

تأثیر مکانیزم‌های شیمیایی مختلف احتراق متان-هوا بر توزیع گونه‌های اصلی و ساختار جریان آشفته چرخشی در شعله "SM1" با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی و مدل فیلیمت آرام پایا

محسن جهانبخش آبکناری^۱، حمیدرضا نظیف^۲

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران.

^۲ نویسنده مسئول، دانشیار، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران.

چکیده:

این پژوهش به بررسی عددی ساختار جریان آشفته و توزیع گونه‌های شیمیایی اصلی در مشعل غیرپیش‌آمیخته SM1 با استفاده از مدل فیلیمت آرام پایا می‌پردازد. هدف پژوهش حاضر، تحلیل تأثیر تغییر مکانیزم‌های شیمیایی مختلف بر ساختار جریان شعله SM1 و توزیع گونه‌های شیمیایی اصلی است. برای این کار، از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI Mech (سری ۱، ۲، ۱۱، ۲۰ و ۳۰) و مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از مکانیزم‌های سری GRI Mech تفاوت محسوسی در توزیع سرعت محوری و چرخشی، توزیع دما، جزء مخلوط و گونه‌های اصلی ایجاد نمی‌کنند و نتایج آن‌ها تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارند. در مقابل، مکانیزم تک مرحله‌ای به طور قابل توجهی، توزیع دما، جزء مخلوط و گونه‌ها را کمتر از مقدار واقعی محاسبه می‌کند. همچنین، مدل آشفته‌گی $k-\epsilon$ استاندارد، قابلیت مدل‌سازی جریان چرخشی اولیه در پشت سطح فاصله‌انداز را دارد. پروفیل سرعت توانی $1/7$ به عنوان پروفیل جریان توسعه یافته برای ورودی‌های سوخت و هوای چرخشی بسیار مناسب و سازگار با شرایط عملکردی شعله SM1 است.

واژگان کلیدی فارسی: مدل فیلیمت آرام پایا، شعله غیر پیش‌آمیخته، شعله چرخشی SM1، مکانیزم GRI Mech، مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان، واکنش شیمیایی، گونه شیمیایی.

۱. مقدمه

کمیت‌های اساسی طراحی در سیستم‌های احتراقی غیر پیش‌آمیخته تلقی می‌شود [۳]. برای اختلاط مناسب سوخت و اکسیدکننده و ایجاد پایداری شعله در سیستم‌های احتراقی غیر پیش‌آمیخته، می‌توان از مکانیزم‌های نگهدارنده هندسی و آیرودینامیکی استفاده کرد. مکانیزم‌های نگهدارنده هندسی شامل صفحه فاصله‌انداز و Backward Facing Step است. در نگهدارنده‌های هندسی، جریان برگشتی ایجاد شده در پشت هندسه نگهدارنده، باعث پایداری شعله می‌شود. در پایدارکننده‌های آیرودینامیکی، پدیده فیزیکی شکست گردابه‌ها با وجود جریان چرخشی ورودی، وظیفه پایداری شعله و اختلاط سوخت و اکسیدکننده را بر عهده دارد [۳-۵]. در بعضی از مشعل‌ها همچون مشعل انتشاری چرخشی دانشگاه سیدنی (مشعل‌های سری SM)، هم از مکانیزم هندسی فاصله‌انداز و هم

مشعل‌ها، یکی از اجزای اصلی سیستم‌های احتراقی محسوب می‌شوند [۱، ۲]. مشعل‌ها از دیدگاه نحوه اختلاط سوخت و اکسیدکننده به چهار دسته تقسیم‌بندی می‌شوند که شامل مشعل‌های پیش‌آمیخته، مشعل‌های پیش‌آمیخته جزئی، مشعل‌های غیر پیش‌آمیخته و مشعل‌های مرحله‌ای هستند [۱، ۲]. در سیستم‌های احتراقی غیر پیش‌آمیخته، به دلیل مجزا بودن مسیر ورود سوخت و اکسیدکننده به داخل محفظه احتراق و عدم اختلاط آن‌ها قبل از ورود به محفظه احتراق، اختلاط سوخت و اکسیدکننده در داخل محفظه احتراق، بسیار مهم و حیاتی است [۱، ۳]. به همین دلیل، وقوع احتراق پایدار و اختلاط مناسب سوخت و اکسیدکننده در داخل محفظه احتراق، یکی از

از جریان چرخشی برای افزایش پایداری شعله و افزایش نرخ اختلاط سوخت و اکسیدکننده استفاده می‌شود [۳]. به دلیل وجود گردابه‌ها در ناحیه برگشتی در شعله‌های انتشاری چرخشی، شاهد افزایش نرخ اختلاط سوخت و اکسیدکننده، افزایش زمان اقامت، افزایش پایداری، افزایش راندمان فرآیند احتراق و کاهش تشکیل آلاینده‌ها در شعله هستیم [۳، ۱۰-۱۵]. از شعله‌های انتشاری چرخشی می‌توان در کاربردهای صنعتی همچون توربوماشین‌ها، موتورهای احتراق داخلی بنزینی و دیزلی، سیستم‌های پیش‌ران با سوخت مایع، موتورهای هوایی، انواع کوره‌های صنعتی، کارخانه‌های فرآوری شیمیایی، خشک‌کن‌ها و بویلرها استفاده کرد [۷-۹، ۴-۱۵].

یکی از رویکردهای موجود برای بررسی ساختار جریان سیال در مشعل‌ها، استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی [۳، ۵-۱۰، ۱۳-۱۶] است. هنگام استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی، می‌توان جریان سیال غیر واکنشی را در مشعل مورد بررسی قرار داد [۴، ۱۲]. هدف از شبیه‌سازی جریان سیال غیر واکنشی، به دست آوردن اثرات هندسی و هیدرودینامیکی خالص خود مشعل بدون در نظر گرفتن اثرات ثانویه احتراق بر ساختار داخلی جریان سیال در مشعل است [۴، ۱۰، ۱۲، ۱۶]. همچنین، برای در نظر گرفتن همزمان اثرات هندسی، هیدرودینامیکی و اثرات متقابل فرآیند احتراق بر ساختار جریان شعله، می‌توان از شبیه‌سازی‌های عددی همراه با جریان سیال واکنش‌پذیر استفاده کرد [۱۰-۱۳، ۱۶-۱۳].

در [۱۱]، برای پیش‌بینی توزیع دما در ساختار مشعل SM1، از یادگیری ماشین و از پایگاه داده به دست آمده از شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی مشعل SM1 استفاده شده است. شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از مدل احتراقی فلیملت آرام پایا (SLFM) و مدل آشفستگی $k - \omega SST$ انجام شده‌اند. در این مقاله، مکانیزم شیمیایی مورد استفاده برای انجام فرآیند احتراق متان بیان نشده است.

در [۱۷]، ساختار جریان سیال در مشعل سه بعدی SM1 با استفاده از دو مدل آشفستگی $k - \varepsilon RNG$ و $k - \omega SST$ به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج حل عددی نسبت به داده‌های آزمایشگاهی و نتایج حاصل از مدل آشفستگی شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) مقایسه شده است. برای

انجام فرآیند احتراق در این پژوهش از مدل احتراقی فلیملت پایای انتشاری به همراه مکانیزم شیمیایی GRI Mech 3.0 استفاده شده است. علت استفاده از این مکانیزم شیمیایی، در این مقاله بیان نشده است و اثر به کارگیری سایر مکانیزم‌های شیمیایی مربوط به احتراق گاز طبیعی در این مقاله مورد بررسی قرار نگرفته است.

در [۱۸]، جریان سیال واکنش‌پذیر در مشعل SM1 و مشعل Sandia D با استفاده از مدل آشفستگی LES و مدل احتراقی Flamelet-Progress-Variable (FPV) مورد بررسی قرار گرفته است و کارایی این مدل احتراقی بر توزیع جریان سیال و توزیع گونه‌های شیمیایی مورد بررسی قرار گرفته است. برای بررسی فرآیند احتراق، از مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11 در این پژوهش استفاده شده است؛ اما اثر به کارگیری انواع مکانیزم‌های شیمیایی مختلف مورد بررسی قرار نگرفته است.

در [۱۹]، اثر به کارگیری مدل‌های آشفستگی مختلف از جمله مدل‌های آشفستگی مبتنی بر معادلات ناویر-استوکس متوسط رینولدزی (RANS)، LES و مدل‌های ترکیبی RANS/LES بر نتایج حل عددی مشعل‌های چرخشی SM1 و SMA2 مورد بررسی قرار گرفته است. در این پژوهش، از مدل احتراقی SLFM و از مکانیزم شیمیایی با ۳۰ گونه شیمیایی و ۱۸۴ واکنش شیمیایی استفاده شده است که این مکانیزم شیمیایی بر اساس مکانیزم GRI Mech 3.0 است. هدف این مقاله، صرفاً به استفاده از مدل‌های آشفستگی مختلف متمرکز بوده است و به اثرات انواع مکانیزم‌های شیمیایی مختلف با تعداد گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی مختلف توجهی نشده است.

در [۲۰]، اثر اضافه کردن هیدروژن به سوخت متان در شعله چرخشی SM1 به صورت عددی در نرم‌افزار اوپن‌فوم مورد بررسی قرار گرفته است. در این مقاله، از مدل‌های آشفستگی $k - \varepsilon$ ، $k - \omega SAS$ و $k - \omega SST$ استفاده شده است. در این مقاله، از مکانیزم شیمیایی GRI Mech 3.0 برای انجام فرآیند احتراق استفاده شده است؛ اما علت استفاده از این مکانیزم در این مقاله بیان نشده است.

علاوه بر اهمیت مدل‌های آشفته‌گی برای مدل‌سازی ویژگی‌های فیزیکی جریان در ساختار مشعل، نحوه مدل‌سازی فرآیند احتراق یا به عبارتی دیگر، نحوه مدل‌سازی تعامل بین آشفته‌گی و شیمی نیز مهم است [۱۹]. به همین منظور، برای بررسی عددی جریان واکنش‌پذیر در مشعل‌های غیر پیش‌آمیخته از جمله مشعل SM1، می‌توان از مدل‌های احتراقی مختلفی استفاده کرد که شامل مدل اختلاط گردابه‌های خطی (LEM) [۳، ۴] و مدل فلیمت آرام پایا (SLFM) [۱۰، ۱۴، ۱۶] است. استفاده از دو مدل مذکور، تطابق خوبی بین نتایج شبیه‌سازی‌های عددی مشعل‌های غیر پیش‌آمیخته و داده‌های آزمایشگاهی مربوطه نشان می‌دهند. با توجه به دقت مدل احتراقی SLFM در مطالعات پیشین، در این پژوهش نیز از این مدل احتراقی استفاده خواهد شد.

برای مدل‌سازی جریان واکنش‌پذیر در یک مشعل، علاوه بر اهمیت بالای مدل آشفته‌گی و مدل احتراقی مورد استفاده، نوع مکانیزم شیمیایی مورد استفاده نیز از اهمیت بالایی برخوردار است [۱۹]. به همین دلیل، مقالات مختلف، از مکانیزم‌های شیمیایی مختلفی استفاده کرده‌اند. برای انجام فرآیند احتراق متان و هوا در شبیه‌سازی‌های عددی مشعل‌های غیر پیش‌آمیخته، می‌توان از مکانیزم‌های شیمیایی تک مرحله‌ای [۳، ۴] و چند مرحله‌ای [۶، ۱۴، ۱۶، ۱۸، ۲۰] استفاده کرد. مکانیزم‌های شیمیایی چند مرحله‌ای احتراق متان و هوا، مکانیزم‌های دقیق‌تر و پیچیده‌تر هستند که شامل واکنش‌های میانی و گونه‌های شیمیایی مختلف هستند. از جمله مکانیزم‌های شیمیایی چند مرحله‌ای استفاده شده در مطالعات پیشین، می‌توان به مکانیزم DRM-19 با ۱۹ گونه شیمیایی و ۸۴ واکنش شیمیایی [۶]، مکانیزم GRI Mech 2.11 با ۴۹ گونه و ۲۷۷ واکنش شیمیایی [۱۴، ۱۸]، مکانیزم GRI Mech 3.0 با ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش شیمیایی [۱۷، ۲۰] و مکانیزمی با ۹۷ گونه و ۶۲۹ واکنش شیمیایی [۱۶] اشاره کرد.

در مقالات بررسی شده، علت استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف برای مدل‌سازی مشعل SM1 بیان نشده است و انتخاب

مکانیزم‌های شیمیایی بیان شده در فوق، صرفاً یک فرض اولیه و در بعضی مواقع ساده‌کننده محسوب می‌شود. به همین دلیل، در این پژوهش قصد داریم تا اثر به کارگیری مکانیزم‌های شیمیایی مختلف (مکانیزم شیمیایی سری GRI Mech و مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای) بر ساختار مشعل SM1 و توزیع گونه‌های شیمیایی اصلی به صورت عددی مورد بررسی قرار گیرد. به همین دلیل، در این پژوهش، تاثیر استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف با تعداد گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی مختلف مورد بررسی قرار خواهد گرفت. در فرآیند احتراق صنعتی و آزمایشگاهی، مسئله آلودگی محیط زیست به دلیل احتراق سوخت‌های فسیلی، باعث شده است که مهندسان و محققان به دنبال راه‌حلی برای افزایش راندمان فرآیند احتراق و کاهش آلاینده‌های زیست محیطی احتراق باشند. به همین دلیل، بررسی عملکرد انواع مکانیزم‌های شیمیایی احتراق سوخت‌های فسیلی، اهمیت بسیار زیادی دارد. به همین دلیل، استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف می‌تواند به عنوان راهکاری مؤثر برای بهبود راندمان فرآیند احتراق و کاهش تولید آلاینده‌های زیست محیطی مورد توجه قرار گیرد.

در بخش‌های بعدی، ابتدا هندسه مشعل SM1 به همراه شرایط عملکردی آن به تفصیل شرح داده خواهد شد. سپس در بخش ۳، معادلات حاکم بر مسئله برای انجام شبیه‌سازی عددی جریان سیال واکنش‌پذیر در مشعل SM1 همراه با مدل احتراق SLFM ارائه خواهد شد. در بخش ۴، شرایط مرزی، شبکه محاسباتی و روش حل عددی مورد استفاده بیان خواهد شد. در بخش ۵، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی مشعل SM1 با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف تحلیل خواهد شد. سرانجام، در بخش ۶، یافته‌های این پژوهش جمع‌بندی شده و پیشنهادهایی برای تحقیقات آینده و توسعه دانش در حوزه احتراق مشعل SM1 مطرح خواهد شد.

۲. تشریح هندسه و شرایط عملکردی

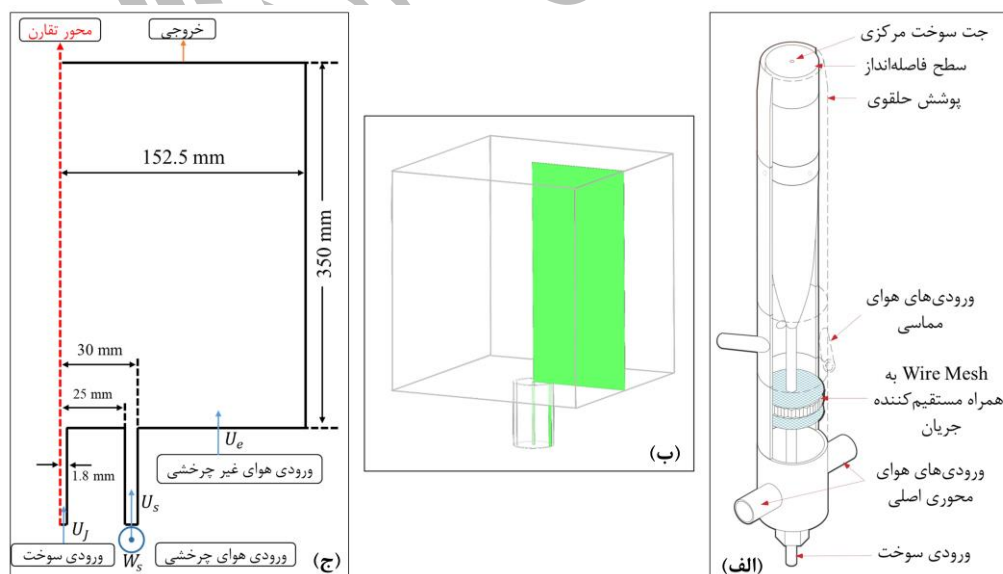
مشعل مشعل SM1

شکل ۱، پیکربندی مشعل چرخشی غیرپیش‌آمیخته دانشگاه سیدنی [۲۱] را برای مشعل SM1 به تصویر می‌کشد که شامل ناحیه محاسباتی هم در حالت سه بعدی و هم دو بعدی است. شکل ۱ (الف) نشان می‌دهد که دو مجرای ورودی با قطر ۲۵

محفظه احتراق، دارای سطح مقطعی مربعی با اندازه $305 \text{ mm} \times 305 \text{ mm}$ است [۵-۳، ۸، ۹، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۲۱].

مطابق با شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده در [۲۲]، مشاهده شده است که طول ناحیه محاسباتی در بالادست صفحه فاصله‌انداز، بر نتایج شبیه‌سازی عددی اثر مستقیم دارد. با اعمال این طول در بالادست سطح فاصله‌انداز، تطابق بیشتری بین نتایج حل عددی و داده‌های تجربی مشاهده می‌شود. به همین دلیل، مطابق با نتایج به دست آمده از [۲۲]، طول ناحیه در بالادست صفحه فاصله‌انداز برای اعمال ورودی سوخت و ورودی هوای چرخشی، 100 میلی‌متر ($2D_b$) در نظر گرفته می‌شود. مطابق با شکل ۱ (ج)، طول محفظه احتراق مشعل SM1 در پایین‌دست صفحه فاصله‌انداز برابر با 350 میلی‌متر ($7D_b$) در نظر گرفته می‌شود. شرایط کارکرد مشعل SM1 به صورت کامل در جدول ۱ بیان شده است. دبی جرمی هوای چرخشی عبوری از حلقه هوای اصلی با مقدار سرعت توده محوری U_s رابطه مستقیم و خطی دارد. عدد رینولدز هوای چرخشی در حلقه با استفاده از سرعت مشخصه U_s ، طول مشخصه R_s و خواص فیزیکی هوا در دمای ورودی 300 کلین، برابر با $Re_s \approx 73108$ است [۸، ۱۲]. عدد رینولدز در ورودی پورت سوخت با استفاده از طول مشخصه D_b ، سرعت مشخصه U_f و خواص فیزیکی گاز متان در دمای 300 کلین برابر با $Re_f = 6811.5$ است.

میلی‌متر در فاصله تقریبی 450 میلی‌متری از صفحه فاصله‌انداز نصب شده‌اند که وظیفه تأمین هوای محوری اصلی را در این مشعل بر عهده دارند. بالاتر از این دو مجرای ورودی، Wire Mesh به همراه مستقیم‌کننده جریان در داخل ساختار مشعل جانمایی شده است تا با عبور جریان محوری از آن، جریان یکنواختی ایجاد شود. برای ایجاد چرخش در ساختار جریان هوای عبوری از مشعل، سه ورودی هوای مماسی با قطر 7 میلی‌متر و با زاویه 15° درجه نسبت به خط افق، در سرتاسر محیط مشعل در فاصله‌ای 300 میلی‌متری از صفحه فاصله‌انداز تعبیه شده است [۲۱]. شکل ۱، مشخصات هندسی مشعل SM1 را نشان می‌دهد که شامل یک صفحه فاصله‌انداز با قطر 50 میلی‌متر ($D_b = 2R_b$) است. در مرکز صفحه سرامیکی فاصله‌انداز، یک مجرای ورود سوخت با قطر 3.6 میلی‌متر ($D_f = 2R_f$) وجود دارد که وظیفه انتقال گاز متان خالص به درون محفظه احتراق را بر عهده دارد. در اطراف صفحه فاصله‌انداز، یک حلقه با قطر داخلی 50 میلی‌متر و قطر خارجی 60 میلی‌متر ($D_s = 2R_s$) تعبیه شده است. این حلقه به عنوان مسیر ورودی جریان هوای چرخشی به داخل محفظه احتراق عمل می‌کند که سیال عامل با مولفه سرعت محوری U_s و مولفه سرعت چرخشی W_s به داخل محفظه احتراق وارد می‌شود. در اطراف حلقه‌ی جریان هوای چرخشی، جریان هوای ثانویه به صورت غیر چرخشی و با سرعت محوری U_e همراه با سطح آشفته‌ی جریان آزاد I_e وارد محفظه احتراق می‌گردد.



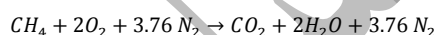
شکل ۱ (الف) هندسه سه بعدی مشعل دانشگاه سیدنی [۲۱]، (ب) هندسه سه بعدی محفظه احتراق همراه با مشعل و (د) ناحیه محاسباتی دو بعدی: تصویر بزرگ شده از ناحیه سبز رنگ در هندسه سه بعدی محفظه احتراق

جدول ۱ مشخصات عملکردی شعله SM1 مطابق با شکل ۱

نام شعله	شعله SM1
نوع سوخت	گاز متان خالص
$U_I (m/s)$	۳۲٫۷
$U_s (m/s)$	۳۸٫۲
$W_s (m/s)$	۱۹٫۱
$U_e (m/s)$	۲۰
$I_e (\%)$	۲

اثرات غیرآدیاباتیک جهت تحلیل رفتار شعله SM1 به کار گرفته شده است. هنگام استفاده از معادلات مدل احتراقی SLFM، عدد لوئیس برابر با یک در نظر گرفته می‌شود. رویکردهای مختلفی برای حل معادلات مدل احتراقی SLFM (معادله جزء مخلوط و واریانس آن) و ایجاد تعامل بین شیمی جریان و آشفتنی وجود دارد که یکی از این رویکردها، استفاده از تابع چگالی احتمال (PDF) است. در رویکرد حل PDF، فرض می‌شود که جزء مخلوط از رابطه تابع چگالی احتمال تابع بتا پیروی می‌کند. برای اختصار، جزئیات کامل معادلات حاکم بر مسئله و تشریح دقیق آن‌ها در قسمت ضمیمه ارائه شده است.

در پژوهش حاضر از مکانیزم‌های GRI Mech 1.2 [۲۴]، GRI Mech 2.11 [۲۵]، GRI Mech 3.0 [۲۶] و واکنش تک مرحله‌ای [۲۷] احتراق گاز متان خالص با هوا استفاده شده است. مکانیزم‌های شیمیایی GRI Mech 1.2، ۲٫۱۱ و ۳٫۰ به ترتیب دارای ۳۲، ۴۹ و ۵۳ گونه شیمیایی و به ترتیب دارای ۱۷۵، ۲۷۷ و ۳۲۵ واکنش شیمیایی هستند [۲۶-۲۴]. مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا نیز دارای ۵ گونه شیمیایی و یک واکنش شیمیایی برگشت‌ناپذیر است. واکنش شیمیایی تک مرحله‌ای مطابق با رابطه (۱) بیان می‌شود که شامل گونه‌های شیمیایی CH_4 ، O_2 ، N_2 و H_2O است [۲۷]. نرخ‌های واکنش شیمیایی احتراق گاز متان در مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI Mech و مکانیزم تک مرحله‌ای، بر اساس معادله آرنیوس بیان می‌شود. معادله آرنیوس، بیانگر نرخ واکنش شیمیایی وابسته به دما است که مطابق با رابطه (۲) قابل بیان است [۲۷].



$$A_r = 10^{12} \quad ; \quad \beta_r = 0 \quad ; \quad E_r = 10^8 \frac{J}{kg \text{ mol}} \quad \text{رابطه (۱)}$$

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) \quad \text{رابطه (۲)}$$

در معادله آرنیوس، کمیت $k_{f,r}$ بیانگر نرخ واکنش شیمیایی رو به جلو واکنش r ، A_r بیانگر عامل پیش‌نمایی، کمیت T بیانگر دما، کمیت β_r بیانگر توان دما (بدون بعد)، کمیت E_r بیانگر انرژی فعالسازی واکنش شیمیایی r و R بیانگر ثابت جهانی گازها است [۲۷]. اطلاعات مربوط به نرخ‌های واکنش شیمیایی بر اساس معادله آرنیوس برای مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI Mech در مراجع [۲۶-۲۴] به صورت مفصل بیان شده است.

بر اساس ابعاد هندسی مشعل SM1، نسبت انسداد (BR) که از رابطه $BR = \frac{(2R_B)^2}{(2R_S)^2}$ محاسبه می‌شود، مقدار ۰٫۶۹ را نشان می‌دهد. در تعریف کمیت نسبت انسداد، پارامتر R_B و R_S به ترتیب بیانگر شعاع فاصله‌انداز و شعاع خارجی حلقه جریان هوای چرخشی است [۴، ۸]. نسبت انسداد (BR) تأثیر مستقیمی بر مشخصات جریان و پایداری شعله دارد؛ به طوری که افزایش این کمیت، منجر به افزایش طول ناحیه چرخشی در ناحیه پایین‌دست صفحه فاصله‌انداز می‌شود [۱۵]. عدد چرخش هندسی برای مشعل SM1 برابر با ۰٫۵ است که این کمیت، به صورت رابطه $S_g = \frac{W_s}{U_s}$ تعریف می‌شود [۶-۴، ۸، ۹، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۲۱]. شعله SM1 دارای طول قابل مشاهده معادل با ۰٫۱۲ متر است. همچنین، میزان حرارت تولید شده از احتراق گاز متان خالص در شرایط عملکردی این شعله، حدود ۱۱٫۱ کیلووات برآورد شده است [۳، ۸، ۹، ۲۱].

۳- معادلات حاکم بر مساله

برای انجام شبیه‌سازی عددی جریان سیال واکنش‌پذیر در شعله SM1، از معادلات ناویر-استوکس متوسط رینولدزی (RANS) به عنوان معادلات بقای جرم و مومنوم استفاده شده است. برای حل عددی جریان سیال، فرض می‌شود که جریان سیال، تراکم‌ناپذیر و پایا است [۲۳]. در این مطالعه، از گاز متان خالص به عنوان سوخت و از هوا به عنوان اکسیدکننده استفاده شده است. سیال عامل به صورت نیوتنی و تک‌فاز مدلسازی شده است [۴]. در این تحقیق، جریان آشفته با استفاده از مدل $k - \epsilon$ استاندارد مدلسازی شده است. همچنین، فرآیند احتراق با به‌کارگیری مدل فلیملت آرام پایا (SLFM) با در نظر گرفتن

ضرایب معادله آرنیوس برای واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا، در رابطه (۱) بیان شده است [۲۷].

۴- فرآیند حل عددی

برای بررسی بهتر و عمیق‌تر، شرایط مرزی هیدرودینامیکی مختلفی در ورودی سوخت و ورودی هوای چرخشی بررسی شده است. در جدول ۲، پروفیل‌های سرعت مختلف اعمال شده در ورودی‌های هوای چرخشی و سوخت نشان داده شده است. مطابق با جدول ۲، دو نوع پروفیل سرعت مختلف در نظر گرفته شده است که شامل پروفیل سرعت توانی [۵، ۱۰، ۱۴] و پروفیل یکنواخت با سرعت ثابت است. در پروفیل سرعت توانی بیان شده در جدول ۲ برای ورودی سوخت، پارامتر U_j بیانگر سرعت توده محوری جت سوخت، پارامتر r بیانگر فاصله از محور جت سوخت و پارامتر R_j بیانگر شعاع حفره ورودی سوخت است [۵، ۱۰، ۱۴]. در پروفیل توانی مربوط به سرعت هوای چرخشی، کمیت U_s بیانگر سرعت محوری و کمیت W_s بیانگر سرعت چرخشی هوای چرخشی است. در پروفیل سرعت هوای چرخشی، کمیت $0.5 t_s$ بیانگر اندازه فاصله محور حلقه هوای چرخشی تا شعاع خارجی حلقه است که کمیت t_s نشان‌دهنده ضخامت حلقه هوای

چرخشی است. در پروفیل سرعت هوای چرخشی، پارامتر r بیانگر فاصله از مرکز حلقه تا دیواره‌های کناری آن است [۵، ۱۰، ۱۴]. لازم به ذکر است که برای داشتن بیشترین تطابق با شرایط آزمایشی شعله SM1، از داده‌های اندازه‌گیری شده با Hot Wire در آزمایشگاه دانشگاه سیدنی برای پروفیل جریان هوای غیر چرخشی، استفاده شده است [۸، ۲۱]. در مرزهای مربوط به ورودی سیال به داخل ناحیه محاسباتی در شعله SM1، شرط مرزی آشفتگی به صورت شدت آشفتگی و قطر هیدرولیکی در نظر گرفته شده است. مطابق با مرجع [۲۱] و جدول ۱، شدت آشفتگی هوای غیر چرخشی برابر با ۲ درصد در نظر گرفته شده است. مقدار قطر هیدرولیکی قسمت هوای غیر چرخشی برابر با ۰،۲۴۵ متر در نظر گرفته شده است. شدت آشفتگی هوای چرخشی و ورودی سوخت نیز نزدیک به شدت آشفتگی هوای غیر چرخشی به دست آمده از داده‌های تجربی در نظر گرفته شده است که شدت آشفتگی این دو ورودی برابر با ۱ درصد در نظر گرفته شده است. قطر هیدرولیکی ورودی هوای چرخشی و ورودی سوخت نیز به ترتیب برابر با ۰،۰۱ متر و ۰،۰۰۳۶ متر در نظر گرفته شده است.

جدول ۲، حالت‌های مختلف در نظر گرفته شده به عنوان پروفیل سرعت ورودی سوخت، ورودی هوای چرخشی و ورودی هوای غیر چرخشی

شماره حالت	جت سوخت محوری	هوای چرخشی	هوای غیر چرخشی
Case A	$U = 1.218 U_j \left(1 - \frac{r}{1.01 R_j}\right)^{\frac{1}{7}}$	$V_{Axial} = 1.218 U_s \left(1 - \frac{r}{1.01(0.5 t_s)}\right)^{\frac{1}{7}}$ $V_{Tangential} = 1.218 W_s \left(1 - \frac{r}{1.01(0.5 t_s)}\right)^{\frac{1}{7}}$ $t_s \equiv$ ضخامت رینگ هوای چرخشی $t_s = 5 \text{ mm}$	
Case B	پروفایل یکنواخت $U_j = 32.7 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	پروفایل یکنواخت $U_s = 38.2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ $W_s = 19.1 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	
Case C	$U = 1.218 U_j \left(1 - \frac{r}{1.01 R_j}\right)^{\frac{1}{7}}$	پروفایل یکنواخت $U_s = 38.2 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ $W_s = 19.1 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	
Case D	پروفایل یکنواخت $U_j = 32.7 \frac{\text{m}}{\text{s}}$	$V_{Axial} = 1.218 U_s \left(1 - \frac{r}{1.01(0.5 t_s)}\right)^{\frac{1}{7}}$ $V_{Tangential} = 1.218 W_s \left(1 - \frac{r}{1.01(0.5 t_s)}\right)^{\frac{1}{7}}$	

داده آزمایشگاهی [۲۱]

	ضخامت رینگ هوای چرخشی $t_s \equiv$	
	$t_s = 5 \text{ mm}$	

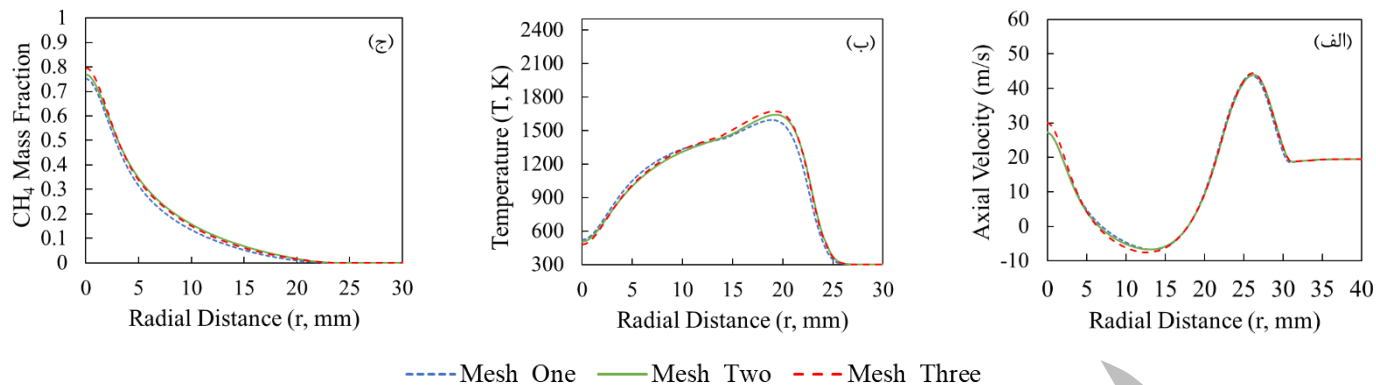
فرآیند استقلال از شبکه، کمیت‌های مختلفی همچون مقدار متوسط سرعت در فاصله ۴۰ میلی‌متری از سطح فاصله‌انداز، مقدار متوسط دما و مقدار متوسط جزء جرمی متان (Y_{CH_4}) در خروجی ناحیه محاسباتی در نظر گرفته شده‌اند. نتایج تحلیل استقلال از شبکه در جدول ۳ ارائه شده است که مقادیر محاسبه‌شده برای کمیت‌های کلیدی و درصد اختلاف آن‌ها بین شبکه‌های محاسباتی مختلف را نشان می‌دهد. همچنین، در شکل ۲، توزیع سرعت محوری، دما و توزیع جزء جرمی متان بر حسب فاصله شعاعی در فاصله محوری ۲۰ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز برای شبکه‌های محاسباتی مختلف نشان داده شده است. با توجه به داده‌های بیان شده در جدول ۳، اختلاف نتایج بین شبکه‌های محاسباتی شماره ۲ و ۳، حداکثر ۱٫۱٪ است. مطابق با شکل ۲ نیز، اختلاف بین توزیع سرعت محوری، دما و جزء جرمی متان در شبکه‌های محاسباتی تولید شده نسبت به یکدیگر بسیار کم می‌باشد. به همین دلیل، شبکه محاسباتی شماره ۲ به عنوان شبکه نهایی برای انجام تمامی شبیه‌سازی‌های عددی برگزیده می‌شود. این موضوع نشان‌دهنده این است که نتایج به دست آمده از شبکه محاسباتی شماره ۲، نسبت به شبکه محاسباتی مستقل هستند و با ریز کردن بیشتر شبکه محاسباتی، نتایج متفاوت‌تری به دست نخواهد آمد.

جدول ۳ شبکه‌های محاسباتی در نظر گرفته شده برای انجام فرآیند استقلال از شبکه

نام کمیت	شماره شبکه محاسباتی	شبکه محاسباتی شماره ۱	شبکه محاسباتی شماره ۲	شبکه محاسباتی شماره ۳
تعداد المان		۷۲۴۰۰۷	۱۲۷۸۱۰۷	۲۴۳۴۲۹۸
متوسط مقدار سرعت (m/s) در فاصله محوری ۴۰ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله‌انداز		۱۹٫۷۵۹	۱۹٫۸۵۲	۱۹٫۷۹۶
درصد اختلاف		**	۰٫۴۷۰	-۰٫۲۷۹
متوسط مقدار دما (K) در خروجی		۳۰۷٫۲۵	۳۰۷٫۱۰	۳۰۶٫۹۸
درصد اختلاف		**	-۰٫۰۴۷	-۰٫۰۴۰
متوسط مقدار Y_{CH_4} در خروجی		6.94×10^{-25}	5.92×10^{-25}	5.85×10^{-25}
درصد اختلاف		**	-۱۴٫۷۵	-۱٫۰۷۹

برای انجام شبیه‌سازی عددی جریان واکنشی شعله SM1، علاوه بر شرط مرزی هیدرودینامیکی، به شرط مرزی حرارتی نیز نیاز است. دمای ورودی سوخت، ورودی هوای چرخشی و هوای غیر چرخشی به صورت یکنواخت و برابر با ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته می‌شود. سوخت مورد استفاده در این پژوهش، گاز متان خالص است. اکسیدکننده سوخت، هوا با ۲۱ درصد اکسیژن و ۷۹ درصد نیتروژن در نظر گرفته شده است. از لحاظ هیدرودینامیکی، شرط عدم لغزش بر روی تمامی دیواره‌های مشعل SM1 اعمال می‌شود و از لحاظ حرارتی نیز، دیواره‌ها عایق در نظر گرفته می‌شوند. در خروجی ناحیه محاسباتی، شرط انتشار صفر در نظر گرفته می‌شود.

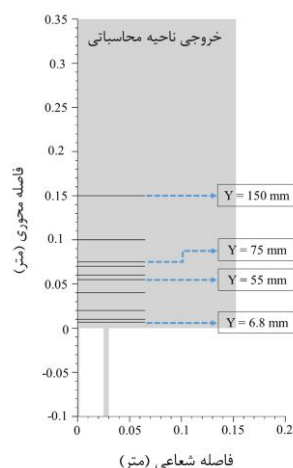
برای انجام شبیه‌سازی جریان واکنش‌پذیر شعله SM1، سه شبکه محاسباتی مختلف ایجاد شده است. شبکه‌های محاسباتی به صورت شبکه مثلثی با توزیع غیر یکنواخت با اندازه المان‌های متفاوت ایجاد شده است. در شبکه‌های محاسباتی ایجاد شده، در نواحی نزدیک به دیواره‌ها از مش لایه مرزی استفاده شده است. برای بررسی فرآیند استقلال از شبکه، جریان واکنش‌پذیر شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11 شبیه‌سازی شده است. برای تعیین شبکه محاسباتی نهایی و انجام



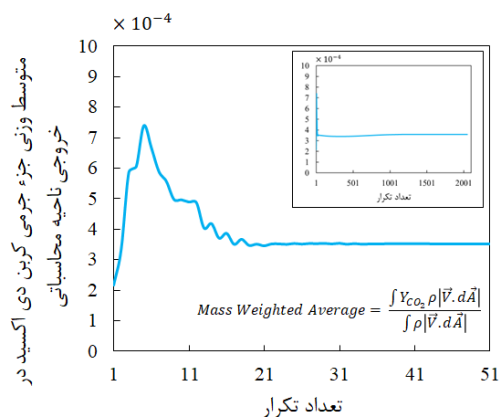
شکل ۲، بررسی تغییرات کمیت‌های مختلف در شبکه‌های محاسباتی مختلف برای بررسی فرآیند استقلال از شبکه محاسباتی، (الف) توزیع سرعت محوری، (ب) توزیع دما، (ج) توزیع جزء جرمی متان

معادلات حاکم بر مساله، با استفاده از روش عددی حجم محدود با رویکردی مبتنی بر فشار حل می‌شوند. برای انجام حل عددی معادلات حاکم بر مساله، از نرم‌افزار انسیس فلونت نسخه 2021 R2 استفاده شده است. در روش حجم محدود استفاده شده، معادلات حاکم بر مساله به صورت پایا و با رویکردی مبتنی بر تکرار حل می‌شوند. برای ایجاد تعامل بین سرعت و فشار در معادلات حاکم بر مساله از رویکرد Coupled استفاده می‌شود. برای گسسته‌سازی پارامترهای فشار، مومنتوم، انرژی جنبشی آشفتگی، نرخ اضمحلال آشفتگی، معادله انرژی، جزء مخلوط متوسط و واریانس آن از روش مرتبه دوم بالادست استفاده شده است. تابع دیواره در نظر گرفته شده در این پژوهش، Non

Equilibrium Wall Function است. برای اطمینان از همگرایی شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده، دو معیار اصلی در نظر گرفته می‌شود که شامل در نظر گرفتن تمامی باقی‌مانده‌های کمیت‌ها در مرتبه 10^{-6} و استفاده از متوسط جرمی جزء جرمی کربن دی اکسید (Y_{CO_2}) در خروجی محفظه احتراق است. در شکل ۳ (الف)، میزان تغییرات کمیت Y_{CO_2} بر حسب تکرار نشان داده شده است. با پیشروی حل عددی، مشاهده می‌شود که میزان تغییرات کمیت Y_{CO_2} در تکرارهای آخر شبیه‌سازی ثابت بوده است. این موضوع نشان‌دهنده همگرایی شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده است.



(ب)



(الف)

شکل ۳ (الف) نمودار متوسط جرمی جزء جرمی کربن دی اکسید (Y_{CO_2}) در خروجی ناحیه محاسباتی بر حسب تکرار، به دست آمده از شبیه‌سازی فرآیند احتراق شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11، (ب) فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز برای نمایش توزیع کمیت‌های مختلف

۵- نتایج و بحث

۵-۱- اثر حالت‌های مختلف پروفیل سرعت ورودی هوای

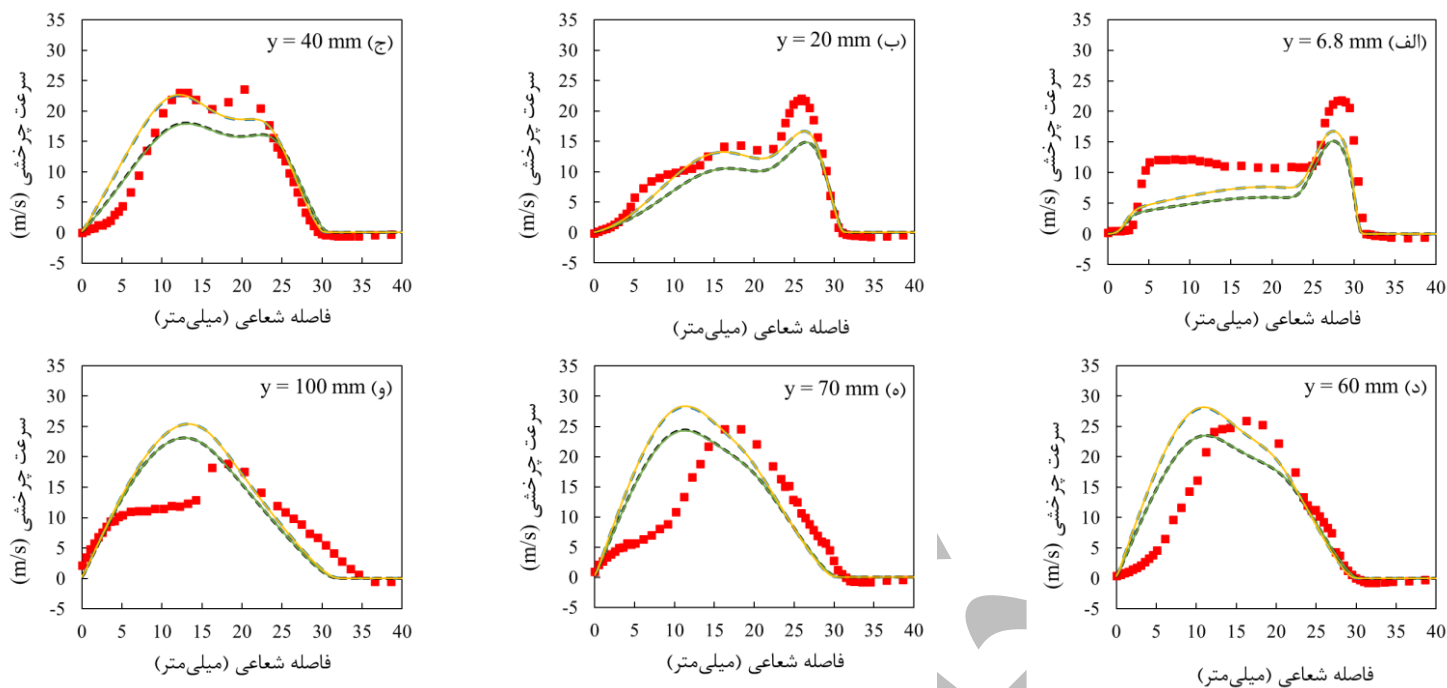
چرخشی و جت سوخت بر احتراق گاز متان در شعله

SM1

در این بخش به بیان نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی احتراق گاز متان در شعله SM1 با تغییر پروفیل سرعت ورودی جت سوخت و هوای چرخشی پرداخته می‌شود. چهار کمیت اثرگذار بر ساختار شعله SM1 عبارتند از: سرعت توده جت سوخت (U_j)، سرعت محوری هوای چرخشی (U_s)، سرعت مماسی هوای چرخشی (W_s) و سرعت متوسط جریان هوای غیر چرخشی (U_e) [۵، ۱۰-۱۶]. برای سرعت ورودی جت سوخت و هوای چرخشی، چهار حالت متفاوت مطابق با جدول ۲ در نظر گرفته شده است. در حالت اول (Case A)، پروفیل سرعت توانی هم به ورودی جت سوخت و هم به ورودی هوای چرخشی اعمال می‌شود. در حالت دوم (Case B)، پروفیل سرعت ثابت به هر دو ورودی جت سوخت و هوای چرخشی اعمال می‌شود. در حالت سوم (Case C)، پروفیل سرعت توانی به ورودی جت سوخت و پروفیل سرعت ثابت به ورودی هوای چرخشی اعمال می‌شود. در حالت آخر (Case D)، پروفیل سرعت ثابت به ورودی جت سوخت و پروفیل سرعت توانی به ورودی هوای چرخشی اعمال می‌شود.

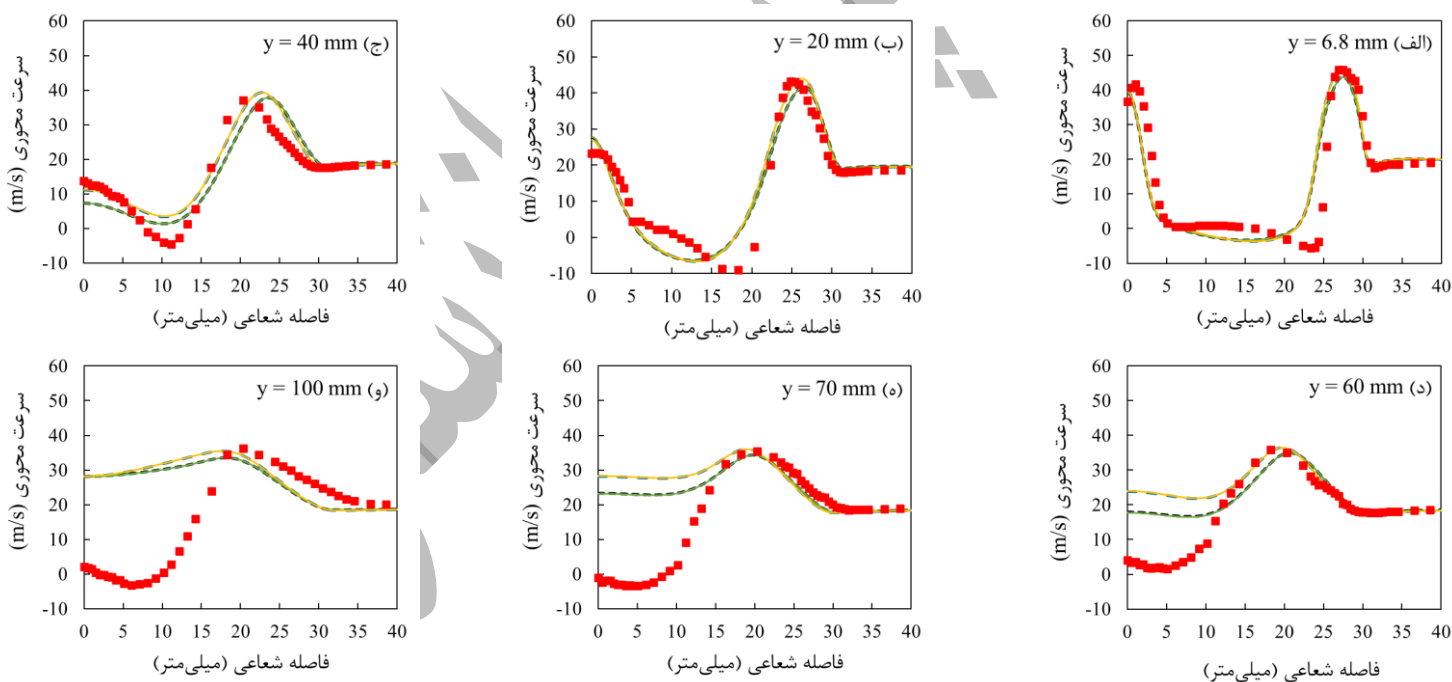
در شکل ۴، ۵ و ۶ به ترتیب، توزیع سرعت چرخشی، توزیع سرعت محوری و توزیع جزء جرمی بخار آب (Y_{H_2O}) در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز برای حالت‌های مختلف پروفیل سرعت ورودی سوخت و هوای چرخشی نشان داده شده است. همچنین در این نمودارها، داده‌های تجربی به دست آمده از احتراق شعله SM1 نیز نشان داده شده است [۲۱]. فواصل محوری مورد نظر برای ترسیم توزیع کمیت‌های مختلف بر حسب فاصله شعاعی در شکل ۳ (ب) نشان داده شده است. با توجه به تمامی نمودارهای نشان داده شده در شکل ۴ الی ۶، مشاهده می‌شود که نتایج حالت "Case A: Both 1/7 Profile" و حالت "Case D: Swirl Air 1/7 Profile" بر روی هم منطبق

شده‌اند. همچنین نتایج مربوط به حالت "Case B: Both Uniform Profile" بر روی نتایج مربوط به حالت "Case C: Fuel Jet 1/7 Profile" منطبق شده‌اند. این موضوع نشان می‌دهد که اگر تنها از پروفیل جریان توسعه‌یافته برای هوای چرخشی در ورودی استفاده شود، نتایج یکسانی با حالتی به دست می‌آید که پروفیل توانی هم در ورودی سوخت و هم در ورودی هوای چرخشی اعمال شود. به عبارت دیگر، شکل پروفیل ورودی جت سوخت بر روی ساختار جریان شعله SM1 تاثیر قابل ملاحظه‌ای نمی‌گذارد. علت این موضوع، می‌تواند ناشی از هندسه ورودی هوای چرخشی و سوخت باشد؛ زیرا هوای چرخشی از داخل یک حلقه با قطر داخلی و خارجی مشخص عبور می‌کند؛ در صورتی که سوخت از داخل یک لوله عبور می‌کند. حلقوی بودن مسیر هوای چرخشی باعث شده است تا تاثیر بیشتری نسبت به ورودی سوخت بر ساختار جریان شعله SM1 بگذارد. علاوه بر این نکته، وقتی از سرعت ثابت در ورودی هوای چرخشی و ورودی جت سوخت استفاده شود، نتایج یکسانی با حالتی به دست می‌آید که تنها از پروفیل توانی در ورودی سوخت استفاده شود. با مقایسه نمودارهای ارائه شده در شکل‌های ۴ الی ۶، می‌توان نتیجه گرفت که با استفاده از پروفیل توانی در ورودی سوخت و هوای چرخشی (Case A)، می‌توان نتایج مناسب‌تری نسبت به سه حالت دیگر به دست آورد. هر چند در بعضی فواصل محوری، عکس این موضوع صادق می‌باشد؛ ولی اختلاف مابین نتایج با حالت "Case A: Both 1/7 Profile" نسبت به حالت "Case B: Both Uniform Profile" آنچنان زیاد نمی‌باشد که از تطابق بهتر حالت Case A در سایر فواصل محوری صرف نظر شود. به عنوان نتیجه نهایی باید گفت که برای تطابق بیشتر شرایط مرزی با شرایط آزمایشگاهی، باید حتماً پروفیل جریان توسعه‌یافته (مانند پروفیل توانی) برای ورودی هوای چرخشی در نظر گرفته شود. در نظر گرفتن پروفیل جریان توسعه‌یافته برای ورودی جت سوخت، تاثیر قابل ملاحظه‌ای نمی‌گذارد؛ اما توصیه می‌شود که توزیع جریان ورودی سوخت به داخل محفظه احتراق نیز توسعه یافته در نظر گرفته شود.



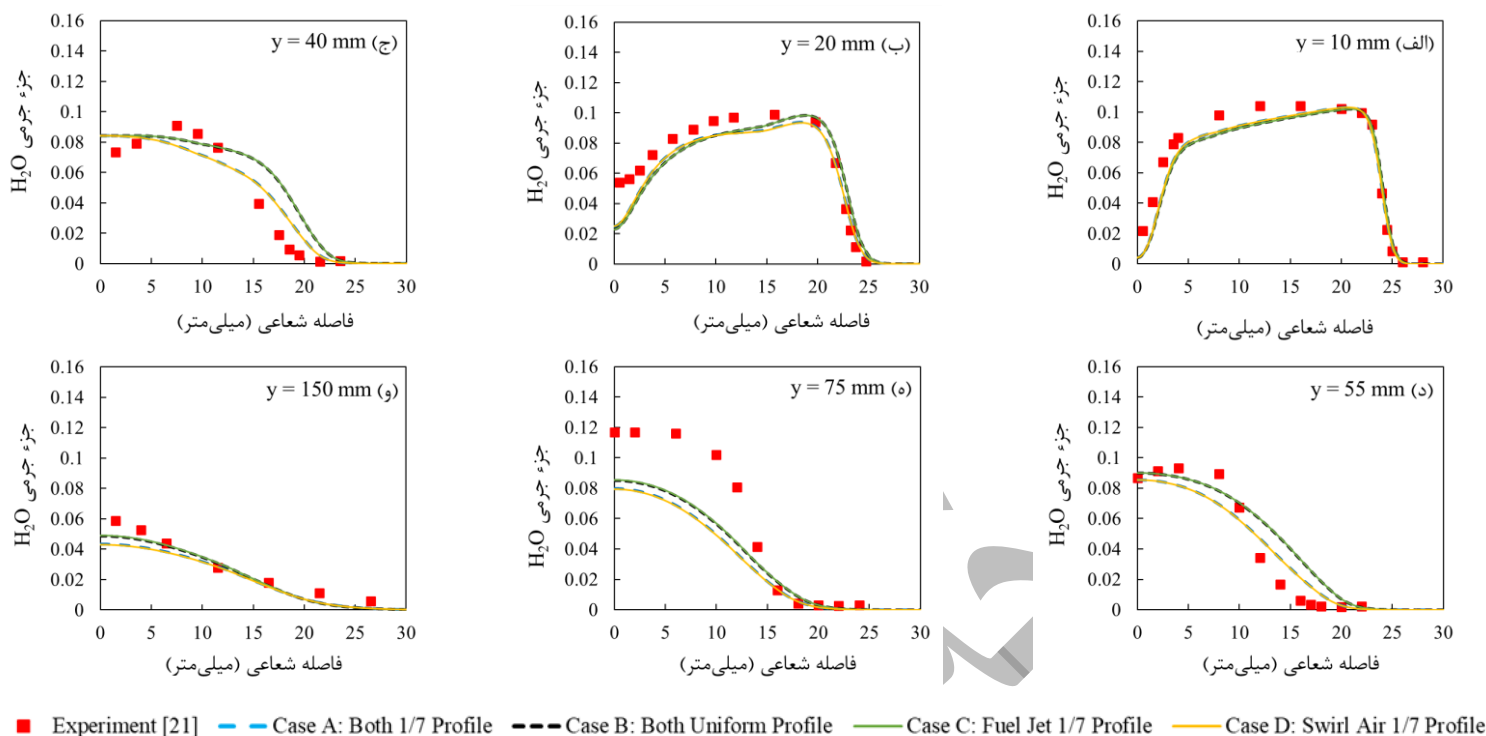
■ Experiment [21] - - - Case A: Both 1/7 Profile - - - Case B: Both Uniform Profile — Case C: Fuel Jet 1/7 Profile — Case D: Swirl Air 1/7 Profile

شکل ۴ مقایسه توزیع سرعت چرخشی در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز برای پروفیل‌های مختلف سرعت ورودی سوخت و هوای چرخشی



■ Experiment [21] - - - Case A: Both 1/7 Profile - - - Case B: Both Uniform Profile — Case C: Fuel Jet 1/7 Profile — Case D: Swirl Air 1/7 Profile

شکل ۵، مقایسه توزیع سرعت محوری در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز برای پروفیل‌های مختلف سرعت ورودی سوخت و هوای چرخشی



شکل ۶، مقایسه توزیع جزء جرمی بخار آب (Y_{H_2O}) در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله انداز برای پروفیل‌های مختلف سرعت ورودی سوخت و هوای چرخشی

۵-۲- اثر تغییر مکانیزم‌های شیمیایی مختلف با تعداد

گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی مختلف بر ساختار جریان

شعله SM1 و توزیع گونه‌های شیمیایی اصلی در محفظه

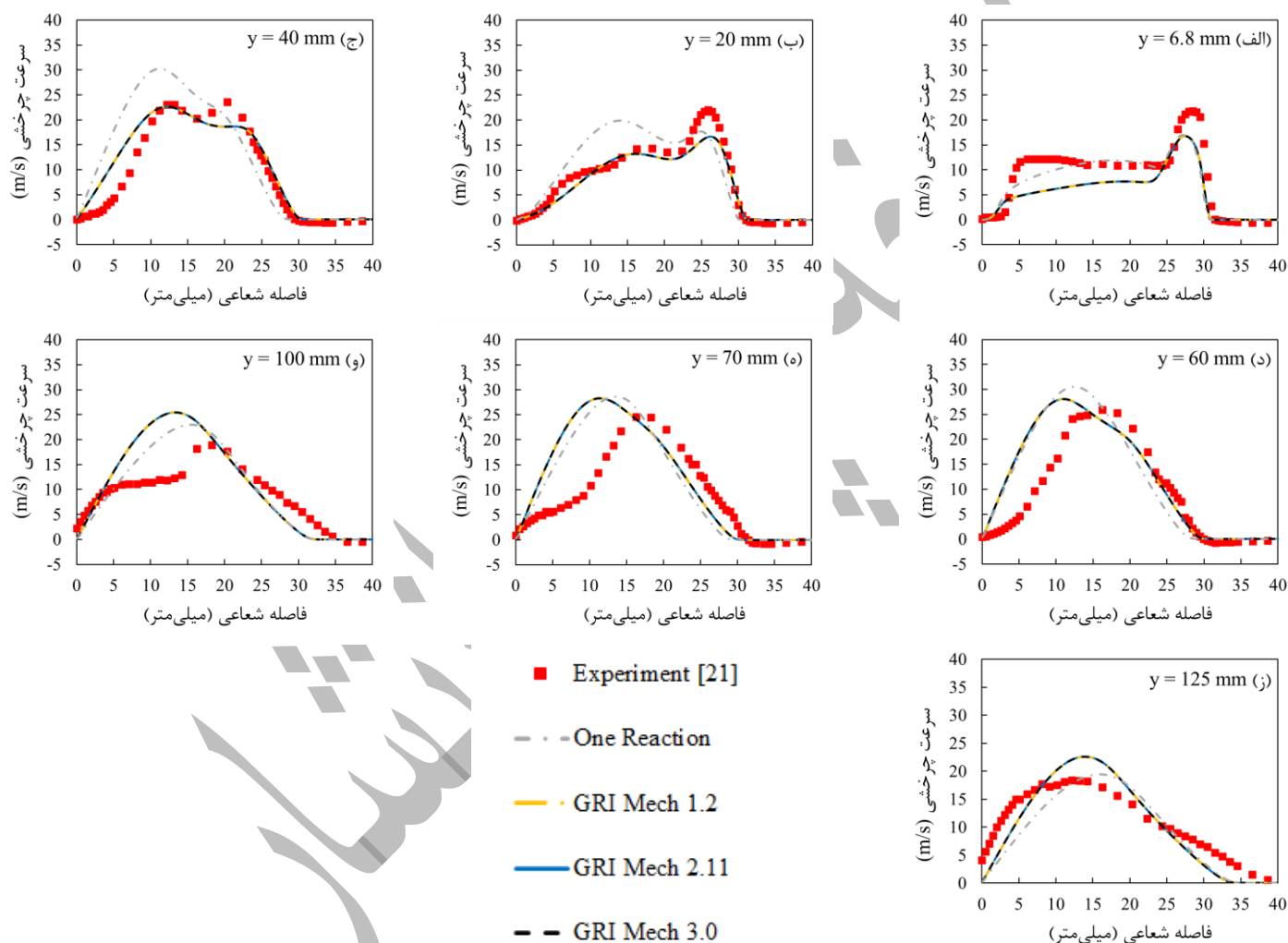
احتراق

در این بخش از مقاله، نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی با تغییر مکانیزم‌های شیمیایی مختلف (مکانیزم‌های شیمیایی 1.2, GRI Mech 2.0, GRI Mech 3.0 و مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای) با تعداد گونه‌ها و تعداد واکنش‌های شیمیایی مختلف مورد تحلیل قرار گرفته و با داده‌های تجربی مقایسه می‌شود. از این پس، برای سادگی، به جای عبارت مکانیزم شیمیایی x، از عبارت کوتاه شده GRI x استفاده می‌شود. شکل‌های ۷ و ۸ به ترتیب، توزیع سرعت چرخشی و سرعت محوری را بر حسب فاصله شعاعی در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله انداز نمایش می‌دهند. این نتایج از شبیه‌سازی‌های عددی با مکانیزم‌های شیمیایی مختلف GRI 1.2، 2.11، 3.0 و واکنش تک مرحله‌ای به دست

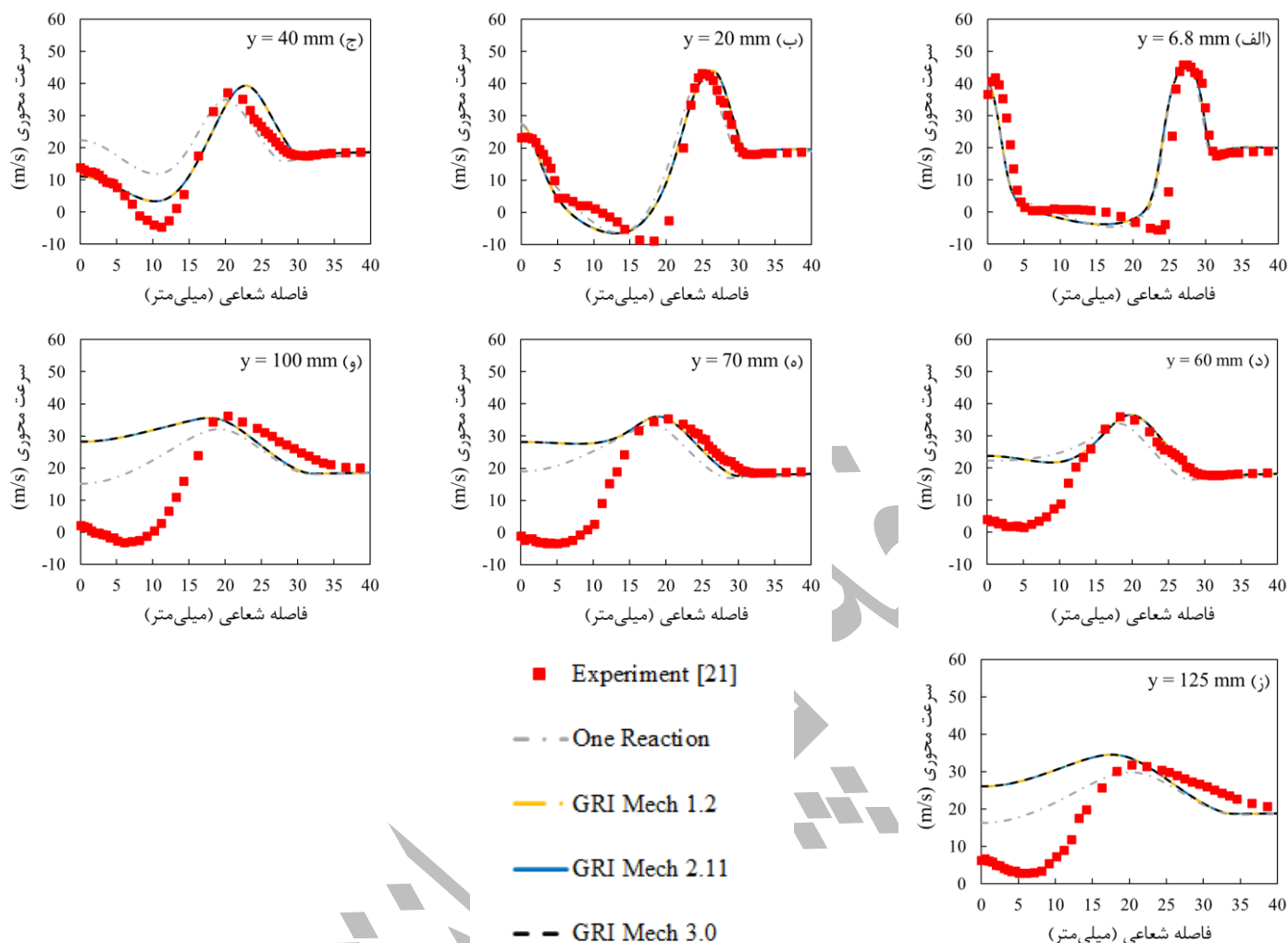
آمده‌اند. برای مقایسه، داده‌های تجربی حاصل از آزمایش شعله SM1 نیز در این نمودارها آورده شده است [۲۱]. نتایج ارائه شده در شکل‌های ۷ و ۸ نشان می‌دهد که استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI (۱، ۲، ۳، ۱۱ و ۳۰) منجر به توزیع سرعت چرخشی و سرعت محوری یکسانی می‌شود؛ اما استفاده از واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان با هوا، توزیع سرعت چرخشی و محوری در ساختار شعله SM1 را نسبت به مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI تغییر می‌دهد. البته، واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان با هوا در فواصل محوری ۶، ۸ و ۲۰ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله انداز، توزیع سرعت محوری مشابهی با سایر مکانیزم‌های شیمیایی ایجاد می‌کند؛ اما در سایر فواصل محوری، توزیع سرعت محوری به دست آمده از واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان با هوا نسبت به سایر مکانیزم‌های شیمیایی مورد بررسی متفاوت است. مقایسه پروفیل‌های سرعت چرخشی و محوری حاصل از شبیه‌سازی احتراق شعله SM1 با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI با داده‌های آزمایشگاهی نشان می‌دهد که در محدوده ۴۰ میلی‌متری اول از سطح فاصله انداز، تطابق قابل قبولی بین نتایج حل عددی و مقادیر داده‌های تجربی

تجربی برقرار است. نتایج به دست آمده از احتراق با واکنش تک مرحله‌ای، نسبت به داده‌های تجربی، دارای رفتار متفاوتی است؛ در بعضی فواصل محوری و فواصل شعاعی، توزیع سرعت چرخشی و محوری به دست آمده از احتراق واکنش تک مرحله‌ای دارای رفتار فرا پیش‌بینی و در بعضی فواصل دیگر دارای رفتار فرو پیش‌بینی است.

وجود دارد. با این حال، پس از این فاصله محوری، انحرافات در نتایج حل عددی نسبت به داده‌های آزمایشگاهی مشاهده می‌شود. نکته قابل توجه این است که از فاصله محوری ۴۰ میلی‌متر به بعد، این انحرافات عمدتاً در نواحی نزدیک به محور طولی شعله (تا فاصله شعاعی حدود ۱۵ میلی‌متر) دیده می‌شود، در حالی که در مناطق دورتر از این فاصله شعاعی (بیش از ۱۵ میلی‌متر)، همخوانی بسیار خوبی بین نتایج محاسباتی و داده‌های



شکل ۷، مقایسه توزیع سرعت چرخشی بر حسب فاصله شعاعی با داده‌های تجربی [۲۱] در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف



شکل ۸، مقایسه توزیع سرعت محوری بر حسب فاصله شعاعی با داده‌های تجربی [۲۱] در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف

را مدلسازی نمایند. لازم به ذکر است که استفاده از مدل LES در [۱۹]، منجر به خطاهای قابل توجه در توزیع جریان محوری و چرخشی در ساختار شعله SM1 شده است. همچنین مدل آشفستگی LES استفاده شده، نمی‌تواند بیشینه مقدار سرعت محوری و سرعت چرخشی را در فواصل محوری مختلف مدلسازی نماید؛ اما مدل‌های آشفستگی RANS از جمله مدل $k - \varepsilon$ و $k - \omega$ می‌توانند مقادیر بیشینه سرعت محوری و چرخشی را با دقت بهتر و مناسب‌تری مدلسازی نمایند [۱۹]. مطابق با شکل ۷ و ۸، مشاهده می‌شود که مدل آشفستگی مورد استفاده در این پژوهش ($k - \varepsilon$ استاندارد)، توانایی مدلسازی بیشینه مقدار سرعت محوری و چرخشی و مدلسازی موقعیت مکانی درست بیشینه مقدار سرعت محوری و چرخشی را دارد. لازم به ذکر است که

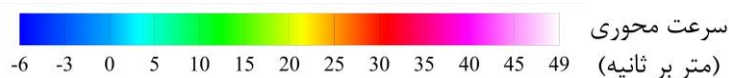
با توجه به داده‌های تجربی شعله SM1، مشاهده می‌شود که در فاصله ۷۰ الی ۱۰۰ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله‌انداز، جریان چرخشی ثانویه‌ای (پدیده شکست گردابه) در ساختار شعله SM1 وجود دارد که مطابق با نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده در پژوهش حاضر، مدل آشفستگی $k - \varepsilon$ استاندارد، امکان مدلسازی جریان چرخشی ثانویه در ساختار شعله SM1 را ندارد. با توجه به [۱۹]، می‌توان نتیجه گرفت که امکان و عدم امکان مدلسازی نواحی چرخشی در ساختار شعله SM1 به مدل آشفستگی بستگی دارد و عموم مدل‌های آشفستگی گروه RANS، امکان مدلسازی پدیده شکست گردابه در ساختار شعله SM1 را ندارند؛ اما مدل آشفستگی LES و مدل‌های ترکیبی LES/RANS می‌توانند پدیده شکست گردابه

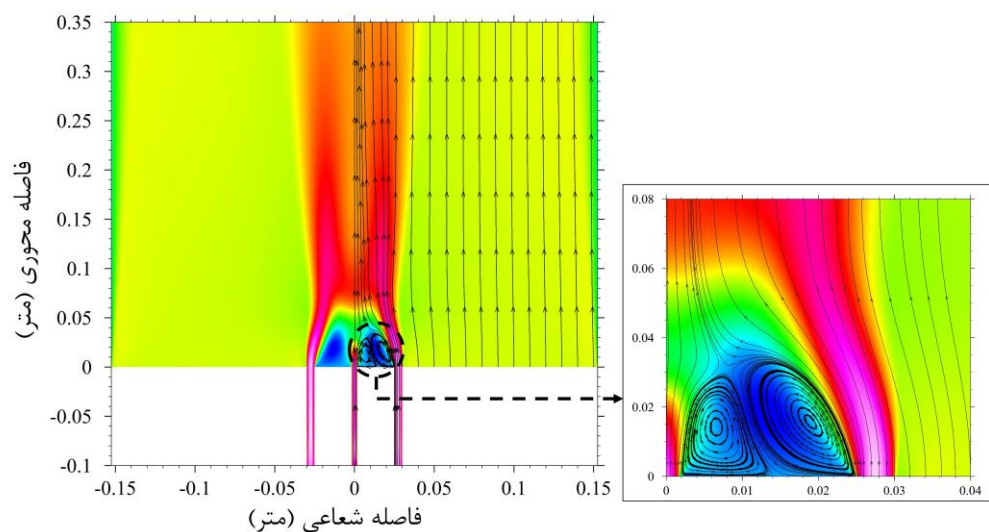
انتخاب مدل آشفته‌گی $k - \varepsilon$ استاندارد در این پژوهش بر اساس دلایل و ویژگی‌هایی همچون مقرون به صرفه بودن، نیاز به هزینه محاسباتی کم و دقت معقول در شبیه‌سازی عددی انجام شده است. این مدل آشفته‌گی، یک مدل نیمه تجربی است که معادلات آن بر اساس ملاحظات پدیدارشناختی و تجربه‌گرایی استخراج و مورد بررسی و آزمون گسترده قرار گرفته است و برای تحقیقات صنعتی، استفاده از این مدل آشفته‌گی با هزینه محاسباتی کم و مصرف انرژی کمتر نسبت به مدل‌های آشفته‌گی پیچیده‌تر و با هزینه بالاتر ترجیح داده می‌شود.

شکل ۹ کانتورهای سرعت محوری برای شعله SM1 برای مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا را با یکدیگر مقایسه می‌کند. لازم به ذکر است که برای جلوگیری از تکرار، کانتور سرعت محوری فقط برای حالت استفاده از واکنش شیمیایی GRI 2.11 ارائه شده است. این انتخاب به‌طور خاص به این دلیل انجام شده که نتایج تمامی مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI با یکدیگر تطابق دارند و نمایش یکی از آنها به تنهایی برای نمایندگی کل این گروه کافی است. مطابق با شکل ۹، توزیع سرعت محوری به دست آمده از احتراق گاز متان در شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 نسبت به مکانیزم تک مرحله‌ای متفاوت است. مطابق با شکل ۹ (الف) و نمودارهای شکل ۸ (الف تا ج)، ناحیه برگشتی در پشت سطح فاصله‌انداز با استفاده از مدل احتراقی SLFM و مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 تا طولی در حدود ۳۵ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز به خوبی مدل‌سازی شده است. مقاله [۷]، نشان می‌دهد که طول گردابه بیرونی ایجاد شده تقریباً تا طولی برابر با ۴۰ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز امتداد پیدا کرده است. این موضوع نشان‌دهنده تطابق مناسب بین نتایج عددی و داده‌های آزمایشگاهی است. به عبارت دیگر، مدل آشفته‌گی $k - \varepsilon$ استاندارد قابلیت مدل‌سازی جریان برگشتی در پشت سطح فاصله‌انداز را به خوبی دارد. اما مطابق با شکل ۹ (ب)، ناحیه برگشتی در پشت سطح فاصله‌انداز با استفاده از مکانیزم

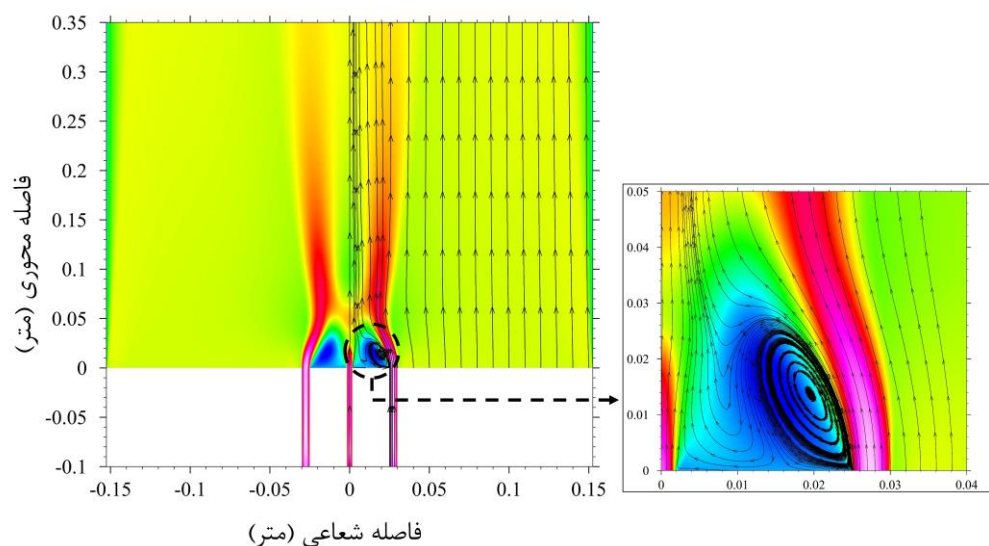
شیمیایی تک مرحله‌ای تا طولی در حدود ۲۸ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز ادامه پیدا کرده است. جهت حرکت گردابه‌های ایجاد شده در دو حالت نشان داده شده در شکل ۹، به گونه‌ای است که هوای چرخشی وارد شده به محفظه احتراق به سمت ورودی سوخت در مرکز هندسه مشعل هدایت می‌شود. این موضوع، سبب افزایش نرخ اختلاط سوخت و هوا در مشعل غیر پیش‌آمیخته خواهد شد [۴]؛ زیرا نفوذ اکسیدکننده به داخل سوخت برای انجام فرآیند احتراق افزایش پیدا می‌کند. همچنین، با استفاده از فرآیند تشکیل این نوع گردابه‌ها در پشت سطح فاصله‌انداز به عنوان مکانیزم پایدارکننده هندسی، امکان پایداری شعله نیز افزایش پیدا می‌کند [۵-۳].

از دیگر تفاوت‌های اساسی در ساختار جریان شعله SM1 به دست آمده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف، می‌توان به این موضوع اشاره کرد که هنگام استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای، جریان برگشتی ایجاد شده در پشت سطح فاصله‌انداز دارای یک گردابه بزرگ است؛ اما هنگام استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI، دو گردابه بزرگ در پشت سطح فاصله‌انداز ایجاد می‌شود. در [۷]، همچون پژوهش حاضر، دو ناحیه گردابه‌ای اصلی در پایین‌دست سطح فاصله‌انداز در ناحیه چرخشی اولیه ایجاد شده است. در [۷]، از مدل آشفته‌گی غیرخطی $k - \varepsilon$ و مدل اختلاط درخت فراگیر مینیمم اقلیدسی (EMST) استفاده شده است. مطابق با شکل ۹، اندازه محوری و شعاعی گردابه‌های ایجاد شده در پشت سطح فاصله‌انداز با یکدیگر متفاوت هستند. مطابق با شکل ۹ (الف) هنگام استفاده از واکنش شیمیایی سری GRI 2.11، طول محوری گردابه سمت راستی و طول شعاعی آن، به ترتیب برابر با ۳۵ و ۱۳ میلی‌متر است. در صورتی که طول محوری و شعاعی تک گردابه ایجاد شده هنگام استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای، به ترتیب برابر با ۲۸ و ۱۲ میلی‌متر است. لازم به ذکر است که علت وجود گردابه‌ها در پشت سطح فاصله‌انداز، جدایش سیال از روی سطح دایروی فاصله‌انداز است [۳، ۴، ۱۴، ۱۹].





(الف) مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11



(ب) واکنش تک مرحله‌ای

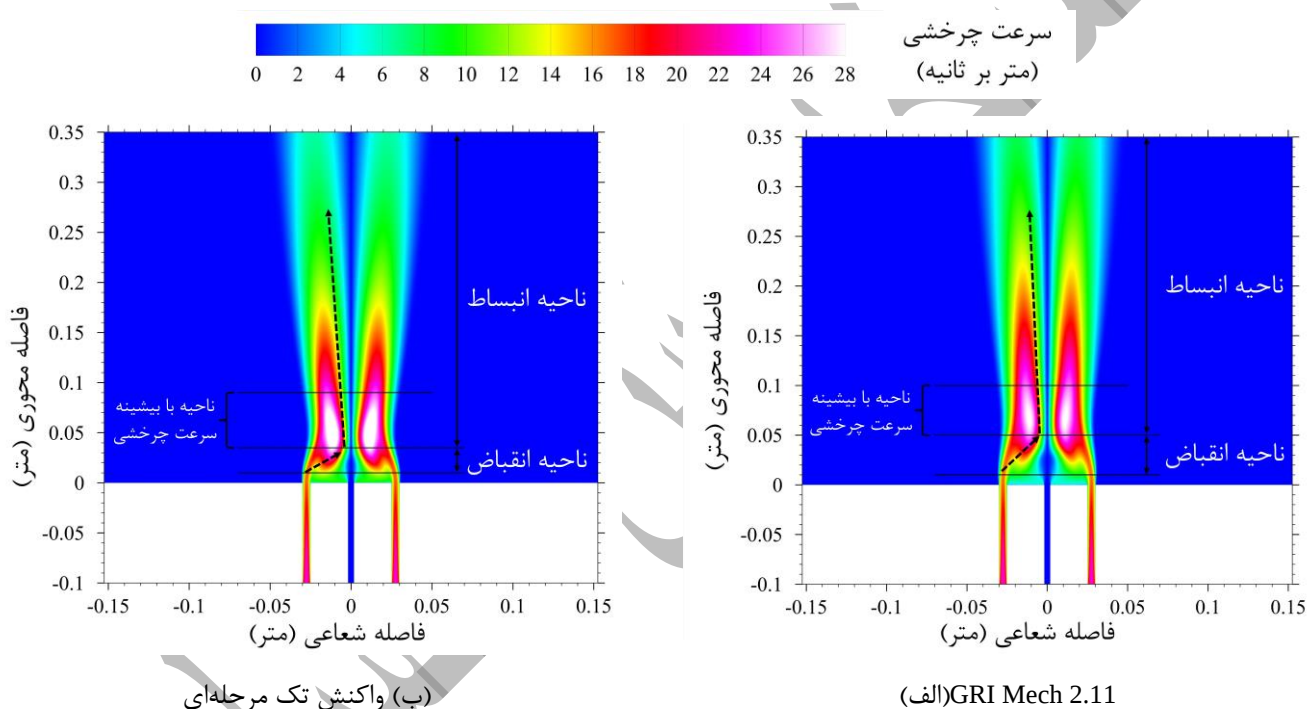
شکل ۹ کانتور سرعت محوری، به دست آمده از (الف) مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11 و (ب) مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای

مکانیزم تک مرحله‌ای در طول ناحیه محاسباتی، بیشتر است. مطابق با شکل ۱۰، هم کانتور سرعت چرخشی به دست آمده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و هم کانتور به دست آمده از مکانیزم تک مرحله‌ای، دارای سه ناحیه مشابه هستند که این نواحی شامل، ناحیه انقباض، ناحیه انبساط و ناحیه با بیشینه سرعت چرخشی است. البته طول تشکیل این نواحی در احتراق شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 متفاوت از

در شکل ۱۰، کانتور سرعت چرخشی به دست آمده از احتراق شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و مکانیزم تک مرحله‌ای نشان داده شده است. مطابق با این شکل، مشاهده می‌شود که جریان چرخشی در احتراق شعله SM1 با مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و مکانیزم تک مرحله‌ای، تا انتهای ناحیه محاسباتی ادامه پیدا کرده است؛ با این تفاوت که توزیع سرعت چرخشی به دست آمده از مکانیزم شیمیایی سری GRI نسبت به

چرخشی سیال در احتراق شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 نسبت به مکانیزم تک مرحله‌ای کم‌تر است. نکته قابل توجه در کانتورهای سرعت چرخشی نشان داده شده، این است که در پشت سطح فاصله‌انداز، جریان چرخشی ابتدا به سمت محور طولی مشعل متمایل می‌شود که این موضوع همانند خطوط جریان نشان داده شده در شکل ۹، به معنای ورود هوای چرخشی به سمت محور طولی مشعل و افزایش نرخ اختلاط سوخت و اکسید کننده است.

مکانیزم تک مرحله‌ای است. هنگام استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11، ناحیه انقباض، انبساط و ناحیه بیشینه سرعت چرخشی به ترتیب در فاصله محوری بین سطح فاصله‌انداز تا ۵۰ میلی‌متر، ۵۰ تا انتهای ناحیه محاسباتی و ۵۰ تا حدود ۱۰۰ میلی‌متری ایجاد شده است؛ در صورتی که در مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای، این نواحی به ترتیب در فواصل محوری بین سطح فاصله‌انداز تا حدود فاصله ۳۰ میلی‌متری، ۳۰ میلی‌متر تا انتهای ناحیه محاسباتی و فاصله بین ۳۰ میلی‌متری تا حدود ۹۰ میلی‌متری ایجاد شده است. همچنین، میزان بازشدگی جریان



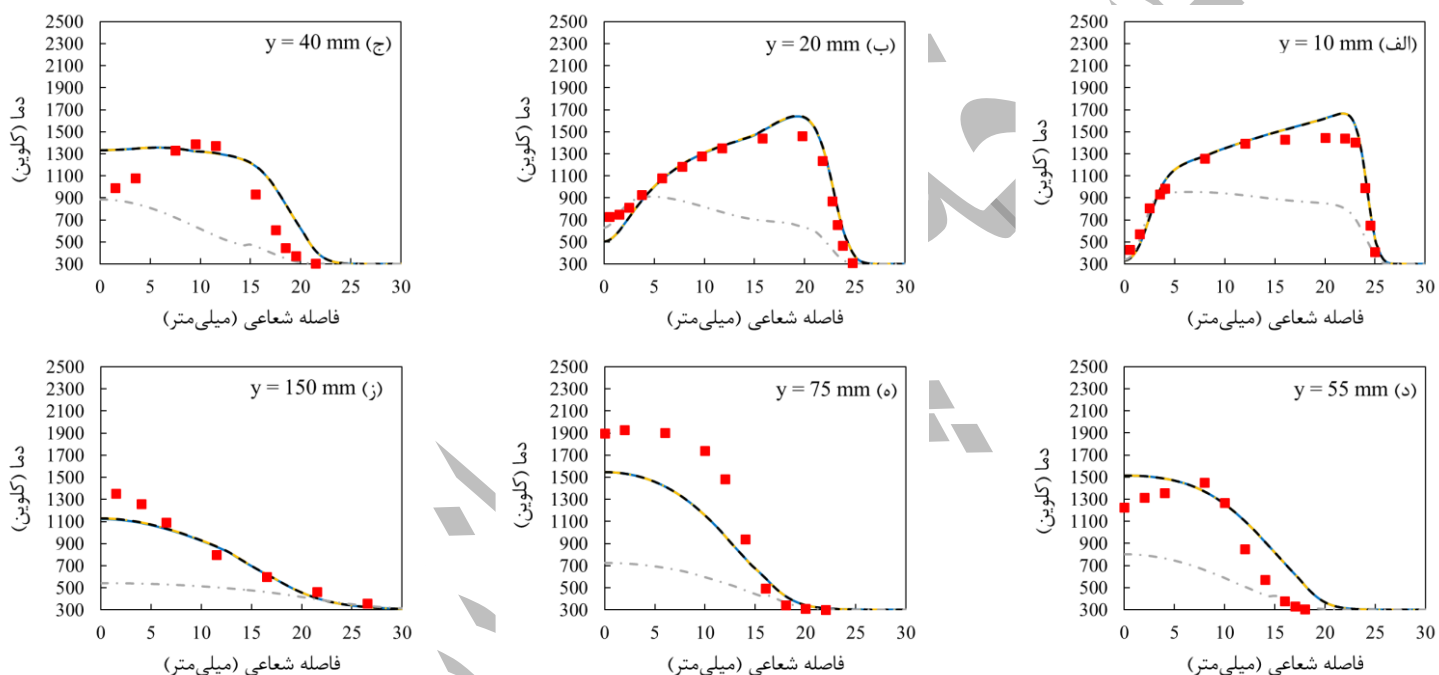
شکل ۱۰ کانتور سرعت چرخشی، به دست آمده از (الف) مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11، (ب) مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای

می‌دهد. در فواصل ۷۵ تا ۱۵۰ میلی‌متری، اگرچه روند کلی توزیع دما حفظ شده، اما انحرافات جزئی نسبت به داده‌های تجربی مشاهده می‌شود. بر اساس پروفیل‌های دمای ارائه شده در شکل ۱۱ (ج، د)، مقادیر عددی محاسبه شده با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI در مقایسه با داده‌های تجربی، دارای حالت فرا پیش‌بینی است. این اختلاف حاکی از آن است که مدل احتراقی SLFM، تمایل به پیش‌بینی مقادیر دمایی بالاتری در این فواصل محوری دارد؛ اما نتایج ارائه شده در شکل ۱۱ (ه، و) نشان می‌دهد که توزیع دمای محاسبه شده با مدل احتراقی

شکل ۱۱ توزیع دما را بر حسب فاصله از محور مرکزی در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز نمایش می‌دهد. این نتایج برای انواع مکانیزم‌های شیمیایی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. همانطور که از نمودارهای نشان داده شده مشخص است، تمامی مکانیزم‌های سری GRI (۱، ۲، ۱، ۱۱ و ۳، ۰) الگوی توزیع دمایی کاملاً یکسانی را ایجاد می‌کنند. توزیع دمایی به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI در محدوده ۰ تا ۵۵ میلی‌متری از سطح فاصله‌انداز، تطابق بسیار خوبی با داده‌های آزمایشگاهی نشان

دلیل، در احتراق متان خالص در شعله SM1 با مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای، توزیع دما نسبت به داده‌های تجربی دارای حالت فرو پیش‌بینی است. همچنین در مدل احتراقی SLFM، از تاثیر جذب و اتلاف حرارت بر جزء جرمی گونه‌های شیمیایی صرف نظر می‌شود. این موضوع بر توزیع دما به خصوص هنگام استفاده از مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای نسبت به مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI اثر می‌گذارد و یکی از دلایل پیش‌بینی کمتر از حد انتظار توزیع دما با استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای می‌تواند این موضوع باشد.

SLFM و مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی، دارای حالت فرو پیش‌بینی است. در تمامی نمودارهای نشان داده شده در شکل ۱۱، توزیع دمای به دست آمده از احتراق تک مرحله‌ای متان و هوا نسبت به توزیع دمای به دست آمده از حل عددی با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI و داده‌های تجربی کمتر می‌باشد. علت این موضوع این است که در مدل احتراقی SLFM، فرض بر واکنش تعادلی به صورت محلی است؛ در صورتی که مکانیزم تک مرحله‌ای، دارای واکنشی شیمیایی به صورت برگشت‌ناپذیر و غیر تعادلی است. به همین



■ Experiment [21] - - - One Reaction - - - GRI Mech 1.2 — GRI Mech 2.11 — GRI Mech 3.0

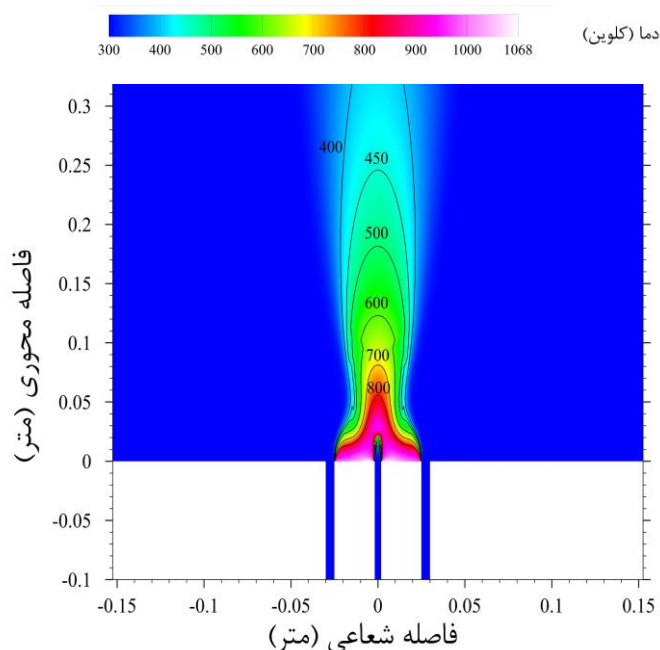
شکل ۱۱، مقایسه توزیع دمای به دست آمده از حل عددی با داده‌های تجربی [۲۱] در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز

دمایی ارائه شده، بیشترین دمای شعله SM1 در ناحیه چرخشی اولیه، دقیقاً در پشت سطح فاصله‌انداز تشکیل می‌شود. همچنین، دما در لبه‌های سطح فاصله‌انداز، افزایش قابل توجهی را نشان می‌دهد. این موضوع با داده‌های تجربی گزارش شده در [۹] برای شعله SM1 مطابقت دارد. علت افزایش دما در لبه‌های سطح فاصله‌انداز، با توجه به خطوط جریان سرعت در شکل ۹ و کانتور سرعت محوری و چرخشی، ورود هوای چرخشی به سمت محور طولی شعله SM1 است. به عبارت دیگر، گردابه‌های ایجاد شده در پشت سطح فاصله‌انداز، باعث افزایش نرخ اختلاط سوخت و

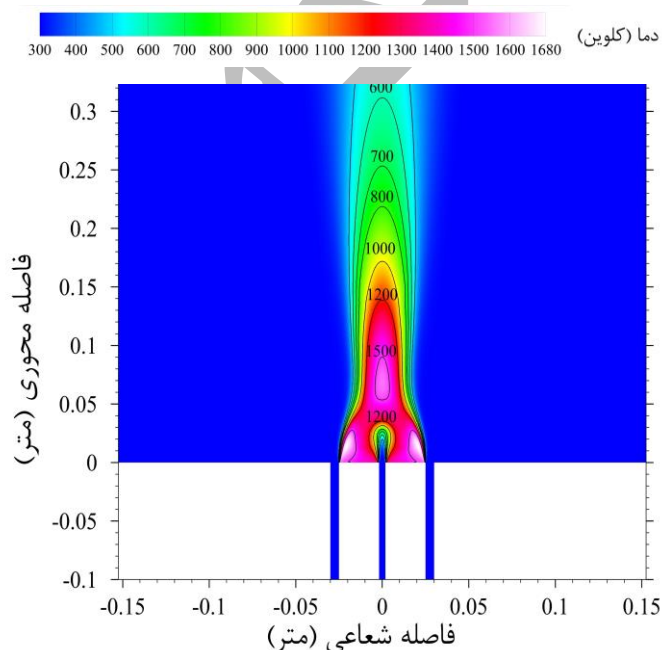
در شکل ۱۲، کانتور دمای به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی فرآیند احتراق در شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و مکانیزم تک مرحله‌ای نشان داده شده است. مطابق با کانتور دمای نشان داده شده، مشاهده می‌شود که بیشینه دمای شعله SM1 با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 تا فاصله محوری حدود ۱۵۰ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز ادامه پیدا می‌کند؛ در صورتی که طول محل بیشینه دما با استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای، نصف حالتی است که از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 استفاده شود. بر اساس کانتورهای

است. مطابق با کانتورهای دمای نشان داده شده، مشاهده می‌شود که طول متأثر از دمای زیاد در ساختار جریان شعله SM1، با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 نسبت به مکانیزم تک مرحله‌ای بیشتر است. یعنی، سیال با دمای حدود ۱۰۰۰ کلوین، تا طولی به اندازه ۱۷۰ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز ادامه پیدا می‌کند؛ در صورتی که در فاصله ۱۷۰ میلی‌متری برای مکانیزم تک مرحله‌ای، دمای سیال، حدوداً برابر با ۵۰۰ کلوین است.

اکسیدکننده می‌شود که افزایش نفوذ هوا به سمت سوخت، باعث تشکیل ناحیه احتراقی با دمای بالا می‌شود [۳، ۱۰-۱۵]. مطابق با شکل ۱۲، مشاهده می‌شود که بیشینه دمای محاسبه شده با استفاده از مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای نسبت به مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 بسیار کمتر است. همچنین، استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 سبب وجود ناحیه داغ‌تری در نواحی نزدیک به خروجی محفظه احتراق می‌شود. در نزدیکی خروجی محفظه احتراق، دمای سیال با استفاده از مکانیزم شیمیایی GRI 2.11 و مکانیزم تک مرحله‌ای به ترتیب برابر با ۵۰۰ و ۴۰۰ کلوین



(ب) واکنش تک مرحله‌ای



GRI Mech 2.11 (الف)

شکل ۱۲ کانتور دما، به دست آمده از (الف) مکانیزم شیمیایی GRI Mech 2.11 و (ب) مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای

از خط تقارن تا لبه فاصله‌انداز ($r = 25 \text{ mm}$) به گونه‌ای است که دمای بیشینه ابتدا در نزدیکی لبه فاصله‌انداز ($r = 20 \text{ mm}$) ایجاد می‌شود و هر چه قدر از سطح فاصله‌انداز به اندازه یک قطر دور می‌شویم، دمای بیشینه به سمت مرکز فاصله بین لبه فاصله‌انداز و خط تقارن ($r = 9.5 \text{ mm}$) حرکت می‌کند. همچنین با افزایش بیشتر فاصله محوری از سطح فاصله‌انداز، مشاهده می‌شود که دمای بیشینه به سمت خط تقارن متمایل

در جدول ۴، دمای بیشینه به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی احتراق شعله SM1 با مکانیزم‌های شیمیایی مختلف با داده‌های آزمایشگاهی در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز مقایسه شده است. همچنین محل وقوع دمای بیشینه در فواصل شعاعی نیز با یکدیگر مقایسه شده است. با توجه به داده‌های موجود در جدول ۴ برای آزمایش تجربی، مشاهده می‌شود که در پشت سطح فاصله‌انداز ($y < 50 \text{ mm}$)، توزیع دما

می‌شود؛ به گونه‌ای که در فاصله محوری ۵۵، ۷۵ و ۱۵۰ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله‌انداز، دمای بیشینه به ترتیب در فاصله شعاعی ۸، ۶ و ۱٫۵ میلی‌متری ایجاد می‌شود. همچنین، با توجه به داده‌های آزمایشگاهی به دست آمده مشاهده می‌شود که در فاصله محوری ۷۵ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله‌انداز، دما نسبت به فاصله‌های اطراف، یعنی فاصله ۵۵ و ۱۵۰ میلی‌متری، افزایش چشمگیری داشته است. این موضوع به دلیل وجود جریان چرخشی است که به صورت محلی، باعث افزایش دما در این ناحیه شده است. مطابق با جدول ۴، مشاهده می‌شود که در شبیه‌سازی‌های عددی انجام شده با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI نیز ابتدا دمای بیشینه در لبه‌های فاصله‌انداز ایجاد می‌شود و هر چه قدر فاصله محوری از فاصله‌انداز بیشتر شود، محل وقوع دمای بیشینه به سمت خط تقارن حرکت می‌کند. با مقایسه دمای بیشینه به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از مکانیزم شیمیایی سری GRI و محل شعاعی دمای بیشینه با داده‌های آزمایشگاهی، می‌توان نتیجه گرفت که موقعیت شعاعی دمای بیشینه در پشت سطح فاصله‌انداز به خوبی مدل‌سازی شده است؛ اما دمای بیشینه به دست آمده از حل عددی با استفاده از مکانیزم شیمیایی سری GRI و مدل احتراقی SLFM دارای حالت فرا پیش‌بینی نسبت به داده‌های تجربی می‌باشد. همچنین، در فواصل محوری که پدیده شکست گردابه‌ای رخ می‌دهد (یعنی $y = 75 \text{ mm}$)، دمای بیشینه به دست آمده از حل عددی با استفاده از مکانیزم شیمیایی سری GRI دارای حالت فرو پیش‌بینی نسبت به داده‌های تجربی می‌باشد. با توجه به کانتور دمای نشان داده شده در شکل ۱۲ (الف)، در این فاصله

محوری مشاهده می‌شود که ناحیه‌ای با دمای بیشینه قرار دارد. با مقایسه اطلاعات موجود در جدول ۴ و شکل ۱۲، می‌توان نتیجه گرفت که گردابه‌ها در تشکیل مناطق با دمای بالا و نواحی واکنشی به صورت مستقیم تاثیرگذار هستند. به همین دلیل، انتخاب مدل آشفته‌گی مناسب برای مدل‌سازی درست گردابه‌ها و توزیع دما در شبیه‌سازی شعله‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. از دیگر مواردی که می‌توان از جدول ۴ نتیجه گرفت این است که استفاده از مکانیزم شیمیایی مختلف سری GRI، تاثیر ناچیزی بر توزیع دمای بیشینه در فواصل محوری و شعاعی مختلف دارد؛ یعنی با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف سری GRI، دمای بیشینه تقریباً یکسانی در فواصل محوری مختلف محاسبه می‌شود؛ اما استفاده از مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای، رفتار بسیار متفاوتی نسبت به مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI و داده‌های تجربی از خود نشان می‌دهد. در تمامی فواصل محوری، مقدار دمای بیشینه به دست آمده از حل عددی با مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای دارای حالت فرو پیش‌بینی نسبت به داده‌های تجربی و داده‌های به دست آمده از احتراق با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI است. همچنین، محل وقوع دمای بیشینه در راستای شعاعی تا فاصله محوری ۴۰ میلی‌متر نسبت به سطح فاصله‌انداز، هنگام استفاده از واکنش تک مرحله‌ای، نسبت به داده‌های تجربی و نتایج به دست آمده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI متفاوت است و دارای حالت فرو پیش‌بینی است؛ اما از فاصله محوری ۴۰ میلی‌متر به بعد، محل وقوع بیشینه دما همانند مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI بر روی خط تقارن شعله SM1 قرار گرفته است.

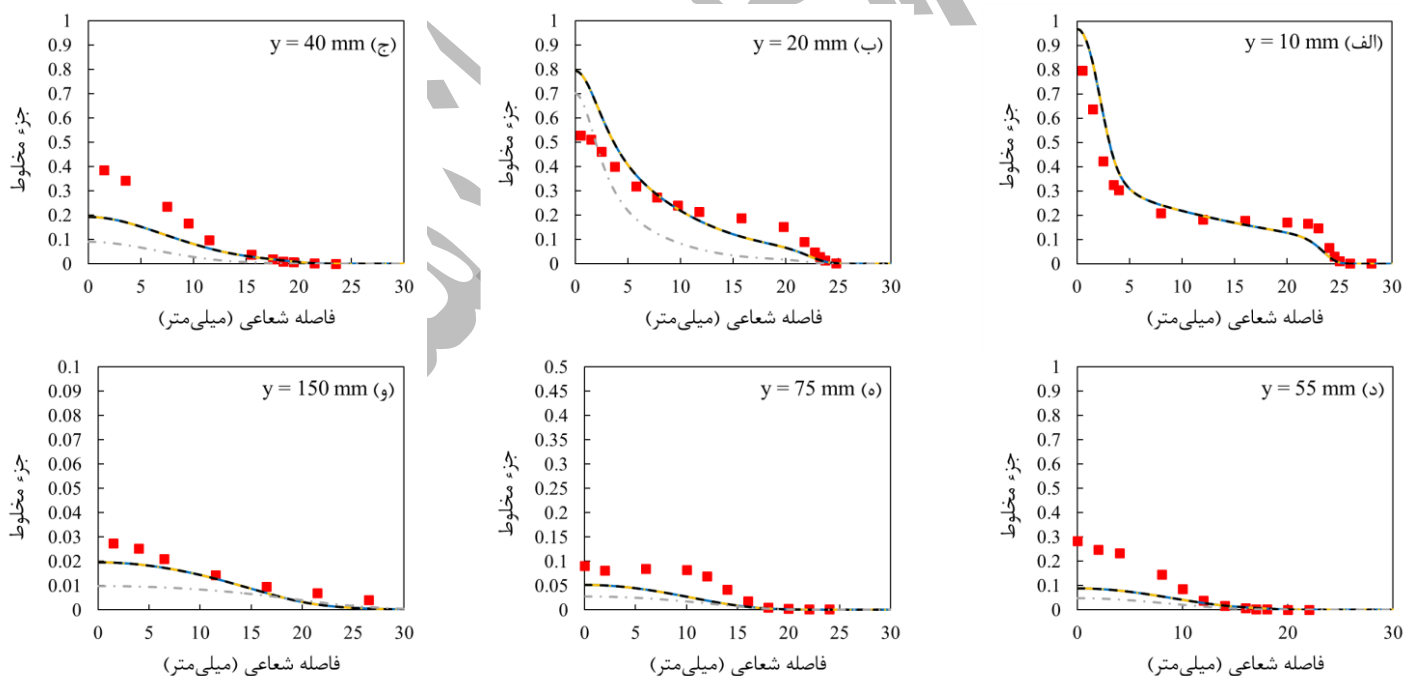
جدول ۴ مقایسه دمای بیشینه به دست آمده از شبیه‌سازی احتراق با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI و مکانیزم تک مرحله‌ای با داده‌های

تجربی [۲۱]

دمای بیشینه					
فاصله محوری	GRI Mech 1.2	GRI Mech 2.11	GRI Mech 3.0	احتراق تک مرحله‌ای	داده تجربی [۲۱]
$y = 10 \text{ mm}$	1666.90 K At $r = 21.8 \text{ mm}$	1665.39 K At $r = 21.8 \text{ mm}$	1666.74 K At $r = 21.8 \text{ mm}$	952.57 K At $r = 6.3 \text{ mm}$	1447 K At $r = 20 \text{ mm}$
$y = 20 \text{ mm}$	1643.36 K At $r = 19.1 \text{ mm}$	1642.01 K At $r = 19.1 \text{ mm}$	1645.17 K At $r = 19.1 \text{ mm}$	910.68 K At $r = 4.7 \text{ mm}$	1461 K At $r = 19.8 \text{ mm}$
$y = 40 \text{ mm}$	1357.83 K At $r = 5.7 \text{ mm}$	1356.08 K At $r = 5.7 \text{ mm}$	1356.75 K At $r = 5.95 \text{ mm}$	884.85 K At $r = 0 \text{ mm}$	1390 K At $r = 9.5 \text{ mm}$
$y = 55 \text{ mm}$	1513.71 K At $r = 0 \text{ mm}$	1512.71 K At $r = 0 \text{ mm}$	1515.73 K At $r = 0 \text{ mm}$	802.90 K At $r = 0 \text{ mm}$	1454 K At $r = 8 \text{ mm}$
$y = 75 \text{ mm}$	1546.93 K At $r = 0 \text{ mm}$	1546.16 K At $r = 0 \text{ mm}$	1548.97 K At $r = 0 \text{ mm}$	723.33 K At $r = 0 \text{ mm}$	1928 K At $r = 6 \text{ mm}$
$y = 150 \text{ mm}$	1126.47 K At $r = 0 \text{ mm}$	1126.17 K At $r = 0 \text{ mm}$	1127.67 K At $r = 0 \text{ mm}$	544.79 K At $r = 0 \text{ mm}$	1355 K At $r = 1.5 \text{ mm}$

داشته است. این مسئله ناشی از ماهیت مدل SLFM است که در آن دما و جزء جرمی گونه‌های شیمیایی مستقیماً از تابع جزء مخلوط محاسبه می‌شوند. این موضوع، در توزیع دمای به دست آمده از فاصله ۴۰ میلی‌متری از سطح فاصله‌انداز قابل مشاهده است؛ زیرا حالت فرو پیش‌بینی موجود در توزیع جزء مخلوط، منجر به ایجاد انحرافات در پیش‌بینی توزیع دما نسبت به داده‌های تجربی شده است. این نکته، اهمیت فرآیند مدلسازی جزء مخلوط در مدل احتراقی SLFM را نشان می‌دهد. این رفتار، در مورد مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای نیز مشاهده می‌شود. با استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا، توزیع جزء مخلوط در تمامی فواصل محوری، نسبت به داده‌های آزمایشگاهی و همچنین نسبت به نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI، دارای حالت فرو پیش‌بینی است. به عبارت دیگر، مکانیزم تک‌مرحله‌ای در تمام طول دامنه محاسباتی، دقت کمتری نسبت به مکانیزم‌های سری GRI در پیش‌بینی توزیع جزء مخلوط از خود نشان می‌دهد.

شکل ۱۳، توزیع جزء مخلوط متوسط ($\bar{f}$) را بر حسب فاصله شعاعی در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز نمایش می‌دهد. همانطور که از نمودارها مشهود است، نتایج حاصل از شبیه‌سازی با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI (۱،۲، ۲،۱۱ و ۳،۰) کاملاً بر یکدیگر منطبق هستند و هیچگونه اختلاف محسوسی بین آن‌ها مشاهده نمی‌شود. نتایج حل عددی نشان می‌دهد که در فواصل نزدیک به صفحه فاصله‌انداز (یعنی فاصله ۱۰ و ۲۰ میلی‌متری)، توزیع جزء مخلوط با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI به خوبی با داده‌های تجربی مطابقت دارند. با این حال، با افزایش فاصله محوری (بیش از ۲۰ میلی‌متر)، مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI تمایل به فرو پیش‌بینی بودن در محاسبه جزء مخلوط متوسط از خود نشان می‌دهند. این انحراف می‌تواند ناشی از محدودیت‌های مدلسازی در مناطق دورتر از سطح فاصله‌انداز باشد که در آن‌ها، اثرات ناحیه‌ای و پیچیدگی‌های جریان، بیشتر خود را نشان می‌دهند. نتایج حل عددی نشان می‌دهد که خطاهای موجود در پیش‌بینی توزیع جزء مخلوط، تأثیر مستقیمی بر دقت محاسبات توزیع دما

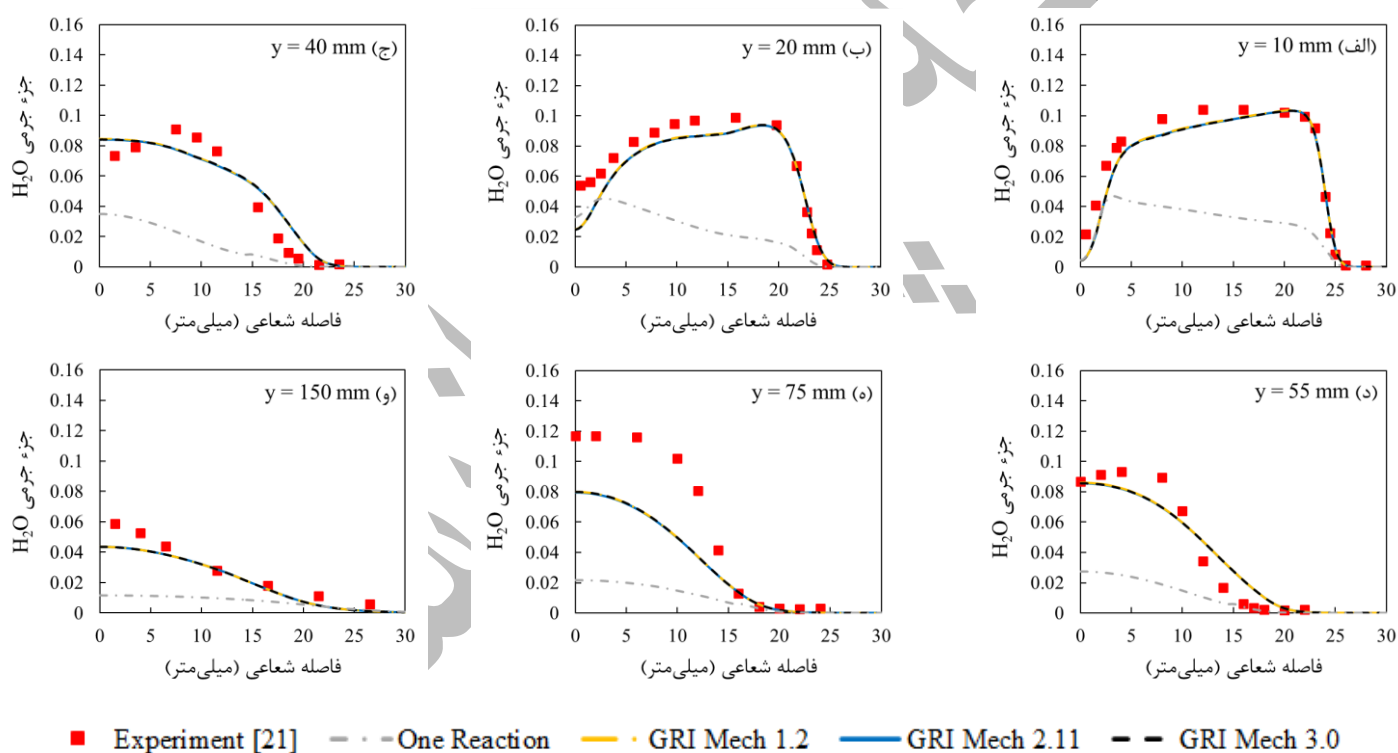


■ Experiment [21] - - One Reaction - . - GRI Mech 1.2 — GRI Mech 2.11 - - GRI Mech 3.0

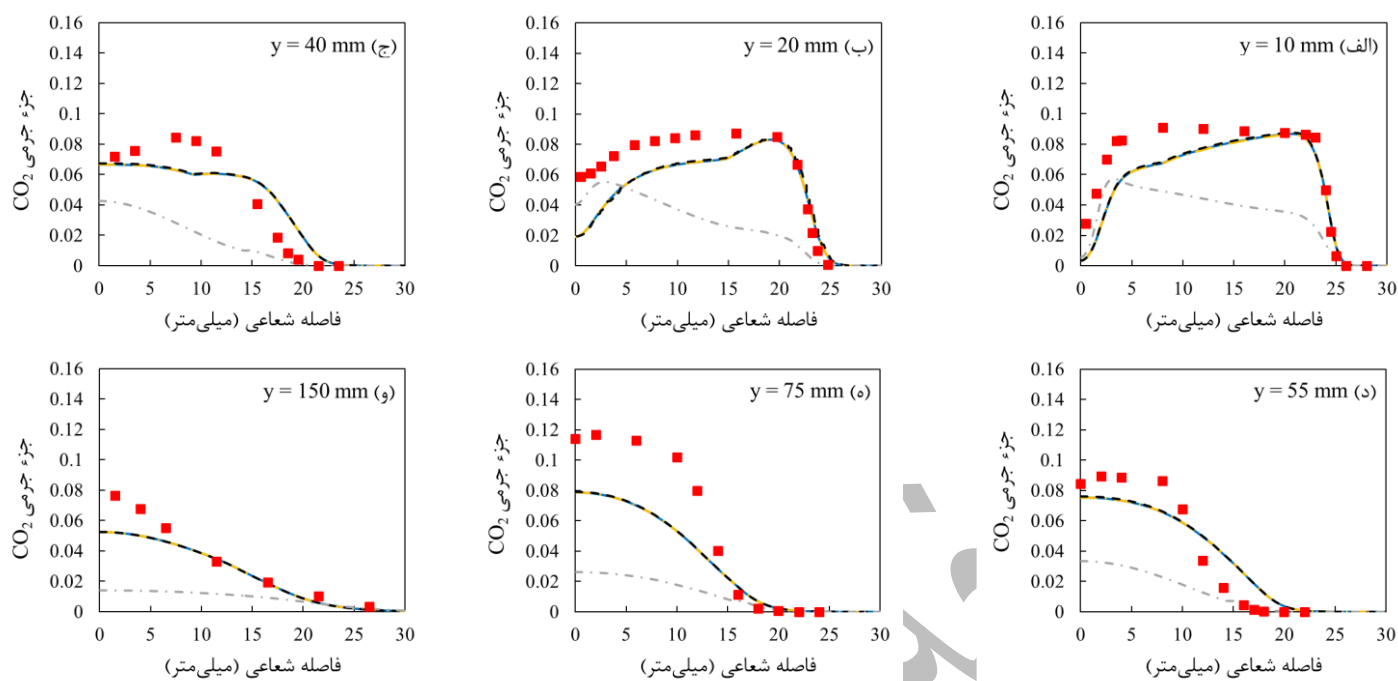
شکل ۱۳، مقایسه توزیع جزء مخلوط متوسط ($\bar{f}$) در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز با داده‌های تجربی [۲۱] با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف

۱۵ میلی‌متر به بالا، توزیع Y_{CO_2} تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارد. در خصوص استفاده از واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا، مشاهده می‌شود که هم توزیع Y_{H_2O} و هم توزیع Y_{CO_2} نسبت به داده‌های تجربی و نتایج حل عددی با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI کم‌تر می‌باشد؛ یعنی توزیع این دو گونه شیمیایی اصلی به صورت فرو پیش‌بینی است. علت این موضوع این است که در مدل احتراقی SLFM، گونه‌های شیمیایی به واسطه جزء مخلوط محاسبه می‌شوند. به همین دلیل، وقتی توزیع جزء مخلوط به دست آمده از شبیه‌سازی عددی با مکانیزم تک مرحله‌ای نسبت به داده‌های تجربی دارای انحراف می‌باشد؛ پس در توزیع جزء جرمی گونه‌های شیمیایی نیز اختلاف مشاهده می‌شود.

در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ به ترتیب، توزیع دو گونه شیمیایی اصلی از محصولات احتراق، یعنی جزء جرمی بخار آب (Y_{H_2O}) و کربن دی‌اکسید (Y_{CO_2}) نشان داده شده است. مطابق با شکل‌های نشان داده شده، توزیع Y_{H_2O} به دست آمده از شبیه‌سازی عددی با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI، بر یکدیگر منطبق هستند. همین حالت برای توزیع Y_{CO_2} نیز ایجاد شده است. توزیع Y_{H_2O} به دست آمده از حل عددی با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI تا فاصله ۵۵ میلی‌متری نسبت به سطح فاصله‌انداز دارای تطابق عالی با داده‌های آزمایشگاهی هستند؛ ولی در فاصله ۷۵ میلی‌متری و ۱۵۰ میلی‌متری اختلافی مشاهده می‌شود. در توزیع Y_{CO_2} تقریباً در تمامی فاصله‌های محوری تا حدود شعاع ۱۵ میلی‌متری، شرایط فرو پیش‌بینی مشاهده می‌شود ولی از شعاع



شکل ۱۴، مقایسه توزیع جزء جرمی بخار آب (Y_{H_2O}) در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله‌انداز با داده‌های تجربی [۲۱] با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف



■ Experiment [21] - - - One Reaction - - - GRI Mech 1.2 — GRI Mech 2.11 - - - GRI Mech 3.0

شکل ۱۵، مقایسه توزیع جزء جرمی کربن دی اکسید (Y_{CO_2}) در فواصل محوری مختلف نسبت به سطح فاصله انداز با داده‌های تجربی [۲۱] با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف

SLFM با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI است. مقدار انرژی آزاد شده از فرآیند احتراق با مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای با استفاده از مدل احتراقی SLFM، اختلاف ۳۷,۳ درصدی نسبت به انرژی آزاد شده از شعله SM1 مطابق با داده‌های تجربی ایجاد می‌کند. وجود این اختلاف بزرگ به این دلیل است که در فرآیند احتراق با مکانیزم شیمیایی تک مرحله‌ای با استفاده از مدل SLFM، فرآیند احتراق گاز متان به صورت محلی تعادلی در نظر گرفته می‌شود؛ در صورتی که فرآیند احتراق تک مرحله‌ای متان، برگشت‌ناپذیر و غیر تعادلی است.

در جدول ۵، مقدار انرژی آزاد شده از فرآیند احتراق متان خالص با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف نشان داده شده است. با مقایسه نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی با مکانیزم شیمیایی سری GRI با مقدار انرژی آزاد شده از شعله SM1 مطابق با داده تجربی، اختلاف حداکثر ۱,۷۷ درصدی در مقدار انرژی آزاد شده به دست آمده است. این موضوع نشان‌دهنده توانایی مدل‌سازی فرآیند احتراق توسط مدل احتراق

جدول ۵ مقایسه مقدار انرژی حرارتی آزاد شده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف با داده آزمایشگاهی برای شعله SM1 با استفاده از مدل احتراقی SLFM

نوع مکانیزم شیمیایی	مقدار انرژی آزاد شده $\dot{W}$ (Watt) به دست آمده از شبیه‌سازی	مقدار انرژی آزاد شده $\dot{W}$ (Watt) به دست آمده از داده‌های تجربی [۲۱]	درصد اختلاف
GRI Mech 1.2	10911.1	11100	1.70
GRI Mech 2.11	10903.8		1.77
GRI Mech 3.0	10905		1.76
One Reaction	6961.7		37.3

۶- نتیجه گیری

نیز در تحلیل‌های عددی مربوط به جریان شعله SM1 مورد بررسی قرار گیرند. این بررسی‌های تکمیلی می‌توانند درک جامع‌تری از رفتار پیچیده سیستم احتراقی شعله SM1 با تغییر تعداد گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی را ارائه دهند.

نمادها، علائم و نشانه‌ها

D	قطر هندسی (mm)
R_i	شعاع هندسی (mm)
$\vec{V}$	بردار سرعت
U	سرعت محوری (m/s)
W	سرعت چرخشی (m/s)
I	سطح آشفستگی جریان آزاد (/.)
Re	عدد رینولدز (بی‌بعد)
BR	نسبت انسداد (بی‌بعد)
S	عدد چرخش (بی‌بعد)
k	نرخ واکنش شیمیایی
A	عامل پیش‌نمایی (بی‌بعد)
T	دما (کلوین)
E	انرژی فعالساز و واکنش شیمیایی ($\frac{J}{kg\ mol}$)
R	ثابت جهانی گازها ($\frac{J}{K\ mol}$)
r	فاصله از محور هندسی / فاصله شعاعی (mm)
t	ضخامت هندسی (mm)
Y_i	جزء جرمی گونه شیمیایی i (بی‌بعد)
y	فاصله محوری (mm)

با انجام شبیه‌سازی‌های عددی فرآیند احتراق در شعله SM1 با تغییر تعداد گونه‌ها و تعداد واکنش‌های شیمیایی با در نظر گرفتن مکانیزم‌های شیمیایی GRI Mech 1.2، GRI Mech 2.11، GRI Mech 3.0 و واکنش تک مرحله‌ای احتراق سوخت متان و هوا، مشاهده می‌شود که توزیع کمیت‌های مربوط به ساختار جریان سیال در شعله SM1 از جمله توزیع سرعت محوری و چرخشی، دما، جزء مخلوط و توزیع جزء جرمی گونه‌های H_2O ، CO_2 برای حالتی که از مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI استفاده شود، منطبق بر یکدیگر هستند و تنها استفاده از واکنش تک مرحله‌ای احتراق متان و هوا، توزیع‌های متفاوتی ایجاد می‌کند. با استفاده از مکانیزم تک مرحله‌ای احتراق متان، توزیع دما، توزیع گونه‌های شیمیایی اصلی (CO_2 ، H_2O) و توزیع جزء مخلوط در عموم فواصل محوری نسبت به سطح فاصله‌انداز در شعله SM1 نسبت به داده‌های تجربی و نتایج حل عددی با استفاده از مکانیزم شیمیایی سری GRI دارای حالت فرو پیش‌بینی است. به همین دلیل، توصیه می‌شود که در پژوهش‌های آتی، اگر هدف به دست آوردن توزیع سرعت، توزیع دما و توزیع گونه‌های اصلی باشد، از مکانیزم‌های شیمیایی چند مرحله‌ای با تعداد گونه‌ها و واکنش‌های شیمیایی محدودتری استفاده شود.

در شبیه‌سازی فرآیند احتراق در شعله SM1 با به کارگیری مدل آشفستگی $\epsilon - k$ استاندارد، تنها می‌توان ناحیه چرخشی اول در پشت سطح فاصله‌انداز را مدلسازی کرد، در حالی که این مدل آشفستگی قادر به مدلسازی ناحیه چرخشی دوم نیست. با این حال، بر اساس نتایج شبیه‌سازی‌های عددی انجام‌شده با مکانیزم‌های شیمیایی سری GRI و مدل احتراقی SLFM، تطابق خوبی بین نتایج حل عددی و داده‌های تجربی مشاهده شده است. همچنین با انجام شبیه‌سازی‌های عددی مشاهده شد که پروفیل توانی $1/7$ برای سرعت ورودی سوخت و هوای چرخشی برای شعله SM1، از دقت قابل قبولی برخوردار است و توصیه می‌شود که برای شبیه‌سازی ساختار جریان در شعله SM1، هم جریان ورودی سوخت و هم جریان هوای چرخشی به صورت توسعه‌یافته در نظر گرفته شود. پیشنهاد می‌شود که در پژوهش‌های آتی، پدیده‌های فیزیکی مختلفی همچون انتقال حرارت تشعشعی و تشکیل دوده

	Combustion Chamber	محفظه احتراق
	Holder	مکانیزم‌های نگهدارنده
	Bluff Body	صفحه فاصله‌انداز
	Recirculating Flow	جریان برگشتی
	Vortex Breakdown Bubble	شکست گردابه‌ها
	Swirling Flow	جریان چرخشی
	Sydney	سیدنی
	Computational Fluid Dynamics	دینامیک سیالات محاسباتی
	Steady Laminar Flamelet Model (SLFM)	مدل فلیملت آرام پایا
	Large Eddy Simulation	شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ
	Steady Diffusion Model Flamelet	مدل فلیملت پایای انتشاری
	OpenFoam	اوپن‌فوم
	Linear Eddy Mixing Model (LEM)	مدل اختلاط گردابه‌های خطی
	Chemical Species	گونه‌های شیمیایی
	Major Chemical Species	گونه‌های شیمیایی اصلی
	Port	مجرای ورودی/خروجی
	Blockage Ratio	نسبت انسداد

$\bar{f}$ جزء مخلوط متوسط (بی‌بعد)

$\dot{W}$ مقدار انرژی آزاد شده (Watt)

حروف یونانی

β توان دما (بی‌بعد)

زیرنویس‌ها

b صفحه فاصله‌انداز

J جت/ورودی سوخت

s هوای چرخشی

e هوای غیر چرخشی/هوای ثانویه

g هندسی

r واکنش

f واکنش رو به جلو

واژه‌نامه

پیشنهادی نویسنده	واژه لاتین	پیشنهادی ویراستار
مشعل‌های پیش آمیخته	Premixed Burners	
مشعل‌های پیش آمیخته جزئی	Partially Premixed Burners	
مشعل‌های غیر پیش آمیخته	Non-Premixed Burners	
مشعل‌های مرحله‌ای	Staging Burners	

	Coupling	تعامل
	Turbulent Kinetic Energy	انرژی جنبشی آشفتگی
	Turbulent Dissipation Rate	نرخ اضمحلال آشفتگی
	Mixture Fraction	جزء مخلوط
	Mixture Fraction Variance	واریانس جزء مخلوط
	Second Order Upwind	روش مرتبه دوم بالادست
	Mass Weighted Average	متوسط جرمی
	Semi-Empirical Model	مدل نیمه تجربی
	Euclidean Minimum Spanning Tree model (EMST)	مدل درخت فراگیر مینیمم اقلیدسی
	Over Prediction	حالت فرا پیش‌بینی
	Under Prediction	حالت فرو پیش‌بینی
	Reaction Zones	نواحی واکنشی

	Swirl Number	عدد چرخش
	Lewis Number	عدد لوئیس
	Reynolds Average Navier-Stokes Equations (RANS)	معادلات ناویر- استوکس متوسط رینولدزی
	Incompressible	تراکم‌ناپذیر
	Steady	پایا
	Probability Density Function	تابع چگالی احتمال
	Function PDF β	تابع چگالی احتمال تابع بتا
	Arrhenius Equation	معادله آرنیوس
	Pre-Exponential Factor	عامل پیش‌نمایی
	Power-Law Velocity Profile	پروفیل سرعت توانی
	Bulk	توده
	Zero Diffusion	انتشار صفر
	Mass Fraction	جزء جرمی

منابع

- [1] C. Baukal, *Heat Transfer in Industrial Combustion*, 1st ed. Boca Raton: CRC Press, 2000, p. 568.
- [2] C. Baukal, V. Gershtein, and X. Jimmy Li, *Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion*. Boca Raton: CRC Press, 2000, p. 648.
- [3] H. El-Asrag and S. Menon, "Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 2, pp. 1747–1754, 2007/01/01/2007, doi: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.251>.

- [4] H. A. El-Asrag and S. Menon, "Large Eddy Simulation of a Swirling Non-Premixed Flame," in *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2005: American Institute of Aeronautics and Astronautics, doi: <https://doi.org/10.2514/6.2005-3971>.
- [5] A. R. Masri, S. B. Pope, and B. B. Dally, "Probability density function computations of a strongly swirling nonpremixed flame stabilized on a new burner," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, no. 1, pp. 123–131, 2000/01/01/ 2000, doi: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(00\)80203-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(00)80203-9).
- [6] Z. Yang, X. Li, Z. Feng, and L. Chen, "Influence of mixing model constant on local extinction effects and temperature prediction in LES for non-premixed swirling diffusion flames," *Applied Thermal Engineering*, vol. 103, pp. 243–251, 2016/06/25/ 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.04.065>.
- [7] R. De Meester, B. Naud, U. Maas, and B. Merci, "Hybrid RANS/PDF calculations of a swirling bluff body flame ('SM1')," in *Proceedings of the Sixth International Symposium On Turbulence Heat and Mass Transfer*, 2009, pp. E–0157, doi: 10.1615/ICHMT.2009.TurbulHeatMassTransf.
- [8] Y. M. Al-Abdeli and A. R. Masri, "Stability characteristics and flow fields of turbulent non-premixed swirling flames," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 7, no. 4, pp. 731–766, 2003/11/04 2003, doi: 10.1088/1364-7830/7/4/007.
- [9] P. A. M. Kalt, Y. M. Al-Abdell, A. R. Masri, and R. S. Barlow, "Swirling turbulent non-premixed flames of methane: Flow field and compositional structure," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 2, pp. 1913–1919, 2002/01/01/ 2002, doi: [https://doi.org/10.1016/S1540-7489\(02\)80232-2](https://doi.org/10.1016/S1540-7489(02)80232-2).
- [10] A. Kempf, W. Malalasekera, K. K. J. Ranga-Dinesh, and O. Stein, "Large Eddy Simulations of Swirling Non-premixed Flames With Flamelet Models: A Comparison of Numerical Methods," *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 81, no. 4, pp. 523–561, 2008/12/01 2008, doi: 10.1007/s10494-008-9147-1.
- [11] G. Deveci, Ö. Yücel, and A. B. Olcay, "Prediction of Temperature Distribution with Deep Learning Approaches for SM1 Flame Configuration," *Energies*, vol. 18, no. 14, p. 3783, 2025.
- [12] Y. Al-Abdeli and A. Masri, "Recirculation and flow field regimes of unconfined non-reacting swirling flows," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 27, pp. 655–665, 05/01 2003, doi: 10.1016/S0894-1777(02)00280-7.
- [13] R. D. Kahanda Koralage, K. W. Jenkins, M. Kirkpatrick, and W. Malalasekera, "Effects of Swirl on Intermittency Characteristics in Non-Premixed Flames," *Combustion Science and Technology - COMBUST SCI TECHNOL*, vol. 184, pp. 629–659, 05/01 2012, doi: 10.1080/00102202.2011.653460.
- [14] K. K. J. Ranga Dinesh, K. W. Jenkins, M. P. Kirkpatrick, and W. Malalasekera, "Modelling of instabilities in turbulent swirling flames," *Fuel*, vol. 89, no. 1, pp. 10–18, 2010/01/01/ 2010, doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.06.024>.
- [15] I. Esquivia-Dano, H. Nguyen, and D. Escudié, "Influence of a bluff-body's shape on the stabilization regime of non-premixed flames," *Combustion and Flame - COMBUST FLAME*, vol. 127, pp. 2167–2180, 12/01 2001, doi: 10.1016/S0010-2180(01)00318-2.
- [16] O. T. Stein and A. M. Kempf, "LES of the Sydney swirl flame series: A study of vortex breakdown in isothermal and reacting flows," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 2, pp. 1755–1763, 2007, doi: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.255>.
- [17] O. V. Kazancı and Y. E. Böke, "Validation of Bluff-body Swirling Flame with RANS Turbulent Model and Comparison of the Results with LES Turbulent Model ", in en), *International Journal of Thermodynamics*, vol. 27, no. 2, pp. 59–74, June 2024, doi: 10.5541/ijot.1380710.

- [18] J. Xu, D. Huang, R. Chen, and H. Meng, "An Improved NO Prediction Model for Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion," *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 106, 03/01 2021, doi: 10.1007/s10494-020-00204-3.
- [19] M. Safavi and E. Amani, "A comparative study of turbulence models for non-premixed swirl-stabilized flames," *Journal of Turbulence*, vol. 19, pp. 1017–1050, 09/24 2018, doi: 1.14685248.2018.1527033/0.1080
- [20] A. Hasanabadi, S. Vakilipour, and r. rahmati, "Study of hydrogen-methane flame structure in Sydney swirl stabilized burner using volumetric combustion model," *Fuel and Combustion*, vol. 17, no. 2, pp. 37–56, 2024, doi: 10/22034.jfnc.2024.450512.1383.
- [21] "Aerospace Mechanical and Mechatronic Engineering - The University of Sydney." <https://web.aeromech.usyd.edu.au/thermofluids/swirl.php> (accessed).
- [22] Y. Yang and S. K. Kær, "Large-eddy simulations of the non-reactive flow in the Sydney swirl burner," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 36, pp. 47–57, 2012/08/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2012.02.008>.
- [23] G. K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics* (Cambridge Mathematical Library). Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [24] H. W. M. Frenklach, C.-L. Yu, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, E.J. Chang, G.P. Smith, D.M. Golden, W.C. Gardiner and V. Lissianski. "GRI-Mech 1.2." <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/new21/version12/text12.html> (accessed).
- [25] R. K. H. C.T. Bowman, D.F. Davidson, W.C. Gardiner, Jr., V. Lissianski, G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach and M. Goldenberg,. "GRI-Mech 2.11." <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/new21/version21/text21.html> (accessed).
- [26] D. M. G. Gregory P. Smith, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin. "GRI-Mech 3.0." <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> (accessed).
- [27] C. K. Westbrook and F. Dryer, "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuel in Flames," *Combustion Science and Technology - COMBUST SCI TECHNOL*, vol. 27, pp. 31–43, 12/01 1981, doi: 10.1080/00102208108946970.