

## شبیه‌سازی شعله آرام پیش‌مخلوط جزئی با استفاده از FGM دوبعدی

فاطمه چیتگرها<sup>۱</sup>، فتح‌الله امی<sup>۲\*</sup> و محمد فرشچی<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، f.chitgarha@modares.ac.ir

۲- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، fommi@modares.ac.ir

۳- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، farshchi@sharif.edu

\* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۱۰/۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۸/۳/۱۹، پذیرش: ۹۸/۳/۲۱)

**چکیده:** در این مقاله، به معرفی روش فلیملت دوبعدی بر مبنای رژیم پیش‌مخلوط پرداخته شده است. این روش ترکیبی از دو روش کاهش سینتیک، یعنی روش فلیملت و روش منیفلد، است. در این روش، شعله چندبعدی به صورت مجموعه‌ای از شعله‌های یک‌بعدی آرام در نظر گرفته می‌شود (روش فلیملت) و ساختار شعله توسط تعدادی متغیر کنترلی تعیین می‌شود (روش منیفلد). با استفاده از این مدل، بانک اطلاعاتی متغیرهای شیمیایی بر حسب متغیرهای کنترلی و پیشرو ساخته می‌شوند. با حل معادلات متغیرهای پیشرو و کنترلی در طول شبیه‌سازی خواص مورد نیاز از بانک اطلاعاتی میان‌بایی می‌شوند. در این مطالعه، به منظور به‌کارگیری روش فلیملت منیفلد دوبعدی، ابتدا روش فلیملت منیفلد یک‌بعدی صحت‌سنجی شد. به منظور صحت‌سنجی، از نتایج شبیه‌سازی مستقیم هندسه شعله جریان مخالف گازی پیش‌مخلوط جزئی با مکانیزم شیمیایی GRI2.11 استفاده شد. در مرحله بعد روش فلیملت منیفلد دوبعدی با اضافه کردن پارامتر کسر مخلوط بر یک شعله جریان متقابل با تغییرات نسبت هم‌ارزی (۱/۸-۱) و نرخ کرنش به‌کار گرفته شد. نتایج نشان داد که برای گونه‌های اصلی و دما روش فلیملت دوبعدی دارای دقت بسیار خوبی بوده و همچنین زمان محاسبات را تا چندین برابر کاهش می‌دهد. این روش در رژیم پیش‌مخلوط جزئی نتایج قابل قبولی را به‌ویژه در کرنش‌های نسبتاً بالا نشان داد.

**کلیدواژگان:** فلیملت منیفلد، متغیر پیشرفت واکنش، شعله پیش‌مخلوط

### مقدمه

مسئله اصلی در شبیه‌سازی فرایندهای پیچیده احتراقی، مدل‌سازی و ارزیابی نرخ‌های واکنش، به‌منظور مشاهده صحیح سینتیک جزئی، است. شبیه‌سازی مستقیم عددی مکانیزم‌های واکنشی بزرگ و پیچیده نیاز به هزینه محاسباتی بسیار بالایی دارد. از این رو پژوهشگران به دنبال روش‌های پربازده محاسباتی برای مدل‌سازی دقیق سینتیک جزئی‌اند. این روش‌های پربازده محاسباتی، به‌منظور دنبال کردن شیمی پیچیده در فرایندهای احتراقی، می‌توانند به دو گروه کلی تقسیم شوند: روش‌های کاهش شیمی و روش‌های فلیملت. روش‌های کاهش شیمی بر این مبنا که فرایندهای شیمی عمدتاً به‌وسیله تعدادی از واکنش‌های کند مشخص می‌شوند، هستند [۱]. این روش‌ها فرض می‌کنند که گونه‌های شامل در واکنش‌های سریع در حالت پایای شبه تعادلی قرار دارند. در این روش، صرفه‌جویی در محاسبات تنها با دنبال کردن واکنش‌های نرخ محدود و گونه‌های شامل در فرایندهای کند به‌وجود می‌آید. حذف گونه‌ها از روش شبه‌پایا به‌صورت دستی انجام می‌شود و نیاز به دید عمیق کاربر در سینتیک‌های شیمیایی دارد. این کار برای هیدروکربن‌های با عدد کربن بالاتر مشکلات بیشتری ایجاد می‌کند. همچنین، فرض پایابودن یک گونه در دمای بالا و حذف آن ممکن است در دمای پایین فرض صحیح نباشد [۲]. روش‌های فلیملت فرض

می‌کنند که ساختار شیمی موضعی یک شعله مستقل از پیچیدگی فیزیکی جریان اطراف است. حل‌های از پیش تولید شده ترکیب شیمیایی برای شعله‌های ساده به‌منظور پیش‌بینی ساختار موضعی شیمیایی در موقعیت‌های پیچیده‌تر با استفاده از روش‌های میان‌یابی و توابع استفاده می‌شوند. مدل فلیملت به‌وسیله جدا کردن واکنش‌های شیمیایی از میدان جریان آشفته، پدیده‌های پیچیده‌ای همچون جریان‌های دارای واکنش‌های شیمیایی و تشکیل آلاینده‌ها را بهتر پیش‌بینی می‌کند. نخستین بار، لیو و همکارانش در سال ۱۹۸۱، ایده استفاده از پروفیل‌های به‌دست‌آمده از شعله‌های نفوذی آرام را برای محاسبه مقدار متوسط و واریانس کمیت‌ها در شعله‌های مغشوش بیان کردند [۳].

مدل‌های احتراقی از نوع فلیملت فرضیات خاصی را در مورد اینکه اختلاط سوخت و اکسنده چگونه باشند، شامل می‌شوند [۵،۴]. برای مثال، مدل‌های فلیملت، که بر مبنای معادلات فلیملت غیرپیش‌مخلوط هستند [۷،۶]، تنها در رژیم غیرپیش‌مخلوط اعتبار دارند. در این مقاله، به بررسی روش فلیملت بر پایه رژیم پیش‌مخلوط در رژیم‌های پیش‌مخلوط جزئی پرداخته می‌شود. مدل فلیملت منیفولد (FGM) ابتدا توسط فن اوین مطرح شد [۸]. او بر اساس تعریف میزان کشیدگی شعله، که توسط دخویی و همکارانش [۹] بیان شده بود، معادله فلیملت یک‌بعدی به‌دست آورد. دوله و همکاران [۱۰] فرمول‌بندی یکسان را برای روش FGM برای سه نوع شعله پیش‌مخلوط، غیرپیش‌مخلوط و شعله پاره‌ای پیش‌مخلوط در مختصات منحنی‌الخط استخراج کردند. آن‌ها این روش را برای شعله گذرای غیرپیش‌مخلوط (که نرخ کرنش آن با زمان تغییر کند) به کار بردند و تاثیر فرضیاتی که در روش فوق استفاده می‌شود را بررسی کردند.

اگرچه احتراق در کاربردهای عملی معمولاً تحت شرایط مغشوش اتفاق می‌افتد، اما شعله‌های آرام به‌منظور فهم بهتر شیمی همچون کنش و واکنش شیمی با جریان مغشوش، مورد بررسی قرار می‌گیرند. شکل شعله جریان مخالف یک شکل تعریف شده است که شعله‌ها بین جریان‌های مخالف سوخت و اکسیدایزر پایدار می‌شوند. شعله جریان مخالف از طریق روش فلیملت به احتراق مغشوش مربوط می‌شود [۴]. از مزایای شعله جریان مخالف می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: در این شکل از شعله، فرایندهای احتراق پایا می‌توانند به دور از پیچیدگی‌های تاثیرات دیوارها ایجاد شوند. به‌علت پایداری ذاتی این نوع شعله‌ها، نیازی به بررسی نواحی ناپایداری نیست. خطوط جریان کشیده شده در این نوع شکل شعله کمک به تعدیل اختلالات کرده و مانع وقوع ناپایداری‌های احتراق (خاموشی شعله) می‌شود. همچنین، این نوع هندسه، به‌علت به‌کارگیری آسان شرایط مرزی و تغییر دادن آن‌ها همچون نرخ کرنش، دماها و ترکیبات جریان‌های مرزی، به‌منظور بررسی ساختار شعله‌ها، کاربرد زیادی دارد. از این رو، در این پژوهش، به‌منظور تحلیل مدل فلیملت در رژیم پیش‌مخلوط جزئی، از این نوع هندسه استفاده می‌شود. در سال ۲۰۰۵، فیورینا [۱۱] و همکارانش به بررسی توانایی مدل‌های فلیملت بر پایه پیش‌مخلوط در رژیم‌های پیش‌مخلوط جزئی و نفوذی در شعله‌های آرام جریان مخالف و به‌کارگیری ایندکس [۱۲] پرداختند. آن‌ها از مدل فلیملت دو‌بعدی، به‌منظور شبیه‌سازی شعله آرام، استفاده کردند. شبیه‌سازی آن‌ها بر پایه شعله یک‌بعدی و نتایج آن‌ها شامل دما و کسر جرمی گونه‌های CO<sub>2</sub> و CO در دو نسبت هم‌ارزی ۱ و ۱/۸ در سه کرنش مختلف بود. روش کار این مقاله مشابه کار فیورینا بوده، اما شبیه‌سازی‌ها در حالت دو‌بعدی در اوپن‌فوم در سه نسبت هم‌ارزی انجام شده است. فن اوین [۱۳، ۸] شعله سه‌گانه آرام را برای طول‌های اختلاط متعدد با دو روش FGM و سینتیک جزئی شبیه‌سازی کرد. او در شبیه‌سازی خود به بررسی میزان حرارت آزاد شده در شعله نفوذی پرداخت و سرعت شعله را در حالات مختلف به‌دست آورد. در مطالعه‌ای دیگر در این زمینه، بونگروز و همکارانش [۱۴] با استفاده از تحلیل شعله برخوردی و کنترل مقدار گرادیان نسبت مخلوط توانستند دقت روش FGM را بسنجند.

از کارهایی که در داخل کشور برای بهبود مدل فلیملت انجام شده می‌توان به کار عطوف و داووده امامی، در سال ۲۰۱۶، اشاره کرد [۲]. آن‌ها به بررسی تاثیر انتخاب متغیر پیشرفت‌های گوناگون در مدل فلیملت منیفولد یک‌بعدی، بر حسب کسر جرمی‌های مختلف در پیش‌بینی جبهه شعله پرداختند.

در سال ۲۰۱۲، پرادپ و گروث به بررسی مدل فلیملت FPI<sup>۱</sup> و مدل فلیملت کلاسیک برای شعله‌های آرام پرداختند [۱]. آن‌ها با روش‌های متفاوتی در هر دو مدل جدول‌سازی کرده و با هم مقایسه کردند. به‌منظور پیاده‌سازی روش FPI، از دو متغیر پیشرفت واکنش و کسر مخلوط استفاده کردند. روش به‌کارگرفته‌شده در این مقاله نیز با دو متغیر پیشرفت واکنش و کسر مخلوط است. هدف از مقاله حاضر به‌کارگیری روش فلیملت دوبعدی برپایه رژیم پیش‌مخلوط در اوپن‌فوم برای شعله‌های دوبعدی آرام با دو ورودی متفاوت (تغییرات نسبت هم‌ارزی) است. این روش برای شعله‌های مغشوش نیز در کارهای اخیر استفاده شده است. ورمن و همکارانش شبیه‌سازی LES<sup>۲</sup> شعله‌های ساندا<sup>۳</sup> را با مدل فلیملت FPI (پیش‌مخلوط) و مدل فلیملت دیفیوژن انجام دادند. آن‌ها مشاهده کردند که برای گونه‌های CO، H<sub>2</sub> و OH مدل فلیملت نفوذی نتایج قابل قبول‌تری را ارائه می‌دهد. آن‌ها این سوال را به‌عنوان مشکل مطرح کردند که این‌گونه خطاها در پیش‌بینی گونه‌ها آیا مربوط به جدول‌بندی فلیملت برپایه رژیم خاص می‌شود و یا مربوط به شبیه‌سازی LES در این نوع شعله‌ها می‌شود [۱۵]. همچنین، شبیه‌سازی احتراق شعله غیرپیش‌مخلوط سیدنی مغشوش نیز با استفاده از روش LES توسط البرخت و همکارانش [۱۶] با استفاده از روش FGM و تولید فلیملت‌های پیش‌مخلوط پایا انجام گرفت. در اکثر کارهای انجام‌شده نتایج به‌صورت کامل ارائه نشده‌اند. در این مقاله، سعی شده است که تحلیل و بررسی جامع‌تری با استفاده از مدل فلیملت در رژیم‌های پیش‌مخلوط جزئی صورت گیرد. از این رو، در مقاله حاضر، شبیه‌سازی دو نوع از شعله‌های آرام در رژیم پیش‌مخلوط جزئی در کرنش‌های متفاوت، به‌منظور بررسی دقیق‌تر روش فلیملت دوبعدی، انجام شده است و نتایج آن‌ها با روش شبیه‌سازی مستقیم مقایسه شده‌اند. ابتدا برای صحت‌سنجی نتایج شبیه‌سازی مستقیم، شعله غیرپیش‌مخلوط جریان مخالف با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده‌اند. در ادامه، ابتدا، به‌منظور صحت‌سنجی کد فلیملت یک‌بعدی، شعله پیش‌مخلوط شبیه‌سازی شده و در نهایت کد فلیملت دوبعدی صحت‌سنجی و با نتایج شبیه‌سازی مقایسه شد.

### معادلات حاکم بر روش فلیملت پیش‌مخلوط

به‌منظور تولید فلیملت یک‌بعدی در شعله‌های پیش‌مخلوط، از تمامی جملاتی که سبب ایجاد اعوجاج در شعله پیش‌مخلوط می‌شوند، مانند انحنا و خمیدگی، در معادلات شعله یک‌بعدی صرف‌نظر می‌شود. با این فرض، معادلات بقای جرم، گونه‌ها و آنتالپی برای فلیملت پایا به‌صورت زیر در می‌آید [۸]:

$$\frac{\partial m}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (mY_i) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{Le_i c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) = \dot{\omega}_i \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (mh) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{c_p} \sum_{i=1}^{N_i} \left( \frac{1}{Le_i} - 1 \right) h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) \quad (3)$$

در این روابط،  $Y_i$  و  $h$  به‌ترتیب نسبت جرمی گونه‌های واکنشی و آنتالپی کل است.  $\lambda$ ،  $c_p$  و  $Le_i$  خواص سیال بوده و به‌ترتیب معرف ضریب هدایت حرارتی، ظرفیت حرارتی مخلوط و عدد لوییس هر گونه واکنشی است.  $m$  برابر حاصل‌ضرب چگالی در سرعت بوده و مقدار ویژه مسئله است. با استفاده از شروط مرزی (۴)، (۵) و حل معادلات، فلیملت یک‌بعدی ساخته شده و در فضای برداری گونه‌ها تشکیل یک منحنی را می‌دهند که می‌توان آن را به‌عنوان منی‌فولد یک‌بعدی تلقی کرد.

$$Y_i(x \rightarrow -\infty) = Y_{i,-\infty}, \quad h(x \rightarrow -\infty) = h_{-\infty} \quad (4)$$

$$\frac{dY_i}{ds}(x \rightarrow \infty) = 0, \quad \frac{dh}{ds}(x \rightarrow \infty) = 0 \quad (5)$$

1. Flame Prolongation of ILDM  
2. Large Eddy Simulation  
3. Sandia

در ادامه با حل معادلات بالا، مقادیر گونه‌ها به همراه دما در یک بانک اطلاعاتی به صورت تابعی از متغیر فضا،  $x$ ، ذخیره می‌شود. حال اگر گونه‌ای شیمیایی پیدا شود که به صورت یکنوا با افزایش متغیر فضا تغییر کند می‌توان تمامی گونه‌ها را برحسب آن گونه بیان کرد. در این صورت، به این گونه، متغیر پیشرو اطلاق می‌شود. از آنجایی که تمام گونه‌ها تنها تابعی از یک متغیر پیشرو هستند، روش FGM به صورت یک‌بعدی است [۲]. انتخاب گونه شیمیایی مناسب به عنوان متغیر پیشرو بستگی به نوع مخلوط سوختنی دارد. البته برطبق کارهای انجام شده [۱۱] برای تخمین بهتر گونه‌ها در میدان، متغیر پیشرو می‌تواند به صورت ترکیب خطی چندگونه نیز انتخاب شود که در مجموع خاصیت افزایشی و یا کاهش‌ی داشته باشند.

اما به منظور بررسی شعله‌هایی با ورودی‌های متفاوت نیاز به پارامتر دیگری علاوه بر متغیر پیشرفت واکنش، برای جدول‌بندی است. در شعله مورد بررسی در این مقاله، به علت تغییرات نسبت هم‌ارزی، نیاز به کمیتی معادل با نسبت هم‌ارزی داریم. در مدل فلیملت منی‌فولد دوبعدی از شبیه‌سازی حل‌های شعله پیش‌مخلوط آرام یک‌بعدی در نسبت هم‌ارزی‌های متفاوت استفاده می‌شود. تمامی خواص شعله همچون ترکیب گاز سوخته، دمای شعله، سرعت شعله و غیره تابعی از مخلوط اولیه نسوخته بوده که به وسیله نسبت هم‌ارزی مخلوط  $\phi$  و مختصات مکانی  $x$  در جهت عمود بر سطح شعله‌اند. از این رو، تمامی خواص می‌توانند به صورت یک‌به‌یک با رابطه زیر تعریف شوند [۱]:

$$\varphi = \varphi(\phi, x) \quad (۴)$$

با توجه به روابط زیر، متغیر مکانی  $x$  از معادلات حذف شده و جدول‌بندی نهایی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\varphi_{fgm2d} = \varphi(x, \phi) = \varphi(Y_c(x), Z(\phi)) \quad (۶)$$

$$\varphi_{fgm2d} = \varphi(Z, Y_c) \quad (۷)$$

در این مدل، متغیر پیشرفت واکنش برای هر ترکیب سوخت اکسیدایزر منحصر به فرد بوده و بایستی طوری انتخاب شود که یک تناظر یک به یک بین مختصات مکانی و متغیر پیشرفت واکنش برای تمامی محدوده‌های نسبت هم‌ارزی برقرار شود [۱].

بعد از تولید جدول‌های فلیملت در هر نسبت هم‌ارزی، این کد بایستی با کد اصلی جریان لینک شود. در کد اصلی، علاوه بر معادلات پیوستگی، تکانه و معادله حالت، معادلات برای متغیر پیشرفت واکنش (در حالت یک‌بعدی) و کسر مخلوط (در حالت دوبعدی) نیز حل می‌شوند.

$$\frac{\partial(\rho Y_c)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v} Y_c) = \dot{\omega}_c + \vec{\nabla} \cdot (D_{Y_c} \vec{\nabla} Y_c) \quad (۵)$$

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v} Z) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D_Z \vec{\nabla} Z) \quad (۶)$$

که در این روابط، ضرایب دیفیوژن به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$D_Z = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (۷)$$

$$D_{Y_c} = \frac{\mu}{\rho S C_{Y_c}} \quad (۸)$$

## روش عددی

در این پژوهش، برای ساخت جدول‌های فلیملت در حالت یک‌بعدی و دوبعدی از کد متن‌باز فلیم‌مستر<sup>۱</sup> استفاده شده است [۱۷]. این کد، به منظور حل سینتیک مخلوط‌های گازی و مایع است که امکان تحلیل شعله‌های پیش‌مخلوط را دارد. این کد، برای حل سینتیک شعله پیش‌مخلوط، دارای سه مدل شعله صفربعدی، مدل شعله جریان مخالف پیش‌مخلوط و مدل

1. FlameMaster

شعله یک‌بعدی بدون کشش است که در این پروژه برای تولید فلیملت‌ها از مدل اخیر در رژیم پیش‌مخلوط استفاده شده است. این کد می‌تواند با استفاده از روش نیوتن سینتیک شعله پیش‌مخلوط غیرکششی را در یک‌بعد با استفاده از شبکه انطباقی حل کند. این بانک اطلاعاتی شامل تمام نسبت جرمی گونه‌ها به‌همراه آنتالپی کل، دما، چگالی، گرانشی، ضریب هدایت، چشمه شیمیایی هرگونه و غیره است که می‌تواند برحسب متغیر مکانی  $x$  (در حالت یک‌بعدی) و نسبت هم‌ارزی (در حالت دوبعدی) در حالت پیش‌مخلوط بیان شود. به‌منظور حل معادلات انتقال متغیرهای پیشرو و کنترلی در کد اصلی، بایستی مقادیر گرانشی و دینامیکی، هدایت حرارتی، گرمای حرارتی ویژه، چگالی سیال و نیز مقدار چشمه شیمیایی با توجه به مقدار متغیر پیشرو و کسر مخلوط در هر سلول محاسباتی از جدول فلیملت میان‌یابی شود.

برای حل جریان سیال (معادلات پیوستگی و تکانه) به‌همراه معادلات انتقالی متغیرهای پیشرو، یعنی معادلات (۸) و (۹)، از کد متن‌باز اپن‌فوم [۹] استفاده شده است. فرایند حل جریان احتراقی توسط روش فلیملت یک‌بعدی به این شکل است که ابتدا در مرحله پیش‌پردازش، بانک اطلاعاتی فلیملت با کد فلیم‌مستر تولید می‌شود. در مرحله پردازش باید یکی از گونه‌های مناسب به‌عنوان متغیر پیشرو انتخاب شود. سپس، در کد اپن‌فوم هندسه به‌همراه شبکه محاسباتی تولید و مقدار متغیر پیشرو در میدان حل مقدار اولیه می‌گیرد. با استفاده از یک تابع میان‌یاب خطی، براساس مقدار متغیر پیشرو، مقادیر اولیه چگالی، ضریب هدایت حرارتی، گرمای حرارتی ویژه و چشمه شیمیایی در هر یک از سلول‌های محاسباتی از درون جدول فلیملت میان‌یابی می‌شود [۲]. سپس، معادلات جریان سیال و پس از آن معادله انتقال متغیر پیشرو حل می‌شود. این مراحل تا همگرایی کامل میدان جلو می‌رود. پس از ارضای شرایط همگرایی، در مرحله پس‌پردازش، براساس مقدار متغیر پیشرو در میدان دیگر گونه‌ها نیز از جدول فلیملت درون‌یابی می‌شود. در مدل فلیملت دوبعدی، میان‌یابی با دو متغیر صورت می‌گیرد. با توجه به مرجع [۱] متغیر پیشرفت واکنش  $CO_2+CO$  در کد فلیملت یک‌بعدی و دوبعدی انتخاب شده است. علت انتخاب این گونه در شکل ۱ مشاهده می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، اگر متغیر پیشرفت گونه  $CO_2$  انتخاب شود، با توجه به شکل، در نسبت هم‌ارزی‌های غنی، تناظر یک‌به‌یک بین دما و متغیر پیشرفت وجود ندارد. این پدیده به‌علت حضور  $CO$  و  $CO_2$  در شرایط غنی و دماهای بالاست، اما، در ترکیب خطی  $CO_2+CO$ ، این تناظر یک‌به‌یک مشاهده می‌شود. بعد از بررسی استقلال از شبکه در تولید جدول‌های فلیملت، شبکه ۳۰۰ تایی برای تولید این جدول‌ها انتخاب شد.

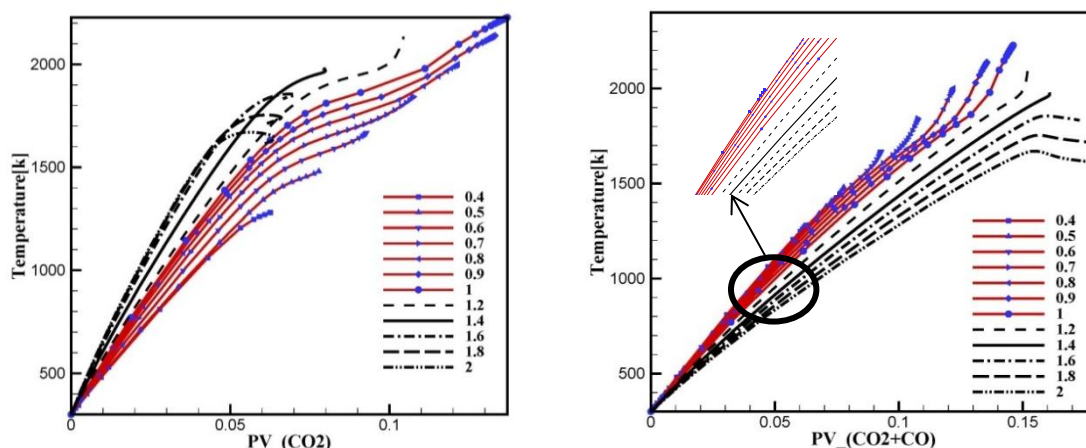


Figure 1- Results of premixed flames in progress variable and mixture fraction space with two progress variable  $CO_2$  and  $CO_2+CO$  in different equivalence ratios

شکل ۱- حل شعله‌های پیش‌مخلوط در فضای متغیر پیشرفت و کسر مخلوط با دو متغیر پیشرفت  $CO_2$  و  $CO_2+CO$  در نسبت هم‌ارزی‌های مختلف

## شبیه‌سازی شعله جریان مخالف

در این مقاله، صحت‌سنجی شبیه‌سازی مستقیم، با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی شعله جریان مخالف غیرپیش‌مخلوط [۱۸]، انجام می‌شود. این شعله به صورت دوبعدی متقارن محوری با کد اوپن‌فوم شبیه‌سازی شده است. مشخصات شعله در جدول ۱ و هندسه دوبعدی متقارن محوری در شکل ۲ مشاهده می‌شود. به علت وجود داده‌های آزمایشگاهی در حالت غیرپیش‌مخلوط، شبیه‌سازی مستقیم در این حالت با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شده است.

جدول ۱- مشخصات شعله شبیه‌سازی شده [۱۸]

Table 1- Characteristic of simulated flame

Oxidizer Temperature (k)	Fuel Temperature (k)	Oxidizer Velocity (cm/s)	Fuel Velocity (cm/s)	Strain rate (s <sup>-1</sup> )
300	300	70	70	162

نرخ کرنش از رابطه  $Strain\ Rate = \frac{2V_{Air}}{d} + \frac{2V_{Fuel}}{d} \sqrt{\frac{\rho_{Fuel}}{\rho_{Air}}}$ ، که  $d$  فاصله بین دو ورودی و  $\rho$  چگالی است، محاسبه می‌شود. سوخت مورد نظر متان است. شبکه‌بندی هندسه مورد نظر به صورتی است که حداقل ۱۰ سلول در ناحیه واکنش وجود دارد. بعد از بررسی استقلال از شبکه، تعداد سلول‌های ۴۴۰۰۰ به عنوان شبکه مناسب انتخاب شد. شرایط مرزی نیز در شکل ۲ مشاهده می‌شود. سوخت از سمت چپ و هوا از سمت راست وارد می‌شود (شعله غیرپیش‌مخلوط). در تمامی شبیه‌سازی‌ها از مکانیزم GRI2.11 استفاده شده است. به منظور حل شبیه‌سازی مستقیم، حلگر ReactingFoam بر مبنای عدد لوییس یک در اوپن‌فوم اصلاح شد. در این حلگر خواص انتقالی از مدل ساترلند<sup>۱</sup> و برای خواص ترمو از جانف<sup>۲</sup> استفاده می‌شود. در شکل ۳، نتایج شبیه‌سازی مستقیم با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج با حالت آزمایشگاهی تطابق خوبی دارند. اختلافات مشاهده شده، به علت تقریبی بودن روابط موجود در اوپن‌فوم برای خواص همچون گرانی است.

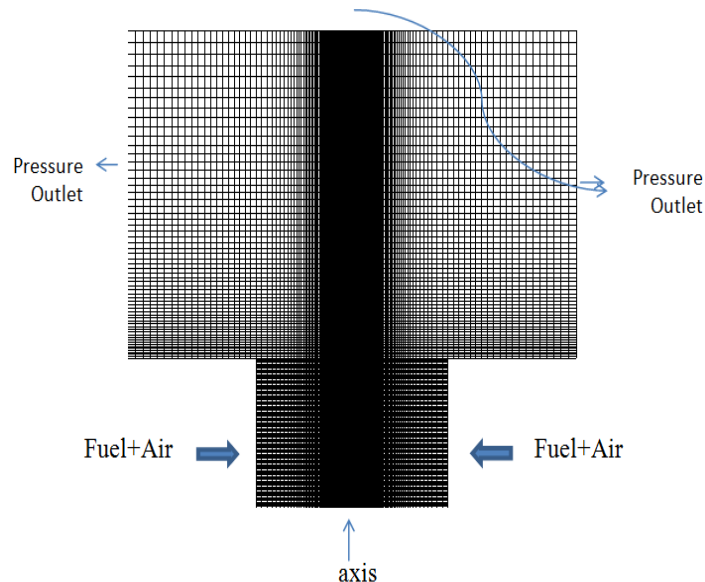


Figure 2- Geometry and Grid  
شکل ۲- هندسه و شبکه‌بندی

1. Sutherland  
2. janaf

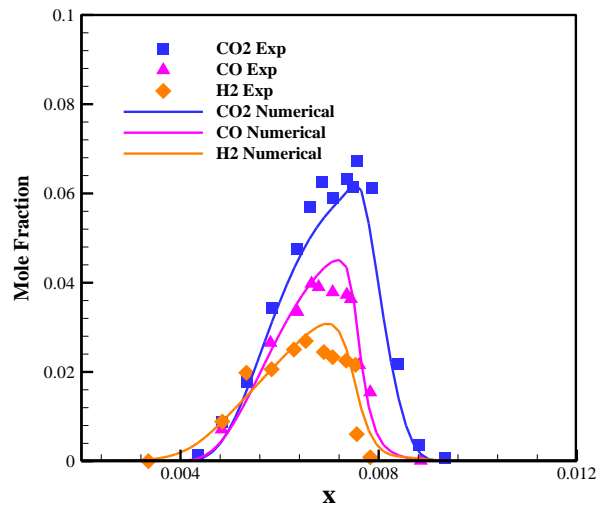


Figure 3- Mole fraction of species with numerical method and experimental results in non-premixed flame  
 شکل ۳- کسر مولی گونه‌ها با روش عددی و نتایج تجربی در شعله غیرپیش مخلوط

### نتایج

بعد از صحت‌سنجی روش شبیه‌سازی مستقیم در اوپن‌فوم، شعله مورد نظر در حالت پیش‌مخلوط با روش فلیمنت شبیه‌سازی می‌شود. به‌منظور صحت‌سنجی کد فلیمنت اعمال‌شده به اوپن‌فوم، ابتدا نتایج شبیه‌سازی مربوط به کد یک‌بعدی (FGM1D) در شکل ۴ مشاهده می‌شود. در این حالت، سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی یک ( $\phi = 1$ ) از دو طرف، وارد میدان می‌شوند. در این قسمت تنها نتایج دما و کسر جرمی گونه  $\text{CO}_2$  نشان داده شده است. در این شعله از آنجایی که دو ورودی یکسان‌اند، می‌توان تنها با یک متغیر پیشرفت این شعله را شبیه‌سازی کرد. در تمامی شبیه‌سازی‌های این مقاله از متغیر پیشرفت  $\text{CO} + \text{CO}_2$  استفاده شده است. نتایج تطابق خوبی را با شبیه‌سازی مستقیم نشان می‌دهند. اختلاف اندک مشاهده‌شده به‌علت تفاوت در محاسبه مقدار ضرایب دیفیوژن حرارتی و هدایت حرارتی در دو کد فلیمنت‌مستر و اوپن‌فوم است. در کد فلیمنت‌مستر این ضرایب با روش سینتیک مولکولی و در کد اوپن‌فوم با روش ضرایب چندجمله‌ای به‌دست آمده است. همچنین، در این مقاله از اثرات کرنش در معادلات فلیمنت صرف‌نظر شده است که منجر به خطای کمی می‌شود.

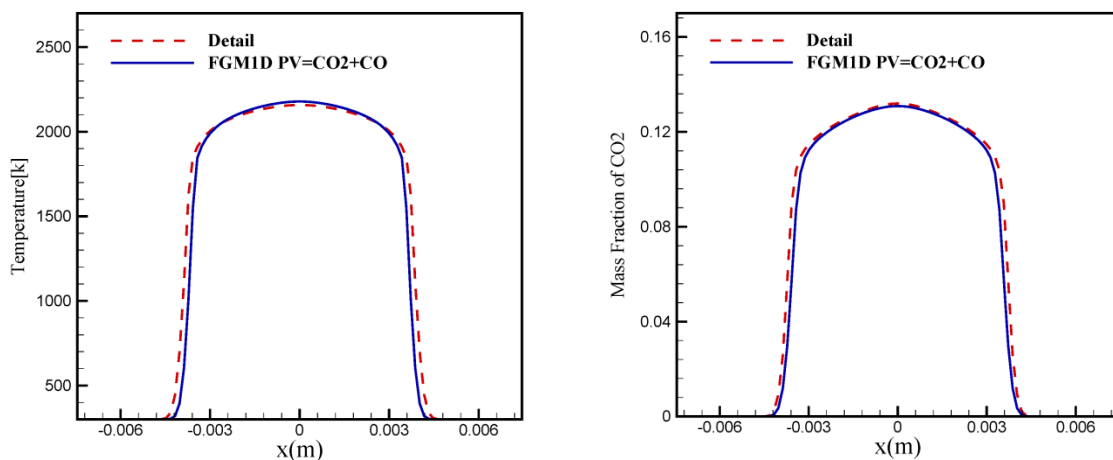


Figure 4- Temperature and mass fraction of  $\text{CO}_2$   
 شکل ۴- پروفیل دما و کسر جرمی گونه  $\text{CO}_2$

در ادامه، به منظور بررسی کد فلیملت دوبعدی (2DFGM)، در شعله مورد نظر فرض می‌شود از یک طرف سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی یک ( $\phi = 1$ ) وارد شده و از طرف دیگر هوا ( $\phi = 0$ ) وارد شود. برای شبیه‌سازی این مسئله، به علت داشتن دو ورودی متفاوت و تغییرات نسبت هم‌ارزی، بایستی از فلیملت دوبعدی استفاده شود. به منظور ساخت جدول‌های فلیملت در این حالت، از ۷۱ شبکه بر روی متغیر کسر مخلوط (نسبت هم‌ارزی) و ۳۰۰ شبکه بر روی متغیر پیشرفت واکنش استفاده شده است. بنابراین، جدول‌های دوبعدی در اندازه  $300 \times 71$  می‌شوند. در شکل ۱، تعدادی از این کسر مخلوط‌ها نمایش داده شد. برای تولید این جدول‌ها محدوده نسبت هم‌ارزی از  $0.4$  تا  $1$  است (شکل ۵ تا ۷).

نتایج حاصل از کد دوبعدی فلیملت (2DFGM) با سینتیک جزئی مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج از دقت نسبتاً خوبی برخوردارند. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، کسر مخلوط، که معادل نسبت هم‌ارزی است، از ورودی سوخت و هوا به‌طور پیوسته تا ورودی هوا کاهش می‌یابد. تغییرات نسبت هم‌ارزی باعث دوبعدی‌شدن مدل فلیملت به‌کارگرفته شده می‌شود. برای کسر جرمی گونه‌های اصلی و دما کمی جابه‌جایی مشاهده می‌شود که می‌تواند به علت محدودیت تولید فلیملت بر پایه رژیم پیش‌مخلوط در نسبت هم‌ارزی‌های پایین باشند. همچنین، این اختلاف، به علت خطایی که در پیش‌بینی کسر مخلوط اتفاق افتاده، در میدان دما نیز مشاهده می‌شود.

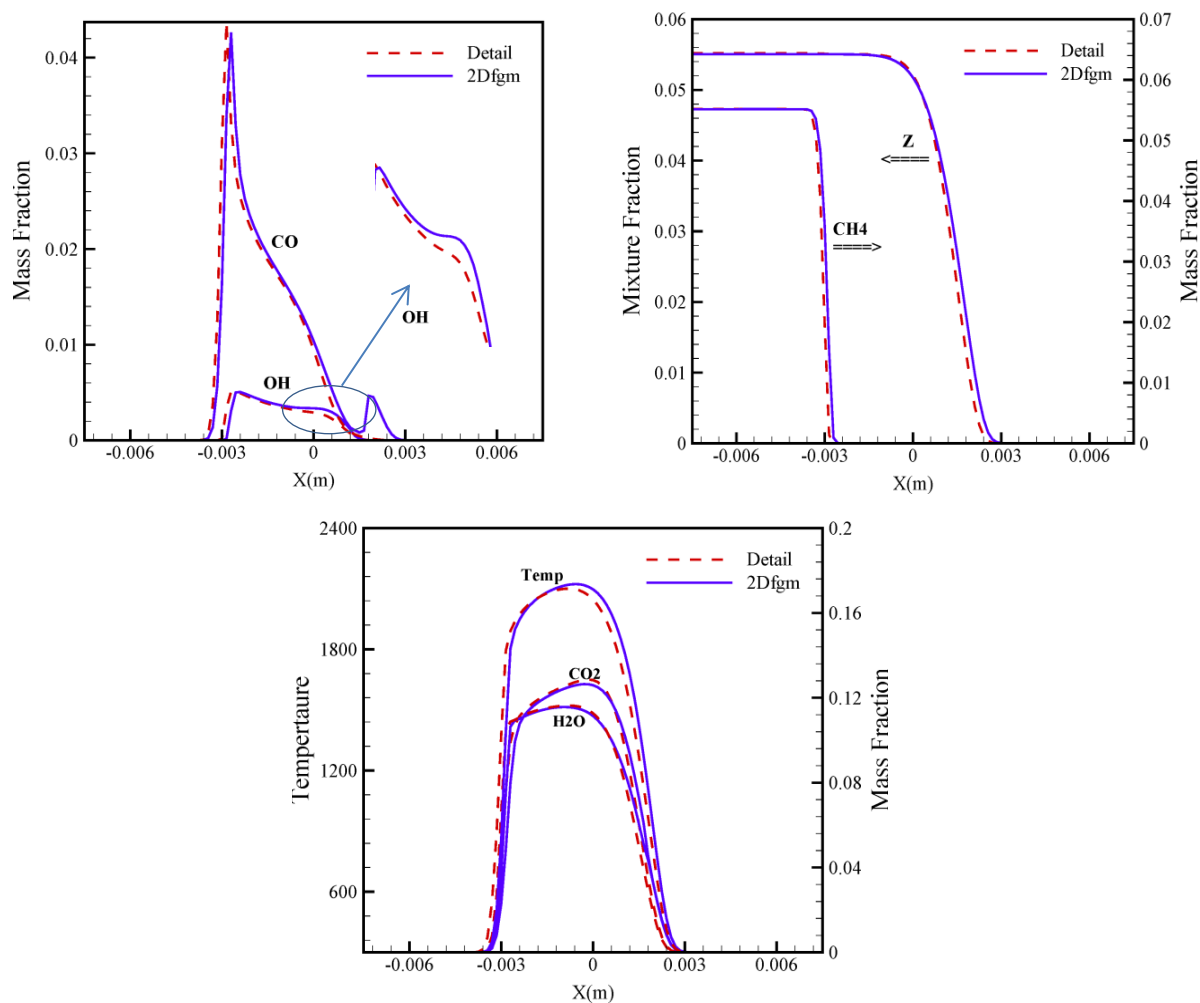


Figure 5- Temperature and mass fraction of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O

شکل ۵- پروفیل دما و کسر جرمی گونه CO<sub>2</sub> و H<sub>2</sub>O



کسر جرمی گونه‌های میانی (شکل ۵) خطای بیشتری را با نتایج سینتیک جزئی در کسر مخلوط‌های پایین نشان می‌دهد. به علت عدم وجود جدول در نسبت هم‌ارزی‌های خارج از محدوده اشتعال‌پذیری (در نسبت هم‌ارزی بین ۰/۴ تا ۰ یا کسر مخلوط‌های کوچک)، امکان تولید جدول‌های فلیملت بر پایه رژیم پیش‌مخلوط نبود. در این نواحی کد مورد نظر دارای خطا می‌شود. از آنجایی که گونه‌های CO و OH در واکنش‌های زنجیره‌ای تولید و مصرف می‌شوند، خطای بیشتری را در این محدوده در شبیه‌سازی نشان می‌دهند. به منظور رفع خطای عدم وجود جدول‌ها در ناحیه خارج از اشتعال‌پذیری، با یک میان‌بایی خطی بین فقیرترین جدول ( $\phi = 0.4$ ) و شرط مرزی اکسند، جدول‌هایی تولید شد. در این ناحیه، نرخ واکنش‌ها صفر فرض می‌شوند. با فرض عدد لوییس یک، کسر جرمی گونه‌ها و دما از رابطه زیر در سمت اکسند به دست می‌آید:

$$Y_k(Y_c, Z) = \frac{Z}{Z_l} (Y_k(Y_c, Z_l) - Y_k^{oxy}) + Y_k^{oxy}$$

$$h(Y_c, Z) = \frac{Z}{Z_l} (h(Y_c, Z_l) - h^{oxy}) + h^{oxy} \quad (9)$$

با استفاده از رابطه بالا جدول‌های مورد نظر در محدوده خارج اشتعال‌پذیری تولید می‌شود. از این رو، در ادامه نتایج، جدول‌های اصلاح‌شده به کار گرفته شد. زمان محاسباتی شبیه‌سازی فلیملت یک‌بعدی انجام‌شده در حدود یک ساعت و فلیملت دوبعدی انجام‌شده در حدود ۴ ساعت بوده، در حالی که شبیه‌سازی با استفاده از روش سینتیک جزئی در حدود چهار روز نیاز به زمان دارد.

### تأثیر تغییر نسبت هم‌ارزی و کرنش

در این قسمت، به منظور بررسی بیشتر رژیم پیش‌مخلوط جزئی، با تغییر نسبت هم‌ارزی در یک طرف، به صحت‌سنجی مدل فلیملت منی‌فولد دوبعدی (2DFGM) در این رژیم پرداخته می‌شود. همچنین، به منظور بررسی دینامیک جریان، با تغییر دادن نرخ کرنش (به وسیله تغییر سرعت‌های ورودی دو طرف) نتایج با مدل فلیملت مقایسه می‌شوند. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، نتایج نسبت هم‌ارزی ۱/۳ با دو کرنش مختلف مقایسه شده‌اند. کرنش پایین‌تر نشان‌دهنده سرعت ورودی کمتر است. نتایج شبیه‌سازی مستقیم و فلیملت نشان می‌دهد که با کاهش کرنش، شعله ضخیم‌تر شده و دو قله در نمودار کسر جرمی گونه‌ها فاصله بیشتری دارند. قله اول از سمت چپ نشان‌دهنده شعله پیش‌مخلوط و قله بعدی در نتیجه ترکیب سوخت باقی‌مانده با هوای ورودی است که شبیه شعله دیفیوژن می‌شود. در کرنش بالاتر این دو قله به علت تکانه بیشتر جریان به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شوند. گونه‌های اصلی و دما تطابق خوبی را با نتایج آزمایشگاهی در هر دو کرنش دارند. اگرچه مقداری خطا به علت در نظر نگرفتن کرنش در معادلات فلیملت نیز به وجود می‌آید. در حالت کرنش پایین‌تر، بین دو قله خطای بیشتری را با مدل فلیملت دوبعدی نشان می‌دهد، در حالی که در حالت کرنش بالاتر، دو قله به یکدیگر نزدیک‌تر شده و خطای کمتری مشاهده می‌شود. کسر جرمی گونه CO نیز در حالت کرنش بالاتر تطابق بهتری را نشان می‌دهد. در حالت کلی، در کرنش بالاتر، نتایج تطابق بهتری با نتایج شبیه‌سازی مستقیم دارند. از آنجایی که در این مقاله کاهش کرنش به وسیله کم کردن سرعت‌های ورودی انجام می‌شود، می‌توان گفت که جریان به سمت رژیم آرام می‌رود. از این رو، با کم کردن کرنش، نقش خواص انتقالی (پدیده‌های مولکولی) در مقایسه با جابه‌جایی بیشتر شده و در نظر نگرفتن پارامترهایی همچون دیفیوژن، کرنش و همچنین فرض عدد لوییس یک در جدول‌های فلیملت، خطای بیشتری را در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی جزئی نشان می‌دهد. همچنین، حساسیت این گونه‌ها به در نظر گرفتن پارامترهایی همچون دیفیوژن و کرنش در جدول‌های فلیملت بیشتر است. در شکل ۷، با افزایش نسبت هم‌ارزی به ۱/۸، شعله به سمت شعله غیرپیش‌مخلوط پیش می‌رود. به همین دلیل تنها یک قله در پیش‌بینی دما و کسر جرمی گونه‌ها مشاهده می‌شود. نتایج در این نسبت هم‌ارزی به‌دلیلی که در قسمت قبل توضیح داده شد، در حالت کرنش بالاتر تطابق بهتری با نتایج حالت جزئی دارد. با افزایش کرنش نیز شعله نازک‌تر می‌شود. در این

نسبت هم‌ارزی گونه‌های اصلی و میانی تطابق خوبی را با نتایج شبیه‌سازی مستقیم دارند، در حالی که گونه‌های میانی همچون  $CO$  و  $OH$  دارای خطا در هر دو کرنش‌اند. این خطا می‌تواند به علت مهم‌تر شدن ترم دیفیوژن و غیرپیش‌مخلوط‌شدن شعله باشد. گونه‌های میانی حساسیت بیشتری را به در نظر نگرفتن این ترم نشان می‌دهند.

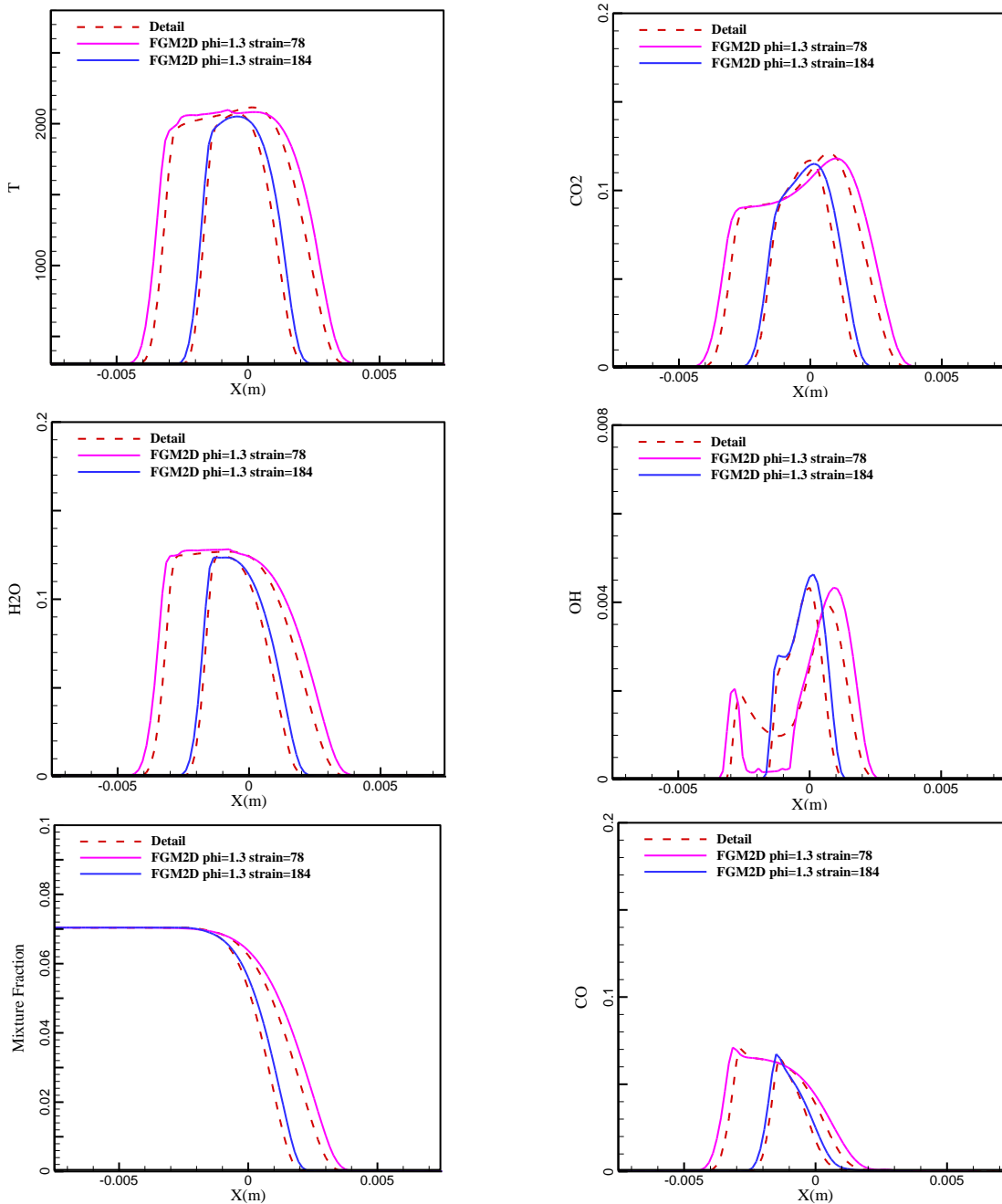


Figure 6- Temperature and mass fraction of species at  $\Phi=1.3$

شکل ۶- پروفیل دما و کسر جرمی گونه‌ها در نسبت هم‌ارزی ۱/۳

به منظور تحلیل بیشتر برای بررسی تاثیر کرنش، از دو پارامتر مقیاس زمانی شیمی و نرخ استهلاک اسکالر استفاده می‌شود که به صورت زیر در میدان محاسبه می‌شوند:

$$\tau_{chem} = \frac{\rho}{S_{pV}}$$

$$\chi = 2D\nabla|Z|^2$$

(۱۰)

که در رابطه بالا،  $S_{pV}$ ، سورس ترم معادله متغیر واکنش است. همان طور که در شکل ۸ مشاهده می شود، در کرنش پایین تر، مقیاس زمانی شیمی بالاتر بوده یعنی نرخ واکنش ها کندتر است. همچنین، با کاهش کرنش گرادیان کسر مخلوط و به دنبال آن نرخ استهلاک اسکالر کمتر شده، اما به دلیل ضخیم تر شدن شعله، دیفیوژن مهم تر می شود.

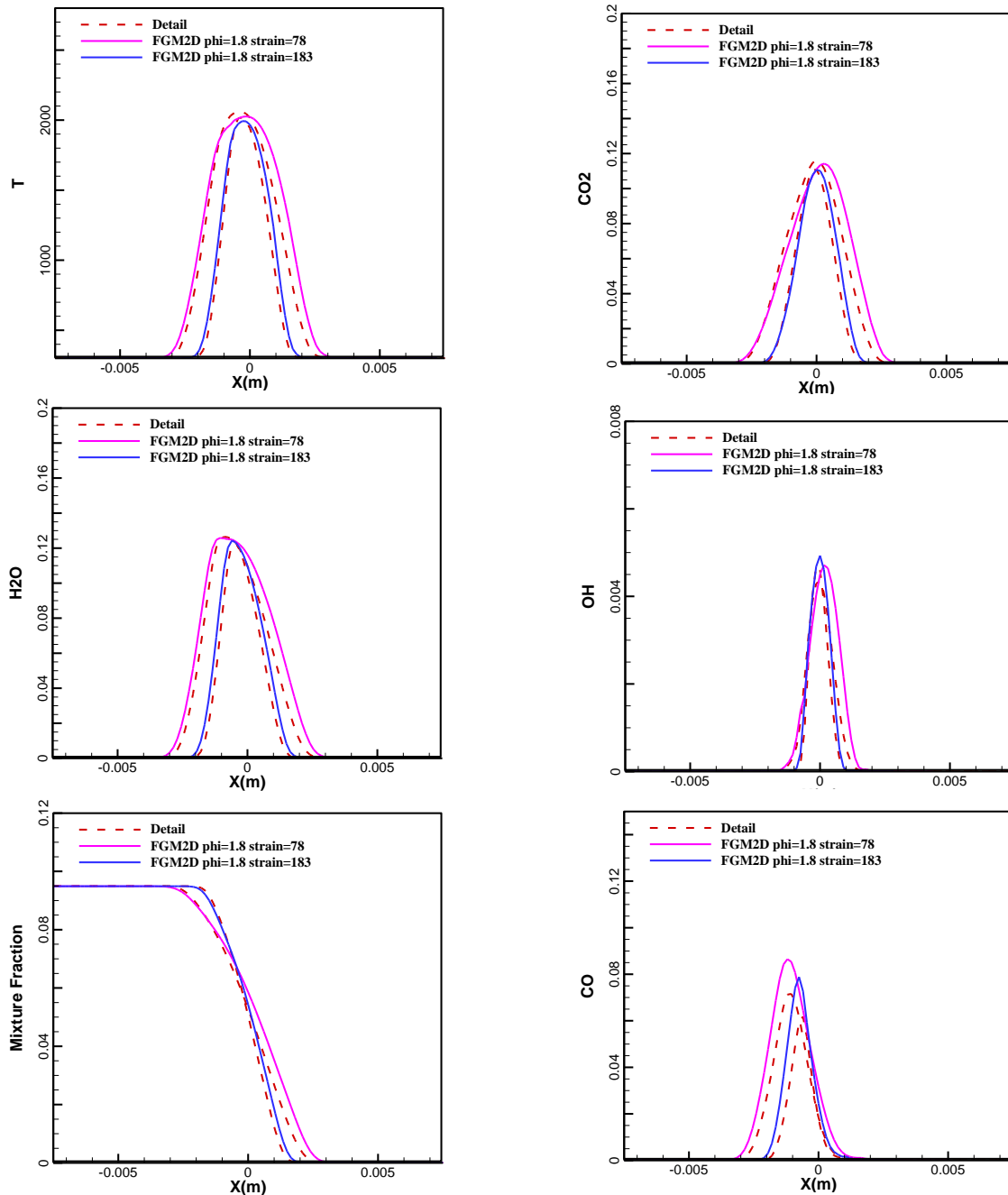


Figure 7- Temperature and mass fraction of species at  $\Phi=1.8$

شکل ۷- پروفیل دما و کسر جرمی گونه‌ها در نسبت هم‌ارزی ۱/۸

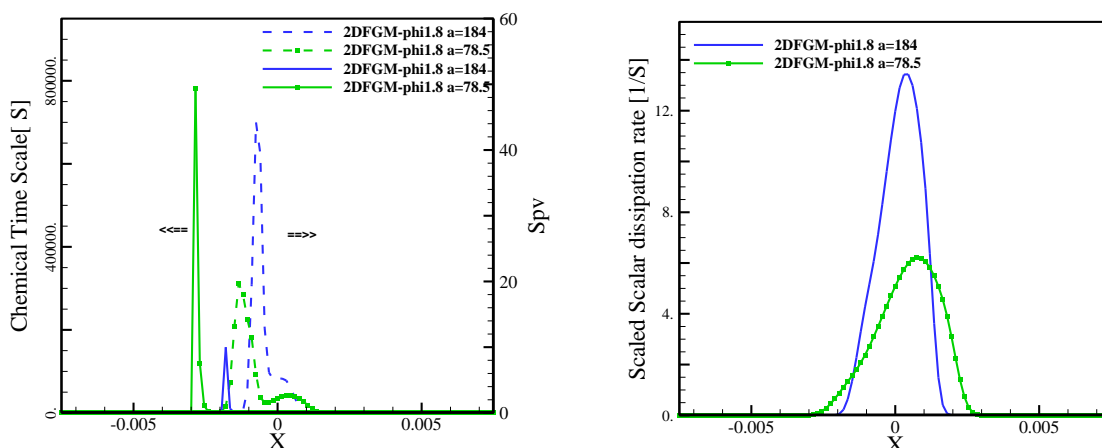


Figure 8- chemical time scale and scalar dissipation rate at  $\Phi=1.8$

شکل ۸- مقیاس زمانی شیمی و نرخ استهلاک اسکالر در نسبت هم‌ارزی ۱/۸

## نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله، به بررسی عملکرد مدل‌های فلیملت برپایه رژیم پیش‌مخلوط، به منظور شبیه‌سازی شعله‌های آرام، پرداخته شد. نتایج نشان دادند که با استفاده از فلیملت یک‌بعدی شعله‌های آدیاباتیک پیش‌مخلوط می‌توانند با دقت بالا و هزینه محاسباتی پایین شبیه‌سازی شوند. اما، به منظور شبیه‌سازی شعله‌هایی که نسبت هم‌ارزی در حال تغییر است، نیازمند متغیر دیگری به نام کسر مخلوط است. با ساخت جدول‌های فلیملت در هر نسبت هم‌ارزی ثابت، جدول‌های فلیملت دوبعدی برحسب کسر مخلوط و متغیر پیشرفت واکنش ساخته می‌شوند. نتایج این مدل نشان دادند که در محدوده اشتعال‌پذیری شعله پیش‌مخلوط، دقت خوبی را با نتایج سینتیک جزئی داراست. اما، خارج از محدوده اشتعال‌پذیری، از آنجایی که این مدل برپایه رژیم مخلوط است، محدودیت استفاده دارد. از این رو با گسترش جدول‌ها در خارج از ناحیه اشتعال‌پذیری نتایج بهبود یافتند. پیش‌بینی این مدل در نسبت هم‌ارزی‌های غنی از سوخت، برای گونه‌های اصلی و دما تطابق خوبی را در کرنش‌های بالا نشان داد. به‌طور کلی، مدل فلیملت دوبعدی بدون کم‌کردن دقت و با کاهش چندین برابری زمان محاسبات، نتایج قابل قبولی را ارائه می‌دهد.

## منابع

1. P. K. Jha and C. P. T. Groth, "Tabulated chemistry approaches for laminar flames: Evaluation of flame-prolongation of ILDM and flamelet methods," *Combustion Theory and Modelling*, 16, 2012, pp. 31-57.
2. H. Atoof and M. D. Emami, "Numerical simulation of laminar premixed CH<sub>4</sub>/air flame by flamelet-generated manifolds: A sensitivity analysis on the effects of progress variables," *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 60, 2016, pp. 287-293.
3. S. K. Liew, K. N. C. Bray and J. B. Moss, "A flamelet model of turbulent non-premixed combustion," *Combustion Science and Technology*, 27, 1981, pp. 69-73.
4. N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion," *Prog. Energy Combust. Sci*, 10, 1984, pp. 319-339.
5. E. Knudsen and H. Pitsch, "A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion," *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp. 678-696.
6. C. D. Pierce and P. Moin, "Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion," *Journal of Fluid Mechanics*, 504, 2004, pp. 73-97.
7. F. Chitgarha and A. Mardani, "Assessment of steady and unsteady flamelet models for MILD combustion modeling," *International Journal of Hydrogen Energy*, 43, 2018, pp. 15551-15563.
8. J. A. Van Oijen and L. P. H. De Goeij, "Combustion Science and Technology Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds," *Combustion Science and Technology*, 161, 2000, pp. 113-137.

9. L. P. H. de Goeij and J. H. M. ten Thijsse Boonkcamp, "A flamelet description of premixed laminar flames and the relation with flame stretch," *Combustion and Flame*, 119, 1999, pp. 253-271.
10. S. Delhay, L. M. T. Somers, J. A. Van Oijen and L. P. H. De Goeij, "Incorporating unsteady flow-effects beyond the extinction limit in flamelet-generated manifolds," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 I, 2009, pp. 1051-1058.
11. B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier and N. Darabiha, "Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation," *Combustion and Flame*, 140, 2005, pp. 147-160.
12. H. Yamashita, M. Shimada and T. Takeno, "A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames," *Symposium (International) on Combustion*, Naples Italy, 1996, pp. 27-34.
13. J. A. van Oijen and L. P. H. de Goeij, "A numerical study of confined triple flames using a flamelet-generated manifold," *Combustion Theory and Modelling*, 8, 2004, pp. 141-163.
14. H. Bongers, J. A. V. Oijen, L. M. T. Somers and L. P. H. D. Goeij, "THE flamelet generated manifold method applied to steady planar partially," *Combustion Science and Technology*, 171, 2005, pp. 2373-2393 pp. 2373-2393.
15. A. W. Vreman, B. A. Albrecht, J. A. van Oijen, L. P. H. de Goeij and R. J. M. Bastiaans, "Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F," *Combustion and Flame*, 153, 2008, pp. 394-416.
16. C. Olbricht, F. Hahn, A. Ketelheun and J. Janicka, "Strategies for presumed PDF modeling for LES with premixed flamelet-generated manifolds," *Journal of Turbulence*, 11, 2010, pp. 1-18.
17. H. Pitsch, R. Seiser and B. Vartharajan, "FlmeMaster, A c++ computer program for O-D combustion and 1-D laminar flame calculations," RWTH Aachen, Germany, 1998, <http://www.itv.rwth-aachen.de/index.php?id=128>
18. J. Lim, J. Gore and R. Viskanta, "A study of the effects of air preheat on the structure of methane/air counterflow diffusion flames," *Combustion and Flame*, 121, 2000, pp. 262-274.

## English Abstract

# Simulation of a partially premixed laminar counterflow flame using 2D flamelet generated manifold

Fatemeh Chitgarha<sup>1</sup>, Fathollah Ommi<sup>2\*</sup> and Mohammad Farshchi<sup>3</sup>

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat moodares University, f.chitgarha@modares.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat moodares University, fommi@modares.ac.ir

3- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, farshchi@sharif.edu

\*Corresponding author

(Received: 2018.12.22, Received in revised form: 2019.06.09, Accepted: 2019.06.11)

In this study a 2D flamelet method is presented based on premixed regime. This method can be considered as a combination of two existing reduced chemistry approaches; the flamelet and manifold approach. This method shares the idea with the flamelet approach that a multi-dimensional flame may be considered as a set of one-dimensional flames (flamelet method) and the flame structure is considered by some control variables. By this method, the data base of chemical variables is constructed in terms of progress and controlling variables. During flame simulation, conservation equations have to be solved for the controlling variables only and the properties are interpolated from the data base. In this research, 2D flamelet generated manifold (FGM) is applied for laminar counterflow flames with two parameters (progress variable and mixture fraction). Test results of premixed counterflow flame shows that detailed chemistry computations are reproduced very well by using 1DFGM with only progress variable. Predictions of temperature and major species mass fractions using 2DFGM have shown very good agreement with detailed chemistry computations especially at high strain rates. Using the FGM method, the computation time has been reduced several times in simulating flames, demonstrating the enormous potential of the method.

**Keywords:** Flamelet Manifold, Progress Variable, Partially Premixed Flame