

## مدلسازی آشفته‌گی در شعله‌های برخاسته فواره نفوذی در جریان همسو تحت شرایط پیش‌گرم و رقیق‌سازی

سید محمد میرنجفی‌زاده<sup>۱</sup>، محمدتقی صادقی<sup>۲</sup> و رحمت ستوده قره‌باغ<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی دکترای مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، mirnajafizadeh@iust.ac.ir

۲- دانشیار مهندسی شیمی، پردیس دانشکده‌های فنی دانشگاه تهران (نویسنده مخاطب)، sadeghi@iust.ac.ir

۳- استاد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، sotudeh@ut.ac.ir

(دریافت: ۱۳۹۱/۳/۱۶، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۱/۹/۱۸، پذیرش: ۹۱/۱۲/۱۲)

در این تحقیق، شعله برخاسته فواره (Jet) آشفته نفوذی، که با سازوکار خوداشتعالی پایدار شده، با استفاده از روش معادله انتقال تابع دانسیته احتمال (PDF) بررسی می‌شود. برای این منظور، از سازوکار شیمیایی پیچیده و مدل اصلاح‌شده اختلاط ملکولی کرل (Curl) استفاده می‌شود. هدف اصلی در این مطالعه بررسی تاثیر در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی نسبت به مدل آشفته‌گی k-ε استاندارد است. لحاظ کردن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی بر کمیات اسکالر مانند دما و کسر جرمی اجزا و همچنین محل برخاستگی شعله تاثیر محسوسی دارد. نتایج نشان می‌دهند محل برخاستگی شعله با در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی نسبت به مدل k-ε استاندارد بهتر پیش‌بینی شده و به نتایج تجربی نزدیک‌تر است. بر اساس مطالعات قبلی، مدل k-ε استاندارد نرخ گسترش فواره را در فواره‌های مدور بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند. در این مطالعه ملاحظه شد در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی نسبت به مدل آشفته‌گی k-ε استاندارد بهبود توزیع دما و کسر جرمی اجزا در ناحیه برخاستگی شعله و در پایین دست جریان فواره را به همراه دارد.

**کلیدواژگان:** خوداشتعالی، برخاستگی شعله، روش PDF توام کمیات اسکالر، مدل آشفته‌گی، تغییرات دانسیته

### مقدمه

مشعل‌های غیرپیش‌آمیخته، به دلیل طراحی ساده و عملکرد ایمن، به‌طور گسترده در سیستم‌های صنعتی استفاده می‌شوند. نیاز به توان بالای حرارتی در سیستم‌های صنعتی مستلزم به‌کارگیری دبی بالای جریان در مشعل‌های غیرپیش‌آمیخته است. افزایش دبی جریان فراتر از حد معینی معمولاً منجر به خاموشی شعله می‌شود. از این رو، در سیستم‌های احتراقی با توان حرارتی بالا، به‌منظور جلوگیری از خاموشی شعله، روش‌های پایدارسازی مورد استفاده قرار گرفته و به‌عنوان یک معیار اصلی در طراحی در نظر گرفته می‌شوند. انتخاب این روش‌ها وابسته به مقدار دبی جریان ورودی و یا به‌صورت معادل وابسته به توان حرارتی مشعل است. خوداشتعالی یکی از روش‌های پایدارسازی است که در آن جریان اکسیدکننده در دمای بالا به سیستم احتراقی وارد شده و با سوخت سرد مخلوط می‌شود و در نهایت واکنش می‌دهد. وجود عمل اختلاط بین اکسیدکننده و فواره (Jet) سوخت و همچنین وقوع خوداشتعالی، در این وضعیت، سبب ایجاد شعله‌های برخاسته می‌شود. چالش اصلی در این نوع شعله پیش‌بینی فاصله اشتعال بوده و از دیدگاه عددی، پیش‌بینی آن از طریق مدلسازی احتراق، به دلیل ارتباط شدید اشتعال با خصوصیات سنیتیکی، موضوعی بسیار دشوار است. مدلسازی جریان‌های فوق‌یکی از موضوعات چالش‌برانگیز در بحث احتراق بوده و همین امر سبب شده تاکنون تئوری‌های مختلفی در ارتباط با سازوکارهای شعله‌های برخاسته مطرح شود. مقالات متعددی درخصوص مطالعه سازوکارهای پایدارسازی در شعله‌های برخاسته فواره نفوذی و همچنین در زمینه خوداشتعالی

مطرح شده است [۴-۱]. ضمن اینکه روابط تجربی مختلفی برای پیش‌بینی ارتفاع برخاستگی ارائه شده که توسعه این روابط صرفاً بر مبنای پارامترهای کلی در سیستم‌های احتراقی است [۵-۹].

تاکنون دیدگاه‌های مدل‌سازی مختلفی مانند روش ممان شرطی (CMC) [۱۱،۱۰]، فلیمیت [۱۲-۱۵]، مفهوم اتلاف گردابه (EDC) [۱۷،۱۶] و تابع دانسیته احتمال (PDF) [۱۸،۱۶-۲۰] برای پیش‌بینی رفتار شعله‌های نفوذی برخاسته آشفته استفاده شده و شبیه‌سازی عددی مستقیم (DNS) نیز جهت مطالعه دقیق سازوکار پایدارسازی شعله‌های برخاسته انجام شده است [۲۱،۲۲].

در کار حاضر، یک شعله برخاسته فواره نفوذی در جریان همسوی گرم با استفاده از داده‌های تجربی کابرا و همکارانش [۲۳] بررسی می‌شود. به دلیل آنکه در فرایند خوداشتعالی پدیده اشتعال نقش مهمی را در تعیین ارتفاع برخاستگی شعله ایفا می‌کند، استفاده از دیدگاه‌های پیشرفته با توانایی پیش‌بینی اشتعال و خاموشی موضعی امری ضروری است. براساس شبیه‌سازی‌های انجام‌شده، دو دیدگاه مفهوم اتلاف گردابه (EDC) [۱۷] و تابع دانسیته احتمال (PDF) [۱۸،۱۶-۲۰] نتایج مناسبی را برای رفتار و محل برخاستگی این شعله در مقایسه با داده‌های تجربی ارائه می‌کنند. مهرولد و همکارانش [۱۷] نشان دادند، در مدل EDC، انتخاب مدل آشفستگی در تعیین محل برخاستگی و پیش‌بینی میدان‌های دما و اجزا بسیار مهم است. مصری و همکارانش [۱۸] مطالعه وسیعی را با استفاده از دیدگاه PDF توام کمیات اسکالر<sup>۴</sup> و مدل آشفستگی k-ε استاندارد بر روی شعله مذکور و محل برخاستگی آن انجام دادند و یکی از دلایل انحراف مقادیر عددی از داده‌های تجربی را ناشی از مدل آشفستگی k-ε استاندارد عنوان کردند. شایان ذکر است مدل آشفستگی k-ε استاندارد در فواره‌های مدور، مقادیر نرخ گسترش<sup>۵</sup> فواره را بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند و این مشکل معمولاً با تغییر ثابت  $C_{\epsilon 1}$  (از مقدار ۱/۴۴ به ۱/۶) در معادله نرخ اتلاف برطرف می‌شود. مصری و همکارانش [۱۸] نشان دادند اصلاح ضرایب مدل k-ε استاندارد بهبودی در نتایج میدان‌های دما و اجزا در این شعله ایجاد نمی‌کند و دلیل این امر تغییرات شدید دانسیته در جریان احتراقی است که مدل آشفستگی k-ε عاری از در نظر گرفتن آن است. همچنین، کائو و همکارانش [۱۹] مطالعه مفصلی در خصوص این هندسه با استفاده از دیدگاه PDF توام سرعت-فرکانس آشفستگی-ترکیب شیمیایی<sup>۶</sup> انجام داده و یکی از دلایل انحراف در کار قبلی با دیدگاه PDF توام کمیات اسکالر را استفاده از مدل ساده k-ε استاندارد عنوان کردند. همچنین، آن‌ها پیشنهاد کردند به کارگیری مدل‌های آشفستگی پیشرفته می‌تواند نتایج عددی بهتری را در مقایسه با داده تجربی دربر داشته باشد.

همان‌طور که در قبل اشاره شد، مدل آشفستگی k-ε استاندارد مبتنی بر فرض جریان تراکم‌ناپذیر است. اهمیت در نظر گرفتن همبستگی بین سرعت و گرادیان فشار در جریان‌های واکنشی آشفته در مقالات مختلفی [۲۴-۲۷] بررسی شده است، اما تاکنون اثر این موضوع در شعله‌های برخاسته فواره آشفته نفوذی با حاکم‌بودن پدیده خوداشتعالی بررسی نشده است. در کار حاضر، بررسی این موضوع با استفاده از دیدگاه احتراقی PDF توام کمیات اسکالر انجام گرفته که در آن جمله واکنش کاملاً بسته بوده و این امر مادامی که سنتیک نرخ محدود از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است منجر به نتایج مناسبی در شبیه‌سازی می‌شود. میدان جریان در این دیدگاه از طریق روش متوسط‌گیری فاوور<sup>۷</sup> و مدل‌سازی آشفستگی با استفاده از مدل آشفستگی k-ε استاندارد و همچنین یک مدل آشفستگی اصلاح‌شده، که در آن جمله همبستگی سرعت-گرادیان فشار در معادله انرژی جنبشی آشفستگی مدل شده، انجام می‌پذیرد. سنتیک شیمیایی مورد استفاده در این مطالعه سازوکار مولر<sup>۸</sup> [۲۸] است که دربرگیرنده ۹

1. Conditional Moment Closure
2. Flamelet
3. Probability Density Function
4. Joint scalar PDF
5. Spreading rate
6. Joint velocity-turbulent frequency and composition
7. Favre
8. Mueller

جزء شیمیایی (H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H, O, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) و ۲۱ واکنش بنیادین است. این سنتیک بر مبنای سازوکار یترا<sup>۱</sup> [۲۹] استوار شده که برای سیستم‌های اکسیداسیون منوکسیدکربن در محیط مرطوب توسعه یافته است. عملکرد این سازوکار با استفاده آزمایش‌های مختلف در یک راکتور جریانی بررسی شده است. همچنین، عملکرد این سازوکار شیمیایی در کارهای قبلی [۲۰، ۱۹] بررسی شده و نتایج مطلوبی را در برداشته است.

## مدلسازی

در این قسمت، جزئیات مدل محاسباتی مورد استفاده جهت بررسی این شعله ارائه می‌شود. از این رو، پس از ارائه معادلات حاکم بر جریان واکنشی، مدلسازی آشفته‌گی تشریح و سپس معادله انتقال تابع دانسیته احتمال توام کمیات اسکالر و روش حل آن ارائه می‌شود. در پایان هندسه، مش و شرایط مرزی مسئله بیان می‌شود.

## معادلات حاکم

تعیین میدان جریان و خصوصیات شیمیایی و ترمودینامیکی در این شعله با استفاده از یک الگوریتم حل پیوندی انجام می‌پذیرد. در این راستا، جهت محاسبه میدان سرعت، معادلات پیوستگی و تکانه در دیدگاه اولرین با استفاده از روش حجم محدود حل شده و در سوی دیگر کمیات اسکالر مانند دما و ترکیب شیمیایی اجزا از طریق معادله انتقال PDF و خواص ذرات تصادفی بر مبنای دیدگاه لاگرانژین محاسبه می‌شوند. روش مرسوم برای حل میدان‌های جریان آشفته، تجزیه متغیرها به مقادیر متوسط و نوسانات است. مقدار متوسط با استفاده از یکی از روش‌های زیر تعریف می‌شود: الف) متوسط رینولدز، ب) متوسط وزنی یا فاوور. مادامی که روش متوسط‌گیری رینولدز انتخاب می‌شود، معادلات به‌دست آمده برای حرکت دارای جمله‌هایی هستند که با نوسانات دانسیته در ارتباط‌اند. برای فائق آمدن بر مشکل مدل کردن عبارت‌های مورد نظر در دیدگاه متوسط‌گیری رینولدز، روش متوسط‌گیری فاوور پیشنهاد می‌کند متغیرهایی مانند سرعت با استفاده از روش متوسط‌گیری وزنی تجزیه شوند و متغیرهایی مانند فشار و دانسیته از روش متوسط‌گیری رینولدز در معادلات جایگزین شوند. مزیت استفاده از چنین دیدگاهی شباهت نزدیک معادلات به‌دست آمده با معادلات حاکم در شرایط تراکم‌ناپذیر است. در این تحقیق، علامت مد<sup>۲</sup> نشان‌دهنده متوسط‌گیری فاوور و (") مقدار نوسانات نسبت به متوسط وزنی را نشان می‌دهد. علامت سربار<sup>۳</sup> نشان‌دهنده متوسط‌گیری رینولدز و (') مقدار نوسانات مربوط به آن است. معادلات حاکم در فرم متوسط به‌صورت زیر ارائه می‌شوند:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{t}_{ji} - \overline{\rho u_j'' u_i''}] \quad (2)$$

که در آن  $\overline{\rho u_j'' u_i''}$  در معادله (۲) مجهول بوده و بیانگر متوسط وزنی همبستگی سرعت-سرعت است که در جریان‌های آرام دارای مقادیر صفر بوده، لکن در جریان‌های آشفته، فارغ از بحث واکنشی و غیرواکنشی، دارای مقادیر غیرصفرند. هدف اصلی در مدل کردن آشفته‌گی ایجاد ابزاری جهت تعیین کمیت فوق است.

## مدل‌های آشفته‌گی

یکی از رایج‌ترین مدل‌ها مدل آشفته‌گی k-ε استاندارد است که دارای استفاده عمومی در بسیاری از مسائل مهندسی است. این مدل در ابتدا برای شرایط تراکم‌ناپذیر توسعه یافت و سپس تحت فرضیاتی خاص برای جریان‌های احتراقی مورد استفاده گرفت.

1. Yetter  
2. Tilde  
3. Overbar

با این حال، در شرایط واقعی، در شعله‌های آشفته، دانسیته سیال با ضریبی برابر با مقدار  $\delta$  تغییر می‌کند و این امر سبب می‌شود نتایج حاصل شده از مدل آشفته‌گی  $k-\varepsilon$  استاندارد با داده‌های تجربی تطابق نداشته باشند. در شرایط دانسیته متغیر، جمله‌هایی شامل حاصل ضرب سرعت‌های نوسانی و گرادیان فشار متوسط در معادلات آشفته‌گی ظاهر می‌شوند که در حالت دانسیته ثابت مقادیر آن‌ها برابر صفر است. برای نشان دادن این موضوع، فرم متوسط معادله انرژی جنبشی آشفته‌گی به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{\rho \tilde{u} k}) = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - u_i'' \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} - t_{ji}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \overline{t_{ji}'' u_i''} - \overline{\rho u_j'' 1/2 u_i'' u_i''} \right] \quad (3)$$

جمله سوم در سمت راست این معادله، متوسط فاوور نرخ اتلاف نامیده شده و به صورت  $\overline{\rho \tilde{\varepsilon}}$  نمایش داده می‌شود. در مدلسازی با روش مرسوم، جمله دوم در سمت راست معادله به مجموع سه جمله با استفاده از  $P = \bar{P} + p'$  تقسیم می‌شود [۳۰]:

$$\overline{u_i'' \frac{\partial P}{\partial x_i}} = \overline{u_i'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i}} - \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{p' u_i''}) \quad (4)$$

جمله اول و جمله دوم در سمت راست معادله (۴) به ترتیب کار فشاری<sup>۱</sup> و انبساط فشاری<sup>۲</sup> نام دارند. دو جمله کار فشاری و انبساط فشاری در شرایط جریان تراکم‌ناپذیر، زمانی که نوسانات دانسیته صفرند، ناپدید می‌شوند. کار فشاری، به دلیل آنکه متوسط زمانی  $\overline{u_i''}$  در شرایط نوسانی دانسیته صفر دارای مقدار صفر است، ناپدید می‌شود. جمله انبساط فشاری نیز، به دلیل آنکه میدان نوسانات در جریان تراکم‌ناپذیر دارای دیورژانس<sup>۳</sup> صفر است، ناپدید می‌شود. جمله آخر در معادله (۴) نیز در داخل جمله آخر معادله (۳) قرار گرفته و به صورت مدل نفوذ گرادیانی در محاسبات در نظر گرفته می‌شود.

فرضیه مارکووین پیشنهاد می‌کند اگر شدت نوسانات دانسیته مقداری کوچک باشد ( $\sqrt{\rho'^2} / \bar{\rho} \leq 0.1$ )، می‌توان از روش حل جریان‌های تراکم‌ناپذیر، البته با کمی اصلاحات، برای حل جریان‌های تراکم‌پذیر استفاده کرد. با چنین دیدگاهی، می‌توان همبستگی‌های موجود در معادلات حاکم را با استفاده از روش‌های مشابه مورد استفاده در جریان‌های تراکم‌ناپذیر مدل کرد [۳۰]. از این رو:

تنش رینولدز:

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = 2\mu_t St_{ij} - \frac{2}{3} \mu_t \tilde{u}_{k,k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \overline{\rho k} \delta_{ij} \quad (5)$$

که در آن نرخ کرنش به صورت  $St_{ij} = \frac{1}{2}(\partial \tilde{u}_i / \partial x_j + \partial \tilde{u}_j / \partial x_i)$  تعریف می‌شود.

$$\overline{t_{ji}'' u_i''} - \overline{\rho u_j'' 1/2 u_i'' u_i''} - \overline{p' u_j''} = \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \quad (6)$$

که در آن  $\sigma_k = 1$  است.

در معادلات بالا  $\mu_t$  گرانیوی گردابه‌ای بوده و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho \tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (7)$$

که در آن مقدار  $C_\mu = 0.09$  است.

1. Pressure work  
2. Pressure dilatation  
3. Divergence

معادله (۴) در جریان‌های دانسیته متغیر حذف نمی‌شود و می‌بایستی در حل در نظر گرفته شود. بیشتر محققان جمله اول در سمت راست معادله (۴) را مدل می‌کنند و از تاثیر جمله دوم، به دلیل کوچک بودن آن، در جریان‌های با سرعت پایین صرف نظر می‌کنند. مدلی که در این شبیه‌سازی در نظر گرفته می‌شود مطابق کار گروه استراهل [۲۴] است که در آن هر دو جمله اول معادله (۴) در نظر گرفته می‌شوند. همان‌طور که در قبل عنوان شد، جمله آخر در معادله (۴) نیز با جمله آخر معادله (۳) ادغام شده و به صورت مدل نفوذ گرادیانی در محاسبات وارد می‌شود. براساس کار گروه استراهل، جمله همبستگی گرادیان فشار-سرعت بر مبنای معادله پواسون<sup>۱</sup> استخراج شده و حل آن از طریق تابع گرین<sup>۲</sup> صورت می‌پذیرد. تاثیر این مدل بر روی انرژی جنبشی آشفستگی در جریان غیرواکنشی و واکنشی، منحنی توزیع محوری سرعت و کمیات اسکالر برای شعله هیدروژن-هوا مورد ارزیابی قرار گرفته و نتایج قابل قبولی را نسبت به داده‌های تجربی ارائه کرده است. مدل مورد نظر برای جمله همبستگی سرعت و گرادیان فشار به شرح زیر است:

$$-u_i'' \frac{\partial P}{\partial x_i} = \frac{2}{3} \kappa_A \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\kappa_B}{3} \overline{\rho u_i'' u_i'' D} \quad (8)$$

که در آن  $\overline{\rho u_i'' u_i''} = 2\bar{\rho}k$  و  $\kappa_A$  و  $\kappa_B$  ثوابت رابطه فوق بوده و مقادیر آن‌ها به ترتیب برابر  $0.036$  و  $1/27$  خواهد بود. همچنین،  $\bar{D}$  انبساط متوسط<sup>۳</sup> و به صورت  $\bar{D} = \partial \tilde{u}_i / \partial x_i$  است. استراهل [۲۴] نشان داد جمله دوم در سمت راست معادله (۸) نقش قابل ملاحظه‌ای را در جریان‌های احتراقی بازی کرده و منجر به بهبود پیش‌بینی نرخ گسترش فواره در پایین دست جریان می‌شود.

همچنین، مطابق مرجع [۲۴]، معادله نرخ اتلاف آشفستگی مورد استفاده به صورت زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \left( \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 2} \frac{\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}^2}{k} \quad (9)$$

که در آن ثابت‌های معادله فوق به صورت زیرند:

$$C_{\varepsilon 1} = 1.44, \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92$$

در این مطالعه، علاوه بر مدل‌سازی با استفاده از مدل آشفستگی اصلاح‌شده برای حالت دانسیته متغیر، مدل‌سازی دیگری بر اساس مدل k-ε استاندارد انجام پذیرفته که امکان مقایسه بین این دو حالت را محقق می‌سازد.

### معادله انتقال تابع دانسیته احتمال

دو دیدگاه برای تعیین PDF در مدل‌سازی یک جریان واکنشی آشفته وجود دارد. در دیدگاه اول، که روشی ساده است، شکل تابع دانسیته احتمال به صورت فرض‌شده براساس دو متغیر، یعنی مقدار متوسط و واریانس کمیت اسکالر، تعیین می‌شود. تاکنون شکل‌های گوناگونی برای تابع دانسیته احتمال مانند تابع گوس و تابع بتا برحسب کمیت‌های اسکالر غیرفعال<sup>۴</sup> پیشنهاد شده است. در دیدگاه دوم از یک معادله انتقال مدل‌شده برای تعیین تابع دانسیته احتمال در دامنه محاسباتی استفاده می‌شود. چنانچه کلیه کمیات اسکالر به صورت مولفه‌های یک بردار  $\vec{\phi}$  در نظر گرفته شوند، معادله انتقال PDF توام بردار  $\vec{\phi}$  از طریق روش‌های مختلف [۳۱] قابل استخراج است. معادله انتقال به شکل دقیق برحسب تابع دانسیته جرمی  $F_\phi$  به صورت زیر است [۳۱]:

$$\frac{DF_\phi}{Dt} + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha(\psi) F_\phi] = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\langle u_i'' | \psi \rangle F_\phi] + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,\alpha}}{\partial x_i} \middle| \psi \right\rangle F_\phi \right] \quad (10)$$

1. poisson  
2. Green  
3. Mean dilatation  
4. passive

که در آن:

$$F_{\phi}(\psi, \mathbf{x}; t) = \bar{\rho} \bar{\phi}_{\phi}(\psi, \mathbf{x}; t)$$

علامت (۱.۱) در عبارت بالا نشان‌دهنده متوسط شرطی است و  $\psi$  فضای نمونه بردار  $\bar{\phi}$  است.  $\bar{\phi}_{\phi}$  متوسط وزنی تابع دانسیته احتمال و  $S_{\alpha}$  بیان‌کننده نرخ واکنش شیمیایی هر یک از اجزاست. کلیه جمله‌ها در سمت چپ معادله (۱۰) به صورت بسته<sup>۱</sup> بوده و به ترتیب انتقال در فضای فیزیکی برحسب زمان و جابه‌جایی با سرعت متوسط و همچنین انتقال در فضای اسکالری به واسطه واکنش را نشان می‌دهند. در سمت راست معادله (۱۰)، جمله‌ها به صورت بسته نبوده و می‌بایستی برای آن‌ها مدل مناسبی ارائه شود. جمله اول در سمت راست نشان‌دهنده انتقال آشفتگی در فضای فیزیکی و جمله دوم نشان‌دهنده انتقال در فضای اسکالری به سبب شار مولکولی است، که اصطلاحاً به آن جمله اختلاط ملکولی<sup>۲</sup> نیز گفته می‌شود. در این تحقیق، جمله اول در سمت راست با استفاده از فرض نفوذ گرادیانی<sup>۳</sup> مدل می‌شود:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \langle \tilde{u}_i^* \psi \rangle \bar{\phi}_{\phi}] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\rho S_{c_t}} \frac{\partial \bar{\phi}_{\phi}}{\partial x_i} \right) \quad (11)$$

که در آن  $\mu_t$  گرانیوی آشفتگی و  $S_{c_t}$  عدد اشمیت آشفتگی است. همچنین، جمله دوم، به دلیل آنکه واکنش‌ها در احتراق در سطح ملکولی انجام می‌شوند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. تاکنون مدل‌های مختلفی برای این جمله ارائه شده است. مدل مورد استفاده در این شبیه‌سازی مدل تصحیح‌شده کرل<sup>۴</sup> [۳۲] با ثابت اختلاط ۲ است. شایان ذکر است در این شعله، به دلیل بالابودن عدد رینولدز فواره (Re=23600) از تاثیر نفوذ ملکولی صرف‌نظر شده است. هر چند تاثیر این متغیر در شعله‌های هیدروژن، با توجه به تقویت انتقال مولکولی در دمای بالا و آرام‌سازی شعله در اثر احتراق [۳۳-۳۵]، می‌تواند مهم باشد.

### حل معادله انتقال تابع دانسیته احتمال

حل معادله انتقال تابع دانسیته احتمال توام بردار  $\bar{\phi}$  با استفاده از روش‌های رایج مانند روش اختلاف محدود و حجم محدود به دلیل هزینه بالای محاسباتی امکان‌پذیر نیست. از این رو الگوریتم مونت کارلو جهت حل این معادله توسط پپ [۳۶] در ۱۹۸۵ پیشنهاد شد که در آن هزینه محاسباتی به صورت خطی با تعداد متغیرهای اسکالر افزایش می‌یابد. در این روش، میدان محاسباتی به  $M$  سلول محاسباتی تقسیم شده که مرکز سلول  $l$  ام با بردار  $\bar{x}_l$  ( $l=1, 2, \dots, M$ ) مشخص می‌شود. هر سلول دارای تعداد  $N_l$  ذره است که به صورت تصادفی در دامنه محاسباتی حرکت می‌کنند. شایان ذکر است هر ذره دارای یک سری خواص متناظر با بردار  $\bar{\phi}$  است. در این روش، از معادلات دیفرانسیل تصادفی استفاده می‌شود که تابع دانسیته احتمال محاسبه‌شده از آن‌ها برابر با حل معادله انتقال PDF است. در نهایت این معادلات با روش مونت کارلو حل می‌شوند. معادلات دیفرانسیل تصادفی متناظر در این روش برای مکان ذرات  $x_i^*$  و کمیات اسکالر  $\phi_{\alpha}^*$  به صورت زیرند [۳۲]:

$$dx_i^* = \left( \tilde{u}_i + \frac{\mu_t}{\bar{\rho} S_{c_t}} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} \right) dt + \sqrt{\frac{2\mu_t}{S_{c_t}}} dW_i \quad (12)$$

$$d\phi_{\alpha}^* = \left( \frac{m_{\alpha}}{\tau_{\phi}} + S_{\alpha} \right) dt \quad (13)$$

که در آن  $dW_i$  نشان‌دهنده افزایش مولفه  $i$  ام فرایند وینر<sup>۵</sup> است. همچنین  $\mu_t$ ،  $\tau_{\phi} = \tau_t / C_{\phi}$  و  $m_{\alpha} / \tau_{\phi}$  به ترتیب نشان‌دهنده گرانیوی آشفتگی، مقیاس زمانی اسکالر و مدل اختلاط ملکولی‌اند. براساس این روش، در هر گام زمانی، ذرات به صورت تصادفی

1. Close  
2. Micro-mixing  
3. Gradient diffusion  
4. Modified Curl's model  
5. Wiener

در اثر فرایند جابه‌جایی و نفوذ بین سلول‌های شبکه حرکت کرده و خواص ذرات در اثر فرایند اختلاط و واکنش شیمیایی تغییر می‌یابند. مقدار متوسط هر کمیت اسکالر در هر سلول با استفاده از خواص ذرات موجود در آن سلول به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\bar{\phi}_l = \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \phi^{(i)} \quad (14)$$

مزیت اصلی روش فوق، بسته‌بودن جمله نرخ واکنش شیمیایی است. این امر، مادامی که سنتیک نرخ محدود از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، منجر به نتایج مناسبی در شبیه‌سازی می‌شود. یکی از معایب روش مونت کارلو وجود خطای آماری است. از این رو تاکنون، برای کاهش این خطا، الگوریتم‌ها و روش‌های مختلفی ارزیابی شده است. یکی از راه‌کارهای مناسب استفاده از روش گام زمانی<sup>۱</sup> است که در این شبیه‌سازی استفاده شده است [۳۶]. همچنین، در این شبیه‌سازی از روش متوسط گیری حرکتی<sup>۲</sup> [۳۷] نیز استفاده شده که خطای آماری را به شکل قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد. در این شبیه‌سازی، در روش حجم محدود، معادلات جریان به صورت پایا و با استفاده از الگوریتم سیمپل<sup>۳</sup> حل شده و تجزیه معادلات با دقت مرتبه دوم و جملات جابه‌جایی در معادلات تکانه، انرژی جنبشی و اتلاف به صورت بالادست در نظر گرفته می‌شوند. به منظور اطمینان در رسیدن به حل آماری<sup>۴</sup> دائم در روش مونت کارلو، دو کمیت دما و کسر جرمی متوسط OH در صفحه خروجی از دامنه محاسباتی زیر نظر<sup>۵</sup> گرفته می‌شوند. با توجه به اینکه کد محاسباتی و کلیه تنظیمات در شرایط مرزی و دامنه محاسباتی مشابه کار گوردن و همکارانش [۲۰] است، لذا، مطابق نتیجه بررسی آنها در خصوص تاثیر تعداد ذرات بر نتایج عددی، تعداد ذرات در هر سلول محاسباتی در این تحقیق برابر با ۱۰۰ در نظر گرفته شد.

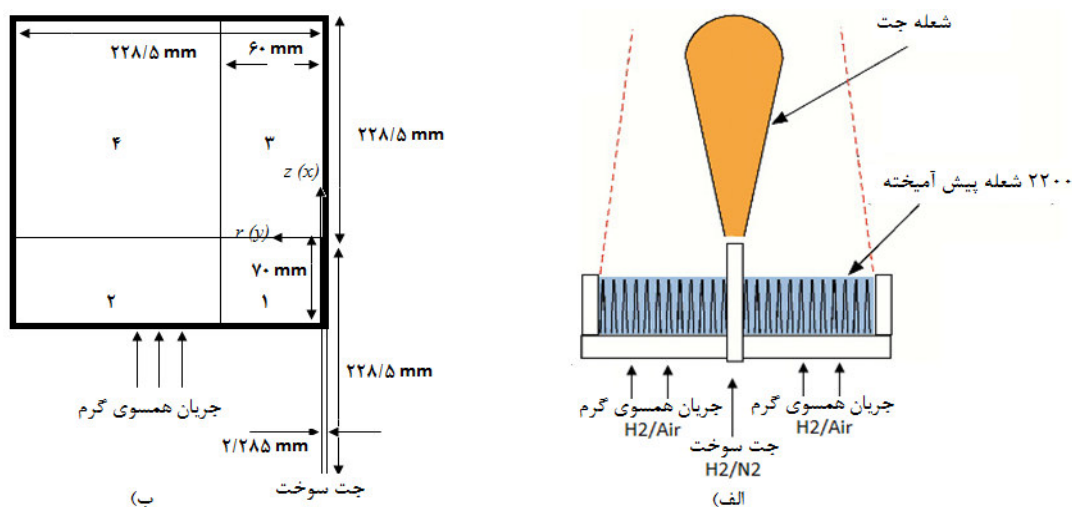
### الگوریتم حل پیوندی

الگوریتم حل ترکیبی متشکل از حل میدان جریان با استفاده از روش حجم محدود و میدان کمیات اسکالر با استفاده از روش مونت کارلو است. در این روش، معادلات جریان و معادلات اسکالرها از طریق مبادله چندین پارامتر به طور همزمان و از طریق یک الگوریتم پیوندی حل می‌شوند. جزئیات حل و نمای کلی این الگوریتم در مرجع [۳۸] نشان داده شده است.

### هندسه، مش محاسباتی و شرایط مرزی

طرحواره مشعل مورد نظر و دامنه محاسباتی در شکل ۱ نشان داده شده است. فواره سوخت دارای قطر داخلی ۴/۵۷ mm و ضخامت دیواره ۰/۸۹ mm بوده و در مرکز یک دیسک سوراخ‌دار با قطر ۲۱۰ mm قرار دارد. این دیسک دارای ۲۲۰۰ سوراخ به قطر ۱/۵۸ mm است که با استفاده از آن شعله‌های پیش‌آمیخته بر روی دیسک ایجاد شده و انرژی لازم برای پایدارسازی شعله با استفاده از سازوکار خوداشتعالی از طریق شعله‌های پیش‌آمیخته فراهم می‌شود. دما و ترکیب این جریان همسو در جدول ۱ نشان داده شده است. فاصله سطح خروجی فواره سوخت نسبت به دیسک سوراخ‌دار ۷۰ mm بوده و بدین ترتیب می‌توان ترکیب مخلوط جریان همسو را به صورت یکنواخت در نظر گرفت. کل چیدمان آزمایش در جریان هوای ساکن قرار داشته و هوای محیط نمی‌تواند تا ناحیه محوری z/D برابر با ۲۶ بر روی شعله تاثیر داشته باشد. اطلاعات تجربی مربوط به مشعل فوق در مرجع [۲۳] موجود است.

1. Local time stepping
2. Moving time averaging
3. SIMPLE
4. Statistically stationary
5. Monitor



شکل ۱- الف) طرحواره مشعل به همراه جریان همسو، ب) دامنه محاسباتی

جدول ۱- مقادیر ورودی سوخت و جریان همسو برای سرعت، دما و کسر مولی براساس داده های تجربی گزارش شده در مرجع [۲۳]

جریان	قطر (mm)	سرعت (m/s)	دما (کلوین)	کسر مولی هیدروژن	کسر مولی اکسیژن	کسر مولی نیتروژن	کسر مولی آب
فواره	۴/۵۷	۱۰۷	۳۰۵	۰/۲۵۳۷	۰/۰۰۲۱	۰/۷۴۲۷	۰/۰۰۱۵
همسو	۲۱۰	۳/۵	۱۰۴۵	۰/۰۰۰۵	۰/۱۴۷۴	۰/۷۵۳۴	۰/۰۹۸۹

همان طور که در شکل ۱-ب نشان داده شده است، مرکز مختصات در سطح خروجی فواره قرار گرفته و دامنه محاسباتی به صورت دوطرفه است. دامنه محاسباتی به مقدار  $50 D$  (قطر) از مرکز مختصات تا پایین دست جریان و همچنین از خط مرکزی در جهت شعاعی گسترش یافته است. دامنه محاسباتی در لوله سوخت نیز در جهت بالادست جریان به مقدار  $50 D$  از مرکز مختصات در نظر گرفته شده است.

شرایط مرزی مورد استفاده در این مسئله مطابق با نتایج تجربی گزارش شده در مرجع [۲۳] است. مسئله در حالت محور متقارن در نظر گرفته شده و شرایط مرزی در خروجی به صورت فشار خروجی<sup>۱</sup> است. شرایط ورودی هم برای سوخت و هم جریان همسو بر اساس سرعت، دما و غلظت اجزای مشخص شده در جدول ۱ است. شرایط مرزی در دیواره نازل سوخت به صورت مرز ثابت<sup>۲</sup> و انتقال حرارت بین سوخت و جریان همسو به صورت ترکیبی<sup>۳</sup> در محاسبات وارد شده که برای مدل سازی مربوطه، ضخامت دیواره، دانسیته، ظرفیت حرارتی ویژه و هدایت پذیری فولاد به ترتیب  $۰/۸۹ \text{ mm}$ ،  $۰/۸۹ \text{ kg/m}^3$ ،  $۵۰۲/۴۸ \text{ J/kg.K}$  و  $۱۶/۲۷ \text{ w/m.K}$  است. منظور از انتقال حرارت ترکیبی در نظر گرفتن همزمان انتقال حرارت هدایتی در دیواره جامد و انتقال حرارت جابه جایی در سیال مجاور است.

در مدل سازی آشفتگی دو مقدار انرژی جنبشی و نرخ اتلاف آشفتگی به عنوان شرط مرزی در ورودی مورد نیازند. این مقادیر در ورودی فواره با استفاده از روابط زیر به دست می آیند:

$$\tilde{k} = 3/2 (u')^2 \quad (15)$$

$$u' = I \times \bar{u} \quad (16)$$

$$\tilde{\epsilon} = (C_\mu)^{3/4} \times \frac{(\tilde{k})^{3/4}}{l} \quad (17)$$

1. Pressure Outlet
2. Noslip
3. Conjugate



که در آن  $I$  شدت آشفته‌گی و  $l$  مقیاس طولی<sup>۱</sup> است.  $C_{\mu}$  یک ثابت بوده و مقدار آن  $0/09$  است. شدت آشفته‌گی برای فواره برابر با  $10\%$  درصد و مقیاس طولی برابر با  $0/07$  قطر هیدرولیک انتخاب شده است. مقادیر مربوطه در جریان همسو به ترتیب  $5\%$  درصد و  $1\text{ mm}$  است.

استقلال مش در این هندسه قبلاً توسط مصری و همکارانش [۱۸] بررسی شده است. آن‌ها، با بررسی سه مش متفاوت و رسم منحنی‌های توزیع<sup>۲</sup> سرعت، انرژی جنبشی و دما برای مقادیر متوسط و نوسانات (rms)، مش مناسب و بهینه جهت شبیه‌سازی را انتخاب کردند. با توجه به اینکه در این تحقیق کد محاسباتی و کلیه تنظیمات اعم از شرایط مرزی و دامنه محاسباتی مشابه مراجع [۱۸] و [۲۰] است، مش بهینه پیشنهاد شده در این مراجع مورد استفاده قرار گرفته است. مشخصات مش بهینه مورد استفاده در کار حاضر در جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲- جزئیات اطلاعات مش بهینه انتخاب شده برای دامنه محاسباتی

جریان	تعداد سلول در جهت $z$	تعداد سلول در جهت $r$
فواره (در داخل نازل)	۱۰۸	۲۰
ناحیه ۱	۴۴	۱۲۴
ناحیه ۲	۲۸	۴۴
ناحیه ۳	۷۶	۱۵۲
ناحیه ۴	۶۲	۱۵۲

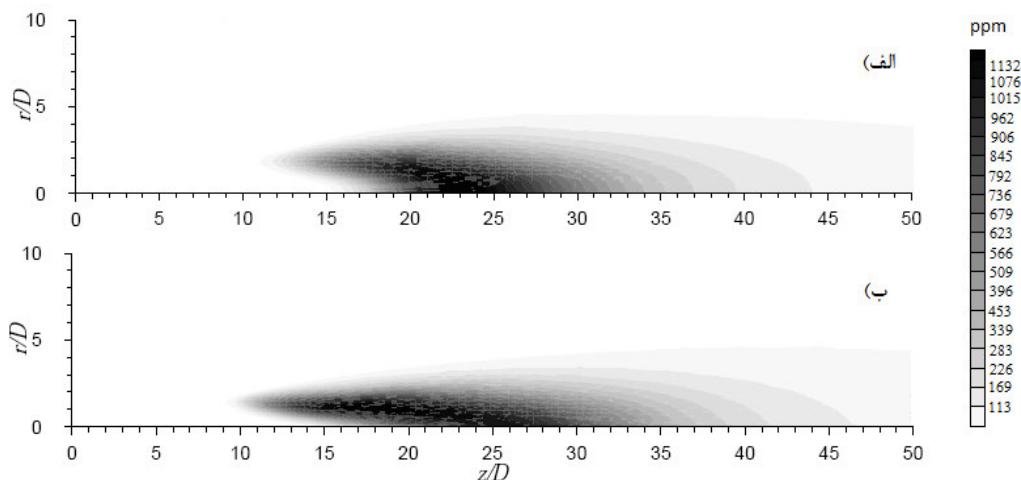
## نتایج و بحث

در کار حاضر، تاثیر استفاده از دو مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد و اصلاح شده با در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در معادله انرژی جنبشی آشفته‌گی بر ارتفاع برخاستگی و میدان‌های سرعت و کمیات اسکالر مطالعه می‌شود. از این رو، در ابتدا، توزیع محوری و شعاعی سرعت و همچنین انرژی جنبشی آشفته‌گی، نرخ اتلاف آن و گرانیوی گردابه‌ای تحت تاثیر این دو مدل آشفته‌گی تجزیه و تحلیل شده و در نهایت منحنی‌های کمیات اسکالر با داده‌های تجربی مقایسه می‌شوند.

### پیش‌بینی ارتفاع برخاستگی

ارتفاع برخاستگی، مطابق با مرجع [۱۷]، نزدیکترین فاصله‌ای تعریف می‌شود که پایه شعله نسبت به لبه نازل داشته و پایه شعله محلی خواهد بود که در آن کسر جرمی جزء OH برابر با مقدار  $600\text{ ppm}$  باشد. بر این اساس و کار تجربی انجام شده توسط کابرا و همکارانش [۱۷]، ارتفاع برخاستگی در این شرایط برابر  $10$  قطر نازل تخمین زده می‌شود. شکل ۲ منحنی هم‌تراز کسر جرمی OH را برای دو مدل آشفته‌گی تشریح شده در قسمت قبل نشان می‌دهد. همچنین، کابرا و همکارانش [۱۷] شکل شعله را در دو حالت تجربی و عددی با استفاده از منحنی‌های هم‌تراز کسر جرمی هیدروکسیل بررسی کرده و نشان دادند شکل واقعی شعله بسیار باریک‌تر از نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد است. با توجه به این موضوع و همچنین مقایسه نتایج در شکل ۲ می‌توان دریافت که شکل شعله با استفاده از مدل ارائه شده برای تغییرات دانسیته باریک‌تر از شکل شعله در حالت پیش‌بینی شده با مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد است. این امر می‌تواند بیانگر کاهش نرخ گسترش<sup>۳</sup> فواره با استفاده از مدل اصلاح شده باشد.

1. Integral length scale  
2. Profile  
3. Spreading rate



شکل ۲- منحنی هم‌تراز متوسط کسر جرمی OH: الف) مدل آشفتگی k-ε استاندارد، ب) مدل آشفتگی اصلاح‌شده با تغییرات دانسیته

### بررسی میدان جریان

به‌منظور بررسی تاثیرات دانسیته در مدل آشفتگی بر میدان جریان، منحنی‌های توزیع سرعت در جهت شعاعی در مقاطع مختلف و همچنین در جهت محوری در خط مرکزی (شکل ۳)، برای دو مدل آشفتگی اصلاح شده و k-ε استاندارد، ارزیابی می‌شوند. k-ε اصلاح‌شده<sup>۱</sup> و k-ε استاندارد<sup>۲</sup> در شکل‌های ارائه‌شده به‌ترتیب نمایانگر مدل آشفتگی اصلاح‌شده و k-ε استانداردند. تغییرات قابل توجه در میدان سرعت در منحنی‌های مربوطه اهمیت لحاظ‌شدن تاثیرات دانسیته در مدل آشفتگی را به‌خوبی نشان می‌دهند. همچنین، یکی از تغییرات مشاهده‌شده در شکل‌ها تغییر نرخ گسترش فواره در حالت مدل آشفتگی اصلاح‌شده است. همانطور که در قبل مورد تاکید واقع شد، یکی از خصوصیات شناخته‌شده در مدل آشفتگی k-ε استاندارد پیش‌بینی بیشتر نرخ گسترش فواره نسبت به مقدار واقعی در فواره‌های مدور است. بررسی منحنی‌های توزیع در شکل ۳ نشان می‌دهد نرخ گسترش با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده به‌طور قابل ملاحظه‌ای نسبت به مدل آشفتگی k-ε استاندارد کاهش می‌یابد. توزیع محوری نیز نشان می‌دهد این تغییرات به‌طور کلی شرایط در پایین‌دست جریان را تحت تاثیر قرار می‌دهند. مشکل پیش‌بینی بیشتر نرخ گسترش فواره در مدل k-ε استاندارد معمولاً با تغییر ثابت  $C_{\epsilon 1}$  (از مقدار ۱/۴۴ به ۱/۶) در معادله نرخ اتلاف برطرف می‌شود. بررسی‌ها در این شعله نشان می‌دهد تغییر ضریب معادله نرخ اتلاف به‌طور عمده بالادست جریان را تحت تاثیر قرار داده و شرایط پایین‌دست بدون تغییر باقی می‌ماند.

نرخ گسترش فواره برای دو مدل آشفتگی در شکل ۴ نشان داده شده است. براساس تعریف، نرخ گسترش فواره در فواره‌های مدور به‌صورت خطی بوده و از رابطه زیر تبعیت می‌کند:

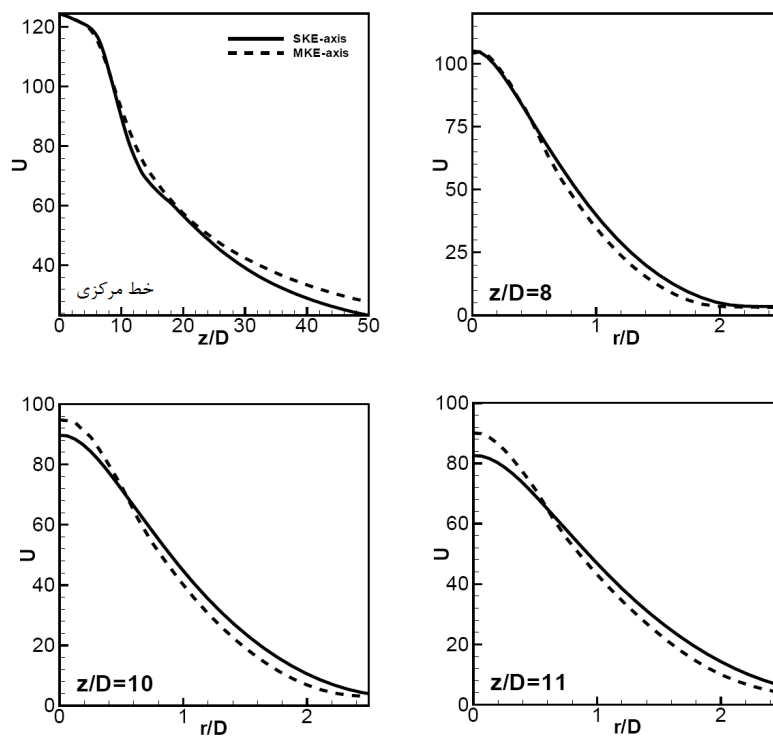
$$r_{1/2} = S(Z - Z_0) \quad (17)$$

که در آن  $r_{1/2}$  ضخامت نصف فواره بوده و براساس سرعت در خط مرکزی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

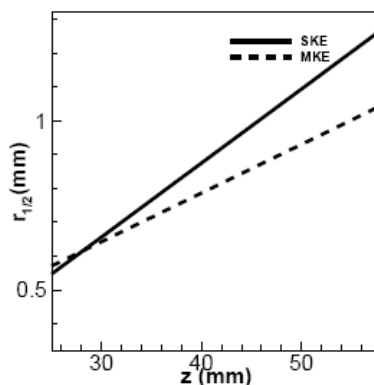
$$\tilde{u}(z, r_{1/2}) = \frac{1}{2} \tilde{u}(z, 0) \quad (18)$$

$S$  نرخ گسترش فواره و  $Z_0$  عرض از مبدا را نشان می‌دهد. براساس شکل ۴، نرخ گسترش فواره با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده نسبت به مدل آشفتگی k-ε استاندارد به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد.

1. Modified k-ε (MKE)  
2. Standard k-ε (SKE)



شکل ۳- توزیع محوری سرعت (خط مرکزی) برای مدل آشفتگی k-ε استاندارد و اصلاح شده

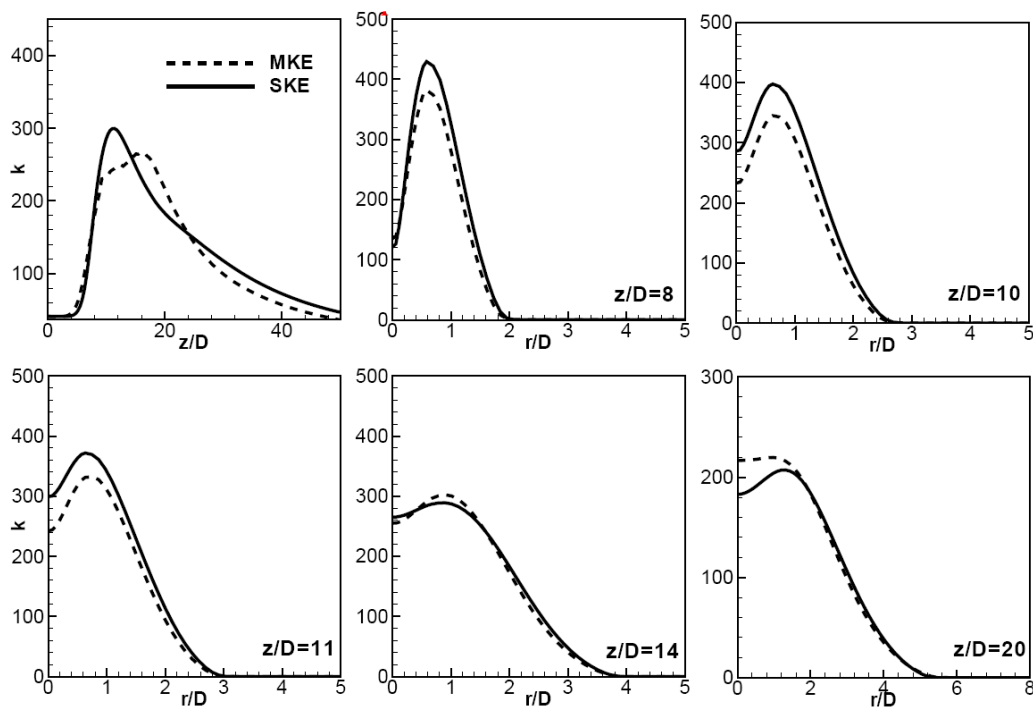


شکل ۴- نرخ گسترش فواره برای مدل های آشفتگی k-ε استاندارد و اصلاح شده

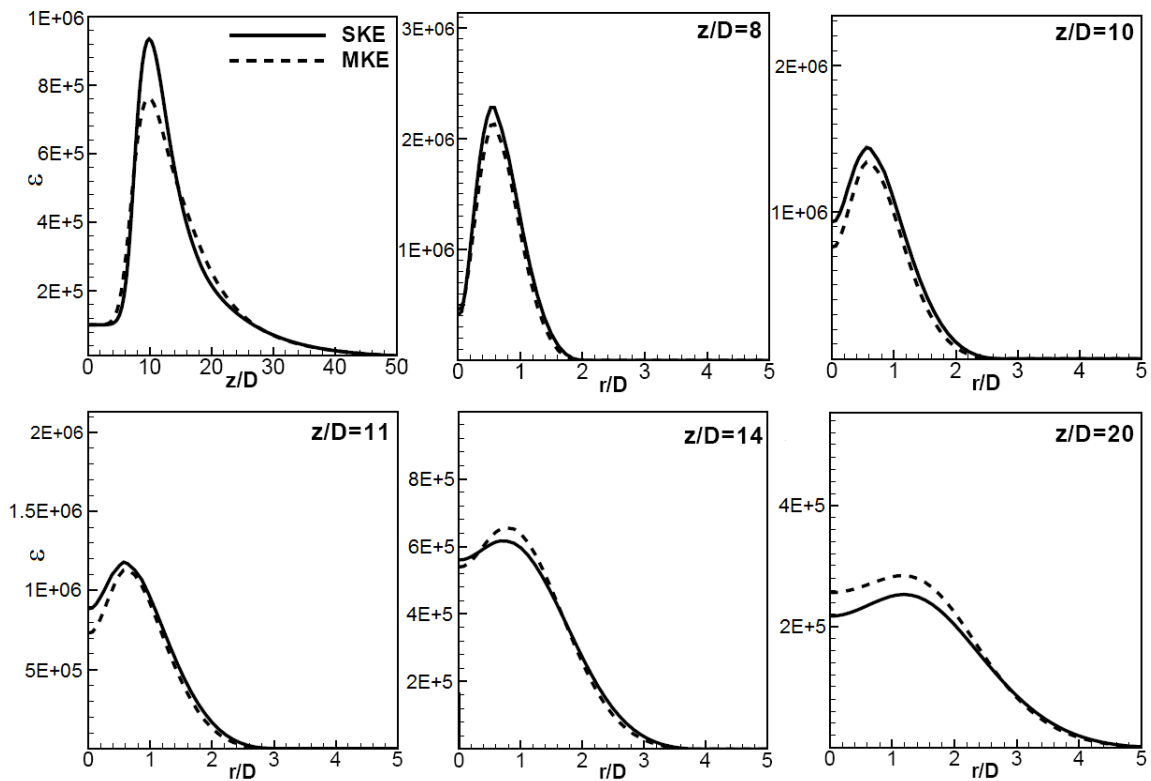
این شبیه‌سازی نشان می‌دهد اصلاح مدل آشفتگی جهت لحاظ‌شدن تغییرات دانسیته منجر به اصلاح نرخ گسترش فواره در فواره‌های مدور در کل دامنه محاسباتی (چه در بالادست و چه در پایین دست جریان) می‌شود. کمیت‌های انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اتلاف آن و گرانیوی گردابه‌ای در اثر اصلاحات انجام‌شده در مدل آشفتگی به صورت قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌یابند. از این رو در ادامه توزیع محوری و شعاعی برای این کمیت‌ها بررسی می‌شود.

**بررسی انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اتلاف و گرانیوی گردابه‌ای تحت تاثیر دانسیته در مدل آشفتگی**  
 به منظور درک بهتر تاثیرات دانسیته بر نتایج حاصل از مدل آشفتگی اصلاح شده، کمیت‌های انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اتلاف آن و گرانیوی گردابه‌ای بررسی می‌شوند. شکل ۵، ۶ و ۷ به ترتیب منحنی‌های انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اتلاف و گرانیوی

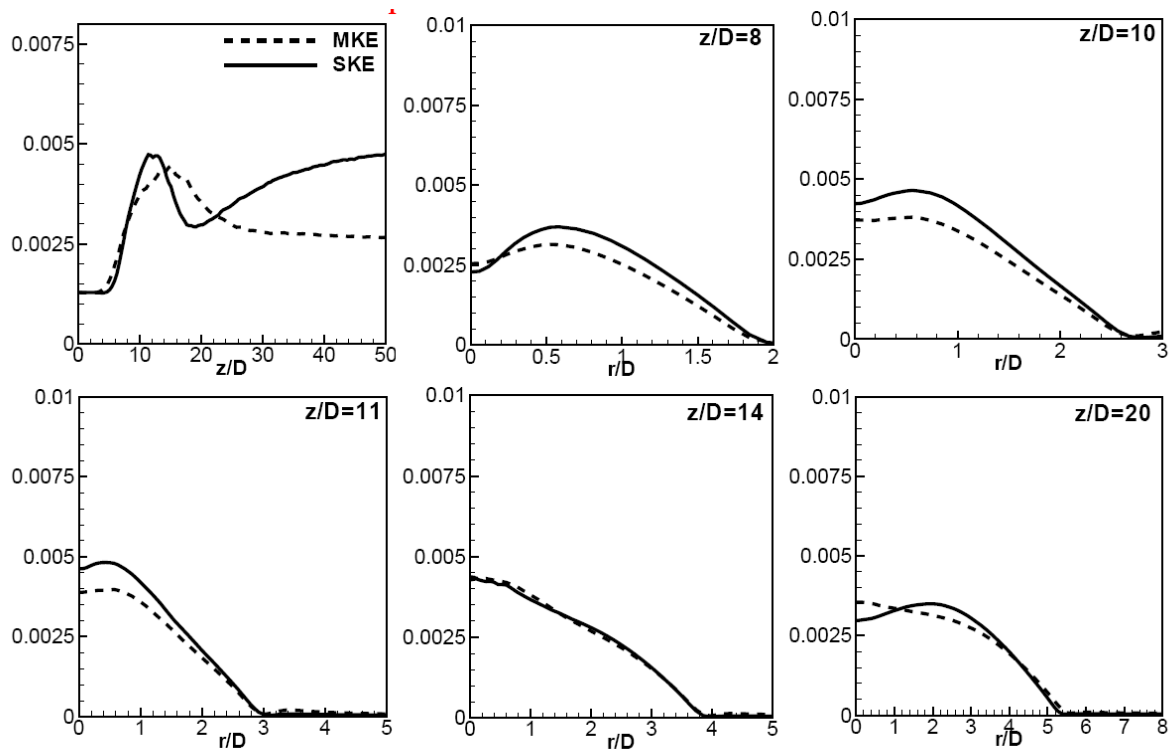
گردابه‌ای را در جهت محوری و شعاعی برای مدل‌های آشفتگی اصلاح‌شده و  $k-\epsilon$  استاندارد نشان می‌دهند. براساس منحنی‌های توزیع شعاعی در مقاطع طولی  $(z/D)$  ۸، ۱۰ و ۱۱، انرژی جنبشی آشفتگی با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده دارای مقادیر کمتری نسبت به مدل آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد است. همچنین، با افزایش فاصله طولی، به دلیل تاثیر فرایند احتراق، انرژی جنبشی آشفتگی با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده شروع به افزایش می‌کند. پیشی گرفتن مقادیر انرژی جنبشی آشفتگی با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده در مقاطع  $(z/D)$  ۱۴ و ۲۰ نسبت به مدل آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد این موضوع را به وضوح نشان می‌دهد. همچنین، عمده تغییرات در این مقاطع بیشتر در نواحی نزدیک به مرکز رخ می‌دهد. همچنین، مقایسه نتایج دو مدل آشفتگی در شکل‌های ۶ و ۷ تاثیرات ناشی از دانسیته در مدل آشفتگی را بر نرخ اتلاف انرژی جنبشی آشفتگی و گرانیوی گردابه‌ای نشان می‌دهند. پیش‌بینی نتایج با مدل آشفتگی اصلاح‌شده مقادیر نرخ اتلاف و گرانیوی گردابه‌ای را کمتر از مقادیر مربوطه در مدل آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد در مقاطع  $(z/D)$  ۸، ۱۰ و ۱۱ نشان می‌دهد. همچنین، در مدل آشفتگی اصلاحی، کاهش دانسیته در فرایند احتراق موجب افزایش نرخ اتلاف و گرانیوی گردابه‌ای در مقاطع  $(z/D)$  ۱۴ و ۲۰ می‌شود. با توجه به اینکه علامت جمله اصلاحی در معادله انرژی جنبشی آشفتگی مثبت است، و چون انبساط متوسط در جریان‌های احتراقی با کاهش دانسیته مثبت است، از این رو انرژی جنبشی آشفتگی در ناحیه احتراق افزایش یافته، این امر در نهایت منجر به افزایش نرخ اتلاف و گرانیوی گردابه‌ای در ناحیه احتراق می‌شود. از سوی دیگر، در ناحیه اختلاط سوخت سرد و جریان همسوی گرم، به دلیل افزایش دانسیته جریان گرم همسو، انرژی جنبشی آشفتگی و در نهایت نرخ اتلاف آن و گرانیوی گردابه‌ای در ناحیه مربوطه کاهش می‌یابد. مقایسه نتایج دو مدل آشفتگی در منحنی توزیع محوری (در خط مرکزی) در پایین دست جریان  $(z/D)$  بزرگ‌تر از ۲۵، مقدار انرژی جنبشی آشفتگی و گرانیوی گردابه‌ای به دست آمده از مدل آشفتگی اصلاح شده را کمتر از مقادیر در مدل آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد نشان می‌دهد. در این ناحیه، به دلیل اتمام فرایند احتراق و وجود اختلاط، دانسیته سیال افزایش می‌یابد. این امر در نهایت کاهش انرژی جنبشی آشفتگی و در نتیجه کاهش گرانیوی گردابه‌ای را در بر خواهد داشت.



شکل ۵- توزیع محوری (خط مرکزی) و شعاعی انرژی جنبشی آشفتگی برای مدل‌های آشفتگی  $k-\epsilon$  استاندارد و اصلاح‌شده



شکل ۶- توزیع محوری (خط مرکزی) و شعاعی نرخ اتلاف انرژی جنبشی آشفتگی برای مدل آشفتگی  $k-\varepsilon$  استاندارد و اصلاح شده

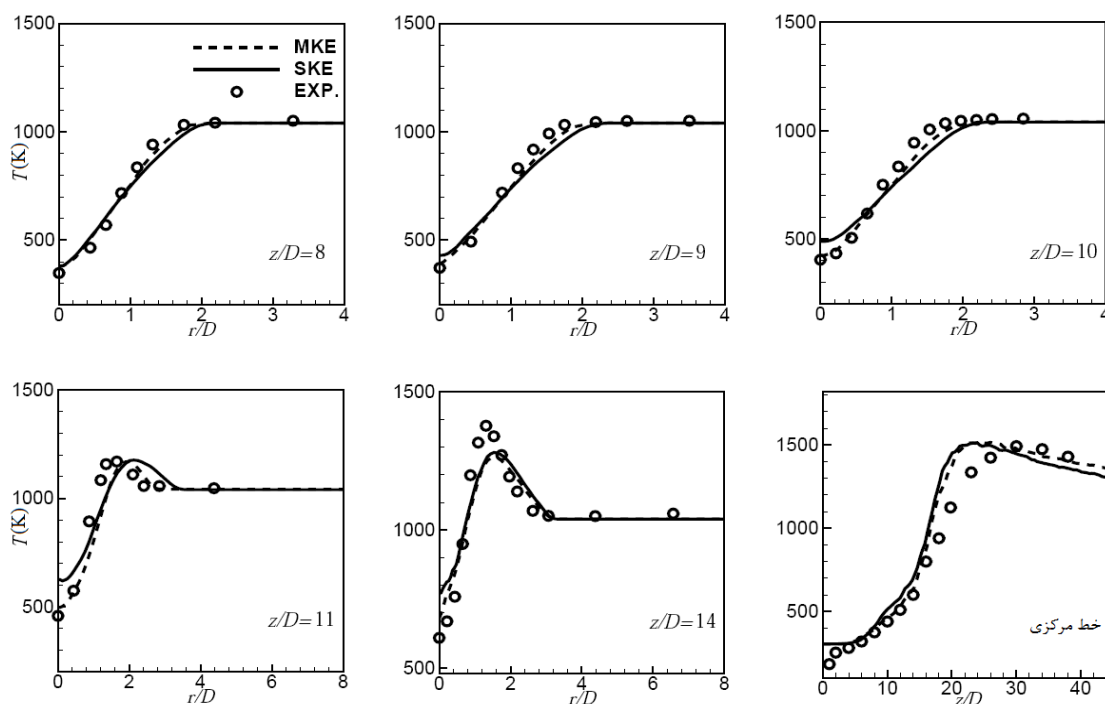


شکل ۷- توزیع محوری (خط مرکزی) و شعاعی انرژی گرانبه‌ای برای مدل آشفتگی  $k-\varepsilon$  استاندارد و اصلاح شده

در ادامه تاثیر اصلاح مدل آشفته‌گی بر کمیات اسکالر با استفاده از منحنی‌های توزیع شعاعی و محوری بررسی می‌شود. همچنین، به‌منظور بررسی عملکرد مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده، نتایج به‌دست آمده از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی گزارش شده توسط کابرا و همکارانش [۱۶] مقایسه می‌شود.

### تاثیر مدل‌سازی آشفته‌گی بر پیش‌بینی کمیات اسکالر

عملکرد دو مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده و  $k-\epsilon$  استاندارد در پیش‌بینی کمیات اسکالر در این قسمت ارزیابی می‌شود. شکل ۸ منحنی‌های توزیع به‌دست آمده از دو مدل آشفته‌گی را در راستای محوری و شعاعی برای دمای متوسط نشان می‌دهد. مقایسه نتایج حاصل از دو مدل آشفته‌گی، اهمیت مدل آشفته‌گی بر پیش‌بینی دمای متوسط را نشان می‌دهد. استفاده از مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده در محاسبات منجر به بهبود نتایج نسبت به مدل  $k-\epsilon$  استاندارد می‌شود. براساس بررسی انجام‌شده، در مقاطع ( $z/D$ ) ۸، ۹ و ۱۰ نتایج توزیع دمایی به‌دست آمده با مدل اصلاح‌شده مطابقت خوبی نسبت به داده‌های تجربی در مقایسه با نتایج مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد دارد. علاوه بر انحراف نتایج حاصل از دو مدل آشفته‌گی برای پیش‌بینی توزیع شعاعی دما در مقطع  $z/D=11$  بهبود نتایج با استفاده از مدل اصلاح‌شده نسبت به مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد مشهود است. همچنین، در مقطع  $z/D=14$  هر چند بهبود نسبی نتایج دما در نزدیکی ناحیه مرکزی با استفاده از مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده مشاهده می‌شود، ولی تقریباً دو مدل آشفته‌گی نتایج مشابهی را برای توزیع شعاعی دما در نواحی دیگر ارائه می‌کنند.



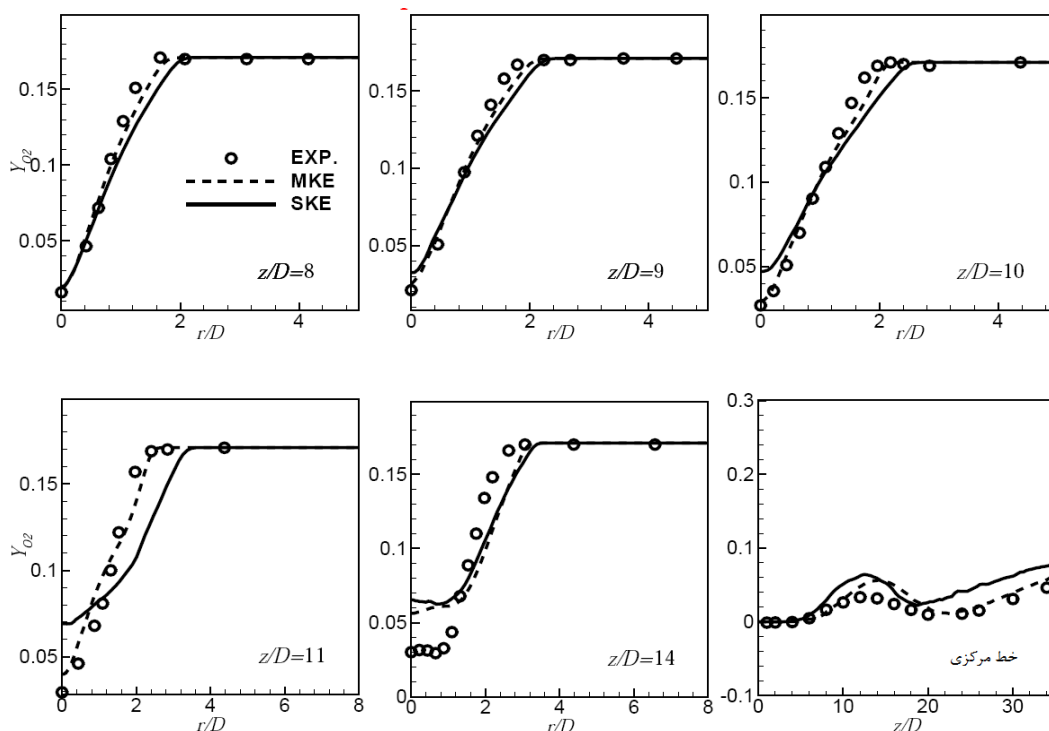
شکل ۸- توزیع محوری (در خط مرکزی) و شعاعی دمای متوسط برای مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد و اصلاح‌شده

همان‌طور که در قبل عنوان شد، یکی از معایب مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد پیش‌بینی بیشتر نرخ گسترش فواره در فواره‌های مدور است. مقایسه نتایج کمیات اسکالر به‌دست آمده از دو مدل آشفته‌گی در مقاطع ( $z/D$ ) ۸، ۹ و ۱۰ نشان می‌دهد نرخ گسترش فواره به‌دست آمده از مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده کمتر از مقدار نرخ گسترش با استفاده از مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد است. این پیش‌بینی با یافته‌های قبلی در خصوص اصلاح نرخ گسترش فواره با استفاده از مدل آشفته‌گی اصلاح‌شده

مطابقت دارد. علی‌رغم بهبود این رفتار توسط مدل اصلاح‌شده، تغییرات دمایی گزارش‌شده براساس نتایج تجربی مؤید آن است که نرخ گسترش فواره در واقع حتی کمتر از پیش‌بینی حاصل از مدل آشفستگی اصلاح‌شده است. با این‌وجود، کاملاً واضح است پیش‌بینی نتایج برای مقادیر دما چه در مرکز و چه در ناحیه جریان همسو با استفاده از مدل آشفستگی اصلاح‌شده بهتر است. حداکثر درصد اختلاف در نتایج بین دو مدل آشفستگی در مقاطع ( $z/D$ ) ۸، ۹، ۱۰، ۱۱ و ۱۴ به ترتیب ۳، ۷، ۱۴، ۲۲ و ۷ است.

شکل ۹ منحنی‌های توزیع به‌دست آمده از دو مدل آشفستگی در راستای محوری و شعاعی برای کسر جرمی متوسط اکسیژن را نشان می‌دهد. مشاهدات بیانگر این حقیقت است که مدل آشفستگی اصلاح‌شده دارای تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر منحنی توزیع محوری و شعاعی برای کسر جرمی متوسط اکسیژن است. همچنین، بهبود نتایج در ناحیه اختلاط در مقاطع محوری ۸، ۹ و ۱۰ کاملاً مشهود است. در مقطع  $z/D=11$ ، علی‌رغم انحراف منحنی‌های توزیع شعاعی در هر دو مدل آشفستگی، نتایج به‌دست آمده از مدل آشفستگی اصلاح‌شده به داده‌های تجربی نزدیک‌ترند. منحنی‌های توزیع شعاعی در مقطع  $z/D=14$  برای دو مدل آشفستگی نشان می‌دهند هر دو مدل آشفستگی تا حد زیادی دارای نتایج مشابهی هستند. همچنین، براساس منحنی‌های توزیع محوری، نتایج با استفاده از مدل آشفستگی اصلاح‌شده برای کسر جرمی اکسیژن نسبت به نتایج به‌دست آمده از مدل آشفستگی k-ε استاندارد به داده‌های تجربی نزدیک‌ترند. این امر در نواحی پایین‌دست جریان کاملاً مشهود بوده و نشان می‌دهد مدل آشفستگی اصلاح‌شده به‌طور مطلوبی فرایند اختلاط در این ناحیه را پیش‌بینی می‌کند.

بهبود نتایج با استفاده از مدل آشفستگی اصلاح‌شده در مقاطع ( $z/D$ ) ۸، ۹ و ۱۰ تاییدکننده اصلاح نرخ گسترش فواره با استفاده از این مدل آشفستگی است. همچنین عمده تغییرات در این مقاطع در نواحی مرکزی واقع شده و نواحی دور از مرکز کمتر تحت تاثیر این مدل آشفستگی قرار می‌گیرند. حداکثر درصد اختلاف در نتایج بین دو مدل آشفستگی در مقاطع ( $z/D$ ) ۸، ۹، ۱۰، ۱۱ و ۱۴ به ترتیب در حدود ۶، ۱۲، ۲۵، ۳۹ و ۹ است.



شکل ۹- توزیع محوری (در خط مرکزی) و شعاعی کسر جرمی متوسط اکسیژن برای مدل آشفستگی k-ε استاندارد و اصلاح‌شده

## نتیجه‌گیری

در این تحقیق، شعله برخاسته آشفته هیدروژن، تحت شرایط گرم و رقیق شده، با استفاده از دیدگاه معادله انتقال تابع دانسیته احتمال (PDF) توام کمیات اسکالر شبیه‌سازی شد. به دلیل اهمیت اشتعال در این شعله، سازوکار شیمیایی به صورت پیچیده و مدل اختلاط، مدل تصحیح‌شده کرل (Curl) انتخاب شده است. در این کار، تاثیر در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی نسبت به مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد ارزیابی شده است. برای این منظور، جمله همبستگی سرعت-گرادیان فشار در معادله انرژی جنبشی آشفته‌گی در نظر گرفته شده و مدل شده است. لحاظ کردن این جمله در مدل آشفته‌گی بر میدان کمیات اسکالر مانند دما و کسر جرمی اجزا و همچنین محل برخاستگی شعله اثر محسوسی دارد. نتایج نشان می‌دهند در نظر گرفتن این جمله در مدل آشفته‌گی سبب پیش‌بینی بهتر محل برخاستگی شعله نسبت به نتایج مدل  $k-\epsilon$  استاندارد می‌شود. در این مطالعه، ملاحظه شد در نظر گرفتن تغییرات دانسیته در مدل آشفته‌گی نسبت به مدل آشفته‌گی  $k-\epsilon$  استاندارد، ضمن بهبود نرخ پهنایش فواره، پیش‌بینی بهتر توزیع دما و کسر جرمی اجزا قبل از شروع واکنش و در پایین دست جریان فواره را به همراه دارد.

## منابع

1. W. M. Pitt, "Large-Scale Turbulent Structures and the Stabilization of Lifted Turbulent Jet Diffusion Flames," *Symposium (International) on Combustion*, 23, 1991, pp. 661-668.
2. K. M. Lyons, "Toward an Understanding of the Stabilization Mechanisms of Lifted Turbulent Jet Flames: Experiments," *Progress in Energy and Combustion Science*, 33, 2007, pp. 211-231.
3. C. J. Lawn, "Lifted Flames on Fuel Jets in Co-Flowing Air," *Progress in Energy and Combustion Science*, 35, 2009, pp. 1-30.
4. E. Mastorakos, "Ignition of Turbulent Non-Premixed Flames," *Progress in Energy and Combustion Science*, 35, 2009, pp. 57-97.
5. W. M. Pitts, "Assessment of Theories for the Behavior And Blowout of Lifted Turbulent Jet Diffusion Flames," *Symposium (International) on Combustion*, 22, 1989, pp. 809-816.
6. G. T. Kalghatgi, "Blow-out Stability of Gaseous Jet Diffusion Flames. Part I: In Still Air," *Combustion Science and Technology*, 26, 1981, pp. 233-239.
7. H. Eickhoff, B. Lenze, W. Leuckel, "Experimental Investigation on the Stabilization Mechanism of Jet Diffusion Flames," *Symposium (International) on Combustion*, 20, 1985, pp. 311-318.
8. S. R. Gollahalli, O. Savaş, R. F. Huang, J. L. Rodriguez, "Structure of Attached And Lifted Gas Jet Flames in Hysteresis Region," *Symposium (International) on Combustion*, 21, 1988, pp. 1463-1471.
9. F. Takahashi, W. J. Schmoll, "Lifting Criteria of Jet Diffusion Flames," *Symposium (International) on Combustion*, 23, 1991, pp. 677-683.
10. R. W. Bilger, "Future Progress in Turbulent Combustion Research," *Progress in Energy and Combustion Science*, 2000, pp. 367-380.
11. S. H. Kim, K. Y. Huh, R. W. Bilger, "Second-Order Conditional Moment Closure Modeling of Local Extinction and Reignition in Turbulent Non-Premixed Hydrocarbon Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, 2002, pp. 2131-2137.
12. D. Bradley, P. H. Gaskell, X. J. Gu, "The Modeling of Aerodynamic Strain Rate and Flame Curvature Effects in Premixed Turbulent Combustion," *Symposium (International) on Combustion*, 27, 1998, pp. 849-856.
13. M. Chen, M. Herrmann, N. Peters, "Flamelet Modeling of Lifted Turbulent Methane/Air and Propane/Air Jet Diffusion Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 167-174.
14. C. M. Muller, H. Breitbach, N. Peters, "Partially Premixed Turbulent Flame Propagation in Jet Flames," *Symposium (International) on Combustion*, 25, 1994, pp. 1099-1106.
15. N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
16. R. Cabra, T. Myhrvold, J. Y. Chen, R. W. Dibble, A. N. Karpetis, R. S. Barlow, "Simultaneous Laser Raman-Rayleigh-Lif Measurements and Numerical Modeling Results of a Lifted Turbulent H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Flame in a Vitiated Coflow," *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, 2002, pp. 1881-1888.
17. T. Myhrvold, I. S. Ertesvag, I. R. Gran, R. Cabra, J. Y. Chen, "A Numerical Investigation of a lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Turbulent Jet Flame in a Vitiated Coflow," *Combustion Science and Technology*, 178, 2006, pp. 1001-1030.
18. A. R. Masri, R. Cao, S. B. Pope, G. M. Goldin, "PDF Calculations of Turbulent Lifted Flames of H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Fuel Issuing into a Vitiated Co-Flow," *Combustion Theory and Modeling*, 8, 2003, pp. 1-22.
19. R. R. Cao, S. B. Pope, A. R. Masri, "Turbulent Lifted Flames in a Vitiated Coflow Investigated using Joint PDF Calculations," *Combustion and Flame*, 142, 2005, pp. 438-453.
20. R. L. Gordon, A. R. Masri, S. B. Pope, G. M. Goldin, "A Numerical Study of Auto-Ignition in Turbulent Lifted Flames Issuing into a Vitiated Co-Flow," *Combustion Theory and Modeling*, 11, 2007, pp. 351-376.



21. L. Vervisch, "Using Numerics to Help the Understanding of Non-Premixed Turbulent Flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 11-24.
22. Y. Mizobuchi, Sh. Tachibana, J. Shinio, S. Ogawa, T. Takeno, "A Numerical Analysis of the Structure of a Turbulent Hydrogen Jet Lifted Flame," *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, 2002, pp. 2009-2015.
23. <http://www.me.berkeley.edu/cal/vcb/data/VCHNData.html>
24. W. C. Strahle, "Velocity-Pressure Gradient Correlation in Reactive Turbulent Flows," *Combustion Science and Technology*, 32, 1983, pp. 289-305.
25. K. H. Luo, "Combustion Effects on Turbulence in a Partially Premixed Supersonic Diffusion Flame," *Combustion and Flame*, 119, 1999, pp. 417-435.
26. C. Chen, J. Riley, P. A. McMurtry, "A Study of Favre Averaging in Turbulent Flows with Chemical Reaction," *Combustion and Flame*, 87, 1991, pp. 257-277.
27. J. Chomiak, J. R. Nisbet, "Modeling Variable Density Effects in Turbulent Flames-Some Basic Considerations," *Combustion and Flame*, 102, 1995, pp. 371-386.
28. J. Muller, Z. Zhao, A. Kazakov, F. L. Dryer, "An Updated Comprehensive Kinetic Model of Hydrogen Combustion," *International Journal of Chemical Kinetics*, 36, 1998, pp. 566-575.
29. R. A. Yetter, F. L. Dryer, H. Rabitz, "A Comprehensive Reaction Mechanism for Carbon Monoxide/Hydrogen/Oxygen Kinetics," *Combustion Science and Technology*, 79, 1991, pp. 97-128.
30. D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries Inc., La Canada, California, 1993.
31. S. B. Pope, "PDF Method for Turbulent Reactive Flows," *Progress in Energy and Combustion Science*, 11, 1985, pp. 119-192.
32. R. O. Fox, *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*, Cambridge University Press, New York, 2003.
33. L. L. Smith, R.W. Dibble, L. Talbot, R. S. Barlow, C. D. Carter, "Laser Raman Scattering Measurements of Differential Molecular Diffusion in Turbulent Non-Premixed Jet Flames of H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> Fuel," *Combustion and Flame*, 100, 1995, pp. 153-160.
34. R. S. Barlow, J. H. Frank, A. N. Karpetis, J. Y. Chen, "Piloted Methane/Air Jet Flames: Transport Effects and Aspects of Scalar Structure", *Combustion and Flame*, 143, 2005, pp. 433-449.
35. A. Mardani, S. Tabejamaat, M. Ghamari, "Numerical Study of Influence of Molecular Diffusion in the Mild Combustion Regime," *Combustion Theory and Modelling*, 14, 2010, pp. 747-774.
36. S. B. Pope, "A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow," *Combustion Science and Technology*, 25, 1981, pp. 159-174.
37. M. Muradoglu, and S. B. Pope, "Local Time-Stepping Algorithm for Solving Probability Density Function Turbulent Model Equations," *AIAA J.*, 40, 2002, pp. 1755-1763.
38. E. Amani, M. R. Heyrani Noubari, "A Comparative Study of Premixed Turbulent Combustion with PDF and RANS Methods," *Fuel and Combustion*, 1, 2010, pp. 35-47.

## English Abstract

# Turbulence Modeling in a Lifted Diffusion Jet Flame Issuing into a Hot and Dilluted Coflow

S. M. Mirnajafizadeh<sup>1</sup>, M. T. Sadeghi<sup>2</sup> and R. Sotudeh Gharebagh<sup>3</sup>

1- PhD Student, Chem. Eng., Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

2- Assoc. Prof., Chem. Eng., Faculty of Engineering, Tehran University, Tehran, Iran (Correspondent author)

3- Prof., Chem. Eng., Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

(Received: 2012.6.6, Received in revised form: 2012.12.9, Accepted: 2013.3.3)

In this paper, a turbulent lifted diffusion jet flame is studied using the composition probability density function approach in a two-dimensional domain with detailed chemistry. The main purpose is to investigate the effect of density variations on scalar fields and lift-off height. For this purpose, the standard k-ε model as well as a modified turbulence model for variable density conditions are employed to investigate the impact of turbulence models on the flame behavior and the place of stabilization. The results show that the best agreement between the numerical results and measurements is achieved using the modified turbulence model. A comparison between the numerical results and measurements shows that the standard k-ε model over-predicts the spreading and decay rates in the jet. Using the velocity-pressure gradient term in the modified turbulence model resolves the relevant problem to a great extent and leads to better results than those of the standard k-ε model.

**Keywords:** Lifted jet flame, Density variations, Turbulent models, Modeling, Autoignition