές είναι πολύ κρίσιμες γιατί στα contours φαίνεται η γεωμετρία των ανακυκλοφοριών που υπάρχουν κατάντι του bluff body. Το γεωμετρικό χαρακτηριστικό που διακρίνεται αμέσως είναι το μήκος της ανακυκλοφορίας. Το μοντέλο ILES υπερεκτιμά το μέγεθος της ανακυκλοφορίας αφού την υπολογίζει με μήκος 1.5Db του στερεού σώματος. Το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα για την περίπτωση κοντά στην απόσβεση (δ3%) υπερεκτιμά την ανακυκλοφορία μόνο 0.1Db, αφού το πειραματική τιμή για την ανακυκλοφορία είναι στο 1.1Db. Όμως για την περίπτωση με πλουσιότερο μίγμα καυσίμου-αέρα (δ25%) έχει μεγαλύτερο σφάλμα με υπολογιστικό μήκος ανακυκλοφορίας 1.1Db και πειραματικό 0.6Db. Χαρακτηριστικό είναι από αυτές τις εικόνες η επιμήκυνση του μήκους της ανακυκλοφορίας με την μείωση της παροχής καυσίμου στην διάταξη.

Στις εικόνες (33,34) διακρίνονται τα αξονικά προφίλ των μέσων τιμών της θερμοκρασίας των υπολογιστικών με τις πειραματικές τιμές κατάντι του στερεού σώματος. Γίνεται αντιληπτό ότι το μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα υπερεκτιμά σε σχέση με το Implicit-LES τις θερμοκρασίες. Τεράστιας σημασίας θεωρείται η εικόνα (34) ,για την περίπτωση (δ25%), στην οποία έγιναν δύο υπολογιστικές προσομοιώσεις με το μοντέλο PaSR η καλύτερη προσέγγιση αυτή με την σταθερά επιλεγμένη 3 για την σταθερά των κλιμάκων, η οποία αναλύεται και στο κεφάλαιο 5.

Οι εικόνες (35,36) έχουν τα διαγράμματα των ακτινικών προφίλ των μέσων τιμών της θερμοκρασίας με το μοντέλο ILES και PaSR. Εξαιτίας ότι θεωρείται καλύτερη προσέγγιση του μοντέλου ILES στο θερμικό πεδίο, από τις εικόνες (33,34) των αξονικών των μέσων τιμών της θερμοκρασίας, πιστεύεται ότι το μοντέλο PaSR υπερεκτιμά κατά πολύ και τα ακτινικά προφίλ στις μέσες τιμές των θερμοκρασιών.

Τα προφίλ των ακτινικών μέσων τιμών της θερμοκρασίας με το PaSR σχετίζονται με αυτά του ILES όσο απομακρύνονται από το κέντρο, δηλαδή εκεί που δεν υπάρχει καύση. Στην περίπτωση για δ25%, διακρίνεται μία μεγαλύτερη απόκλιση των προφίλ του PaSR με αυτό του ILES. Αξιοσημείωτο είναι ότι η ρύθμιση για την σταθερά ως 3, έχει καλύτερα αποτελέσματα από ότι αυτό που συστήνει η Ansys ως προεπιλεγμένη(σταθερά κλιμάκων=4). Οι αποκλίσεις των υπολογιστικών προφίλ θερμοκρασίας σε σχέση με τα πειραματικά είναι το μεγαλύτερο σφάλμα αυτών των μοντελοποιήσεων. Κοντά στο στερεό σώμα η υπολογιστική τιμή τείνει να γίνει να είναι η αδιαβατική θερμοκρασία της φλόγας. Αυτό είναι αδύνατο σε πραγματικές συνθήκες και η έντονη τύρβη μειώνει την μέγιστη θερμοκρασία. Αυτό το σφάλμα έγκειται ίσως στο γενικό μηχανισμό που είναι μία απλοποίηση για να μην υπάρχουν στο μοντέλο εκατοντάδες γημικές εξισώσεις. Επίσης, μπορεί να εντοπιστεί η αιτία του προβλήματος στα δύο χημικό-κινητικά μοντέλα ILES, PaSR που αδυνατούν να περιγράψουν επακριβώς την τυρβώδη καύση και χρησιμοποιούν και τα δύο μοντέλα διάφορες σταθερές. Ενδεχομένως, να υπάρχει βελτίωση του προβλήματος με ένα πυκνότερο πλέγμα στην περιοχή ενδιαφέροντος ώστε να λύνονται απευθείας από το μοντέλο των μεγάλων δινών (LES) μεγαλύτερο μέρος της ροής χωρίς μοντελοποίηση.

Στις εικόνες (37,38) φαίνονται τα πεδία των RMS αξονικών ταχυτήτων για τις μοντελοποιήσεις και του πειράματος. Η RMS τιμή της ταχύτητας είναι μία ένδειξη της τύρβης και της τυρβώδης κινητικής ενέργειας. Είναι το άμεσο μέγεθος που μετράται πειραματικά και για αυτό κρίνεται να παρουσιαστούν τα πεδία των αζονικών ταχυτήτων RMS, ώστε να υπάρχει μία εικόνα της τυρβώδης κινητικής ενέργειας. Οι υπολογιστικές τιμές υπερεκτιμούν τις τιμές των RMS αζονικών ταχυτήτων σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα. Στην εικόνα (37) το μοντέλο PaSR να υπερεκτιμά το πεδίο των RMS ταχυτήτων. Πιστεύεται ότι εάν είχε τρέξει περισσότερο αυτή η μοντελοποίηση ενδεχομένως να μην είχε τόσες μεγάλες αποκλίσεις. Με δ25% το πεδίο των RMS ταχυτήτων στο μοντέλο PaSR και με τις δύο ρυθμίσεις έχουν παρόμοια συμπεριφορά με αυτή του μοντέλου ILES. Οι τιμές των πειραματικών της RMS αξονικής ταχύτητας διακρίνονται μικρότερες από τις υπολογιστικές τιμές.

Στις επόμενες εικόνες (39,40,41,42) συλλέγονται τα χημειοφωταυγάζοντα ριζικά OH^{*}, CH^{*}. Είναι τα δύο από τα τρία σημαντικότερα ριζικά μαζί με το CO₂^{*} τα οποία εκπέμπουν φωτόνια και κάνουν την φλόγα ευδιάκριτη. Επίσης τα δύο αυτά ριζικά είναι σχετικά εύκολο να μετρηθούν πειραματικά, καθιστώντας τα ιδανικά για συσχέτιση με υπολογιστικές τιμές. Ο μη παρεμβατικός χαρακτήρας της μέτρησης της χημειοφωταύγειας τον κάνει αρκετά αξιόπιστο για πρακτικές εφαρμογές και για στιγμιαίο έλεγχο της φλόγας αφού επιτρέπει να γνωρίζουμε την τοπολογία της φλόγας. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα έχουν αποκλίσεις γιατί χρησιμοποιείται ένας γενικός μηχανισμός για την χημεία. Για να βρεθούν οι συγκεντρώσεις των χημειοφωταυγάζοντων στοιχείων έχουν χρησιμοποιηθεί αλγεβρικές σχέσεις οι οποίες έχουν επαληθευτεί πειραματικά.

Παρά τις αποκλίσεις που εντοπίστηκαν παραπάνω, τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων μπορούν να χαρακτηριστούν θεμιτά για αυτό το πολύπλοκο ροϊκό φαινόμενο. Δεν παρατηρήθηκε κάτι το μη ρεαλιστικό στα αποτελέσματα παρά μόνο αποκλίσεις από τις πειραματικές τιμές. Θεωρείται σημαντικό ότι οι τάσεις όλων των υπολογιστικών αποτελεσμάτων είναι ορθές και δόθηκε η ευκαιρία να συγκριθούν τα δύο μοντέλα ILES, PaSR.





Εικόνα 18. Ροϊκό πεδίο γύρω από τις κοιλότητες

Εικόνα 19. Ροϊκό πεδίο γύρω από το στερεό σώμα



PHI: 0 0.3125 0.625 0.9375 1.25 1.5625 1.875 2.1875 2.5 2.8125 3.125 3.4375 3.75 4.0625 4.375 4.6875 5

Εικόνα 20. Πεδίο μίξης του καυσίμου με τον αέρα για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου δ3%,δ25%



















$\delta 3\%$ se apostáseic apó to bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2

Εικόνα 25. Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ του λόγου ισοδυναμίας Φ για παροχή καυσίμου δ25% σε αποστάσεις από το bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2



Εικόνα 26. Πειραματικές και υπολογιστικές τιμές της μέσης αξονικής ταχύτητας για











r/Db





Εικόνα 29.Ακτινικά πειραματικά και υπολογιστικά προφίλ της μέσης αξονικής ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ25% σε αποστάσεις από το bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2



Εικόνα 30. Τοπολογία του υπολογιστικού πεδίου μέσης αξονικής ταχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου με το μοντέλο ILES



Εικόνα 31. Τοπολογία του υπολογιστικού πεδίου μέσης αξονικής ταχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου με το μοντέλο PaSR



Εικόνα 32. Τοπολογία του πειραματικού πεδίου μέσης αξονικής ταχύτητας και απεικόνιση της γεωμετρίας της ανακυκλοφορίας για τις δύο περιπτώσεις παροχής καυσίμου



Εικόνα 33. Αξονικά υπολογιστικά και πειραματικά προφίλ μέσης θερμοκρασίας για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ3%



Εικόνα 34. Αξονικά υπολογιστικά και πειραματικά προφίλ μέσης θερμοκρασίας για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ25%



Εικόνα 35. Ακτινικά υπολογιστικά προφίλ μέσης θερμοκρασίας για παροχή καυσίμου δ3% σε αποστάσεις από το bluff body: x/Db=0, x/Db=0.24, x/Db=0.5, x/Db=1, x/Db=2







Εικόνα 37. Τοπολογία πειραματικών και υπολογιστικών πεδίων RMS αξονικής ταχύτητας για την παροχή καυσίμου δ3%



Εικόνα 38. Τοπολογία πειραματικών και υπολογιστικών πεδίων RMS αξονικής ταχύτητας για παροχή καυσίμου δ25%



Εικόνα 39. Τοπολογία της υπολογιστικής συγκέντρωσης του χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου CH^{*} για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ3%



Εικόνα 40. Τοπολογία της υπολογιστικής συγκέντρωσης του χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου CH^{*} για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ25%



Εικόνα 41. Τοπολογία της υπολογιστικής και πειραματικής συγκέντρωσης του χημειοφωταυγάζοντος στοιχείου ΟΗ^{*} για την περίπτωση παροχής καυσίμου δ3%




6.3 Συμπεράσματα Και Μελλοντική Συνέχεια Της Παρούσας Εργασίας

Στην συγκεκριμένη διπλωματική εργασία έγινε προσπάθεια μοντελοποίησης ενός καυστήρα, ο οποίος με την βοήθεια στερεού σώματος τύπου δίσκου σταθεροποιεί μία διαστρωματωμένη φλόγα προπανίου-αέρα. Το επίκεντρο της μελέτης ήταν η σύγκριση δύο μοντέλων χημικής κινητικής, του ILES με το PaSR, με πειραματικά αποτελέσματα τα οποία υπήρχαν για αυτή την γεωμετρία.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν δείχνουν μία μικρή υπεροχή του μοντέλου του PaSR να ερμηνεύσει τα δύσκολα ροϊκά πεδία που αλληλεπιδρούν σε μία τυρβώδη φλόγα. Το ILES αν και υστερεί σε ακρίβεια δίνει και αυτό ποιοτικά αποτελέσματα. Ένα σύνηθες ερώτημα που προκύπτει σε υπολογιστικές προσομοιώσεις είναι αν το πλέγμα ήταν αρκετά πυκνό στην περιοχή ενδιαφέροντος ώστε να υπολογίζονται με αρκετή ακρίβεια τα φαινόμενα της τύρβης. Επίσης, στην μελέτη φάνηκε η αξία του πειράματος και των πειραματικών δεδομένων, που χωρίς αυτά δεν θα μπορούσε να γίνει σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων.

Για την εξέλιξη της εργασίας προτείνεται πυκνότερο πλέγμα και ένας μεγαλύτερος μηχανισμός για την καύση του προπανίου για περισσότερη ακρίβεια, εάν υπάρχει διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς. Σημαντικό θα ήταν η περαιτέρω εμβάθυνση στο μοντέλο του μερικώς αναδευμένου αντιδραστήρα στον οποίο πιστεύεται ότι υπάρχουν περιθώρια βελτίωσης στις σταθερές του και στον τρόπο που βρίσκει τις κλίμακες χρόνου μίξης και χημείας. Τέλος, θα μπορούσε να γίνει εκτέλεση περισσότερων περιπτώσεων παροχής καυσίμου, ταχυτήτων και θερμοκρασίας του καυστήρα για να μελετηθεί και να κατανοηθεί πιο διεξοδικά η φυσική πίσω από τον μερικώς αναδευμένο αντιδραστήρα γα να χρησιμοποιείται για μελλοντικές διατάξεις καύσεις.

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Κούτμος Παναγιώτης, (2015), Εισαγωγή στις Βασικές Αρχές της Θεωρίας της Καύσης και της Τεχνολογίας της Καύση, Kallipos, Αθήνα
- Volker John,(2004), Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows, Springer, Germany
- Tennekes H. and Lumley J. L,(1972), A first course in turbulence, The MIT Press, USA
- David C. Wilcox, (2006), Turbulence Modeling for CFD, DCW Industries, California
- 5. Κολαΐτης Διονύσιος Ι., (2014), Θεωρία Καύσης, Fountas Books, Αθήνα
- 6. Law Chunk K., (2006), Combustion Physics, Cambridge University Press, UK
- Jiri Blazek, (2007), Computational Fluid Dynamics, Principles and Applications, Elsevier, Germany
- Dogkas E., Mitsopoulos E., Koutmos P., (2018), Mixing and Combustion Performance of a Stratified Bluff Body Primary Zone Interacting with a Co-annular Swirl-Induced Recirculation. Journal of Energy Engineering. https://doi.org/10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000551
- Hardalupas, Y. and M. Orain, (2004), Local measurements of the timedependent heat release rate and equivalence ratio using chemiluminescent emission from a flame, Combustion and Flame
- Panoutsos, C., Y. Hardalupas, and A. Taylor, (2009) ,Numerical evaluation of equivalence ratio measurement using OH* and CH* chemiluminescence in premixed and non-premixed methane–air flames, Combustion and Flame
- 11. Glassman Irvin, (2015), Combustion, Elsevier, UK
- Παπανίκας Δημήτρης Γ., (2010), Εφαρμοσμένη Ρευστομηχανική, Φ.
 ΠΑΠΑΝΙΚΑ, Αθήνα
- Fiorina B., Mercier R., Kuenne G., Ketelheun A. Avdic A., Janicka J. Geyer D., Dreizler A., Alenius E., Duwig C., Trisjono P., Kleinheinz K., Kang S., Pitsch H., Proch F., Marincola F., Kempf A., (2015), Challenging modeling

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών-Τομέας Ενέργειας Αεροναυτικής και Περιβάλλοντος strategies for LES of non-adiabatic turbulent stratified combustion, Combustion and Flame, 162

- Hodzic E., Alenius E., Duwig C., Szasz R., Fuchs L., (2017), A Large Eddy Simulation Study of Bluff Body Flame Dynamics Approaching Blow-Off, Combustion Science and Technology, 189(7)
- 15. Kariuki J., Dawson J., Mastorakos E., (2012), Measurements in turbulent premixed bluff body flames close to blow-off, Combustion and Flame, 159(8)
- 16. Longwell J. P., (1953), Flame stabilization by bluff bodies and turbulent flames in ducts, Symposium (International) on Combustion
- 17. ANSYS® Academic Research,(2022), R2
- 18. ANSYS® ,(2022), Ansys Fluent User's Guide, USA
- 19. Xiouris C., Koutmos P., (2012), Fluid dynamics modeling of a stratified disk burner in swirl co-flow, Appling Thermal Engineering
- 20. Souflas K., (2019), Turbulent mixing and reacting flow characteristics of axisymmetric bluff-body stabilized propane-air flames, under inlet mixture stratification and preheat, PhD thesis, Patras, Greece