

مقایسه شبیه‌سازی احتراق پیش‌آمیخته‌ی آشفته با روش‌های PDF و RANS

احسان امانی^۱، محمد رضا حیرانی نوبری^۲

تهران، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مکانیک

(* نویسنده مخاطب: eamani@aut.ac.ir)

چکیده

یک شعله‌ی پیش‌آمیخته‌ی آشفته‌ی متان- هوا به دو روش تابع چگالی احتمال (PDF) و معادلات متوسط‌گیری شده‌ی رینولدزی (RANS) شبیه‌سازی شده است. برای مدل‌سازی اختلاط مولکولی در روش PDF از مدل تصحیح‌شده‌ی کرل (Curl) استفاده شده است. حل عددی معادله‌ی انتقال PDF با استفاده از روش مونت‌کارلو انجام شده و برای افزایش دقت و کاهش زمان محاسباتی، گام زمانی محلی و متوسط‌گیری زمان اجرا بکار رفته است. در معادلات RANS، جمله‌ی متوسط نرخ واکنش شیمیایی با استفاده از مدل شکست گردابه-نرخ محدود، مدل‌سازی شده و روش اختلاف محدود بر روی یک شبکه‌ی جابجا شده برای حل عددی این معادلات مورد استفاده قرار گرفته است. خصوصیات و تفاوت‌های دو روش مذکور، از جمله زمان محاسباتی و دقت پیش‌بینی میدان‌های متوسط برای شعله‌های پیش‌آمیخته، با جزییات و بطور کمی مقایسه شده‌اند. ملاحظه شده که میدان‌های متوسط پیش‌بینی شده در نواحی نزدیک به شعله دارای اختلاف زیادی هستند، همچنین طول شعله‌ی پیش‌آمیخته‌ی پیش‌بینی شده به روش PDF، نصف طول پیش‌بینی شده به روش RANS است.

واژه‌های کلیدی: احتراق پیش‌آمیخته - تابع چگالی احتمال (PDF) - آشفته - مونت‌کارلو

۱- مقدمه

ماهیت پیچیده‌ی آشفته‌گی 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 بطور کلی جریان‌های آشفته را می‌توان در دو گروه دسته‌بندی کرد. در گروه اول، همه یا قسمتی از مقیاس‌های جریان بطور دقیق حل می‌شود. روش‌های شبیه‌سازی عددی دقیق (DNS) و شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) در این گروه قرار دارند. در گروه دوم که "مدلسازی" نامیده می‌شود، همه‌ی مقیاس‌های جریان مدلسازی می‌شود که شامل روش‌های مبتنی بر متوسط‌گیری معادلات جریان و روش‌های تابع چگالی احتمال (PDF) هستند.

در زمینه‌ی مدلسازی احتراق آشفته، روش‌های رایج از قبیل معادلات متوسط‌گیری شده‌ی رینولدزی (RANS)، علاوه بر دقت پایین، تنها در گستره‌ی خاصی از مسایل احتراقی قابل استفاده هستند. مشکل اصلی در این روش‌ها، مدلسازی جمله‌ی نرخ واکنش شیمیایی متوسط‌گیری شده است.

۱- دانشجوی دکتری دانشکده مکانیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر

۲- دانشیار دانشکده مکانیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر

رایج‌ترین مدلی که در روش RANS مورد استفاده قرار می‌گیرد، مدل اتلاف گردابه (EDM) [۱] است که از اصلاح مدل شکست گردابه (EBU) به دست آمده است. دقت این مدل شدیداً به تعیین دقیق مقیاس زمانی توربولانس وابسته است. مدل‌های دیگری نیز برای مدل‌سازی نرخ واکنش شیمیایی متوسط‌گیری شده، به طور مجزا برای احتراق پیش‌آمیخته‌ی آشفته مانند مدل BML [۲] و یا احتراق نفوذی آشفته مانند مدل EDC [۳] ارائه شده‌اند. اما به دلیل شدیداً غیر خطی بودن جمله‌ی نرخ واکنش شیمیایی، همه‌ی این مدل‌ها در حالت کلی از دقت کمی برخوردار هستند.

در روش تابع چگالی احتمال (PDF) که بر اساس توصیف آماری توربولانس گسترش یافته است؛ تا میزان قابل توجهی از مشکل مدل‌سازی غیر دقیق کاسته می‌شود. به این ترتیب که جملات چشمه‌ی ناشی از واکنش شیمیایی در معادلات متوسط‌گیری شده بر خلاف روش‌های متداول RANS، نیاز به مدل‌سازی نداشته و بطور دقیق منظور می‌شود. روش‌های PDF به دو گروه (حل) معادله‌ی انتقال PDF و روش PDF از پیش فرض شده (Presumed PDF) تقسیم می‌شود. اما در روش PDF از پیش فرض شده، PDF متغیرهای جریان، معلوم فرض می‌شود که دقت این روش را محدود به گستره‌ی خاصی از مسائل می‌کند.

روش حل معادله‌ی انتقال PDF، در سال ۱۹۶۹ آغاز شد. «لاندگرن» (Lundgren) [۴] یک معادله انتقال را برای PDF سرعت، استخراج، مدل‌سازی و حل کرد. در این معادله، جایجایی بطور دقیق در نظر گرفته می‌شود. در حالی که در روش‌های RANS، یک مدل برای تعیین تنش‌های رینولدزی مورد نیاز است. «دوپازو» (Dopazo)، «اُبراین» (O'Brien) [۵،۶] و «پپ» (Pope) [۷] معادله انتقال PDF ترکیبی (Composition PDF) را استخراج، مدل‌سازی و حل نمودند (این PDF، تابع چگالی احتمال توأم یک سری اسکالر (کسرهای جرمی و انتالپی) است که حالت شیمیایی-حرارتی جریان را مشخص می‌کند). این معادله از این حیث قابل توجه است که واکنش‌هایی با هر مقدار پیچیدگی بدون تقریب و بطور دقیق قابل اعمال هستند. معادله‌ی PDF ترکیبی برای جریان‌های مختلفی حل شده است. برای نمونه، «پپ» [۸] و «مک نات» (Mc Nutt) [۹] شعله‌های پیش‌آمیخته‌ی مغشوش را مورد بررسی قرار دادند.

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

دقت بیشتر روش PDF نسبت به روش RANS در شبیه‌سازی مسائل احتراقی، بخصوص احتراق نفوذی بارها نشان داده شده است [۱۲،۱۳]. در این مقاله قصد داریم، خصوصیات و تفاوت‌های شبیه‌سازی به دو روش مذکور برای احتراق پیش‌آمیخته را با جزییات و بطور کمی بررسی کنیم.

۲- مدل‌سازی ریاضی

معادلات حاکم با فرض عدد ماخ کوچک و صرفنظر از اثر تابش، در دو قسمت "معادلات جریان" شامل معادله‌ی پیوستگی و مومنتوم و "معادلات اسکالرها" شامل معادلات انرژی و اجزاء شیمیایی بیان می‌شود.

۲-۱- معادلات جریان

برای هر متغیر جریان (ϕ)، معادله‌ی 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 نشان‌دهنده‌ی متوسط‌های رینولدزی و وزنی با چگالی هستند. در معادله‌ی بالا x و y جهات مختصات، $\bar{\rho}$ چگالی متوسط، \tilde{u} و \tilde{v} مولفه‌های سرعت متوسط، Γ_{ϕ} ضریب نفوذ متغیر ϕ و S_{ϕ} جمله‌ی چشمه است. با استفاده از تقریب بوزینسک، Γ_{ϕ} به صورت زیر بیان می‌شود

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

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

$$\mu_t = C_{\mu}\bar{\rho}\frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (3)$$

ضریب تجربی C_{μ} برابر ۰.۰۹ انتخاب می‌شود. در اینجا از مدل آشفتگی $k-\epsilon$ [۱۴] به همراه توابع دیوار [۱۵] برای محاسبه‌ی \tilde{k} و $\tilde{\epsilon}$ استفاده شده است. متغیرهای مختلف ϕ و پارامترهای مربوط به معادله‌ی انتقال هر کدام (معادله (۱)) در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱- معادلات RANS برای متغیرهای جریان

Equation	ϕ	σ_{ϕ}	S_{ϕ}
Continuity	1	1	0
Axial momentum	\tilde{u}	1	$\frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial\tilde{u}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial\tilde{v}}{\partial x}) - \frac{\partial\bar{p}}{\partial x}$
Radial momentum	\tilde{v}	1	$\frac{\partial}{\partial x}(\mu_e \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_e \frac{\partial\tilde{v}}{\partial y}) - \frac{\partial\bar{p}}{\partial y}$
Turbulent energy	\tilde{k}	1	$P_k - \bar{\rho}\tilde{\epsilon}$
Turbulent dissipation energy	$\tilde{\epsilon}$	1.3	$(\tilde{\epsilon}/\tilde{k})(C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\bar{\rho}\tilde{\epsilon})$
Constant parameters	$C_{\epsilon 1} = 1.44, C_{\epsilon 2} = 1.92$		
Other terms	$\mu_e = \mu_l + \mu_t$ $P_k = \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial\tilde{v}}{\partial y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial x} \right)^2 \right\}$		

برای تعیین چگالی متوسط، از معادله‌ی حالت گاز ایده‌آل بصورت زیر استفاده می‌گردد.

$$\bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{RT \sum_{\alpha=1}^N \bar{Y}_{\alpha} / W_{\alpha}} \quad (4)$$

که در آن \bar{p} فشار متوسط، R ثابت عمومی گازها، \bar{T} دمای متوسط، N تعداد اجزاء شیمیایی، \bar{Y}_{α} متوسط کسر جرمی جزء شیمیایی α و W_{α} وزن مولی این جزء است. همانطور که در ادامه شرح داده خواهد شد، متغیرهای اسکالر شامل \bar{Y}_{α} و \bar{T} با استفاده از حل معادله‌ی انتقال PDF ترکیبی و یا از حل معادلات RANS برای اسکالرها بدست می‌آید.

۲-۲- معادلات انتقال اسکالرها

چنانچه کلیه اسکالرهای جریان به صورت مولفه‌های یک بردار $\bar{\Phi}$ (بردار حالت) نمایش داده شود

$$\bar{\Phi} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) \quad (5)$$

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

$$\frac{\partial \tilde{f}(\bar{\psi})}{\partial t} + \tilde{U}_i \frac{\partial \tilde{f}(\bar{\psi})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} (S_{\alpha}(\bar{\psi}) \tilde{f}(\bar{\psi})) = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} \langle u_i'' | \bar{\Phi} = \bar{\psi} \rangle \tilde{f}(\bar{\psi}) \right] - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left\{ \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_{l,\alpha} \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial x_i} \right) \middle| \bar{\Phi} = \bar{\psi} \right\rangle \tilde{f}(\bar{\psi}) \right\} \quad (6)$$

که در آن علامت $\langle \cdot | \cdot \rangle$ نشان‌دهنده‌ی متوسط شرطی و $\bar{\psi}$ فضای نمونه بردار حالت $\bar{\Phi}$ نامیده می‌شود. جمله‌های سمت راست معادله که شامل اثر واکنش شیمیایی نیز هستند (جمله‌ی سوم) بطور دقیق و بدون نیاز به مدلسازی منظور می‌شود. جمله‌های سمت چپ معادله شامل متوسط شرطی بوده و مجهولات اضافی هستند که باید مدل شوند. جمله‌ی اول با استفاده از فرض گرادیان نفوذی (gradient diffusion) مدلسازی می‌شود. برای جمله‌ی دوم که ناشی از اختلاط مولکولی است، مدل‌های مختلفی موجود است [۱۶]. در اینجا مدل تصحیح شده‌ی کرل (modified Curl's model or MC) [۱۷] بکار برده می‌شود. در این مدل مقیاس زمانی آشفستگی ($\tau_i = \tilde{k} / \bar{\epsilon}$) به عنوان ورودی مورد نیاز است که از معادلات جریان (بخش ۲-۱) بدست می‌آید. در نهایت، معادله‌ی مدل شده‌ی انتقال PDF ترکیبی بصورت زیر نوشته می‌شود.

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

در معادله‌ی بالا ضریب تجربی σ_{ϕ} برای جریان واکنشی برابر ۰.۷ و $M(\bar{\psi})$ مدل اختلاط مولکولی است.

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

جدول ۲- معادلات RANS برای اسکالرها

Equation	ϕ	Γ_l	σ_{ϕ}	S_{ϕ}
Species mass fraction $\alpha = 1, 2, \dots, N$	\tilde{Y}_{α}	$\bar{\rho} D_{\alpha}$	0.7	$\bar{\omega}_{\alpha}$

Energy	\tilde{T}	$\frac{\lambda}{c_p}$	0.85	$-\frac{1}{c_p} \sum_{\alpha=1}^N h_{ref,\alpha} \bar{\omega}_\alpha$
--------	-------------	-----------------------	------	---

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

۳- روش حل عددی

معادلات جریان (جدول ۱)، با استفاده از الگوریتم SIMPLE [۱۸] حل می‌شود. برای تجزیه‌ی معادلات، از روش اختلاف محدود بر روی یک شبکه‌ی جابجا شده استفاده می‌شود. برای پایداری، جملات جابجایی با استفاده از طرح بالادست و جملات نفوذ با استفاده از طرح اختلاف مرکزی تجزیه می‌گردد. دستگاه معادلات جبری حاصل از تجزیه‌ی معادلات با روش TDMA [۱۸] حل می‌گردد. برای معادلات اسکالر در قالب RANS (جدول ۲)، روش عددی مانند معادلات جریان اعمال می‌گردد. برای حل معادله‌ی انتقال PDF ترکیبی (معادله‌ی (۷))، از روش مونت کارلو شبه‌اولیری [۱۰] استفاده می‌شود. برای جزئیات بیشتر درباره‌ی روش بکار رفته، می‌توان به مرجع [۱۳] مراجعه کرد. توجه شود که معادلات جریان و معادلات اسکالرها از طریق $\bar{\rho}$ و τ_i کوپل هستند. بنابراین، حل کننده‌ی مونت کارلو برای اسکالرها و اختلاف محدود برای معادلات جریان به طور همزمان و در الگوریتمی پیوندی اجرا می‌شود. روش‌های مونت کارلو همراه با خطای آماری هستند. در جریان‌های از نظر آماری دائم (statistically stationary)، می‌توان زمان محاسباتی و خطای آماری را با استفاده از روش گام زمانی محلی (local time stepping) [۱۹] کاهش داد. همچنین در اینجا از روش متوسط‌گیری زمان اجرا (runtime averaging) [۲۰] نیز استفاده می‌شود تا خطای آماری باز هم کمتر شود. شبیه‌سازی با استفاده از کد محاسباتی تهیه شده در کار [۱۳] انجام شده است. برای بحث مفصل درباره‌ی تایید اعتبار کد محاسباتی بکار رفته، می‌توان به همین مرجع مراجعه کرد. شرایط مرزی برای شبیه‌سازی انجام شده در بخش بعد معرفی شده‌اند.

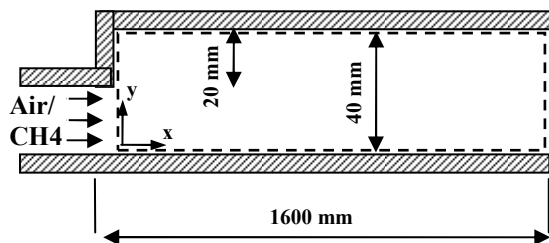
۴- نتایج و بحث

شبیه‌سازی برای یک شعله‌ی پیش‌آمیخته‌ی متان و هوا در یک کانال با تغییر مقطع ناگهانی مشابه با شعله‌ی مورد استفاده در کار تجربی [۲۱] انجام شده است (شکل ۱ الف)). ابعاد کانال برابر $0.04 \text{ m} \times 0.157 \text{ m} \times 1.6 \text{ m}$ است و یک پله در ورودی به ارتفاع $h = 0.02 \text{ m}$ باعث انبساط جریان می‌شود. با فرض زیاد بودن عرض کانال در برابر ارتفاع آن و دور از دیواره‌های جانبی کانال، جریان دوبعدی صفحه‌ای فرض می‌گردد. مخلوط سوخت و هوای ورودی با نسبت هم ارزی ۰.۹، سرعت یکنواخت 1.553 m/s بر ثانیه و دمای 273 K کلوین وارد محفظه‌ی احتراق می‌شود. شدت آشفستگی (I_t) در ورودی برابر با ۰.۰۵ فرض می‌شود. شرایط مرزی ورودی برای \tilde{k} و $\tilde{\epsilon}$ نیز از روابط زیر تخمین زده می‌شود.

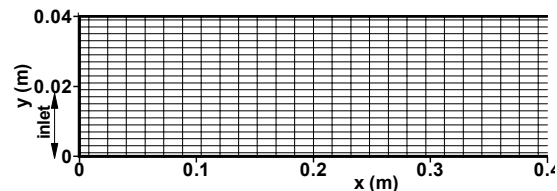
$$\tilde{k}_{inlet} = \frac{3}{2} \left(\left| \tilde{U}_{inlet} \right| I_t \right)^2, \quad \tilde{\epsilon}_{inlet} = C_\mu^{3/4} \frac{\tilde{k}_{inlet}^{3/2}}{0.07 D_h} \quad (8)$$

که در آن قطر هیدرولیکی ورودی است. دیواره‌های پایینی و بالایی کانال، آدیاباتیک فرض شده و خروجی به اندازه‌ای در پایین دست فرض می‌گردد که جریان توسعه یافته باشد. شبکه‌ی محاسباتی که شبکه‌ای یکنواخت با 20×100 سلول در جهت $x-y$ است در شکل ۱ (ب) نشان داده شده است.

برای مکانیزم واکنشی احتراق متان در این مقاله از مکانیزم دو مرحله‌ای وست‌بروک-درایر (Westbrook-Drier) [۲۲] استفاده شده است. اگر چه این مکانیزم ساده قادر به پیش‌بینی اجزاء شیمیایی فرعی احتراق نیست، اما برای پیش‌بینی دما و اجزاء اصلی در شعله‌های پیش‌آمیخته با نسبت هم ارزی کوچکتر از ۱ بسیار مناسب است [۲۳].



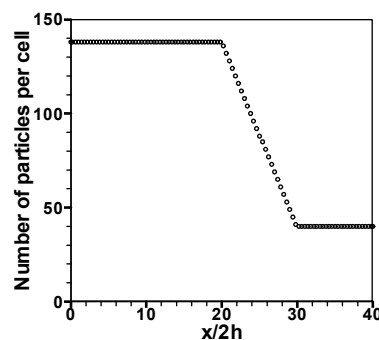
(الف)



(ب)

شکل ۱ - (الف) هندسه‌ی شعله‌ی پیش‌آمیخته (خط‌چین: ناحیه محاسباتی) (ب) قسمتی از شبکه‌ی محاسباتی (۰.۴ متر ابتدای محفظه)

کلیه شبیه‌سازی‌ها توسط یک کامپیوتر 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 کم اهمیت 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 ۲ تعداد ذرات در هر سلول بر حسب x رسم شده است.

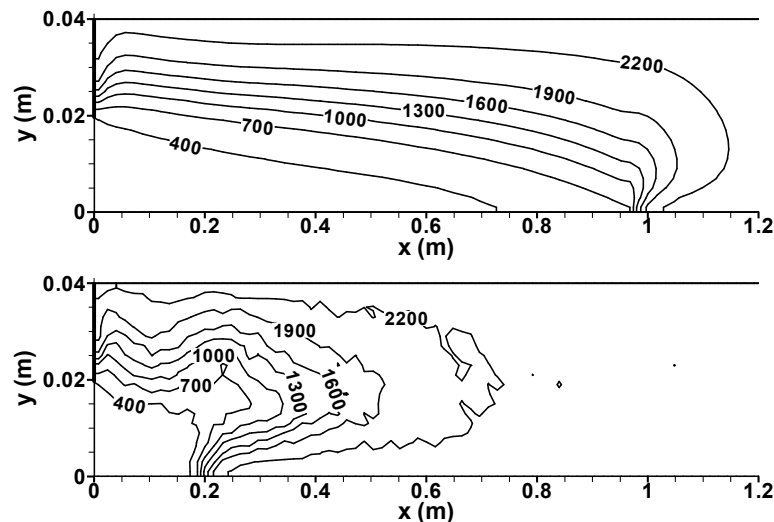


شکل ۲ - تغییر تعداد ذرات موجود در هر سلول محاسباتی در طول محفظه‌ی احتراق

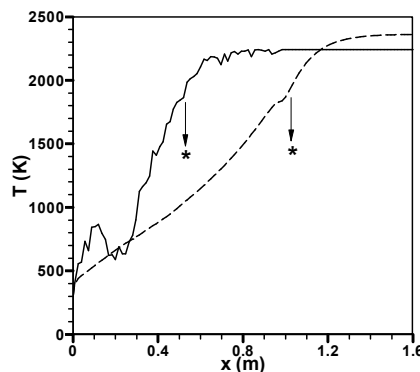
برای کاهش زمان محاسباتی از جواب شبیه‌سازی RANS به عنوان شرط اولیه‌ی شبیه‌سازی PDF استفاده می‌شود. در شبیه‌سازی PDF، ابتدا محاسبات برای ۹۰۰۰ گام زمانی اجرا می‌شود تا جواب به شرایط از نظر آماری دائم برسد. سپس به

منظور کاهش خطا، ۵۰۰۰ گام زمانی دیگر همراه با متوسط‌گیری زمان اجرا، طی می‌گردد. کل زمان اجرای شبیه‌سازی PDF حدود ۱۸ ساعت است.

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 شکل ۳ کانتورهای دمای متوسط، محاسبه شده با دو روش RANS و PDF نشان داده شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، ناحیه شعله در روش RANS خیلی وسیعتر از این ناحیه در روش PDF است. این مساله در نمودار نشان داده شده در شکل ۴ با وضوح بیشتری قابل مشاهده است. در این نمودار موقعیت نوک شعله که در اینجا متناظر با ماکزیمم 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 $x = 1.02 \text{ m}$ و در روش PDF در $x = 0.53 \text{ m}$ قرار دارد. همانطور که ملاحظه می‌شود، ماکزیمم دما (در خروجی) توسط روش RANS برابر ۲۳۶۰ کلوین و توسط روش PDF برابر ۲۲۴۰ کلوین پیش‌بینی شده است.



شکل ۳ - کانتورهای \bar{T} ، بالا: روش RANS، پایین: روش PDF.

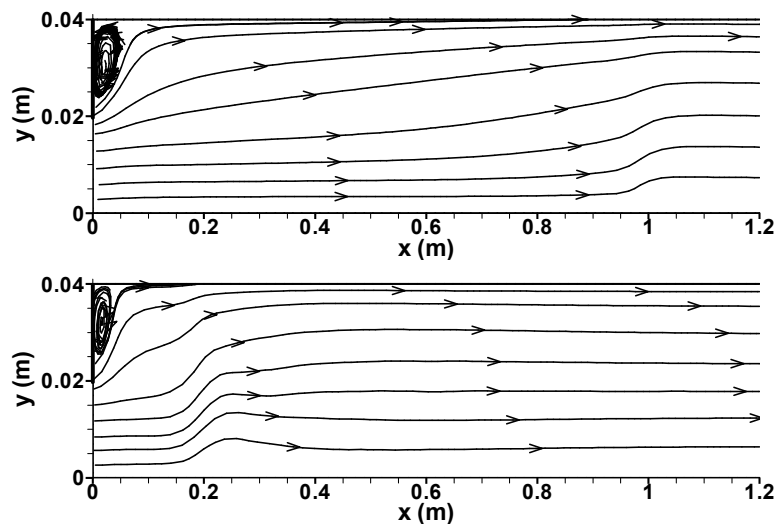


شکل ۴ - نمودار تغییر \bar{T} در طول محفظه. خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS. علامت * : نوک شعله.

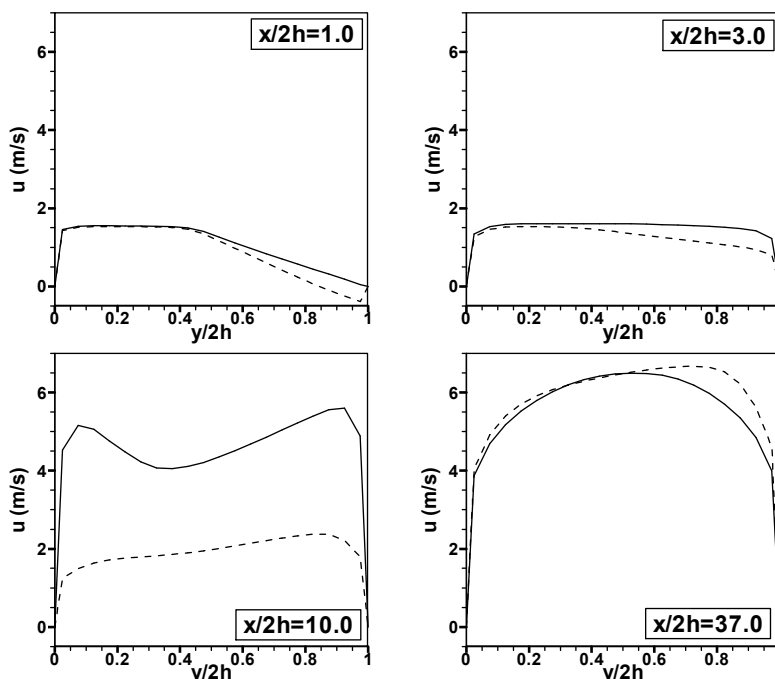
خطوط جریان برای دو روش شبیه‌سازی نیز در شکل ۵ نشان داده شده‌اند. گردابه‌ی ایجاد شده در اثر تغییر ناگهانی مقطع جریان در پشت پله، در این شکل قابل مشاهده است. اندازه‌ی گردابه‌ی ایجاد شده در روش RANS بزرگتر از روش PDF است. این نکته در شکل ۶ در مقطع $x/2h = 1.0$ بهتر مشاهده می‌شود که در آن سرعت محوری متوسط پیش‌بینی شده با روش PDF در کل مقطع مثبت بوده که نشانه‌ی عدم برگشت جریان و محو شدن گردابه تا این مقطع است در حالی که در روش RANS و نزدیک به دیواره‌ی بالایی ($y/2h = 1.0$)، سرعت منفی شده و نشانه‌ی حضور گردابه است.

در شکل ۶ پروفیل سرعت محوری متوسط بر حسب y در مقاطع مختلف محفظه‌ی احتراق برای دو روش شبیه‌سازی مقایسه شده است. همانطور که ملاحظه 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 پروفیل به پروفیل جریان توسعه یافته‌ی آشفته نزدیک می‌شود.

در شکل ۷ نمودار دمای متوسط و کسر جرمی متوسط برای دو نمونه از اجزای شیمیایی اصلی احتراق یعنی سوخت و دی‌اکسیدکربن بر حسب y ، هر کدام در دو مقطع مختلف و برای دو روش شبیه‌سازی نشان داده شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، در مقاطع میانی و نزدیک به دیواره‌ی 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 محاسبه‌ی نرخ واکنش شیمیایی تعیین‌کننده است. در حالی که در شبیه‌سازی RANS هنوز در ناحیه پیش‌گرمایش مخلوط هستیم. نرخ واکنش شیمیایی در روش PDF بطور دقیق و بدون مدل‌سازی منظور می‌شود ولی در روش RANS بسیار متفاوت و با مدل‌های تقریبی بیان می‌گردد.

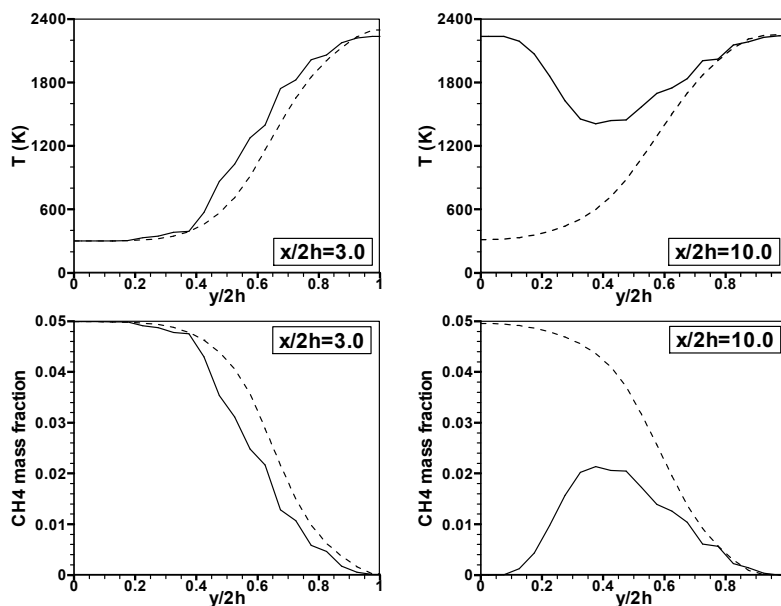


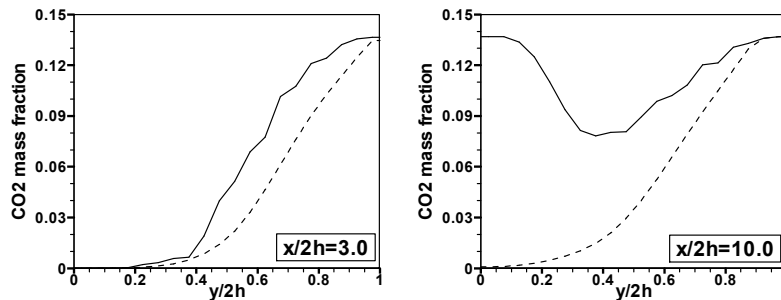
شکل ۵ - خطوط جریان، بالا: روش RANS. پایین: روش PDF.



شکل ۶- نمودار تغییرات \bar{u} بر حسب y در مقاطع مختلف محفظه. خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS.

در شبیه‌سازی PDF علاوه بر میدان‌های متوسط، کلیه‌ی 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.



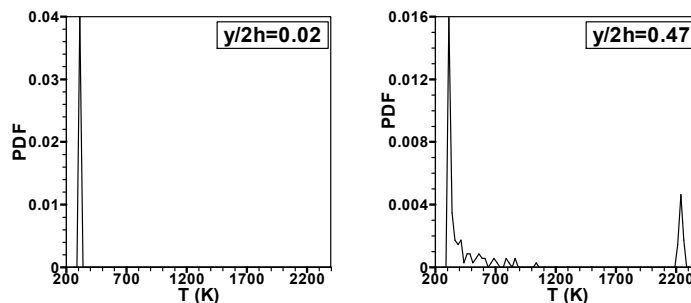


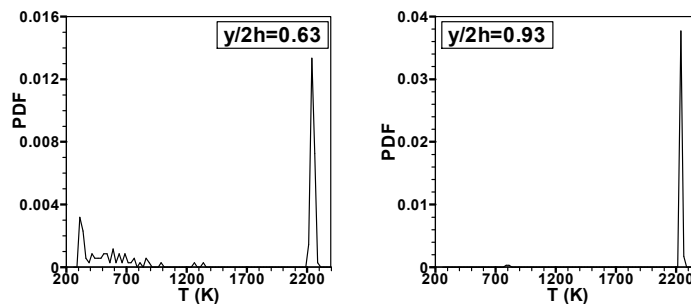
شکل ۷- نمودار تغییر \bar{T} و \bar{Y}_α بر حسب y در دو مقطع مختلف محفظه. خط ممتد: روش PDF، خط چین: روش RANS.

در شکل ۸، PDF مرزی دما در ۴ نقطه‌ی مختلف از مقطع $x/2h = 3.0$ رسم شده است. نقطه‌ی اول ($y/2h = 0.02$) نزدیک به دیواره‌ی پایینی و در ناحیه‌ی سوخت و هوای مصرف نشده قرار دارد، بنابراین همانطور که انتظار می‌رود شکل PDF تقریباً بصورت 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 جبهه‌ی شعله و به ترتیب قبل و بعد از آن قرار دارد. در این نواحی شکل PDF تغییر کرده و گستره‌ی 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 جبهه‌ی شعله و نزدیک شدن به دیواره‌ی بالایی ($y/2h = 0.93$) در ناحیه‌ی مخلوط کاملاً سوخته شده قرار می‌گیریم. در این نقطه شکل PDF به تابع ضربه در دمای ۲۲۴۰ کلوین نزدیک است.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، برای مقایسه‌ی خصوصیات و تفاوت‌های شبیه‌سازی احتراق آشفته‌ی پیش‌آمیخته به روش‌های PDF ترکیبی و RANS، یک شعله‌ی پیش‌آمیخته‌ی متان-هوا به دو روش مذکور شبیه‌سازی شد. حل عددی معادله‌ی انتقال PDF به روش مونت‌کارلو 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.





شکل ۸ - PDF مرزی دما در نقاط مختلف مقطع $x/2h = 3.0$.

همانطور که در نتایج مشاهده شد، طول شعله پیش‌آمیخته‌ی پیش‌بینی شده در روش PDF تقریباً نصف طول پیش‌بینی شده در روش RANS بوده، همچنین، ماکزیمم دمای شعله در شبیه‌سازی RANS، ۱۲۰ کلوین بیشتر از این دما در روش PDF بدست 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, The Combustion Institute, 1970.
- 2- Bray, K.N.C., and Moss, J.B., "A unified statistical model of the premixed flame", Acta Astronautica, Vol. 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, Vol. 16, pp. 719-729, 1976.
- 4- Lundgren, T.S., "Model equation for non-homogeneous turbulence", Physics of Fluids, Vol. 12, pp. 485-499, 1969.
- 5- Dopazo, C., and O' Brien E.E., "Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence", Combustion Science and Technology, Vol. 13, pp. 99-122, 1976.
- 6- Dopazo, C., and O'Brien E.E., "An approach to the autoignition of a turbulent mixture", Acta Astronaut, Vol. 1, pp. 1239-1266, 1974.
- 7- Pope, S.B., "The probability approach to the modeling of turbulent reacting flows", Combustion and flame, Vol. 27, pp. 299-312, 1976.
- 8- Pope, S.B., "Calculations of premixed turbulent flames", 18th symposium (Int.) on combustion, The combustion Institute, 1981.
- 9- McNutt, D.G., M.S. 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, Vol. 25, pp. 159-174, 1981.
- 11- Pope, S.B., "PDF method for turbulent reactive flows", progress in Energy and combustion Science, Vol. 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", Int. J. of Heat and Mass Transfer, Vol. 51, pp. 136-144, 2008.



FCCI2010-1109

سومین کنفرانس سوخت و احتراق ایران

تهران - دانشگاه صنعتی امیرکبیر - اسفند ماه ۱۳۸۸



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
دانشکده مهندسی هوافضا

- ۱۳- امانی الف، "بررسی عددی احتراق آشفته در یک محفظه استوانه ای به روش تابع چگالی احتمال (PDF)"، رساله کارشناسی ارشد، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ۱۳۸۵.
- 14- Launder, B.E., and Spalding, D.B., Lectures in mathematical models of turbulence, Academic Press, London, England, 1972.
- 15- Launder, B.E., and Spalding, D.B., "*The numerical computation of turbulent flows*", Comp. Methods Appl. Mech. Eng., Vol. 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, Vol. 4, pp. 47-66, 1979.
- 18- Anderson, J.D., Computational fluid dynamics: The basics with applications, MGH, 1995.
- 19- Muradoglu, M., Pope, S.B., "*Local time-stepping algorithm for solving probability density function turbulent model equations*", AIAA J., Vol. 40, No. 9, pp. 1755-1763, 2002.
- 20- Fox, R.O., Computational models for turbulent reacting flows. Cambridge University Press, 2003.
- 21- Elbanhawy, Y., Sibasegaram, S., and Whitelaw, J.H., "*Premixed, turbulent combustion of a sudden-expansion flow*", Combustion and Flame, Vol. 50, pp. 153-165, 1983.
- 22- Westbrook, C.K., and Dryer, F.L., "*Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames*", Combustion Science and Technology, Vol. 27, pp. 31, 1981.
- 23- Guo, Z.M., Zhang, H.Q., Chan, C.K., and Lin, W.Y., "*Presumed joint probability density function model for turbulent combustion*", Fuel, Vol. 82, pp. 1091-1101, 2003.