

بررسی اثر مدل سازی وردایی متغیر پیشرفت واکنش در شبیه سازی گردابه های بزرگ شعله آشفته پیش مخلوط با مدل خمینه تولیدی ریزشعله

محمد مهدی صالحی^{۱*}، حسن عطائی زاده^۲

۱- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، mmsalehi@sharif.edu

۲- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، hassan.atayizadeh@ae.sharif.edu

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۲/۲۵، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۱/۰۲/۰۴، پذیرش: ۱۴۰۱/۰۲/۱۷)

چکیده: این مقاله با دو هدف مرور ادبیات روش های مدل سازی احتراق بر مبنای فرض ریزشعله آرام و همچنین پیاده سازی، به کارگیری و آنالیز حساسیت یکی از این روش ها برای شبیه سازی شعله های پیش مخلوط نوشته شده است. امروزه یکی از قابل اعتمادترین روش ها برای شبیه سازی آشفته، روش شبیه سازی گردابه های بزرگ است. نظر به اینکه هزینه محاسباتی این روش به مراتب بیشتر از روش های معمول رینولدز-متوسط است، کم هزینه ترین و در نتیجه پرکاربردترین مدل های احتراقی در شبیه سازی گردابه های بزرگ روش هایی بر پایه فرض ریزشعله آرام است. این روش ها در عین حال محدودیت هایی نیز دارند که در این پژوهش به تفصیل مورد بحث و بررسی قرار گرفته اند. روش خمینه تولیدی ریزشعله یکی از این روش ها است که در این پژوهش به کمک مدل شبیه سازی گردابه های بزرگ در یک شعله پشت جسم مانع مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که دقت این روش حساسیت قابل توجهی به مدل زیرشبکه وردایی متغیر پیشرفت واکنش و ثابت آن دارد. مدل جبری تخمین وردایی زیرشبکه متغیر پیشرفت واکنش از دقت کافی برای شبیه سازی برخوردار نمی باشد، به گونه ای که طول شعله حدوداً ۳۰ درصد کمتر از مقدار واقعی پیش بینی می شود و سرعت محوری در بعضی نقاط تا بیش از ۶۰ درصد خطا دارد. از سوی دیگر در صورت حل معادله انتقال برای وردایی متغیر پیشرفت دقت نتایج شبیه سازی افزایش قابل ملاحظه ای دارد.

کلیدواژگان: احتراق آشفته، مدل سازی احتراق، روش ریزشعله، شبیه سازی گردابه های بزرگ

مقدمه

شبیه سازی جریان های واکنشی در سامانه های احتراقی یکی از ابزارهای کارآمد جهت بهینه سازی طراحی این نوع سامانه ها است. دقیق ترین روش برای مدل سازی این نوع جریان ها شبیه سازی عددی مستقیم^۱ جریان آشفته و حل معادله انتقال برای تمام گونه های شیمیایی با استفاده از مدل های دقیق سینتیک شیمیایی جزئی^۲ برای محاسبه نرخ تولید یا مصرف آن ها است. اما این روش به دلیل وجود طیف وسیعی از مقیاس های فیزیکی در هر دو پدیده آشفتهگی و سینتیک شیمیایی از هزینه محاسباتی بسیار بالایی برخوردار بوده و قابل استفاده در کاربردهای عملی نیست. در نتیجه ابزارهای دینامیک سیالات محاسباتی که برای شبیه سازی این نوع جریان ها توسعه می یابند نیازمند مدل سازی اثرات مقیاس های مدل نشده هر دو پدیده و همچنین اندرکنش آن ها است [۱].

1. Direct Numerical Simulation
2. Detailed Chemical Kinetics

توسعه سازوکارهای دقیق سینتیک شیمیای مرهون پژوهش‌های هینشلوود^۱ و سمنوف^۲ است. این پژوهش‌ها که منجر به جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۵۶ شد، نقطه عطفی در فهم واکنش‌های زنجیره‌ای^۳ و توسعه سازوکارهای سینتیک شیمیایی بود^۴. هینشلوود در سخنرانی کلیدی خود در هفتمین سمپوزیوم بین‌المللی احتراق در سال ۱۹۵۸ صراحتاً به پیچیدگی سازوکارهای سینتیک لازم حتی برای مدل‌سازی شعله‌های ساده آرام اذعان کرد^۳. اما تنها پس از چند دهه تحقیق و توسعه، سازوکارهای سینتیک شیمیایی دقیق^۴ برای سوخت‌های ساده نظیر هیدروژن و هیدروکربن‌های ساده توسعه پیدا کرد. از معروف‌ترین آنها سازوکار GRI-MECH 3.0 با ۵۳ گونه شیمیایی و بیش از ۳۰۰ واکنش رفت و برگشتی است^۴. هرچند توسعه این سازوکارها برای سوخت‌های پیچیده در شرایط کاری مختلف هنوز در مرحله تحقیق و توسعه قرار دارد، اما همان‌گونه که در بالا اشاره شد، استفاده از این سازوکارها در کاربردهای صنعتی شبیه‌سازی جریان آشفته احتراقی، هزینه محاسباتی بسیار بالایی دارد و عملاً امکان‌پذیر نیست. روش‌های بسیار متنوعی برای ساده‌سازی و کاهش درجه آزادی سازوکارهای دقیق شیمیایی ارائه شده است^۵. یکی از کاربردی‌ترین گروه از این روش‌ها جهت استفاده در شبیه‌سازی‌های عددی جریان آشفته، سینتیک‌های جدول‌بندی شده^۵ یا کتابخانه‌ای است. از معروف‌ترین روش‌ها در این گروه می‌توان به روش «خمینه ذاتی ابعاد پایین»^۶، روش «جدول‌سازی در جای تطبیق پذیر»^۷، روش «خمینه تعادل محدود شده ناوردا»^۸ و روش‌های مبتنی بر فرض «ریزشعله آرام»^۹ [۱۱، ۱۰، ۹] اشاره کرد. از بین روش‌های فوق پرکاربردترین رویکرد استفاده از فرض ریزشعله آرام است؛ زیرا از هزینه محاسباتی به مراتب کمتری به نسبت روش‌های دیگر برخوردار است.

در رویکرد ریزشعله آرام فرض می‌شود که احتراق در نقاط مختلف یک شعله آشفته شبیه یک شعله آرام ساده یک‌بعدی است. در نتیجه می‌توان ابتدا به سادگی یک شعله یک‌بعدی آرام را با استفاده از سازوکار دقیق شیمیایی با هزینه محاسباتی کم شبیه‌سازی کرد و سپس از نتایج جدول‌بندی‌شده در حل یک شعله آشفته استفاده کرد. این روش ابتدا به صورت گسترده برای شعله‌های غیرپیش‌مخلوط با فرض پایا بودن حل شعله آرام توسعه یافت^۹. در این روش، شعله‌های پایا متقابل سوخت و اکسید در نرخ کرنش‌های مختلف حل و نرخ آزادسازی انرژی و غلظت گونه‌های مختلف به صورت یک جدول دو بعدی ذخیره می‌شود. سپس پیچ و همکاران^{۱۲} اثرات ناپایایی نرخ کرنش را بر روی ریزشعله‌ها مدل‌سازی و کمی‌سازی کردند. اثرات خاموشی موضعی و به‌دنبال آن پیش‌مخلوطی جزئی سوخت و اکسید در شعله‌های غیرپیش‌مخلوط نیز با استفاده از کمیت متغیر پیشرفت واکنش توسط پیرس و همکاران^{۱۳} و ایمه و همکاران^{۱۴} به این مدل اضافه شد.

تلاش‌های اولیه برای استفاده از فرض ریزشعله آرام برای توسعه سازوکار شیمیایی کتابخانه‌ای در شبیه‌سازی شعله‌های پیش‌مخلوط به پژوهش‌های ژیکل و همکاران^{۱۱} و فان‌اوین و دخوی^{۱۰} بر می‌گردد. در این رویکرد یک شعله آرام یک بعدی پیش‌مخلوط بدون کرنش با استفاده از سینتیک شیمیایی دقیق مدل‌سازی می‌شود و نرخ آزادسازی انرژی، نرخ تولید و غلظت گونه‌های مختلف برحسب یک متغیر پیشرفت واکنش برای شبیه‌سازی شعله‌های پیش‌مخلوط آشفته جدول‌بندی می‌شود. این روش توسط ژیکل و همکاران^{۱۱} به‌عنوان روش «توسعه شعله‌ای خمینه ذاتی ابعاد پایین»^۱ و توسط فان‌اوین و دخوی^{۱۰} تحت عنوان روش «خمینه تولیدی ریزشعله»^۱ نام‌گذاری شد. در برخی از پژوهش‌ها این روش صرفاً با عنوان روش «ریزشعله» پیش‌مخلوط معرفی می‌شود^{۱۵، ۱۶}. ایده اولیه استفاده از نتایج حل یک شعله آرام پیش‌مخلوط بدون کرنش با

-
1. Hinshelwood
 2. Semenov
 3. Chain Reactions
 4. Detailed Chemical Kinetics
 5. Tabulated Chemistry
 6. Intrinsic Lower-Dimensional Manifold (ILDm)
 7. In Situ Adaption Tabulation (ISAT)
 8. Invariant Constrained Equilibrium (ICE) Manifold
 9. Flamelet Assumption
 10. Flame Prolongation of Intrinsic lower-dimensional manifold (FPI)
 11. Flamelet Generated Manifold

فرض ریزشعله در شعله‌های آشفته سال‌ها قبل توسط بردلی و همکاران [۱۷] ارائه شد بود، اما آن‌ها از این روش صرفاً جهت بستن جمله نرخ آزادسازی انرژی^۱ در معادله انرژی استفاده کردند و بحث استفاده از این روش به‌عنوان یک سازوکار شیمیایی کتابخانه‌ای در آن مقطع مطرح نبود. برخلاف شعله‌های غیرپیش‌مخلوط، شعله‌های پیش‌مخلوط حساسیت کمتری به نرخ کرنش دارند و اثرات نرخ کرنش بر روی ساختار ریزشعله‌ها فقط در شدت آشفته‌گی‌های بالا اهمیت دارد. برای این شرایط نیز روش‌هایی توسط کولا و سوامیناتان [۱۸]، نودسون و همکاران [۱۹] و مهدی‌پور و صالحی [۲۰] ارائه شده است. همچنین لازم به‌ذکر است که روش‌های مختلف دیگری که برای مدل‌سازی شعله‌های آشفته پیش‌مخلوط ارائه شده‌اند، نظیر روش «چگالی سطح شعله^۲»، روش «معادله جی^۳» و روش «بری-ماس-لیبی^۴» نیز بر مبنای فرض ریزشعله آرام توسعه یافته‌اند [۱].

توسعه سازوکارهای شیمیایی کتابخانه‌ای بر مبنای فرض ریزشعله آرام برای شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی^۵، از چالش به‌مراتب بیشتری نسبت به حالت‌های حدی پیش‌مخلوط و غیرپیش‌مخلوط برخوردار است. شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی طیف وسیعی از شعله‌ها را شامل می‌شود که در یک سر این طیف سازوکار آزادسازی انرژی به مانند شعله‌های پیش‌مخلوط، جبهه در حال انتشار شعله^۶ است و در سر دیگر آن، مشابه شعله‌های غیرپیش‌مخلوط، نرخ آزادسازی انرژی به نرخ اختلاط^۷ سوخت و اکسید وابسته است. در این بین برخی شعله‌ها نظیر شعله‌های برخاسته^۸، از ساختارهای پیچیده‌ای نظیر شعله‌های سه‌گانه^۹ برخوردار است که در آن ریزشعله‌های پیش‌مخلوط و غیرپیش‌مخلوط به‌صورت محلی در کنار هم تشکیل می‌شوند [۲۱]. از دیگر ساختارهای پیچیده در شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی می‌توان به ریزشعله‌های خوداشتعال^{۱۰} اشاره کرد که در شعله‌های اسپری و در شرایط فشار بالا، مشابه موتورهای دیزل، تشکیل می‌شوند [۲۲]. نوین و همکاران [۲۳] یک روش جامع برای تولید ریزشعله‌های چند بعدی در شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی ارائه کرده‌اند. مشابه این روش توسط هندرا و بوش [۲۴] و مولر [۲۵] نیز ارائه شده است. استفاده از این روش‌های جامع در عمل نیازمند مقادیر ورودی مختلفی اعم از نرخ هدررفت کسر مخلوط ۱۱، نرخ هدررفت متغیر پیشرفت واکنش^{۱۲} و نرخ هدررفت متعامد دو اسکالر^{۱۳} کسر مخلوط و متغیر پیشرفت واکنش است. همچنین استفاده از یک جدول ریزشعله جامع در شبیه‌سازی یک شعله آشفته به‌سادگی میسر نیست. در نتیجه در عمل معمولاً با توجه به فیزیک جریان ریزشعله‌های خاص انتخاب شده [۲۲] و یا از ترکیب ریزشعله‌های حدی پیش‌مخلوط و غیرپیش‌مخلوط به‌صورت همزمان استفاده می‌شود [۲۶]. در روش اخیر ریزشعله‌های حدی در یک کتابخانه گردآوری شده و سپس با محاسبه یک متغیر به‌نام شاخص شعله^{۱۴} در هر سلول محاسباتی ریزشعله مربوطه انتخاب می‌شود. متغیر شاخص شعله تعیین کننده پیش‌مخلوط یا غیرپیش‌مخلوط بودن احتراق در هر سلول محاسباتی است [۲۶].

استفاده از جداول ریزشعله در شبیه‌سازی یک شعله آشفته نیازمند یک تابع توزیع احتمال پیش‌فرض^{۱۵} برای متغیر پیشرفت واکنش در شعله‌های پیش‌مخلوط و برای متغیر کسر مخلوط در شعله‌های غیرپیش‌مخلوط است. شبیه‌سازی شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی نیازمند تابع توزیع احتمال تجمعی^{۱۶} هر دو متغیر فوق است. در شرایطی که آنتالپی کل در شعله ثابت نباشد، نظیر تشعشع در شعله‌های حاوی ذرات دوده، یک متغیر تصادفی دیگر نظیر آنتالپی نیز به تابع توزیع احتمالی تجمعی

1. Heat Release Rate
2. Flame Surface Density (FSD)
3. G-equation approach
4. Bray-Moss-Libby (BML)
5. Partially-Premixed Flames
6. Propagating Flame Front
7. Mixing Rate
8. Lifted Flame
9. Triple Flame
10. Auto-Igniting Flamelets
11. Mixture Fraction Scalar Dissipation Rate
12. Progress Variable Scalar Dissipation Rate
13. Cross Scalar Dissipation Rate
14. Flame Index
15. Presumed Probability Density (PDF) Function
16. Joint-PDF

اضافه می‌شود [۲۷]. معروف‌ترین و پرکاربردترین تابع توزیع احتمال پیش‌فرض تابع بتا^۱ است. با استفاده از این تابع می‌توان با تقریب خوبی توزیع احتمالاتی کسرمخلوط را در شعله‌های مختلف پیش‌بینی کرد [۱]. از تابع بتا برای توزیع احتمال متغیر پیشرفت واکنش نیز استفاده شده است [۱۷]، اما پژوهش‌های مختلفی نشان دادند که این تابع نرخ تولید محصولات احتراق در یک شعله آشفته پیش‌مخلوط را بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند [۲۹، ۲۸]. در نتیجه مدل‌های جایگزینی توسط پژوهشگران مختلف نظیر بری و همکاران [۲۸]، دومینگو و همکاران [۳۰]، صالحی و بوش [۳۱]، سویی و بوش [۳۲] و فیتسنر [۳۳] توسعه داده شده است. مدل‌سازی تابع توزیع احتمال تجمعی کسرمخلوط و متغیر پیشرفت واکنش در شعله‌های پیش‌مخلوط جزئی عمدتاً با فرض استقلال آماری^۲، از حاصل ضرب دو تابع توزیع احتمال حاشیه‌ای^۳ متغیر پیشرفت و کسرمخلوط به دست می‌آید [۳۵، ۳۴، ۲۷]. اما بسته به شرایط کاری و ساختار شعله پیش‌مخلوط جزئی فرض استقلال آماری می‌تواند خطای قابل ملاحظه‌ای ایجاد کند [۳۷، ۳۶]. در نتیجه مدل‌های مختلفی برای تابع توزیع احتمال تجمعی با در نظر گرفتن همبستگی این دو متغیر ارائه شده است [۳۸-۴۰].

با توجه به توضیحات فوق، دقت مدل‌سازی شعله‌های آشفته با روش ریزشعله اولاً منوط به دقت فرض ریزشعله و ثانیاً دقت مدل تابع توزیع احتمال پیش‌فرض است. این توابع نظیر تابع بتا از یک فرم ریاضی خاص برخوردار بوده که با دو متغیر تعیین می‌شود. این دو متغیر با استفاده از ممان اول و دوم متغیر تصادفی محاسبه می‌شوند. در نتیجه دقت تابع توزیع احتمال پیش‌فرض، هم به فرم ریاضی مورد استفاده و هم به دقت تخمین ممان‌های اول و دوم وابسته است. در شبیه‌سازی رینولد-متوسط^۴ شعله‌های پیش‌مخلوط ممان اول مقدار متوسط متغیر پیشرفت و در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ^۵ مقدار فیلترشده آن است. ممان دوم نیز وردایی متغیر پیشرفت است. روش‌های مختلفی برای در پژوهش‌های مختلف مورد استفاده قرار گرفته است که در این بین روش جبری فرمن و همکاران [۴۱] و روش حل معادله انتقال با مدل هدررفت اسکالر دانستان و همکاران [۴۲] در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ بیشترین کاربرد را داشته است. هدف از این پژوهش، مقایسه عملکرد این دو مدل به همراه آنالیز حساسیت متغیرهای هر مدل در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ یک شعله پیش‌مخلوط با استفاده از روش خمینه تولید ریزشعله است. بدین منظور، ابتدا تئوری روش ریزشعله مورد استفاده و معادلات حاکم شرح داده می‌شود. سپس نحوه پیاده‌سازی و نتایج شبیه‌سازی ارائه و در نهایت نتایج جمع‌بندی می‌شود.

تئوری و معادلات حاکم

در این بخش ابتدا تئوری روش خمینه تولیدی ریزشعله برای مدل‌سازی شعله‌های پیش‌مخلوط ارائه می‌شود. سپس تئوری و نحوه استفاده از این مدل در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ به تفصیل تشریح می‌شود.

روش خمینه تولیدی ریزشعله

در روش خمینه تولیدی ریزشعله، ابتدا معادلات حاکم بر یک شعله یک-بعدي بدون کرنش به صورت پایا حل می‌شود. شماتیک دامنه محاسباتی این شعله در شکل ۱ آمده است. معادلات حاکم بر این شعله یک بعدی عبارت است از معادله بقای جرم، بقای گونه‌ها و بقای انرژی که به ترتیب در زیر آمده است [۴۳]:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \quad (1)$$

1. Beta Function
2. Statistical Independence
3. Marginal PDF
4. Reynolds-Averaged Navier Stokes (RANS)
5. Large-Eddy Simulation

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} = -\frac{dJ_k}{dx} + \rho \dot{\omega}_k \quad (2)$$

$$\rho c_p u \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{k=1}^K c_{p_k} J_k \frac{dT}{dx} - \sum_{k=1}^K \rho \dot{\omega}_k h_k \quad (3)$$

که در معادلات فوق ρ چگالی سیال، u سرعت سیال، Y_k کسر جرمی گونه k و T دمای سیال است. همچنین λ ضریب رسانش گرمایی، c_{p_k} ظرفیت گرمایی ویژه فشار ثابت گونه k و c_p ظرفیت گرمایی ویژه فشار ثابت مخلوط است. جمله منبع معادله ۲، $\dot{\omega}_k$ ، نرخ تولید گونه k است که با استفاده از سینتیک دقیق و جزئی شیمیایی مدل سازی می شود. همچنین در معادله فوق h_k آنتالپی گونه k است و J_k شار انتشار مولکولی گونه k است که با استفاده از مدل کامل انتشار چند-جزئی^۲ به صورت زیر مدل می شود:

$$J_k = \frac{\rho M_k}{M^2} \sum_i M_i D_{ki} \frac{\partial X_i}{\partial x} - \frac{D_k^T}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (4)$$

که در رابطه فوق M_k جرم مولی، X_k کسر مولی و D_{ki}^T ضریب انتشار مولکولی ناشی از گرادیان دما (اثر سوریه)^۳ برای گونه k است. همچنین D_{ki} ضریب انتشار مولکولی گونه k در گونه i است.

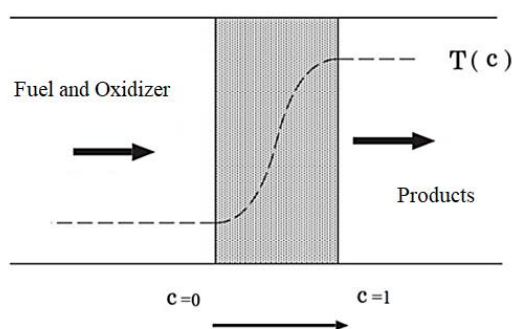


Figure 1- Schematic of a one-dimensional unstrained laminar premixed flame for flamelet table generation

شکل ۱- شماتیک یک شعله پیش مخلوط یک بعدی بدون کرنش جهت تولید جداول ریزشعله [۴۴]

پس از حل معادلات فوق، نتایج برحسب یک متغیر پیشرفت واکنش جدول بندی می شود. مقدار این متغیر در مواد اولیه واکنش صفر و در محصولات احتراق یک است. این متغیر را می توان با استفاده از دما [۳۲]، کسر جرمی اکسیژن [۴۵] و کسر جرمی یک گونه از محصولات احتراق نظیر دی اکسید کربن [۳۱] و یا ترکیب خطی از گونه های مختلف [۲۷] به دست آورد. مهم ترین ویژگی متغیر پیشرفت اکیدا صعودی بودن آن است به گونه ای که در جدول نهایی به ازای یک مقدار مشخص از متغیر پیشرفت فقط یک جواب وجود داشته باشد. به عنوان مثال، در شعله های متان-هوا در شرایط غنی از سوخت، مقدار دی اکسید کربن ابتدا افزایش و سپس با تبدیل شدن به گاز مونواکسید کربن در محصولات احتراق کاهش می یابد. در نتیجه در این شرایط مجموع کسر جرمی این دو گونه $Y_{CO_2} + Y_{CO}$ تقسیم بر مقدار تعادلی آن می تواند به عنوان متغیر پیشرفت واکنش در نظر گرفته شود [۴۴]. ایمه و همکاران [۴۶] در قالب حل یک مسئله بهینه سازی مقید^۴ یک روش مدون برای تعریف متغیر

1. Molecular Diffusive Flux
2. Multi-Component Diffusion
3. Soret Effect
4. Constrained Optimization Problem

پیشرفت واکنش ارائه داده‌اند که علاوه بر قید اکیداً صعودی بودن، می‌توان قیود دیگری را نیز جهت محاسبه یک متغیر پیشرفت واکنش لحاظ کرد.

معادلات فوق را می‌توان با یک تغییر متغیر از فضای فیزیکی واقعی x به فضای متغیر پیشرفت c انتقال داد. به بیان دیگر پس از تغییر متغیر، متغیر مستقل در معادلات فوق متغیر پیشرفت واکنش خواهد بود. به‌عنوان مثال معادله بقای گونه‌ها پس از این تغییر متغیر با صرف نظر کردن از پدیده انتشار مولکولی چند جزئی به صورت زیر خواهد بود [۴۷]:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial c} \dot{\omega}_c = \chi_c \frac{\partial^2 Y_k}{\partial c^2} + \dot{\omega}_k \quad (5)$$

که در رابطه فوق، $\dot{\omega}_c$ نرخ تولید متغیر پیشرفت واکنش و χ_c نرخ هدررفت متغیر پیشرفت واکنش است که به صورت $\chi_c = D|\nabla c|$ تعریف می‌شود. این متغیر را می‌توان به صورت جبری با استفاده از تابع خطای معکوس^۱ مدل کرد [۲۳] و یا از یک معادله انتقال به دست آورد [۴۸]. این روش مشابه روش متداول برای به دست آوردن ریزشعله‌های غیرپیش مخلوط است [۹] و از آن در نرم‌افزار تجاری انسیس-فلوئنت^۲ نیز استفاده می‌شود.

فارغ از نحوه به دست آوردن ریزشعله‌ها، جدول نهایی ریزشعله برای یک شعله پیش مخلوط در نسبت هم‌ارزی خاص، یک جدول یک بعدی است که شامل کسر جرمی گونه‌های مختلف و نرخ تولید آن‌ها می‌باشد: $Y_k(c)$ و $\dot{\omega}_k(c)$ از این جدول مستقیماً می‌توان برای حل دینامیک سیالات محاسباتی یک شعله آرام استفاده کرد [۴۹، ۱۰]. بدین منظور علاوه بر معادلات حاکم بر سیال فقط یک معادله انتقال^۳ دیگر برای متغیر پیشرفت واکنش حل می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_c \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_c \quad (6)$$

که در رابطه فوق u_i بردار سرعت با نمایش انشتین و D_c ضریب انتشار مولکولی متغیر پیشرفت واکنش است.

روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ

در دو دهه گذشته، روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ^۴ جهت استفاده در کاربردهای صنعتی به سرعت در حال توسعه است [۵۰]. در این روش با فیلتر کردن گردابه‌های کوچک، گردابه‌های بزرگ جریان آشفته شبیه‌سازی شده و اثرات گردابه‌های فیلترشده بر گردابه‌های بزرگ مدل می‌شود. این روش که یکی از قابل اعتمادترین روش‌های شبیه‌سازی جریان آشفته است، نیازمند شبیه‌سازی ناپایا^۵ بر روی یک شبکه محاسباتی سه‌بعدی است. همچنین شبکه محاسباتی باید به اندازه کافی ریز باشد به گونه‌ای که مقیاس‌های ناهمسانگرد جریان آشفته را مستقیماً حساب کند. با تعریف تابع $G(x_i)$ به‌عنوان یک فیلتر گذرپایین^۶ می‌توان مقادیر فیلترشده هر یک از متغیرهای میدان جریان را به صورت زیر تعریف کرد:

$$\bar{\phi}(x_i) \equiv \int_V \phi(x'_i, t) G(x_i - x'_i) dx'_i \quad (7)$$

که V حجم یک سلول محاسباتی است. تابع $G(x_i)$ در رابطه فوق می‌تواند در حل میدان جریان به صورت صریح تعریف شده و بر روی متغیرهای مختلف میدان جریان اعمال شود. در مقابل روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ ضمنی^۷ قرار دارد که در آن صرف گسسته‌سازی بر روی یک شبکه محاسباتی درشت‌تر از مقیاس کولموگروف، کارکرد یک فیلتر مکانی گذرپایین را دارد.

1. Inverse Error Function ($erfc^{-1}$)
 2. Ansys Fluent
 3. Transport Equation
 4. Large-Eddy Simulation
 5. Unsteady
 6. Low-Pass Filter
 7. Implicit LES

چگالی سیال در جریان‌های واکنشی به دلیل تغییرات دمایی متغیر است. بنابراین به منظور اجتناب از مدل‌سازی همبستگی چگالی و دیگر متغیرهای میدان جریان، از فیلتر فاویر^۱ $\bar{\phi} \equiv \overline{\rho\phi}/\bar{\rho}$ استفاده می‌شود. با اعمال این عملگر بر روی معادله (۶) و مدل‌سازی شار اسکالر زیرشبکه داریم [۱]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\bar{c}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\bar{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\bar{\rho}\left(D_c + \frac{\nu_t}{Sc_t}\right)\frac{\partial\bar{c}}{\partial x_i}\right) + \bar{\rho}\tilde{\omega}_c \quad (8)$$

که در رابطه فوق لزجت آشفته^۲ و Sc_t عدد اشمیت آشفته است. این دو کمیت برای مدل‌سازی شار اسکالر زیرشبکه^۳ با فرض انتشار گرادیانی^۴ تعریف شده‌اند. برای مدل‌سازی جمله بسته $\tilde{\omega}_c$ در مدل‌هایی نظیر مدل ریزشعله [۵۱] و مدل بستن ممان شرطی^۵ [۵۲] از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$\tilde{\omega}_c = \int_0^1 \tilde{\omega}_c|c^* \bar{P}(c^*) dc^* \quad (9)$$

که در این رابطه، c^* یک متغیر تصادفی برای متغیر پیشرفت واکنش، $\bar{P}(c^*)$ تابع توزیع احتمال این متغیر و $\tilde{\omega}_c|c^*$ ممان شرطی نرخ تولید متغیر پیشرفت واکنش است. در روش خمینه تولیدی ریزشعله $\tilde{\omega}_c|c^*$ از حل یک شعله آرام یک بعدی به دست می‌آید؛ در نتیجه از این روش بعضاً با نام «روش ممان شرطی پیش فرض»^۶ نیز در مراجع یاد شده است [۵۳]. [۵۵،۵۴]. همان‌گونه که در بخش قبل عنوان شد، مدل‌های مختلفی برای تابع توزیع احتمال متغیر پیشرفت واکنش ارائه شده است، که در این پژوهش از مدل جین و همکاران [۲۹] استفاده شده است. در همه این مدل‌ها یک تابع پیش فرض مورد استفاده قرار می‌گیرد که به دو متغیر \bar{c} و \bar{c}_v وابسته است. در نتیجه می‌توان انتگرال فوق را پیش از انجام محاسبات دینامیک سیالات محاسباتی شعله آشفته برحسب مقادیر مختلف \bar{c} و \bar{c}_v محاسبه و در یک جدول دو بعدی ذخیره کرد. نمونه‌ای از این جدول انتگرال‌گیری شده در شکل ۲ آمده است. مشابه نرخ تولید متغیر پیشرفت واکنش، انتگرال فوق را می‌توان برای به دست آوردن کسر جرمی گونه‌های مختلف \tilde{Y}_k نیز استفاده کرده و در یک جدول دو بعدی برحسب \bar{c} و \bar{c}_v ذخیره کرد.

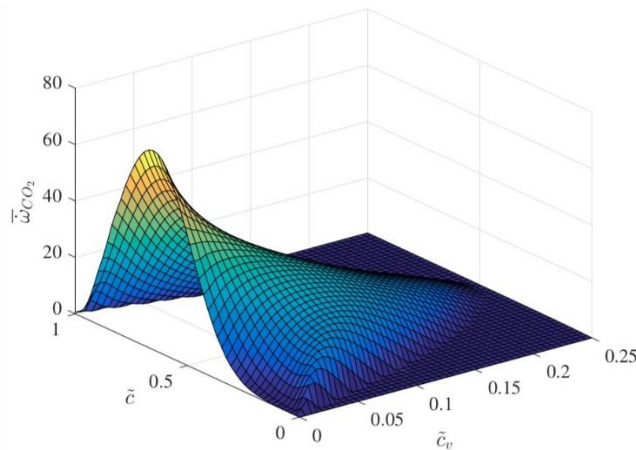


Figure 2- CO2 production rate in the integrated flamelet table

شکل ۲- نرخ تولید گونه دی‌اکسید کربن در جدول انتگرال‌گیری شده ریزشعله

1. Favre filtering
2. Turbulent Viscosity
3. Sub-grid Scalar Flux
4. Gradient Diffusion
5. Conditional Moment Closure
6. Presumed Conditional Moment (PCM)

لازم به ذکر است که به سادگی می توان ثابت کرد که حداکثر مقدار وردایی یک متغیر تصادفی که بین صفر و یک است، در شرایطی رخ می دهد که تابع توزیع احتمال آن مجموع دو تابع دلتای دیراک در صفر و یک باشد:

$$\bar{P}(c^*) = (1 - \bar{c})\delta(c^*) + \bar{c}\delta(1 - c^*) \quad (10)$$

در این شرایط حداکثر مقدار وردایی برابر با $\bar{c}(1 - \bar{c})$ است که این مقدار در بازه صفر و یک حداکثر ۰/۲۵ است. برای به دست آوردن این متغیر در شبیه سازی های گردابه های بزرگ می توان یک معادله بقا حل کرد و یا از یک مدل ساده جبری استفاده کرد. فرمن و همکاران مدل ساده جبری زیر را برای مدل سازی وردایی پیشنهاد دادند [۴۱]:

$$\bar{c}_v = \alpha \Delta^2 |\bar{\nabla} \bar{c}|^2 \quad (11)$$

که در رابطه فوق یک ثابت بین ۰/۱ تا ۰/۳ و Δ اندازه فیلتر مکانی در شبیه سازی گردابه های بزرگ است. این مدل در پژوهش های مختلفی از جمله [۵۷، ۵۶، ۲۷] مورد استفاده قرار گرفته است. روش دیگر برای به دست آوردن وردایی حل یک معادله انتقال برای این متغیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \bar{c}_v) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{c}_v) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} (D_c + \frac{v_t}{Sc_t}) \frac{\partial \bar{c}_v}{\partial x_i} \right) + 2\bar{\rho} \frac{v_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} - 2\bar{\epsilon}_c + 2\bar{\rho}(\bar{\omega}_c c - \bar{c} \bar{\omega}_c) \quad (12)$$

که در این رابطه، $\bar{\omega}_c c$ با استفاده از جداول ریزشعله قابل محاسبه است، اما جمله $\bar{\epsilon}_c$ که عبارت است از نرخ هدررفت متغیر پیشرفت واکنش نیازمند مدل سازی است. مدل های مختلفی برای این متغیر ارائه شده است از این بین مدل دانستان و همکاران به صورت سیستماتیک برای شعله های پیش مخلوط توسعه یافته و اثر فیزیک های مختلف نظیر اتساع^۱ سرعت در محصولات احتراق، خمیدگی شعله در مقیاس های زیرشبکه و اختلاط گردابه های جریان آشفته در آن لحاظ شده است [۴۲]:

$$\bar{\epsilon}_c = \bar{\rho} \left[1.5\tau \frac{S_L}{\delta_{th}} + \left(\frac{1.5\sqrt{Ka_\Delta}}{1 + \sqrt{Ka_\Delta}} - \frac{1.1\tau Da_\Delta}{(1 + \sqrt{Ka_\Delta})^{0.4}} \right) \frac{2u'_\Delta}{3\Delta} \right] \Gamma \frac{\bar{c}_v}{\beta_c} \quad (13)$$

که در این رابطه S_L سرعت شعله آرام یک بعدی بدون کرنش، δ_{th} ضخامت دمایی و τ شاخص آزادسازی انرژی است که از دمای مواد اولیه T_u و محصولات احتراق T_b به صورت $\tau = (T_b - T_u)/T_u$ محاسبه می شود. همچنین $\beta_c = \frac{\sqrt{(u'_\Delta/S_L)^3 \delta_{th}/\Delta}}{Ka_\Delta}$ و $Da_\Delta = \Delta S_L / u'_\Delta \delta_{th}$ ، $Ka_\Delta = \frac{2u'_\Delta}{3\Delta}$ نوسانات سرعت زیرشبکه است. تنها متغیر ثابت در معادله فوق، β_c است. مقدار پیشنهادی این متغیر توسط دانستان و همکاران [۴۲] عدد ۰/۲۴ است که بر مبنای ارزیابی پیشینی^۲ به دست آمده است. فرس و همکاران [۵۸] از همین مقدار برای شبیه سازی یک شعله پیش مخلوط پشت جسم مانع استفاده کرده اند. مسی و همکاران [۱۵] این مقدار را تا ۰/۴ پایین آورده اند و چن و همکاران [۵۹] تا ۷/۵ بالا برده اند. یکی از اهداف این پژوهش سنجش حساسیت شبیه سازی به مقادیر مختلف این متغیر است.

اعتبار روش ریزشعله

با توجه به مباحث فوق دقت روش ریزشعله اولاً به فرض آرام بودن محلی شعله و ثانياً به دقت تابع توزیع احتمال متغیر پیشرفت واکنش وابسته است. دقت تابع توزیع احتمال نیز به نوبه خود به دقت ممان های اول و دوم متغیر پیشرفت و همچنین فرم تابع پیش فرض وابسته است که به تفصیل در بخش های قبلی مورد بحث قرار گرفت. این موارد به صورت خلاصه در روند نمای شکل ۳ نمایش داده شده است.

فرض آرام بودن محلی شعله یکی از مسائل مورد اختلاف در حوزه احتراق آشفته است. در ابتدا باور دانشمندان این حوزه بر این بود که شعله وقتی به صورت محلی آرام است که مقیاس زمانی آن کمتر از کوچک ترین مقیاس زمانی جریان آشفته (مقیاس کولموگروف^۳) باشد. این مساله با یک پارامتر بی بعد به نام عدد کارلویتز^۱ تعریف می شود:

1. Dilatation
2. A priori assessment
3. Kolmogorov

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} \quad (14)$$

که در این رابطه $\tau_c = \delta_{th}/S_L$ مقیاس زمانی شعله است که با ضخامت دمایی و سرعت آن تعریف می‌شود و τ_η مقیاس زمانی کولموگروف است.

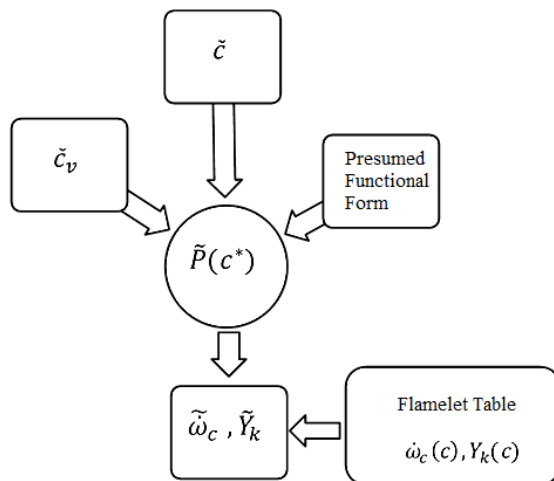


Figure 3- Flowchart of the procedure for calculation of filtered reaction rate and species mass fraction in the flamelet approach

شکل ۳- روندنمای نحوه محاسبه نرخ واکنش و کسر جرمی فیلتر شده گونه‌ها در روش ریزشعله

در صورتی که $Ka \leq 1$ باشد، فرآیند آزادسازی انرژی احتراق خیلی سریع‌تر از کوچکترین مقیاس زمانی آشفتنگی اتفاق می‌افتد و در نتیجه می‌توان شعله را به صورت محلی آرام فرض کرد. شرط $Ka = 1$ که شرط کلیموف-ویلیامز^۱ نام دارد به صورت سنتی تعیین کننده محدوده فرض ریزشعله بود [۱]. اما پیترز [۶۰] در سال ۱۹۹۹ پیشنهاد داد که محدوده فرض ریزشعله را می‌توان تا کارلویتزهای حدود ۱۰۰ نیز افزایش داد. با فرض یک بودن عدد اشمیت می‌توان ثابت کرد که عدد کارلویتز برابر با مجذور نسبت مقیاس طولی شعله و مقیاس طولی کولموگروف است: $Ka = (\delta_{th}/\eta)^2$. استدلال پیترز بر این مبنا بود که آزادسازی انرژی در یک شعله پیش مخلوط در لایه درونی^۳ شعله اتفاق می‌افتد که ضخامت این لایه حدود یک دهم ضخامت دمایی شعله $\delta_{th} = (T_b - T_u)/(\frac{dT}{dx})_{max}$ است و مقیاس‌های کولموگروف در لایه پیش‌گرمایش^۴ شعله قبل از رسیدن به لایه درونی به دلیل افزایش دما و افزایش لزجت میرا می‌شوند و فرصت برهم زدن ساختار شعله آرام را ندارند. این مهم مورد اختلاف پژوهشگران دیگر نظیر دان و همکاران [۶۱] و یون و گولدر [۶۲] قرار گرفت که با اندازه‌گیری‌های تجربی ساختار شعله را متفاوت از ساختار شعله آرام یافتند. اسکيبا و همکاران [۶۳] با استفاده از یک روش جدید برای اندازه‌گیری لایه درونی شعله^۵ نشان دادند که نظریه پیترز [۶۰] تا کارلویتزهای حدود ۵۰۰ نیز برقرار است. به بیان دیگر گرچه کانتورهای دما با ساختار یک شعله آرام تطابق ندارند اما آزادسازی انرژی به مانند یک شعله آرام در لایه‌های نازک اتفاق می‌افتد. برخلاف پژوهش اسکيبا و همکاران [۶۳]، در پژوهش‌های سابق یا شعله کاملاً پیش مخلوط نیست [۶۲، ۶۱] و یا صرفاً دمای شعله اندازه‌گیری شده است [۶۲].

1. Karlovitz Number
2. Klimov-Williams
3. Inner Layer
4. Preheat Layer

۵. اندازه‌گیری همزمان گونه‌های CH و OH و استفاده از حاصل ضرب این دو سیگنال

از منظر مدل‌سازی پژوهش‌های مختلفی نشان دادند که کماکان می‌توان از فرض ریزشعله آرام برای مدل‌سازی شعله‌های پیش‌مخلوط آشفته در شدت آشفستگی بالا استفاده کرد [۲۰، ۱۹]. مهدی‌پور و صالحی با ارزیابی پسینی داده‌های شبیه‌سازی عددی مستقیم در چهار کارلویتز ۶، ۷۴، ۵۴۰ و ۴۱۰۰ نشان دادند که می‌توان از ریزشعله‌های آرام کرنش‌نیافته برای شبیه‌سازی تا کارلویتز ۷۴ استفاده کرد. اما در کارلویتزهای ۵۴۰ و ۴۱۰۰ باید از ریزشعله‌های کرنش یافته استفاده کرد. این مسئله نیازمند تولید یک جدول ریزشعله دو بعدی است که استفاده از آن در شبیه‌سازی جریان آشفته پیچیدگی‌های بیشتری به نسبت تئوری تشریح شده در بخش قبل دارد.

لازم به ذکر است که شعله پیش‌مخلوط در شرایطی که افت حرارتی^۱ داشته باشد و یا از سوختی نظیر هیدروژن با ضریب انتشار مولکولی بسیار بالا برخوردار باشد، می‌تواند به صورت موضعی خاموش شده و ساختارهای متفاوتی به نسبت یک ریزشعله آرام به خود بگیرد [۶۴]. از دیگر عوامل خاموشی یک شعله پیش‌مخلوط می‌توان به رقیق شدن آن با هوا به صورت موضعی نام برد. در دو مورد اخیر شعله از حالت پیش‌مخلوط کامل وارد رژیم پیش‌مخلوط جزئی می‌شود. در این رژیم و همچنین در رژیم‌های دیگر احتراقی نظیر رژیم غیرپیش‌مخلوط، خوداشتعال و احتراق مایلد^۲، در صورتی که شدت آشفستگی زیاد شود، شعله و مقیاس‌های مختلف جریان آشفته می‌توانند اندرکنش قابل ملاحظه‌ای داشته باشند به گونه‌ای که ساختارهای محلی شعله از یک شعله نازک آرام یک-بعدی فاصله گیرند. اما کماکان مدل‌های ریزشعله به دلیل هزینه بسیار کم در مقابل دیگر روش‌ها، می‌توانند با ترفندهایی در این شرایط نیز مورد استفاده قرار گیرند. از جمله این ترفندها می‌توان به ریزشعله‌های ناپایا [۱۲]، ریزشعله‌های تعاملی^۳ [۶۵]، ترکیب ریزشعله‌های پایا و ناپایدار نزدیک خاموشی^۴ [۶۶] و ترکیب ریزشعله‌های پایا و راکتورهای خوداشتعال [۶۷] اشاره کرد. در عین حال در شرایطی نظیر احتراق مایلد استفاده از حل راکتورهای کاملاً هم‌زده^۵ منجر به نتایج به مراتب بهتری به نسبت ریزشعله‌ها می‌شود [۶۸].

بیکربندی مشعل و حل عددی

مشعل شبیه‌سازی شده در این پژوهش مشعل پشت جسم مانع کریوکی و همکاران [۶۹] است. در این مشعل سوخت متان و هوا در نسبت هم‌ارزی ۰/۷۵ پیش‌مخلوط شده و با سرعت متوسط ۱۰/۷ متر بر ثانیه از یک لوله که در انتهای آن یک جسم مانع قرار دارد عبور کرده و مشتعل می‌شود. قطر لوله ۳۵ میلی‌متر و قطر جسم مانع در ابتدا ۶/۳۵ میلی‌متر است که با زاویه ۴۵ درجه تا ۲۵ میلی‌متر در خروجی لوله افزایش می‌یابد. این لوله در جریان هوای آزاد با سرعت ۰/۷ متر بر ثانیه قرار دارد. هندسه مشعل در شکل ۴ نمایش داده شده است.

دامنه محاسباتی و مرزهای ورودی و خروجی در شکل ۴ نشان داده شده است. دامنه محاسباتی با استفاده از برنامه بلاک‌مش^۶ از مجموعه نرم‌افزار متن باز اوپن‌فوم^۷ به صورت ساختاریافته^۸ با حدود ۱/۵ میلیون سلول محاسباتی شبکه‌بندی می‌شود. دو نما از شبکه در شکل ۵ نمایش داده شده است. نزدیک‌ترین سلول محاسباتی به دیواره درون لوله در γ^+ حدوداً برابر با ۳۰ قرار دارد. در نتیجه برای محاسبه دقیق اثرات دیواره بر روی میدان سرعت از تابع دیواره استاندارد^۹ در اوپن‌فوم استفاده شده است.

1. Heat Loss
2. Moderate or Intense Low Oxygen Dilution (MILD)
3. Interactive Flamelets

۴. این ریزشعله‌ها از حل یک شعله یک بعدی با نرخ واکنش کم بر روی شاخه میانی S-Shape Curve به دست می‌آید.

5. Perfectly-Stirred Reactor (PSR)
6. blockMesh
7. OpenFOAM
8. Structured
9. Standard Wall Function

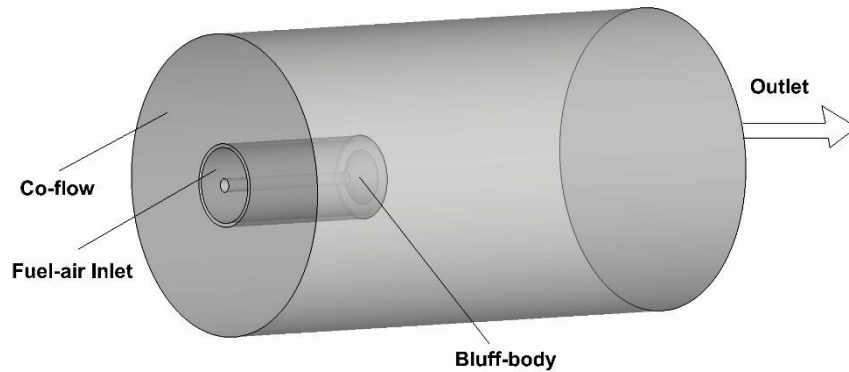


Figure 4- Geometry of the bluff-body burner, computational domain and boundary conditions
 شکل ۴- هندسه مشعل جسم مانع، دامنه محاسباتی و شرایط مرزی

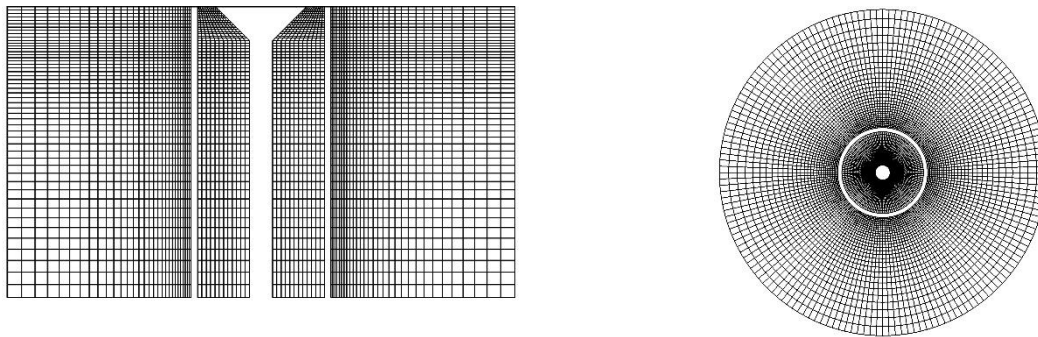


Figure 5- Two views of the computational grid at the inlet (right figure) and near the bluff-body (left figure)
 شکل ۵- دو نما از شبکه محاسباتی در ورودی (شکل راست) و در نزدیکی جسم مانع (شکل چپ)

معادلات حاکم بر سیال به علاوه معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش و وردایی آن با استفاده از نرم افزار اوپن فوم حل شده است. این معادلات با روش مرتبه ۲ محدود شده^۱ در مکان و روش مرتبه ۲ عقب گرد^۲ در زمان گسسته سازی شده است. برای حل معادلات حاکم بر سیال از روش فشار-مینا با الگوریتم پیرو^۳ استفاده شده است. برای شبیه سازی اثرات مقیاس های زیر شبکه^۴ در شبیه سازی های گردابه های بزرگ از روش اسمگورینسکی^۵ استفاده شده است [۷۰]. مقدار عدد اشمیت زیر شبکه ثابت و برابر با ۰/۷ در نظر گرفته شده است. مقدار این پارامتر در شبیه سازی گردابه های بزرگ جریان های احتراقی برابر با ۰/۷ [۷۱،۵۶،۲۷] و نیز در برخی پژوهش ها برابر با ۰/۴ [۵۹،۴۱] در نظر گرفته شده است. اخیراً ژائو و ژنگ [۷۲] یک تحلیل حساسیت نسبت به این پارامتر انجام داده اند. نتایج نشان می دهد که تغییر عدد اشمیت از ۰/۴ به ۰/۷ تأثیر چندانی در کسر جرمی گونه ها و میدان سیال ندارد. همچنین نتایج این پژوهش نشان می دهد که تغییرات عدد پرنتل زیر شبکه از ۰/۵ تا ۰/۹ تأثیر چندانی در نتایج ندارد. در این پژوهش عدد ۰/۹ برای عدد پرنتل استفاده شده است. مدل زیر شبکه اسمگورینسکی نیز یک متغیر دارد که یا برابر با یک مقدار ثابت در نظر گرفته می شود و یا به صورت دینامیکی محاسبه می شود. مقدار این عدد ثابت معمولاً بین ۰/۱ تا ۰/۲ در نظر گرفته می شود [۷۳]. میدان جریان سرد در

1. Linear TVD Scheme
2. Backward
3. PISO
4. Sub-Grid Scales
5. Smagorinsky

هندسه مورد نظر در این پژوهش، توسط لی و کنت [۷۴] با مدل‌های مختلف زیرشبکه اعم از مدل اسمگورینسکی ثابت و دینامیک مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که مقدار بهینه این ثابت در حدود ۰/۱۵ است و در این شرایط تفاوت چندانی بین نتایج مدل اسمگورینسکی ثابت و دینامیک در تخمین میدان سرعت متوسط وجود ندارد. مقدار پیش‌فرض این ثابت در نرم‌افزار اوپن‌فوم ۰/۱۶۷ است که در این پژوهش از این مقدار استفاده شده است.

شبیه‌سازی‌ها با گام زمانی حدود یک میکروثانیه انجام شده است. در میدان سیال پشت جسم مانع پدیده‌های فیزیکی مختلفی اعم از ناپایداری کلوین-هلمهولتز^۱ و ریزش گردابه^۲ انجام می‌گیرد. بسامد مشخصه این پدیده‌ها در این هندسه با توجه به رژیم جریان بین ۷۵ تا ۳۰۰۰ هرتز است [۷۴]. گام زمانی یک میکروثانیه با دقت بالایی می‌تواند این پدیده‌ها را شبیه‌سازی کرده و همچنین جهت حفظ پایداری عددی، عدد کورانت^۳ را کمتر از ۰/۳ حفظ کند.

در شرط اولیه برای شروع احتراق، مقدار $\bar{c} = 1$ درون یک استوانه با ارتفاع حدود دو برابر قطر جسم مانع بر روی جسم مانع منظور شده است. بر مبنای سرعت متوسط سیال در ورودی، زمان لازم برای عبور یک ذره سیال از کل دامنه^۴ حدود ۲۳ میلی‌ثانیه است. شبیه‌سازی ابتدا حدود ۶۰ میلی‌ثانیه برای خارج کردن شرط اولیه غیرواقعی انجام می‌شود و سپس برای حدود ۱۲۰ میلی‌ثانیه برای متوسط‌گیری ادامه پیدا می‌کند.

جداول ریزشعه با حل معادلات حاکم بر یک شعله یک-بعدی آرام بدون کرنش با کمک نرم افزار متن‌باز فلیم‌مستر^۵ انجام شده است. از سازوکار شیمیایی GRI-MECH 2.11 برای شبیه‌سازی شعله استفاده می‌شود. خروجی در یک کد خانگی با تابع توزیع احتمال پیش‌فرض انتگرال‌گیری شده و برحسب \bar{c} و \bar{c}_v برای شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی در اوپن‌فوم ذخیره می‌شود.

نتایج

از ویژگی‌های این مشعل وجود داده‌های تجربی برای تست‌های سرد جهت اعتبارسنجی نتایج عددی است. در این شرایط سیال عامل هوا است. با استفاده از تکنیک لیزری سرعت‌سنجی ذرات^۶، سرعت لحظه‌ای در نقاط مختلف پشت جسم مانع اندازه‌گیری و سپس متوسط‌گیری شده است. در شکل ۶ نتایج عددی و تجربی متوسط‌گیری شده مقایسه شده‌اند. این شکل نشان می‌دهد که شبیه‌سازی عددی به خوبی سرعت محوری را پیش‌بینی می‌کند.

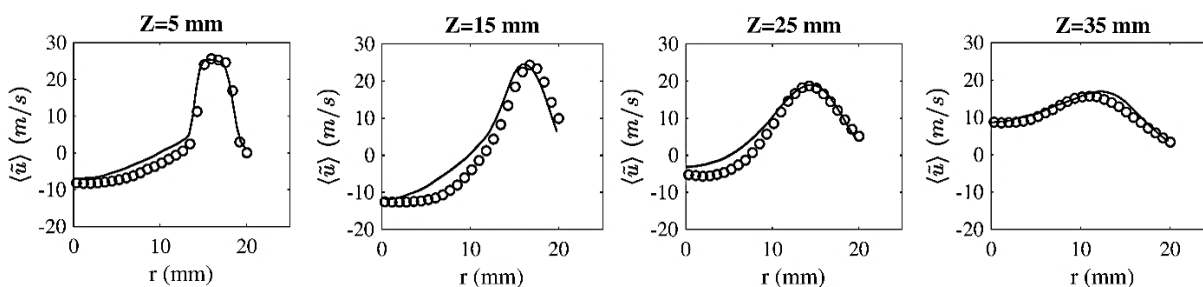


Figure 6- Radial profiles of the experimental (-) and numerical (o) axial velocity at different axial distances from the bluff-body

شکل ۶- پروفیل شعاعی سرعت محوری تجربی (o) و عددی (-) در فواصل محوری مختلف از جسم مانع

1. Kelvin-Helmholtz Instability
2. Vortex Shedding
3. Courant Number
4. Flow-through time
5. FlameMaster
6. Particle Image Velocimetry (PIV)

شکل فوق نتایج مربوط به شبکه با $1/5$ میلیون سلول محاسباتی است. از شروط اولیه قابل اعتماد بودن نتایج شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ محاسبه مسقیم حداقل 80% درصد انرژی جنبشی آشفتگی سیال است. شکل ۷ مقدار کل انرژی جنبشی آشفتگی سیال به همراه مقداری که مستقیماً محاسبه شده است را در یک مقطع خاص نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که بیش از 80% درصد انرژی جنبشی در فواصل شعاعی مختلف مستقیماً محاسبه شده و الباقی در مقیاس زیرشبکه مدل شده است. در نتیجه این شبکه از وضوح کافی برخوردار است. همچنین طیف مقیاس‌های زمانی جریان آشفته در دو نقطه در فاصله محور 15 میلی‌متر از جسم مانع محاسبه شده و در شکل ۷ آمده است. این طیف از محاسبه چگالی طیفی توان^۱ سرعت محوری به دست آمده است. شیب $-5/3$ این طیف از مشخصه‌های جریان‌های کاملاً آشفته است که در شبیه‌سازی‌های عددی نیز با تقریب خوبی به دست آمده است.

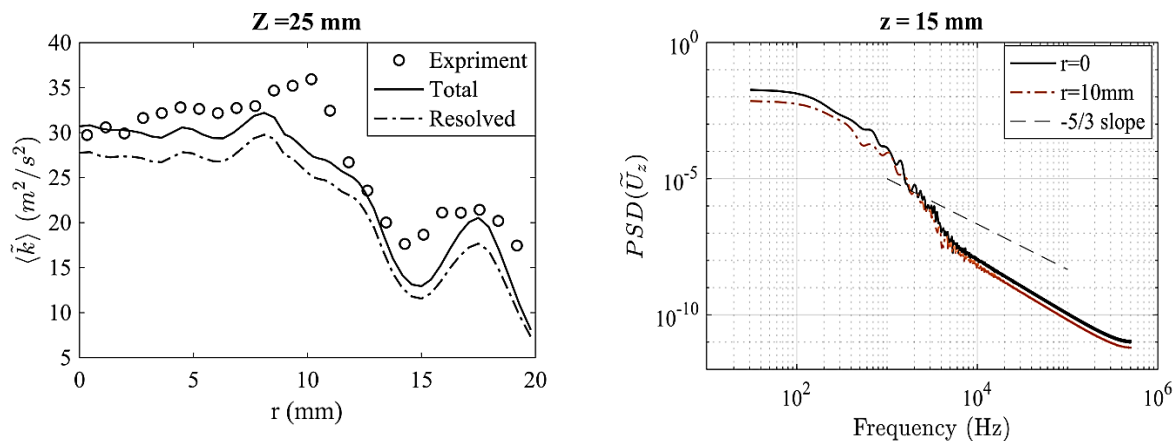


Figure 7- Power spectrum density of axial velocity (right figure) and radial variation of turbulent kinetic energy (left figure)

شکل ۷- چگالی طیفی توان سرعت محوری (شکل راست) و تغییرات شعاعی انرژی جنبشی (شکل چپ)

با توجه به نتایج تجربی [۶۹] عدد کارلویتز در این شعله کمتر از $Ka \leq 4$ است. در نتیجه استفاده از فرض ریزشعله آرام با استفاده از ریزشعله‌های کرنش نیافته برای شبیه‌سازی این شعله موجه است. برای مقایسه اثرات احتراق بر روی میدان جریان ساختارهای یکنوای آشفتگی^۲ لحظه‌ای حل سرد و گرم در شکل ۸ نمایش داده شده است. یکی از روش‌های به تصویر کشیدن این ساختارها استفاده از معیار Q است. این شکل به خوبی نشان‌دهنده ساختارهای تیوبی شکل ناشی از ناپایداری کلونین-هلمهولتز در لایه‌های برشی، شکست گردابه^۳ در پایین دست جسم مانع و ساختارهای گرم-شکل^۴ در جریان برگشتی است. همچنین این شکل تفاوت میدان جریان سرد و گرم سیال را به خوبی به تصویر می‌کشد. جریان سرد در پشت جسم مانع از ساختارهای ریزتر با شدت آشفتگی بالاتری برخوردار است، در حالی که در جریان گرم به دلیل آزادسازی گرما و افزایش شدید لزجت سیال، نرخ میرایی آشفتگی افزایش پیدا کرده و جریان آرام‌تر می‌شود. همچنین به دلیل کاهش چگالی و انبساط سیال در پشت شعله اندازه ناحیه برگشتی^۵ در میدان جریان احتراقی افزایش چشمگیری دارد.

1. Power Spectrum Density (PSD)
2. Turbulent Coherent Structures
3. Vortex Breakdown
4. Worm-like Structures
5. Recirculation Zone

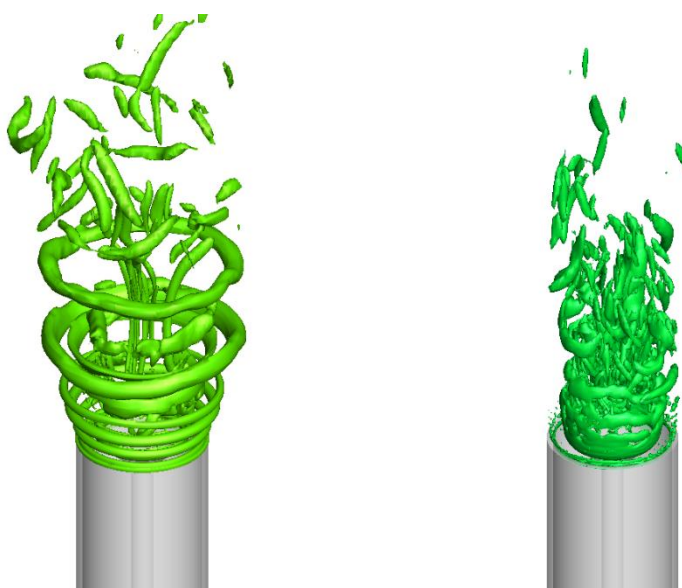


Figure 8- Turbulent coherent structures in iso-surface of Q-criterion 10^6 in the cold flow (right figure) and reacting flow (left figure) simulations

شکل ۸- ساختارهای یکنوای آشفته‌گی با معیار $Q = 10^6$ در شبیه‌سازی جریان سرد (شکل راست) و جریان احتراقی (شکل چپ)

تنها گونه‌ای که در آزمایش‌های تجربی اندازه‌گیری شده است گونه هیدروکسیل OH است. این گونه از کتابخانه خمینه تولیدی ریزشعله در هر گام زمانی بازیابی و متوسط‌گیری شده است. نتایج در شکل ۹ نشان داده شده است. مطابق این شکل برای آنالیز حساسیت نسبت به مدل وردایی زیرشکبه ۵ شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ مختلف انجام شده است. در دو شبیه‌سازی از مدل جبری معادله (۱۱) با $\alpha = 0.1, 0.3$ استفاده شده که حداقل و حداکثر مقدار این متغیر است [۴۱]. شکل ۹ نشان می‌دهد که استفاده از این مدل ساده جبری خطای قابل ملاحظه‌ای در پیش‌بینی مقدار گونه هیدروکسیل ایجاد می‌کند؛ به‌گونه‌ای که شعله در شبیه‌سازی‌های عددی کوتاه‌تر از مقدار واقعی است. در مقابل شکل ۹ نشان می‌دهد که به‌دست آوردن مقدار وردایی از حل معادله انتقال (۱۲) تخمین به نسبت بهتری از کسر جرمی این گونه ارائه می‌دهد، خصوصاً در شرایطی که $\beta_c = 2.4$ است.

اساساً این نوع مدل‌های جبری عمدتاً از فرض تعادل و برابری جملات تولید و مصرف در معادله انتقال آنها به‌دست می‌آید. با استفاده از این فرض در معادله انتقال (۱۲) داریم:

$$\bar{\epsilon}_c = \bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} + \bar{\rho} (\bar{\omega}_c c - \bar{c} \bar{\omega}_c) \quad (15)$$

مدل جبری معادله (۱۱) با فرض ناچیز بودن جملات ناشی از واکنش شیمیایی در معادله فوق و همچنین یک مدل ساده اختلاط زیرشکبه برای نرخ هدررفت متغیر پیشرفت $\bar{\epsilon}_c \sim \bar{\rho} D_t \bar{c}_v / \Delta^2$ به‌دست آمده است [۳۰]. برای بررسی دقیق‌تر علت عدم دقت معادله جبری (۱۱)، مقدار متوسط جملات معادله (۱۵) در یک مقطع خاص در شکل ۱۰ نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که جملات ناشی از واکنش شیمیایی مقدار قابل توجهی دارد و صرف‌نظر کردن آن باعث می‌شود که مقدار وردایی زیرشکبه کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شود. متعاقباً شکل ۲ نشان می‌دهد که در صورتی که مقدار وردایی کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شود، نرخ تولید متوسط متغیر پیشرفت واکنش بیش از مقدار واقعی پیش‌بینی شده و در نتیجه نرخ تولید محصولات احتراق و سرعت شعله بیشتر از مقدار واقعی خواهد شد. در نتیجه استفاده از مدل جبری وردایی سبب می‌شود که طول شعله کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شود. در صورتی که طول شعله را با حداکثر مقدار گونه هیدروکسیل

تعریف کنیم، شکل ۹ نشان می‌دهد که استفاده از مدل جبری باعث می‌شود که طول شعله با حدوداً ۳۰ درصد خطا پیش‌بینی شود.

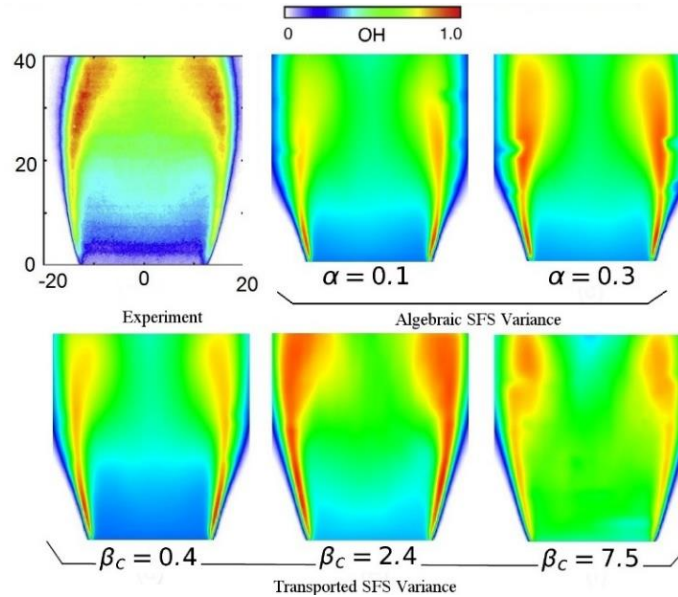


Figure 9- Sensitivity analysis of the normalized OH mass fraction results on the Sub-Filter Scale (SFS) variance model

شکل ۹- حساسیت سنجی نتایج کسر جرمی گونه OH نرمال شده به مدل وردایی زیر-فیلتر

شکل ۸ نشان می‌دهد که بهترین نتیجه با حل معادله انتقال وردایی و مقدار $\beta_c = 2.4$ به دست می‌آید؛ همان مقدار پیش‌فرض مدل که در ابتدا توسط دانستان و همکاران [۴۲] پیشنهاد شده بود. در عین حال لازم به ذکر است که مقدار بهینه این ثابت ممکن است تحت تأثیر خطاهای دیگری که در شبیه‌سازی است تغییر کند.

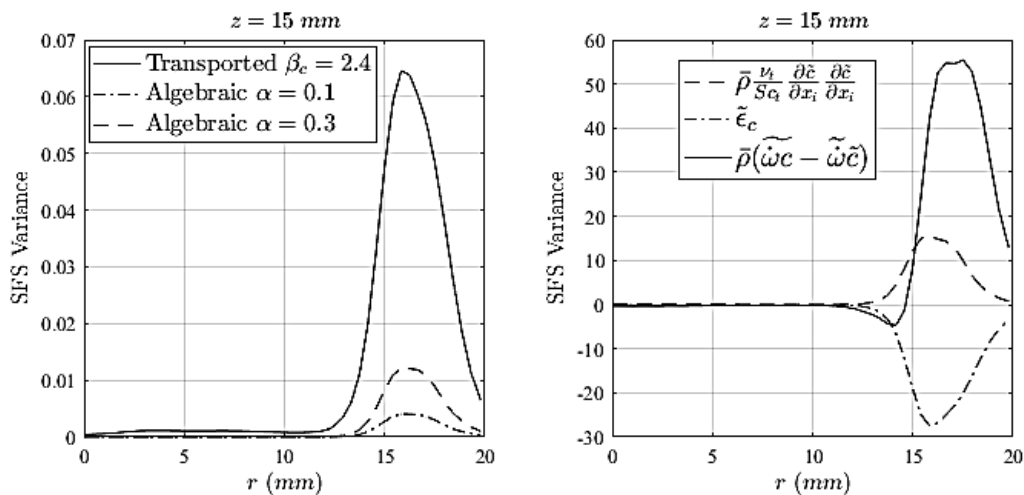


Figure 10- Comparison between the variance transport equation source terms (right figure) and variance profile using algebraic and transported variance model (left figure) at one axial location

شکل ۱۰- مقایسه مقادیر متوسط جملات منبع معادله انتقال وردایی (شکل راست) و پروفیل وردایی با استفاده از مدل جبری و مدل معادله انتقال (شکل چپ) در یک فاصله محوری

شکل‌های ۱۱ تا ۱۴ اثر دو مدل مختلف وردایی متغیر پیشرفت و تغییر ثواب آن‌ها بر روی سرعت محوری و انرژی جنبشی آشفته‌گی در مقایسه با نتایج تجربی را نشان می‌دهد. مشابه نتایج به‌دست آمده در شکل ۹ برای گونه هیدروکسیل، نتایج به‌دست آمده برای میدان سرعت نیز بیانگر این است که حل معادله انتقال برای وردایی متغیر پیشرفت واکنش‌گزینه به‌مراتب بهتری به نسبت مدل جبری است. شکل ۱۱ نشان می‌دهد استفاده از مدل جبری برای وردایی متغیر پیشرفت باعث می‌شود که سرعت محوری بر روی محور در فاصله ۳۵ میلی‌متری از سطح جسم مانع تا حدود ۶۰ درصد کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شود. همچنین این شکل به‌وضوح نشان می‌دهد که ناحیه بازگشتی پشت جسم مانع کوچک‌تر از مقدار واقعی پیش‌بینی شده است. این مهم ناشی از این است که در این مدل طول شعله کوتاه‌تر از مقدار واقعی آن پیش‌بینی شده است. از سوی دیگر شکل ۱۲ نشان می‌دهد که در صورتی که برای وردایی متغیر پیشرفت یک معادله انتقال حل شود، تخمین میدان سرعت به نتایج تجربی نزدیک‌تر است. همین نتیجه را می‌توان از شکل‌های ۱۳ و ۱۴ که پروفیل‌های شعاعی انرژی جنبشی آشفته‌گی متوسط را در فواصل محوری مختلف نشان می‌دهند گرفت. شکل ۱۳ به‌وضوح نشان می‌دهد که استفاده از مدل جبری برای وردایی متغیر پیشرفت باعث ایجاد خطای قابل توجهی را ایجاد می‌کند. این خطا در صورت حل یک معادله انتقال برای این متغیر به‌طرز چشمگیری کاهش می‌یابد. مشابه شکل ۹، شکل‌های ۱۲ و ۱۴ نیز نشان می‌دهند که در صورت حل معادله انتقال برای وردایی متغیر پیشرفت، بهترین نتیجه به‌ازای مقدار ثابت $\beta_c = 2.4$ به‌دست می‌آید.

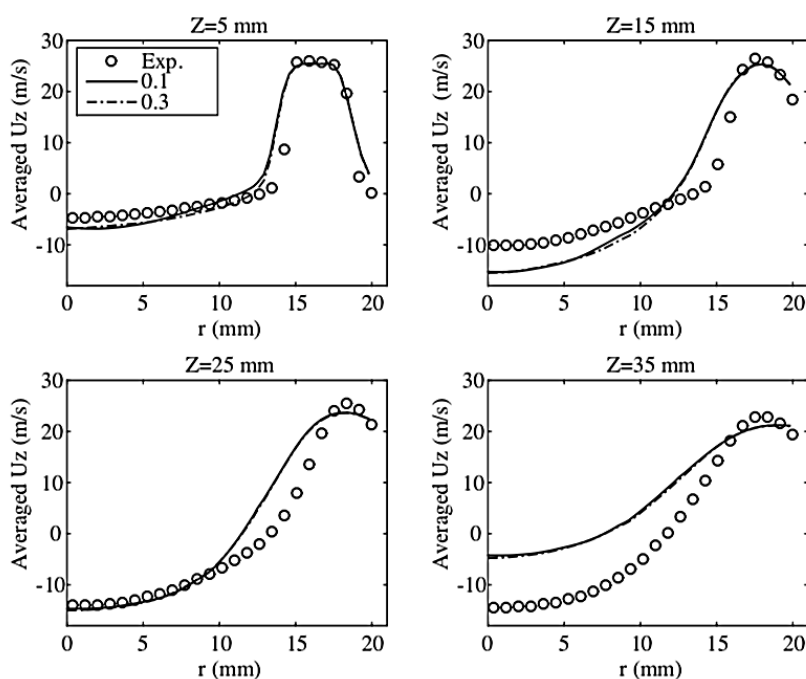


Figure 11- Radial profiles of the axial velocity in simulation of turbulent reacting flow using the algebraic variance model for different values of α

شکل ۱۱- پروفیل شعاعی سرعت محوری در شبیه‌سازی جریان واکنشی با استفاده از مدل وردایی جبری برای مقادیر مختلف α

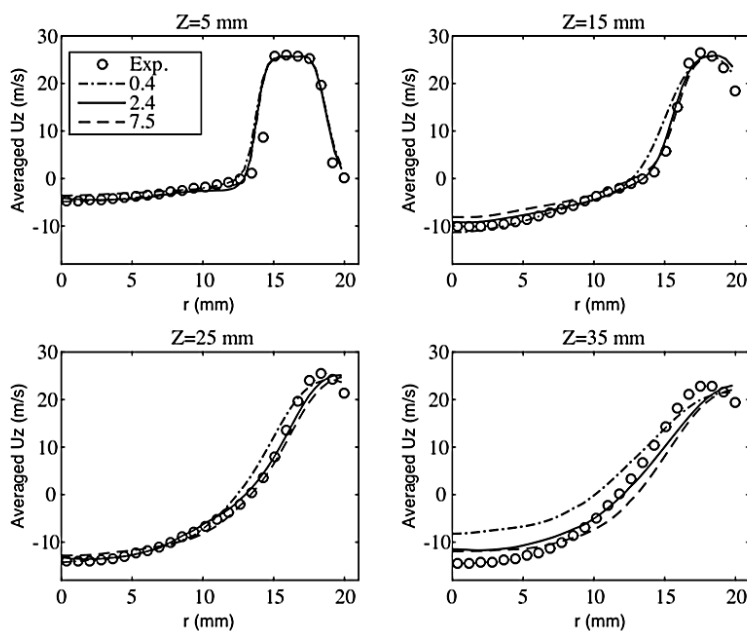


Figure 12- Radial profiles of the axial velocity in simulation of turbulent reacting flow using the transported variance model for different values of β_c

شکل ۱۲- پروفیل شعاعی سرعت محوری در شبیه سازی جریان واکنشی با استفاده از مدل وردایی معادله انتقال برای مقادیر مختلف β_c

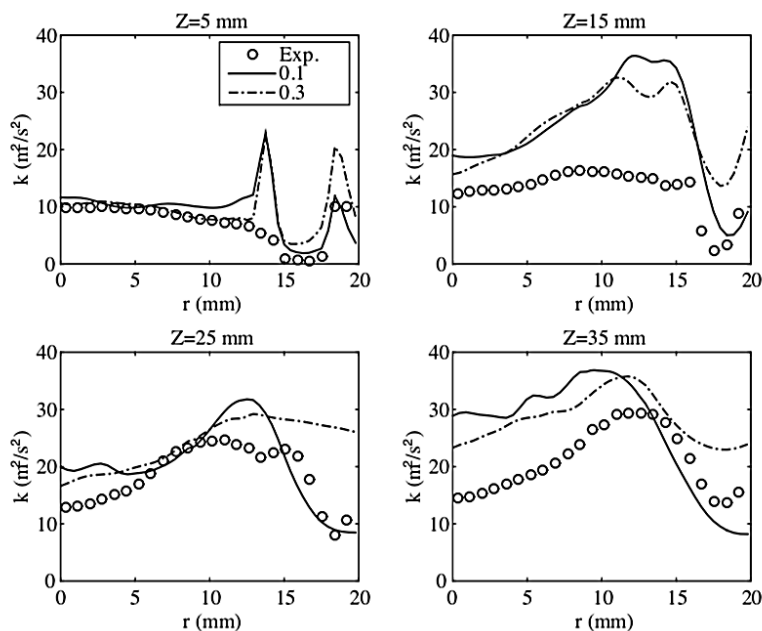


Figure 13- Radial profiles of the averaged turbulent kinetic energy in simulation of turbulent reacting flow using the algebraic variance model for different values of α

شکل ۱۳- پروفیل شعاعی انرژی جنبشی آشفتگی متوسط در شبیه سازی جریان واکنشی با استفاده از مدل وردایی جبری برای مقادیر مختلف α

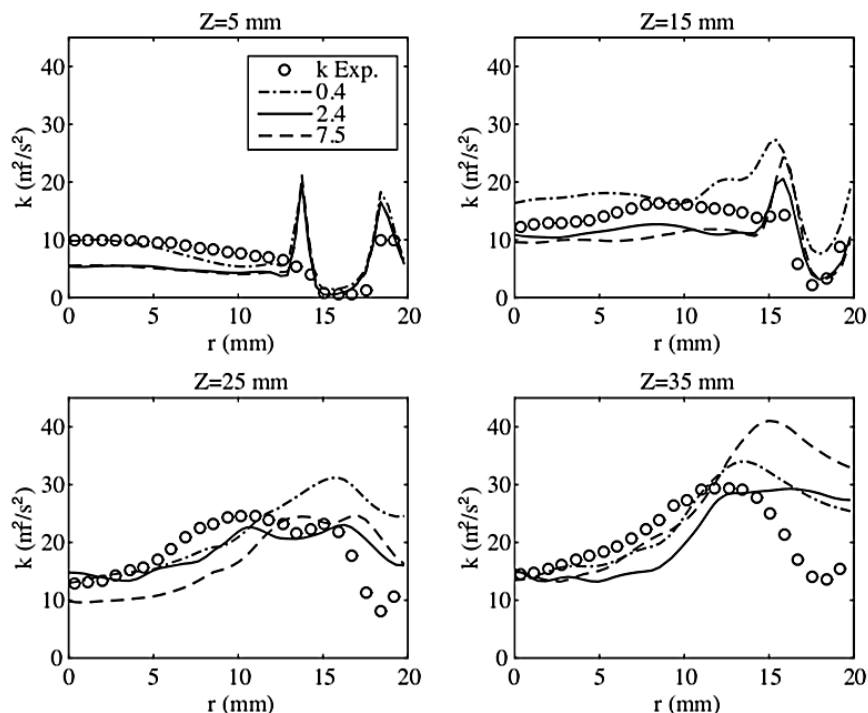


Figure 14- Radial profiles of the averaged turbulent kinetic energy in simulation of turbulent reacting flow using the transported variance model for different values of β_c

شکل ۱۴- پروفیل شعاعی انرژی جنبشی آشفته متوسط در شبیه‌سازی جریان واکنشی با استفاده از مدل وردایی معادله انتقال برای مقادیر مختلف β_c

نتیجه‌گیری

در این پژوهش پس از مرور ادبیات مدل‌سازی شعله‌های آشفته پیش‌مخلوط با کمک فرض ریزشعله، یک روش خاص بر مبنای این فرض به نام روش خمینه تولیدی ریزشعله به تفصیل تشریح و ارائه شده است. این روش در چهارچوب روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای مدل‌سازی آشفته‌گی در کد متن‌باز اوپن‌فوم پیاده‌ساز شده است. پیاده‌سازی این روش مستلزم حل حداقل یک معادله انتقال برای متغیر پیشرفت واکنش فیلتر شده است. برای بستن جمله منبع در این معادله و همچنین محاسبه مقدار فیلترشده گونه‌های مختلف شیمیایی، از یک تابع توزیع احتمال پیش‌فرض استفاده شده است. برای تشکیل این تابع که تقریبی برای توصیف آماری متغیر پیشرفت واکنش در هر سلول محاسباتی را فراهم می‌کند، علاوه بر مقدار فیلترشده متغیر پیشرفت واکنش، وردایی این کمیت نیز مورد نیاز است. در این پژوهش از دو مدل مختلف برای وردایی زیرشبکه متغیر پیشرفت واکنش استفاده شده است: یک مدل ساده جبری و یک مدل بر مبنای حل یک معادله انتقال. شبیه‌سازی‌های مختلفی بر مبنای این دو مدل و مقادیر مختلف ثوابت موجود در آن‌ها انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که حل معادله انتقال برای این کمیت منجر به نتایج به مراتب بهتری در مقایسه با مدل ساده جبری می‌شود.

تشکر و قدردانی

شبیه‌سازی‌های انجام شده در این پژوهش با امکانات مرکز پردازش سریع دانشگاه صنعتی شریف انجام شده است که بدین‌وسیله از زحمات مسئولین مربوطه در تأسیس، نگهداری و ارتقاء نرم‌افزاری و سخت‌افزاری این مجموعه قدردانی می‌شود.

1. T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc., 2005.
2. A. N. Gorban and G. S. Yablonsky, "Three Waves of Chemical Dynamics," *Math. Model. Nat. Phenom.*, 10, 2015.
3. R. W. Bilger, S. B. Pope, K. N. C. Bray, and J. F. Driscoll, "Paradigms in turbulent combustion research," *Proc. Combust. Inst.*, 30, 2005, pp. 21–42.
4. Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin, "GRI-MECH 3.0." Available Online: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
5. C. K. Law, *Combustion Physics*, First Edition, Cambridge, Cambridge University Press, 2010.
6. U. Maas and S. B. Pope, "Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space," *Combust. Flame*, 88, 1992, pp. 239–264.
7. S. B. Pope, "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation," *Combust. Theory Model.*, 1, 1997, pp. 41–63.
8. Z. Ren, S. B. Pope, A. Vladimirovsky, and J. M. Guckenheimer, "The invariant constrained equilibrium edge preimage curve method for the dimension reduction of chemical kinetics," *J. Chem. Phys.*, 124, 2006, p. 114111.
9. N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion," *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10, 1984, pp. 319–339.
10. J. A. van Oijen and L. P. H. de Goeij, "Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method," *Combust. Theory Model.*, 6, 2002, pp. 463–478.
11. O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin, "Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion," *Proc. Combust. Inst.*, 28, 2000, pp. 1901–1908.
12. H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters, "Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames," *Proc. Combust. Inst.*, 27, 1998, pp. 1057–1064.
13. C. D. Pierce and P. Moin, "Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion," *J. Fluid Mech.*, 504, 2004, pp. 73–97.
14. M. Ihme, C. M. Cha, and H. Pitsch, "Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach," *Proc. Combust. Inst.*, 30, 2005, pp. 793–800.
15. J. C. Massey, I. Langella, and N. Swaminathan, "Large Eddy Simulation of a Bluff Body Stabilised Premixed Flame Using Flamelets," *Flow Turbul. Combust.*, 101, 2018, pp. 1–20.
16. I. Langella, N. Swaminathan, and R. W. Pitz, "Application of unstrained flamelet SGS closure for multi-regime premixed combustion," *Combust. Flame*, 173, 2016, pp. 161–178.
17. D. Bradley, L. K. Kwa, A. K. C. Lau, M. Missaghi, and S. B. Chin, "Laminar flamelet modeling of recirculating premixed methane and propane-air combustion," *Combust. Flame*, 71, 1988, pp. 109–122.
18. H. Kolla and N. Swaminathan, "Strained flamelets for turbulent premixed flames, I: Formulation and planar flame results," *Combust. Flame*, 157, 2010, pp. 943–954.
19. E. Knudsen, H. Kolla, E. R. Hawkes, and H. Pitsch, "LES of a premixed jet flame DNS using a strained flamelet model," *Combust. Flame*, 160, 2013, pp. 2911–2927.
20. A. H. Mahdipour and M. M. Salehi, "A Priori Evaluation of the Laminar Flamelet Decomposition Model for Turbulent Premixed Flames using DNS Data," *Flow Turbul. Combust.*, 108, 2022, pp. 149–180.
21. S. Ghosal and L. Vervisch, "Stability diagram for lift-off and blowout of a round jet laminar diffusion flame," *Combust. Flame*, 124, 2001, pp. 646–655.
22. C. Bekdemir, L. M. T. Somers, and L. P. H. de Goeij, "Modeling diesel engine combustion using pressure dependent Flamelet Generated Manifolds," *Proc. Combust. Inst.*, 33, 2011, pp. 2887–2894.
23. P.-D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, and P. Domingo, "Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion," *Combust. Flame*, 157, 2010, pp. 43–61.
24. G. R. Hendra and W. K. Bushe, "The uniform conditional state model for turbulent reacting flows," *Combust. Flame*, 205, 2019, pp. 484–505.
25. M. E. Mueller, "Physically-derived reduced-order manifold-based modeling for multi-modal turbulent combustion," *Combust. Flame*, 214, 2020, pp. 287–305.
26. E. Knudsen and H. Pitsch, "A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion," *Combust. Flame*, 156, 2009, pp. 678–696.
27. A. Donini, R. J. M. Bastiaans, J. A. van Oijen, and L. P. H. de Goeij, "A 5-D Implementation of FGM for the Large Eddy Simulation of a Stratified Swirled Flame with Heat Loss in a Gas Turbine Combustor," *Flow Turbul. Combust.*, 98, 2017, pp. 887–922.
28. K. N. C. Bray, M. Champion, P. A. Libby, and N. Swaminathan, "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion," *Combust. Flame*, 146, 2006, pp. 665–673.
29. B. Jin, R. Grout, and W. K. Bushe, "Conditional Source-Term Estimation as a Method for Chemical Closure in Premixed Turbulent Reacting Flow," *Flow Turbul. Combust.*, 81, 2008, pp. 563–582.
30. P. Domingo, L. Vervisch, S. Payet, and R. Hauguel, "DNS of a premixed turbulent V flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry," *Combust. Flame*, 143, 2005, pp. 566–586.
31. M. M. Salehi and W. K. Bushe, "Presumed PDF modeling for RANS simulation of turbulent premixed flames,"

- Combust. Theory Model.*, 14, 2010, pp. 381–403.
32. H. P. Tsui and W. K. Bushe, “Linear-Eddy Model Formulated Probability Density Function and Scalar Dissipation Rate Models for Premixed Combustion,” *Flow Turbul. Combust.*, 93, 2014, pp. 487–503.
 33. M. Pfitzner, “A New Analytic PDF for Simulations of Premixed Turbulent Combustion,” *Flow Turbul. Combust.*, 106, 2020, pp. 1213–1239.
 34. A. Soli, I. Langella, and Z. X. Chen, “Analysis of Flame Front Breaks Appearing in LES of Inhomogeneous Jet Flames Using Flamelets,” *Flow Turbul. Combust.*, 108, 2022, pp. 1159–1190.
 35. M. Ghadimi, H. Atayizadeh, and M. M. Salehi, “Presumed Joint-PDF Modelling for Turbulent Stratified Flames,” *Flow Turbul. Combust.*, 107, 2021, pp. 405–439.
 36. S. Ruan, N. Swaminathan, and O. Darbyshire, “Modelling of turbulent lifted jet flames using flamelets: a priori assessment and a posteriori validation,” *Combust. Theory Model.*, 18, 2014, pp. 295–329.
 37. W. K. Bushe, C. Devaud, and J. Bellan, “A priori evaluation of the Double-conditioned Conditional Source-term Estimation model for high-pressure heptane turbulent combustion using DNS data obtained with one-step chemistry,” *Combust. Flame*, 217, 2020, pp. 131–151.
 38. O. R. Darbyshire and N. Swaminathan, “A Presumed Joint PDF Model for Turbulent Combustion with Varying Equivalence Ratio,” *Combust. Sci. Technol.*, 184, 2012, pp. 2036–2067.
 39. M. T. H. de Frahan, S. Yellapantula, R. King, M. S. Day, and R. W. Grout, “Deep learning for presumed probability density function models,” *Combust. Flame*, 208, 2019, pp. 436–450.
 40. A. Mousemi and W. Kendal Bushe, “The joint probability density function of mixture fraction, reaction progress variable, and total enthalpy in a stratified, swirl-stabilized turbulent flame,” *Phys. Fluids*, 33, 2021, p. 035106.
 41. A. W. Vreman, J. A. van Oijen, L. P. H. de Goey, and R. J. M. Bastiaans, “Subgrid Scale Modeling in Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion Using Premixed Flamelet Chemistry,” *Flow Turbul. Combust.*, 82, 2009, pp. 511–535.
 42. T. D. Dunstan, Y. Minamoto, N. Chakraborty, and N. Swaminathan, “Scalar dissipation rate modelling for Large Eddy Simulation of turbulent premixed flames,” *Proc. Combust. Inst.*, 34, 2013, pp. 1193–1201.
 43. C. Developers, “One-dimensional Flames,” *CANTERA*, Feb. 09, 2022. <https://cantera.org/science/flames.html>.
 44. B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thevenin, S. Carpentier, and N. Darabiha, “Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM,” *Combust. Theory Model.*, 7, 2003, pp. 449–470.
 45. G. V. Nivarti, J. Huang, and W. K. Bushe, “Conditional Source-Term Estimation for the Numerical Simulation of Turbulent Combustion in Homogeneous-Charge SI Engines,” *SAE 2014 International Powertrain, Fuels & Lubricants Meeting*, Warrendale, PA, USA, Oct. 2014.
 46. M. Ihme, L. Shunn, and J. Zhang, “Regularization of reaction progress variable for application to flamelet-based combustion models,” *J. Comput. Phys.*, 231, 2012, pp. 7715–7721.
 47. G. Lodier, L. Vervisch, V. Moureau, and P. Domingo, “Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds,” *Combust. Flame*, 158, 2011, pp. 2009–2016.
 48. A. Scholtissek, P. Domingo, L. Vervisch, and C. Hasse, “A self-contained composition space solution method for strained and curved premixed flamelets,” *Combust. Flame*, 207, 2019, pp. 342–355.
 49. J. A. van Oijen, F. A. Lammers, and L. P. H. de Goey, “Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds,” *Combust. Flame*, 127, 2001, pp. 2124–2134.
 50. H. Pitsch, “Large-eddy simulation of turbulent combustion,” *Annu Rev Fluid Mech*, 38, 2006, pp. 453–482.
 51. M. Mahdi Salehi, W. Kendal Bushe, N. Shahbazian, and C. P. T. Groth, “Modified laminar flamelet presumed probability density function for LES of premixed turbulent combustion,” *Proc. Combust. Inst.*, 34, 2013, pp. 1203–1211.
 52. N. Swaminathan and R. W. Bilger, “Analyses of conditional moment closure for turbulent premixed flames,” *Combust. Theory Model.*, 5, 2001, pp. 241–260.
 53. J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo, “Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner,” *Combust. Flame*, 155, 2008, pp. 247–266.
 54. G. Lecocq, S. Richard, O. Colin, and L. Vervisch, “Hybrid presumed PDF and flame surface density approaches for Large-Eddy Simulation of premixed turbulent combustion: Part 1: Formalism and simulation of a quasi-steady burner,” *Combust. Flame*, 158, 2011, pp. 1201–1214.
 55. F. E. Hernández-Pérez, C. P. T. Groth, and Ö. L. Gülder, “Large-eddy simulation of lean hydrogen–methane turbulent premixed flames in the methane-dominated regime,” *Int. J. Hydrog. Energy*, 39, 2014, pp. 7147–7157.
 56. A. Donini, R. J. M. Bastiaans, J. A. van Oijen, and L. P. H. de Goey, “Numerical Simulations of a Turbulent High-Pressure Premixed Cooled Jet Flame With the Flamelet Generated Manifolds Technique,” *J. Eng. Gas Turbines Power*, 137, 2015, pp. 071501–071509.
 57. G. M. Ottino, A. Fancello, M. Falcone, R. J. M. Bastiaans, and L. P. H. de Goey, “Combustion Modeling Including Heat Loss Using Flamelet Generated Manifolds: A Validation Study in OpenFOAM,” *Flow Turbul. Combust.*, 96, 2016, pp. 773–800.
 58. D. Farrace, K. Chung, S. S. Pandurangi, Y. M. Wright, K. Boulouchos, and N. Swaminathan, “Unstructured LES-CMC modelling of turbulent premixed bluff body flames close to blow-off,” *Proc. Combust. Inst.*, 36, 2017, pp. 1977–1985.
 59. Z. Chen, S. Ruan, and N. Swaminathan, “Large Eddy Simulation of flame edge evolution in a spark-ignited methane–air jet,” *Proc. Combust. Inst.*, 36, 2017, pp. 1645–1652.
 60. N. Peters, “The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence,” *J. Fluid Mech.*, 384, 1999, pp.

- 107–132.
61. M. J. Dunn, A. R. Masri, R. W. Bilger, R. S. Barlow, and G.-H. Wang, “The compositional structure of highly turbulent piloted premixed flames issuing into a hot coflow,” *Proc. Combust. Inst.*, 32, 2009, pp. 1779–1786.
 62. F. T. C. Yuen and Ö. L. Gülder, “Turbulent premixed flame front dynamics and implications for limits of flamelet hypothesis,” *Proc. Combust. Inst.*, 34, 2013, pp. 1393–1400.
 63. A. W. Skiba, T. M. Wabel, C. D. Carter, S. D. Hammack, J. E. Temme, and J. F. Driscoll, “Premixed flames subjected to extreme levels of turbulence part I: Flame structure and a new measured regime diagram,” *Combust. Flame*, 189, 2018, pp. 407–432.
 64. A. M. Steinberg, P. E. Hamlington, and X. Zhao, “Structure and dynamics of highly turbulent premixed combustion,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, 85, 2021, p. 100900.
 65. H. Pitsch, H. Barths, and N. Peters, “Three-Dimensional Modeling of NOx and Soot Formation in DI-Diesel Engines Using Detailed Chemistry Based on the Interactive Flamelet Approach,” *SAE International Fall Fuels and Lubricants Meeting and Exhibition*, Warrendale, PA, USA, Oct. 1996.
 66. M. Ihme and H. Pitsch, “Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model,” *Combust. Flame*, 155, 2008, pp. 70–89.
 67. P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante, “Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow,” *Combust. Flame*, 152, 2008, pp. 415–432.
 68. Y. Minamoto and N. Swaminathan, “Subgrid scale modelling for MILD combustion,” *Proc. Combust. Inst.*, 35, 2015, pp. 3529–3536.
 69. J. Kariuki, J. R. Dawson, and E. Mastorakos, “Measurements in turbulent premixed bluff body flames close to blow-off,” *Combust. Flame*, 159, 2012, pp. 2589–2607.
 70. J. Smagorinsky, “General circulation experiments with the primitive equations,” *Mon. Weather Rev.*, 91, 1963, pp. 99–164.
 71. T. Ma, Y. Gao, A. M. Kempf, and N. Chakraborty, “Validation and implementation of algebraic LES modelling of scalar dissipation rate for reaction rate closure in turbulent premixed combustion,” *Combust. Flame*, 161, 2014, pp. 3134–3153.
 72. M. Zhao and H. Zhang, “Large eddy simulation of non-reacting flow and mixing fields in a rotating detonation engine,” *Fuel*, 280, 2020, p. 118534.
 73. S. B. Pope, *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
 74. C. Y. Lee and S. Cant, “Assessment of LES Subgrid-scale Models and Investigation of Hydrodynamic Behaviour for an Axisymmetrical Bluff Body Flow,” *Flow Turbul. Combust.*, 98, 2017, pp. 155–176.

English Abstract

Assessment of the progress variable variance modelling on large-eddy simulation of turbulent premixed flames using flamelet-generated manifold model

Mohammad Mahdi Salehi^{1*}, Hassan Atayizadeh²

1- Assistant Professor, Aerospace Engineering Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, mmsalehi@sharif.edu

2- Ph.D. Student, Aerospace Engineering Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, hassan.atayizadeh@ae.sharif.edu

*Corresponding author

(Received: 2022/03/16, Received in revised form: 2022/04/24, Accepted: 2022/05/07)

The objective of this paper is two-fold: a comprehensive literature review of the combustion model based on the laminar flamelet assumption; and implementation, application and sensitivity analysis of one of these flamelet models for simulation of turbulent premixed flames. Large-eddy simulation is one of the most reliable approaches in turbulence modelling. Since the computational cost of this approach is substantially more significant than the Reynolds-averaged Navier-Stokes models, the most economical and thus widely-used combustion models in the context of large-eddy simulation are models based on the flamelet assumption. Nevertheless, flamelet models have known shortcomings presented and discussed in detail in this work. The Flamelet-Generated Manifold (FGM) model is one of these models utilized in this work for a large-eddy simulation of a turbulent flame stabilized behind a bluff body. The results show that the accuracy of this model depends on the sub-grid scale variance. An algebraic model was used to approximate the variance, but the results were not accurate enough; so that the flame height was under-estimated by approximately 30%, and the error in the mean axial velocity was more than 60% at some points in the domain. However, solving a transport equation for this quantity improves the accuracy of the predictions.

Keywords: Turbulent combustion, combustion modelling, flamelet model, large-eddy simulation