ISI BİLİMİ VE TEKNİĞİ DERGİSİ Cilt 15, Sayı 1, Mart 1992 Sayfa : 7-11

BİLİM ve TEKNİĞE KATKILAR

KİMYASAL REAKSİYON İÇEREN TÜRBÜLANSLI AKIŞLARIN SİMÜLASYONU*

Celalettin ÇELİK*
İ.T.Ü. Makina Fakültesi,
80191 Gümüşsuyu-İstanbul

Ahmet ARISOY*
İ.T.Ü. Makina Fakültesi,
80191 Gümüşsuyu-İstanbul

SUMMARY

The objective of this study was the development of a numerical model for turbulent flow with chemical reaction. For the numerical solution of Navier-Stokes equations and for the modelling of turbulence, radiation and combustion computer programmes which are already available in the literature were used. Results for the model reactor were obtained by assuming that the reactions are kinetically controlled. The performance of the model was evaluated by comparing the predictions with the measurements available from IFRF on M-2 trials.

ÖZET

Bu çalışmada, içinde kimyasal reaksiyonların gerçekleştiği türbülanslı akışlara ait pratik bir sayısal modelin geliştirilmesi amaçlanmıştır. Akış alanlarının hidrodinamik çözümü veren Navier-Stokes denklemlerinin sayısal çözümünde ve türbülans, yanma ve ışınımın modellenmesinde literatürde bulunan bilgisayar programlarından yararlanılmıştır. Model reaktördeki akım fonksiyonu, sıcaklık, yanma ürünlerinin molar oranları gibi sayısal sonuçlar kinetik hal için elde edilmiştir. Oluşturulan modelin sonuçları ile IFRF'in M-2 deney serilerine ait veriler karşılaştırılarak, sayısal modelin performansı irdelenmiştir.

GİRİŞ

Türbülanslı reaktif akışların simülasyonu sürekli değişen sıcaklık ve hız alanlarında aynı anda etkileşen pek çok kimyasal bileşenin bulunması nedeniyle son derece karmaşık bir problem olarak tanımlanmaktadır (1). Ancak problem özellikle yanma veriminin artırılması, çevreye zararlı gaz emisyonlarının azaltılması ve yeni yanma sistemlerinin tasarımı amacıyla son yıllarda pek çok araştırıcının artan ilgisini çekmektedir.

Genel olarak türbülanslı reaktif sistemlere yaklaşımda iki temel yöntem mevcuttur. Birincisi reaksiyon hızlarının sonsuz olduğu varsayımına dayanan kimyasal denge yaklaşımıdır. Burada reaksiyon çok hızlı gerçekleştiği için yanma karışım hızları ile kontrol edilmektedir. İkinci yaklaşım ise reaksiyon hızlarının sonlu olduğu, buna karşılık karışımın sonsuz hızda gerçekleştiği mükemmel karışmış reaktör modelleridir. Bu yaklaşımda ise yanma, reaksiyon hızları ile kontrol edilmektedir. Sunulan çalışmada sonlu hız kimyasını dikkate alan kinetik yaklaşım kullanılmıştır.

Kimyasal bileşenlerin ve enerjinin korunumu için CREK bilgisayar kodu (2) kullanılmıştır. Akış alanının hidrodinamik çözümü k-ε türbülans modelinin kullanıldığı TEACH kodu ile elde edilmiştir (3,4). Işınımla olan ısı geçişi ise 4-Akış (4-Flux) yaklaşımı ile modellenmiştir (5,6).

*Yazarlar önceki sayımızda tanıtılmıştır.

*Makale 8.Ulusal Isı Bilimi ve Tekniği Kongresi'nde sunulmuştur.

2. ÇÖZÜM YÖNTEMİ

2.1 Korunum Denklemleri

Kütle, momentum, enerji ve kimyasal bileşenlerin korunum denklemleri gerekli düzenlemelerden sonra:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varnothing) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_{\varnothing} \frac{\partial \varnothing}{\partial x_j}) + S_{\varnothing} \qquad (1)$$

şeklinde genel bir kısmı diferansiyel denklem formunda yazılabilmektedir. Burada ρ yoğunluğu, u_j hız bileşenini, $\varnothing$ söz konusu bağımsız değişkeni, $\Gamma_{\varnothing}$, $\varnothing$ değişkenine ait "efektif" difüzyon katsayısını ve $S_{\varnothing}$ kaynak terimini göstermektedir. $\varnothing$ bağımsız değişkeni kimyasal bileşenlerin kütlesel oranları, entalpi, hız bileşenleri, türbülans kinetik enerjisi veya disipasyonu gibi pek çok büyüklüğü karakterize etmektedir.

(1) denklemi formundaki korunum denklemlerinin çözüm alanının bölündüğü her bir hücrede entegre edilmesi sonucu,

$$\sum_d A_d \varnothing_p = \sum_d A_d \varnothing_d + S_{\varnothing} \qquad (2)$$

şeklinde sonlu-fark denklemleri elde edilmektedir. (4). Burada "d" indisi komşu düğüm noktalarını (N,S,E,W), göstermektedir. A_d ise konvektif ve difüzif terimleri içeren bir katsayıdır ve yapısı korunum denklemlerinin tipi ile (parabolik, eliptik, hiperbolik) kullanılan sonlu-fark yöntemine (merkezi, upwind..) bağlıdır.

2.2Türbülans Modeli

Sunulan çalışmada klasik 2-denklemli türbülans modelini kullanan TEACH bilgisayar kodu kullanılmıştır (3). Navier-Stokes denklemleri k türbülans kinetik enerjisi ve ε disipasyon hızı ile birlikte çözülmektedir (Tablo 1).

2.3 Yanma Modeli

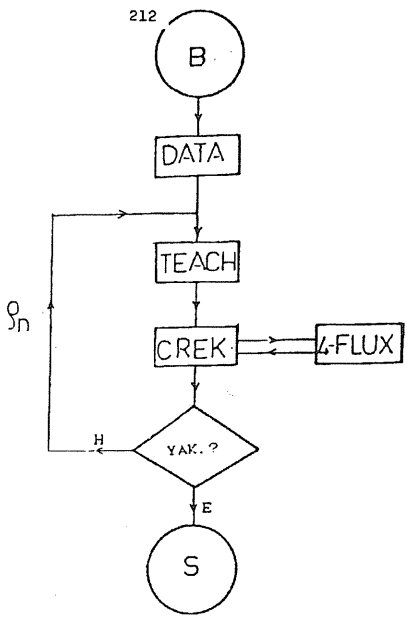
Yanma modelinde kullanılan çözüm yöntemi daha önce çeşitli çalışmalarda sunulmuştur (7,8,11). Sunulan çalışmada mükemmel karışımlı kinetik model uygulanmıştır. Metan gazının yanması ile ilgili 34-elemanter reaksiyon, 19 bileşen içeren, NO_x oluşumunun tanımlandığı bir mekanizma kullanılmıştır (9).

2.4 Işınım Modeli

Bu çalışmada model reaktörde ışınımla olan ısı geçişini karakterize etmek üzere 4-Akış modeli kullanılmıştır (5). Yöntemin esası ışınım akışının radyal ve eksenel yönlerde gerçekleştiği kabulüne dayanmaktadır. Herhangi bir P düğüm noktasındaki uzay açı her birinde ışınım şiddetinin sabit bir değer aldığı dört konik dilime bölünmektedir.

2.5 Çözüm Stratejisi

Modelin çözüm stratejisini hidrodinamik model ile yanma modeli arasında yapılan bir "süper-iterasyon" işlemi olarak özetlenebilir (Şekil 1). Kütle ve momentumun korunumu için TEACH kodu, bileşenler ve enerjinin korunumu için CREK kodu sırasıyla kullanılmaktadır.



Şekil 1. Çözüm Stratejisi

Her iki bilgisayar kodu arasında gerçekleştirilen bu "süper-iterasyon" işlemi yoğunluk alanında herhangi bir değişim kaydedilmemesi ve ısıl bilançonun sağlanması koşullarına ulaşılıncaya değin sürmektedir. Ayrıca ışınım modeli yanma modeli tarafından her düğüm noktasında "entalpi kaynak terimini" sağlayacak şekilde çağrılmaktadır.

3. MODELİN PERFORMANSI

3.1 Model Reaktör

Sunulan çalışmanın performansının belirlenmesi amacıyla model sonuçlarıyla IFRF'in M-2 deney serisinden 29 nolu aleve ait deneysel verilerin karşılaştırılması hedeflenmiştir. 29 no.lu alev çevrintisiz (non-siwirling), 3 MW termik güçte bir doğal gaz alevidir (10). Yanma odasının geometrisi Şekil 2. de verilmiştir.

3.2 Model Sonuçlarıyla Referans Deney Sonuçlarının Karşılaştırılması

Çeşitli eksenel mesafelerdeki U-hızı profilleri ve akım fonksiyonu dağılımları Şekil 3. ve Şekil 4.'de görülmektedir. Model sonuçları ile deneysel değerlerin birbirleriyle uyum içinde oldukları görülmektedir. Hemen yakıcı çıkışında U-profilinin gradyeninde çok hızlı bir değişim dikkati çekmektedir. k-ε türbülans modeli bu dramatik değişimi tam olarak karakterize edememektedir.

Tablo 1. k-ε türbülans modeli

Silindirik koordinatlarda herhangi bir Ø değişkeni için korunum denklemi: (kartezyen koordinatlarda r = 1, ∂/∂r=∂/∂y)

$$\frac{1}{r}:[\frac{\partial}{\partial x}(\rho rU\varnothing)+\frac{\partial}{\partial r}(\rho rV\varnothing)-\frac{\partial}{\partial x}(r\Gamma_\varnothing\frac{\partial \varnothing}{\partial x})-\frac{\partial}{\partial r}(r\,\Gamma_\varnothing\frac{\partial \varnothing}{\partial x})\,]=S_\varnothing$$

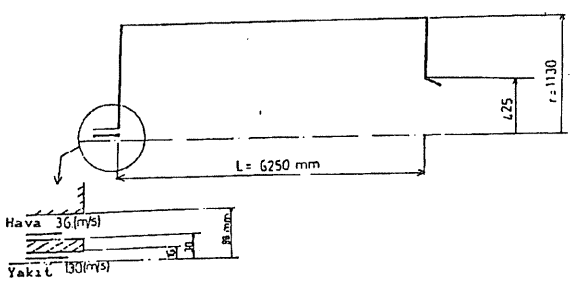
No.	Ø	$\Gamma_\varnothing$	$S_\varnothing$
1	U	μ_{eff}	$-\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{1}{r}[\frac{\partial}{\partial x}(r\mu_{eff}\frac{\partial U}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial r}(r\mu_{eff}\frac{\partial V}{\partial x})]$
2	V	μ_{eff}	$-\frac{\partial P}{\partial r}-2\mu_{eff}\frac{V}{r^2}+\frac{1}{r}[\frac{\partial}{\partial r}(r\mu_{eff}\frac{\partial V}{\partial r})+\frac{\partial}{\partial x}(r\mu_{eff}\frac{\partial U}{\partial r})]$
3	k	$\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k}$	$G-\rho\varepsilon$
4	ε	$\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon}$	$\frac{\varepsilon}{k}(C_1G-C_2\rho\varepsilon)$

burada $G=\mu_t\{2[(\frac{\partial U}{\partial x})^2+(\frac{\partial V}{\partial r})^2+(\frac{V}{r})^2]+[\frac{\partial U}{\partial r}+\frac{\partial V}{\partial x}]^2\}$

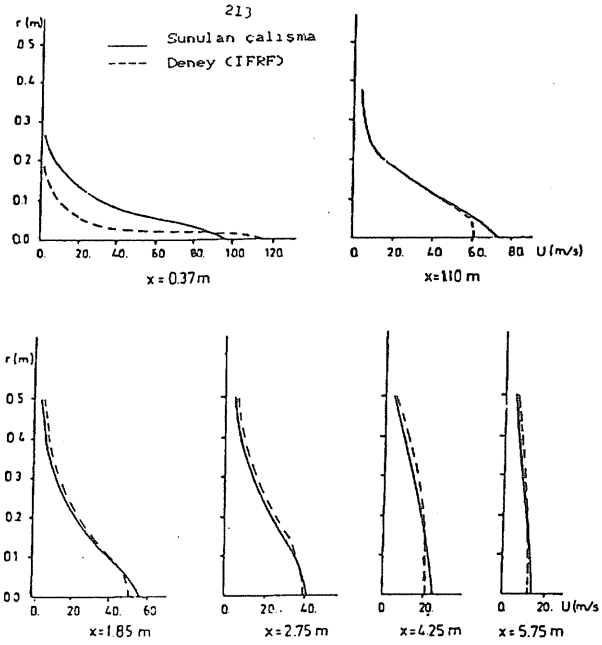
ve $\mu_{eff}=\mu_{lam}+\mu_{turb}=\mu_{lam}+C_\mu\rho\frac{k^2}{\varepsilon}$

$C_\mu, C_1, C_2, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$ ampirik katsayılar

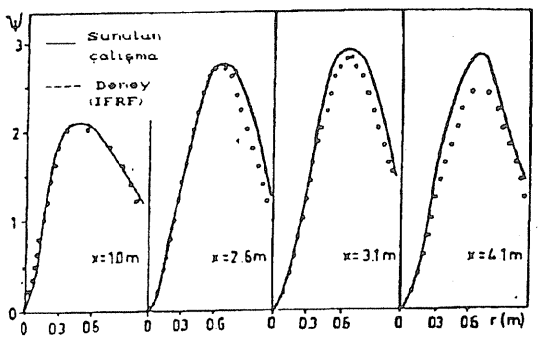
$C_\mu = 0.09.\ C_1 = 1.44,\ C_2 = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3$



Şekil 2. Model Reaktör

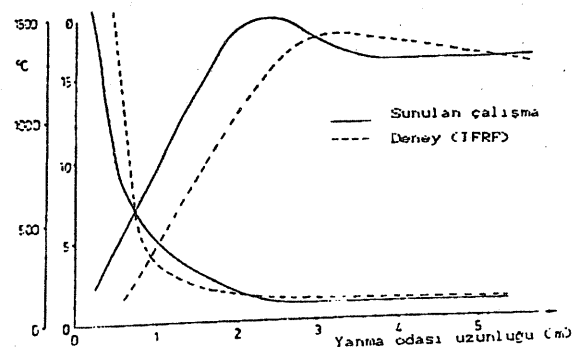


Şekil 3. Çeşitli Eksenel Mesafelerde U-hızı Profilleri



Şekil 4. Çeşitli Eksenel Mesafelerde Akım Fonksiyonu Değişimi

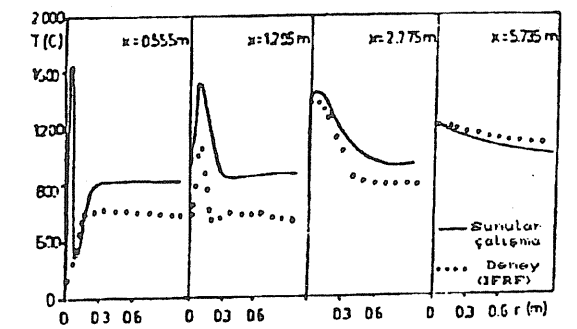
Şekil 5. de yanma odasının simetri ekseni boyunca sıcaklık ve yakıt ekivalans oranı değişimleri görülmektedir. Model sonuçları ile deneysel veriler benzer yapılardadır. Ancak, "kalma sürelerinin" çok kısa, karışım hızlarının çok yüksek olduğu yakıcıya yakın bölgelerde makro ve mikro karışım işlemleri türbülans



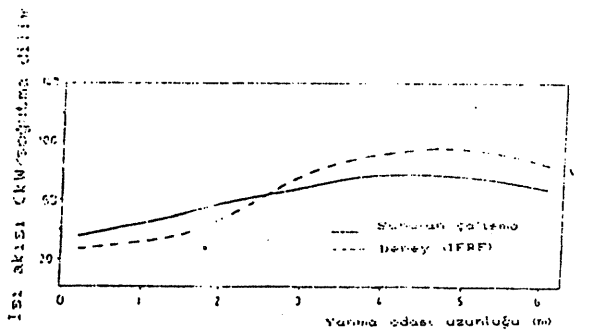
Şekil 5. Eksenel Sıcaklık ve Yakıt-Ekivalans Oranı Değişimleri.

ve yanma modelleriyle tam olarak ifade edilememektedir.

Çeşitli eksenel mesafelerdeki radyal sıcaklık dağılımları Şekil 6. da görülmektedir. Şekil 7. de ise yanma odası cidarlarından çekilen toplam (ışınım artı konveksiyon) ısı dağılımı verilmiştir. Model sonuçlarıyla



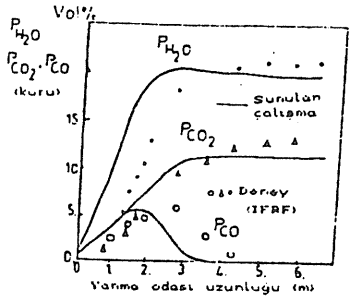
Şekil 6. Çeşitli Eksenel Mesafelerde Radyal Sıcaklık Dağılımları



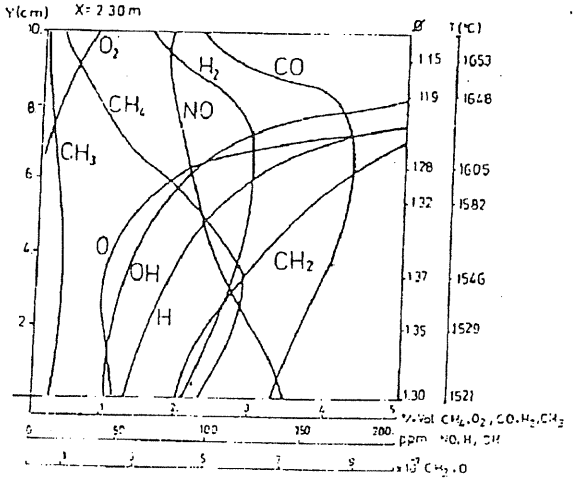
Şekil 7. Cidardaki Soğutma Dilimlerine Geçen Isı Dağılımı

deneysel değerlerin uyum içinde oldukları görülmektedir. Şekil 8. de ise 3 doymuş bileşenin reaktör ekseni boyunca değişimi verilmiştir. Özellikle yanma odası çıkışında model sonuçlarıyla deneysel değerlerin uyum içinde oldukları görülmektedir.

Sunulan çalışma aynı zamanda dikkate alınan 19 bileşenin reaktör içindeki dağılımını verebilmektedir. Böylelikle kararlı bileşenlerin yanında, pek çok radikalin oluşumu, değişimi ve karşılıklı etkileşimini izlemek mümkün olabilmektedir. Şekil 9. dikkate alınan bileşenlerden bir kısmının eksenel bir mesafede radyal yöndeki değişimlerini vermektedir.



Şekil 8. Bazı Doymuş Yanma Ürünlerinin Eksen Boyunca Değişimi.



Şekil 9. Bazı Radikal ve Doymuş Bileşenlerin x=2.30 m.dekti Radyal Yöndeki Değişimleri.

4. SONUÇ

Performansı deneysel verlilerle irdelenmiş türbülanslı reaktif akışlara ait pratik bir matematik model geliştirilmiştir. Model sonlu-hız kimyasına göre gaz fazı reaksiyonları ayrıntılı bir şekilde çözebilmektedir. Böylesi gelişmiş bir modelin pratikte karşılaşılan yanma problemlerine uygulanması yanma odalarındaki akış, karışım, ısı transferi ve çevreye zararlı bileşenlerin oluşumu konularının anlaşılmasını kolaylaştıracaktır.

KAYNAKLAR

1. Libby, P.A., and Williams, F.A.: Turbulent Reacting Flows. Springer Verlag, 1980.

2. Pratt, D.T., and Wormeck J.J.: CREK A Computer Program For Calculation of Combustion Reaction Equilibrium and Kinetics In Laminar or Turbulent Flow. Washington State University. Report WSU-ME-TEL-76-1, 1976.

3. Durst F., and Loy, T.: TEACH Ein Berechnungsverfahren für zweidimensionale Laminare und Turbulente Stromuengen. Kurzlehrgang Karlsruhe, Maerz 1984.

4. Gosman, A.D., Pun, W.M., Runchal, A.K., Spalding, D.B., Wolfstein M.: Heat and Mass Transfer In Recirculating Flows. Academic Press, 1969.

5. Richter, W.: Mathematische Modelle Technisher Flammen, Dissertation der Univers. Stuttgart 1977.

6. Zinser, W.: Zur Entwicklung Mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung Technischer Brennstoffe. Fortschr-Ber. VDI Reihe 6 Nr. 171. Düsseldorf: VDI-Verlag 1985.

7. Çelik, C., Arısoy, A., : A Mathematical Model For Combustion Chambers. 1st European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, Lisbon Portugal, 1988.

8. Çelik, C., Arısoy, A.: A Study of Gaseous Fuel Combustion in a Model Furnace. XIth International Symposium on Combustion Processes, Miedzyzdroje, Poland, 1989.

9. Waldman, C.H., Wilson, R.P., Jr., and Maloney, K.L.: Kinetic Mechanisms of Methane-Air Combustion with Pollutant Formation, Environmental Protection Technology Series EPA-650/2-74-045 (1974).

10. Michelfelder, S., Lowes, T.M.: Report on the M-2 Trials. Doc. nr.F 36/a/4, International Flame Research Foundation, Ijmuiden, 1974.

11. Çelik, C., Arısoy, A.,: Yanma Odaları İçin Matematik Bir Model, Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi, 10/4, 23-29, 1987.