

شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ شعله‌های سندیا D, E و F با توسعه مدل اشتعال لایه اختلاطی متغیر (VIML) در تولید کتابخانه دوبعدی FGM

سعیدرضا زادسیرجان^۱ و صادق تابع جماعت^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، s_zadsirjan@aut.ac.ir

۲- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، sadegh@aut.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۹/۱۲، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۱۱/۱، پذیرش: ۹۷/۱۲/۶)

چکیده: کتابخانه فلیملت FGM براساس دو بعد کسر مخلوط و متغیر پیشروی شکل گرفته است. با این کتابخانه امکان شبیه‌سازی احتراق برای جریان سوخت و اکسند با ترکیب شیمیایی ثابت وجود دارد. شبیه‌سازی احتراق با استفاده از مدل فلیملت نیازمند افزایش ابعاد کتابخانه فلیملت به بیش از دو بعد است. شعله‌های پایلوت دار سندیا از جمله شعله‌های با چند جریان ورودی است که از جت سوخت، جریان داغ پایلوت و هوا شکل گرفته‌اند. افزایش ابعاد کتابخانه فلیملت منجر به افزایش قابل توجه حجم کتابخانه و افزایش هزینه محاسباتی در فرایند بازخوانی و میان‌بایی داده‌ها از این کتابخانه می‌شود. این مقاله به معرفی روشی ابداعی باهدف تولید کتابخانه دوبعدی فلیملت برای میدان جریانی با چند ورودی و یا ترکیب غیرثابت سوخت و اکسند ورودی می‌پردازد. روش ابداعی بر پایه روش مدل اشتعال لایه اختلاط (IML) توسعه یافته و مدل اشتعال لایه اختلاطی متغیر (VIML) نام‌گذاری می‌شود. برای اعتبارسنجی این مدل پیشنهادی، از شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ (LES) شعله‌های سندیا D, E و F با اعداد رینولدز ۲۲۴۰۰، ۳۳۶۰۰ و ۴۴۸۰۰ بهره گرفته شده است. نتایج شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ نشان می‌دهد که کتابخانه دوبعدی توانایی مدل‌سازی میدان جریان را با سه ورودی متفاوت را دارد و می‌تواند به عنوان جایگزین کتابخانه‌هایی با ابعاد بیش از دو بعد گردد که منجر به کاهش زمان محاسبه فرایند بازیابی اطلاعات و کاهش حافظه رم مورد نیاز برای ذخیره کتابخانه به مقدار قابل توجهی می‌شود. نتایج شبیه‌سازی نشان‌دهنده همخوانی مناسب مقادیر میانگین و واریانس کسر مخلوط و دما با داده‌های تجربی برای هر سه شعله است. افزایش عدد رینولدز باعث افزایش خطا قبل از توسعه جریان جت در محاسبه دما شده که ناشی از عدم دقت در پیش‌بینی کسر مخلوط در آن محدوده است.

کلیدواژگان: کتابخانه فلیملت، شعله سندیا، مدل اشتعال لایه اختلاطی متغیر، شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ

مقدمه

افزایش روزافزون رویکرد اقتصادی و زیست‌محیطی به فرایند احتراق و سامانه‌های احتراقی، موجب تحقیقات وسیع‌تر و دقیق‌تر با استفاده از ابزارهای پیشرفته تجربی و عددی در این حوزه شده است. شبیه‌سازی فرایند احتراق همیشه یک چالش بزرگ برای سامانه‌های محاسباتی برای دستیابی به اطلاعات دقیق‌تر از میدان جریان واکنش است. این چالش، موجب شده تلاش‌های فراوانی در راستای مدل‌سازی فرایند احتراق با کمترین هزینه و بیشتر دقت صورت گیرد. کوچک بودن مقیاس زمان و مقیاس طول در واکنش شیمیایی، کلید کاهش معادلات حاکم در مدل‌سازی فرایند احتراق است. بر این اساس، تکنیک‌های کاهش شیمیایی^۱ و مدل‌های فلیملت آرام^۱ توسعه یافته است. ایده اصلی این روش‌ها این است که با

1. Chemical reduction techniques

فرض کوچک بودن مقیاس زمان و طول در واکنش شیمیایی، ترکیب شیمیایی را می‌توان با چند متغیر کنترل‌کننده^۲ بیانکرد. در نتیجه حل معادلات انتقال متغیرهای کنترل‌کننده به جای معادلات غیرخطی گونه‌های شیمیایی، به‌طور قابل‌توجهی نیاز به منابع محاسباتی در شبیه‌سازی عددی را کاهش می‌دهد [۱]. با محاسبه و در اختیار داشتن متغیرهای کنترل، دیگر متغیرهای ترموشیمیایی میدان مانند دما و گونه‌های شیمیایی را می‌توان از یک پایگاه داده پیش‌پردازش شده مانند کتابخانه فلیملت بازیابی کرد.

تکنیک کاهش شیمیایی تنها بر اساس واکنش‌های شیمیایی ساخته‌شده است و معادلات انتقال را شامل نمی‌شود. بنابراین، در نواحی با دمای پایین مخلوط که متناظر با سرعت اندک واکنش است، خطاهای مدل‌سازی افزایش می‌یابد. در این نواحی به دلیل فرض اندک بودن مقیاس زمان فرایند شیمیایی نسبت به پدیده‌های انتقالی نظیر نفوذ مولکولی نقض شده و اثر نفوذ مولکولی گونه‌های شیمیایی نسبت به واکنش‌های شیمیایی غلبه دارد [۲-۴].

در مدل فلیملت شعله از شعله‌های کوچک یک‌بعدی آرام وابسته به زمان تشکیل شده است. فرمول‌بندی این مدل توسط پترز [۵] در سال ۱۹۸۸ پیشنهاد شد. در این روش معادلات غیرتعدادی شیمیایی با معادلات آشفته‌گی جریان توسط تعریف آماری اسکالره‌های کسر مخلوط و نرخ اضمحلال لحظه‌ای کوپل می‌شود.

مدل فلیملت معرفی‌شده توسط پترز در محدوده نرخ بالای واکنش یا انرژی فعال‌سازی بالا که به ترتیب با عدد دامکولر و زلدویوچ نشان داده می‌شود، اعتبار دارد. همچنین، در شعله پیش‌آمیخته آشفته، اعتبار مدل فلیملت توسط ضخامت شعله تعیین می‌شود که باید از کوچک‌ترین مقیاس طول آشفته کوچک‌تر باشد [۵]. در مخلوط غیرپیش‌آمیخته، کسر مخلوط به‌عنوان یکی از ابعاد فضای کتابخانه فلیملت شناخته‌شده است. نرخ اضمحلال اسکالر دومین بعد این کتابخانه است که مقیاس زمان نفوذ را مشخص می‌کند.

مدل‌های فلیملت پایا و ناپایا با استفاده از کسر مخلوط و نرخ اضمحلال اسکالر داده‌های ترموشیمیایی را از کتابخانه فلیملت بازیابی می‌کنند. علی‌رغم نتایج موفقیت‌آمیز استفاده از این مدل‌ها در شبیه‌سازی احتراق [۴، ۶-۱۰]، فرایندهای اشتعال و خاموشی همچنان از نقاط ضعف این مدل‌ها هستند [۱۱-۱۳].

مدل فلیملت با متغیر پیشرو^۳ [۱۴-۱۶] و فلیملت منی‌فولد تولیدشده^۴ [۱۷، ۱۸] از یک متغیر پیشروی واکنش به‌جای نرخ اضمحلال اسکالر بهره می‌برند. متغیر پیشروی متعارف، از جمع خطی-وزنی نسبت جرمی گونه‌های شیمیایی شکل می‌گیرد. این متغیر به تعریف کامل‌تر حالت ترموشیمیایی مخلوط کمک می‌کند و خاموشی موضعی و اشتعال دوباره جریان [۱۹] را با دقت بیشتری شبیه‌سازی می‌کند.

روش FGM در ابتدا برای شعله پیش مخلوط طراحی‌شده بود و می‌توانست از چند متغیر پیشرفت واکنش بهره ببرد [۴، ۱۷، ۲۰]. از روش‌های مشابه FGM می‌توان روش ILDM (FPI) [۲۱] و روش (PS-ILDM) [۲۲] را نام برد.

کتابخانه FGM از حل جریان یک‌بعدی جریان مقابل^۵ استخراج می‌شود. به‌صورت متعارف برای پدیده خود اشتعالی، شرایط اولیه حل یک‌بعدی با استفاده از حل جریان پایای غیر واکنشی شعله جریان مقابل به دست می‌آید. این روش به‌صورت ضمنی فرض می‌شود که اختلاط مولکولی دو جریان قبل از شروع واکنش شیمیایی به حالت پایا رسیده است (شرایط اولیه^۶ حل). این فرض برای مخلوطی با گونه‌های بسیار نفوذپذیر و یا مخلوطی که زمان تأخیر اشتعال آن کمتر از مقیاس زمانی برای رسیدن به شرایط پایا باشد، معتبر نیست.

1. Laminar flamelet models
2. Controlling variables
3. Flamelet progressive variable
4. Flamelet generated manifold
5. Counter-flow
6. Initial condition

ابطحی‌زاده و همکاران [۲۳] روش اشتعال لایه اختلاط (IML) ^۱ را معرفی کردند که اجازه می‌دهد واکنش در حین فرایند نفوذ و اختلاط رخ دهد و قادر به محاسبه سینتیک‌های شیمیایی و انتشار گونه‌ها در کنار یکدیگر است. این روش بر مبنای شرایط اولیه حل یک‌بعدی تعریف می‌شود. در شرط اولیه حل یک‌بعدی سوخت و اکسنده به صورت ساکن در مجاورت یکدیگر قرار می‌گیرند به گونه‌ای که کسر مخلوط شبیه به تابع پله (صفر برای اکسنده و یک برای سوخت) است. یکی از مزیت‌های این روش امکان مدل‌سازی دقیق‌تر نفوذ مولکولی هرگونه در بازه قبل از اشتعال است.

علاوه بر شرایط اولیه، شرط مرزی دیگر تفاوت اساسی در روش IML با روش شعله جریان مقابل است. شرط مرزی سوخت و اکسنده در روش IML معادل نرخ کرنش صفر در مرز است. به عبارتی دبی سوخت و اکسنده در مرز برابر با صفر است و تنها سوخت و اکسنده که از شرط اولیه در میدان حل حضور دارند به واسطه نفوذ مولکولی مخلوط شده و در صورت وجود شرایط مناسب مشتعل می‌شوند. اما در روش شعله جریان مقابل، دو جریان با سرعت معین وارد میدان حل شده و علاوه بر نفوذ مولکولی وجود گرادیان سرعت و فشار منجر به انتقال و نفوذ مولکول‌های دو جریان می‌شود.

یکی از چالش‌های محاسباتی پیش روی مدل فلیملت دقت و ابعاد کتابخانه آن است. افزایش ابعاد یا حجم بالای کتابخانه منجر به افزایش هزینه محاسباتی می‌شود. به صورت کلی کتابخانه فلیملت بر پایه حل یک‌بعدی جریان سوخت و اکسنده تولید شده است. بنابراین، این کتابخانه تنها برای شبیه‌سازی میدان جریان تنها با دو ورودی سوخت و اکسنده با ترکیب شیمیایی و ثابت مطابق با حل یک‌بعدی کاربرد ایده‌آل دارد. در نتیجه با افزایش جریان‌های ورودی به میدان مانند استفاده از جریان بازگشتی محصولات احتراق و یا جریان پایلوت، ابعاد کتابخانه فلیملت برای حفظ کارایی آن افزایش می‌یابد [۲۴-۲۶].

در این مقاله روش ابداعی باهدف استفاده از کتابخانه فلیملت دوبعدی در میدان‌هایی با چند جریان ورودی معرفی می‌شود. این روش بر پایه روش IML است و روش اشتعال لایه اختلاط متغیر (VIML) ^۲ نامیده می‌شود. جلوگیری از افزایش ابعاد کتابخانه فلیملت موجب کاهش هزینه محاسباتی و افزایش سرعت محاسبات می‌شود. با هدف اعتبارسنجی این روش، شعله‌های سندیا E، D و F با استفاده از روش FGM و شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ شبیه‌سازی شده‌اند. این شعله‌ها به ترتیب دارای عدد رینولدز ۲۲۴۰۰، ۳۳۶۰۰ و ۴۴۸۰۰ هستند.

رهیافت عددی

در این قسمت مدل اشتعال لایه اختلاط (IML) و مدل توسعه‌یافته VIML تشریح می‌شود. همچنین، معادلات حاکم بر جریان یک‌بعدی و معادلات LES نیز توصیف می‌شود. برای اعتبارسنجی این مدل از شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ شعله‌های سندیا E، D و F استفاده شده است.

اشتعال لایه اختلاط

روش متداول برای تولید کتابخانه فلیملت استفاده از حل یک‌بعدی جریان متقابل است. برای تولید شرط اولیه حل جریان مقابل ابتدا جریان غیرواکنشی حل شده پس از رسیدن به حالت پایا، نتیجه این حل به عنوان شرط اولیه برای حل جریان واکنشی استفاده می‌شود.

در این روش تولید شرط اولیه، یک فرض به صورت ضمنی به کار گرفته شده است که فرایند اشتعال و احتراق پس از پایا شدن اختلاط سوخت و اکسنده رخ می‌دهد. این فرض زمانی صادق است که زمان تأخیر اشتعال τ_{ign} از زمان اختلاط τ_{mix} بیشتر است. به این ترتیب، در شرایطی که $\tau_{ign} \leq \tau_{mix}$ باشد، اشتعال در حین فرایند اختلاط رخ می‌دهد و فرض فوق نقض می‌شود [۲۳]. به عنوان مثال، مولکول هیدروژن در قیاس نسبت به مولکول‌های بزرگ‌تر سوخت مانند هیدروکربن‌ها دارای ضریب

1. Ignition mixing layer
2. Variable ignition mixing layer

نفوذ و واکنش پذیری بیشتری است. این رفتار خاص منجر به کاهش زمان تأخیر اشتعال در سوخت‌های مخلوط شده با هیدروژن می‌شود [۲۸، ۲۷].

برای حل این مشکل و افزایش بازه اعتبار کتابخانه فیلملت، ابطیحی زاده و همکاران [۲۳] روش اشتعال لایه اختلاطی (IML) را پیشنهاد دادند. در این روش سوخت و اکسنده با نرخ کرنش صفر و در حالت سکون در مجاورت یکدیگر قرار داده می‌شود و تنها از طریق نفوذ مولکولی در یکدیگر نفوذ کرده و مشتعل می‌شود. به این ترتیب این امکان وجود دارد که فرایند اشتعال در حین فرایند اختلاط رخ دهد. در این روش که مانند روش شعله مقابل یک‌بعدی است، محل مرز تماس سوخت و اکسنده x_t می‌نامیم. شرط اولیه حل عبارت‌اند از:

$$u_f = u_{ox} = 0, \quad \zeta(x) = \begin{cases} 1, & x < x_t \\ 0, & x \geq x_t \end{cases} \quad (1)$$

در روش IML کسر مخلوط ابتدا به صورت پله است اما با گذر زمان و نفوذ مولکولی سوخت و اکسنده در یکدیگر، اندازه مطلق گرادیان کسر مخلوط $|\partial\zeta/\partial x|$ در محل تماس کاهش می‌یابد. به این ترتیب نرخ اضمحلال اسکالر، $\xi = D|\partial\zeta/\partial x|^2$ ، در طول زمان کاهش می‌یابد، شکل ۱ نشان‌دهنده این رفتار است.

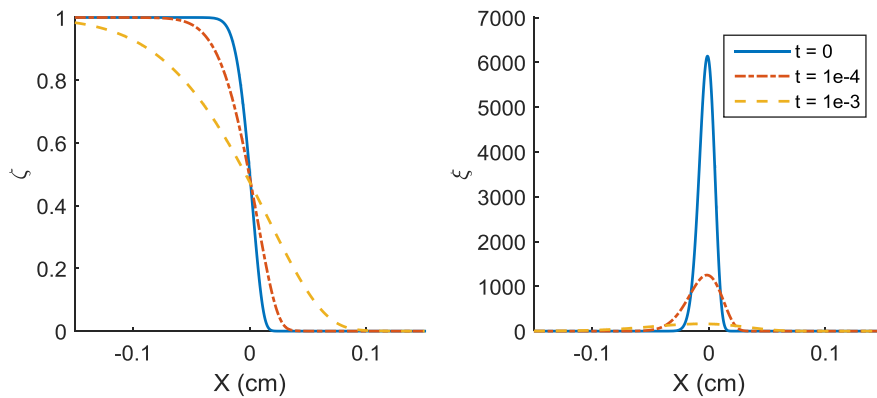


Figure 1- Effect of the molecular diffusion on mixture fraction (left) and scalar dissipation rate (right)

شکل ۱- کاهش کسر مخلوط (چپ) و نرخ اضمحلال اسکالر (راست) در اثر نفوذ مولکولی

برای مقایسه روش شعله مقابل با استفاده از مدل IML، فرایند اشتعال و احتراق در ترکیب سوخت $50\% \text{H}_2 + 50\% \text{N}_2$ و هوا به صورت غیرپیش آمیخته برای سه نرخ کرنش ۱۰۰، ۱۰، و ۰ بررسی می‌شود. دمای سوخت ۱۰۰۰ K و دمای هوا ۳۰۰ K است. نرخ کرنش صفر معادل با روش IML است. در شکل ۲، شرط اولیه برای سه حالت فوق نشان داده شده است.

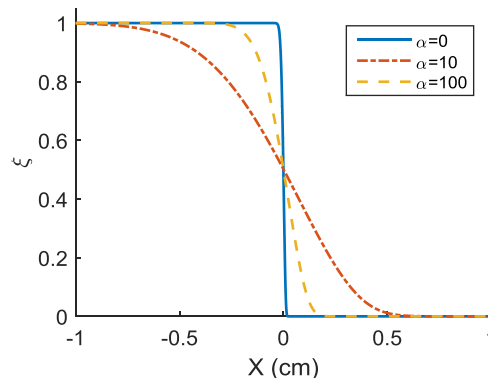


Figure 2- The initial condition for mixture fraction for strain rate 0,10, 100

شکل ۲- شرط اولیه کسر مخلوط برای حل جریان مقابل برای سه نرخ کرنش ۰، ۱۰ و ۱۰۰

به دلیل شرایط اولیه متفاوت زمان تأخیر اشتعال نیز متفاوت به دست می آید. زمان تأخیر اشتعال از دو روش رشد دما یا استفاده از غلظت مولکولی HO_2 به دست می آید. در روش اول، در هر زمان بیشترین تغییرات دما نسبت به شرایط اولیه سنجیده می شود، (شکل ۴). در روش دوم در هر لحظه بیشینه غلظت مولکولی HO_2 محاسبه می شود [۲۹]، (شکل ۳).

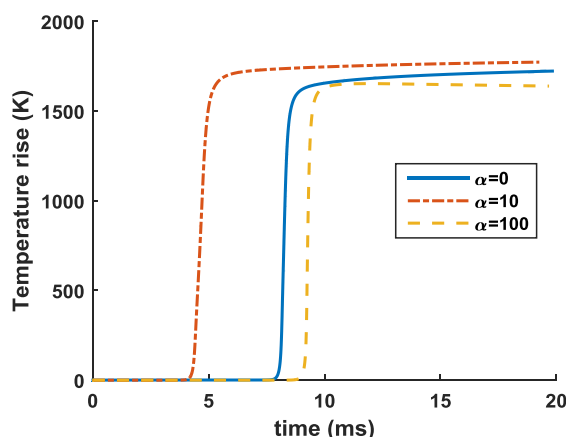


Figure 3- The effect of initial condition strain rate on ignition delay time indicated by temperature rise up

شکل ۳- اثر نرخ کرنش اولیه اولیه بر زمان تأخیر اشتعال و رشد دما

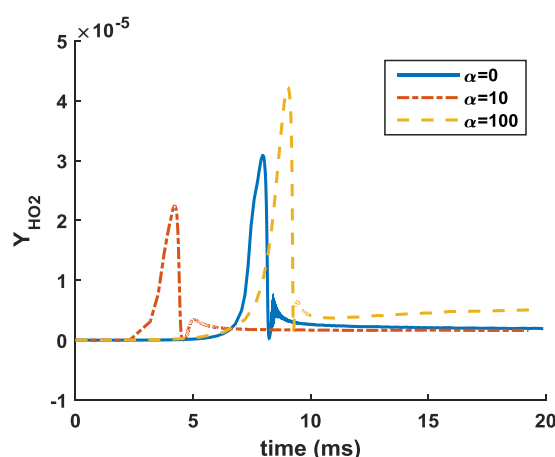


Figure 4- the effect of initial condition strain rate on ignition delay time indicated by HO_2 mass fraction

شکل ۴- اثر نرخ کرنش اولیه شرایط اولیه زمان تأخیر اشتعال با استفاده بیشینه کسر جرمی گونه HO_2

رادیکال HO_2 از جمله گونه های شیمیایی میانی است که قبل از رشد دمای ناشی از اشتعال به مقدار قابل ملاحظه ای افزایش و پس از اشتعال مصرف شده و کاهش می یابد. به این ترتیب زمانی که این گونه شیمیایی به بیشینه مقدار خود می رسد، نشانگر مناسبی برای تأخیر زمان اشتعال است. همان گونه که شکل ۳ و ۴ نشان داده شده است، رشد دما و بیشینه غلظت HO_2 همزمان رخ می دهد.

اشتعال لایه اختلاطی متغیر (VIML)

تفاوت اصلی روش IML با شعله مقابل در شرط مرزی و اولیه شعله یک بعدی است. در شعله مقابل ترکیب درون میدان توسط جریان ورودی از مرز تعیین می شود. که به واسطه ورود سوخت و اکسنده به میدان است و شرط مرزی سرعت در مرز وجود

دارد. در نتیجه نرخ کرنش در میدان بزرگتر از صفر است. اما در روش IML جریان اکسند و سوخت از مرز به میدان وارد نمی‌شود و سوخت و اکسند تنها براساس شرط اولیه در $t=0$ در میدان حضور دارند. در این روش نرخ کرنش صفر است و در نتیجه تنها پدیده انتقالی اثر نفوذ ناشی از گرادیان‌های غلظت و دما است. به صورت خلاصه، در نرخ کرنش صفر، ترکیب شیمیایی و ترمودینامیکی سوخت و اکسند توسط شرط اولیه و در کرنش بزرگتر از صفر توسط شرط مرزی تعیین می‌شود. از آنجا که در روش شعله مقابل ترکیب شیمیایی سوخت و اکسند ثابت است در نتیجه کتابخانه فلیملت تولید شده بر این اساس، تنها برای حل میدان جریانی مناسب است که تنها یک دما و ترکیب شیمیایی برای سوخت و اکسند به میدان حل وارد می‌شود. در شرایطی که چند جریان مختلف ورودی وجود دارد یا دما و ترکیب شیمیایی واکنش‌دهنده‌ها در مرز تغییر می‌کند مانند تغییر غلظت اکسیژن در جریان اکسند، نیاز به افزایش ابعاد کتابخانه فلیملت است [۲۷، ۲۴].

در این روش VIML شرایط اولیه به گونه‌ای در نظر گرفته می‌شود که شرایط مرزی فیزیکی در شعله یک‌بعدی شبیه‌سازی شود. یعنی تغییرات ترکیب شیمیایی و دمای آن مطابق با شرایط مرزی میدان شبیه‌سازی است. تنها شرط در این مورد تغییرات مونوتونیک کسر مخلوط سوخت به اکسند است.

برای بررسی اعتبار این مدل از شعله سندیا D، E و F که دارای سه جریان ورودی به میدان است، بهره گرفته می‌شود. از این پس برای راحتی، در متن شعله‌ها با D, E, F نام‌گذاری می‌شود. شکل ۵ شرایط اولیه در برای حل عددی برای زمان $t=0$ نشان می‌دهد تغییرات کسر مخلوط مطابق با شرایط مرزی ورودی برای شعله D است. در طول زمان با نفوذ مولکولی، کسر مخلوط نیز تغییر می‌کند و نرخ اضمحلال کاهش می‌یابد. کاهش گرادیان کسر مخلوط در این شکل برای $t > 0$ نشان داده شده است. در این شعله جت سوخت ($\zeta = 1$) با قطر $7/2$ mm خارج شده و با جریان گرم محصولات احتراق که پایلوت نامیده می‌شود، احاطه می‌شود. کسر مخلوط پایلوت برابر با 0.27 است. این دو جت در جریان هوا ($\zeta = 0$) به عنوان اکسند قرار می‌گیرد، شکل x. توزیع کسر مخلوط در شعله D مطابق زیر است.

$$\zeta(x, 0) = \begin{cases} 1 & 0 \leq X < r_{jet} \\ 0.27 & r_{jet} \leq X < r_{pilot} \\ 0 & r_{jet} \leq X \end{cases} \quad (2)$$

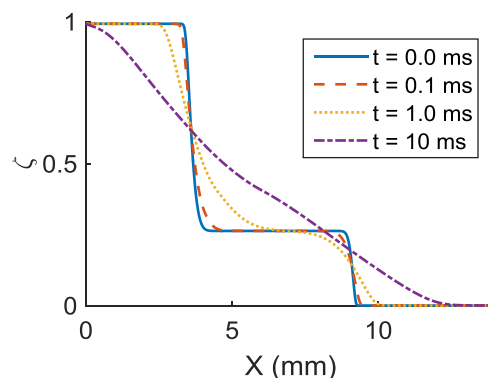


Figure 5- detroration of the spatial mixture fraction gradient due to molecular diffusion in Sandia D flame

شکل ۵- کاهش گرادیان کسر مخلوط در اثر نفوذ مولکولی گونه های شیمیایی در شعله سندیا D

در روش متداول، تغییر در ترکیب سوخت و یا اکسند نیازمند افزایش ابعاد کتابخانه فلیملت است که موجب افزایش هزینه محاسباتی می‌شود. در روش VIML امکان تولید کتابخانه فلیملت دوبعدی برای ترکیب شیمیایی متغیر سوخت و اکسند وجود دارد. در نتیجه باعث کاهش هزینه محاسباتی نسبت به روش متداول می‌شود.

معادلات حاکم بر روش VIML

جریان یک‌بعدی احتراقی با استفاده از یک کد توسعه‌یافته در دانشگاه صنعتی آیندهوفن به نام Chem1D، حل می‌شود. مکانیزم شیمیایی مورد استفاده GRI 3.0 است. معادلات حاکم برای حل یک‌بعدی جریان واکنشی عبارتند از:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u Y_i)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{Le_i c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \omega_i \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u h)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\lambda}{c_p} \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{1}{Le_i} - 1 \right) h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right] \quad (5)$$

رابطه بقای اجزا برای $N_s - 1$ گونه شیمیایی حل می‌شود. شرایط اولیه برای سرعت، u ، کسر جرمی گونه‌ها Y_i ، و آنتالپی h عبارتند از:

$$u(x, 0) = 0 \quad (6)$$

$$Y_i(x, 0) = \begin{cases} Y_{i, fu} & x < 0 \\ Y_{i, ox} & x \geq 0 \end{cases} \quad (7)$$

$$h(x, 0) = \begin{cases} h_{fu} & x < 0 \\ h_{ox} & x \geq 0 \end{cases} \quad (8)$$

چگالی ρ ، رسانش حرارتی λ ، ظرفیت گرمایی ویژه c_p ، ویژگی‌های ترمودینامیک گونه i هستند. N_s تعداد گونه شیمیایی و $\dot{\omega}$ ترم منبع شیمیایی است. عدد لوییس ثابت و غیر واحد برای گونه‌های مختلف فرض شده است. در شکل ۶ عدد لوییس تعدادی از گونه‌های شیمیایی برای شبیه‌سازی شعله D از کد داخلی Chem1D با استفاده از روش تقریب هرشفلدر-کورتیس^۱ محاسبه شده است [۳۰].

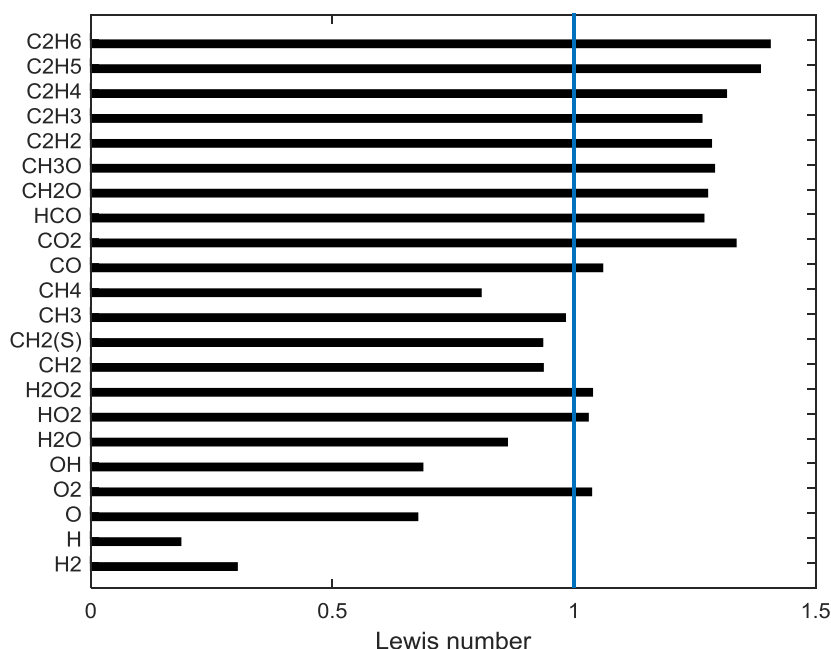


Figure 6- the Lewis number for several chemical species based on the GRI 3.0 chemical mechanism for Sandia D flame

شکل ۶- عدد لوییس برای تعدادی از گونه‌های شیمیایی در شبیه‌سازی احتراق مشعل Sandia D با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 3.0

1. Hirschfelder-Curtiss

در روش IML نفوذ مولکولی عامل اصلی کاهش نرخ اضمحلال اسکالر و نهایتاً اشتعال کاهش جریان واکنش دهنده‌ها است. در مواردی که واکنش دهنده‌ها شامل گونه شیمیایی با ضریب نفوذ بیشتر از دیگر گونه‌ها باشد، امکان اعمال عدد لوییس خاص هرگونه شیمیایی وجود دارد. در عدد لوییس برای تعدادی از گونه‌های شیمیایی در فرایند احتراق مشعل D با استفاده مکانیزم شیمیایی GRI 3.0 به نمایش درآمده است.

رهیافت عددی ادی‌های بزرگ (LES)

رهیافت عددی شبیه‌سازی عددی ادی‌های بزرگ (LES) مورد استفاده به اختصار معرفی می‌شود. حل گر مورد استفاده با مراجع [۳۲،۳۱] یکسان است و برای اطلاعات بیشتر به آن‌ها رجوع شود. روابط LES از معادلات ضمنی فیلتر شده نویر-استوک با عرض فیلتر Δ_f پیروی می‌کند. در این رهیافت، معادلات فیلتر شده بقای جرم و تکانه معادلات حاکم میان جریان است و در کنار دو رابطه انتقالی فیلتر شده کسر مخلوط و متغیر پیشروی که محورهای مختصات کتابخانه FGM برای حل جریان واکنشی هستند، بهره گرفته شده است.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_L + \mu_T) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \epsilon_{ij} \right) \right] \quad (10)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\xi})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\xi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} \right] \quad (11)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\eta})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\eta})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_{\eta} \quad (12)$$

کمیت‌های فیلتر شده با علامت بار و کمیت‌های وزن دهی شده با تیلدا مشخص شده است. متغیرهای $\bar{\rho}$ و c_p و $\bar{\omega}_{\eta}$ از کتابخانه FGM بازیابی می‌شوند. ضریب رسانش (λ) و لزجت (μ_L) با تابع ساده‌سازی شده از PDF با استفاده از دما میانگین‌گیری شده که در کتابخانه FGM ذخیره گردیده است، محاسبه می‌شود [۳۳،۱۷].

$$\mu_L = 1.67 \times 10^{-8} (\tilde{T}/298)^{0.51} c_p \quad (13)$$

$$\lambda = 1.67 \times 10^{-5} (\tilde{T}/298)^{0.69} c_p \quad (14)$$

نفوذ ادی‌ها μ_T/Sc_T ، براساس مدل پیشنهادی ورمان [۳۴] و عدد اشمید آشفته برابر با 0.4 محاسبه می‌شود. روش Beta-PDF برای مدل‌سازی اثرات متقابل جریان آشفته و واکنشی مورد استفاده قرار می‌گیرد. روش اعمال به این صورت است که متغیر پیشروی نرمالایز شده و از وابستگی آماری آن به دیگر متغیرها صرف‌نظر می‌شود. به‌صورت کلی، تابع چگالی احتمال برای کمیت φ به‌صورت $P(\varphi) = P(\varphi; \tilde{\varphi}, \tilde{\varphi}''^2)$ در نظر گرفته می‌شود. برای محاسبه $\tilde{\varphi}''^2$ از رابطه جبری $\tilde{\varphi}''^2 = \alpha \Delta X^2 (\partial \tilde{\varphi} / \partial X_j)^2$ استفاده می‌شود که بر مبنای بسط تیلور $\alpha = 1/12$ است.

شرایط مرزی نیومن برای سرعت، کسر مخلوط، متغیر پیشروی در صفحات جانبی و مرزی خروجی، همچنین این شرط برای فشار در صفحات ورود و خروج اعمال شده است. شرط مرزی فشار در صفحات جانبی از نوع دیریکله است. کسر مخلوط و متغیر پیشروی به‌صورت اختلال نیافته^۱ در شرط مرزی ورود در نظر گرفته می‌شود [۳۵] درحالی‌که در مرز ورود از تولیدکننده اغتشاشات اتفاقی برای سرعت استفاده می‌شود. جریان تقریباً آشفته همگن ایزوتروپیک در مرز ورودی توسط فیلتر باکس مکانی با ابعاد $\Delta_f = D/4$ فیلتر زمانی $\Delta_t = \Delta_f / 4$ تولید می‌شود.

1. Unperturbed

گسسته‌سازی مکانی معادلات بقای جرم و تکانه به صورت مرتبه دوم مرکزی حجم محدود بر روی شبکه کارترین اعمال شده است. پله‌های زمانی هیبرید برای گسسته‌سازی زمانی استفاده شده است. برای ترم همرفت از روش آدام-بشغورد و برای ترم لزجت و ترم منبع از روش اویلر روبه جلو استفاده شده است که موجب پایداری بیشتر می‌شود [۳۵]. رابطه انتقال کسر مخلوط و متغیر پیشرو با روش مرتبه سوم فن لیر MUSCLE گسسته‌سازی شده است. ترکیبی از MPI و پروتکل OpenMP در یک پلت فرم چند بلوک برای استفاده در فرایند محاسبات موازی استفاده می‌شود. روش چند بلوکی برای حل رابطه پواسون نیز استفاده شده است [۳۲-۳۵].

بحث در نتایج

شعله‌های سندیا از سه جریان سوخت پیش‌آمیخته به عنوان جت، پایلوت و هوای استاندارد به عنوان جریان هم‌جهت^۱ آن شکل یافته است [۳۰]. نسبت حجمی سوخت به هوا ۱/۳ متان به هوا از نازلی با قطر ۷/۲ mm به میدان جریان تخلیه می‌شود. جریان پایلوت که بین هوا و جت سوخت قرار می‌گیرد، در واقع محصولات احتراق یک شعله پیش‌آمیخته بامتان و هوا و نسبت هم ارزی $\phi = 0.75$ است که با دمای ۱۸۸۰ کلوین و با سرعت بیشینه سرعت ۱۵/۵ m/s به میدان وارد می‌شود. کسر مخلوط جریان پایلوت $\zeta = 0.27$ است. جریان هوا نیز جریان‌های پایلوت و جت سوخت را در برگرفته و با سرعت ۳/۵ m/s وارد میدان می‌شود. جریان هوا از یک کانال با سطح مقطع مربعی با طول ۳۰ cm خارج می‌شود. مشخصات سه شعله D، E و F در جدول ۱ و شکل ۷ آمده است.

جدول ۱ - مشخصات شعله‌های Sandia D، E و F

Table 1- The Sandia flames D, E, and F properties

	Re number	$U_{j,max}$ (m/s)
D	22400	62.77
E	33600	96.87
F	44800	125.7

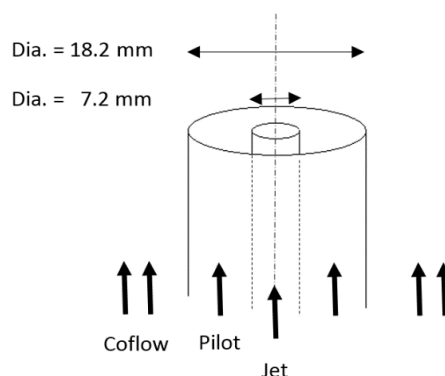


Figure 7- Schematic of the Sandia burner

شکل ۷- شمایی از هندسه مشعل سندیا

داده‌های تجربی اندازه‌گیری شده در راستای محور تا $Z = 80 D$ و در راستای شعاعی تا $R = 10 D$ گزارش شده است. Z و R به ترتیب محور مختصات در راستای محوری و شعاعی میدان است. برای کاهش اثرات شرط مرزی در مرزهای خروج جریان، میدان عددی تا $Z = 121 D$ امتداد می‌یابد. در راستای شعاعی نیز طول میدان با استفاده از باز شدن جت سوخت محاسبه می‌شود. از آنجا که زاویه باز شدن یک جت آشفته در میدان ساکن به صورت تقریبی با $R = Z/5$ برابر است، در نتیجه میدان عددی در راستای شعاعی $D = 24$ در نظر گرفته می‌شود. میدان محاسباتی از یک شبکه با گسسته‌سازی $149 \times 149 \times 512$

1. Coflow

تشکیل شده است. شبکه محاسباتی در راستای محور جریان تا $Z = 80D$ شامل 80% شبکه محاسباتی است. شبکه محاسباتی از دهانه نازل در تمامی سه جهت دارای کشیدگی است و ابعاد سلولها بزرگتر می شود. کمترین طول فاصله نقاط شبکه در دهانه خروجی جت سوخت رخ می دهد و در راستای شعاعی $D/15$ و در راستای محوری $D/10$ است.

شرایط مرزی ورودی به میدان جریان برابر با داده های اندازه گیری شده در $Z=D$ است. از نقطه نظر حل عددی استفاده از این شرایط مرزی پروفیل عددی هموارتری در قیاس با پروفیل گسسته جریان در شعاع جت سوخت و پایلوت در صفحه ورودی $Z=0$ ایجاد می کند. همچنین، شرایط اولیه حل برای کسر مخلوط، متغیر پیشروی و سرعت جریان با استفاده از شرایط مرزی در تونل هوا تعیین می شود.

روش اشتعال لایه اختلاط متغیر باهدف تولید کتابخانه دوبعدی فلیملت برای شبیه سازی جریان هایی با ترکیب متغیر سوخت و /یا اکسنده معرفی شده است. شرایط اولیه برای حل جریان یک بعدی در کد Chem1d مطابق با هندسه و کسر مخلوط در شرط مرزی ورودی میدان است. به این ترتیب برای شعله سندیا E و F که به جز شرط مرزی سرعت جت، شبیه به یکدیگر هستند، در فاصله $0 \leq X < 3.6$ متناظر با جت سوخت، $3/6 \leq X < 9/1$ متناظر با جریان پایلوت و در فاصله $X \geq 9/1$ متناظر با جریان هوای تونل باد است. از مکانیزم شیمیایی GRI3.0 برای شبیه سازی شیمی احتراق بهره گرفته شده است. در شکل ۵ دما و کسر مخلوط شرایط اولیه کد Chem1D برای $t=0$ نشان داده شده است. متغیر پیشروی براساس تابع وزنی مجموع گونه های شیمیایی ساخته شده است. وزن گونه های شیمیایی مورد استفاده در ساختن متغیر پیشروی در جدول ۲ نمایش داده شده است. تعریف متغیر پیشروی به صورت محافظه کارانه ای صورت گرفته است و از واکنش دهنده ها (CH_4 و O_2)، محصولات میانی مکانیزم شیمیایی (HO_2) و محصولات نهایی احتراق (CO_2 و H_2O) تشکیل شده است. پله زمانی حل به صورت ثابت و برابر با $10^{-6} \times 2$ ثانیه در نظر گرفته می شود به گونه ای که بیشینه عدد CFL در میدان حل برابر با 0.2 به دست می آید. جریان جت سوخت در $t = 0.0625$ s به فاصله $80D$ از ابتدای میدان می رسد، برای اطمینان از پایا شدن جریان در میدان، متوسط گیری پارامترهای مطلوب مانند دما و سرعت از زمان $t = 0.200$ s محاسبه می شود و تا $t = 0.325$ s ادامه می یابد. ابعاد شبکه محاسباتی برای مدل سازی ادی های بزرگ با استفاده از تحلیل نتایج سرعت در $Z = 81D$ محاسبه شده است. شکل ۸ نشان دهنده اسپکتروم توان است که با خط با شیب $-5/3$ معادل مقدار تئوری آن برابر است. به این ترتیب شبکه محاسباتی برای شبیه سازی ادی های بزرگ تایید می شود.

جدول ۲- وزن گونه های شیمیایی در تولید متغیر پیشروی

Table 2- Chemical species weight factor to build the progress variable

	O2	CH4	CO2	H2O	HO2
C_i	-1	-1	1	1	100

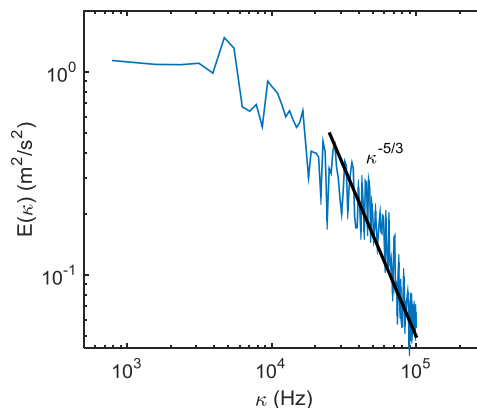


Figure 8- Energy spectrum analysis base on the instantaneous velocity on jet center at the $Z = 81D$

شکل ۸- آنالیز اسپکتروم انرژی براساس سرعت لحظه ای روی محور جت در فاصله $Z=81D$

توزیع دمای شبیه‌سازی عددی ادی‌های بزرگ برای هر سه شعله سندیا در شش فاصله مختلف از $Z = 1\text{ D}$ تا $Z = 120\text{ D}$ از نازل سوخت به صورت لحظه‌ای و میانگین در شکل ۹ نشان داده شده است. همانطور که مشخص است افزایش عدد رینولدز جت سوخت با افزایش اختلاط جریان سوخت و اکسندۀ موجب کاهش ارتفاع شعله و نزدیک شدن آن به دهانه نازل سوخت می‌شود.

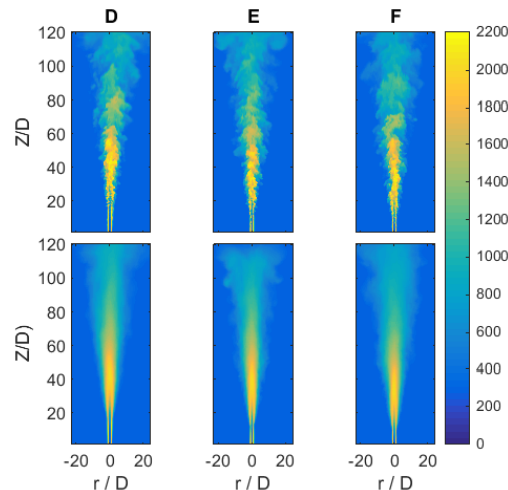


Figure 9- Instantaneous (up) and mean (bottom) temperature contour for Sandia D, E, and F flame

شکل ۹- کانتور دما لحظه‌ای (بالا) و میانگین (پایین) برای سه شعله سندیا D, E و F

مقایسه نتایج تجربی و عددی برای میانگین و واریانس دما و کسر مخلوط در شکل ۱۰، ۱۱ و ۱۲ به ترتیب برای شعله‌های D, E و F نشان داده شده است. در روش‌های فلیمنت دقت شبیه‌سازی کسر مخلوط از اهمیت بالایی برخوردار است چون دیگر پارامترهای ترموفیزیکی با استفاده از کسر مخلوط در کتابخانه فلیمنت ذخیره شده‌اند. در نتیجه افزایش دقت در شبیه‌سازی کسر مخلوط منجر به پیش‌بینی دقیق‌تر سایر متغیرهای جریان مانند کسر جرمی گونه‌ها و دما می‌شود.

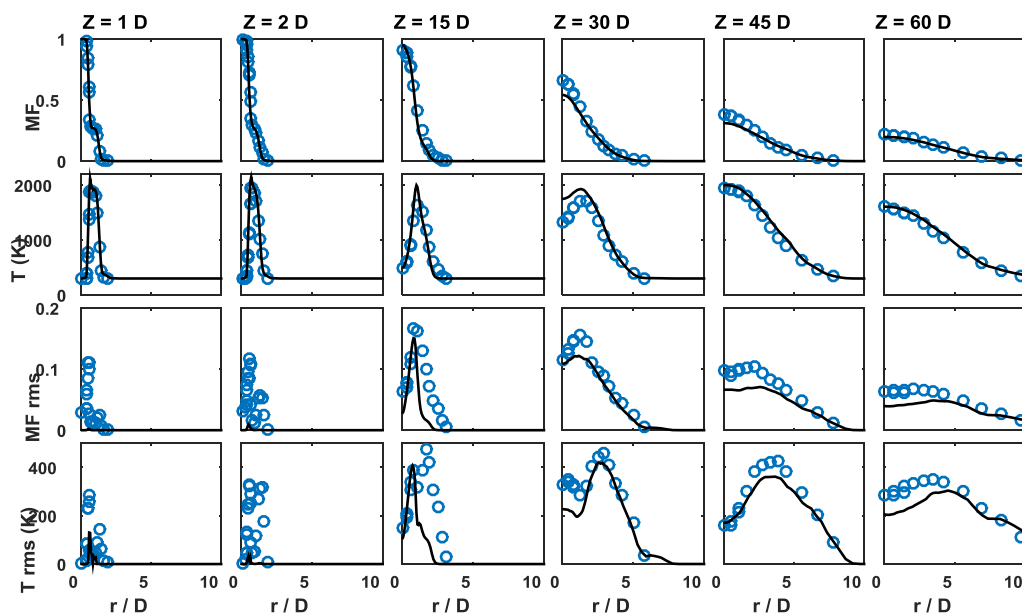


Figure 10- Mean and variance of the mixture fraction and temperature for Sandia D flame

شکل ۱۰- مقادیر متوسط و واریانس کسر مخلوط و دما برای شعله سندیا D

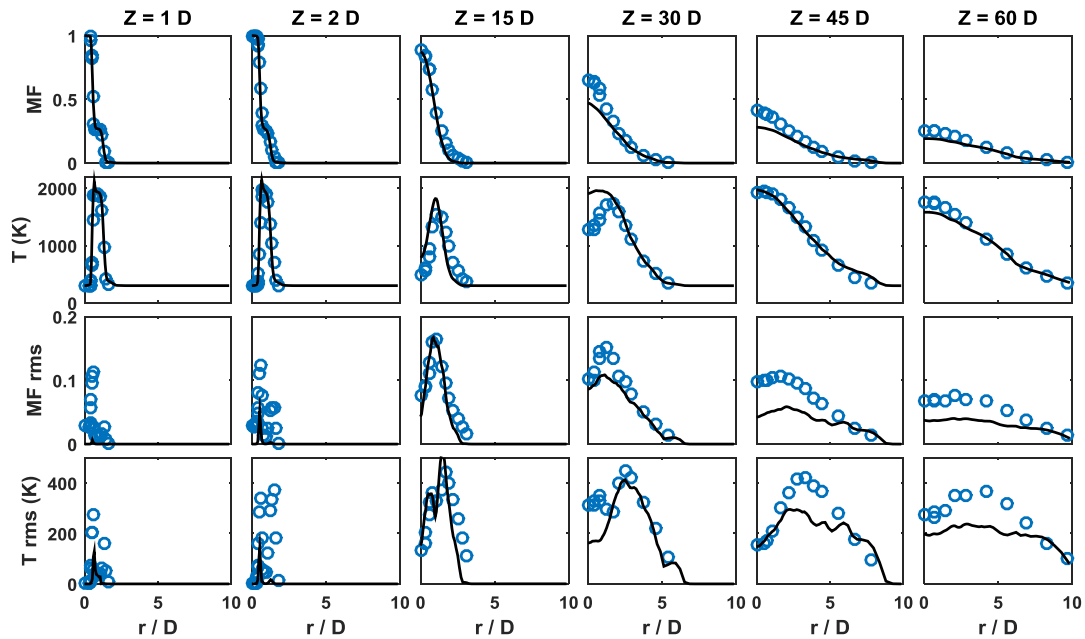


Figure 11- Mean and variance of the mixture fraction and temperature for Sandia E flame

شکل ۱۱- مقادیر متوسط و واریانس کسر مخلوط و دما برای شعله E

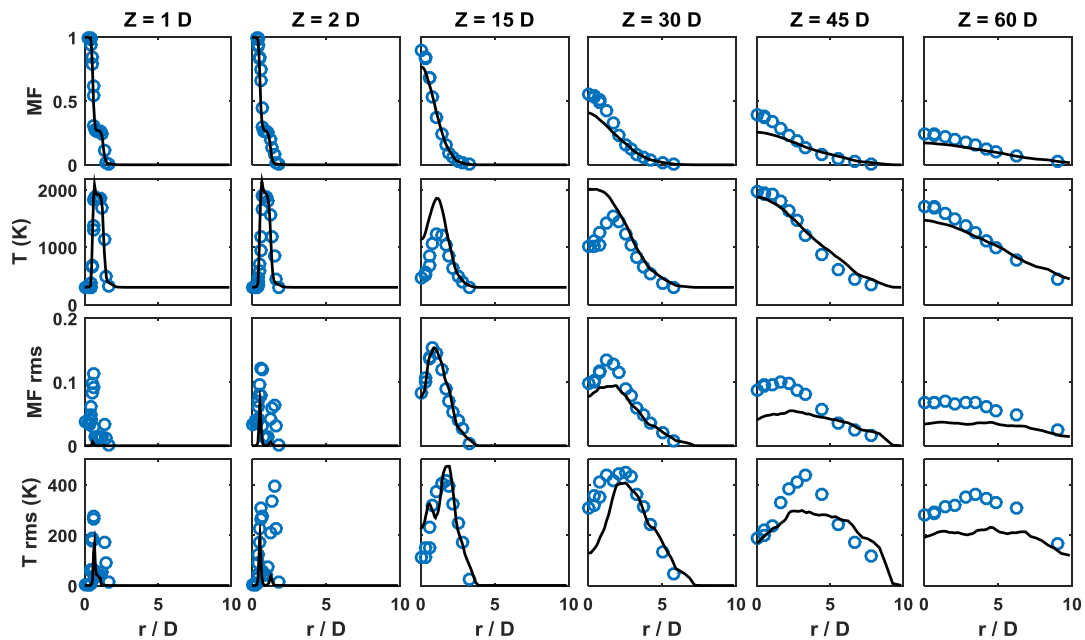


Figure 12- mean and variance of the mixture fraction and temperature for Sandia F flame

شکل ۱۲- مقادیر متوسط و واریانس کسر مخلوط و دما برای شعله F

دقت شبیه‌سازی کسر مخلوط برای هر سه شعله با مقادیر تجربی همخوانی مناسبی دارد اما با افزایش عدد رینولدز و سرعت جت سوخت، خطای شبیه‌سازی نیز افزایش پیدا می‌کند. به این ترتیب دقیق‌ترین پیش‌بینی دما در شعله D رخ می‌دهد. بیشترین خطای دما در ارتفاع $Z = 30 D$ در شعله F در مرکز جت اتفاق می‌افتد. دلیل این امر پیچیدگی شبیه‌سازی جت سوخت قبل از رسیدن به حالت توسعه‌یافته است. بیشترین دقت در پیش‌بینی کسر مخلوط قبل از شکستن جت $Z < 10 D$ و

بعد از رسیدن جت به حالت توسعه یافته $Z > 30 D$ دیده می شود. مقادیر واریانس کسر مخلوط و دما نیز با افزایش فاصله از دهانه نازل سوخت همخوانی دارد و بخصوص بعد از $Z > 15 D$ این همخوانی با داده تجربی افزایش می یابد. خطای بالای مقداری واریانس در نزدیک مرزهای ورودی می تواند ناشی از واریانس متغیرها در مرزی ورودی باشد. اما با توسعه جت و افزایش انرژی اغتشاش که همراه با شکستن جت و رسیدن به جریان توسعه یافته است، $Z > 10 D$ ، میزان خطا در واریانس کسر مخلوط و دما کاهش می یابد. همچنین، مقایسه بین سه شعله نشان می دهد که میزان خطای واریانس های کسر مخلوط و دما در نزدیکی دهانه نازل با افزایش عدد رینولدز کاهش می یابد.

مقایسه روش VIML با روش شعله مقابل

همان طور که به آن اشاره شد، استفاده از روش شعله مقابل که به صورت متعارف برای تولید کتابخانه فلیملت استفاده می شود تنها برای شرایط جریان سوخت و اکسندۀ ثابت قابل استفاده است. هرگونه تغییرات در ترکیب سوخت و یا اکسندۀ منجر به محدودیت استفاده از این روش و افزایش خطای شبیه سازی می گردد. به طور مثال در مشعل سندیا به دلیل وجود سه جریان جت سوخت، پایلوت، و جریان هوای تونل باد تنها امکان یک جفت از این جریان ها وجود دارد. از آنجا که حل جریان یک بعدی در شرایط خوداشتعالی مورد نظر است (اشتعال جت سوخت توسط جریان پایلوت) جریان سوخت شعله مقابل برابر با ترکیب جت سوخت و جریان اکسندۀ شعله مقابل برابر با جریان پایلوت در نظر گرفته می شود که در عمل امکان شبیه سازی جریان هوای تونل باد وجود ندارد. به این ترتیب در حل سه بعدی جریان، جریان هوای تونل باد با جریان پایلوت جایگزین می گردد. نتایج مقایسه روش تولید کتابخانه فلیملت دوبعدی در قیاس با روش توسعه یافته VIML در شکل ۱۳ نشان داده شده است.

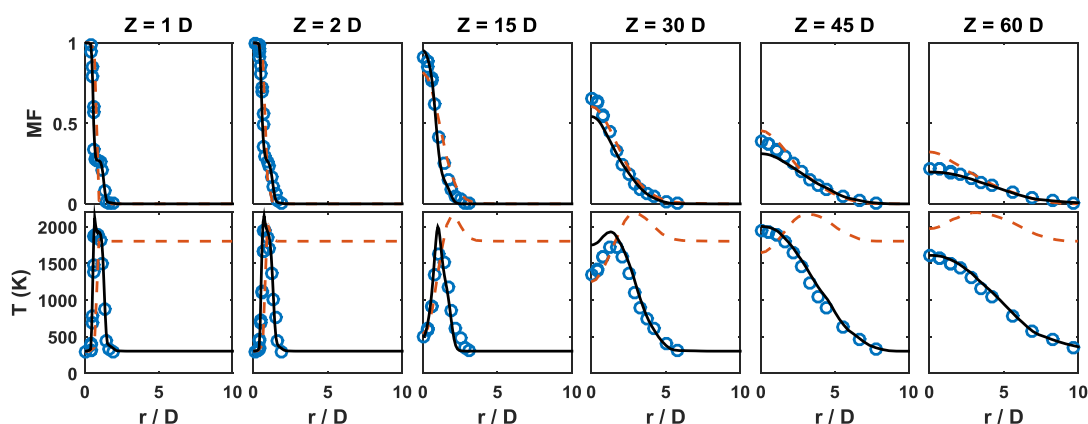


Figure 13- the result comparison of the developed model VIML (black) and the conventional counter flow flame (dotted-orange)
 شکل ۱۳- مقایسه حل جریان سه بعدی مشعل سندیا براساس کتابخانه فلیملت تولید شده به روش شعله مقابل (نارنجی خط چین) و روش توسعه یافته VIML (خط سیاه)

به صورت کلی در شبیه سازی احتراق با استفاده از مدل های فلیملت هر چه میزان دقت پیش بینی کسر مخلوط بیشتر باشد خطا در پیش بینی دیگر پارامترها نظیر دما که از کتابخانه بازایی می شوند کاهش می یابد. نتایج شبیه سازی نشان می دهد با استفاده از شعله مقابل نشان می دهد کسر مخلوط با دقت قابل قبولی پیش بینی شده است پیش بینی دما دارای خطای بسیار زیاد مخصوصاً در ناحیه جریان اکسندۀ $(r/D > 3)$ است. این خطا ناشی از محدودیت کتابخانه دوبعدی فلیملت به روش شعله مقابل رخ می دهد و در نتیجه کل جریان اکسندۀ با جریان پایلوت معادل گرفته می شود.

نتیجه‌گیری

حجم و دقت کتابخانه فلیملت نقش مهمی در دقت شبیه‌سازی احتراقی دارد. در میدان‌هایی که چند جریان به میدان وارد می‌شوند، کتابخانه دوبعدی فلیملت به روش متداول ناتوان از شبیه‌سازی دقیق است. همچنین، افزایش ابعاد کتابخانه به بیش از دو بعد منجر به افزایش حجم محاسبات و در نتیجه هزینه شبیه‌سازی می‌شود.

روش اشتعال لایه اختلاطی متغیر VIML که بر پایه روش IML توسعه‌یافته، این توانایی را دارد که با حفظ ابعاد کتابخانه فلیملت در دو بعد، میدان‌های با چند جریان ورودی را شبیه‌سازی کند. برای اعتبارسنجی مدل توسعه‌یافته شبیه‌سازی میدان‌هایی با چند ورودی مختلف به روش شبیه‌سازی ادی‌های بزرگ (LES) صورت پذیرفت. برای این شبیه‌سازی از شعله‌های سندیا E، D و F با عدد رینولدز مختلف بهره گرفته شد.

نتایج شبیه‌سازی نشان‌دهنده دقت مناسب پیش‌بینی مقادیر میانگین و واریانس کسر مخلوط و دما در قیاس با اندازه‌گیری‌های تجربی در فواصل مختلف از نازل سوخت است. با افزایش عدد رینولدز از ۲۲۴۰۰ برای شعله D تا ۴۴۸۰۰ برای شعله F، منجر به کاهش دقت در مقادیر میانگین کسر مخلوط و دما می‌شود. اما هنوز نتایج شبیه‌سازی در بسیاری از نقاط داده تجربی همخوانی دارد و در بازه قابل قبول قرار می‌گیرد. از آنجا که داده‌های تروموفیزیکی نظیر دما از کتابخانه فلیملت با استفاده از کسر مخلوط و متغیر پیشروی بازیابی می‌شود، هرگونه خطا در محاسبه کسر مخلوط منجر به بازیابی اشتباه این متغیرها می‌شود و در نتیجه دقت شبیه‌سازی کاهش خواهد یافت. به این ترتیب با افزایش دقت در محاسبه کسر مخلوط و متغیر پیشروی می‌تواند دقت محاسبات را افزایش داد.

منابع

1. J. A. van Oijen, A. Donini, R. J. M. Bastiaans, J. H. M. ten Thijs Boonkamp, and L. P. H. de Goeij, "State-of-The-Art in Premixed Combustion Modeling Using Flamelet Generated Manifolds," *Prog. Energy Combust. Sci.*, 57, No. Supplement C, 2016, pp. 30–74.
2. U. Maas and S. B. Pope, "Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space," *Combust. Flame*, 88, No. 3, 1992, pp. 239–264.
3. R. L. G. M. Eggels and L. P. H. de Goeij, "Mathematically Reduced Reaction Mechanisms Applied to Adiabatic Flat Hydrogen/Air Flames," *Combust. Flame*, 100, No. 4, 1995, pp. 559–570.
4. S. Delhay, L. M. T. Somers, J. A. van Oijen, and L. P. H. de Goeij, "Incorporating Unsteady Flow-Effects in Flamelet-Generated Manifolds," *Combust. Flame*, 155, No. 1, 2008, pp. 133–144.
5. N. Peters, "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," *Symp. Combust.*, 21, No. 1, 1988, pp. 1231–1250.
6. M. Rieth, F. Proch, M. Rabaçal, B. M. Franchetti, F. Cavallo Marincola, and A. M. Kempf, "Flamelet LES of A Semi-Industrial Pulverized Coal Furnace," *Combust. Flame*, 173, No. Supplement C, 2016, pp. 39–56.
7. Y. Xuan, G. Blanquart, and M. E. Mueller, "Modeling Curvature Effects in Diffusion Flames Using A Laminar Flamelet Model," *Combust. Flame*, 161, No. 5, 2014, pp. 1294–1309.
8. K. Claramunt, R. Cònsul, D. Carbonell, and C. D. Pérez-Segarra, "Analysis of The Laminar Flamelet Concept For Nonpremixed Laminar Flames," *Combust. Flame*, 145, No. 4, 2006, pp. 845–862.
9. A. W. Cook, J. J. Riley, and G. Kosály, "A Laminar Flamelet Approach To Subgrid-Scale Chemistry in Turbulent Flows," *Combust. Flame*, 109, No. 3, 1997, pp. 332–341.
10. H. Pitsch and H. Steiner, "Scalar Mixing And Dissipation Rate in Large-Eddy Simulations of Non-Premixed Turbulent Combustion," *Proc. Combust. Inst.*, 28, No. 1, 2000, pp. 41–49.
11. H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters, "Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames," *Symp. Combust.*, 27, No. 1, 1998, pp. 1057–1064.
12. P. Sripakagorn, S. Mitarai, G. Kosály, and H. Pitsch, "Extinction And Reignition In A Diffusion Flame: A Direct Numerical Simulation Study," *J. Fluid Mech.*, 518, 2004, pp. 231–259.
13. 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, No. 1, 2005, pp. 793–800.
14. 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.
15. M. Ihme and H. Pitsch, "Modeling of Radiation And Nitric Oxide Formation in Turbulent Nonpremixed Flames Using A Flamelet/Progress Variable Formulation," *Phys. Fluids*, 20, No. 5, May 2008, p. 55110.
16. M. Ihme and H. Pitsch, "Prediction of Extinction And Reignition in Nonpremixed Turbulent Flames using A Flamelet/Progress Variable Model: 1. A Priori Study And Presumed PDF Closure," *Combust. Flame*, 155, No. 1, 2008,

- pp. 70–89.
17. J. van Oijen and P. de Goey, "Modelling of Premixed Laminar Flames Using Flamelet-Generated Manifolds," *Combust. Sci. Technol.*, 161, No. 1, Dec. 2000, pp. 113–137.
 18. D. J. E. M. Roekaerts, J. van Oijen, and P. de Goey, "A Priori Testing of Flamelet Generated Manifolds for Turbulent Partially Premixed Methane/Air Flames," *Flow, Turbul. Combust.*, 84, 2010, pp. 439–458.
 19. G. El-Asrag, Hossam A. Golden, "A Comparison Between Two Different Flamelet Reduced Order Manifolds For Non-Premixed Turbulent Flames," *8th U. S. National Combustion Meeting*, Canyons resort in Park City, Utah, 2013.
 20. J. A. van Oijen and L. P. H. de Goey, "Modelling of Premixed Counterflow Flames Using The Flamelet-Generated Manifold Method," *Combust. Theory Model.*, 6, No. 3, Sep. 2002, pp. 463–478.
 21. O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin, "Liminar Premixed Hydrogen/Air Counterflow Flame Simulations using Flame Prolongation of ILDM With Differential Diffusion," *Proc. Combust. Inst.*, 28, No. 2, 2000, pp. 1901–1908.
 22. H. Bongers, "Analysis of Flamelet-Based Methods to Reduce Chemical Kinetics in Flame Computations," PhD diss., Technische Universiteit Eindhoven, 2005.
 23. E. Abtahizadeh, P. de Goey, and J. van Oijen, "Development of A Novel Flamelet-Based Model to Include Preferential Diffusion Effects in Autoignition Of CH₄/H₂ Flames," *Combust. Flame*, 162, No. 11, 2015, pp. 4358–4369.
 24. M. Ihme and Y. C. See, "LES Flamelet Modeling of A Three-Stream MILD Combustor: Analysis of Flame Sensitivity to Scalar Inflow Conditions," *Proc. Combust. Inst.*, 33, No. 1, 2011, pp. 1309–1317.
 25. J. Lamouroux, M. Ihme, B. Fiorina, and O. Gicquel, "Tabulated Chemistry Approach For Diluted Combustion Regimes With Internal Recirculation And Heat Losses," *Combust. Flame*, 161, No. 8, 2014, pp. 2120–2136.
 26. G. Sarra, Y. Mahmoudi, L. D. Arteaga Mendez, E. H. van Veen, M. J. Tummers, and D. J. E. M. Roekaerts, "Modeling of Turbulent Natural Gas and Biogas Flames of the Delft Jet-in-Hot-Coflow Burner: Effects of Coflow Temperature, Fuel Temperature and Fuel Composition on the Flame Lift-Off Height," *Flow, Turbul. Combust.*, 93, No. 4, 2014, pp. 607–635.
 27. K. B. Brady, X. Hui, and C. J. Sung, "Effect of Hydrogen Addition on The Counterflow Ignition Of N-Butanol at Atmospheric And Elevated Pressures," *Int. J. Hydrogen Energy*, 40, No. 46, 2015, pp. 16618–16633.
 28. J. Li, H. Huang, N. Kobayashi, C. Wang, and H. Yuan, "Numerical Study on Laminar Burning Velocity and Ignition Delay Time of Ammonia Flame With Hydrogen Addition," *Energy*, 126, no. Supplement C, 2017, pp. 796–809.
 29. R. L. Gordon, A. R. Masri, S. B. Pope, and G. M. Goldin, "A Numerical Study of Auto-Ignition in Turbulent Lifted Flames Issuing into A Vitiated Co-Flow," *Combust. Theory Model.*, 11, No. 3, Apr. 2007, pp. 351–376.
 30. R. Barlow, J. Frank, A. N. Karpetis, and J. Y. Chen, "Piloted Methane/Air Jet Flames: Scalar Structure and Transport Effects," *Combust. Flame*, 2005, No. 143, pp. 433–449.
 31. S. E. Abtahizadeh, "Numerical Study of Mild Combustion From Laminar Flames to Large Eddy Simulation of Turbulent Flames With Flamelet Generated Manifolds," , PhD diss., Eindhoven University of Technology, 2014.
 32. E. Abtahizadeh, P. de Goey, and J. van Oijen, "LES of Delft Jet-in-Hot Coflow Burner To Investigate The Effect of Preferential Diffusion On Autoignition of CH₄/H₂ Flames," *Fuel*, 191, no. Supplement C, 2017, pp. 36–45.
 33. M. Smooke, *Series Lecture Notes in Physics: Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations For Methane-Air Flames*, Berlin, Springer, 1991.
 34. A. Vreman, R. Bastiaans, and B. Geurts, "A Similarity Subgrid Model For Premixed Turbulent Combustion.," *Flow Turb Combust*, 82, 2009, pp. 233–48.
 35. A. W. Vreman, B. A. Albrecht, J. A. van Oijen, L. P. H. de Goey, and R. J. M. Bastiaans, "Premixed and Nonpremixed Generated Manifolds in Large-Eddy Simulation of Sandia Flame D And F," *Combust. Flame*, 153, No. 3, 2008, pp. 394–416.

English abstract

The Large Eddy Simulation of the Sandia D, E, and F flames using FGM model based on the VIML novel approach

Saeedreza Zadsirjan¹ and Sadegh Tabejamaat^{2*}

1- School of Aerospace Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran, s_zadsirjan@aut.ac.ir

2- School of Aerospace Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran, sadegh@aut.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2018.12.3, Received in revised form: 2018.12.22, Accepted: 2019.2.25)

The flamelet library in FGM model is constructed based on mixture fraction and progress variable. This library facilitates to model the reactive flow precisely only in the case of two fuel/oxidizer in-flow streams. For the case of more in-flow streams, e.g. Sandia piloted flames fuel jet/ pilot/ air, it is needed to extend dimensions of the FGM library. This extension increase the size of stored data leads to higher computational cost. In this paper, the main motivation is to develop the Ignition Mixing Layer method (IML) to the Variable Ignition Mixing Layer (VIML) as the novel approach to generate the 2D FGM table for multi in-flow streams. Large Eddy Simulations of the Sandia D, E, and F with Reynolds number of 22400, 33600, and 44800 were conducted to validate this method. The LES results show a good agreement on the mean and variance of the mixture fraction and temperature. Therefore, the VIML is a successful model to simulate multi in-flow streams with 2D FGM library.

Keywords: flamelet library, Sandia flame, Large Eddy Simulation, Variable Ignition Mixing Layer