



توسعه روش بولتزمن شبکه ای برای شبیه سازی احتراق شعله نفوذی آرام متان توسط مکانیزم های کاهش یافته

مصطفی آشنا¹، محمدحسن رحیمیان^{2*}

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

2- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران

* تهران، صندوق پستی 123456789، rahimyan@ut.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 17 مرداد 1394

پذیرش: 03 آذر 1394

ارائه در سایت: 28 آذر 1394

کلید واژگان:

بولتزمن شبکه ای

مکانیزم کاهش یافته

شعله نفوذی

جت متان

چکیده

در این مقاله احتراق یک جت متان با استفاده از چند معادله با آهنگ واکنش محدود و توسط روش بولتزمن شبکه ای شبیه سازی شده است. در این مدل از دو دسته از توابع توزیع، یک دسته برای حل معادلات پیوستگی و مومنتوم و دسته دیگر برای حل معادلات گرما و اجزاء شیمیایی استفاده شده است. معادله بولتزمن شبکه ای برای جریان تراکم پذیر با تقریب عدد ماخ پایین مدل شده و چگالی از طریق رابطه گاز کامل به دما وابسته شده است. تولید و مصرف اجزاء شیمیایی و گرمای واکنش ها به صورت جملات چشمه در معادلات بولتزمن شبکه ای وارد شده اند. استفاده از مکانیزم های کاهش یافته چند معادله ای به جای تنها یک معادله، در نظر گرفتن اثر دما و غلظت اجزاء بر خواص و آهنگ واکنش ها در هر مرحله زمانی از مزیت های مدل توسعه داده شده است. مدل احتراقی با استفاده از شبیه سازی یک مکانیزم چهار معادله ای با شش جزء شیمیایی در یک شعله نفوذی جت آرام متان و مقایسه نتایج با داده های تجربی اعتبارسنجی شده است. نتایج نشان می دهد مدل توسعه داده شده غلظت اجزاء شیمیایی مختلف و دمای شعله را با دقت مناسبی پیش بینی می کند. این مسأله از این نظر حائز اهمیت است که برای حل میدان غلظت اجزاء شیمیایی متفاوت که ضرایب نفوذ آنها تابعی از مکان و دما است نیاز است تا زمان آسایش در معادله بولتزمن تابعی از دما و مکان باشد. این امر در الگوریتم های معمول سبب ناپایداری و واگرایی حل می شود. برای حل این مشکل بازه های زمانی برای دما و هر کدام از اجزاء شیمیایی در هر مرحله حل اصلاح می شوند تا مشکل ناپایداری حل برطرف گردد.

Developing lattice Boltzmann method for simulation of reduced combustion mechanisms in laminar methane jet diffusion flames

Mostafa Ashna¹, Mohammad Hassan Rahimian^{2*}

Department of Mechanical Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran.

* P.O.B. 123456789 Tehran, Iran, rahimyan@ut.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 08 August 2015
Accepted 24 November 2015
Available Online 19 December 2015

Keywords:

Lattice Boltzmann
reduced mechanism
diffusion flame
methane jet

ABSTRACT

In this paper the coupled lattice Boltzmann model is developed for simulation of multi-step combustion mechanism of a methane jet diffusion flame. The lattice Boltzmann scheme employs the double-distribution-function model, one distribution function for solving flow field and another for temperature and species concentration fields. The density and temperature fields are coupled through low Mach number flow field. The solution parameters such as species properties and rate of chemical reactions are adjusted in each time step according to temperature and concentration of species variations. Using combustion mechanisms instead of one step fast chemistry reaction and considering effect of temperature and species concentration on solution parameters are the main advantages of the developed model. For validation of the model, a four-step reduced mechanism with six species is used for simulation of combustion in a methane jet diffusion flame configuration. Results show that the developed model predicts the concentration of chemical species and flame temperature with good accuracy. It is important to note that the relaxation time in lattice Boltzmann equation must be a function of both temperature and space to gain these results. Variation of the relaxation time eventuate in divergence of solution in usual LB Models. To overcome this problem the time steps are adjusted according to temperature variation. Agreement between the present results and experimental data confirms that this scheme is also an efficient numerical method for more detailed combustion simulations.

1- مقدمه

از پیچیده ترین مباحث در پژوهش های مهندسی محسوب می شود. این پیچیدگی نه تنها تحقیقات آزمایشگاهی در مورد آن را بسیار مشکل ساخته، بلکه، تحقیقات در این زمینه با استفاده از روش های عددی و شبیه سازی

پدیده احتراق شامل بسیاری از جنبه های دینامیک سیال از جمله اغتشاش، نفوذ، اختلاط، انتقال گرما و واکنش های شیمیایی می شود و از این لحاظ یکی

Please cite this article using:

M. Ashna, M.H. Rahimian, Developing lattice Boltzmann method for simulation of reduced combustion mechanisms in laminar methane jet diffusion flames, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 1, pp. 63-71, 2015 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

یافته چهار معادله‌ای را برای احتراق جت‌های آرام متان پیشنهاد دادند. آنها شعله‌های نفوذی متان را برای غلظت اجزاء شیمیایی و مشخصه‌های فیزیکی همچون ساختار و خاموشی شعله با استفاده از این مکانیزم کاهش یافته مورد بررسی قرار دادند. بدین منظور معادلات ناویراستوکس و معادلات غلظت اجزاء برای متغیر کسر مخلوط را بازنویسی کرده و آن را به روش عددی اختلاف محدود حل کردند. آنها نتایج خود را بر مبنای داده‌های تجربی یاماوکا و سوچی [6] اصلاح کردند.

جونز و لیندشتات [7] یک مکانیزم کاهش یافته چهار معادله‌ای را برای احتراق آلکان‌ها پیشنهاد دادند. مدل آنها شامل دو معادله تجزیه سوخت و دو معادله تعادلی می‌باشد. آنها معادلات جریان و واکنش‌های شیمیایی را با استفاده از تابع جریان بی‌بعد شده به روش عددی اختلاف محدود ضمنی حل کردند. ثوابت مربوط به آهنگ واکنش با استفاده از داده‌های تجربی محاسبه شده‌اند. مدل چهار معادله‌ای آنها هم برای شعله‌های پیش آمیخته و هم برای شعله‌های نفوذی کارایی دارد.

تمامی تحقیقات عددی ذکر شده با حل معادلات ناویر استوکس انجام شده‌اند. اخیراً روش بولتزمن شبکه‌ای به عنوان یک روش برای حل مسایل جریان سیال مطرح شده است. مزیت‌های ذاتی آن همچون کدنویسی ساده و توانایی موازی سازی رایانه‌ای، آن را به عنوان روش موثری برای حل مسایل سیال با حجم زیاد محاسبات عددی همچون جریان دوفاز، جریان در محیط متخلخل، هندسه‌های پیچیده و جریان‌های واکنشی مطرح کرده است [9,8]. با وجود تمامی مزیت‌های گفته شده استفاده از این روش برای حل مسایل احتراق با وجود تلاش‌های صورت گرفته در سال‌های اخیر، هنوز در مراحل اولیه خود است.

سوچی و همکاران [10] برای اولین بار روش بولتزمن شبکه‌ای را برای مدل‌سازی احتراق توسعه دادند. آنها از مدل دو بعدی $1FCHC$ 24 سرعتی استفاده کردند که علاوه بر تابع توزیع اصلی شامل دو تابع توزیع اسکالر غیر فعال، یکی برای میدان دما و دیگری برای کسر مخلوط سوخت بود. این توابع توزیع، واکنش آنی احتراق و میدان دما را در کنار میدان مومنتم مدل می‌کنند. مشکل اصلی مدل آنها وابسته نبودن چگالی به میدان دما است بنابراین با استفاده از این مدل نمی‌توان تغییرات چگالی را بر اثر گرمای آزاد شده در واکنش بدست آورد. در احتراق واقعی تغییرات دما بر چگالی و از طریق آن بر میدان جریان تاثیر می‌گذارد به همین دلیل نتایج آنها اختلاف زیادی با نتایج تحقیقات تجربی داشت.

یاماموتو و همکاران [12,11] احتراق شعله‌های نفوذی را با استفاده از مدل دو تابعی شبیه‌سازی کردند. یک تابع برای فشار و دسته‌ای دیگر از توابع برای دما و نسبت جرمی اجزاء شیمیایی. آنها احتراق را با یک واکنش آنی شیمیایی شبیه‌سازی کردند. در کار آنها نیز میدان چگالی به میدان دما وابسته نیست.

در کار دیگری، یاماموتو و همکاران [13] یک شعله نفوذی جریان مخالف را با استفاده از مدل واکنش سریع و همچنین مکانیزم شیمیایی کامل به روش بولتزمن شبکه‌ای مدل کردند. اگرچه این اولین شبیه‌سازی احتراق توسط مکانیزم‌های شیمیایی به روش بولتزمن بود، اما در این کار نیز چگالی به میدان دما وابسته نبود و نتایج، توافق خوبی با داده‌های تجربی نداشتند.

فیلیپووا و همکاران [16-14] تقریب عدد ماخ کوچک از معادلات ناویر استوکس را برای شبیه‌سازی احتراق توسط روش بولتزمن شبکه‌ای معرفی

رایانه‌ای نیز بسیار چالش برانگیز است. تنها پس از ظهور رایانه‌های پر قدرت بود که پژوهشگران توانستند احتراق را با جزئیات قابل قبول بصورت عددی مدل‌سازی کنند. روش‌ها و الگوریتم‌های عددی متعددی برای غلبه بر پیچیدگی‌های شبیه‌سازی این پدیده ابداع شده است.

شبیه‌سازی عددی احتراق با در نظر گرفتن تنها یک واکنش شیمیایی آنی، هرچند از لحاظ نظری ارزشمند است اما جزئیات زیادی از فرایند را بدست نمی‌دهد. همچنین در نظر گرفتن تمامی واکنش‌های شیمیایی رخ داده یا حتی در نظر گرفتن یک مکانیزم شیمیایی کامل، جز برای هندسه‌های بسیار ساده، بسیار مشکل و پرهزینه است. بنابراین تلاش بسیاری شده است تا با کاهش تعداد واکنش‌های در نظر گرفته شده، اصلی‌ترین و مؤثرترین واکنش‌ها در قالب یک مکانیزم کاهش یافته ارائه شود.

بورک و شومان [1] برای اولین بار صفحه واکنش یا صفحه شعله را به عنوان مکان واکنش در شعله‌های نفوذی در نظریه احتراق معرفی کردند. آنها متغیرهای پیوسته و مشتق‌پذیری را برای بیان غلظت سوخت و اکسیدکننده در دو طرف صفحه واکنش معرفی کردند. آنها همچنین معادلات توزیع دما و غلظت سوخت و اکسیژن را با فرض ضرایب نفوذ گرما و اجزاء شیمیایی برابر (عدد لوپس برابر یک) به صورت تئوریک حل کردند و با نتایج تجربی حاصل از آزمایش توسط خودشان مقایسه کردند. تطبیق نتایج نظری و تجربی و سادگی نظریه آنها باعث شده است تا این نظریه به یک نظریه کلاسیک در احتراق مبدل شود.

ادلن و همکاران [2] یک مدل ریاضی را برای توضیح شعله‌های جت نفوذی آرام پیشنهاد دادند. مدل آنها اثرات لزجت، نفوذ، گرانش، اینرسی و واکنش شیمیایی را شامل می‌شد. احتراق توسط یک معادله شیمیایی آنی در فرمول‌بندی به سبک لایه‌های مرزی با معادلات بقاء ترکیب و معادلات به روش اختلاف محدود صریح، حل شده بود. تحلیل‌های ابعادی انجام شده توسط ایشان نشان داد که شعاع عریض‌ترین قسمت شعله، سرعت جریان و شرایط ترمودینامیکی از مشخصه‌های جریان هستند. آنها همچنین آزمایش‌هایی با محفظه در حال سقوط برای شرایط با جاذبه و شرایط بدون جاذبه طراحی و اجرا کردند. نتایج تحلیلی آنها توافق خوبی با داده‌های آزمایش‌های مربوط به شرایط با جاذبه و توافق ضعیفی برای شرایط بدون جاذبه نشان می‌دادند.

ویلیامز و لینان [3] مدل بورک و شومان را برای اعداد لوپس غیر واحد اما ثابت با استفاده از دو متغیر کسر مخلوط گسترش دادند. متغیر اضافی غلظت اجزاء را با استفاده از نسبت ضرایب نفوذ آنها محاسبه می‌کرد. میدان دما بصورت جداگانه و توسط معادله بقای انرژی محاسبه می‌شد.

در روش‌های مذکور فرض اصلی این است که آهنگ واکنش‌های شیمیایی نسبت به آهنگ نفوذ بسیار سریع است. احتراق واقعی شامل واکنش‌های شیمیایی با آهنگ‌های واکنش بسیار تند تا بسیار آهسته می‌شود که در نظر گرفتن همزمان آنها مشکلاتی را در حل‌های عددی ایجاد می‌کند. بولینگ و همکاران [4] فرمول‌بندی جدیدی از مدل بورک و شومان برای رفع این مشکلات ارائه دادند و واکنش‌های با آهنگ محدود را برای شعله‌های نفوذی متان و هوا مدل کردند. در مدل آنها یک مکانیزم کاهش یافته سه مرحله‌ای که غیر از واکنش دهنده‌ها و محصولات، شامل اجزاء H_2 و CO می‌شد همراه با معادلات بقا مومنتم و پیوستگی به صورت عددی و به روش اختلاف محدود شبیه‌سازی شده است. آنها مشکل سختی دستگاه معادلات شیمیایی را که به دلیل سرعت‌های واکنش مختلف در معادلات بوجود می‌آید، با تغییر متغیر و فرمول‌بندی خاص رفع نمودند.

پترز و کی [5] با بررسی مطالعات عددی انجام شده، یک مکانیزم کاهش

1- Face-centered hyper-cub

حاکم بر احتراق نفوذی آرام به صورت (6-1) خواهند بود [19,16]:

$$\partial_t \rho + \nabla_\alpha \rho u_\alpha = 0 \quad (1)$$

$$\partial_t \rho u_\alpha + \nabla_\beta \rho u_\alpha u_\beta = -\nabla_\alpha P_h + \nabla_\beta \mu (\nabla_\alpha u_\beta + \nabla_\beta u_\alpha) \quad (2)$$

$$\rho C_p (\partial_t T + u_\alpha \nabla_\alpha T) = \nabla_\alpha C_p \kappa \rho \nabla_\alpha T + \sum_{i=1}^N h_i \omega_i + \partial_t P_0 \quad (3)$$

$$\rho (\partial_t Y_i + u_\alpha \nabla_\alpha Y_i) = \nabla_\alpha D_i \rho \nabla_\alpha Y_i + \omega_i, i = 1, \dots, N-1 \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (5)$$

$$\rho = \frac{P_0 \bar{W}}{RT} \quad (6)$$

در معادلات فوق ρ , u و T به ترتیب چگالی، سرعت و دمای مخلوط، μ ، κ و C_p به ترتیب لزجت دینامیک، ضریب رسانایی گرمایی و ظرفیت گرمایی فشار ثابت مخلوط می‌باشند. Y_i و D_i نسبت جرمی و ضریب نفوذ جرمی اجزاء شیمیایی در مخلوط هستند. ω_i و h_i نیز به ترتیب آهنگ تولید جزء شیمیایی و گرمای اجزاء شیمیایی هستند. R ثابت جهانی گازها و \bar{W} وزن مولکولی متوسط مخلوط گاز است که توسط رابطه (7) داده می‌شود:

$$\bar{W} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i}} \quad (7)$$

فشار کل P در معادلات ناویر استوکس به دو جزء تقسیم شده است: فشار ترمودینامیکی P_{th} و فشار هیدرولیکی P_h . فشار ترمودینامیکی تنها تابعی از زمان بوده و به مکان بستگی ندارد در نتیجه برای یک سیستم پایا و باز، ثابت است و مشتقات آن در معادله (3) حذف می‌گردند [19]. از اثر اتلاف انرژی لزجت، انتقال گرمای تشعشع، جاذبه، و سایر نیروهای حجمی در مدل صرف نظر شده است. شکل بی‌بعد معادلات فوق برای انتقال پارامترها به فضای بولتزمن استفاده شده است که به شکل (8-11) می‌باشند:

$$\partial_t^* \rho^* + \nabla_\alpha^* \rho^* u_\alpha^* = 0 \quad (8)$$

$$\partial_t^* \rho^* u_\alpha^* + \nabla_\beta^* \rho^* u_\alpha^* u_\beta^* = -\nabla_\alpha^* P^* + \frac{1}{Re} \nabla_\beta^* \mu^* (\nabla_\alpha^* u_\beta^* + \nabla_\beta^* u_\alpha^*) \quad (9)$$

$$\partial_t^* T^* + u_\alpha^* \nabla_\alpha^* T^* = \frac{1}{\rho^* RePr} \nabla_\alpha^* \mu^* \nabla_\alpha^* T^* + \sum_{i=1}^N h_i^* \omega_i^* \quad (10)$$

$$\partial_t^* Y_i + u_\alpha^* \nabla_\alpha^* Y_i = \frac{1}{\rho^* ReSc_i} \nabla_\alpha^* \mu^* \nabla_\alpha^* Y_i + \omega_i^*, i = 1, \dots, N-1 \quad (11)$$

در معادلات فوق $Re = \rho_0 u_0 l_0 / \mu_0$ ، $Pr = \mu / (\rho \kappa)$ ، $Sc_i = \mu / (\rho D_i)$ به ترتیب اعداد بی بعد رینولدز، پرانتل و اعداد اشمیت مربوط به اجزاء شیمیایی می‌باشند. پارامترهای $\omega_i^* = l_0 \omega_i / (u_0 \rho_0)$ و $h_i^* = h_i / (C_p T_0)$ به ترتیب تولید جزء بی بعد و آنتالپی تشکیل بی بعد اجزاء شیمیایی می‌باشند. برای یک تحلیل عددی صحیح در روش بولتزمن علاوه بر اتخاذ ضرایب تبدیل مناسب برای ابعاد اصلی باید اعداد بی‌بعد فوق نیز در فضای واقعی و فضای بولتزمن برابر باشند. متغیرهایی که با ستاره نشان داده شده‌اند با استفاده از مقادیر چگالی هوا در دمای ورودی ρ_0 ، سرعت ورودی هوا u_0 ، دمای هوای ورودی T_0 ، لزجت هوا در دمای ورودی μ_0 و ارتفاع l_0 به عنوان مقادیر مرجع بی‌بعد شده‌اند. در معادله (9) با توجه به صفر بودن گرادیان فشار ترمودینامیکی $\nabla_\alpha P_{th} = 0$ ، فشار کل جایگزین فشار هیدرولیکی شده است.

2-2- مدل بولتزمن شبکه ای

2-2-1- میدان جریان

برای مدل‌سازی احتراق، الگوریتمی بر پایه مدل دو تابع توزیعی پیشنهاد شده توسط چن و همکاران [19,18] که در آن چگالی به میدان دما وابسته است طرح‌ریزی شده است. در این مدل یک تابع توزیع، معادلات ناویر استوکس با تقریب ماخ کم را مدل می‌کند و دسته‌ای دیگر از توابع توزیع شامل یک تابع برای گرما و $n-1$ تابع - که در آن n تعداد اجزاء شیمیایی است - برای اجزاء

کردند. در جریان‌های واکنشی با سرعت کم که امواج صوتی¹ اثر قابل توجهی بر احتراق ندارند، مشخصه جریان عدد ماخ کوچک است و صرفاً تغییرات دما باعث تغییر چگالی می‌شود [17]. آنها الگوریتم عددی پیشنهاد دادند که شامل مدل BGK² اصلاح شده همراه با روش اختلاف محدود برای حل میدان دما و اجزاء شیمیایی می‌شد. به جای تابع توزیع استاندارد برای چگالی آنها از یک تابع توزیع برای فشار استفاده کردند که برای مدل کردن معادلات ناویر استوکس تراکم‌پذیر همدم وجود آمده بود. احتراق تنها با یک واکنش کلی آنی مدل‌سازی شده و تنها اجزاء اصلی واکنش دهنده‌ها و محصولات در نظر گرفته شده بود.

چن و همکاران [19,18] احتراق در عدد ماخ پایین را بوسیله مدل بولتزمن شبکه‌ای کوپل شده شبیه‌سازی کردند. آنها از الگوریتمی استفاده کردند که میدان‌های جریان، دما و اجزاء شیمیایی را تنها با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای حل می‌کرد. چگالی سیال مستقیماً با میدان دما وابسته شده بود. آنها پارامتر جدیدی را به نام دمای مشخصه معرفی کردند که اندازه بازه‌های زمانی، زمان آسایش و لزجت دینامیک سیال در هر مرحله از حل عددی بر مبنای آن اصلاح می‌شود. مدل آنها پایداری عددی بهتری را در کنار سایر مزیت‌های روش بولتزمن ارائه می‌دهد.

لی و همکاران [20] الگوریتم جدیدی را برای شبیه‌سازی شعله‌های نفوذی آرام ارائه دادند. الگوریتم آنها شامل دو تابع توزیع می‌شود که یکی معادلات ناویر استوکس با تقریب ماخ پایین را مدل‌سازی می‌کند و دیگری کسر مخلوط را - که معادلات انرژی و اجزاء شیمیایی را ترکیب می‌کند - مدل‌سازی می‌کند. آنها از مدل گذرای صفحه شعله بورک و شومان با فرض واکنش آنی و ضرایب نفوذ برابر برای تمامی اجزاء شیمیایی استفاده کردند. هرچند معادله بولتزمن بدست آمده در تحقیق آنها برای کسر مخلوط در واکنش‌های آنی بود اما می‌توان کارشان را برای واکنش‌های با سرعت محدود هم تعمیم داد.

در تمامی کارهای فوق‌الذکر احتراق با استفاده از معادلات شیمیایی آنی مدل شده است. اگرچه استفاده از تنها یک معادله واکنش آنی اطلاعات عمومی در مورد احتراق به ما می‌دهد، اما برای بدست آوردن اطلاعات دقیق‌تر از محصولات و آنچه در حین احتراق اتفاق می‌افتد باید از مکانیزم‌های احتراق با معادلات بیشتر و کامل‌تر استفاده نمود. در همین راستا در این مقاله مدل دو تابعی چن و همکاران که برای واکنش‌های آنی ابداع شده بود برای حل واکنش‌های با سرعت محدود و متفاوت مربوط به مکانیزم‌های احتراقی توسعه داده شده است. تاثیر دما و غلظت اجزاء شیمیایی بر خواص از جمله ضرایب نفوذ اجزاء و سرعت واکنش‌ها در نظر گرفته شده است. برای حل هم‌زمان معادلات مربوط به واکنش‌های با سرعت متفاوت، اندازه بازه زمانی و زمان‌های آسایش در معادله بولتزمن برای هر معادله شیمیایی در هر مرحله حل به صورت مجزا محاسبه می‌شود. برای اعتبار سنجی مدل، یک شعله نفوذی جت متان با یک مکانیزم کلی چهار معادله‌ای پیشنهاد شده توسط جونز و لیندشتات [7] شبیه‌سازی شده و میدان‌های دما و غلظت اجزاء شیمیایی با نتایج تجربی گزارش شده توسط میشل و همکاران [21] مقایسه شده است.

2- فرمول بندی مسأله

2-1- معادلات حاکم

معادلات ناویر استوکس با تقریب عدد ماخ کم³ و معادله بقاء اجزاء شیمیایی

1- Acoustic
2- Bhatnagar, Gross and Krook
3- Low Mach Number Approximation

$$\omega_i^* = \frac{l_0}{u_0 \rho_0} \omega_i = \frac{l_0}{u_0 \rho_0} W_i \sum_j a_{ij} (r_j^b - r_j^f) \quad (22)$$

$$Q_i = \left(\frac{u_0 \rho_0}{l_0} \right)_{LBM} \omega_i^* \quad (23)$$

$$Q_0 = (C_p T_0)_{LBM} \left(\frac{u_0 \rho_0}{l_0} \right)_{LBM} \sum_{i=1}^N h_i^* \omega_i^* \quad (24)$$

در معادلات فوق a_{ij} ضریب استوکیومتری جزء i -ام در معادله واکنشی j -ام و r_j^b و r_j^f آهنگ‌های واکنش معادله واکنشی j -ام است. تابع توزیع تعادلی برای این میدان ها بصورت (25) خواهد بود.

$$g_{s,k}^{eq} = \xi_k Z \left[1 + 3 \frac{(e_k \cdot u)}{c} + \frac{9 (e_k \cdot u)^2}{2 c^2} - \frac{3 |u|^2}{2 c^2} \right] \quad (25)$$

که در آن Z نشان دهنده دما ($s=0$) و نسبت جرمی جزء s -ام ($s=1,2,\dots$) می‌باشد. دما و نسبت جرمی اجزاء از معادلات (27,26) بازیابی می‌شوند.

$$T = \sum_k g_{T,k} \quad (26)$$

$$Y_i = \sum_k g_{Y_i,k} \quad (27)$$

ضریب نفوذ گرما κ ، و ضرایب نفوذ جرمی اجزای شیمیایی D_i از طریق روابط (29,28) با زمان‌های آسایش مرتبط هستند.

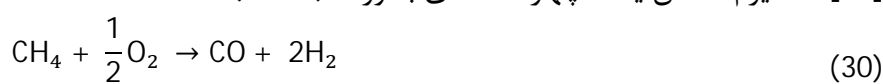
$$\kappa = \frac{2\tau_T - 1}{6} c^2 \Delta t \quad (28)$$

$$D_i = \frac{2\tau_{Y_i} - 1}{6} c^2 \Delta t \quad (29)$$

هستند و از طریق اعداد Pr و Sc_i به زمان آسایش معادله بولتزمن مومنتم مرتبط خواهند شد.

2-3- مکانیزم کاهش یافته

برای اعتبارسنجی مدل فوق احتراق یک شعله نفوذی جت متان که داده‌های تجربی آن برای اجزاء شیمیایی گزارش شده مدل و شبیه‌سازی شده است. از مکانیزم کاهش یافته عمومی برای احتراق آلکان ها که توسط جونز و لینداشتات [7] پیشنهاد شده برای شبیه‌سازی شعله نفوذی جت متان استفاده شده است. این مکانیزم شامل دو معادله مصرف سوخت و دو معادله تعادلی می‌باشد و تولید و مصرف شش جزء شیمیایی را مدل‌سازی می‌کند. نتایج منتشر شده توسط محققان کارایی این مکانیزم را در پیش‌بینی سرعت شعله، ضخامت شعله و توزیع اجزاء شیمیایی در شعله‌های نفوذی آرام جت‌های هم راستا نشان می‌دهد [21]. مکانیزم کاهش یافته چهار معادله‌ای بصورت (30-33) است:



که در آن‌ها آهنگ‌های واکنش‌های مستقیم از روابط (34-37) محاسبه می‌شود:

$$r_1^f = k_1^f(T) [CH_4]^{1/2} [O_2]^{5/4} \quad (34)$$

$$r_2^f = k_2^f(T) [CH_4] [H_2O] \quad (35)$$

$$r_3^f = k_3^f(T) [H_2]^{1/4} [O_2]^{3/2} \quad (36)$$

$$r_4^f = k_4^f(T) [CO] [H_2O] \quad (37)$$

مقادیر ثابت‌های آهنگ واکنش مستقیم در جدول 1 داده شده است:

جدول 1 ثابت‌های آهنگ واکنش مستقیم ($k_f = A T^b \exp(-E/RT)$) [7] (بر مبنای

واحدهای kg, kmol, cal, K, m و s)

Table 1 Forward rate constants (as $A T^b \exp(-E/RT)$) (Units kg, m, s, kmol, cal, K)

ضریب آهنگ واکنش	A	b	E
k_1^f	0.44×10^{12}	0	30000
k_2^f	0.30×10^9	0	30000
r_3^f	0.68×10^{16}	-1	40000
r_4^f	0.275×10^{10}	0	20000

شیمیایی، میدان دما و نسبت جرمی اجزاء شیمیایی را مدل می‌کنند. طرح D2Q9 برای گسسته‌سازی فضا بکار رفته است. معادله بولتزمن گسسته شده بصورت (12) خواهد بود:

$$f_k(x + ce_k \Delta t, t + \Delta t) - f_k(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_k(x, t) - f_k^{eq}(x, t)) \quad (12)$$

که در آن Δt مرحله زمانی، τ زمان آسایش برای میدان جریان و f_k تابع توزیع برای میدان جریان است. تابع توزیع تعادلی f_k^{eq} بصورت رابطه (13) تعریف می‌شود:

$$f_k^{eq} = \chi_k + \rho s_k(u) \quad (13)$$

که در آن $\chi_0 = \rho - 4\sigma P_1/c^2$ و $\chi_k = \lambda P_1/c^2$ زمان $k=1, 2, 3, 4$ و $\chi_k = \gamma P_1/c^2$ زمان $k=5, 6, 7, 8$. پارامترهای σ, λ, γ معادلات $\lambda + 2\gamma = 0.5$ را باید ارضا کنند. همچنین در این تابع رابطه (14) برقرار است:

$$s_k(u) = \xi_k \left[3 \frac{(e_k \cdot u)}{c} + \frac{9 (e_k \cdot u)^2}{2 c^2} - \frac{3 |u|^2}{2 c^2} \right] \quad (14)$$

که در آن ξ_k تابع وزن بوده و مقادیر آن بصورت $\xi_{5,6,7,8} = 1/36$ و $\xi_{1,2,3,4} = 1/9$ ، $\xi_0 = 4/9$ است. فشار هیدرولیکی و مومنتم را می‌توان از معادلات (15-16) بازیابی کرد:

$$P_1 = \frac{c^2}{4\sigma} \left[\sum_{k \neq 0} f_k + \rho s_0(u) \right] \quad (15)$$

$$\rho u = \sum_k ce_k f_k \quad (16)$$

لزجت سینماتیک از طریق رابطه (17) به بازه‌های زمانی و زمان آسایش مرتبط است.

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} c^2 \Delta t \quad (17)$$

در این روش چگالی مخلوط مستقیماً از معادله بولتزمن (معادله 12) محاسبه نمی‌شود بلکه با استفاده از قانون گاز ایده ال و در هر مرحله زمانی بصورت رابطه (18) محاسبه می‌شود [18]

$$\rho^{n+1} = \frac{\rho_0 T_0 \bar{W}^{n+1}}{T^{n+1} \bar{W}_0} \quad (18)$$

که در آن \bar{W}_0 وزن مولکولی میانگین مخلوط در حالتی است که مخلوط در دمای T_0 است و زیرنویس‌های n یا $n+1$ مراحل زمانی را نشان می‌دهند. زمان آسایش τ در هر مرحله توسط معادله (17) محاسبه می‌شود. با استفاده از معادله (18) می‌توان لزجت سینماتیک را با رابطه (19) در هر مرحله محاسبه نمود.

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = \frac{\mu T \bar{W}_0}{\rho_0 T_0 \bar{W}} \quad (19)$$

برای بدست آوردن لزجت دینامیک در هر مرحله فرض شده است که مقدار آن از رابطه (20) به دما وابسته است [19]:

$$\mu = \mu_0 \sqrt{\frac{T}{T_0}} \quad (20)$$

2-2-2- میدان‌های دما و نسبت جرمی اجزاء

معادله بولتزمن برای مدل‌سازی میدان دما و نسبت جرمی اجزاء شیمیایی بصورت رابطه (21) خواهد بود:

$$g_{s,k}(x + ce_k \Delta t, t + \Delta t) - g_{s,k}(x, t) = -\frac{1}{\tau_s} (g_{s,k}(x, t) - g_{s,k}^{eq}(x, t)) + \xi_k Q_s \Delta t \quad (21)$$

زیر نویس s در معادله بالا نشان دهنده دما ($s=0$) و نسبت جرمی اجزاء شیمیایی ($s=1,2,\dots$) است. جمله چشمه در معادله فوق است که برای $s=0$ تولید گرما در واکنش و برای $s=1,2,\dots$ تولید یا مصرف اجزاء شیمیایی را نشان می‌دهد. با استفاده از آنالیز ابعادی پارامترها، می‌توان روابط (22-24) را نوشت:

$$\frac{c^n}{c} = \sqrt{\frac{T_{max}^n}{T_0}} \quad (39)$$

سپس مقادیر مربوط به بازه زمانی از رابطه (40) محاسبه می‌شود:

$$\Delta x = c^n \Delta t^n \quad (40)$$

اندازه بازه‌های زمانی در ابتدا 1×10^{-6} s بوده و در هر مرحله از رابطه (40) اصلاح می‌گردد. حال با استفاده از روابط (17) تا (20) پارامترهای مربوط به میدان مومنتم، با استفاده از روابط (28) و (29) پارامترهای مربوط به میدان‌های گرما و اجزاء شیمیایی و با استفاده از روابط (34) تا (38) پارامترهای مربوط به واکنش‌های شیمیایی اصلاح می‌شوند.

3- نتایج

در این قسمت برای اعتبارسنجی مدل بولتزمن، نتایج بدست آمده از حل عددی با نتایج تجربی و نظری گزارش شده توسط میشل و همکاران مقایسه شده است [21]. شبیه‌سازی عددی انجام شده شامل ساده‌سازی‌هایی می‌شود که در

تفسیر نتایج باید مد نظر قرار گیرند. مهمترین این ساده‌سازی‌ها عبارتند از:

- در مدل احتراقی تنها شش جزء شیمیایی در نظر گرفته شده است. این امر جهت مقایسه با نتایج تجربی گزارش شده می‌باشد. این مسأله از این نظر حائز اهمیت است که در کار تجربی اجزاء شیمیایی زیادی وجود دارند که بر فرایند احتراق تاثیر می‌گذارند هرچند غلظت آنها گزارش نشود. اما در کار عددی صرفا اجزاء شیمیایی مدل شده بر فرایند احتراق تاثیر می‌گذارند.
- اثرات جاذبه در مدل بولتزمن در نظر گرفته نشده‌اند در حالی که به دلیل اختلاف چگالی زیاد، جاذبه در حرکت گاز موثر خواهد بود. در نظر نگرفتن جاذبه باعث پهن‌تر شدن توزیع‌های دما و اجزاء شیمیایی می‌شود هرچند این اثر به دلیل کم بودن اثر جاذبه نسبت به اینرسی اولیه سیال بسیار جزئی خواهد بود.
- اثرات تشعشع در نظر گرفته نشده‌اند. هرچند دیواره‌ها در کار تجربی عایق بوده‌اند، اما انتقال گرمای تشعشع بخصوص از قسمت بالایی محفظه احتراق بر توزیع دما موثر است.

شکل 2 کانتورهای مربوط به نسبت مولی متان در محفظه احتراق را نشان می‌دهد. (توجه شود که معادلات بولتزمن بر مبنای نسبت جرمی هستند، اما نتایج برای مقایسه با داده‌های تجربی بر حسب نسبت‌های مولی بیان شده‌اند).

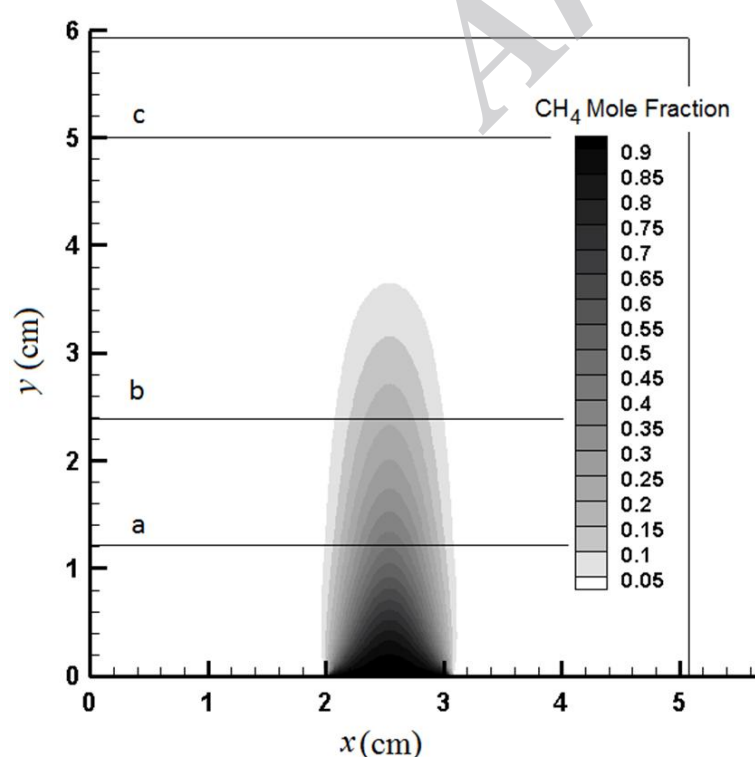


Fig. 2 Methane mole fraction contours. The lines (a, b and c) show the cross sections at which the concentration profiles are calculated.

شکل 2 کانتورهای نسبت مولی متان. خطوط (a,b,c) سطح مقطع‌هایی را نشان می‌دهد که توزیع نسبت مولی اجزاء با داده‌های تجربی و تئوریک گزارش شده مقایسه شده است.

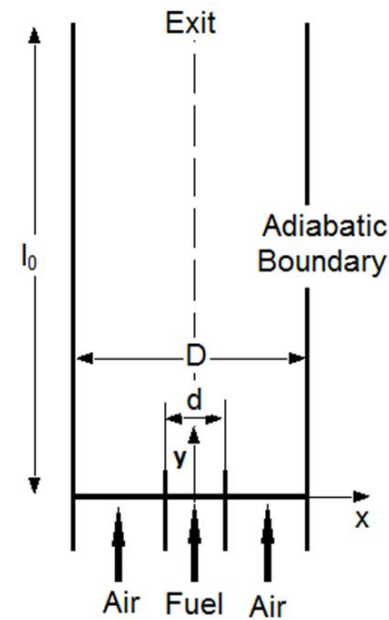


Fig. 1 Computational domain and boundaries

شکل 1 دامنه محاسباتی و شرایط مرزی

آهنگ‌های واکنش‌های معکوس (معادلات 32 و 33) از مقادیر آهنگ واکنش مستقیم و ثابت‌های تعادلی استخراج شده از داده‌های ترمودینامیکی و طبق رابطه (38) محاسبه می‌شوند [22].

$$k_i^b(T) = \frac{k_i^f(T)}{K_i^c(T)} \quad (38)$$

در رابطه فوق $K_i^c(T)$ ثابت تعادلی مربوط به معادلات واکنشی می‌باشد.

4-2- هندسه و شرایط مرزی

احتراق جریان‌های هم راستای متان به عنوان سوخت و هوا به عنوان اکسیدکننده شبیه‌سازی شده و شکل شعله و توزیع دما و اجزای شیمیایی در مقطعی از شعله با نتایج تجربی مقایسه شده است. هندسه شبیه‌سازی شده در شکل 1 داده شده است. متان از ورودی مرکزی و هوا از اطراف وارد محفظه احتراق می‌شوند. مکانی که در آن متان و هوا با نسبت‌های استوکیومتری حضور دارند به عنوان مکان اولیه شعله برای شروع حل در نظر گرفته شده است.

شرایط مرزی زیر برای حل معادلات بولتزمن در نظر گرفته شده است،

- 1- مقادیر مشخص سرعت، دما و اجزاء شیمیایی در ورودی‌ها
- 2- دیواره‌های آدیاباتیک صلب با نفوذ شیمیایی صفر
- 3- شرط عدم لغزش در دیواره‌ها
- 4- شرط مرزی خروجی آزاد در قسمت فوقانی

سرعت و نسبت جرمی ورودی برای متان به ترتیب 2.14 cm/s و 1 و برای هوا به ترتیب 4.42 cm/s و 0.233 اکسیژن و 0.767 نیتروژن در نظر گرفته شده است. دمای ورودی برای هر دو جریان 300K بوده و تمامی خواص اولیه سیال از جمله لزجت، ضرایب نفوذ و ظرفیت‌های گرمایی در این دما از داده‌های ترمودینامیکی استخراج شده‌اند.

5-2- الگوریتم حل

ابتدا تمامی خواص در دمای 300K از جداول مربوطه استخراج، توسط آنالیز ابعادی و با استفاده از اعداد بی‌بعد ذکر شده به مقادیر مربوط به فضای بولتزمن تبدیل می‌شوند.

سپس فرآیند حل بدون واکنش شیمیایی انجام می‌شود تا اجزاء شیمیایی سوخت و هوا به حالت پایدار برسند. سپس معادلات واکنش‌های احتراق نیز به روند حل معادلات اضافه شروع می‌شوند. در هر مرحله بیشترین دمای موجود در دامنه حل به عنوان دمای مشخصه در نظر گرفته شده و سرعت ذره در محیط بولتزمن شبکه‌ای از رابطه (39) اصلاح می‌گردد:

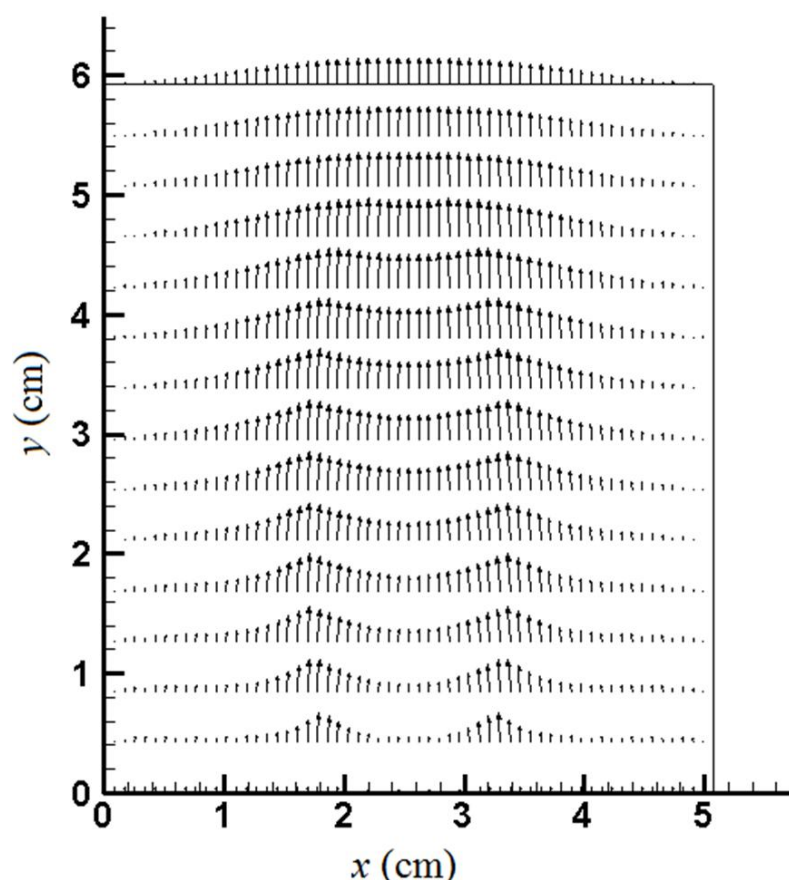


Fig. 5 Velocity Vectors.

شکل 5 بردارهای سرعت.

در این مدل که چگالی به میدان دما وابسته شده است، بردارهای سرعت در نواحی با دمای بیشتر و چگالی کمتر، بزرگترند و این بقای جرم را ارضا می‌کند. در مرز خروجی توزیع بردارهای سرعت نشان می‌دهد که افزایش دما در قسمت بالای شعله بصورت یکنواخت در آمده است.

شکل‌های 6 تا 11 مقایسه بیان نتایج حل عددی به روش بولتزن شبکه‌ای (خطوط پر) داده‌های تجربی از مرجع [21] (علایم مثلث شکل) و نتایج نظری برای واکنش تک معادله‌ای (خط چین) را نشان می‌دهند.

شکل 6 نسبت مولی اجزاء را در سطح مقطع افقی 1.2cm بالاتر از ورودی (خط a در شکل 2) نشان می‌دهد. نتایج حل عددی به روش بولتزن در حالت کلی با داده‌های تجربی و نظری همخوانی دارند. با مقایسه نتایج برای CH_4 ، H_2O و CO_2 مشاهده می‌شود که نسبت مولی بدست آمده از روش بولتزن شبکه‌ای کمی کمتر از مقادیر نظری تک مرحله‌ای است. از آنجا که در محاسبات نظری تنها یک واکنش شیمیایی و تنها اجزاء شیمیایی مربوط به واکنش دهنده‌ها و محصولات احتراق در نظر گرفته شده است و نسبت‌های مولی CO و H_2 در نظر گرفته نشده‌اند، مقادیر مربوط به CH_4 ، H_2O و CO_2 در روش نظری تک مرحله‌ای بیشتر خواهد بود. از طرف دیگر با توجه به اینکه در کار تجربی کلیه ذرات موجود در واکنش از قبیل CH ، CH_2 ، و CH_3 وجود دارد در حالی که این ذرات در روش بولتزن شبکه‌ای محاسبه نشده است، مقادیر متان وجود در داخل شعله در روش تجربی اندکی کمتر از روش بولتزن شبکه‌ای است. نسبت‌های مولی بدست آمده از روش بولتزن برای CO_2 و CO کمی بیشتر از نتایج تجربی هستند. این مسأله به دلیل در نظر نگرفتن سایر اجزاء شیمیایی در مدل بولتزن اما حضور آنها در احتراق واقعی است که باعث کاهش نسبت‌های سایر اجزاء در حالت واقعی می‌شود. در این شکل مقادیر بدست آمده برای H_2 کمتر از مقادیر گزارش شده در کار تجربی می‌باشد. این عدم تطابق بخصوص در نواحی داخلی شعله که سوخت درصد جرمی بالایی دارد، توسط جونز و لیندشتات [7] ارائه دهندگان مدل احتراقی چهار واکنشی - نیز گزارش شده‌است. ایشان خطای روابط آهنگ واکنش‌های (32) و (33) در ناحیه داخلی شعله با نسبت جرمی سوخت زیاد (ابتدای شعله) را دلیل این امر دانسته‌اند.

صفحه شعله را می‌توان مکان هندسی نقاطی با نسبت مولی یا جرمی متان صفر و یا نقاط با بیشترین دما -جایی که واکنش‌ها با بیشترین آهنگ رخ می‌دهند- در نظر گرفت. در این شکل خطوط (a,b,c) سطح مقطع‌هایی را نشان می‌دهد که داده‌های تجربی برای دما و نسبت مولی اجزاء توسط میشل و همکاران گزارش شده است.

شکل 3 کانتورهای دما را نشان می‌دهد. سرعت واکنش‌های احتراقی با افزایش دما افزایش می‌یابد بنابراین مکان شعله را می‌توان نقاط با بیشترین دما در نظر گرفت. مقایسه شکل‌های 2 و 3 نشان می‌دهد بیشینه دما در قسمت خارجی صفحه شعله جایکه غلظت سوخت به صفر رسیده است، می‌باشد.

شکل 4 توزیع چگالی را در دامنه حل نشان می‌دهد. چگالی با دما نسبت عکس و با وزن مولکولی میانگین (معادله 18) نسبت مستقیم دارد. کاهش چگالی در قسمت‌های داخلی شعله به دلیل دمای بالا و نسبت جرمی بالای متان با وزن مولکولی کمتر نسبت به اکسیژن و نیتروژن است. در ورودی سوخت، چگالی کمتر صرفاً به دلیل نسبت جرمی بالای متان است. در نواحی نزدیک شعله دمای بالا دلیل اصلی کاهش چگالی است.

بردارهای سرعت در شکل 5 نشان داده شده‌اند. در مدل‌های بولتزن که میدان چگالی به میدان دما وابسته نیست عدم تغییر چگالی باعث تخمین نادرست میدان سرعت می‌شد.

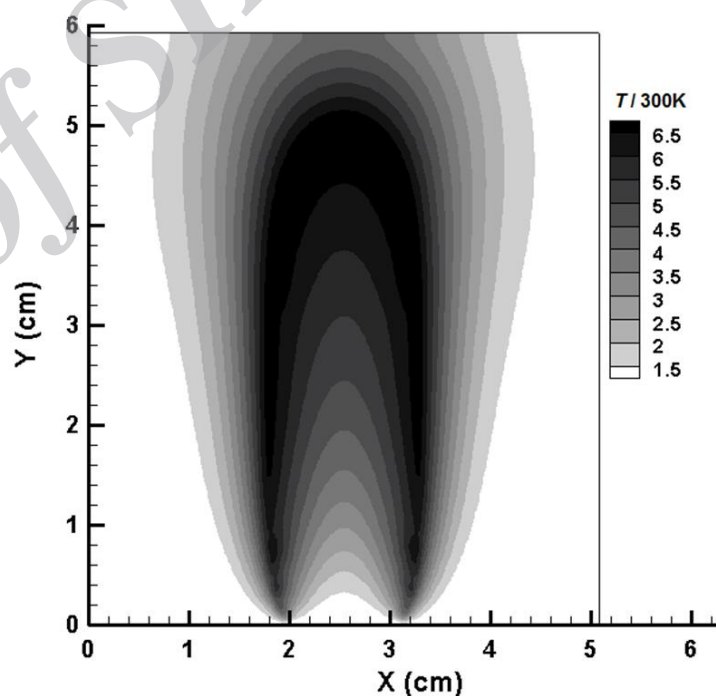


Fig. 3 Temperature contours.

شکل 3 کانتورهای دما

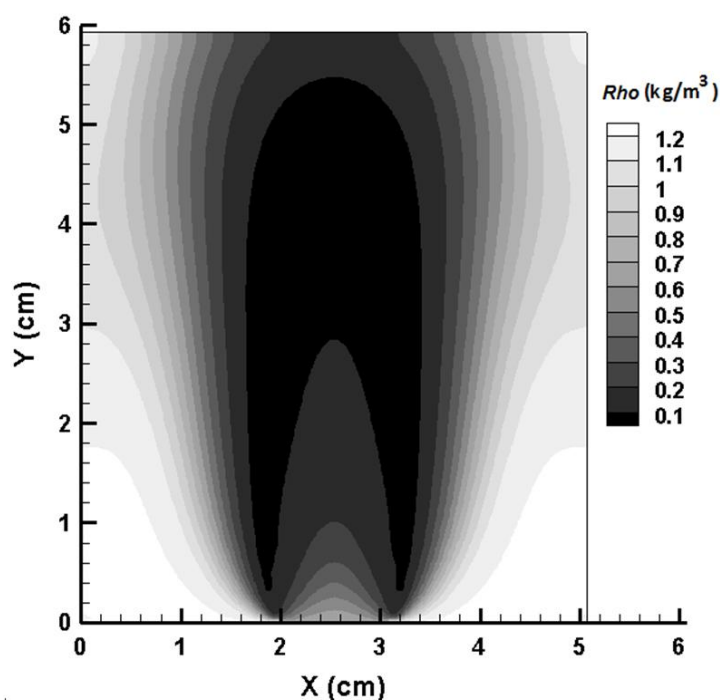


Fig. 4 Density contours.

شکل 4 کانتورهای چگالی

طرح کلی نتایج شبیه به شکل 6 بوده و در اینجا نیز نتایج حل عددی به روش بولتزمن از نتایج نظری کمی کمتر و از نتایج تجربی کمی بیشترند.

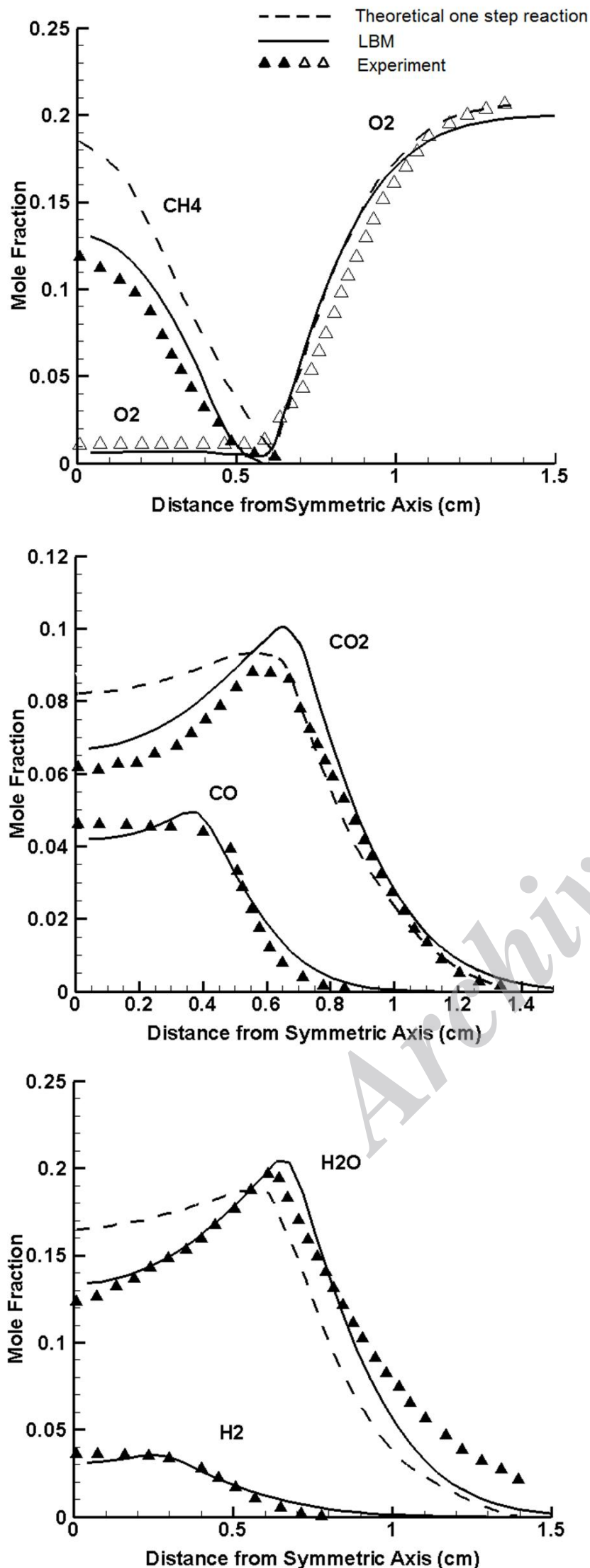


Fig. 7 Mole fraction profiles established 2.4 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 7 توزیع نسبت های مولی اجزاء 2.4cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین ها نتایج نظری یک معادله ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می دهند.

شکل 7 نسبت مولی اجزاء را در سطح مقطع افقی 2.4cm بالاتر از ورودی (خط b در شکل 2) نشان می دهد. نسبت مولی CH_4 نسبت به شکل 6 کاهش یافته و این به دلیل مصرف سوخت در فرایند احتراق در فاصله 1.2 تا 2.4 سانتی متر است.

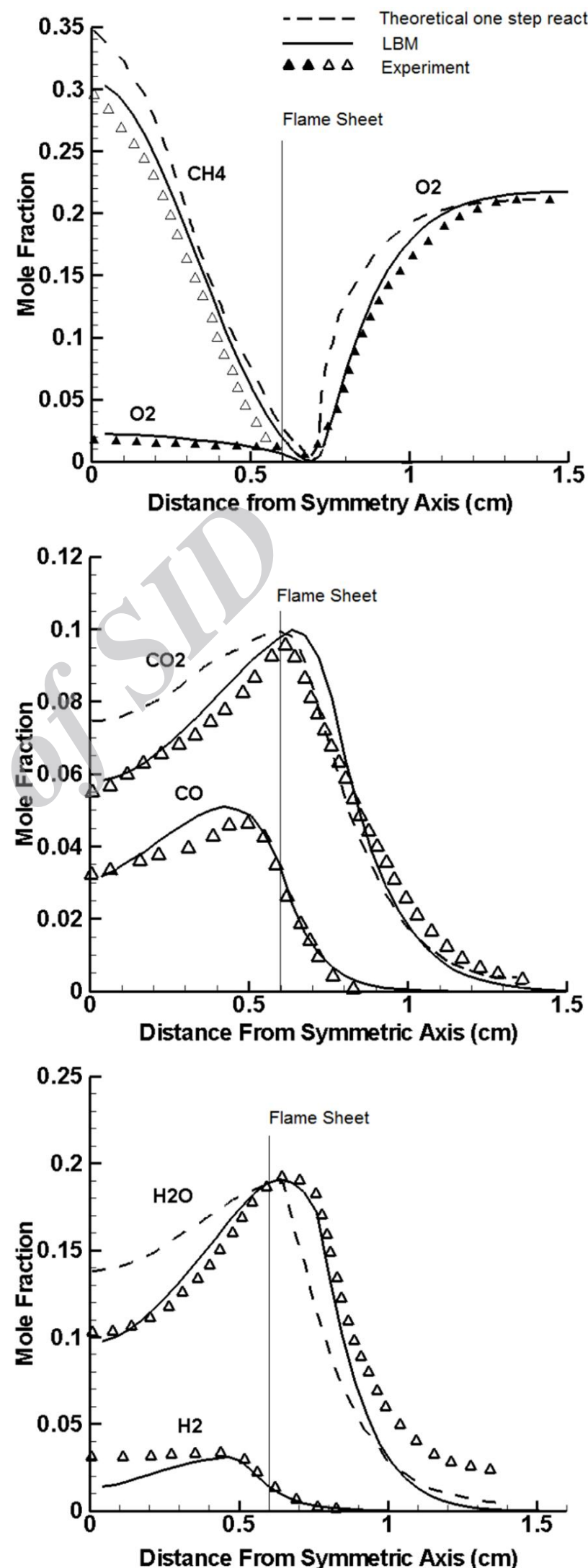


Fig. 6 Mole fraction profiles established 1.2 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 6 توزیع نسبت های مولی اجزاء 1.2cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین ها نتایج نظری یک معادله ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می دهند.

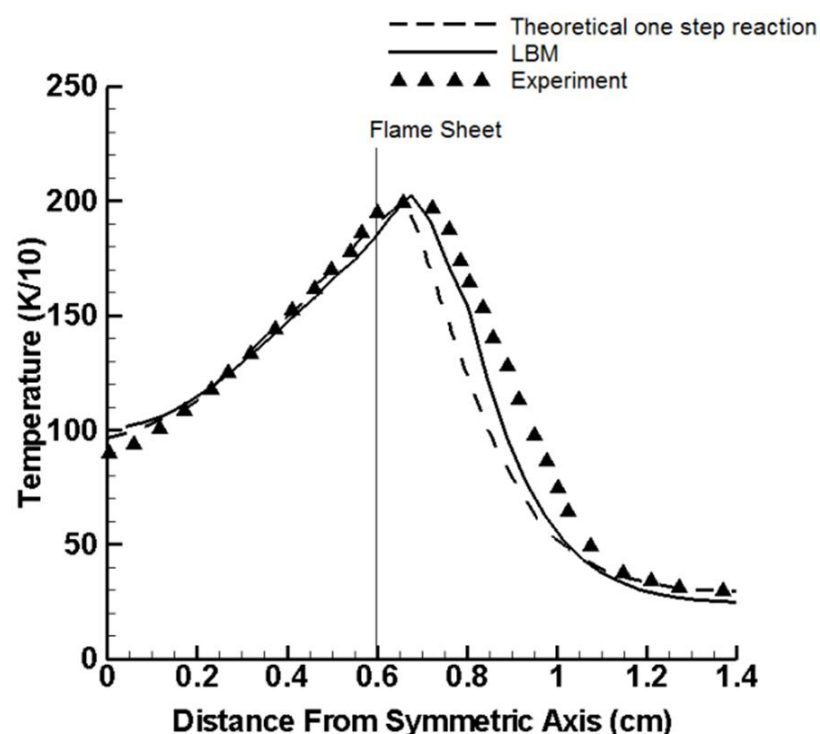


Fig. 9 Temperature profiles established 1.2 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 9 توزیع دما 1.2cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزنم، خط چین‌ها نتایج نظری یک معادله‌ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می‌دهند.

شکل 8 نسبت مولی اجزاء را در سطح مقطع افقی 5cm بالاتر از ورودی (خط c در شکل 2) نشان می‌دهد. از آنجا که این مقطع بالاتر از صفحه شعله قرار گرفته است تمامی متان مصرف شده و نسبت مولی آن در شکل صفر است. نتایج محاسبه شده با روش بولتزنم توافق خوبی با داده‌های تجربی مربوط به H_2 و CO ، CO_2 ، O_2 دارند.

در شکل 8 نتایج حل عددی به روش بولتزنم برای H_2O در ناحیه بیرونی شعله جایی که نسبت جرمی H_2 به صفر میل می‌کند کمتر از نتایج تجربی است. این موضوع در شکل‌های 6 و 7 تکرار شده است. در تحلیل عددی نسبت جرمی بخار آب در هوای ورودی صفر در نظر گرفته شده است در حالی که در کار تجربی هوای ورودی مقادیر بسیار کمی بخار آب به همراه دارد. این موضوع می‌تواند کمی نسبت مولی بخار آب در کار عددی نسبت به داده‌های تجربی را توضیح دهد. مقادیر محاسبه شده بخار آب در ناحیه داخلی شعله، جایی که ورودی، هم در کار عددی و هم در کار تجربی متان خالص است مساوی یا بیشتر از نتایج تجربی است.

شکل 9 توزیع دما را در سطح مقطع افقی 1.2cm بالاتر از ورودی (خط a در شکل 2) نشان می‌دهد. در حالت کلی نتایج حل عددی به روش بولتزنم منطبق با داده‌های تجربی و نتایج نظری است. با توجه به اینکه در سطح مقطع a در داخل شعله مقادیر متان به صورت تجربی کمتر از مقادیر محاسبه شده است این به معنی سوخته شدن مقادیر بیشتری از متان است بنابر این درجه حرارت در این مقطع در حالت تجربی اندکی بیشتر از مقادیر نظری و بولتزنم شبکه ای است.

شکل 10 توزیع دما را در سطح مقطع افقی 2.4cm بالاتر از ورودی (خط b در شکل 2) نشان می‌دهد. در ناحیه داخلی شعله روش بولتزنم مقادیر دما را بیشتر از داده‌های تجربی نشان می‌دهد. در احتراق واقعی مراحل و اجزاء شیمیایی احتراق بیشتر است و اجزاء شیمیایی سوخته بیشتری هنوز در ناحیه داخلی وجود دارند درحالی‌که در مکانیزم حل شده تنها چهار مرحله شیمیایی و شش جزء شیمیایی وجود دارد و بیشتر اجزاء شیمیایی سوخته‌اند و انرژی بیشتری آزاد شده است.

شکل 11 توزیع دما را در سطح مقطع افقی 5cm بالاتر از ورودی (خط c در شکل 2) نشان می‌دهد. در حالت کلی نتایج حل عددی به روش بولتزنم

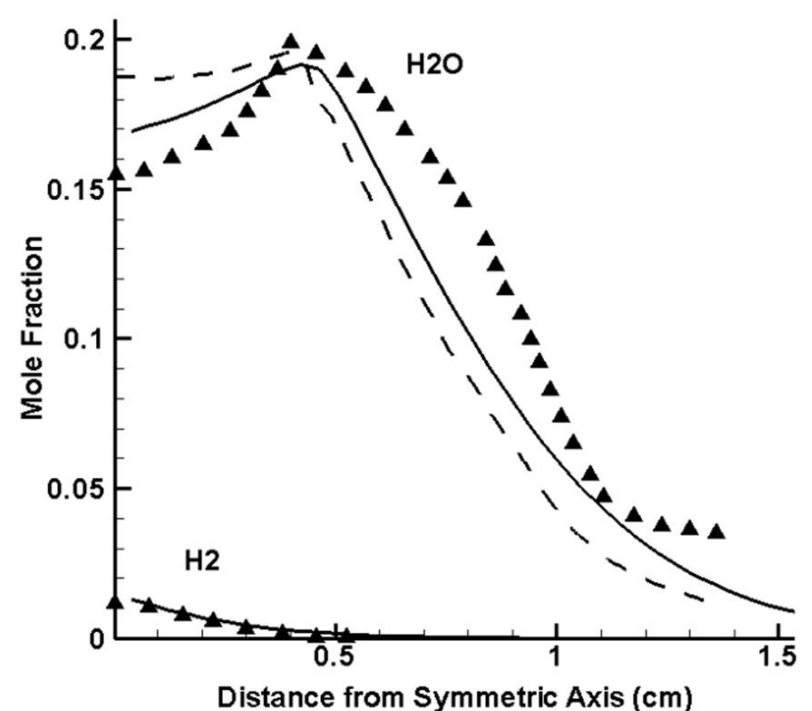
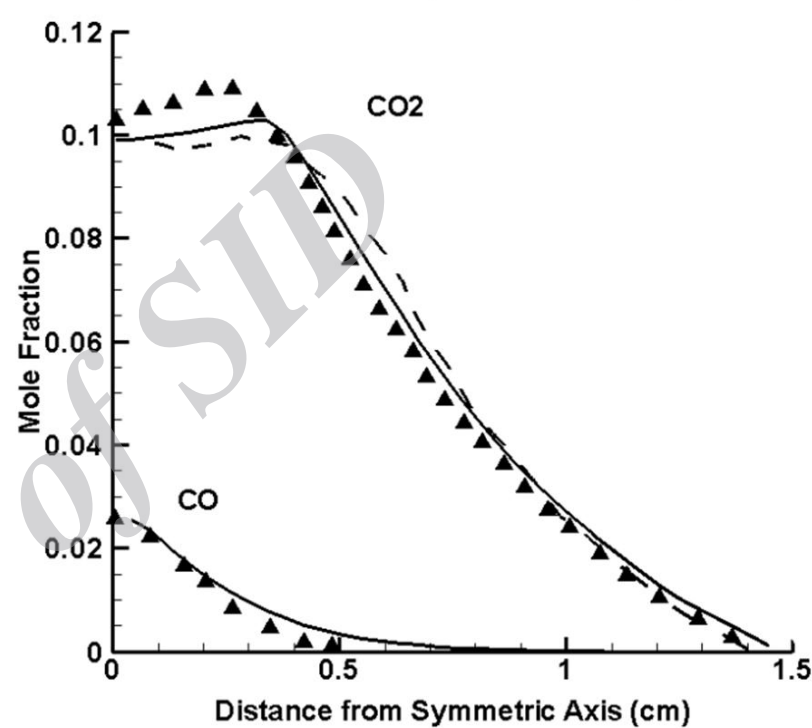
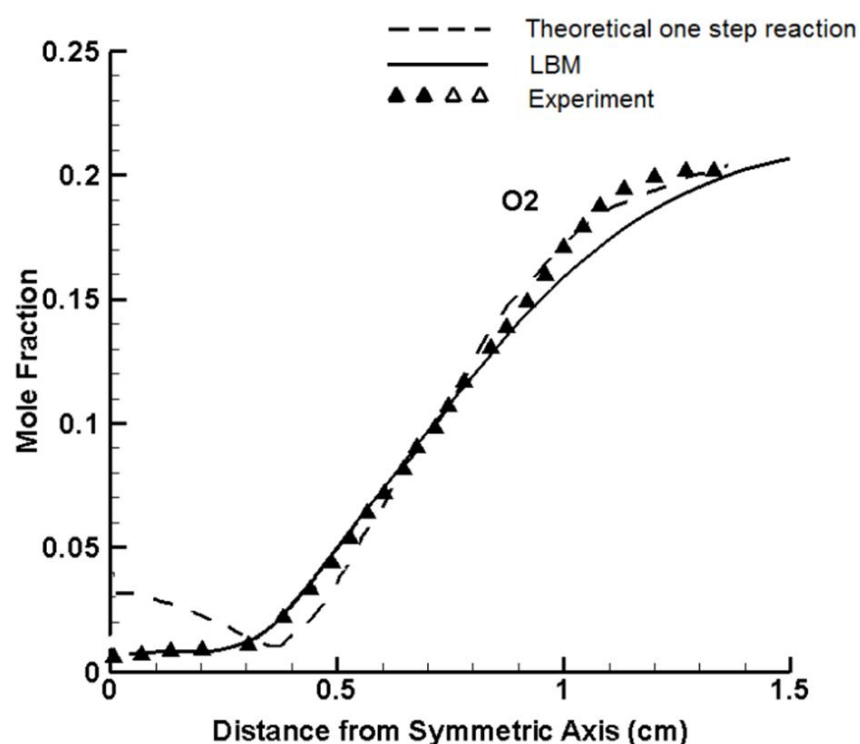


Fig. 8 Mole fraction profiles established 5.0 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 8 توزیع نسبت مولی اجزاء 5.0cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزنم، خط چین‌ها نتایج نظری یک معادله‌ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می‌دهند.

به نظر می‌رسد استدلالات مربوط به شکل 6 در اینجا نیز صادق است. مقادیر H_2 و CO در روش بولتزنم شبکه ای و روش تجربی کاملاً همخوانی دارد.

- اگرچه نتایج توافق خوبی با داده‌های تجربی دارند، اما اختلافاتی نیز دیده می‌شود که به دلیل ساده سازی‌های صورت گرفته در حل عددی می‌باشند. برای بدست آوردن نتایج دقیق‌تر باید شرایط فیزیکی واقعی‌تر از جمله جاذبه و تشعشع را در نظر گرفت. با توجه به قابلیت انعطاف این روش می‌توان این اثرات را بصورت جمله‌های چشمه به معادلات بولتزمن اضافه کرد.

5- مراجع

- [1] S. P. Burke, T. E. W. Schumann, Diffusion Flames, *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 20, No. 10, pp. 998-1004, 1928.
- [2] R. B. Edelman, O. F. Fortune, G. Weilerstein, T. H. Cochran, J. B. Haggard, An analytical and experimental investigation of gravity effects upon laminar gas jet-diffusion flames, *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 14, No. 1, pp. 399-412, 1973.
- [3] F. A. Williams, A. Linan, *Fundamental Aspects of Combustion*, pp. 144-146, New York: Oxford University Press, 1993.
- [4] M. Bollig, A. Linan, A. L. Sanchez, F. A. Williams, A Simplified Approach to the Numerical Description of Methan-Air Diffusion Flames, *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 27, pp. 595-603, 1998.
- [5] N. Peters, R. J. Kee, The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism, *Combustion and Flame*, Vol. 68, No. 1, pp. 17-29, 1987.
- [6] H. Tsuji, I. Yamaoka, Structure analysis of counterflow diffusion flames in the forward stagnation region of a porous cylinder, *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 13, No. 1, pp. 723-731, 1971.
- [7] W. P. Jones, R. P. Lindstedt, Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion, *Combustion and Flame*, Vol. 73, pp. 233-249, 1988.
- [8] M. A. Bijarchi, M. H. Rahimian, Numerical Simulation of droplet collision in the two phase flow using Lattice Boltzmann Method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 2, pp. 85-96, 2014. (in persian)
- [9] M. Taghilou, M. H. Rahimian, Investigation of two-phase flow in porous media using lattice Boltzmann method, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 67, No. 2, pp. 424-436, 2014. (in persian)
- [10] S. Succi, G. Bella, F. Papetti, Lattice Kinetic Theory for Numerical Combustion, *Journal of Scientific Computing*, Vol. 12, No. 4, 1997.
- [11] K. Yamamoto, LB simulation on combustion with turbulence, 2003, pp. 197-200.
- [12] K. Yamamoto, X. He, G. D. Doolen, Simulation of Combustion Field with Lattice Boltzmann Method, *Journal of Statistical Physics*, Vol. 107, pp. 367-383, 2002.
- [13] K. Yamamoto, Combustion Simulation using the Lattice Boltzmann Method, *JSME International Journal*, Vol. 47, No. 2, pp. 4003-409, 2004.
- [14] O. Filipova, D. Hanel, Lattice-BGK model for low mach number combustion, *International Journal Modern Physics*, Vol. 158, pp. 139-139, 2000.
- [15] O. Filipova, D. Hanel, A novel numerical scheme for reactive flows at low mach numbers, *Computer Physics Communications*, Vol. 129, pp. 267-267, 2000.
- [16] O. Filipova, D. Hanel, A Novel lattice BGK approach for low mach number combustion, *Journal of Computational Physics*, Vol. 9, No. C, pp. 267-267, 1998.
- [17] T. Poinso, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, Philadelphia: R.T. Edwards Inc., 2001.
- [18] S. Chen, Z. Liu, Z. Tian, B. Shi, C. Zheng, S. Chena, Z. Liub, Z. Tianb, B. Shib, C. Zhengb, A simple lattice Boltzmann scheme for combustion simulation, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 55, No. 7, pp. 1424-1432, 2008.
- [19] S. Chen, Z. Liu, C. Zhang, Z. He, Z. Tian, B. Shi, C. Zheng, A novel coupled lattice Boltzmann model for low Mach number combustion simulation, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 193, No. 1, pp. 266-284, 2007.
- [20] T. Lee, C.-L. C. L. Lin, L. D. L.-D. Chen, A lattice Boltzmann algorithm for calculation of the laminar jet diffusion flame, *Journal of Computational Physics*, Vol. 215, No. 1, pp. 133-152, 2006.
- [21] R. E. Mitchell, A. F. Sarofim, L. A. Clomburg, Experimental and Numerical Investigation of Confined Laminar Diffusion Flames, *Combustion and Flame*, Vol. 37, pp. 227-244, 1980.
- [22] R. A. Svehla, *Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high emperature*, 1962.

در اینجا نیز منطبق با داده‌های تجربی و نتایج نظری است.

4- بحث و نتیجه گیری

هدف اصلی این تحقیق توسعه روش بولتزمن شبکه‌ای برای شبیه‌سازی مکانیزم‌های واکنشی با سرعت محدود و دخیل کردن تاثیر دما و غلظت در خواص و پارامترهای حل از جمله سرعت واکنش بود. مهمترین نتایج حاصل از مطالعه عبارتند از:

- توافق نتایج حل عددی با داده‌های تجربی نشان می‌دهد که روش چن و همکاران را می‌توان برای حل واکنش‌های احتراقی با سرعت‌های محدود و متفاوت توسعه داد. هرچند در اینجا یک مکانیزم چهار معادله‌ای شبیه‌سازی شده است اما شبیه‌سازی مکانیزم‌های پیچیده‌تر ممکن است.
- وابسته شدن میدان چگالی و خواص به میدان دما و اصلاح پارامترهای حل بخصوص بازه‌های زمانی در هر مرحله از حل باعث ارضای معادله پیوستگی شده است.

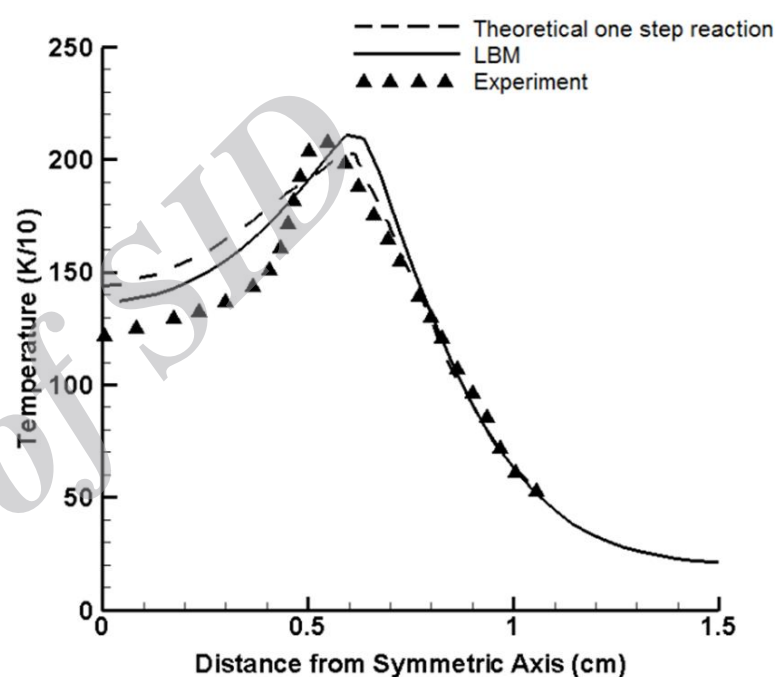


Fig. 10 Temperature profiles established 2.4 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 10 توزیع دما 2.4cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین‌ها نتایج نظری یک معادله‌ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می‌دهند.

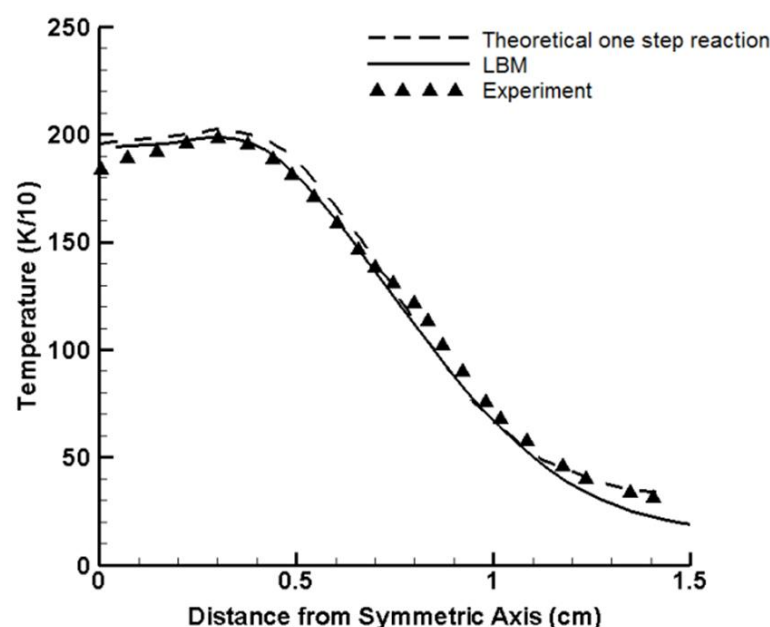


Fig. 11 Temperature profiles established 5 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21]

شکل 11 توزیع دما 5cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین‌ها نتایج نظری یک معادله‌ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می‌دهند.