

مقایسه شبیه‌سازی احتراق پیش‌آمیخته آشفته با روش‌های PDF و RANS

احسان امانی* و محمد رضا حیرانی نوبری**
دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی مکانیک
(دریافت: ۱۳۸۹/۱/۲۰، پذیرش: ۱۳۸۹/۷/۱۴)

در این پژوهش یک شعله پیش‌آمیخته آشفته متان- هوا به دو روش تابع چگالی احتمال (PDF) و معادلات متوسط‌گیری شده رینولدزی (RANS) شبیه‌سازی شده است. برای مدل‌سازی اختلاط مولکولی در روش PDF از مدل تصحیح‌شده کرل (Curl) استفاده شده است. حل عددی معادله انتقال PDF با استفاده از روش مونت‌کارلو انجام شده و برای افزایش دقت و کاهش زمان محاسباتی، گام زمانی محلی و متوسط‌گیری زمان اجرا به کار رفته است. در معادلات RANS جمله متوسط نرخ واکنش شیمیایی با استفاده از مدل شکست گردابه- نرخ محدود، مدل‌سازی شده و روش اختلاف محدود بر روی یک شبکه جابه‌جا شده برای حل عددی این معادلات استفاده شده است. ویژگی‌ها و تفاوت‌های دو روش مذکور، از جمله زمان محاسباتی و پیش‌بینی میدان‌های متوسط برای شعله‌های پیش‌آمیخته، با جزئیات و به طور کمی مقایسه شده‌اند. ملاحظه شده که میدان‌های متوسط پیش‌بینی شده در نواحی نزدیک به شعله دارای اختلاف زیادی هستند، همچنین طول شعله پیش‌آمیخته پیش‌بینی شده به روش PDF، نصف طول پیش‌بینی شده به روش RANS است.

واژگان کلیدی: احتراق پیش‌آمیخته، تابع چگالی احتمال (PDF)، آشفته، مونت‌کارلو

مقدمه

ماهیت پیچیده آشفستگی در تعامل با واکنش‌های شیمیایی سبب می‌شود که احتراق آشفته به یکی از پیچیده‌ترین مباحث مکانیک سیالات تبدیل شود. معادلات حاکم برای توصیف احتراق آشفته و به طور کلی جریان‌های آشفته را می‌توان در دو گروه دسته‌بندی کرد. در گروه اول، همه یا قسمتی از مقیاس‌های جریان به طور دقیق حل می‌شود. روش‌های شبیه‌سازی عددی دقیق (DNS- Direct Numerical Simulation) و شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES- Large Eddy Simulation) در این گروه قرار دارند. در گروه دوم که "مدلسازی" نامیده می‌شود، همه مقیاس‌های جریان مدل‌سازی می‌شود که شامل روش‌های مبتنی بر متوسط‌گیری معادلات جریان و روش‌های تابع چگالی احتمال (PDF-Probability Density Function) هستند. در زمینه مدل‌سازی احتراق آشفته، روش‌های رایج از قبیل معادلات متوسط‌گیری شده رینولدزی (RANS- Reynolds Averaged Navier-Stokes)، علاوه بر دقت پایین، تنها در گستره خاصی از مسایل احتراقی قابل استفاده هستند. مشکل اصلی در این روش‌ها، مدل‌سازی جمله نرخ واکنش شیمیایی متوسط‌گیری شده است.

رایج‌ترین مدلی که در روش RANS استفاده می‌شود، مدل اتلاف گردابه (EDM- Eddy Dissipation Model) [۱] است که از اصلاح مدل شکست گردابه (EBU- Eddy Berak Up) به دست آمده است. دقت این مدل شدیداً به تعیین دقیق مقیاس زمانی آشفستگی وابسته است. مدل‌های دیگری نیز برای مدل‌سازی نرخ واکنش شیمیایی متوسط‌گیری شده، به طور مجزا برای احتراق پیش‌آمیخته آشفته مانند مدل BML (Bray Moss Libby) [۲] و یا احتراق نفوذی آشفته مانند مدل EDC (Eddy Dissipation Concept) [۳] ارائه شده‌اند. اما به دلیل غیر خطی بودن شدید جمله نرخ واکنش شیمیایی، همه این مدل‌ها در حالت کلی از دقت کمی برخوردارند.

* دانشجوی دکتری (ایمیل: eamani@aut.ac.ir)

** دانشیار - نویسنده مخاطب (ایمیل: mrnobar@aut.ac.ir)

در روش تابع چگالی احتمال (PDF) که بر اساس توصیف آماری آشفتگی گسترش یافته است، میزان قابل توجهی از مشکل مدلسازی غیردقیق کاسته می‌شود. به این ترتیب که جملات چشمه ناشی از واکنش شیمیایی در معادلات متوسط‌گیری شده بر خلاف روش‌های متداول RANS، نیاز به مدلسازی نداشته و به طور دقیق منظور می‌شود. روش‌های PDF به دو گروه (حل) معادله انتقال PDF و روش PDF از پیش فرض شده (Presumed PDF) تقسیم می‌شوند. اما در روش PDF از پیش فرض شده، PDF متغیرهای جریان معلوم فرض می‌شود که دقت این روش را محدود به گستره خاصی از مسائل می‌کند. روش حل معادله انتقال PDF، در سال ۱۹۶۹ آغاز شد. لاندگرن [۴] یک معادله انتقال را برای PDF سرعت، استخراج، مدلسازی و حل کرد. در این معادله، جابه‌جایی به طور دقیق در نظر گرفته می‌شود. در حالی که در روش‌های RANS، یک مدل برای تعیین تنش‌های رینولدزی مورد نیاز است. دوپازو، ابراین [۵، ۶] و پ [۷] معادله انتقال PDF ترکیبی (Composition PDF) را استخراج، مدلسازی و حل کردند. این PDF، تابع چگالی احتمال توأم یک سری اسکالر (کسرهای جرمی و انتالپی) است که حالت شیمیایی - گرمایی جریان را مشخص می‌کند. این معادله از این رو قابل توجه است که واکنش‌هایی با هر مقدار پیچیدگی بدون تقریب و به طور دقیق قابل اعمال هستند. معادله PDF ترکیبی برای جریان‌های مختلفی حل شده است. برای نمونه، پ [۸] و مک نات [۹] شعله‌های پیش آمیخته آشفته را مورد بررسی قرار دادند.

معادله انتقال PDF، یک معادله دیفرانسیل جزئی با تعداد زیادی متغیر مستقل (بعد) است. بنابراین، حل عددی آن با استفاده از روش‌های استاندارد CFD (Computational Fluid Dynamics) مانند اختلاف محدود، حجم محدود و غیره که هزینه محاسباتی آن‌ها با افزایش ابعاد مسئله به طور نمایی افزایش می‌یابد، امکان‌پذیر نیست. در سال ۱۹۸۰ پ [۱۰] یک روش مونت کارلو برای حل معادله PDF ترکیبی ارائه کرد. در این روش با تغییر ابعاد PDF، امکان‌ات مورد نیاز رایانه به طور خطی تغییر می‌کند. روش مونت کارلو به شیوه‌های شبه‌اویلری [۱۰] و لاگرانژی [۱۱] قابل اعمال است.

دقت بیشتر روش PDF نسبت به روش RANS در شبیه‌سازی مسائل احتراقی، به ویژه احتراق نفوذی بارها نشان داده شده است [۱۲ و ۱۳]. در این مقاله قصد داریم، ویژگی‌ها و تفاوت‌های شبیه‌سازی به دو روش مذکور برای احتراق پیش‌آمیخته را با جزئیات و به طور کمی بررسی کنیم. لازم به ذکر است که شعله‌های پیش‌آمیخته کمتر با روش PDF مطالعه شده‌اند.

مدل‌سازی ریاضی

معادلات حاکم با فرض عدد ماخ پایین و صرف‌نظر از اثر تابش، در دو قسمت "معادلات جریان" شامل معادله پیوستگی و تکانه (Momentum) و "معادلات اسکالرها" شامل معادلات انرژی و اجزای شیمیایی بیان می‌شوند.

معادلات جریان

برای هر متغیر جریان (ϕ)، معادله انتقال به صورت متوسط‌گیری شده و دو بعدی در دستگاه کارتزین به شکل عمومی زیر بیان می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\phi} - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi} - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y}) = S_{\phi} \quad (1)$$

علامت "-" و "~" به ترتیب نشان‌دهنده متوسط‌های رینولدزی و وزن داده شده با چگالی هستند. در معادله بالا x و y جهت‌های مختصات، $\bar{\rho}$ چگالی متوسط، \tilde{u} و \tilde{v} مولفه‌های سرعت متوسط، Γ_{ϕ} ضریب نفوذ متغیر ϕ و S_{ϕ} جمله چشمه است. با استفاده از تقریب بوزینسک (Boussinesq)، Γ_{ϕ} به صورت زیر بیان می‌شود.

$$\Gamma_{\phi} = \Gamma_l + \frac{\mu_l}{\sigma_{\phi}} \quad (2)$$

که در آن Γ_l ضریب نفوذ مولکولی متغیر ϕ و μ_l لزجت آشفتگی بوده که با استفاده از متوسط انرژی جنبشی آشفتگی \tilde{k} و نرخ اتلاف $\tilde{\epsilon}$ به صورت زیر قابل بیان است.

$$\mu_i = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (۳)$$

ضریب تجربی C_μ برابر ۰/۰۹ انتخاب می‌شود. در اینجا از مدل آشفتگی $k-\varepsilon$ [۱۴] به همراه توابع دیوار [۱۵] برای محاسبه \tilde{k} و $\tilde{\varepsilon}$ استفاده شده است. متغیرهای مختلف φ و متغیرهای مربوط به معادله انتقال هر کدام (معادله (۱)) در جدول (۱) آورده شده است.

جدول ۱- معادلات RANS برای متغیرهای جریان

نوع معادله	φ	σ_φ	S_φ
پیوستگی	۱	۱	0
تکانه محوری	\tilde{u}	۱	$\frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x}$
تکانه شعاعی	\tilde{v}	۱	$\frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial y}$
انرژی آشفتگی	\tilde{k}	۱	$P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}$
میرایی انرژی آشفتگی	$\tilde{\varepsilon}$	۱/۳	$(\tilde{\varepsilon} / \tilde{k}) (C_{e1} P_k - C_{e2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon})$
متغیرهای ثابت	$C_{e1} = 1.44, C_{e2} = 1.92$		
سایر جملات	$\mu_e = \mu_i + \mu_t$ $P_k = \mu_i \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right)^2 \right\}$		

برای تعیین چگالی متوسط، از معادله حالت گاز ایدئال به صورت زیر استفاده می‌شود.

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{RT \sum_{\alpha=1}^N \tilde{Y}_\alpha / W_\alpha} \quad (۴)$$

که در آن \bar{p} فشار متوسط، R ثابت عمومی گازها، \tilde{T} دمای متوسط، N تعداد اجزای شیمیایی، \tilde{Y}_α متوسط کسر جرمی جزء شیمیایی α ام و W_α وزن مولی این جزء است. همان‌طور که در ادامه شرح داده خواهد شد، متغیرهای اسکالر شامل \tilde{T} و \tilde{Y}_α با استفاده از حل معادله انتقال PDF ترکیبی و یا از حل معادلات RANS برای اسکالرها به دست می‌آیند.

معادلات انتقال اسکالرها

چنانچه کلیه اسکالره‌های جریان به صورت مولفه‌های یک بردار $\vec{\Phi}$ (بردار حالت) نمایش داده شود،

$$\vec{\Phi} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) \quad (۵)$$

معادله‌ی انتقال PDF توام متغیرهای $\vec{\Phi}$ با استفاده از روش‌های مختلف [۱۶] به صورت زیر قابل استخراج است.

$$\frac{\partial \tilde{f}(\vec{\psi})}{\partial t} + \tilde{U}_i \frac{\partial \tilde{f}(\vec{\psi})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} (S_\alpha(\vec{\psi}) \tilde{f}(\vec{\psi})) = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \langle u_i'' | \vec{\Phi} = \vec{\psi} \rangle \tilde{f}(\vec{\psi}) \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\{ \left[\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{i,\alpha} \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial x_i} \right) \right] \vec{\Phi} = \vec{\psi} \right\} \tilde{f}(\vec{\psi}) \quad (۶)$$

که در آن علامت $\langle \cdot | \cdot \rangle$ نشان‌دهنده متوسط شرطی و $\vec{\psi}$ فضای نمونه بردار حالت $\vec{\Phi}$ نامیده می‌شود. جمله‌های سمت راست معادله که شامل اثر واکنش شیمیایی نیز هستند (جمله سوم) به طور دقیق و بدون نیاز به مدلسازی منظور می‌شوند. جمله‌های سمت چپ معادله شامل متوسط شرطی بوده و مجهولات اضافی هستند که باید مدل شوند. جمله اول با استفاده از فرض گرادیان نفوذی (Gradient diffusion) مدلسازی می‌شود. برای جمله دوم که ناشی از اختلاط مولکولی است، مدل‌های

مختلفی موجود است [۱۶]. در اینجا مدل تصحیح شده کرل (Modified Curl's model or MC) [۱۷] به کار برده می‌شود. در این مدل مقیاس زمانی آشفتگی ($\tau_i = \tilde{k} / \tilde{\varepsilon}$) به عنوان ورودی مورد نیاز است که از معادلات جریان (بخش ۲-۱) به دست می‌آید. در نهایت، معادله مدل شده انتقال PDF ترکیبی به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\frac{\partial \tilde{f}(\tilde{\psi})}{\partial t} + \tilde{U}_i \frac{\partial \tilde{f}(\tilde{\psi})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} (S_\alpha(\tilde{\psi}) \tilde{f}(\tilde{\psi})) = \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_i}{\sigma_\phi} \frac{\partial \tilde{f}(\tilde{\psi})}{\partial x_i} \right] + M(\tilde{\psi}) \quad (7)$$

در معادله‌ی بالا ضریب تجربی σ_ϕ برای جریان واکنشی برابر 0.7 و $M(\tilde{\psi})$ مدل اختلاط مولکولی است که در اینجا با مدل تصحیح شده کرل بیان شد. طریقه اعمال این مدل در روش مونت کارلو در بخش بعدی تشریح می‌شود. جمله S_α نرخ تغییر ψ_α (جزء شیمیایی یا دما) در اثر واکنش شیمیایی است (مشابه با جدول (۲) برای روش RANS ولی با مقادیر لحظه‌ای به جای متوسط).

چنانچه به جای روش PDF ترکیبی، از معادلات RANS برای بیان اسکالرها استفاده شود، این معادلات نیز در شکل عمومی معادله (۱) قابل بیان بوده که متغیرهای مختلف آن در جدول (۲) آورده شده است.

جدول ۲- معادلات RANS برای اسکالرها

نوع معادله	ϕ	Γ_ϕ	σ_ϕ	S_ϕ
کسر جرمی گونه‌ها $\alpha = 1, 2, \dots, N$	\tilde{Y}_α	$\tilde{\rho} D_\alpha$	0.7	$\tilde{\omega}_\alpha$
انرژی	\tilde{T}	$\frac{\lambda}{c_p}$	0.85	$-\frac{1}{c_p} \sum_{\alpha=1}^N h_{ref,\alpha} \tilde{\omega}_\alpha$

λ و c_p به ترتیب رسانایی و گرمای ویژه فشار ثابت مخلوط، $h_{ref,\alpha}$ انتالپی تشکیل و $\tilde{\omega}_\alpha$ متوسط نرخ تولید جزء شیمیایی α است. برای حل معادلات در روش RANS باید جملات $\tilde{\omega}_\alpha$ معلوم باشند. در اینجا برای مدل‌سازی این جملات از مدل اتلاف گردابه-نرخ محدود استفاده می‌شود که در آن نرخ هر واکنش به صورت کمینه نرخ آرنیوس و نرخ مدل اتلاف گردابه [۱] در نظر گرفته می‌شود.

روش حل عددی

معادلات جریان (جدول (۱))، با استفاده از الگوریتم سیمپلر (SIMPLE) [۱۸] حل می‌شوند. برای تجزیه معادلات، از روش اختلاف محدود با دقت مرتبه دوم روی یک شبکه جابه‌جا شده استفاده می‌شود. برای پایداری، جملات جابه‌جایی با استفاده از طرح بالادست و جملات نفوذ با استفاده از طرح اختلاف مرکزی گسسته می‌شوند. دستگاه معادلات جبری حاصل از تجزیه معادلات با روش TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm) [۱۸] حل می‌شود. برای معادلات اسکالر در قالب RANS (جدول (۲))، روش عددی مانند معادلات جریان اعمال می‌شود.

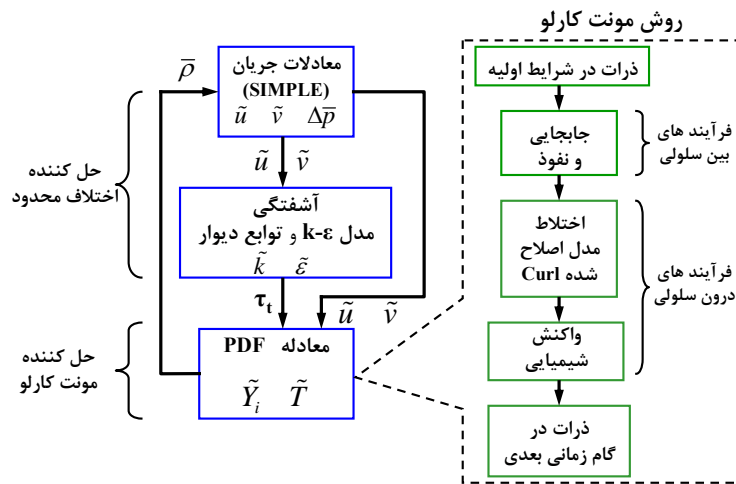
برای حل معادله انتقال PDF ترکیبی (معادله (۷))، از روش مونت کارلوی شبه‌اویلری [۱۰] استفاده می‌شود. در یک کد شبه‌اویلری، میدان محاسباتی به M سلول محاسباتی تقسیم می‌شود. موقعیت مرکز سلول ℓ ام را با بردار \tilde{x}_ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, M$) مشخص می‌کنند. در هر سلول محاسباتی، N_ℓ ذره محاسباتی در نظر گرفته می‌شود. این ذرات، ذرات تصادفی نامیده می‌شوند. نیاز نیست که تعداد ذرات تصادفی در سلول‌های شبکه مساوی باشد. به هر ذره تصادفی، یک سری خواص متناظر با بردار حالت (معادله (۵)) نسبت داده می‌شود. یعنی ذره n ام، نمایانگر یک مقدار $\bar{\Phi}^{(n)}(t)$ برای بردار حالت است.

$$\bar{\Phi}^{(n)}(t) = (Y_1^{(n)}(t), Y_2^{(n)}(t), \dots, Y_N^{(n)}(t), T^{(n)}(t)) \quad (8)$$

چنانچه مقادیر خواص ذرات در زمان t در هر سلول شبکه مشخص باشد، مقدار تابع PDF و نیز هر یک از خواص آماری قابل محاسبه‌اند. برای نمونه مقدار متوسط کمیت ϕ در هر سلول از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\tilde{\varphi}(\bar{x}_\ell, t) = \frac{1}{N_\ell} \sum_{n=1}^{N_\ell} \varphi^{(n)}(t) \quad (9)$$

که متوسط‌گیری بر روی ذرات موجود در سلول ℓ ام انجام می‌شود. مقدار اولیه خواص ذرات ($\bar{\Phi}^{(n)}(t=0)$) با توجه به شرایط اولیه مسئله تعیین می‌شود. در حین حل و در طی هر گام زمانی، ذرات در اثر فرآیندهای جابه‌جایی و نفوذ بین سلول‌های شبکه جابه‌جا می‌شوند. همچنین خواص ذرات در اثر فرآیندهای اختلاط مولکولی و واکنش شیمیایی تغییر می‌یابند. توجه شود که معادلات جریان و معادلات اسکالرها از طریق $\bar{\rho}$ و τ_i کوپل هستند. بنابراین، حل کننده مونت کارلو برای اسکالرها و اختلاف محدود برای معادلات جریان به طور همزمان و در الگوریتمی پیوندی اجرا می‌شود. روند نمای کد محاسباتی در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱ - روند نمای کد محاسباتی در روش PDF ترکیبی

برای جزئیات بیشتر هر یک از مراحل الگوریتم مونت کارلو می‌توان به مراجع [۱۳]، [۱۹] و [۲۰] مراجعه کرد. در اینجا برای نمونه، مرحله اختلاط مولکولی با روش تصحیح شده کرل تشریح می‌شود.

برای اعمال مدل تصحیح شده کرل در سلول ℓ ام، تعداد n_{mc} جفت از ذرات این سلول بدون جایگذاری انتخاب می‌شود.

$$n_{mc} = \text{int} \left(\frac{3}{2} C_\phi N_\ell \frac{\Delta t}{\tau_i} \right) \quad (10)$$

که در آن Δt گام زمانی شبیه‌سازی، $C_\phi = 2.0$ ثابت مدل و تابع $\text{int}(\cdot)$ نزدیک‌ترین عدد صحیح به آرگومان ورودی را نتیجه می‌دهد. حال هر جفت از این ذرات انتخاب شده با یک جفت ذره، که خواص آن‌ها از ترکیب خواص دو ذره اولیه به دست می‌آید، جایگزین می‌شود. یعنی چنانچه دو ذره n و m یک جفت را تشکیل دهند، دو ذره جایگزین دارای خواص زیر هستند که ξ یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه (۰، ۱) است.

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}^{(m),new} &= \xi \bar{\Phi}^{(n)} + (1-\xi) \bar{\Phi}^{(m)} \\ \bar{\Phi}^{(n),new} &= \xi \bar{\Phi}^{(m)} + (1-\xi) \bar{\Phi}^{(n)} \end{aligned} \quad (11)$$

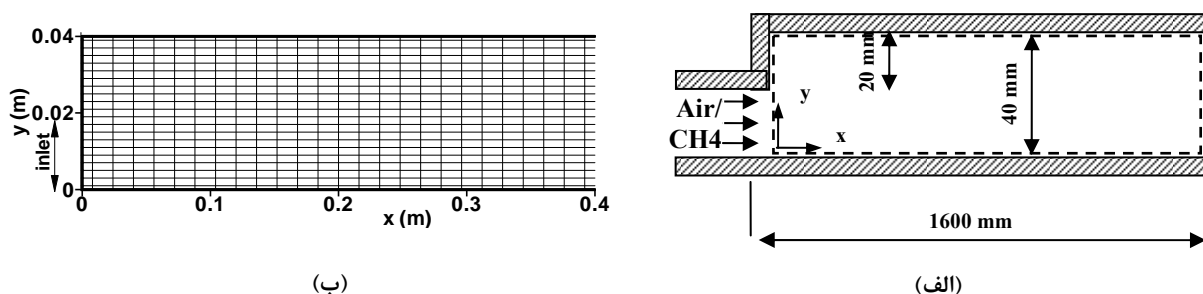
روش‌های مونت کارلو همراه با خطای آماری هستند. در جریان‌های از نظر آماری دایم (Statistically stationary)، می‌توان زمان محاسباتی و خطای آماری را با استفاده از روش گام زمانی محلی (Local time stepping) [۲۱] کاهش داد. همچنین در اینجا از روش متوسط‌گیری زمان اجرا (Runtime averaging) [۱۹] نیز استفاده می‌شود تا خطای آماری باز هم کمتر شود. شبیه‌سازی با استفاده از کد محاسباتی تهیه شده در کار مرجع [۱۸] انجام شده است. برای بحث مفصل درباره تایید اعتبار کد محاسباتی به کار رفته، می‌توان به همین مرجع و نیز مرجع [۲۰] مراجعه کرد. شرایط مرزی برای شبیه‌سازی انجام شده در بخش بعد معرفی شده‌اند.

نتایج و بحث

شبهه‌سازی برای یک شعله پیش‌آمیخته متان و هوا در یک کانال با تغییر مقطع ناگهانی مشابه با شعله مورد استفاده در کار تجربی [۲۲] انجام شده است (شکل (۲-الف)). ابعاد کانال برابر $0.04 \times 0.157 \times 0.04$ متر است و یک پله در ورودی به ارتفاع $h = 0.02$ m باعث انبساط جریان می‌شود. با فرض زیاد بودن عرض کانال در برابر ارتفاع آن و دور از دیواره‌های جانبی کانال، جریان دوبعدی صفحه‌ای فرض می‌شود. مخلوط سوخت و هوای ورودی با نسبت هم‌ارزی 0.9 ، سرعت یکنواخت $1/553$ متر بر ثانیه و دمای 273 کلوین وارد محفظه احتراق می‌شود. شدت آشفته‌گی (I_t) در ورودی 0.5 فرض می‌شود. شرایط مرزی ورودی برای \tilde{k} و $\tilde{\epsilon}$ نیز از رابطه‌های زیر تخمین زده می‌شود.

$$\tilde{k}_{inlet} = \frac{3}{2} \left(\left| \tilde{U}_{inlet} \right| I_t \right)^2, \quad \tilde{\epsilon}_{inlet} = C_\mu^{3/4} \frac{\tilde{k}_{inlet}^{3/2}}{0.07 D_h} \quad (12)$$

که در آن D_h قطر هیدرولیکی ورودی است. دیواره‌های پایینی و بالایی کانال، بی‌دررو فرض شده و خروجی به اندازه‌های در پایین دست فرض می‌شود که جریان توسعه یافته باشد. شبکه محاسباتی که شبکه‌ای یکنواخت با 20×10 سلول در جهت $x-y$ است در شکل (۲-ب) نشان داده شده است.



شکل ۲- (الف) هندسه شعله پیش‌آمیخته (خط‌چین: ناحیه محاسباتی)، (ب) قسمتی از شبکه محاسباتی (0.4 متر ابتدای محفظه)

برای سازوکار واکنشی احتراق متان در این مقاله از سازوکار دو مرحله‌ای وست‌بروک-درایر (Westbrook-Drier) [۲۳] استفاده شده است. اگر چه این سازوکار ساده قادر به پیش‌بینی اجزای شیمیایی فرعی احتراق نیست، اما برای پیش‌بینی دما و اجزای اصلی در شعله‌های پیش‌آمیخته با نسبت هم‌ارزی کوچک‌تر از ۱ بسیار مناسب است [۲۴]. این سازوکار شامل دو مرحله زیر است.



که در آن نرخ‌های واکنش ($kmol/m^3 \cdot sec$) به صورت زیر هستند.

$$\begin{aligned} RR_I &= 1.15 \times 10^9 \rho Y_{CH_4}^{-0.3} Y_{O_2}^{1.3} \exp(-24444/T) \\ RR_{II} &= 5.42 \times 10^9 \rho^{1.75} Y_{CO}^{0.5} Y_{H_2O}^{0.25} Y_{O_2} \exp(-15152/T) \end{aligned} \quad (14)$$

عدد رینولدز جریان در ورودی محفظه بر اساس قطر هیدرولیکی ورودی برابر با 23976 است. عدد دامکالر (Damkohler) نیز به صورت نسبت مقیاس زمانی انتگرالی آشفته‌گی به مقیاس زمانی احتراق تعریف می‌شود [۲۵].

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{\tilde{k}/\tilde{\epsilon}}{\delta/S_L^0} \quad (15)$$

که در آن δ ضخامت شعله و S_L^0 سرعت شعله صفحه‌ای یک‌بعدی بدون کشش (Unstretched) آرام است. ضخامت شعله پیش‌آمیخته به صورت $\delta \approx \lambda / \rho c_p S_L^0$ تخمین زده می‌شود [۲۵]. برای S_L^0 نیز حل‌های تحلیلی، عددی و نتایج آزمایشگاهی موجود است. برای شعله متان با نسبت هم‌ارزی 0.9 و در فشار و دمای استاندارد، S_L^0 تقریباً برابر 0.3 m/s است [۲۵]. عدد

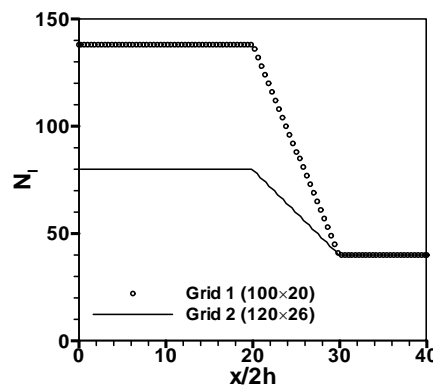
بی‌بعد مهم دیگر، عدد کارلوویتز (Karlovitz) است که به صورت نسبت مقیاس زمانی احتراق به مقیاس زمانی کلموگورف (Kolmogorov) تعریف می‌شود [۲۵].

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta / S_L^0}{(\nu / \bar{\epsilon})^{1/2}} \quad (16)$$

که در آن ν گرانیروی دینامیکی است. با توجه به شرایط ورودی داریم $Da \approx 380$ و $Ka \approx 0.07$. با توجه به مقادیر اعداد بی‌بعد ($Ka < 1, u' < S_L^0$)، شعله در رژیم جریان فلیملت چین‌خورده (Wrinkled Flamelet) قرار دارد [۲۵].

کلیه شبیه‌سازی‌ها توسط یک رایانه با مشخصات (Core II Duo CPU of 1.86 GHz, 2 GB RAM) انجام شده است. شبیه‌سازی RANS در حدود ۲۰ دقیقه به طول می‌انجامد. در شبیه‌سازی PDF برای اینکه محاسبات بهینه باشد، باید تعداد ذرات محاسباتی در نواحی مهم‌تر مانند نواحی شعله بیشتر (برای کاهش خطای آماری) و همین‌طور در نواحی کم‌اهمیت تعداد کمی ذره حضور داشته باشد (برای کاهش زمان محاسباتی). برای این منظور، تعداد ذرات در سلول‌های محاسباتی شبکه در جهت x متغیر انتخاب شده است. در شکل (۳)، (شبکه ۱)، تعداد ذرات در هر سلول بر حسب x رسم شده است. با توزیع در نظر گرفته شده، تعداد ذرات تصادفی در کل ناحیه محاسباتی برابر ۲۰۲۲۴۰ ذره است. برای کاهش زمان محاسباتی از جواب شبیه‌سازی RANS به عنوان شرط اولیه شبیه‌سازی PDF استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی PDF، ابتدا محاسبات برای ۹۰۰۰ گام زمانی اجرا می‌شود تا جواب به شرایط دایم (از نظر آماری) برسد. سپس به منظور کاهش خطا، ۵۰۰۰ گام زمانی دیگر همراه با متوسط‌گیری زمان اجرا، طی می‌شود. کل زمان اجرای شبیه‌سازی PDF حدود ۱۸ ساعت است.

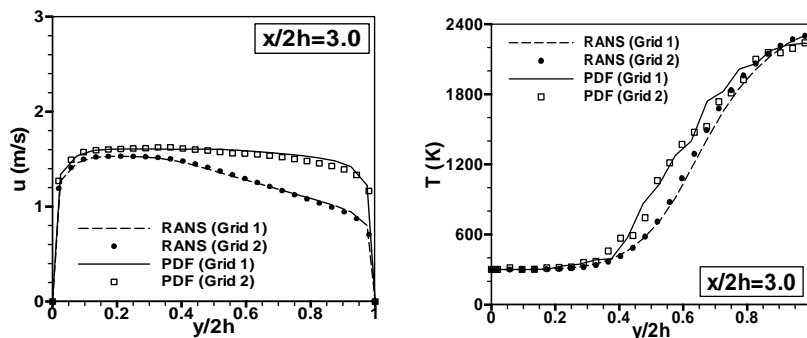
برای نشان دادن استقلال از شبکه نتایج، یک شبکه دیگر (شبکه ۲) با 120×26 سلول در جهت $x-y$ نیز در نظر گرفته شده است و شبیه‌سازی‌های RANS و PDF با استفاده از این شبکه تکرار شده است. با توجه به تعداد بیشتر سلول‌ها در این شبکه، برای شبیه‌سازی PDF توزیع ذرات تصادفی به گونه‌ای انتخاب شده که تعداد ذرات در کل میدان تقریباً با حالت قبل برابر باشد تا هزینه محاسباتی افزایش زیادی نداشته باشد. این توزیع ذرات در شکل (۳)، (شبکه ۲)، نشان داده شده است. تعداد کل ذرات با این توزیع برابر با ۲۰۲۵۴۰ ذره است. همان‌طور که در شکل (۳) دیده می‌شود، در شبکه ۲ تعداد ذرات در هر سلول نسبت به شبکه ۱ کمتر است. این امر باعث افزایش خطای آماری در روش مونت کارلو خواهد شد. اما در اینجا با به‌کارگیری روش متوسط‌گیری زمان اجرا [۱۹] این مشکل تا حد زیادی جبران می‌شود.



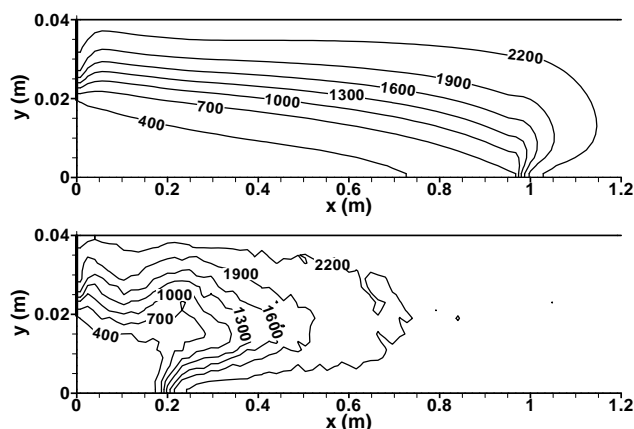
شکل ۳- تغییر تعداد ذرات موجود در هر سلول محاسباتی در طول محفظه احتراق برای دو شبکه محاسباتی معرفی شده

دو نمونه از نتایج شبیه‌سازی در هر دو شبکه ذکر شده و برای هر دو روش RANS و PDF در شکل (۴) نمایش داده شده است. اختلاف کوچک نتایج دو شبکه، استقلال از شبکه را برای نتایج به دست آمده نشان می‌دهد. توجه شود که طول ناحیه محاسباتی برابر ۱/۶ متر است ولی برای وضوح بیشتر بعضی نتایج در قسمتی از آن نمایش داده شده است. در شکل‌های (۵) و (۷)، مقیاس محور x نسبت به محور y ، ده برابر کوچک‌تر است. در شکل (۵) کانتورهای دمای متوسط، محاسبه شده با دو روش RANS و PDF نشان داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، ناحیه شعله در روش RANS خیلی وسیع‌تر از این

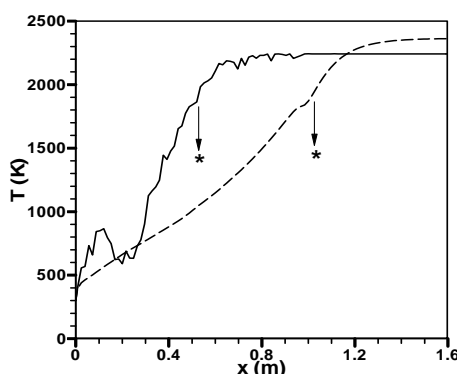
ناحیه در روش PDF است. این مسئله در نمودار نشان داده شده در شکل (۶) با وضوح بیشتری دیده می‌شود. در این نمودار موقعیت نوک شعله که در اینجا متناظر با بیشینه گرادیان محوری دمای متوسط انتخاب شده، برای دو روش شبیه‌سازی نشان داده شده است. دمای متوسط در نوک شعله، برابر ۱۹۰۰ کلوین است. با توجه به این نمودار، نوک شعله در روش RANS در $x=1/0.2$ و در روش PDF در $x=0.53$ قرار دارد. همان‌طور که دیده می‌شود، بیشینه دما (در خروجی) توسط روش RANS برابر ۲۳۶۰ کلوین و توسط روش PDF برابر ۲۲۴۰ کلوین پیش‌بینی شده است.



شکل ۴- بررسی استقلال از شبکه برای شبیه‌سازی‌های انجام شده. چپ: توزیع سرعت، راست: توزیع دما



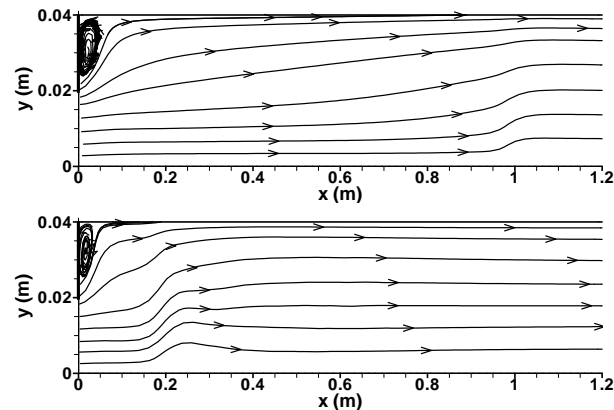
شکل ۵- کانتورهای \bar{T} ، بالا: روش RANS، پایین: روش PDF



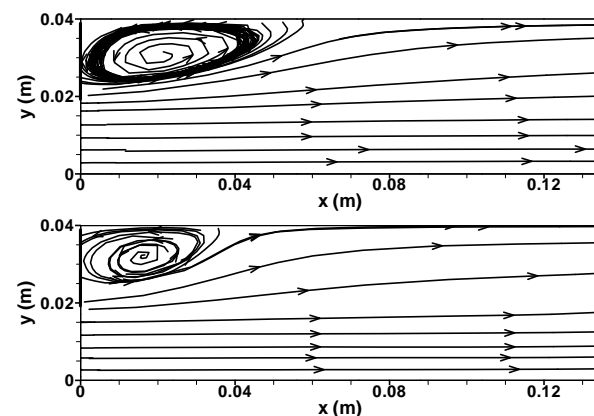
شکل ۶- نمودار تغییر \bar{T} در طول محفظه، خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS. علامت *: نوک شعله

خطوط جریان برای دو روش شبیه‌سازی نیز در شکل (۷) نشان داده شده‌اند. گردابه ایجاد شده در اثر تغییر ناگهانی مقطع جریان در پشت پله، در این شکل قابل مشاهده است. برای اینکه ناحیه نشان داده شده در شکل، نوک شعله را (که محل

شتاب گرفتن جریان و اعوجاج خطوط جریان است) در هر دو روش شامل شود، مقیاس دو محور x و y ، همان طور که در قبل هم اشاره شد، در شکل (۷) متفاوت انتخاب شده است. در شکل (۸) ناحیه نزدیک به ورودی این بار با مقیاس یکسان رسم شده است. همان طور که در این شکل دیده می‌شود، اندازه گردابه ایجاد شده در روش RANS بزرگ‌تر از روش PDF است.



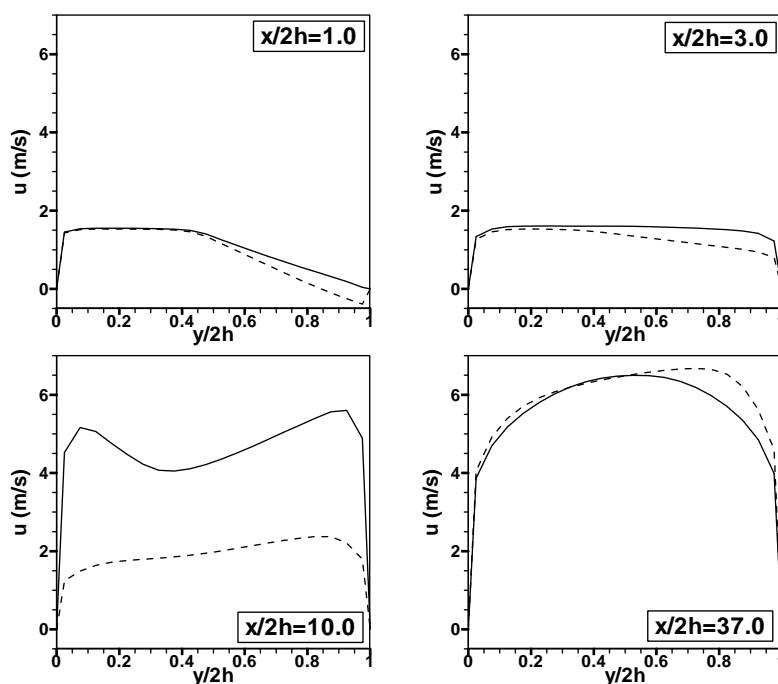
شکل ۷- خطوط جریان، بالا: روش RANS، پایین: روش PDF.



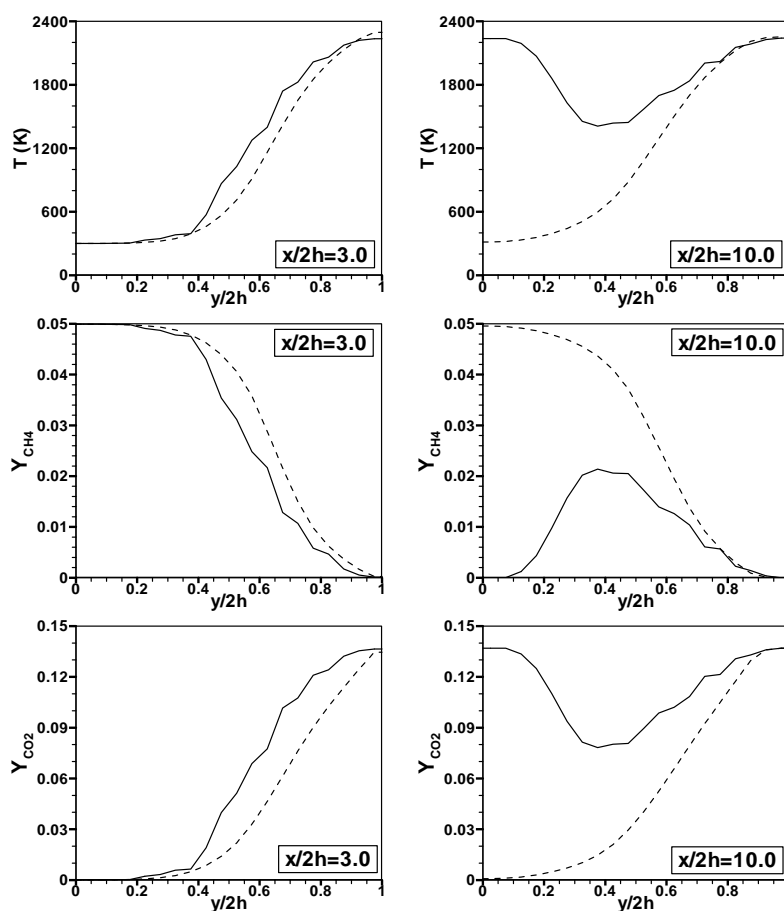
شکل ۸- خطوط جریان، بالا: روش RANS، پایین: روش PDF (با مقیاس یکسان برای دو محور x و y)

در شکل (۹) توزیع (Profile) سرعت محوری متوسط بر حسب y در مقاطع مختلف محفظه احتراق برای دو روش شبیه‌سازی مقایسه شده است. همان طور که دیده می‌شود، اختلاف دو روش در مقاطع میانی (مانند $x/2h = 10.0$) زیاد است که این امر به دلیل کوتاه‌تر بودن طول شعله و سریع‌تر شتاب گرفتن جریان در روش PDF است. در مقاطع انتهایی (مانند $x/2h = 37.0$) هر دو توزیع به توزیع جریان توسعه یافته آشفته نزدیک می‌شوند. کوچک‌تر بودن اندازه گردابه ایجاد شده در روش PDF در این شکل نیز در مقطع $x/2h = 1.0$ دیده می‌شود که در آن سرعت محوری متوسط پیش‌بینی شده با روش PDF در کل مقطع مثبت بوده که نشانه عدم برگشت جریان و محو شدن گردابه تا این مقطع است در حالی که در روش RANS و نزدیک به دیواره بالایی ($y/2h = 1.0$)، سرعت منفی شده و نشانه حضور گردابه است.

در شکل (۱۰) نمودار دمای متوسط و کسر جرمی متوسط برای دو نمونه از اجزای شیمیایی اصلی احتراق یعنی سوخت و دی‌اکسید کربن بر حسب y ، هر کدام در دو مقطع مختلف و برای دو روش شبیه‌سازی نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود، در مقاطع میانی و نزدیک به دیواره پایینی، اختلاف دو روش زیاد است. زیرا در این نواحی و در شبیه‌سازی PDF واکنش در حال کامل شدن است و به نوک شعله نزدیک هستیم، بنابراین دقت محاسبه نرخ واکنش شیمیایی تعیین‌کننده است. در حالی که در شبیه‌سازی RANS هنوز در ناحیه پیش‌گرمایش مخلوط هستیم. نرخ واکنش شیمیایی در روش PDF به طور دقیق و بدون مدل‌سازی منظور می‌شود ولی در روش RANS بسیار متفاوت و با مدل‌های تقریبی بیان می‌شود.



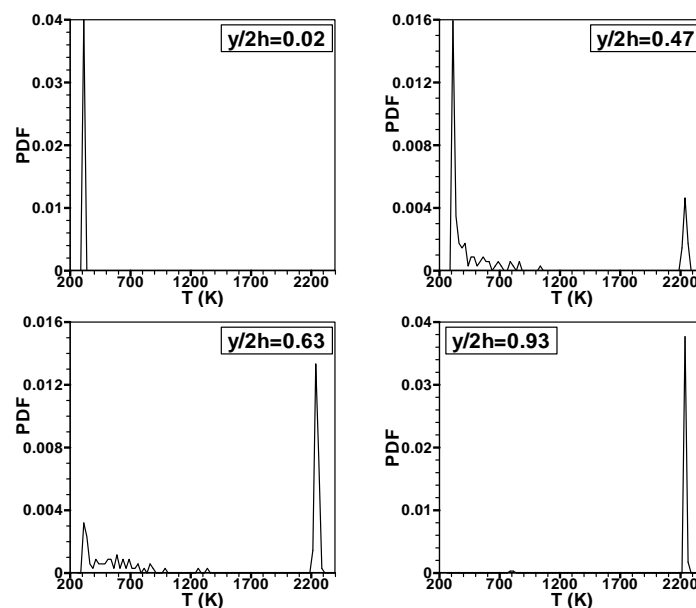
شکل ۹- نمودار تغییرات \bar{u} بر حسب y در مقاطع مختلف محفظه، خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS



شکل ۱۰- نمودار تغییر \bar{T} و \bar{Y}_α بر حسب y در دو مقطع مختلف محفظه، خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS

در شبیه‌سازی PDF علاوه بر میدان‌های متوسط، کلیه خواص آماری تک‌نقطه‌ای با داشتن PDF توام تک‌نقطه‌ای قابل حصول است. از جمله خاصیت‌های مهم، PDF مرزی دما (Marginal PDF) در هر نقطه است که احتمال اینکه جریان با دماهای مختلف در آن نقطه حضور داشته باشد را نشان می‌دهد.

در شکل (۱۱)، PDF مرزی دما در چهار نقطه مختلف از مقطع $x/2h = 3.0$ رسم شده است. نقطه اول ($y/2h = 0.02$) نزدیک به دیواره پایینی و در ناحیه سوخت و هوای مصرف نشده قرار دارد، بنابراین همان‌طور که انتظار می‌رود شکل PDF تقریباً به صورت یک تابع ضربه (Delta function) در دمای نزدیک به مخلوط ورودی است. نقاط دوم ($y/2h = 0.47$) و سوم ($y/2h = 0.63$) در نزدیکی جبهه شعله و به ترتیب قبل و بعد از آن قرار دارد. در این نواحی شکل PDF تغییر کرده و گستره‌ای از دماهای مختلف با احتمال‌های مختلف را در بر می‌گیرد، یعنی احتمال حضور جریان با دماهای متفاوت در این نواحی وجود دارد. با دور شدن از جبهه شعله و نزدیک شدن به دیواره بالایی ($y/2h = 0.93$) در ناحیه مخلوط کاملاً سوخته شده قرار می‌گیریم. در این نقطه شکل PDF به تابع ضربه در دمای ۲۲۴۰ کلوین نزدیک است.



شکل ۱۱ - PDF مرزی دما در نقاط مختلف مقطع $x/2h = 3.0$

نتیجه‌گیری

در این مقاله، برای مقایسه ویژگی‌ها و تفاوت‌های شبیه‌سازی احتراق آشفته پیش‌آمیخته به روش‌های PDF ترکیبی و RANS، یک شعله پیش‌آمیخته متان- هوا به دو روش مذکور شبیه‌سازی شد. حل عددی معادله انتقال PDF به روش مونت کارلو شبه اویلری و حل عددی معادلات RANS به روش اختلاف محدود انجام گرفت. دقت روش PDF به دلیل دقیق منظور کردن اثر واکنش شیمیایی در جریان‌های احتراقی خیلی بیشتر از روش RANS است. حال آنکه برای شبیه‌سازی PDF زمان محاسباتی بیشتری مورد نیاز است. زمان محاسباتی مورد نیاز در شبیه‌سازی حاضر در روش PDF حدود ۱۸ ساعت در مقابل زمان ۲۰ دقیقه‌ای مورد نیاز در روش RANS بود.

همان‌طور که در نتایج مشاهده شد، طول شعله پیش‌آمیخته پیش‌بینی شده در روش PDF تقریباً نصف طول پیش‌بینی شده در روش RANS بوده، همچنین، بیشینه دمای شعله در شبیه‌سازی RANS، ۱۲۰ کلوین بیشتر از این دما در روش PDF به دست آمد. اختلاف دو روش در پیش‌بینی میدان‌های متوسط نیز، در نواحی نزدیک به شعله زیاد بوده و در سایر نواحی اختلاف کمتری دیده شد.

مراجع

1. Spalding, D. B., "Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames," In 13th Symposium (Int.) on Combustion, Combustion Institute, 1970.
2. Bray, K. N. C., and Moss, J. B., "A Unified Statistical Model of the Premixed Flame," *Acta Astronautica*, 4, pp. 291-319, 1977.
3. Magnussen, B. F., and Hjertager, B. H., "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, 16, pp. 719-729, 1976.
4. Lundgren, T. S., "Model Equation for Non-Homogeneous Turbulence," *Physics of Fluids*, 12, pp. 485-499, 1969.
5. Dopazo, C., and Obrien, E. E., "Statistical Treatment of Non-Isothermal Chemical Reactions in Turbulence," *Combustion Science and Technology*, 13, pp. 99-122, 1976.
6. Dopazo, C., and Obrien, E. E., "An Approach to the Autoignition of a Turbulent Mixture," *Acta Astronaut*, 1, pp. 1239-1266, 1974.
7. Pope, S.B., "The probability approach to the modeling of turbulent reacting flows," *Combustion and flame*, 27, pp. 299-312, 1976.
8. Pope, S. B., "Calculations of Premixed Turbulent Flames," 18th Symposium (Int.) on Combustion, Combustion Institute, 1981.
9. McNutt, D. G., "A Study of Premixed Turbulent Flames," MS Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1981.
10. Pope, S. B., "A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow," *Combustion Science and Technology*, 25, pp. 159-174, 1981.
11. Pope, S. B., "PDF Method for Turbulent Reactive Flows," *Progress in Energy and Combustion Science*, 11, pp. 119-192, 1985.
12. Wang, F., Zhou, L. X., Xu, C. X., and Goldin, G. M., "Comparison between a Composition PDF Transport Equation Model and an ASOM Model for Simulating a Turbulent Jet Flame," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, pp. 136-144, 2008.
۱۳. امانی، الف؛ "بررسی عددی احتراق آشفته در یک محفظه استوانه‌ای به روش تابع چگالی احتمال (PDF)،" پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران، ۱۳۸۵.
14. Launder, B. E., and Spalding, D. B., *Lectures in mathematical models of turbulence*, Academic Press, 1972.
15. Launder, B. E., and Spalding, D. B., "The Numerical Computation of Turbulent Flows," *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 3, pp. 269-289, 1974.
16. Pope, S. B., *Turbulent Flows*, Cambridge University Press, 2000.
17. Janicka, J., Kolbe, W., and Kollmann, W., "Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Turbulent Scalar Fields," *J. Nonequilibrium Thermodynamics*, 4, pp. 47-66, 1979.
18. Anderson, J. D., *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*, Mc Graw-Hill, 1995.
19. Fox, R. O., *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*, Cambridge University Press, 2003.
20. Amani, E., and Nobari, M. R. H., "An Efficient PDF Calculation of Flame Temperature and Major Species in Turbulent Nonpremixed Flames," *Applied Mathematical Modeling*, 34, pp. 2223-2241, 2010.
21. Muradoglu, M., and Pope, S. B., "Local Time-Stepping Algorithm for Solving Probability Density Function Turbulent Model Equations," *AIAA J.*, 40, No. 9, pp. 1755-1763, 2002.
22. Elbanhawy, Y., Sibasegaram, S., and Whitelaw, J. H., "Premixed, Turbulent Combustion of a Sudden-Expansion Flow," *Combustion and Flame*, 50, pp. 153-165, 1983.
23. Westbrook, C. K., and Dryer, F. L., "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames," *Combustion Science and Technology*, 27, pp. 31, 1981.
24. Guo, Z. M., Zhang, H. Q., Chan, C. K., and Lin, W. Y., "Presumed Joint Probability Density Function Model for Turbulent Combustion," *Fuel*, 82, pp. 1091-1101, 2003.
25. Poinso, T., and Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards, 2001.

English Abstract

A Comparative Study of Premixed Turbulent Combustion with PDF and RANS Methods

E. Amani and M. R. Heyrani Nobari

Department of Mechanical Engineering, Amirkabir University of Technology

A methane-air turbulent premixed flame is simulated via probability density function (PDF) and Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS) methods. In the PDF approach, molecular mixing is modelled through the modified Curl's model. A Monte Carlo method is used to solve the PDF transport equation. Also, the run time averaging and local time stepping procedures are incorporated to increase the accuracy and reduce the computational time of the PDF simulation. In the RANS approach, the averaged chemical reaction rate term is modeled by the eddy breakup-finite rate model. A finite difference discretization on a staggered grid is utilized to obtain the numerical solution for the RANS equations. The characteristics and differences of the two above mentioned methods, including computational time and predicted mean fields, are investigated in detail for premixed flames. It is observed that the discrepancy of the predicted mean fields between the two methods is large especially in regions near the flame. In addition, the predicted flame length by the PDF method is approximately half the flame length predicted by the RANS method.

Keywords: Premixed combustion, Probability density function, Turbulent, Monte Carlo