



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 مومنتم 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 معادله ای را برای احتراق جت های آرام متان پیشنهاد دادند. آنها شعله های نفوذی متان را برای غلظت اجزاء شیمیایی و مشخصه های 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 داده های تجربی یاماوکا و سوچی [6] اصلاح کردند.

جونز و لیندشتات [7] یک مکانیزم کاهش یافته چهار معادله ای را برای احتراق آلکان ها پیشنهاد دادند. مدل آنها شامل دو معادله تجزیه سوخت و دو معادله تعادلی می باشد. آنها معادلات جریان و واکنش های شیمیایی را با استفاده از تابع جریان بی بعد شده به روش عددی اختلاف محدود ضمنی حل کردند. ثوابت مربوط به آهنگ واکنش با استفاده از داده های تجربی محاسبه شده اند. مدل چهار معادله ای آنها هم برای شعله های پیش آمیخته و هم برای شعله های نفوذی کارایی دارد.

تمامی تحقیقات عددی ذکر شده با حل معادلات ناویر استوکس انجام شده اند. اخیرا روش بولتزمن شبکه ای به عنوان یک روش برای حل مسایل جریان سیال مطرح شده است. مزیت های ذاتی آن همچون کدنویسی ساده و توانایی موازی سازی رایانه ای، آن را به عنوان روش موثری برای حل مسائل سیال با حجم زیاد محاسبات عددی همچون جریان دوفاز، جریان در محیط متخلخل، هندسه های پیچیده و جریان های واکنشی مطرح کرده است [8,9]. با وجود تمامی مزیت های گفته شده استفاده از این روش برای حل مسائل احتراق با وجود تلاش های صورت گرفته در سال های اخیر، هنوز در مراحل اولیه خود است.

سوچی و همکاران [10] برای اولین بار روش بولتزمن شبکه ای را برای مدل سازی احتراق توسعه دادند. آنها از مدل دو بعدی 24FCHC^1 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 آبی احتراق و میدان دما را در کنار میدان مومنتم مدل می کنند. مشکل اصلی مدل آنها وابسته نبودن چگالی به میدان دما است بنابراین با استفاده از این مدل نمی توان 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 می گذارد به همین دلیل نتایج آنها اختلاف زیادی با نتایج تحقیقات تجربی داشت.

یاماموتو و همکاران [11,12] احتراق شعله های نفوذی را با استفاده از مدل دو تابعی شبیه سازی کردند. یک تابع برای فشار و دسته ای دیگر از توابع برای دما و نسبت جرمی اجزاء شیمیایی. آنها احتراق را با یک واکنش آبی شیمیایی شبیه سازی 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 شبکه ای مدل کردند. اگرچه این اولین شبیه سازی احتراق توسط مکانیزم های شیمیایی به روش بولتزمن بود، اما در این کار نیز چگالی به میدان دما وابسته نبود و نتایج، توافق خوبی با داده های تجربی نداشتند.

فیلیپووا و همکاران [14-16] تقریب عدد ماخ کوچک از معادلات ناویر استوکس را برای شبیه سازی احتراق توسط روش بولتزمن شبکه ای معرفی

رایانه ای نیز بسیار چالش برانگیز است. تنها پس از ظهور رایانه های پر قدرت بود که پژوهشگران توانستند احتراق را با جزئیات قابل قبول بصورت عددی مدل سازی کنند. روش ها و الگوریتم های عددی متعددی برای غلبه بر پیچیدگی های شبیه سازی این پدیده ابداع شده است.

شبیه سازی عددی احتراق با در نظر گرفتن تنها یک واکنش شیمیایی آبی، هرچند از لحاظ نظری ارزشمند است اما جزئیات زیادی از فرایند را بدست نمی دهد. همچنین در نظر گرفتن تمامی واکنش های شیمیایی رخ داده یا حتی در نظر گرفتن یک مکانیزم شیمیایی کامل، جز برای هندسه های بسیار ساده، بسیار مشکل و پرهزینه است. بنابراین تلاش بسیاری شده است تا با کاهش تعداد واکنش های در نظر گرفته شده، اصلی ترین و مؤثرترین واکنش ها 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 شعله های نفوذی در نظریه احتراق معرفی کردند. آنها متغیرهای پیوسته و مشتق پذیری 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 لوایس 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.

ادلمن و همکاران [2] یک مدل ریاضی را برای توضیح شعله های جت نفوذی آرام پیشنهاد دادند. مدل آنها اثرات لزجت، نفوذ، گرانش، اینرسی و واکنش شیمیایی را شامل می شد. احتراق توسط یک معادله شیمیایی آبی در فرمول بندیی به سبک لایه های مرزی با معادلات بقاء ترکیب و معادلات به روش اختلاف محدود صریح، حل شده بود. تحلیل های ابعادی انجام شده توسط ایشان نشان داد که شعاع عریض ترین قسمت شعله، سرعت جریان و شرایط ترمودینامیکی از مشخصه های جریان هستند. آنها همچنین آزمایش هایی با محفظه در حال سقوط برای شرایط با جاذبه و شرایط بدون جاذبه طراحی و اجرا کردند. نتایج تحلیلی آنها توافق خوبی با داده های آزمایش های مربوط به شرایط با جاذبه و توافق ضعیفی برای شرایط بدون جاذبه نشان می دادند.

ویلیامز و لینان [3] مدل بورک و شومان را برای اعداد لوایس 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 می کرد. میدان دما بصورت جداگانه و توسط معادله بقای انرژی محاسبه می شد.

در روش های مذکور فرض اصلی این است که آهنگ واکنش های شیمیایی نسبت به آهنگ نفوذ بسیار سریع است. احتراق واقعی شامل واکنش های شیمیایی با آهنگ های واکنش بسیار تند تا بسیار آهسته می شود که در نظر گرفتن همزمان آنها مشکلاتی را در حل های عددی ایجاد می کند. بولینگ و همکاران [4] فرمول بندی جدیدی از مدل بورک و شومان برای رفع این مشکلات ارائه دادند و واکنش های با آهنگ محدود را برای شعله های نفوذی متان و هوا مدل کردند. در مدل آنها یک مکانیزم کاهش یافته سه مرحله ای که غیر از واکنش دهنده ها و محصولات، شامل اجزاء H_2 و CO می شد همراه با معادلات بقا مومنتم و پیوستگی به صورت عددی و به روش اختلاف محدود شبیه سازی شده است. آنها مشکل سختی دستگاه معادلات شیمیایی را که به دلیل سرعت های واکنش مختلف در معادلات بوجود می آید، با تغییر متغیر و فرمول بندی خاص رفع نمودند.

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

1- Face-centered hyper-cub

کردند. در جریان های واکنشی با سرعت کم که امواج صوتی¹ اثر قابل توجهی بر احتراق ندارند، مشخصه جریان عدد ماخ کوچک است و صرفا تغییرات دما باعث تغییر چگالی می شود [17]. آنها الگوریتم عددی پیشنهاد دادند که شامل مدل BGK² اصلاح شده همراه با روش اختلاف محدود برای حل میدان دما و اجزاء شیمیایی می شد. به جای تابع توزیع استاندارد برای چگالی آنها از یک تابع توزیع برای فشار استفاده کردند که برای مدل کردن معادلات ناویر استوکس تراکم پذیر همدمای بوجود آمده بود. احتراق تنها با یک واکنش کلی آبی مدل سازی شده و تنها اجزاء اصلی واکنش دهنده ها و محصولات در نظر گرفته شده بود.

چن و همکاران [19,18] احتراق در عدد ماخ پایین را بوسیله مدل بولتزمن شبکه ای کوپل شده شبیه سازی کردند. آنها از الگوریتمی استفاده کردند که میدان های جریان، دما و اجزاء شیمیایی را تنها با استفاده از روش بولتزمن شبکه ای حل می کرد. چگالی سیال مستقیما با میدان دما وابسته شده بود. آنها پارامتر جدیدی را به نام دمای مشخصه معرفی کردند که اندازه بازه های زمانی، زمان آسایش و لزجت دینامیک سیال در هر مرحله از حل عددی بر مبنای آن اصلاح می شود. مدل آنها پایداری عددی بهتری را در کنار سایر مزیت های روش بولتزمن ارائه می دهد.

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

در تمامی کارهای فوق الذکر احتراق با استفاده از معادلات شیمیایی آبی مدل شده است. اگرچه استفاده از تنها یک معادله واکنش آبی اطلاعات عمومی در مورد احتراق به ما می دهد، اما برای بدست آوردن اطلاعات دقیق تر از محصولات و آنچه در حین احتراق اتفاق می افتد باید از مکانیزم های احتراق با معادلات بیشتر و کامل تر استفاده نمود. در همین راستا در این مقاله مدل دو تابعی چن و همکاران که برای واکنش های آبی ابداع شده بود برای حل واکنش های با سرعت محدود و متفاوت مربوط به مکانیزم های احتراقی توسعه داده شده است. تاثیر دما و غلظت اجزاء شیمیایی بر خواص از جمله ضرایب نفوذ اجزاء و سرعت واکنش ها در نظر گرفته شده است. برای حل همزمان معادلات مربوط به واکنش های با سرعت متفاوت، اندازه بازه زمانی و زمان های آسایش در معادله بولتزمن برای هر معادله شیمیایی در هر مرحله حل به صورت مجزا محاسبه می شود. برای اعتبار سنجی مدل، یک شعله نفوذی جت متان با یک مکانیزم کلی چهار معادله ای پیشنهاد شده توسط جونز و لیندشتات [7] شبیه سازی شده و میدان های دما و غلظت اجزاء شیمیایی با نتایج تجربی گزارش شده توسط میشل و همکاران [21] مقایسه شده است.

2- فرمول بندی مسأله

1-2- معادلات حاکم

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

حاکم بر احتراق نفوذی آرام به صورت (1-6) 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 می باشند. 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 می شود:

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

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 می گردند [19]. از اثر اتلاف انرژی لزجت، انتقال گرمای تشعشع، جاذبه، و سایر نیروهای حجمی در مدل صرف نظر شده است. شکل بی بعد معادلات فوق برای انتقال پارامترها به فضای بولتزمن استفاده شده است که به شکل (8-11) می باشند:

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

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

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

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

در معادلات فوق $Re = \rho_0 u_0 l_0 / \mu_0$ ، $Pr = \mu / (\rho \kappa)$ و $Sc_i = \mu / (\rho D_i)$ به ترتیب اعداد بی بعد رینولدز، پرانتل و اعداد اشمیت مربوط به اجزاء شیمیایی می باشند. 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 می باشند. برای یک تحلیل عددی صحیح در روش بولتزمن علاوه بر اتخاذ ضرایب تبدیل مناسب برای ابعاد اصلی باید اعداد بی بعد فوق نیز در فضای واقعی و فضای بولتزمن برابر باشند. متغیرهایی که با ستاره نشان داده شده اند 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 بی بعد شده اند. 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

1-2-2- میدان جریان

برای مدل سازی 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 طرح ریزی شده است. در این مدل یک تابع توزیع، معادلات ناویر استوکس با تقریب ماخ کم را مدل می کند و دسته ای دیگر از توابع توزیع شامل یک تابع برای گرما و $n-1$ تابع - که در آن n تعداد اجزاء شیمیایی است - برای اجزاء

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 آهنگ های واکنش معادله واکنشی j -ام است. تابع توزیع تعادلی برای این میدان ها بصورت (25) خواهد بود.

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

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

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

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

ضریب نفوذ گرما κ ، و ضرایب نفوذ جرمی اجزای شیمیایی D_i از طریق روابط (29,28) با زمان های 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 مومنت مرتبط خواهند شد.

2-3- مکانیزم کاهش یافته

برای اعتبارسنجی مدل فوق احتراق یک شعله نفوذی جت متان که داده های تجربی آن برای اجزاء شیمیایی گزارش شده مدل و شبیه سازی شده است. از مکانیزم کاهش یافته عمومی برای احتراق آلکان ها که توسط جونز و لینداشتات [7] پیشنهاد شده برای شبیه سازی شعله نفوذی جت متان استفاده شده است. این مکانیزم شامل دو معادله مصرف سوخت و دو معادله تعادلی می باشد و تولید و مصرف شش جزء شیمیایی را مدل سازی می کند. نتایج منتشر شده توسط محققان کارایی این مکانیزم را در پیش بینی سرعت شعله، ضخامت شعله و توزیع اجزاء شیمیایی در شعله های نفوذی آرام جت های هم راستا نشان می دهد [21]. مکانیزم کاهش یافته چهار معادله ای بصورت (30-33) است:



که در آن ها آهنگ های واکنش های مستقیم از روابط (34-37) محاسبه می شود:

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

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

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

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

مقادیر ثابت های آهنگ واکنش مستقیم در جدول 1 داده شده است:

جدول 1 ثابت های 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 می کنند. طرح D2Q9 برای گسسته سازی 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 می شود:

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

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 $\lambda + \gamma = \sigma$ و $\lambda + 2\gamma = 0.5$ را باید ارضا کنند. همچنین در این تابع رابطه (14) برقرار است:

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

که در آن ξ_k تابع وزن بوده و مقادیر آن بصورت $\xi_0 = 4/9$ ، $\xi_{1,2,3,4} = 1/9$ و $\xi_{5,6,7,8} = 1/36$ تعریف می شوند و $c = \Delta x / \Delta t$ سرعت در مدل بولتزمن است. فشار هیدرولیکی و مومنت را می توان از معادلات (15-16) بازیابی کرد:

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

$$\rho u = \sum_k c e_k f_k \quad (16)$$

لزجت سینماتیک از طریق رابطه (17) به بازه های 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 نمی شود بلکه با استفاده از قانون گاز ایده ال و در هر مرحله زمانی بصورت رابطه (18) محاسبه می شود [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 زیرنویس های n یا $n+1$ مراحل زمانی را نشان می دهند. زمان آسایش τ در هر مرحله توسط معادله (17) محاسبه می شود. با استفاده از معادله (18) می توان 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- میدان های دما و نسبت جرمی اجزاء

معادله بولتزمن برای مدل سازی 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. Q_s 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 می دهد. با استفاده از آنالیز ابعادی پارامترها، می توان 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 می شود:

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

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

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]. شبیه سازی عددی انجام شده شامل ساده سازی هایی می شود که در تفسیر نتایج باید مد نظر قرار گیرند، مهمترین این ساده سازی ها عبارتند از:

- در مدل احتراقی تنها شش جزء شیمیایی در نظر گرفته شده است. این امر جهت مقایسه با نتایج تجربی گزارش شده می باشد. این مسأله از این نظر حائز اهمیت است که در کار تجربی اجزاء شیمیایی زیادی وجود دارند که بر فرایند احتراق تاثیر می گذارند هرچند غلظت آنها گزارش نشود. اما در کار عددی صرفا اجزاء شیمیایی مدل شده بر فرایند احتراق تاثیر می گذارند.
- اثرات جاذبه در مدل بولتزمن در نظر گرفته نشده اند در حالی که به دلیل اختلاف چگالی زیاد، جاذبه در حرکت گاز موثر خواهد بود. در نظر نگرفتن جاذبه باعث پهن تر شدن توزیع های دما و اجزاء شیمیایی می شود هرچند این اثر به دلیل کم بودن اثر جاذبه نسبت به اینرسی اولیه سیال بسیار جزئی خواهد بود.
- اثرات تشعشع در نظر گرفته نشده اند. هرچند دیواره ها در کار تجربی عایق بوده اند، 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 می دهد. (توجه شود که معادلات بولتزمن بر مبنای نسبت جرمی هستند، اما نتایج برای مقایسه با داده های تجربی بر حسب نسبت های مولی بیان شده اند).

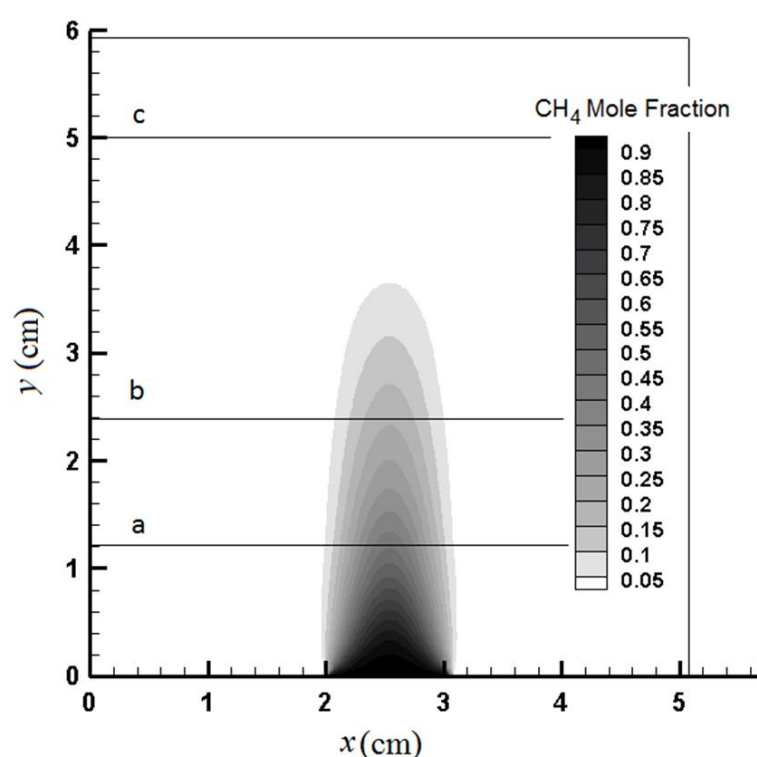


Fig. 2 Methane mole fraction contours. The lines (a, b and c) show the cross sections at which the concentration profiles are calculated.

شکل 2 کانتورهای نسبت مولی متان، خطوط (a,b,c) سطح مقطع هایی را نشان می دهد که توزیع نسبت مولی اجزاء با داده های تجربی و تئوریک گزارش شده مقایسه شده است.

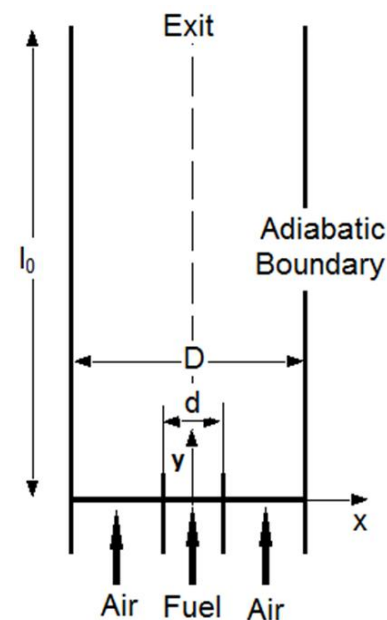


Fig. 1 Computational domain and boundaries

شکل 1 دامنه محاسباتی و شرایط مرزی

آهنگ های واکنش های معکوس (معادلات 32 و 33) از مقادیر آهنگ واکنش مستقیم و ثابت های تعادلی استخراج شده از داده های ترمودینامیکی و طبق رابطه (38) محاسبه می شوند [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 می باشد.

4-2- هندسه و شرایط مرزی

احتراق جریان های هم راستای متان به عنوان سوخت و هوا به عنوان اکسیدکننده شبیه سازی شده و شکل شعله و توزیع دما و اجزای شیمیایی در مقطعی از شعله با نتایج تجربی مقایسه شده است. هندسه شبیه سازی شده در شکل 1 داده شده است. متان از ورودی مرکزی و هوا از اطراف وارد محفظه احتراق می شوند. مکانی که در آن متان و هوا با نسبت های 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 ورودی ها
- 2- دیواره های آدیاباتیک صلب با نفوذ شیمیایی صفر
- 3- شرط عدم لغزش در دیواره ها
- 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 ظرفیت های گرمایی در این دما از داده های ترمودینامیکی استخراج شده اند.

5-2- الگوریتم حل

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

سپس فرآیند حل بدون واکنش شیمیایی انجام می شود تا اجزاء شیمیایی سوخت و هوا به حالت پایدار برسند. سپس معادلات واکنش های احتراق نیز به روند حل معادلات اضافه شروع می شوند. در هر مرحله بیشترین دمای موجود در دامنه حل به عنوان دمای مشخصه در نظر گرفته شده و سرعت ذره در محیط بولتزمن شبکه ای از رابطه (39) اصلاح می گردد:

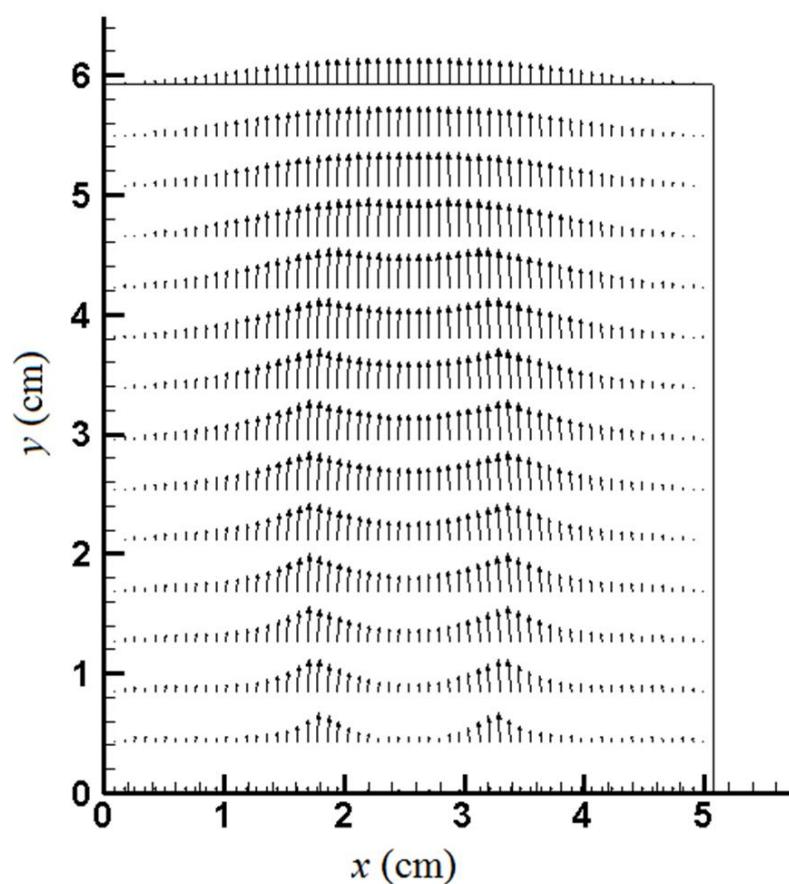


Fig. 5 Velocity Vectors.

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 می-کند. در مرز خروجی توزیع بردارهای سرعت نشان می دهد که افزایش دما در قسمت بالای شعله بصورت یکنواخت در آمده است.

شکل های 6 تا 11 مقایسه بیان نتایج حل عددی به روش بولتزمن شبکه ای (خطوط پر) داده های تجربی از مرجع [21] (علامه مثلث شکل) و نتایج نظری برای واکنش تک معادله ای (خط چین) را نشان می دهند.

شکل 6 نسبت مولی اجزاء را در سطح مقطع افقی 1.2cm بالاتر از ورودی (خط a در شکل 2) نشان می دهد. نتایج حل عددی به روش بولتزمن در حالت کلی با داده های تجربی و نظری همخوانی دارند. با مقایسه نتایج برای CH_4 ، H_2O و CO_2 مشاهده می شود که نسبت مولی بدست آمده از روش بولتزمن شبکه ای کمی کمتر از مقادیر نظری تک مرحله ای است. از آنجا که در محاسبات نظری تنها یک واکنش شیمیایی و تنها اجزاء شیمیایی مربوط به واکنش دهنده ها و محصولات احتراق در نظر گرفته شده است و نسبت های مولی CO و H_2 در نظر گرفته نشده اند، مقادیر مربوط به CH_4 ، H_2O و CO_2 در روش نظری تک مرحله ای 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 بولتزمن شبکه ای محاسبه نشده است، مقادیر متان وجود در داخل شعله در روش تجربی اندکی کمتر از روش بولتزمن شبکه ای است. نسبت های مولی بدست آمده از روش بولتزمن برای CO و CO_2 کمی بیشتر از نتایج تجربی هستند. این مسأله به دلیل در نظر نگرفتن سایر اجزاء شیمیایی در مدل بولتزمن اما حضور آنها در احتراق واقعی است که باعث کاهش نسبت های سایر اجزاء در حالت واقعی می شود. در این شکل مقادیر بدست آمده برای H_2 کمتر از مقادیر گزارش شده در کار تجربی می باشد. 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 شده است. ایشان خطای روابط آهنگ واکنش های (32) و (33) در ناحیه داخلی شعله با نسبت جرمی سوخت زیاد (ابتدای شعله) را دلیل این امر دانسته اند.

صفحه شعله را می توان مکان هندسی نقاطی با نسبت مولی یا جرمی متان صفر و یا نقاط با بیشترین دما -جایی که واکنش ها با بیشترین آهنگ رخ می دهند- در نظر گرفت. در این شکل خطوط (a,b,c) سطح مقطع هایی را نشان می دهد که داده های تجربی برای دما و نسبت مولی اجزاء توسط میشل و همکاران گزارش شده است.

شکل 3 کانتورهای دما را نشان می دهد. سرعت واکنش های احتراقی با افزایش دما افزایش می یابد بنابراین مکان شعله را می توان نقاط با بیشترین دما در نظر گرفت. مقایسه شکل های 2 و 3 نشان می دهد بیشینه دما در قسمت خارجی صفحه شعله جاییکه غلظت سوخت به صفر رسیده است، می باشد.

شکل 4 توزیع چگالی را در دامنه حل نشان می دهد. چگالی با دما نسبت عکس و با وزن مولکولی میانگین (معادله 18) نسبت مستقیم دارد. کاهش چگالی در قسمت های 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 صرفا 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 شده اند. در مدل های بولتزمن که میدان چگالی به میدان دما وابسته نیست عدم تغییر چگالی باعث تخمین نادرست میدان سرعت می شد.

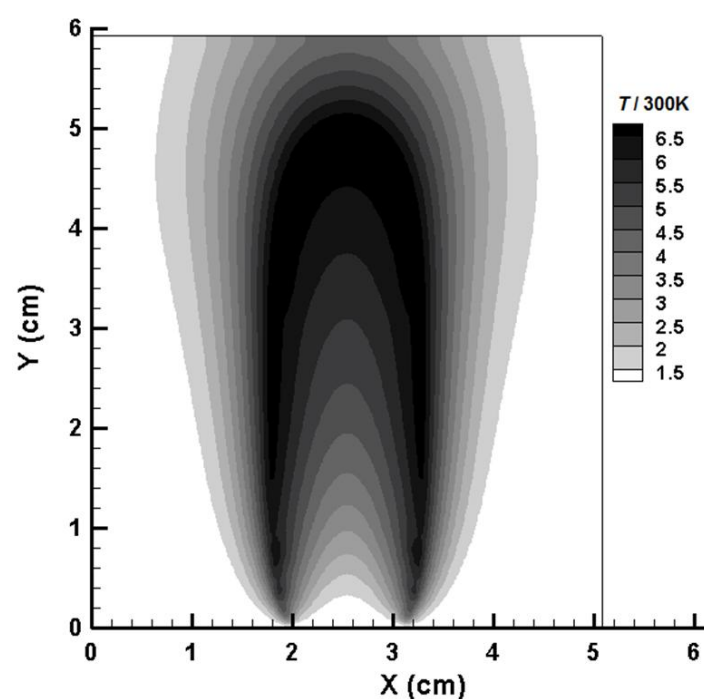


Fig. 3 Temperature contours.

شکل 3 کانتورهای دما

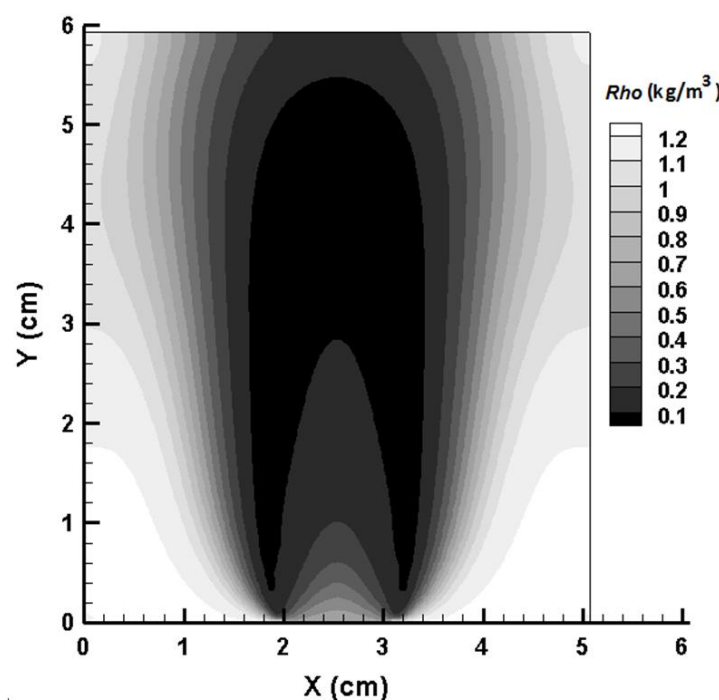


Fig. 4 Density contours.

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.

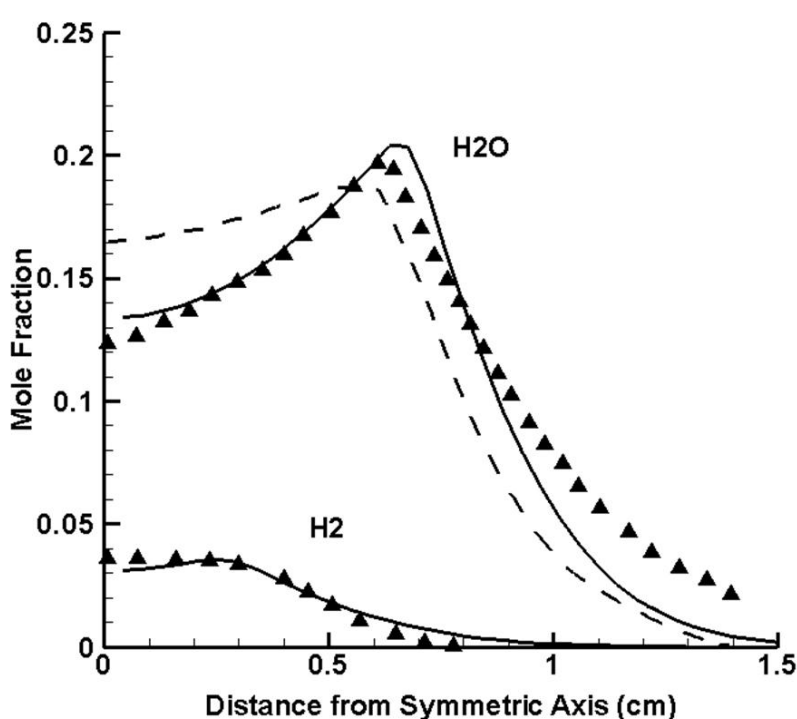
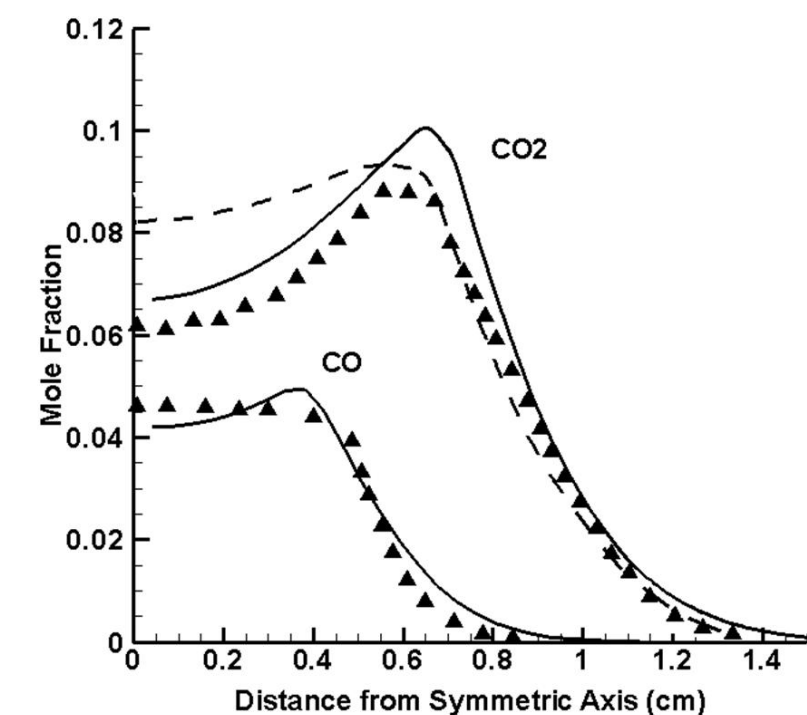
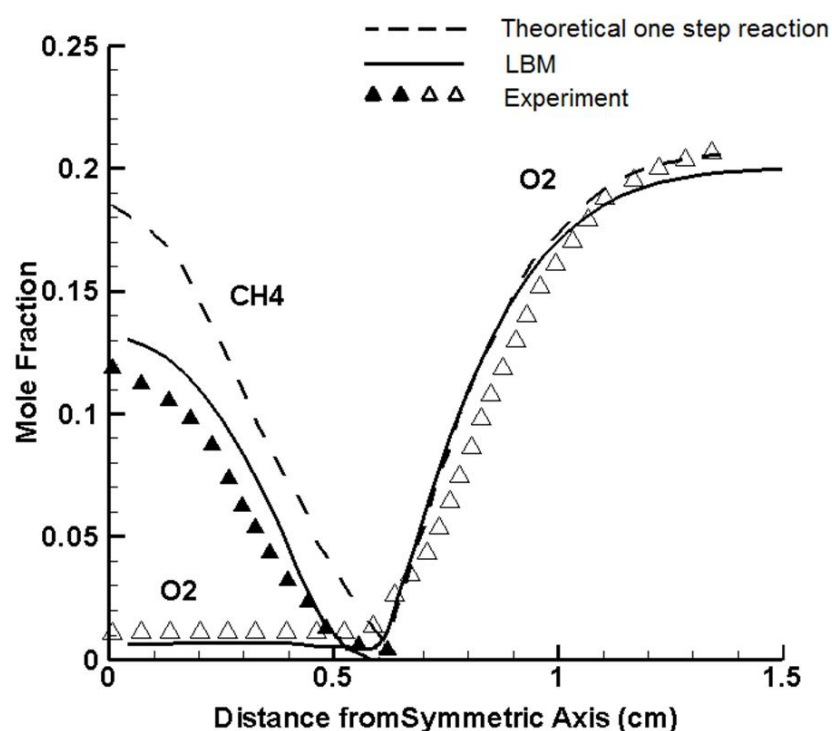


Fig. 7 Mole fraction profiles established 2.4 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

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.

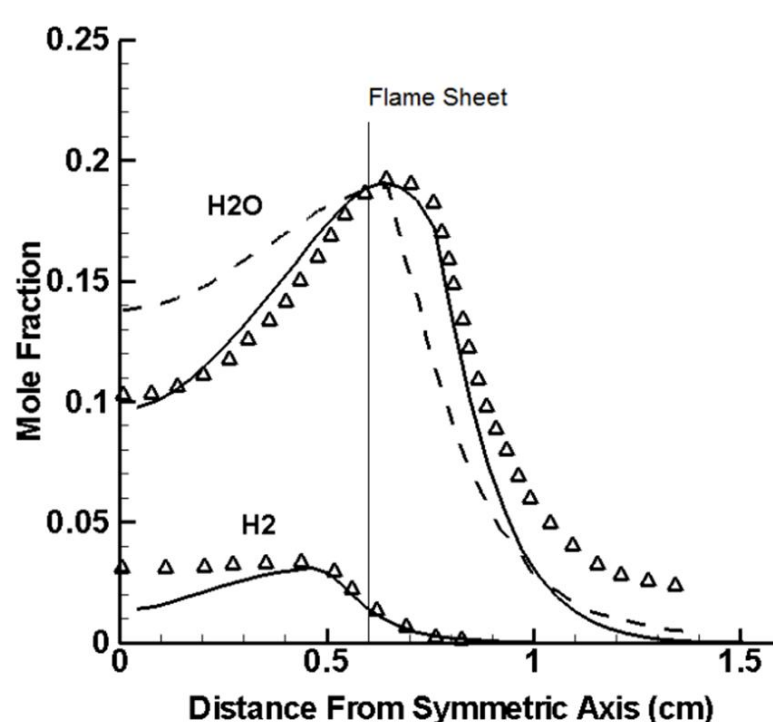
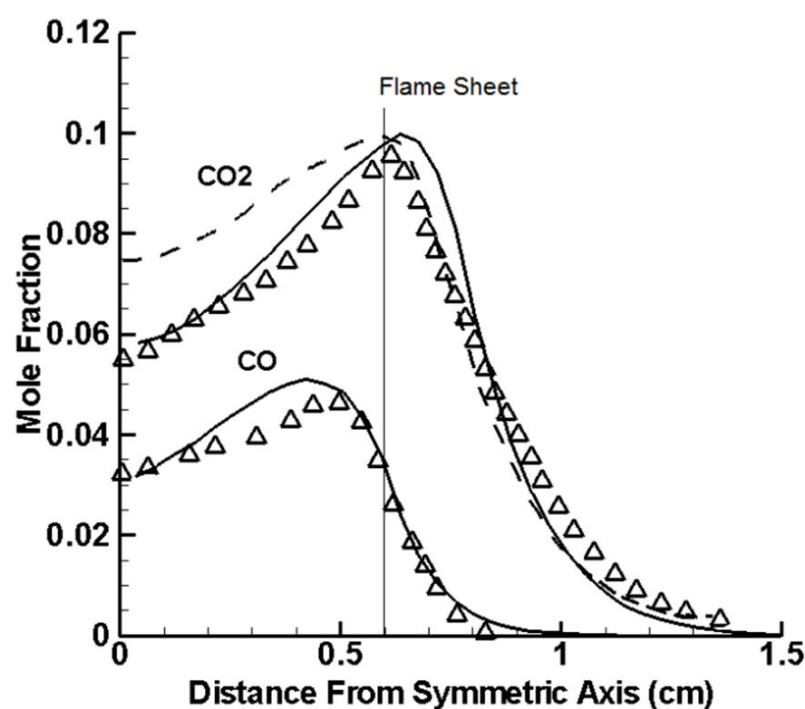
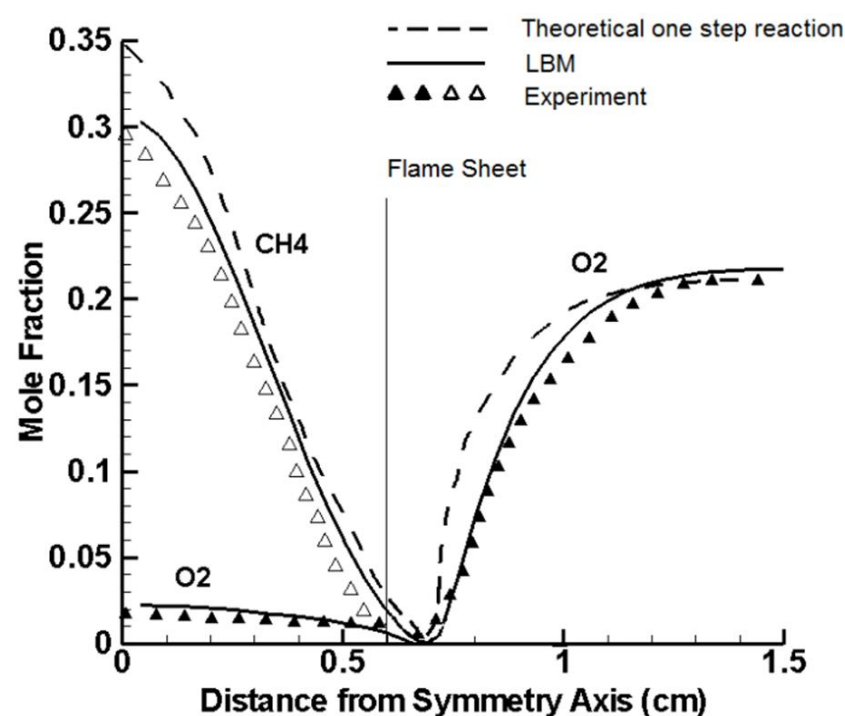


Fig. 6 Mole fraction profiles established 1.2 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

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.

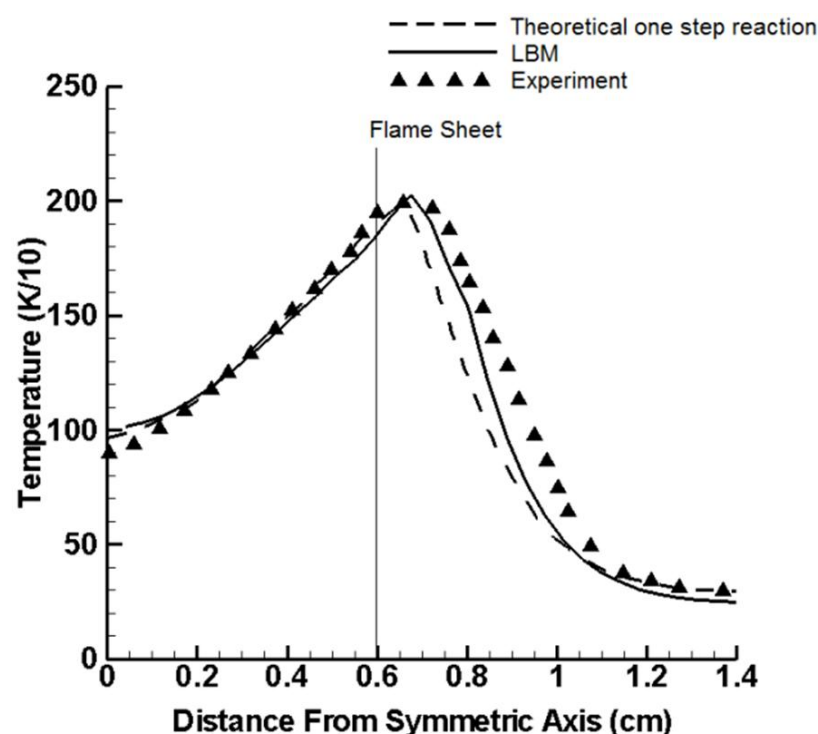


Fig. 9 Temperature profiles established 1.2 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 9 توزیع دما 1.2cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین ها نتایج نظری یک معادله ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می دهند.

شکل 8 نسبت مولی اجزاء را در سطح مقطع افقی 5cm بالاتر از ورودی (خط c در شکل 2) نشان می دهد. 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 بولتزمن توافق خوبی با داده های تجربی مربوط به H_2 و CO ، CO_2 ، O_2 دارند.

در شکل 8 نتایج حل عددی به روش بولتزمن برای H_2O در ناحیه بیرونی شعله جایی که نسبت جرمی H_2 به صفر میل می کند کمتر از نتایج تجربی است. این موضوع در شکل های 6 و 7 تکرار شده است. در تحلیل عددی نسبت جرمی بخار آب در هوای ورودی مقدار بسیار کمی بخار آب به همراه دارد. این موضوع می تواند کمی نسبت مولی بخار آب در کار عددی نسبت به داده های 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 می دهد. در حالت کلی نتایج حل عددی به روش بولتزمن منطبق با داده های 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 بولتزمن شبکه ای است.

شکل 10 توزیع دما را در سطح مقطع افقی 2.4cm بالاتر از ورودی (خط b در شکل 2) نشان می دهد. در ناحیه داخلی شعله روش بولتزمن مقادیر دما را بیشتر از داده های تجربی نشان می دهد. در احتراق واقعی مراحل و اجزاء شیمیایی احتراق بیشتر است و اجزاء شیمیایی سوخته بیشتری هنوز در ناحیه داخلی وجود دارند درحالی که در مکانیزم حل شده تنها چهار مرحله شیمیایی و شش جزء شیمیایی وجود دارد و بیشتر اجزاء شیمیایی سوخته اند 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 می دهد. در حالت کلی نتایج حل عددی به روش بولتزمن

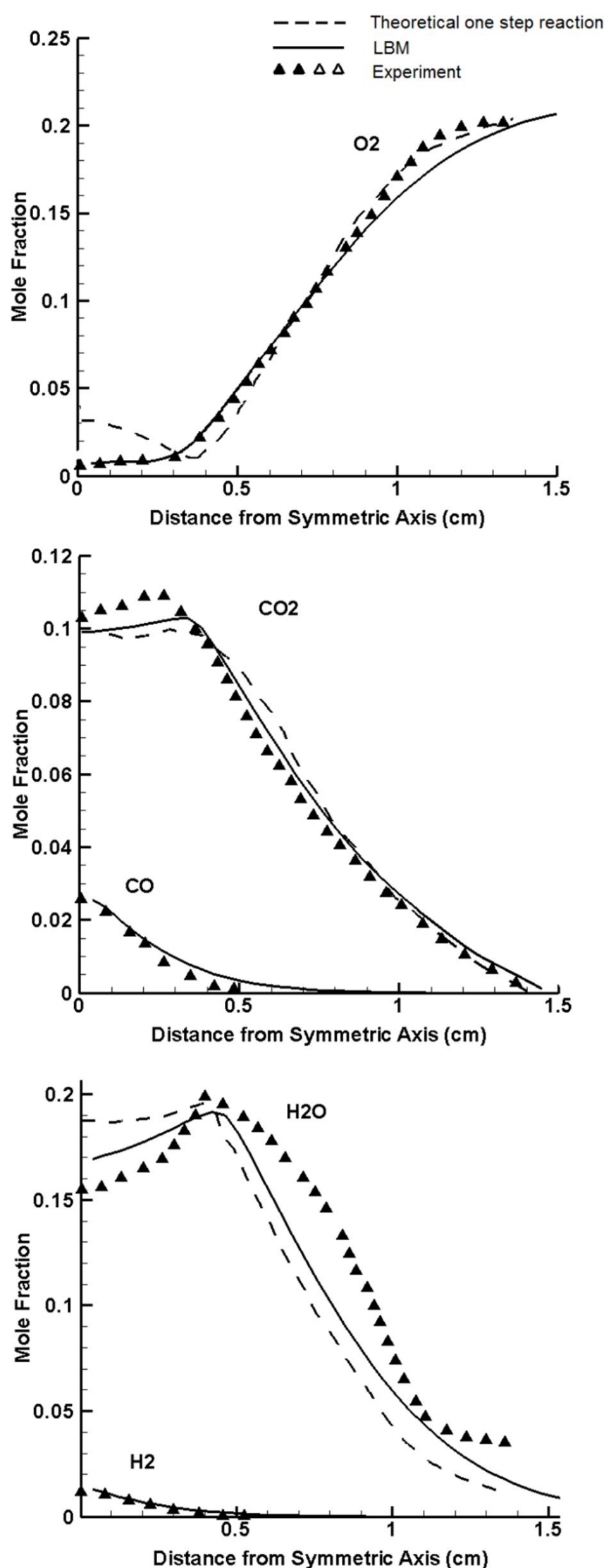


Fig. 8 Mole fraction profiles established 5.0 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 8 توزیع نسبت های مولی اجزاء 5.0cm 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.

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

در اینجا نیز منطبق با داده های تجربی و نتایج نظری است.

4- بحث و نتیجه گیری

هدف اصلی این تحقیق توسعه روش بولتزمن شبکه ای برای شبیه سازی مکانیزم های 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 داده های تجربی نشان می دهد که روش چن و همکاران را می توان برای حل واکنش های احتراقی با سرعت های محدود و متفاوت توسعه داد. هرچند در اینجا یک مکانیزم چهار معادله ای شبیه سازی شده است اما شبیه سازی مکانیزم های پیچیده تر ممکن است.
- وابسته شدن میدان چگالی و خواص به میدان دما و اصلاح پارامترهای حل بخصوص بازه های زمانی در هر مرحله از حل باعث ارضای معادله پیوستگی شده است.

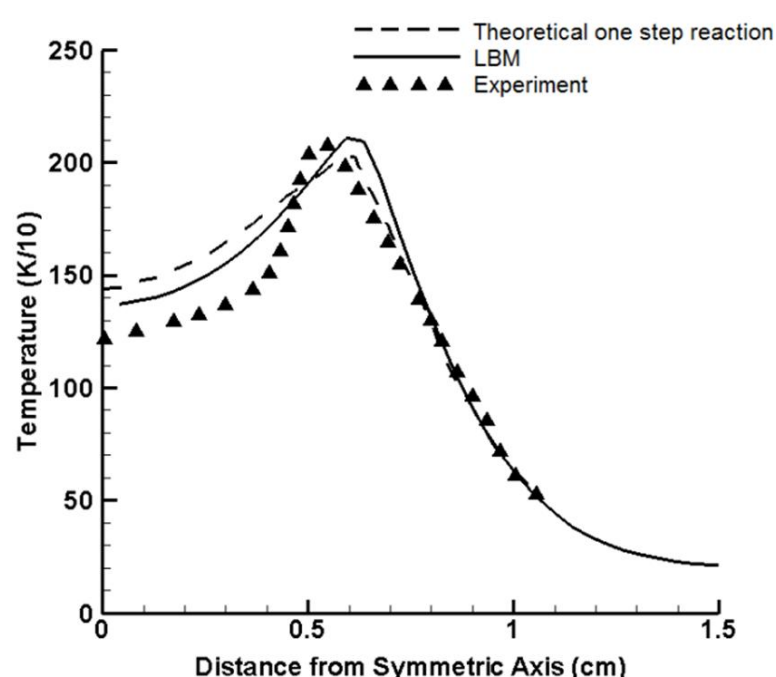


Fig. 10 Temperature profiles established 2.4 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 10 توزیع دما 2.4cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین ها نتایج نظری یک معادله ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می دهند.

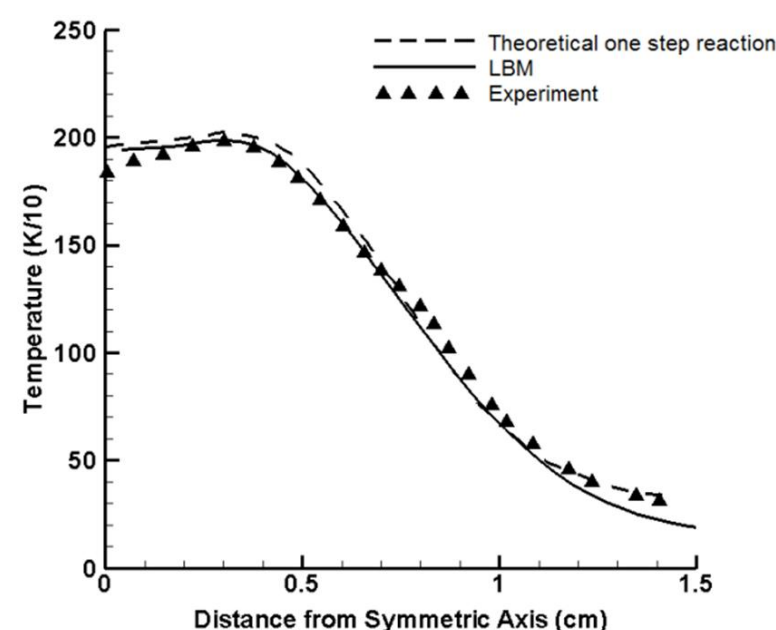


Fig. 11 Temperature profiles established 5 cm above the inlet. Solid lines denote LBM computed profiles. Dashed lines are theoretical profiles and triangle symbols are experimental data from reference [21].

شکل 11 توزیع دما 5cm بالاتر از ورودی. خطوط پر نتایج حل عددی به روش بولتزمن، خط چین ها نتایج نظری یک معادله ای و علائم مثلثی نتایج تجربی از مرجع [21] را نمایش می دهند.

- اگرچه نتایج توافق خوبی با داده های تجربی دارند، اما اختلافاتی نیز دیده می شود که به دلیل ساده سازی های صورت گرفته در حل عددی می باشند. برای بدست آوردن نتایج دقیق تر باید شرایط فیزیکی واقعی تر از جمله جاذبه و تشعشع را در نظر گرفت. با توجه به قابلیت انعطاف این روش می توان این اثرات را بصورت جمله های 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.