

## Evaluation of the Capability of Manifold-Based Models in Representing Laminar Premixed and Non-premixed Flames with Emphasis on Scalar DissipationRate

Amir Goudarzi<sup>1</sup>, Asghar Afshari<sup>2\*</sup> 

<sup>1</sup> PhD student, University of Tehran, Tehran, Iran. aamirgoudarzi@gmail.com

<sup>2</sup> Associate Professor, University of Tehran, Tehran, Iran (\*Correspondence: afsharia@ut.ac.ir)

### ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research Paper

Received: 02 May 2025

Received in Revised form: 18 June 2025

Accepted: 07 July 2025

Available Online: 23 July 2025

### Keywords:

Flamelet,

Scalar Dissipation Rate,

Premixed Flame,

Non-premixed Flame,

Deep Neural Network

### GRAPHICAL

The use of manifold-based models for mapping governing equations from physical space into the species composition space and constructing flamelet tables has led to a significant reduction in computational cost for simulating reactive flows. Within the framework of flamelet modeling, the manifold space is characterized by the mixture fraction in non-premixed flames, and by the reaction progress variable in premixed flames. A key parameter in the transformation from physical to manifold space is the scalar dissipation rate, which is inherently dependent on the spatial gradients of the manifold coordinates in the physical domain. Therefore, prior to solving the reactive flow and generating flamelet tables, it is essential to develop an appropriate model for the scalar dissipation rate based on the manifold components. Such a model must effectively represent the characteristics of the physical space within the manifold framework. In this study, the results obtained from solving the governing equations in manifold space are analyzed and compared with reference solutions in the physical coordinate system. This comparison aims to assess the predictive capabilities of various scalar dissipation rate models. To this end, a novel data-driven model based on deep neural networks is proposed for predicting the scalar dissipation rate of the reaction progress variable, using a dataset of freely propagating premixed flames. The results demonstrate that the proposed data-driven model yields superior accuracy compared to traditional modeling approaches, offering improved predictions of flame behavior.

**Cite this article:** Goudarzi A , Afshari A . Evaluation of the Capability of Manifold-Based Models in Representing Laminar Premixed and Non-premixed Flames with Emphasis on Scalar Dissipation Rate. Journal of Fluid Mechanics and Aerodynamics 2025; 14 (1): 79-90. DOI: <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.23223278.1404.14.1.6.9>

© The Author(s).

**Publisher:** Imam Hossein University.



## بررسی قابلیت مدل‌های منیفلد پایه در بازنمایی شعله‌های پیش‌آمیخته و غیر پیش‌آمیخته آرام با

### تأکید بر اثر پارامتر نرخ اتلاف کمیت

امیر گودرزی<sup>۱</sup>، اصغر افشاری<sup>۲\*</sup>

<sup>۱</sup> دانشجوی دکتری دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تهران (agoudarzi@ut.ac.ir)

<sup>۲</sup> دانشیار دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه تهران (نویسنده مسئول: afsharia@ut.ac.ir)

#### چکیده

به کارگیری مدل‌های منیفلد پایه باهدف نگاشت معادلات از فضای فیزیکی به فضای ترکیب گونه‌ها و تولید جداول فلیملت، موجب کاهش قابل‌توجهی در هزینه‌های محاسباتی شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی شده است. در این چارچوب، مدل‌سازی به روش فلیملت متکی بر توصیف فضای منیفلد است، به گونه‌ای که در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته از کسر مخلوط و در شعله‌های پیش‌آمیخته از پارامتر پیشرفت واکنش به عنوان مختصات فضای منیفلد استفاده می‌شود. یکی از پارامترهای کلیدی در نگاشت فضای فیزیکی به فضای منیفلد، نرخ اتلاف کمیت است که به طور مستقیم به گرادیان مؤلفه منیفلد در فضای فیزیکی وابسته است. از این رو، به منظور تشکیل جداول فلیملت، توسعه مدلی برای نرخ اتلاف کمیت بر اساس مختصات فضای منیفلد ضروری است؛ مدلی که بتواند ویژگی‌های فضای فیزیکی را در چارچوب فضای منیفلد به درستی بازنمایی کند. در این پژوهش، ضمن بررسی نتایج حاصل از حل معادلات در فضای منیفلد، این نتایج با داده‌های مرجع حاصل از حل در فضای فیزیکی مقایسه شده‌اند. هدف از این تحلیل، ارزیابی دقت مدل‌های توسعه‌یافته برای پیش‌بینی نرخ اتلاف کمیت بوده است. در این راستا، مدلی نوین مبتنی بر شبکه‌های عصبی عمیق برای پیش‌بینی نرخ اتلاف پارامتر پیشرفت واکنش در شعله‌های پیش‌آمیخته با پیشروی آزاد توسعه داده شده است. نتایج حاصل از این مدل داده محور بیانگر عملکرد بهتر نسبت به مدل‌های پیشین و دقت بالاتر در پیش‌بینی رفتار شعله است.

#### تاریخچه مقاله:

نوع مقاله: علمی پژوهشی

دریافت: ۱۲ اردیبهشت ۱۴۰۴

بازنگری: ۲۸ خرداد ۱۴۰۴

پذیرش: ۱۶ تیر ۱۴۰۴

ارائه آنلاین: ۰۱ مرداد ۱۴۰۴

#### کلیدواژه‌ها:

فلیملت

نرخ اتلاف کمیت

شعله پیش‌آمیخته

شعله غیر پیش‌آمیخته

شبکه عصبی عمیق

**استناد:** گودرزی، امیر<sup>۱</sup>، افشاری، اصغر<sup>۲</sup>. بررسی قابلیت مدل‌های منیفلد پایه در بازنمایی شعله‌های پیش‌آمیخته و غیر پیش‌آمیخته آرام با تأکید بر اثر پارامتر نرخ اتلاف کمیت. مکانیک سیالات و آیرودینامیک (۱۴۰۴)؛ ۱۴ (۱): ۷۹-۹۰.

DOR: <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.23223278.1404.14.1.6.9>



© نویسندگان.

ناشر: دانشگاه جام امام حسین (ع).

## ۱- مقدمه

برهم‌کنش احتراق و آشفستگی پدیده‌ای پیچیده است که در آن، واکنش‌های شیمیایی دقیق و دینامیک سیال آشفته به‌طور هم‌زمان دخیل هستند؛ همین پیچیدگی چالش‌های قابل‌توجهی برای شبیه‌سازی عددی ایجاد می‌کند. توسعه یک مدل جامع و معتبر برای تمامی رژیم‌های شعله‌های آشفته تاکنون بی‌سابقه بوده است، چراکه این شعله‌ها از تنوع و پیچیدگی بالایی برخوردارند. مدل‌سازی احتراق آشفته نیازمند مصالحه‌ای میان جامعیت مدل و هزینه محاسباتی آن است. مدل‌هایی که باهدف افزایش جامعیت، از فرض‌های پیشینی درباره فیزیک احتراق اجتناب می‌کنند، ناگزیر به استفاده از سینتیک‌های شیمیایی کاهش‌یافته یا بهینه‌شده هستند تا هزینه محاسباتی را کاهش دهند. ازجمله این مدل‌ها می‌توان به مدل‌های شیمیایی با نرخ محدود مانند مدل مفهوم اضمحلال گردابه‌ای [۱] و مدل راکتور هم‌زده جزئی [۲] و همچنین مدل‌های تابع توزیع احتمال انتقالی [۳] و گردابه خطی [۴] اشاره کرد. در مقابل مدل‌های منیفلد<sup>۱</sup> با مرتبه کاهش‌یافته مانند مدل‌های بر پایه فلیملت<sup>۲</sup>، که بر اساس پیش‌فرض‌هایی در مورد نوع احتراق مورد مطالعه توسعه می‌یابند، به دلیل بازده محاسباتی بالا و سازگاری با سازوکارهای شیمیایی دقیق مورد توجه قرار دارند.

مدل‌سازی فلیملت یکی از روش‌های پرکاربرد در شبیه‌سازی احتراق آشفته است که با بهره‌گیری از رویکردی محاسباتی مقرون‌به‌صرفه و مبتنی بر شهود فیزیکی امکان بررسی تعاملات پیچیده میان مکانیسم شیمیایی جزئی و آشفستگی جریان را فراهم می‌سازد. در این روش، شعله‌های آشفته به‌صورت مجموعه‌ای از شعله‌های یک‌بعدی لایه‌ای محلی، موسوم به فلیملت، مدل‌سازی می‌شوند. این چارچوب با تکیه بر تفکیک مقیاس‌ها میان واکنش‌های شیمیایی سریع و موضعی و اختلاط آشفته کند و بزرگ‌مقیاس، شیمی پیچیده را بر روی منیفلدهای با ابعاد پایین نگاشت می‌کند و بدین ترتیب، فرآیندهای سینتیک شیمیایی از شبیه‌سازی جریان آشفته جدا می‌گردند [۵]. معمولاً کاربرد مدل‌های فلیملت مبتنی بر فن‌های مناسبی برای پیش‌جدول‌بندی متغیرهای ترموشیمیایی برحسب یک یا چند مختصه محدود می‌باشند.

در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته، سوخت و اکسیدکننده در ابتدا از یکدیگر جدا هستند و احتراق در ناحیه‌ی مرزی اختلاط، یعنی جایی که سوخت و اکسیدکننده در مقیاس مولکولی با یکدیگر ترکیب می‌شوند و مخلوط استوکیومتری تشکیل می‌شود، رخ

می‌دهد. ساختار شعله در این حالت توسط کسر مخلوط<sup>۳</sup> کنترل می‌شود؛ این کمیت عددی پایستار، فرآیند اختلاط را توصیف کرده و نسبت سوخت به هوای محلی را نمایش می‌دهد. معادلات فلیملت در دستگاه مختصاتی فرمول‌بندی می‌شوند که به سطوح کسر مخلوط ثابت شعله متصل است و واکنش‌های شیمیایی به‌صورت تابعی این پارامتر بیان می‌گردند [۶]. مدل فلیملت لایه‌ای پایدار فرض می‌کند که آشفستگی، شعله را کشیده می‌کند بدون آنکه ساختار شبه‌پایدار آن را تغییر دهد [۷]. پیشرفت‌های صورت گرفته در این حوزه، اثرات ناپایداری و استفاده از کتابخانه‌های فلیملت چندبعدی را به‌منظور شبیه‌سازی پدیده‌های گذرا مانند اشتعال و خاموشی وارد مدل‌سازی کرده‌اند [۸]. در احتراق غیرپیش‌آمیخته، مدل‌های فلیملت به‌ویژه در شبیه‌سازی سامانه‌هایی مانند توربین‌های گاز، موتورهای دیزل و کوره‌های صنعتی عملکرد بسیار مناسبی دارند؛ زیرا امکان لحاظ کردن شیمی جزئیات در آن‌ها بدون تحمیل هزینه‌های محاسباتی سنگین فراهم است. مطالعاتی نظیر مرجع [۹] نشان می‌دهند که این مدل‌ها توان بالایی در پیش‌بینی دقیق تشکیل آلاینده‌ها دارند. در احتراق پیش‌آمیخته، سوخت و اکسیدکننده پیش از اشتعال با یکدیگر ترکیب می‌شوند و جبهه‌ی واکنش درون مخلوطی همگن از سوخت و اکسیدکننده پیشروی می‌کند. در این حالت، یک پارامتر پیشرفت واکنش<sup>۴</sup>، که پارامتری واکنشی و غیر پایستار و معمولاً بدون بعد و نرمال‌سازی به‌صورت تابعی از دما یا کسر جرمی برخی گونه‌ها است، برای ردیابی میزان پیشرفت واکنش به کار می‌رود. مدل‌های فلیملت برای سامانه‌های پیش‌آمیخته، نظیر روش معادله جی [۱۰] یا روش منیفلد تولیدشده توسط فلیملت [۱۱]، جبهه‌ی شعله را با استفاده از یک متغیر پیشرفت واکنش یا یک تابع سطح تراز<sup>۵</sup> ردیابی می‌کنند. این مدل‌ها فرض می‌کنند که ساختار شعله مشابه یک شعله‌ی لایه‌ای پیش‌آمیخته است که اثرات آشفستگی از طریق کشش شعله و انحنای آن لحاظ می‌شود. در احتراق پیش‌آمیخته، رویکردهای فلیملت برای مدل‌سازی موتورهای جرقه‌ای و سامانه‌های احتراق رقیق اهمیت ویژه‌ای دارند؛ چراکه قابلیت شبیه‌سازی گسترش شعله و پایداری آن تحت شرایط آشفته را دارا هستند [۱۲].

رویکردهای منیفلد پایه، مبتنی بر نگاشت کمیت‌های ترموشیمیایی از فضای فیزیکی بر روی یک فضای منیفلد با تعداد بعد محدود می‌باشند. این نگاشت را می‌توان به‌صورت یک دسته معادله دیفرانسیل موسوم به معادلات منیفلد برای کمیت‌های ترموشیمیایی نسبت به متغیرهای منیفلد بیان کرد. بنابراین،

<sup>۳</sup> Mixture Fraction<sup>۴</sup> Progress Variable Parameter<sup>۵</sup> Level-set Function<sup>۱</sup> Manifold<sup>۲</sup> Flamelet

نفوذی گونه است که بر اساس رابطه فیک<sup>۴</sup> [۱۳] و با فرض عدد لوئیس<sup>۵</sup> واحد برای تمام گونه‌ها به صورت  $J_{k,j} = -\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$  تعریف می‌شود که در آن  $D$  ضریب پخش مولکولی است. همچنین آنتالپی مخلوط طبق مخلوط ایدئال از رابطه  $\square = \sum_{k=1}^{N_s} Y_k \square_k$  به دست می‌آید که در آن  $\square_k = \square_k^\circ + \int_{T^\circ}^T c_{p,k} dT$  و  $T$  دما است. نتایج مرجع برای شعله غیر پیش آمیخته از ساختار شعله متقابل پایا در مختصات دوبعدی صفحه‌ای به دست می‌آید. در این ساختار سوخت و اکسیدکننده از دو سمت وارد محدوده محاسباتی می‌شوند و شعله کشیده شده<sup>۶</sup> در نزدیکی صفحه سکون پایدار می‌گردد. الگوریتم حل تشابهی این مسئله که منجر به تشکیل دستگاه معادلات یک‌بعدی می‌گردد در مرجع [۱۴] تشریح شده است. از سوی دیگر نتایج مرجع برای شعله پیش آمیخته از دو ساختار شعله پیش‌رونده آزاد و شعله متقابل صفحه‌ای به دست آمده است. در مورد اول پیشروی شعله کشیده نشده در محیط یک‌بعدی به سمت مخلوط پیش آمیخته نسوخته موردبررسی قرار می‌گیرد. روش حل در این ساختار بر محاسبه مقدار ویژه به عنوان سرعت آرام شعله استوار است و در مرجع [۱۵] تشریح شده است. در مورد دوم مسئله مطالعه شده تقابل دو مخلوط پیش آمیخته با تقارن حول صفحه سکون است که سبب تشکیل شعله کشیده شده می‌گردد. حل این حالت نیز بر استفاده از الگوریتم تشابهی استوار است. در تحقیق حاضر از کد FlameMaster [۱۶] برای حل مسائل مرجع استفاده شده است.

برای به دست آوردن معادلات منیفلد لازم است یک تبدیل مختصات از فضای فیزیکی به فضای منیفلد صورت بگیرد  $(\psi, \tau) \rightarrow (x_j, t)$ . قوانین تبدیل مختصات به صورت زیر است.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \psi} \\ \frac{\partial}{\partial x_j} &= \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \psi} \end{aligned} \quad (۵)$$

که در این رابطه  $\psi$  مشخص‌کننده متغیر منیفلد و  $\tau$  زمان منیفلد برای حالت غیر پایاست. برای شعله غیر پیش آمیخته متغیر منیفلد، کسر مخلوط  $Z$  است که برای جریان اکسیدکننده صفر و برای جریان سوخت به میزان یک تعریف می‌شود. این پارامتریک کمیت پایستار است و معادله انتقال آن به شرح زیر است.

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (۶)$$

نگاشت فوق منجر به تشکیل معادلات فلیملت در احتراق غیر پیش آمیخته به صورت زیر می‌گردد.

مدل‌های منیفلد پایه مانند فلیملت نیازمند نوعی اطلاعات مربوط به گرادیان متغیر منیفلد در فضای فیزیکی هستند؛ متغیری که در احتراق غیرپیش‌آمیخته، کسر مخلوط و در احتراق پیش‌آمیخته، متغیر پیشرفت واکنش است. این اطلاعات گرادیانی در نرخ‌های اتلاف کمیت<sup>۱</sup> گنجانده شده‌اند. تفاوت حل معادلات در فضای فیزیکی و فضای منیفلد در این است که در مدل اول، نرخ اتلاف کمیت به عنوان یک کمیت محاسباتی حاصل می‌شود، در حالی که در مدل دوم، به عنوان یک پارامتر ورودی در نظر گرفته می‌شود که معمولاً نیازمند مدل‌سازی بر اساس مختصات منیفلد است.

در این پژوهش، با در نظر گرفتن مدل‌های جریان متقابل<sup>۲</sup> و پیشروی آزاد شعله<sup>۳</sup> در فضای فیزیکی یک‌بعدی به عنوان مرجع، قابلیت‌های مدل‌سازی مبتنی بر منیفلد در بازنمایی ویژگی‌های اشتعالی شعله‌های نفوذی و پیش‌آمیخته آرام برای سوخت‌های گوناگون مورد ارزیابی قرار گرفته است. تمرکز اصلی این مطالعه بر نحوه مدل‌سازی نرخ اتلاف کمیت، اعتبارسنجی مدل‌های موجود و توسعه مدل‌های نوین مبتنی بر شبکه عصبی عمیق برای این پارامتر است. هدف نهایی، بررسی دقت و کارایی مدل‌های فلیملت در پیش‌بینی فرآیند اشتعال تحت شرایط مختلف ترمودینامیکی و سینتیکی است.

## ۲- معادلات حاکم

در جریان‌های واکنشی آدیاباتیک با عدد ماخ پایین سیستم معادلات حاکم برای جرم، مومنتوم، گونه‌های شیمیایی و آنتالپی به صورت زیر توصیف می‌شود.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (۱)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (۲)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{k,j}}{\partial x_j} + \dot{m}_k \quad (۳)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (۴)$$

که در این معادلات  $\rho$  چگالی،  $u_i$  مؤلفه‌های سرعت،  $p$  فشار ترمودینامیکی،  $Y_k$  کسرهای جرمی گونه شیمیایی،  $\tau_{ij}$  تانسور تنش برشی،  $\lambda$  رسانایی گرمایی،  $c_p$  گرمای ویژه مخلوط و  $\dot{m}_k$  ترم منبع شیمیایی گونه می‌باشند. در این روابط  $J_{k,j}$  شار

<sup>۴</sup> Fick's Law

<sup>۵</sup> Lewis Number

<sup>۶</sup> Stretched

<sup>۱</sup> Scalar Dissipation Rate

<sup>۲</sup> Counterflow Flame

<sup>۳</sup> Freely Propagating Flame

به‌منظور حل معادلات منیفلد، دو حل گر پیش‌آمیخته و غیر پیش‌آمیخته گذرا در زبان C++ توسعه داده شده است. حدس اولیه در حل غیر پیش‌آمیخته و شرط مرزی تعادلی در حسگر پیش‌آمیخته با استفاده از پکیج Cantera [۱۷] محاسبه می‌شود. همچنین حدس اولیه در حل پیش‌آمیخته به‌صورت خطی بین دو شرط مرزی برای متغیرهای ترموشیمیایی تعیین شده است. مشتق‌های مرتبه اول با روش تفاضل محدود بادسو مرتبه اول، و مشتق‌های مرتبه دوم با روش تفاضل محدود مرکزی مرتبه دوم گسسته سازی شده‌اند. معادلات غیرخطی گسسته شده با استفاده از بسته نرم‌افزاری SUNDIALS [۱۸] و از طریق انتگرال‌گیری در زمان با حسگر CVODE حل می‌شوند. حل گرهای توسعه‌یافته بر اساس پروتکل MPI موازی‌سازی شده‌اند. همچنین حل گرهای مستقیم به‌کاررفته در کدهای موجود، که از ژاکوبین‌های باند بزرگ استفاده می‌کنند، با یک حسگر GMRES [۱۹] جایگزین شده‌اند. این رویکرد تکراری امکان استفاده از ژاکوبین‌های تقریبی را به‌عنوان خوش وضع ساز<sup>۱</sup> فراهم می‌سازد. با بهره‌گیری از ژاکوبین‌های تقریبی، هزینه محاسباتی مربوط به عملیات ماتریسی به‌طور چشم‌گیری کاهش می‌یابد [۲۰ و ۲۱]. فایل‌های ورودی شامل مدل‌های سینتیک شیمیایی، خواص ترمودینامیکی و خواص انتقالی، از قالب استاندارد نرم‌افزار Chemkin [۲۲] پیروی می‌کنند.

### ۳- نتایج و بحث

به‌منظور بررسی قابلیت‌های مدل توسعه‌یافته نتایج حل معادلات در دستگاه فیزیکی یک‌بعدی و معادلات منیفلد مورد مقایسه قرار می‌گیرند. برای این منظور از دو سوخت استفاده شده است و در تمام موارد اکسیدکننده هوا با ترکیب مولی ۷۹ درصد نیتروژن و ۲۱ درصد اکسیژن است. سوخت‌های بررسی شده در این تحقیق متان و دی‌متیل اتر<sup>۲</sup> هستند که به ترتیب از مکانیسم‌های شیمیایی [۲۳] و [۲۴] برای احتراق آن‌ها با هوا استفاده شده است. در تمامی شبیه‌سازی‌ها دمای سوخت و هوا ۳۰۰ K و فشار اتمسفری در نظر گرفته شده است. در این بخش به‌منظور تفکیک مناسب، ابتدا نتایج مربوط به شعله پخشی ارائه می‌گردد و در ادامه به نتایج شعله پیش‌آمیخته پرداخته می‌شود.

در رابطه با شعله غیر پیش‌آمیخته پارامتر اساسی در نگاشت از فضای فیزیکی به فضای منیفلد نرخ اتلاف کسر مخلوط است که بیانگر تأثیر جریان سیال بر ساختار فلیمنت است. این پارامتر معیاری است که نرخ هموارسازی نوسانات کسر مخلوط را به‌واسطه‌ی پدیده‌ی پخش مولکولی توصیف می‌کند. این کمیت

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{\chi_Z}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{\dot{m}_k}{\rho} \quad (7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\chi_Z}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^{N_s} \square_k \frac{\dot{m}_k}{\rho} + \frac{\chi_Z}{2c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} + \sum_{k=1}^{N_s} \frac{c_{p,k}}{c_p} \frac{\chi_Z}{2} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (8)$$

که در این رابطه  $\chi_Z = 2D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j}$  نرخ اتلاف کسر جرمی و پارامتر نگاشت بین دو فضا است.

برای شعله پیش‌آمیخته متغیر منیفلد، پارامتر پیشرفت واکنش  $\Lambda$  است که برای مخلوط سوخت و هوای نسوخته صفر و برای حالت تعادل ترمودینامیکی به میزان یک تعریف می‌شود و به‌صورت تابعی از ترکیب گونه‌های مرجع تعریف می‌گردد. تنها شرط لازم برای تعیین ترکیب گونه‌های مرجع آن است که به‌صورت یکنواخت از حالت نسوخته تا تعادل ترمودینامیکی تغییر کند. در غیر این صورت، انتخاب گونه‌های مرجع و نیز وابستگی تابعی آن به پارامتر پیشرفت واکنش اختیاری است. ساده‌ترین نوع وابستگی ترکیب گونه‌های مرجع به پارامتر پیشرفت واکنش یک رابطه خطی است که متناظر با تعریف معمول یک متغیر پیشرفت واکنش نرمال سازی است.

$$\Lambda = \frac{Y_R - Y_{R,u}}{Y_{R,eq} - Y_{R,u}} \quad (9)$$

که در آن زیرنویس  $u$  مربوط به حالت نسوخته و  $eq$  مربوط به حالت تعادل ترمودینامیکی است. این پارامتر یک کمیت واکنشی است و معادله انتقال آن به شرح زیر است.

$$\rho \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \right) + \dot{m}_\Lambda \quad (10)$$

که در این رابطه  $\dot{m}_\Lambda$  عبارت منبع برای معادله انتقال پارامتر پیشرفت واکنش است و بر اساس ترکیب گونه‌های مرجع از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\dot{m}_\Lambda = \left[ \frac{1}{\partial Y_k / \partial \Lambda} \left( \frac{\rho \chi_\Lambda}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \Lambda^2} + \dot{m}_k \right) \right]_R \quad (11)$$

نگاشت فوق منجر به تشکیل معادلات فلیمنت در احتراق پیش‌آمیخته به‌صورت زیر می‌گردد.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{\chi_\Lambda}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \Lambda^2} + \frac{\dot{m}_k}{\rho} - \frac{\partial Y_k}{\partial \Lambda} \frac{\dot{m}_\Lambda}{\rho} \quad (12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\chi_\Lambda}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial \Lambda^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^{N_s} \square_k \frac{\dot{m}_k}{\rho} + \frac{\chi_\Lambda}{2c_p} \frac{\partial T}{\partial \Lambda} \frac{\partial c_p}{\partial \Lambda} + \sum_{k=1}^{N_s} \frac{c_{p,k}}{c_p} \frac{\chi_\Lambda}{2} \frac{\partial Y_k}{\partial \Lambda} \frac{\partial T}{\partial \Lambda} - \frac{\partial T}{\partial \Lambda} \frac{\dot{m}_\Lambda}{\rho} \quad (13)$$

که در این رابطه  $\chi_\Lambda = 2D \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j} \frac{\partial \Lambda}{\partial x_j}$  نرخ اتلاف پارامتر پیشرفت واکنش است.

<sup>۱</sup> Preconditioner

<sup>۲</sup> Dimethyl Ether (DME)

شایان ذکر است که به منظور تطابق نتایج بین دو حل، از تعریف کسر مخلوط Bilger [۱۳] برای استخراج کسر مخلوط از نتایج حل در مختصات فیزیکی استفاده شده است.

**جدول (۱):** مقادیر نرخ کرنش و  $\chi_{Z,st}$  معادل استفاده شده در کدهای غیر پیش آمیخته برای هر سوخت

| متان                |           | دی متیل اتر         |           |
|---------------------|-----------|---------------------|-----------|
| $\chi_{Z,st} (1/s)$ | $a (1/s)$ | $\chi_{Z,st} (1/s)$ | $a (1/s)$ |
| ۰/۰۱                | ۰/۰۰۴۶    | ۰/۰۱                | ۰/۰۰۱۳    |
| ۱۰                  | ۰/۴۴      | ۱۰۰                 | ۱۱/۷۸     |
| ۶۷۵                 | ۲۷/۳۳     | ۲۱۰۰                | ۲۲۱/۷۲    |

نتایج مربوط به شبیه سازی در فضای فیزیکی و فضای منیفلد برای سوخت های متان و دی متیل اتر در شکل های ۱ و ۲ آورده شده است. به منظور رعایت اختصار تنها نتایج نرخ اتلاف کسر مخلوط، دما، کسر جرمی مونواکسید کربن و کسر جرمی هیدروکسید آورده شده است. در هر شکل راستای فلش، محور عمودی دسته منحنی را مشخص می کند و شکل ها دارای دو قسمت با (الف) و (ب) مشخص شده اند. نتایج گویای تطبیق خوب حل معادلات منیفلد و فضای فیزیکی است که محصول قابلیت بالای مدل توسعه یافته برای  $\chi_Z$  در نگاشت فضای فیزیکی است. این پارامتر در شکل به صورت بدون بعد و در قالب  $\chi_{Z,profile} = \chi_Z / \chi_{Z,st}$  آورده شده است. در هر شکل مقادیر  $Z_{st}$  به صورت خط عمودی مشخص شده است. در نرخ های کرنش پایین، حل عددی به نتایج تعادلی همگرا می شود، در حالی که با افزایش این پارامتر به محدوده ای که منجر به خاموشی شعله در اثر کشیدگی شدید می شود، نزدیک می گردد. شایان توجه است که با نزدیک شدن به محدوده خاموشی، انحرافات جزئی در نتایج قابل مشاهده است.

در احتراق پیش آمیخته، یک فضای یک بعدی با استفاده از پارامتر پیشرفت واکنش تعریف می شود و نرخ اتلاف این کمیت به عنوان پارامتر نگاشت در معادلات منیفلد یک بعدی حاصل ظاهر می گردد. گرادیان پارامتر پیشرفت واکنش تحت تأثیر هر دو عامل اختلاط در مقیاس کوچک و فرآیندهای شیمیایی قرار دارد. در ناحیه پیش گرمایش شعله، که عدد دامکوهلر<sup>۲</sup> محلی کوچک است، انتظار می رود که  $\chi_\Lambda$  عمدتاً تحت تأثیر اختلاط قرار داشته باشد. در مقابل، در ناحیه نازک واکنشی که عدد دامکوهلر بزرگ است، منبع شیمیایی گرایش دارد تا  $\nabla \Lambda$  را تقویت کند، که در نتیجه منجر به افزایش  $\chi_\Lambda$  می شود. بنابراین، پیش بینی یک توزیع کلی برای  $\chi_\Lambda$  که بتواند به طور مستقیم با پاسخ شعله به

یکی از پارامترهای کلیدی در توصیف شدت اختلاط است و نقش مهمی در ساختار شعله، نرخ واکنش های شیمیایی و مرزهای خاموشی شعله های پخشی ایفا می کند. مقادیر بالای این پارامتر نشان دهنده ی اختلاط شدید هستند که می تواند در شرایطی منجر به خاموشی شعله گردد، به ویژه زمانی که سرعت اختلاط از نرخ واکنش های شیمیایی پیشی گیرد. به عبارت دیگر، این پارامتر وضعیت محلی اختلاط را به نرخ های واکنش شیمیایی مرتبط می سازد. این پارامتر عمدتاً تحت تأثیر فرآیند اختلاط جریان قرار دارد و انتظار نمی رود که توزیع آن وابستگی قابل توجهی به فرآیندهای شیمیایی داشته باشد، مگر در مواردی که اثرات آزادسازی حرارت موجب تغییر در میدان جریان و در نتیجه تأثیر بر اختلاط شوند؛ همان گونه که در شعله های سه گانه به دلیل انحراف خطوط جریان مشاهده می شود.

یکی از چالش های اساسی در فرمول بندی معادلات منیفلد، نیاز به داشتن اطلاعات پیشین درباره ی وابستگی نرخ اتلاف به کسر مخلوط است. از این رو، این وابستگی باید مدل سازی شود. در مراجع، معمولاً از رابطه حاصل از یک تقریب تحلیلی برای شعله ی دیفیوژن در جریان متقابل و یک لایه اختلاط آرام با شرایط مرزی جریان پتانسیل یک بعدی استفاده شده است [۱۵].

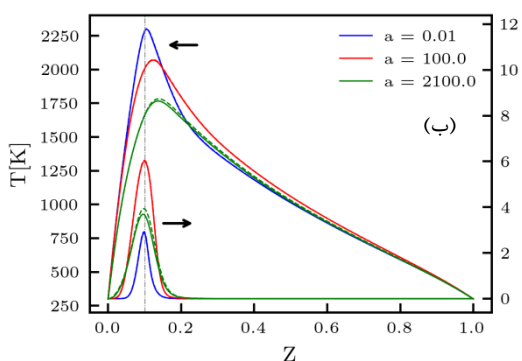
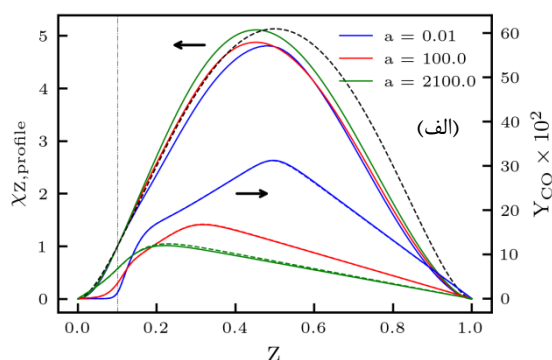
$$\chi_Z(Z) = \chi_{Z,st} \frac{\exp[-2(\operatorname{erfc}^{-1}(2Z))^2]}{\exp[-2(\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st}))^2]} \quad (14)$$

که در این رابطه  $\chi_{Z,st}$  نرخ اتلاف کسر مخلوط در شرایط استوکیومتری را نشان می دهد. بارزترین ویژگی این پروفایل آن است که بیشینه ی نرخ اتلاف در کسر مخلوط ۰/۵ رخ می دهد. با استفاده از این رابطه، کتابخانه ی فلیملت با دو پارامتر ورودی به صورت  $\xi(Z, \chi_{Z,st})$  برای هر کمیت ترموشیمیایی ساخته می شود. در برخی منابع از طریق پس پردازش حل فلیملت متغیرهای مستقل جدیدی برای جدول بندی نتایج استخراج شده اند [۲۵].

به منظور اعتبارسنجی پاسخ منبع از مدل ارائه شده برای  $\chi_Z$ ، مقایسه نتایج حل فلیملت و حل تشابهی احتراق غیر پیش آمیخته جریان متقابل در ادامه آورده می شود. در مورد کد حسگر جریان متقابل، پارامتر ورودی نرخ کرنش<sup>۱</sup> است که بیانگر گرادیان سرعت محوری در دوردست صفحه سکون است و واحد آن مانند نرخ اتلاف کمیت  $(1/s)$  است. انتخاب مقادیر نرخ کرنش برای هر سوخت به شکلی صورت گرفته است که گستره حل از شرایط تعادل ترمودینامیکی تا نقطه خاموشی را شامل شود. مقادیر متناسب  $\chi_{Z,st}$  برای هر نرخ کرنش بر اساس گرادیان کسر مخلوط در فضای فیزیکی محاسبه شده و به عنوان ورودی حسگر فلیملت در جدول ۱ آورده شده است. همچنین

<sup>2</sup> Damköhler Number

<sup>1</sup> Strain Rate



شکل (۲): نتایج دی متیل اتر برای شعله غیر پیش آمیخته، خطوط حل فضای فیزیکی و خط چین حل معادلات منیفلد

مشخصه این تعریف تغییر یکنواخت از حالت نسوخته تا تعادل ترمودینامیکی است. به منظور اعتبارسنجی پاسخ حاصل از مدل ارائه شده برای  $\chi_{\Lambda}$ ، نتایج مقایسه حل منیفلد و حل شعله پیش آمیخته با پیشروی آزاد کشیده نشده برای نسبت هم‌ارزی‌های<sup>۱</sup> متفاوت در ادامه آورده می‌شود. مقادیر متناسب  $\chi_{\Lambda,ref}$  برای هر نسبت هم‌ارزی بر اساس گرادیان پارامتر پیشرفت واکنش در فضای فیزیکی محاسبه شده و به عنوان ورودی حسگر منیفلد در جدول ۲ آورده شده است.

جدول (۲): مقادیر نسبت هم‌ارزی و  $\chi_{\Lambda,ref}$  معادل استفاده شده در کدهای پیش آمیخته برای هر سوخت

| دی متیل اتر                |        | متان                       |        |
|----------------------------|--------|----------------------------|--------|
| $\chi_{\Lambda,ref} (1/s)$ | $\phi$ | $\chi_{\Lambda,ref} (1/s)$ | $\phi$ |
| ۱۸۳۰/۲                     | ۰/۷    | ۱۱۱۵/۳                     | ۰/۷    |
| ۴۵۰۶/۸                     | ۱/۰    | ۲۶۵۰/۲                     | ۱/۰    |
| ۴۱۵۰                       | ۱/۲    | ۱۴۹۳/۲                     | ۱/۲    |

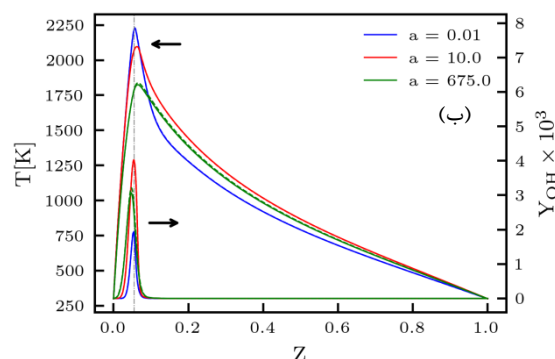
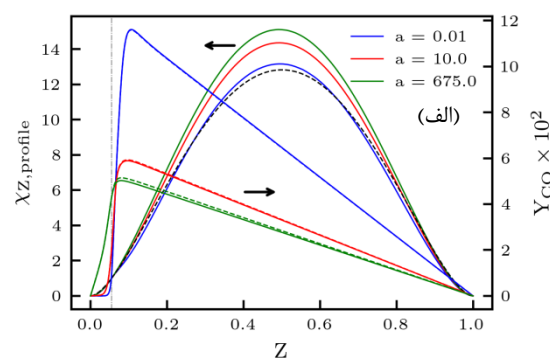
نتایج مربوط به شبیه‌سازی در فضای فیزیکی و فضای منیفلد برای سوخت‌های متان و دی متیل اتر در شکل‌های ۳ و ۴ آورده شده است. همان‌طور که مشخص است پروفیل ارائه شده به منظور

کرنش مرتبط باشد، کاری دشوار است. برای بستن معادلات منیفلد یک‌بعدی، فرضی درباره وابستگی نرخ اتلاف به پارامتر پیشرفت واکنش مورد نیاز است؛ به عبارت دیگر، نیاز به نرخ اتلاف شرطی وجود دارد. نگویین و همکاران [۲۶] یک رابطه تحلیلی برای نرخ اتلاف پارامتر پیشرفت واکنش در شعله کشیده شده جریان متقابل، مشابه معادله (۱۴)، ارائه دادند.

$$\chi_{\Lambda}(\Lambda) = \chi_{\Lambda,ref} \frac{\exp\left[-2\left(\operatorname{erfc}^{-1}(2\Lambda)\right)^2\right]}{\exp\left[-2\left(\operatorname{erfc}^{-1}(2\Lambda_{ref})\right)^2\right]} \quad (15)$$

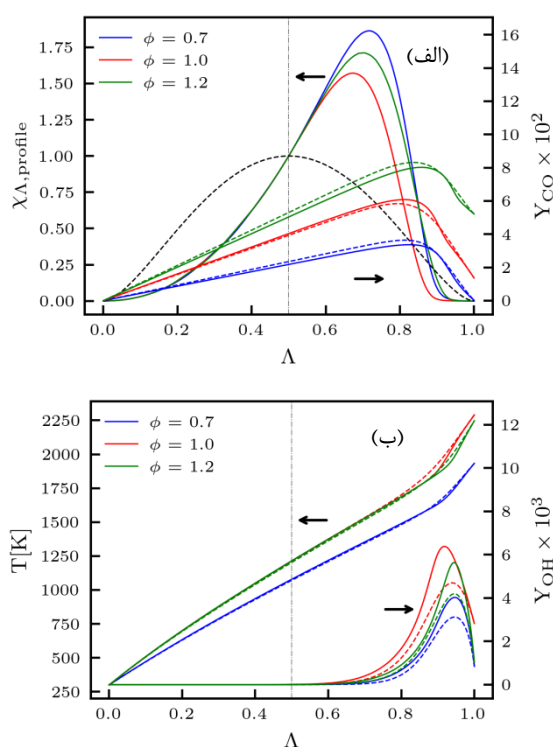
در رابطه فوق  $\Lambda_{ref} = 0.5$  معرفی شده است. به این ترتیب، کتابخانه‌ی منیفلد با دو پارامتر ورودی به صورت  $\xi = \xi(\Lambda, \chi_{\Lambda,ref})$  برای هر کمیت ترموشیمیایی تشکیل می‌شود. جهت تکمیل مدل توسعه یافته لازم است ترکیب گونه‌های مرجع در تعریف پارامتر پیشرفت واکنش تعیین شود. تعاریف متنوعی در مراجع برای این پارامتر ارائه شده است و در تحقیق حاضر از رابطه زیر استفاده می‌گردد.

$$Y_R = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{H_2} \quad (16)$$

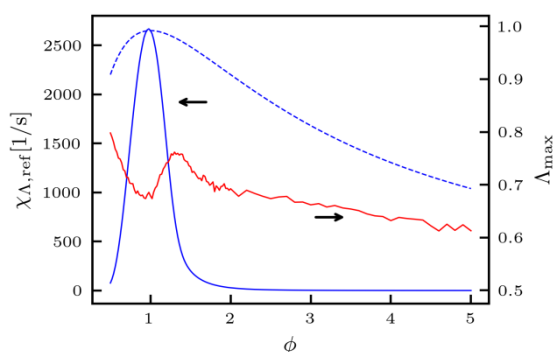


شکل (۱): نتایج متان برای شعله غیر پیش آمیخته، خطوط حل فضای فیزیکی و خط چین حل معادلات منیفلد

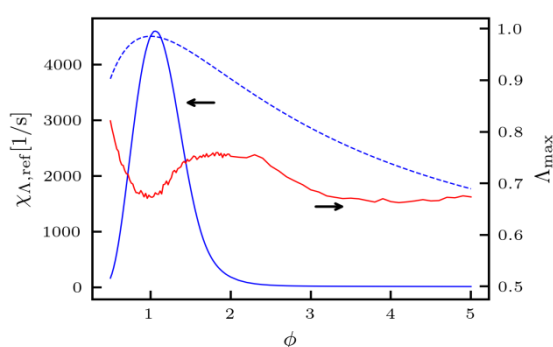
<sup>1</sup> Equivalence Ratio



شکل (۴): نتایج دی متیل اتر برای شعله پیش آمیخته، مدل سازی  $\chi_{\Lambda}$  بر پایه رابطه (۱۴)



شکل (۵): نتایج متان برای  $\chi_{\Lambda,ref}$  و محل بیشینه  $\chi_{\Lambda}$ ، خط حل فضای فیزیکی و خط چین معادله (۱۷)

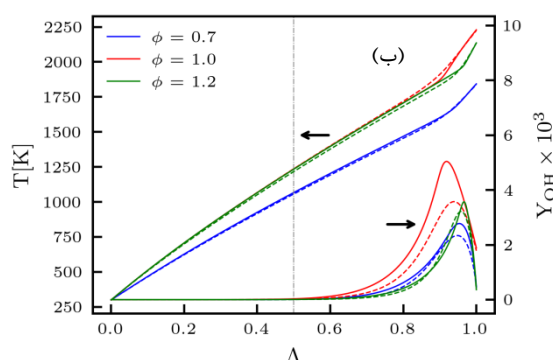
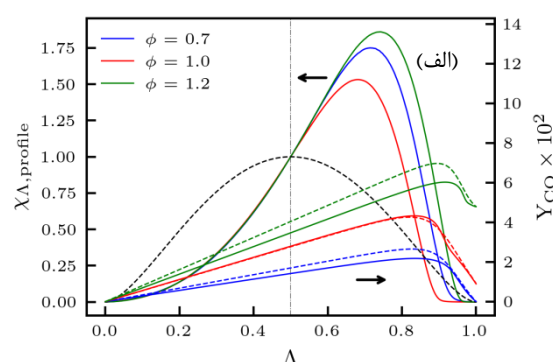


شکل (۶): نتایج دی متیل اتر برای  $\chi_{\Lambda,ref}$  و محل بیشینه  $\chi_{\Lambda}$ ، خط حل فضای فیزیکی و خط چین حل معادله (۱۷)

مدل سازی  $\chi_{\Lambda}$  از تطابق مناسب با حل فیزیکی برخوردار نیست و بالطبع سبب حصول نتایج با اختلاف قابل توجه نسبت به حل مرجع شده است. مدل توسعه یافته دلالت بر مقدار بیشینه  $\chi_{\Lambda}$  در پارامتر پیشرفت واکنش ۰/۵ دارد، امری که در نتایج فضای فیزیکی مشاهده نمی شود. از مقادیر مندرج در جدول ۲ می توان دریافت که  $\chi_{\Lambda,ref}$  تابعی از میزان نسبت هم ارزی است. مولر [۲۷] وابستگی این پارامتر به کسر مخلوط را، که به نوعی معرف نسبت هم ارزی است، بر اساس رابطه (۱۷) بیان کرده است. این رابطه مستنتج از تغییرات نرخ سوختن در حالت پیش آمیخته با نسبت هم ارزی است؛ به طوری که این نرخ در شرایط استوکیومتری بیشینه بوده و با دور شدن از آن، به سوی سوخت یا اکسیدکننده، کاهش می یابد.

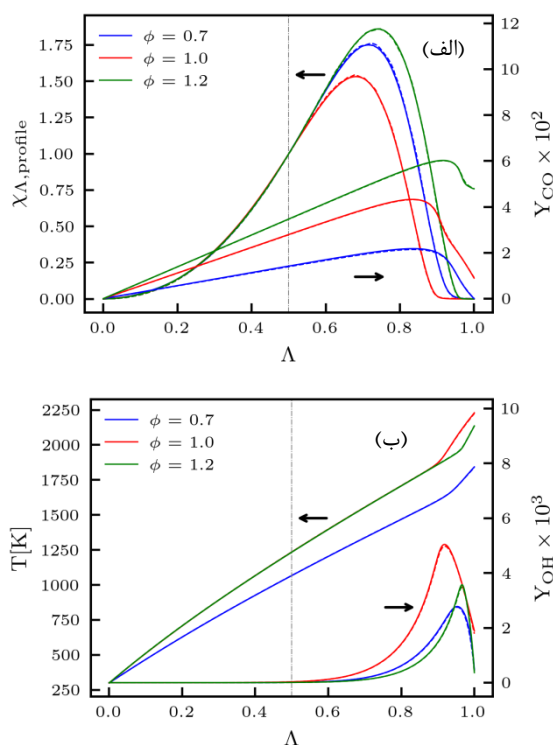
$$\chi_{\Lambda,ref}(Z) = \chi_{\Lambda,ref}^{\circ} \times \exp \left[ -2 \left( \operatorname{erfc}^{-1} \left( \frac{2Z(1-Z_{st})}{(1-Z)Z_{st} + Z(1-Z_{st})} \right) \right)^2 \right] \quad (17)$$

در شکل های ۵ و ۶ مقایسه مقادیر  $\chi_{\Lambda,ref}$  در فضای فیزیکی و حاصل از رابطه (۱۷) و همچنین محل وقوع بیشینه مقدار  $\chi_{\Lambda}$  بر حسب نسبت هم ارزی به ترتیب برای سوخت های متان و دی متیل اتر آورده شده است. این نتایج تأیید دیگری بر نیاز به مدل دقیق تر برای پارامتر  $\chi_{\Lambda}$  در احتراق پیش آمیخته است.



شکل (۳): نتایج متان برای شعله پیش آمیخته، مدل سازی  $\chi_{\Lambda}$  بر پایه رابطه (۱۴)

نتایج مربوط به شبیه‌سازی شعله با پیشروی آزاد در فضای فیزیکی و فضای منیفلد برای سوخت‌های متان و دی متیل اتر در شکل‌های ۷ و ۸ آورده شده است. پروفیل ارائه‌شده به منظور مدل‌سازی  $\chi_\Lambda$  از تطابق بسیار خوبی با حل فیزیکی برخوردار است که سبب حصول نتایج منطبق با حل مرجع شده است. به این ترتیب شبکه ایجادشده به خوبی قابلیت بازنمایی پایگاه داده موردنظر را دارد.



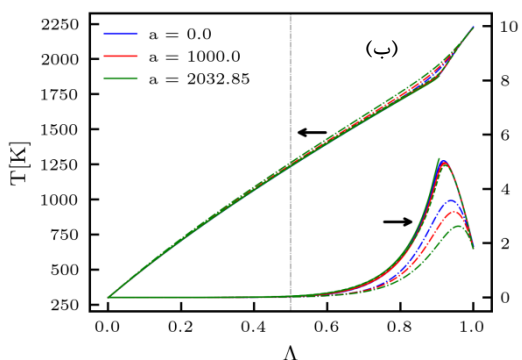
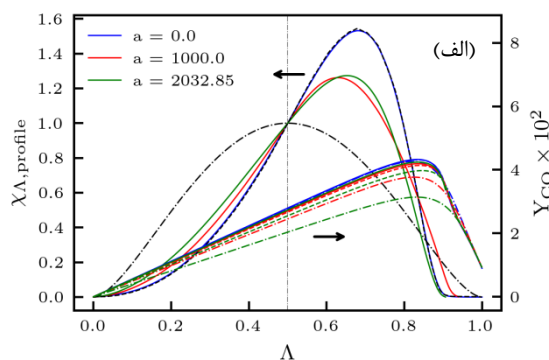
شکل (۷): نتایج متان برای شعله پیش آمیخته، مدل‌سازی  $\chi_\Lambda$  بر پایه شبکه عصبی عمیق

در ادامه به منظور بررسی قابلیت شبکه عصبی توسعه‌یافته بر مبنای پایگاه داده فلیملت‌های حاصل از حل شعله‌های پیش آمیخته با پیشروی آزاد در فضای فیزیکی، شعله متقابل پیش آمیخته از نوع کشیده شده مورد بررسی قرار می‌گیرد. معادلات توسعه‌یافته در فضای منیفلد توصیف گر هر شعله پیش آمیخته آدیاباتیک بدون توجه به ماهیت آن به لحاظ کشیدگی، که مبنای تقسیم‌بندی مسائل در مختصات فیزیکی است، می‌باشند. بنابراین مدل‌های ارائه‌شده برای  $\chi_\Lambda$  می‌بایست قابلیت شبیه‌سازی هر دو پیکربندی شعله پیش آمیخته را دارا باشند. در این قسمت مقایسه نتایج حل منیفلد و حل تشابهی احتراق پیش آمیخته جریان متقابل آورده می‌شود. در مورد کد حسگر جریان متقابل، پارامترهای ورودی نرخ کرنش و نسبت هم‌ارزی و شرایط مرزی تقارن حول صفحه سکون است. به منظور رعایت اختصار در این مرحله تنها نتایج مربوط به مخلوط پیش آمیخته استوکیومتری

به منظور دستیابی به مدل معتبر برای مدل‌سازی پارامتر  $\chi_\Lambda$ ، در تحقیق حاضر از الگوریتم شبکه عصبی عمیق استفاده شده است. به این ترتیب، ابتدا پایگاه داده‌ای از فلیملت‌های حاصل از حل شعله‌های پیش آمیخته با پیشروی آزاد برای طیف وسیعی از نسبت‌های هم‌ارزی و شرایط مورد مطالعه، تشکیل می‌گردد. حل فلیملت‌های پیش آمیخته یک‌بعدی در فضای فیزیکی توزیع  $\nabla \Lambda$  بر حسب  $\Lambda$  را فراهم می‌سازد. در نتیجه برای هر فلیملت پروفیل  $\chi_\Lambda$  با وابستگی به هر دو عامل نسبت هم‌ارزی و پارامتر پیشرفت واکنش حاصل می‌گردد. فضای نمونه برای هر سوخت از ۲۰۰ فلیملت با نسبت هم‌ارزی متفاوت و با تمرکز بر مقادیر نزدیک به استوکیومتری تشکیل شده است و هر فلیملت در فضای فیزیکی با ۲۵۰۰ نقطه گسسته سازی شده است. حال از پایگاه داده بزرگ تشکیل شده جهت آموزش شبکه عصبی عمیق استفاده می‌گردد. این شبکه می‌تواند به عنوان یک مدل جانشین داده محور برای پیش‌بینی پروفایل  $\chi_\Lambda$  در حسگر فلیملت پیش آمیخته به کار رود و به واسطه قابلیت آن در بازنمایی روابط پیچیده بین ورودی‌ها و خروجی‌ها، جایگزینی قدرتمند برای روش‌های تحلیلی یا صرفاً مبتنی بر فیزیک شناخته شود.

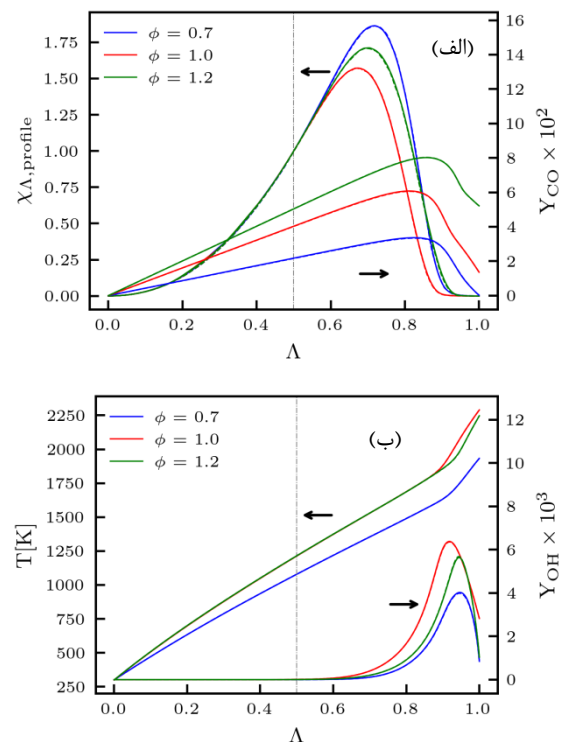
شبکه موردنظر دارای دو پارامتر ورودی ( $Z, \Lambda$ ) و یک پارامتر خروجی ( $\chi_\Lambda$ ) است. برای این هدف از کتابخانه یادگیری عمیق PyTorch در محیط برنامه‌نویسی پایتون استفاده شده است. شبکه‌ی عصبی پیاده‌سازی در این تحقیق از نوع شبکه‌ی عصبی پیش‌خور کاملاً متصل است. این شبکه یک بردار ورودی دوبعدی را دریافت می‌کند که نمایانگر پارامترهای فیزیکی کسر مخلوط و پارامتر پیشرفت واکنش می‌باشند. معماری شبکه شامل شش لایه پنهان کاملاً متصل است که هر یک دارای ۱۲۸ نورون است. پس از هر لایه پنهان، یک تابع فعال‌سازی ReLU اعمال می‌شود که با ایجاد غیرخطی‌سازی، به انتشار مؤثر گرادیان در طی فرآیند آموزش کمک می‌کند. لایه‌ی خروجی شامل یک نورون منفرد است که مقدار پروفیل نرخ اتلاف پارامتر پیشرفت واکنش را پیش‌بینی می‌کند. خروجی این لایه از طریق تابع فعال‌سازی Softplus عبور داده می‌شود تا تضمین گردد که مقادیر پیش‌بینی شده هموار و مثبت باقی بمانند. در فرآیند یادگیری داده‌ها با نسبت ۸۰ به ۲۰ به مجموعه‌های آموزش و آزمون تقسیم می‌شوند. فرآیند آموزش با کمینه‌سازی تابع MSE بین مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر واقعی صورت می‌گیرد. عملکرد مدل پس از آموزش با استفاده از همین معیار بر روی داده‌های آزمون ارزیابی می‌شود. برای به‌روزرسانی وزن‌ها از الگوریتم Adam با نرخ یادگیری ۰/۰۰۱ استفاده شده است؛ این الگوریتم تعادلی میان تطبیق‌پذیری نرخ یادگیری و بهره‌وری محاسباتی برقرار می‌کند. آموزش مدل در طی ۲۰۰ تکرار و با اندازه‌ی دسته‌ی ۱۰۰ نمونه انجام می‌شود که به پایداری در همگرایی مدل کمک می‌کند.

پروفیل مستخرج از حل شعله با پیشروی آزاد فاصله می‌گیرد. دلیل این امر ایجاد کشیدگی در شعله و اثرگذاری بیشتر اختلاط است. به این ترتیب که با افزایش کشیدگی در شعله، اهمیت عبارت منبع شیمیایی نسبت به عبارات انتقال کاهش می‌یابد و در نتیجه، پارامتر پیشرفت واکنش رفتاری نزدیک به کمیت غیر واکنشی از خود نشان می‌دهد. این مفهوم در بررسی شعله گذرا با کشیدگی بیشتر از حد خاموشی خود را بهتر نشان می‌دهد. همین عامل سبب شده است تا نتایج حل با پروفیل شبکه عصبی نیز مقداری متفاوت از نتایج فضای فیزیکی خصوصاً با افزایش نرخ کرنش باشد. البته قابلیت پروفیل مبتنی بر پایگاه داده شعله‌های پیشروی آزاد تطابق بسیار بهتری با نتایج شعله متقابل نسبت به پروفیل رابطه (۱۴) دارند. به این ترتیب مشخص است راهکار معرفی شده در این تحقیق قابلیت ایجاد مدلی بهتر از  $\chi_\Lambda$  نسبت به مدل نورخان تر معرفی شده را در محدوده پایداری شعله آرام دارد و متعاقباً تهیه جداول فلیملت، پیش از ورود به حل جریان واکنشی، با این مدل از دقت بهتری برخوردار خواهند بود. شایان ذکر است با توجه به ماهیت این پارامتر و حساسیت بالا نسبت به مشخصات مکانی و زمانی جریان احتراقی نمی‌توان انتظار داشت مدل‌های جامع و تنها وابسته به پارامترهای فضای منفیفلد از دقت بسیار بالا برخوردار باشند.



شکل (۹): نتایج متان برای شعله استوکیومتری متقابل پیش آمیخته، خط حل فضای فیزیکی، خط چین مدل سازی  $\chi_\Lambda$  بر پایه شبکه عصبی عمیق و خط نقطه مدل سازی  $\chi_\Lambda$  بر پایه رابطه (۱۴)

بررسی می‌گردد. انتخاب مقادیر نرخ کرنش برای هر سوخت به شکلی صورت گرفته است که گستره حل از شعله بدون کشیدگی تا نقطه خاموشی را شامل شود. مقادیر متناسب  $\chi_{\Lambda,ref}$  برای هر نرخ کرنش بر اساس گرادیان پارامتر پیشرفت واکنش در فضای فیزیکی محاسبه شده و به عنوان ورودی حسگر منفیفلد در جدول ۳ آورده شده است.



شکل (۸): نتایج دی متیل اتر برای شعله پیش آمیخته، مدل سازی  $\chi_\Lambda$  بر پایه شبکه عصبی عمیق

جدول (۳): مقادیر نرخ کرنش و  $\chi_{\Lambda,ref}$  معادل در کدهای پیش آمیخته برای هر سوخت با مخلوط استوکیومتری

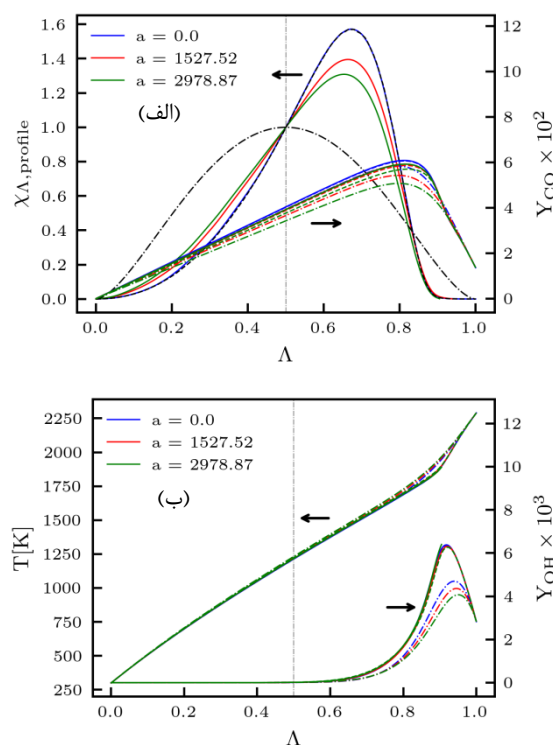
| دی متیل اتر                |           | متان                       |           |
|----------------------------|-----------|----------------------------|-----------|
| $\chi_{\Lambda,ref} (1/s)$ | $a (1/s)$ | $\chi_{\Lambda,ref} (1/s)$ | $a (1/s)$ |
| ۴۵۰۶/۸                     | ۰         | ۲۶۵۰/۲                     | ۰         |
| ۵۷۱۱/۸                     | ۱۵۲۷/۵    | ۳۳۵۷/۸                     | ۱۰۰۰      |
| ۶۹۵۴                       | ۲۹۷۸/۹    | ۴۲۳۵/۴                     | ۲۰۳۲/۸    |

نتایج مربوط به شبیه سازی شعله متقابل پیش آمیخته کشیده شده در فضای فیزیکی و فضای منفیفلد برای مخلوط استوکیومتری هوا و سوخت‌های متان و دی متیل اتر در شکل‌های ۹ و ۱۰ آورده شده است. همان‌طور که مشخص است با افزایش نرخ کرنش پروفیل  $\chi_\Lambda$  برای شعله جریان متقابل از

پیش‌آمیخته بر مبنای پایگاه داده شعله‌های پیش‌آمیخته با پیشروی آزاد پیشنهاد و توسعه داده شد. ارزیابی نتایج حاصل از این مدل در مقایسه با شعله‌های کشیده شده با جریان پیش‌آمیخته متقابل نشان می‌دهد که رویکرد داده‌محور پیشنهادی در مقایسه با مدل‌های پیشین، از دقت و توانایی بالاتری در شبیه‌سازی فرآیندهای احتراقی برخوردار است. این یافته‌ها بر قابلیت‌های چشمگیر روش‌های یادگیری ماشین در مدل‌سازی پدیده‌های غیرخطی و پیچیده در دینامیک واکنش‌های شیمیایی تأکید دارند.

## ۵- مراجع

- [1] Ertesvåg IS, Magnussen BF. The eddy dissipation turbulence energy cascade model. *Combustion Science and Technology*. 2000;159:213–235. DOI 10.1080/00102200008935784
- [2] Chomiak J. *Combustion: A study in theory, fact, and application*. Abacus Press; 1990.
- [3] Pope SB. Computations of turbulent combustion: progress and challenges. *In Symposium (International) on Combustion* 1991;23(1):591-612. DOI 10.1016/S00820784(06)80307-3
- [4] McMurthy PA, Menon S, Kerstein AR. A linear eddy sub-grid model for turbulent reacting flows: Application to hydrogen-air combustion. *Symposium (International) on Combustion*. 1992;24:271–278. DOI 10.1016/S00820784(06)80036-6
- [5] Peters N. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press; 2000.
- [6] Peters N. Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technology*. 1983;30:117. DOI 10.1080/00102208308923608
- [7] Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*. 1984;10:319-339. DOI 10.1016/03601285(84)90114-X
- [8] Ihme M, See YC. Prediction of autoignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model. *Combustion and Flame*. 2010;157:1850–1862. DOI 10.1016/j.combustflame.2010.07.015
- [9] Pitsch H, Barths H, Peters N. Three-dimensional modeling of NO<sub>x</sub> and soot formation in DI-diesel engines using detailed chemistry based on the interactive flamelet approach. *SAE transactions*. 1996;1:2010-24. DOI 10.4271/962057
- [10] Knudsen E, Kim SH, Pitsch H. An analysis of premixed flamelet models for large eddy simulation of turbulent combustion. *Physics of Fluids*. 2010;22(11). DOI 10.1063/1.3490043
- [11] Van Oijen JA, De Goey LP. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion science and technology*. 2000;161(1):113-37. DOI 10.1080/00102200008935814
- [12] Mittal V, Cook DJ, Pitsch H. An extended multi-regime flamelet model for IC engines. *Combustion and Flame*. 2012;159(8):2767-76. DOI 10.1016/j.combustflame.2012.01.014
- [13] Turns SR. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw Hill; 2011.



شکل (۱۰): نتایج دی متیل اتر برای شعله استوکیومتری متقابل پیش‌آمیخته، خط حل فضای فیزیکی، خط چین مدل‌سازی  $\chi_A$  بر پایه شبکه عصبی عمیق و خط نقطه مدل‌سازی  $\chi_A$  بر پایه رابطه (۱۴)

## ۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه، کارایی مدل‌های مبتنی بر فضای منیفلد در شبیه‌سازی شعله‌های غیرپیش‌آمیخته و پیش‌آمیخته مورد بررسی قرار گرفت. به منظور ارزیابی دقت این مدل‌ها، احتراق سوخت‌های متان و دی‌متیل‌اتر در حضور اکسیدکننده هوا مورد استفاده قرار گرفت و پیکربندی‌های مختلف شعله، شامل شعله جریان متقابل برای حالت غیرپیش‌آمیخته و شعله‌های پیش‌آمیخته با پیشروی آزاد و جریان متقابل کشیده‌شده، به‌عنوان مراجع حل در فضای فیزیکی انتخاب شدند. نتایج حاصل حاکی از آن است که مدل توسعه‌یافته مبتنی بر تقریب لایه اختلاط آرام با شرایط مرزی جریان پتانسیل، در پیش‌بینی نرخ اتلاف کسر مخلوط در شعله‌های غیرپیش‌آمیخته عملکرد رضایت‌بخشی دارد. با این حال، تعمیم همین چارچوب به شعله‌های پیش‌آمیخته منجر به انحراف از نتایج مرجع شده و دقت لازم را در بازتولید رفتار شعله ارائه نمی‌دهد. همچنین مدل‌های مبتنی بر این رویکرد، در پیش‌بینی صحیح مکان وقوع بیشینه نرخ اتلاف و روند تغییرات آن با نسبت هم‌ارزی دچار ضعف بوده‌اند. در راستای بهبود این پارامتر، مدلی مبتنی بر شبکه عصبی عمیق برای تخمین نرخ اتلاف پارامتر پیشرفت واکنش در شعله‌های

- [21] Lapointe S, Xuan Y, Kwon H, Whitesides RA, McNeenly MJ. A computationally-efficient method for flamelet calculations. *Combustion and Flame*. 2020;221:94–102. DOI 10.1016/j.combustflame.2020.07.035
- [22] Kee R, Rupley F, Miller J. Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. 1989.
- [23] Smith GP, Golden DM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer B, Goldenberg M, Bowman CT, Hanson RK, Song S, Gardiner WC Jr, Lissianski VV, Qin Z. GRI-Mech 3.0. 2000. Available from: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>
- [24] Bhagatwala A, Luo Z, Shen H, Sutton JA, Lu T, Chen JH. Numerical and experimental investigation of turbulent DME jet flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2015;35:1157–1166. DOI 10.1016/j.proci.2014.05.147
- [25] Pierce CD, Moin P. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*. 2004;504:73–97. DOI 10.1017/S0022112004008213
- [26] Nguyen PD, Vervisch L, Subramanian V, Domingo P. Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combustion and Flame*. 2010;157:43–61. DOI 10.1016/j.combustflame.2009.07.008
- [27] Mueller ME. Physically-derived reduced-order manifold-based modeling for multi-modal turbulent combustion. *Combustion and Flame*. 2020;214. DOI 10.1016/j.combustflame.2020.01.004
- [14] Dixon-Lewis G, David T, Gaskell PH, Fukutani S, Jinno H, Miller JA, Kee RJ, Smooke MD, Peters N, Effelsberg E, Warnatz J. Calculation of the structure and extinction limit of a methane-air counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder. In: *Symposium (International) on Combustion*. 1985;20(1):1893-1904. DOI 10.1016/S00820784(85)80688-3
- [15] Poinot T, Veynante D. *Theoretical and Numerical Combustion*. RT Edwards, Inc.; 2005.
- [16] Pitsch H. Flamemaster: A C++ computer program for 0D combustion and 1D laminar flame calculations. Cited in. 1998;81.
- [17] Goodwin DG, Moffat HK, Schoegl I, Speth RL, Weber BW. Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes. 2024. DOI 10.5281/zenodo.742000
- [18] Hindmarsh AC, Brown PN, Grant KE, Lee SL, Serban R, Shumaker DE, Woodward CS. Sundials: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*. 2005;31:363–396. DOI 10.1145/1089014.1089020
- [19] Saad Y, Schultz MH. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. 1986;7:856–869. DOI 10.1137/0907058
- [20] Lapointe S, Whitesides RA, McNeenly MJ. Sparse, iterative simulation methods for one-dimensional laminar flames. *Combustion and Flame*. 2019;204:23–32. DOI 10.1016/j.combustflame.2019.02.030