

مدل سازی اندرکنش سینتیک شیمیایی و آشفته‌گی با روش بهینه شده تخمین شرطی جمله تولید

مجتبی لطفی^{۱*}، محمدمهدی صالحی^۲

۱- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، mojtaba.latifi@ae.sharif.edu

۲- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، mmsalehi@sharif.edu

* نویسنده مخاطب

چکیده

هدف این پژوهش، ارزیابی و بررسی عملکرد مدل تخمین شرطی جمله تولید^۱ بهینه شده با بسط برنشتاین^۲ می‌باشد. بدین منظور این مدل در یک کد دینامیک سیالات محاسباتی پیاده سازی گردید؛ سپس با این مدل احتراق آشفته و پیش مخلوط متان- هوا با نسبت هم‌ارزی یک، در یک شعله بنزن با مدل آشفته‌گی متوسط‌گیری رینولدز^۳ مدل سازی شد. با توجه به اینکه این شعله آشفته در رژیم ریزشعله‌های آرام قرار دارد؛ میانگین شرطی گونه‌ها مشابه یک شعله آرام یک بعدی است. به منظور صحت سنجی نتایج، در چهار مقطع مختلف از طول شعله نمودارهای سرعت، دما و کسر جرمی گونه‌های مختلف رسم، و با نتایج تجربی مقایسه گردید. مطابق با نتایج حاصل شده، دقت مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده برای گونه‌های اصلی نظیر آب و کربن‌دی‌اکسید؛ همچنین گونه‌ی میانی هیدروکسید دقیق و کاملاً قابل قبول است. اما در نمودار دما و گونه‌ی کربن‌مونوکسید مقداری خطا وجود دارد. نتایج حاصل از بررسی میزان بهینه سازی نیز نشان می‌دهد که استفاده از بسط برنشتاین، زمان محاسبه‌ی میانگین‌های شرطی در مدل تخمین شرطی جمله تولید را به میزان زیادی کاهش داده است.

کلمات کلیدی: احتراق پیش مخلوط، مدل سازی احتراق، تخمین شرطی جمله تولید، بسط برنشتاین

مقدمه

بهینه سازی محفظه‌های احتراق، علاوه بر افزایش راندمان و کاهش مصرف سوخت، سبب کمتر شدن آلاینده‌گی‌های ناشی از احتراق، نظیر دوده می‌شود [۱]. به‌کارگیری روش‌های تجربی؛ به‌منظور تحلیل عملکرد یک محفظه احتراق، هزینه‌های زیادی به‌همراه دارد. در نتیجه برای کاهش هزینه‌های طراحی، از شبیه سازی‌های عددی در کنار روش‌های تجربی استفاده می‌شود.

در بیشتر مسائل احتراقی موجود در صنعت، جریان به صورت آشفته است. در یک جریان احتراقی آشفته، حضور گردابه‌هایی با ابعاد و مقیاس زمانی متفاوت، سبب دشواری حل مسئله می‌شود. علاوه بر این، سینتیک واکنش‌های شیمیایی به دلیل وجود گونه‌ها و واکنش‌های زیاد؛ سبب پیچیده‌تر شدن حل می‌گردد. به همین جهت شبیه سازی عددی مستقیم^۴ با وجود داشتن دقت زیاد؛ هزینه‌ی محاسباتی بسیار زیادی به‌همراه دارد. بنابراین در بیشتر مدل سازی‌های احتراقی، برای مدل سازی جریان آشفته از روش‌هایی نظیر شبیه سازی گردابه‌های بزرگ^۵ و متوسط‌گیری رینولدز به‌منظور کاهش حجم محاسبات استفاده می‌شود.

در مدل سازی احتراق آشفته، برای محاسبه نرخ واکنش‌ها نمی‌توان از مقادیر میانگین دما و غلظت گونه‌های شیمیایی استفاده کرد، زیرا به دلیل اندرکنش آشفته‌گی با سینتیک شیمیایی، نرخ واکنش‌های شیمیایی توابعی غیرخطی نسبت به دما و غلظت گونه‌ها هستند [۲]. برای مدل سازی اندرکنش سینتیک شیمیایی و آشفته‌گی مدل‌هایی مانند مدل ریزشعله‌های آرام^۶ [۳]، مدل

بستن ممان شرطی [۴] و مدل تابع توزیع احتمال انتقال یافته^۷ [۵] توسعه داده شده است.

مدل ریزشعله‌های آرام حجم محاسبات کمتری نسبت به مدل بستن ممان شرطی دارد و بر این فرض استوار است که جریان احتراقی آشفته مجموعه‌ای از ریزشعله‌های یک بعدی، نقطه‌ای و آرام است. در نتیجه این فرض که در شدت آشفته‌گی‌های کم و متوسط برقرار است، معادلات حاکم بر جریان احتراقی ساده‌تر می‌شوند. اما مدل‌های بستن ممان شرطی، به دلیل عدم اعتبار این فرضیه در شدت آشفته‌گی‌های زیاد، از این فرض استفاده نکرده و این مدل‌ها برپایه‌ی فرضیه مرتبه اول مدل بستن ممان شرطی استوار هستند. طبق فرضیه مرتبه اول مدل بستن ممان شرطی، میانگین نرخ شرطی واکنش‌های شیمیایی با استفاده از میانگین‌های شرطی دما و نسبت جرمی گونه‌های شیمیایی قابل محاسبه است [۴]. در واقع مدل‌هایی که بر پایه این فرض استوار هستند؛ محدودیت‌های مدل ریزشعله‌های آرام را ندارند. این مدل‌ها می‌توانند شعله‌های آشفته حتی با شدت آشفته‌گی بالا، همچنین شعله‌های پیش مخلوط و غیر پیش مخلوط را با دقت بیشتر و مناسب‌تر مدل سازی کنند. علاوه بر این، با این مدل‌ها می‌توان پدیده‌هایی نظیر خاموشی موضعی و جرقه زنی را نیز مدل سازی کرد. اما این مدل‌ها نسبت به مدل‌های ریزشعله‌های آرام هزینه‌ی محاسباتی بیشتری دارند. علت بالا بودن هزینه‌ی محاسباتی در مدل‌های بستن ممان شرطی محاسبه‌ی اسکالره‌های شرطی جریان از طریق حل معادلات انتقال است.

مدل تخمین شرطی جمله تولید نیز بر مبنای فرضیه مرتبه اول مدل بستن ممان شرطی توسعه یافته است [۶]. اما برای محاسبه‌ی اسکالره‌های شرطی جریان، برخلاف مدل بستن ممان شرطی، به‌جای حل معادله انتقال از حل یک مسئله‌ی معکوس انتگرالی^۸ استفاده می‌کند؛ که سبب کاهش حجم محاسبات می‌شود. اما محاسبه‌ی این مسئله‌ی معکوس نیز زمانبر بوده و هزینه‌ی محاسباتی مدل تخمین شرطی جمله تولید با وجود کمتر بودن نسبت به مدل بستن ممان شرطی، نسبت به مدل ریزشعله‌های آرام بیشتر است.

مدل ریزشعله‌های آرام^۹ برای مدل سازی شعله‌های آشفته و پیش مخلوط، در ابتدا با استفاده از روش متوسط‌گیری رینولدز استفاده گردید [۷]. سپس با استفاده از شبیه سازی گردابه‌های بزرگ در شعله‌های پیش مخلوط به‌کار برده شد [۸]. نتایج مدل سازی احتراق آشفته و پیش مخلوط نشان می‌دهد که این مدل دقت قابل قبولی دارد [۹]. مدل بستن ممان شرطی نیز در مدل سازی احتراق پیش مخلوط استفاده و عملکرد آن در ابتدا در شبیه سازی عددی مستقیم [۱۰]، متوسط‌گیری رینولدز [۱۱] و شبیه سازی گردابه‌های بزرگ [۱۲] ارزیابی گردید. مدل تخمین شرطی جمله تولید که در محاسبه‌ی نرخ شرطی واکنش‌ها مشابه مدل بستن ممان شرطی است [۶]، در ابتدا برای ارزیابی اولیه در یک احتراق پیش مخلوط استفاده شد. سپس

⁶ Laminar Flamelet

⁷ Transporte PDF Model

⁸ Integral Inverse Problem

⁹ Laminar flamelet

¹ Conditional Source-term Estimation (CSE)

² Bernstein Expansion

³ Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)

⁴ Direct Numerical Simulation (DNS)

⁵ Large Eddy Simulation (LES)

در این معادلات، u سرعت و ρ چگالی است. تانسور تنش رینولدز ($\overline{\rho u_i u_j}$) نیز با استفاده از مدل آشفتگی $k - \varepsilon$ استاندارد به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$\overline{\rho u_i u_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \overline{\rho k} \delta_{ij} \quad (5)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1; & i = j \\ 0; & i \neq j \end{cases} \quad (6)$$

لزجت آشفتگی (μ_t) در معادله ۵، به صورت معادله ۷ محاسبه می‌شود.

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

دو پارامتر انرژی جنبشی آشفتگی (\tilde{k}) و نرخ هدر رفت $\tilde{\varepsilon}$ از طریق معادلات ارائه شده در روش $k - \varepsilon$ استاندارد (معادلات ۸ و ۹) بدست می‌آیند.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) - (\overline{\rho u_i u_j}) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho \tilde{\varepsilon}} \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\varepsilon}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{\varepsilon}}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (\overline{\rho u_i u_j}) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \overline{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (9)$$

ضرایب موجود در این روابط ($\sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$) ثابت مدل $k - \varepsilon$ استاندارد می‌باشند.

حلگر استفاده شده در این کد دینامیک سیالات محاسباتی فشار مبنای است، که این حلگر به جای حل معادله‌ی پیوستگی به فرم استاندارد، یک معادله‌ی پواسون برای محاسبه‌ی میدان فشار حل می‌کند. چگالی نیز از طریق حل معادله‌ی حالت^۵ بدست می‌آید. سرعت جریان را هم می‌توان از طریق حل معادلات ۴ تا ۹ بدست آورد. اما برای محاسبه‌ی کسر جرمی گونه‌های شیمیایی، باید از روابط زیر استفاده نمود.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{Y}_k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Y}_k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{S C_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \overline{\omega}_k \quad (10)$$

در معادله ۱۰، \tilde{Y}_k کسر جرمی و $\overline{\omega}_k$ متوسط نرخ واکنش گونه k ام، است. که متوسط نرخ واکنش از رابطه‌ی ۱۱ بدست می‌آید. همچنین پارامتر $S C_t$ عدد اشمیت آشفته بوده و مقدار آن ۰/۷ است.

$$\overline{\omega}_k = \int_0^1 \overline{\omega}_k |c^*| P(c^*; \tilde{c} \cdot \tilde{c}^{\tilde{n}_2}) dc^* \quad (11)$$

در این معادله، پارامتر $P(c^*; \tilde{c} \cdot \tilde{c}^{\tilde{n}_2})$ تابع توزیع احتمال متغیر پیشرفت واکنش می‌باشد. این تابع، یک تابع توزیع احتمال پیش فرض بوده و بر مبنای دو پارامتر متوسط و واریانس متغیر پیشرفت واکنش محاسبه می‌گردد. تابع توزیع احتمال استفاده شده، تابع توزیع احتمال فلیملت آرام بهینه شده^۷ است [۲۲]. در معادله ۱۱ پارامتر c^* ، متغیر پیشرفت واکنش است؛ و به صورت زیر تعریف می‌گردد.

$$c^* = \frac{Y_{CO_2}}{Y_{CO_2}^{eq}} \quad (12)$$

در معادله ۱۲، پارامتر $Y_{CO_2}^{eq}$ کسر جرمی گونه‌ی کربن دی‌اکسید در حالت تعادل است. با استفاده از فرضیه مرتبه اول مدل بستن ممان شرطی، می‌توان

دقت آن با روش متوسط‌گیری رینولدز [۱۳] و شبیه سازی گردابه‌های بزرگ [۱۴] تایید گردید. همچنین این مدل با روش متوسط‌گیری رینولدز برای مدل سازی شعله‌ی دیفیوژن متان [۱۵] و احتراق اسپری [۱۶] به کار برده شده؛ و با شبیه سازی گردابه‌های بزرگ نیز برای مدل سازی احتراق پیش مخلوط متان [۱۷]؛ پیش مخلوط جزئی متان [۱۸]، همچنین احتراق اسپری [۱۹] استفاده شده است. مهدی‌پور و صالحی [۲۰] برای بهینه سازی مدل تخمین شرطی جمله تولید، استفاده از بسط برنشتاین را پیشنهاد کرده‌اند. ایشان در ارزیابی پیشینی که با نتایج شبیه سازی عددی مستقیم انجام داده‌اند، نشان دادند که استفاده از بسط برنشتاین، در حل مسئله‌ی معکوس انتگرالی موجود در مدل تخمین شرطی جمله تولید، می‌تواند هزینه‌ی محاسبه‌ی اسکالره‌ای شرطی جریان را کاهش و دقت آن را افزایش دهد.

در این پژوهش از مدل تخمین شرطی جمله تولید به دلیل هزینه محاسباتی کمتر نسبت به مدل بستن ممان شرطی و دقت بیشتر نسبت به مدل ریزشعله‌های آرام استفاده گردید؛ و برای بهینه سازی این مدل، طبق پژوهش مهدی‌پور و صالحی، از بسط برنشتاین برای حل مسئله‌ی معکوس انتگرالی استفاده شد. به عبارت دیگر در این پژوهش، مدل پیشنهاد شده توسط ایشان در یک کد دینامیک سیالات محاسباتی پیاده سازی شد. سپس برای بررسی دقت نتایج و عملکرد مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده با بسط برنشتاین؛ احتراق آشفته و پیش مخلوط متان-هوا در یک شعله بنزن [۲۱] با نسبت هم‌ارزی یک مدل سازی شد. در این مدل سازی از روش متوسط‌گیری رینولدز برای شبیه سازی جریان آشفته استفاده و سپس نتایج بدست آمده برای دما و غلظت گونه‌ها در فواصل مختلف، با نتایج تجربی [۲۱] مقایسه شد.

در این مقاله ابتدا تئوری و روابط حاکم بر مدل تخمین شرطی جمله تولید و معادلات مربوط به بسط برنشتاین و نرخ شرطی واکنش‌ها ارائه می‌شود. سپس هندسه شعله، شرایط مرزی و نحوه‌ی مدل‌سازی توضیح داده خواهد شد و پس از آن نتایج عددی این پژوهش با نتایج تجربی ارائه و مقایسه می‌شود. در نهایت به نتیجه‌گیری و دستاوردهای این پژوهش پرداخته می‌شود.

تئوری و روابط

در مدل‌سازی جریان آشفته با روش متوسط‌گیری رینولدز، تمامی پارامترها به دو بخش متوسط (\bar{u}) و اغتشاشی (\tilde{u}) تجزیه می‌شوند. در واقع جریان‌هایی با این روش مدل می‌شوند که پایا بوده و متوسط آن‌ها در طول زمان تغییر نکند.

$$u \equiv \bar{u} + u' \quad (1)$$

اما به دلیل اینکه در جریان احتراقی چگالی در حال تغییر است، باید متوسط‌گیری جرمی (آفاور) انجام داد.

$$u \equiv \tilde{u} + u'' \quad (2)$$

$$\tilde{u} \equiv \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} \quad (3)$$

با این کار، معادله‌ی مومنوم به فرم زیر در می‌آید.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{u}_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j}) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) \quad (4)$$

5 Equation of State

6 Presumed Probability Density Function

7 Modified laminar flamelet PDF

1 Bernstein Decomposition Conditional Source-term Estimation (BDCSE)

2 Favre averaging

3 Dissipation rate

4 Pressure Based

در این معادله α_j^0 حل شعله پیش مخلوط کرنش نیافته یک بعدی و λ ضریب منظم سازی است. با وجود منظم سازی حل، اما گاهی اوقات نیازمند یک فیلتر پایین گذر نیز می‌باشد [۱۳].

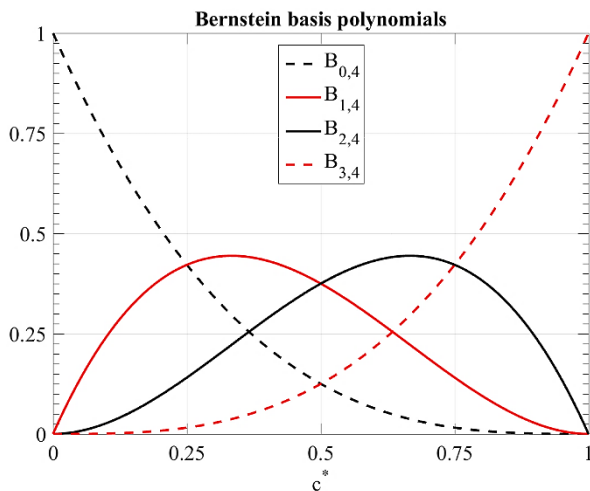
در بسط برنشتاین، میانگین‌های شرطی، به صورت یک بسط از چند جمله‌ای‌های درجه n برنشتاین نوشته می‌شود.

$$\overline{\phi|c^*} = \sum_{j=0}^n \beta_j B_{j,n}(c^*) \quad (18)$$

در این معادله β_j ضرایب برنشتاین بوده که باید محاسبه گردند و $B_{j,n}$ چند جمله‌ای‌های برنشتاین بوده و از طریق معادله‌ی زیر قابل محاسبه‌اند:

$$B_{j,n}(c^*) = \frac{n!}{j!(n-j)!} c^{*j} (1-c^*)^{n-j} \quad (19)$$

در معادله ۱۹، علامت $!$ بیانگر فاکتوریل بوده و مقدار j از ۰ تا n متغیر است. در شکل ۱ چند جمله‌ای‌های برنشتاین از درجه چهار نشان داده شده است. مطابق با شکل ۱ می‌توان گفت اگر متغیر شرطی، همان متغیر پیشرفت واکنش باشد، توابع پایه مشابه با اسکالرهای شرطی جریان هستند. به طور مثال، اولین چند جمله‌ای به طور کیفی مشابه واکنش دهنده‌های اصلی (گونه متان یا اکسیژن) بوده و آخرین چند جمله‌ای نیز مشابه گونه‌های اصلی در فرآورده‌ها (گونه کربن‌دی‌اکسید یا آب) می‌باشد. دو چند جمله‌ای دیگر نیز مشابه گونه‌های میانی و رادیکال‌ها هستند.



شکل ۱: توابع پایه بسط برنشتاین از درجه چهار

از دیگر ویژگی‌های توابع برنشتاین می‌توان به این موضوع اشاره کرد که، مجموع چند جمله‌ای‌های برنشتاین، به‌ازای تمامی بازه‌های متغیر پیشرفت واکنش، برابر با ۱ می‌باشد.

$$\sum_{j=0}^n B_{j,n}(c^*) = 1. \quad (\text{where } 0 < c^* < 1) \quad (20)$$

در این روش، مقادیر چند جمله‌ای‌ها در تمامی بازه‌های متغیر پیشرفت واکنش مشخص بوده و تنها ضرایب برنشتاین (β_j) مجهول است. برای اینکه در یک مجموعه سلول، مقادیر اسکالرهای شرطی همگن باشد، باید فرض نمود مقادیر ضرایب برنشتاین نیز همگن است. با این فرض می‌توان معادله‌ی ۱۵ را به صورت زیر بازنویسی کرد.

نرخ شرطی واکنش $(\overline{\dot{\omega}_k|c^*})$ را طبق رابطه‌ی زیر، از اسکالرهای شرطی جریان بدست آورد [۴].

$$\overline{\dot{\omega}_k|c^*} \approx \dot{\omega}_k(\overline{Y_k|c^*}, \overline{T|c^*}, \overline{\rho|c^*}) \quad (13)$$

مدل سینتیک شیمیایی استفاده شده در این پژوهش مدل خمینه‌ی تولیدی ریزشعله‌ی دوبعدی است. در این مدل از یکسری جداول از پیش آماده شده استفاده می‌شود و نرخ شرطی واکنش‌ها از این جداول بدست می‌آیند. این جداول در روش خمینه تولیدی ریزشعله از حل یک شعله پیش مخلوط یک بعدی، مطابق با مکانیزم دقیق شیمیایی *GRI-Mech 3.0* بدست می‌آیند [۲۳]. مخلوط اولیه در روش متعارف خمینه تولید ریزشعله یک بعدی، مخلوط متان و هوا است؛ که مقادیر مختلف دو گونه‌ی اصلی CO_2 و H_2O به مخلوط اولیه اضافه می‌شود، به نحوی که نسبت هم ارزی ثابت بماند. در نتیجه‌ی این کار ریزشعله‌های مختلف در فضای گونه‌ها ایجاد می‌گردند. در نهایت نتایج بدست آمده به صورت جداول دو بعدی برحسب دو گونه‌ی اصلی CO_2 و H_2O ذخیره می‌شوند. از این رو این مدل را خمینه‌ی تولیدی ریزشعله‌ی دوبعدی [۱۴] می‌نامند. در این روش معادله‌ی ۱۳ به شکل زیر در می‌آید.

$$\overline{\dot{\omega}_k|c^*} \approx \dot{\omega}_k(\overline{Y_{CO_2}|c^*}, \overline{Y_{H_2O}|c^*}) \quad (14)$$

با داشتن دو اسکالر شرطی موجود در معادله‌ی ۱۴، می‌توان نرخ شرطی واکنش‌ها را بدست آورد. در مدل تخمین شرطی جمله تولید، اسکالرهای شرطی، با استفاده از معادله انتگرالی زیر و از طریق حل یک معادله‌ی معکوس بدست می‌آیند [۶].

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \overline{\phi|c^*} P(c^*; \bar{c}, \bar{c}^2) dc^* \quad (15)$$

در این معادله، $\bar{\phi}$ می‌تواند هر کدام از اسکالرهای معادله ۱۳ باشد. در مدل تخمین شرطی جمله تولید، هنگام حل معادله‌ی ۱۵ فرض می‌شود که اسکالرهای شرطی در یک مجموعه سلول همگن هستند. برای حل این معادله در مدل تخمین شرطی جمله تولید؛ می‌توان از روش‌های استاندارد حل مسائل معکوس استفاده کرد. در این روش‌ها متغیر پیشرفت واکنش گسسته سازی می‌شود؛ در نتیجه معادله ۱۵ به فرم زیر در می‌آید.

$$\mathbb{P}_{ij} \alpha_j = \bar{\phi}_i. \quad \mathbb{P}_{ij} = \int_{c_{j-\frac{1}{2}}}^{c_{j+\frac{1}{2}}} P(c^*; \bar{c}, \bar{c}^2) dc^* \quad (16)$$

در معادله ۱۶، i تعداد سلول‌های احتراقی بوده و α_j فرم گسسته‌ی $\overline{\phi|c^*}$ در بازه‌ی J ام از متغیر پیشرفت واکنش تصادفی $(c_{j-\frac{1}{2}} < c^* < c_{j+\frac{1}{2}})$ می‌باشد. تعداد بازه‌های متغیر پیشرفت واکنش ۵۰ عدد بوده و می‌تواند تا ۱۰۰ عدد نیز افزایش یابد. در معادله ۱۶، مقدار $\bar{\phi}_i$ از طریق حل معادله انتقال (شبه معادله ۱۰ برای کسر جرمی گونه‌ها) مشخص بوده و مقادیر $\overline{\phi|c^*}$ مجهول است؛ که به دلیل گسسته سازی متغیر پیشرفت واکنش به ۵۰ بازه، روش حل مسئله معکوس دارای ۵۰ مجهول بوده که حل این مسئله معکوس ذاتاً بد حالت است. برای منظم سازی حل در شعله پیش مخلوط، استفاده از مدل مرتبه اول تیخونوف^۷ یا حل ریزشعله‌های آرام به عنوان داده‌ی اولیه، دقت مناسبی دارد ([۱۳]. [۱۴]).

$$\alpha_j^{DD} = \arg \alpha_j \min (\| \mathbb{P}_{ij} \alpha_j - \bar{\phi}_i \|_2^2 + \lambda^2 \| \alpha_j - \alpha_j^0 \|_2^2) \quad (17)$$

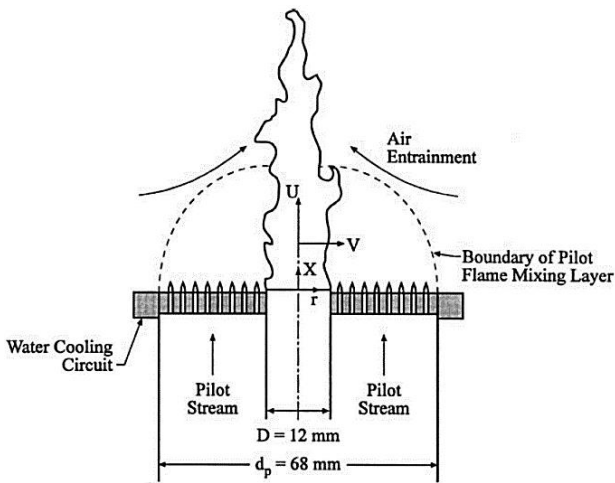
⁵ Ill-posed
⁶ Regularization
⁷ First Order Tikhonov

¹ Conditional Reaction Rate
² Two-Dimensional Flame-Generated Manifold (2D-FGM)
³ Flame Generated Manifolds
⁴ Inverse Problems

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{u}_i \bar{\Sigma}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v_t}{Sc_{\bar{\Sigma}}} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right) + \alpha_0 \frac{\bar{\Sigma}}{k} - \beta_0 S_L \frac{\bar{\Sigma}^2}{1 - \bar{c}} \quad (27)$$

هندسه و شرایط مرزی

شعله مدل سازی شده، یک شعله‌ی بزنن بوده که در مرکز، مخلوط گاز متان با هوا، با نسبت هم‌ارزی ۱ و دمای ۳۰۰ کلون وارد می‌شود. در اطراف این مخلوط نسوخته، پیلوت قرار دارد، که در پیلوت مخلوط سوخته‌ی متان-هوا با دمای ۱۹۳۶ درجه‌ی کلون وارد شده و سبب سوختن مخلوط متان-هوا می‌شود. سرعت در مرکز برابر با ۴۰ متربرثانیه، و سرعت ورودی دوم (پیلوت) ۱/۵ متربرثانیه است؛ فشار محیط نیز ۱ اتمسفر و دمای آن ۳۰۰ کلون می‌باشد. در شکل ۲ تصویر این شعله نشان داده شده است [۲۱]. عدد رینولدز برحسب سرعت جریان و قطر ورودی اول برابر با ۲۴۰۰۰؛ و عدد کارلویتز نیز حدود ۳/۴ است. در نتیجه این شعله طبق دسته بندی پیترز [۲۵]، داخل رژیم ناحیه‌ی واکنش نازک،^۵ و یا به عبارت دیگر در رژیم ریزشعله‌های آرام قرار دارد.



شکل ۲: شکل شعله‌ی بزنن [۲۱]

مدل سازی انجام شده، دو بعدی و تقارن محوری است. حداکثر عدد کورانت^۴ برابر با ۰/۲ انتخاب شده که در نتیجه آن مقدار گام زمانی حدود ۲ میکروثانیه می‌باشد. برای بررسی سائز شبکه، شبکه‌هایی با تعداد سلول ۲۰۰۰، ۴۰۰۰، ۸۰۰۰، ۱۶۰۰۰ و ۳۲۰۰۰ تست گردید. در نهایت شبکه‌ای که دارای ۸۰۰۰ سلول است، به دلیل اختلاف اندک با شبکه‌های ریزتر، و حجم محاسبات کمتر انتخاب گردید. این شبکه در شکل ۳ نشان داده شده است.

به منظور مدل سازی این شعله با مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده، این شعله در راستای محور، به ۱۶ ناحیه تقسیم گردید. زیرا در این نواحی گرادیان سرعت و نرخ کرنش متفاوت است؛ که در نتیجه‌ی آن شکل میانگین شرطی و یا به عبارت دیگر نرخ واکنش‌ها (در متغیر پیشرفت واکنش یکسان) متفاوت است.

در این مدل سازی، جداول از پیش آماده شده مطابق با مکانیزم موجود برای احتراق متان-هوا در *GRI-Mech 3.0* تولید شده اند. این جداول با نرم افزار کنترال^۶ و برای نسبت هم‌ارزی یک تولید شده‌اند. همچنین برای بهینه سازی مدل تخمین شرطی جمله تولید، از بسط برنشتاین برای محاسبه‌ی اسکالره‌های شرطی استفاده گردید. بسط برنشتاین استفاده شده در حل

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \left[\sum_{j=0}^n \beta_j B_{j,n}(c^*) \right] P(c^*; \bar{c}, \bar{c}^{\sim 2}) dc^* \quad (21)$$

با گسسته سازی معادله‌ی ۲۱ همانند معادله‌ی ۱۶، برای $\bar{\phi}$ داریم:

$$\mathbb{B}_{ij} \beta_j = \bar{\phi}_i \quad (22)$$

$$\mathbb{B}_{ij} = \int_{c_{j-\frac{1}{2}}}^{c_{j+\frac{1}{2}}} B_{j,n}(c^*) P(c^*; \bar{c}, \bar{c}^{\sim 2}) dc^*$$

با گسسته سازی صورت گرفته در معادله‌ی ۲۲، می‌توان با حل یک مسئله‌ی معکوس (مشابه معادله ۱۷) ضرایب برنشتاین را بدست آورد. اما در حل این مسئله‌ی معکوس تعداد مجهولات کاهش یافته و به جای ۵۰ مجهول در معادله‌ی ۱۷، به چهار عدد (تعداد ضرایب برنشتاین) رسیده است. در این شرایط نیازی به استفاده از منظم سازی با روش تیخونوف و همچنین فیلتر پایین گذر نیست. در نتیجه می‌توان معادله‌ی مورد نیاز برای محاسبه‌ی ضرایب برنشتاین را به صورت زیر نوشت.

$$\beta_j = \arg \beta_j \min \left(\left\| \mathbb{B}_{ij} \beta_j - \bar{\phi}_i \right\|_2^2 \right) \quad (23)$$

در معادله‌ی ۱۷ اسکالره‌های شرطی و در معادله‌ی ۲۳، ضرایب برنشتاین محاسبه می‌شود. برای محاسبه‌ی اسکالره‌های شرطی در مدل بهینه شده، پس از محاسبه‌ی ضرایب برنشتاین از طریق معادله‌ی ۲۳، می‌توان مقادیر اسکالره‌های شرطی را با استفاده از معادله‌ی ۲۲ بدست آورد.

با داشتن اسکالره‌های شرطی (کسر جرمی شرطی گونه‌های کربن دی‌اکسید و آب)، می‌توان از طریق جداول تهیه شده بر اساس معادله‌ی ۱۴، نرخ شرطی واکنش‌ها را محاسبه نمود. با محاسبه‌ی نرخ شرطی واکنش‌ها و داشتن تابع توزیع احتمال، از طریق معادله‌ی ۱۶ متوسط نرخ واکنش، که در معادله‌ی ۱۰ مجهول است؛ بدست می‌آید. برای محاسبه‌ی تابع توزیع احتمال که در معادلات ۱۱، ۱۵ و معادلات دیگر مورد نیاز است، باید دو پارامتر متوسط و واریانس متغیر پیشرفت واکنش محاسبه گردند. این دو پارامتر به ترتیب از حل معادلات ۲۴ و ۲۵ بدست می‌آیند.

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{c})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{c}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_c \quad (24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{c}^{\sim 2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{c}^{\sim 2}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{v_T}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}^{\sim 2}}{\partial x_i} \right) + 2\bar{\rho} \frac{v_T}{Sc_t} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} - 2\rho D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} + 2\bar{c} \bar{\omega}_c \quad (25)$$

در معادله‌ی ۲۵، v_T لزجت سینماتیکی آشفته است. در این معادله‌ی ۲۵ $2\rho D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i}$ نرخ اضمحلال اسکالر بوده و توسط معادله‌ی جبری زیر مدل سازی می‌شود [۲۴].

$$\overline{\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i}} \approx \frac{1}{2} (2c_m - 1) \rho_u S_L \bar{\Sigma} \frac{\bar{c}^{\sim 2}}{\bar{c} (1 - \bar{c})} \quad (26)$$

در این معادله S_L سرعت شعله‌ی آرام و ρ_u چگالی مخلوط نسوخته بوده و ضریب c_m برابر با ۰/۷۵ است. پارامتر $\bar{\Sigma}$ چگالی سطحی شعله‌ی آست و از طریق معادله‌ی ۲۷ محاسبه می‌گردد [۲]. مقادیر α_0 و β_0 ثوابت این مدل می‌باشند.

⁴ Thin reaction zone regime

⁵ Courant Number

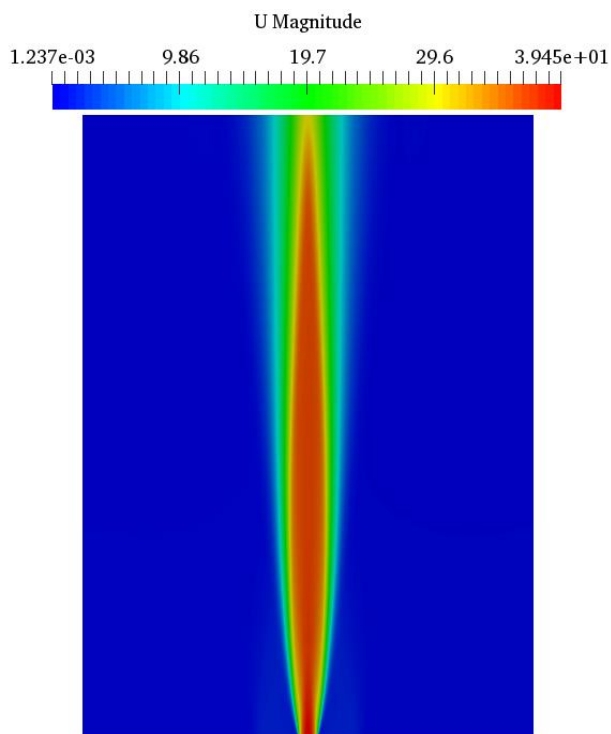
⁶ Cantera

¹ Laminar Flame Speed

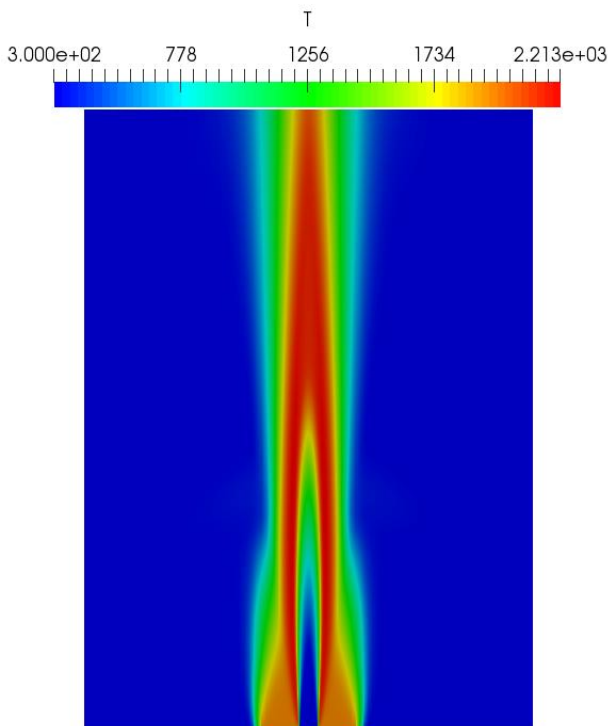
² Flame surface density

³ Pilot

می‌کند، و چون دمای پیلوت بالا (۱۹۳۶ کلوین) است، سبب مشتعل شدن مخلوط نسوخته‌ی سوخت و هوای داخل شده از ورودی اول می‌شود.



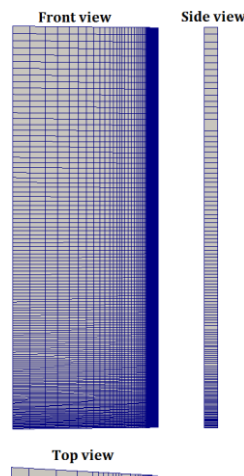
شکل ۵: کانتور اندازه‌ی سرعت (متر بر ثانیه)



شکل ۶: کانتور دما (کلوین)

در شکل ۷، نمودار میانگین‌های شرطی بدست آمده در چهار ناحیه‌ی متفاوت نشان داده شده‌است. این نمودارها بسیار شبیه یکدیگر و مشابه حل ریزشعله‌های آرام هستند. زیرا همانطور که در قسمت هندسه و شرایط مرزی به آن اشاره شد، در این شعله عدد کارلویتز پایین و برابر با ۳/۴ بوده و شعله در رژیم ریزشعله‌های آرام قرار دارد. از این رو می‌توان انتظار داشت که شکل کلی میانگین‌های شرطی به صورت ریزشعله‌های آرام باشد. در مدل

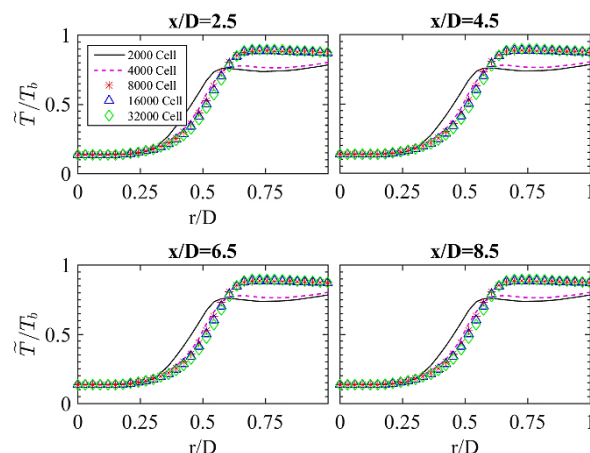
معادله‌ی ۲۳ از درجه‌ی چهار می‌باشد (مطابق با شکل ۱). با این کار تعداد مجهولات، از ۵۰ مجهول در روش مسئله‌ی معکوس به ۴ عدد در روش بهینه شده رسیده است.



شکل ۳: شبکه‌ی استفاده شده برای مدل‌سازی

نتایج

در این مدل‌سازی، به منظور بررسی دقت شبکه، پنج شبکه با تعداد سلول ۲۰۰۰، ۴۰۰۰، ۸۰۰۰، ۱۶۰۰۰ و ۳۲۰۰۰ بررسی گردید. در این بررسی نتایج با استفاده از حل ریزشعله‌های آرام با گام زمانی ۲/۵ میکروثانیه بدست آمده است. با این گام زمانی، در شبکه‌ی ۳۲۰۰۰ سلول ماکزیمم عدد کورانت برابر با ۰/۳، و در شبکه‌ی ۲۰۰۰ سلول ماکزیمم عدد کورانت برابر با ۰/۰۷ است. شکل ۴، نمودار دمای بی‌بعد این شبکه‌ها را نشان می‌دهد.

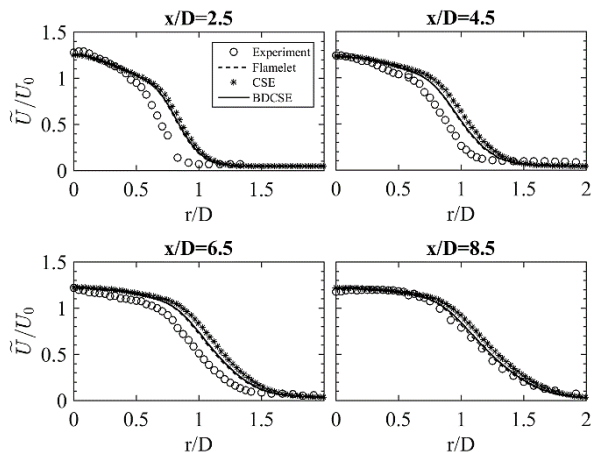


شکل ۴: نمودار دما در مقاطع مختلف محوری، برای شبکه‌های متفاوت

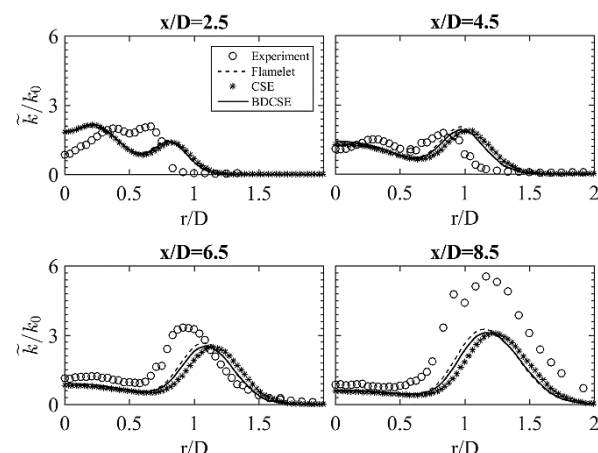
طبق این شکل، شبکه‌های ۸۰۰۰، ۱۶۰۰۰ و ۳۲۰۰۰ سلول، اختلاف بسیار کمی با یکدیگر دارند. اما این سه شبکه با شبکه‌های ۲۰۰۰ و ۴۰۰۰ سلول، اختلاف قابل توجهی دارند. در نتیجه شبکه‌ی دارای ۸۰۰۰ سلول، برای مدل‌سازی این شعله انتخاب گردید؛ زیرا اختلاف نتایج این شبکه با شبکه‌های ریزتر بسیار اندک، اما حجم محاسبات آن به مقدار زیادی کمتر است.

پس از انتخاب شبکه، این شعله با مدل تخمین شرطی جمله‌ی تولید بهینه شده، مدل‌سازی گردیده و نتایج آن در شکل‌های ۵ و ۶ ارائه شده‌است. در شکل ۵ کانتور بدست آمده برای سرعت در شعله بنزن، و در شکل ۶ نیز کانتور دما برای این شعله نشان داده شده است. مطابق با شکل ۶، جریان هوای گرم از پیلوت (ورودی دوم)، به سمت ورودی اول (مخلوط نسوخته) حرکت

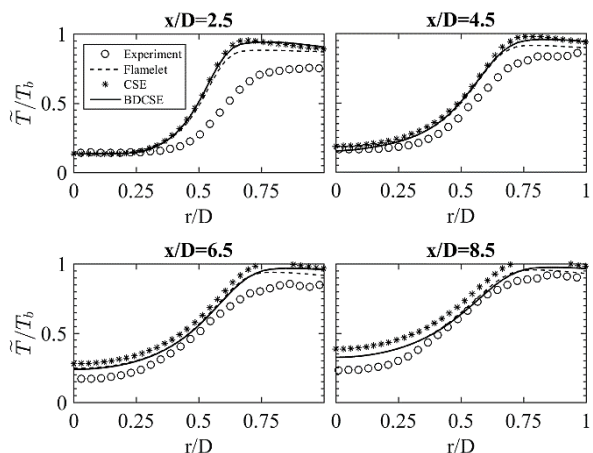
از دیگر مواردی که می‌تواند در میزان نرخ واکنش و میزان انتقال حرارت خطا ایجاد کند؛ استفاده از مدل متوسط گیری رینولدز ($k - \epsilon$ استاندارد)، برای مدل سازی جریان آشفته است. همچنین نرخ اضمحلال اسکالر، که یک پارامتر مهم در جریان آشفته است؛ و بر روی نتایج اثر زیادی دارد، به سختی قابل مدل سازی است. در این پژوهش از معادله‌ی ۲۶ برای مدل سازی این پارامتر استفاده شد، علی‌رغم دقت خوب این روش [۲۴] این معادله نیز یکی از منابع خطا می‌باشد.



شکل ۸: نمودار سرعت عددی و تجربی در مقاطع مختلف محوری

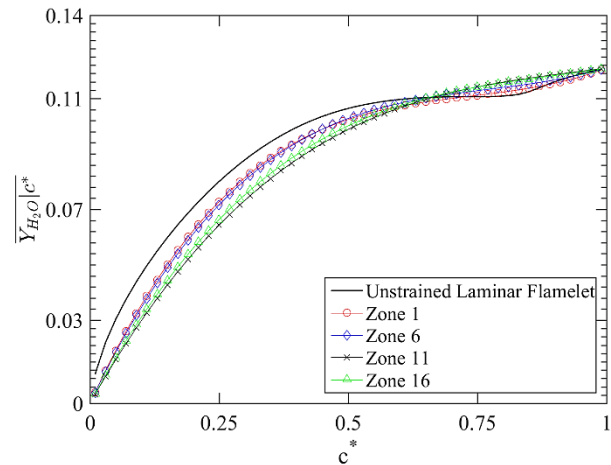


شکل ۹: نمودار شدت آشفته‌گی در مقاطع مختلف محوری



شکل ۱۰: نمودار دمای عددی و تجربی در مقاطع مختلف محوری

ریزشعله‌های آرام میانگین‌های شرطی پیش‌فرض شده می‌باشند، اما همانگونه که در قسمت تئوری بیان شد، در مدل تخمین شرطی جمله تولید میانگین‌های شرطی از طریق معادله‌ی ۱۷ محاسبه می‌شوند. اکنون نتایج بدست آمده در شکل ۷ نشان می‌دهد که میانگین‌های شرطی بدست آمده با مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده، تطابق زیادی با میانگین‌های شرطی پیش‌فرض در مدل ریزشعله‌های آرام دارد.



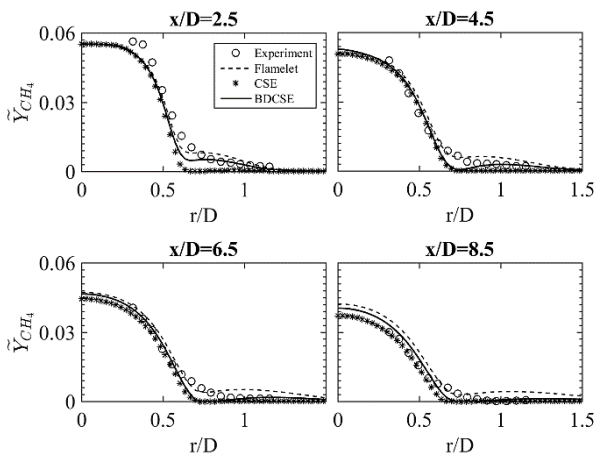
شکل ۷: میانگین شرطی در چهار ناحیه‌ی متفاوت

علاوه بر نمودار میانگین‌های شرطی، سایر نتایج بدست آمده نیز بررسی شده و به منظور بررسی بهتر دقت نتایج؛ در چهار قسمت از طول شعله (در راستای محوری) سرعت، شدت آشفته‌گی، دما و غلظت گونه‌ها گرفته شده و همراه با نتایج تجربی [۲۱] ارائه شده‌اند. در این شکل‌ها علاوه بر نتایج تجربی و مدل تخمین شرطی جمله‌ی تولید بهینه شده، نمودار نتایج مدل ریزشعله‌های آرام و مدل تخمین شرطی جمله‌ی تولید بهینه نشده نیز ارائه شده‌اند. همانطور که ذکر شد، این شعله در رژیم احتراقی ریزشعله‌های آرام قرار دارد و نمودار میانگین‌های شرطی آن مشابه ریزشعله‌های آرام است؛ از این رو سایر نتایج بدست آمده برای گونه‌ها و دما نیز تطابق زیادی با نتایج مدل ریزشعله‌های آرام دارد.

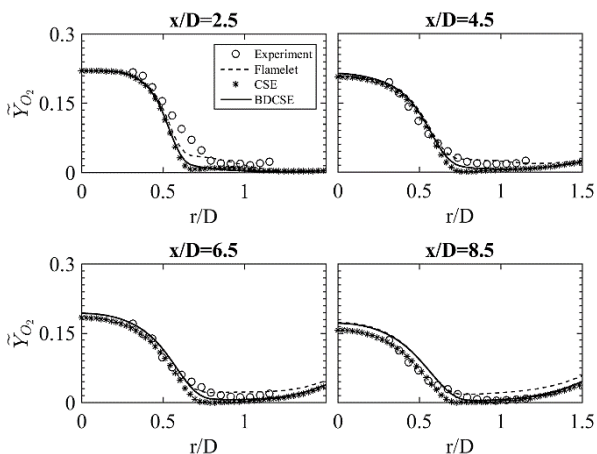
با توجه به شکل ۸، می‌توان گفت نتایج هر سه مدل عددی کاملاً مطابق یکدیگر بوده و این نمودارها با نمودار نتایج تجربی اختلاف اندکی دارند؛ در نتیجه می‌توان گفت دقت حل برای سرعت در مقاطع مختلف کاملاً قابل قبول است. در شکل ۹ نتایج عددی و تجربی شدت آشفته‌گی نشان داده شده است. در این شکل نیز هر سه مدل عددی کاملاً مشابه‌اند؛ خطای موجود بین نتایج عددی و تجربی نیز ناشی از استفاده از روش متوسط گیری رینولدز برای مدل سازی آشفته‌گی است.

مطابق نمودارهای مربوط به دما که در شکل ۱۰ ارائه شده‌اند، نتایج عددی و تجربی تطابق قابل قبولی دارند، اما در مقاطع نزدیک به ورودی به خصوص مقطع $x/D=2.5$ ، اختلاف بین نتایج تجربی و عددی زیاد است. مقداری از این خطا ناشی از زیاد بودن گرمای آزاد شده می‌باشد که در نتیجه‌ی آن دما به سرعت افزایش یافته است. زیاد بودن گرمای آزاد شده نیز ناشی از بالا بودن نرخ واکنش در این مقطع است. به عبارت دیگر نرخ واکنش‌های محاسبه شده بیش از اندازه تخمین زده شده‌اند. همچنین مقداری از این خطا ناشی از انتقال حرارت از پیلوت به سرمشعل می‌باشد. مطابق با شکل ۶، به طور کلی چون دما در پیلوت بالاتر است؛ و جریان پیلوت به سمت جریان مرکزی حرکت می‌کند، انتقال حرارت بین جریان پیلوت و جریان مرکزی وجود دارد، اما در نتایج عددی انتقال حرارت بیش از اندازه بدست آمده‌است.

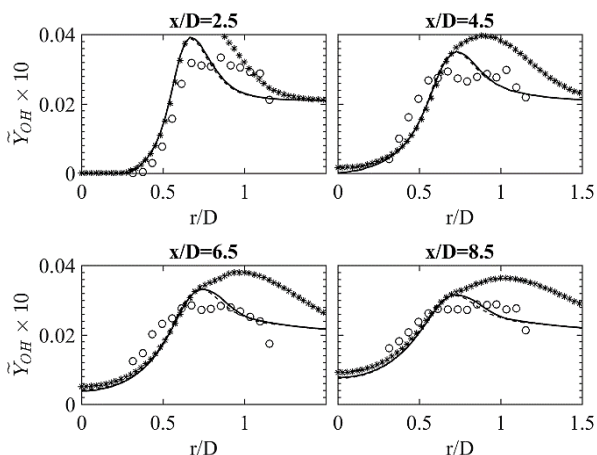
بهینه شده، دقت بیشتری داشته و مدل بهینه نشده در شعاع‌های بی‌بعد بزرگتر از ۰/۷ از نتایج دو مدل دیگر و نتایج تجربی فاصله می‌گیرد.



شکل ۱۳: نمودار کسر جرمی متان در مقاطع مختلف محوری



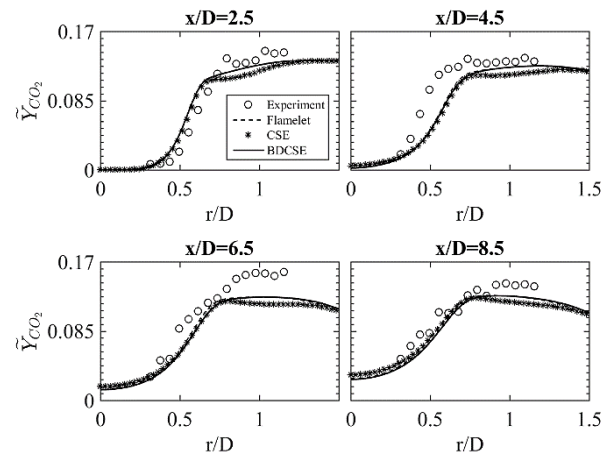
شکل ۱۴: نمودار کسر جرمی اکسیژن در مقاطع مختلف محوری



شکل ۱۵: نمودار کسر جرمی هیدروکسید در مقاطع مختلف محوری

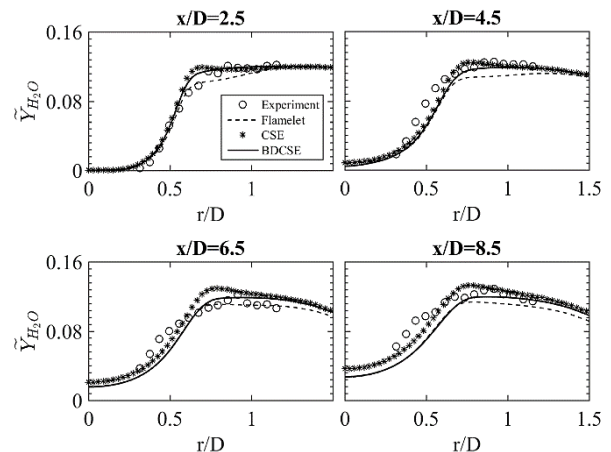
کسر جرمی گونه‌های میانی مستقیم از جداول خمینی تولیدی ریزشعله دوبعدی خوانده می‌شوند. در نتیجه برای خطای موجود در نتایج گونه‌ی کربن مونوکسید می‌توان گفت: در جداول تولید شده با روش خمینی تولیدی ریزشعله دوبعدی، تابع توزیع استفاده شده و همچنین واریانس که

مطابق شکل ۱۱، می‌توان گفت نتایج گونه‌ی کربن دی‌اکسید در تمامی مقاطع دقت قابل قبولی دارد. دو مدل ریزشعله‌های آرام و تخمین شرطی جمله‌ی تولید بهینه شده، کاملاً منطبق بر یکدیگرند، و تخمین شرطی جمله‌ی تولید بهینه نشده، مقدار اندکی اختلاف دارد.



شکل ۱۶: نمودار کسر جرمی کربن دی‌اکسید در مقاطع مختلف محوری

برای گونه‌های آب، متان و اکسیژن نیز می‌توان گفت نتایج دقت لازم را داشته و اختلاف نتایج مدل‌های عددی با نتایج تجربی کم است. به عبارت دیگر، شکل و روند کلی نمودارهای عددی مشابه نمودارهای تجربی است، اما با کمی اختلاف، این مقادیر بیشتر و یا کمتر محاسبه شده‌اند. می‌توان گفت نتایج مدل ریزشعله‌های آرام و مدل بهینه شده، دقت بیشتری نسبت به مدل بهینه نشده دارد.



شکل ۱۷: نمودار کسر جرمی آب در مقاطع مختلف محوری

در شکل ۱۵، نمودار کسر جرمی گونه‌ی هیدروکسید نشان داده شده است. مطابق با نمودارهای تجربی و عددی، نتایج عددی برای این گونه نیز کاملاً قابل قبول است. در این شکل، دو مدل ریزشعله‌های آرام و مدل بهینه شده، مشابه یکدیگر هستند، اما مدل تخمین شرطی جمله‌ی تولید، برای شعاع‌های بی‌بعد بزرگتر از ۰/۵، از نتایج تجربی فاصله می‌گیرد.

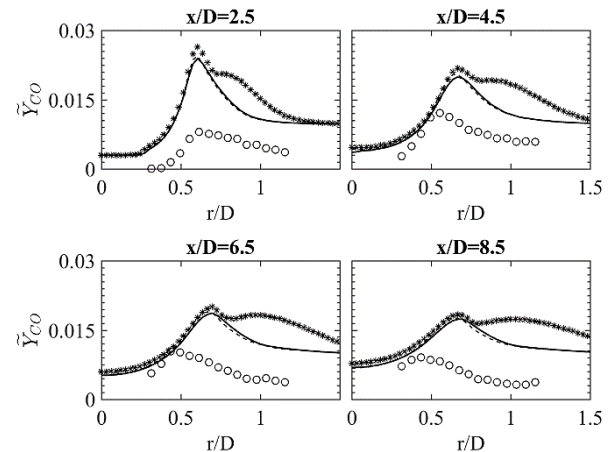
با وجود دقت مناسب نتایج برای گونه‌های اصلی و گونه‌ی هیدروکسید، اما نتایج بدست آمده برای گونه‌ی میانی کربن مونوکسید دقت مناسبی ندارند. مطابق با نمودارهای عددی و تجربی شکل ۱۶، کسر جرمی گونه‌ی کربن مونوکسید، به طور کلی در هر چهار مقطع بیشتر از مقادیر تجربی محاسبه شده است. در این تصویر نیز، دو مدل ریزشعله‌های آرام و مدل

مدل ریزشعله‌های آرام هم‌خوانی دارد. همچنین پس از بررسی نمودارهای رسم شده در مقاطع مختلف محوری، می‌توان گفت مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده در محاسبه‌ی کسر جرمی گونه‌های اصلی عملکرد بسیار خوبی داشته و نتایج دقت خوب و قابل قبولی دارند. برای گونه‌ی میانی هیدروکسید نیز نتایج عددی تطابق زیادی با نتایج تجربی دارد. اما در نمودارهای دما و گونه‌ی میانی کربن‌مونوکسید مقداری اختلاف بین نتایج تجربی و عددی موجود است. اختلاف موجود در نمودار دما زیاد نبوده و نتایج همچنان معتبر است؛ این اختلاف نیز ناشی از زیاد محاسبه شدن نرخ واکنش و خطای موجود در مدل آشفتگی و مدل نرخ اضمحلال اسکالر است. اختلاف نتایج عددی و تجربی در گونه‌ی کربن‌مونوکسید نیز ناشی از خطای جداول تولید شده و خطای تابع توزیع احتمال است. همچنین در بررسی هزینه‌ی محاسباتی مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده در مقایسه با مدل بهینه نشده؛ نتایج نشان می‌دهند که استفاده از بسط برنشتاین برای محاسبه‌ی میانگین‌های شرطی، هزینه‌ی محاسبات را به میزان قابل توجهی کاهش داده است. در پایان می‌توان مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده را یک مدل با دقت مناسب و حجم محاسبات کم دانست.

مراجع

- [1] J. Warnatz, U. Maas and R. W. Dibble, *Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, Springer, 2000.
- [2] T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, Philadelphia: Edwards, 2005.
- [3] N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in nonpremixed turbulent combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 10, pp. 319-339, 1984.
- [4] A. Y. Klimenko and R. W. Bilger, "Conditional moment closure for turbulent combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 25, pp. 595-687, 1999.
- [5] S. B. Pope, "PDF methods for turbulent reactive flows," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 11, pp. 119-192, 1986.
- [6] W. K. Bushe and H. Steiner, "Conditional moment closure for large eddy simulation of nonpremixed turbulent reacting flows," *Physics of Fluids*, vol. 11, pp. 1896-1906, 1999.
- [7] D. Bradley, L. K. Kwa, A. K. C. Lau, M. Missaghi and S. B. Chin, "Laminar Flamelet Modeling of Recirculating Premixed Methane and Propane-Air Combustion," *Combustion and Flame*, vol. 71, pp. 109-122, 1988.
- [8] P. Domingo, L. Vervisch, S. Payet and R. Hauguel, "DNS of a premixed turbulent V flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry," *Combustion and Flame*, vol. 143, pp. 566-586, 2005.
- [9] E. R. Hawkes and J. H. Chen, "Comparison of direct numerical simulation of lean premixed methane-air flames with strained laminar flame calculations," *Combustion and Flame*, vol. 144, pp. 112-125, 2006.
- [10] N. Swaminathan and R. W. Bilger, "Analyses of Conditional Moment Closure for Turbulent

برای تولید تابع توزیع استفاده می‌شود؛ خطا وجود دارد. اما این خطا برای گونه‌های میانی بیشتر است.



شکل ۱۶: نمودار کسر جرمی کربن‌مونوکسید در مقاطع مختلف محوری

پس از بررسی دقت مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده، برای بررسی هزینه محاسباتی این مدل نسبت به مدل بهینه نشده؛ زمان مدل‌سازی شعله بنزن پس از ۱۰۰ گام زمانی، با سه مدل ممان شرطی فرض شده؛ تخمین شرطی جمله تولید و تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده اندازه‌گیری گردید. اندازه‌ی تمامی گام‌های زمانی ثابت و برابر با ۱ میکروثانیه (عدد کورانت حدود ۰/۱) گرفته شده است. نتایج حاصل شده به صورت جدول ۱ می‌باشد. اعداد ذکر شده در این جدول، متوسط نتایج حاصل از سه بار تکرار برای ۱۰۰ گام زمانی می‌باشد.

جدول ۱: متوسط زمان حل برای ۱۰۰ گام زمانی

مدل	ممان شرطی فرض شده	تخمین شرطی جمله تولید	تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده
زمان اجرا (ثانیه)	۲۸۵/۴۸	۳۵۳/۱۱	۲۸۶/۸۹

زمان مربوط به مدل ممان شرطی فرض شده نسبت به دو مدل دیگر کمتر است، زیرا در این روش میانگین‌های شرطی محاسبه نمی‌شوند و از مقادیر ریزشعله‌های آرام استفاده می‌شود. طبق نتایج بدست آمده، هزینه محاسباتی مدل تخمین شرطی جمله تولید بهینه شده، نسبت به مدل ممان شرطی فرض شده، به میزان کمی بیشتر است. اما اختلاف مدل تخمین شرطی جمله تولید با مدل ممان شرطی فرض شده زیاد بوده و حدود ۶۲/۶۳ ثانیه است؛ در صورتی که اختلاف مدل بهینه شده با مدل ممان شرطی فرض شده ۱/۴۱ ثانیه بوده که نشانگر سرعت بیشتر مدل بهینه شده است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، روش پیشنهادی مهدی‌پور و صالحی برای بهینه‌سازی مدل تخمین شرطی جمله تولید، در یک کد دینامیک سیالات محاسباتی پیاده سازی گردید و برای اولین بار از بسط برنشتاین برای محاسبه‌ی اسکالرهای شرطی جریان استفاده شد. سپس برای بررسی عملکرد این مدل، یک شعله‌ی آشفته‌ی بنزن با سوخت متان مدل‌سازی شد. این مدل به خوبی توانست شکل میانگین‌های شرطی جریان را مدل کند و نتایج کاملاً با نتایج

- DNS of premixed V-flame, LES of lifted non-premixed flame and RANS of jet-flame," *Journal of Turbulence*, vol. 5, pp. 1-36, 2004.
- [25] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, 2000.
- Premixed Flames," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 5, pp. 241-260, 2001.
- [11] S. M. Martin, J. C. Kramlich, G. Kosaly and J. J. Riley, "The Premixed Conditional Moment Closure Method Applied to Idealized Lean Premixed Gas Turbine Combustors," *Transactions of ASME*, vol. 125, pp. 895-900, 2003.
- [12] D. Farrace, K. Chung, S. S. Pandurangi, Y. M. Wright, K. Boulouchos and N. Swaminathan, "Unstructured LES-CMC modelling of turbulent premixed bluff body flames close to blow-off," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, pp. 1977-1985, 2017.
- [13] M. M. Salehi, W. K. Bushe and K. J. Daun, "Application of the conditional source-term estimation model for turbulence-chemistry interactions in a premixed flame," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 16, pp. 301-320, 2012.
- [14] N. Shahbazian, M. M. Salehi, C. P. T. Groth, O. L. Gulder and W. K. Bushe, "Performance of conditional source-term estimation model for LES of turbulent premixed flames in thin reaction zones regime," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 35, pp. 1367-1375, 2015.
- [15] J. W. Labahn, I. Stanković, C. B. Devaud and B. Merci, "Comparative study between Conditional Moment Closure (CMC) and Conditional Source-term Estimation (CSE) applied to piloted jet flames," *Combustion and Flame*, vol. 181, pp. 172-187, 2017.
- [16] A. Hussien and C. B. Devaud, "Simulations of turbulent acetone spray flames using the conditional source term estimation (CSE) approach," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 25, no. 2, pp. 269-292, 2021.
- [17] H. P. Tsui and W. K. Bushe, "Conditional Source-term Estimation using dynamic ensemble selection and parallel iterative solution," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 20, no. 5, pp. 812-833, 2016.
- [18] M. Mortada and C. Devaud, "Large Eddy Simulation of lifted turbulent flame in cold air using Doubly Conditional Source-term Estimation," *Combustion and Flame*, vol. 208, pp. 420-435, 2019.
- [19] X. H. Fang, R. Ismail, K. Bushe and M. Davy, "Simulation of ECN diesel spray A using conditional source-term estimation," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 24, no. 4, pp. 725-760, 2020.
- [20] A. H. Mahdipour and M. M. Salehi, "Localized conditional source-term estimation model for turbulent combustion," *Combustion and Flame*, vol. 235, pp. 1-17, 2021.
- [21] Y. C. Chen, N. Peters, G. A. Schneemann, N. Wruck, U. Renz and M. S. Mansour, "The detailed flame structure of highly stretched turbulent premixed methane-air flames," *Combustion and Flame*, vol. 107, no. 3, pp. 223-244, 1996.
- [22] M. M. Salehi and W. K. Bushe, "Presumed PDF modeling for RANS simulation of Turbulent premixed flames," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 14, pp. 381-403, 2010.
- [23] J. A. Van Oijen and L. P. H. De Geoy, "Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds," *Combustion Science and Technology*, vol. 161, no. 1, pp. 113-137, 2000.
- [24] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo and M. Rullaud, "Three facets of turbulent combustion modelling: