

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی تبدیل انرژی

بررسی پایداری شعله‌های پیش آمیخته کم سوخت در مشعل لایه‌ای به روش لتیس -

بولتزمن

نگارنده: الهه نوروزی جاجرم

استاد راهنما

دکتر جواد ابوالفضلی اصفهانی

شهریور ۱۳۹۵

در آغاز از کوشش‌های دلسوزانه و بی‌دریغ استاد فرهیخته و فرزانه
جناب آقای دکتر حواد ابوالفضل صیفهانی و راهنمایی‌های ارزنده‌ی
ایشان در زمینه انتخاب موضوع، فراهم کردن مرجع‌ها و مشاوره دائمی
در فرآیند پژوهش صمیمانه قدردانی می‌نمایم. بهروزی و سربلندی
روزافزون ایشان را از درگاه پروردگار یکتا خواهانم.

تعهد نامه

اینجانب الهه نوروزی جاجرم دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک- تبدیل انرژی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی پایداری شعله‌های پیش‌آمیخته کم‌سوخت در مشعل لایه‌ای به روش لتیس-بولتزمن تحت راهنمایی دکتر جواد ابوالفضلی اصفهانی متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ ۱۳۹۶/۰۴/۱۹

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

احتراق فرآیند پیچیده‌ای است که برای تحلیل آن نیاز به حل معادلات پیوستگی، ناویراستوکس و انرژی به صورت همزمان می‌باشد. در دو دهه اخیر روش شبکه بولتزمن به عنوان یک جایگزین مناسب برای تحلیل‌های پیچیده عددی شناخته شده است. استفاده از احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت در مشعل‌ها در مقایسه با احتراق غیر پیش‌آمیخته، علاوه بر کاهش مصرف انرژی، به دلیل دمای پایین‌تر محصولات احتراق، گازهای آلاینده کمتری تولید می‌کند. در کنار مزایای استفاده از احتراق پیش‌آمیخته، موانعی برای کاربردی کردن این نوع احتراق وجود دارد، این موانع مشکل ناپایداری شعله (پس‌زنی شعله به داخل مشعل و کنده‌شدن شعله از سطح مشعل) می‌باشد. در کار پیش‌رو به بررسی پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت در یک مشعل لایه‌ای براساس موقعیت تزریق سوخت و هوا در هر یک از لایه‌های مشعل پرداخته شده است. وجود یک مانع در خروجی مشعل، به عنوان یک عامل موثر در بهبود پایداری شعله در نظر گرفته می‌شود زیرا از پس‌زدن شعله به داخل مشعل جلوگیری می‌کند. شرط مرزی انتخاب شده‌ی فشار ثابت در خروجی مشعل، حل جریان در روش لیس بولتزمن را با خطای جریان برگشتی در خروج همراه می‌کند. سوخت مورد آزمایش در پژوهش حاضر پروپان است. اثر پارامترهای نسبت هم‌ارزی، سرعت و اثر تزریق هوا در مجرای داخلی و خارجی مشعل، بر روی شعله میانی مورد بررسی قرار گرفت. در حالت اولیه سوخت و هوا به صورت پیش‌آمیخته از لایه میانی وارد مشعل می‌شوند و مشاهده شد، با افزایش نسبت هم‌ارزی در یک سرعت ثابت، شعله تغییر شکل می‌دهد و به سمت پایداری پیش می‌رود. در سرعت 1 (m/s) ، راس شعله برخاسته به سمت بالا دست جریان خم می‌شود، و با فاصله گرفتن از این سرعت ریشه شعله برخاسته بلند می‌شود. در حالت دوم با تزریق هوا در مجرای خارجی مشعل با یک سرعت جریانی بزرگتر از یک مقدار حدی تغییر شکل و پایداری شعله نسبت به حالت اول مشاهده می‌شود. زیرا در این حالت هوا تزریق شده نقش عایق را در برابر جریان سرد محیطی دارد که مانع خاموشی شعله می‌شود. در حالت سوم با تزریق هوا به مجرای داخلی مشعل اثر قابل درکی نسبت به دو حالت قبل در ساختار شعله مشاهده نشد.

کلید واژه: احتراق، روش لیس-بولتزمن، شعله پیش‌آمیخته، پایداری شعله

لیست مقالات مستخرج از رساله

- ۱- بررسی پایداری شعله در احتراق پیش آمیخته کم سوخت مشعل لایه ای با استفاده از روش شبکه بولتزمن، ششمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران، مشهد، دانشگاه فردوسی مشهد، بهمن ۱۳۹۴.
- ۲- بررسی پارامترهای تاثیرگذار بر افزایش پایداری شعله در مشعل های لایه ای دارای احتراق پیش آمیخته کم سوخت به روش شبکه بولتزمن، دومین کنفرانس بین المللی تهویه مطبوع و تاسیسات حرارتی و برودتی، بیرجند، دانشگاه بیرجند، مهر ۱۳۹۵.

فهرست

عنوان صفحه

فصل اول: مقدمه

فصل اول: مقدمه	۲
۱-۱ مقدمه	۲
۲-۱ تاریخچه روش شبکه بولترمن	۳
۳-۱ مدل‌های روش شبکه بولترمن	۵
۴-۱ مروری بر کارهای گذشته	۷
۱-۴-۱ جریان با هندسه ساده	۷
۲-۴-۱ جریان با هندسه پیچیده	۸
۳-۴-۱ احتراق	۹

فصل دوم: مبانی روش شبکه بولترمن

فصل دوم: مبانی روش شبکه بولترمن	۱۶
۱-۲ مقدمه	۱۶
۲-۲ الگوریتم حل	۲۲
۳-۲ تبدیل واحد	۲۳
۴-۲ حدس اولیه	۲۷
۵-۲ شرایط مرزی	۲۷
۱-۵-۲ شرط مرزی دیوار	۲۹
۲-۵-۲ شرط مرزی تقارن	۳۱

۳۲.....	شرط مرزی ورودی.....	۳-۵-۲
۳۴.....	شرط مرزی خروجی.....	۴-۵-۲
۳۵.....	میدان دما و غلظت.....	۶-۲
۳۷.....	شرایط مرزی دما.....	۱-۶-۲
۳۹.....	شرایط مرزی غلظت.....	۲-۶-۲

فصل سوم: ارزیابی کد

۴۴.....	فصل سوم: ارزیابی کد.....	
۴۴.....	مقدمه.....	۱-۳
۴۴.....	محفظه جریان مخالف.....	۲-۳
۴۸.....	احتراق یکبعدی پروپان.....	۳-۳

فصل چهارم: پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته

۵۶.....	فصل چهارم: پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته.....	
۵۶.....	مقدمه.....	۱-۴
۵۷.....	فرضیات.....	۲-۴
۵۸.....	شرایط مسئله.....	۳-۴
۵۹.....	به دست آوردن پارامترها.....	۴-۴
۶۱.....	شرایط مرزی و پارامترها.....	۵-۴
۶۲.....	استقلال از شبکه.....	۶-۴
۶۳.....	نتایج.....	۷-۴

فصل پنجم: نتیجه‌گیری و پیشنهادها

۱۰۸.....	فصل پنجم: نتیجه‌گیری و پیشنهادها.....	
----------	---------------------------------------	--

۱-۵ مقدمه ۱۰۸

۲-۵ جمع‌بندی ۱۰۸

۳-۵ پیشنهاد برای پژوهش‌های آینده ۱۰۹

پیوست ۱۱۱

مراجع ۱۱۴

فهرست شکل ها

- شکل ۱-۱ الف) روشهای پیوسته (حجم محدود، المان محدود) و معادلات تاویر استوکس (ب) روش شبکه بولتزمن (ج) روش دینامیک ملکولی [۷] ۴
- شکل ۱-۲: ساختار سلول دو بعدی D2Q9 و جهت‌های مجاز ۱۸
- شکل ۳-۲: سلول D3Q19 ۱۹
- شکل ۴-۲: نمایش برخورد و انتشار توابع توزیع ۲۲
- شکل ۵-۲: فلوچارت روش شبکه بولتزمن ۲۴
- شکل ۶-۲: روش عقبگرد استاندارد ۳۰
- شکل ۷-۲: شرط مرزی تقارن ۳۲
- شکل ۸-۲: توابع توزیع در مرزهای مختلف ۳۳
- ۱-۳ هندسه محفظه جریان مخالف ۴۵
- ۲-۳ نمودار سرعت عمودی بیبید روی مرز غربی ۴۶
- ۳-۳ نمودار سرعت افقی بیبید روی مرز جنوبی ۴۷
- شکل ۴-۳: هندسه شرایط یکبعدی احتراق [۲۱] ۵۲
- شکل ۵-۳: محل تشکیل شعله در گامهای زمانی مختلف ۵۴
- شکل ۱-۴: هندسه مساله مورد مطالعه ۵۹
- شکل ۲-۴: مقایسه تغییرات دما در مقطع $xH = 0.8$ برای سه شبکه مختلف ۶۳
- شکل ۳-۴: روند همگرایی معادله جریان ۶۴
- شکل ۴-۴: شعله نزدیک به کندهشدن ۶۵
- شکل ۵-۴: شعله برخاسته ۶۶

- شکل ۴-۶: شعله مخروطی ۶۶
- شکل ۴-۷: نمودار دما، $U = 0.5 \text{ (ms)}$ ۶۷
- شکل ۴-۸: نمودار سرعت، $U = 0.5 \text{ (ms)}$ ۶۸
- شکل ۴-۹: بردارهای سرعت ۶۸
- شکل ۴-۱۰: نمودار پروفیل‌های سرعت ۶۹
- شکل ۴-۱۱: نمودار دبی جرمی در مقاطع مختلف در مجرا ۷۰
- شکل ۴-۱۲: نمودار دما، $U = 0.6 \text{ (ms)}$ ۷۱
- شکل ۴-۱۴: نمودار دما، $U = 1 \text{ (ms)}$ ۷۲
- شکل ۴-۱۵: نمودار دما، $U = 1.2 \text{ (ms)}$ ۷۲
- شکل ۴-۱۶: تغییرات زاویه شعله بر حسب تغییرات سرعت ۷۳
- شکل ۴-۱۷: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $yH = 0.5$ ۷۴
- شکل ۴-۱۸: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $yH = 0.5$ ۷۵
- شکل ۴-۱۹: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $yH = 0.5$ ۷۵
- شکل ۴-۲۰: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی $yH = 0.5$ ۷۵
- شکل ۴-۲۱: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $yH = 0.55$ ۷۶
- شکل ۴-۲۲: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $yH = 0.55$ ۷۶
- شکل ۴-۲۳: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $yH = 0.55$ ۷۶
- شکل ۴-۲۴: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی $yH = 0.55$ ۷۷
- شکل ۴-۲۵: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $yH = 0.6$ ۷۷
- شکل ۴-۲۶: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $yH = 0.6$ ۷۷
- شکل ۴-۲۷: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $yH = 0.6$ ۷۸

- شکل ۴-۲۸: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی $yH = 0.6$ ۷۸
- شکل ۴-۲۹: شعله شبهمخروطی ($\phi = 0.85, U_{mid} = 1, U_{out} = 1 \text{ m/s}$) ۷۹
- شکل ۴-۲۹-الف: بررسی نمودار سرعت و منطقه گردابه‌های در حالت چندجریان با تزریق خارجی هوا ۸۰
- شکل ۴-۳۰: شعله با تزریق داخلی هوا ($\phi = 0.85, U_{mid} = 0.5, U_{in} = 1 \text{ m/s}$) ۸۱
- شکل ۴-۳۱: مرز بین شعله برخاسته و شعله شبهمخروطی ۸۲
- شکل ۴-۳۲: مرز بین شعله برخاسته و شعله شبهمخروطی ۸۳
- شکل ۴-۳۳: نمودار سرعت (m/s) ۸۵
- شکل ۴-۳۴: نمودار دما (K) ۸۵
- شکل ۴-۳۵: نمودار کسر جرمی سوخت ۸۶
- شکل ۴-۳۶: نمودار کسر جرمی هوا ۸۶
- شکل ۴-۳۷: نمودار کسر جرمی CO_2 ۸۷
- شکل ۴-۳۸: نمودار کسر جرمی H_2O ۸۷
- شکل ۴-۳۹: نمودار سرعت (m/s) ۸۸
- شکل ۴-۳۹-الف: نمودار بردارهای سرعت ۸۸
- شکل ۴-۴۰: نمودار دما (K) ۸۹
- شکل ۴-۴۲: نمودار کسر جرمی هوا ۹۰
- شکل ۴-۴۳: نمودار کسر جرمی CO_2 ۹۰
- شکل ۴-۴۴: نمودار کسر جرمی H_2O ۹۱
- شکل ۴-۴۵: مقایسه نمودارهای دما ۹۱
- شکل ۴-۴۶: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت ۹۲

- شکل ۴-۴۷: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا ۹۲
- شکل ۴-۴۹: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O ۹۳
- شکل ۴-۵۱: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت ۹۴
- شکل ۴-۵۲: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا ۹۴
- شکل ۴-۵۳: مقایسه نمودارهای کسر جرمی CO_2 ۹۴
- شکل ۴-۵۴: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O ۹۵
- شکل ۴-۵۶: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت ۹۶
- شکل ۴-۵۷: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا ۹۶
- شکل ۴-۵۸: مقایسه نمودارهای کسر جرمی CO_2 ۹۶
- شکل ۴-۵۹: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O ۹۷
- شکل ۴-۶۱: نمودار دما (K) ۹۸
- شکل ۴-۶۳: نمودار کسر جرمی هوا ۹۹
- شکل ۴-۶۵: نمودار کسر جرمی H_2O ۱۰۰
- شکل ۴-۶۶: نمودار سرعت (m/s) ۱۰۰
- شکل ۴-۶۷: نمودار دما (K) ۱۰۱
- شکل ۴-۶۸: نمودار کسر جرمی سوخت ۱۰۱
- شکل ۴-۷۰: نمودار کسر جرمی CO_2 ۱۰۲
- شکل ۴-۷۱: نمودار کسر جرمی H_2O ۱۰۳
- شکل ۴-۷۲: نمودار سرعت (m/s) ۱۰۴
- شکل ۴-۷۳: نمودار دما (K) ۱۰۴
- شکل ۴-۷۴: نمودار کسر جرمی سوخت ۱۰۵

شکل ۴-۷۵: نمودار کسر جرمی هوا ۱۰۵

شکل ۴-۷۶: نمودار کسر جرمی CO_2 ۱۰۵

شکل ۴-۷۷: نمودار کسر جرمی H_2O ۱۰۶

فهرست جدول ها

جدول ۳-۱: مقایسه نتایج به دست آمده در کار انجام شده با کار یاماموتو و همکاران [۲۱]. ۴۸

جدول ۳-۲: پارامترهای مورد استفاده در تحلیل احتراق یک بعدی پروپان ۴۹

جدول ۴-۱: ابعاد مشعل ۵۹

جدول ۴-۲: نتایج مربوط به فشار و سرعت ماکزیمم در ۳ شبکه مختلف ۶۳

جدول ۴-۳: شبیه سازی هندسه شکل در نرم افزار گمبیت ۸۴

فصل اول: مقدمه

فصل اول: مقدمه

۱-۱ مقدمه

از دیرباز مدل‌های ریاضی نظیر معادلات ناویراستوکس و یا معادله بولتزمن به منظور توضیح رفتار جریان سیال مورد توجه بوده‌اند. با این وجود، حل تحلیلی این معادلات بسیار پیچیده و در اغلب موارد امری ناممکن در محدوده دانش فعلی می‌باشد. با رشد فزاینده فناوری سخت‌افزاری و نرم‌افزاری در سال‌های اخیر، شبیه‌سازی عددی، به عنوان روشی قدرتمند در دینامیک سیالات، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب نموده است. در این میان، روش دینامیک سیالات محاسباتی^۱ که بر پایه پیوستگی رژیم جریان توسعه پیدا نموده از جایگاه ویژه‌ای برخوردار می‌باشد. در این روش حوزه محاسباتی به اجزاء کوچکی تجزیه گردیده و معادلات ریاضی با روش‌هایی نظیر المان محدود^۲ و حجم محدود^۳ گسسته می‌گردند. پس از آن یک برنامه محاسباتی به منظور حل معادلات جبری بوجود آمده استفاده می‌شود [۱]. همچنین، چندین نرم‌افزار تجاری بر پایه روش فوق توسعه پیدا نموده‌اند که از آن جمله می‌توان به فلوئنت^۴، سی اف ایکس^۵ و استار سی دی^۶ بر پایه روش حجم محدود و کامسول^۷ بر اساس روش المان محدود اشاره نمود.

در مقیاس میکروسکوپی^۸ ذرات تشکیل دهنده ماده (اتم یا مولکول) در نظر گرفته شده است و برای هر ذره سرعت و مکان مشخص می‌شود. بنابراین برای تحلیل بایستی نیروهای بین ذرات در نظر گرفته شود.

^۱ - Computational fluid dynamic

^۲ - Finite element

^۳ - Finite volume

^۴ - Fluent

^۵ - CFX

^۶ - STAR-CD

^۷ - COMSOL

^۸ - Microscopic

دما، فشار، گرانی، ظرفیت گرمایی و ... برای هر ذره تعریف نمی‌شود. دما و فشار به انرژی داخلی ذره (سرعت و جرم) و فرکانس آن مربوط می‌شود. این روش را دینامیک مولکولی^۹ می‌نامند. روش شبکه بولتزمن با دارا بودن قابلیت تحلیل مسائل در مقیاس میکروسکوپی و میکروسکوپی تحولی نو را در این عرصه بوجود آورده است. شکل ۱-۱ به این مهم اشاره دارد.

۲-۱ تاریخچه روش شبکه بولتزمن

روش شبکه بولتزمن اولین بار در سال ۱۹۸۸ توسط مک نامارا و زانتی^{۱۰} [۲] به منظور غلبه بر نواقص شبکه گاز^{۱۱} ارائه شد. بنابراین مبدا روش شبکه بولتزمن را می‌توان روش شبکه گاز دانست که این روش تنها قادر به بررسی اثرات هیدرودینامیکی می‌باشد [۳]. در سال‌های اخیر روش شبکه بولتزمن تبدیل به یک روش عددی قدرتمند با توانایی شبیه‌سازی میدان دما و جریان [۴]، جریان‌های چند فازی [۵]، جریان‌های آشفته [۶] و جریان‌های در ابعاد میکرو و نانو گردیده است. در حالی که معادلات ناویراستوکس با وجود پیچیدگی‌هایی نظیر جریان در محیط‌های متخلخل^{۱۲}، جریان‌های رقیق گازی، جریان با مرزهای هندسی پیچیده، احتراق پیش‌آمیخته^{۱۳} و ... کارایی خود را از دست می‌دهد، روش شبکه بولتزمن قادر به تحلیل جریان‌ها در مقیاس میکروسکوپی و میکروسکوپی می‌باشد.

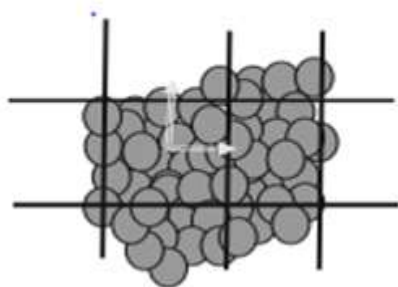
^۹ - Molecular Dynamics (MD)

^{۱۰} - McNamara and Zanetti

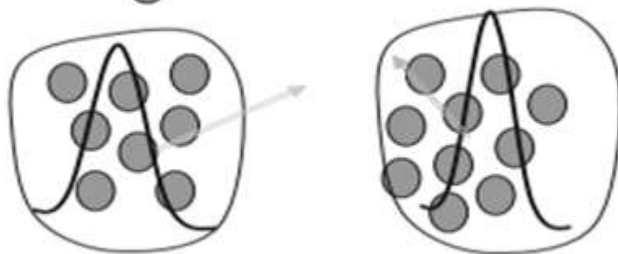
^{۱۱} - Lattice gas cellular automata

^{۱۲} - Porous media

^{۱۳} - Premixed-flame



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۱-۱ (الف) روش‌های پیوسته (حجم محدود، المان محدود) و معادلات تاویر استوکس (ب) روش شبکه بولتزمن (ج) روش دینامیک ملکولی $[M]$

این روش با استفاده از توابع توزیع^{۱۴}، احتمال حضور یک ذره در زمان و مکان مشخصی را به کار می‌گیرد. در نتیجه، برخلاف روش دینامیک ملکولی^{۱۵}، رفتار و موقعیت تک تک مولکول‌ها مورد بررسی قرار نمی‌گیرد. به عبارت دیگر، اثر کلی حضور مولکول‌ها در توابع توزیع ذرات در نظر گرفته می‌شود. بر این اساس، می‌توان روش شبکه بولتزمن را پلی میان روش‌های میکروسکوپیکی نظیر روش حجم محدود به منظور حل عددی معادلات ناویراستوکس و روش دینامیک ملکولی دانست. الگوریتم روش شبکه بولتزمن

¹⁴ - Distribution functions

¹⁵ - Molecular dynamics

دارای ویژگی‌هایی است که آن را از روش‌های عددی سنتی برای حل میدان جریان متمایز می‌نماید که برخی از این ویژگی‌ها به شرح زیر می‌باشد:

۱- جمله جابجایی^{۱۶} در این روش خطی می‌باشد در حالی که در معادلات ناویراستوکس این موضوع متفاوت است.

۲- فشار در روش شبکه بولتزمن توسط معادله حالت و یا با استفاده از تابع توزیع فشار بدست می‌آید. در حالی که در حل معادلات ناویراستوکس، فشار با تبدیل معادله پیوستگی به رابطه‌ای برای تصحیح فشار استخراج می‌گردد که پیچیدگی‌ها و خطاهای خاص خودش را دارد.

۳- در مقایسه با روش‌هایی نظیر DSMC، روش شبکه بولتزمن از جهت‌های حرکتی محدودتری استفاده می‌نماید. این ویژگی باعث می‌شود که انتقال از فضای توابع توزیع به کمیت‌های ماکروسکوپیک با سادگی و سرعت بیشتری صورت پذیرد.

با وجود این مزایا، از معایب روش شبکه بولتزمن به موارد زیر می‌توان اشاره کرد:

- ضعف در شبیه‌سازی جریان‌های با اعداد ماخ بالا.
 - وابستگی روابط ارائه شده به نوع شبکه انتخابی در اعمال شرایط مرزی.
- با این وجود، در سال‌های اخیر گام‌های ارزشمندی به منظور رفع نواقص فوق انجام گرفته که دستاوردهای چشمگیری نیز به همراه داشته است.

۳-۱ مدل‌های روش شبکه بولتزمن

روش شبکه بولتزمن از دو مرحله انتشار^{۱۷} و برخورد^{۱۸} تشکیل شده است. در حالی که مرحله انتشار در همه مدل‌های روش یکسان است، مرحله برخورد می‌تواند بهبود پیدا نموده و مزایا و معایبی را به روش

¹⁶ - Advection

¹⁷ - Propagate

اضافه نماید. روش بهاتناگار- گروس- کروک^{۱۹} که به نام روش یک زمان آسایش^{۲۰} (SRT) شناخته می- شود توسط کیان^{۲۱} و همکاران [۸] توسعه پیدا نموده است. از جمله ویژگی‌های این روش سادگی اعمال و هزینه محاسباتی پایین آن می‌باشد. این مدل تنها از یک زمان آسایش بهره می‌برد که در نتیجه امکان تعریف گرانروی دینامیکی^{۲۲} و گرانروی حجمی^{۲۳} جریان به‌صورت مجزا وجود نداشته و مقدار آن در محاسبات برابر قرار داده می‌شود. گرانروی حجمی در معادلات ناویراستوکس برای جریان‌های تراکم‌پذیر اهمیت پیدا می‌کند. این پارامتر با توجه به گرانروی ثانویه سیال به‌صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$\mu_B = \lambda - \frac{2}{3}\mu \quad (1-1)$$

همچنین، شرط مرزی دیوار استفاده شده در این روش وابسته به گرانروی می‌باشد که از جمله نواقص روش محسوب می‌شود. در نتیجه، در شبیه‌سازی جریان‌های رقیق گازی در رژیم جریان لغزشی و انتقالی که لغزش سرعت از اهمیت بالایی برخوردار می‌باشد، می‌بایست از مدل‌های پیشرفته‌تر نظیر مدل زمان- های آسایش چندگانه^{۲۴} (MRT) استفاده نمود. مدل زمان‌های آسایش چندگانه اولین بار توسط دیهامیرس^{۲۵} [۹] معرفی گردید. از جمله مزایای مدل می‌توان به امکان تعریف گرانروی حجمی و دینامیکی به‌صورت مجزا اشاره نمود. در این روش مرحله برخورد از چند زمان آسایش استفاده می‌نماید. در نتیجه، تمامی پارامترهای دخیل در معادلات ناویراستوکس از جمله گرانروی دینامیکی، چگالی، گرانروی حجمی، عدد پرانتل و غیره به نحو مطلوب کنترل می‌گردند. از دیگر مزایای روش می‌توان به پایداری عددی بالا و شرایط مرزی بهبود یافته آن اشاره نمود. با این وجود، هزینه محاسباتی بالا که حدود

¹⁸ - Collision

¹⁹ - Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)

²⁰ - Single relaxation time (SRT)

²¹ - Qian

²² - Dynamic viscosity

²³ - Bulk viscosity

²⁴ - Multiple relaxation times (MRT)

²⁵ - d'Humieres

۲۰ درصد بالاتر از روش SRT می‌باشد، و همچنین، پیچیدگی‌های کدنویسی آن باعث گردیده است تا مورد استقبال بسیاری از محققین قرار نگیرد. از سوی دیگر، رابطه مشخصی برای برخی زمان‌های آسایش مورد استفاده در این روش ارائه نگردیده و میزان تاثیر آن‌ها روی جواب نهایی ناشناخته باقی مانده است که این مورد موجب دشواری استفاده از این روش گردیده است.

۴-۱ مروری بر کارهای گذشته

با گذشت حدود دو دهه از انتشار اولین مقالات در رابطه با استفاده از روش شبکه گاز در مکانیک سیالات، هم‌اکنون روش شبکه بولتزمن به‌طور گسترده در بخش‌های مختلف از جمله جریان سیال، چگالش، نانو سیال، احتراق، تابش و ... مورد استفاده قرار گرفته است. اخیراً با استفاده از میان‌یابی مشکلات این روش با هندسه‌های پیچیده نیز از میان برداشته شده است و جریان در هندسه‌های پیچیده نیز با تقریب بسیار خوبی با روش شبکه بولتزمن تحلیل می‌شود. در این بخش به‌طور خلاصه توضیحاتی در مورد کاربردهای روش و ویژگی‌های آن در حوزه مکانیک سیالات آورده شده است.

۱-۴-۱ جریان با هندسه ساده

در شبیه‌سازی جریان تک‌فاز و هم‌دما، پایداری عددی، دقت و هزینه محاسباتی روش شبکه بولتزمن قابل مقایسه با روش‌های سنتی حل میدان جریان نظیر روش حجم محدود می‌باشد [۱۰]. در این زمینه، هو^{۲۶} و همکاران [۱۱] به شبیه‌سازی جریان درون محفظه^{۲۷} دو بعدی با استفاده از روش شبکه بولتزمن پرداختند. مطالعه آن‌ها محدوده وسیعی از اعداد رینولدز از ۱۰ تا ۱۰۰۰۰ را مورد بررسی قرار می‌دهد. گزارش گردیده است که خطا در نتایج کمتر از یک درصد می‌باشد. همچنین هو [۱۲] جریان آرام درون محفظه سه‌بعدی را شبیه‌سازی نموده و بیان نموده است که تطابق خوبی بین نتایج روش و نتایج

²⁶ - Hou

²⁷ - Cavity

آزمایشگاهی برقرار می‌باشد. از دیگر جریان‌های ساده می‌توان به جریان آرام حول استوانه در رینولدز بین ۰/۵ تا ۳۰۰ با استفاده از روش‌های حجم محدود و شبکه بولتزمن اشاره نمود که توسط برنزدورف^{۲۸} [۱۳] مورد مطالعه قرار گرفته است.

۱-۴-۲ جریان با هندسه پیچیده

از جمله نقاط قوت مدل شبکه بولتزمن می‌توان به توانایی آن در شبیه‌سازی جریان‌های با مرزهای هندسی پیچیده اشاره نمود به‌طوری که این روش به‌عنوان یک روش مزوسکوپیک^{۲۹} توانایی قابل ملاحظه‌ای در شبیه‌سازی جزئیات رفتار جریان و انتقال گونه‌های شیمیایی در جریان‌های با هندسه پیچیده و همچنین محیط‌های متخلخل را دارا می‌باشد. از جمله محدودیت‌های روش حجم محدود، دشواری تعیین موانع جامد درون فضای سیال می‌باشد. برای این منظور معمولاً گرانشی محیط جامد بی-نهایت در نظر گرفته شده و تنش برشی دیوار وارد ضرایب ماتریس سه‌بعدی می‌شود. این روش دقت و انرژی زیادی از برنامه‌نویس طلب می‌نماید.

در مقابل، یکی از نقاط قوت روش شبکه بولتزمن استفاده از شرط مرزی موسوم به عقب‌گرد^{۳۰} می‌باشد که نقش عمده‌ای در محبوبیت این روش داشته است. با استفاده از این شرط مرزی، روش قادر به مدل کردن مرزهای جامد پیچیده خواهد بود. در فصل دوم، این مورد به‌طور کامل بحث گردیده است. در زمینه مطالعه جریان‌های پیچیده، سوشی و همکاران [۱۴] از روش شبکه بولتزمن به‌منظور شبیه‌سازی جریان در محیط متخلخل سه‌بعدی استفاده نمود. همچنین، ماچادو^{۳۱} [۱۵] به شبیه‌سازی جریان در محیط متخلخل دو بعدی با نسبت تخلخل ۸۸/۵ و ۹۵ درصد پرداخته و نتایج مربوط به افت فشار در هر حالت را

²⁸ - Bernsdorf

²⁹ - Mesosvopic

³⁰ - Bounce back

³¹ - Machado

با نتایج آزمایشگاهی اسپاداسینی^{۳۲} [۱۶] مقایسه نموده است. براین اساس تطابق خوبی بین نتایج شبیه-سازی انجام شده به روش شبکه بولتزمن و نتایج آزمایشگاهی مشاهده شده است. یوشینو اینامورو^{۳۳} [۱۷] به بررسی پدیده‌های انتقال در محیط‌های متخلخل سه‌بعدی پرداختند. هدف آن‌ها بررسی ویژگی‌های انتقال حرارت در محیط‌های متخلخل بوده که برای تحقق این امر از روش شبکه بولتزمن بهره برده‌اند.

۱-۴-۳ احتراق^{۳۴}

احتراق نتیجه‌ی یک فرایند شیمیایی گرمازا میان یک ماده سوختنی و عامل اکسید کننده است که با تولید گرما و تغییر شیمیایی مواد اولیه همراه می‌شود. فرایند احتراق بسیار پیچیده است. احتراق شامل فرایندهایی مانند اغتشاش، اختلاط، انتقال حرارت، تابش و واکنش شیمیایی می‌باشد. با توجه به اینکه احتراق شامل این فرایندهای متفاوت است علاوه بر یک موضوع ترکیبی، موضوعی با چالش‌های فراوان می‌باشد [۱۸]. در روش‌های سنتی با حل معادلات ناویراستوکس و پیوستگی به همراه معادلات انرژی^{۳۵} و انتقال جرم^{۳۶} شبیه‌سازی احتراق انجام می‌گرفت. این معادلات به‌صورت همزمان با روش‌های عددی نظیر دینامیک سیالات محاسباتی مدل‌سازی می‌شد. از دیگر پیچیدگی‌های شبیه‌سازی فرایند احتراق می‌توان به چند مرحله‌ای بودن واکنش‌های احتراقی اشاره کرد که باعث می‌شود تعداد معادلات برای دستیابی به حل دقیق افزایش یابد. اخیراً روش شبکه بولتزمن موفقیت‌های چشمگیری را در تحلیل احتراق با هندسه‌های مختلف کسب کرده است. این روش با استفاده از معادلات ساده بولتزمن زمان تحلیل فرایند احتراق را نسبت به روش دینامیک سیالات محاسباتی به‌طور قابل توجهی کاهش داده است. علاوه بر این، روش شبکه بولتزمن در تحلیل احتراق پیش‌آمیخته با دقت بهتری عمل می‌کند.

³² - Spadaccini

³³ - Yoshino & Inamuro

³⁴ - Combustion

³⁵ - Energy equation

³⁶ - Mass Transfer

در احتراق پیش‌آمیخته، سوخت و هوا قبل از ورود به محفظه احتراق با یکدیگر مخلوط می‌شوند. شعله در احتراق پیش‌آمیخته نسبت به شعله‌ی احتراق غیر پیش‌آمیخته^{۳۷} دارای انرژی بیشتر و حجم کمتر می‌باشد و به دلیل تولید نیتروژن اکسید کمتر در احتراق پیش‌آمیخته، در دو دهه اخیر این گونه از احتراق بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱۹]. تحلیل کامل احتراق به وسیله روش شبکه بولتزمن همواره به عنوان یک چالش مطرح بوده است. یکی از دلایل این امر تغییرات شدید چگالی در حین واکنش احتراق است. تحلیل جریان‌هایی که تغییرات شدید چگالی دارند به وسیله روش شبکه بولتزمن با ناپایداری‌های عددی شدیدی همراه است. این ناپایداری در رینولدزهای بالا بیشتر است.

با مروری به کارهای پیشین در زمینه مطالعه جریان‌های همراه با واکنش شیمیایی به روش شبکه بولتزمن می‌توان رهیافت‌های متفاوتی را در این زمینه مشاهده نمود. برای نمونه، هندسه دو بعدی دارای واکنش شیمیایی سطحی، به وسیله مدلی نسبتاً پرهزینه از روش شبکه بولتزمن آنتروپیک^{۳۸} توسط آرسیادیاکونو^{۳۹} و همکاران مدلسازی گردیده است [۲۰]. در این کار از سلول نه سرعتی D2Q9، که در آن اعداد ۲ و ۹ به ترتیب نشان‌دهنده بعد جریان و جهت‌های مجاز حرکت ذره می‌باشد، برای حل معادلات بقاء گونه‌ها در واکنش تجزیه سوخت متان استفاده گردیده است.

یاماموتو^{۴۰} و همکاران [۲۱] جزء اولین کسانی بودند که به شبیه‌سازی احتراق توسط روش شبکه بولتزمن پرداخته و نشان دادند که تطابق خوبی بین نتایج روش آن‌ها و روش تفاضل محدود تراکم‌ناپذیر برقرار می‌باشد. با این وجود، در کار آن‌ها به‌طور کامل از روش شبکه بولتزمن استفاده نشده و از یک مدل شبکه بولتزمن کوپل شده به‌منظور تعیین تغییرات چگالی استفاده گردیده است. از جمله مشکلات موجود در کار

³⁷ - Non premixed-flame

³⁸ Entropic lattice boltzmann

³⁹ - Arcidiacono

⁴⁰ - Yamamoto

فوق می‌توان نیاز به تراکم مش بالا به‌منظور تأمین شرایط پایداری حل اشاره نمود که موجب بالا رفتن هزینه محاسباتی می‌گردد.

چن^{۴۱} و همکاران [۲۲] با وابسته نمودن گام زمانی و سرعت مشخصه ذرات به دمای بیشینه سیستم نشان دادند که روش آن‌ها از پایداری عددی بسیار مطلوب‌تری حتی در تراکم مش‌های پایین و دماهای کاری بالا برخوردار می‌باشد. همچنین، آن‌ها با وابسته نمودن گرانشی سیال به دما دقت نتایج را نیز بهبود دادند. به‌طور کلی کار فوق را می‌توان به‌عنوان یکی از جامع‌ترین کارهای موجود در زمینه مدلسازی احتراق به روش شبکه بولتزمن دانست. همچنین، آن‌ها اثر میدان جریان بر واکنش شیمیایی روی سطح جامد را برای مطالعه واکنش‌های زمین‌شناسی بررسی کردند. سوشی [۱۳] و همکاران، جریان به همراه واکنش شیمیایی، با استفاده از مدل ۲۴ سرعته FCHC که شامل دو متغیر اسکالر دما و کسر جرمی بود، را تحلیل کردند. فیلیپو و همکارانش [۲۳] روش جدیدی را برای احتراق در اعداد ماخ پایین ارائه کردند. میدان جریان با روش شبکه بولتزمن و معادلات انرژی و گونه‌ها به روش تفاضل محدود حل شد. مدل آن-ها قابلیت تحلیل شرایط چگالی متغیر را دارا بود که در مسائل احتراق فاکتور مهمی است اما به‌طور کامل از روش شبکه بولتزمن استفاده نمی‌کند و تنها میدان جریان توسط این روش حل می‌شود.

جین^{۴۲} و همکاران [۲۴] در سال ۱۹۹۸ به مطالعه پایداری شعله‌های پیش‌آمیخته توسط جت مخالف پرداختند. آن‌ها معادله زیر را برای جدایش شعله با استفاده از سوخت گازی بیان کردند:

$$\phi = 0.4 \left[\frac{V_m}{F \cdot \sqrt{d_j}} \right]^{0.2} \quad (2-1)$$

چو^{۴۳} و همکاران [۲۵] در سال ۲۰۰۹ با بررسی روی بهبود پایداری شعله‌ها و کاهش NO_x در احتراق پیش‌آمیخته ضعیف با اضافه کردن هیدروژن به نتایج مهمی دست یافتند. آن‌ها نشان دادند که در احتراق

⁴¹ - Chen

⁴² Jin

⁴³ Cho

پیش‌آمیخته ضعیف به علت اینکه احتراق در نزدیکی حد پایین اشتعال پذیری اتفاق می‌افتد شعله‌های تشکیل شده ناپایدارند. همچنین نشان دادند، با افزودن مقدار کمی هیدروژن به سوخت، پایداری شعله در دمای پایین اتفاق می‌افتد و موجب افزایش رادیکال‌های OH می‌شود که ناحیه قابل اشتعال را توسعه می‌دهد. آن‌ها به طور کلی اضافه کردن هیدروژن را عامل پایداری شعله و کاهش انتشار NO معرفی کردند.

ماکاندا^{۴۴} و همکاران [۲۶] در سال ۱۹۹۲ با تحقیق روی پایداری شعله‌های پیش‌آمیخته آرام دو بعدی خطی، تحت گرانش صفر دریافتند که خواص انتقالی متغیر، پایداری و طول موج بحرانی را با ضریب ۲/۵- ۲ افزایش می‌دهند. نتایج نشان می‌دهند که طول موج ناپایای بحرانی برای مخلوط استوکیومتریک هیدروژن- هوا حدود ۱/۹ - ۱/۸ میلی‌متر است.

روش یاماموتو و همکارانش [۲۱] مدل ساده‌ای برای تحلیل احتراق پیش‌آمیخته پروپان در یک محفظه با جریان مخالف^{۴۵} ارائه می‌کند. در این مدل فرض شده است که احتراق به صورت تک‌مرحله‌ای انجام می‌گیرد و همچنین واکنش شیمیایی روی میدان جریان تأثیر نمی‌گذارد. چگالی در این مدل ساده فرض شده است و برای تحلیل جریان از معادله توزیع فشار که در ادامه توضیح داده خواهد شد، استفاده شده است.

۱-۵ هدف پژوهش

امروزه فرایند احتراق در صنایع مختلف، محیط اطراف و حتی زندگی روزمره ما وجود دارد. روش‌های مختلفی برای تحلیل این فرایند معرفی شده است. به طور کلی فرایند احتراق به دلیل پیچیدگی‌هایی که در آن وجود دارد بدون کمک کامپیوتر تقریباً غیر قابل تحلیل می‌باشد. یکی از بهترین روش‌ها برای تحلیل

⁴⁴ Mukunda

⁴⁵ - Counter flow

فرایند احتراق استفاده از روش‌های عددی می‌باشد. با توجه به محدودیت‌های موجود در زمان و هزینه، همواره روش‌هایی که از این لحاظ عملکرد بهتری داشته‌اند بیشتر مورد علاقه کارشناسان و محققین بوده است.

به دلیل وجود فرایندهای احتراقی، مصرف انرژی در دنیا به شدت افزایش یافته است. از این رو توسعه فرایندهای احتراقی با مصرف انرژی و تولید آلاینده‌های کمتر به یکی از زمینه‌های پژوهشی مورد علاقه‌ی بسیاری از محققین تبدیل شده است. یکی از روش‌های کاربردی، استفاده از احتراق پیش‌آمیخته کم-سوخت در مشعل‌ها می‌باشد. احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت علاوه بر کاهش در مصرف انرژی، به دلیل دمای پایین‌تر محصولات احتراقی، گازهای آلاینده کمتری تولید کرده و مانع از افزایش دمای محیط و به تبع آن پدیده گرمایش زمین می‌شوند. در کنار فواید فراوان استفاده از این نوع احتراق در مشعل‌ها، معایب و موانعی برای کاربردی کردن این روش وجود دارد. به دلیل این‌که در احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت گرما آزاد شده در فرایند احتراق پایین می‌باشد لذا شعله در این نوع احتراق دچار نوسان و ناپایداری شده و در نهایت خاموش می‌شود. یکی از چالش‌های استفاده از این روش احتراقی، پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته همزمان با حفظ درجه حرارت بالای شعله و قدرت خروجی مشعل است.

تحلیل عددی احتراق به کمک روش دینامیک سیالات محاسباتی بر پایه حل معادلات پیوستگی، ناویراستوکس، انرژی و انتقال جرم می‌باشد که باعث می‌شود پیچیدگی‌های زیادی وارد مسئله شود. اخیراً روش شبکه بولتزمن گام بلندی در راستای تحلیل جریان‌های واکنشی برداشته است. در این روش به جای حل معادلات پیچیده ناویراستوکس از معادله توزیع بولتزمن استفاده می‌شود. یکی از مزایای این روش تحلیل احتراق پیش‌آمیخته با دقتی بیش از روش دینامیک سیالات محاسباتی است که این امر با مقایسه دو روش با مدل آزمایشگاهی مشخص می‌شود. در احتراق پیش‌آمیخته شعله تشکیل شده بسیار باریک بوده که این شعله با روش دینامیک سیالات محاسباتی با خطای نسبتاً زیادی تشکیل می‌شود.

هدف از پژوهش، بررسی پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت پروپان به‌وسیله روش شبکه بولتزمن و به کمک نرم‌افزار فلوئنت می‌باشد. در تحلیل جریان، با توجه به شرط خروجی فشار ثابت، در مرز خروجی به علت وجود جریان برگشتی، نتایج با مقداری خطا همراه است. برای این منظور از مدل دوبعدی D2Q9 استفاده شده است. هندسه انتخاب شده برای مشعل، هندسه جدیدی است که در کارهای آزمایشگاهی برای بررسی پایداری شعله پیش‌آمیخته از آن استفاده شده است که در پژوهش حاضر این هندسه در شبکه لتیس بولتزمن مدل شده است و پایداری شعله به روش عددی بررسی می‌شود و تأثیر تغییر موقعیت تزریق هوا در یک مشعل لایه‌ای، اثر افزایش و یا کاهش نسبت هم‌ارزی و تغییرات سرعت روی پایداری شعله مورد بررسی قرار گرفته است. در این پروژه از مدل آرنیوس برای محاسبه پارامترهای احتراق استفاده شده است.

فصل دوم:

مبانی روش شبکه بولتزمن

فصل دوم: مبانی روش شبکه بولتزمن

۱-۲ مقدمه

همان گونه که در فصل قبل اشاره شد، روش شبکه بولتزمن قابلیت حل معادله بولتزمن را دارا می باشد. معادله بولتزمن را در شکل کلی می توان به صورت زیر بیان نمود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F}{m} = \Omega(f_1, f_2) \quad (1-2)$$

در رابطه فوق $f(x, v, t)$ بیانگر تابع توزیع ذره ای با سرعت v در موقعیت x و زمان t می باشد. همچنین F نمایانگر نیروی خارجی و m جرم ذره می باشد. سمت راست معادله (۱-۲) جمله برخورد نامیده شده که تغییر در تابع توزیع در نتیجه برخورد میان دو ذره را نشان می دهد و به صورت زیر ارائه گردیده است [۲۷]:

$$\Omega(f_1, f_2) = \int_{R^3} \int_S |V \cdot n| (f_1' f_2' - f_1 f_2) dndv_1 \quad (2-2)$$

در این رابطه دو ذره قبل از برخورد با اعداد ۱ و ۲ و ذرات پس از برخورد با ۱' و ۲' مشخص گردیده اند و V سرعت نسبی ذره ۲ (v_2) نسبت به ذره ۱ (v_1) می باشد. همچنین، انتگرال روی فضای سه بعدی R^3 و سطح خارجی نیم کره S انجام می پذیرد.

با توجه به پیچیده بودن جمله برخورد، حل تحلیلی معادله بولتزمن بدون استفاده از فرضیات ساده کننده غیرممکن می باشد. به همین دلیل چند مدل به منظور تقریب زدن این جمله پیشنهاد گردیده است. در این میان یکی از پر کاربردترین روابط، مدل پیشنهادی توسط بهاتناگار-گروس-کروک می باشد که به منظور خطی نمودن جمله برخورد ارائه گردیده است. جمله برخورد با استفاده از تقریب BGK به صورت زیر بیان می گردد [۲۷]:

$$\Omega(f_1, f_2) = -\frac{f - f^{eq}}{\zeta} \quad (3-2)$$

در رابطه فوق ζ زمان آسایش مدل و f^{eq} تابع توزیع تعادلی ذرات، ماکسول-بولتزمن^{۴۶}، می باشد که از رابطه زیر قابل محاسبه می باشد:

$$\exp\left[-\frac{Mu^2}{2KT}\right] = \frac{M}{(2\pi KT)^{3/2}} f^{eq} \quad (4-2)$$

که در آن K ، M ، u و T به ترتیب ثابت بولتزمن، جرم ملکولی، سرعت متوسط حرارتی ملکول ها^{۴۷} و دما می باشند. در نهایت معادله بولتزمن با استفاده از تقریب BGK و با صرف نظر از نیروهای خارجی به صورت زیر ساده می گردد:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\zeta} \quad (5-2)$$

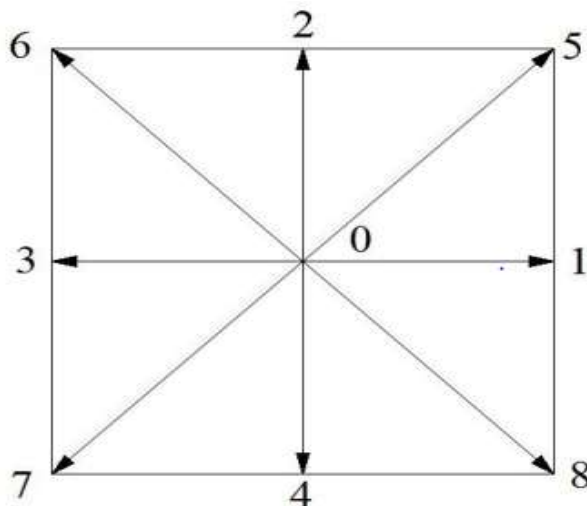
با محدود نمودن درجه آزادی حرکت ذرات در فضا، می توان به جای انتگرال گیری از معادله فوق، از سری-های متناهی استفاده نمود. ایده اصلی این موضوع به روش شبکه گاز برمی گردد، که توسط فریش^{۴۸} و همکاران [۲۸] معرفی شده است. همچنین، بسیاری از نواقص موجود در شبکه گاز در روش شبکه بولتزمن برطرف گردیده است. به منظور حل مسائل یک، دو و سه بعدی سلول های متفاوتی با درجات آزادی مختلف پیشنهاد گردیده است. در این میان سلول D2Q9 یکی از محبوب ترین سلول ها در شبیه سازی جریان های دو بعدی به شمار می رود که با دقت قابل قبولی به نتایج معادلات ناویراستوکس همگرا می گردد. عبارت D2 بیانگر بعد جریان و Q9 جهت های مجاز برای حرکت ذرات را نشان می دهد. همچنین، در صورت استفاده از سلول های مرتبه بالاتر نظیر D2Q12، نتایج روش به سمت نتایج معادله اصلی بولتزمن همگرا خواهد گردید. به همین دلیل گفته می شود که به منظور شبیه سازی جریان های

⁴⁶ - Maxwell-boltzmann

⁴⁷ - Mean thermal velocity of molecules

⁴⁸ - Frisch

رقیق گازی سلول D2Q9 کافی نبوده و می‌بایست از سلول‌های مراتب بالاتر استفاده نمود. واضح است که با افزایش جهت‌های حرکت ذره، هزینه محاسباتی نیز افزایش خواهد یافت. در نتیجه، سلول انتخابی می‌بایست متناسب با مسئله مورد مطالعه انتخاب گردد. ساختار سلول D2Q9 و جهت‌های مجاز حرکت ذره در شکل ۱-۲ نمایش داده شده است:



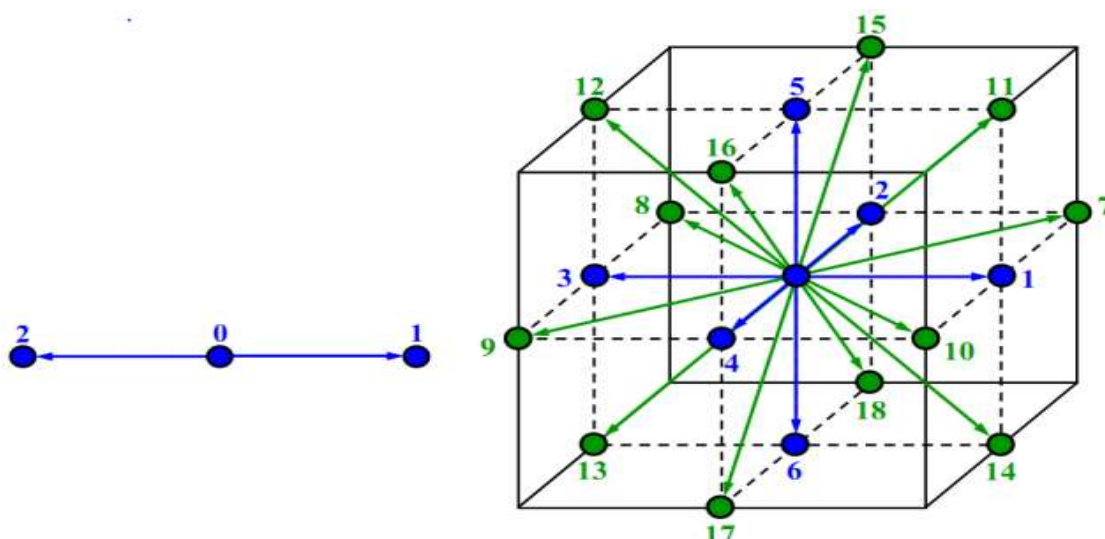
شکل ۱-۲: ساختار سلول دو بعدی D2Q9 و جهت‌های مجاز

که در آن e_i سرعت گسسته شده می‌باشد و به صورت زیر ارائه گردیده است:

$$\begin{aligned} e_0 &= 0 \\ e_{1-4} &= c(\cos((i-1)\pi/2), \sin((i-1)\pi/2)) \\ e_{5-8} &= \sqrt{2}c(\cos((i-5)\pi/2 + \pi/4), \sin((i-5)\pi/2 + \pi/4)) \end{aligned} \quad (۶-۲)$$

در رابطه فوق $c = \delta x / \delta t$ سرعت مشخصه شبکه می‌باشد. همچنین δx و δt به ترتیب گام مکانی و زمانی را مشخص می‌نماید. در کار حاضر از سلول D2Q9 در شبیه‌سازی میدان جریان، دما و معادلات انتقال گونه‌ها استفاده گردیده است. از دیگر سلول‌های پرکاربرد برای مسائل یک‌بعدی و سه‌بعدی می‌توان به D1Q3 و D3Q19 اشاره نمود که به ترتیب در شکل (۲-۲) و شکل (۳-۲) نشان داده شده است. در این سلول‌ها جهت صفر e_0 ذره در حال سکون را نشان می‌دهد. با استفاده از سرعت‌های گسسته شده و مدل BGK معادله بولتزمن به صورت زیر قابل ارائه خواهد بود:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_i \cdot \nabla f_i = -\frac{f_i + f_i^{eq}}{\varsigma} \quad (7-2)$$



شکل ۲-۲: سلول $D1Q3$

شکل ۲-۳: سلول $D3Q19$

این شکل از معادله بولتزمن که مدل سرعت گسسته شده^{۴۹} [۲۹] نامیده می‌شود در مقایسه با فرم اصلی معادله بولتزمن به سادگی توسط الگوریتم‌های عددی قابل حل می‌باشد. در صورت استفاده از روش تفاضل محدود، به‌منظور گسسته نمودن رابطه فوق و با در نظر گرفتن گام زمانی δt و گام مکانی δx معادله‌ای به‌صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$\begin{aligned} \frac{f(x, t + \delta t) - f(x, t)}{\delta t} + e_i \cdot \frac{f(x + \delta x, t + \delta t) - f(x, t + \delta t)}{\delta x} \\ = -\frac{1}{\varsigma} [f(x, t) - f^{eq}(x, t)] \end{aligned} \quad (8-2)$$

با توجه به رابطه $\delta x = e_i \delta t$ رابطه فوق به شکل زیر ساده می‌گردد:

$$f_i(x + e_i \delta t, t + \delta t) = f_i(x, t) + \frac{f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t)}{\tau} \quad (9-2)$$

⁴⁹ - Discret velocity model

در این رابطه $\tau = \zeta/\delta t$ زمان آسایش بی‌بعد شده و X بیانگر مختصات در فضای گسسته شده می‌باشد. این رابطه با نام معادله بولتزمن همراه با مدل BGK و یا اصطلاحاً مدل $LBGK$ شناخته می‌شود. در معادله (۹-۲) تابع توزیع تعادلی f^{eq} به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$f^{eq} = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{e_i \cdot u}{c^2} + \frac{9(e_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right] \quad (۱۰-۲)$$

که در آن ρ و u به ترتیب چگالی و سرعت ماکروسکوپی جریان می‌باشند و به صورت زیر محاسبه می‌گردند:

$$\rho = \sum_{i=0} f_i \quad (۱۱-۲)$$

$$\rho u = \sum_{i=0} e_i f_i \quad (۱۲-۲)$$

ضمناً ω_i ضرایب وزنی مدل می‌باشند که برای سلول $D2Q9$ به صورت زیر ارائه می‌گردد:

$$\omega_i = \begin{cases} 4/9 & i = 0 \\ 1/9 & i = 1, 2, 3, 4, \\ 1/36 & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (۱۳-۲)$$

معادلات بولتزمن روشی برای حل معادلات ناویراستوکس نیز می‌باشد که توسط بسط چپمن-انسکاگ^{۵۰} این عمل صورت می‌گیرد [۳۰]. با انجام این فرایند، گرانیروی سینماتیک در واحد شبکه بولتزمن به صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$v = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \delta t \quad (۱۴-۲)$$

که در آن $c_s = c/\sqrt{3}$ سرعت صوت در واحد شبکه بولتزمن می‌باشد. در این رابطه c سرعت ذره می‌باشد که برابر $\frac{dx}{dt}$ می‌باشد. ضریب آسایش τ بایستی همواره بزرگتر از 0.5 باشد در غیر این صورت مقدار گرانیروی سینماتیک منفی می‌شود که غیر قابل قبول می‌باشد. در صورتی که مقدار τ به مقدار 0.5 نزدیک شود، حل به سوی ناپایداری خواهد رفت [۳۱].

در حل مسائل به روش شبکه بولتزمن عموماً فشار با توجه به مقدار چگالی و قانون گاز کامل به دست می‌آید. در مسائلی که جریان غیر قابل تراکم فرض شود، می‌توان تابع توزیع فشار را به صورت زیر تعریف کرده و چگالی را در تمام حوزه حل ثابت در نظر گرفت. یاماموتو و همکارانش [۲۱] برای تحلیل جریان در کار خود از این روش استفاده نمودند. از مزایای استفاده از تابع توزیع فشار می‌توان به سادگی عملکرد در شرط مرزی فشار ثابت اشاره کرد که در صورت استفاده از تابع توزیع جریان، استفاده از این شرط مشکلاتی را در پایداری حل ایجاد می‌کند. تعریف تابع توزیع فشار مانند تابع توزیع چگالی می‌باشد و تنها تابع توزیع تعادلی آن به شکل رابطه ۲-۱۵ تغییر خواهد کرد.

$$p_i(x + e_i \delta t, t + \delta t) = p_i(x, t) + \frac{p_i^{eq}(x, t) - p_i(x, t)}{\tau} \quad (2-15)$$

$$p^{eq} = \omega_i \left[p + p_0 \left(3 \frac{e_i \cdot u}{c^2} + \frac{9(e_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right) \right]$$

ضرایب وزنی تابع توزیع فشار مانند تابع توزیع جریان با توجه به رابطه ۲-۱۳ تعیین می‌شود:

$$p_i = \omega_i P \quad (2-16)$$

P و u به ترتیب فشار و سرعت ماکروسکوپی جریان می‌باشند و به صورت زیر محاسبه می‌گردند:

$$P = \sum_{i=0} P_i \quad (2-17)$$

$$P_0 u = \sum_{i=0} e_i P_i$$

که در روابط ۲-۱۷ پارامتر P_0 ثابت یا فشار محیط بوده و به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$P_0 = \rho_0 C_s^2 \quad (2-18)$$

که در رابطه فوق ρ_0 چگالی ثابت می‌باشد که معمولاً در حل مسائل می‌تواند برابر یک در نظر گرفته شود.

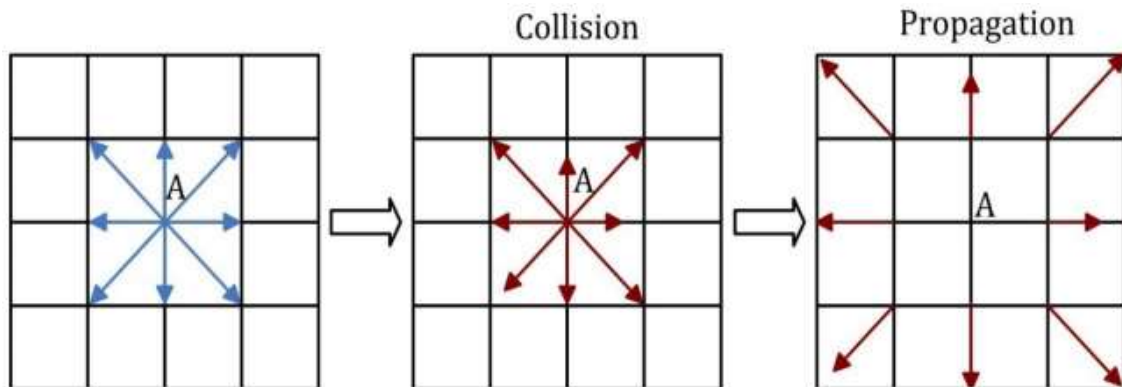
۲-۲ الگوریتم حل

در عمل معادله شبکه بولتزمن (رابطه (۲-۹)) طی دو مرحله به صورت زیر حل می شود:

$$\tilde{P}_i(x, t) = \tilde{P}_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (P_i(x, t) - P_i^{eq}(x, t)) \quad \text{گام برخورد:}$$

$$P_i(x + e_i \delta x, t + \delta t) = \tilde{P}_i(x, t) \quad \text{گام انتشار:}$$

در این رابطه $\tilde{P}$ تابع توزیع فشار پس از برخورد^{۵۱} را مشخص می نماید. همان گونه که مشاهده می گردد، مرحله برخورد فقط از داده های درون هر سلول استفاده می کند به طوری که در محاسبات این مرحله هیچ گونه وابستگی به اطلاعات سلول های مجاور وجود ندارد. این امر باعث شده است که روش شبکه بولتزمن به عنوان روشی کارآمد در پردازش موازی و به منظور تحلیل جریان های پیچیده با حجم محاسباتی بالا معرفی و مورد استفاده قرار گیرد. در مرحله انتشار، تابع توزیع معلوم در جهت های مجاز حرکت ذره به گره های مجاور منتقل می گردد. شکل ۲-۴ به طور شماتیک نحوه تغییرات توابع توزیع طی انجام دو مرحله فوق را نشان می دهد.



شکل ۲-۴: نمایش برخورد و انتشار توابع توزیع.

⁵¹ - Post collision distribution function

به‌طور کلی الگوریتم حل شبکه بولتزمن به دو روش می‌تواند ارائه گردد: روش برخورد- انتشار، که در آن ابتدا مرحله برخورد انجام گرفته و سپس توابع توزیع پس از برخورد به گره‌های مجاور جابجا می‌شوند، و روش انتشار- برخورد، که عکس فرایند فوق می‌باشد. می‌توان نشان داد که هر دو روش نتیجه یکسانی خواهد داشت و در کار حاضر از روش برخورد- انتشار استفاده گردیده است. شکل ۲-۵ یک فلوچارت معمولی از این روش را نشان می‌دهد. در صورت نیاز به شبیه‌سازی حرارتی و انتقال گونه‌ها، زیر برنامه‌های مربوط به صورت مشابه در برنامه گنجانده خواهد شد. لازم به ذکر است که در برخی از موارد و به ویژه در مسائل پیچیده می‌توان ترتیب زیر برنامه‌های ارائه شده در شکل ۲-۵ را بنا بر شرایط مسئله مورد مطالعه تغییر داده و بهبود بخشید. در این پروژه از زبان برنامه‌نویسی فرترن^{۵۲} جهت تحلیل احتراق به وسیله روش شبکه بولتزمن براساس فلوچارت شکل ۲-۵ استفاده شده است.

۳-۲ تبدیل واحد

واحد پارامترها و متغیرهای مورد استفاده در شبکه بولتزمن با واحدهای این متغیرها در شرایط فیزیکی متفاوت است. بنابراین، جهت کار با این روش بایستی ابتدا تمامی متغیرها و پارامترها از واحد فیزیکی به واحد شبکه بولتزمن تبدیل کرد. مراحل زیر، که در آن زیرنویس L بیانگر واحدهای شبکه و P بیانگر واحدهای فیزیکی می‌باشد، برای درک بهتر جریان درون یک کانال با شرایط زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$H_P = 0.1 \text{ m}$$

$$u_P = 0.1 \text{ m/s}$$

$$v_P = 10^{-5} \text{ m/s}^2$$

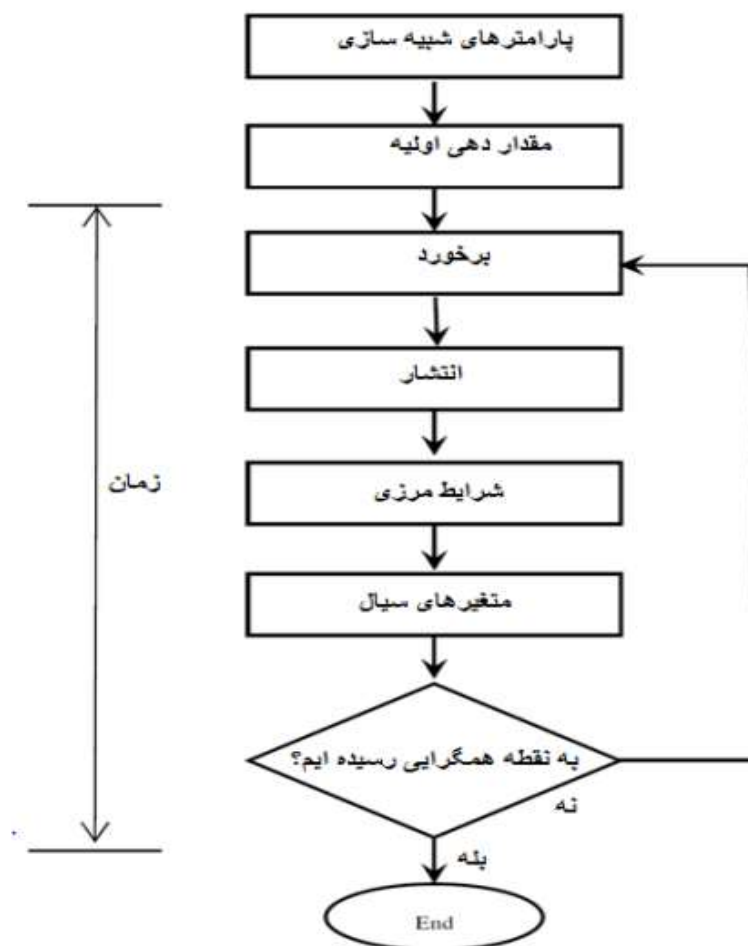
(۱۹-۲)

در روابط فوق H ، u و v به ترتیب عرض کانال، سرعت ورودی و گرانشی سینماتیک سیال می‌باشد. در نتیجه عدد رینولدز برابر خواهد بود با:

⁵² - Fortran 90

$$Re_p = \frac{u_p H_p}{\nu_p} = \frac{0.1 \times 0.1}{10^{-5}}$$

(۲۰-۲)



شکل ۲-۵: فلوچارت روش شبکه بولتزمن

معمولا برای سادگی محاسبات، گام زمانی و گام مکانی در واحد شبکه بولتزمن به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$\delta t_L = 1 \quad ts \quad (۲۱-۲)$$

$$\delta x_L = 1 \quad lu \quad (۲۲-۲)$$

عبارت های ts و lu اغلب برای مشخص نمودن واحدهای شبکه آورده می شوند. در مسائل ساده، گام زمانی و مکانی واحد قادر به تامین پایداری و دقت مورد نیاز می باشد ولی در مسائل پیچیده تر و به ویژه

شیه‌سازی احتراق، انتخاب گام زمانی مناسب لازمه تضمین شرایط پایداری حل می‌باشد [۲۷]. فرض می‌کنیم که تعداد گره‌ها در عرض کانال به صورت زیر باشد:

$$N_y = 90 \quad (2-23)$$

در نتیجه عرض کانال در واحد شبکه بولتزمن 90 lu می‌باشد. رابطه بین گام مکانی فیزیکی و گام مکانی شبکه را می‌توان به صورت زیر بیان نمود:

$$\frac{\delta x_P}{\delta x_L} = \frac{\text{Length in Physical unites}}{\text{Length in Lattice unites}} \quad (2-24)$$

با استفاده از رابطه فوق، گام مکانی در مقیاس فیزیکی با تقسیم طول مرجع در واحد فیزیکی به طول مرجع در واحد شبکه بولتزمن به دست می‌آید:

$$\delta x_P = \frac{0.1}{90} \times 1.0 = 1.11 \times 10^{-3} \text{ m} \quad (2-25)$$

سپس مقداری دلخواه برای زمان آسایش با توجه به محدوده اشاره شده ($0.5 < \tau < 2$) به منظور پایداری حل انتخاب می‌شود:

$$\tau = 0.6 \quad (2-26)$$

از معادله (۲-۱۴) گرانی سینماتیک در واحد شبکه به صورت زیر به دست می‌آید:

$$v_L = 0.03334 \frac{\text{lu}^2}{\text{ts}} \quad (2-27)$$

رابطه بین گرانی فیزیکی و گرانی شبکه را می‌توان به صورت زیر بیان نمود:

$$v_L = v_P \times \frac{\delta t_P}{\delta x_P^2} \quad (2-28)$$

در نتیجه گام زمانی فیزیکی را می‌توان محاسبه نمود:

$$\delta t_P = v_L \times \frac{\delta x_P^2}{v_P} = 4.107 \times 10^{-3} \text{ s} \quad (2-29)$$

سرعت ورودی در واحد شبکه بولتزمن به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$u_L = u_P \times \frac{\delta t_P}{\delta x_P} = 0.37 \quad (۳۰-۲)$$

با استفاده از پارامترهای به دست آمده در واحد شبکه، عدد رینولدز محاسبه می‌شود:

$$Re_L = \frac{u_L \times (\text{Channel height})}{\nu_L} = \frac{0.048 \times 70}{0.03334} = 1000 = Re_P \quad (۳۱-۲)$$

همان‌گونه که مشاهده می‌گردد عدد رینولدز به دست آمده از پارامترهای شبکه برابر با رینولدز فیزیکی است که نشان‌دهنده صحت عملیات تبدیل واحد می‌باشد. در انتها، عدد ماخ^{۵۳} نیز می‌بایست مورد بررسی قرار گردد، زیرا اثبات گردیده است که معادله شبکه بولتزمن با شرایط اشاره شده تنها در صورتی معادلات ناویراستوکس را ارضا می‌نماید که عدد ماخ به‌طور قابل ملاحظه‌ای کوچکتر از یک باشد:

$$Ma_L = \frac{u_L}{C_s} = \frac{0.37}{1/\sqrt{3}} = 0.63 < 1 \quad (۳۲-۲)$$

عدد ماخ بدست آمده خیلی کوچک نیست که باعث می‌شود خطای بیشتری بین روش شبکه بولتزمن و روش سنتی ایجاد شود. هرچه عدد ماخ کوچکتر باشد دقت محاسبات افزایش خواهد یافت. افزایش عدد ماخ همچنین می‌تواند باعث ناپایداری حل گردد. به منظور کاهش دادن عدد ماخ می‌توان تعداد گره‌ها (N_y) را افزایش و یا ضریب آسایش τ را کاهش داد. از سوی دیگر، ضریب آسایش می‌بایست همواره بزرگتر از ۰/۵ باشد. در نتیجه به منظور شبیه‌سازی به روش شبکه بولتزمن ابتدا می‌بایست پارامترهای بهینه حل انتخاب گردد. در شبیه‌سازی جریان‌های همراه با انتقال حرارت و گونه‌های شیمیایی انتخاب بهینه این پارامترها گاه می‌تواند فرایندی زمان‌بر و دشوار باشد. در نهایت نیز پارامترهای به دست آمده در واحد شبکه، در مرحله پس‌پردازش^{۵۴} دوباره به واحدهای فیزیکی تبدیل می‌گردند.

⁵³ Mach

⁵⁴ - Post processing

۴-۲ حدس اولیه

یک حدس اولیه مناسب می‌تواند موجب کاهش زمان حل و همچنین تامین پایداری عددی کد گردد. یکی از قدرتمندترین روش‌ها در اعمال شرط اولیه در روش شبکه بولتزمن، طرح تعادلی می‌باشد. در این روش توابع توزیع از طریق مقادیر تعادلی آن‌ها مقدار دهی اولیه می‌شوند [۳۰].

$$f_i(t_0) = f_i^{eq}(\rho_0, u_0) \quad (۳۳-۲)$$

در این رابطه ρ_0 و u_0 به ترتیب چگالی و سرعت در زمان اولیه طرح می‌باشند. واضح است که برای مسائل حالت پایا، حل نهایی مستقل از حدس اولیه می‌باشد و حدس اولیه تعادلی فوق به‌خوبی قابل استفاده می‌باشد. در مسائل گذرا، که حساسیت بالایی نسبت به حدس اولیه وجود دارد، این روش ممکن است با خطا همراه باشد. در نتیجه در مسائل گذرا می‌توان از روش‌های دقیق‌تری نظیر روش غیر تعادلی و یا روش تکراری^{۵۵} بهره برد [۳۰].

۵-۲ شرایط مرزی

شرایط مرزی نقش تعیین کننده‌ای در دینامیک سیالات دارا می‌باشد. به‌طور کلی، این شرایط به‌صورت متغیرهای جریان نظیر سرعت، فشار، دما و غیره مشخص می‌گردند. این در حالی است که متغیرهای حل در روش شبکه بولتزمن توابع توزیع می‌باشند که این موضوع متفاوت با معادلات ناویراستوکس است. در این روش، کمیت‌هایی نظیر سرعت و چگالی به راحتی می‌توانند از توابع توزیع محاسبه گردند اما عکس عملیات فوق می‌تواند دشوار باشد. بنابراین، ضروری است که روشی به منظور تبدیل شرایط مرزی از متغیرهای جریان به توابع توزیع به کار گرفته شود. برخی مطالعات نشان می‌دهد که شرایط مرزی اعمال شده به روش شبکه بولتزمن به‌طور قابل توجهی بر دقت، پایداری و همگرایی روش تاثیرگذار می‌باشد

⁵⁵ - Iterative method

[۳۰]. در نتیجه، اعمال شرایط مرزی از موضوعات چالش برانگیز در این روش محسوب می‌گردد. در این بخش قواعد کلی به منظور اعمال این شرایط در مسائل هم‌دما ارائه می‌گردد و شرایط مرزی حرارتی و گونه‌های شیمیایی نیز در بخش مربوط به خود توضیح داده خواهد شد.

همان‌گونه که اشاره گردید مقادیر ماکروسکوپیک جریان نظیر چگالی و سرعت، از جمع توابع توزیع حاصل می‌گردد. با وجود این، روی نقاط مرزی این عملیات می‌بایست به‌صورت معکوس انجام گیرد. به عبارت دیگر روی مرز، متغیرهای ماکروسکوپیک جریان می‌بایست به مقادیر معادل توابع توزیع برگردانده شود. بدین منظور، روش‌های متعددی جهت اعمال شرایط مرزی در روش شبکه بولتزمن ارائه گردیده است. پنج نوع شرط مرزی در تحلیل مسائل میدان جریان به روش شبکه بولتزمن در ادامه بررسی می‌شود:

۱- شرط مرزی ورودی.

۲- شرط مرزی خروجی (فشار ثابت و جریان توسعه یافته).

۳- شرط مرزی دیوار، برای دیواره‌های ثابت و متحرک و موانع در برابر حرکت جریان. همچنین، شرط مرزی لغزش، که معمولاً در جریان‌های رقیق گازی استفاده می‌گردد، نیز در این دسته قرار می‌گیرد.

۴- شرط مرزی تناوبی^{۵۶}.

۵- شرط مرزی تقارن^{۵۷}.

در این بخش به‌طور خلاصه شرایط مرزی مناسب برای مدل LBGK مرور گردیده است. به دلیل استفاده از معادله توزیع فشار برای تحلیل میدان جریان، شرایط مرزی بر اساس این تابع توزیع معرفی خواهد شد.

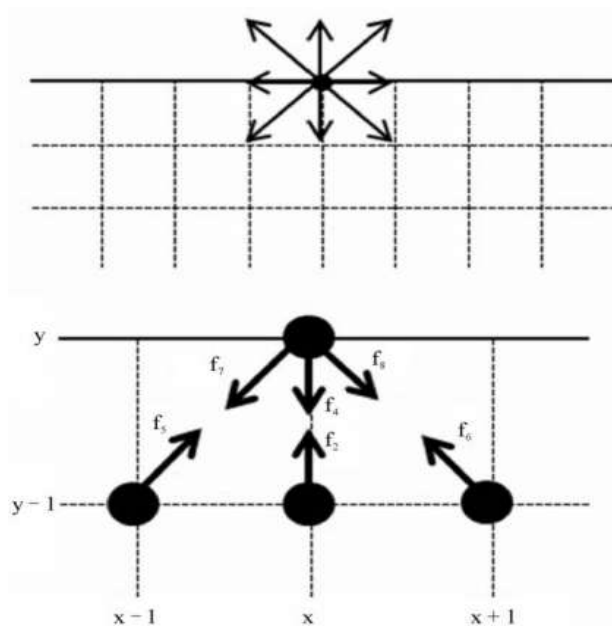
⁵⁶ - Periodic
⁵⁷ - Symmetric

۲-۵-۱ شرط مرزی دیوار

در حل معادلات ناویراستوکس به روش حجم محدود، دیوارها از طریق اعمال شرط مرزی عدم لغزش مشخص می‌گردند. در روش شبکه بولتزمن برهم‌کنش بین ذره و مرز جامد به‌منظور ارضا نمودن شرط عدم لغزش توسط مدل عقب‌گرد صورت می‌پذیرد. در این روش فرض می‌گردد ذره با برخورد به دیوار در جهت معکوس به دامنه حل بازگرداده می‌شود. به‌طور کلی به دو صورت متفاوت می‌توان روش عقب‌گرد را در کد اعمال نمود. در روش اول (شکل ۲-۶)، دیوار جامد دقیقاً روی مرکز گره قرار می‌گیرد. ثابت گردیده است که این روش دارای دقتی از مرتبه یک می‌باشد [۲۷]. در این روش مرحله برخورد روی تمامی گره‌ها از جمله گره‌های دیوار انجام گرفته و پس از آن شرط مرزی عقب‌گرد به گره‌های قرار گرفته روی دیوار اعمال می‌گردد.

به عنوان نمونه، استفاده از این روش برای دیوار بالای کانال که در شکل ۲-۶ نمایش داده شده است، به گونه زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} p(4, i, N_y) &= p(2, i, N_y) \\ p(7, i, N_y) &= p(5, i, N_y) \\ p(8, i, N_y) &= p(6, i, N_y) \end{aligned} \quad (2-34)$$



شکل ۲-۶: روش عقب‌گرد استاندارد

P تابع توزیع فشار می‌باشد. ملاحظه می‌گردد که در روش عقب‌گرد، تکانه^{۵۸} ذره پس از برخورد به دیوار نسبت به تکانه قبل از برخورد آن معکوس شده است. به راحتی می‌توان نشان داد که در نتیجه اعمال این روش سرعت مماسی و عمودی روی دیوار صفر خواهد شد. این شرط مرزی معادل شرط عدم لغزش در شرایط فیزیکی نیز می‌باشد.

همان‌گونه که مشاهده می‌شود شرط مرزی عقب‌گرد به راحتی قابل اعمال بوده که این امر به طور ویژه سبب محبوبیت بیشتر روش شبکه بولتزمن در بین محققین علاقه‌مند به شبیه‌سازی جریان‌های با هندسه پیچیده مانند محیط‌های متخلخل گشته است. زیبایی این روش در این نکته است که هر اندازه هندسه مسئله پیچیده باشد تغییر چندانی در برنامه‌نویسی آن ایجاد نمی‌نماید. در نتیجه برای شبیه‌سازی جریان در محیط متخلخل کافی است تصویری از محیط تهیه گردیده و سپس توسط یک نرم‌افزار پردازش تصویر مانند متلب^{۵۹}، نواحی جامد و سیال به کد اصلی شناسانده شده و محاسبات آغاز گردد.

⁵⁸ - Momentum
⁵⁹ - Mathlab

با وجود سادگی، گزارش گردیده است که به کار بردن شرط عقب‌گرد در روش شبکه بولتزمن با یک زمان آسایش می‌تواند با خطا همراه باشد [۳۲]. به بیان دیگر، اثبات گردیده است که با افزایش زمان آسایش τ ، شرط مرزی عقب‌گرد قادر به ارائه عدم لغزش روی دیوار نبوده و سرعت مماسی روی دیوار را مقداری غیر از صفر گزارش می‌دهد که نوعی خطای عددی تلقی می‌گردد. لازم به ذکر است که این نقص با بکارگیری مدل‌های پیشرفته‌تر روش شبکه بولتزمن مانند روش زمان‌های آسایش چندگانه و یا استفاده از شرایط مرزی دقیق‌تر برطرف گردیده است. برای شبیه‌سازی مرزهای منحنی معمولاً از روش‌های میانجی‌ابی استفاده می‌گردد.

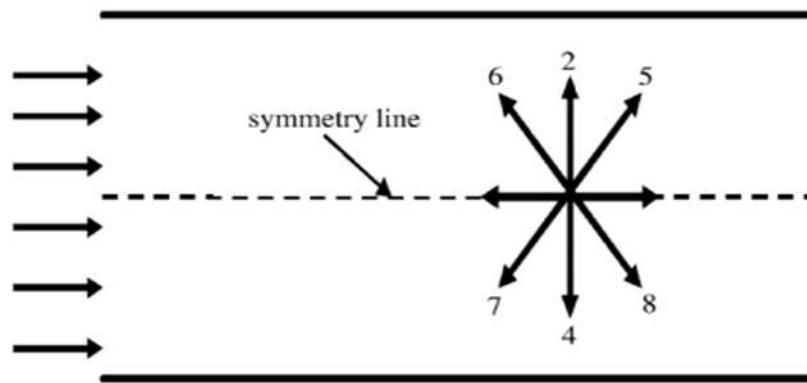
۲-۵-۲ شرط مرزی تقارن^{۶۰}

در روش شبکه بولتزمن مانند روش دینامیک سیالات محاسباتی می‌توان برای هندسه‌های متقارن مسئله را برای یک قسمت مدل‌سازی کرد و سپس برای کل هندسه تعمیم داد. در این صورت خطوط تقارن مسئله با شرط مرزی تقارن یا آینه^{۶۱} تعریف می‌شود [۷]. تفاوت شرط مرزی تقارن با شرط مرزی دیوار در این است که در شرط مرزی دیوار جریان برخورد کننده به دیوار در راستای برخورد بازگشت می‌کند اما در شرط مرزی تقارن مرز مورد نظر را مانند آینه تخت فرض کرده و توابع توزیع مقابل هم با یکدیگر برابر در نظر گرفته می‌شود. نمونه‌ای از اعمال این شرط در شکل ۲-۷ به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} p(4, i, N_y) &= p(2, i, N_y) \\ p(7, i, N_y) &= p(6, i, N_y) \\ p(8, i, N_y) &= p(5, i, N_y) \end{aligned} \quad (2-35)$$

⁶⁰ - Symmetry boundary condition

⁶¹ - Mirror



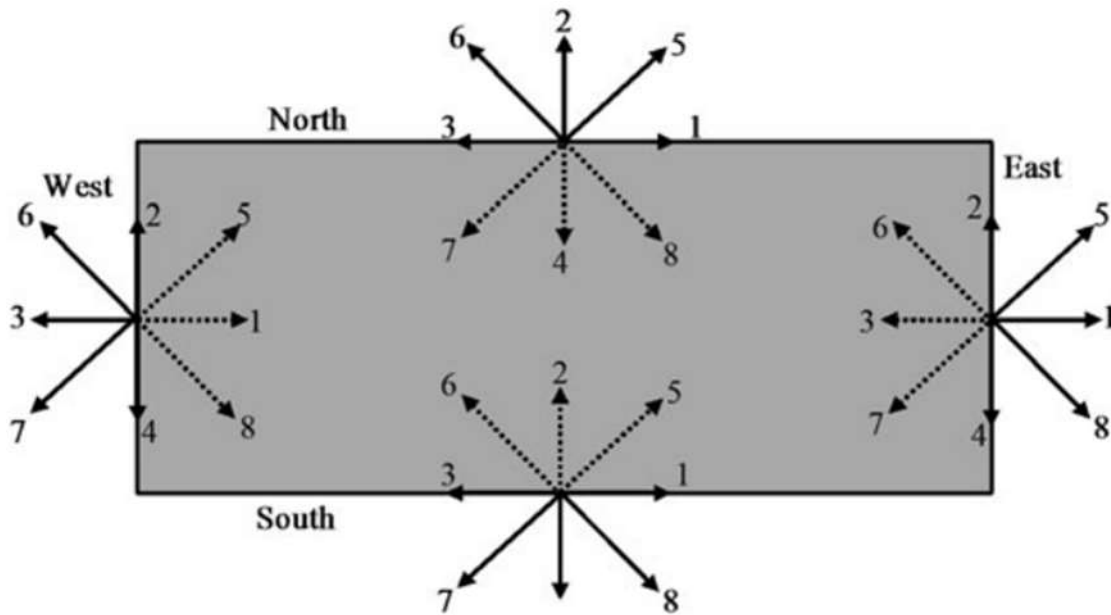
شکل ۲-۷: شرط مرزی تقارن

۲-۵-۳ شرط مرزی ورودی

در کار حاضر از شرط مرزی سرعت در ورودی استفاده گردیده است. برای این منظور، فرض می‌شود که سرعت در ورودی محفظه u_x می‌باشد. این شرط با به‌کارگیری روش پیشنهادی توسط زو و هی^{۶۲} [۳۳] اعمال می‌شود. همان‌گونه که در شکل ۲-۸ مشخص گردیده است، با توجه به اینکه مرز ورودی در هندسه مورد نظر برای تحلیل احتراق، مرز غربی می‌باشد، اعمال شرط مرزی ورودی برای مرز غربی توضیح داده می‌شود. در مرز غربی توابع توزیع $p_0, p_2, p_3, p_4, p_6, p_7$ که با خط توپر مشخص گردیده‌اند، از مرحله انتشار معلوم بوده و توابع توزیع p_1, p_5, p_8 که با خط چین مشخص شده‌اند، مقادیر مجهول می‌باشند که می‌بایست از طریق شرط مرزی ورودی تعیین گردند. به‌طور مثال برای شرط مرزی غربی داریم:

$$\begin{aligned} P_W &= p_0 + p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6 + p_7 + p_8 \\ P_0 u_y &= p_2 + p_5 + p_6 - p_4 - p_7 - p_8 = 0 \\ P_0 u_x &= p_1 + p_5 + p_8 - p_3 - p_6 - p_7 \end{aligned} \quad (۲-۳۶)$$

در روابط فوق p_1, p_5, p_8 و P_W نامعلوم و سایر مقادیر معلوم می‌باشند. معادلات فوق را می‌توان به صورت زیر مرتب نمود:



شکل ۲-۸: توابع توزیع در مرزهای مختلف

$$p_1 + p_5 + p_8 = P_W - (p_0 + p_2 + p_3 + p_4 + p_6 + p_7)$$

$$p_5 - p_8 = p_4 + p_7 - p_2 - p_6 \quad (۳۷-۲)$$

$$p_1 + p_5 + p_8 = P_0 u_x + p_3 + p_6 + p_7$$

از روابط فوق فشار در ورودی به صورت زیر تعیین می گردد:

$$P_W = P_0 u_x + 2 \times (p_3 + p_6 + p_7) + p_0 + p_2 + p_4 \quad (۳۸-۲)$$

حال مقادیر p_8 , p_5 , p_1 مجهول می باشد. به منظور حل نمودن دستگاه معادله فوق به یک رابطه دیگر نیاز می باشد. مدل های مختلفی به منظور اضافه نمودن یک رابطه و در نتیجه قابل حل شدن دستگاه معادلات (۳۷-۲) ارائه گردیده است [۳۳]. یکی از مدل ها روش عقب گرد غیر تعادلی^{۶۳} توابع توزیع در جهت عمود به مرز می باشد. این روش در واقع بیانگر این مطلب است که توابع توزیع ورودی و خروجی به مرز به یک اندازه از مقدار تعادلی خود انحراف دارند. بنابراین با مساوی قرار دادن انحراف از تعادل برای توابع توزیع در جهت های ۱ و ۳ رابطه زیر به دست می آید:

⁶³ - Non-equilibrium bounce back

$$p_1 - p_1^{eq} = p_3 - p_3^{eq} \quad (39-2)$$

فرض فوق اولین بار توسط زو و هی [۳۳] مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از این رابطه مقدار p_1 به راحتی محاسبه می‌گردد:

$$p_1 = p_3 + \frac{2}{3} P_0 u_x \quad (40-2)$$

با معلوم شدن مقدار p_1 ، مقادیر p_5 و p_8 نیز به صورت زیر قابل محاسبه می‌باشند:

$$p_5 = p_7 - \frac{1}{2}(p_2 - p_4) + \frac{1}{6} P_0 u_x \quad (41-2)$$

$$p_8 = p_6 + \frac{1}{2}(p_2 - p_4) + \frac{1}{6} P_0 u_x \quad (42-2)$$

لازم به ذکر است در میان چند شرطی که به عنوان ورودی معرفی گردیده است، روش زو و هی به دلیل دقت و پایداری آن، از محبوبیت بالایی برخوردار می‌باشد. در این پروژه برای شرط مرزی ورودی در غرب فرض گردیده که سرعت در راستای Y در ورودی صفر می‌باشد و جریان به صورت افقی وارد می‌شود.

۴-۵-۲ شرط مرزی خروجی

در خروجی که در واقع مرز شرقی مسئله است، از شرط فشار ثابت استفاده گردیده است [۲۱]. زیرا فرض توسعه یافتگی در هندسه مسئله با خطای زیادی همراه خواهد بود. در این روش مقدار فشار در گره خروجی با توجه به شرایط مسئله تعیین می‌شود.

با توجه به معلوم بودن فشار در خروجی پنج مجهول باقی خواهد ماند که عبارتند از u_y, u_x ، برای p_7, p_6, p_3 به دست آوردن مجهولات فوق ابتدا فرض می‌شود سرعت عمودی گره مرزی برابر سرعت عمودی گره مرزی مجاور در گام زمانی قبلی است.

$$u_y(N_x, y) = u_y^*(N_x - 1, y) \quad (43-2)$$

که در این معادله * برای نشان دادن گام زمانی قبلی می‌باشد. سپس با معلوم بودن سرعت‌ها سایر مجهولات با استفاده از معادله کمکی در راستای X به‌صورت زیر محاسبه خواهد شد.

$$p_3 = p_1 - \frac{2}{3} P_0 u_x \quad (44-2)$$

$$P_E = p_0 + p_1 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6 + p_7 + p_8$$

$$P_0 u_y = p_2 + p_5 + p_6 - p_4 - p_7 - p_8 \quad (45-2)$$

$$P_0 u_x = p_1 + p_5 + p_8 - p_3 - p_6 - p_7$$

در روابط فوق p_3, p_6, p_7, u_x نامعلوم و سایر مقادیر معلوم می‌باشند. P_E فشار خروجی در واحد شبکه بولتزمن می‌باشد. روابط ۴۵-۲ را به‌صورت زیر می‌توان مرتب نمود:

$$p_3 + p_6 + p_7 = P_E - (p_0 + p_1 + p_2 + p_4 + p_5 + p_8)$$

$$p_6 - p_7 = P_0 u_x - p_2 - p_5 + p_4 + p_8 \quad (46-2)$$

$$p_3 + p_6 + p_7 = p_1 + p_5 + p_8 - P_0 u_x$$

با جایگذاری رابطه ۴۴-۲ در سومین معادله در رابطه ۴۶-۲ سرعت خروجی در راستای X به‌دست می‌آید.

$$u_x = \frac{1}{P_0} (p_0 + p_2 + p_4 + 2(p_1 + p_5 + p_8)) - \frac{P_0}{P_E} \quad (47-2)$$

بنابراین مقدار P_3 از رابطه ۴۳-۲ قابل محاسبه خواهد بود. با معلوم شدن مقدار P_3 و جایگذاری آن در رابطه ۴۶-۲ مقادیر p_6 و p_7 به دست می‌آیند:

$$p_7 = p_5 + \frac{1}{2} (p_2 - p_4) - \frac{1}{6} P_0 u_x - \frac{1}{6} P_0 u_y \quad (48-2)$$

$$p_6 = p_8 - \frac{1}{2} (p_2 - p_4) - \frac{1}{6} P_0 u_x + \frac{1}{6} P_0 u_y \quad (49-2)$$

۶-۲ میدان دما و غلظت

در بسیاری از مسائل کاربردی، انتقال حرارت و جرم با جریان همراه می‌باشد [۱]. پس از حل معادلات میدان جریان در روش شبکه بولتزمن به روش حل میدان دما پرداخته خواهد شد. معادلات توزیع دما و

کسر جرمی نیز با استفاده از معادله بولتزمن استخراج می‌شوند. البته با توجه به اینکه کمیت‌های دما و کسر جرمی اسکالر^{۶۴} هستند تابع توزیع تعادلی متفاوت خواهد بود.

مانند میدان جریان، معادله انتقال حرارت و کسر جرمی در روش شبکه بولتزمن به صورت زیر بیان می‌گردد [۲۱]:

$$g_i(x + e_i \delta t, t + \delta t) = g_i(x, t) - \frac{1}{\tau_g} [g_i(x, t) - g_i^{eq}(x, t)] + w_i Q_T \quad (۵۰-۲)$$

$$F_{i,Y_j}(x + e_i \delta t, t + \delta t) = F_{i,Y_j}(x, t) - \frac{1}{\tau_{Y_j}} [F_{i,Y_j}(x, t) - F_{i,Y_j}^{eq}(x, t)] + w_i \omega_i \quad (۵۱-۲)$$

$$g_i^{eq} = w_i \cdot T \left(1 + 3 \frac{(e_{\alpha} \cdot u)}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_{\alpha} \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right) \quad (۵۲-۲)$$

$$F_{i,Y_j}^{eq} = w_i \cdot Y_j \left(1 + 3 \frac{(e_{\alpha} \cdot u)}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_{\alpha} \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right) \quad (۵۳-۲)$$

برای به دست آوردن مقادیر دما و کسر جرمی از تابع توزیع بولتزمن از روابط ۲-۵۴ استفاده می‌شود:

$$T = \sum_i g_i \quad i = 0,8 \quad (۵۴-۲)$$

$$Y_j = \sum_i F_{Y_j,i} \quad i = 0,8$$

نرخ کلی واکنش در کار انجام شده براساس رابطه آرنیوس به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$W_{ov} = K_{ov} \cdot C_{C_3H_8} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (۵۵-۲)$$

در رابطه ۲-۵۳، K_{ov} نرخ واکنش که برای پروپان مقدار ثابت $9.9 \times 10^{-3} \text{ cm}^3/\text{mol.s}$ است، C_l میزان غلظت مولی گونه j ، E انرژی فعالسازی واکنش، R ثابت جهانی گازها و برای 8.315 J/mol.K و T دمای محلی بر حسب K می‌باشد. جمله‌های چشمه Q_T و ω_i به ترتیب جملات چشمه در معادلات دما و گونه می‌باشند، که به صورت زیر محاسبه می‌گردند:

⁶⁴ - Scalar

$$Q_T = \frac{Q \cdot w_{ov}}{\rho C_p} \quad (۵۶-۲)$$

$$\omega_i = a_j \cdot M_j w_{ov}$$

که در این رابطه ضرایب a_i همان ضرایب استوکیومتری گونه مورد نظر می‌باشند. همچنین M_i جرم ملکولی، w_{ov} نرخ کلی واکنش در واحد فیزیکی می‌باشد که با توجه به دما و غلظت واکنش‌دهنده‌ها برای هر گره محاسبه می‌شود. برای به دست آوردن غلظت مولی هر گونه از رابطه زیر استفاده شده است:

$$C_j = \frac{\rho_0 \cdot Y_j}{M_j} \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (۵۷-۲)$$

که در آن C_j (mol/m^3) غلظت گونه j و T_0 (K) دمای محیط می‌باشد. برای تعیین ضریب پخش حرارت و جرم در مقیاس شبکه بولتزمن از روابط زیر استفاده شده است:

$$\alpha = \frac{2\tau_T - 1}{6} c^2 \delta t \quad (۵۸-۲)$$

$$D_j = \frac{2\tau_{Y_j} - 1}{6} c^2 \delta t \quad (۵۹-۲)$$

در رابطه‌های بالا α و D_j به ترتیب ضریب پخش حرارت مخلوط و ضریب پخش جرم برای گونه j در فضای شبکه می‌باشند و τ_T و τ_{Y_j} به ترتیب زمان آسایش معادلات انتقال حرارت و جرم می‌باشند.

۲-۶-۱ شرایط مرزی دما

در این بخش نحوه اعمال شرایط مرزی معادله انرژی و گونه در روش شبکه بولتزمن توضیح داده خواهد شد. یکی از ساده‌ترین انواع شرایط مرزی در روش شبکه بولتزمن طرح تعادلی می‌باشد. در این روش توابع توزیع مجهول روی مرز از مقادیر تعادلی آن منتج می‌شود. با توجه به اینکه توابع توزیع تعادلی تنها به کمیت‌های ماکروسکوپی نظیر دمای مرز و سرعت جریان در مرز وابسته می‌باشد، مقادیر توابع توزیع تعادلی روی مرز همواره معلوم می‌باشد (به جز شرط خروجی). ایده اصلی این روش از آنجا به وجود آمده

است که با همگرا شدن حل، توابع توزیع با مقادیر تعادلی خود برابر خواهند شد. در کار حاضر از طرح تعادلی استفاده نشده است، زیرا در طی واکنش احتراق مقادیر ماکروسکوپیک نظیر دما به شدت تغییر کرده و در صورتی که از مقادیر مرزی برابر با مقدار تعادلی در نظر گرفته شود، نتایج با خطای قابل توجهی مواجه شد.

۲-۱-۶-۲ ورودی (دما ثابت)

در ورودی از یک طرح غیر تعادلی به صورت زیر استفاده شده است. اگر مرز ورودی مرز غربی باشد توابع توزیع g_1, g_5, g_8 مجهول بوده و بایستی محاسبه گردد، برای محاسبه مجهولات از این مفهوم که اختلاف مقدار توابع توزیع با مقدار نهایی آن که $g_i(x, y) = T_{in} \cdot W_i$ در هر راستا با هم برابرند، استفاده شده است. به عبارت دیگر مقدار انحراف از تعادل برای توابع توزیع روی مرز در هر راستا ثابت خواهد بود.

$$g_i(x, y) = T \cdot W_i \quad (۶۰-۲)$$

$$g_1(0, y) = T_{in}(W_1 + W_3) - g_3(0, y)$$

$$g_5(0, y) = T_{in}(W_5 + W_7) - g_7(0, y) \quad (۶۱-۲)$$

$$g_8(0, y) = T_{in}(W_8 + W_6) - g_6(0, y)$$

این طرح یکی از ساده‌ترین روش‌ها برای اعمال شرط مرزی ورودی برای مسائل ماکروسکوپیک می‌باشد.

۲-۱-۶-۲ تقارن

به‌طور مشابه، توابع توزیع گره‌های دیوار مانند شرط آینه در میدان جریان با یکدیگر برابر خواهند بود، به‌طور مثال برای مرز جنوبی این شرط به صورت زیر اعمال شده است:

$$g_2(x, 0) = g_4(x, 0)$$

$$g_5(x, 0) = g_8(x, 0) \quad (۶۲-۲)$$

$$g_6(x, 0) = g_7(x, 0)$$

این شرط در واقع بیانگر برابر بودن دما در دو طرف مرز تقارن و یا شرط بی‌دررو خواهد بود.

۲-۶-۱-۳ خروجی (عدم گرادیان)

به منظور تعیین متغیر اسکالر دما در خروجی از شرط مرزی عدم گرادیان استفاده گردیده است. بدین منظور فرض می‌گردد که توابع توزیع گره‌های خروجی مقداری برابر با توابع توزیع گره‌های ماقبل آخر دارند. این شرط به صورت زیر تحقق می‌یابد:

$$g_i(N_x, y) = g_i(N_x - 1, y) \quad (۶۳-۲)$$

۲-۶-۱-۴ شار گرمایی ثابت

در مرز خروجی با شار گرمایی ثابت معادله پایستگی انرژی در مرز به صورت زیر می‌باشد:

$$k \frac{\partial T}{\partial X} = q \quad (۶۴-۲)$$

$$k \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta X} = q \quad (۶۵-۲)$$

$$T_i = T_{i-1} - \frac{q \cdot \Delta X}{k} \quad (۶۶-۲)$$

برای مثال اگر شرط مرزی شار گرمایی ثابت در مرز شمالی مد نظر باشد. معادلات شرط مرزی در روش شبکه بولترمن به شکل زیر خواهد بود:

$$g_4(i, j) = g_4(i, j - 1) - w_4 \frac{q \cdot \Delta x}{k}$$

$$g_7(i, j) = g_7(i, j - 1) - w_7 \frac{q \cdot \Delta x}{k}$$

$$g_8(i, j) = g_8(i, j - 1) - w_8 \frac{q \cdot \Delta x}{k}$$

در صورتی که شار گرمایی در مرز صفر باشد، شرط مرزی به شرط عدم گرادیان دما تبدیل خواهد شد.

۲-۶-۲ شرایط مرزی غلظت

پس از انجام مرحله انتشار، مقادیر مجهول توابع توزیع روی مرزهای دامنه باقی می‌مانند که می‌بایست توسط شرایط مرزی مناسب تعیین گردند. در کار حاضر شرط مرزی ورودی و دیواره به ترتیب

غلظت ثابت، عدم گرادیان و شار نفوذ صفر^{۶۵} در نظر گرفته شده است. اعمال این شرایط مشابه شرایط مرزی هیدرودینامیکی بحث شده در بخش‌های پیشین می‌باشد، بدین معنی که توابع توزیع مجهول پس از مرحله انتشار به وسیله مقادیر معلوم و شرایط مرزی نامبرده شده تعیین می‌گردد.

۲-۶-۲-۱ ورودی غلظت ثابت

شرط مرزی غلظت ثابت می‌تواند به عنوان شرط مرزی ورودی و یا خروجی مورد استفاده قرار گیرد. در این قسمت نحوه اعمال این شرط برای مرزهای عمود بر جهت جریان بیان شده است، با این وجود می‌توان این شرط را برای مرز با هر شکل دلخواه اعمال نمود. مقادیر مجهول توابع توزیع در ورودی کانال به گونه‌ای تعیین می‌گردند که گونه‌های واکنش در ورودی دارای غلظت ثابتی باشند.

فرض می‌شود که کسر جرمی گونه j در مرز ورودی برابر با $Y_{in,j}$ باشد. به منظور تحقق این شرط توابع توزیع مجهول در مرز غربی از شکل ۲-۸ به صورت زیر تعیین می‌گردند:

$$\begin{aligned} F_{1,Y_j} &= Y_{in,j}(w_1 + w_3) - F_{3,Y_j} \\ F_{5,Y_j} &= Y_{in,j}(w_5 + w_7) - F_{7,Y_j} \\ F_{8,Y_j} &= Y_{in,j}(w_8 + w_6) - F_{6,Y_j} \end{aligned} \quad (۲-۶۷)$$

در واقع شرط مرزی ورودی برای دما و غلظت کاملاً مشابه اعمال شده است

۲-۶-۲-۲ تقارن

مطابق قبل شرط مرزی تقارن دقیقاً مشابه شرط مرزی تقارن دما اعمال می‌شود. برای مثال در مرز جنوبی شکل ۲-۸ این شرط به صورت زیر اعمال می‌شود:

$$\begin{aligned} F_{2,Y_j} &= F_{4,Y_j} \\ F_{5,Y_j} &= F_{8,Y_j} \\ F_{6,Y_j} &= F_{7,Y_j} \end{aligned} \quad (۲-۶۸)$$

⁶⁵ - Zero diffusive flux

۳-۲-۶-۲ خروجی (عدم گرادیان)

مشابه میدان جریان و دما، در خروجی از شرط مرزی عدم گرادیان برای تمامی گونه‌ها استفاده گردیده است. نتیجه به صورت زیر خواهد بود:

$$F_{\sigma, Y_j}(N_x, y) = F_{\sigma, Y_j}(N_x - 1, y) \quad (۶۹ - ۲)$$

۴-۲-۶-۲ دیوار (شار صفر)

برای دیوار از شرط مرزی شار نفوذ صفر استفاده می‌شود، به همین دلیل می‌توان این شرط را مشابه شرط میدان دما برای دیوار، اعمال کرد.

$$F_{\sigma, Y_j}(x_{wall}, y_{wall}) = F_{\sigma, Y_j}(x_{wall} - 1, y_{wall} - 1) \quad (۷۰ - ۲)$$

لازم به ذکر است که در کار حاضر از سلول D_2Q_9 به منظور بررسی احتراق استفاده گردیده است. در برخی مطالعات پیشین نشان داده شده است که سلول‌های ابتدایی‌تر مانند D_2Q_5 و D_2Q_4 نیز به خوبی قادر به ارائه جزئیات احتراق می‌باشند [۳۴]. در صورت استفاده از سلول مرتبه پایین‌تر در مطالعه واکنش-های مرتبط با چندین گونه شیمیایی، می‌توان هزینه محاسبات را به نحو قابل ملاحظه‌ای کاهش داد.

فصل سوم: ارزیابی کد

فصل سوم: ارزیابی کد

۱-۳ مقدمه

جهت بررسی توانایی روش شبکه بولتزمن در تحلیل مسئله مورد نظر، ابتدا این روش به منظور تحلیل مسائل ساده تر به کار گرفته شده است. با استفاده از دو مثال توانایی روش شبکه بولتزمن در تحلیل میدان جریان، دما و غلظت بررسی شده است. مثال اول جریان در یک محفظه با جریان مخالف^{۶۶} بررسی شده است. جریان سیال از بالا و پایین وارد محفظه شده است و از طرفین خارج می شود. نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از روش تفاضل محدود^{۶۷} و همچنین نتایج کار یاماموتو و همکاران [۲۱] مقایسه شده است. در مثال دوم به منظور بررسی توانایی روش شبکه بولتزمن در تحلیل میدان دما و غلظت، محفظه یک-بعدی با واکنش پروپان و هوا بررسی شده است. نتایج تحلیل با نتایج حاصل از کار یاماموتو و همکاران و همچنین نتایج آزمایشگاهی [۳۵] مقایسه شده است. بدین ترتیب صحت کد نوشته شده جهت این کار ارزیابی خواهد شد.

۲-۳ محفظه جریان مخالف

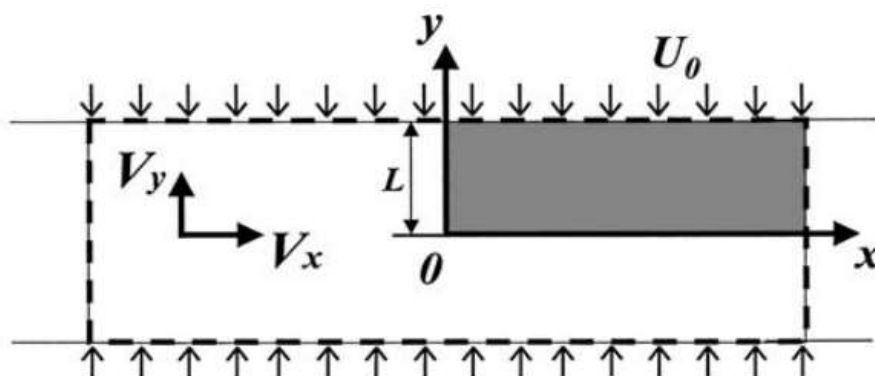
هندسه جریان در مثال اول در شکل زیر نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود جریان با سرعت U_0 از بالا و پایین محفظه به صورت یکنواخت وارد شده است. به دلیل تقارن فیزیکی مساله برای قسمت مشخص شده تحلیل خواهد شد. پارامترهای این مساله به صورت زیر جهت مقایسه با روش تفاضل محدود [۳۶] انتخاب شده است:

$$L = 10 \text{ mm}, U_0 = 0.2 \text{ m/s}, \nu = 1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

⁶⁶ - Counter flow

⁶⁷ - Finite difference

$$Re = \frac{U_0 \cdot L}{\nu} = 124 \quad (۱-۳)$$



۱-۳ هندسه محفظه جریان مخالف

نسبت طول به عرض محفظه ۱۶.۷:۱ می‌باشد. برای تحلیل مساله از شبکه 151×91 استفاده شده است و نتایج با نتایج کار یاماموتو و همکاران [۲۱] و همچنین روش تفاضل محدود [۳۶] مقایسه شده است. در واحد شبکه بولتزمن سرعت ورودی $U_0 = 0.1$ و چگالی برابر 1 در نظر گرفته شده است. با توجه به برابر بودن عدد رینولدز در واحد شبکه و فیزیکی، پارامترها در واحد شبکه به‌دست می‌آید. گرانروی سینماتیک به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$124 = \frac{U \cdot L}{\nu} = \frac{0.1 \times 90}{\nu} \rightarrow \nu = 0.0725 \quad (۲-۳)$$

از رابطه زیر زمان آسایش را می‌توان به‌دست آورد:

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} c^2 \delta t \rightarrow \tau = 0.717 \quad (۳-۳)$$

فشار خروجی با توجه به رابطه (۲-۱۸)، برابر با فشار محیط، $P_0 = \frac{1}{3}$ ، در نظر گرفته شده است. در این قسمت به بررسی صحت کد در تحلیل جریان پرداخته می‌شود.

۱-۲-۳ شرایط مرزی جریان

شرایط مرزی مسئله به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

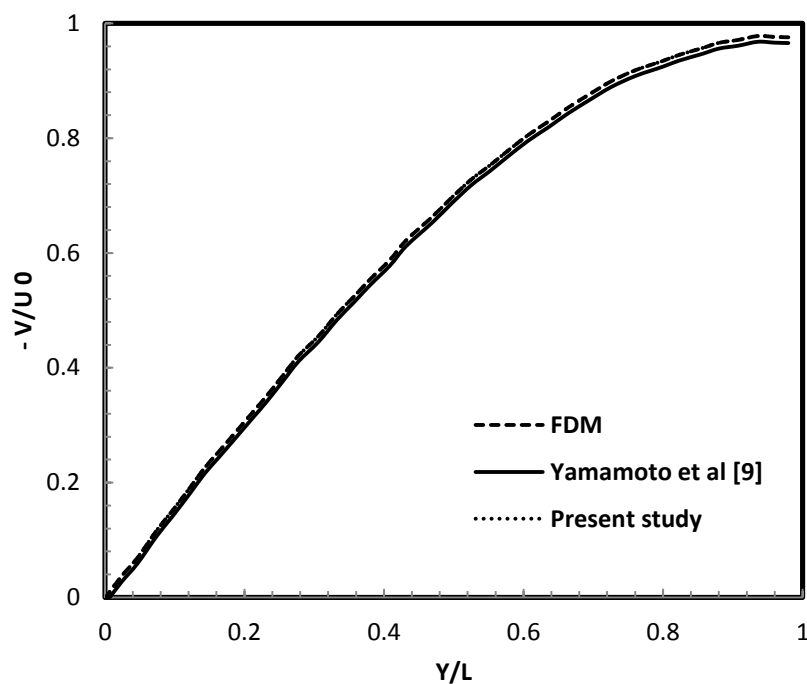
۱- در مرز جنوب و غرب شرط مرزی تقارن استفاده می‌شود.

۲- در مرز شمالی شرط مرزی سرعت ورودی ثابت استفاده می‌شود.

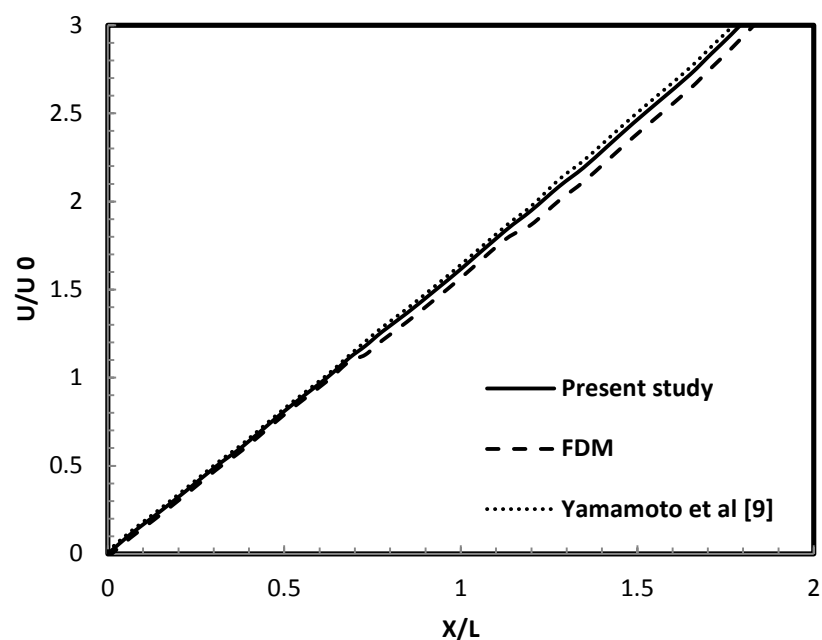
۳- در مرز شرقی شرط فشار ثابت در خروج استفاده شده است.

۲-۲-۳ نتایج

به منظور مقایسه نتایج از نمودار سرعت افقی روی مرز جنوبی و سرعت عمودی روی مرز غربی استفاده شده است. و همچنین محل سرعت و فشار ماکزیمم با مقادیر به دست آمده در کار یاماموتو و همکاران [۲۱] در جدول ۱-۳ مقایسه شده است.



۲-۳ نمودار سرعت عمودی بی‌بعد روی مرز غربی



۳-۳ نمودار سرعت افقی بی‌بعد روی مرز جنوبی

با مشاهده شکل‌های ۲-۳ و ۳-۳ دریافته می‌شود که اختلاف بین نتایج به‌دست‌آمده از روش شبکه بولتزمن و روش تفاضل محدود [۳۶] بسیار ناچیز است، که این موضوع نشان می‌دهد کار حاضر توانایی خوبی در مدلسازی جریان سیال دارد. در جدول ۱-۳ به مقایسه پارامترهای دیگری از کار حاضر با نتایج حاصل از کار یاماموتو و همکاران اشاره می‌شود:

جدول ۳-۱: مقایسه نتایج به دست آمده در کار انجام شده با کار یاماموتو و همکاران [۲۱].

شرح	ابعاد شبکه	زمان آسایش (τ)	فشار ماکزیمم در واحد شبکه $P(0,0)$	سرعت ماکزیمم در واحد شبکه $U(N_x, 0)$
یاماموتو	151×91	0.717	0.371	0.275
کار انجام شده	151×91	0.717	0.371	0.275
یاماموتو	301×181	0.935	0.371	0.275
کار انجام شده	301×181	0.935	0.371	0.275

از جدول ۳-۱ می توان صحت کد نوشته شده را دریافت، بدین ترتیب توانایی روش شبکه بولتزمن در تحلیل میدان جریان اثبات می شود

۳-۳ احتراق یک بعدی پروپان

احتراق در عمل یک پدیده سه بعدی می باشد. در کار حاضر برای بهره گیری از روش شبکه بولتزمن جهت تحلیل و شبیه سازی احتراق ابتدا به بررسی توانایی این روش در تحلیل این پدیده پرداخته شده است. به دلیل اینکه در این کار از پروپان به عنوان سوخت استفاده شده است به منظور اعتبارسنجی حل نیز از سوخت پروپان استفاده می شود.

فضای یک بعدی با ابعاد $501 \text{ lu} \times 3 \text{ lu}$ در نظر گرفته شده است. مدل مورد استفاده D_2Q_9 می باشد اما به دلیل اینکه نسبت طول به عرض بسیار زیاد است می توان فرض نمود که شعله به صورت یک بعدی تشکیل خواهد شد. جریان هوا و سوخت پروپان از مرز غربی به صورت یکنواخت وارد کانال می شوند. شرط مرزی شمال و جنوب تقارن در نظر گرفته شده است. در مرز خروجی شرط توسعه یافتگی دما، غلظت و جریان در نظر گرفته شده است که با توجه به طول بلند کانال منطقی به نظر می آید. طول کانال در شرایط فیزیکی برابر 0.1 m و عرض آن 0.6 mm می باشد. سرعت ورودی برابر 1 m/s و چگالی آن 1.1 Kg/m^3 در نظر گرفته شده است. واکنش احتراق تک مرحله ای پروپان در نظر گرفته شده است.

پارامترهای مورد استفاده در کار حاضر در جدول ۳-۲ آورده شده است:

جدول ۳-۲: پارامترهای مورد استفاده در تحلیل احتراق یک‌بعدی پروپان

پارامتر	شبکه بولتزمن	فیزیک
طول کانال (L)	500 Lu	1 m
عرض کانال (D)	3 Lu	0.006 m
چگالی مخلوط (ρ)	1.0	1.1 Kg/m^3
گرانروی سینماتیک (ν)	0.008	$1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
ضریب پخش حرارت (α)	0.011	$2.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
ضریب پخش جرم C_3H_8 ($D_{\text{C}_3\text{H}_8}$)	0.0055	$1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
ضریب پخش جرم O_2 (D_{O_2})	0.0105	$2.1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
ضریب پخش جرم CO_2 (D_{CO_2})	0.008	$1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
ضریب پخش جرم H_2O ($D_{\text{H}_2\text{O}}$)	0.011	$2.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
سرعت ورودی (U_{in})	0.1	1 m/s
دمای ورودی (T_{in})	1	300 K
کسر جرمی سوخت ورودی ($Y_{\text{C}_3\text{H}_8}$)	0.0225	0.0225

به منظور تبدیل واحد از فیزیک به شبکه بولتزمن مانند بخش ۲-۳ عمل می‌شود. با توجه به برابری عدد رینولدز در فیزیک و واحد شبکه بولتزمن، گرانروی سینماتیک در واحد شبکه بولتزمن از رابطه ۳-۱ به دست می‌آید. در کار حاضر زیروند L نشان‌دهنده پارامتر در واحد شبکه بولتزمن و زیروند P نشان‌دهنده پارامتر در واحد فیزیکی می‌باشد.

$$Re_P = \frac{U \times L}{\nu} = \frac{1.0 \times 0.1}{1.6 \times 10^{-5}} = 6250 = Re_L \quad (۳-۴)$$

$$\nu_L = \frac{U_L \times L_L}{Re_P} = \frac{0.1 \times 500}{6250} = 0.008 \quad (۳-۵)$$

سپس از معادله ۱۴-۲ مقدار زمان آسایش 0.524 به دست می‌آید. با استفاده از عدد بی‌بعد پرانتل که از رابطه مقابل به دست می‌آید:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = 0.727 \quad (۳-۶)$$

مقدار α در واحد شبکه بولتزمن از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\alpha_L = \frac{v_L}{Pr} = \frac{0.008}{0.727} = 0.01100 \quad (۷-۳)$$

پس از به دست آوردن مقدار ضریب پخش حرارت، زمان آسایش برای معادله انتقال حرارت با توجه به رابطه ۵۷-۲ مقدار 0.533 محاسبه می‌شود. مقدار دما در واحد شبکه بولتزمن برابر دمای بی‌بعد $\frac{T}{T_0}$ می‌باشد، بنابراین دمای ورودی برابر ۱ خواهد بود.

برای محاسبه ضریب پخش جرم در واحد شبکه بولتزمن، با توجه به اینکه واحد ضریب پخش جرم m^2/s می‌باشد، مقدار واحد فیزیکی این پارامتر در $\frac{(U.L)_L}{(U.L)_P}$ ضرب می‌شود. سپس زمان آسایش برای معادله کسر جرمی برای هر گونه براساس رابطه ۵۷-۲ محاسبه می‌شود. در معادلات دما و غلظت به دلیل وجود واکنش شیمیایی باید تولید و مصرف انرژی و جرم وارد معادلات شوند. این کار توسط جمله چشمه انجام خواهد شد. با توجه به معادلات ناویراستوکس جمله چشمه برای میدان دما و غلظت در دست می‌باشد اما برای وارد کردن این جمله در واحد شبکه بولتزمن باید ابتدا تبدیل واحد مناسب انجام گیرد. بدین منظور از تشابه بین معادلات بی‌بعد ناویراستوکس و معادلات استفاده شده است:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{HR \cdot w_{ov}}{\rho C_p} \quad (۸-۳)$$

در رابطه ۸-۳، HR میزان گرما آزاد شده واکنش بر حسب KJ/mol می‌باشد. با بی‌بعدسازی معادلات بالا به وسیله پارامترهای بی‌بعد زیر مقدار چشمه بی‌بعد به دست می‌آید:

$$T^* = \frac{T}{T_0}, u^* = \frac{u}{U_0}, v^* = \frac{v}{U_0}, X^* = \frac{X}{L}, Y^* = \frac{Y}{L}, t^* = Fo, Fo = \frac{\alpha t}{L^2} \quad (۹-۳)$$

در رابطه بالا U_0 سرعت ورودی، Fo عدد فوریه و L نصف عرض محفظه احتراق می‌باشد.

$$\frac{\alpha T_0}{L^2} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{T_0 U_0}{L} u^* \frac{\partial T^*}{\partial X^*} + \frac{T_0 U_0}{L} v^* \frac{\partial T^*}{\partial Y^*} = \frac{\alpha T_0}{L^2} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial X^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial Y^{*2}} \right) + \frac{HR \cdot w_{ov}}{\rho C_p}$$

(۱۰-۳)

$$\frac{\frac{T_0 U_0}{L}}{Re.Pr} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{T_0 U_0}{L} u^* \frac{\partial T^*}{\partial X^*} + \frac{T_0 U_0}{L} v^* \frac{\partial T^*}{\partial Y^*} = \frac{\frac{T_0 U_0}{L}}{Re.Pr} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial X^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial Y^{*2}} \right) + \frac{HR. w_{ov}}{\rho C_p}$$

با توجه به رابطه بالا مقدار چشمه بی بعد با تقسیم کردن مقدار چشمه بر $\frac{T_0 U_0}{L}$ ، به دست می آید. به همین ترتیب برای معادلات کسر جرمی با معادل سازی انتقال جرم و انتقال حرارت جمله چشمه معادلات دما و کسر جرمی در مقیاس بولتزمن به صورت زیر به دست می آید:

$$(Q_T)_L = Q_T \left[\frac{\left(\frac{T_0 U_0}{L} \right)_L}{\frac{T_0 U_0}{L}} \right] \quad (۱۱-۳)$$

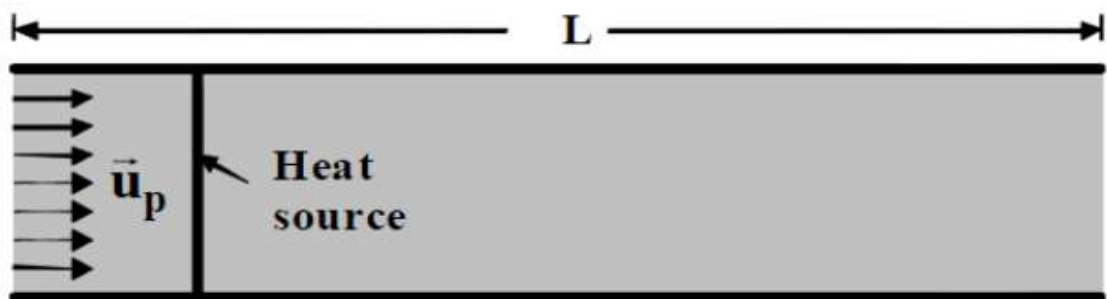
$$(w_i)_L = w_i \left[\frac{\left(\frac{\rho_0 U_0}{L} \right)_L}{\frac{\rho_0 U_0}{L}} \right]$$

در این رابطه از معادل سازی $\rho_0 \equiv T_0$ در معادلات انتقال حرارت و جرم استفاده شده است. در رابطه بالا Q_T جمله چشمه و w_i نرخ تولید جرم در شرایط فیزیکی است.



در کار حاضر از معادله احتراق تک مرحله ای پروپان که در رابطه (۱۲-۳) نوشته شده، استفاده شده است. به منظور تحلیل احتراق در کانال یک بعدی نیاز به یک جرقه برای شروع فرآیند احتراق وجود دارد. برای شبیه سازی جرقه^{۶۸} یک ناحیه با دمای بالا که در شکل ۳-۴ مشخص شده است به صورت شرایط اولیه به مسئله اعمال شده است. شرط اولیه تا زمانی برقرار است که شعله تشکیل شود. دمای جرقه می تواند به طور مثال برابر دمای شعله آدیاباتیک^{۶۹} پروپان یا مقداری نزدیک به آن باشد. دمای جرقه در این کار برابر 1500 K در نظر گرفته شده است.

⁶⁸ - Ignition⁶⁹ - Adiabatic flame temperature



شکل ۳-۴: هندسه شرایط یکبعدی احتراق [۲۱]

جهت ارزیابی کد نوشته شده و نتایج به دست آمده از پارامتر سرعت سوختن^{۷۰} استفاده شده است. سرعت سوختن پروپان در شرایط آزمایشگاهی محاسبه شده است و برابر 0.11 m/s می باشد [۳۵].

۳-۳-۲ نتایج

پس از تحلیل مساله فوق با استفاده از مدل شبکه بولتزمن که در فصل قبل توضیح داده شد، به منظور اعتبار سنجی، نتایج با مدل آزمایشگاهی و نتایج کار یاماموتو و همکاران [۲۱] مقایسه شده است. ابتدا سرعت شعله به روش محاسباتی تعیین شده و سپس با مدل آزمایشگاهی [۳۵] مقایسه شده است. برای به دست آوردن سرعت سوختن پروپان با استفاده از روش شبکه بولتزمن ابتدا سرعت پیشروی شعله با استفاده از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$V_f = \frac{X_{f,t_f} - X_{f,t_0}}{t_f - t_0} \quad (۳-۱۳)$$

در رابطه فوق X_{f,t_f} محل تشکیل شعله در زمان نهایی و X_{f,t_0} محل تشکیل شعله در زمان اولیه بوده و t_0 و t_f به ترتیب زمان اولیه و نهایی می باشد. محل تشکیل شعله نقطه ای است که سوخت در آن نقطه مصرف شده است. نرخ مصرف پروپان را می توان با توجه به بی بعدسازی معادله انتقال نرمال سازی کرد. پارامتر بی بعد Y معرف کسر جرمی است. با توجه به اینکه معادلات انتقال حرارت و جرم دارای یک

⁷⁰ - Burning velocity

ماهیت می‌باشند می‌توان با استفاده از معادل‌سازی بین پارامترها از رابطه ۳-۱۰ استفاده کرد. در این رابطه بجای T_0 از معادل آن در انتقال جرم یعنی ρ_0 استفاده شده است. بنابراین برای بی‌بعدسازی نرخ تولید جرم باید آن را بر $\frac{\rho_0 U_0}{L}$ تقسیم کرد.

$$w_{N,C_3H_8} = \frac{w_{C_3H_8}}{\frac{\rho_0 U_0}{L}} \quad (۳-۱۴)$$

که در این رابطه w_{N,C_3H_8} ، مصرف سوخت نرمال شده، U_0 سرعت ورودی، $w_{C_3H_8}$ مصرف سوخت بر حسب $Kg/m^3.s$ می‌باشد. با توجه به رابطه فوق محل تشکیل شعله در گام‌های زمانی مختلف را می‌توان به صورت نمودار شکل ۳-۵ رسم نمود.

با توجه به شکل ۳-۵ مشاهده می‌گردد با افزایش گام زمانی شعله به سمت جلو پیش می‌رود و سرعت پیشروی شعله در واقع برابر با شیب خط پیشروی شعله می‌باشد. بنابراین برای محاسبه این پارامتر به صورت زیر عمل می‌گردد.

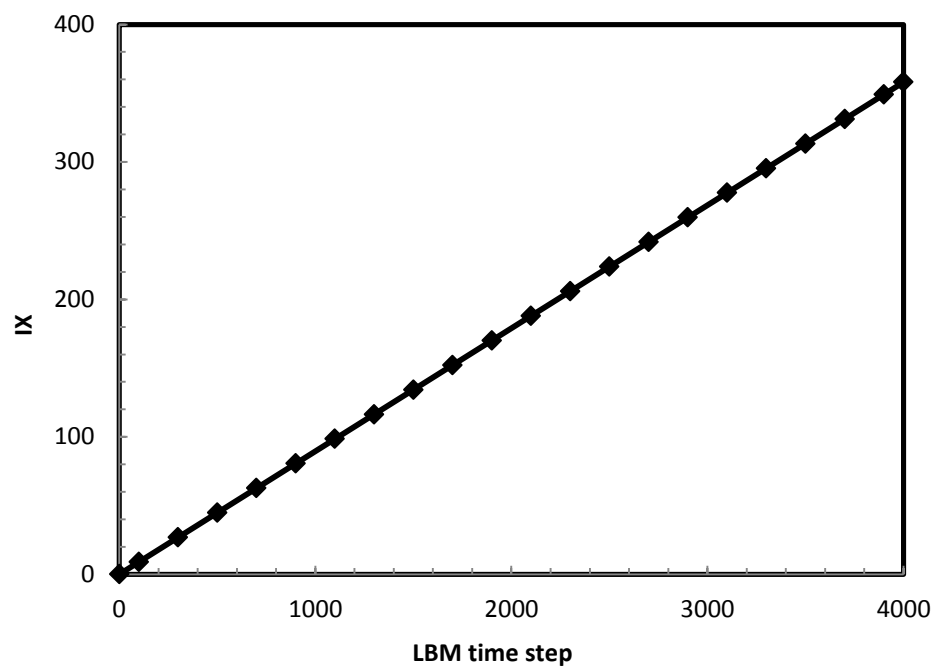
$$V_f = \frac{408 - 50}{4000 - 0} = 0.0895$$

پس از محاسبه سرعت پیشروی شعله با توجه به اینکه سرعت پیشروی شعله، V_f ، برابر تفاضل سرعت ورودی و سرعت شعله، S_L ، می‌باشد، سرعت شعله را می‌توان به صورت زیر محاسبه نمود:

$$(S_L)_{LBM} = (U_{in} - V_f)_{LBM} = 0.1 - 0.0895 = 0.105$$

مقدار به دست آمده برای S_L در واحد شبکه بولتزمن می‌باشد که با رابطه زیر به واحد فیزیکی تبدیل می‌شود:

$$\frac{S_L}{U_{in}} = \left(\frac{S_L}{U_{in}}\right)_{LBM} \Rightarrow S_L = \left(\frac{S_L}{U_{in}}\right)_{LBM} \cdot U_{in} = 0.105 \times 1.0 = 0.105 \text{ m/s} \quad (۳-۱۵)$$



شکل ۳-۵: محل تشکیل شعله در گام‌های زمانی مختلف

بنابراین میزان خطای محاسبات نسبت به مقدار آزمایش، 0.11، برابر ۴/۵ درصد می‌باشد که قابل قبول است. با توجه به مقایسه نتایج محاسبات با نتایج روش آزمایشگاهی می‌توان گفت روش استفاده شده برای تحلیل احتراق معتبر می‌باشد.

فصل چہارم:

نتائج

فصل چهارم: پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته

۴-۱ مقدمه

احتراق فرایند پیچیده‌ای است که برای تحلیل آن نیاز به حل معادلات پیوستگی، ناویراستوکس و انرژی به صورت هم‌زمان می‌باشد. در دهه اخیر روش شبکه بولتزمن به عنوان یک جایگزین مناسب برای روش سنتی، برای تحلیل‌های پیچیده عددی شناخته شده است [۲۱].

به دلیل کاربرد فراوان فرایندهای احتراقی در جهان و با توجه به تاثیرات بسیار مخرب و جبران‌ناپذیری که این فرایندها روی اکوسیستم می‌گذارند و تهدیدی جدی برای آینده بشر محسوب می‌گردند، از این‌رو توسعه فرایندهای احتراقی با مصرف انرژی و تولید آلاینده کمتر به یکی از زمینه‌های پژوهشی مورد علاقه بسیاری از محققین تبدیل شده است. یکی از این روش‌های کاربردی، استفاده از احتراق پیش‌آمیخته کم-سوخت در مشعل‌ها می‌باشد. این نوع احتراق در مقایسه با احتراق غیر پیش‌آمیخته، علاوه بر کاهش مصرف انرژی، به دلیل دمای پایین‌تر محصولات احتراق، گازهای آلاینده کمتری تولید کرده و مانع افزایش دمای محیط و به دنبال آن پدیده زمین گرمایی می‌شود [۳۷]. احتراق پیش‌آمیخته در دو دهه اخیر در اکثر صنایع به دلیل تک رقمی بودن میزان آلودگی اکسید نیتروژن به عنوان احتراق استاندارد معرفی شده است [۳۸]. در کنار فواید زیاد استفاده از احتراق پیش‌آمیخته در مشعل‌ها، معایب و موانعی برای کاربردی کردن این نوع احتراق وجود دارد. به علت این‌که در احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت، گرما آزاد شده در فرایند احتراق پایین می‌باشد لذا شعله تشکیل شده دچار نوسان و ناپایداری شده و در نهایت خاموش می‌شود.

هدف اصلی کار حاضر بررسی عوامل ناپایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته و ارائه طرحی برای افزایش پایداری شعله در این نوع احتراق توسط یک مدل شبکه بولتزمن مرتبه پایین (D_2Q_9)، که قابلیت پردازش

موازی و تحلیل جریان‌های در مقیاس میکرو^{۷۱} از جمله ویژگی‌های آن است، می‌باشد. در پایان این فصل به منظور بررسی دقیق‌تر مدل‌سازی احتراق در شبکه لتیس بولتزن، احتراق در نرم‌افزار فلوئنت برای سرعت‌ها و نسبت هم‌ارزی‌های مختلف مدل شده است و سپس به مقایسه این دو روش برای شبیه‌سازی احتراق پرداخته شده است.

۲-۴ فرضیات

فرضیات زیر به منظور شبیه‌سازی میدان جریان، دما و غلظت گونه‌ها به روش شبکه بولتزن به کار گرفته شده است:

- ۱- از نیروی شناوری در محاسبات میدان جریان صرف‌نظر شده است.
- ۲- از انتقال گرما تابشی صرف‌نظر شده است.
- ۳- احتراق پروپان کامل و تک مرحله‌ای فرض شده است و مونوکسید کربن در فرآورده‌ها وجود ندارد.
- ۴- معادلات جریان، دما و غلظت گونه به صورت همزمان حل شده و میدان جریان مستقل از توزیع دمای دامنه می‌باشد.
- ۵- پخش حرارت و جرم با توجه به قوانین فوریه^{۷۲} و فیک^{۷۳} انجام می‌شود.
- ۶- از اثرات دما روی خواص مانند ضریب نفوذ گونه‌ها، گرمای ویژه، ضریب رسانش حرارتی و گرانیوی سیال صرف‌نظر گردیده است.
- ۷- از تولید گرما در اثر تلفات گرانیوی صرف‌نظر شده است. این فرض با توجه به پایین بودن عدد رینولدز منطقی می‌باشد.

⁷¹ - Micro
⁷² - Fourier
⁷³ - Fick

فرض پیوستگی رژیم جریان قابل استفاده می‌باشد.

۳-۴ شرایط مسئله:

در کار پیش‌رو به بررسی پایداری شعله در احتراق پیش‌آمیخته کم‌سوخت در یک مشعل لایه‌ای^{۷۴} براساس موقعیت تزریق سوخت و هوا در هر یک از لایه‌های مشعل پرداخته شده است. وجود یک مانع^{۷۵} در خروجی مشعل، به‌عنوان یک عامل موثر در بهبود پایداری شعله در نظر گرفته می‌شود [۳۹] و [۴۰]. در حالت اولیه سوخت و هوا به‌صورت پیش‌آمیخته از لایه میانی وارد مشعل می‌شوند، در این حالت اثر سرعت ورودی و نسبت هم‌ارزی بر شعله بررسی می‌شود. در حالت دوم با تزریق سوخت و هوا به‌صورت پیش‌آمیخته در لایه میانی و تزریق هوا در لایه بیرونی مشعل، پایداری شعله با حالت اولیه مقایسه می‌گردد. در حالت سوم سوخت و هوا به لایه میانی و هوا به لایه درونی مشعل تزریق می‌شوند و پایداری شعله با دو حالت قبل مقایسه می‌شود. سوخت مورد آزمایش در پژوهش حاضر پروپان است.

معادله احتراق تک مرحله‌ای پروپان با هوای نظری به‌صورت زیر بیان می‌شود:

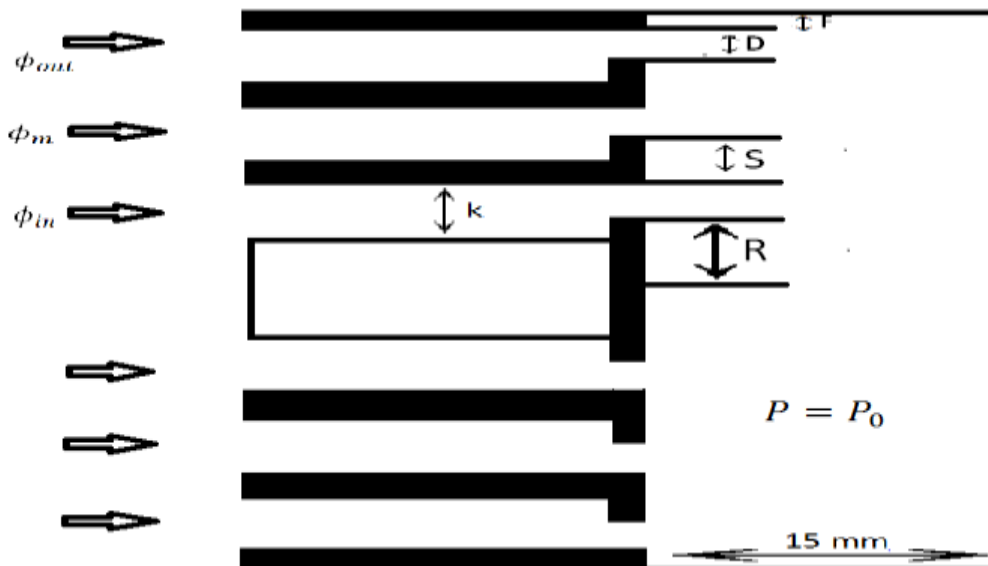


به‌منظور تحلیل واکنش پروپان از مدل دو بعدی شبکه بولترمن D_2Q_9 استفاده شده است. زمان آسایش برای هر کدام از معادلات جریان، دما و غلظت عددی ثابت در نظر گرفته شده است که با توجه به فرض ثابت بودن خواص فیزیکی قابل قبول خواهد بود. به‌منظور تحلیل دقیق‌تر جریان و اعمال شرط مرزی فشار ثابت در خروجی برای معادله توزیع فشار و تحلیل میدان جریان استفاده شده است. به دلیل تقارن محوری مشعل مورد مطالعه، در شبیه‌سازی عددی به روش شبکه بولترمن، از نیمه بالایی این هندسه برای بررسی‌های پیش‌رو استفاده شده است.

⁷⁴ - Stratified burner

⁷⁵ - Bluff body

همان‌طور که گفته شد معادلات به صورتی حل خواهند شد که دما و غلظت تاثیری روی میدان جریان نخواهند داشت. این فرض برای اعداد ماخ پایین با تقریب خوبی برقرار می‌باشد و هر چه عدد ماخ کمتر باشد خطای استفاده از این فرض کمتر خواهد بود. شکل ۴-۱ هندسه مشعل را نشان می‌دهد و جدول ۴-۱ ابعاد مشعل را بیان می‌کند.



شکل ۴-۱: هندسه مساله مورد مطالعه.

جدول ۴-۱: ابعاد مشعل

طول مشعل	اندازه دیواره بیرونی (F)	ورودی مشعل (K)	خروجی مشعل (D)	فاصله بین هر مجرا (S)	نصف طول مانع (R)
20 mm	1 mm	5 mm	3 mm	4 mm	7 mm

۴-۴ به دست آوردن پارامترها

برای تحلیل واکنش احتراق، محاسبه برخی پارامترها ضروری می‌باشد. در این قسمت به معرفی و محاسبه این پارامترها پرداخته شده است:

۴-۵-۱ نرخ کلی واکنش (W_{ov}): سرعت واکنش را نشان می‌دهد.

$$W_{ov} = K_{ov} \cdot C_{C_3H_8} \cdot C_{O_2} \cdot \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (۲-۴)$$

در رابطه بالا K_{ov} ضریب واکنش^{۷۶} که برابر $9.9 \times 10^7 (m^3/mol.s)$ ، C_i غلظت گونه $i (mol/m^3)$ ، E انرژی فعالسازی واکنش که برابر با $126000 (J)$ ، R ثابت جهانی گازها که برابر $8.315 (J/mol.K)$ است و T دمای مطلق (K) می‌باشد.

غلظت (C_j): برای به دست آوردن غلظت گونه j از رابطه زیر استفاده شده است [۲۱]:

$$C_j = \frac{\rho_0 \cdot Y_i}{M_i} \left(\frac{T_0}{T}\right) \quad (۳-۴)$$

در رابطه بالا M جرم ملکولی گونه (kg/mol) ، T_0 دمای محیط و T دمای محلی می‌باشد که مقادیر آن-ها به شرح زیر است:

$$M_{C_3H_8} = 0.044 (kg/mol)$$

$$M_{O_2} = 0.032 (kg/mol)$$

$$M_{CO_2} = 0.044 (kg/mol)$$

$$M_{H_2O} = 0.018 (kg/mol)$$

$$T_0 = 300 (K)$$

۴-۵-۲ نسبت هم‌ارزی: برابر نسبت سوخت به هوا در شرایط واقعی به نسبت سوخت به هوای نظری می‌باشد. با توجه به رابطه احتراق پروپان نسبت هم‌ارزی با کسر جرمی گونه‌های شرکت کننده در واکنش به صورت زیر رابطه خواهد داشت:

$$\phi = \frac{(F/A)}{(F/A)_{st}} = \frac{Y_{C_3H_8}/Y_{Air}}{(1 \cdot M_{C_3H_8})/(5 \cdot M_{O_2}/Y_{O_2,0})} = \frac{\frac{Y_{C_3H_8}}{(1 - Y_{C_3H_8})}}{0.0642} \quad (۴-۴)$$

⁷⁶ - Reaction coefficient

در این رابطه $Y_{O_2,0}$ برابر کسر جرمی اکسیژن در هوا است. در هوای محیط با توجه به نسبت حجمی اکسیژن کسر جرمی اکسیژن برابر با 0.233 می‌باشد. در صورت افزایش یا کاهش غلظت اکسیژن در هوا این مقدار تغییر می‌کند. نسبت هم‌ارزی برای شرایط رقیق عددی بین ۱۰، برای شرایط استوکیومتری برابر ۱ و برای شرایط احتراق غلیظ بیشتر از ۱ خواهد بود.

۴-۵-۳ نرخ تولید جرم: برای به دست آوردن تولید جرم از جایگذاری رابطه ۲-۵۵ در رابطه ۲-۵۶ استفاده می‌شود:

$$\omega_i = a_i \cdot M_i \cdot K_{ov} C_{C_3H_8} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (۴-۵)$$

که در این رابطه ضرایب a_i همان ضرایب استوکیومتری گونه موردنظر می‌باشد.

۴-۵ شرایط مرزی و پارامترها

با توجه به اینکه مساله به صورت متقارن حل می‌شود، شرط مرزی در مرز جنوبی تقارن در نظر گرفته می‌شود. در مرز شرقی که همان خروجی خواهد بود شرط مرزی فشار ثابت استفاده می‌شود. در مرز غربی شرط ورودی سرعت ثابت اعمال خواهد شد و در مرز شمالی نیز شرط مرزی دیواره را اعمال خواهیم کرد. دمای محیط 300 K و فشار خروجی برابر فشار اتمسفر در نظر گرفته می‌شود.

در روش شبکه بولتزن برای مقادیر سرعت ورودی، فشار خروجی، چگالی و پارامترهای انتقال با توجه به اعداد بی‌بعد مقدار مناسب اختیار می‌شود. مقدار انرژی فعالسازی واکنش برابر 30 KCal/mol ، ضریب واکنش (K_{ov}) برابر با $9.9 \times 10^{13} \text{ cm}^3/\text{mol.s}$ و گرمای آزاد شده در اثر احتراق برابر $2.05 \times 10^6 \text{ J/mol}$ می‌باشد.

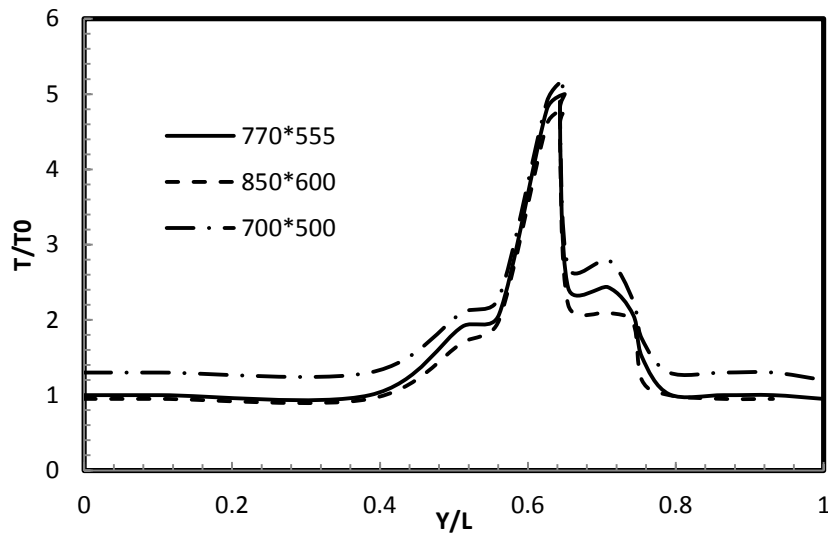
۴-۶ استقلال از شبکه

یکی از مهم‌ترین مسائلی که در مطالعات مربوط به شبکه در شبیه‌سازی‌های عددی مطرح می‌باشد، بحث استقلال از شبکه است که عبارت است از بهبود اولیه یک شبکه درشت تا رسیدن به مرحله‌ای که نتایج مورد نظر تقریباً بدون تغییر باشد. اهمیت این عملیات به اندازه‌ای است که این مرحله بخشی از تمام مطالعات معتبر دینامیک سیالات محاسباتی را تشکیل می‌دهد و روش شبکه بولتزمن نیز از این قاعده خارج نیست. با این وجود، در این روش با تغییر شبکه، پارامترهای موجود در معادلات نظیر زمان آسایش، سرعت ورودی، گرانش و غیره نیز می‌بایست طوری تعریف گردند که اعداد بی‌بعد مسئله ثابت بماند. در کار حاضر به منظور ثابت نگه‌داشتن عدد رینولدز در شبکه‌های مختلف مقدار زمان آسایش تغییر داده شده است. همچنین، به‌طور استاندارد این روش از سلول‌های مربعی (برای مسائل دو بعدی) و مکعبی (برای مسائل سه بعدی) هم‌اندازه استفاده می‌نماید.

به‌منظور بررسی شرایط استقلال از شبکه نمودار دمای مخلوط در مقطع $x/H = 0.8$ برای سه شبکه مختلف رسم شده است که عبارت است از شبکه‌های 700×500 , 770×555 و 850×600 . بررسی نتایج نشان می‌دهد که شبکه 770×555 دقت مناسبی برای تحلیل احتراق دارد. جدول ۴-۲ نتایج مربوط به فشار و سرعت ماکزیمم در راستای x برای سه شبکه مورد استفاده را نشان می‌دهد. همان‌طور که ملاحظه می‌گردد با استفاده از شبکه 770×555 می‌توان با دقت مناسبی هندسه مورد نظر را مدلسازی کرد. همچنین شکل ۴-۲ نمودار دما را در مقطع $x/H = 0.8$ برای هر سه شبکه نشان می‌دهد، با توجه به شکل ملاحظه می‌شود نتایج شبکه‌های 770×555 و 850×600 اختلاف $4/5$ درصدی دارند بنابراین می‌توان از شبکه 770×555 با دقت مناسبی استفاده کرد و از این پس برای حل مساله از این شبکه استفاده خواهد شد.

جدول ۴-۲: نتایج مربوط به فشار و سرعت ماکزیمم در ۳ شبکه مختلف

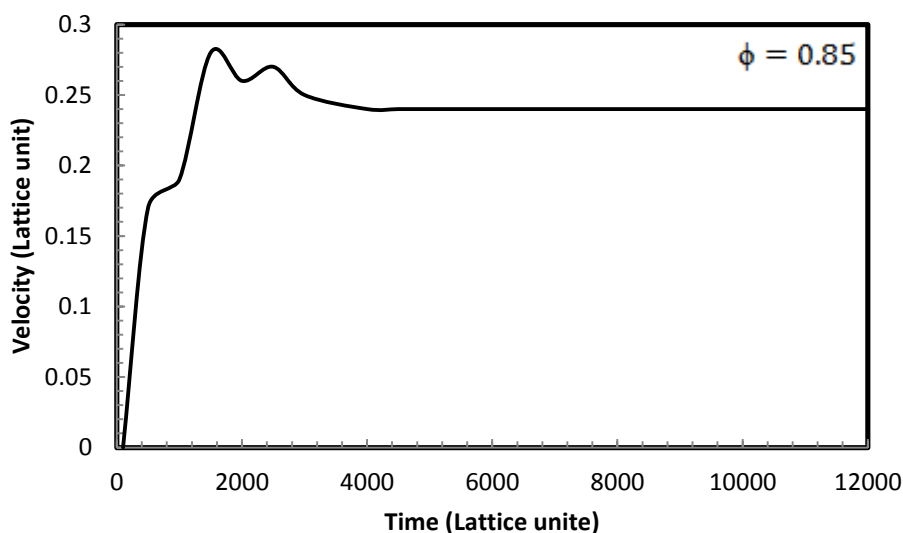
ابعاد شبکه	زمان آسایش (τ)	فشار ماکزیمم در واحد شبکه $P(0,355)$	سرعت ماکزیمم در واحد شبکه $U(400,333)$
700×500	0.69	0.39	0.25
770×555	0.71	0.38	0.24
850×600	0.73	0.38	0.24



شکل ۴-۲: مقایسه تغییرات دما در مقطع $x/H = 0.8$ برای سه شبکه مختلف

۷-۴ نتایج

به منظور اطمینان از همگرایی حل، سرعت ماکزیمم که برابر سرعت در مقطع $x/H = 0.8$ است در گام-های زمانی مختلف محاسبه شده و نمودار آن رسم شده است. بدین ترتیب چگونگی همگرایی برای معادله میدان جریان در شکل ۴-۳ نمایش داده شده است. برای معادلات دما و غلظت نیز همگرایی به همین صورت بررسی شده است.



شکل ۴-۳: روند همگرایی معادله جریان

برای همگرایی معادلات جریان به حدود 8000 گام زمانی در زمان حدود 4 ساعت با سیستم محاسباتی سنگین با شبکه 770×555 نیاز است.

۴-۷-۱ حالت تک جریان

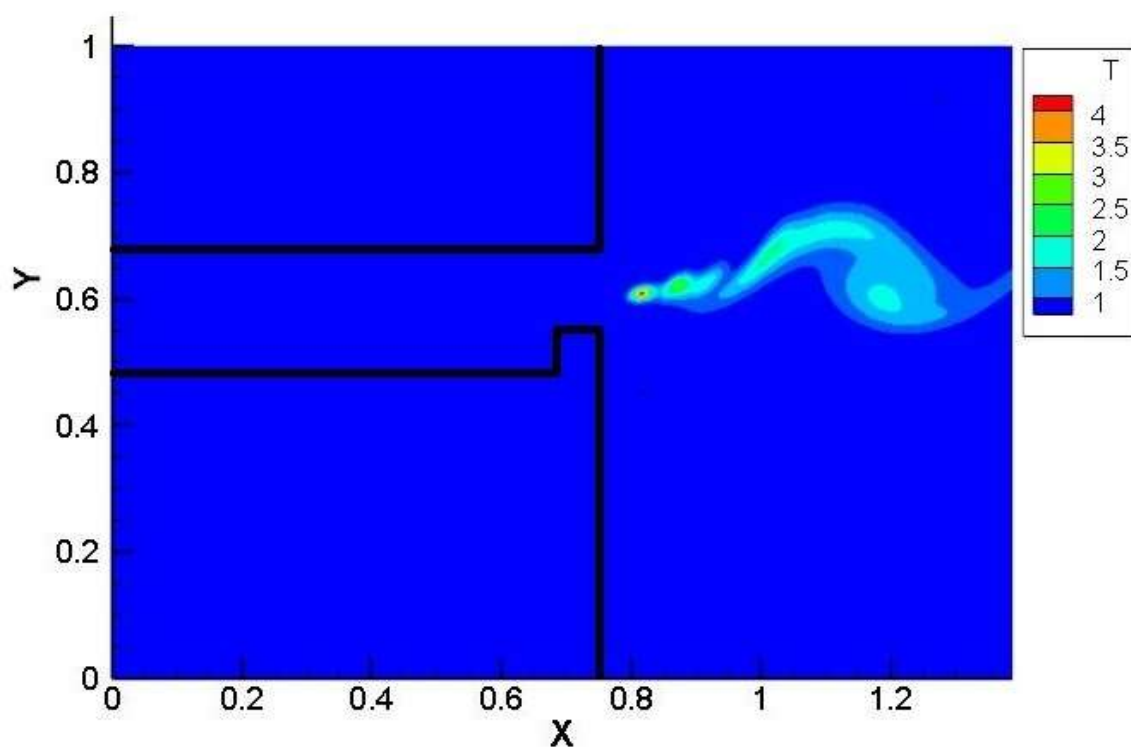
شکل‌های ۴-۴ تا ۴-۶ تغییرات نسبت هم‌ارزی را روی شکل شعله بررسی می‌کند. در این بررسی سه پیکربندی متفاوت برای شعله در نظر گرفته شده است، شعله مخروطی^{۷۷}، شعله برخاسته^{۷۸} و شعله نزدیک به کنده شدن^{۷۹}. همان‌طور که در شکل دیده شده است با کاهش نسبت هم‌ارزی، شعله از شکل مخروطی ($\phi = 0.95$) به شعله برخاسته ($\phi = 0.85$) و در نهایت به شعله نزدیک به کنده شدن ($\phi = 0.6$) در سرعت 1 (m/s) تغییر می‌کند. شعله مخروطی به رنگ آبی، با طول شعله کوتاه است زیرا در نسبت هم‌ارزی نزدیک به نقطه استوکیومتری، سرعت سوخت به بیشترین مقدار خودش می‌رسد. سمت بیرونی شعله در $\phi = 0.85$ به دلیل سرعت سوخت پایین‌تر، کمتر روی مشعل لنگر انداخته است همین باعث

⁷⁷ - Cone flame

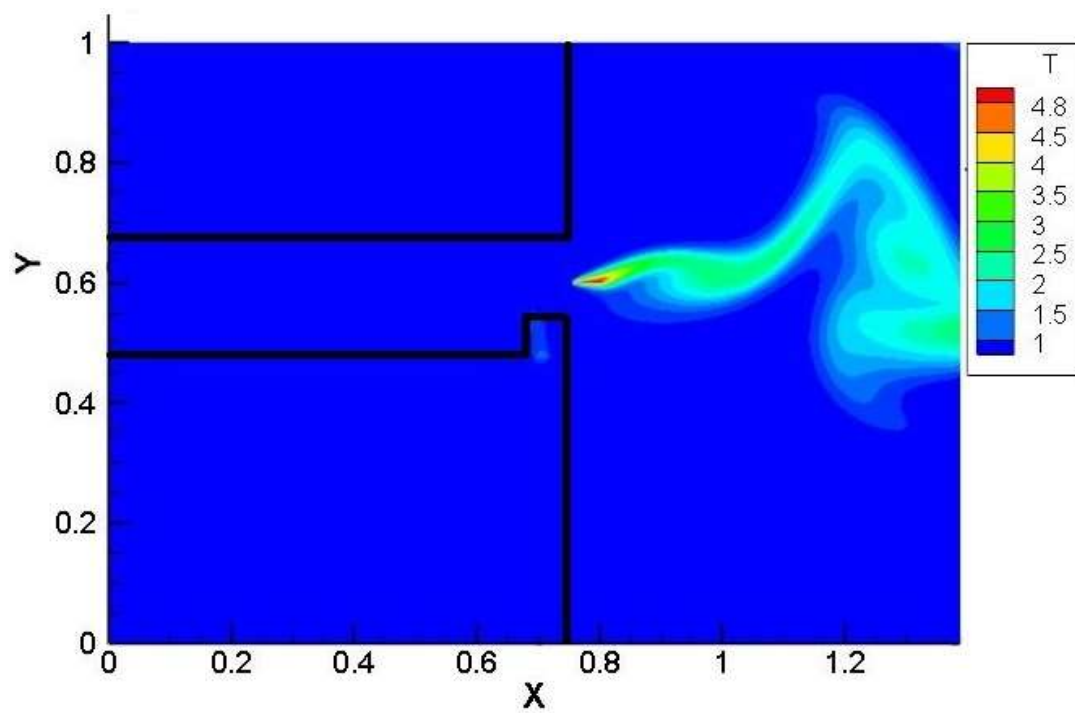
⁷⁸ - Lift-off flame

⁷⁹ - Near blowout

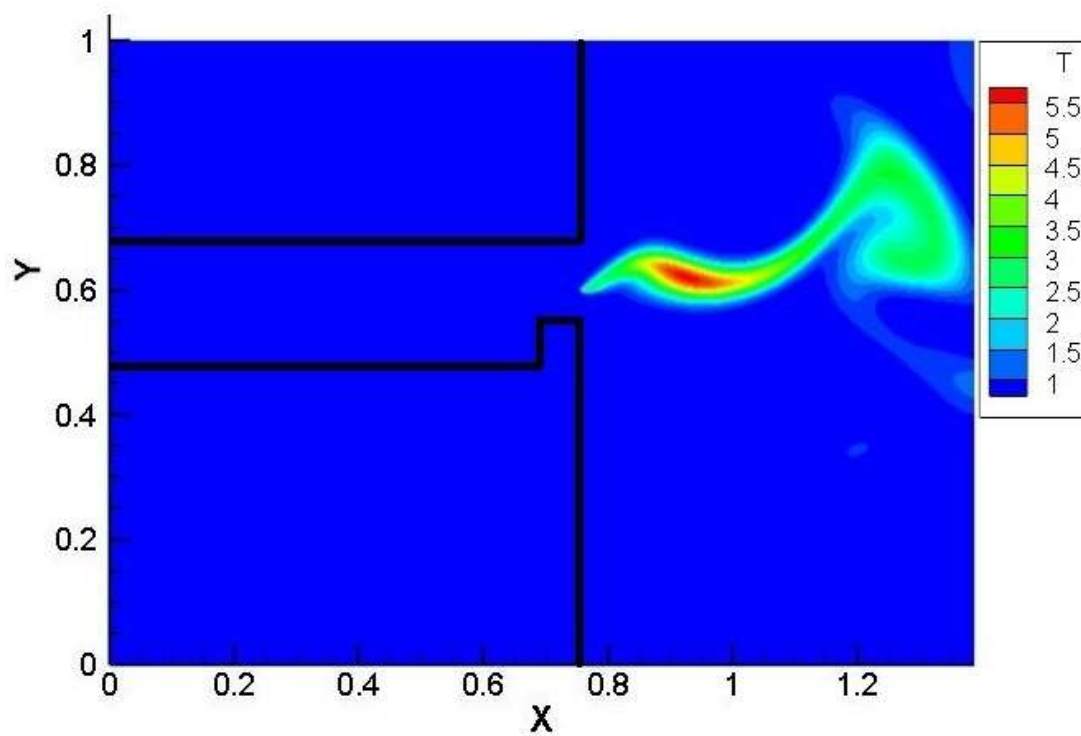
شده است که شکلی برخاسته داشته باشد. در $\phi = 0.6$ ریشه شعله برخاسته شده و به علت مقدار کم سوخت در مخلوط، گرمای کمی آزاد می‌شود و همین باعث می‌شود که شعله ضعیف و کم‌نور شود.



شکل ۴-۴: شعله نزدیک به کنده‌شدن

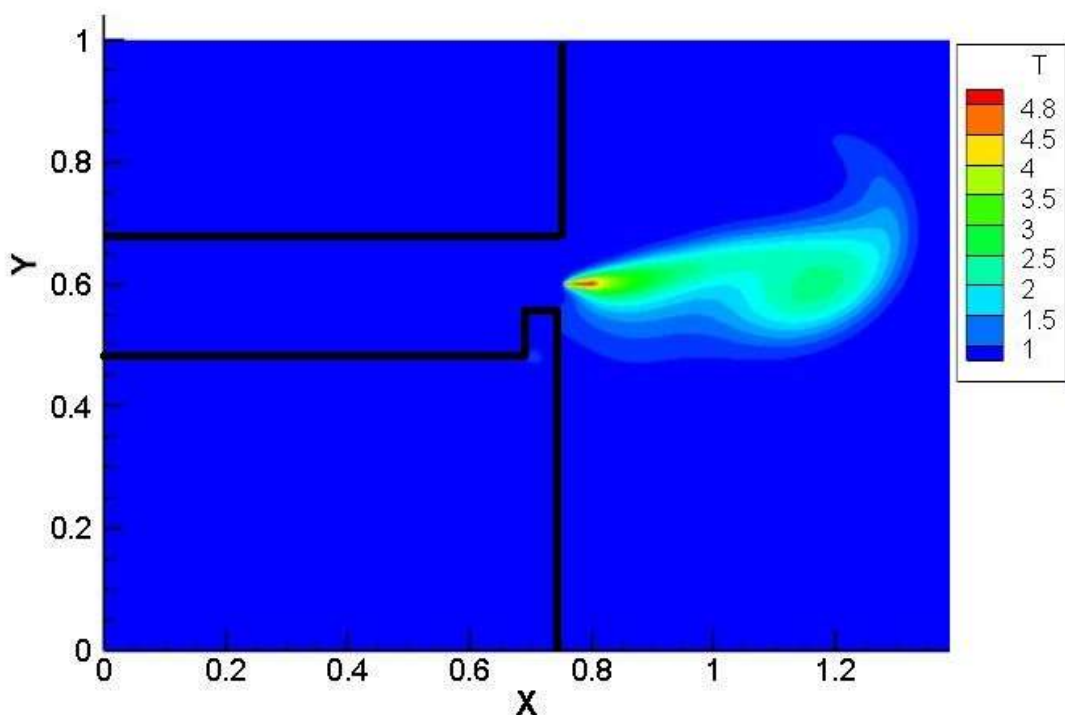


شکل ۴-۵: شعله برخاسته

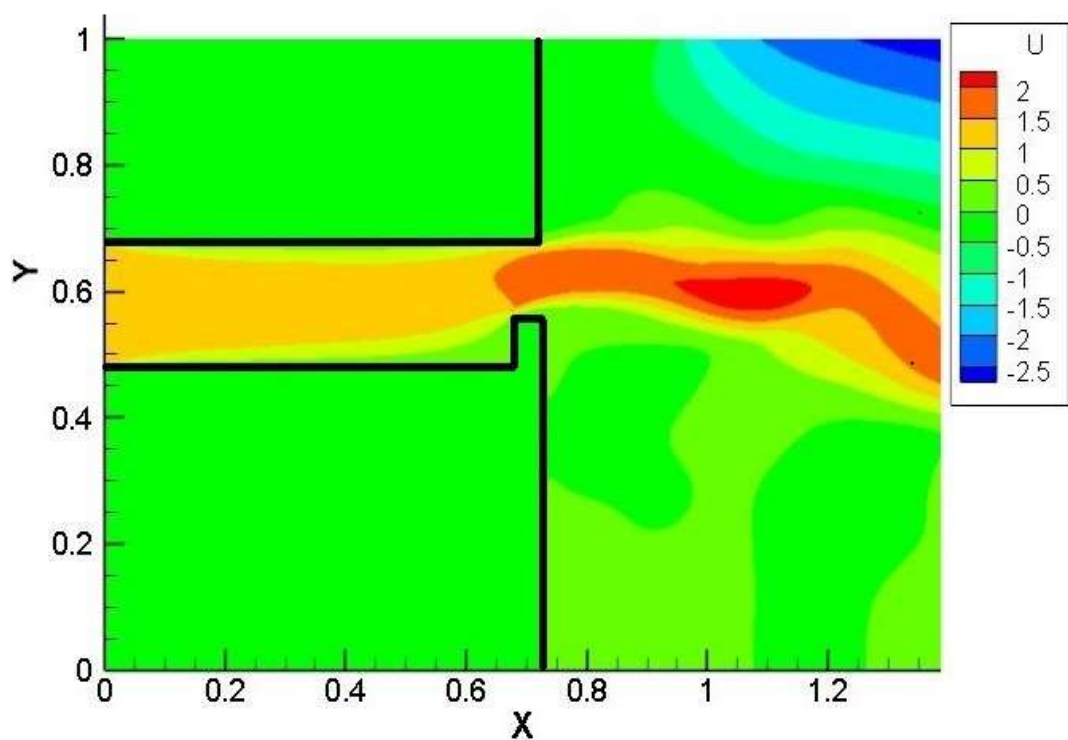


شکل ۴-۶: شعله مخروطی

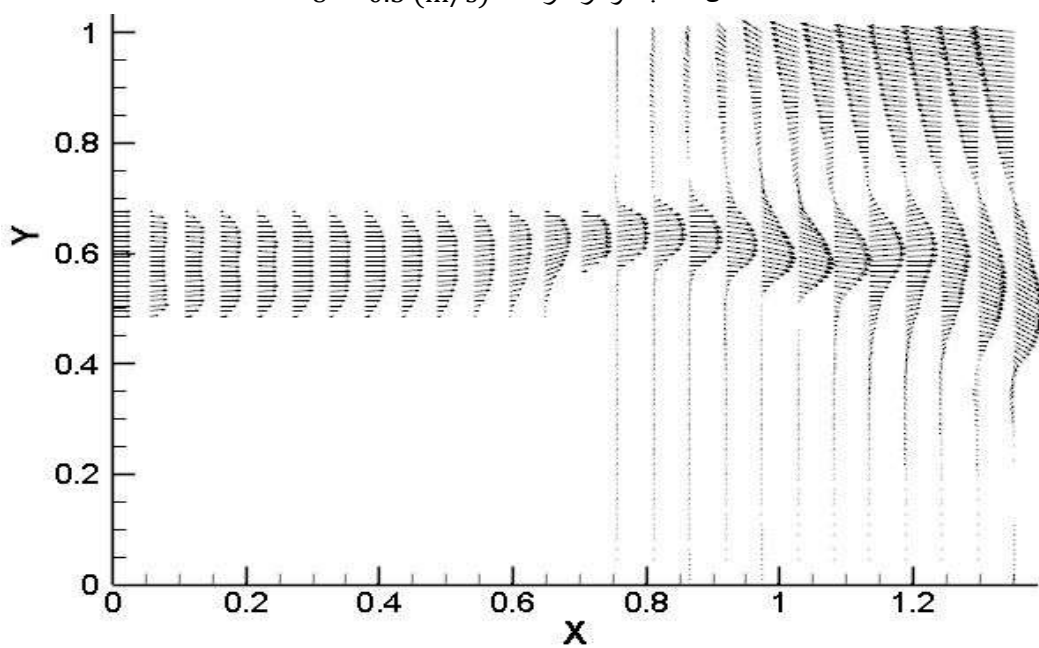
شکل‌های ۷-۴ تا ۱۵-۴ به بررسی اثر افزایش سرعت در پایداری شعله در یک مشعل ساده با یک جریان سوخت و هوای پیش‌آمیخته در نسبت هم‌ارزی 0.85 می‌پردازد. همان‌طور که در شکل‌ها مشاهده می‌شود در سرعت $1 (m/s)$ شعله بر روی مشعل لنگر انداخته در حالی‌که در سرعت‌های $0.5 (m/s)$ و $1.2 (m/s)$ شعله کشیده‌تر است و تمایل برای جدا شدن از سطح مشعل را دارند. شکل ۸-۴، نمودار سرعت را برای سرعت ورودی $0.5 (m/s)$ نشان می‌دهد همان‌طور که در شکل دیده می‌شود در خروجی مشعل سرعت افزایش می‌یابد و تقریباً به بیشترین مقدار خود می‌رسد، و در داخل مشعل، در نزدیکی دیواره‌ها سرعت تقریباً صفر است و با فاصله گرفتن از دیواره‌ها سرعت به $1 (m/s)$ می‌رسد.



شکل ۷-۴: نمودار دما، $U = 0.5 (m/s)$



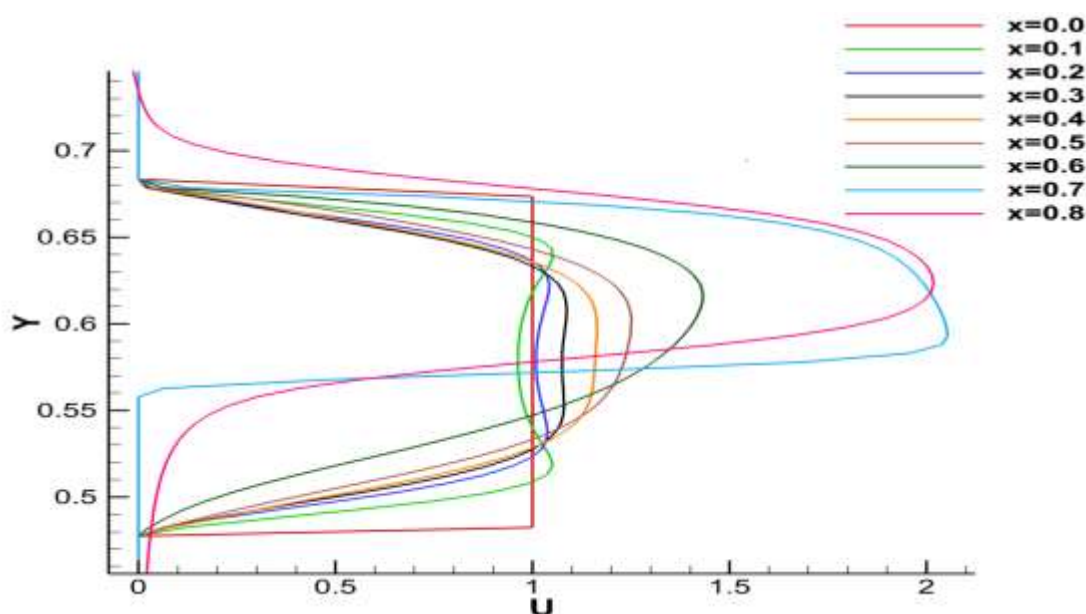
شکل ۴-۸: نمودار سرعت، $U = 0.5 \text{ (m/s)}$



شکل ۴-۹: بردارهای سرعت

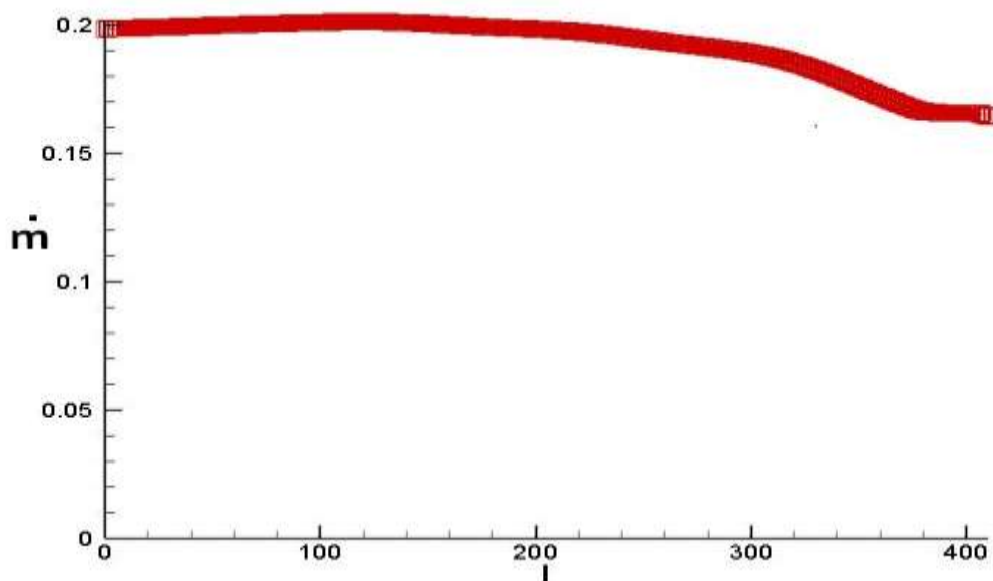
شکل ۴-۹، نمودار بردارهای سرعت را نشان می‌دهد. جریان با سرعتی یکنواخت وارد کانال می‌شود، پروفیل‌های سهمی جریان در طول کانال نشان می‌دهد که در کنار دیواره‌ها سرعت جریان به صفر می‌رسد.

رسد اما با فاصله گرفتن از دیواره‌ها مقدار سرعت افزایش می‌یابد. با نزدیک شدن به ناحیه گلویی در مشعل جریان تحت تاثیر تغییر هندسه مشعل قرار می‌گیرد و این را به جریان بالادست نیز منتقل می‌کند. علت جریان برگشتی در قسمت سمت راست و در بالای شکل به دلیل پایین بودن ممنتوم است که در این حالت فشار خروجی بر ممنتوم جریان غلبه کرده و جریان برمی‌گردد.



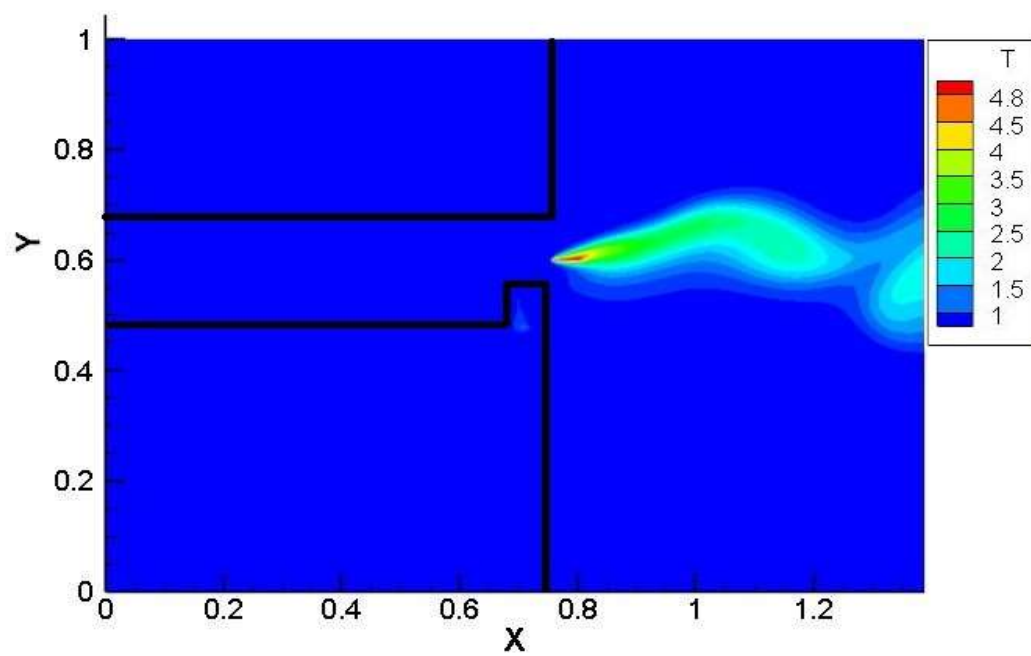
شکل ۴-۱۰: نمودار پروفیل‌های سرعت

شکل ۴-۱۰، پروفیل‌های سرعت در مقاطع عرضی مختلف را نشان می‌دهد. در ورودی همانطور که دیده می‌شود جریان با سرعت ثابت و یکنواخت وارد مشعل می‌شود، با پیشروی در داخل کانال ورودی مشعل و نزدیک‌تر شدن به سمت ناحیه گلوگاه، سرعت جریان افزایش می‌یابد و در گلوگاه سرعت تقریباً دو برابر می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود در نزدیکی دیواره عمودی در گلوگاه سرعت تقریباً صفر شده است. در مجموع با بررسی پروفیل‌های سرعت در نقاط مختلف، تغییر هندسه در خروجی مشعل جریان بالادست را دستخوش تغییرات می‌کند و بر روی پروفیل سرعت نیز تاثیر می‌گذارد.

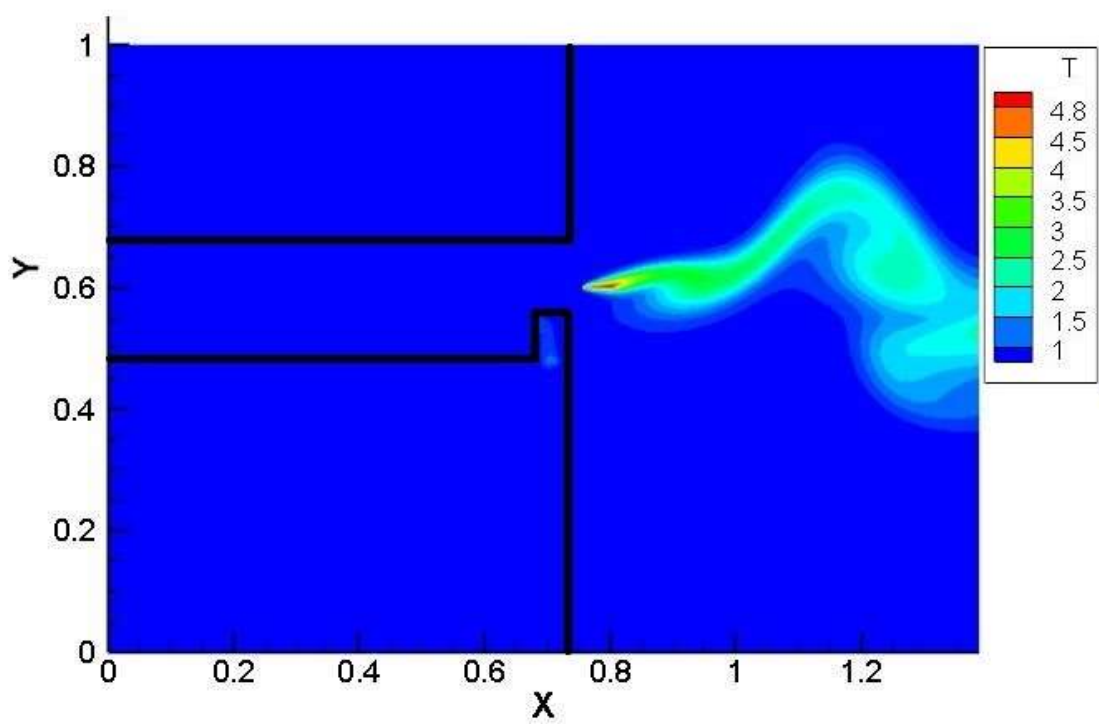


شکل ۴-۱۱: نمودار دبی جرمی در مقاطع مختلف در مجرا

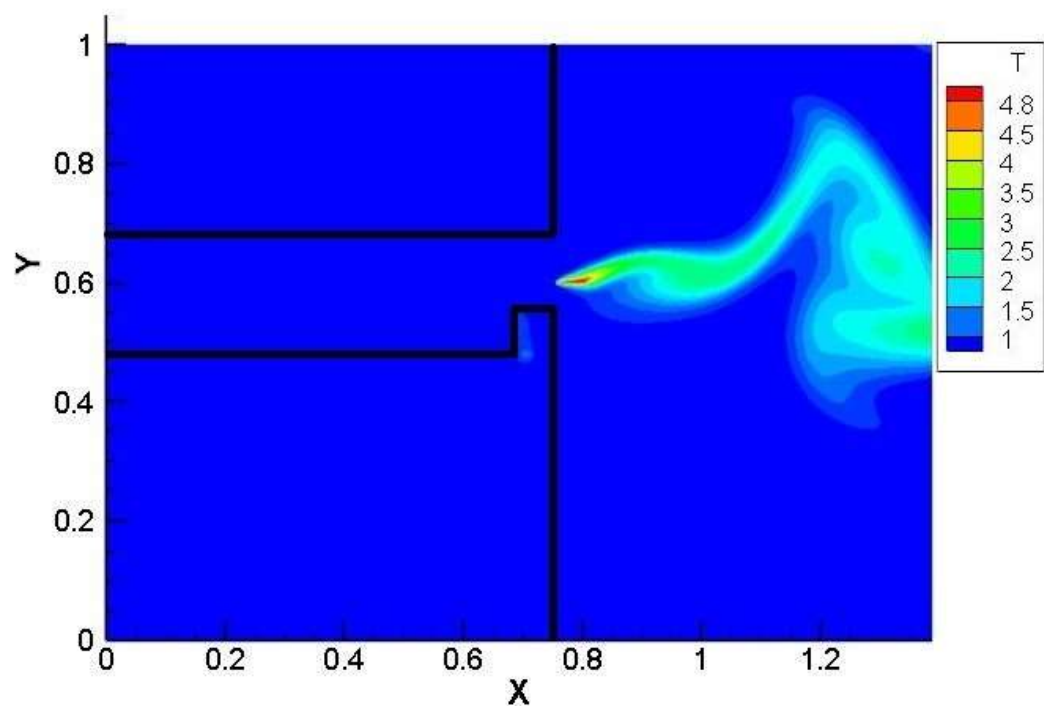
شکل ۴-۱۱، نمودار دبی جرمی را در مقاطع مختلف مجرا نشان می‌دهد. در شکل دیده می‌شود در طول کانال ورودی مشعل دبی جرمی در مقاطع مختلف ثابت است و شرط پیوستگی به خوبی ارضا می‌شود، اما با ورود جریان به ناحیه گلوگاه در کانال، مقداری کاهش در اندازه دبی اتفاق افتاده است. از نمودار دبی جرمی می‌توان به این نتیجه رسید که جریان در کانال ورودی مشعل به خوبی مدل شده است اما با خروج جریان از مشعل و ورود به فضای بیرونی به دلیل شرط مرزی انتخاب شده در مرز خروجی و به وجود آمدن جریان برگشتی در خروج، مدلسازی با خطا همراه شده است.



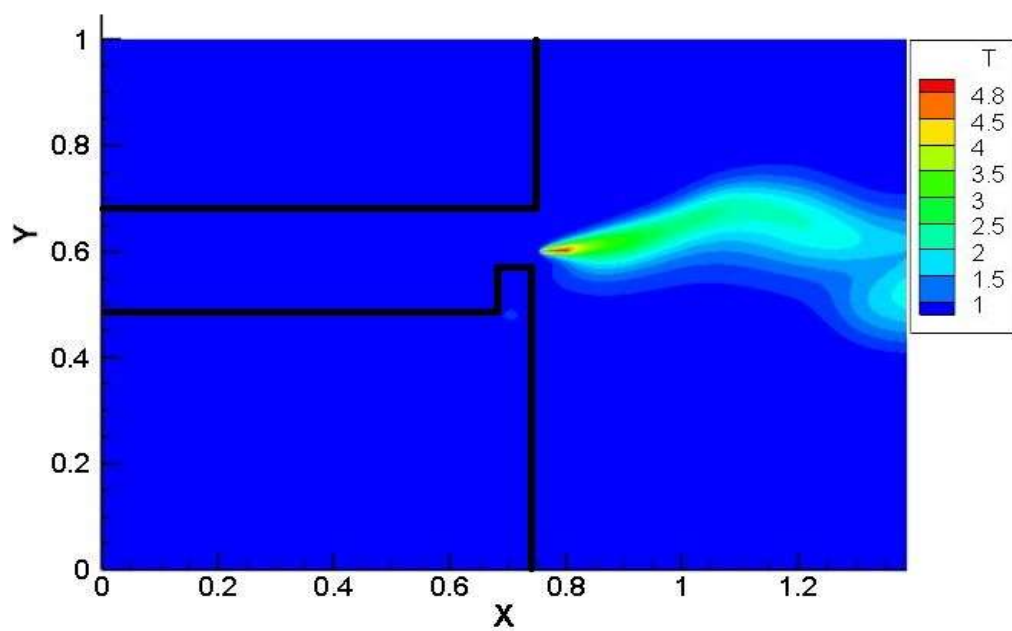
شکل ۴-۱۲: نمودار دما، $U = 0.6$ (m/s)



شکل ۴-۱۳: نمودار دما، $U = 0.8$ (m/s)

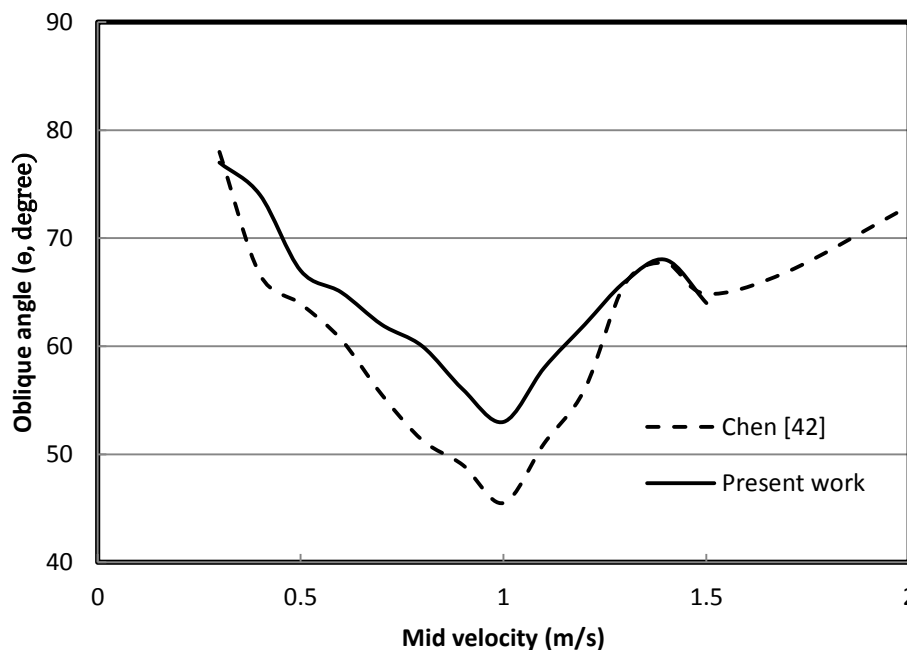


شکل ۴-۱: نمودار دما، $U = 1$ (m/s)



شکل ۴-۱: نمودار دما، $U = 1.2$ (m/s)

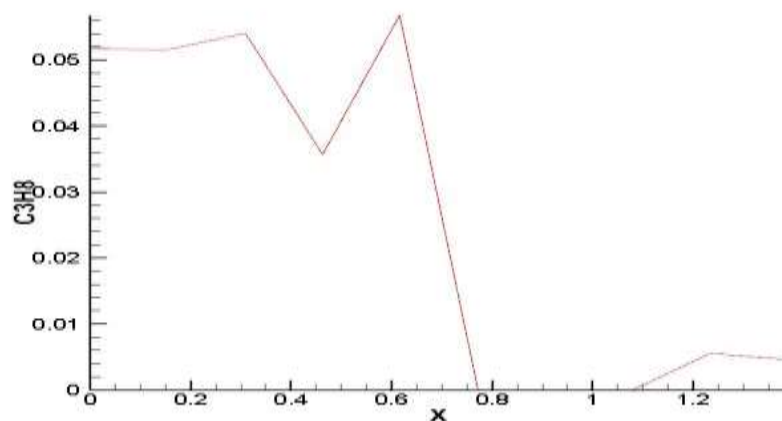
شکل ۴-۱۶ به طور مفصل تر به بررسی شکل شعله در محدوده وسیع تری از سرعت های مختلف می پردازد. در منطقه واکنش، به علت تعاملاتی موجود بین شعله و جریان، باعث می شود که به شدت روی هندسه شعله تاثیر بگذارد، در نتیجه یک زاویه مورب برای این نوع شعله های برخاسته تعریف می شود [۴۱]. با توجه به هندسه ساده شعله (دو بعدی)، زاویه مورب، فاصله بین صفحه عمودی (لبه خروجی مشعل) و راس شعله را شامل می شود. همان طور که در شکل دیده می شود کمترین مقدار این زاویه 53° است که در سرعت 1 (m/s) اتفاق می افتد. با کاهش زاویه مورب، راس شعله به سمت بالادست جریان خم می شود، که نشان می دهد سرعت سوخت در شعله برخاسته افزایش می یابد و به بیشترین مقدار خود در سرعت 1 (m/s) می رسد به دلیل محدودیت عدد ماخ ($Ma \ll 1$) در شبکه لتیس بولتزمن محدوده سرعت مدل شده $0.3-1.5 \text{ (m/s)}$ می باشد. نتیجه این بررسی با کار چن و همکاران [۴۲] مقایسه شده است و با توجه به نتایج به دست آمده ملاحظه می گردد بیشترین میزان خطا در سرعت 0.8 (m/s) اتفاق می افتد و میزان آن ۱۵ درصد می باشد که با تقریب خوبی می توان به صحت بررسی های انجام شده پی برد.



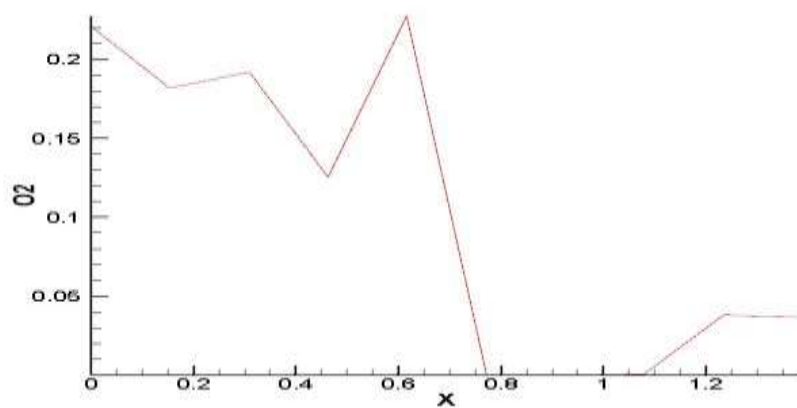
شکل ۴-۱۶: تغییرات زاویه شعله برحسب تغییرات سرعت

۴-۷-۱-۱ بررسی نمودار غلظت گونه‌ها:

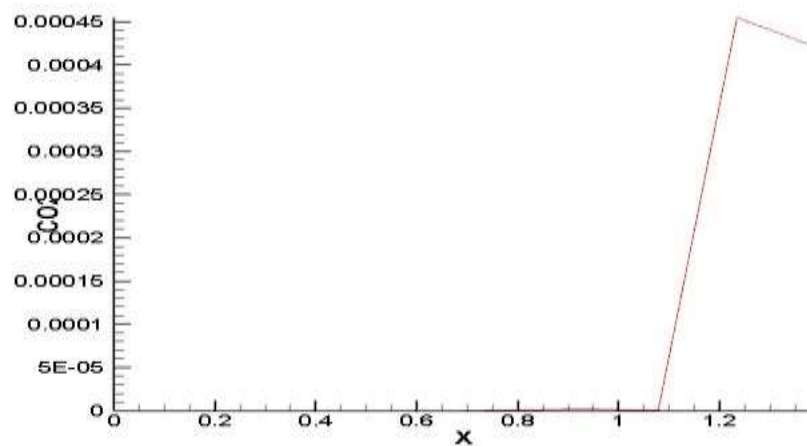
نمودارهای ۴-۱۷ تا ۴-۲۸ کسر جرمی گونه‌های واکنش دهنده و محصولات را در مقاطع عرضی مختلف، برای سرعت ۱ متر بر ثانیه و نسبت هم‌ارزی ۰/۸۵ نشان می‌دهد. در نمودارهای ۴-۱۷ و ۴-۱۸ و ۴-۲۱ و ۴-۲۲ و ۴-۲۵ و ۴-۲۶ با فعال شدن احتراق، گونه‌های شرکت کننده در واکنش مصرف می‌شوند و غلظت آن‌ها کاهش می‌یابد، اما تغییرات کسر جرمی واکنش‌دهنده‌ها در نزدیکی دیواره‌ها، در طول مشعل نیز دیده می‌شود که این موضوع توجیهی ندارد و می‌بایست کسر جرمی در طول مشعل برای واکنش‌دهنده‌ها ثابت باقی می‌ماند زیرا احتراق در خروجی مشعل رخ می‌دهد و از آن به بعد تغییر در کسر جرمی باید مشاهده شود. نمودارهای ۴-۱۹ و ۴-۲۰ و ۴-۲۳ و ۴-۲۴ و ۴-۲۷ و ۴-۲۸ تولید محصولات واکنش (H_2O و CO_2) را پس از احتراق نشان می‌دهد.



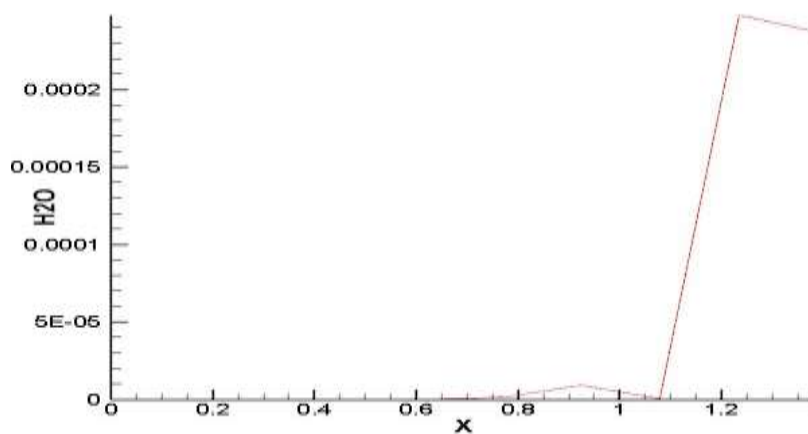
شکل ۴-۱۷: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $y/H = 0.5$



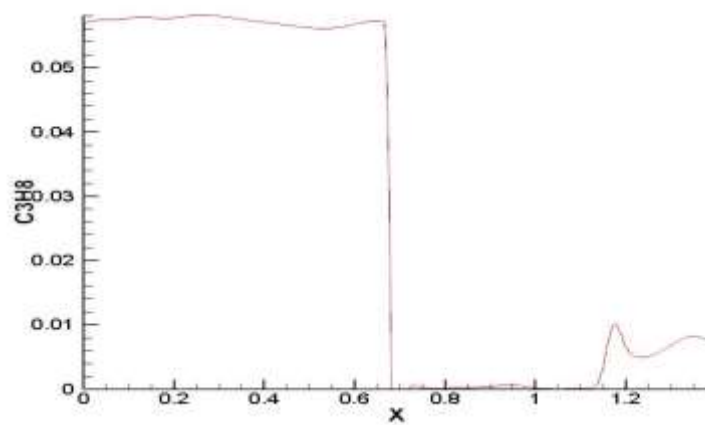
شکل ۴-۱۸: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $y/H = 0.5$



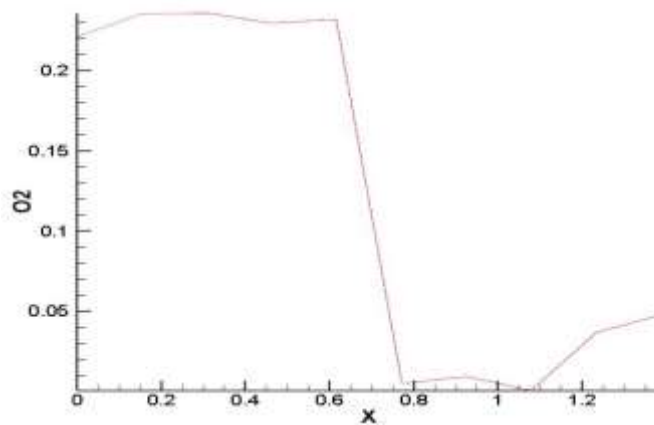
شکل ۴-۱۹: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $y/H = 0.5$



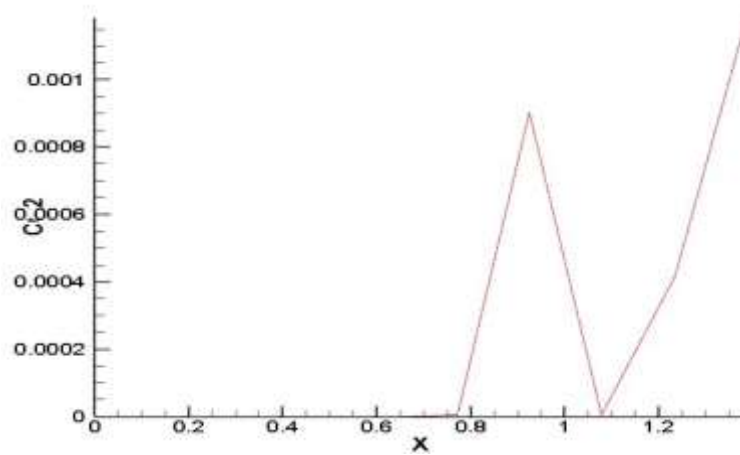
شکل ۴-۲۰: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی
 $y/H = 0.5$



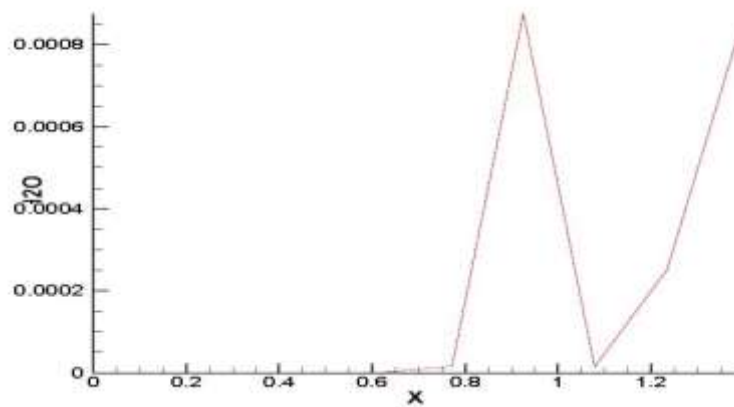
شکل ۴-۲۱: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $y/H = 0.55$



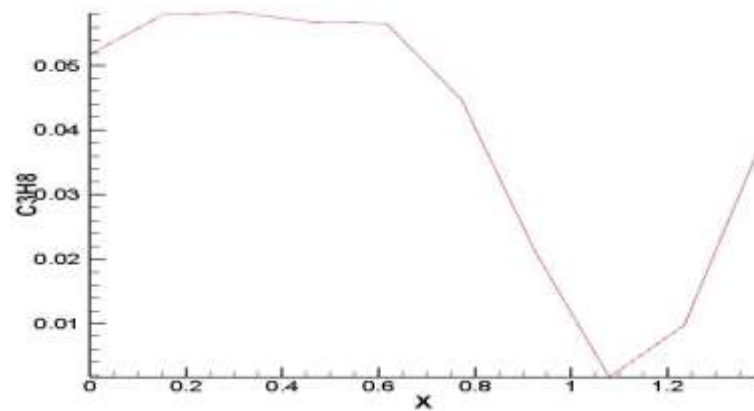
شکل ۴-۲۲: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $y/H = 0.55$



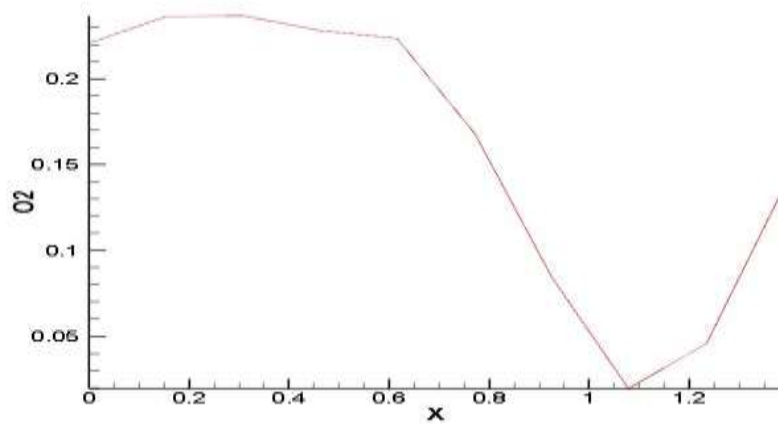
شکل ۴-۲۳: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $y/H = 0.55$



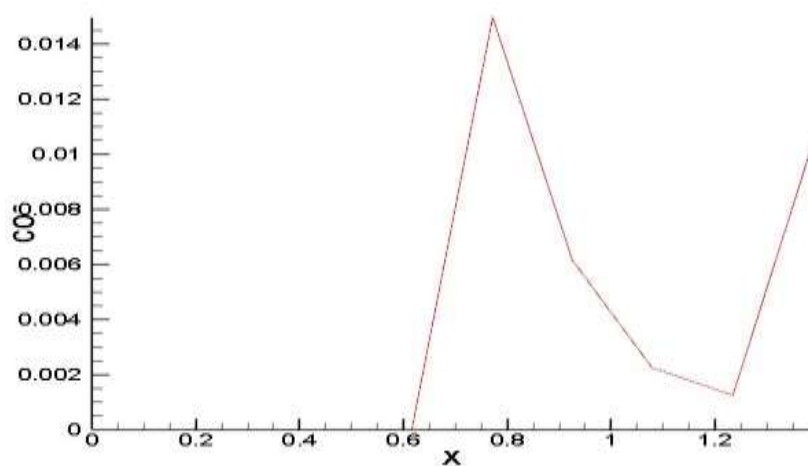
شکل ۴-۲۴: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی $y/H = 0.55$



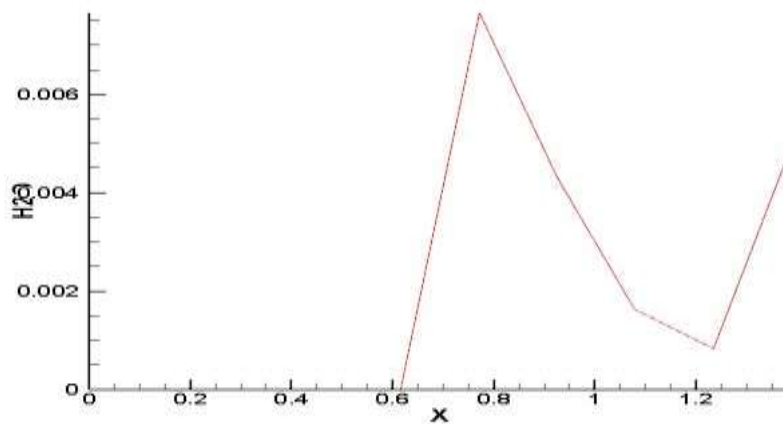
شکل ۴-۲۵: نمودار کسر جرمی سوخت در مقطع عرضی $y/H = 0.6$



شکل ۴-۲۶: نمودار کسر جرمی هوا در مقطع عرضی $y/H = 0.6$



شکل ۴-۲۷: نمودار کسر جرمی CO_2 در مقطع عرضی $y/H = 0.6$



شکل ۴-۲۸: نمودار کسر جرمی H_2O در مقطع عرضی $y/H = 0.6$

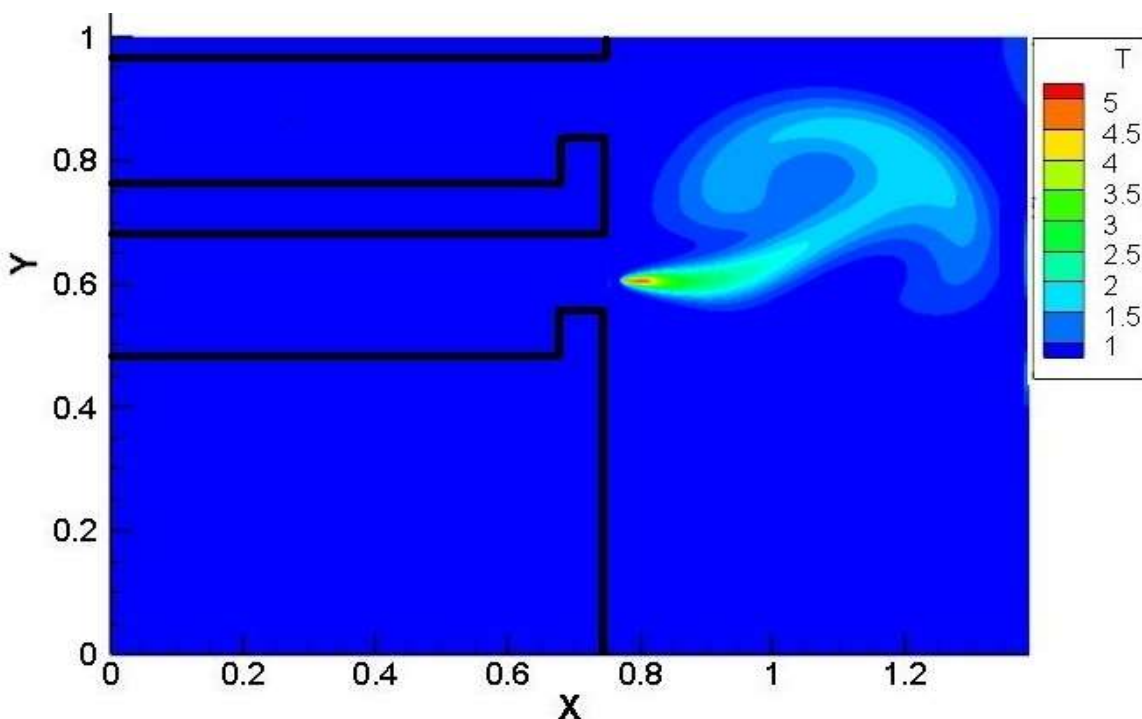
تمامی بررسی‌های انجام شده در بالا برای حالتی بود که جریان سوخت و هوا از مجرای میانی وارد مشعل می‌شدند و از مجرای خارجی و داخلی مشعل جریانی وارد نمی‌شد، به عبارت دیگر حالت تک‌جریانی^{۸۰} بررسی شد. در ادامه مطالعات به بررسی چگونگی پایداری شعله در حالت چندجریانی^{۸۱} پرداخته می‌شود.

⁸⁰ - Single-flow mode

⁸¹ - Co-flow mode

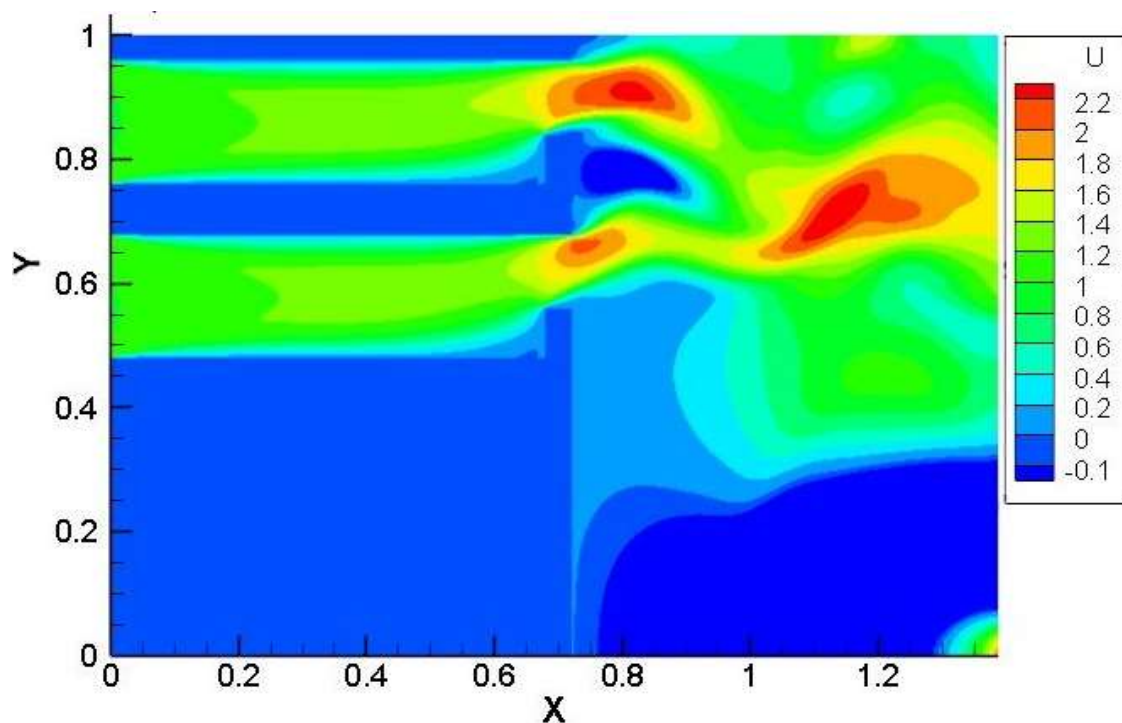
۲-۷-۴ حالت چند جریان

شکل ۲۹-۴ پیکربندی شعله را برای چند جریان در مقایسه با شکل‌های ۴-۵ و ۴-۶ نشان می‌دهد. در این شکل مخلوط سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی 0.85 از مجرای میانی و هوا از مجرای خارجی وارد مشعل می‌شوند. دیده می‌شود زمانی که هوا با سرعتی بزرگ‌تر از یک سرعت حدی وارد مشعل می‌شود، یک شعله شبه‌مخروطی^{۸۲} با پایداری بیشتر ظاهر می‌شود، راس شعله به سمت پایین خم می‌شود و ارتفاع برخاست شعله نسبت به شعله برخاسته در حالت تک جریان کمتر می‌شود و شکلی شبیه به شعله مخروطی نمایان می‌شود. در این حالت یک جریان گردابه‌ای کوچک بین مجرای میانی و مجرای خارجی تشکیل می‌شود که منطقه گردابه‌ای متقاطع نامیده می‌شود که یک عامل کلیدی برای تغییر از یک شعله برخاسته به یک شعله شبه‌مخروطی می‌تواند باشد. این منطقه در شکل ۲۹-۴ الف نشان داده شده است.



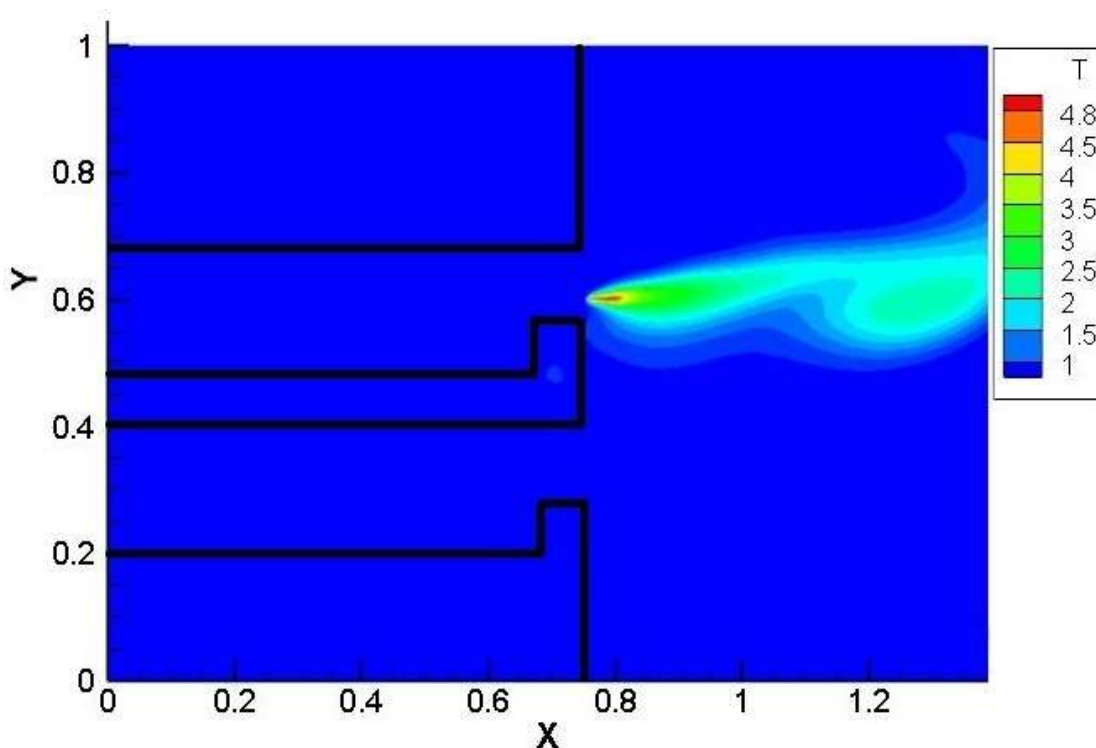
شکل ۲۹-۴: شعله شبه‌مخروطی ($\phi = 0.85, U_{mid} = 1, U_{out} = 1 \text{ m/s}$)

⁸² - Cone-like flame



شکل ۴-۲۹-الف: بررسی نمودار سرعت و منطقه گردابه‌ای در حالت چندجریان با تزریق خارجی هوا

شکل ۴-۳۰ به بررسی پیکر بندی شعله در حالت چند جریان برای تزریق داخلی هوا می‌پردازد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود زمانی که هوا از مجرای داخلی وارد مشعل می‌شود در خروجی تغییراتی در شکل شعله مشاهده نمی‌شود و بیانگر این موضوع است که تزریق داخلی هوا تاثیر چندانی روی شعله برخاسته ندارد.

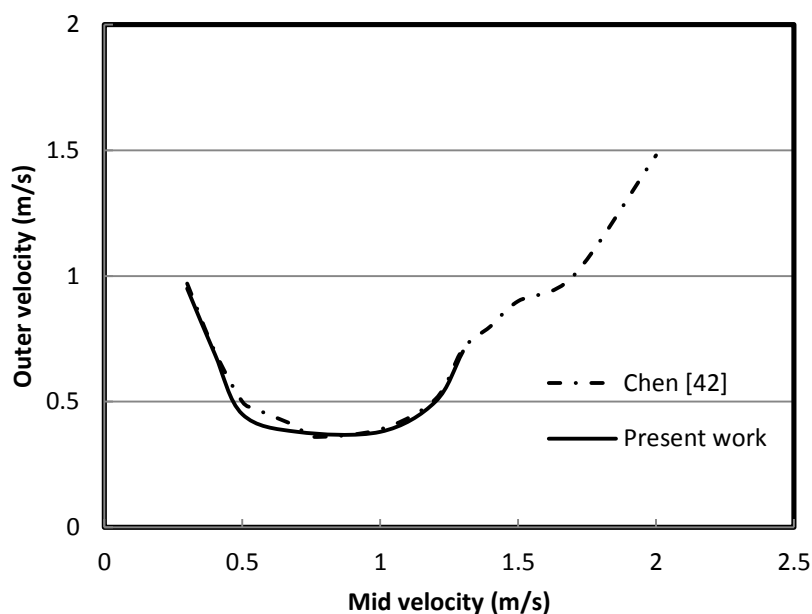


شکل ۳۰-۴: شعله با تزریق داخلی هوا ($\phi = 0.85, U_{mid} = 0.5, U_{in} = 1 \text{ m/s}$)

برای مشخص تر شدن شرایط تبدیل شعله، که شعله برخاسته به یک شعله شبه مخروطی تغییر پیدا می کند یک آستانه سرعت برای هوای خارجی در حالت چند جریان تعریف می شود که سرعت موثر $(U_0^*)^{\wedge 3}$ نامیده می شود. در تزریق میانی نسبت هم ارزی ثابت نگه داشته می شود ($\phi = 0.85$) و سرعت میانی در محدوده 0.1 (m/s) تا 1.4 (m/s) تغییر داده می شود. با تغییرات سرعت هوا در مجرای خارجی به ازای هر سرعت میانی، با تغییرات شکل شعله از شعله برخاسته به شعله مخروطی U_0^* اندازه گیری می شود. به طور کلی، منطقه واکنش در شعله آرام پیش آمیخته در موقعیتی که سرعت مخلوط به تعادل با سرعت سوخت برسد، پایدار می شود. از این رو هندسه مانع این امکان را به شعله می دهد که به سمت بالادست منطقه چرخشی توسعه یابد، زیرا که حرارت محلی انباشته شده به عنوان یک منبع پیوسته احتراقی عمل

می‌کند. نسبت سرعت، یک پارامتر موثر برای کنترل پایداری است، زیرا حرکت جریان چرخشی در پشت مانع نقش تعیین کننده‌ای را در واکنش اختلاط و پایداری در تمام سطح شعله ایفا می‌کند [۴۳].

شکل ۴-۳۱، چگونگی پایداری شعله را با تغییرات سرعت مخلوط و سرعت هوا نشان می‌دهد. بالای نمودار حدود سرعت‌ها را برای شعله شبه‌مخروطی و زیر نمودار حدود سرعت‌ها را برای شعله برخاسته نشان می‌دهد. در نهایت نتیجه را با کار چن و همکارانش [۴۲] مقایسه شده است. در کار حاضر به دلیل محدودیت عدد ماخ در شبکه لتیس بولتزمن فقط تا سرعت 1.4 (m/s) مدل شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود بیشترین میزان خطا در سرعت میانی 0.5 (m/s) است که ۱۰ درصد است.

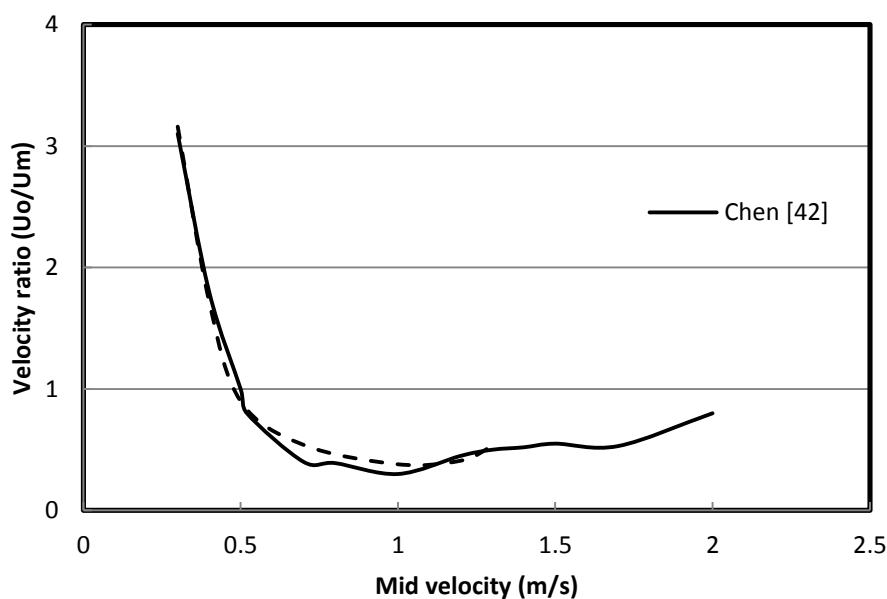


شکل ۴-۳۱: مرز بین شعله برخاسته و شعله شبه‌مخروطی

شکل ۴-۳۲، تغییرات نسبت سرعت^{۸۴} (γ) را برای یک شعله کم‌سوخت، بر حسب تغییرات سرعت سوخت در تزریق میانی نشان می‌دهد. زمانی که سرعت میانی از 0.5 (m/s) کمتر می‌شود، نسبت سرعت باید بیشتر از مقدار واحد افزایش یابد تا شعله از حالت برخاسته به حالت پایدار برسد، و همین‌طور با روند

⁸⁴ - Velocity ratio ($\frac{U_o}{U_m}$)

کاهش سرعت میانی، افزایش بیشتری در نسبت سرعت باید حاصل شود. با کاهش سرعت میانی به مقداری کمتر از 0.5 (m/s) ، برای تامین سوخت کافی برای تشکیل شعله برخاسته، نسبت سرعت باید به اندازه‌ای بزرگ شود که یک منطقه چرخشی را تشکیل دهد که بتواند محصولات داغ احتراقی حاصل از شعله میانی را متراکم کند. با افزایش سرعت میانی از مقدار 0.5 (m/s) ، حداقل نسبت سرعت مورد نیاز برای تغییر شکل شعله در محدوده 0.33 تا 0.75 است. مقدار واکنش شیمیایی برای سرعت‌های بزرگتر از 0.5 (m/s) کافی است که یک شعله برخاسته را تشکیل دهد. نتیجه می‌شود که جریان هوا در مجرای خارجی مشعل نقش یک عایق را در برابر جریان هوای سرد ایفا می‌کند، که می‌تواند مانع خاموشی شعله شود. در این نمودار نیز محدوده سرعت میانی بین 0.3 (m/s) تا 1.4 (m/s) تعریف می‌شود. بالای نمودار حدود سرعت‌ها را برای شعله شبه‌مخروطی و زیر نمودار حدود سرعت‌ها را برای شعله برخاسته نشان می‌دهد.



شکل ۴-۳۲: مرز بین شعله برخاسته و شعله شبه‌مخروطی

به دلیل مشکلاتی که در شبیه‌سازی به روش شبکه لتیس بولتزمن وجود دارد، از جمله عدم دقت کافی در نتایج احتراقی حاصل شده و عدم امکان افزایش حوزه حل در قسمت خروجی مشعل به منظور بررسی بهتر نتایج احتراقی، در ادامه قسمتی از نتایج با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت شبیه‌سازی و با نتایج روش لتیس بولتزمن مقایسه شده است.

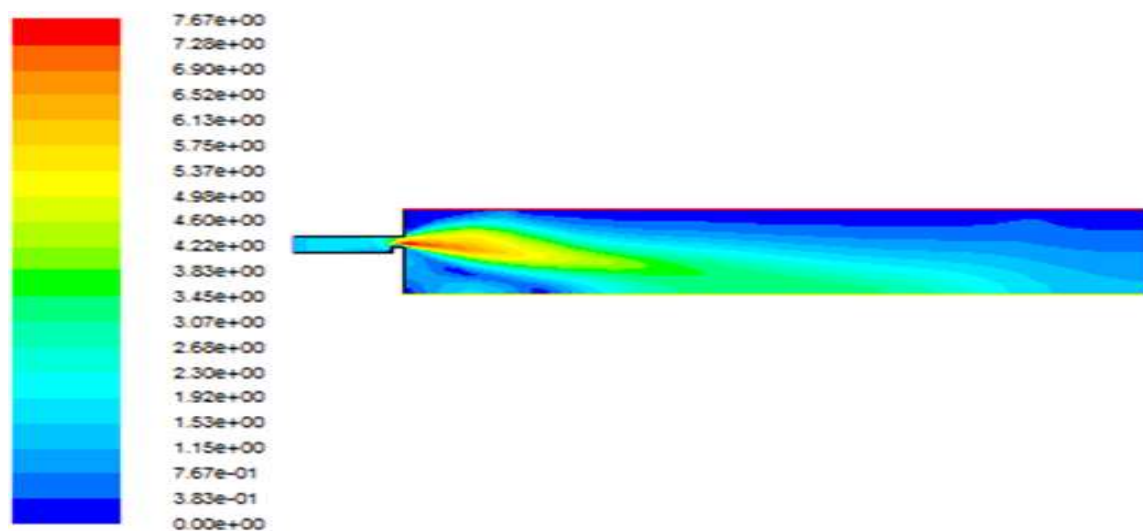
اطلاعات هندسه مدلسازی شده در نرم‌افزار گمبیت در جدول ۳-۴ آورده شده است:

جدول ۳-۴: شبیه‌سازی هندسه شکل در نرم‌افزار گمبیت

نوع شبکه انتخابی	اندازه هر شبکه	تعداد کل شبکه‌ها
Quad-Map	0.125	78000

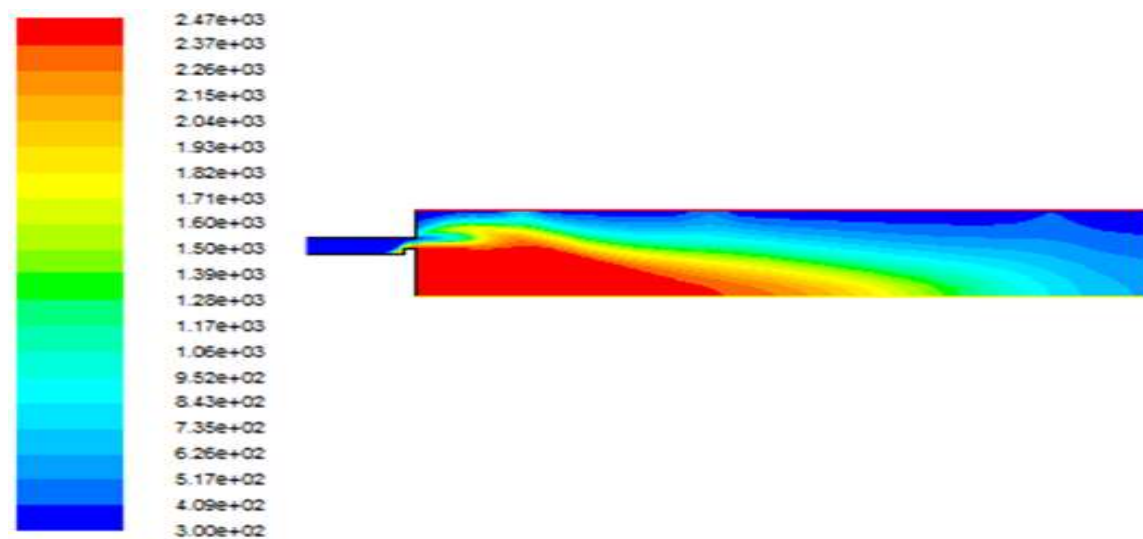
در نرم‌افزار فلوئنت از مدل ویسکوزیته $k-\epsilon$, RNG و احتراق به روش EDC مدل شده است. در تمامی مدلسازی‌های انجام شده توسط نرم‌افزار فلوئنت نسبت هم‌ارزی برای مخلوط پیش‌آمیخته سوخت و هوا که از مجرای میانی وارد مشعل می‌شود 0.85 و سرعت مخلوط میانی $1/5 \text{ m/s}$ در نظر گرفته شده است.

در شکل‌های ۳۳-۴ تا ۳۷-۴، طول محیط بیرونی، $E=135 \text{ mm}$ در نظر گرفته شده است.



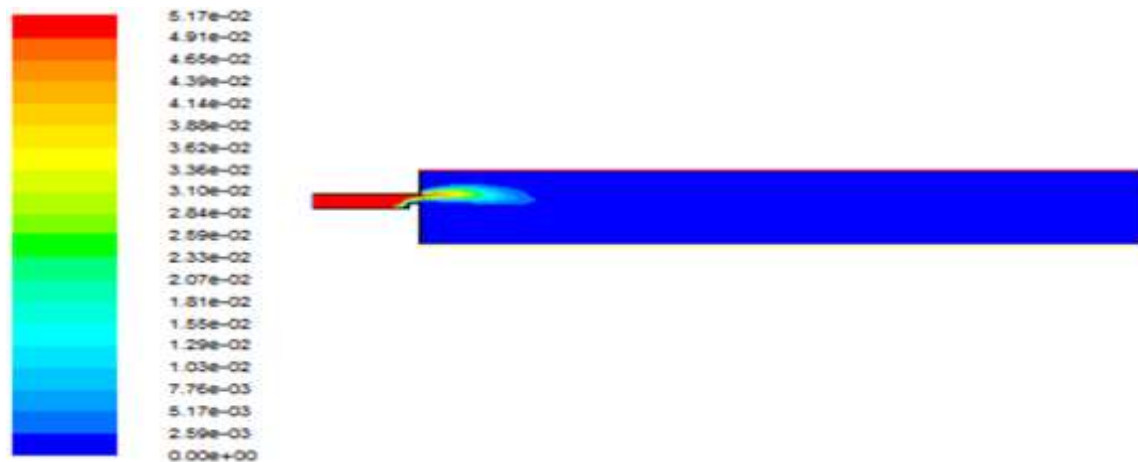
شکل ۳۳-۴: نمودار سرعت (m/s)

شکل ۳۳-۴ نمودار سرعت را نشان می‌دهد، در طول مشعل سرعت تقریباً ثابت باقی می‌ماند اما در خروجی مشعل سرعت افزایش می‌یابد و به تدریج با پیشروی در فضای بیرون از مقدار سرعت کاسته می‌شود. به علت تقارن در مرز پایینی، نمودار سرعت به سمت محور تقارن متمایل شده است.



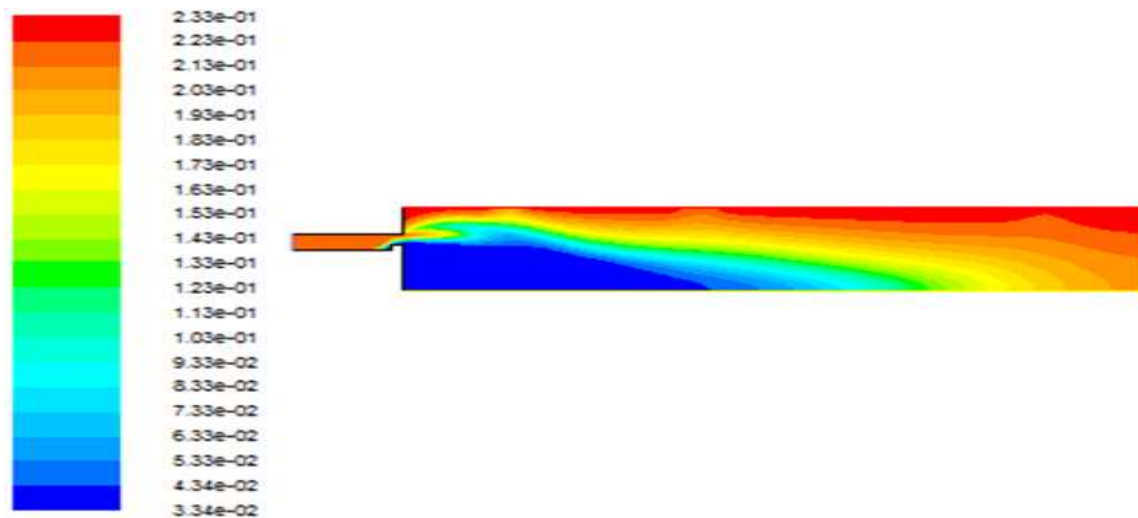
شکل ۳۴-۴: نمودار دما (K)

در شکل ۴-۳۴، در طول مشعل دما ثابت باقی می ماند اما در خروجی مشعل با اعمال جرقه و شکل گرفتن احتراق، دما ناگهان بالا می رود و شعله تشکیل می شود. به علت تقارن هندسه، شعله احتراقی به سمت مرز تقارن متمایل شده است. در این حالت یک شعله برخاسته تشکیل می شود.



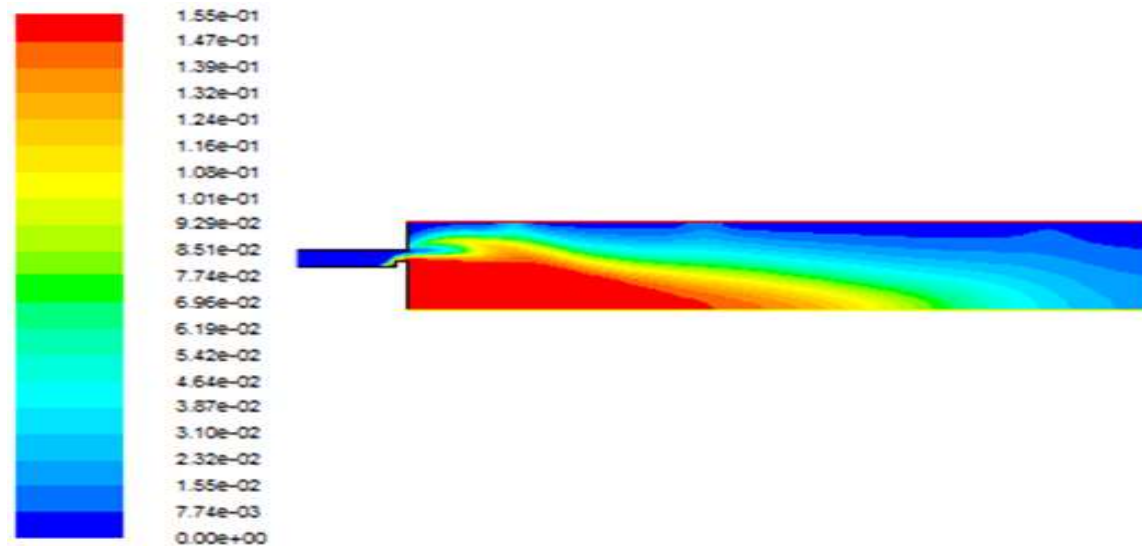
شکل ۴-۳۵: نمودار کسر جرمی سوخت

شکل ۴-۳۵ نمودار کسر جرمی سوخت را نشان می دهد، در طول مشعل و قبل از احتراق کسر جرمی مقدار ثابتی دارد و تغییر نمی کند اما بعد از جرقه سوخت در واکنش احتراقی شرکت می کند و به سرعت مصرف می شود.

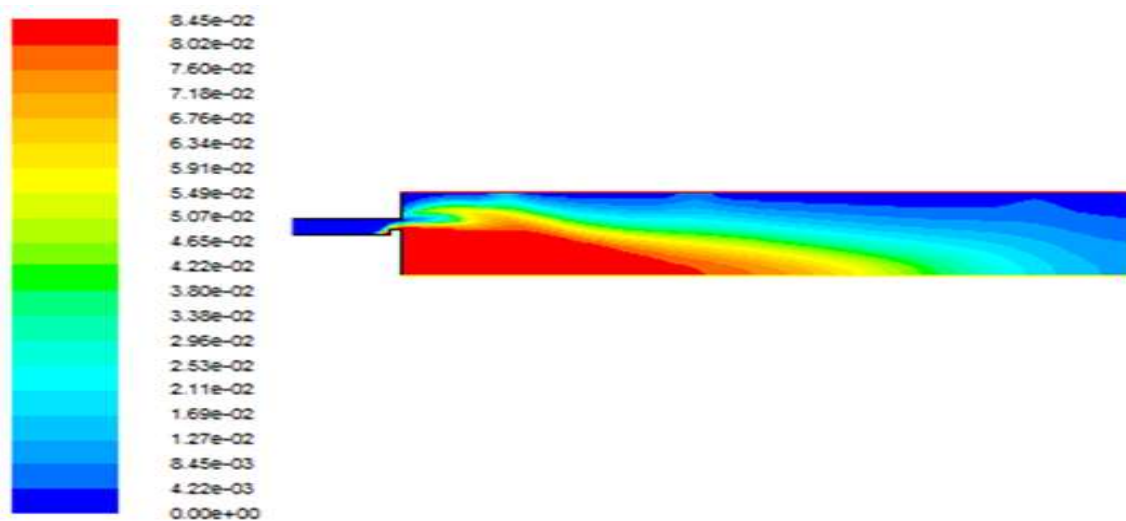


شکل ۴-۳۶: نمودار کسر جرمی هوا

شکل ۴-۳۶ نمودار کسر جرمی هوا را نشان می‌دهد، در ناحیه داخلی شعله به علت واکنش بین سوخت و هوا، کسر جرمی هوا به شدت کاهش می‌یابد.



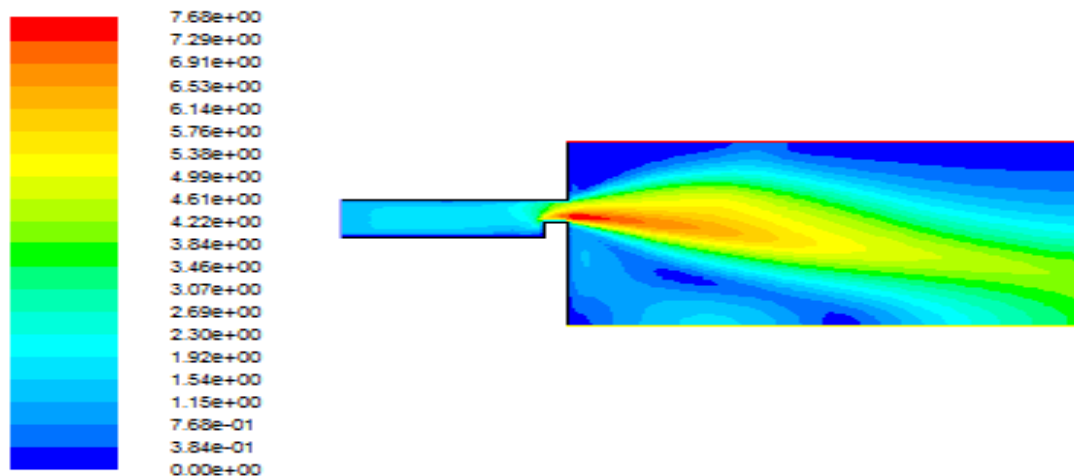
شکل ۴-۳۷: نمودار کسر جرمی CO_2



شکل ۴-۳۸: نمودار کسر جرمی H_2O

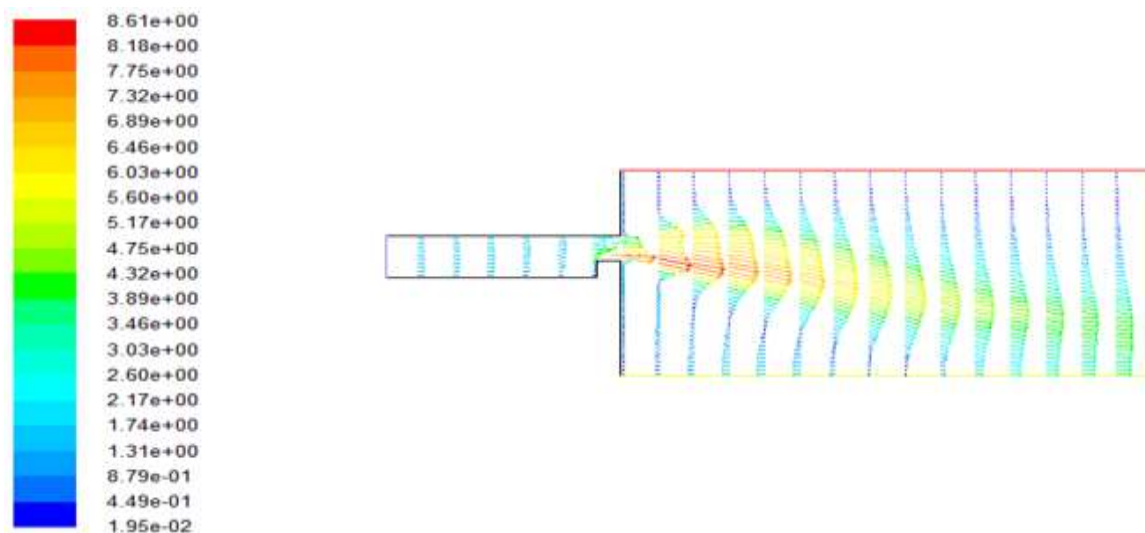
شکل‌های ۴-۳۷ و ۴-۳۸ نمودار کسر جرمی محصولات احتراقی را نشان می‌دهد که با پیشروی احتراق و مصرف سریع واکنش‌دهنده‌ها به سرعت محصولات احتراقی تولید می‌شوند.

در شکل‌های ۴-۳۹ تا ۴-۴۴، با جابجایی مرز خروجی طول فضای بیرونی، $E=45\text{mm}$ در نظر گرفته شده است. نمودارهای مربوط به هر یک از متغیرها نمایش داده شده است:



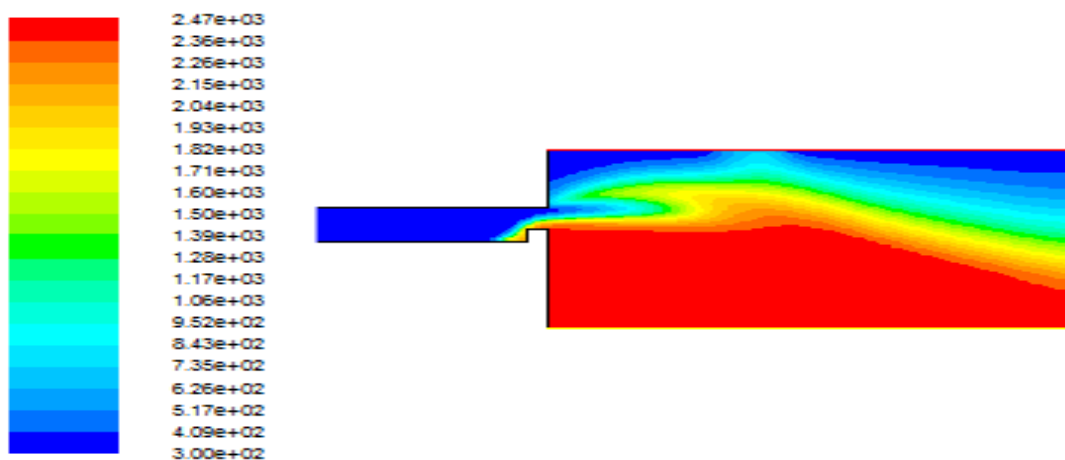
شکل ۴-۳۹: نمودار سرعت (m/s)

در شکل ۴-۳۹، نمودار سرعت نشان داده شده است در این شکل نیز مشاهده می‌شود که سرعت در طول مشعل تقریباً ثابت باقی می‌ماند و در خروجی مشعل به حداکثر می‌رسد و مقدار آن برابر مقدار حداکثر سرعت در شکل ۴-۳۳ است.



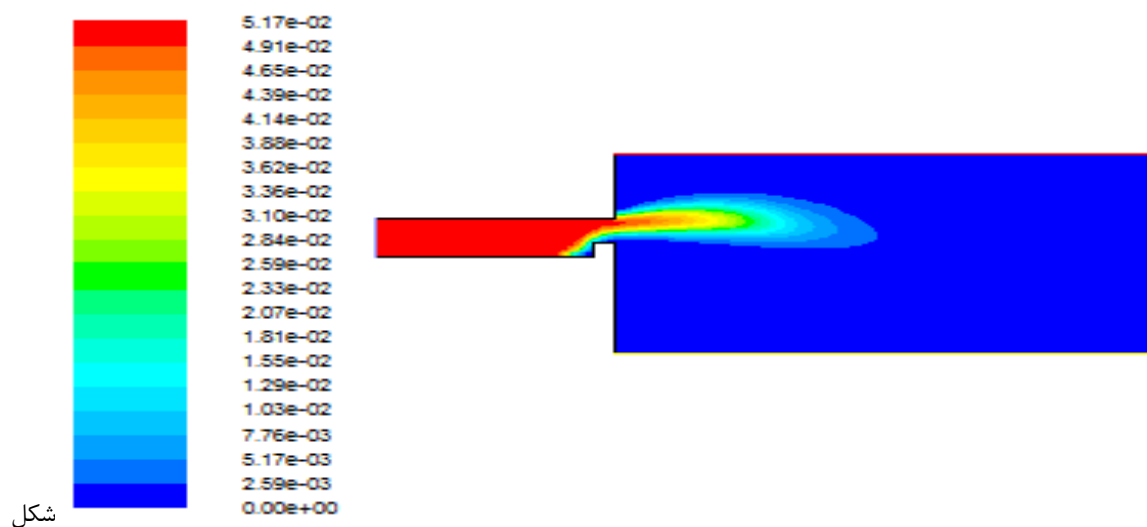
شکل ۴-۳۹-الف: نمودار بردارهای سرعت

شکل ۴-۳۹- الف، نمودار برداری سرعت را نشان می‌دهد. جریان با سرعت یکنواخت وارد مشعل می‌شود، در نزدیکی گلویی به علت هندسه خروجی مشعل، پروفیل سرعت نیز تحت تاثیر قرار می‌گیرد. جهت این بردارها به درک بهتر نمودار سرعت کمک می‌کند.



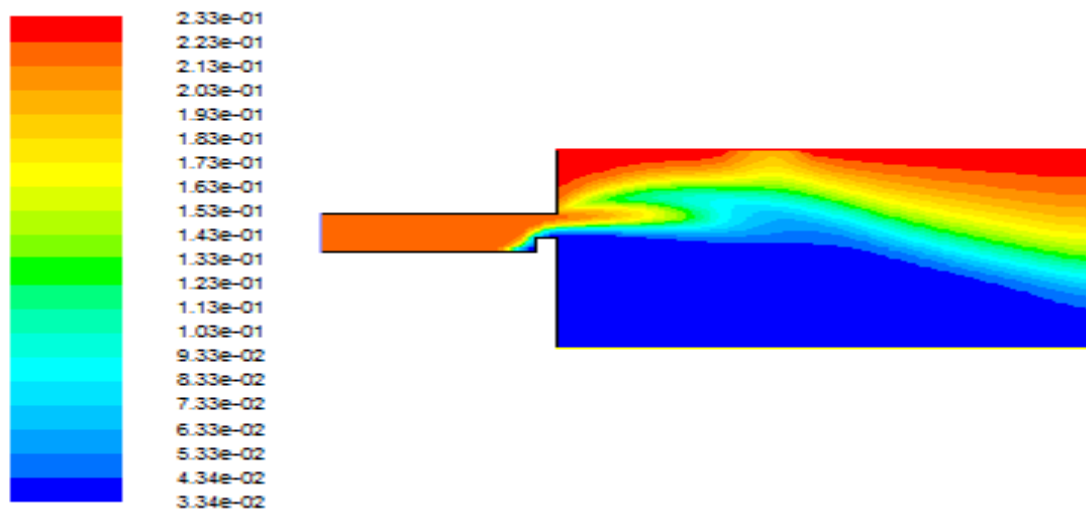
شکل ۴-۴۰: نمودار دما (K)

شکل ۴-۴۰، نمودار دما را نشان می‌دهد که ناحیه دمایی در این حالت مشابه ناحیه دما بالا در نمودار ۴-۳۴ است.

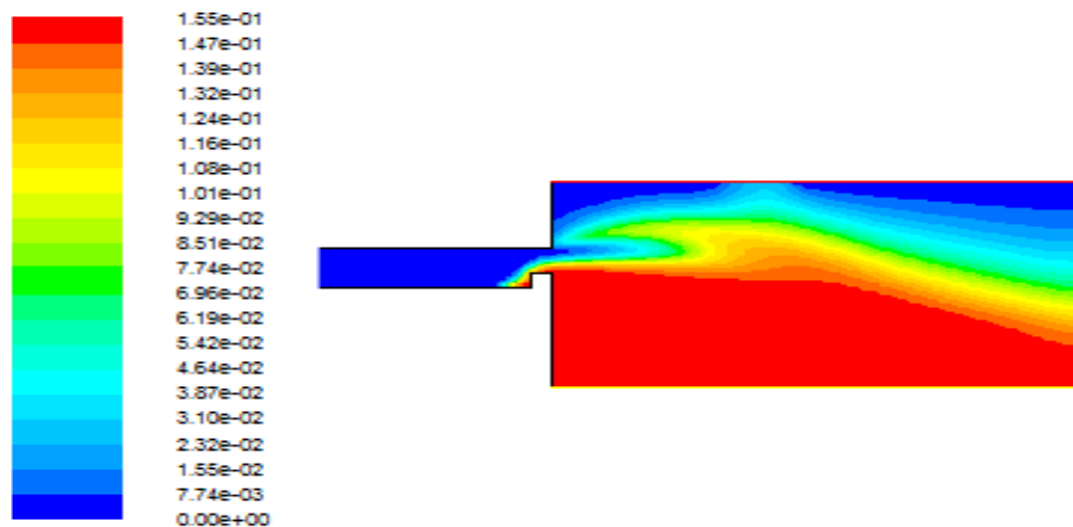


شکل ۴-۴۱: نمودار کسر جرمی سوخت

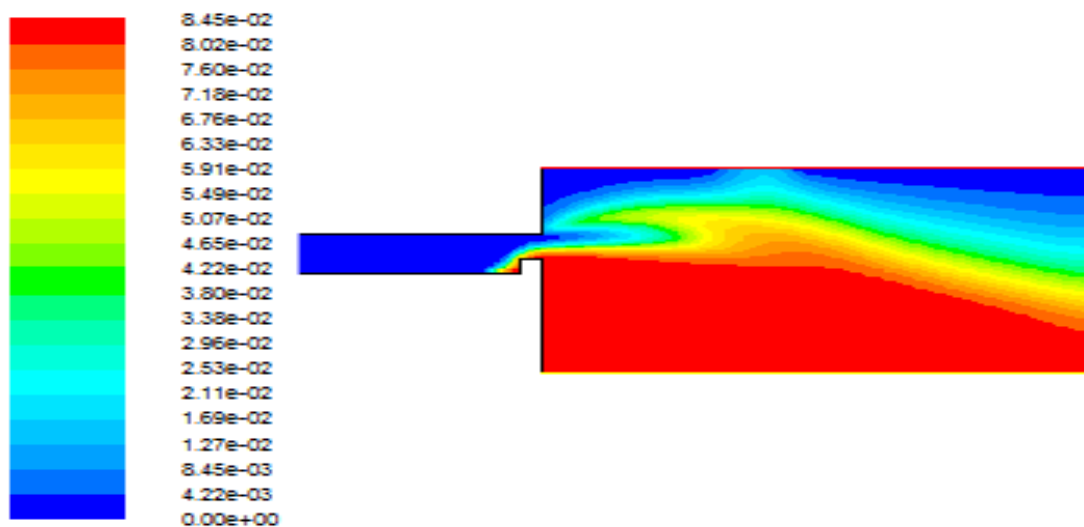
شکل ۴-۴۱، نمودار کسر جرمی سوخت را نشان می‌دهد که مشاهده می‌شود با شروع احتراق، سوخت نیز به سرعت مصرف می‌شود.



شکل ۴-۴۲: نمودار کسر جرمی هوا
شکل ۴-۴۲، نیز کاهش مقدار هوا را در ناحیه تشکیل شعله نشان می‌دهد.



شکل ۴-۴۳: نمودار کسر جرمی CO_2

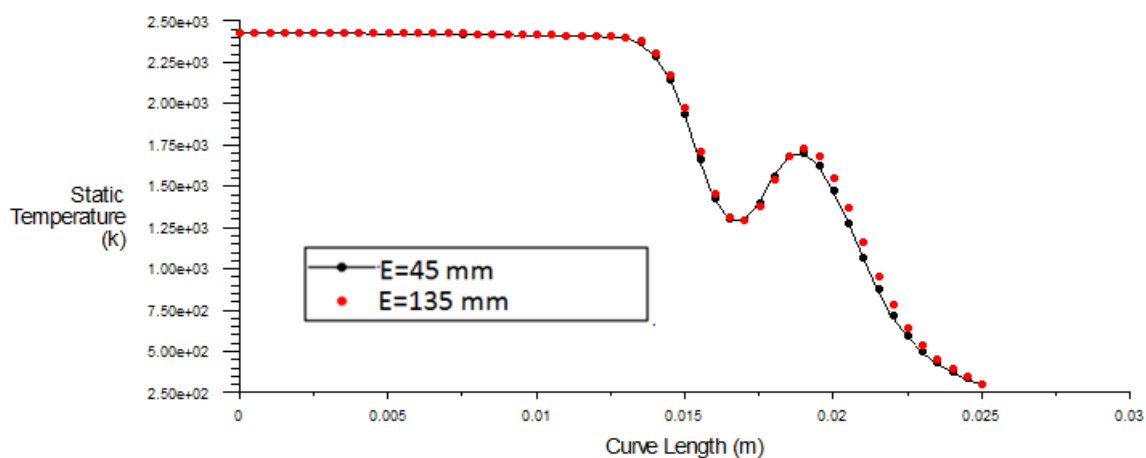


شکل ۴-۴۴: نمودار کسر جرمی H_2O

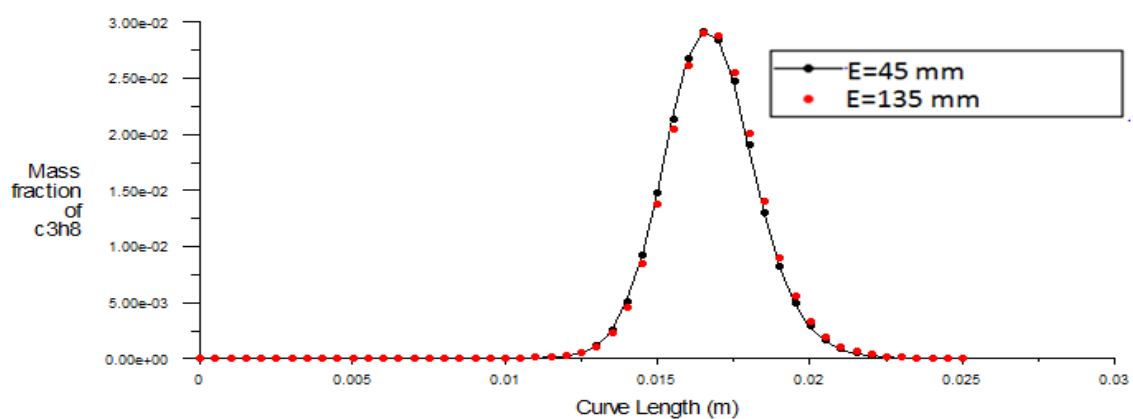
شکل‌های ۴-۴۳ و ۴-۴۴، نمودارهای کسر جرمی محصولات را نشان می‌دهد که بعد از احتراق به سرعت تولید می‌شوند.

در ادامه با مقایسه نمودارهای حاصل شده، در مقاطع طولی مختلف بطور دقیق‌تر به بررسی تاثیر جابجایی مرز خروجی در نتایج احتراقی پرداخته شده است:

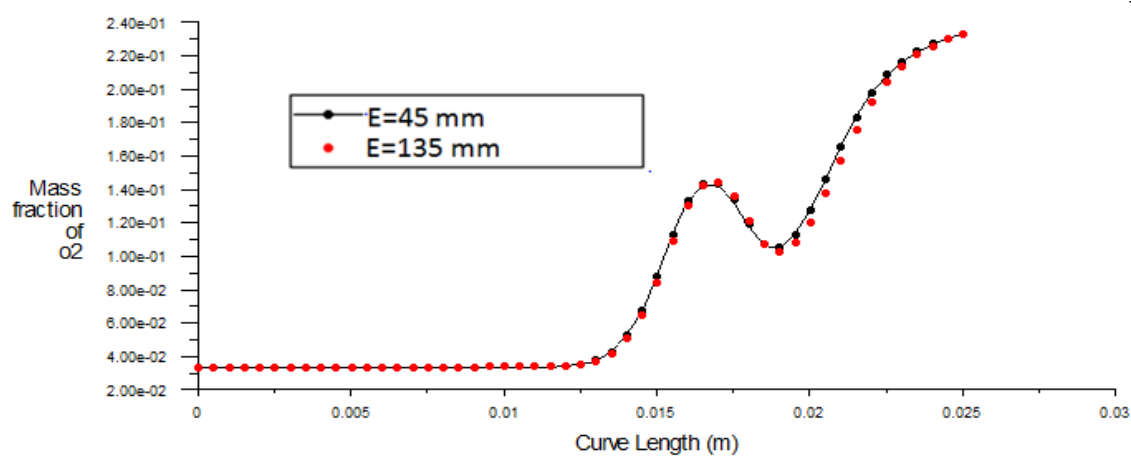
شکل‌های ۴-۴۵ تا ۴-۴۹ در مقطع طولی $X = 30 \text{ mm}$ رسم شده‌اند:



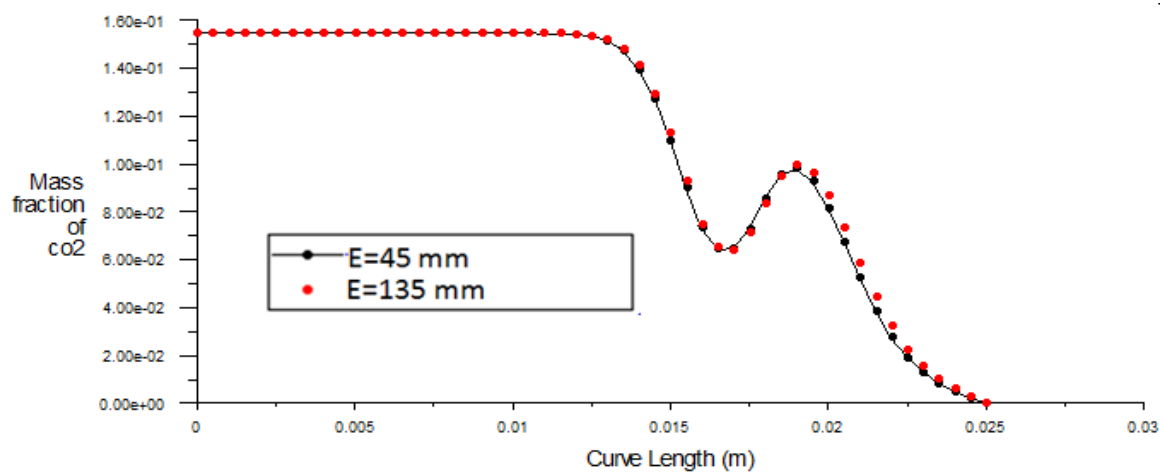
شکل ۴-۴۵: مقایسه نمودارهای دما



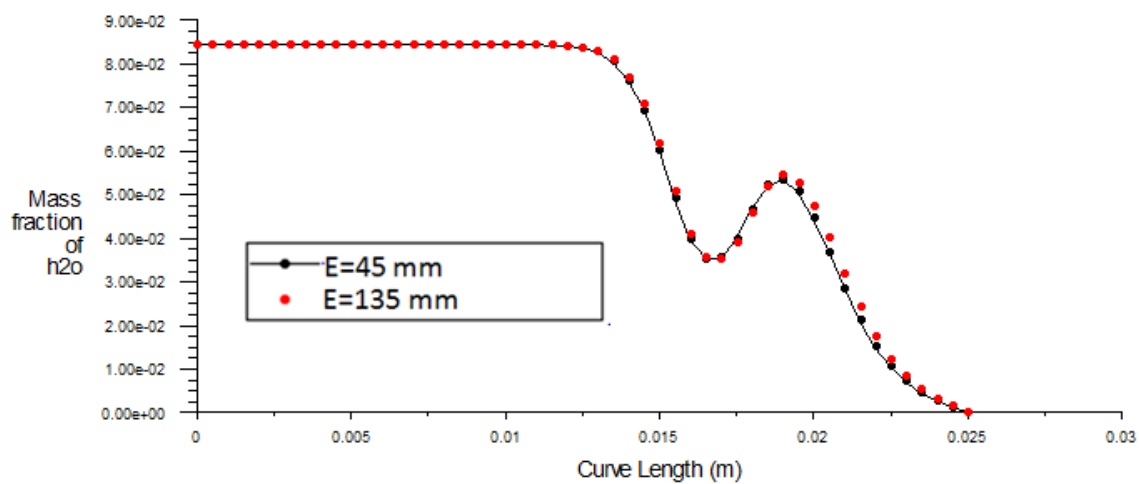
شکل ۴-۴۶: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت



شکل ۴-۴۷: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا

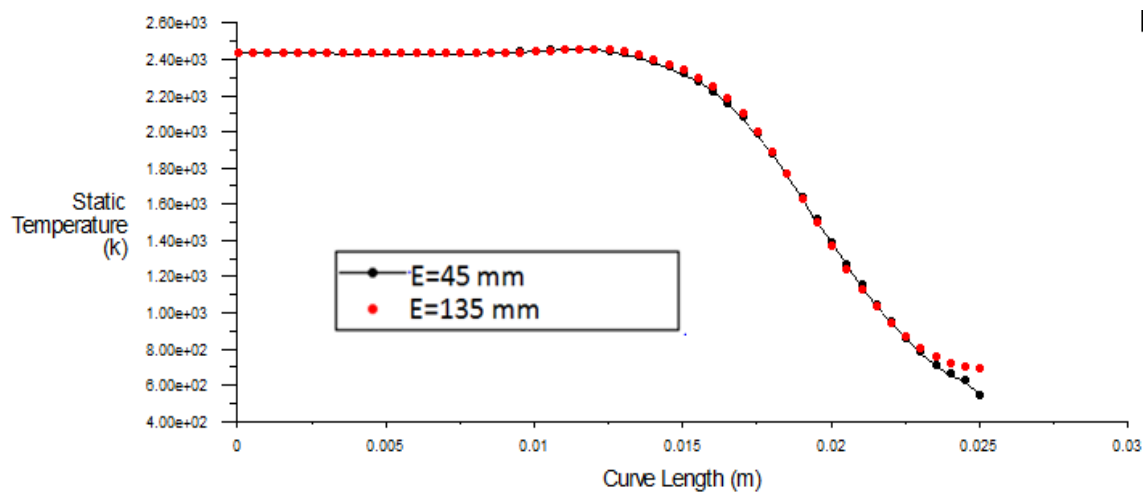


شکل ۴-۴۸: مقایسه نمودارهای کسر جرمی CO_2

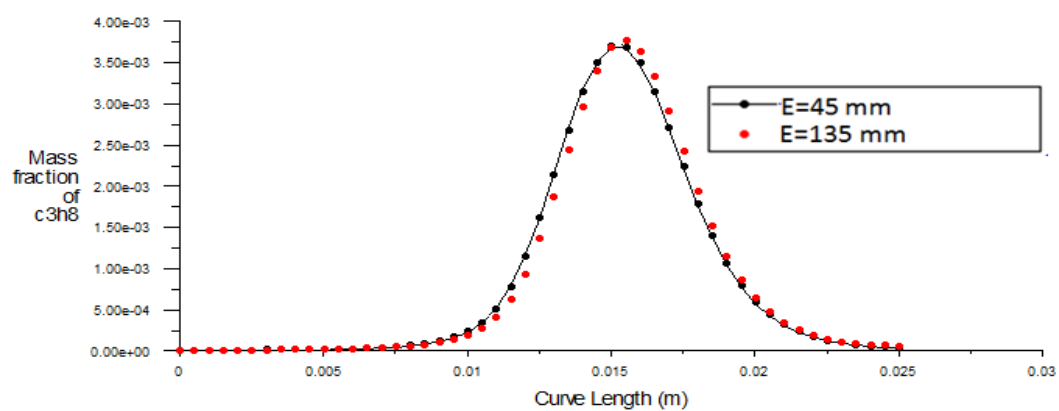


شکل ۴-۴۹: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O

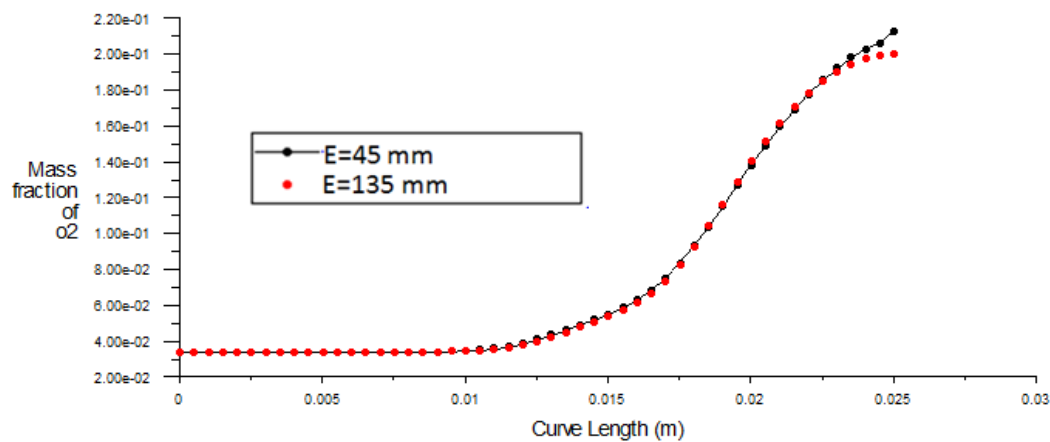
شکل‌های ۴-۵۰ تا ۴-۵۴ در مقطع طولی $x = 40$ mm رسم شده‌اند:



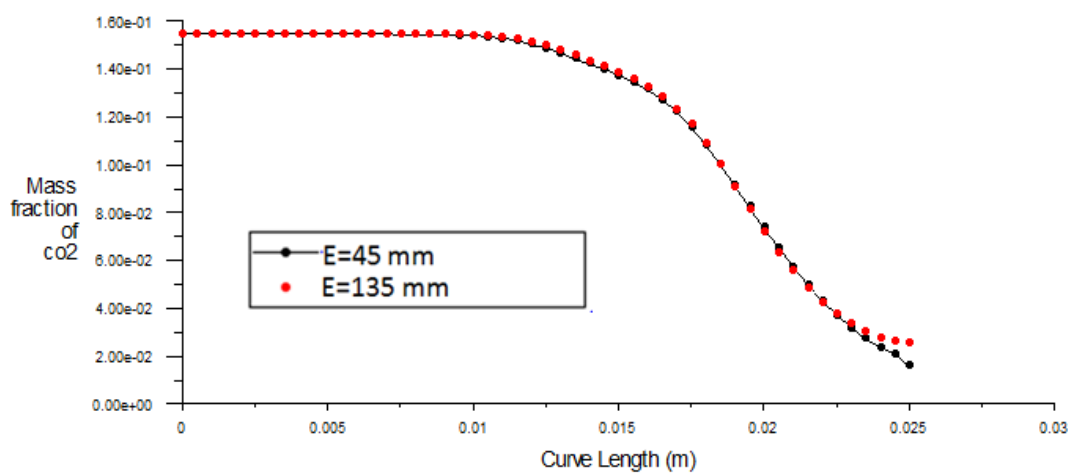
شکل ۴-۵۰: مقایسه نمودارهای دما



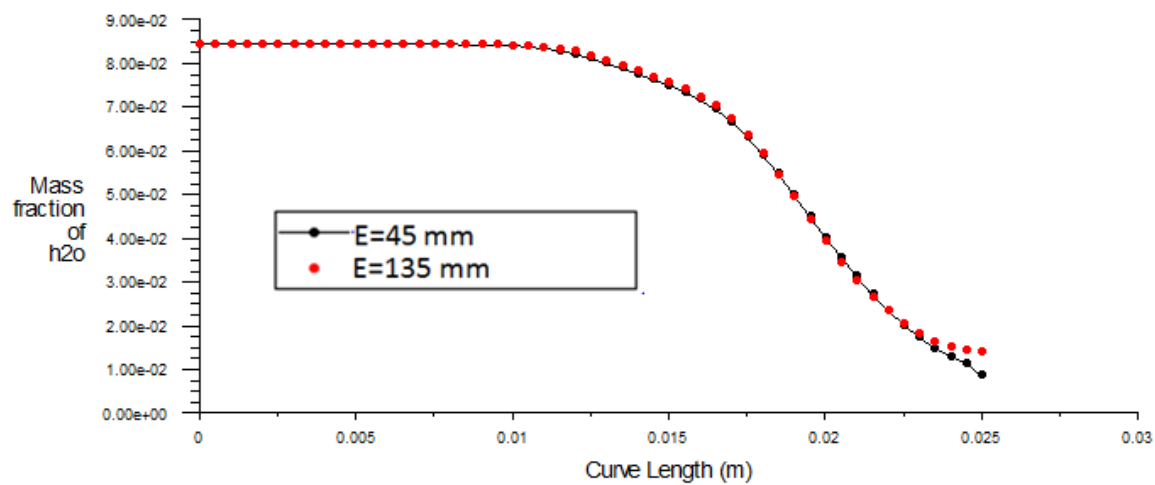
شکل ۴-۵۱: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت



شکل ۴-۵۲: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا

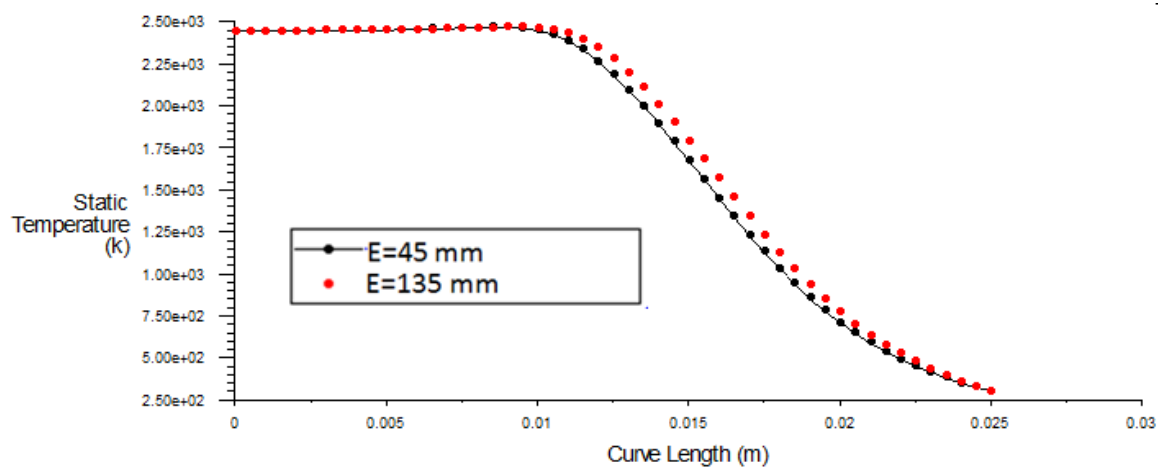


شکل ۴-۵۳: مقایسه نمودارهای کسر جرمی CO_2

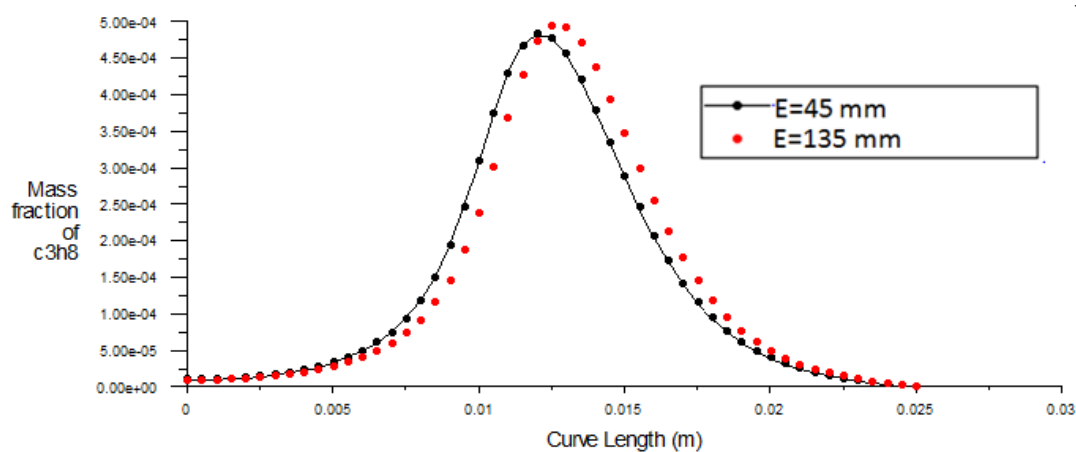


شکل ۴-۵۴: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O

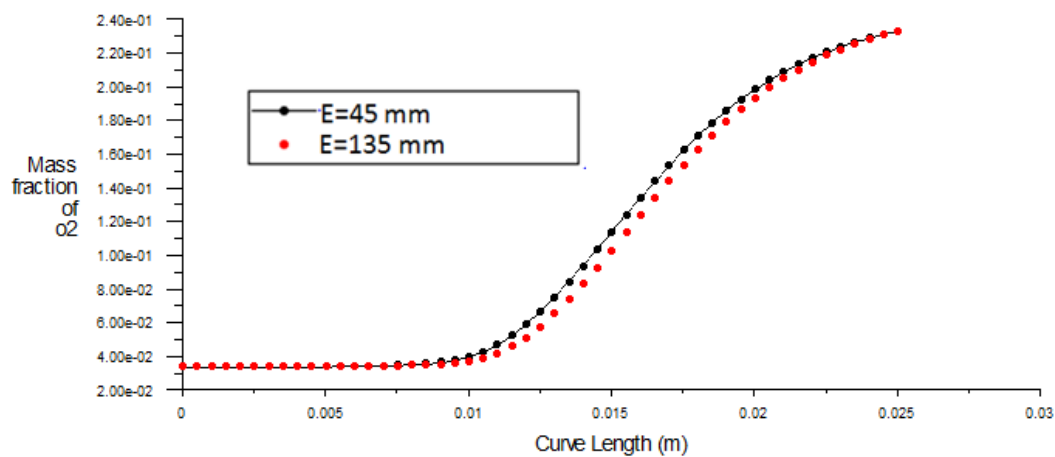
شکل‌های ۴-۵۵ تا ۴-۵۹ در مقطع طولی $X=50$ mm رسم شده‌اند:



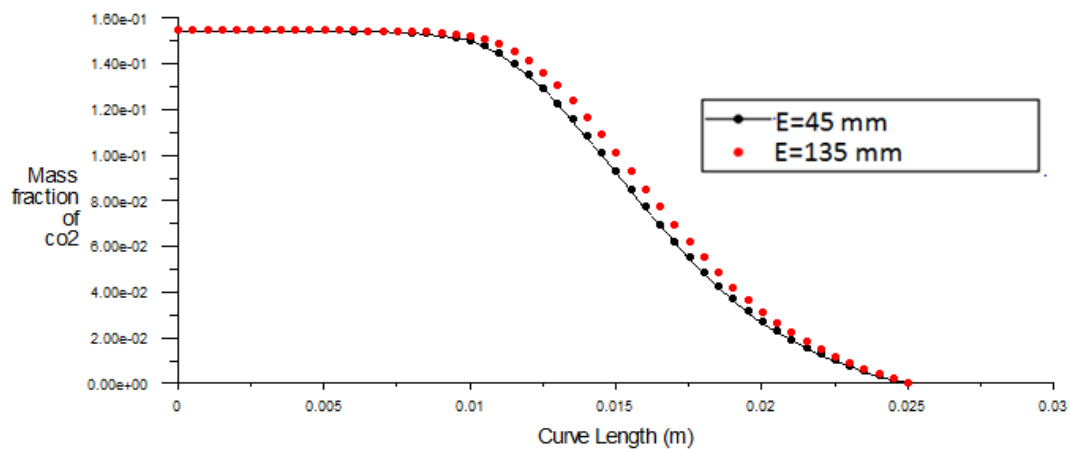
شکل ۴-۵۵: مقایسه نمودارهای دما



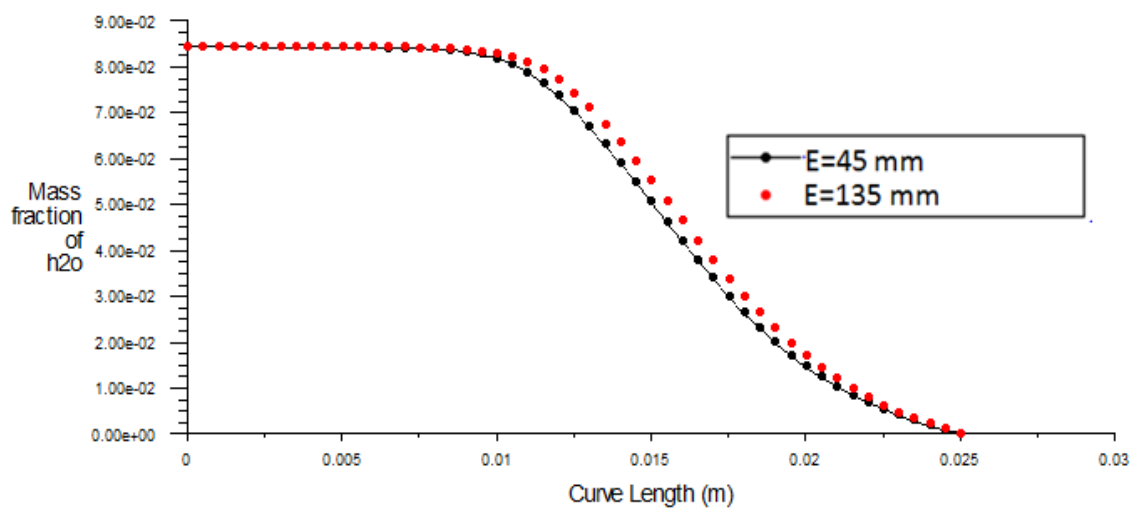
شکل ۴-۵۶: مقایسه نمودارهای کسر جرمی سوخت



شکل ۴-۵۷: مقایسه نمودارهای کسر جرمی هوا



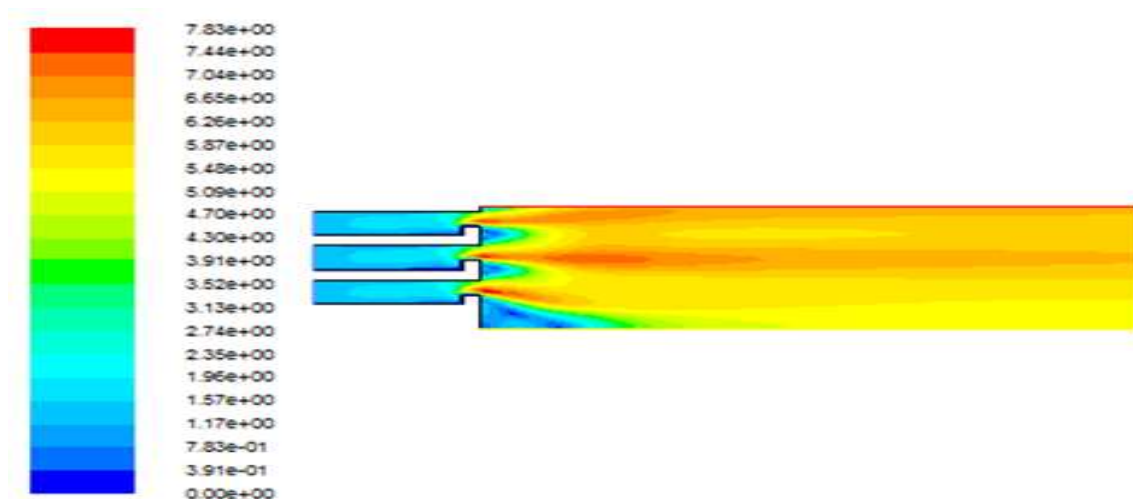
شکل ۴-۵۸: مقایسه نمودارهای کسر جرمی CO_2



شکل ۴-۵: مقایسه نمودارهای کسر جرمی H_2O

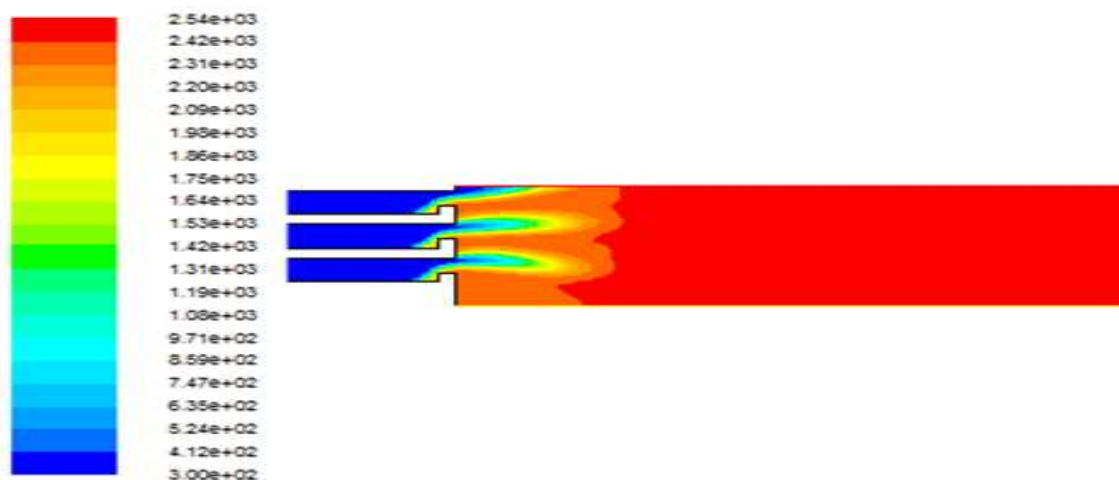
با مقایسه نمودارها در مقاطع طولی مختلف، مشاهده می‌شود که جابجایی مرز خروجی تأثیری در نتایج حاصل شده ندارد و نتایج نمودارها با دقت بالایی نزدیک به هم هستند.

حال با در نظر گرفتن نیمه بالایی مشعل، فرض می‌شود از هر سه مجرای ورودی، جریان سوخت و هوا به صورت پیش‌آمیخته وارد مشعل شده است و نتایج حاصل از این فرض در ادامه آمده است (طول فضای بیرونی، $E=80\text{ mm}$ در نظر گرفته شده است):



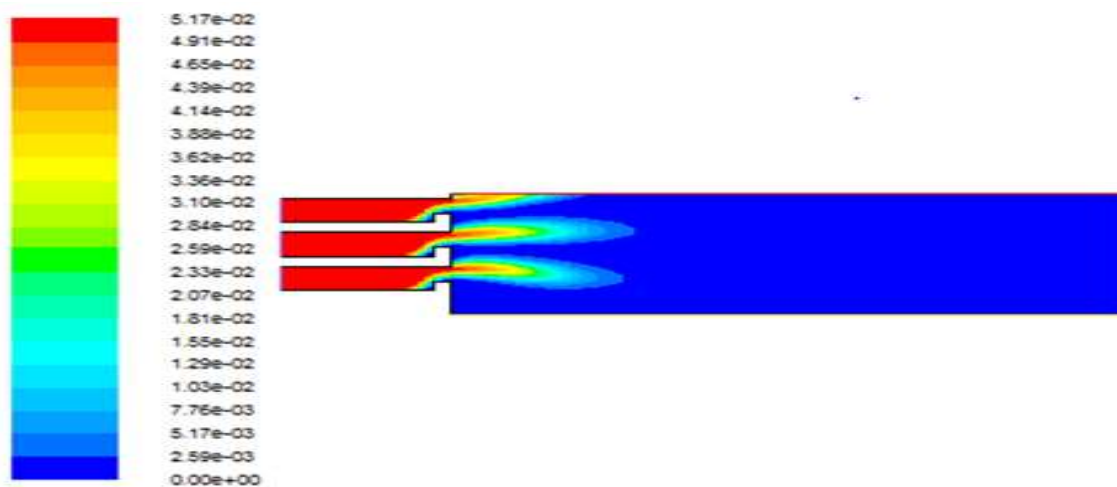
شکل ۴-۶: نمودار سرعت (m/s)

در شکل ۴-۶۱، با توجه به اینکه از هر سه مجرای جریان سوخت و هوا وارد شده است، ناحیه دما بالا حاصل از احتراق تقریباً در تمامی حوزه حل گسترده شده است.

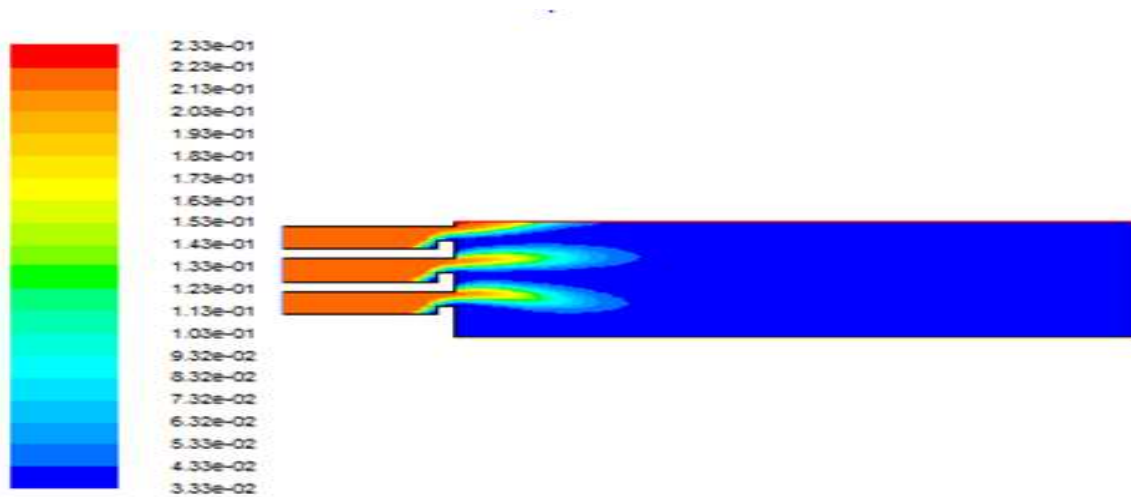


شکل ۴-۶۱: نمودار دما (K)

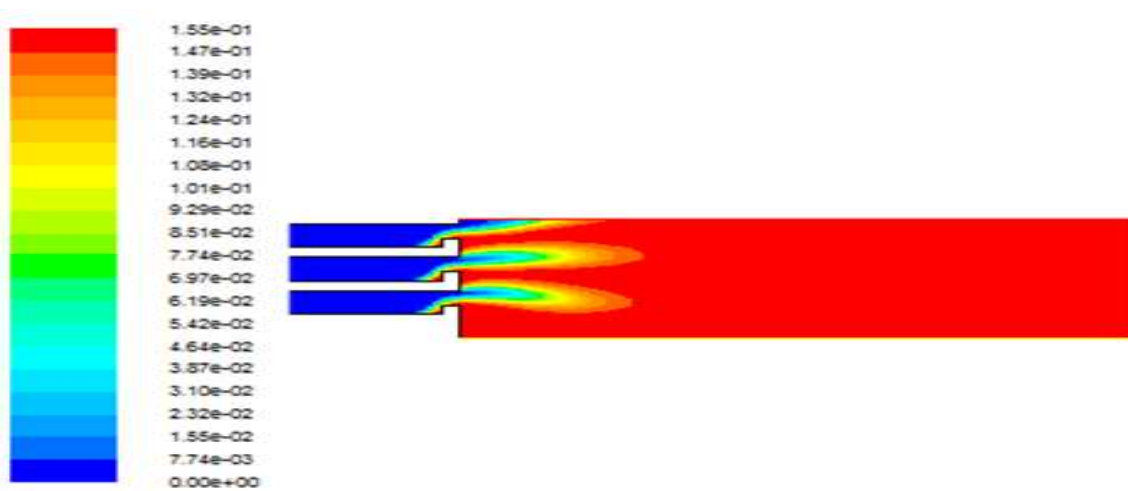
در شکل‌های ۴-۶۲ و ۴-۶۳، پس از خروج از مشعل و بعد از اعمال جرقه، سوخت و هوا به سرعت مصرف و تمام شده‌اند.



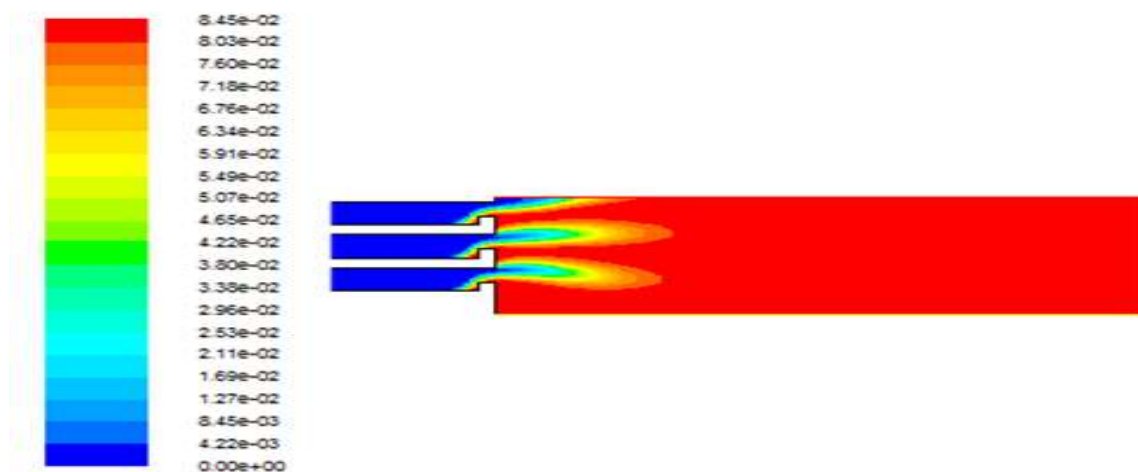
شکل ۴-۶۲: نمودار کسر جرمی سوخت



شکل ۴-۶۳: نمودار کسر جرمی هوا
در شکل‌های ۴-۶۴ و ۴-۶۵، بعد از اعمال جرقه، محصولات احتراقی شامل CO_2 و H_2O تولید می‌شوند.

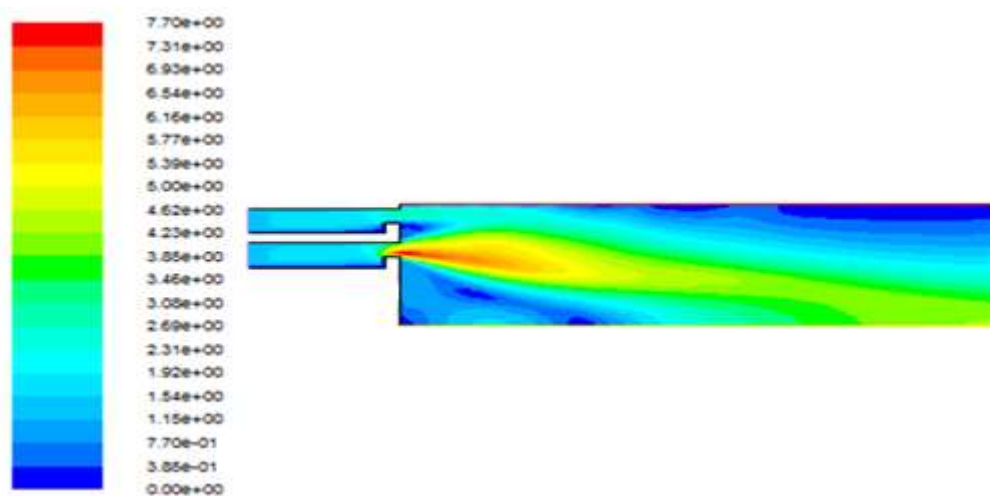


شکل ۴-۶۴: نمودار کسر جرمی CO_2



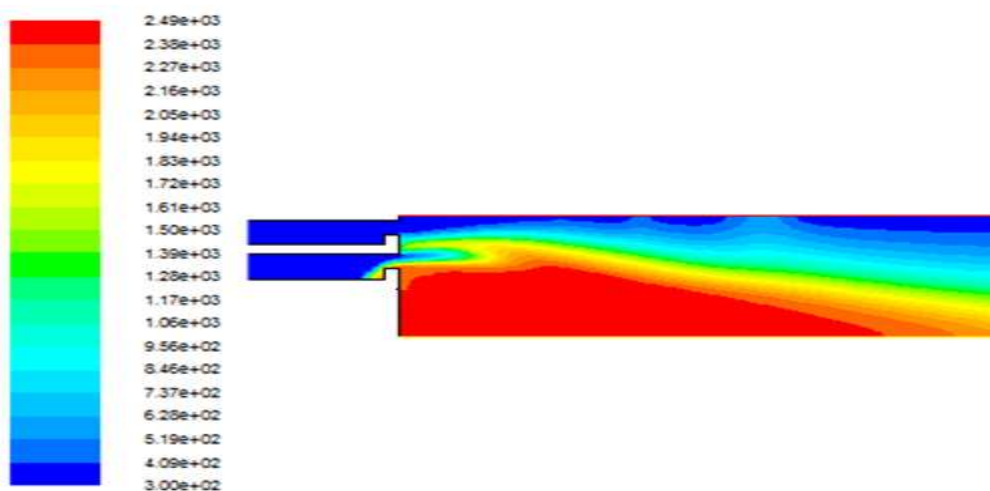
شکل ۴-۶۵: نمودار کسر جرمی H_2O

برای بررسی تاثیر هوا و موقعیت تزریق هوا از هر یک از ورودی‌های مشعل، دو حالت مختلف مدلسازی شده است و نتایج آن بررسی می‌شوند. در حالت اول، هوا با سرعت $1/5 \text{ m/s}$ از مجرای خارجی و مخلوط سوخت و هوای پیش‌آمیخته از مجرای میانی وارد مشعل می‌شوند.



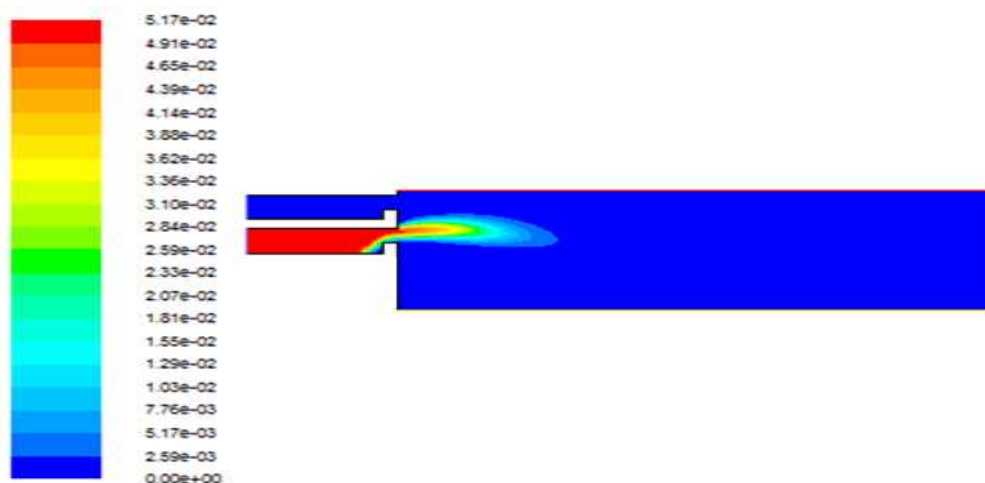
شکل ۴-۶۶: نمودار سرعت (m/s)

شکل ۴-۶۶، نمودار سرعت را نشان می‌دهد که هوا با سرعتی برابر با سرعت مخلوط سوخت و هوای پیش‌آمیخته از مجرای خارجی وارد مشعل می‌شود. در این حالت فرض می‌شود که مجرای داخلی بسته است و هیچ جریانی از آن عبور نمی‌کند.



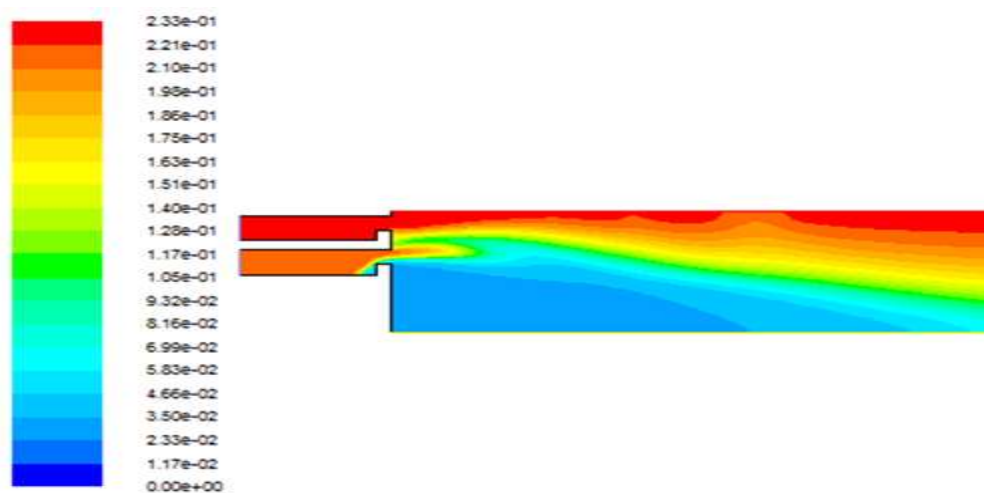
شکل ۴-۶۷: نمودار دما (K)

شکل ۴-۶۷، نمودار دمایی را نشان می‌دهد، همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود راس شعله کاملاً روی مشعل لنگر انداخته است و کاملاً پایدار شده است. شعله تشکیل شده، یک شعله شبه‌مخروطی است



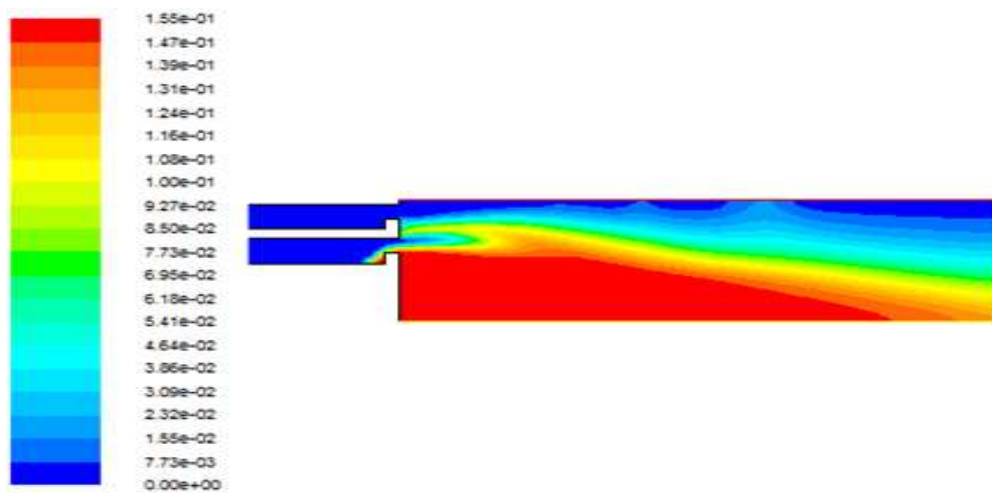
شکل ۴-۶۸: نمودار کسر جرمی سوخت

در شکل ۴-۶۸، نمودار کسر جرمی سوخت نمایش داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رود سوخت به سرعت مصرف می‌شود.

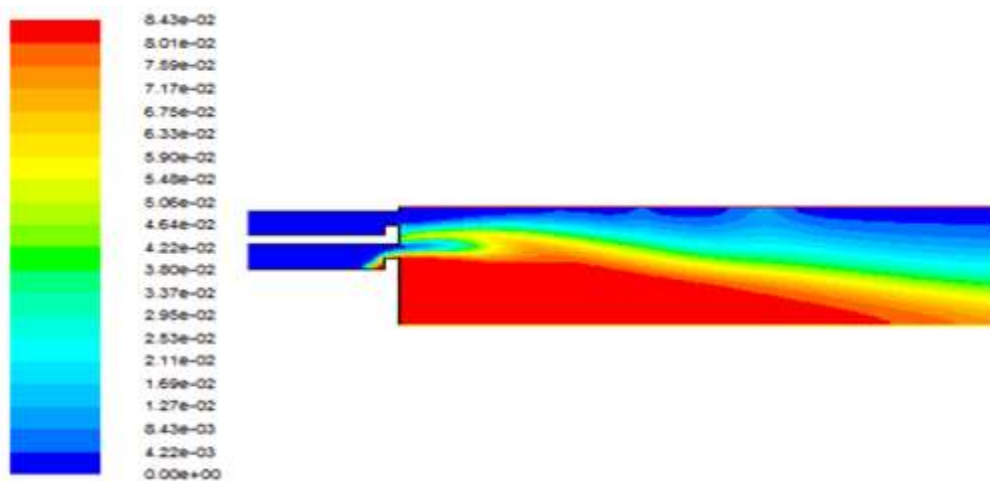


شکل ۴-۶۹: نمودار کسر جرمی هوا

با مشاهده نمودار کسر جرمی هوا در شکل ۴-۶۹، دیده می‌شود که هوا در ناحیه داخلی مشعل سریع مصرف می‌شود.



شکل ۴-۷۰: نمودار کسر جرمی CO_2

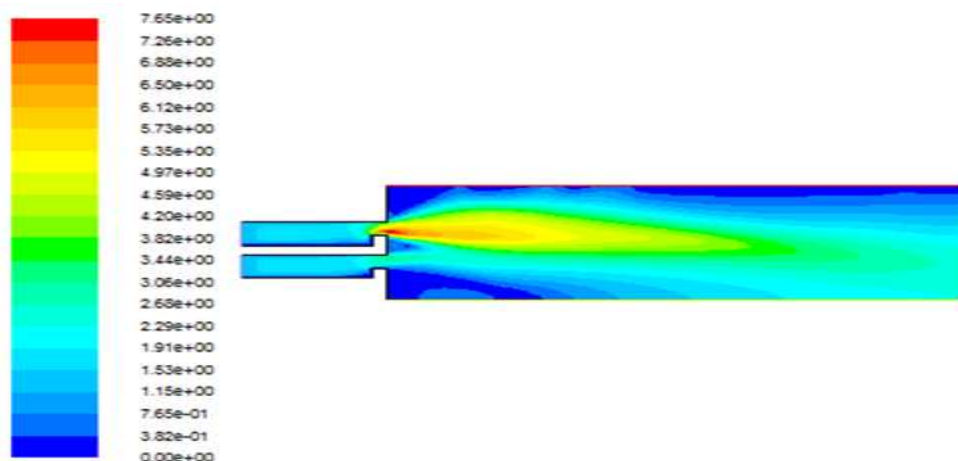


شکل ۴-۷۱: نمودار کسر جرمی H_2O

شکل‌های ۴-۷۰ و ۴-۷۱ نمودارهای کسر جرمی محصولات واکنش را نشان می‌دهد، دیده می‌شود که با فعال شدن احتراق، محصولات نیز بلافاصله تولید می‌شوند.

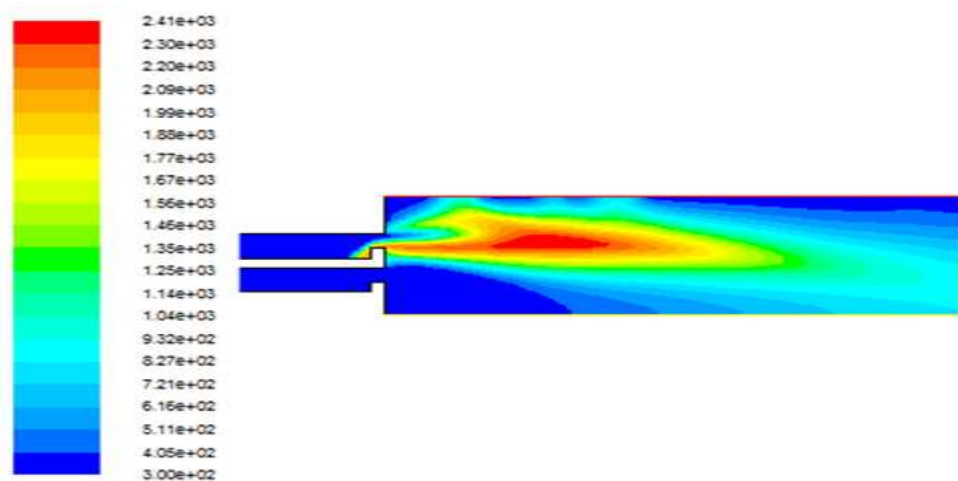
با بررسی نمودارهای دما و کسر جرمی گونه‌های واکنش‌دهنده و محصولات در حالتی که هوا از مجرای خارجی وارد مشعل می‌شود، می‌توان به این نتیجه رسید که تزریق هوا از مجرای خارجی باعث بهبود پایداری شعله می‌شود. در این حالت هوای تزریق شده از مجرای خارجی نقش عایق را در برابر جریان سرد محیطی دارد و گرمای حاصل از احتراق را در داخل شعله نگه می‌دارد و به پایداری بیشتر شعله میانی کمک می‌کند و یک شعله شبه مخروطی را ایجاد می‌کند.

در حالت دوم مخلوط سوخت و هوای پیش‌آمیخته از مجرای میانی و هوا با سرعت $1/5 \text{ m/s}$ از مجرای داخلی وارد مشعل می‌شود. در این حالت تاثیر تزریق هوا از مجرای داخلی بر روی شعله مورد بررسی قرار می‌گیرد.



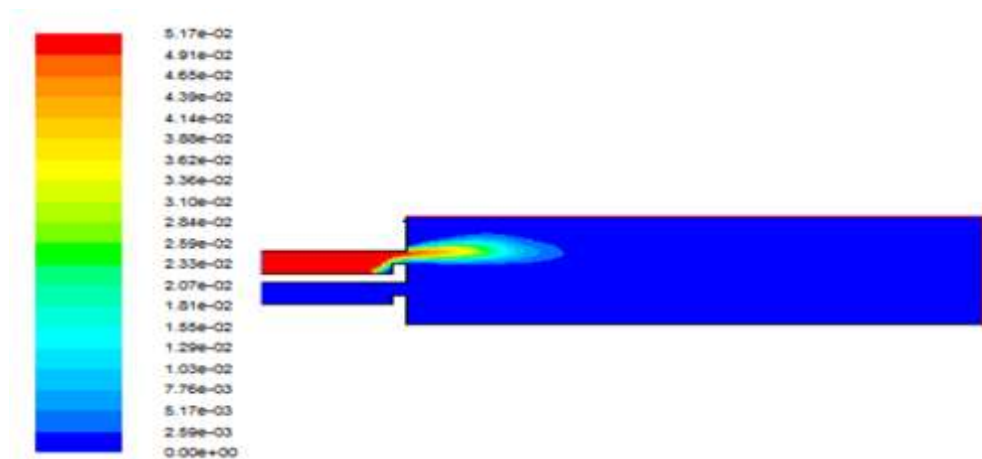
شکل ۷۲-۴: نمودار سرعت (m/s)

همان‌طور که در شکل ۷۲-۴ دیده می‌شود، هوا با سرعت $1/5 m/s$ از مجرای داخلی وارد مشعل شده است. در این حالت فرض شده مجرای بیرونی بسته است و هیچ جریانی وارد آن نمی‌شود. با توجه به اینکه هوا با سرعت از مشعل خارج می‌شود پروفیل سرعت نسبت به حالت قبلی کمتر به سمت مرز تقارن متمایل شده است.

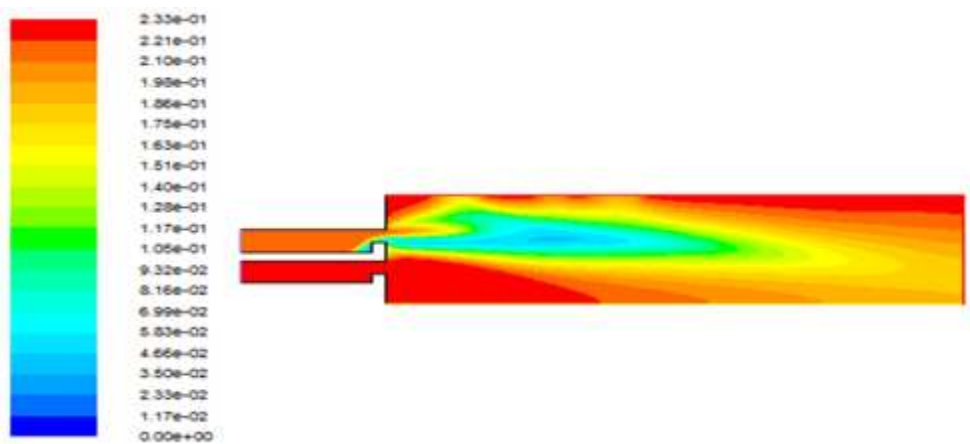


شکل ۷۳-۴: نمودار دما (K)

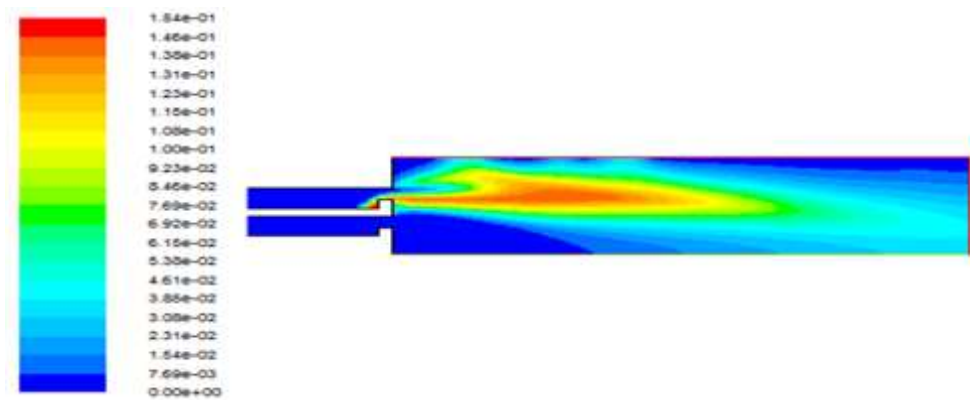
شکل ۷۳-۴، نمودار دما را نشان می‌دهد، همان‌طور که در شکل دیده می‌شود شعله در این حالت شکلی برخاسته دارد و هوای تزریق شده در مجرای داخلی تاثیری در پایداری شعله ندارد.



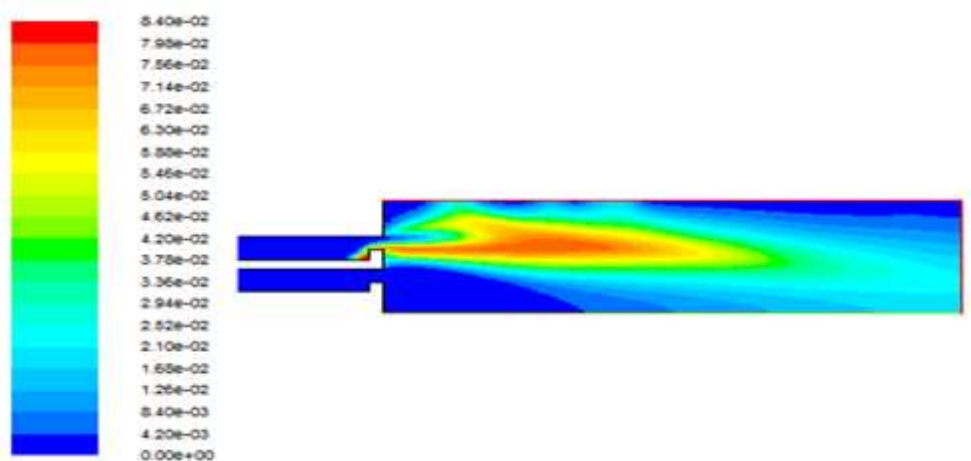
شکل ۴-۷۴: نمودار کسر جرمی سوخت



شکل ۴-۷۵: نمودار کسر جرمی هوا



شکل ۴-۷۶: نمودار کسر جرمی CO_2



شکل ۴- ۷۷: نمودار کسر جرمی H_2O

با بررسی نتایج مشاهده می‌شود تزریق هوا از مجرای داخلی تاثیری بر پایداری شعله ندارد. در این حالت شعله شکلی برخاسته دارد و ناپایدار است.

فصل پنجم:

نتیجه‌گیری و پیشنهادها

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادها

۵-۱ مقدمه

روش شبکه بولترمن روش نسبتاً جدیدی در حوزه مطالعات دینامیک سیالات محاسباتی می‌باشد که براساس دیدگاه مزوسکوپیک بنا نهاده شده است. به‌طور کلی این روش قادر به تحلیل مسائل دینامیک سیالات و انتقال حرارت در هندسه‌های مختلف می‌باشد. این روش به عنوان روش عددی مناسب برای مطالعه جریان‌های پیچیده نام برده می‌شود. سادگی کدنویسی از جمله ویژگی‌های این روش می‌باشد.

۵-۲ جمع‌بندی

با توجه به اهمیت فراوان فرایند احتراق در علم مهندسی و کاربردهای گسترده آن، بررسی و تحلیل مناسب این فرایند کمک شایانی را می‌تواند به توسعه هرچه بیشتر این شاخه از علم کند. یکی از انواع شعله‌های تشکیل شده در اثر فرایند احتراق شعله‌های پیش‌آمیخته هستند که با توجه به مزایایی که دارند، از جمله کم‌حجم، پرنرژی و بدون دوده بودن، می‌توانند کاربرد وسیعی را در صنعت داشته باشند. در نتیجه بررسی واره‌های روش‌هایی در جهت رفع عیوب این شعله‌ها می‌تواند بسیار کارا و موثر باشد. در این پروژه، به بررسی روش‌های پایداری شعله‌های کم‌سوخت پیش‌آمیخته در یک مشعل لایه‌ای با استفاده از روش شبکه بولترمن و به کمک نرم‌افزار فلوئنت پرداخته شده است. به‌منظور ارزیابی کد نوشته شده ابتدا یک محفظه یک‌بعدی در نظر گرفته شد و احتراق پیش‌آمیخته پروپان در این شرایط مدل‌سازی شد. نتایج به‌دست‌آمده با نتایج کار یاماموتو [۲۱] و همچنین نتایج آزمایشگاهی [۳۵] مقایسه شد و با توجه به خطای قابل قبول موجود، روش مورد استفاده برای تحلیل احتراق پروپان در شرایط دوبعدی مورد استفاده قرار گرفت.

در مدلسازی جریان به روش لیتیس بولتزمن، جریان در کانال ورودی مشعل به خوبی مدل شده است. اما با ورود جریان به فضای بیرونی به دلیل شرط فشار ثابت در مرز خروجی و وجود جریان برگشتی در خروج، حل جریان با خطا همراه بود. سپس در بررسی احتراق، اثر پارامترهای نسبت هم‌ارزی، سرعت و اثر تزریق هوا در مجرای داخلی و خارجی مشعل، بر روی شعله میانی مورد بررسی قرار گرفت و مشاهده شد، با افزایش نسبت هم‌ارزی در یک سرعت ثابت شعله تغییر شکل می‌دهد و به سمت پایداری پیش می‌رود. در سرعت $1 (m/s)$ ، راس شعله برخاسته به سمت بالا دست جریان خم می‌شود و بر روی مشعل لنگر می‌اندازد، و با فاصله گرفتن از این سرعت، ریشه شعله برخاسته بلند می‌شود. با تزریق هوا در مجرای خارجی مشعل با یک سرعت جریانی بزرگتر از یک مقدار حدی تغییر شکل و پایداری شعله بوجود خواهد آمد زیرا در این حالت هوا تزریق شده نقش عایق را در برابر جریان سرد محیطی دارد که مانع خاموشی شعله می‌شود. در حالی که با تزریق هوا به مجرای داخلی مشعل اثر قابل درکی در ساختار شعله مشاهده نمی‌شود. در ادامه شبیه‌سازی‌های انجام شده توسط روش شبکه لیتیس بولتزمن، با توجه به دقیق نبودن نتایج احتراقی در این روش، با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت برخی از نتایج مجدداً شبیه‌سازی شد و با توجه به دقت کافی نتایج در این روش می‌توان برای بررسی‌های دقیق‌تر در قسمت احتراق، از این نرم‌افزار کمک گرفت.

۳-۵ پیشنهاد برای پژوهش‌های آینده

با توجه به فرضیاتی که برای مدلسازی احتراق در روش شبکه بولتزمن در این پژوهش در نظر گرفته شد می‌توان پیشنهادهایی برای پژوهش‌های آینده ارائه کرد که در زیر به برخی از آن‌ها اشاره شده است:

- ۱- با توجه به فرض تراکم‌ناپذیر بودن جریان در پژوهش حاضر، می‌توان به بررسی جریان‌های تراکم‌پذیر در شبکه بولتزمن پرداخت و به ارائه روش‌هایی برای بهبود ناپایداری‌های حاصل از این فرض پرداخت.

- ۲- بررسی روش‌هایی برای استفاده از دمای گازهای خروجی در جهت پایداری شعله پیش‌آمیخته.
- ۳- به دلیل محدودیت‌های موجود در روش بولتزمن برای تحلیل محدوده وسیع‌تری از سرعت‌ها روشی برای حل سرعت‌های بالاتر در تحلیل مسائل ارائه کرد.
- ۴- بررسی هندسه‌های مختلف مانع و تاثیر آن بر پایداری شعله پیش‌آمیخته و ناحیه چرخشی به-وجود آمده در خروجی مشعل.
- ۵- با توجه به ضعفی که در شبیه‌سازی جریان به روش لیس بولتزمن به دلیل شرط مرزی خروجی وجود داشت، در پژوهش‌های آینده می‌توان به بررسی دقیق میدان سرعت و جریان و انتخاب شرط مرزی مناسب برای تحلیل درست جریان پرداخت.

پیوست

نمادها			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
c	سرعت شبکه	Lattice speed	-
C_P	ظرفیت گرمایی ویژه	Specific heat capacity	$J/kg.K$
C_s	سرعت صوت شبکه	Lattice sound speed	-
D	ضریب نفوذ جرم	Mass diffusivity coefficient	m^2/s
E	سرعت گسسته شدن ذره	Discrete particle velocity	-
F	تابع توزیع	Distribution function	-
P	تابع توزیع فشار	Pressure distribution function	-
g	تابع توزیع دما	Temperature distribution function	-
F_Y	تابع توزیع غلظت	Concentration distribution function	-
K	ثابت بولتزمن	Boltzmann constant	$W/m^2.K$
L	طول	Length	M
Ma	عدد ماخ	Mach number	-
N	تعداد گره	Grid number	-
P	فشار	Pressure	Pa
Pe	عدد پکلت	Peclet number	-
Pr	پرانتل	Prandtl	-
Fo	عدد فوریه	Fourier number	-
Q	گرمای واکنش	Reaction heat	J/mol
R	ثابت جهانی گاز	Universal gas constant	$J/mol.K$
w_{ov}	نرخ واکنش	Overall reaction rate	$mol/m^3.s$
K_{ov}	ضریب واکنش	Reaction coefficient	$cm^3/mol.s$
C_j	غلظت مولی	Molar concentration	mol/m^3
Q_T	جمله چشمه دما	Temperature source term	$1/s$
ω_j	نرخ تولید جرم	Mass production rate	$kg/m^3.s$
t	زمان	Time	S

a	ضریب استوکیومتری	Stoichiometric coefficients	-
T	دما	Temperature	K
T^*	دمای بی‌بعد	Dimensionless temperature	-
u	سرعت در راستای x	Velocity	m/s
v	سرعت در راستای y	Velocity	m/s
U	اندازه سرعت	Velocity magnitude	m/s
U^*	سرعت بی‌بعد در راستای x	Dimensionless x velocity	-
V^*	سرعت بی‌بعد در راستای y	Dimensionless y velocity	-
V_f	سرعت پیشروی شعله	Flame propagation speed	m/s
S_L	سرعت سوختن	Burning velocity	m/s
w	ضریب وزنی	Weight coefficient	-
M	جرم ملکولی	Molecular mass	kg/mol
x	مکان	Position	M
y	مکان	Position	M
Y	کسر جرمی	Mass fraction	-
علائم یونانی			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
α	ضریب نفوذ گرمایی	Thermal diffusivity coefficient	m^2/s
δt	گام زمانی شبکه	Lattice time step	-
δX	فاصله گره	Lattice spacing	-
μ	گرانروی دینامیکی	Dynamic viscosity	kg/m.s
ν	گرانروی سینماتیک	Kinematic viscosity	m^2/s
ρ	چگالی	Density	kg/m ³
τ	زمان آسایش بی‌بعد	Dimensionless relaxation time	-
ζ	زمان آسایش	Relaxation time	S
زیر نویس ها			
نماد	نام فارسی	نام انگلیسی	واحد
T	دمایی	Thermal	-
I	جهت سرعت گسسته	Discrete velocity direction	-

	شده		
j	گونه j	j Component	-
C_3H_8	پروپان	Propane	-
O_2	اکسیژن	Oxygen	-
CO_2	کربن دی اکسید	Carbon Dioxid	-
H_2O	بخار آب	Water vapor	-
N_2	نیتروژن	Nitrogen	-
LB	شبکه بولتزمن	Lattice Boltzmann	-
L	شبکه	Lattice	-
N	نرمال شده	Normalize	-
in	ورودی	Inlet	-
O	خروجی	Outlet	-
x	راستای محور X	X- direction	-
y	راستای محور Y	Y- direction	-
Y	شیمیایی	Chemical	-
σ	شماره گونه	Species number	-
0	مقدار مرجع	Reference value	-
بالانویس ها			
Eq	تعادلی	Equilibrium	-

منابع

- [1] Yu H. (2004) "Lattice boltzmann equation simoulation of turbulence ,mixing, and combustion" **Office of Graduate Studies of Texas A&M University**.
- [2] McNamara G.R. and Zanetti G. (1988) "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice gas automata" **Physical Review Letters** vol. 61, p. 2332.
- [3] Wolf-Gladrow D.A. (2000) "Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction" **Springer**.
- [4] Ansumali S., Karlin I. and Öttinger H. (2003) "Minimal entropic kinetic models for hydrodynamics" **EPL (Europhysics Letters)**, vol. 63, p. 798.
- [5] Hu A., Li L., Chen S., Liao Q., and Zeng J., (2013) "On equations of state in pseudo-potential multiphase lattice Boltzmann model with large density ratio" **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 67, 159-163.
- [6] Chikatamarla S., and Karlin I., (2013) "Entropic lattice Boltzmann method for turbulent flow simulations: Boundary conditions" **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**.
- [7] Mohamad A.A. (2011) "Lattice Boltzmann Method:Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes" **Springer**.
- [8] Qian Y., d'Humières D., and Lallemand P. (1992) "Lattice BGK models for Navier-Stokes equation" **EPL (Europhysics Letters)**, vol. 17, p. 479.
- [9] d'Humières D. (2002) "Multiple-relaxation time lattice Boltzmann models in three dimensions" **Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, vol. 360, 437-451.
- [10] Martinez D.O., Matthaeus W.H., Chen S., and Montgomery D. (1994) "Comparison of spectral method and lattice Boltzmann simulations of two-dimensional hydrodynamics" **Physics of Fluids**, vol. 6, p. 1285.
- [11] Hou S., Zou Q., Chen S., Doolen G., and Cogley A.C., (1995) "Simulation of cavity flow by the lattice Boltzmann method" **Journal of Computational Physics**, vol. 118, 329-347.
- [12] Hou S. (2008) "Lattice Boltzmann method for incompressible" **viscous flow**.
- [13] Bernsdorf J.M. (2008) "Simulation of Complex Flows and Multi-physics with the LatticeBoltzmann Method".

- [13] Succi S., Foti E., and Higuera F. (1989) “Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method” **EPL (Europhysics Letters)**, vol. 10, p. 433.
- [15] Machado R. (2012) “Numerical simulations of surface reaction in porous media with lattice Boltzmann” **Chemical Engineering Science**, vol. 69, 628-643.
- [16] Spadaccini C.M. (2004) “Combustion systems for power-MEMS applications” **Massachusetts Institute of Technology**.
- [17] Yoshino M. and Inamuro T. (2003) “Lattice Boltzmann simulations for flow and heat/mass transfer problems in a three-dimensional porous structure” **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 43, 183-198.
- [18] Chen S., Liu Z., Tian Z., Shi B. and Zheng C. (2008) “A simple lattice boltzmann scheme for combustion simulation” **Computers and Mathematics With Applications**, 1424- 1432.
- [19] Glassman I. (1997), “**Combustion**” Academic press, 525 B street, san diego, California 92101-4495, USA.
- [20] Arcidiacono S., Mantzaras J. and Karlin I. (2008) “Lattice Boltzmann simulation of catalytic reactions” **Physical Review E**, vol. 78, p. 046711.
- [21] Yamamoto K., He X. and Doolen G.D. (2001) “Simulation of Combustion Field with Lattice Boltzmann Method” **Journal of Statistical Physics**, vol. 107.
- [22] Chen S., Liu Z., Zhang C., He Z., Tian Z., Shi B., Zheng C. (2007) “A novel coupled lattice Boltzmann model for low Mach number combustion simulation” **Applied Mathematics and Computation**, vol. 193, 266-284.
- [23] Filippova O. and Hanel D. (2000) “A novel lattice BGK approach for low Mach number combustion” **Journal of computational physics** vol. 158, 139–160.
- [24] Jin L., Huifu Z. (Series E) “Study of premixed flame stabilization by using opposed jet” **SCIENCE IN CHINA**.
- [25] Co E., Chung S. (2009) “Improvement of flame stability and NO_x reduction in hydrogen-added ultra lean premixed combustion” **Journal of Mechanical Science and Technology**, VOL. 23, 650, 658.

- [26] Mukunda H.S., Drummond J.P. (1993) "Two dimensional linear stability of premixed laminar flames under" **Applied Scientific Research Academic Publishers. Printed in the Netherlands Kluwer , vol. 51, 687,711.**
- [27] Yeom T. (2007) "Lattice Boltzmann Method for Micro Channel and Micro Orifice Flows" **ProQuest.**
- [28] Frisch U., Hasslacher B. and Pomeau Y. (1986) "Lattice-gas automata for the Navier Stokes equation" **Phys. Rev. Lett, vol. 56, p. 1505.**
- [29] Yu D., Mei R., Luo L.S. and Shyy W. (2003) "Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation" **Progress in Aerospace Sciences, vol. 39, 329-367.**
- [30] Guo Z. and Shu C. (2013) "Lattice Boltzmann Method and Its' Applications inEngineering" **World Scientific Publishing Company Incorporated.**
- [31] Succi S. (2001) "The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond" **Oxford university press.**
- [32] Verhaeghe F., Luo L.S. and Blanpain B. (2009) "Lattice Boltzmann modeling of microchannel flow in slip flow regime" **Journal of Computational Physics, vol. 228, 147-157.**
- [33] Zou Q. and He X. (1997) "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model" **Physics of Fluids, vol. 9, p. 1591.**
- [34] Chen L., Kang Q., He Y.L., Tao W.Q. (2012) "Pore-scale simulation of coupled multiple physicochemical thermal processes in micro reactor for hydrogen production using lattice Boltzmann method" **International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 37, 13943-13957.**
- [35] Yamaoka I. and Tsuji H. (1984) "Determination of burning velocity using counter flow flames" **Proceeding of the Combustion Institute, vol. 20, 1883–1892.**
- [36] Yamamoto K. (1999) "Pressure change and transport process on flames formed in a stretched, rotating flow" **Combustion and Flame, vol. 118, 431-444.**
- [37] Davide E., Cavaliere, Kariuki J. (2013) "A Comparison of the Blow-Off Behavior of Swirl-Stabilized Premixed, Non-Premixed and Spray Flames" **Flow Turbulence Combust, Vol. 91, 347–372.**

- [38] Tuncer O. (2013) “Premixed Combustion of Hydrogen and Syngas Fuels in Gas Turbine Combustors” **Material and processes for energy**.
- [39] Chen Y.C., Chang C.C., Pan K.L. and Yang J.T. (1998) “Flame lift-off and stabilization mechanisms of nonpremixed jet flames on a bluff-body burner” **Combust. Flame, Vol. 115, 51**.
- [40] Yahagi Y., Sekiguti M. and Suzuki K. (2007) “Flow structure and flame stability in a micro can combustor with a baffle plate” **Applied Thermal Engineering, Vol.27, 788**.
- [41] Lawn C.J. (2009) “Lifted flames on fuel jets in co-flowing air” **Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 35, 1**.
- [42] Chen J.W., Li C.C., Lin H.W., Yang J.T. (2015) “The Effect of Air Coflow on Lean Premixed Flames on a Stratified Burner” **Combustion Science and Technology, 31,41**.
- [43] Esquiva-Dano I., Nguyen H.T. and Escudie D. (2001) “Influence of a bluff-body's shape on the stabilization regime of non-premixed flames” **Combust. Flame, Vol. 127, 2167**.

Abstract

Combustion is a complicated process which needs the simultaneous solutions of continuity equation, Navier-Stokes equations and energy equation for its analysis. In the two recent decades the Lattice-Boltzmann method has been identified as an appropriate substitute for complex numerical analyses. Utilizing the lean premixed flames in the burners, compared to non-premixed flames, not only does decrease the energy consumption but also produces less pollutant gases due to the lower temperature of combustion products. However, it has some obstacles on the way to be practically applied in spite of its great advantages.

The released heat in the combustion process is low for lean premixed flames, hence; the generated flame encounters instability and consequently is extinguished. In the present study, the stability of the flame in the lean premixed flame in a stratified burner has been investigated based on the location of air and fuel injection in each layer of the burner. Presence of a Bluff-body at the flame exit is considered as an effective factor in improving the stability of the flame. Selected boundary condition of constant pressure at the outlet of the burner, the flow solution with some errors. In the current study, propane is the fuel used for the experiments. Impacts of parameters of velocity equivalence ratio and effect of air inner/outer injection have been investigated on the median flame. In the initial mode, air and fuel enter the burner in a premixed way through the median layer, and it is observed that by increasing the equivalence ratio at a constant speed, the flame reshapes and starts reaching the stability. At the speed of 1 m/s, the tip of Lift-off flame bends toward the upstream of the flow, and by deviating of this speed the root of the Lift-off flame rises. In the second mode, by outer injection of the air into the flame with a relatively high flow speed in comparison to the initial mode, the reshape and stability of the flame are observed which are attributed to the fact that the injected air plays the insulator role against the ambient cold flow and prevents the flame from being extinguished. In the second mode, by inner injection the air into the burner, there have been observed no meaningful impacts in comparison to the two other modes.

Key Words: Combustion, Lattice-Boltzmann method, Premixed flame, stability of flame, Stratified burner



Shahrood University of Technology
Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering
M.Sc. Thesis in Energy Conversion Engineering

**Investigation of stability of lean premixed flames on a stratified
burner by Lattice-Boltzmann method**

By: Elahe Norozi Jajarm

Supervisor:
Dr Javad Abolfazli Esfehani

September, 2016