

اعمال الگوریتم ISAT در شبیه سازی احتراق مخلوط غیر پیش آمیخته مغشوش در نرم افزار OpenFOAM

علی شمعونی پور^۱، کیومرث مظاهری^{۲*}

دانشکده فنی و مهندسی، بخش مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

(^{*} نویسنده مخاطب: kiumars@modares.ac.ir)

چکیده

استفاده از سینتیک تفصیلی در عین پرهزینه و زمانگیر بودن در بسیاری شبیه سازی های احتراقی کاربرد دارد. الگوریتم ISAT یا جدول سازی در جای تطبیق پذیر یک روش مناسب برای کاهش زمان و هزینه محاسبات با استفاده از سازوکار شیمیایی تفصیلی در جریانهای واکنشی است. در این مقاله برای کاهش زمان شبیه سازی شعله دو بعدی با تقارن محوری غیر پیش آمیخته متان، هیدروژن و اکسیژن در شرایط احتراق MILD با استفاده از کد متن باز OpenFOAM، الگوریتم ISAT به حلگر مورد استفاده اعمال شد. شبیه سازی با استفاده از سینتیک DRM22 که شامل ۲۲ گونه و ۱۰۴ واکنش است بصورت موازی انجام شد و افزایش سرعتی در حدود ۴ برابر مشاهده شد. نتایج بدست آمده بیانگر دقت بالای این الگوریتم در کنار کاهش زمان محاسباتی قابل توجه است.

واژه های کلیدی: الگوریتم ISAT - جدول سازی در جای تطبیق پذیر - سازوکار شیمیایی تفصیلی - احتراق بدون شعله

۱- مقدمه

در محاسبات احتراقی با در نظر گرفتن سینتیک شیمیایی، برای بدست آوردن ترم تولید در معادله انتقال گونه ها، ناگزیر به حل یک دستگاه ODE سخت (Stiff System of Ordinary Differential Equations) - رابطه (۱) - در هر سلول محاسباتی و در هر گام زمانی هستیم. این قسمت از محاسبات زمان گیر ترین بخش حل است. برای کاهش زمان محاسبات چندین روش پیشنهاد شده است. بطور کلی میتوان این روش ها را به دو دسته ذخیره سازی-بازیابی و کاهش سینتیک تقسیم کرد. از جمله روش های ذخیره سازی-بازیابی یا جدول سازی می توان به الگوریتم در جای تطبیق پذیر (ISAT) [۱]، PRISM [۲]، منیفولد کم بعد ذاتی یا ILDM [۳]، شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) [۴]، HDMR [۵] و جداول جستجوی ساختار یافته [۶] اشاره کرد. از جمله روش هایی که سینتیک را کاهش می دهند میتوان به آنالیز حساسیت [۷]، اختلال تکین محاسباتی (CSP) [۸]، گراف نسبت مستقیم (DRG) [۹]، گراف نسبت مستقیم با انتشار خطا (DRGEP) [۱۰]، شیمی تطبیق پذیر دینامیک (DAC) [۱۱]، تقریب های شبه پایا (QSSA) و تقریب جزئی (PE) [۱۲] اشاره کرد.

روشی که در این مقاله از آن استفاده شده است، روش جدول سازی در جای تطبیق پذیر (ISAT) [۱] است. در روش ISAT اطلاعات حل سینتیک در جدولی ذخیره میشود و از این جدول برای تخمین حل دستگاه ODE در سلول های دیگر یا زمان های دیگر استفاده میشود. منظور از درجا بودن این جدول این است که برخلاف روش هایی مثل ILDM [۳] یا جداول جستجوی ساختار یافته [۶] که در آن با جدولی از پیش ساخته روبرو هستیم، در این روش جدول بصورت همزمان با پیشرفت

۱- دانشیار بخش مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه تربیت مدرس

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

حل ساخته می‌شود. از آنجا که در این نوع جدول سازی بر خلاف جداول از پیش ساخته شده، تنها مناطقی از فضای ترکیب که در محاسبات ظاهر میشوند (Accessed Region) وارد جدول میشوند، با کاهش حجم جدول و در نتیجه کاهش زمان جستجو در جدول روبرو هستیم. همچنین منظور از تطبیق پذیر بودن این است که در مواقعی در جریان حل، این جدول اصلاح میشود [۱]. از اواسط دهه ۹۰ که ایده اولیه این روش توسط یانگ و پوپ [۱۳] مطرح شد، اصلاحاتی در زمینه افزایش دقت، کاهش زمان و پردازش موازی در این روش انجام شده است [۱۴-۱۸]. این روش اکثراً در شبیه سازی‌هایی که از مدل احتراقی PDF [۱۹] استفاده میکنند، بکار رفته است [۲۰-۲۴]. شاید بتوان علت را در زمینه کاری و علاقه مندی Pope و همکاران به مدل‌های PDF در احتراق نسبت داد. در عین حال استفاده از روش ISAT در شبیه سازی‌های DNS و LES [۲۵-۲۷] و نرم افزار Fluent [۲۸] نیز گزارش شده است.

در حقیقت با هر مدلی که نیاز به حل دستگاه ODE سینتیک شیمیایی باشد می‌توان از ISAT به عنوان جایگزینی برای حل زمانگیر دستگاه ODE سینتیک شیمیایی استفاده کرد. از جمله این مدل‌ها، مدل PaSR [۲۹] است که در کار حاضر استفاده می‌شود. این مدل با استفاده از سینتیک تفصیلی چالش اندرکنش شیمی و اغتشاش را به‌خوبی برطرف می‌کند اما مشکل اصلی در آن زمانگیر بودن مدت شبیه سازی است. این مشکل از آنجا ناشی میشود که در این مدل هر سلول محاسباتی بصورت یک راکتور با مخلوط همگن و فشار ثابت در نظر گرفته می‌شود و تحول گونه‌ها بصورت دو فرایند جداگانه احتراق و اختلاط در هر سلول مدل می‌شود. در فرایند احتراق در هر سلول می‌بایست دستگاه ODE گونه‌ها، دما و فشار حل شود که بسیار زمانگیر است. از این رو در این مقاله جهت کاهش زمان محاسبات از الگوریتم ISAT استفاده شد.

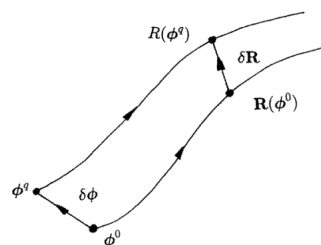
۲- مبانی ISAT

ترکیب گونه‌ها در فضای ترکیب (Composition Space) در زمان t_0 با بردار ترکیب $\bar{\phi}^0 = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{n_s+2}\} = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_s}, T, P\}$ و در زمان $t_0 + \Delta t$ با $\bar{R}(\bar{\phi}^0)$ نمایش داده می‌شود. $R(\bar{\phi}^0)$ نگاشت واکنش (Reaction Mapping) نیز نامیده می‌شود. این نگاشت از حل دستگاه ODE سینتیک شیمیایی زیر بدست می‌آید:

$$\frac{d(\bar{\phi})}{dt} = g(\bar{\phi}) \quad (1)$$

$$g(\bar{\phi}) = \sum_{r=1}^R \bar{S}_r F^r(\bar{\phi}) \quad (2)$$

در این رابطه R تعداد واکنش‌های اولیه، $\bar{S}_r$ بردار ضرایب استوکیومتری و $F^r(\bar{\phi})$ نرخ واکنش مربوط به I-امین واکنش اولیه است [۳۰]. اگر مسیر تحول گونه‌ها (Trajectories) در فضای ترکیب را بصورت شکل (۱) نمایش دهیم:



شکل ۱- شمای نگاشت واکنش از نقطه جدول سازی ϕ^0 و همچنین نقطه جستجو ϕ^q [۱]

برای بدست آوردن نگاشت واکنش در زمانی که غلظت های اولیه بجای $\bar{\varphi}^0$ ، $\bar{\varphi}^q$ هستند باید دوباره دستگاه ODE (۱) این بار با شرایط اولیه $\bar{\varphi}^q$ حل شود. در روش ISAT بجای حل دوباره این دستگاه، از تقریب خطی زیر برای نگاشت واکنش استفاده می شود.

$$\bar{R}(\bar{\varphi}^q) \approx \bar{R}(\bar{\varphi}^0) + \delta \bar{R}^T \quad \delta \bar{R}^T = A \delta \bar{\varphi} \quad (3)$$

که در آن $\delta \bar{\varphi}$ بیانگر $|\bar{\varphi}^q - \bar{\varphi}^0|$ است و A ماتریسی $n_s + 2 \times n_s + 2$ بنام ماتریس گرادیان (Gradient Mapping) است که اعضای آن بصورت زیر هستند:

$$A_{ij} = \frac{\partial R_i(\bar{\varphi})}{\partial \varphi_j} \quad (4)$$

البته قبل از استفاده از این تقریب باید اطمینان حاصل کرد که خطای ناشی از این تقریب که برابر رابطه (۵) است از حد خطایی که توسط کاربر تعیین می شود (ε_{tol}) کمتر باشد. با این محدودیت می توان منطقه ای را در فضای ترکیب بدست آورد که خطای تقریب آن از خطای ε_{tol} کمتر است، این منطقه، منطقه دقت (Region of Accuracy) یا (ROA) نامیده می شود.

$$\varepsilon = \|\bar{R}(\bar{\varphi}^q) - \bar{R}(\bar{\varphi}^0)\| \quad (5)$$

در ISAT ابتدا حدس اولیه محافظه کارانه بصورت یک بیضی گون - عبارت (۶) - برای منطقه دقت در نظر گرفته می شود. در طی فرایند جدول سازی این بیضی گون برای در بر گرفتن نقاط جدیدی که خطای تقریب خطی در آنها از ε_{tol} کمتر باشد رشد می - یابد.

$$E \equiv \left\{ \bar{\varphi} \left| \delta \bar{\varphi}^T \frac{A^T A}{\varepsilon_{tol}^2} \delta \bar{\varphi} \leq 1 \right. \right\} \quad (6)$$

عبارت (۶) در جبر خطی بیان یک بیضی در فضای ۲ بعدی، بیضی گون در فضای ۳ بعدی و فرا بیضی گون (Hyper Ellipsoid) در فضای n بعدی است که بطور کلی در اینجا آنرا بیضی گون دقت (Ellipsoid of Accuracy) یا (EOA) مینامیم [۱]. بجای

محاسبه عبارت (۶) می توان با استفاده از فاکتورگیری چلسکی (Cholesky Factorization)، ماتریس $\frac{A^T A}{\varepsilon_{tol}^2}$ را بصورت ضرب

یک ماتریس پایین مثلثی در ترانهاده خود نوشت:

$$\frac{A^T A}{\varepsilon_{tol}^2} = LL^T \quad (7)$$

به ماتریس L ماتریس چلسکی نیز می گویند. با جاگذاری رابطه (۷) در (۶) می توان بیان بیضی گون را بصورت (۸) انجام داد:

$$E \equiv \left\{ \bar{\varphi} \left| \delta \bar{\varphi}^T LL^T \delta \bar{\varphi} \leq 1 \right. \right\} \quad (8)$$

با استفاده از تعریف نرم رابطه (۸) را می توان بصورت (۹) نوشت:

$$E \equiv \left\{ \bar{\varphi} \left| \left\| L^T \delta \bar{\varphi} \right\| \leq 1 \right. \right\} \quad (9)$$

رابطه ای که مشخص میکند آیا نقطه $\bar{\varphi}^q$ در بیضی گون EOA است یا خیر، رابطه (۹) است.

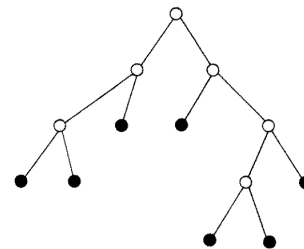
۲-۱- ذخیره سازی و بازیابی اطلاعات

نحوه ذخیره سازی اطلاعات در حافظه بطوری که در آینده مورد استفاده قرار گیرند را میتوان به طرق مختلفی انجام داد. Pope روش درخت باینری (Binary Tree) را برای ذخیره سازی اطلاعات پیشنهاد کرد [۱]. البته در تحقیقی که در سال ۲۰۱۰

انجام شد نیز درخت باینری بهترین روش ذخیره سازی برای ISAT معرفی شد [۳۱]. ساختار درخت باینری از دو جزء به نامهای گره (Node) و برگ (Leaf) تشکیل شده است که در شکل (۲) دیده می شود. در گره ها اطلاعات مربوط به صفحات برش (Cutting Planes) که در ادامه معرفی می شوند و در برگ ها اطلاعاتی که برای تقریب خطی مورد نیاز است ذخیره می شوند. اطلاعات در هر برگ شامل $\bar{\varphi}^0$ ، $R(\bar{\varphi}^0)$ و $A(\bar{\varphi}^0)$ هستند. در ابتدای حل، جدول ISAT خالی است. با ورود اولین بردار ترکیب $\bar{\varphi}^0$ (مربوط به زمان t_0) - که همان شرایط اولیه غلظت گونه ها، دما و فشار است - به حلگر ISAT، این زیر برنامه، $\bar{\varphi}^0$ را به حلگر ODE تحویل داده و $R(\bar{\varphi}^0)$ یا همان $\bar{\varphi}(t_0 + \Delta t)$ و همچنین $A(\bar{\varphi}^0)$ را از حلگر تحویل می گیرد. سپس درخت با یک برگ تشکیل می شود - شکل (۳) - ISAT سپس $R(\bar{\varphi}^0)$ را برای محاسبه ترم تولید در معادله انتقال گونه ها به قسمت جریان واکنشی کد محاسباتی تحویل می دهد. با وارد شدن دومین بردار ترکیب $(\bar{\varphi}^q)$ از دومین سلول محاسباتی، ISAT چک میکند که آیا این ترکیب در محدوده دقت برگ شامل $\bar{\varphi}^0$ است یا خیر - رابطه (۹) - اگر این رابطه برقرار بود، ISAT بجای تحویل $\bar{\varphi}^q$ به حلگر ODE، تقریب خطی از جواب - رابطه (۳) - را به حلگر جریان واکنشی تحویل می دهد. به این مرحله مرحله بازیابی (Retrieve) گفته می شود.

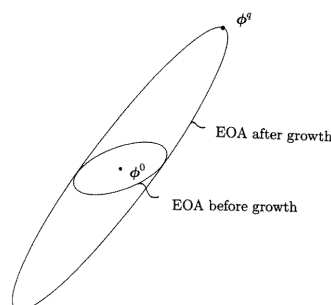


شکل ۳- تشکیل درخت باینری با اولین برگ



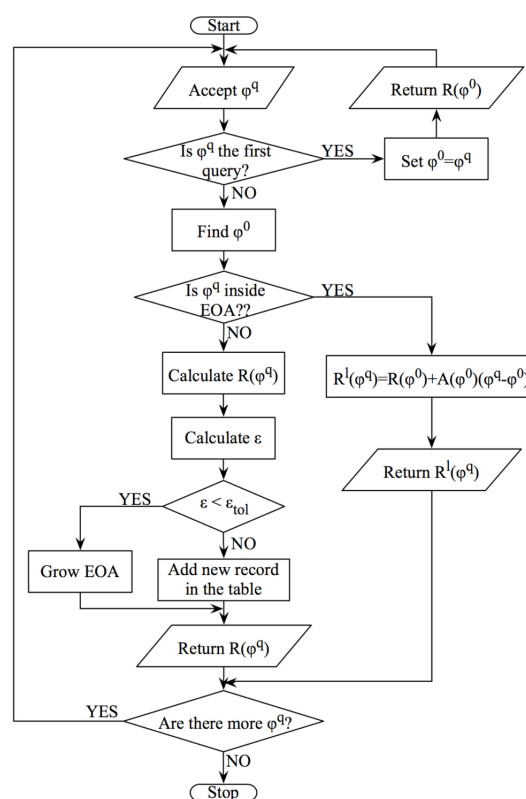
شکل ۲- شمای درخت باینری، نقاط سیاه نشان دهنده برگ ها و نقاط سفید نشان دهنده گره ها هستند [۱].

اگر $\bar{\varphi}^q$ در محدوده دقت $\bar{\varphi}^0$ نبود، $\bar{\varphi}^q$ به حلگر ODE تحویل داده و $R(\bar{\varphi}^q)$ و $A(\bar{\varphi}^q)$ تحویل گرفته می شود و رابطه (۵) محاسبه می شود. از آنجا که EOA یک حدس اولیه محافظه کارانه برای محدوده دقت $\bar{\varphi}^0$ است، امکان این وجود دارد که رابطه (۹) در ابتدا برقرار نباشد اما خطای تقریب خطی از ε_{tol} کوچکتر باشد. پس در این مرحله رابطه (۵) محاسبه میشود، اگر $\varepsilon \leq \varepsilon_{tol}$ بود وارد مرحله رشد (Growing) و اگر $\varepsilon > \varepsilon_{tol}$ بود، وارد مرحله اضافه کردن (Adding) می شویم. مرحله رشد زمانی است که باید تخمین ما از EOA اصلاح شود. در این قسمت بیضی گون به گونه ای رشد می یابد که $\bar{\varphi}^q$ را در مرز خود در بر گیرد. شکل (۴) نشان دهنده بیضی گون اولیه و بیضی گون رشد داده شده است.



شکل ۴- شماتیک رشد منطقه دقت اولیه به منطقه دقت جدید برای در بر گرفتن نقطه φ^q که خطای تقریب خطی (ε) در آن کمتر از ε_{tol} است [۱].

تأثیر مرحله رشد در درخت باینری بدین صورت است که پس از رشد تنها L که در بر گیرنده اطلاعات EOA اصلاح شده می باشد، $R(\overline{\varphi^q})$ و $A(\overline{\varphi^q})$ ثابت می ماند. ISAT پس از مرحله رشد، حل دقیق یعنی $R(\overline{\varphi^q})$ را به قسمت محاسبات جریان واکنشی تحویل می دهد. در این مرحله دیگر برگگی به جدول اضافه نمی شود. رشد از یک طرف باعث کمتر شدن حجم جدول و در نتیجه کمتر شدن مقدار حافظه مورد نیاز الگوریتم شده ولی از طرف دیگر منشأ اصلی خطا در الگوریتم ISAT است. در مرحله اضافه کردن، جای برگ موجود را یک گره میگیرد و برگ موجود به سمت چپ گره و برگ جدید که شامل اطلاعات $\overline{\varphi^q}$ ، $R(\overline{\varphi^q})$ و $A(\overline{\varphi^q})$ است در سمت راست گره قرار می گیرد. با اضافه کردن یک $\overline{\varphi}$ جدید به جدول، اطلاعات صفحه برشی در گره مرتبط کننده ۲ برگ ($\overline{\varphi}$ جدید و $\overline{\varphi^0}$ قبلی) ذخیره می شود. صفحه برشی توسط بردار v و اسکالر a تعریف میشود. این صفحه برش طوری تعیین میشود که تمام نقاط بردار $\overline{\varphi}$ جدید در راست و نقاط بردار $\overline{\varphi^0}$ در چپ آن قرار گیرند. با این کار حین جستجو در درخت باینری با رسیدن به هر گره میتوان تصمیم گرفت که $\overline{\varphi^q}$ در گره سمت راست یا چپ قرار دارد. تا اینجا سه فرایند اصلی در ISAT یعنی بازیابی، اضافه کردن و رشد تنها برای محاسبات مربوط به سلولهای محاسباتی اول و دوم توضیح داده شد. در ادامه کار با وارد شدن $\overline{\varphi^q}$ ها به ISAT همانند قبل، درخت برای یافتن برگگی که نزدیکترین ترکیب به $\overline{\varphi^q}$ را دارد جستجو شده و با استفاده از روابط (۹) و (۵) یکی از سه اتفاق بازیابی، اضافه کردن یا رشد به وقوع می پیوندد. در مورد درخت باینری میتوان گفت بترتیب یا شکل آن تغییر نمیکند و یا یک برگ و یک گره به آن اضافه میشود. برای جمع بندی این بخش فلوچارت ISAT در شکل (۵) آورده می شود.



شکل ۵- فلوچارت ISAT

۳- استفاده از روش ISAT در شبیه سازی احتراق بدون شعله

در این قسمت نتایج پیاده سازی الگوریتم ISAT بر حلگر ReactingFOAM در نرم افزار OpenFOAM که یک حلگر با مدل احتراقی PaSR است مورد بررسی قرار میگیرد. مسئله انتخابی جهت اعمال الگوریتم، احتراق MLID [۳۲] یا احتراق بدون شعله [۳۳ و ۳۴] است که توسط حلجی [۳۵] با استفاده از کد با متن باز OpenFOAM شبیه سازی شده است. در این شبیه سازی از سینتیک DRM22 [۳۶] که شامل ۲۲ گونه و ۱۰۴ واکنش است استفاده شده است. شبیه سازی با استفاده از یک پردازنده ۲ هسته ای ۲.۲ گیگاهرتز با ۳ گیگابایت حافظه داخلی و یک سیستم پردازش موازی با ۵ گره محاسباتی دارای پردازنده تک هسته ای ۳ گیگاهرتز که هر کدام دارای ۱ گیگابایت حافظه داخلی هستند انجام شده است. شبیه سازی بصورت ۲ بعدی با تقارن محوری و بدون در نظر گرفتن اثرات تشعشع و با استفاده از معادلات RANS ($k-\varepsilon$) به منظور مدلسازی اغتشاش انجام شده است.

۳-۱- مشخصات و شرایط مرزی مشعل مورد استفاده

شعله مدل شده، شعله مخلوط متان و هیدروژن (مشعل JHC دالی) [۳۴] است. این مشعل در یک تونل باد با سرعت هوای ۳.۳ متر بر ثانیه بگونه ای که محور مشعل موازی جریان تونل باشد، قرار گرفته است. سوخت از طریق جت مرکزی با سرعت ۵۸ متر بر ثانیه و محصولات داغ (ترکیبی از CO_2 ، H_2O ، O_2 ، N_2) با یک جت هم محور با سرعت ۳.۲ متر بر ثانیه وارد محفظه احتراق می شود. مشخصات مورد استفاده در آزمایش دالی [۳۴] در جدول (۱) و شرایط عملکرد آزمایش در جدول (۲) آورده شده است. شکل (۶) هندسه دو بعدی و متقارن محوری مسئله مورد مطالعه را نشان می دهد. تعداد ۱۷۵۰۰ سلول محاسباتی لازم است تا مسئله به شبکه وابستگی نداشته باشد.

جدول ۱- مشخصات مشعل دالی [۳۴]

قطر خارجی ورودی هوای داغ	قطر داخلی ورودی هوای داغ	قطر خارجی نازل سوخت	قطر داخلی نازل سوخت
۸۷.۶ میلیمتر	۸۲ میلیمتر	۴.۶۵ میلیمتر	۴.۲۵ میلیمتر

جدول ۲- شرایط عملکرد آزمایش دالی برای مساله مورد نظر (درصد های گونه های مخلوط بصورت جرمی می باشند). [۳۴]

ورودی تونل باد	ورود محصولات داغ	ورودی سوخت
$V = 3.3 \text{ m/s}$ $T = 294K$ $23.2\%O_2 + 76.8\%N_2$	$V = 3.2 \text{ m/s}$ $T = 1300K$ $3\%O_2 + 6.5\%H_2O + 5.5\%CO_2 + 85\%N_2$	$V = 58.7 \text{ m/s}$ $T = 305K$ $80\%CH_4 + 20\%H_2$

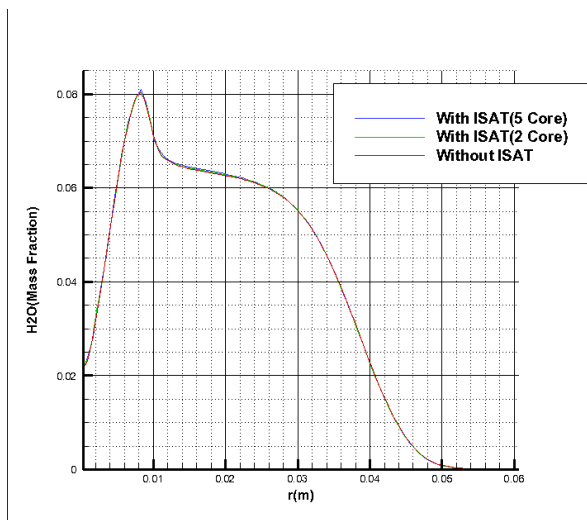


شکل ۶- هندسه شبیه سازی شده [۳۵]

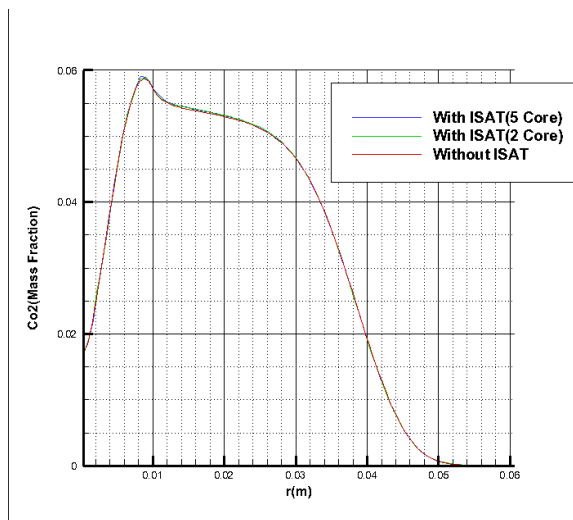
۳-۲- بررسی نتایج

برای رسیدن به حالت پایا، شبیه سازی تا ۲۵۰۰۰ تکرار انجام شده است. تعداد نقاطی که وارد الگوریتم ISAT میشوند از حاصل ضرب تعداد شبکه در تعداد تکرار لازم برای همگرایی بدست می آید که برابر ۴۰۰ میلیون نقطه است. این، تعداد دفعاتی

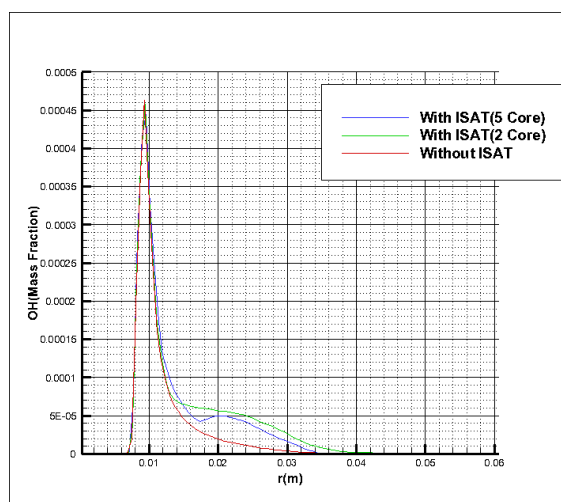
است که باید دستگاه ODE با ۲۴ مجهول (۲۲ مجهول گونه ها بعلاوه دما و فشار) در طول شبیه سازی حل شود. در شکل های ۷ تا ۱۲ بترتیب تغییرات کسر جرمی CO_2 ، H_2O ، O ، OH و C_2H_2 و پروفیل دما در فاصله ۳۰ میلی متری از دهانه نازل مشاهده می شود. این شبیه سازی برای ۳ حالت انجام شده است. ابتدا در حالات معمولی یعنی بدون استفاده از الگوریتم ISAT، دوم با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای و سوم با استفاده از ISAT با سیستم پردازش موازی ۵ هسته ای. در جدول (۳) مدت زمان اجرا برای هریک از حالات و همچنین نسبت افزایش سرعت شبیه سازی بواسطه استفاده از ISAT مشاهده می شود.



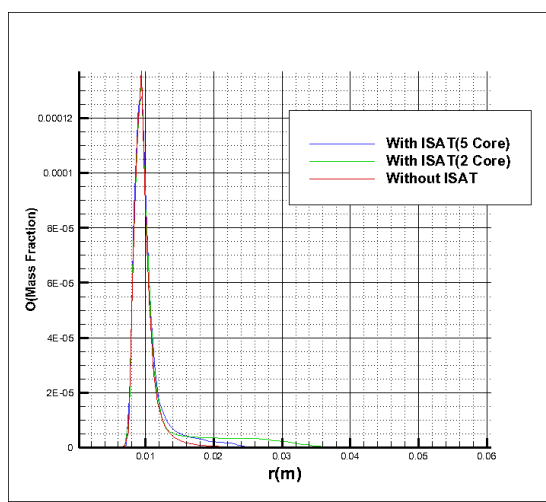
شکل ۸- پروفیل کسر جرمی H_2O در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای (رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای (رنگ آبی)



شکل ۷- پروفیل کسر جرمی CO_2 در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای (رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای (رنگ آبی)

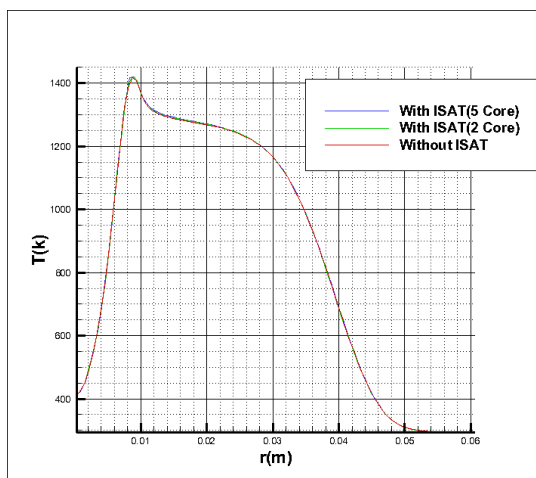


شکل ۱۰- پروفیل کسر جرمی رادیکال OH در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای (رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای



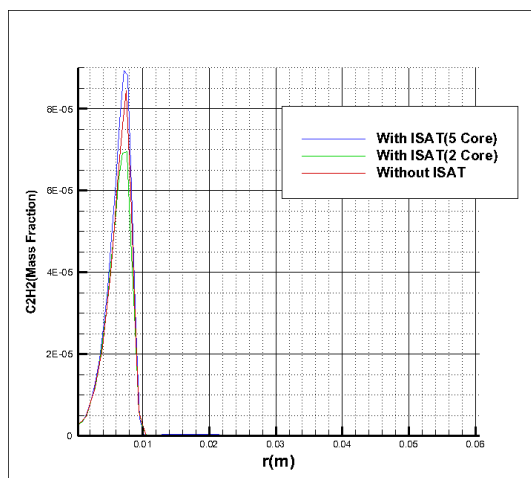
شکل ۹- پروفیل کسر جرمی رادیکال O در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای

(رنگ آبی)



شکل ۱۲- پروفیل دما در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای (رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای (رنگ آبی)

(رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای (رنگ آبی)



شکل ۱۱- پروفیل کسر جرمی رادیکال C_2H_2 در فاصله ۳۰ میلیمتری از دهانه نازل بصورت شعاعی تا شعاع ۶۰ میلیمتری برای ۳ حالت بدون استفاده از الگوریتم ISAT (رنگ قرمز)، با استفاده از ISAT با پردازنده ۲ هسته ای (رنگ سبز) و با استفاده از ISAT با پردازنده موازی ۵ هسته ای (رنگ آبی)

جدول ۳- زمان و افزایش سرعت شبیه سازی با استفاده از ۲ پردازنده ۲ هسته ای و موازی ۵ هسته ای

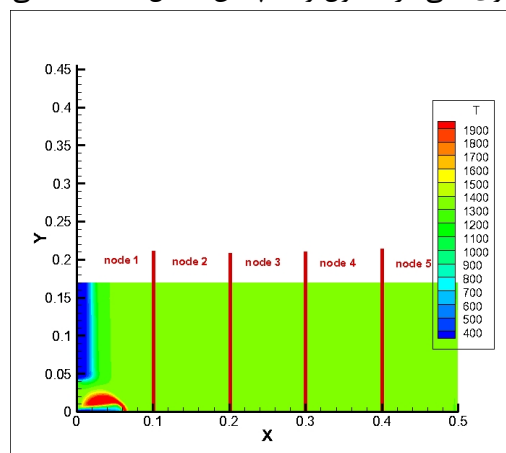
مشخصات سیستم	سیستم پردازش موازی با ۵ گره محاسباتی (3GHz)	پردازنده ۲ هسته ای (2.2GHz)
حافظه داخلی	۵ گیگابایت	۳ گیگابایت
مدت زمان شبیه سازی بدون ISAT	۱۲۴.۶۵ ساعت (۵.۲ روز)	۱۴۵.۶۶ ساعت (۶.۱ روز)
مدت زمان شبیه سازی با ISAT	۳۱.۱۸ ساعت (۱.۳ روز)	۳۹.۳ ساعت (۱.۶۴ روز)
افزایش سرعت	۴ برابر	۳.۷۱ برابر

همانطور که در شکل های ۷، ۸ و ۱۲ مشخص است کسر جرمی محصولات و همچنین دما با دقت بالایی با استفاده از ISAT محاسبه شده است. برای نشان دادن توانایی ISAT در تخمین کسر جرمی رادیکال های آزاد به عنوان نمونه سه رادیکال مهم O ، OH و C_2H_2 انتخاب شده اند که در شکل های ۹، ۱۰ و ۱۱ مقادیر آنها قابل مشاهده است. در اینجا باید خاطر نشان کرد که این رادیکال ها هم مقادیر کمی دارند و هم بسرعت از بین میروند، در ISAT با در نظر گرفتن خطای 0.0001 (یعنی $\epsilon_{tol}=0.0001$) همین خطا به نوعی وارد محاسبات می شود. اختلاف بین اجراهای مختلف در شکل های ۹ و ۱۰ بترتیب برای مقادیر زیر 0.0002 و 0.0001 است که با توجه به ϵ_{tol} که ما وارد محاسبات کردیم طبیعی بنظر میرسد. این مسئله در شکل (۱۱) نیز تکرار شده است. علت آوردن نتایج مربوط به پردازنده موازی ۵ هسته ای در اینجا این است که بر خلاف انتظار، افزایش تعداد گره ها در پردازش موازی از ۲ به ۵، سرعت شبیه سازی با استفاده از ISAT را بصورت خطی افزایش نمی دهد. علت این امر را باید در نحوه پردازش موازی جستجو کرد. با استفاده از بسته MPI در OpenFOAM پردازش موازی بدین

صورت است که با تقسیم هندسه به تعداد هسته های موجود، محاسبات بصورت موازی انجام می شود. در حالت معمولی هندسه موجود برای محاسبه با ۵ هسته بصورت شکل ۱۳) تقسیم می شود. در این حالت دو مشکل بوجود می آید اول آنکه به علت اینکه احتراق از دهانه نازل شروع می شود در نود ۱ شاهد تغییرات در فضای ترکیب هستیم بنابراین ISAT شروع به جدول سازی می کند، در این حالت برای بدست آوردن نگاشت واکنش نقاطی از فضای ترکیب مربوط به نود ۱ که در جدول نیستند با استفاده از انتگرال گیری مستقیم که زمانبر است عمل می شود. در این زمان محاسبات مربوط به نودهای ۲ تا ۵ که هنوز شعله به آنها نرسیده است با استفاده از جدول ISAT به سرعت انجام می شود و این نودها منتظر اتمام محاسبات مربوط به نود ۱ می مانند. این اتفاق زمانی که شعله به نود ۲ هم میرسد بوقوع می پیوندد. بدین صورت

که در این زمان ترکیب گونه ها در نود ۱ به حالت پایداری رسیده و برای محاسبه نگاشت واکنش از جدول استفاده شده و محاسبات به سرعت انجام می شود. در نودهای ۳ تا ۵ نیز به علت عدم رسیدن شعله جدول با یک برگ (متناظر با ترکیب اولیه نود) وجود دارد و با استفاده از آن محاسبات به سرعت انجام می شوند. این نودها تا اتمام محاسبات مربوط به نود ۲ منتظر می مانند.

همانطور که ملاحظه شد در پردازش موازی برای هر نود یک جدول در حافظه مربوط به آن نود تشکیل می شود. مشکل دوم به واسطه وجود همین جداول مستقل از هم است. بدین صورت که با شروع محاسبات در هر نود جدول مخصوص به آن بدون اطلاع از بقیه جداول، ذخیره سازی اطلاعات را ادامه می دهد. در این حالت همپوشانی زیادی بین جداول وجود دارد که این مسئله باعث بالا رفتن زمان جستجوی کلی در جداول و همچنین اشغال حافظه اضافی می شود.



شکل ۱۳- تقسیم بندی هندسه در پردازش موازی بین ۵ نود و پروفیل دما پس از ۴۱۶ بار تکرار که نشان میدهد تنها در نود ۱ احتراق صورت میگیرد.

۴- نتیجه گیری

در این مقاله برای کاهش زمان شبیه سازی با در نظر گرفتن سینتیک تفصیلی، شعله دو بعدی با تقارن محوری غیر پیش آمیخته متان، هیدروژن و اکسیژن در شرایط احتراق MILD با استفاده از کد متن باز OpenFOAM، الگوریتم ISAT به حلگر مورد استفاده اعمال شد. همانطور که در شکل های ۷ تا ۱۲ مشاهده شد دما و غلظت گونه ها با دقت خوبی محاسبه شد. همچنین با استفاده از ISAT همانطور که در جدول (۳) مشاهده شد، زمان شبیه سازی تا ۴ برابر کاهش یافت. در کنار مزایای الگوریتم ISAT در کاهش زمان محاسبات و همچنین دقت بالای آن، این الگوریتم در شبیه سازی های موازی بصورت بهینه عمل نمی کند و نیازمند تغییراتی در نحوه جدول سازی برای از بین بردن همپوشانی جداول و ایجاد تعادل بار بین گره های محاسباتی است.

مراجع

1. Pope, S. B., *Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation*. 1997, Combust. Theory Modeling, Vol. 1, pp. 41-63.
2. Tonse, S. R., et al., *Piecewise Reusable Implementation of Solution Mapping*. An economical strategy for chemical kinetics. Israel Journal of Chemistry, Vol. 39.
3. Maas, U., and Pope, S. B., *Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space*. 1992, Combustion and Flame, Vol. 88.
4. Christo, F. C., Masri, A.R., and Nebot, E.M., *Artificial neural network implementation of chemistry with PDF simulation of H₂/CO₂ flames*. 1996, Combustion and Flame, Vol. 106.
5. Rabitz, H., and Alis, O., *General foundations of high-dimensional model representations*. 1999, Journal of Mathematical Chemistry, Vol. 25.
6. Chen, J. Y., Kollmann, W. and Dibble, R.W., *PDF modelling of turbulent nonpremixed methane jet flames*. 1989, Combustion Science and Technology, Vol. 64.
7. Tomlin, A. B. et al., *Mechanism reduction for the oscillatory oxidation of hydrogen: Sensitivity and quasi-steady-state analyses*. 1992, Combustion and Flame, Vol. 91.
8. Lam, S. H. and Goussis, D. A., *The CSP Method for Simplifying Kinetics*. 1994, International Journal of Chemical Kinetics, Vol. 26.
9. Lu, T. and Law, C. K., *A directed relation graph method for mechanism reduction*. 2005, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 30.
10. *An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms*. Pepiot-Desjardins, P. and Pitsch, H., 2008, Combustion and Flame, Vol. 154.
11. Liang, L. and Stevens, J. G., *A dynamic adaptive chemistry scheme for reactive flow computations*. 2009, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 32.
12. Warnats, J., Maas, U. and Dibble, R. W., *Combustion*. 4th. Springer.
13. Yang, B. and Pope, S. B., *Treating Chemistry in Combustion with Detailed Mechanisms-In situ Adaptive Tabulation in Principal Direction*. 1998, Combustion and Flame, Vol. 112, pp. 85-112.
14. *Investigation of strategies for*. Lu, L. et al., Drexel University, Philadelphia. 2005. 4th Joint Meeting of the US Sections of the Combustion Institute. pp. 20-23.
15. Veljkovic, I., Plassmann, P. E. and Haworth, D. C., *A scientific on-line database for efficient function approximation*.
16. Chen, J. Y., *Analysis of in situ adaptive tabulation performance for combustion chemistry and improvement with a modified search algorithm*. 2004, Combustion Science and Technology, Vol. 176, pp. 1153-1169.
17. Panda, B., et al., *Indexing for function approximation*. s.l. : ACM , 2009. Report. 1-59593-385.
18. Lu, L., et al., *Computationally efficient implementation of combustion chemistry in parallel PDF calculations*. 2007, Combustion Theory and Modeling.
19. Pope, S. B., *PDF Methods For Turbulent Reactive Flows*. 1985, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 11.
20. Xu, J. and Pope, S. B., *PDF calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction*. 2000, Combustion and Flame, Vol. 123, pp. 281-307.
21. Tang, Q., Xu, J. and Pope, S. B., *PDF calculations of local extinction and NO production in piloted-jet turbulent methane/air flames*. 2000, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 28, pp. 133-139.
22. Masri, A. R., et al., *PDF calculations of turbulent lifted flames of H₂/N₂ issuing into a vitiated co-flow*. 2004, Combustion Theory and modeling, Vol. 8, pp. 1-22.

23. Liu, K., Pope, S. B. and Caughey, D. A., *Calculations of bluff-body stabilized flames using a joint probability density function model with detailed chemistry*. 2005, Combustion and Flame, Vol. 141, pp. 89-117.
24. Cao, R. and Pope, S. B., *The influence of chemical mechanisms on PDF calculations of nonpremixed piloted jet flames*. Combustion and Flame, 2005, Vol. 143, pp. 450-470.
25. Lu, L., et al., *LES/FDF/ISAT computations of turbulent*. Center For Turbulence Research, 2004. Proceedings of CTR Summer Program. pp. 283-294.
26. Singer, M. A. and Pope, S. B., *Exploiting ISAT to solve the reaction-diffusion equation*. 2004, Combustion Theory and Modeling, Vol. 8, pp. 361-383.
27. Singer, M. A., Pope, S. B. and Najm, H. N., *Modeling unsteady reacting flow with operator-splitting and ISAT*. 2006, Combustion and Flame, Vol. 147, pp. 150-162.
28. Gordon, R. L., et al., *A numerical study of auto-ignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated coflow*. 2007, Combustion Theory and Modeling, Vol. 11, pp. 351-376.
29. Nordin, P. A.N., *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*. Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology. 1998. PhD. Thesis.
30. Lam, S. H., *Using CSP to Understand Complex Chemical Kinetics*. 1993, Combustion Science and Technology, Vol. 89.
31. Liolious, V., *Developing a tabulation approach to multiscale modelling for systems biology*. Research Skills and Professional Issues. 2010. MSc Project Background Report. COMP60990.
32. Cavaliere, A. and Joannon, M. D., *Mild Combustion*. 2004, Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 30, pp. 329-366.
33. Christo, F. C. and Dally, B. B., *Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow*. 2005, Combustion and Flame, Vol. 142, pp. 117-129.
34. Dally, B. B., Karretis, A. N. and Barlow, R. S., *Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow*. 2002, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 29, pp. 1147-1154.
۳۵. حلاجی, محسن, *ارزیابی مدل‌های توربولانسی در شبیه سازی کوره های با احتراق بدون شعله*. مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی : دانشگاه تربیت مدرس. 89, پایان نامه دوره کارشناسی ارشد.
36. Kazakov, A. and Frenklach, M., <http://www.me.berkeley.edu/drm/>. [Online]