



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών
«Παραγωγή και Διαχείριση Ενέργειας»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

***ΚΑΙΝΟΤΟΜΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ
ΜΕΤΑΔΟΣΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑ
και ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥΣ ΣΕ ΚΑΥΣΤΗΡΕΣ***

Του Μεταπτυχιακού Φοιτητή

Δημητρίου Νίκ. Τερτίπη

Επιβλέπων

Δρ. Εμμανουήλ Κακαράς, Καθηγητής Ε.Μ.Π.
*Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Εργαστήριο Ατμοκινητήρων και Λεβήτων*

Αθήνα, Ιούλιος 2007

Αυτή η σελίδα παρέμεινε σκοπίμως κενή

This page left intentionally blank

**Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Δ.Π.Μ.Σ. «Παραγωγή και Διαχείριση Ενέργειας»**

Ακαδημαϊκό Έτος 2006 – 2007

**Διπλωματική Εργασία
«Καινοτόμες Μέθοδοι Υπολογισμού Μετάδοσης Θερμότητας με
Ακτινοβολία και Εφαρμογή τους σε Καυστήρες»**

Επιμέλεια
Δημήτριος Νίκ. Τερτίπης
Μηχανολόγος Μηχανικός

Επίβλεψη
Δρ. Εμμανουήλ Κακαράς, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<i>Σύνοψη και περίληψη</i>	6
<i>Abstract and summary</i>	8
1^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	11
§ 1.1: Φύση και σημασία της θερμικής ακτινοβολίας.....	11
§ 1.2: Το μέλαν σώμα – ιδιότητες και συναρτήσεις ακτινοβολίας.....	14
§ 1.3: Στοιχεία ακτινοβολίας πραγματικών σωμάτων.....	19
2^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	25
§ 2.1: Σχηματισμός NO _x κατά την καύση στερεών καυσίμων.....	25
§ 2.2: Τεχνολογία οξειδωσης χωρίς φλόγα.....	27
3^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	33
§ 3.1: Φύση και ποσοτικοποίηση της θερμικής ακτινοβολίας αερίων.....	33
§ 3.2: Μέθοδοι υπολογισμού των ιδιοτήτων ακτινοβολίας αερίων.....	37
4^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	53
§ 4.1: Φύση και σημασία της θερμικής ακτινοβολίας σωματιδίων.....	53
§ 4.2: Προσομοίωση σωματιδίων από μικρές σφαίρες.....	55
5^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	61
§ 5.1: Εισαγωγή – γενικές προδιαγραφές κωδίκων.....	61
§ 5.2: Μοντελοποίηση και εξέταση ιδιοτήτων μειγμάτων αερίων.....	61
§ 5.3: Μοντελοποίηση και εξέταση ιδιοτήτων σωματιδιακών νεφών.....	69
6^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ	
Συμπεράσματα και σχόλια.....	77
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ	80

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ:	Καινοτόμες Μέθοδοι Υπολογισμού Μετάδοσης Θερμότητας με Ακτινοβολία και Εφαρμογή τους σε Καυστήρες
ΦΟΙΤΗΤΗΣ:	Δημήτριος Τερτίπης
ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:	Εμμανουήλ Κακαράς, Καθηγητής Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π.
ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΟ ΕΤΟΣ:	2006 – 2007

Σύνοψη

Η επίδραση της μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία είναι σημαντική σε εστίες στερεών καυσίμων. Με συμμετοχή των αερίων προϊόντων της καύσης (κυρίως CO₂ και υδρατμός), αλλά και των αντίστοιχων σωματιδιακών (π.χ. τέφρα, άκαυστος άνθρακας κ.λπ.), ο υπολογισμός των συναλλασσόμενων ποσών θερμότητας απαιτεί τον προσδιορισμό των συντελεστών απορρόφησης σε κάθε σημείο της εστίας, κατά τρόπο εύχρηστο, ακριβή και με μειωμένη απαίτηση υπολογιστικής ισχύος. Συγκρίνοντας τις διάφορες αναπτυχθείσες μεθόδους, ως καταλληλότερη επιλογή για την προσομοίωση των ιδιοτήτων ακτινοβολίας των αερίων προϊόντων της καύσης αξιολογήθηκε το Εκθετικό Μοντέλο Ευρείας Ζώνης, ενώ για τις αντίστοιχες των σωματιδιακών προϊόντων επιλέχθηκε η εφαρμογή της θεωρίας Lorenz – Mie. Τα μοντέλα αυτά αποτέλεσαν τη βάση για την ανάπτυξη υπολογιστικών κωδίκων και την εφαρμογή των τελευταίων σε μείγματα ειδικής σύνθεσης, με προσανατολισμό σε συστήματα oxyfuel και σε συστήματα καύσης χωρίς φλόγα. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ήταν ενδεικτικά της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων (θερμοκρασία, συγκέντρωση, πίεση, μέγεθος και πυκνότητα σωματιδίων κ.λπ.) στον τρόπο με τον οποίο διαμορφώνονται οι συντελεστές ακτινοβολίας και συνεπακόλουθα στην ποσοτικοποίηση της μετάδοσης θερμότητας.

Περίληψη

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία πραγματεύεται τις βασικές αρχές της μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία και εξειδικευμένες εφαρμογές αυτής σε αέρια και σωματιδιακά προϊόντα καύσης στερεών καυσίμων.

Η Εργασία διαρθρώνεται στα παρακάτω κεφάλαια:

1. στο πρώτο κεφάλαιο αναλύονται οι θεμελιώδεις έννοιες της μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία. Ξεκινώντας από την ανάλυση της «φύσης» της θερμικής ακτινοβολίας, μελετώνται τα κύρια μεγέθη που περιγράφουν αυτή: οι ιδιότητες του μέλανος σώματος, οι θεμελιώδεις εξισώσεις Planck και Wien, οι έννοιες της απορροφητικότητας, της διαπερατότητας, της ανακλαστικότητας και της εκπεμπιμότητας και το φαινόσώμα..
2. στο δεύτερο κεφάλαιο μελετάται η τεχνολογία καύσης στερεών καυσίμων χωρίς φλόγα. Η τεχνολογία αυτή, στοχεύει στη μείωση των εκπομπών οξειδίων του αζώτου.
3. στο τρίτο κεφάλαιο πραγματοποιείται ανάλυση του φαινομένου της θερμικής ακτινοβολίας αερίων προϊόντων καύσης. Γίνεται επισκόπηση των αναπτυχθέντων μεθόδων για την πρόβλεψη του συντελεστή απορρόφησης αερίων μειγμάτων: οι μέθοδοι στενής ζώνης, οι μέθοδοι σταθμισμένων αθροισμάτων φαιών αερίων και οι μέθοδοι ευρείων ζωνών. Τελικώς για την προσομοίωση των ιδιοτήτων ακτινοβολίας αερίων επιλέγεται το Εκθετικό Μοντέλο Ευρείας Ζώνης: το μοντέλο αυτό περιγράφεται, αναλύοντας τον τρόπο δόμησής του και τη φυσική του συσχέτιση με το φαινόμενο της θερμικής ακτινοβολίας. Εξετάζονται, επίσης, οι δυνατές απλοποιήσεις του Εκθετικού Μοντέλου, με σκοπό την καλύτερη συμπεριφορά του μοντέλου ως προς την ταχύτητα των υπολογισμών.
4. στο τέταρτο κεφάλαιο γίνεται αναφορά στην έννοια της ακτινοβολίας σωματιδίων, με εμβάθυνση στα σωματιδιακά νέφη που υπάρχουν στα προϊόντα της καύσης στερεών καυσίμων. Περιγράφονται οι έννοιες της παραμέτρου μεγέθους σωματιδίων και του μιγαδικού δείκτη διάθλασης και κατόπιν τούτων εξετάζεται η θεωρία Mie για την προσομοίωση και ποσοτικοποίηση του φαινομένου της

εξασθένισης, σκέδασης και απορρόφησης ακτινοβολίας από τα σωματίδια. Αναλύοντας, τέλος, και την έννοια της συνάρτησης κατανομής μεγέθους των σωματιδίων, είναι εφικτός ο υπολογισμός των συντελεστών ακτινοβολίας των σωματιδιακών νεφών.

5. στο πέμπτο κεφάλαιο, οι θεωρίες που μελετήθηκαν κατά τα δύο προηγούμενα κεφάλαια εφαρμόζονται σε υπολογιστικούς κώδικες. Το Εκθετικό Μοντέλο μεταφέρεται σε κώδικα και επαληθεύεται βάσει βιβλιογραφικών δεδομένων και, κατόπιν τούτου, επιλέγονται κάποιες ειδικές περιπτώσεις μειγμάτων αερίων και μελετάται παραμετρικά ως προς τη συγκέντρωση, την πίεση και τη θερμοκρασία η διακύμανση του συντελεστή απορρόφησης: ειδικά για τη μελέτη αερίων μειγμάτων σε συνθήκες καύσης oxyfuel και οξείδωσης χωρίς φλόγα, γίνεται μια προκαταρκτική μελέτη των θερμοροών σε ένα μονοδιάστατο πεδίο μετάδοσης θερμότητας. Ακολούθως, χρησιμοποιείται κώδικας που εφαρμόζει τη θεωρία Mie, με σκοπό την προσομοίωση συστημάτων χαμηλής ακτινοβολίας, για όλες τις συνιστώσες εξετάζονται διάφορα περιβάλλοντα χαμηλής ακτινοβολίας, για ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών και για τυπικά μεγέθη των σωματιδίων.

Στο τελευταίο κεφάλαιο διατυπώνονται συμπεράσματα πάνω στα θέματα της Διπλωματικής Εργασίας.

POST-GRADUATE THESIS: **Innovative Methods of Radiative Heat Transfer Calculation and their Application on Furnaces**

STUDENT: **Dimitrios Tertipis**

SUPERVISOR: **Dr. Emmanuel Kakaras, Professor**
School of Mechanical Engineering, Thermal Section
National Technical University of Athens

ACADEMIC YEAR: **2006 – 2007**

Abstract

The effect of the Radiative Heat Transfer is an important parameter for solid fuel furnaces. With the participation of gaseous products (mainly carbon dioxide and water vapour) and the solid products (e.g. fly ash, incombusted coal, etc.), the exchanged heat calculation demands the definition of the absorption coefficients in any location in the furnace, in a way, which is usable, accurate and computationally efficient. Comparing the various developed methods, the most appropriate choice for calculating the radiation properties of combustion gaseous products was the Exponential Wide Band Model (EWBM), while for the properties of solid products the application of Lorenz – Mie theory was chosen. These models are the basis on which the development of computational codes and their application on special composition mixtures (directed to the oxy-fuel and the flameless oxidation systems) was built. The results of the test cases indicate the effect of various parameters (e.g. temperature, pressure, composition, size and density of particles etc.) on the way in which the radiation coefficients are formed and on the quantitation of heat transfer.

Summary

This Post-Graduate Diploma Thesis deals with the principles of Radiative Heat Transfer and its specialized applications on gaseous and solid products of solid fuel combustion.

The Thesis is structured in the following chapters:

1. in the first chapter, the fundamental principles of radiative heat transfer are analysed. Starting at the analysis of the thermal radiation “nature”, the main parameters which describe it are examined: the black body properties, the basic Planck and Wien Laws, the absorption, transmissivity, reflectivity and emissivity and finally, the gray body.
2. in the second chapter, the Flameless Oxidation technology is presented. This technology aims at the reduction of NO_x emissions.
3. in the third chapter, the phenomenon of molecular gas radiation is analysed. The developed methods of predicting the gas mixtures absorption coefficients are reviewed: narrow band models, weighted sum of gray gases models and the wide band models. Finally, for the simulation of gas radiation properties, the Exponential Wide Band Model is chosen. This model is described by analysing the way it is structured and its natural correlation to the thermal radiation phenomenon. Also, possible simplification of the EWBM is examined, in order to achieve the model best performance, as far as the computational efficiency is concerned.
4. in the fourth chapter, the particle radiation is described and further consideration is given on the particle clouds existing in the products of solid fuel combustion. The particle size parameter and the complex refractive index are described and then Lorenz – Mie theory is examined on the simulation and quantitation of the extinction, scattering and absorption of radiation by the particles. Finally, analysing the matter of the particle size distribution, the calculation of particle clouds radiation coefficients is conducted.
5. in the fifth chapter, the theories studied in the two previous chapters are applied on computational codes. The EWBM model is transformed into a code and it is verified by bibliographic data. Next, some

special cases of gas mixtures are chosen and the absorption coefficient fluctuation is studied as a function of temperature, pressure and composition. Especially, for the study of gas mixtures under oxy-fuel and flux conditions, a preliminary examination of heat fluxes in 1D field of heat transfer is carried out. Consequently, a code applying the Lorenz – Mie theory is used, in order to simulate low radiation systems; various environments of low radiation are examined for all components, for a wide range of temperature and typical particle diameters.

The last chapter deals with a conclusion reached in the whole thesis.

1^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΘΕΜΕΛΙΩΔΕΙΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΤΗΣ ΜΕΤΑΔΟΣΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑ

§ 1.1: Φύση και σημασία της θερμικής ακτινοβολίας

§ 1.1.1: Εισαγωγή

Η θερμική ακτινοβολία είναι μιας μορφής ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, που εκπέμπεται από κάθε σώμα με θερμοκρασία μεγαλύτερη του απολύτου μηδενός. Αιτία της θερμικής ακτινοβολίας είναι η μετατροπή της θερμότητας που παράγεται κατά τη διέγερση των σωματιδίων των ατόμων σε ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.

Θεωρείται ένα σώμα απόλυτης θερμοκρασίας T_l , περιβαλλόμενο από ένα επαρκώς μεγαλύτερο σώμα απόλυτης θερμοκρασίας T_g , που είναι μικρότερη της T_l . Δεχόμενοι ότι ο χώρος μεταξύ των δύο σωμάτων είναι κενός, ώστε να αποκλείεται η εμφάνιση φαινομένων μετάδοσης θερμότητας με αγωγή ή συναγωγή, παρατηρείται μεταφορά θερμότητας από το θερμό στο ψυχρότερο σώμα, που οφείλεται στο φαινόμενο της θερμικής ακτινοβολίας· μολονότι αμφότερα τα σώματα εκπέμπουν και απορροφούν ακτινοβολία, εντούτοις μακροσκοπικά παρατηρείται ψύξη του αρχικώς θερμού σώματος και θέρμανση του αρχικώς ψυχρότερου σώματος, πράγμα που καταδεικνύει ότι το θερμότερο σώμα εκπέμπει υψηλότερα επίπεδα θερμικής ακτινοβολίας από το ψυχρό ^[1].

§ 1.1.2: Ερμηνεία του φαινομένου της ακτινοβολίας: κυματική και κβαντική θεωρία

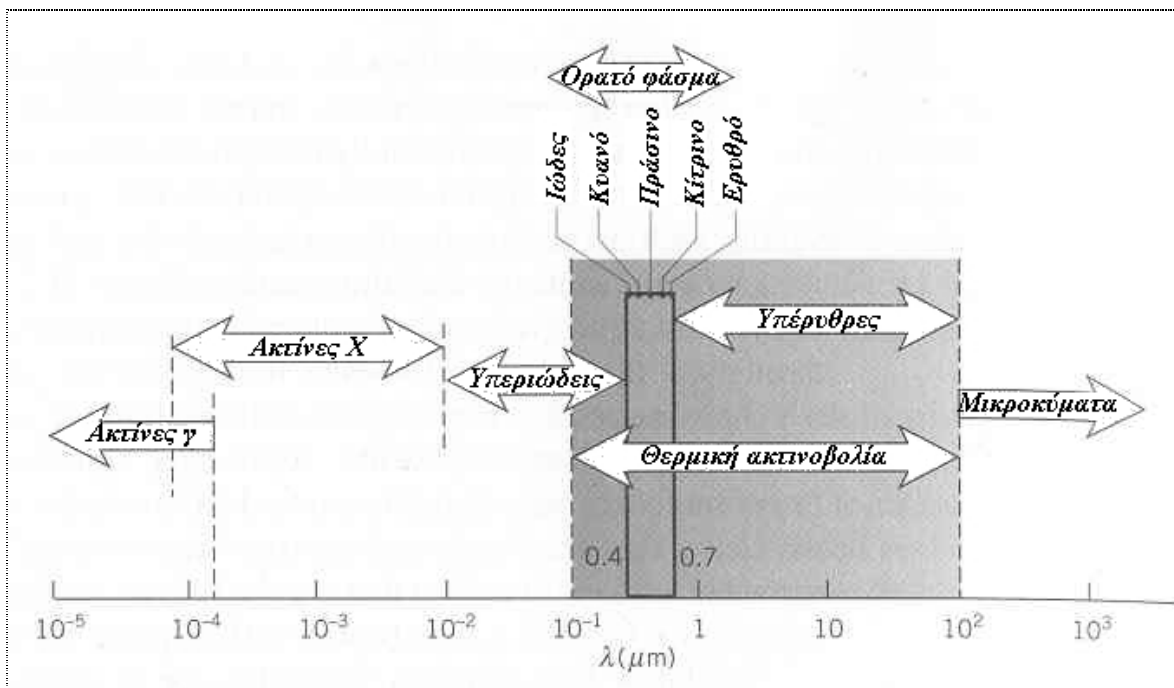
Αν και η ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Maxwell, που αποδίδει τη μετάδοση της θερμότητας σε ηλεκτρομαγνητικά κύματα, χρησιμοποιείται για τη μελέτη των ιδιοτήτων της θερμικής ακτινοβολίας των σωμάτων, εντούτοις για την ποσοτικοποίηση των φαινομένων και συνεπακόλουθα για τον υπολογισμό του μεγέθους της ακτινοβολούμενης ενέργειας ενός σώματος χρησιμοποιείται η θεωρία του Max Planck, σύμφωνα με την οποία η μετάδοση της θερμότητας οφείλεται στην ύπαρξη κβάντα φωτός¹.

Η κλασσική θεώρηση της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας και ύλης οδηγεί συνήθως στη διατύπωση εξισώσεων με αξιοσημείωτη ομοιότητα προς τα αποτελέσματα της κβαντομηχανικής. Με μερικές εξαιρέσεις, που αφορούν στην ακτινοβολία των αερίων, η θερμική ακτινοβολία δύναται να αντιμετωπιστεί ως ένα φαινόμενο βασισμένο στην κλασσική προσέγγιση της μεταφοράς της ενέργειας με ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Οι εξαιρέσεις, ωστόσο, περιλαμβάνουν μερικά από τα πιο σημαντικά φαινόμενα, κοινά στη μελέτη της μετάδοσης με

¹ Για την ανάπτυξη της κβαντικής θεωρίας, ο Max Planck τιμήθηκε κατά το έτος 1918 με το βραβείο Nobel Φυσικής, μολονότι η εργασία του είχε πρωτοδημοσιευτεί το 1901.

ακτινοβολία, όπως η φασματική κατανομή της εκπεμπόμενης ενέργειας ενός σώματος και οι ιδιότητες ακτινοβολίας των αερίων· τα φαινόμενα αυτά μπορούν να εξηγηθούν υπό το πρίσμα των κβαντικών φαινομένων, σύμφωνα με τα οποία η ενέργεια μεταφέρεται από διακριτά σωματίδια, τα κβάντα φωτός. Η πραγματική φύση της ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας (αν είναι ηλεκτρομαγνητική ή κβαντική) δεν είναι γνωστή, αλλά δεν υπεισέρχεται στους τελικούς υπολογισμούς τεχνικών θεμάτων. Σημειώνεται ότι η κυματική θεωρία παρουσιάζει τη μεγαλύτερη χρησιμότητα σε τεχνικούς υπολογισμούς και η χρήση της παράγει, εν γένει, τις ίδιες εξισώσεις με την κβαντική θεωρία [2].

§ 1.1.3: Ηλεκτρομαγνητικό φάσμα



Το **ηλεκτρομαγνητικό φάσμα**, το οποίο σχηματικά απεικονίζεται στο παραπάνω σκαρίφημα, εκφράζει το σύνολο της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας για μήκος κύματος από $\lambda = 0$ έως $\lambda = \infty$ και αποτελείται από νοητές περιοχές, τις **ζώνες**, οι οποίες διακρίνονται μεταξύ τους από τις μεθόδους που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή και την ανίχνευση της ακτινοβολίας (δεν υπάρχει θεμελιώδης διαφορά στην ακτινοβολία των διαφόρων ζωνών του φάσματος). Παρακάτω παρουσιάζονται οι σημαντικότερες ζώνες [1]:

- ζώνη ορατής ακτινοβολίας: εκτείνεται στην περιοχή $0.4\mu m \div 0.7\mu m$ και γίνεται αντιληπτή από το ανθρώπινο μάτι
- ζώνη υπεριώδους ακτινοβολίας: εκτείνεται στην περιοχή $0.01\mu m \div 0.4\mu m$
- ζώνη εγγύς υπέρυθρης ακτινοβολίας: εκτείνεται στην περιοχή $0.7\mu m \div 25\mu m$
- ζώνη απομακρυσμένης υπέρυθρης ακτινοβολίας: εκτείνεται στην περιοχή $25\mu m \div 1000\mu m$
- ζώνη τηλεοπτικών, ραδιοφωνικών και σημάτων radar: εκτείνεται στην περιοχή $1000\mu m \div 10^{10}\mu m$

Από άποψης συμμετοχής στο φαινόμενο της μετάδοσης θερμότητας, το μεγαλύτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι ζώνες της περιοχής $0.1\mu m \div 100\mu m$ · στο υποσύνολο αυτής $0.1\mu m \div 3\mu m$

εκπέμπεται η ηλιακή ακτινοβολία. Διαπιστώνεται από τα παραπάνω ότι η πλέον σημαντική μορφή ακτινοβολίας από άποψη μετάδοσης θερμότητας είναι η υπέρυθη, της οποίας η ύπαρξη ανιχνεύεται από το θερμικό αποτέλεσμά της (μιας και δεν είναι ορατή).

Υπενθυμίζουμε τη βασική σχέση που συνδέει την ταχύτητα διάδοσης c , το μήκος λ και τη συχνότητα f ενός κύματος:

$$c = \lambda \cdot f \quad \{1.1\}$$

Η ταχύτητα διάδοσης του κύματος συνδέεται με την ταχύτητα του φωτός στο κενό c_0 (ήτοι, τη μέγιστη δυνατή ταχύτητα του κύματος) μέσω του δείκτη διάθλασης n :

$$n = \frac{c_0}{c} \quad \{1.2\}$$

Η τιμή της ταχύτητας του φωτός στο κενό είναι $c_0 = 2.998 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$, ο δε δείκτης διάθλασης είναι για το κενό εξ' ορισμού ίσος με τη μονάδα. Σε επόμενο κεφάλαιο θα αναλυθεί η έννοια του κυματαριθμού, με τον οποίο θα αντικατασταθεί το μήκος κύματος.

§ 1.1.4: Επίδραση και σημασία της θερμικής ακτινοβολίας στα φαινόμενα μετάδοσης θερμότητας

Ένας από τους παράγοντες που ερμηνεύουν τη σημασία της θερμικής ακτινοβολίας σε διάφορες εφαρμογές είναι ο τρόπος κατά τον οποίο η εκπομπή ακτινοβολίας εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Στις περιπτώσεις αγωγής και συναγωγής, η μεταφορά της ενέργειας μεταξύ δύο σημείων εξαρτάται από τη θερμοκρασιακή διαφορά αυτών. Αντίθετα, η μεταφερόμενη με ακτινοβολία θερμότητα εξαρτάται από τη διαφορά των τετάρτων δυνάμεων των απολύτων θερμοκρασιών των σημείων, πράγμα που την καθιστά ισχυρό φορέα μετάδοσης θερμότητας και αναιρεί οποιαδήποτε ιδέα απαλοιφής της από τεχνικούς υπολογισμούς: αντίθετα, σε περιβάλλον υψηλών θερμοκρασιών, η επίδραση της θερμικής ακτινοβολίας μπορεί να είναι τέτοιας τάξης μεγέθους, ώστε να καθιστά αμελητέα τη συμμετοχή της αγωγής και της συναγωγής στη μεταφορά της θερμότητας ^[1].

Ένα δεύτερο χαρακτηριστικό γνώρισμα της θερμικής ακτινοβολίας είναι η μη αναγκαιότητα ύπαρξης μέσου μεταξύ των δύο σημείων διαφορετικής θερμοκρασίας, ώστε να πραγματοποιηθεί η συναλλαγή της θερμότητας και η διέλευση της ακτινοβολίας από το κενό είναι η μόνη που δε συνοδεύεται από απώλειες. Η ιδιότητα αυτή έρχεται σε ευθεία αντίθεση με την αγωγή και τη συναγωγή, μιας και σε αυτές τις περιπτώσεις ένα φυσικό μέσο πρέπει να είναι παρόν για να μεταφέρει την ενέργεια.

§1.2: Το μέλαν σώμα – ιδιότητες και συναρτήσεις ακτινοβολίας

§ 1.2.1: Υλοποίηση και βασικές ιδιότητες του μέλανος σώματος

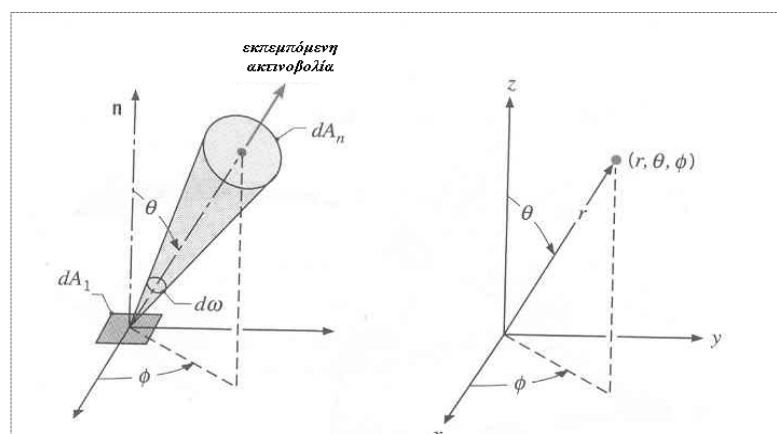
Ορίζεται ως **μέλαν** το σώμα, το οποίο σε συγκεκριμένη θερμοκρασία T απορροφά όλη την προσπίπτουσα θερμική ακτινοβολία για όλα τα μήκη κύματος. Λόγω του ότι στα μέλανα σώματα δεν παρουσιάζεται ανάκλαση προς άλλες κατευθύνσεις ή διαβίβαση ενέργειας μέσω αυτών (οι έννοιες αυτές θα εξεταστούν αναλυτικά σε επόμενη παράγραφο), αυτά για δεδομένη θερμοκρασία και μήκος κύματος εκπέμπουν το μέγιστο ποσό θερμικής ενέργειας σε σχέση με οποιοδήποτε άλλο σώμα ομοιόμορφα προς όλες τις κατευθύνσεις του χώρου. Το μέλαν σώμα μοντελοποιείται ως ένας κλειστός χώρος με μια μόνο οπή: αν εισέλθει στο χώρο από την οπή ακτινοβολία, αυτή εγκλωβίζεται και δε μπορεί να διαφύγει. Σε αντίθεση με το μέλαν σώμα, το **κατοπτρικό** σώμα δε μπορεί να απορροφήσει την προσπίπτουσα ακτινοβολία και τελικώς την ανακλά.

Πρέπει να σημειωθεί ότι το μέλαν σώμα συνιστά μια εξιδανικευμένη θεώρηση σώματος, της οποίας η χρησιμότητα έγκειται στη σύγκριση της εκπομπής και της απορρόφησης ακτινοβολίας πραγματικών σωμάτων. Μια άλλη ιδιαιτερότητα του μέλανος σώματος είναι το γεγονός ότι δεν πρόκειται για ένα σώμα μαύρου χρώματος (μάλιστα, η ανθρώπινη όραση αντιλαμβάνεται το μέλαν σώμα μόνο στην ορατή περιοχή του φάσματος): χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτής της ιδιαιτερότητας είναι ο πάγος: μολοντί ο οφθαλμός τον αντιλαμβάνεται ως σώμα λευκό και φωτεινό, σε περιβάλλον ακτινοβολίας μεγάλου μήκους κύματος συμπεριφέρεται ως μέλαν σώμα, απορροφώντας όλη την ακτινοβολία. Η απόκλιση της συμπεριφοράς ενός πραγματικού σώματος από ένα μέλαν σώμα ποσοτικοποιείται με τον ορισμό κατάλληλων μεγεθών: ορίζοντας ένα μέγεθος X για το μέλαν σώμα (που είναι κατά βάση εύκολο να υπολογιστεί), υπολογίζεται ακολούθως ο κατάλληλος συντελεστής συσχέτισης (π.χ. η εκπεμπιμότητα, που ισούται με το κλάσμα της εκπεμπόμενης ενέργειας ενός πραγματικού σώματος προς την αντίστοιχη ενέργεια του μέλανος σώματος στην ίδια θερμοκρασία) και τελικά μπορεί το μέγεθος X να αναχθεί στο πραγματικό σώμα.

Στα επόμενα κεφάλαια, οι ιδιότητες του μέλανος σώματος θα χρησιμοποιηθούν με σκοπό την εφαρμογή της θεωρίας Mie για τον υπολογισμό των συντελεστών απορρόφησης, απόσβεσης και σκέδασης ακτινοβολίας των στερεών προϊόντων της καύσης στερεών καυσίμων.

§ 1.2.2: Στερεές γωνίες

Για την εξέταση των ιδιοτήτων του μέλανος σώματος, είναι αναγκαίος ο ορισμός της **στερεάς γωνίας**. Έστω Ω η κατεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας και O το σημείο αναφοράς (π.χ., το σημείο τομής των αξόνων του τρισδιάστατου χώρου), όπως φαίνεται στο διπλανό σχήμα [3].



Θεωρώντας ότι μια επιφάνεια dA_1 εκπέμπει ακτινοβολία και ότι ένας παρατηρητής βλέπει την επιφάνεια dA_1 από μια άλλη επιφάνεια, έστω την dA_n , ορίζεται ως στερεά γωνία $d\omega$ η γωνία εκείνη, υπό την οποία η dA_n βλέπει την κάθετη προς αυτήν που διέρχεται από την dA_1 [4]. Η στερεά γωνία ορίζεται από την εξίσωση:

$$d\omega = \frac{dA_n}{r^2} \quad \{1.3\}$$

και μονάδα μέτρησης αυτής είναι το στερακτίνο (sr). Δεδομένου του ορισμού της στερεάς γωνίας :

✓ η συνολική στερεά γωνία μιας σφαίρας εκφράζεται ως $\omega_{sph} = \frac{A_{sph}}{r^2} = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^2}{r^2} = 4 \cdot \pi sr$.

✓ η συνολική στερεά γωνία ενός ημισφαιρίου από το κέντρο του είναι

$$\omega_{hem} = \frac{A_{sem}}{r^2} = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^2}{2 \cdot r^2} = 2 \cdot \pi sr.$$

§ 1.2.3: Φασματική κατανομή ακτινοβολίας μέλανος σώματος

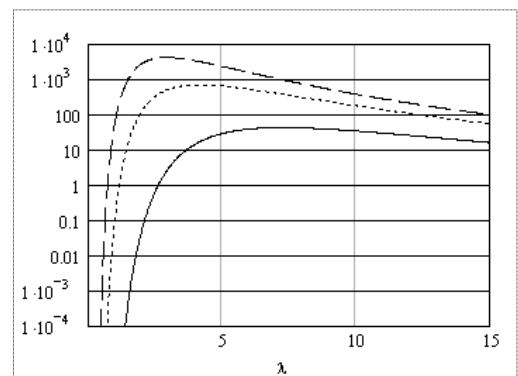
Η ισχύς της ακτινοβολούμενης ενέργειας από μέλαν σώμα είναι διαφορετική για τις διάφορες τιμές της θερμοκρασίας και του μήκους κύματος. Η φασματική κατανομή της ακτινοβολούμενης ισχύος ενός μέλανος σώματος σε ημισφαιρικό κενό χώρο δίδεται από τη σχέση

$$I_{b\lambda}(T) = \frac{2 \cdot h \cdot c_0^2}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{h \cdot c_0}{\lambda \cdot k \cdot T}} - 1 \right)} = \frac{\frac{C_1}{\pi}}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda \cdot T}} - 1 \right)} \left[\frac{W}{m^2 \cdot \mu m \cdot sr} \right] \quad \{1.4\}$$

που αποτελεί την έκφραση της **συνάρτησης Planck** [4], όπου:

- ❖ ο δείκτης «b» αντιστοιχεί στο μέλαν σώμα και ο δείκτης «λ» ορίζει ότι η εξίσωση αναφέρεται σε συγκεκριμένο μήκος κύματος.
- ❖ h είναι η σταθερά Planck, ίση προς $h = 6.63 \cdot 10^{-34} J \cdot s$
- ❖ k είναι η σταθερά Boltzmann, ίση προς $k = 1.381 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$.
- ❖ $C_1 = 2 \cdot \pi \cdot h \cdot c_0^2 = 3.742 \cdot 10^8 \frac{W}{m^2} \cdot \mu m^4$
- ❖ $C_2 = \frac{h \cdot c_0}{k} = 1.439 \cdot 10^4 \mu m \cdot K$

Στο διπλανό γράφημα απεικονίζεται η συσχέτιση της ακτινοβολίας μέλανος σώματος με το μήκος κύματος της ακτινοβολίας για θερμοκρασίες 400K (αντιστοιχεί στη συνεχή καμπύλη), 700K (αντιστοιχεί



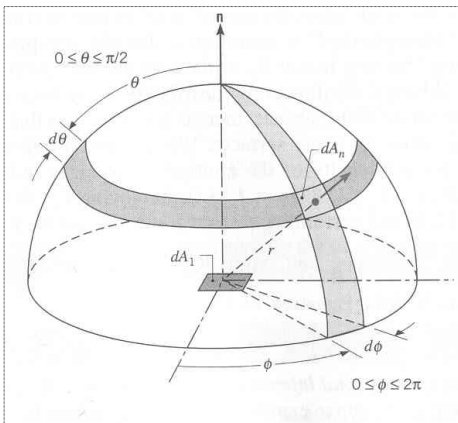
στην στικτή καμπύλη) και $1,000K$ (αντιστοιχεί στη διακεκομμένη καμπύλη). Από το γράφημα δύνανται να διατυπωθούν μερικά αρχικά συμπεράσματα για τη συμπεριφορά της συνάρτησης Planck:

- εμφανίζεται σαφής εξάρτηση της έντασης της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας με το μήκος κύματος
- αυξανόμενης της θερμοκρασίας, σημειώνεται αύξηση της εκπομπής ακτινοβολίας για κάθε τιμή του μήκους κύματος
- αυξανόμενης της θερμοκρασίας, γίνεται περισσότερο εμφανής η ύπαρξη «μεγίστου» προς χαμηλότερα μήκη κύματος.

Η ανά μονάδα στερεάς γωνίας και επιφάνειας κάθετης προς την κατεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας ακτινοβολουμένη ισχύς μέλανος σώματος για όλα τα μήκη κύματος, δίνεται ως συνάρτηση της θερμοκρασίας από την ακόλουθη απλοποιημένη ολοκληρωτική σχέση:

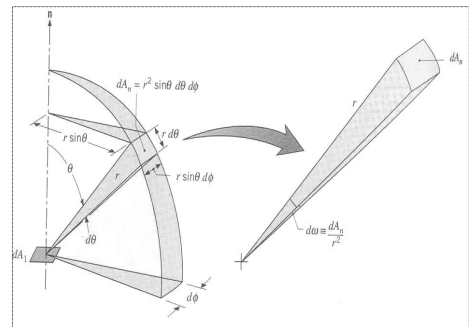
$$I_b(T) = \int_0^{\infty} I_{bl}(T) d\lambda \left[\frac{W}{m^2 \cdot sr} \right] \quad \{1.5\}$$

Σημειώνεται ότι για το μέλαν σώμα, η τιμή της $I_b(T)$ είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης [4].



Ιδιαίτερο πρακτικό ενδιαφέρον παρουσιάζει ο υπολογισμός της ενέργειας που ακτινοβολείται ανά μονάδα επιφάνειας μέλανος σώματος, του οποίου η απόλυτη θερμοκρασία είναι T . Υποτίθεται επιφάνεια dA_n , όπως στα σχήματα της παρούσας παραγράφου. Από την επιφάνεια αυτή, η συμμετοχή στην εκπομπή ακτινοβολίας στο κάθετο προς την επιφάνεια επίπεδο, είναι $I_{bl}(T) \cdot dA \cdot \cos\theta \cdot d\omega$

(οι γωνίες ω , φ και θ αναφέρονται στα σχήματα) και εκφράζει την εκπεμπόμενη ενέργεια από την επιφάνεια dA_n , μέσα στη στερεά γωνία $d\omega$ ανά μονάδα μήκους κύματος· πρόκειται για τη φασματική κατανομή ισχύος. Η προαναφερθείσα σχέση οδηγεί στην εύρεση της εκπεμπόμενης ενέργειας στον ημισφαιρικό χώρο, και νοουμένου ότι $d\omega = \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi$, με διπλή ολοκλήρωση για $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ και $0 \leq \theta \leq \pi$ προκύπτει :

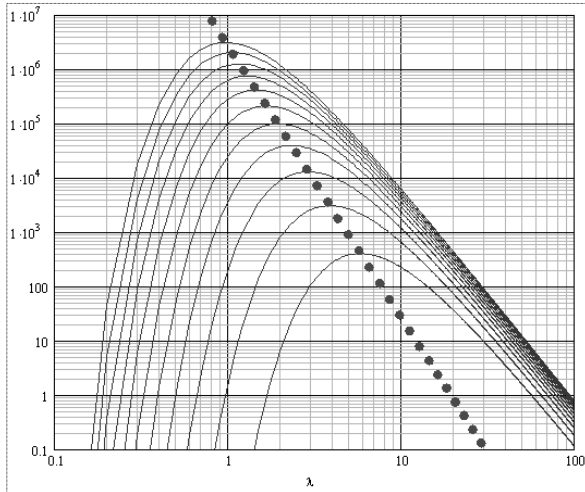


$$E_{bl}(T) = I_{bl}(T) \cdot \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} (\cos\theta \cdot \sin\theta) d\theta d\varphi = \pi \cdot I_{bl}(T) \left[\frac{W}{m^2 \cdot \mu m} \right] \quad \{1.6\}$$

Η παραπάνω έκφραση περιγράφει την ακτινοβολουμένη ενέργεια μέλανος σώματος με απόλυτη θερμοκρασία T ανά μονάδα επιφάνειας και μήκους κύματος προς όλες τις κατευθύνσεις του ημισφαιρικού χώρου, ή, με διαφορετική διατύπωση, τη φασματική πυκνότητα παροχής θερμότητας που ακτινοβολείται από το μέλαν σώμα. Για την πλήρη μορφή της παραπάνω εξίσωσης, τη συνδυάζουμε με την {1.4} και τελικώς προκύπτει [4]:

$$E_{b\lambda}(T) = \pi \cdot I_{b\lambda}(T) = \frac{C_1}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1 \right)} \left[\frac{W}{m^2 \cdot \mu m} \right] \quad \{1.7\}$$

§ 1.2.4: Νόμος μετατοπίσεων του Wien



Στο διπλανό σχήμα απεικονίζεται η φασματική κατανομή ενέργειας μέλανος σώματος συναρτήσει του μήκους κύματος για διάφορες τιμές της θερμοκρασίας (οι «κατώτερες» καμπύλες αντιστοιχούν σε χαμηλότερες θερμοκρασίες. Η χρήση του λογαριθμικού διαγράμματος καθιστά ευδιάκριτη την ύπαρξη μιας τιμής του μήκους κύματος, η οποία, για συγκεκριμένη θερμοκρασία, οδηγεί στη μεγιστοποίηση της ακτινοβολούμενης ενέργειας· πιο συγκεκριμένα, η αύξηση της θερμοκρασίας μετατοπίζει τις μέγιστες τιμές της

ακτινοβολούμενης ενέργειας προς μικρότερες τιμές μηκών κύματος. Η ακριβής συσχέτιση μεταξύ θερμοκρασίας και μήκους κύματος της υψηλότερης ακτινοβολίας είναι ο **Νόμος Μετατοπίσεων του Wien**², του οποίου η μαθηματική μορφή περιγράφεται από την εξίσωση

$$\lambda \cdot T \Big|_{\max} = 2'898 \mu m \cdot K \quad \{1.8\}$$

Δεδομένης της θερμοκρασίας, η μέγιστη ενέργεια ακτινοβολίας θα εμφανιστεί στο μήκος κύματος $\lambda = \frac{2'898}{T} [\mu m]$. Σε επόμενα κεφάλαια θα διαπιστωθεί τη χρησιμότητα του νόμου μετατοπίσεων του Wien, κατά τη διαδικασία προκαταρκτικού εντοπισμού των ισχυρών ζωνών εκπομπής και απορρόφησης των αερίων σε κάθε τιμή της θερμοκρασίας^[1].

§ 1.2.5: Νόμος των Stefan - Boltzmann

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η ολικά ακτινοβολούμενη ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας μέλανος σώματος με απόλυτη θερμοκρασία T για όλα τα μήκη κύματος ανά μονάδα επιφάνειας και χρόνου^[4]. Η σχέση που συνδέει την ενέργεια με τη θερμοκρασία είναι απλής μαθηματικής μορφής, μολονότι αποτελεί απόρροια μιας περίπλοκης ολοκλήρωσης:

$$E_b(T) = \int_{\lambda=0}^{\lambda=\infty} E_{b\lambda}(T) d\lambda = \int_{\lambda=0}^{\lambda=\infty} \frac{C_1}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1 \right)} d\lambda = \sigma \cdot T^4 \quad \{1.9\}$$

² Ο νόμος αυτός φέρει το όνομα του Γερμανού φυσικού Wilhelm Wien, ο οποίος, για την διατύπωση του νόμου μετατοπίσεων, τιμήθηκε με το βραβείο Nobel Φυσικής κατά το έτος 1911 – δηλαδή, νωρίτερα από τον Max Planck.

όπου σ είναι η **σταθερά Stefan – Boltzmann**, ίση προς $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 \cdot K^4}$. Για τον ημισφαιρικό χώρο ισχύει, βάσει της εξίσωσης {1.6}, η συνεπαγωγή

$$E_b(T) = \pi \cdot I_b(T) \Leftrightarrow I_b(T) = \frac{1}{\pi} \cdot \sigma \cdot T^4 \left[\frac{W}{m^2 \cdot sr} \right] \quad \{1.10\}$$

§ 1.2.6: Εκπομπή ζώνης και συναρτήσεις ακτινοβολίας μέλανος σώματος

Για τον υπολογισμό της εκπεμπόμενης ισχύος ανά μονάδα επιφάνειας του μέλανος σώματος πρακτικό ενδιαφέρον παρουσιάζει η γνώση της εκπεμπομένης ακτινοβολίας σε μια συγκεκριμένη περιοχή του φάσματος, έστω μεταξύ των μηκών κύματος λ_1 και λ_2 . Ζητούμενο είναι η εύρεση μιας απλής μεθοδολογίας που θα καθιστά μη αναγκαίο τον υπολογισμό του

ολοκληρώματος $\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{C_1}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1 \right)} d\lambda$, κάτι που επιτυγχάνεται με την εισαγωγή της έννοιας της

εκπομπής ζώνης μέλανος σώματος. Η μεθοδολογία αυτή βασίζεται στην αναγωγή του ολοκληρώματος σε δύο άλλα ολοκληρώματα, κάτω όριο των οποίων θα είναι το $\lambda = 0$.

Για το σκοπό αυτό, ορίζεται η **συνάρτηση ακτινοβολίας μέλανος σώματος** $F_{(0 \rightarrow \lambda)}(T)$, ίση με

$$F_{(0 \rightarrow \lambda)}(T) = \frac{\int_0^{\lambda} E_{b\lambda}(T) d\lambda}{\int_0^{\infty} E_{b\lambda}(T) d\lambda} = \frac{\int_0^{\lambda} E_{b\lambda}(T) d\lambda}{\sigma \cdot T^4} \quad \{1.11\}$$

Επομένως, αν ζητείται η ενέργεια $E_{b(\lambda_1 \rightarrow \lambda_2)}(T)$, η εισαγωγή των συναρτήσεων ακτινοβολίας οδηγεί στη μορφή:

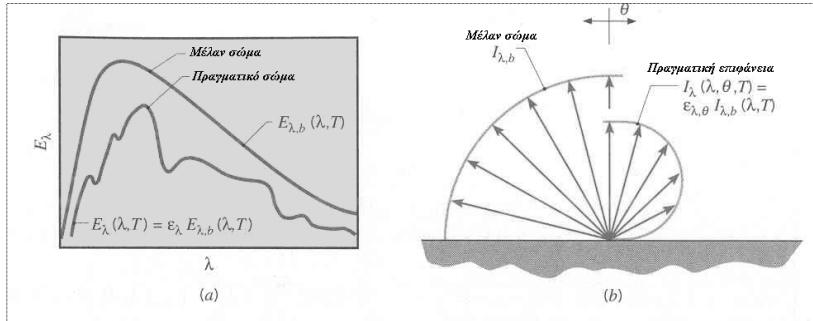
$$E_{b(\lambda_1 \rightarrow \lambda_2)}(T) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E_{b\lambda}(T) d\lambda = \int_0^{\lambda_2} E_{b\lambda}(T) d\lambda - \int_0^{\lambda_1} E_{b\lambda}(T) d\lambda = (F_{(0 \rightarrow \lambda_2)} - F_{(0 \rightarrow \lambda_1)}) \cdot \sigma \cdot T^4 \quad \{1.12\}$$

Οι τιμές των συναρτήσεων ακτινοβολίας $F_{(0 \rightarrow \lambda)}(T)$ δίνονται σε πίνακες ^[4], οπότε ο υπολογισμός της ενέργειας $E_{b(\lambda_1 \rightarrow \lambda_2)}(T)$ ανάγεται στην επίλυση μιας απλής αλγεβρικής σχέσης. Οι πίνακες αυτοί είναι εύκολο να ενσωματωθούν σε υπολογιστικούς κώδικες, επιτρέποντας ταχύτερη εκτέλεση του υπολογισμού της εκπεμπόμενης ενέργειας (σε σχέση με την ακριβή ολοκληρωτική σχέση).

§1.3.: Στοιχεία ακτινοβολίας πραγματικών σωμάτων

§ 1.3.1: Φαινόμενα εκπομπής ακτινοβολίας

Στην παράγραφο §1.2 εξηγήθηκε η χρησιμότητα του μέλανος σώματος, ως μέγεθος



αναφοράς για τα πραγματικά σώματα· εν γένει, η φασματική ακτινοβολία που εκπέμπεται από ένα πραγματικό σώμα διαφέρει κατά τρόπο μη ομοιόμορφο από την κατανομή που ορίζει η θεωρία του Planck. Επιπροσθέτως, η

χωρική κατανομή της ακτινοβολίας διαφέρει από την ομοιόμορφη εκπομπή που παρουσιάζει το μέλαν σώμα.

Ορίζεται η **φασματική και κατευθυντική εκπεμπιμότητα** $\varepsilon_{\lambda,\theta}(\lambda, \theta, \varphi, T)$ μιας επιφάνειας σε θερμοκρασία T ως ο λόγος της ακτινοβολίας που εκπέμπεται σε μήκος κύματος λ προς τις κατευθύνσεις που ορίζουν οι γωνίες φ και θ προς την ένταση της ακτινοβολίας μέλανος σώματος για το ίδιο μήκος κύματος και την ίδια θερμοκρασία:

$$\varepsilon_{\lambda,\theta}(\lambda, \theta, \varphi, T) = \frac{I_{\lambda}(\lambda, \theta, \varphi, T)}{I_{b\lambda}(\lambda, T)} \quad \{1.13\}$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να απλοποιηθεί, με απαλοιφή των όρων κατεύθυνσης, κάτι που σε τεχνικές εφαρμογές δεν επηρεάζει την ακρίβεια των υπολογισμών ^[1]. Έτσι, η **φασματική ημισφαιρική εκπεμπιμότητα** προκύπτει από την παρακάτω απλή σχέση

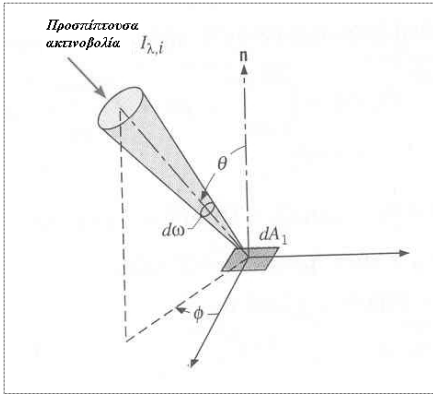
$$\varepsilon_{\lambda}(\lambda, T) = \frac{E_{\lambda}(\lambda, T)}{E_{b\lambda}(\lambda, T)} \quad \{1.14\}$$

Ολοκληρώνοντας τους όρους του κλάσματος στο δεύτερο μέλος της παραπάνω εξίσωσης, προκύπτει η **ολική ημισφαιρική εκπεμπιμότητα**:

$$\varepsilon(T) = \frac{E(T)}{E_b(T)} = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon_{\lambda}(\lambda, T) \cdot E_{b\lambda}(\lambda, T) d\lambda}{\sigma \cdot T^4} \quad \{1.15\}$$

Πρέπει να τονιστεί ιδιαίτερα ότι σε πραγματικά σώματα δεν ισχύει η σχέση $E_{\lambda}(T) = \pi \cdot I_{\lambda}(T)$.

§ 1.3.2: Ακτινοβόληση



Για τον ορισμό των υπολοίπων ιδιοτήτων ακτινοβολίας των πραγματικών σωμάτων, κρίνεται απαραίτητη η περιγραφή της έννοιας της **ακτινοβόλησης**. Η φασματική ακτινοβόληση $G_\lambda(\lambda)$, μετρούμενη σε $\frac{W}{m^2 \cdot \mu m}$, εκφράζει το ρυθμό κατά τον οποίο ακτινοβολία με μήκος κύματος λ προσπίπτει σε ένα επίπεδο ανά μονάδα επιφανείας και μήκους κύματος [1]:

$$G_\lambda(\lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I_{\lambda,i}(\lambda, \varphi, \theta) \cdot \cos\theta \cdot \sin\theta d\theta d\varphi \quad \{1.16\}$$

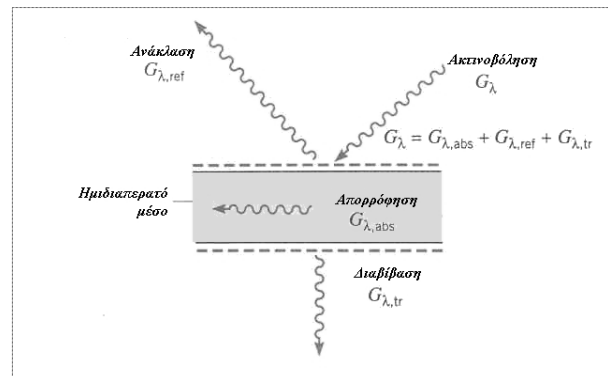
όπου ο παράγοντας $\sin\theta d\theta d\varphi$ εισάγει τη στερεά γωνία στο ολοκλήρωμα. Για κάθε κατεύθυνση και σε όλο το φάσμα μηκών κύματος, η **ολική ακτινοβόληση** δίνεται από τη σχέση

$$G = \int_0^\infty G_\lambda(\lambda) d\lambda \quad \{1.17\}$$

Στην ειδική περίπτωση που η προσπίπτουσα ακτινοβολία είναι διάχυτη, άρα και ανεξάρτητη των γωνιών θ και φ , προκύπτει ότι

$$\begin{cases} G_\lambda(\lambda) = \pi \cdot I_{\lambda,i}(\lambda) \\ G = \pi \cdot I_i \end{cases} \quad \{1.18\}$$

Θεωρείται μία επιφάνεια, όπως αυτή του διπλανού σχήματος, η οποία ακτινοβολείται με ρυθμό G_λ . Χαρακτηριστικό γνώρισμα της επιφάνειας αυτής είναι η ημιδιαπερατότητά της, η οποία επιτρέπει τη διαβίβαση ακτινοβολίας κατάντι της πρόσπτωσης. Αν η επιφάνεια ανακλά ακτινοβολία $G_{\lambda,ref}$, απορροφά $G_{\lambda,abs}$ και διαβιβάζει $G_{\lambda,tr}$, η εφαρμογή της αρχής διατήρησης της ενέργειας οδηγεί στην σχέση



$$G_\lambda = G_{\lambda,ref} + G_{\lambda,abs} + G_{\lambda,tr} \quad \{1.19\}$$

Στην πράξη είναι γενικά σύνθετος ο υπολογισμός των ανωτέρω συνιστωσών, μιας και υπείσρχονται παράμετροι όπως οι συνθήκες της άνω και της κάτω επιφάνειας, η ομογένεια (ή όχι) και το πάχος του μέσου κ.α.. Η επίδραση τέτοιων παραμέτρων γίνεται πολύ περισσότερο αισθητή, όταν συμπεριληφθούν και τα ογκομετρικά φαινόμενα του μέσου (πράγμα που, όπως θα δούμε σε επόμενο κεφάλαιο, συμβαίνει στα πολικά μόρια αερίων). Ωστόσο, σε τεχνικές

εφαρμογές μπορούν να ληφθούν υπ' όψιν σημαντικές απλοποιήσεις, που έγκεινται στην παραδοχή αδιαφανούς μέσου· στην περίπτωση αυτή, μηδενίζεται ο όρος της διαβιβαζόμενης ακτινοβολίας και οι εναπομείναντες όροι της απορρόφησης και της ανάκλασης δύνανται να εκληφθούν ως συμμετέχοντες σε φαινόμενο επιφανειακό.

§ 1.3.3: Φαινόμενα απορρόφησης ακτινοβολίας

Η *απορροφητικότητα* είναι μια ιδιότητα που καθορίζει το κλάσμα της ακτινοβολίας που απορροφάται από μια επιφάνεια. Ο καθορισμός της ιδιότητας αυτής είναι σύνθετος διότι, όπως συμβαίνει και με την εκπεμπιμότητα, το φαινόμενο της απορρόφησης παρουσιάζει φασματική και κατευθυντική εξάρτηση. Η *φασματική και κατευθυντική απορροφητικότητα* ορίζεται ως το κλάσμα της φασματικής έντασης που προσπίπτει από την κατεύθυνση θ και φ και που τελικά απορροφάται από την επιφάνεια, με παραδοχή αμελητέας επίδρασης της θερμοκρασίας, ήτοι ^[3]:

$$\alpha_{\lambda,\theta}(\lambda, \theta, \varphi) = \frac{I_{\lambda,i,abs}(\lambda, \theta, \varphi)}{I_{\lambda,i}(\lambda, \theta, \varphi)} \quad \{1.20\}$$

Με απαλοιφή των όρων κατεύθυνσης, κάτι που δεν επιδρά ιδιαίτερα στα αποτελέσματα τεχνικών υπολογισμών, η παραπάνω σχέση απλοποιείται σημαντικά, μιας και τελικά η μόνη εξάρτηση είναι του μήκους κύματος, δίνοντας τη *φασματική ημισφαιρική απορροφητικότητα*:

$$\alpha_{\lambda}(\lambda) = \frac{G_{\lambda,abs}(\lambda)}{G_{\lambda}(\lambda)} \quad \{1.21\}$$

Ολοκλήρωση της παραπάνω σχέσης για όλο το φάσμα μηκών κύματος, δίνει ως αποτέλεσμα την *ολική ημισφαιρική απορροφητικότητα*:

$$\alpha = \frac{\int_0^{\infty} a_{\lambda}(\lambda) \cdot G_{\lambda}(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} G_{\lambda}(\lambda) d\lambda} = \frac{G_{abs}}{G} \quad \{1.22\}$$

§ 1.3.4: Φαινόμενα ανάκλασης ακτινοβολίας

Η *ανακλαστικότητα* ως ιδιότητα καθορίζει το ποσοστό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας που ανακλάται από την επιφάνεια. Ωστόσο, ο κατά περίπτωση ορισμός της δύναται να λάβει διάφορες μορφές, λόγω του ότι η συγκεκριμένη ιδιότητα παρουσιάζεται εγγενώς σε δύο κατευθύνσεις (συγκεκριμένα, υπάρχει εξάρτηση, τόσο από την κατεύθυνση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας, όσο και από την αντίστοιχη της ανακλώμενης). Προκειμένου να αρθεί αυτή η πολυπλοκότητα, εισάγεται η έννοια της ανακλαστικότητας, που εκφράζει μια «μέση τιμή» της ανακλώμενης ακτινοβολίας σε όλο τον ημισφαιρικό χώρο, κατά τρόπον ώστε να απαλείφεται η ανάγκη γνώσης της κατανομής της κατεύθυνσης της ακτινοβολίας αυτής. Συγκεκριμένα, η *φασματική και κατευθυντική ανακλαστικότητα* μιας επιφάνειας ορίζεται ως το κλάσμα της

ανακλώμενης ακτινοβολίας από την επιφάνεια προς την τιμή της φασματικής έντασης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας από την κατεύθυνση που ορίζουν οι γωνίες φ και θ , δηλαδή

$$\rho_{\lambda,\theta}(\lambda,\theta,\varphi) = \frac{I_{\lambda,i,ref}(\lambda,\theta,\varphi)}{I_{\lambda,i}(\lambda,\theta,\varphi)} \quad \{1.23\}$$

Όμοια με πριν, λαμβάνεται η τιμή της *φασματικής ημισφαιρικής ανακλαστικότητας*, με γνώση των φασματικών τιμών της ακτινοβολήσης:

$$\rho_{\lambda}(\lambda) = \frac{G_{\lambda,ref}(\lambda)}{G_{\lambda}(\lambda)} \quad \{1.24\}$$

ενώ ολοκληρώνοντας για όλα τα μήκη κύματος μεταξύ μηδενός και απείρου, λαμβάνεται η τιμή της *ολικής ημισφαιρικής ανακλαστικότητας*:

$$\rho = \frac{\int_0^{\infty} \rho_{\lambda}(\lambda) \cdot G_{\lambda}(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} G_{\lambda}(\lambda) d\lambda} = \frac{G_{ref}}{G} \quad \{1.25\}$$

§ 1.3.5: Φαινόμενα διαβίβασης ακτινοβολίας

Η διαβίβαση ακτινοβολίας είναι ένα φαινόμενο που εντοπίζεται σε ημιδιαπερατά μέσα (σε αντίθεση με τα αδιαφανή μέσα, τα οποία απορροφούν και ανακλούν ολόκληρη την προσπίπτουσα ακτινοβολία). Και, μολονότι ο υπολογισμός της συμπεριφοράς ενός ημιδιαπερατού μέσου είναι εξαιρετικά πολύπλοκος, εντούτοις η εισαγωγής της έννοιας της *φασματικής ημισφαιρικής διαπερατότητας* καθιστά το πρόβλημα απλούστερο:

$$\tau_{\lambda} = \frac{G_{\lambda,tr}(\lambda)}{G_{\lambda}(\lambda)} \quad \{1.26\}$$

Η *ολική διαπερατότητα* υπολογίζεται με ολοκλήρωση της παραπάνω σχέσης για όλα τα μήκη κύματος.

$$\tau = \frac{\int_0^{\infty} \tau_{\lambda}(\lambda) \cdot G_{\lambda}(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} G_{\lambda}(\lambda) d\lambda} = \frac{G_{tr}}{G} \quad \{1.27\}$$

§ 1.3.6: Επαλληλία φαινομένων ακτινοβολίας πραγματικών σωμάτων

Με τον ορισμό των εννοιών της εκπεμψιμότητας, της απορροφητικότητας, της ανακλαστικότητας και της διαπερατότητας, είναι δυνατό να εντοπιστεί η συσχέτιση μεταξύ αυτών των μεγεθών, όταν συνυπάρχουν. Η αντικατάσταση των όρων του δευτέρου μέλους της εξίσωσης {1.19} με τους αντίστοιχους όρους των εξισώσεων {1.22}, {1.25} και {1.27} οδηγεί στην έκφραση

$$\alpha + \rho + \tau = 1 \quad \{1.28\}$$

Στην ειδική περίπτωση του αδιαφανούς μέσου, ο όρος της διαβίβασης ακτινοβολίας μηδενίζεται και η εξίσωση {1.28} γράφεται στη μορφή

$$\alpha + \rho = 1 \quad \{1.29\}$$

Σημειώνεται ότι στα πρώτα μέλη των εξισώσεων {1.28} και {1.29} μπορούν να τοποθετηθούν και οι φασματικές (αντί των ολικών) τιμές των εκάστοτε μεγεθών.

§ 1.3.7: Νόμος του Kirchhoff – Φαιά σώματα

Θεωρείται ένα μέλαν σώμα I εντός μέλανος χώρου S . Υπό συνθήκες ισορροπίας, η ενέργεια απορροφάται από το σώμα I με το ρυθμό που εκπέμπεται, ο οποίος είναι ίσος προς $A_1 \cdot E_b$, όπου E_b είναι η ενέργεια που ακτινοβολείται από το μέλανα χώρο. Έστω ότι το σώμα I αντικαθίσταται από ένα άλλο σώμα, το σώμα 2 , το οποίο έχει ίδιο μέγεθος, σχήμα και προσανατολισμό· προφανώς, η ενέργεια που προσκρούει πάνω στο δεύτερο σώμα είναι ίση με αυτή που δεχόταν το σώμα I , άρα ισχύει $A_1 \cdot E_b = A_2 \cdot E_b$, ή, αν χρησιμοποιηθεί ο ορισμός της απορροφητικότητας, $\alpha_2 \cdot A_2 \cdot E_b = A_2 \cdot E$. Τελικά, για οποιοδήποτε σώμα ισχύει

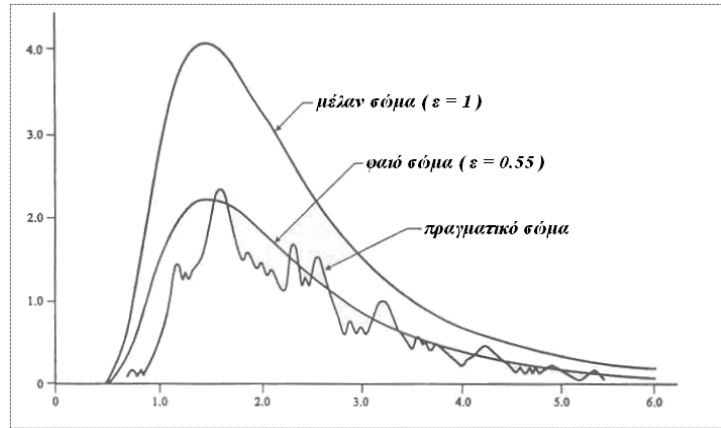
$$\alpha = \frac{E}{E_b} = \varepsilon \quad \{1.30\}$$

Η εξίσωση {1.30}, που αποτελεί το *Νόμο του Kirchhoff* για την ακτινοβολία, έχει προκύψει για κατάσταση θερμικής ισορροπίας εντός ισοθερμοκρασιακού μέλανος χώρου. Η γενικότερη μορφή του νόμου του Kirchhoff εξισώνει τις φασματικές και κατευθυντικές εκπεμψιμότητα και απορροφητικότητα, δηλαδή:

$$a_{\lambda,\theta} = \varepsilon_{\lambda,\theta} \quad \{1.31\}$$

Η απαλοιφή του όρου διεύθυνσης θ μπορεί να γίνει υπό δύο προϋποθέσεις: πρώτον, η προσπίπτουσα ακτινοβολία πρέπει να είναι διάχυτη· δεύτερον, η επιφάνεια πρέπει να ακτινοβολεί κατά τρόπο διάχυτο. Για την αποσύνδεση και από το μήκος κύματος (δηλαδή, για την ισχύ της σχέσης {1.30}), θα πρέπει πρώτα να εισαχθεί η έννοια του φαιού σώματος.

Ένα σώμα ορίζεται ως *φαιό* όταν οι τιμές των φασματικών τιμών της εκπεμπιμότητας, της απορροφητικότητας και της διαβιβασιμότητας είναι ανεξάρτητες της κατεύθυνσης και της θερμοκρασίας και εξ' ορισμού σταθερές για κάθε τιμή του μήκους κύματος· το φαιό σώμα απορροφά σταθερό ποσοστό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας από όλες τις κατευθύνσεις και για κάθε μήκος κύματος και εκπέμπει σταθερό ποσοστό της ακτινοβολίας μέλανος σώματος. Η συμπεριφορά του φαιού σώματος είναι παρόμοια με την αντίστοιχη του μέλανος, εκτός, του γεγονότος ότι η εκπεμπιμότητα ενός φαιού σώματος είναι πάντοτε μικρότερη της μονάδας (κάτι που δεν ισχύει στο μέλαν σώμα, όπου εξ' ορισμού είναι $\varepsilon = 1$). Στο διπλανό σχήμα μπορεί να συγκριθεί η φασματική κατανομή της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας μέλανος, φαιού και πραγματικού σώματος σε θερμοκρασία 2,000K συναρτήσει του μήκους κύματος.



Η ιδιότητα των σωμάτων 1 και 2 του παραπάνω παραδείγματος ως φαιά σώματα είναι η πρώτη προϋπόθεση για την ισχύ του νόμου του Kirchhoff ανεξάρτητα της κατεύθυνσης και της θερμοκρασίας και για κάθε μήκος κύματος· η δεύτερη προϋπόθεση είναι η ταυτοσημία των θερμοκρασιών του σώματος και του μέλανος περιβάλλοντος χώρου. Σε επόμενα κεφάλαια, η αντιμετώπιση των αερίων ως φαιά θα επιτρέψει την περιγραφή μοντέλων για τον υπολογισμό των συντελεστών απορρόφησης μειγμάτων αερίων.

2° ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΚΑΥΣΗΣ ΣΤΕΡΕΩΝ ΚΑΥΣΙΜΩΝ ΧΑΜΗΛΩΝ ΕΚΠΟΜΠΩΝ NO_x

§ 2.1: Σχηματισμός NO_x κατά την καύση στερεών καυσίμων

§ 2.1.1: Εισαγωγή

Τα οξείδια του αζώτου σχηματίζονται στην περιοχή της φλόγας και στις γειτονικές προς αυτήν περιοχές, ως προϊόντα της οξειδωσης των μορίων αζώτου του αέρα καύσης και του καυσίμου.

Ο «γενικός» συμβολισμός NO_x αναπαριστά μια ομάδα επτά ενώσεων (N₂O, NO, N₂O₂, N₂O₃, NO₂, N₂O₄, N₂O₅), από τις οποίες η πλέον σημαντική είναι το διοξείδιο του αζώτου (NO₂), όχι μόνο διότι είναι ο κυριότερος ρύπος της οικογένειας των NO_x που παράγεται από τις ανθρωπογενείς δραστηριότητες, αλλά και λόγω του ότι αντιδρά στην ατμόσφαιρα παράγοντας όζον (O₃) και όξινη βροχή· σημειώνεται ότι το παραγόμενο όζον δε συνεισφέρει στο στρώμα όζοντος της τροπόσφαιράς, μα ενσωματώνεται στον αέρα των κατωτέρων στρωμάτων της ατμόσφαιράς.

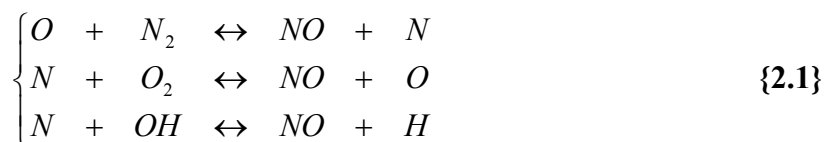
Ένα σημαντικό ποσοστό των εκπομπών NO_x οφείλεται στους θερμοηλεκτρικούς σταθμούς, επομένως ο σχεδιασμός αυτών κατά τρόπο που θα μειώνει τις εκπομπές NO_x, κρίνεται ως ουσιώδης στη συνολική προσπάθεια περιορισμού εκπομπών του εν λόγω ρύπου.

§ 2.1.2: Μηχανισμοί σχηματισμού NO_x

Ο σχηματισμός των NO_x αποδίδεται σε τρεις βασικούς μηχανισμούς:

- η αντίδραση υδρογονανθράκων με μοριακό άζωτο σε περιοχές φλόγας χαμηλής συγκέντρωσης οξυγόνου, οδηγεί στο σχηματισμό *άμεσου* NO_x. Κατά την αντίδραση αυτή, σχηματίζονται ενώσεις κυανίου, που με τη σειρά τους μετατρέπονται κατά ένα μέρος σε μονοξείδιο του αζώτου· η στοιχειομετρική συσχέτιση και η θερμοκρασία είναι παράγοντες που επιδρούν καθοριστικά στο σχηματισμό. Σημειώνεται ότι ο μηχανισμός αυτός οδηγεί σε σχηματισμό NO_x με τη χαμηλότερη συμμετοχή στην τελική ποσότητα των NO_x.
- από το περιεχόμενο σε οργανικές ενώσεις άζωτο παράγεται το *NO_x καυσίμου*. Ο σχηματισμός του NO_x με αυτό το μηχανισμό εξαρτάται μερικώς από τη θερμοκρασία και πραγματοποιείται σε περιοχές με θερμοκρασία σαφώς μικρότερη αυτής, στην οποία θα παραγόταν θερμικό NO_x. Υπάρχει υψηλή συσχέτιση με το λόγο αέρα και με τη διαδικασία ανάμειξης του καυσίμου με τον αέρα.

- από το μοριακό άζωτο, που περιέχει ο αέρας καύσης, παράγεται **θερμικό NO_x**, κατά την αντίδραση με οξυγόνο σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 1,300°C. Ο σχηματισμός του θερμικού NO_x σχετίζεται με τη θερμοκρασία, το χρόνο παραμονής στην περιοχή υψηλών θερμοκρασιών και στη μερική πίεση του οξυγόνου [6]. Ο σχηματισμός του θερμικού NO_x περιγράφεται (σύμφωνα με το **μηχανισμό Zeldovich**) από τις παρακάτω χημικές αντιδράσεις:



§ 2.1.3: Μέθοδοι ελέγχου του σχηματισμού και των εκπομπών NO_x

Οι διεργασίες περιορισμού των εκπομπών NO_x μπορούν να ταξινομηθούν σε δύο κατηγορίες: τις **πρωτογενείς** διεργασίες και τις **δευτερογενείς** διεργασίες. Οι πρώτες επιδρούν στους μηχανισμούς σχηματισμού των NO_x, ενώ οι δεύτερες αφορούν αναγωγή των ήδη σχηματισθέντων NO_x. Παρατίθενται οι βασικότερες διεργασίες που εφαρμόζονται σήμερα σε ευρεία κλίμακα.

1. Πρωτογενείς διεργασίες

- μείωση της θερμοκρασίας
- μείωση του χρόνου παραμονής σε σημεία υψηλής θερμοκρασίας
- περιορισμό της συγκέντρωσης του O₂ στην περιοχή καύσης
- χρήση καθαρού οξυγόνου ως οξειδωτικού

2. Δευτερογενείς διεργασίες

- χημική αναγωγή των NO_x

Ακολουθεί συνοπτική περιγραφή των μεθόδων αυτών.

Η μείωση της θερμοκρασίας καύσης επιτυγχάνεται με τον έλεγχο του λόγου αέρα – καυσίμου. Οι τεχνικές μείωσης της θερμοκρασίας ποικίλλουν ανάλογα με την περιεκτικότητα του εκάστοτε καυσίμου σε άζωτο· σε κάθε περίπτωση, πάντως, ο μοναδιαίος λόγος αέρα αποφεύγεται, μιας και οδηγεί στη μεγιστοποίηση της θερμοκρασίας της καύσης, άρα και σε ενίσχυση του σχηματισμού θερμικού NO_x.

Η μείωση του χρόνου παραμονής σε υψηλές θερμοκρασίες μπορεί να επιτευχθεί με κατάλληλες διαμορφώσεις των καυστήρων, τόσο ως προς τη διάταξή τους, όσο και ως προς το σχεδιασμό τους.

Ο περιορισμός της συγκέντρωσης του οξυγόνου στην περιοχή της καύσης είναι αποτέλεσμα της ανακυκλοφορίας καυσαερίων στην εστία, της ανάμειξης του αέρα καύσης με καυσαέρια και της προσαγωγής στο πάνω μέρος της εστίας. Η πρώτη μέθοδος δε συνίσταται, μιας και καταναλώνει σημαντικό ποσοστό ενέργειας· η δεύτερη, ούσα αποτελεσματικότερη της πρώτης, βρίσκει εφαρμογή σε συστήματα καύσης αερίων ή υγρών καυσίμων· η τελευταία οδηγεί σε πιο ικανοποιητικά αποτελέσματα από την ανακυκλοφορία καυσαερίων, μιας και μειώνει τη

θερμοκρασία και τη συγκέντρωση οξυγόνου στην εστία, επιτρέποντας έτσι το μεγαλύτερο μέρος της καύσης να πραγματοποιείται σε αναγωγικό περιβάλλον (τα σχηματιζόμενα NO_x ανάγονται επειδή ο οξυγόνο αντιδρά ισχυρότερα με το μόριο του καυσίμου παρά του αζώτου) [6].

Η χρήση καθαρού οξυγόνου ως οξειδωτικού μέσου αποτελεί ένα άλλο πρωτογενές μέτρο για τη μείωση των εκπομπών NO_x, ενώ παράλληλα οδηγεί και σε ελάττωση της κατανάλωσης καυσίμου. Για την εύρυθμη λειτουργία ενός τέτοιου συστήματος θα πρέπει:

- ✓ το οξυγόνο να είναι υψηλής καθαρότητας
- ✓ το καύσιμο να μην περιέχει άζωτο
- ✓ το σύστημα καύσης να είναι τελείως αεροστεγές, ώστε να μη υπάρχει παρασιτικός αέρας.

Οι δύο πρώτες προϋποθέσεις είναι τεχνικά δύσκολο να επιτευχθούν : το καθαρό οξυγόνο είναι ακριβό και εν γένει μη διαθέσιμο σε μεγάλες ποσότητες, ενώ όλα τα καύσιμα περιέχουν ποσότητες αζώτου [7].

§ 2.2: Τεχνολογία οξείδωσης χωρίς φλόγα

§ 2.2.1: Εισαγωγή

Η αύξηση του βαθμού απόδοσης σε διεργασίες καύσης και η ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών NO_x χαρακτηρίζονται ως στόχοι ιδιαίτερης πολυπλοκότητας ως προς την επίτευξή τους. Ένα από τα κύρια μέσα αύξησης του βαθμού απόδοσης, η προθέρμανση του αέρα καύσης, για καύση αερίων καυσίμων, οδηγεί σε αύξηση των εκπομπών NO_x, όπως φαίνεται και από τις προσεγγιστικές τιμές του παρακάτω πίνακα.

Θερμοκρασία προθέρμανσης του αέρα καύσης [°C]	100 – 200	300	400	500	700	800	900	1,000
Εκπομπές NO _x για 3% O ₂ στα καυσάερια [mg/Nm ³]	< 400	≤450	≤600	≤800	≤1,500	≤2,300	≤3,500	≤5,300

Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στο ότι η αύξηση της θερμοκρασίας ευνοεί το σχηματισμό θερμικών NO_x, ήτοι του πλέον «δραστικού» μηχανισμού σχηματισμού των εν λόγω ρύπων. Αναφέρεται ότι, σύμφωνα με τον μηχανισμό Zeldovich, ο ρυθμός σχηματισμού NO_x δίνεται από τη σχέση [8]

$$\frac{d[NO_x]}{dt} = \frac{6 \cdot 10^{16}}{\sqrt{T}} \cdot e^{-\frac{69'090}{T}} \cdot [N_2] \cdot [O_2]^{1/2} \quad \{2.1\}$$

Σημαντικές μελέτες στην Ιαπωνία, τη Γερμανία και τις Η.Π.Α. είχαν ως αντικείμενό τους την ανάπτυξη νέου τύπου καυστήρων αερίου για λειτουργία σε υψηλές θερμοκρασίες αέρα καύσης

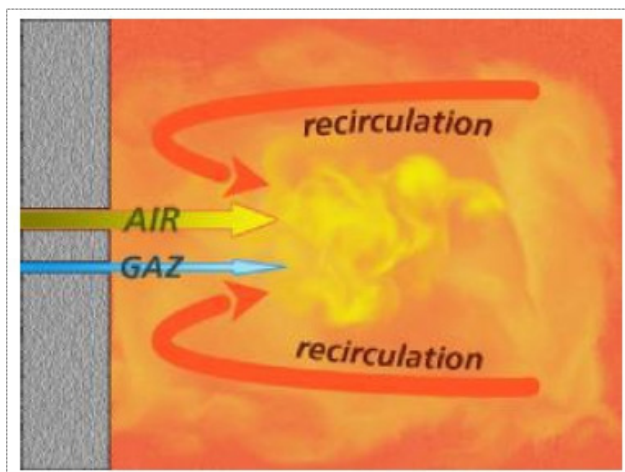
(άνω των $1,000^{\circ}\text{C}$), χωρίς αυξημένες εκπομπές NO_x . Πλέον, διάφοροι κατασκευαστές διαθέτουν εμπορικά διαθέσιμους καυστήρες αυτού του τύπου, οι οποίες είναι γνωστοί ως καυστήρες σε λειτουργία *οξείδωσης χωρίς φλόγα* (flameless oxidation, ή, συντομογραφικά, flox) [8].

§2.2.2: Περιγραφή της τεχνολογίας της οξείδωσης χωρίς φλόγα

Διευκρινίζεται κατ' αρχήν, ότι οι εκφράσεις «καύση χωρίς φλόγα», «οξείδωση χωρίς φλόγα» και «καύση με αέρα υψηλής θερμοκρασίας» αποτελούν διαφορετικές περιγραφές για σχεδόν όμοιες τεχνολογίες.

Οι τεχνολογίες αυτές αρχικά αναπτύχθηκαν για εφαρμογές θέρμανσης, κυρίως στην Ιαπωνία, αργότερα όμως και στην Ευρώπη. Την ώθηση για την ανάπτυξη αυτών των τεχνολογιών έδωσε η προσπάθεια για εξοικονόμηση ενέργειας με προθέρμανση του αέρα. Συνδυάζοντας αυτή την τεχνολογία προθέρμανσης του αέρα με μεγάλους λόγους εσωτερικής ανακυκλοφορίας αέρα, ο σχηματισμός θερμικών NO_x ήταν δυνατό να τεθεί υπό έλεγχο σε υψηλές θερμοκρασίες. Υψηλοί βαθμοί μείωσης των NO_x διαπιστώθηκαν ως αποτέλεσμα του συνδυασμού ισχυρά προθερμανθέντος μείγματος αερίου και υψηλού ρυθμού ανακυκλοφορίας αέρα σε μια νέα τεχνική καύσης, τη λεγόμενη καύση χωρίς φλόγα (flameless combustion) ή λειτουργία οξείδωσης (oxidation mode). Η ιαπωνική βιομηχανία παρουσίασε εμπορικές εφαρμογές των τεχνολογιών αυτών στην περίοδο 1980 – 1990, με την ανάπτυξη αναγεννητικών καυστήρων φυσικού αερίου, που επρόκειτο να χρησιμοποιηθούν στη χαλυβουργία, ενώ λίγα χρόνια αργότερα, η εταιρεία WS Wärmetechnik πρωτοπόρησε στην ανάπτυξη της τεχνολογίας αυτής σε ευρωπαϊκό επίπεδο [9]. Συγκεκριμένα, κατά τη διάρκεια πειράματος (εν έτει 1989) σε καυστήρα εσωτερικής ανάκτησης, όπου η θερμότητα αποθηκεύεται σε έναν κεραμικό αναγεννητή, παρατηρήθηκε ότι για θερμοκρασίες του καυστήρα περίπου $1,000^{\circ}\text{C}$ και του προθερμανθέντος αέρα περίπου 650°C δεν εμφανιζόταν φλόγα και ενώ δεν ανιχνευόταν υπεριώδης ακτινοβολία από τους αντίστοιχους αισθητήρες, εντούτοις, το καύσιμο καιγόταν εξ' ολοκλήρου! Η ανάλυση των καυσαερίων έδωσε τιμές για το CO χαμηλότερες του $1ppm$ και σχεδόν μηδενικές εκπομπές NO_x .

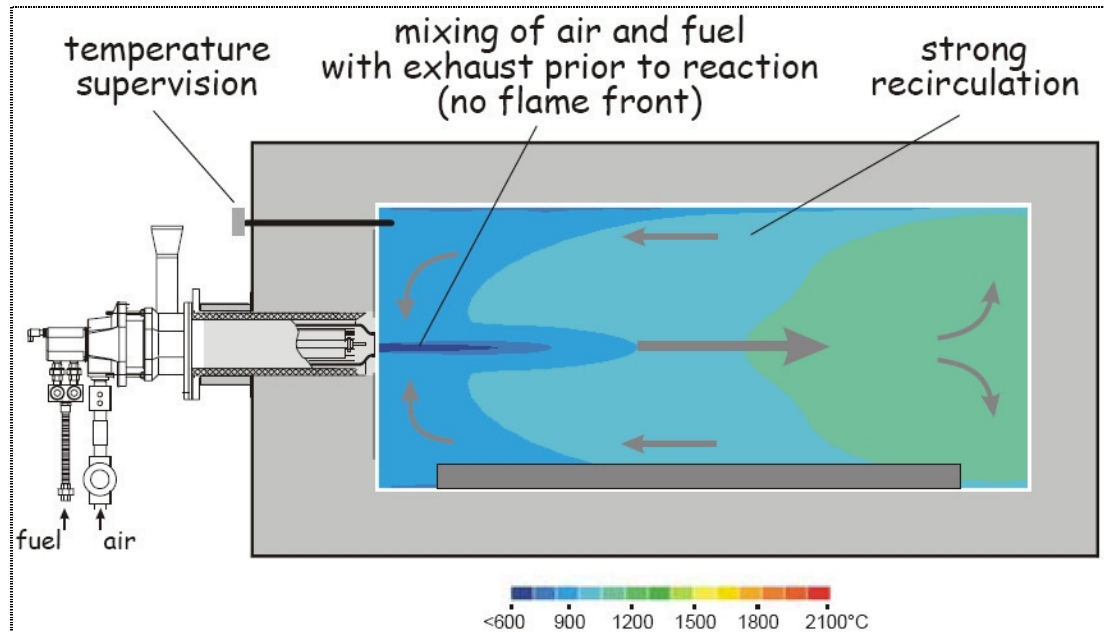
Κατά τη λειτουργία οξείδωσης χωρίς φλόγα, η τροφοδοσία του αέρα και του καυσίμου



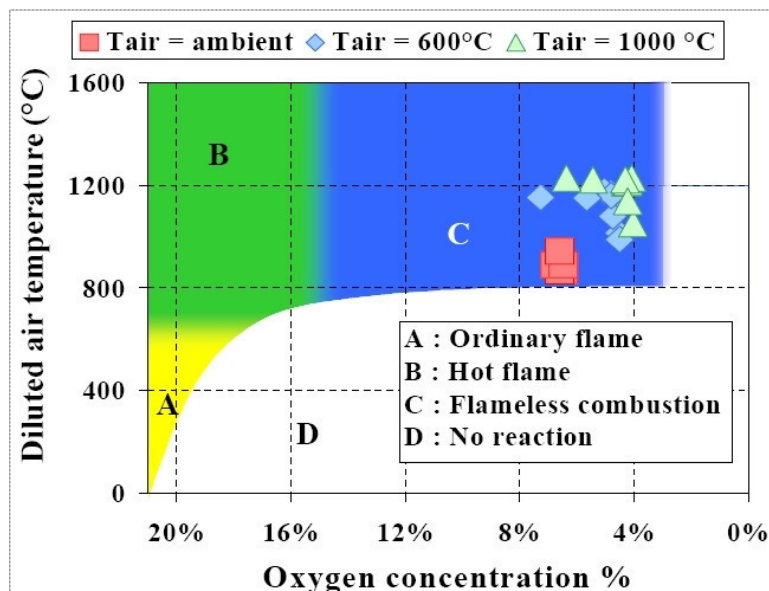
πραγματοποιείται ξεχωριστά (δηλαδή, δεν πραγματοποιείται προανάμειξη) και με υψηλές ταχύτητες εισαγωγής στον καυστήρα. Η γεωμετρία, τόσο του καυστήρα, όσο και του θαλάμου καύσης, καθώς επίσης και οι υψηλές ταχύτητες της ροής, έχουν ως αποτέλεσμα την πρόκληση ισχυρών εσωτερικών ρευμάτων ανακυκλοφορίας των προϊόντων της καύσης, όπως φαίνεται και στο διπλανό σχήμα. Οι υψηλές θερμοκρασίες των ανακυκλοφορούντων καυσαερίων είναι ο

παράγοντας που, όχι μόνο «εκκινεί», αλλά και διατηρεί την ούτω καλουμένη «καύση». Έτσι,

πραγματοποιηθείσης της μετάβασης σε λειτουργία flox, δεν υπάρχει φλόγα, η δε καύση είναι κατά το μεγαλύτερο μέρος κατανεμημένη σε όλο τον όγκο του θαλάμου καύσης. Μια προκαταρκτική απεικόνιση της κατανομής θερμοκρασιών απεικονίζεται στο παρακάτω σκαρίφημα, στο οποίο φαίνονται ευκρινώς οι περιοχές ανακυκλοφορίας καυσαερίου και ανάμειξης καυσαερίου, αέρα και καυσίμου^[10].



Η ανακυκλοφορία των καυσαερίων οδηγεί σε μείωση της συγκέντρωσης του αέρα που είναι διαθέσιμος στο θάλαμο καύσης. Η μείωση της συγκέντρωσης του οξυγόνου, ως απόρροια της ανακυκλοφορίας των καυσαερίων, μαζί με τη θερμοκρασία είναι οι παράγοντες που καθορίζουν

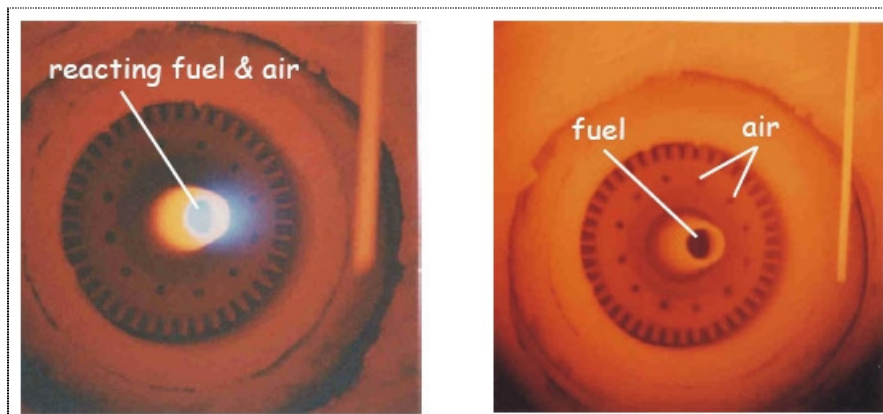


το αν ο καυστήρας θα λειτουργεί με τυπική φλόγα, με θερμή φλόγα ή κατά flox· στο διπλανό γράφημα καθίσταται εμφανής η συσχέτιση των παραμέτρων αυτών σε λειτουργικό επίπεδο. Είναι ευδιάκριτη η περιοχή μεταξύ των συγκεντρώσεων 3% έως 15% περίπου, εντός της οποίας είναι δυνατή η λειτουργία του καυστήρα κατά flox. Αυτές οι χαμηλές συγκεντρώσεις οξυγόνου οδηγούν σε «εξομάλυνση» του θερμοκρασιακού προφίλ, απαλοίφοντας τις «αιχμές» της

θερμοκρασίας, κάτι που έρχεται σε αντίθεση με τις συνθήκες λειτουργίας συμβατικών συστημάτων, όπου οι τοπικά πολύ υψηλές τιμές της θερμοκρασίας ευνοούν το σχηματισμό θερμικών NO_x . Εδώ, το σχεδόν «επίπεδο» θερμοκρασιακό προφίλ επιδρά κατασταλτικά στο μηχανισμό σχηματισμού NO_x · μετρήσεις έχουν δείξει ότι για θερμοκρασία λειτουργίας $1,300^\circ\text{C}$

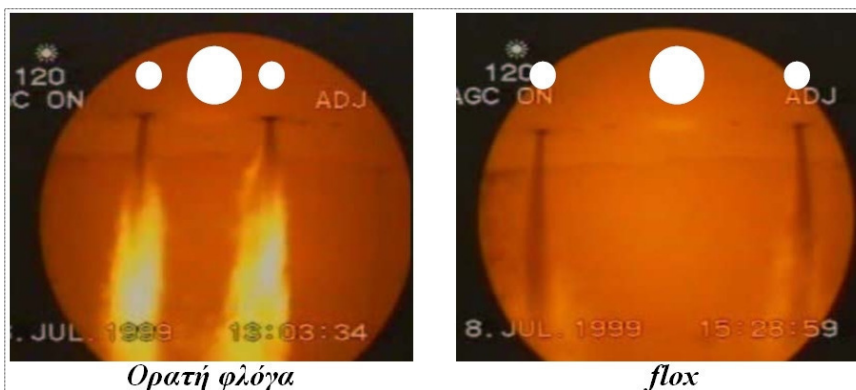
ένας καυστήρας που λειτουργεί κατά flox εκπέμπει λιγότερα από $300 \frac{mg_{NO_x}}{Nm^3}$ (για 3% οξυγόνο), ενώ για θερμοκρασίες της τάξης των $1,100^\circ C$ οι εκπομπές περιορίζονται στα $55 \frac{mg_{NO_x}}{Nm^3}$ περίπου [8].

Μια οπτική απεικόνιση της λειτουργίας ενός καυστήρα κατά flox της WS Wärmetechnik φαίνεται στις παρακάτω φωτογραφίες. Στην αριστερή φωτογραφία, ο καυστήρας λειτουργεί με φλόγα (της οποίας η ύπαρξη προσδιορίζεται από το γαλάζιο χρώμα)· στην αντίστοιχη δεξιά, η καύση πραγματοποιείται χωρίς φλόγα. Η ιδιαιτερότητα των καυστήρων flox της WS Wärmetechnik ως προς τους άλλους τύπους ομοίων καυστήρων έγκειται στον (εμπορικά κατοχυρωμένο) σχεδιασμό της εσωτερικής ανακυκλοφορίας σε ένα σχεδιαστικά ενοποιημένο σύστημα καυστήρα, χωρίς πρόσθετες διατάξεις. Η υψηλή ανακυκλοφορία που επιτυγχάνεται καθιστά μη αναγκαία την προθέρμανση του αέρα, ειδικά στην περίπτωση καυσίμων με υψηλή θερμογόνο ικανότητα [10].



§ 2.2.3: Ανάπτυξη συστημάτων οξείδωσης χωρίς φλόγα για καύση στερεών καυσίμων

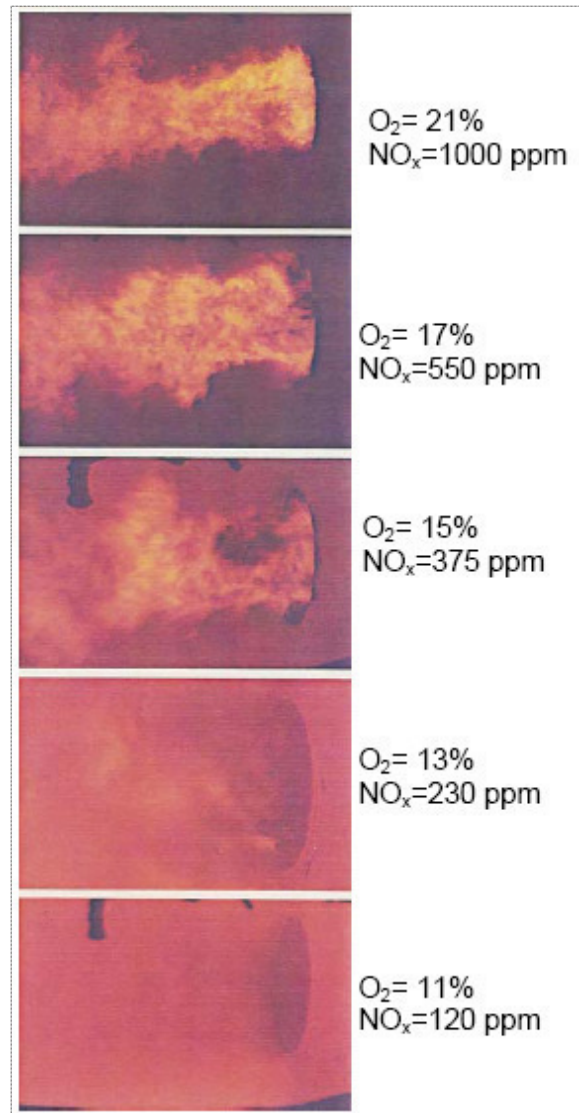
Μολονότι ο αρχικός «προσανατολισμός» της τεχνολογίας οξείδωσης χωρίς φλόγα ήταν βιομηχανικός (έχει ήδη αναφερθεί η χρήση τους στη χαλυβουργία), εντούτοις σύντομα



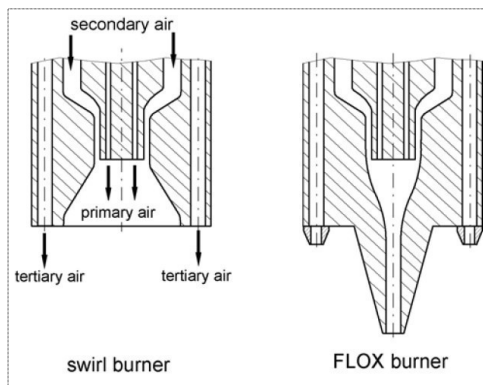
υλοποιήθηκαν συστήματα και για άλλους σκοπούς: για αεριοστροβίλους φυσικού αερίου και βιοαερίου, για καυστήρες αναμορφωτών υδρογόνου, καυστήρες μονάδων συμπαραγωγής κ.α.. Στο επίκεντρο της έρευνας σήμερα, βρίσκεται η

εφικτότητα υλοποίησης της τεχνολογίας αυτής για την περιβαλλοντικά αποδεκτή αξιοποίηση των γαιανθράκων.

Υπό την αιγίδα του Διεθνούς Ιδρύματος για τη Μελέτη της Φλόγας (International Flame Research Foundation, IFRF) έχουν διεξαχθεί πειράματα σε ανθρακικές εστίες με πρόταξη αεριοστροβίλου, όπου το οξειδωτικό μέσο φέρεται, όχι από τον αέρα περιβάλλοντος, αλλά από τα καυσαέρια του αεριοστροβίλου· προσομοιώθηκαν διάφορες καταστάσεις λειτουργίας με διαφορετική «ποιότητα» καυσαερίου, ώστε να διαπιστωθούν οι αλληλοσυσχετίσεις μεταξύ καυστήρων φυσικού αερίου και αεριοστροβίλων. Στο διπλανό σχήμα παρατίθενται απεικονίσεις των φλογών ως «συνάρτηση» της συγκέντρωσης οξυγόνου στον αέρα καύσης, καθώς επίσης και οι εκπομπές NO_x. Κατά τη διάρκεια των πειραμάτων, εισήχθη η έννοια της λειτουργίας οξείδωσης χωρίς φλόγα, που αποτελεί ίσως και το πρώτο πείραμα καύσης άνθρακα χωρίς φλόγα. Το IFRF εντόπισε λειτουργία floc όταν η συγκέντρωση O₂ στον αέρα καύσης μειώθηκε σε επίπεδα κάτω του 11%· ταυτόχρονα διαπιστώθηκε και ότι τα επίπεδα εκπομπών NO_x μειώνονταν αισθητά καθώς μειωνόταν η συγκέντρωση O₂. Σε αυτά τα πειράματα, η μόνη τεχνική που εφαρμοζόταν ήταν η εξωτερική προθέρμανση του αέρα καύσης· εσωτερική ανακυκλοφορία αέρα ή ανάμειξη με αέρα καύσης για καυστήρες floc δεν είχαν εφαρμοστεί. Ωστόσο, τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η καύση χωρίς φλόγα ως τεχνική είχε τη δύναμη να μειώσει κατά τρόπο λειτουργικά και ενεργειακά αποδοτικό τις εκπομπές NO_x^[9].



Σε συνεργασία με τους πρωτοπόρους κατασκευαστές καυστήρων floc, από το Ανώτατο



Τεχνικό Πανεπιστήμιο Ρηνανίας – Βεστφαλίας του Ααχεν (Rheinisch Westfälische Technische Hochschule Aachen, RWTH Aachen), σχεδιάστηκαν καυστήρες floc για ισχύ 400kW υπό πίεση και 150kW σε πίεση μιας ατμόσφαιρας^[8]. Στο διπλανό σχήμα απεικονίζονται σε τομή ο βέλτιστος σχεδιασμός κατά floc, η χρήση του οποίου έδειξε μείωση των εκπομπών NO_x κατά 25% σε σχέση με έναν καυστήρα συστροφής που χρησιμοποιήθηκε ειδικά για τη σύγκριση (ο οποίος φαίνεται σε τομή στο αριστερό σχέδιο)^[9].

3^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΜΕΛΕΤΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ ΜΕΙΓΜΑΤΩΝ ΑΕΡΙΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΥΣΗΣ

§ 3.1: Φύση και Ποσοτικοποίηση της Θερμικής Ακτινοβολίας Αερίων

§ 3.1.1: Εισαγωγή

Στο πρώτο κεφάλαιο αναπτύχθηκαν οι θεμελιώδεις έννοιες της μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία και μελετήθηκαν κάποιες πρωταρχικές ιδιότητες. Στο παρόν κεφάλαιο θα εξετασθεί η έννοια της *θερμικής ακτινοβολίας αερίων*.

Η θερμική ακτινοβολία αποτελεί τη σημαντικότερη συνιστώσα μεταφοράς θερμότητας μέσα σε συστήματα καύσης. Υπενθυμίζοντας τη διαπίστωση ότι η θερμική ακτινοβολία μεταφέρεται χωρίς απώλειες μόνο στο κενό, η μελέτη των ιδιοτήτων ακτινοβολίας αερίων έχει ως αντικείμενο την πρόβλεψη των απωλειών λόγω της διέλευσης της ακτινοβολίας μέσα από αέρια μείγματα.

Η επίδραση των αερίων στη θερμική ακτινοβολία δεν είναι μονοσήμαντη. Τα λεγόμενα *μη πολικά αέρια*, όπως το οξυγόνο ή το άζωτο, δε λαμβάνονται υπ' όψιν κατά τους υπολογισμούς μετάδοσης θερμότητας, μιας και τα αέρια αυτά δε εκπέμπουν ακτινοβολία (δηλαδή, μπορούν να θεωρηθούν διαφανή μέσα ως προς την ακτινοβολία). Ωστόσο, τα *πολικά αέρια*, όπως το CO₂ και ο υδρατμός, εκπέμπουν και απορροφούν ακτινοβολία σε ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών ^[5].

Η βασική διαφορά της ακτινοβολίας των αερίων από αυτή των στερεών (που εξετάστηκε στο 1^ο κεφάλαιο) είναι ότι, ενώ τα μεν στερεά σώματα (αλλά, και τα υγρά) ακτινοβολούν βάσει μιας συνεχούς κατανομής ως προς το μήκος κύματος, η ακτινοβολία των αερίων είναι συγκεντρωμένη σε συγκεκριμένες περιοχές του φάσματος συχνοτήτων, τις λεγόμενες *ζώνες*, ώστε τελικά η μελέτη της ακτινοβολίας των αερίων να επικεντρώνεται τελικώς μόνο στα ζώνες αυτές.

Στις επόμενες ενότητες θα μελετηθούν πρώτα οι πρωταρχικές έννοιες της ακτινοβολίας αερίων και ακολούθως θα περιγραφούν τα αναπτυχθέντα μοντέλα για την πρόβλεψη των ιδιοτήτων αυτής.

§ 3.1.2: Ορισμός και χρήση του συντελεστή απορρόφησης

Στο 1^ο κεφάλαιο ορίστηκε η έννοια της απορροφητικότητας, της οποίας η ποσοτική έκφραση είναι το κλάσμα της απορροφώμενης ακτινοβολίας προς την προσπίπτουσα. Η έννοια της απορροφητικότητας, όμως, δεν είναι επαρκής για να ποσοτικοποιήσει το φαινόμενο της απορρόφησης κατά μήκος μιας διαδρομής πεπερασμένου μήκους, παρά μόνο μακροσκοπικά.

Καθίσταται, λοιπόν, απαραίτητη η εισαγωγή ενός νέου μεγέθους, του *συντελεστή απορρόφησης*.

Σε αντίθεση με την απορροφητικότητα, ο συντελεστής απορρόφησης περιγράφει την «ποσότητα» της απορρόφησης της ακτινοβολίας ανά μονάδα μήκους του μέσου διάδοσης. Έτσι, αποτελεί ένα πιο πρόσφορο μέγεθος για τη μελέτη ογκομετρικών φαινομένων μετάδοσης θερμότητας και, κυρίως, ιδεώδες για την εισαγωγή του σε συστήματα Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής.

Έστω ρεύμα ακτινοβολίας μήκους κύματος λ και έντασης I_0 που πρέπει να διέλθει από στρώμα αερίου πάχους L , του οποίου ο συντελεστής απορρόφησης (για το συγκεκριμένο μήκος κύματος) είναι ίσος προς κ_λ . Ζητούμενη είναι η ένταση της ακτινοβολίας που θα εξέλθει από το στρώμα αερίου, έστω I_L · για τον υπολογισμό της, επιλύεται η ακόλουθη διαφορική εξίσωση χωριζόμενων μεταβλητών [3]:

$$\begin{aligned}
 & \frac{dI}{dx} = -\kappa_\lambda \cdot I(x) \\
 \Leftrightarrow & \frac{dI}{I(x)} = -\kappa_\lambda \cdot dx \\
 \Leftrightarrow & \int_{I(x=0)}^{I(x=L)} \frac{1}{I(x)} dI = \int_{x=0}^{x=L} -\kappa_\lambda dx \\
 \Leftrightarrow & \ln \left[\frac{I(x=L)}{I(x=0)} \right] = -\kappa_\lambda \cdot L \\
 \Leftrightarrow & \frac{I_L}{I_0} = e^{-\kappa_\lambda \cdot L} \\
 \Leftrightarrow & I_L = I_0 \cdot e^{-\kappa_\lambda \cdot L}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Η προτελευταία σχέση ομοιάζει με τον ορισμό της διαπερατότητας (βλ. §1.3.5):

$$\tau = \frac{I_L}{I_0} \Leftrightarrow \tau_\lambda = e^{-\kappa_\lambda \cdot L} \tag{3.2}$$

και τελικά είναι δυνατό να συσχετιστεί η απορροφητικότητα, χρησιμοποιώντας τη σχέση {1.28} και με παραδοχή μηδενικής ανακλαστικότητας, με το συντελεστή απορρόφησης ως ακολούθως:

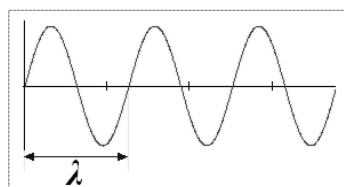
$$\tau_\lambda + \alpha_\lambda = 1 \Leftrightarrow \begin{cases} \alpha_\lambda & = 1 - e^{-\kappa_\lambda \cdot L} \\ \kappa_\lambda & = -\frac{\ln(1 - \alpha_\lambda)}{L} \end{cases} \tag{3.3}$$

Οι παραπάνω σχέσεις, αν και θεμελιώδεις για την κατανόηση των φαινομένων ακτινοβολίας αερίων, αποκρύπτουν σημαντικές παραμέτρους αυτών. Κατ' αρχήν, προϋποθέτουν σταθερή τιμή για το συντελεστή απορρόφησης καθ' όλο το μήκος όδευσης της ακτινοβολίας· αυτό κατά βάση δεν ισχύει σε πραγματικά συστήματα, όμως αποτελεί αποδεκτή παραδοχή για απειροστό μήκος όδευσης. Δεύτερον, δεν εμφανίζεται πρωτογενώς η επίδραση της θερμοκρασίας, της πίεσης και

της συγκέντρωσης του αερίου μείγματος, αλλά μόνο ως μεταβολή του συντελεστή απορρόφησης. Άρα, τελικά καλείται ο συντελεστής απορρόφησης να συμπεριλάβει όλες αυτές τις λειτουργικές παραμέτρους, υπό οποιεσδήποτε συνθήκες λειτουργίας.

§ 3.1.3: Εισαγωγή της έννοιας του κυματαριθμού

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα περιγράφεται από το μήκος του, τη συχνότητά του και την ταχύτητα διάδοσής του. Οι έννοιες του μήκους κύματος και της συχνότητας είναι αλληλένδετες και οδηγούν στην εύρεση της ταχύτητας διάδοσης: το μήκος ενός κύματος είναι η απόσταση μεταξύ των αρχικών σημείων δύο κυμάτων (όπως φαίνεται στο διπλανό σχήμα), ενώ η συχνότητα εκφράζει τον αριθμό των κυμάτων στη μονάδα του χρόνου.



Κατά την ανάλυση των φασματοσκοπικών φαινομένων από τον Johannes Robert Rydberg¹ (στα 1888, μελετώντας την εκπεμπόμενη ενέργεια των φωτονίων κατά τη μετάβαση των ατόμων από μια ενεργειακή στάθμη σε άλλη), φάνηκε ότι η μελέτη διευκολυνόταν από τη χρήση του αντιστρόφου μήκους κύματος, ενώ αργότερα, η *αρχή συνδυασμού Rydberg-Ritz* (σκοπός της οποίας ήταν η μελέτη των φασματικών γραμμών όλων των ατόμων) χρησιμοποίησε επίσης το αντίστροφο μήκους κύματος. Κρίθηκε, λοιπόν, σκόπιμη η εισαγωγή της έννοιας του *κυματαριθμού* (wavenumber):

$$\eta = \frac{1}{\lambda} \quad \{3.4\}$$

Η φυσική σημασία του κυματαριθμού είναι απλά αντίστροφη του μήκους κύματος: το μήκος κύματος εκφράζει το μήκος ενός μόνο κύματος, ενώ ο κυματαριθμός εκφράζει το πλήθος των κυμάτων που περικλείονται από τη μονάδα του μήκους. Η μονάδα του κυματαριθμού στο Διεθνές Σύστημα Μονάδων είναι m^{-1} , αν και στην πράξη οι κυματαριθμοί απαντώνται μετρούμενοι σε cm^{-1} .

Πρέπει να σημειωθεί ότι όχι σπάνια, τόσο στην ξενόγλωσση όσο και στην ελληνική βιβλιογραφία, ο κυματαριθμός αποδίδεται ως «συχνότητα». Παρόλο που όντως υπάρχει αντίστροφα ανάλογη σχέση μεταξύ μήκους κύματος και συχνότητας (όπως, δηλαδή, ισχύει και μεταξύ μήκους κύματος και κυματαριθμού), εντούτοις μια τέτοια «ισοδυναμία» δεν είναι απόλυτα αυστηρή, μιας και παραβλέπεται ο όρος της ταχύτητας διάδοσης του κύματος. Για το λόγο αυτό, στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιείται πάντα ο όρος «κυματαριθμός». Χάρην πληρότητας, επαναδιατυπώνεται η εξίσωση {1.1} με όρους τη συχνότητα και τον κυματαριθμό:

¹ Ο Johannes Robert Rydberg ήταν Σουηδός φυσικός και έζησε μεταξύ 1854 και 1919. Ιδιαίτερα σημαντική ήταν η συμβολή του στην προκαταρκτική μελέτη της κβαντικής θεωρίας.

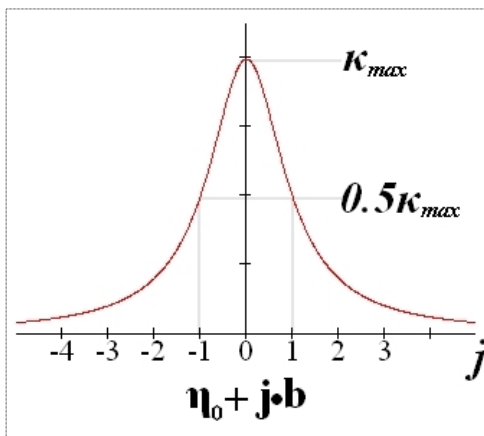
$$c = \frac{f}{\eta} \Rightarrow f = c \cdot \eta \quad \{3.5\}$$

Η τελευταία σχέση καθιστά εμφανή την ευθεία αναλογία μεταξύ συχνότητας και κυματαριθμού, που όμως, λόγω της παρουσίας του όρου c , δεν καθιστά τα δύο αυτά μεγέθη ισοδύναμα.

§ 3.1.4: Φύση των ζωνών ακτινοβολίας – Εισαγωγή της έννοιας της φασματικής γραμμής

Η χωροθέτηση των ζωνών στο ηλεκτρομαγνητικό φάσμα δεν είναι χαοτική διαδικασία, αλλά εξαρτάται από τις ιδιότητες καθενός μορίου, μιας και η εκπομπή ή η απορρόφηση ακτινοβολίας σχετίζεται άμεσα με τη μεταβολή των ταλαντωτικών ή περιστροφικών επιπέδων ενέργειας των μορίων.

Αφ' ης στιγμής τα άτομα κινούνται στον τρισδιάστατο χώρο, εμφανίζονται τρεις βαθμοί ελευθερίας: εμπρός και πίσω, αριστερά και δεξιά, πάνω και κάτω. Όταν κάποιο άτομο είναι συνδεδεμένο με κάποιο άλλο (εντός κάποιου διατομικού ή πολυατομικού μορίου), καθένα άτομο έχει τρεις βαθμούς ελευθερίας, αν και θα ήταν μάλλον πιο «βολική» η έκφραση ότι ένα μόριο που αποτελείται από N άτομα έχει τρεις βαθμούς ελευθερίας για μεταφορά και $3 \cdot N - 3$ βαθμούς ελευθερίας για σχετική κίνηση μεταξύ των ατόμων· οι τελευταία αναφερθέντες βαθμοί ελευθερίας μπορούν ειδικότερα να ταξινομηθούν σε περιστροφικούς και ταλαντωτικούς. Με χρήση της Κβαντικής Φυσικής είναι δυνατό να υπολογιστεί ο κυματαριθμός του κέντρου κάθε ζώνης, είτε αυτή είναι περιστροφική, είτε ταλαντωτική· ωστόσο, η συσχέτιση μεταξύ των ενεργειακών σταθμών των μορίων με τους αντίστοιχους κυματαριθμούς ξεφεύγει από τους σκοπούς του παρόντος, γι' αυτό και παραλείπεται ^[1].



Ορίζεται, τέλος, ως **φασματική γραμμή** μια πολύ λεπτή περιοχή του φάσματος συχνοτήτων, εντός της οποίας εμφανίζονται φαινόμενα απορρόφησης ακτινοβολίας. Αν και με εφαρμογή της Κβαντικής Φυσικής είναι δυνατό να προσδιοριστούν, τόσο το σχήμα, όσο και η θέση μιας φασματικής γραμμής, εντούτοις στην πράξη χρησιμοποιούνται κάποιες «τυποποιημένες» μορφές φασματικών γραμμών· η πλέον γνωστή κατανομή φασματικών γραμμών περιγράφεται από τη (ποιοτικά απεικονιζόμενη στο διπλανό σχήμα)

λεγόμενη **κατανομή Lorentz**, της οποίας η εξίσωση είναι η ακόλουθη ^[1]:

$$\kappa_{\eta} = \frac{S \cdot b}{\pi \cdot \left\{ (\eta - \eta_0)^2 + b^2 \right\}} \quad \{3.6\}$$

όπου $S = \int_{\Delta\eta} \kappa_{\eta} d\eta$ είναι ο ολοκληρωτικός συντελεστής απορρόφησης της γραμμής (εναλλακτική έκφραση για το μέγεθος αυτό είναι «σθένος γραμμής») και b είναι ένα εύρος κυματαριθμού, στο

ένα άκρο του οποίου βρίσκεται το κέντρο της γραμμής, η_0 , και το άλλο άκρο στη θέση εκείνη όπου ο συντελεστής απορρόφησης είναι ίσος με το ήμισυ του μεγίστου (που εμφανίζεται στη θέση η_0). Ο παράγων b είναι δυνατό να προσδιοριστεί βάσει των δομικών και θερμοδυναμικών χαρακτηριστικών του μορίου.

§ 3.2: Μέθοδοι Υπολογισμού των Ιδιοτήτων Ακτινοβολίας Αερίων

§ 3.2.1: Εισαγωγή – Επισκόπηση βασικών στοιχείων μεθόδων στενής και ευρείας ζώνης και σταθμισμένων αθροισμάτων

Η δυσκολία υπολογισμού του συντελεστή απορρόφησης ενός μείγματος αερίων, αλλά και η αναγκαιότητα γνώσης των ιδιοτήτων ακτινοβολίας σε μείγματα, που δεν καλύπτονται από τις περιπτώσεις που εξετάζουν οι απλοποιημένοι θερμοτεχνικοί υπολογισμοί, οδήγησαν τους μελετητές στην ανάπτυξη μοντέλων που αξιοποιούν τη «φύση» του φαινομένου της ακτινοβολίας αερίων και που οδηγούν σε αλγορίθμους, άλλοτε αυστηρής μορφής και άλλοτε προσεγγιστικής.

Ανάλογα με τον τρόπο προσέγγισης του φαινομένου της θερμικής ακτινοβολίας, τα μοντέλα ταξινομούνται σε μοντέλα *στενών*, μοντέλα *ευρειών* ζωνών (narrow band models και wide band models, αντίστοιχα) και σε μοντέλα *σταθμισμένων αθροισμάτων* (weighted sum models, ενώ απαντάται και ο όρος *global models*). Η έννοια της ζώνης σχετίζεται με τις περιοχές του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, όπου εμφανίζονται τα φαινόμενα ακτινοβολίας των αερίων, ενώ ο διαχωρισμός σε μοντέλα στενών και ευρειών ζωνών καθορίζεται από την προσέγγιση της έννοιας του φασματικού εύρους: σύμφωνα με τα μοντέλα στενών ζωνών, υπολογίζονται οι μέσες ιδιότητες εντός μιας περιοχής εύρους $\Delta\eta$, ασχέτως της ύπαρξης ταλαντωτικών ή περιστροφικών ζωνών εντός του εύρους αυτού· στον αντίποδα, τα μοντέλα ευρείας ζώνης υπολογίζουν τις μέσες ιδιότητες όλων των φασματικών γραμμών μιας ζώνης (είτε αυτή είναι περιστροφική, είτε ταλαντωτική), ασχέτως του καταλαμβανόμενου φασματικού εύρους [12].

Στις ενότητες που ακολουθούν, πρόκειται να παρουσιαστούν τα βασικά σημεία των ανωτέρω κατηγοριών μοντέλων, με έμφαση στη δόμηση του καθενός και όχι στη μαθηματική του υπόσταση, και να αξιολογηθούν συγκριτικά, τονίζοντας τα στοιχεία, στα οποία το κάθε μοντέλο υπερτερεί των άλλων.

§ 3.2.2: Μοντέλα στενών ζωνών

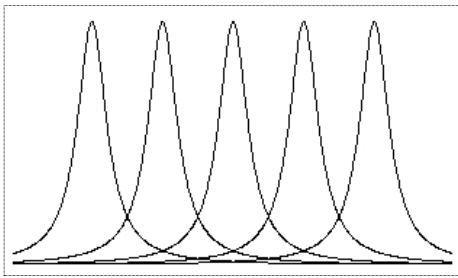
Σε ένα μοντέλο στενής ζώνης, ο υπολογισμός του συντελεστή απορρόφησης εκτελείται μέσω της απλής μορφολογικά αλλά εξαιρετικά δύσχρηστης σχέσης [1]:

$$\kappa_{\eta} = \sum_j \kappa_{\eta,j} \quad \{3.7\}$$

Τα σημαντικότερα μοντέλα στενών ζωνών που έχουν χρησιμοποιηθεί είναι το **μοντέλο του Elsasser** και το **Στατιστικό Μοντέλο** (στα αγγλικά, Statistical Model ή Statistical Narrow Band Model).

Το μοντέλο του Elsasser² βασίζεται στην ανάπτυξη απείρων ισαπέχουσών φασματικών γραμμών Lorenz ίσης έντασης, οι οποίες οδηγούν σε κατανομή της μορφής:

$$\kappa_{\eta} = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \frac{S \cdot b}{\pi \cdot \{(\eta - \eta_0 - j \cdot d) - b^2\}} \quad \{3.8\}$$



όπου d είναι η (σταθερή, όπως προαναφέρθηκε) απόσταση. Όπως φαίνεται και στο σχήμα, κάθε φασματική γραμμή εμπεριέχει και δύο διαστήματα αλληλεπικάλυψης με τις γειτονικές της, κάτι που μοντελοποιείται με την παράμετρο αλληλεπικάλυψης β^3 , που λαμβάνεται από τη σχέση $\beta = \pi \cdot \frac{b}{d}$, ενώ ανάγοντας τους κυματαριθμούς με την

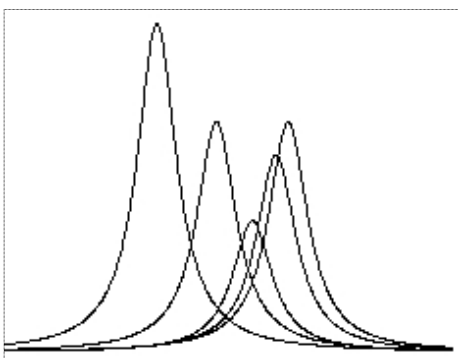
ποσότητα $z = \frac{2\pi}{d} \cdot \eta$, η παραπάνω σχέση μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά, οδηγώντας στην έκφραση:

$$\kappa_{\eta} = \frac{S}{d} \cdot \frac{\sinh(2 \cdot \beta)}{\cosh(2 \cdot \beta) - \cos(z - z_0)} \quad \{3.9\}$$

και τελικά ο μέσος συντελεστής απορρόφησης λαμβάνεται από την απλή σχέση:

$$\bar{\kappa}_{\eta} = \frac{S}{d} \quad \{3.10\}$$

λόγω της οποίας, το πηλίκο $\frac{S}{d}$ συχνά καλείται και **εξομαλυνθείς συντελεστής απορρόφησης**^[1].



Ακολουθώντας μια διαφορετική προσέγγιση έχει δομηθεί το Στατιστικό μοντέλο, σύμφωνα με το οποίο, σε αντίθεση με τις ισαπέχουσες και ίσης έντασης φασματικές γραμμές, θεωρείται ότι οι φασματικές γραμμές, όχι απλά δεν ισαπέχουν, αλλά κατανέμονται «τυχαία» εντός της στενής ζώνης, όπως φαίνεται στο διπλανό σχήμα. Η υπόθεση αυτή μπορεί να εκληφθεί ως μια ακριβής αναπαραγωγή πολύπλοκων μορίων. Δικαίως, λοιπόν, το μοντέλο αυτό είναι κοινώς αποδεκτό ως το πιο ακριβές και

² Το μοντέλο αυτό πήρε το όνομά του από τον Φυσικό Walter Maurice Elsasser (1904 – 1991).

³ Σε επόμενη ενότητα, κατά την ανάλυση του Εκθετικού Μοντέλου, θα χρειαστεί να χρησιμοποιήσουμε ξανά την παράμετρο αλληλεπικάλυψης, με διαφορετικό, όμως, ορισμό.

χρησιμοποιείται ευρέως για την προτυποποίηση άλλων μοντέλων, αλλά και σε θεωρητικές αναλύσεις του φαινομένου της ακτινοβολίας αερίων [1].

Μια συνολική διαπίστωση για τα μοντέλα στενής ζώνης είναι ότι προσφέρουν μεν άκρως ικανοποιητική ακρίβεια, πλην όμως οδηγούν σε χρονοβόρους υπολογισμούς, άρα η εφαρμογή τους σε μεγάλο μεγέθους συστήματα είναι μη πρακτική, ακόμα και όταν χρησιμοποιούνται ισχυροί υπολογιστές. Η συμβολή τους, όμως, στην προτυποποίηση άλλων μοντέλων είναι σημαντική και ζωτικής σημασίας για την εξασφάλιση της γνώσης της ακρίβειας που τα τελευταία προσφέρουν [12a].

§ 3.2.3: Μοντέλα σταθμισμένων αθροισμάτων φαιών αερίων

Η βασική ιδέα των μοντέλων σταθμισμένων αθροισμάτων φαιών αερίων (Weighted Sum of Gray Gases - WSGG) έγκειται στη θεώρηση ενός πραγματικού αερίου ως συνισταμένη πεπερασμένου πλήθους φαιών αερίων. Η ανάπτυξη των μοντέλων αυτών ήταν απόρροια της μελέτης της συμπεριφοράς μειγμάτων μη σταθερής θερμοκρασίας, η δε πατρότητα των μοντέλων αυτών ανήκει στους ερευνητές H. C. Hottel και A. F. Sarofim. Σύμφωνα με το μοντέλο σταθμισμένων αθροισμάτων φαιών αερίων, η συνολική εκπεμψιμότητα, ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, δίνεται από την απλή σχέση [12]:

$$\varepsilon(T) = \sum_i a_i(T) \cdot (1 - e^{-\kappa_i \cdot L}) \quad \{3.11\}$$

όπου a_i είναι ο – εξαρτώμενος από τη θερμοκρασία – συντελεστής στάθμισης (σημειώνεται ότι το άθροισμα των συντελεστών στάθμισης πρέπει να είναι ίσο με τη μονάδα) και κ_i είναι ο συντελεστής απορρόφησης του i φαιού αερίου. Η γνώση της ολικής εκπεμψιμότητας μπορεί να οδηγήσει στον υπολογισμό του συντελεστή απορρόφησης βάσει της σχέσης [13]:

$$\kappa = -\frac{\ln(1 - \varepsilon)}{L} \quad \{3.12\}$$

Ιδιαιτερότητα του μοντέλου αυτού είναι ότι λαμβάνει ως σταθερούς τους συντελεστές απορρόφησης των φαιών αερίων, επιβάλλοντας ισχυρή επίδραση των τοπικών θερμοκρασιών στους συντελεστές στάθμισης. Για την κατανόηση της φύσης των συντελεστών, ο συντελεστής στάθμισης του i φαιού αερίου μπορεί να ερμηνευθεί ως το ποσοστό της συνάρτησης του μέλανος σώματος, εντός της φασματικής περιοχής όπου ο μέσος συντελεστής απορρόφησης είναι ίσος προς κ_i .

Παρ' όλο που το WSGG προσεγγίζει ικανοποιητικά μη ισοθερμοκρασιακά μείγματα, εντούτοις ήταν δυσχερής η διαχείριση μη ομογενών μέσων. Προκειμένου να αρθεί αυτός ο περιορισμός, οι μελετητές M. K. Denison και B. W. Webb ανέπτυξαν μια παραλλαγή του WSGG, τη μέθοδο φασματικών γραμμών (Spectral Lines Weighted sum of Gray gases - SLW), της οποίας η χρήση μπορούσε να καλύψει στην πλειοψηφία τους τις πρακτικές εφαρμογές (όπου τα μέσα μετάδοσης θερμότητας είναι μη ομογενή και μη ισοθερμοκρασιακά). Στη μέθοδο SLW,

οι συντελεστές στάθμισης εξαρτώνται όχι μόνο από τις τοπικές θερμοκρασίες (όπως συμβαίνει στο μοντέλο σταθμισμένων αθροισμάτων), αλλά και από τις τοπικές συγκεντρώσεις. Η μέθοδος SLW μπορεί να οδηγήσει σε πολύ ακριβέστερα αποτελέσματα από το μοντέλο WSGG, ωστόσο η ακρίβεια αυτή αντισταθμίζεται από την απαίτηση πιο χρονοβόρων υπολογισμών ^[14].

Από συγκρίσεις μεταξύ μοντέλων σταθμισμένων αθροισμάτων και στενών ζωνών κατά την εφαρμογή τους σε αέρια προϊόντα καύσης, διαπιστώνεται η υπεροχή των δεύτερων στον τομέα της ακρίβειας, μιας και οι συντελεστές στάθμισης λαμβάνονται για τη θερμοκρασία εκπέμποντος σώματος, με αποτέλεσμα η απορρόφηση από ψυχρά αέρια ακτινοβολίας που εκπέμπεται από θερμά αέρια ή σώματα να υποεκτιμάται. Εντούτοις, τα μοντέλα σταθμισμένων αθροισμάτων μπορούν να αποτελέσουν μια ελκυστική λύση για τον υπολογισμό ιδιοτήτων ακτινοβολίας ομογενών και ισοθερμοκρασιακών μειγμάτων αερίων, όπου η ήδη εγνωσμένη ταχύτητα των μοντέλων αυτών συνοδεύεται και από επαρκή ακρίβεια (πάντα σε σχέση με τα μοντέλα στενών ζωνών) ^{[15], [16]}.

§ 3.2.4: Μοντέλα ευρειών ζωνών

Τα παραπάνω περιγραφέντα μοντέλα αναπτύχθηκαν αρχικά ως θεωρητικά εργαλεία και ακολούθως προσαρμόστηκαν στις τεχνικές εφαρμογές. Αναφέρθηκαν ήδη τα βασικά μειονεκτήματα των μεθόδων (υψηλοί υπολογιστικοί χρόνοι για τα μοντέλα στενής ζώνης και σχετικά χαμηλή ακρίβεια για τα μοντέλα σταθμισμένων αθροισμάτων). Ορμώμενοι από τα μοντέλα στενής ζώνης, το ζήτημα που τέθηκε ήταν: πως είναι δυνατό να γίνει η μετάβαση από την προσέγγιση των φασματικών γραμμών (που είναι θεμελιώδης για τα μοντέλα στενής ζώνης), σε μια πιο ολοκληρωτική θεώρηση των ζωνών εκπομπής; Την απάντηση σε αυτό το ερώτημα έδωσαν τα μοντέλα ευρειών ζωνών.

Τα μοντέλα ευρειών ζωνών θεωρούνται ότι προσφέρουν τη βέλτιστη συνύπαρξη ακριβών αποτελεσμάτων, απλότητας και χρονικής αποδοτικότητας. Αν και στα πλαίσια της παρούσας εργασίας δεν έχει πραγματοποιηθεί συγκριτική μελέτη μεταξύ της αποδοτικότητας των διαφόρων μοντέλων, εντούτοις στη διεθνή βιβλιογραφία διατίθενται αρκετές δημοσιεύσεις (αναφέρονται ενδεικτικά οι αναφορές [17] και [18]) που καταδεικνύουν τα προαναφερθέντα πλεονεκτήματα των μοντέλων ευρειών ζωνών, ειδικά σε περιπτώσεις συνύπαρξης των μοντέλων αυτών με υπολογιστικούς κώδικες Μηχανικής Ρευστών.

Θεμελιώδης έννοια στα μοντέλα ευρείας ζώνης είναι η *ένταση ζώνης* a , με την οποία ποσοτικοποιείται με μαθηματικά αυστηρό τρόπο η ολοκλήρωση σε όλο το φάσμα συχνοτήτων, ή, ακριβέστερα, σε όλο το φάσμα κυματαριθμών. Για την ένταση ζώνης υπάρχουν ακόμη οι εκφράσεις «ολοκληρωτικός συντελεστής απορρόφησης» και «ολοκληρωτική ένταση ζώνης» Εφαρμόζοντας τη σχέση {3.10}, λαμβάνεται η έκφραση ^[1]:

$$a = \int_0^{\infty} \kappa_{\eta} d\eta = \int_0^{\infty} \left(\frac{S}{d} \right)_{\eta} d\eta \quad \{3.13\}$$

Από τη σχέση αυτή παράγονται τα περισσότερα ενδιάμεσα αποτελέσματα κατά τη χρήση των μοντέλων ευρειών ζωνών. Ιδιαίτερα σημαντική, επίσης, είναι και η σχέση ορισμού της ολικής απορροφητικότητας της ζώνης ^[1]:

$$A = \int_{band} \varepsilon_{\eta} d\eta = \int_0^{\infty} (1 - e^{-\kappa_{\eta} \cdot L}) d\eta \quad \{3.14\}$$

Το πλέον διαδεδομένο μοντέλο ευρειών ζωνών είναι το **Εκθετικό Μοντέλο** (Exponential Wide Band Model - EWBM), το οποίο θα αναπτυχθεί αναλυτικά σε επόμενη ενότητα. Χάριν πληρότητας, ωστόσο, αναφέρεται το **Ορθογωνικό Μοντέλο** (Box Model), το οποίο αποτελεί την απλούστερη υλοποίηση μοντέλου ευρειών ζωνών. Σύμφωνα με το μοντέλο αυτό, η ζώνη μοντελοποιείται ως ένα παραλληλόγραμμο πλάτους $\Delta\eta_{eff}$ (ίσο με το «ενεργό» εύρος της ζώνης, όπου ενεργό εύρος θεωρείται αυτό, εντός του οποίου τα φαινόμενα απορρόφησης δε μπορούν να αμεληθούν) και ύψους κ_{aver} , ώστε τελικά αυτός ο μέσος συντελεστής απορρόφησης να υπολογίζεται από τη σχέση ^[1]:

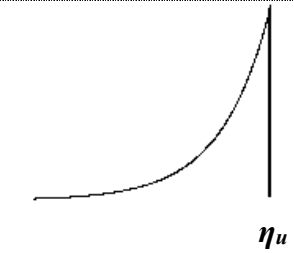
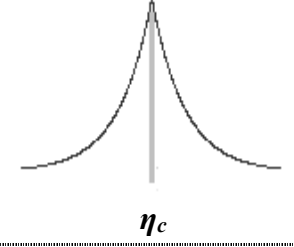
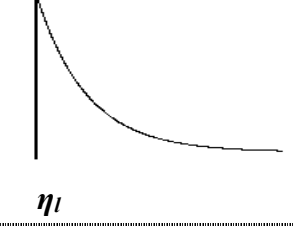
$$\kappa_{aver} = \frac{a}{\Delta\eta_{eff}} \quad \{3.15\}$$

Παρόλη την απλότητά του, το Ορθογωνικό Μοντέλο δε μπορεί να παράσχει ορθά αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις, μιας και απαιτεί ακριβή γνώση του ενεργού εύρους της ζώνης.

§ 3.2.5: Το Εκθετικό Μοντέλο Ευρειών Ζωνών

Το Εκθετικό Μοντέλο αποτελεί την πιο διαδεδομένη εκδοχή μοντέλου ευρειών ζωνών και μια από τις πιο ελκυστικές εναλλακτικές λύσεις για τη μελέτη τεχνικών συστημάτων, στα οποία συνυπάρχουν πολλές αέριες συνιστώσες διαφορετικών συγκεντρώσεων, έντονες θερμοκρασιακές διακυμάνσεις, φαινόμενα μεταφοράς μάζας κ.λπ, ενώ επίσης προσφέρει ικανοποιητικής ακρίβειας αποτελέσματα σε ένα ευρύ φάσμα συνθηκών λειτουργίας: πιέσεις από 0.5atm ως 20.0atm, θερμοκρασίες από 300K ως 3'000K και μήκη όδευσης ακτινοβολίας από 10⁻⁴m ως 100m. Αναφέρονται ως θεμελιωτές του Εκθετικού Μοντέλου ο D. K. Edwards και οι συνεργάτες του W. A. Menard και A. Balakrishnan, ενώ σημαντικές δημοσιεύσεις πάνω στο μοντέλο αυτό συνυπογράφουν και οι L. K. Glassen, W. C. Hauser, J. S. Tuchscher και M. M. Weiner.

Το Εκθετικό Μοντέλο βασίστηκε στην υπόθεση του D. K. Edwards ^[19] για την μορφή των ζωνών. Σύμφωνα με την υπόθεση αυτή, ο εξομαλυνθείς συντελεστής απορρόφησης $\frac{S}{d}$ μπορεί να λάβει μια από τις ακόλουθες μορφές ^[1]:

	ασύμμετρη ζώνη με άνω αιχμή	$\frac{S}{d}(\eta) = \frac{a}{\omega} \cdot e^{-\frac{\eta_u - \eta}{\omega}}$	{3.16}
	συμμετρική ζώνη	$\frac{S}{d}(\eta) = \frac{a}{\omega} \cdot e^{-\frac{2 \eta_c - \eta }{\omega}}$	
	ασύμμετρη ζώνη με κάτω αιχμή	$\frac{S}{d}(\eta) = \frac{a}{\omega} \cdot e^{-\frac{\eta - \eta_l}{\omega}}$	

Στις παραπάνω σχέσεις παρατηρήθηκε η εμφάνιση του όρου ω . Ο όρος αυτός καλείται **παράμετρος εύρους** και ισούται με το πλάτος της ζώνης στο $\frac{1}{e}$ του μεγίστου $\frac{S}{d}$.

Στην συνέχεια θα αναλυθεί η δομή του Εκθετικού Μοντέλου. Οι βασικές παράμετροι που απαιτούνται για την περιγραφή τη ολικής απορροφητικότητας μιας ζώνης είναι τρεις:

- ✓ η ένταση ζώνης, που όπως ήδη έχει αναφερθεί, παράγεται από την ολοκληρωτική σχέση $a = \int_{\eta_l}^{\eta_u} \kappa_{\eta} d\eta$, όπου η_L και η_U είναι αντίστοιχα ο κάτω και ο άνω κυματαριθμός της ζώνης. Μονάδες μέτρηση της έντασης ζώνης είναι το $\frac{cm^{-1}}{m^2}$.
- ✓ η παράμετρος επικάλυψης, που περιγράφει το κατά πόσο οι φασματικές γραμμές εντός της ζώνης επικαλύπτονται (ή, εναλλακτικά, το κατά πόσο αραιά ή πυκνά κατανέμονται οι φασματικές γραμμές εντός της ζώνης), όπως έχουμε ήδη δει κατά τη μελέτη του μοντέλου στενών ζωνών κατά Elsasser. Η εν λόγω παράμετρος είναι αδιάστατη.
- ✓ η παράμετρος εύρους, που, όπως ήδη αναφέρθηκε, εκφράζει το εύρος της ζώνης στο $\frac{1}{e}$ του μεγίστου $\frac{S}{d}$. Η συγκεκριμένη παράμετρος μετριέται σε cm^{-1} .

Από τα παραπάνω μεγέθη, δύο (η ένταση ζώνης και η παράμετρος εύρους) εξαρτώνται μόνο από τη θερμοκρασία, ενώ ένα από τη θερμοκρασία, την πίεση και τη συγκέντρωση.

Η ένταση ζώνης των ταλαντωτικών ζωνών συνδέεται με τη θερμοκρασία μέσω της σχέσης [20]:

$$\alpha(T) = \alpha_o \cdot \frac{\left[1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^m u_k \cdot \delta_k\right) \right] \cdot \psi(T)}{\left[1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^m u_{o,k} \cdot \delta_{o,k}\right) \right] \cdot \psi(T_o)} \quad \{3.17\}$$

όπου α_o είναι η ένταση αναφοράς, T_o είναι η θερμοκρασία αναφοράς, ίση με 100K, u είναι μια συνάρτηση που συνδέει τις θερμοκρασίες με τους θεμελιώδεις κυματαριθμούς (αντιστοιχούν στον αθροιστή k και καθένας τους περιγράφει μια χαρακτηριστική «κίνηση» καθενός μορίου):

$$u_k(T, \eta_k) = C_2 \cdot \frac{\eta_k}{T} \quad \{3.18\}$$

δ είναι μια παράμετρος που ποσοτικοποιεί τα φαινόμενα μεταπτώσεων των ταλαντωτικών ζωνών και $\psi(T)$ είναι η ακόλουθη συνάρτηση [20]:

$$\psi(T) = \frac{\prod_{k=1}^m \sum_{v_k=v_{o,k}}^{\infty} \frac{(v_k + g_k + |\delta_k| - 1)!}{(g_k - 1)! \cdot v_k!} \cdot \exp(-u_k \cdot v_k)}{\prod_{k=1}^m \sum_{v_k=0}^{\infty} \frac{(v_k + g_k - 1)!}{(g_k - 1)! \cdot v_k!} \cdot \exp(-u_k \cdot v_k)} \quad \{3.19\}$$

Στην παραπάνω συνάρτηση, οι παράμετροι δ και g χρησιμοποιούνται για να εκφράσουν τη μορφή του προφίλ της ζώνης (συγκεκριμένα, είναι η μεταβολή του ταλαντωτικού κβαντικού αριθμού κατά τη μετάβαση από μια ενεργειακή στάθμη στην άλλη και οι συντελεστές στάθμισης της μετάβασης αυτής, αντίστοιχα) και ο αριθμός v_o προκύπτει από τη σχέση [1]:

$$v_o = \begin{cases} 0 & [\delta \geq 0] \\ |\delta| & [\delta < 0] \end{cases} \quad \{3.20\}$$

Σημειώνεται ότι σε περίπτωση ύπαρξης j αλληλεπικαλυπτόμενων ζωνών (όπως συμβαίνει με τη ζώνη στα 2.70 μ m του H₂O), η ένταση ζώνης δίνεται από τη σχέση [1]:

$$a = \sum_j a_j \quad \{3.21\}$$

Η δεύτερη παράμετρος που μελετάται, ήτοι η παράμετρος επικάλυψης, δίνεται από την παρακάτω σχέση [1]:

$$\beta(T, p, y) = \gamma(T) \cdot p_e(p, y) = \left[\gamma_o \cdot \sqrt{\frac{T_o}{T}} \cdot \frac{\Phi(T)}{\Phi(T_o)} \right] \cdot p_e(p, y) \quad \{3.22\}$$

όπου p_e είναι η λεγόμενη «ισοδύναμη ενεργός πίεση» (που σχετίζεται με τις συγκρούσεις των απορροφώντων μορίων με άλλα απορροφώντα μόρια, ή και με μη απορροφώντα, αν υπάρχουν τέτοια) και που προκύπτει από τη σχέση ^[12]:

$$p_e(p, y) = [p + y \cdot (b - 1)]^n \quad \{3.23\}$$

στην οποία οι παράμετροι b και n (που ονομάζονται και *παράμετροι πίεσης*) είναι μεγέθη γνωστά από τη βιβλιογραφία. Ο αριθμός γ_0 λαμβάνεται ως αριθμητικό δεδομένο, ενώ η συνάρτηση $\Phi(T)$ (οι όροι της οποίας στη σχέση {3.22} λαμβάνονται υπ' όψιν μόνο σε ταλαντωτικές ζώνες) λαμβάνεται από τη σχέση ^[20]:

$$\Phi(T) = \frac{\left\{ \prod_{k=1}^m \sum_{v_k=v_{o,k}}^{\infty} \sqrt{\frac{(v_k + g_k + |\delta_k| - 1)!}{(g_k - 1)! \cdot v_k!}} \cdot \exp(-u_k \cdot v_k) \right\}^2}{\prod_{k=1}^m \sum_{v_k=v_{o,k}}^{\infty} \frac{(v_k + g_k + |\delta_k| - 1)!}{(g_k - 1)! \cdot v_k!} \cdot \exp(-u_k \cdot v_k)} \quad \{3.24\}$$

Αναφέρεται, τέλος, ότι αν αλληλεπικαλύπτονται j ζώνες, τότε η συνάρτηση $\gamma(T)$ λαμβάνεται από την ακόλουθη σχέση ^[1]:

$$\gamma = \frac{1}{a} \cdot \sum_j \sqrt{a_j \cdot \gamma_j} \quad \{3.25\}$$

Η τελευταία παράμετρος που εξετάζεται είναι η παράμετρος εύρους η οποία προκύπτει από τη σχέση ^[19]:

$$\omega(T) = \omega_0 \cdot \sqrt{\frac{T}{T_0}} \quad \{3.26\}$$

όπου ω_0 είναι η παράμετρος εύρους στη θερμοκρασία αναφοράς.

Όπως προαναφέρθηκε, κάποιες από τις παραπάνω εξισώσεις εφαρμόζονται μόνο σε ταλαντωτικές ζώνες. Για την ειδική περίπτωση της περιστροφικής ζώνης του H₂O εφαρμόζεται η σχέση:

$$a(T) = a_0 \cdot \exp\left(-9 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}}\right) \quad \{3.27\}$$

ενώ η συνάρτηση $\gamma(T)$ από την αντίστοιχη:

$$\gamma(T) = \gamma_0 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} \quad \{3.28\}$$

Ειδικά για τη χωροθέτηση της περιστροφικής ζώνης του υδρατμού, υπάρχει διαφωνία μεταξύ των ερευνητών. Ο D. K. Edwards θεωρεί ότι η περιστροφική ζώνη έχει κάτω αιχμή στα 0cm^{-1} , σε αντίθεση με άλλες βιβλιογραφικές πηγές, όπου η περιστροφική ζώνη είναι συμμετρική με κέντρο στα 140cm^{-1} . Στην παρούσα εργασία υιοθετείται η δεύτερη προσέγγιση.

Για τη λήψη των αριθμητικών δεδομένων, βάσει των οποίων δομείται το Εκθετικό Μοντέλο, μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι πίνακες της επόμενης σελίδας ^{[1], [20]}. Στον πρώτο πίνακα δίδονται οι τιμές των μεγεθών δ_k , a_0 , γ_0 και ω_0 , καθώς επίσης και οι παράμετροι πίεσης· στο δεύτερο πίνακα φαίνονται οι τιμές των παραμέτρων g_k και οι πλήθους m θεμελιώδεις κυματαριθμοί καθενός αερίου.

Συνιστώσα	Χωροθέτηση ζώνης			Παράμετροι πίεσης		a_0	γ_0	ω_0
	λ [μm]	η_c [cm^{-1}]	δ_k	n	b			
H₂O	71.0	140	(0,0,0)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	44,205.0	0.14311	69.3
	6.30	1,600	(0,1,0)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	41.2	0.09427	56.4
	2.70	3,760	(0,2,0)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	0.2	0.13219	60.0
			(1,0,0)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	2.3		
			(0,0,1)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	23.4		
	1.87	5,350	(0,1,1)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	3.0	0.08169	43.1
1.38	7,250	(1,0,1)	1.00	$8.6 \cdot \sqrt{\frac{T_0}{T}} + 0.5$	2.5	0.11628	32.0	
CO₂	15.0	667	(0,1,0)	0.70	1.30	19.00	0.06157	12.7
	10.4	960	(-1,0,1)	0.80	1.30	$2.47 \cdot 10^{-9}$	0.04017	13.4
	9.40	1,060	(0,-2,1)	0.80	1.30	$2.48 \cdot 10^{-9}$	0.11888	10.1
	4.30	2410 (=η _ν)	(0,0,1)	0.80	1.30	110.00	0.24723	11.2
	2.70	3,660	(1,0,1)	0.65	1.30	4.00	0.13341	23.5
	2.00	5,200	(2,0,1)	0.65	1.30	0.06	0.39305	34.5
CO	4.70	2,143	(1)	0.80	1.10	20.90	0.07506	25.5
	2.35	4,260	(2)	0.80	1.10	0.14	0.16758	20.0
CH₄	7.70	1,310	(0,0,0,1)	0.80	1.30	28.00	0.08698	21
	3.30	3,020	(0,0,1,0)	0.80	1.30	46.00	0.06973	56
	2.40	4,220	(1,0,0,1)	0.80	1.30	2.90	0.35429	60
	1.70	5,861	(1,1,0,1)	0.80	1.30	0.42	0.68598	45
NO	5.30	1,876	(1)	0.65	1.00	9	0.18050	20
SO₂	19.3	519	(0,1,0)	0.70	1.28	4.220	0.05291	33.1
	8.70	1,151	(1,0,0)	0.70	1.28	3.670	0.05952	24.8
	7.30	1,361	(0,0,1)	0.65	1.28	29.970	0.49299	8.8
	4.30	2,350	(2,0,0)	0.60	1.28	0.423	0.47513	16.5
	4.00	2,512	(1,0,1)	0.60	1.28	0.346	0.58937	10.9

	m	g_k	η_1	η_2	η_3	η_4
H₂O	3	(1,1,1)	3,652	1,595	3,756	
CO₂	3	(1,2,1)	1,351	666	2,396	
CO	1	(1)	2,143			
CH₄	4	(1,2,3,3)	2,914	1,526	3,020	1,306
NO	1	(1)	1,876			
SO₂	3	(1,1,1)	1,151	5119	1,361	

Όπως φάνηκε στις παραπάνω σχέσεις, είναι μόνιμη η παρουσία ιδιαίτερος σύνθετων συναρτήσεων κατά τους υπολογισμούς της έντασης ζώνης και της παραμέτρου επικάλυψης. Μολονότι δεν υπάρχει κάποια ανυπέβλητη δυσκολία στην εισαγωγή αυτών των σύνθετων συναρτήσεων σε υπολογιστικό κώδικα, εντούτοις η ύπαρξη των απειροσειρών θα επέφερε προφανή καθυστέρηση στη λήψη των αποτελεσμάτων, κάτι που σε πλέγματα μεγάλων διαστάσεων θα ήταν εξαιρετικά δυσάρεστο. Τίθεται, λοιπόν, το ερώτημα του κατά πόσο θα μπορούσαν οι συναρτήσεις αυτές να αναχθούν σε άλλες απλούστερες, χωρίς κάποιο σημαντικό συμβιβασμό στην ακρίβεια των παρεχομένων αποτελεσμάτων.

1. η συνάρτηση $\psi(T)$ μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά, εισάγοντας τη βοηθητική συνάρτηση ^{[19], [20]}:

$$S_k(u) = \frac{1}{1 - e^{-u_k}} \quad \{3.29\}$$

Η συνάρτηση αυτή, που σε διάφορες μορφές αντικαθιστά την αντίστοιχη $\psi(T)$ οδηγεί σε απλοποίηση των υπολογισμών, τόσο από άποψη υπολογιστικής ταχύτητας (μιας και δεν υπάρχουν πια απειροσειρές), όσο και από άποψη «εποπτείας» στους υπολογισμούς. Ο άλλος όρος της παράστασης {3.18}, ήτοι το κλάσμα των εκθετικών αθροιστών στις θεμελιώδεις ζώνες, μπορεί να αναπτυχθεί σε απλούς παράγοντες. Στον πίνακα της επόμενης σελίδας φαίνεται το πώς αναπτύσσονται οι όροι και πως τελικά προκύπτει η ένταση καθεμιάς ταλαντωτικής ζώνης (έχουμε ήδη αναφέρει ότι στην περιστροφική ζώνη του H₂O χρησιμοποιούνται άλλες εξισώσεις). Ο πίνακας διαβάζεται ως εξής:

- στην 3^η στήλη, αναπτύσσεται το εκθετικό άθροισμα στους εκάστοτε όρους που το αποτελούν
- στην 4^η στήλη, παρουσιάζεται ο όρος που θα αντικαταστήσει τη συνάρτηση $\psi(T)$
- στην 5^η στήλη εμφανίζεται ο τρόπος υπολογισμού της έντασης ζώνης:

- αν ο εκθετικός όρος (που έχει αναπτυχθεί στην 3^η στήλη) περιέχει μόνον έναν παράγοντα u_k , και μάλιστα στη μορφή $\exp(-u_k)$, τότε αποδεικνύεται ότι με τις τιμές αυτές των όρων δ_k θα δώσουν γραμμικές συναρτήσεις στην 4^η στήλη, ώστε τελικά τα δύο κλάσματα της εξίσωσης {3.18} να αλληλοαναιρεθούν και τελικά η ένταση ζώνης να ισούται, ανεξαρτήτως θερμοκρασίας, με τον όρο a_0 .

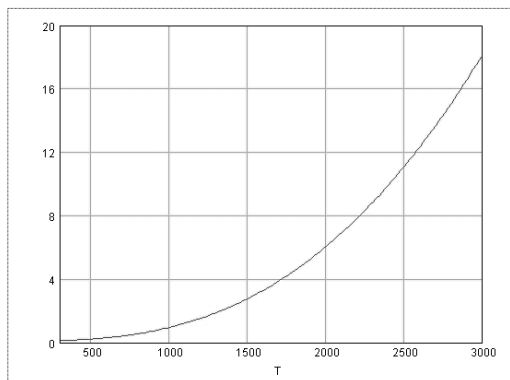
- αν ο εκθετικός όρος της 3^{ης} στήλης δεν είναι της μορφής $\exp(-u_k)$, τότε υπολογίζονται οι διαφορές $\left[1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^m u_k \cdot \delta_k\right) \right]$ και

$\left[1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^m u_{0,k} \cdot \delta_k\right) \right]$, αντικαθίστανται οι συναρτήσεις $\psi(T)$ και με τις

αντίστοιχες παραστάσεις των S_k και τελικά εφαρμόζεται η εξίσωση {3.18}.

Συνιστώσα	λ [μm]	$\left[1 - \exp\left(-\sum_{k=1}^m u_k \cdot \delta_k\right)\right] = \dots$	$\psi(T) = \dots$	$a(T) = \dots$
H₂O	6.30	$1 - \exp(-u_2)$	S_2	a_0
	2.70	$1 - \exp(-2 \cdot u_2)$	$2 \cdot S_2^2$	{3.18}
		$1 - \exp(-u_1)$	S_1	a_0
		$1 - \exp(-u_3)$	S_3	a_0
	1.87	$1 - \exp(-u_2 - u_3)$	$S_2 \cdot S_3$	{3.18}
	1.38	$1 - \exp(-u_1 - u_3)$	$S_1 \cdot S_3$	{3.18}
CO₂	15.0	$1 - \exp(-u_2)$	$2 \cdot S_2$	a_0
	10.4	$1 - \exp(u_1 - u_3)$	$e^{-u_1} \cdot (2 - e^{-u_1}) \cdot S_1 \cdot S_3$	{3.18}
	9.40	$1 - \exp(2 \cdot u_2 - u_3)$	$e^{-u_1} \cdot (2 - e^{-u_1}) \cdot S_1 \cdot S_3$	{3.18}
	4.30	$1 - \exp(-u_3)$	S_3	a_0
	2.70	$1 - \exp(-u_1 - u_3)$	$S_1 \cdot S_3$	{3.18}
	2.00	$1 - \exp(-2 \cdot u_1 - u_3)$	$2 \cdot S_1^2 \cdot S_3$	{3.18}
CO	4.70	$1 - \exp(-u_1)$	S_1	a_0
	2.35	$1 - \exp(-2 \cdot u_1)$	$2 \cdot S_1^2$	{3.18}
CH₄	7.70	$1 - \exp(-u_4)$	$3 \cdot S_4$	a_0
	3.30	$1 - \exp(-u_3)$	$3 \cdot S_3$	a_0
	2.40	$1 - \exp(-u_1 - u_4)$	$3 \cdot S_1 \cdot S_4$	{3.18}
	1.70	$1 - \exp(-u_1 - u_2 - u_4)$	$6 \cdot S_1 \cdot S_2 \cdot S_4$	{3.18}
NO	5.30	$1 - \exp(-u_1)$	S_1	a_0
SO₂	19.3	$1 - \exp(-u_2)$	S_2	a_0
	8.70	$1 - \exp(-u_1)$	S_1	a_0
	7.30	$1 - \exp(-u_3)$	S_3	a_0
	4.30	$1 - \exp(-2 \cdot u_1)$	$2 \cdot S_1^2$	{3.18}
	4.00	$1 - \exp(-u_1 - u_3)$	$S_1 \cdot S_3$	{3.18}

2. για την απλοποίηση της συνάρτησης $\Phi(T)$ χρειάστηκε πρώτα να γίνουν εφαρμογές αυτής βάσει του ορισμού, ώστε να διαπιστωθεί ότι σε ένα ικανό εύρος θερμοκρασιών,



η συνάρτηση αυτή συμπεριφερόταν παρόμοια με πολυωνυμική (όπως φαίνεται στο διπλανό σχήμα, το οποίο αναφέρεται στη ζώνη $9.40\mu\text{m}$ του CO_2) και μάλιστα η καλύτερη προσαρμογή επιτυγχανόταν με πολώνυμα 4^{ου} βαθμού. Συγκεκριμένα, πραγματοποιήθηκε η απλοποίηση $\frac{\Phi(T)}{\Phi(T_0)} = \sum_{j=1}^4 \beta_j \cdot T^j$, η οποία εφαρμόστηκε

σε όλες τις ζώνες όλων των αερίων, με επαλήθευση ακόμα και τη «σύνθετη» ζώνη του H_2O στα $2.70\mu\text{m}$. Με τη μέθοδο αυτή, οι απειροσειρές του ορισμού της συνάρτησης $\Phi(T)$ ανάγονται σε πολώνυμα και τελικά ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος μειώνεται κατακόρυφα, η δε αξιοπιστία των απλοποιητικών συναρτήσεων έχει ελεγχθεί σε όλο το εύρος ισχύος του Εκθετικού Μοντέλου και οδηγεί σε μέσα σχετικά σφάλματα μικρότερα του 1%. Στον παρακάτω πίνακα αναγράφονται οι τιμές των συντελεστών β_i των πολυωνυμικών προσεγγίσεων για κάθε ταλαντωτική ζώνη καθενός αερίου.

		β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
H₂O	6.30	0.842307	$3.79754 \cdot 10^{-4}$	$6.68034 \cdot 10^{-7}$	$1.23242 \cdot 10^{-9}$	$3.9887 \cdot 10^{-14}$
	2.70	1.540955	$7.48362 \cdot 10^{-4}$	$3.48073 \cdot 10^{-7}$	$2.21254 \cdot 10^{-9}$	$1.5899 \cdot 10^{-13}$
	1.87	0.744548	$9.02501 \cdot 10^{-4}$	$-2.69531 \cdot 10^{-7}$	$1.88458 \cdot 10^{-9}$	$7.4664 \cdot 10^{-14}$
	1.38	0.795496	$7.58821 \cdot 10^{-4}$	$-4.69848 \cdot 10^{-7}$	$1.65543 \cdot 10^{-9}$	$1.0327 \cdot 10^{-13}$
CO₂	15.0	0.196135	$4.60263 \cdot 10^{-3}$	$-6.54262 \cdot 10^{-7}$	$1.93769 \cdot 10^{-8}$	$4.6826 \cdot 10^{-15}$
	10.4	-1.656057	$1.49517 \cdot 10^{-2}$	$-2.2221 \cdot 10^{-5}$	$3.34193 \cdot 10^{-8}$	$6.3939 \cdot 10^{-13}$
	9.40	-1.642894	$1.4896 \cdot 10^{-2}$	$-2.21505 \cdot 10^{-5}$	$3.33859 \cdot 10^{-8}$	$6.4455 \cdot 10^{-13}$
	4.30	-0.4652	$8.65064 \cdot 10^{-3}$	$-1.09215 \cdot 10^{-5}$	$2.41811 \cdot 10^{-8}$	$6.1291 \cdot 10^{-14}$
	2.70	-1.563141	$1.49529 \cdot 10^{-2}$	$-2.40186 \cdot 10^{-5}$	$3.8078 \cdot 10^{-8}$	$1.4219 \cdot 10^{-13}$
CO	2.00	-2.333098	$1.96932 \cdot 10^{-2}$	$-3.48132 \cdot 10^{-5}$	$5.02315 \cdot 10^{-8}$	$7.2356 \cdot 10^{-15}$
	4.70	0.968458	$-3.19407 \cdot 10^{-4}$	$1.58693 \cdot 10^{-6}$	$-4.95428 \cdot 10^{-10}$	$5.8419 \cdot 10^{-14}$
CH₄	2.35	0.989397	$-5.32794 \cdot 10^{-4}$	$2.13906 \cdot 10^{-6}$	$-6.57943 \cdot 10^{-10}$	$7.6326 \cdot 10^{-14}$
	7.70	1.564842	$-6.894421 \cdot 10^{-3}$	$2.54499 \cdot 10^{-5}$	$-2.84493 \cdot 10^{-8}$	$2.7312 \cdot 10^{-11}$
	3.30	1.433591	$-6.750206 \cdot 10^{-3}$	$2.66633 \cdot 10^{-5}$	$-3.18397 \cdot 10^{-8}$	$2.7962 \cdot 10^{-13}$
NO	2.40	4.52366	$-2.470598 \cdot 10^{-2}$	$6.36154 \cdot 10^{-5}$	$-6.60821 \cdot 10^{-8}$	$4.3582 \cdot 10^{-11}$
	1.70	5.269932	$-3.061382 \cdot 10^{-2}$	$8.01309 \cdot 10^{-5}$	$-8.63644 \cdot 10^{-8}$	$5.6101 \cdot 10^{-11}$
	5.30	0.896005	$-6.34331 \cdot 10^{-5}$	$1.67418 \cdot 10^{-6}$	$-5.3493 \cdot 10^{-10}$	$6.4022 \cdot 10^{-14}$
SO₂	19.3	0.358415	$4.26431 \cdot 10^{-3}$	$-1.85430 \cdot 10^{-6}$	$3.89339 \cdot 10^{-8}$	$-5.7857 \cdot 10^{-15}$
	8.70	0.234585	$5.13241 \cdot 10^{-3}$	$-7.29580 \cdot 10^{-6}$	$4.03494 \cdot 10^{-8}$	$-5.6772 \cdot 10^{-14}$
	7.30	0.124110	$5.94186 \cdot 10^{-3}$	$-9.34916 \cdot 10^{-6}$	$4.05602 \cdot 10^{-8}$	$-6.9248 \cdot 10^{-14}$
	4.30	0.334783	$5.54569 \cdot 10^{-3}$	$-1.23091 \cdot 10^{-5}$	$5.30622 \cdot 10^{-8}$	$-2.7098 \cdot 10^{-13}$
	4.00	-0.795474	$1.25562 \cdot 10^{-2}$	$-2.76297 \cdot 10^{-5}$	$6.52692 \cdot 10^{-8}$	$-2.2545 \cdot 10^{-13}$

Πλέον, έχουν περιγραφεί οι τρόποι υπολογισμού (αναλυτικά και προσεγγιστικά) των θεμελιωδών παραμέτρων α , β και ω , οπότε είναι πλέον δυνατό να αναλυθεί το Εκθετικό Μοντέλο. Τα βήματα που ακολουθούνται τώρα είναι τα ακόλουθα:

- a. υπολογίζεται το *οπτικό μήκος*, X , το οποίο εξ' ορισμού είναι ίσο με το μήκος L πολλαπλασιασμένο με την πυκνότητα της εκάστοτε συνιστώσας. Χρησιμοποιείται η σχέση:

$$X = \frac{(y \cdot p) \cdot M}{R_0 \cdot T} \cdot L \quad \{3.30\}$$

όπου M είναι η μοριακή μάζα της συνιστώσας και R_0 είναι η σταθερά των αερίων, ίση προς $8.314 \frac{J}{mole \cdot K}$. Το οπτικό μήκος δίδεται σε $\left[\frac{g}{m^2} \right]$ και υπολογίζεται

ξεχωριστά για κάθε αέριο (άρα, είναι κοινό για όλες τις ζώνες του ίδιου αερίου).

- b. δεδομένου του οπτικού μήκους, υπολογίζονται για κάθε ζώνη:
1. το *οπτικό πάχος* της ζώνης, το οποίο αποτελεί μια ποσοτικοποίηση της ικανότητας του μέσου να «εξασθενίζει» τη διερχόμενη «ενέργεια», βάσει της σχέσης ^[19]:

$$\tau_0 = \frac{\alpha}{\omega} \cdot X \quad \{3.31\}$$

2. η *ανηγμένη απορροφητικότητα* της ζώνης, ως συνάρτηση της παραμέτρου επικάλυψης και του οπτικού πάχους και μάλιστα με διαφορετικές συναρτήσεις ανά πεδίο τιμών των μεγεθών αυτών ^[1]:

$$A^* = \begin{cases} (\beta \leq 1) & \begin{cases} \tau_0 & 0 \leq \tau_0 < \beta \\ 2 \cdot \sqrt{\tau_0 \cdot \beta} - \beta & \beta \leq \tau_0 < \frac{1}{\beta} \\ \ln(\tau_0 \cdot \beta) + 2 - \beta & \tau_0 \geq \frac{1}{\beta} \end{cases} \\ (\beta > 1) & \begin{cases} \tau_0 & 0 \leq \tau_0 < 1 \\ \ln(\tau_0) + 1 & \tau_0 \geq 1 \end{cases} \end{cases} \quad \{3.32\}$$

3. η *ολική απορροφητικότητα* της ζώνης, βάσει της σχέσης

$$A = \omega \cdot A^* \quad \{3.33\}$$

4. η *εκπεμνιμότητα* της ζώνης, ως συνάρτηση της ανηγμένης απορροφητικότητας, του οπτικού πάχους και της παραμέτρου επικάλυψης ^[19]:

$$\varepsilon = \begin{cases} (\beta \leq 1) & \begin{cases} 0.1 & 0 \leq \tau_0 < \beta \\ 1 - \frac{\sqrt{\tau_0 \cdot \beta}}{A_i^*} & \beta \leq \tau_0 < \frac{1}{\beta} \\ 1 - \frac{1}{A^*} & \tau_0 \geq \frac{1}{\beta} \end{cases} \\ (\beta > 1) & \begin{cases} 0.1 & 0 \leq \tau_0 < 1 \\ 1 - \frac{1}{A^*} & \tau_0 \geq 1 \end{cases} \end{cases} \quad \{3.34\}$$

5. βάσει της εκπεμψιμότητας, είναι πλέον δυνατός ο υπολογισμός του συντελεστή απορρόφησης της εκάστοτε ζώνης καθενός αερίου, εφαρμόζοντας τη σχέση {3.12}. Ο συντελεστής αυτός εκφράζεται στην αντίστροφη μονάδα του μήκους ακτινοβολίας.
6. το εύρος της ζώνης, καθώς επίσης και οι κάτω και άνω κυματαριθμοί ^[19]:

$$\begin{cases} \Delta\eta = \frac{A}{\varepsilon} \\ \eta_L = \eta_C - \frac{1}{2} \cdot \Delta\eta \\ \eta_U = \eta_C + \frac{1}{2} \cdot \Delta\eta \end{cases} \quad \{3.35\}$$

Η παραπάνω σχέση ισχύει για ζώνες με συμμετρική μορφή. Για μη συμμετρικές ζώνες, όπως αυτή των $4.30\mu m$ του CO_2 , ο κάτω ή άνω κυματαριθμός της ζώνης προκύπτει από το δεδομένο άνω ή κάτω κυματαριθμού με αφαίρεση ή πρόσθεση του παράγοντα $\Delta\eta$ αντίστοιχα.

Πλέον, για κάθε ζώνη καθενός αερίου έχουν υπολογιστεί, τόσο ο συντελεστής απορρόφησης, όσο και το εύρος. Το επόμενο βήμα είναι ο προσδιορισμός του ολικού συντελεστή απορρόφησης, που θα εκφράζει τη «συνισταμένη» των φαινομένων απορρόφησης από όλα τα αέρια. Ο ολικός αυτός συντελεστής θα επιτρέπει την άπαξ εφαρμογή της εξίσωσης {3.1}, αναιρώντας την ανάγκη να εφαρμοστεί ξεχωριστά ανά ζώνη η εξίσωση αυτή, με προφανές όφελος υπολογιστικού χρόνου. Τα βήματα που εφαρμόζονται για τον υπολογισμό του ολικού συντελεστή απορρόφησης, κ_{tot} , είναι τα ακόλουθα:

- a) για κάθε ζώνη, υπολογίζεται η διαπερατότητα, τ , βάσει της εξίσωσης {3.2}
- b) βάσει των υπολογισθέντων κάτω και άνω κυματαριθμών κάθε ζώνης, εντοπίζονται τα διαστήματα αλληλοεπικάλυψης και γίνεται η σύνθεση της επίδρασης καθεμιάς ζώνης στις περιοχές αυτές, πολλαπλασιάζοντας τις διαπερατότητες των επικαλυπτόμενων ζωνών ^[12]. Σκοπός της διαδικασίας αυτής είναι να μην αμεληθεί η συνισταμένη επίδραση των ζωνών στις περιοχές αλληλεπικάλυψης.
- c) γίνεται ολοκλήρωση των συντελεστών απορρόφησης για το εκάστοτε εύρος κυματαριθμών ως προς τη συνάρτηση Planck ^[19]. Αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης

αυτής είναι η ολική απορροφητικότητα του μείγματος, η οποία, δεδομένου του Νόμου του Kirchhoff (βλ. εξίσωση {1.30}), ισούται με την ολική εκπεμπιμότητά του.

- d) δεδομένης της εκπεμπιμότητας, μπορεί να γίνει χρήση της εξίσωσης {3.12}, ώστε τελικώς να υπολογιστεί ο ολικός συντελεστής απορρόφησης του μείγματος.

4^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΜΕΛΕΤΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ ΣΤΕΡΕΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΥΣΗΣ

§ 4.1: Φύση και Σημασία της Θερμικής Ακτινοβολίας Σωματιδίων

§ 4.1.1: Εισαγωγή

Όταν ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα αλληλεπιδρά με ένα μέσο που περιέχει σωματίδια, η ακτινοβολία του κύματος απορροφάται ή και σκεδάζεται. Στην παρούσα εργασία θα μελετηθούν οι ιδιότητες ως προς τη θερμική ακτινοβολία μειγμάτων που αποτελούνται από σωματίδια ιπτάμενης τέφρας, αιθάλης, εξανθρακώματος και άνθρακα. Τα είδη αυτά σωματιδίων απαντώνται στα προϊόντα της καύσης άνθρακα, για το λόγο αυτό η γνώση των ιδιοτήτων τους και της επίδρασής τους στη μετάδοση θερμότητας με ακτινοβολία είναι ζωτικής σημασίας για την πρόβλεψη και την αποδοτική λειτουργία ενός καυστήρα στερεού καυσίμου.

§ 4.1.2: Εισαγωγή των εννοιών μιγαδικού δείκτη διάθλασης και παραμέτρου μεγέθους

Το πόσο και σε ποια κατεύθυνση ένα σωματίδιο σκεδάζει το προσπίπτον ηλεκτρομαγνητικό κύμα εξαρτάται από:

- ✓ το σχήμα του σωματιδίου
- ✓ το υλικό του σωματιδίου
- ✓ το σχετικό μέγεθος του σωματιδίου
- ✓ το διάκενο μεταξύ των σωματιδίων

Από τους ανωτέρω παράγοντες, οι τρεις τελευταίοι ποσοτικοποιούνται με την εισαγωγή κατάλληλων αριθμητικών μεγεθών. Στην παράγραφο αυτή θα περιγραφούν αυτά τα αριθμητικά μεγέθη και σε επόμενες ενότητες θα εξετάσουμε την επίδρασή τους στις ιδιότητες ακτινοβολίας των σωματιδίων.

Ο *μιγαδικός δείκτης διάθλασης*, εκφράζεται μαθηματικά μέσω της σχέσης:

$$m = n + j \cdot k \quad \{4.1\}$$

και έχει διττή έννοια: το πραγματικό του μέρος, n , εκφράζει την ελάττωση της ταχύτητας διάδοσης του κύματος (κάτι που έχουμε ήδη συναντήσει στην εξίσωση {1.2}), ενώ το φανταστικό του μέρος ποσοτικοποιεί τις απώλειες λόγω απορρόφησης καθώς το κύμα διαδίδεται μέσα στο μέσο. (όχι σπάνια, κάποιοι μελετητές αποκαλούν το φανταστικό δείκτη διάθλασης ως «συντελεστή απορρόφησης», ωστόσο στην παρούσα εργασία ο συντελεστής απορρόφησης θα οριστεί με διαφορετικό τρόπο) Αμφότερα τα μέρη αποτελούν συναρτήσεις του μήκους κύματος του προσπίπτοντος κύματος, δηλαδή:

$$m(\lambda) = n(\lambda) + j \cdot k(\lambda) \quad \{4.2\}$$

Για τα είδη σωματιδίων που εξετάζονται οι δείκτες διάθλασης προκύπτουν από τις παρακάτω συσχετίσεις. Οι εν λόγω συσχετίσεις έχουν ληφθεί για συγκεκριμένες συστάσεις καθενός είδους σωματιδίων, οι οποίες θεωρούνται ως «τυπικές» για καθένα από αυτά. Επειδή ο δείκτης διάθλασης είναι οπτική ιδιότητα των σωματιδίων, για την εύρεση τιμών αυτού για διαφορετική σύσταση, θα πρέπει να ακολουθηθεί συγκεκριμένη πειραματική διαδικασία ^[12].

$$\checkmark \text{ για ιπτάμενη τέφρα: } \left\{ \begin{array}{l} n = \begin{cases} 1.5 & (\lambda < 6\mu m) \\ 1.5 - 0.35 \cdot (\lambda - 6) & (6\mu m \leq \lambda < 8\mu m) \\ 0.8 + 0.5 \cdot (\lambda - 8) & (8\mu m \leq \lambda < 11\mu m) \\ 2.3 - 0.5 \cdot (\lambda - 11) & (11\mu m \leq \lambda < 12\mu m) \end{cases} \\ k = \begin{cases} 10^{-4.6+2.2 \cdot (\lambda-0.5)} & (\lambda < 1\mu m) \\ 10^{-3.5} & (1\mu m \leq \lambda < 4\mu m) \\ 10^{-3.5+(\lambda-4)} & (4\mu m \leq \lambda < 5\mu m) \\ 10^{-2.5+0.24 \cdot (\lambda-5)} & (5\mu m \leq \lambda < 7.5\mu m) \\ 10^{-1.9+1.8 \cdot (\lambda-7.5)} & (7.5\mu m \leq \lambda < 8.5\mu m) \\ 10^{-0.1} & (8.5\mu m \leq \lambda < 10.5\mu m) \\ 10^{-0.1-0.733 \cdot (\lambda-10.5)} & (10.5\mu m \leq \lambda < 12\mu m) \end{cases} \end{array} \right. \quad \{4.3\}$$

$$\checkmark \text{ για άνθρακα: } \left\{ \begin{array}{l} n = 1.8 + 3.714 \cdot 10^{-3} \cdot (\lambda - 2) \\ k = 0.02 + 2.391 \cdot 10^{-3} \cdot (\lambda - 2) \end{array} \right. \quad \{4.4\}$$

$$\checkmark \text{ για εξανθράκωμα: } \left\{ \begin{array}{l} n = \begin{cases} 1.85 + 9.6667 \cdot 10^{-2} \cdot (\lambda - 2) & (\lambda < 5\mu m) \\ 2.14 + 7.71 \cdot 10^{-2} \cdot (\lambda - 5) & (\lambda \geq 5\mu m) \end{cases} \\ k = \begin{cases} 2.29 + 1.333 \cdot 10^{-1} \cdot (\lambda - 2) & (\lambda < 5\mu m) \\ 2.69 + 6.145 \cdot 10^{-2} \cdot (\lambda - 5) & (\lambda \geq 5\mu m) \end{cases} \end{array} \right. \quad \{4.5\}$$

Το σχετικό μέγεθος των σωματιδίων ανάγεται πάντοτε ως προς το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Θεωρώντας σφαιρικά σωματίδια, ορίζεται η **παράμετρος μεγέθους**, βάσει της σχέσης ^[11]:

$$x = \frac{\pi \cdot d}{\lambda} \quad \{4.6\}$$

Η παράμετρος μεγέθους είναι αδιάστατος αριθμός, επομένως θα πρέπει τόσο η διάμετρος, d , του σωματιδίου, όσο και το μήκος κύματος, λ , της ακτινοβολίας να είναι εκπεφρασμένες στην ίδια μονάδα (συνήθως, σε μm).

Το διάκενο μεταξύ των σωματιδίων ορίζεται ποσοτικά ως ο λόγος της απόστασης των κέντρων των σωματιδίων προς το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Όμως, στις πρακτικές εφαρμογές, ο λόγος αυτός είναι αρκετές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερος της μονάδας, οπότε το εν λόγω διάκενο δεν επηρεάζει τη σκέδαση ως φαινόμενο, οπότε δε χρειάζεται να ληφθεί υπ' όψιν ^[1].

§ 4.2: Προσομοίωση σωματιδίων από μικρές σφαίρες

§ 4.2.1: Απορρόφηση και σκέδαση από μια μεμονωμένη σφαίρα

Η σκέδαση και η απορρόφηση της ακτινοβολίας από μια μεμονωμένη σφαίρα μελετήθηκε για πρώτη φορά στα τέλη του 19^{ου} αιώνα από Lord Rayleigh, ο οποίος κατάφερε να μελετήσει το φαινόμενο για πολύ μικρές σφαίρες (δηλαδή, με παράμετρο μεγέθους πολύ μικρότερο της μονάδας). Η εργασία του Rayleigh συνεχίστηκε από τον L. Lorenz, τον G. Mie και τον P. Debye. Η εργασία του L. Lorenz βασίστηκε στη δική του θεωρία περί ηλεκτρομαγνητισμού, παρά σε αυτή του Maxwell, σε αντίθεση με τον G. Mie, ο οποίος ανέπτυξε μια ισοδύναμη λύση των εξισώσεων Maxwell για ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα εντός δεδομένου μέσου. Και, μολονότι η εργασία του L. Lorenz είναι προγενέστερη της αντίστοιχης του G. Mie, εντούτοις η γενική θεωρία περιγραφής της σκέδασης και απορρόφησης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας από μικρές σφαίρες συνήθως αναφέρεται ως «θεωρία Mie».

Η σύνθετη *θεωρία σκέδασης Mie* χρησιμοποιείται εν γένει αν το μέγεθος της σφαίρας είναι αρκετά μεγάλο για να χρησιμοποιηθεί η θεωρία Rayleigh, αλλά και πολύ μικρό, ώστε να εφαρμοστεί γεωμετρική οπτική. Βάσει της θεωρίας αυτής, η ποσότητα της σκέδασης και της απορρόφησης ακτινοβολίας από ένα σωματίδιο συνήθως εκφράζεται σε όρους *διατομής απορρόφησης* και *διατομής σκέδασης*. Το άθροισμα των δύο αυτών όρων ορίζεται ως *διατομή εξασθένισης* ^[1]:

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \quad \{4.7\}$$

Η γνώση των διατομών αυτών οδηγεί στον προσδιορισμό των *παραγόντων αποτελεσματικότητας*, οι οποίοι είναι αδιάστατα μεγέθη ^[1]:

$$\begin{cases} Q_{abs} &= \frac{C_{abs}}{\pi \cdot a^2} \\ Q_{sca} &= \frac{C_{sca}}{\pi \cdot a^2} \\ Q_{ext} &= \frac{C_{ext}}{\pi \cdot a^2} \end{cases} \quad \{4.8\}$$

όπου a είναι η ακτίνα της σφαίρας. Ο συνδυασμός των εξισώσεων {4.7} και {4.8} οδηγεί στη σύνδεση μεταξύ των παραγόντων αποτελεσματικότητας απορρόφησης, σκέδασης και εξασθένισης:

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{sca} \quad \{4.9\}$$

Όταν η ακτινοβολία αλληλεπιδρά με ένα σφαιρικό σωματίδιο, μπορεί να σκεδαστεί κατά γωνία Θ . μάλιστα, για σφαιρικά σωματίδια, η γωνία Θ είναι το μόνο απαραίτητο μέγεθος για την ποσοτικοποίηση της «εκτροπής» της ακτινοβολίας λόγω σκέδασης.

Σύμφωνα με τη θεωρία Mie, οι διατομές σκέδασης και εξασθένισης προκύπτουν από τις παρακάτω σχέσεις ^[1]:

$$\begin{cases} C_{sca} &= \frac{2\pi}{k^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) \cdot (|a_n|^2 + |b_n|^2) \right\} \\ C_{ext} &= \frac{2\pi}{k^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (2n+1) \cdot \text{Re}[a_n + b_n] \right\} \end{cases} \quad \{4.10\}$$

όπου

$$k^2 = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \{4.11\}$$

και

$$\begin{cases} a_n &= \frac{m \cdot \psi_n(m \cdot x) \cdot \psi'_n(x) - \psi_n(x) \cdot \psi'_n(m \cdot x)}{m \cdot \psi_n(m \cdot x) \cdot \xi'_n(x) - \xi_n(x) \cdot \psi'_n(m \cdot x)} \\ b_n &= \frac{\psi_n(m \cdot x) \cdot \psi'_n(x) - m \cdot \psi_n(x) \cdot \psi'_n(m \cdot x)}{\psi_n(m \cdot x) \cdot \xi'_n(x) - m \cdot \xi_n(x) \cdot \psi'_n(m \cdot x)} \end{cases} \quad \{4.12\}$$

Στην παραπάνω σχέση εμφανίζονται οι συναρτήσεις $\psi(x)$ και $\xi(x)$, γνωστές και ως συναρτήσεις Riccati – Bessel, οι οποίες συνδέονται με τις συναρτήσεις Bessel και Hankel βάσει των σχέσεων

$$\begin{cases} \psi_n(z) &= \sqrt{\frac{\pi \cdot z}{2}} \cdot J_{\frac{n+1}{2}}(z) \\ \xi_n(z) &= \sqrt{\frac{\pi \cdot z}{2}} \cdot H_{\frac{n+1}{2}}(z) \end{cases} \quad \{4.13\}$$

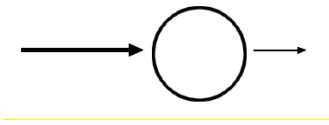
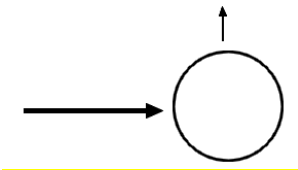
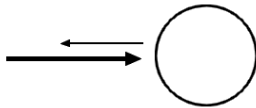
Με παρόμοιο τρόπο, αλλά με χρήση της παραμέτρου μεγέθους, ορίζονται οι παράγοντες αποτελεσματικότητας σκέδασης και εξασθένισης:

$$\begin{cases} Q_{sca} &= \frac{2\pi}{x^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \{(2n+1) \cdot (|a_n|^2 + |b_n|^2)\} \\ Q_{ext} &= \frac{2\pi}{x^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \{(2n+1) \cdot \text{Re}[a_n + b_n]\} \end{cases} \quad \{4.14\}$$

Μια άλλη παράμετρος που συμβάλλει στην ποσοτικοποίηση της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας και σφαιρών είναι ο **παράγων ασυμμετρίας**, ο οποίος περιγράφει τη συμπεριφορά της σκέδασης ως προς την κατεύθυνση, βάσει το μέσου συνημιτόνου της γωνίας σκέδασης (για το λόγο αυτό, εξάλλου, όχι σπάνια στη βιβλιογραφία αντί του όρου «παράγων ασυμμετρίας» χρησιμοποιείται ο όρος «μέσο συνημίτονο»). Για σκέδαση από σφαιρικά σωματίδια, ο παράγων ασυμμετρίας προκύπτει από τη ^[1] σχέση:

$$g = \frac{4}{x^2 \cdot Q_{sca}} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{n \cdot (n+2)}{n+1} \cdot \text{Re}\{a_n \cdot a_{n+1}^* + b_n \cdot b_{n+1}^*\} + \frac{2n+1}{n \cdot (n+1)} \cdot \text{Re}\{a_n \cdot b_n^*\} \right] \quad \{4.15\}$$

Η φυσική σημασία του παράγοντα ασυμμετρίας σχετίζεται με την διεύθυνση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας με την προσπίπτουσα. Τα σχήματα του παρακάτω πίνακα είναι κατατοπιστικά· με έντονη γραμμή σημειώνεται η προσπίπτουσα ακτινοβολία και με λεπτή η αντίστοιχη σκεδαζόμενη.

		
$g = 1.0$	$g = 0.0$	$g = -1.0$

§ 4.2.2: Ιδιότητες ακτινοβολίας νεφών σωματιδίων

Στα θέματα μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία, σημαντικός είναι ο καθορισμός της προσέγγισης της επίδρασης των νεφών σωματιδίων, διαφόρων ειδών και μεγεθών. Στην ενότητα αυτή εξετάζουμε το πώς συμπεριφέρονται τα νέφη σωματιδίων, κατηγοριοποιώντας τα ως νέφη ίσων σωματιδίων και ως νέφη μη ίσων σωματιδίων.

Ορίζεται ως **συντελεστής σκέδασης** το κλάσμα της ενέργειας που σκεδάζεται από το νέφος ανά μονάδα μήκους κατά μήκος της διεύθυνσης της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Ο συντελεστής σκέδασης ισούται με το γινόμενο της διατομής σκέδασης επί το πλήθος των ακτίνας a (ίσων) σωματιδίων στη μονάδα του όγκου, N ^[1]:

$$\sigma_{s,\lambda} = N \cdot C_{sca} = N \cdot \pi \cdot a^2 \cdot Q_{sca} \quad \{4.16\}$$

ενώ με παρόμοιο τρόπο ορίζονται ο *συντελεστής απορρόφησης* και ο *συντελεστής εξασθένισης* [1].

$$\kappa_{\lambda} = N \cdot C_{abs} = N \cdot \pi \cdot a^2 \cdot Q_{abs} \quad \{4.17\}$$

$$\beta_{\lambda} = N \cdot C_{ext} = N \cdot \pi \cdot a^2 \cdot Q_{ext} = \sigma_{s,\lambda} + \kappa_{\lambda} \quad \{4.18\}$$

Αναφέρεται ότι, μολονότι στην πράξη δε μπορεί να επιτευχθεί πλήρης ομοιότητα μεταξύ των σωματιδίων, εντούτοις η παραδοχή αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ταξινόμηση μη ίσων σωματιδίων σε κλάσεις μεγέθους και τον περαιτέρω επιμέρους υπολογισμό των ιδιοτήτων ακτινοβολίας για κάθε κλάση ξεχωριστά.

Για την προσομοίωση νεφών μη ίσων σωματιδίων υπάρχουν δύο προσεγγίσεις: η πρώτη προσέγγιση ταξινομεί τα σωματίδια σε κλάσεις μεγέθους, ώστε κάθε κλάση να περιλαμβάνει ισομεγέθη, και οι συντελεστές ακτινοβολίας υπολογίζονται για κάθε κλάση ξεχωριστά και στο τέλος με επαλληλία για όλο το νέφος· η δεύτερη προσέγγιση (που θα χρησιμοποιηθεί εδώ) χρησιμοποιεί μια συνεχή συνάρτηση του μεγέθους, την *κατανομή μεγέθους σωματιδίων* (στα αγγλικά, Particle Size Distribution). Η συνάρτηση αυτή είναι συνεχής και κυμαίνεται μεταξύ των δύο ακραίων διαμέτρων του εκάστοτε είδους σωματιδίου, ενώ εμπεριέχει και την επίδραση της «συνηθέστερης» διαμέτρου. Η συνάρτηση μεγέθους είναι της μορφής:

$$n(a) = A \cdot (2a)^n \cdot e^{-b \cdot (2a)^p} \quad \{4.19\}$$

όπου A , n , b και p είναι θετικοί πραγματικοί αριθμοί που εξαρτώνται από τις συνθήκες του εκάστοτε προβλήματος και συνδέονται μεταξύ τους μέσω των σχέσεων [1]:

$$A = \frac{p \cdot b^{\frac{n+1}{p}}}{\Gamma\left\{\frac{n+1}{p}\right\}} \quad \{4.20\}$$

$$b = \frac{n}{p} \cdot (2 \cdot a_m)^{-p} \quad \{4.21\}$$

όπου a_m είναι η «συνηθέστερη» ακτίνα. Οι συντελεστές n και p επιλέγονται να είναι ακέραιοι και να συνδέουν τη «συνηθέστερη» ακτίνα με τη μέγιστη και την ελάχιστη. Έχοντας εισάγει την έννοια της συνάρτησης μεγέθους, αναπτύσσονται οι ολοκληρωτικές σχέσεις υπολογισμού των συντελεστών σκέδασης, απορρόφησης και εξασθένισης:

$$\sigma_{s,\lambda} = \int_0^{\infty} C_{sca} \cdot n(a) da = \pi \cdot \int_0^{\infty} Q_{sca} \cdot a^2 \cdot n(a) da \quad \{4.22\}$$

$$\kappa_\lambda = \int_0^\infty C_{abs} \cdot n(a) da = \pi \cdot \int_0^\infty Q_{abs} \cdot a^2 \cdot n(a) da \quad \{4.23\}$$

$$\beta_\lambda = \int_0^\infty C_{ext} \cdot n(a) da = \pi \cdot \int_0^\infty Q_{ext} \cdot a^2 \cdot n(a) da \quad \{4.24\}$$

5^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΚΩΔΙΚΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ

§ 5.1: Εισαγωγή – Γενικές Προδιαγραφές Κωδίκων

Στα δύο προηγούμενα κεφάλαια, μελετήθηκε η φύση της αλληλεπίδρασης της θερμικής ακτινοβολίας από αέρια και σωματίδια και αναλύθηκε η σημασία της γνώσης της αλληλεπίδρασης αυτής για την ορθή πρόβλεψη λειτουργίας ενός συστήματος καύσης. Η εστίαση σε συγκεκριμένες μεθόδους πρόβλεψης των ιδιοτήτων ακτινοβολίας είχε ως απώτερο στόχο την ανάπτυξη υπολογιστικών κωδίκων προσομοίωσης των ιδιοτήτων αυτών.

Για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας, χρησιμοποιήθηκαν δύο αυτόνομα προγράμματα: το πρώτο διαχειρίζεται το φαινόμενο της απορρόφησης θερμικής ακτινοβολίας από μείγματα αερίων προϊόντων καύσης, ενώ το δεύτερο παρέχει τους συντελεστές εξασθένησης, σκέδασης και απορρόφησης ακτινοβολίας από ένα σωματιδιακό νέφος. Αμφότερα τα προγράμματα έχουν δομηθεί κατά τέτοιον τρόπο, ώστε να παρέχουν άμεση δυνατότητα ενσωμάτωσής τους σε κώδικες Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (οι οποίοι ενοποιούν τα φαινόμενα μεταφοράς θερμότητας, μάζας και ορμής, επιλύοντας ταυτόχρονα τις εξισώσεις που διέπουν τα φαινόμενα αυτά και τις εξισώσεις Navier – Stokes). Σε κάθε περίπτωση, τα προγράμματα είναι δυνατό να χρησιμοποιηθούν και αυτόνομα.

Ουσιαστικό χαρακτηριστικό των προγραμμάτων είναι το ότι πραγματοποιούν υπολογισμούς σε μόνο ένα «σημείο». Η έκφραση αυτή παραπέμπει σε έναν κόμβο υπολογιστικού πλέγματος, οπότε για την πλήρη επίλυση του πλέγματος σε τρισδιάστατο χώρο, θα πρέπει το πρόγραμμα να κληθεί ως υπορουτίνα, με τρία διαδοχικά `do loops` (ένα για κάθε κατεύθυνση του χώρου) για περίπτωση κανονικού πλέγματος.

§ 5.2: Μοντελοποίηση και Εξέταση Ιδιοτήτων Μειγμάτων Αερίων

§ 5.2.1: Παρουσίαση του κώδικα *ewbm*

Στο τρίτο κεφάλαιο της εργασίας αυτής πραγματοποιήθηκε μια επισκόπηση των σημαντικότερων μεθόδων υπολογισμού του συντελεστή απορρόφησης και περιγράφηκαν τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα καθ' ενός. Ως πιο ισορροπημένη τεχνική υλοποίηση, επιλέχθηκε το Εκθετικό Μοντέλο για την σύνταξη υπολογιστικού κώδικα.

Η πρώτη νοητή «ενότητα» του προγράμματος **ewbm** περιλαμβάνει όλες εκείνες τις εντολές που είναι απαραίτητες για το άνοιγμα του αρχείου δεδομένων εισόδου (με όνομα **ewbm_input.txt**) και την ανάγνωση αυτών· επιλέχθηκε η χρήση αρχείου για την εισαγωγή των δεδομένων, ώστε να αποφεύγεται η μεταγλώττιση ολόκληρου του κώδικα σε κάθε εκτέλεση (με συνεπακόλουθο χρονικό «κόστος»). Αφού ολοκληρωθεί η ανάγνωση του αρχείου, το πρόγραμμα πραγματοποιεί έλεγχο των δεδομένων εισόδου, για να πιστοποιηθεί ότι αυτά βρίσκονται εντός των ορίων ισχύος του Εκθετικού Μοντέλου. Ο παρακάτω πίνακας παρουσιάζει τις μεταβλητές εισόδου, τις μονάδες μέτρησής τους και τα σύμβολα αυτών στο πρόγραμμα.

Σύμβολο στον πηγαίο κώδικα	Σύμβολο μεγέθους	Φυσική περιγραφή	Μονάδα μέτρησης	Όρια ισχύος του Εκθετικού Μοντέλου
TP	p	Ολική πίεση	atm	0.5 – 20.0
TEQ	T	Απόλυτη θερμοκρασία	K	300 – 3000
YCD	y_{CO_2}	Συγκέντρωση CO ₂ κατά όγκο	%	0 – 100
YWV	y_{H_2O}	Συγκέντρωση H ₂ O κατά όγκο	%	0 – 100
YCM	y_{CO}	Συγκέντρωση CO κατά όγκο	%	0 – 100
YCH	y_{CH_4}	Συγκέντρωση CH ₄ κατά όγκο	%	0 – 100
YNM	y_{NO}	Συγκέντρωση NO κατά όγκο	%	0 – 100
YSD	y_{SO_2}	Συγκέντρωση SO ₂ κατά όγκο	%	0 – 100
PLEQ	L	Μήκος όδευσης ακτινοβολίας	m	10 ⁻⁴ – 10 ²

Εισαχθέντων πλέον των δεδομένων εισόδου, το πρόγραμμα μεταβαίνει στη δεύτερη ενότητά του, όπου πρόκειται να εκτελεστεί βήμα προς βήμα το Εκθετικό Μοντέλο, εφαρμόζοντας τις εξισώσεις {3.18} έως {3.37} ανά περίπτωση, για κάθε αέριο και κάθε ζώνη. Η ενότητα αυτή αποτελείται από τις παρακάτω υποενότητες:

- προσδιορίζονται οι εντάσεις των ζωνών. Οι τιμές των εντάσεων καταχωρούνται στις μεταβλητές “AK_L”, όπου “K” είναι το όνομα της αέριας συνιστώσας (CD για το CO₂, WV για το H₂O, CM για το CO, CH για το CH₄, NM για το NO και SD για το SO₂) και “L” είναι το μήκος κύματος της ζώνης (με τρία ψηφία χωρίς υποδιαστολή)· για παράδειγμα, με AWV_270 συμβολίζεται η ένταση της ζώνης στα 2.70 μm του H₂O, ενώ με ASD_193 συμβολίζεται η ένταση της ζώνης στα 19.3 μm του SO₂.
- προσδιορίζονται οι παράμετροι αλληλεπικάλυψης, σύμφωνα με τις πολυωνυμικές προσεγγίσεις, που αναλύθηκαν διεξοδικά στην § 3.2.5. Για την αποφυγή του υπολογισμού της τετραγωνικής ρίζας $\sqrt{\frac{T_0}{T}}$ σε κάθε ζώνη, η ρίζα αυτή υπολογίζεται άπαξ και μόνο το αποτέλεσμά της συμμετέχει στους υπολογισμούς της σχέσης {3.23}. Οι παράμετροι αλληλεπικάλυψης απαντώνται στον πηγαίο κώδικα με τις μεταβλητές “BK_L”.
- προσδιορίζονται οι παράμετροι εύρους. Και σε αυτή την περίπτωση, η τετραγωνική ρίζα $\sqrt{\frac{T}{T_0}}$ υπολογίζεται μόνο μια φορά, ενώ εδώ χρησιμοποιούνται οι μεταβλητές “WK_L”.

- προσδιορίζονται το οπτικό μήκος καθενός αερίου (με μεταβλητή “XK”) και βάσει αυτού για κάθε ζώνη το οπτικό πάχος (με μεταβλητή “TOK_L”), η ανηγμένη και η ολική απορροφητικότητα (με μεταβλητές “ASTARK_L” και “ABK_L” αντίστοιχα), η εκπεμπιμότητα (με μεταβλητή “EMK_L”), ο συντελεστής απορρόφησης (με μεταβλητή “AKK_L”) και οι χαρακτηριστικοί κυματαριθμοί κάθε ζώνης (με μεταβλητές “DNK_L”, “DLK_L” και “DUK_L” για το εύρος της ζώνης, ο κάτω και ο άνω κυματαριθμός αντίστοιχα).

Επόμενο βήμα είναι ο προσδιορισμός του φασματικού συντελεστή απορρόφησης, με τον οποίο προσομοιώνεται η συνολική συμπεριφορά του μείγματος ως προς την απορρόφηση ακτινοβολίας. Πρώτα υπολογίζονται οι διαπερατότητες καθεμιάς ζώνης, έπειτα γίνεται η ταξινόμηση των ζωνών βάσει του κάτω κυματαριθμού καθεμιάς και ακολούθως πραγματοποιείται η ολοκλήρωση βάσει της συνάρτησης Planck, ώστε τελικά να προκύψει ο φασματικός συντελεστής απορρόφησης, που στο πρόγραμμα παρίσταται από τη μεταβλητή AGAS.

Στην τέταρτη και τελευταία ενότητα μορφοποιείται και συντάσσεται το αρχείο εξόδου, το οποίο φέρει το όνομα **ewbm_results.txt**. Στο αρχείο αυτό καταχωρούνται για κάθε ζώνη καθενός αερίου ο συντελεστής απορρόφησης, οι κάτω και άνω κυματαριθμοί και το εύρος της ζώνης, καθώς επίσης και ο φασματικός συντελεστής απορρόφησης. Τα εμφανιζόμενα στο αρχείο εξόδου δεδομένα μετρώνται με τις μονάδες του παρακάτω πίνακα.

Σύμβολο μεγέθους	Φυσική περιγραφή	Μονάδα μέτρησης
κ	Συντελεστής απορρόφησης ζώνης	m^{-1}
$\Delta\eta$	Εύρος ζώνης	cm^{-1}
η_l	Κάτω wavenumber ζώνης	cm^{-1}
η_u	Άνω wavenumber ζώνης	cm^{-1}
κ_{tot}	Φασματικός συντελεστής απορρόφησης μείγματος	m^{-1}

§ 5.2.2: Επαλήθευση εγκυρότητας του υπολογιστικού κώδικα

Το τελικό βήμα, πριν την εφαρμογή του υπολογιστικού κώδικα, είναι η επαλήθευση της ισχύος του. Κριτήριο της εδώ επαλήθευσης θα είναι δεδομένα, ληφθέντα από τη δημοσίευση “Molecular Gas Band Radiation” του D. K. Edwards ^[19].

Ο παρακάτω πίνακας εμφανίζει τη σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων του κώδικα **ewbm** και των δεδομένων του D. K. Edwards. Είναι εμφανές ότι η ακρίβεια είναι ιδιαίτερος ικανοποιητική, το δε μέσο σφάλμα είναι μικρότερο του 1%. Άρα, οι απλουστεύσεις που τηρήθηκαν δε επέφεραν κάποια σημαντική μείωση της αξιοπιστίας του κώδικα, όμως κατάφεραν να τον καταστήσουν πιο ταχύ.

		Συντελεστής απορρόφησης [m ⁻¹]	Διαπερατότητα ζώνης [-]		Εύρος ζώνης [cm ⁻¹]	
		κώδικας <i>ewbm</i>	κώδικας <i>ewbm</i>	Edwards	κώδικας <i>ewbm</i>	Edwards
CO ₂	15.0	0.4874	0.232	0.232	266.94	266
	10.4	0.0351	0.900	0.900	98.59	100
	9.40	0.0351	0.900	0.900	99.88	100
	4.30	0.6081	0.161	0.161	309.71	310
	2.70	0.3051	0.400	0.400	366.24	366
	2.00	0.0305	0.913	0.900	79.83	90
H ₂ O	71.0	0.6048	0.163	0.137	1090.57	898
	6.30	0.3688	0.331	0.331	953.4	954
	2.70	0.3718	0.328	0.332	1018	1012
	1.87	0.1692	0.602	0.594	452	422
	1.38	0.1597	0.619	0.610	361	336
CO	4.70	0.2136	0.527	0.527	187.98	188
	2.35	0.0351	0.900	0.900	38.340	34

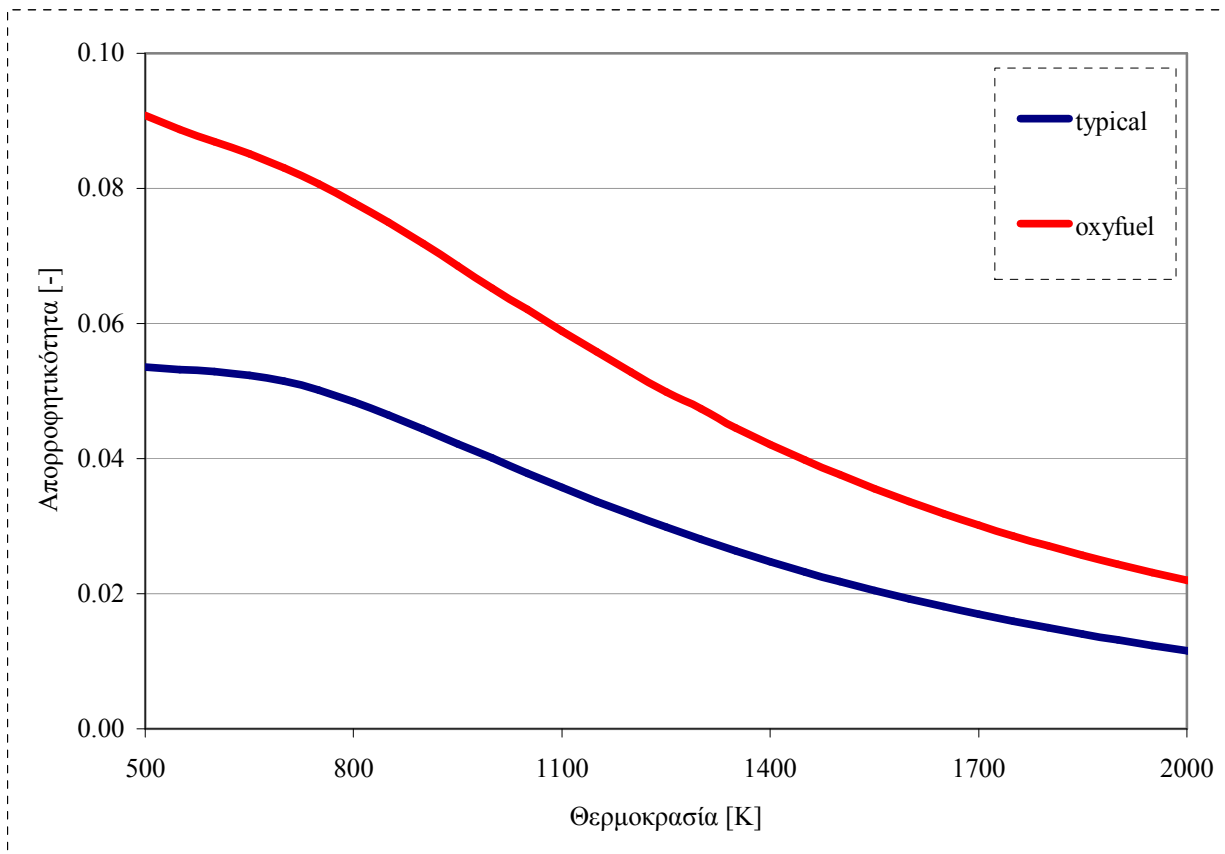
Η προσομοίωση έγινε υπό πίεση 1atm, απόλυτη θερμοκρασία 1,400K, κατά μήκος όδευσης 3m και σε συγκεντρώσεις CO₂, H₂O και CO ίσες προς 6%, 18% και 3% αντιστοίχως.

§ 5.2.3: Εξέταση συμπεριφοράς αερίων μειγμάτων ειδικής σύνθεσης

Στην ενότητα αυτή θα εξετασθεί η συμπεριφορά ως προς την ακτινοβολία αερίων μειγμάτων ειδικής σύνθεσης, όπως σε συνθήκες πλούσιου CO₂, όπως συμβαίνει σε συστήματα oxy-fuel, σε συνθήκες καύσης χωρίς φλόγα και σε διάφορες άλλες συνθήκες. Στις δύο πρώτες περιπτώσεις θα γίνεται σύγκριση με «τυπικό» σύστημα καύσης, το οποίο τροφοδοτείται με λιγνίτη τύπου Lausitz.¹

Αρχικά εξετάζεται η μεταβολή της απορροφητικότητας σε ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασιών και υπό ατμοσφαιρική πίεση δύο μειγμάτων: ενός «τυπικού» και ενός συστήματος oxy-fuel. Οι συγκεντρώσεις των καυσαερίων ενός συστήματος καύσης oxy-fuel εκτιμώνται σε 56% CO₂ και 32% H₂O (όπου το υπόλοιπο 12% είναι μη ακτινοβολούσες συνιστώσες), ενώ το μείγμα καυσαερίων από το «τυπικό» σύστημα αποτελείται από 15.02% CO₂ και 10.65% H₂O.

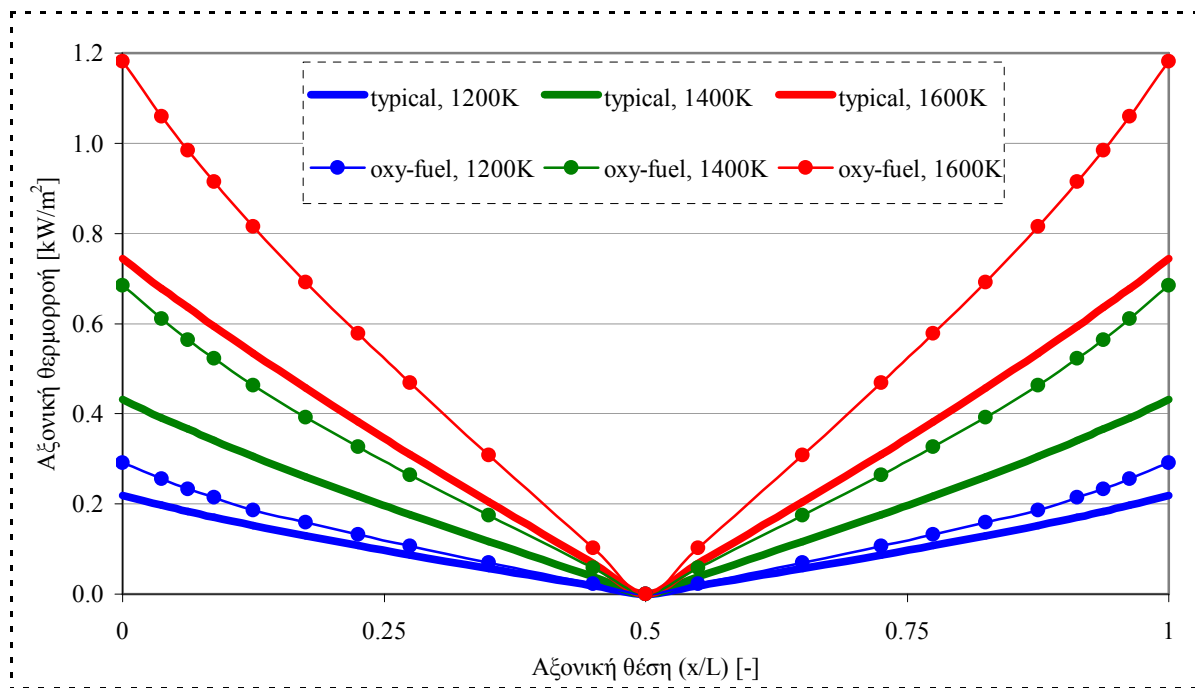
¹ Η κατά μάζα σύσταση του λιγνίτη, τύπου Lausitz, είναι 56.7% C, 5.6% H₂, 21.44% O₂, 0.55% N₂ και 0.61% S, καθώς επίσης 4.90% τέφρα και 10.20% υγρασία.



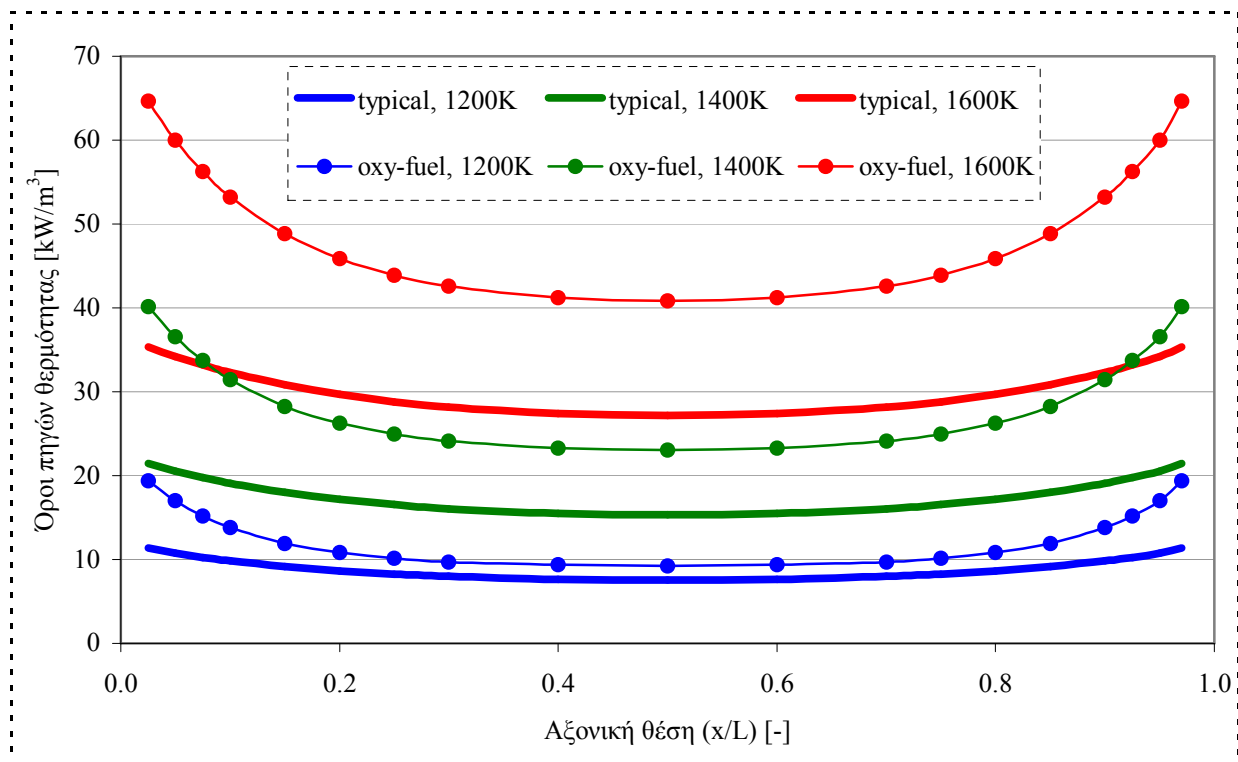
Από τις παραπάνω καμπύλες εξάγονται τα ακόλουθα συμπεράσματα:

- ένα σύστημα oxy-fuel παρουσιάζει μεγαλύτερη απορροφητικότητα σε σχέση με ένα «τυπικό» σύστημα καύσης, διότι περιέχει ακτινοβολούντα αέρια σε πολύ μεγαλύτερες συγκεντρώσεις (υπενθυμίζεται ότι οι μη ακτινοβολούσες συνιστώσες αποτελούν τα 2/3 περίπου των καυσαερίων του «τυπικού» συστήματος καύσης)
- η θερμοκρασία επηρεάζει την απορροφητικότητα με διάφορους τρόπους ανάλογα με την ολική πίεση του μείγματος. Συγκεκριμένα, πάντοτε η αύξηση της θερμοκρασίας δείχνει να οδηγεί σε ελάττωση της απορροφητικότητας και μάλιστα ο ρυθμός μείωσης σχετίζεται άμεσα με τη πίεση του αερίου μείγματος: όσο υψηλότερη είναι η ολική πίεση, τόσο πιο έντονη είναι η εξασθένιση του φαινομένου της απορρόφησης.

Παράλληλα προς τον υπολογισμό των συντελεστών ακτινοβολίας, πραγματοποιείται προκαταρκτική μελέτη των θερμορροών ενός συστήματος oxy-fuel, ώστε να μελετηθεί η συγκριθεί η μετάδοση θερμότητας μεταξύ του συστήματος αυτού και του «τυπικού» συστήματος. Θεωρείται μονοδιάστατη μετάδοση θερμότητας μεταξύ δύο τοιχωμάτων με σταθερή εκπεμπιμότητα, ίση προς 0.01, και σταθερή θερμοκρασία, της τάξης των 900K, ενώ το αέριο μείγμα ήταν ισοθερμοκρασιακό στα 1,200K, στα 1,400K και στα 1'600K και σε ατμοσφαιρική πίεση. Εφαρμόζοντας το μοντέλο P₁ (η ανάλυση του οποίου δεν αποτελεί αντικείμενο της παρούσας εργασίας) για τον υπολογισμό των θερμορροών η αξονική θερμορροή συναρτήσε της θερμοκρασίας και της θέσης απεικονίζεται στις παρακάτω καμπύλες:



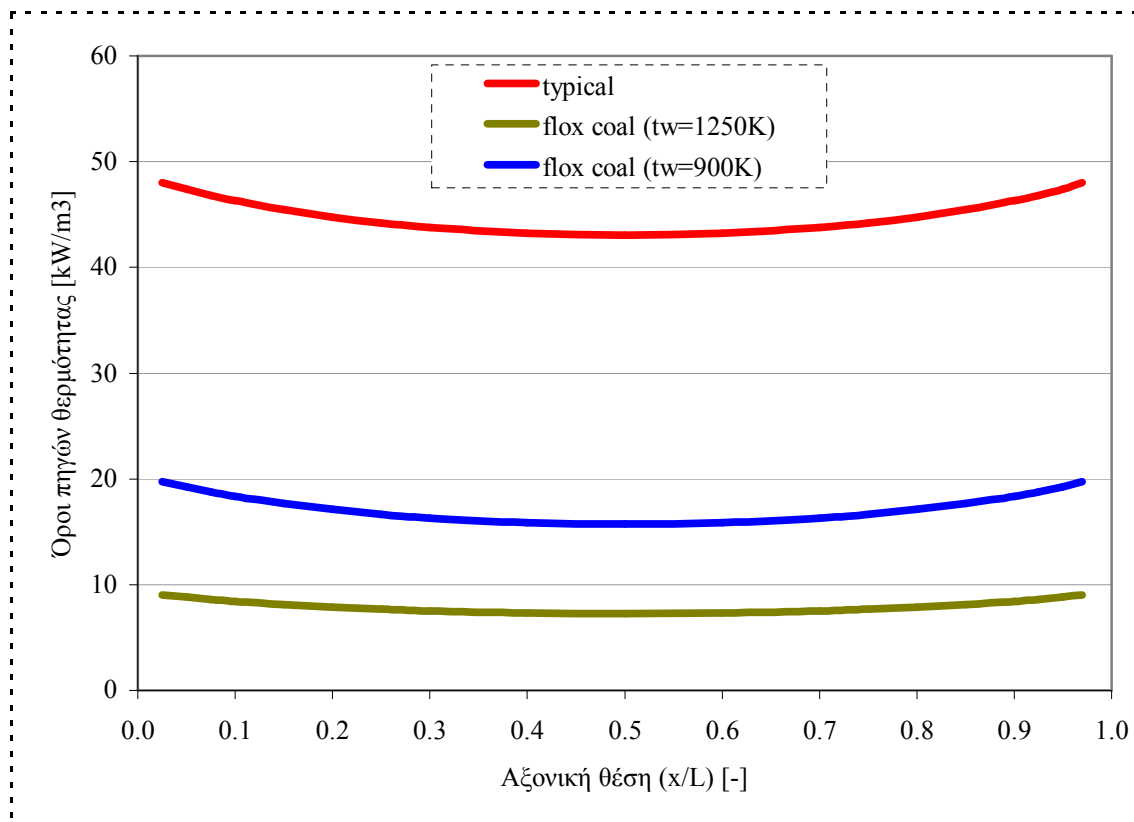
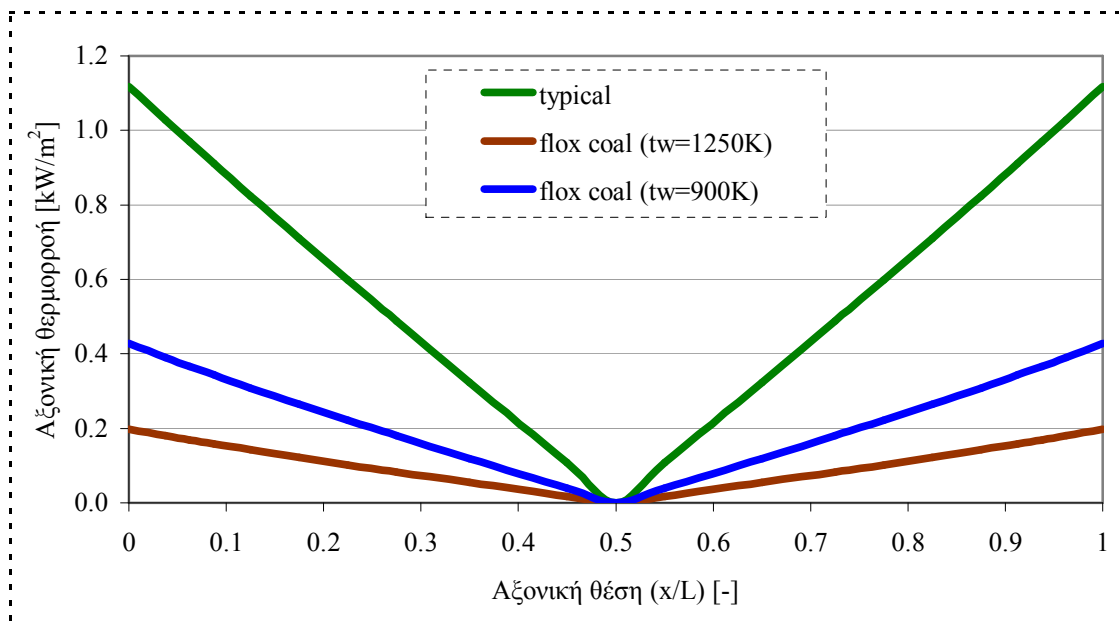
Στο ακόλουθο γράφημα φαίνονται και οι όροι των πηγών θερμότητας σε κάθε σημείο του μονοδιάστατου πλέγματος.



Από τις παραπάνω καμπύλες, διαπιστώνεται ότι η ακτινοβολία που μεταφέρεται μέσω των καυσαερίων ενός συστήματος oxy-fuel είναι μεγαλύτερη της αντίστοιχης ενός «τυπικού» συστήματος. Το ίδιο συμβαίνει και με τους όρους των πηγών θερμότητας, όπου ειδικά σε μεγάλες θερμοκρασίες (ή, μάλλον, σε μεγάλες θερμοκρασιακές διαφορές μεταξύ αερίου και

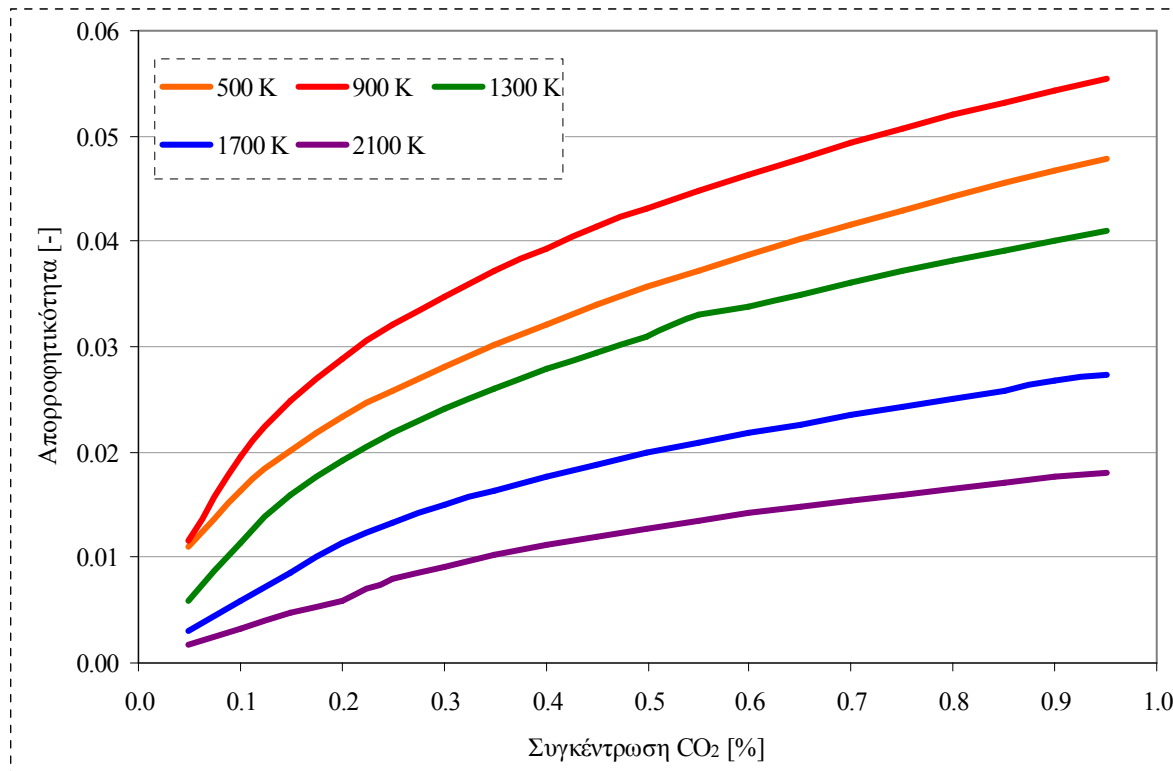
τοιχωμάτων) οι πηγές του συστήματος oxy-fuel εμφανίζονται κατά σχεδόν 50% πιο ισχυρές σε σχέση με τις αντίστοιχες του «τυπικού» συστήματος.

Προκαταρκτική μελέτη θερμοροών θα γίνει και για ένα σύστημα καύσης χωρίς φλόγα. Συγκεκριμένα, θα συγκριθεί ο ρυθμός μετάδοσης θερμότητας από αέριο μείγμα στους 1,450K σε τοίχωμα στους 1'250K (όπως συμβαίνει σε συνθήκες flox), αλλά και στους 900K, με τον αντίστοιχο από αέριο μείγμα στους 1,600K σε τοίχωμα στους 900K. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης των θερμοροών φαίνονται στα ακόλουθα γραφήματα.



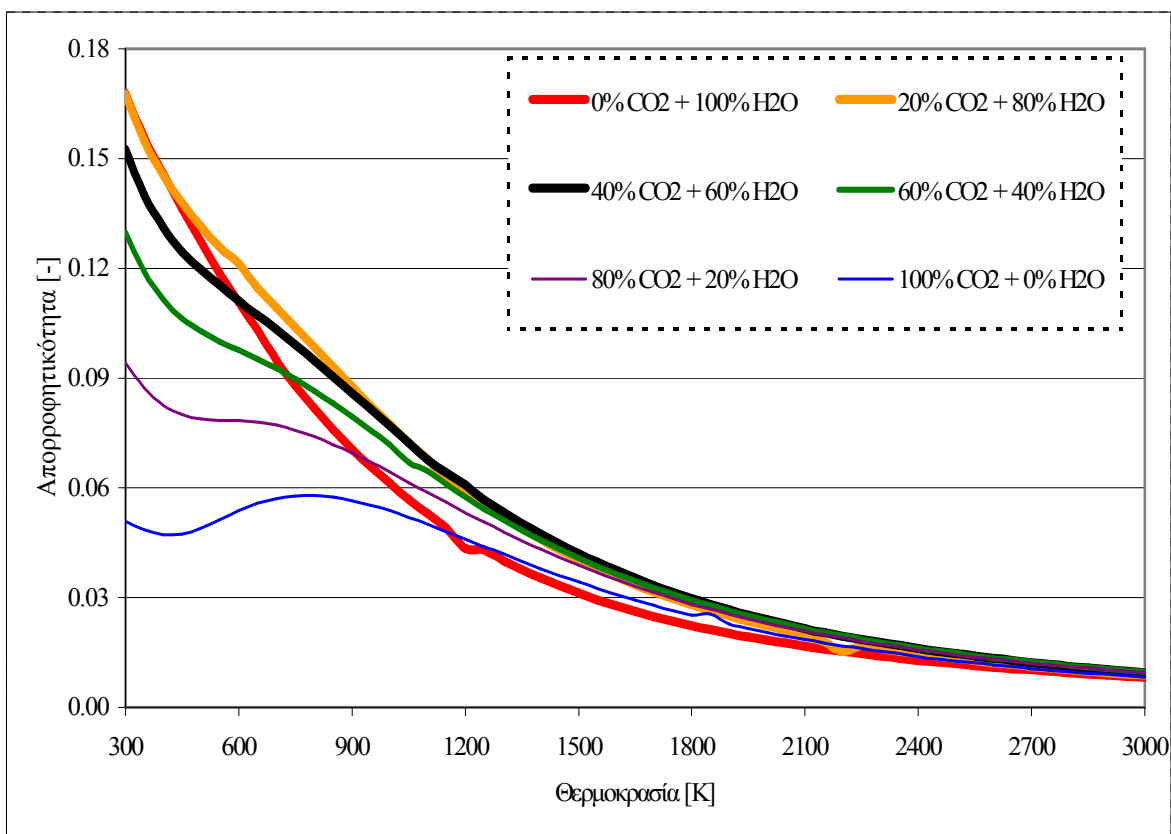
Μελετώντας τις παραπάνω καμπύλες, διαπιστώνεται ότι ένα σύστημα flux εμφανίζει ασθενέστερες θερμορροές σε σχέση με ένα «τυπικό» σύστημα σε ίδιες συνθήκες. Αυτό είναι απόρροια του της μικρής θερμοκρασιακής διαφοράς μεταξύ τοιχωμάτων και αερίου.

Η επόμενη προσομοίωση αφορά στη διακύμανση του συντελεστή απορρόφησης και της απορροφητικότητας, σε διάφορες τιμές συγκέντρωσης του CO₂. Η μελέτη γίνεται χωρίς να λαμβάνονται υπ' όψιν οι υπόλοιπες συνιστώσες και σε ατμοσφαιρική πίεση. Για θερμοκρασίες 500K, 900K, 1,300K, 1,700K και 2,100K λαμβάνονται τα παρακάτω αποτελέσματα:



Κατ' αρχήν, παρατηρείται ότι η αύξηση της συγκέντρωσης οδηγεί σε ισχυροποίηση του φαινομένου της απορρόφησης, κάτι που γίνεται κατά τρόπο ταχύτερο σε χαμηλές συγκεντρώσεις και λιγότερο γρήγορα σε υψηλότερες. Επίσης, βλέπουμε ότι οι συντελεστές απορρόφησης τείνουν να μεγιστοποιηθούν στην περιοχή των 900K και το φαινόμενο εξηγείται από το νόμο του Wien ως εξής: σε θερμοκρασία 900K η συνάρτηση Planck εμφανίζει μέγιστο στα 3.22 μ m, ενώ εμφανίζεται μια πολύ ισχυρή ζώνη του CO₂ στα 4.30 μ m, δηλαδή κοντά στην παραπάνω περιοχή (βέβαια, δεν είναι μόνο η θερμοκρασία που επηρεάζει το όλο αποτέλεσμα, αλλά οι εν γένει συνθήκες, φαίνεται, όμως, ότι η συσχέτιση με το νόμο του Wien έχει νόημα).

Η επόμενη περίπτωση που εξετάζεται εδώ αφορά στη μελέτη ενός μείγματος που θα αποτελείται αποκλειστικά από υδρατμό και CO₂. Το μείγμα μελετάται παραμετρικά ως προς τη θερμοκρασία και τη συγκέντρωση.



Εξετάζοντας την ταυτόχρονη επίδραση του CO₂ και του H₂O διαπιστώνεται ότι η αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί σε μείωση της απορροφητικότητας· εναλλακτικά, η μείωση της θερμοκρασίας καθιστά τη συγκέντρωση ως τον σημαντικό παράγοντα διαμόρφωσης της απορροφητικότητας (κάτι που σε υψηλές θερμοκρασίες δεν ισχύει). Παρατηρείται επίσης ότι η μετατόπιση της συγκέντρωσης προς περισσότερο CO₂ οδηγεί σε αύξηση της απορροφητικότητας γύρω από την περιοχή των 800K, εξαιτίας της ζώνης στα 4.3μm, ενώ η αύξηση της συγκέντρωσης του υδρατμού έχει ως αποτέλεσμα την εμφάνιση υψηλών απορροφητικοτήτων σε χαμηλές θερμοκρασίες (κάτι που οφείλεται στην ενίσχυση του «ρόλου» της περιστροφικής ζώνης του υδρατμού)· με εξαίρεση την περίπτωση μηδενικής συγκέντρωσης υδρατμού, η περιστροφική ζώνη αυτού δε μπορεί να αμεληθεί.

§ 5.3: Μοντελοποίηση και Εξέταση Ιδιοτήτων Σωματιδιακών Νεφών

§ 5.3.1: Παρουσίαση του κώδικα *mie*²

Στο τέταρτο κεφάλαιο της εργασίας αναλύθηκε η θεωρία Lorenz-Mie και αναφέρθηκε η χρησιμότητά της στην πρόβλεψη των ιδιοτήτων ακτινοβολίας των σωματιδιακών προϊόντων της καύσης στερεών καυσίμων. Η θεωρία αυτή εφαρμόζεται στο παρόν κεφάλαιο, με σκοπό να

² Ο κώδικας *mie* είναι προϊόν προγενέστερης εργασίας των Ιωάννη Μαράκη και Χαράλαμπου Παπαπαύλου, συνεργατών του Εργαστηρίου Ατμοκινητήρων και Λεβήτων. Εδώ χρησιμοποιείται με σκοπό την αξιολόγηση των τάξεων μεγέθους των συντελεστών ακτινοβολίας μειγμάτων ειδικής σύνθεσης.

συσχετισθούν παραμετρικά οι συντελεστές ακτινοβολίας των σωματιδιακών νεφών με τις συνθήκες λειτουργίας ενός τέτοιου συστήματος καύσης.

Ο κώδικας *mie*, δέχεται ως δεδομένα εισόδου τη θερμοκρασία, τις συγκεντρώσεις, τις διαμέτρους και τις πυκνότητες των σωματιδιακών συνιστωσών, καθώς επίσης και το «περιβάλλον» ακτινοβολίας στο χώρο που μελετάται., όπως αυτό εκφράζεται μέσα από τη ζώνη μηκών κύματος. Τα δεδομένα εισόδου στον κώδικα, τα οποία δεν εισάγονται με χρήση αρχείου (όπως συνέβαινε στον κώδικα των αερίων), εμφανίζονται στον παρακάτω πίνακα.

Σύμβολο στον πηγαίο κώδικα	Σύμβολο μεγέθους	Περιγραφή	Μονάδα μέτρησης	Όρια ισχύος	
T	T	Θερμοκρασία	K	300 – 3000	
Παράμετροι μηκών κύματος	WAVELMIN	λ_{min}	Ελάχιστο μήκος κύματος	μm	$< \lambda_{max}$
	WAVELMAX	λ_{max}	Μέγιστο μήκος κύματος	μm	< 12
	WAVELINT	-	Βήμα ολοκλήρωσης μήκους κύματος	μm	-
Παράμετροι ιπτάμενης τέφρας	DFAMIN	$d_{fa,min}$	Ελάχιστη διάμετρος σωματιδίων τέφρας	μm	$< d_{fa,max}$
	DFAMAX	$d_{fa,max}$	Μέγιστη διάμετρος σωματιδίων τέφρας	μm	-
	DFAINT	-	Βήμα ολοκλήρωσης διαμέτρου τέφρας	μm	-
	DMFA	$d_{fa,m}$	Συνηθέστερη διάμετρος τέφρας	μm	-
	VAR1FA	n_{fa}	Συντελεστής n της PSD της τέφρας	-	-
	VAR2FA	p_{fa}	Συντελεστής p της PSD της τέφρας	-	-
	DENFA	ρ_{fa}	Πυκνότητα τέφρας	kg/m^3	-
WFA	w_{fa}	Συγκέντρωση τέφρας	kg/m^3	-	
Παράμετροι άνθρακα	DCOMIN	$d_{co,min}$	Ελάχιστη διάμετρος άνθρακα	μm	$< d_{co,max}$
	DCOMAX	$d_{co,max}$	Μέγιστη διάμετρος άνθρακα	μm	-
	DCOINT	-	Βήμα ολοκλήρωσης διαμέτρου άνθρακα	μm	-
	DMCO	$d_{co,m}$	Συνηθέστερη διάμετρος άνθρακα	μm	-
	VAR1CO	n_{co}	Συντελεστής n της PSD του άνθρακα	-	-
	VAR2CO	p_{co}	Συντελεστής p της PSD του άνθρακα	-	-
	DENCO	ρ_{co}	Πυκνότητα άνθρακα	kg/m^3	-
WCO	w_{co}	Συγκέντρωση άνθρακα	kg/m^3	-	
Παράμετροι εξανθρακώματος	DCHMIN	$d_{ch,min}$	Ελάχιστη διάμετρος εξανθρακώματος	μm	$< d_{ch,max}$
	DCHMAX	$d_{ch,max}$	Μέγιστη διάμετρος εξανθρακώματος	μm	-
	DCHINT	-	Βήμα ολοκλήρωσης διαμέτρου εξανθ/τος	μm	-
	DMCH	$d_{ch,m}$	Συνηθέστερη διάμετρος εξανθρακώματος	μm	-
	VAR1CH	n_{ch}	Συντελεστής n της PSD του εξανθ/τος	-	-
	VAR2CH	p_{ch}	Συντελεστής p της PSD του εξανθ/τος	-	-
	DENCH	ρ_{ch}	Πυκνότητα εξανθρακώματος	kg/m^3	-
WCH	w_{ch}	Συγκέντρωση εξανθρακώματος	kg/m^3	-	
Παράμετροι αιθάλης	DSO	d_{so}	Διάμετρος σωματιδίων αιθάλης	μm	-
	DENSO	ρ_{so}	Πυκνότητα σωματιδίων αιθάλης	kg/m^3	-
	WSO	w_{so}	Συγκέντρωση σωματιδίων αιθάλης	kg/m^3	-

Μετά την ανάγνωση των δεδομένων εισόδου, ο κώδικας υπολογίζει τις λεγόμενες «μέσες» διαμέτρους, ώστε να εισαχθεί στην υπολογιστική διαδικασία η έννοια της κατανομής μεγέθους των σωματιδίων. Οι συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται είναι οι ακόλουθες [21]:

- μέση διάμετρος διατομής απορρόφησης, $D_{20}^2 = \int_0^{\infty} \{n(D) \cdot D^2\} dD$ {5.1}

- μέση διάμετρος όγκου, $D_{30}^3 = \int_0^{\infty} \{n(D) \cdot D^3\} dD$ {5.2}

- μέση διάμετρος Sauter, $D_{32} = \frac{D_{30}}{D_{20}}$ {5.3}

Ακολούθως υπολογίζονται ο αριθμός των σωματιδίων στην περιοχή που μελετάται, βάσει της συγκέντρωσης, της πυκνότητας και του όγκου των σωματιδίων [21].

Στο επόμενο βήμα, για κάθε τιμή του μήκους κύματος εντός της ζώνης ακτινοβολίας, εφαρμόζεται η θεωρία Mie και υπολογίζονται οι παράγοντες αποτελεσματικότητας εξασθένησης και σκέδασης και βάσει της εξίσωσης {4.9} ο παράγον αποτελεσματικότητας απορρόφησης, καθώς επίσης και ο παράγον ασυμμετρίας. Για την εφαρμογή της θεωρίας Mie είναι απαραίτητη η γνώση:

- του δείκτη διάθλασης της εκάστοτε συνιστώσας, βάσει των εξισώσεων {4.3}, {4.4} και {4.5}· οι δείκτες διάθλασης υπολογίζονται με την κλήση κατάλληλης υπορουτίνας.
- της παραμέτρου μεγέθους σωματιδίου, που τώρα μεταβάλλεται για κάθε τιμή του μήκους κύματος, αλλά και για κάθε τιμή της διαμέτρου των σωματιδίων, βάσει της PSD.
- του άνω ορίου των απειροσειρών της θεωρίας Mie. Όπως φαίνεται στις εξισώσεις {4.14}, οι σειρές ξεκινούν από το μηδέν και καταλήγουν στο άπειρο. Για την απλοποίηση των υπολογισμών, θεωρείται ότι η ακρίβεια των υπολογισμών είναι επαρκής μετά από NSTOP αθροίσεις, όπου [22]:

$$NSTOP = x + 4 \cdot \sqrt[3]{x} + 2 \quad \text{{5.4}}$$

- των παραγόντων a_n και b_n των εξισώσεων {4.12}. Λόγω της προφανούς δυσχρηστίας των σχέσεων αυτών, χρησιμοποιούνται οι παρακάτω ισοδύναμες τους [22], στις οποίες το m δηλώνει το μιγαδικό δείκτη διάθλασης, ενώ το n είναι ο αθροιστής (δεν πρέπει να συγχέεται με το πραγματικό μέρος του μιγαδικού δείκτη διάθλασης):

$$\left\{ \begin{array}{l} a_n = \frac{\left[\frac{D_n(m \cdot x)}{m} + \frac{n}{x} \right] \cdot \psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{\left[\frac{D_n(m \cdot x)}{m} + \frac{n}{x} \right] \cdot \zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)} \\ b_n = \frac{\left[m \cdot D_n(m \cdot x) + \frac{n}{x} \right] \cdot \psi_n(x) - \psi_{n-1}(x)}{\left[m \cdot D_n(m \cdot x) + \frac{n}{x} \right] \cdot \zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)} \end{array} \right. \quad \{5.5\}$$

όπου D_n είναι η λεγομένη *λογαριθμική παράγωγος* που ορίζεται από τη σχέση ^[22]:

$$D_n(\rho) = \frac{d}{d\rho} \ln \psi_n(\rho) \quad \{5.6\}$$

ενώ ικανοποιούνται και οι ακόλουθες συσχετίσεις:

$$D_{n-1}(\rho) = \frac{n}{\rho} - \frac{1}{D_n(\rho) + \frac{n}{\rho}} \quad \{5.7\}$$

$$\psi'_n(x) = \psi_{n-1}(x) - \frac{n \cdot \psi_n(x)}{x} \quad \{5.8\}$$

$$\zeta'_n(x) = \zeta_{n-1}(x) - \frac{n \cdot \zeta_n(x)}{x} \quad \{5.9\}$$

$$\psi_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} \cdot \psi_n(x) - \psi_{n-1}(x) \quad \{5.10\}$$

$$\begin{cases} \psi_{-1}(x) = \cos(x) \\ \psi_0(x) = \sin(x) \end{cases} \quad \{5.11\}$$

$$\begin{cases} \chi_{-1}(x) = -\sin(x) \\ \chi_0(x) = \cos(x) \end{cases} \quad \{5.12\}$$

όπου $\zeta_n = \psi_n - j \cdot \chi_n$ (υπενθυμίζεται ότι οι παράμετροι ψ και ζ έχουν ήδη οριστεί από τις εξισώσεις {4.13}). Η λογαριθμική παράγωγος υπολογίζεται από $n = NMX - 1$, όπου ^[22]:

$$NMX = \max\{NSTOP, |m \cdot x|\} + 15 \quad \{5.13\}$$

μέχρι την τιμή D_{-1} .

Πλέον έχουν υπολογιστεί οι παράγοντες αποτελεσματικότητας εξασθένισης, σκέδασης και απορρόφησης, καθώς επίσης και ο παράγων ασυμμετρίας, οπότε σύμφωνα με τις εξισώσεις {4.22}, {4.23} και {4.24} μπορεί να γίνει ο υπολογισμός των αντιστοίχων συντελεστών εξασθένισης, σκέδασης και απορρόφησης. Σημειώνεται ότι, σε αντίθεση με ότι ίσχυε στη μελέτη της ακτινοβολίας αερίων, εδώ το σημαντικό μέγεθος για τη μετάδοση θερμότητας είναι, όχι ο

συντελεστής απορρόφησης, μα ο συντελεστής εξασθένησης· ο συντελεστής απορρόφησης έχει σημασία μόνο στη μελέτη της αύξησης της θερμοκρασίας των σωματιδίων.

§ 5.3.2: Επαλήθευση εγκυρότητας του υπολογιστικού κώδικα

Προκειμένου να αξιολογηθεί η εγκυρότητα του υπολογιστικού κώδικα και ιδίως της υπορουτίνας εφαρμογής της θεωρίας Mie, πραγματοποιήθηκε σύγκριση των αποτελεσμάτων αυτής με βιβλιογραφικά δεδομένα. Συγκεκριμένα, ο κώδικας που βρίσκεται στον τόμο “Absorption and Scattering of Light by Small Particles” των C. F. Bohren και D. R. Huffman^[22] εκτελέστηκε για διάφορες συνθήκες και τα αποτελέσματά του συγκρίθηκαν με τα αντίστοιχα του κώδικα *mie* για τις ίδιες συνθήκες. Τόσο οι συνθήκες, όσο και τα αποτελέσματα, απεικονίζονται στον παρακάτω πίνακα.

<i>real</i>	<i>imag.</i>	<i>a</i>	λ	Q_{ext}		Q_{scat}	
				B & H	<i>mie</i>	B & H	<i>mie</i>
1.55	0	0.525	0.6328	3.10543	3.10543	3.10543	3.10543
1.55	0.5	0.525	0.6328	2.53558	2.53558	1.19988	1.19988
1	0.5	1	1	2.18787	2.18787	1.04641	1.04641
0.75	1	0.5	2	2.56798	2.56798	1.04089	1.04089
0.8	0.1	0.5	1.5	0.58261	0.58261	0.20440	0.20440
1	0.1	0.5	1	0.69752	0.69752	0.10416	0.10416

Συγκρίνοντας τις τιμές των δύο τελευταίων ζευγών στηλών του πίνακα, διαπιστώνεται ότι υπάρχει ταύτιση ως το 5^ο δεκαδικό ψηφίο οπότε μπορεί με ασφάλεια να ειπωθεί ότι ο κώδικας *mie* παρέχει σωστά αποτελέσματα. Δεν κρίθηκε η απαραίτητη περισσότερων δοκιμών, διότι η διαδικασία εκτέλεσης της θεωρίας Mie δεν περιλαμβάνει βρόχους εκλογής (κάτι που συμβαίνει στο Εκθετικό Μοντέλο), ώστε να υπάρχει επισφάλεια για την ορθότητα μέρους του κώδικα.

§ 5.3.3: Εξέταση συμπεριφοράς σωματιδιακών νεφών ειδικής σύνθεσης

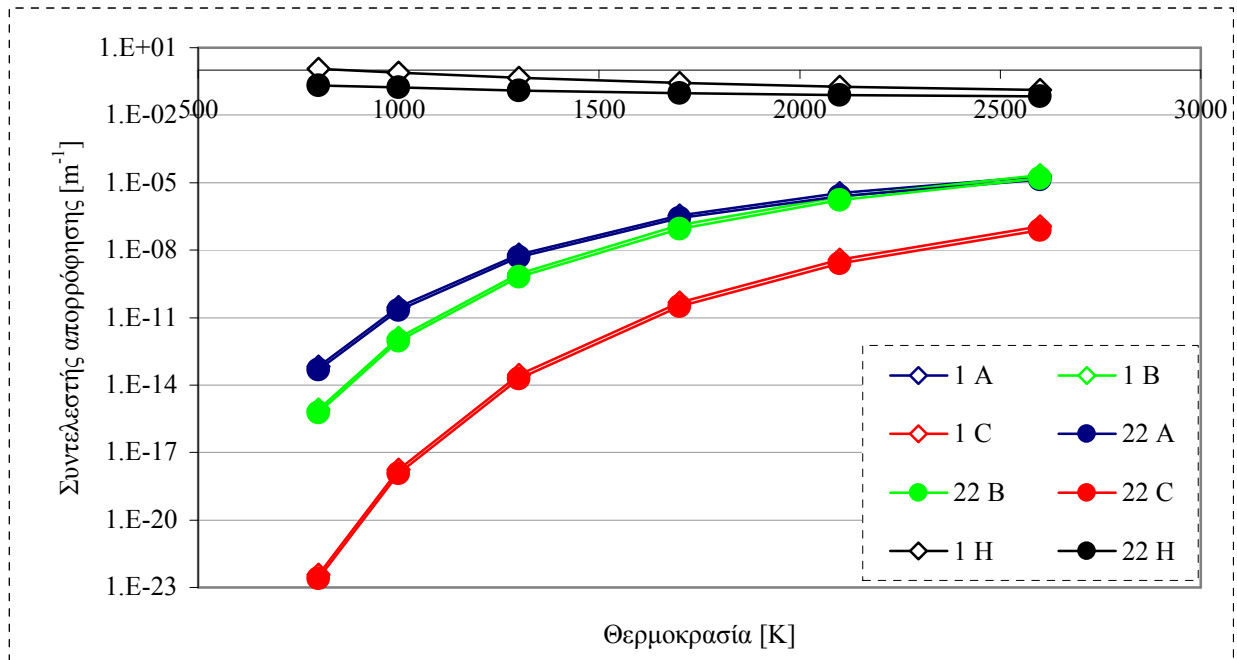
Στο εδάφιο αυτό θα εξεταστεί η διακύμανση των συντελεστών ακτινοβολίας σωματιδιακών νεφών για διάφορες συνθήκες θερμοκρασίας, μεγέθους σωματιδίων και μηκών κύματος. Με πρώτο κριτήριο τα μήκη κύματος και παραμετρικά ως προς τη θερμοκρασία, θα μελετηθούν οι ιδιαιτερότητες των νεφών ως προς την ακτινοβολία.

Οι ζώνες μηκών κύματος που θα εξεταστούν είναι οι ακόλουθες:

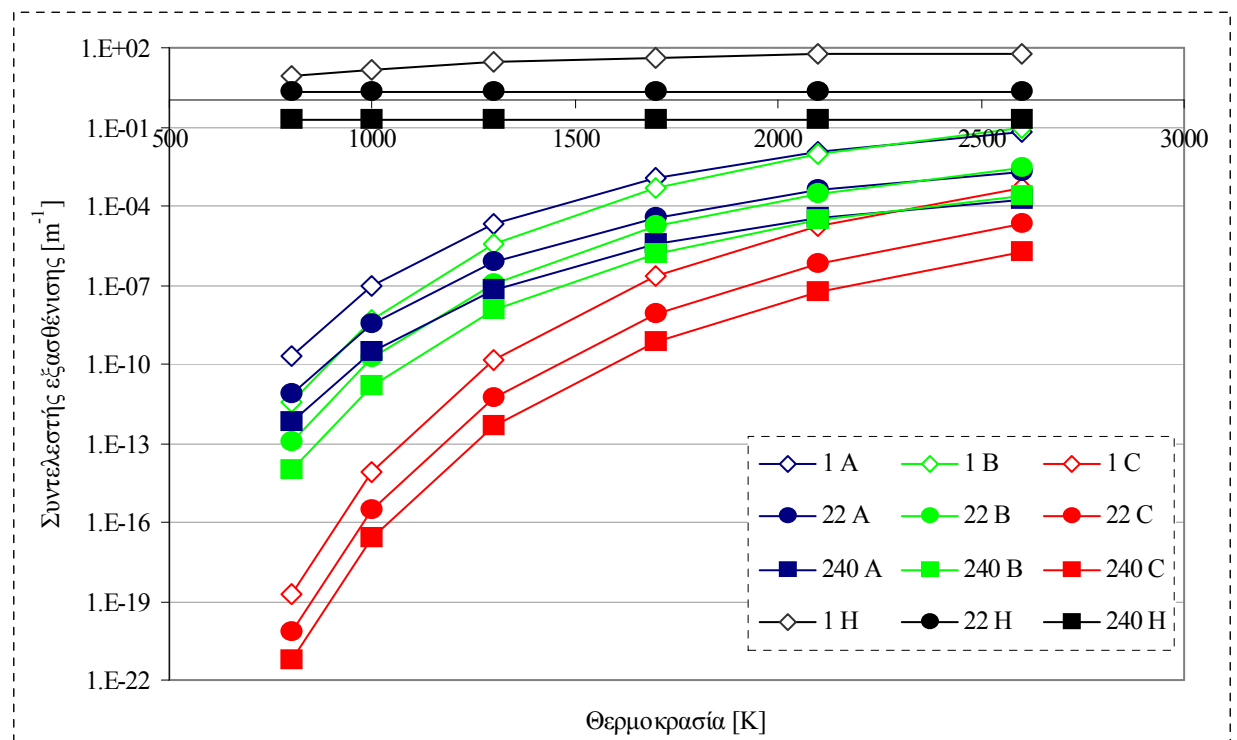
- ζώνες υψηλής ακτινοβολίας:
 - (H): 0.4 μm – 10.0 μm
- ζώνες χαμηλής ακτινοβολίας:
 - (A): 509 μm – 519 μm
 - (B): 390 μm – 450 μm
 - (C): 302 μm – 312 μm

Οι προαναφερθείσες ζώνες έχουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε καυστήρες τύπου flox, γι’ αυτό και μελετώνται εδώ.

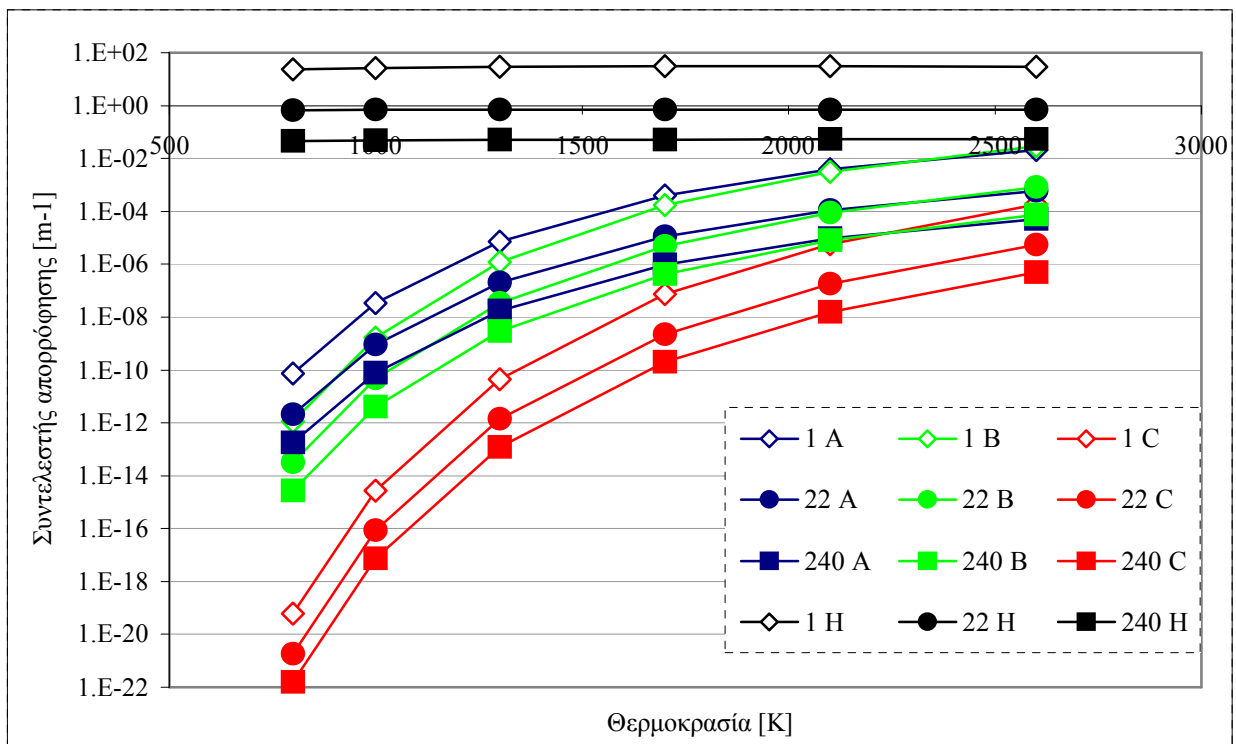
Η πρώτη συνιστώσα που μελετάται είναι η ιπτάμενη τέφρα. Για (σχεδόν σταθερή) διάμετρο σωματιδίων τέφρας, ίση προς $1\mu\text{m}$ και $22\mu\text{m}$, ο κώδικας *mie* δίνει τα παρακάτω αποτελέσματα για το συντελεστή απορρόφησης:



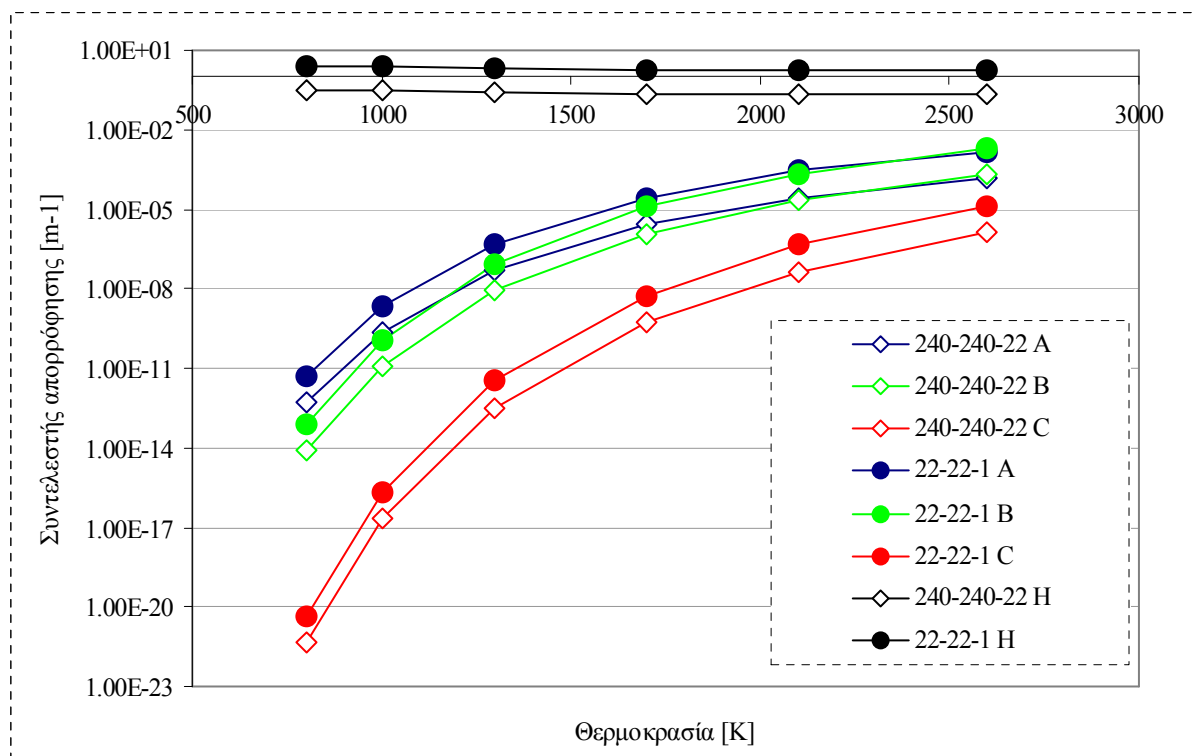
Σε δεύτερο βήμα, μελετάται ο συντελεστής εξασθένισης των σωματιδίων άνθρακα. Για διαμέτρους $1\mu\text{m}$, $22\mu\text{m}$ και $240\mu\text{m}$ λαμβάνονται τα ακόλουθα αποτελέσματα



Η επόμενη συνιστώσα που εξετάζεται είναι το εξανθράκωμα (char). Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, θεωρούνται διάμετροι ίσες προς $1\mu m$, $22\mu m$ και $240\mu m$ και οι συντελεστές απορρόφησης είναι:



Η επαλληλία των παραπάνω παραδειγμάτων θα δώσει το συντελεστή απορρόφησης του σωματιδιακού νέφους, για διάφορους συνδυασμούς διαμέτρων των συνιστωσών.



Μελετώντας τις παραπάνω καμπύλες, εξάγονται χρήσιμα συμπεράσματα.

- σε περιβάλλοντα χαμηλής ακτινοβολίας, οι συντελεστές εμφανίζονται πολλές τάξεις μεγέθους μικρότεροι σε σύγκριση με τους αντίστοιχους της υψηλής ακτινοβολίας. Αυτό οφείλεται στο ότι σε περιβάλλον υψηλής ακτινοβολίας εμφανίζεται ένα πολύ μεγάλο εύρος μηκών κύματος, ενώ σε περιβάλλοντα χαμηλής ακτινοβολίας, τόσο τα μήκη κύματος αυτά καθ' αυτά είναι μικρά, αλλά και το εύρος των περιοχών μηκών κύματος είναι μικρού πλάτους, με συνεπακόλουθη ελάττωση της τάξης μεγέθους των συντελεστών.
- η θερμοκρασία επιδρά πολύ έντονα σε περιβάλλοντα χαμηλής ακτινοβολίας, ενώ οι θερμοκρασιακές διαφορές γίνονται πολύ περισσότερο αισθητές σε χαμηλές θερμοκρασίες, παρά σε υψηλότερες.

6^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΣΧΟΛΙΑ

Στην παρούσα Διπλωματική Εργασία μελετήθηκαν φαινόμενα μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία μέσα σε εστίες στερεών καυσίμων, εμβαθύνοντας στις ιδιότητες ακτινοβολίας των αερίων και των σωματιδιακών προϊόντων της καύσης.

Γνωρίζοντας ήδη το ρόλο της θερμικής ακτινοβολίας στη μετάδοση θερμότητας μέσα σε εστίες, το αντικείμενο δύο κεφαλαίων της εργασίας υπήρξε η μελέτη της συμμετοχής στη μετάδοση θερμότητας με ακτινοβολία των αερίων προϊόντων και των σωματιδίων από την καύση στερεών καυσίμων. Μελετώντας τις ήδη αναπτυχθείσες μεθόδους και συγκρίνοντας τα προτερήματα και τα μειονεκτήματα καθεμιάς, το συμπέρασμα ήταν ότι η πιο «ισορροπημένη» λύση μεταξύ ακρίβειας, απλότητας και υπολογιστικής αποδοτικότητας είναι το Εκθετικό Μοντέλο Ευρείας Ζώνης. Περιγράφηκε ο τρόπος δόμησης του μοντέλου αυτού, ενώ παράλληλα σχολιάστηκαν οι εφικτές απλοποιήσεις αυτού, με στόχο την περαιτέρω βελτίωση της υπολογιστικής του αποδοτικότητας. Ο υπολογιστικός κώδικας που προέκυψε από την εφαρμογή του υπολογιστικού μοντέλου είναι ισχυρός, αξιόπιστος και χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση συστημάτων ειδικής σύνθεσης.

Παρόμοια ανάλυση έγινε και για την προσομοίωση των ιδιοτήτων ακτινοβολίας των σωματιδιακών προϊόντων της καύσης γαιανθράκων. Αρχικά, περιγράφηκε η θεωρία Lorenz – Mie, η οποία αποτέλεσε τη βάση υπολογιστικού κώδικα, ο οποίος χρησιμοποιήθηκε για την πρόβλεψη των ιδιοτήτων ακτινοβολίας διαφόρων μειγμάτων σωματιδίων. Διαπιστώθηκε η ταχύτητα του κώδικα για οποιαδήποτε δεδομένα εισόδου, ενώ επίσης εξετάστηκε συσχέτιση η περαιτέρω βελτίωση της υπολογιστικής αποδοτικότητας.

Με στόχο να μελετηθεί στην πράξη η επίδραση των διαφόρων συνιστωσών λειτουργίας ενός συστήματος καύσης στερεών καυσίμων, χρησιμοποιήθηκαν οι υπολογιστικοί κώδικες, αφ' ενός για τη μελέτη της συμπεριφοράς των συντελεστών απορρόφησης, αφ' ετέρου για την επίδραση αυτών στη μετάδοση θερμότητας. Δομήθηκε υπολογιστικός κώδικας, με χρήση του οποίου κατέστη δυνατός ο υπολογισμός των ιδιοτήτων ακτινοβολίας αερίων μειγμάτων, με έμφαση σε συστήματα oxy-fuel και καύσης χωρίς φλόγα. Πραγματοποιήθηκε, επίσης, μια προκαταρκτική μελέτη των ροών θερμότητας τέτοιων συστημάτων, με σκοπό αυτά να συγκριθούν με «τυπικά» συστήματα καύσης και να διαφανούν στην πράξη η επίδραση των λειτουργικών χαρακτηριστικών κάθε συστήματος στη μετάδοση θερμότητας. Παρόμοιος προσδιορισμός των ιδιοτήτων ακτινοβολίας πραγματοποιήθηκε και για τα σωματιδιακά προϊόντα της καύσης κονιοποιημένων στερεών καυσίμων, εστιάζοντας σε περιβάλλοντα χαμηλής ακτινοβολίας (τα οποία απαντώνται σε συνθήκες καύσης χωρίς φλόγα). Εκτελώντας τους κώδικες κατά τρόπον ώστε να εισάγονται τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της κάθε τεχνολογίας, έγιναν οι ακόλουθες διαπιστώσεις:

- η τεχνολογία oxy-fuel εμφάνισε ενίσχυση της μετάδοσης θερμότητας με ακτινοβολία, και τούτο εξ' αιτίας της αυξημένης παρουσίας ακτινοβολούντων αερίων στα καυσαέρια (μέσω της αυξημένης αυτής συγκέντρωσης, έμμεσα εισήχθη η τεχνολογία oxy-fuel, που έγκειται στην έντονη ανακυκλοφορία των καυσαερίων). Τόσο από άποψης ροών θερμότητας, όσο και από άποψης πηγών θερμότητας, τα συστήματα oxy-fuel φάνηκαν μεταφέρουν εντονότερα θερμότητα με ακτινοβολία σε σχέση με «τυπικά» συστήματα καύσης στις ίδιες συνθήκες.
- η τεχνολογία flox, αντίθετα, παρουσιάστηκε ως λιγότερο ευνοϊκή ως προς τη μετάδοση θερμότητας με ακτινοβολία σε σχέση με ένα «τυπικό» σύστημα. Η απουσία της φλόγας οδήγησε σε χαμηλότερες τιμές της θερμοκρασίας των καυσαερίων, ενώ η σχετικά υψηλή θερμοκρασία των τοιχωμάτων (όπως επιβάλλεται από την τεχνολογία της καύσης χωρίς φλόγα) είχε τελικώς ως αποτέλεσμα τη μικρή θερμοκρασιακή διαφορά μετάδοσης θερμότητας, άρα και λιγότερο ισχυρές θερμορροές.

Οι εκτελεσθείσες εργασίες, ήτοι η κατάστρωση κωδίκων για τον υπολογισμό των συντελεστών ακτινοβολίας αερίων και στερεών, καθώς επίσης και η προκαταρκτική μελέτη των ροών θερμότητας, θα πρέπει να ακολουθηθούν από εκτενέστερη ανάλυση των φαινομένων καύσης κατά oxy-fuel και flox στις εξής κατευθύνσεις:

- πλήρης γνώση των συνθηκών λειτουργίας, ως προς το εισαγόμενο καύσιμο και τα λειτουργικά χαρακτηριστικά των συστημάτων (ανακυκλοφορία καυσαερίων, περιβάλλον ακτινοβολίας κ.α.)
- παραμετρική ανάλυση των παραπάνω μεγεθών σε συνάρτηση με τη διακύμανση των εκπομπών NO_x
- διερεύνηση δυνατοτήτων βελτιώσεων των υπάρχουσών τεχνολογιών flox και oxy-fuel, με σκοπό της αύξησης της αποδοτικότητάς τους και μελέτη της εφικτότητας ενσωμάτωσης σε αυτά συστημάτων εξοικονόμησης ενέργειας.
- προσομοίωση των συνθηκών καύσης σε γενικό κώδικα Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής, με σκοπό την πλήρη γνώση όλων των χαρακτηριστικών λειτουργίας, τον υπολογισμό των ωφέλιμων ποσών θερμότητας και του βαθμού απόδοσης της εστίας.
- οικονομική ανάλυση του κόστους μετατροπής υπάρχουσών μονάδων σε oxy-fuel ή flox, σταθμίζοντας τα αναγκαία κεφάλαια και την ενδεχόμενη μείωση του βαθμού απόδοσης με τις περιβαλλοντικές ωφέλειες.

Εκφράζονται ειλικρινείς ευχαριστίες στον κ. Εμμανουήλ Κακαρά και στους κ.κ. Δ. Γιαννακόπουλο, Α. Δουκέλη και Χ. Παπαπαύλου για την ουσιαστική τους βοήθεια και υποστήριξη κατά την εκπόνηση της Διπλωματικής Εργασίας.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Michael Modest: **“Radiative Heat Transfer, 2nd edition”**, Academic Press, 2003
- [2] Robert Siegel, John R. Howell: **“Thermal Radiation Heat Transfer, 2nd edition”**, McGraw – Hill Book Company, 1981
- [3] Frank P. Incropera, David P. DeWitt: **“Fundamentals of Heat and Mass Transfer”**, John Wiley & Sons, 1996
- [4] Μαρία Φούντη, Δημήτριος Χουντάλας: **“Μεταφορά Θερμότητας II”**, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2003
- [5] Donald Pitts, Leighton Sissom: **“Μεταφορά Θερμότητας”**, Εκδόσεις Τζιόλα, 2001
- [6] Εμμανουήλ Κακαράς: **“Αντιρρυπαντική Τεχνολογία Θερμικών Εγκαταστάσεων”**, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 1993
- [7] J. A. Wüning, J. G. Wüning: **“Flameless Oxidation to reduce thermal NO-formation”**, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 23, pp. 81 – 97, 1997
- [8] Franck Delacroix: **“The Flameless Oxidation Mode: an efficient combustion device leading also to very low NO_x emission levels”**, *French Agency for Energy and Environmental Management*
- [9] European Commission – Research Directorate: **“Development of a pilot-scale flameless oxidation burner for ultra low NO_x combustion of pulverized coal: Technical Annex”**, 2005
- [10] Joachim G. Wüning: **“Flameless combustion and its applications”**, WS Inc.
- [11] Εγκυκλοπαίδεια **“Πάπυρος – Larousse – Britannica”**, Εκδοτικός Οργανισμός «Πάπυρος», 1981 – 1997
- [12] Ιωάννης Γρ. Μαράκης: **“Εξέταση φαινομένων θερμικής ακτινοβολίας σε εστίες στερεού καυσίμου”** (διδακτορική διατριβή), Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 1997
- [12a] V. Goutiere, F. Liu, A. Charrette: **“An assessment of real-gas modeling in 2D enclosures”**, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 64, pp. 299 – 326, 2000
- [13] P. J. Coelho: **“Numerical simulation of radiative heat transfer form non-gray gases in three-dimensional enclosures”**, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 74, pp. 307 – 328, 2002
- [14] Vladimir P. Slovjov, Brent W. Webb: **“SLW modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures”**, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 65, pp. 655 – 672, 2000
- [15] A. Soufiani, E. Djavdan: **“A comparison between Weighted Sum of Gray Gases and Statistical Narrow Band radiation models of combustion applications”**, *Combustion and Flame*, Vol. 97, pp. 240 – 250, 1994
- [16] L. Pierrot, A. Soufiani, J. Taine: **“Accuracy of narrow band and global models of radiative transfer in H₂O, CO₂ and H₂O-CO₂ mixtures at high temperature”**, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 62, pp. 523 – 548, 1998

- [17] N. Lallemand, A. Sayre, R. Weber: “**Evaluation of emissivity correlations for H₂O–CO₂–N₂/air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation**”, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 22, pp. 543 – 574, 1996
- [18] J. Ströhle, P. J. Coelho: “**On the application of the Exponential Wide Band Model to the calculation of radiative heat transfer in one- and two-dimensional enclosures**”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 45, pp. 2129 – 2139, 2002
- [19] D. K. Edwards: “**Molecular Gas Band Radiation**”, *Advances in Heat Transfer*, Vol. 12, pp. 115 – 193, 1976
- [20] N. Lallemand, R. Weber: “**A computationally efficient procedure for calculating gas radiative properties using the Exponential Wide Band Model**”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 39, No. 15, pp. 3273 – 3286, 1996
- [21] J. G. Marakis, Ch. Papapavlou, E. Kakaras: “**A parametric study of radiative heat transfer in pulverised coal furnaces**”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 43, pp. 2961 – 2971, 2000
- [22] Craig F. Bohren, Donald R. Huffman: “**Absorption and scattering of light by small particles**”, John Wiley and Sons., 1998

