

شبیه سازی شعله آرام جریان مخالف با استفاده از FGM دو بعدی

حسین عطوف
دکترای مهندسی مکانیک
دانشگاه صنعتی اصفهان
h.atooof@me.iut.ac.ir

محمد فرشچی
استاد
دانشکده مهندسی هوافضا
دانشگاه صنعتی شریف
farshchi@sharif.edu

فتح الله امی
دانشیار
دانشکده مهندسی مکانیک
دانشگاه تربیت مدرس
fommi@modares.ac.ir

فاطمه چیتگرها
دانشجوی دکتری
دانشکده مهندسی مکانیک
دانشگاه تربیت مدرس
Fatemeh.chitgarha@modares.ac.ir

چکیده

در این مقاله به معرفی روش فلیملت دو بعدی بر مبنای رژیم پیش مخلوط پرداخته شده است. این روش ترکیبی از دو روش کاهش سینتیک، یعنی روش فلیملت و روش منیفولد است. در این روش شعله چند بعدی بصورت مجموعه ای از شعله های یک بعدی آرام در نظر گرفته می شود (روش فلیملت) و ساختار شعله توسط تعدادی متغیر کنترلی تعیین می گردد (روش منیفولد). با استفاده از این مدل بانک اطلاعاتی متغیرهای شیمیایی بر حسب متغیرهای کنترلی و پیشرو ساخته می شوند. با حل معادلات متغیرهای پیشرو و کنترلی در طول شبیه سازی خواص مورد نیاز از بانک اطلاعاتی میانبایی می شوند. در این مطالعه به منظور بکارگیری روش فلیملت منیفولد دو بعدی، ابتدا روش فلیملت منیفولد یک بعدی با شبیه سازی شعله ی پیش مخلوط جریان مخالف آرام صحت سنجی شد. در مرحله بعد روش فلیملت منیفولد دو بعدی با اضافه کردن پارامتر کسر مخلوط بر یک شعله جریان مخالف با تغییرات نسبت هم آری بکار گرفته شد. نتایج نشان داد که برای گونه های اصلی و دما روش فلیملت دو بعدی دارای دقت بسیار خوبی بوده و همچنین زمان محاسبات را تا چندین برابر کاهش می دهد.

کلمات کلیدی: فلیملت منیفولد، متغیر پیشرفت واکنش، شعله پیش مخلوط.

۱- مقدمه

پیچیدگی فیزیکی جریان اطراف است. حل های از پیش تولید شده ترکیب شیمیایی برای شعله های ساده به منظور پیش بینی ساختار موضعی شیمیایی در موقعیت های پیچیده تر با استفاده از روش های میانبایی و توابع استفاده می شوند. مدل فلیملت بوسیله ی جدا نمودن واکنش های شیمیایی از میدان جریان آشفته، پدیده های پیچیده فیزیکی هم چون جزئیات واکنش های شیمیایی و تشکیل آلاینده ها را بهتر پیش بینی می نماید. نخستین بار لئو و همکارانش در سال ۱۹۸۱ ایده استفاده از پروفیل های بدست آمده از شعله های دیفیوژن آرام را جهت محاسبه ی مقدار متوسط و واریانس کمیت ها در شعله های مغشوش بیان نمودند [۳].

مدل های احتراقی از نوع فلیملت فرضیات خاصی را در مورد اینکه اختلاط سوخت و اکسند چگونگی باشند، را شامل می شوند [۴] و [۵]. برای مثال مدل های فلیملت که بر مبنای معادلات فلیملت غیرپیش مخلوط هستند [۶] تنها در رژیم غیرپیش مخلوط اعتبار دارند. به طور مشابه معادلات بر مبنای فلیملت پیش مخلوط [۷] تنها در رژیم پیش مخلوط معتبر هستند. در این مقاله به بررسی روش فلیملت بر پایه ی رژیم پیش مخلوط پرداخته می شود. مدل فلیملت منیفولد^۱ (FGM) ابتدا توسط فن اوین مطرح گردید [۸]. او بر اساس تعریف میزان کشیدگی شعله که توسط دخویی و همکارانش [۹] بیان شده بود، معادله فلیملت یک بعدی بدست آورد. دوله و همکاران [۱۰] فرمول بندی یکسان را برای روش FGM برای سه نوع شعله پیش مخلوط، غیرپیش مخلوط و شعله پاره ای پیش مخلوط در مختصات منحنی الخط استخراج کردند. آنها این روش را برای شعله گذرای غیرپیش مخلوط (که نرخ کرنش آن با زمان تغییر کند) بکار بردند و تاثیر فرضیاتی که در روش فوق استفاده می شود را بررسی کردند.

اگرچه احتراق در کاربردهای عملی معمولاً تحت شرایط مغشوش اتفاق می افتد، اما شعله های آرام به منظور فهم بهتر شیمی همچون کنش و واکنش شیمی با جریان مغشوش، مورد بررسی قرار می گیرند. شکل شعله ی جریان مخالف یک شکل تعریف شده است که شعله ها بین جریان های مخالف سوخت و اکسیدایزر پایدار می شوند. شعله ی جریان مخالف از طریق روش فلیملت به احتراق مغشوش مربوط می شود [۴]. از مزایای شعله ی جریان مخالف می توان به موارد زیر اشاره نمود، در این شکل از شعله، پروسه های احتراق پایا می توانند به دور از پیچیدگی های تاثیرات دیوارها ایجاد شوند. در این شعله ها، نیازی به دنبال کردن نواحی پایدار نمی باشد. که به علت پایداری ذاتی جریان مخالف می باشد. خطوط جریان کشیده شده در این نوع شکل شعله، کمک به تعدیل اختلالات کرده و مانع وقوع ناپایداری های احتراق (خاموشی شعله) می شود.

همچنین این نوع هندسه، به علت بکارگیری آسان شرایط مرزی و تغییر دادن آنها همچون نرخ کرنش، دماها و ترکیبات جریان های مرزی به منظور

مسئله ی اصلی در شبیه سازی پروسه های پیچیده ی احتراقی، مدلسازی و ارزیابی نرخ های واکنش به منظور مشاهده ی صحیح سینتیک جزئی است. شبیه سازی مستقیم عددی مکانیزم های واکنشی بزرگ و پیچیده نیاز به هزینه محاسباتی بسیار بالایی دارد. از این رو پژوهشگران به دنبال روش های پربازده محاسباتی برای مدلسازی دقیق سینتیک جزئی می باشند. این روش های پربازده محاسباتی به منظور دنبال کردن شیمی پیچیده در پروسه های احتراقی، می توانند به دو گروه کلی تقسیم شوند: روش های کاهش شیمی و روش های فلیملت. روش های کاهش شیمی بر این مبنا که پروسه های شیمی عمدتاً بوسیله ی تعدادی از واکنش های کند مشخص می شوند [۱]. این روش ها فرض می کنند که گونه های شامل در واکنش های سریع در حالت پایای شبه تعادلی قرار دارند. در این روش، صرفه جویی در محاسبات تنها با دنبال کردن واکنش های نرخ محدود و گونه های شامل در پروسه های کند به وجود می آید. حذف گونه ها از روش شبه پایا به صورت دستی انجام می شود و نیاز به دید عمیق کاربر در سینتیک های شیمیایی دارد. این کار برای هیدروکربن های با عدد کربن بالاتر مشکلات بیشتری ایجاد می کند. همچنین فرض پایا بودن یک گونه در دمای بالا و حذف آن، ممکن است در دمای پایین فرض صحیحی نباشد [۲]. روش های فلیملت فرض می کنند که ساختار شیمی موضعی یک شعله مستقل از

¹ Flamelet Generated Manifold

$$\frac{\partial m}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(mY_i) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{l}{Le_i c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial x}\right) = \nu \kappa_y, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(mh) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{l}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{l}{c_p} \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{1}{Le_i} - 1\right) h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x}\right) \quad (3)$$

در این روابط، Y_i و h برتربیت نسبت جرمی گونه‌های واکنشی و انتالپی کل است. λ ، c_p و Le_i خواص سیال بوده و برتربیت معرف ضریب هدایت حرارتی، ظرفیت حرارتی مخلوط و عدد لوییس هر گونه واکنشی است. m برابر حاصلضرب چگالی در سرعت بوده و مقدار ویژه مسئله است. با استفاده از شروط مرزی (۴)، (۵) و حل معادلات، فلیلمت یک بعدی ساخته شده و در فضای برداری گونه‌ها تشکیل یک منحنی را می‌دهند که می‌توان آنرا به عنوان منیفلد یک بعدی تلقی کرد.

$$Y_i(x^{\text{R}} - \Psi) = Y_{i-\Psi}, \quad h(x^{\text{R}} - \Psi) = h_{-\Psi} \quad (4)$$

$$\frac{dY_i}{ds}(x^{\text{R}} - \Psi) = 0, \quad \frac{dh}{ds}(x^{\text{R}} - \Psi) = 0 \quad (5)$$

در ادامه با حل معادلات بالا، مقادیر گونه‌ها به همراه دما در یک بانک اطلاعاتی به صورت تابعی از متغیر فضا، x ، ذخیره می‌شود. حال اگر گونه‌ای شیمیایی پیدا شود که بصورت یکنوا با افزایش متغیر فضا تغییر کند می‌توان تمامی گونه‌ها را بر حسب آن گونه بیان کرد. در این صورت به این گونه، متغیر پیشرو اطلاق می‌شود. از آنجایی که تمام گونه‌ها تنها تابعی از یک متغیر پیشرو هستند، روش FGM بصورت یک بعدی است [۲]. انتخاب گونه شیمیایی مناسب به عنوان متغیر پیشرو بستگی به نوع مخلوط سوختنی دارد. البته بر طبق کارهای انجام شده [۱۱] برای تخمین بهتر گونه‌ها در میدان، متغیر پیشرو می‌تواند به صورت ترکیب خطی چند گونه نیز انتخاب شود که در مجموع خاصیت افزایشی و یا کاهش‌ی داشته باشند.

اما به منظور بررسی شعله‌هایی با ورودی‌های متفاوت نیاز به پارامتر دیگری علاوه بر متغیر پیشرفت واکنش، برای جدول بندی است. در شعله-ی مورد بررسی در این مقاله، به علت تغییرات نسبت هم‌ارزی، نیاز به کمیته معادل با نسبت هم‌ارزی داریم. در مدل فلیلمت منیفلد دویبعدی از شبیه سازی حل‌های شعله پیش مخلوط آرام یک بعدی در نسبت هم‌ارزی های متفاوت استفاده می‌شود. تمامی خواص شعله همچون ترکیب گاز سوخته، دمای شعله، سرعت شعله و غیره تابعی از مخلوط اولیه سوخته بوده که بوسیله‌ی نسبت هم‌ارزی مخلوط f و مختصات مکانی x در جهت عمود بر سطح شعله می‌باشند. از این رو تمامی خواص می‌توانند به صورت یک به یک با رابطه زیر تعریف شوند [۱]:

$$j = j(f, x) \quad (6)$$

با توجه به روابط زیر، متغیر مکانی x از معادلات حذف شده و جدول بندی نهایی به صورت زیر بدست می‌آید:

بررسی ساختار شعله‌ها کاربرد زیادی دارد. از این رو به منظور تحلیل مدل فلیلمت در این مقاله از این نوع هندسه استفاده می‌شود.

در سال ۲۰۰۵، فیورینا [۱۱] و همکارانش به بررسی توانایی مدل های فلیلمت بر پایه‌ی پیش مخلوط در رژیم های پیش مخلوط جزئی و دیفیوژن شعله‌های آرام جریان مخالف و بکارگیری ایندکس تاکنو [۱۲] پرداختند. آنها از مدل فلیلمت دو بعدی به منظور شبیه سازی شعله‌ی آرام استفاده نمودند.

از کارهایی که در داخل کشور برای بهبود مدل فلیلمت انجام شده میتوان به کار عطف و داووده امامی در سال ۲۰۱۶ اشاره نمود [۲]. آنها به بررسی تاثیر انتخاب متغیر پیشرفت های گوناگون در مدل فلیلمت منیفلد یک بعدی، بر حسب کسر جرمی‌های مختلف در پیش بینی جبهه‌ی شعله پرداختند. در مورد شبیه سازی شعله‌های پیش مخلوط جزئی، فن اوین [۸، ۱۳] شعله سه‌گانه آرام را برای طول‌های اختلاط متعدد با دو روش FGM و سینتیک جزئی شبیه سازی کرد. او در شبیه سازی خود به بررسی میزان حرارت آزاد شده در شعله نفوذی پرداخت و سرعت شعله را در حالات مختلف بدست آورد. در مطالعه‌ی دیگر در این زمینه، بونگرز و همکارانش [۱۴] با استفاده از تحلیل شعله بر خوردی و کنترل مقدار گرادیان نسبت مخلوط توانست دقت روش FGM را بسنجد.

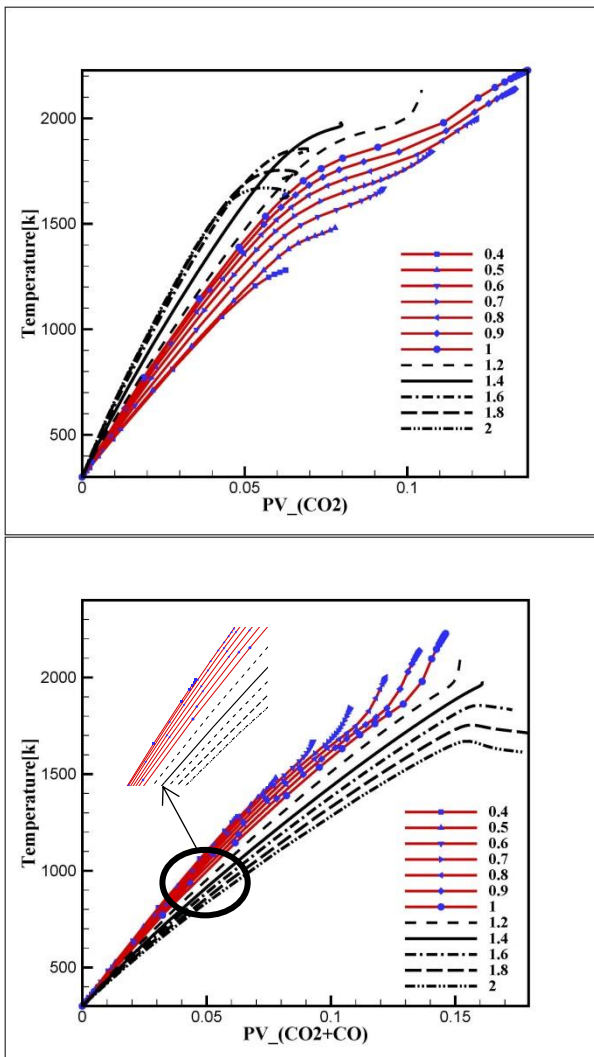
در سال ۲۰۱۲، پرادپ و گروث به بررسی مدل فلیلمت^۱ FPI و مدل فلیلمت کلاسیک برای شعله‌های آرام پرداختند [۱]. آنها با روش های متفاوتی در هر دو مدل جدول سازی کرده و با هم مقایسه نمودند. به منظور پیاده سازی روش FPI از دو متغیر پیشرفت واکنش و کسر مخلوط استفاده کردند. روش بکار گرفته شده در این مقاله نیز با دو متغیر پیشرفت واکنش و کسر مخلوط است. هدف از مقاله‌ی حاضر بکارگیری روش فلیلمت دویبعدی بر پایه‌ی رژیم پیش مخلوط در اوپن فوم برای شعله‌های آرام با دو ورودی متفاوت (تغییرات نسبت هم‌ارزی) می‌باشد. این روش برای شعله‌های مغشوش نیز در کارهای اخیر استفاده شده است. ورمین و همکارانش، شبیه سازی LES شعله‌های ساندا را با مدل فلیلمت FPI (پیش مخلوط) و مدل فلیلمت دیفیوژن انجام دادند. آنها مشاهده نمودند که برای گونه‌های H_2O و CO_2 مدل فلیلمت دیفیوژن نتایج قابل قبول تری را ارائه می‌دهد. آنها این سوال را به عنوان مشکل مطرح کردند که این گونه خطاها در پیش‌بینی گونه‌ها آیا مربوط به جدول بندی فلیلمت بر پایه‌ی رژیم خاص می‌شود و یا مربوط به شبیه سازی LES در این نوع شعله‌ها می‌شود [۱۵]. همچنین شبیه‌سازی احتراق شعله غیرپیش-مخلوط سیدنی مغشوش نیز با استفاده از روش LES توسط البرخت و همکارانش [۱۶] با استفاده از روش FGM و تولید فلیلمت‌های پیش-مخلوط پایا انجام گرفت. در مقاله‌ی حاضر شبیه سازی دو نوع از شعله‌های آرام به منظور بررسی دقیق تر روش فلیلمت دویبعدی انجام شده است و نتایج آنها با روش شبیه سازی مستقیم مقایسه شده‌اند.

۲- معادلات حاکم بر روش فلیلمت پیش مخلوط

به منظور تولید فلیلمت یک بعدی در شعله‌های پیش مخلوط از تمامی جملاتی که سبب ایجاد اعوجاج در شعله پیش مخلوط می‌شوند، مانند انحنا و خمیدگی، در معادلات شعله یک بعدی صرفنظر می‌شود. با این فرض، معادلات بقاء جرم، گونه‌ها و انتالپی برای فلیلمت پایا به صورت زیر در می‌آید [۸]:

^۱ Flame Prolongation of ILDM

در میدان حل مقدار اولیه می‌گیرد. با استفاده از یک تابع میانیاب خطی، براساس مقدار متغیر پیشرو، مقادیر اولیه چگالی، ضریب هدایت حرارتی، گرمای حرارتی ویژه و چشمه شیمیایی در هریک از سلول‌های محاسباتی از درون جدول فلیملت میانیابی می‌شود [۲]. سپس معادلات جریان سیال و پس از آن معادله انتقال متغیر پیشرو حل می‌شود. این مراحل تا همگرایی کامل میدان جلو می‌رود. پس از ارضای شرایط همگرایی، در مرحله پس‌پردازش، براساس مقدار متغیر پیشرو در میدان دیگر گونه‌ها نیز از جدول فلیملت درونیابی می‌شود. در مدل فلیملت دو بعدی، میانیابی با دو متغیر صورت می‌گیرد. با توجه به [۱] متغیر پیشرفت واکنش CO₂+CO در مدل فلیملت یک بعدی و دو بعدی انتخاب شده است. علت انتخاب این گونه در شکل زیر مشاهده می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود، اگر متغیر پیشرفت گونه‌ی CO₂ انتخاب شود، با توجه به شکل در نسبت هم ارزی‌های غنی، تناظر یک به یک بین دما و متغیر پیشرفت وجود ندارد (یعنی نمودار با هم تداخل داشته و امکان دارد به ازای یک متغیر پیشرفت دو کسر مخلوط وجود داشته باشد). اما در ترکیب خطی CO₂+CO، این تناظر یک به یک مشاهده می‌شود. بعد از بررسی استقلال از شبکه در تولید جداول فلیملت، شبکه ۳۰۰ تایی برای تولید این جداول انتخاب شد.



شکل ۱: حل شعله‌های پیش مخلوط در فضای متغیر پیشرفت و کسر مخلوط با دو متغیر پیشرفت CO₂ و CO₂+CO در نسبت هم ارزی‌های مختلف

$$j_{fgm2d} = j(x, f) = j(Y_c(x), Z(f)) \quad (7)$$

$$j_{fgm2d} = j(Z, Y_c) \quad (8)$$

در این مدل، متغیر پیشرفت واکنش برای هر ترکیب سوخت/اکسیدایزر منحصر به فرد بوده و بایستی طوری انتخاب شود که یک تناظر یک به یک بین مختصات مکانی و متغیر پیشرفت واکنش برای تمامی محدوده‌های نسبت هم ارزی برقرار شود [۱].

بعد از تولید جداول فلیملت در هر نسبت هم ارزی، این کد بایستی با کد اصلی جریان لینک شود. در کد اصلی، علاوه بر معادلات پیوستگی، مومنتوم و معادله حالت، معادلات برای متغیر پیشرفت واکنش (در حالت یک بعدی) و کسر مخلوط (در حالت دو بعدی) نیز حل می‌شوند.

$$\frac{\partial (r Y_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (r \mathbf{v} Y_c) = \mathcal{R}_c + \nabla \cdot (D_{Y_c} \nabla Y_c) \quad (9)$$

$$\frac{\partial (r Z)}{\partial t} + \nabla \cdot (r \mathbf{v} Z) = \nabla \cdot (D_Z \nabla Z) \quad (10)$$

که در این رابطه D_Z به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$D_Z = \frac{l}{r c_p} \quad (11)$$

۳- روش عددی

در این پژوهش، برای ساخت جداول فلیملت در حالت یک بعدی و دوبعدی از کد متن باز فلیم‌مستر^۱ استفاده شده است. این کد به منظور حل سینتیک مخلوط‌های گازی و مایع است که امکان تحلیل شعله‌های پیش مخلوط را دارد. برای حل سینتیک شعله‌ی پیش مخلوط دارای سه مدل شعله صفر بعدی، مدل PaSR، مدل شعله جریان مخالف پیش مخلوط و مدل شعله‌ی یک بعدی بدون کشش است. که در این پروژه برای تولید فلیملت‌ها از مدل اخیر در رژیم پیش مخلوط استفاده شده است. این کد می‌تواند با استفاده از روش نیوتن سینتیک شعله پیش مخلوط غیرکششی را در یک بعد با استفاده از شبکه انطباقی حل کند. این بانک اطلاعاتی شامل تمام نسبت جرمی گونه‌ها به همراه آنتالپی کل، دما، چگالی، ویسکوزیته، ضریب هدایت، چشمه شیمیایی هرگونه ... است که می‌تواند بر حسب متغیر مکانی X (در حالت یک بعدی) و نسبت هم ارزی (در حالت دو بعدی) در حالت پیش مخلوط بیان شود. به منظور حل معادلات ترانسپورت متغیرهای پیشرو و کنترلی در کد اصلی، بایستی مقادیر ویسکوزیته دینامیکی، هدایت حرارتی، گرمای حرارتی ویژه، چگالی سیال و نیز مقدار چشمه شیمیایی با توجه به مقدار متغیر پیشرو و کسر مخلوط در هر سلول محاسباتی از جدول فلیملت میانیابی شود.

برای حل جریان سیال (معادلات پیوستگی و مومنتوم) به همراه معادلات انتقالی متغیرهای پیشرو یعنی معادلات (۹) و (۱۰) از کد متن باز اپن فوم^۲ [۹] استفاده شده است. فرآیند حل جریان احتراقی توسط روش فلیملت یک بعدی به این شکل است که ابتدا در مرحله‌ی پیش پردازش، بانک اطلاعاتی فلیملت با کد فلیم‌مستر تولید می‌شود. در مرحله پردازش باید یکی از گونه‌های مناسب به عنوان متغیر پیشرو انتخاب شود. سپس در کد اپن فوم هندسه به همراه شبکه محاسباتی تولید و مقدار متغیر پیشرو

¹ FlameMaster

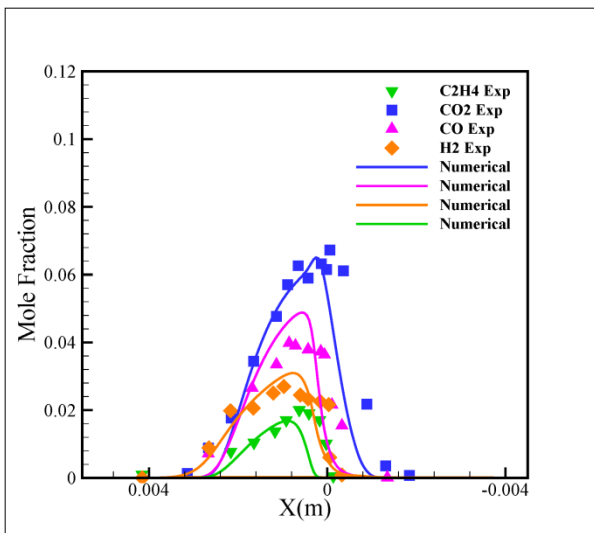
² OpenFOAM

۴- نتایج:

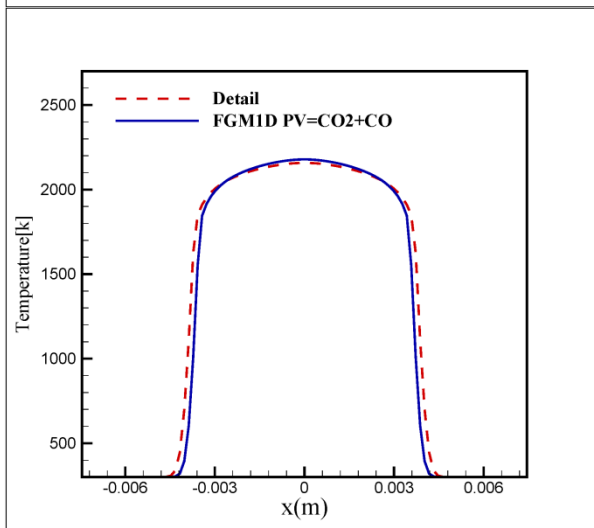
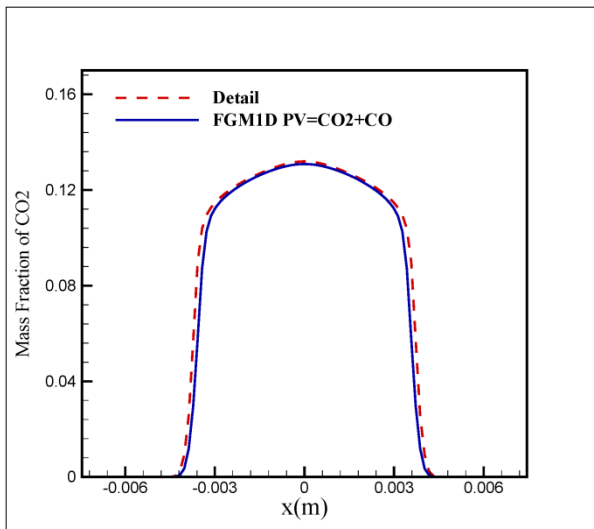
در پژوهش مورد نظر، شعله جریان مخالف غیر پیش مخلوط [۱۷] به منظور دارا بودن داده‌های آزمایشگاهی به منظور صحت سنجی شبیه سازی مستقیم، انتخاب شده است. این شعله به صورت دوبعدی متقارن محوری با کد اوپن فوم شبیه سازی شده است. مشخصات شعله در جدول ۱ و هندسه دو بعدی متقارن محوری در شکل ۲ مشاهده می‌شود. به علت وجود داده‌های آزمایشگاهی در حالت غیر پیش مخلوط، شبیه سازی مستقیم در این حالت با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شده است.

جدول ۱: مشخصات شعله ی شبیه سازی شده [۱۷]

نرخ کرنش (s^{-1})	سرعت سوخت (cm/s)	سرعت اکسیژنکننده (cm/s)	دمای سوخت (k)	دمای اکسید کننده (k)
162	70	70	300	300



شکل ۳: کسر مولی گونه‌های بدست آمده از روش عددی و مقایسه با نتایج تجربی در شعله‌ی غیرپیش مخلوط



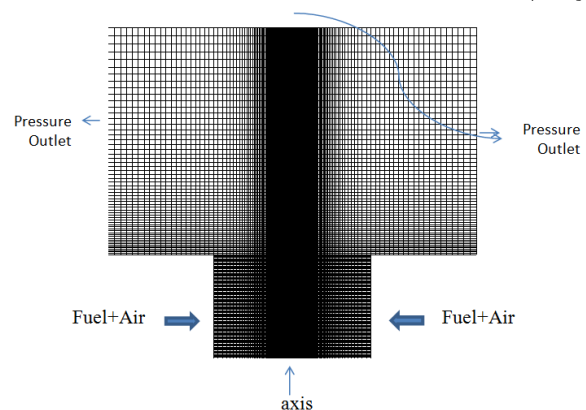
شکل ۴: پروفیل دما و کسر جرمی گونه‌ی CO2

در ادامه به منظور بررسی کد فلیمنت دوبعدی، در شعله مورد نظر فرض می‌شود از یک طرف سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی یک وارد شده و از طرف دیگر هوا وارد شود. برای شبیه سازی این مسئله، به علت داشتن دو

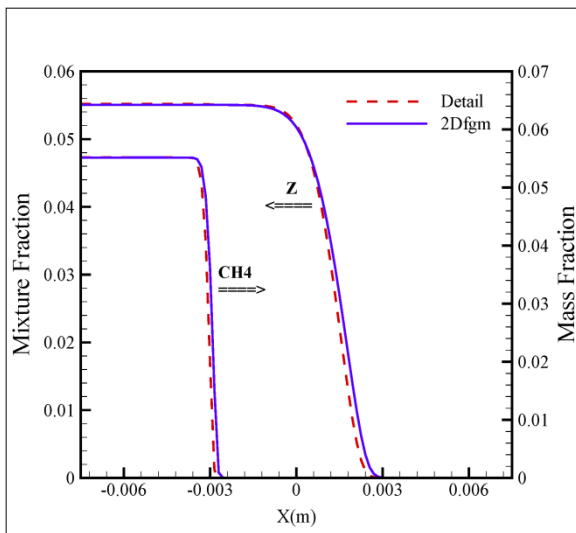
سوخت مورد نظر متان می‌باشد. شبکه بندی هندسه مورد نظر به صورتی است که حداقل 10 سلول در ناحیه واکنش وجود دارد. بعد از بررسی استقلال از شبکه، تعداد سلول‌های ۴۴۰۰۰ به عنوان شبکه مناسب انتخاب شد. شرایط مرزی نیز در شکل ۲ مشاهده می‌شود. سوخت از سمت چپ و هوا از سمت راست وارد می‌شوند (شعله غیرپیش مخلوط). در تمامی شبیه‌سازی‌ها، از مکانیزم GRI2.11 استفاده شده است.

در شکل ۳ نتایج شبیه سازی مستقیم با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود، نتایج با حالت آزمایشگاهی تطابق خوبی دارند. اختلافات مشاهده شده، به علت تقریبی بودن روابط موجود در اوپن فوم برای خواصی همچون ویسکوزیته است.

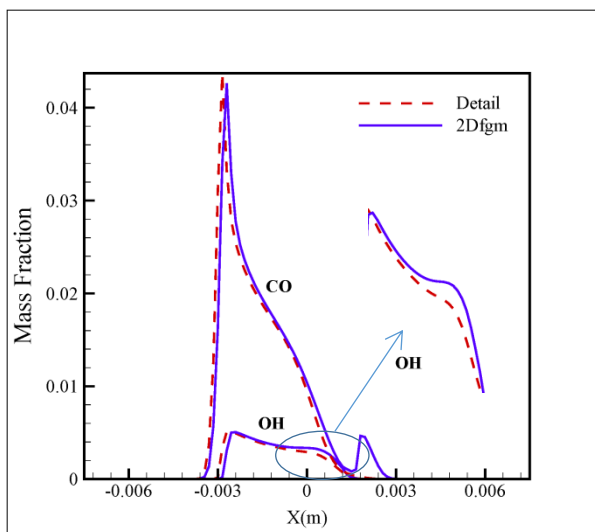
بعد از صحت سنجی روش شبیه سازی مستقیم، شعله‌ی مورد نظر در حالت پیش مخلوط با روش فلیمنت شبیه سازی می‌شود. به منظور صحت سنجی کد مورد نظر، ابتدا نتایج شبیه سازی مربوط به کد یک بعدی در شکل ۴ مشاهده می‌شود. در این حالت، سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی یک از دو طرف، وارد میدان می‌شوند. از آنجایی که دو ورودی یکسان می‌باشند، می‌توان تنها با یک متغیر پیشرفت این شعله را شبیه سازی نمود. نتایج با نتایج شبیه‌سازی مستقیم منطبق بر هم هستند. اختلاف اندک مشاهده شده به علت تفاوت در محاسبه‌ی مقدار ضرایب دیفیوژن حرارتی و هدایت حرارتی در دو کد فلیمنت مستر و اوپن فوم می‌باشد. در کد فلیمنت مستر این ضرایب با روش سینتیک مولکولی و در کد اوپن فوم با روش ضرایب چندجمله‌ای بدست آمده است.



شکل ۲: هندسه مسئله شبیه سازی شده



شکل ۶: پروفیل کسر مخلوط و کسر جرمی گونه‌ی CH₄



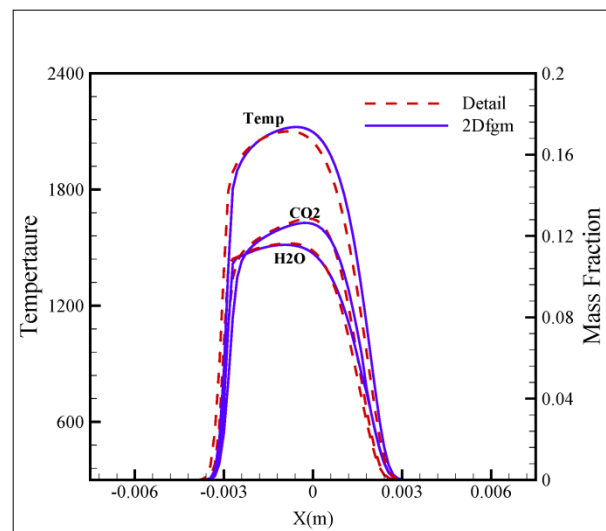
شکل ۷: پروفیل کسر جرمی گونه‌ی CO و OH

۵- نتیجه گیری

در این مقاله، به بررسی عملکرد مدل‌های فلیملت بر پایه‌ی رژیم پیش-مخلوط به منظور شبیه سازی شعله‌های آرام پرداخته شد. نتایج نشان دادند که با استفاده از یک متغیر پیشرفت واکنش مناسب (افزایشی یا کاهش) شعله‌های آدیاباتیک پیش مخلوط می‌توانند با دقت بالا و هزینه محاسباتی پایین شبیه سازی شوند. اما به منظور شبیه سازی شعله‌هایی که نسبت هم‌ارزی در حال تغییر است، نیازمند متغیر دیگری به نام کسر مخلوط هستیم. با ساخت جداول فلیملت در هر کسر مخلوط ثابت، جداول فلیملت دو بعدی بر حسب کسر مخلوط و متغیر پیشرفت واکنش ساخته می‌شوند. نتایج این مدل نشان دادند که در محدوده‌ی اشتعال پذیری شعله‌ی پیش مخلوط، دقت خوبی را با نتایج سینتیک جزئی داراست. اما خارج از محدوده اشتعال پذیری، از آنجایی که این مدل بر پایه‌ی رژیم مخلوط است، محدودیت استفاده دارد. به طور کلی، مدل فلیملت یک بعدی و دوبعدی بدون کم کردن دقت و با کاهش چندین برابری زمان محاسبات، نتایج قابل قبولی را ارائه می‌دهند.

ورودی متفاوت و تغییرات نسبت هم‌ارزی، بایستی از فلیملت دوبعدی استفاده شود. به منظور ساخت جداول فلیملت در این حالت، از شبکه ۷۱ شبکه بر روی متغیر کسر مخلوط (نسبت هم‌ارزی) و ۳۰۰ شبکه بر روی متغیر پیشرفت واکنش استفاده شده است. بنابراین جداول دوبعدی در اندازه (۳۰۰*۷۱) می‌شوند. در شکل ۱، تعدادی از این کسر مخلوط‌ها نمایش داده شد. برای تولید این جداول محدوده‌ی نسبت هم‌ارزی از 0.4 تا 1 می‌باشد.

در شکل ۵، شکل ۶ و شکل ۷ نتایج حاصل از کد دوبعدی فلیملت با سینتیک جزئی مقایسه شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود نتایج از دقت نسبتاً خوبی برخوردارند. برای کسر جرمی گونه‌های اصلی و دما کمی جابجایی مشاهده می‌شود که می‌تواند به علت محدودیت تولید فلیملت بر پایه‌ی رژیم پیش مخلوط در نسبت هم‌ارزی‌های پایین باشند. همچنین این اختلاف به علت خطایی که در پیش‌بینی کسر مخلوط اتفاق افتاده، در میدان دما نیز مشاهده می‌شود. همانطور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، کسر مخلوط که معادل نسبت هم‌ارزی است از ورودی سوخت و هوا به طور پیوسته تا ورودی هوا کاهش می‌یابد. تغییرات نسبت هم‌ارزی باعث دو بعدی شدن مدل فلیملت بکارگرفته شده می‌شود. کسر جرمی گونه‌های میانی (شکل ۷) خطای بیشتری را با نتایج سینتیک جزئی نشان می‌دهند. از آنجایی که در نسبت هم‌ارزی‌های خارج از محدوده‌ی اشتعال پذیری در نسبت هم‌ارزی بین (0.4-0) امکان تولید جداول فلیملت بر پایه‌ی رژیم پیش مخلوط نبود، در این نواحی کد مورد نظر دارای خطا می‌باشد. خطای مشاهده شده در محدوده کسر مخلوط‌های بسیار پایین مشاهده می‌شود. از آنجایی که این گونه‌ها در واکنش‌های زنجیره‌ای بوده، تولید و مصرف می‌شوند، خطای بیشتری را در شبیه‌سازی نشان می‌دهند. زمان محاسباتی شبیه سازی فلیملت یک بعدی انجام شده در حدود یک ساعت و فلیملت دو بعدی انجام شده در حدود ۴ ساعت بوده در حالی که شبیه سازی با استفاده از روش سینتیک جزئی در حدود سه روز نیاز به زمان دارد.



شکل ۵: پروفیل دما و کسر جرمی گونه‌ی H₂O و CO₂

- flames. Symposium (International) on Combustion, 1996. Elsevier, 27-34.
- [۱۳] VAN OIJEN, J. A. & DE GOEY, L. P. H. 2004. A numerical study of confined triple flames using a flamelet-generated manifold. *Combustion Theory and Modelling*, 8, 141-163.
- [۱۴] BONGERS ,H., OIJEN, J. A. V. A. N., SOMERS, L. M. T. & GOEY, L. P. H. D. E. Combustion Science and Technology THE FLAMELET GENERATED MANIFOLD METHOD APPLIED TO STEADY PLANAR PARTIALLY. 2373-2393.
- [۱۵] VREMAN, A. W., ALBRECHT, B. A., VAN OIJEN, J. A., DE GOEY, L. P. H. & BASTIAANS, R. J. M. 2008. Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F. *Combustion and Flame*, 153, 394-416.
- [۱۶] OLBRICHT, C., HAHN, F., KETELHEUN, A. & JANICKA, J. 2010. Strategies for presumed PDF modeling for LES with premixed flamelet-generated manifolds. *Journal of Turbulence*, 11, N38.
- [۱۷] LIM, J., GORE, J. & VISKANTA, R. 2000. A study of the effects of air preheat on the structure of methane/air counterflow diffusion flames. *Combustion and Flame*, 121, 262-274.
- [۱] JHA, P. K. & GROTH, C. P. T. 2012. Tabulated chemistry approaches for laminar flames: Evaluation of flame-prolongation of ILDM and flamelet methods. *Combustion Theory and Modelling*, 16, 31-57.
- [۲] ATOOF, H. & EMAMI, M. D. 2016. Numerical simulation of laminar premixed CH4/air flame by flamelet-generated manifolds: A sensitivity analysis on the effects of progress variables. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 60, 287-293.
- [۳] LIEW, S.K., BRAY, K.N.C., MOSS, J.B. 1981. A flamelet model of turbulent non-premixed combustion. *Combustion Science and Technology*, 27, 69-73.
- [۴] PETERS, N. 1984. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci*, 10, 319-339.
- [۵] KNUDSEN, E. & PITSCH, H. 2009. A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion. *Combustion and Flame*, 156, 678-696.
- [۶] PIERCE, C. D. & MOIN, P. 2004. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504, 73-97.
- [۷] VAN OIJEN, J. A., BASTIAANS, R. J. M. & DE GOEY, L. P. H. 2007. Low-dimensional manifolds in direct numerical simulations of premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, 1377-1384.
- [۸] VAN OIJEN, J. A. & DE GOEY, L. P. H. 2000. Combustion Science and Technology Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet- Generated Manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161, 113-137.
- [۹] DE GOEY, L. P. H. & TEN THIJE BOONKKAMP, J. H. M. 1999. A flamelet description of premixed laminar flames and the relation with flame stretch. *Combustion and Flame*, 119, 253-271.
- [۱۰] DELHAYE, S., SOMERS, L. M. T., VAN OIJEN, J. A. & DE GOEY, L. P. H. 2009. Incorporating unsteady flow-effects beyond the extinction limit in flamelet-generated manifolds. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 I, 1051-1058
- [۱۱] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S. & DARABIHA, N. 2005. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation. *Combustion and Flame*, 140, 147-160.
- [۱۲] YAMASHITA, H., SHIMADA, M. & TAKENO, T. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion