

مطالعه عددی گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله‌ای با یک مانع

سبحان امامی کوپائی^۱، کیومرث مظاهری^۲ و علی شمعونی پور^۳

۱- دکترای مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، آزمایشگاه شبیه‌سازی احتراق، S_emami@modares.ac.ir

۲- استاد مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، آزمایشگاه شبیه‌سازی احتراق (نویسنده مخاطب)، Kiumars@modares.ac.ir

۳- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، آزمایشگاه شبیه‌سازی احتراق، Ali.shamooni@modares.ac.ir

(دریافت: ۱۳۹۲/۹/۲۰، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۲/۱۲/۲۵، پذیرش: ۹۲/۱۲/۲۸)

در این پژوهش، با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) به مطالعه شتاب‌گیری شعله و گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله‌ای با یک مانع، که توسط مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا پر شده، پرداخته شده است. به‌منظور شبیه‌سازی احتراق زیرشبه از رویکرد شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF) و به‌منظور مدل‌سازی دقیق‌تر اثرات واکنش‌های شیمیایی بر پدیده حاضر از یک سینتیک ۲۱ مرحله‌ای استفاده شده است. از آنجایی که در نظر گرفتن سینتیک شیمیایی تفصیلی هزینه محاسباتی را به شدت افزایش می‌دهد، از روش جدول‌سازی درجای تطبیق‌پذیر (ISAT) بهره برده شده است. بررسی نتایج حاضر نشان می‌دهند که رویکرد پیشنهادی LES/ATF/ISAT از توانایی بالایی در بازتولید پدیده‌های فیزیکی روی داده در حین فرآیند انتشار شعله و گذار از جت شعله آشفته به تراک برخوردار است. مشاهده شد، حضور دیوار، در محفظه‌ای که جت شعله در آن تخلیه می‌شود، تأثیر بسزایی در رفتار شعله و آغاز تراک دارد، به‌طوری‌که آغاز تراک دقیقاً در مجاورت دیواره و درست در پشت ساقه ماخ شکل گرفته در اثر انعکاس شوک پیشرو از دیوار روی می‌دهد. البته این آغاز به‌دنبال چندین انفجار محلی روی داده در پشت لبه حمله به‌وقوع می‌پیوندد.

کلیدواژگان: جت شعله آشفته، آغاز تراک، شتاب‌گیری شعله، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، روش شعله ضخیم‌شده مصنوعی

مقدمه

آغاز موج انفجاری تراک در یک مخلوط گازی در عمل به روش‌های مختلفی امکان‌پذیر است. این روش‌ها را می‌توان به چهار دسته گذار از شعله به تراک (DDT)^۱، آغاز مستقیم حاصل از موج بلست^۲، آغاز فوتوشیمیایی و آغاز در اثر جت داغ محصولات احتراق تقسیم‌بندی کرد [۱]. از آنجایی که تولید موج تراک در نسل جدیدی از موتورهای هوایی با نام موتورهای انفجار ضربه‌ای (PDE)^۳ جزئی از چالش‌های اساسی در طراحی و ساخت این موتورها به حساب می‌آید، روش تولید تراک مناسب، که هم از لحاظ انرژی اولیه مورد نیاز و هم از لحاظ طول طی شده تا تراک بهینه باشد، مورد بررسی زیادی قرار گرفته است. یکی از روش‌های مورد توجه در این حیطه آغاز موج تراک توسط جت داغ محصولات احتراق است [۲].

امکان آغاز تراک به‌وسیله یک جت آشفته از محصولات احتراق برای اولین بار توسط نیستاتاس و همکاران [۳] در آزمایش‌هایی بر روی مخلوط بسیار حساس استیلن-اکسیژن نشان داده شد. اجزای اصلی آزمایش شامل یک محفظه احتراق کروی مجهز به یک روزنه تخلیه بود. خروج محصولات احتراق از طریق روزنه‌ای با سطح مقطع مستطیلی یا دایروی باعث آغاز موج تراک در محیط اطراف (که با مخلوط قابل احتراق مشابه پر شده بود) شد. فرآیند آغاز بلافاصله در نزدیکی

1. Deflagration to Detonation Transition
2. Blast Wave
3. Pulse Detonation Engine

جریان خروجی، در ناحیه اختلاط آشفته بین محصولات داغ احتراق و مخلوط نسوخته تازه، روی داد. به این پدیده آغازش مستقیم تراک به وسیله جت آشفته محصولات احتراق گفته می‌شود. آن‌ها معتقد بودند که سازوکار این آغازش فرآیند DDT از طریق اختلاط آشفته است. این محققان با بررسی تأثیر اندازه و شکل روزنه‌ها سه معیار ضروری برای رخداد DDT پیشنهاد کردند: ۱- وجود گردابه‌های آشفته پرنرژ بزرگ مقیاس از گازهای نسوخته در دنباله آشفته شکل گرفته در پایین دست روزنه، ۲- شکل‌گیری ساختارهای آشفته کوچک مقیاس به منظور تشدید اختلاط محصولات داغی که به درون گردابه‌های بزرگ مقیاس کشیده شده‌اند و ۳- وجود گرادیان مکانی زمان تأخیر که باید در درون گردابه آشفته ایجاد شده تا در نهایت DDT در گردابه بزرگ از طریق سازوکار تقویت پیوسته موج شوک (یا همان سازوکار SWACER¹ که توسط لی و همکاران برای بیان دقیق چگونگی تبدیل یک نقطه داغ به تراک ارائه شد) روی دهد. در این گردابه‌ها هنگامی که محصولات داغ به درون گردابه کشیده می‌شوند قبل از اختلاط با گازهای نسوخته به صورت رشته‌های^۲ پپیشی در می‌آیند که این موضوع باعث ایجاد یک میدان گرادیان مکانی در زمان‌های تأخیر شیمیایی می‌شود. این گرادیان از مرکز گردابه به سمت بیرون شکل می‌گیرد. مقیاس گردابه‌های بزرگ مورد نیاز حداقل باید در مرتبه اندازه سلولی تراک، l ، در مخلوط باشند [۳]. در ادامه، آزمایش‌های دیگری توسط محققان مختلف از جمله مک‌کی و همکاران [۴]، موئن و همکاران [۵] و اونقوت و شاف [۶] بر روی آغازش تراک توسط جت محصولات آشفته در مقیاس‌های بزرگ و بر روی مخلوط‌هایی با حساسیت کمتر (مخلوط سوخت و هوا) انجام گرفت. این مطالعات نشان دادند که پدیده آغازش تراک توسط جت گاز می‌تواند در مخلوط‌های سوخت-هوا نیز به شرط طولانی بودن جت مشاهده شود [۵]. در این آزمایش‌ها برای شتاب‌گیری شعله از یک لوله شوک بلند، که یک سر آن بسته و سر دیگر آن باز است و در بعضی موارد در طول آن موانعی نصب شده، استفاده می‌شود. شعله شتاب‌گیرنده به صورت یک جت وارد یک محفظه بزرگ (مثلاً یک کیسه بزرگ پلاستیکی) شده و امکان گذار به تراک در این محفظه تراک بررسی می‌شود. مک‌کی و همکاران [۵] نشان دادند که اگر سر لوله شتاب‌گیرنده کاملاً باز باشد، انفجارهای محلی پی‌درپی روی داده در ساختارهای گردابی شکل گرفته در جریان القایی خروجی از لوله باعث تقویت پیوسته موج شوک پیشرو تا تراک می‌شوند. اما اگر سر لوله شتاب‌دهنده با استفاده از مانعی مسدود شده باشد (نسبت انسداد ۴۱ درصد) حالت‌های مختلفی از گذار به تراک قابل مشاهده است. این حالت‌ها شامل گذار در پایین دست مانع در اثر اندرکنش شعله-گردابه، گذار در اثر برخورد لبه‌های شعله عبوری از مانع در یک جت نامتقارن با یکدیگر (اندرکنش شعله-شعله) و گذار در اثر اندرکنش شعله و مرز جامد محفظه تراک می‌باشند. این نتایج نشان دادند که حداقل سرعت جت شعله مورد نیاز برای گذار در یک مخلوط سوخت و هوای حساس در حدود 600 m/s است که این سرعت با کاهش حساسیت مخلوط افزایش می‌یابد [۴].

برخلاف مطالعات یادشده، کاراناشیالی و همکاران [۷] و اینادا و همکاران [۸]، به جای شتاب‌گیری شعله، از پاره‌شدن ناگهانی یک غشا برای تولید جت آشفته استفاده کردند. آن‌ها معتقدند که در روش شعله شتاب‌گیرنده، ساختار دینامیک گازی جریان در جت شعله وابسته به تاریخچه شتاب‌گیری شعله در لوله قبل از ورود آن به محفظه باز تراک است که این موضوع بر سازوکار آغازش تراک تأثیر می‌گذارد. از این رو، در این مطالعات آغازش مستقیم تراک توسط یک جت از محصولات داغ احتراق، که در یک انفجار حجم ثابت ایجاد شده و از طریق یک روزنه به محفظه دیگری تخلیه می‌شود، انجام گرفت. بنابراین تا قبل از پاره‌شدن دیافراگم هیچ میدان جریانی در پایین دست روزنه شکل نمی‌گیرد. در مطالعات کاراناشیالی و همکاران [۷]، که بر روی مخلوط‌های استوکیومتری اتیلن، استیلن، هیدروژن و پروپان با اکسیژن و با نسبت‌های متفاوتی از نیتروژن انجام گرفت، نشان داده شد که برای آغازش تراک می‌توان معیاری براساس نسبت قطر روزنه d به اندازه سلولی تراک l ارائه کرد. این معیار قابل مقایسه با قطر بحرانی لوله برای انتشار تراک پایا یعنی $d/\lambda \geq 13$ است. بر این اساس، بسته به هندسه روزنه و حساسیت مخلوط شرایط بحرانی برای آغازش تراک از طریق جت برابر $d/\lambda = 11-15$ است.

1. Shock Wave Amplification by Coherent Energy Release
2. Filament

دوروفیو و همکاران [۹] نیز آزمایش‌های بزرگ‌مقیاسی در زمینه آغازش تراک توسط جت داغی از محصولات احتراق در مخلوط هیدروژن-هوا انجام دادند. در این پژوهش نیز جت داغ محصولات با پاره‌شدن یک غشای جداکننده شکل گرفت. تأثیر غلظت هیدروژن، قطر روزنه جت و ترکیب مخلوط در محفظه انفجاری حجم ثابت مورد بررسی قرار گرفت. براساس این مطالعات، به‌منظور آغازش تراک، کمینه نسبت اندازه جت آشفته به پهنای سلولی تراک باید در حدود ۱۲ تا ۱۳ باشد. کروک [۱۰] نیز با مطالعاتی که بر روی آغازش در مخلوط هیدروژن-اکسیژن رقیق‌شده با نیتروژن یا بخار آب انجام داد، معیار $2 < d/\lambda < 7$ را پیشنهاد داد. همچنین لیبرمن و همکاران [۱۱] نیز در مطالعات خود معیار $d/\lambda \geq 1-2$ را به‌دست آوردند. البته از آنجایی که در کار آن‌ها محفظه تراک دارای عرض کمی است، به‌نظر آن‌ها اثر دیواره‌های محفظه باعث تقویت فرآیند گذار می‌شود. با توجه به مطالب بالا و براساس عقیده‌عده‌ای از محققان، به‌نظر ارائه معیار عمومی فراگیری برای آغازش تراک از طریق جت امکان‌پذیر نیست [۸ و ۱۰]، زیرا در این معیار اثری از هندسه محفظه و روزنه، نحوه ایجاد جت داغ محصولات و همچنین نحوه شتاب‌گیری شعله در لوله شتاب‌دهنده لحاظ نشده است.

توماس و جونز [۱۲] نیز به بررسی رفتار جریان واکنشی به‌هنگام خروج از لوله شوک پرداختند. در این آزمایش، با عبور شوک از روی شعله، شعله شتاب گرفته و در اثر جریان القایی شوک در جهت حرکت شوک منتشر می‌شود. شعله شتاب‌گیرنده در نهایت به‌صورت یک جت از انتهای باز لوله شوک وارد یک محفظه استوانه‌ای بزرگ می‌شود. برخلاف نظر نیستاتاس و همکاران [۳]، توماس و جونز معتقدند که گذار به تراک در اثر گردابه‌های محلی پر قدرت با مقیاسی قابل مقایسه با ضخامت جبهه واکنش روی می‌دهد، نه به‌علت اثرات چرخشی حاصل از گردابه‌های بزرگ مقیاسی که در محفظه استوانه‌ای بزرگ شکل می‌گیرند. افزایش نرخ آزادسازی انرژی در جبهه واکنش آشفته منجر به فراهم‌آمدن شرایط خوداشتعالی در بسته‌هایی از مخلوط نسوخته می‌شود، جایی که گذار از یک نقطه داغ به تراک روی می‌دهد. مدودف و همکاران [۱۳] نیز به مطالعه نظام‌مند دینامیک آغازش تراک از طریق جت پرداختند. همچنین، مقایسه مستقیمی بین روش‌های مختلف ایجاد جت یعنی روش غشای پاره‌شونده و روش صفحه سوراخ‌دار در کار آن‌ها صورت گرفت.

در سال‌های اخیر واگساتر و همکاران [۱۵، ۱۴] و همچنین گائوگ و همکاران [۱۶] با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ^۱ (LES) به مطالعه عددی فرآیند گذار از جت شعله به تراک در محفظه‌هایی به‌همراه یک مانع پرداخته‌اند. البته پیکربندی محفظه در کار آن‌ها متفاوت از کارهای آزمایشگاهی قبلی انجام گرفته بر روی جت‌های ورودی به محفظه‌های بزرگ است. در این مطالعات، یک لوله با طول ۴ متر با استفاده از یک مانع با نسبت انسداد زیاد به دو قسمت لوله شتاب‌دهنده شعله و لوله تراک تقسیم شده است. بنابراین، جت شعله در این مطالعات وارد یک ناحیه محصورشده توسط دیواره‌های لوله می‌شود. در مطالعات انجام گرفته توسط واگساتر و همکاران [۱۵، ۱۴] هدف توسعه کد رایانه‌ای برپایه LES به‌منظور شبیه‌سازی DDT بوده است. به‌علت پیچیدگی زیاد پدیده DDT مدل واکنشی زیرشبکه‌ای که برای شبیه‌سازی این پدیده انتخاب می‌شود باید قابلیت مدل‌سازی دقیق اندرکنش‌های شعله-آشفته را داشته باشد و همچنین به‌منظور مشاهده فاز نهایی DDT و ایستگی نرخ واکنش به دما را نیز لحاظ کند. به این منظور، در این مراجع نرخ واکنش کلی به‌صورت مدلی ترکیبی از یک نرخ واکنش وابسته به نرخ اختلاط و یک نرخ واکنش وابسته به سازوکار شیمیایی تعریف شده است. در رژیم‌های شعله آرام و آشفته نرخ واکنش اول غالب بوده، اما با افزایش دمای واکنشگرها در مراحل پایانی فرآیند DDT و همچنین بعد از آغازش تراک نرخ واکنش سینتیکی حاکم است [۱۵].

هدف از کار حاضر مطالعه عددی انتشار و شتاب‌گیری شعله و همچنین گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله‌ای شامل یک مانع است. این مطالعه امکان فهم فیزیکی بیشتری از این فرآیند را میسر می‌کند. شبیه‌سازی حاضر با استفاده از رویکرد پیشنهادی LES/ATF/ISAT که در ادامه معرفی می‌شود، انجام گرفته و هدف دیگر این مطالعه ارزیابی توانایی این رویکرد در شبیه‌سازی پدیده پیچیده‌ای همانند گذار از جت شعله آشفته به تراک است. از این رو، از نتایج تجربی و عددی

1. Large Eddy Simulation

منتشر شده توسط واگساتر و همکاران [۱۵،۱۴] برای راستی آزمایی شبیه‌سازی‌های انجام شده استفاده می‌شود. از آنجایی که این شبیه‌سازی دارای ویژگی‌های متفاوت و بعضاً خاصی نسبت به دیگر مطالعات انجام گرفته بر روی پدیده DDT در محفظه‌های بدون مانع و حتی محفظه‌هایی با موانع متعدد پشت سرهم است، می‌توان ارزیابی دقیقی از مدل عددی حاضر به دست آورد.

مدل‌سازی عددی

معادلات حاکم بر جریان آشفته واکنشی حاضر، همان معادلات ناویر-استوکس واکنشی تراکم‌پذیر ناپایا هستند. از آنجایی که مقیاس‌های طولی متفاوتی در پدیده DDT مشاهده می‌شود، شبیه‌سازی مستقیم عددی این پدیده با توجه به توان رایانه‌ای موجود امکان‌پذیر نیست. در حین فرآیند DDT، پدیده‌های گذرای نظیر جدایش جریان، رهاش گردابه، اندرکنش شوک-شعله، ناپایداری‌های جریان و شعله و غیره مشاهده می‌شوند؛ بنابراین استفاده از رویکرد شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES)، به نظر بر دیگر روش‌های متوسط‌گیری معادلات ارجحیت دارد. در روش LES ساختارهای آشفته بزرگ مقیاس پرانرژی بر روی شبکه محاسباتی حل شده در حالی که ساختارهای کوچک مقیاس (که دارای ویژگی‌های بسیار عمومی‌تری هستند) به کمک مدل‌های زیرشبکه (SGS) محاسبه می‌شوند. شایان ذکر است که در سالین اخیر از روش LES برای شبیه‌سازی شتاب‌گیری شعله و DDT در لوله‌ای با یک مانع استفاده شده است [۱۴-۱۶]. با این حال استفاده از LES در این گونه مطالعات، روشی کاملاً نوپا بوده و هنوز ارزیابی جامعی از دقت این رویکرد حاصل نشده است. از این رو پرداختن به این موضوع کمک شایانی به ارزیابی دقت این رویکرد و مدل‌های زیرشبکه مورد استفاده خواهد داشت.

رویکرد LES-ATF

در شبیه‌سازی LES شعله‌های پیش‌آمیخته، از آنجایی که ضخامت شعله آرام، δ_l^0 ، بسیار کوچک‌تر از اندازه پهنای فیلتر، Δ ، است، جبهه شعله بر روی شبکه محاسباتی حل نمی‌شود. از آنجایی که سهم بسیار مهمی از واکنش‌ها و آزادسازی انرژی در سطح مقیاس زیرشبکه روی می‌دهد، استفاده از LES برای جریان‌های واکنشی با چالش بزرگی روبه‌روست [۱۷]. یکی از رویکردهای توسعه داده شده برای غلبه بر این مشکل، مدل شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF)^۲ است که توسط باتلر و اورزکه ارائه شده است [۱۸]. ایده اصلی در این رویکرد افزایش مصنوعی ضخامت شعله پیش‌آمیخته است، به طوری که جبهه شعله حتی بر روی شبکه درشت نیز قابل حل باشد. در این روش، با افزایش F برابری ضریب نفوذ مولکولی (D) و کاهش I/F برابری ضریب پیش‌نمایی مدل آرنیوسی، ضخامت شعله F برابر شده ($\delta_l^1 = F\delta_l^0$)، اما سرعت سوزش آرام شعله، S_l^0 ، ثابت باقی می‌ماند [۱۸]. مقدار F به طور معمول به گونه‌ای انتخاب می‌شود که شعله ضخیم‌شده توسط ۱۰ گره محاسباتی حل شود ($\delta_l^1 \cong 10\Delta_x$) [۱۹]. اگرچه ارائه‌دهندگان این مدل معتقدند که این رویکرد توانایی حل جریان‌هایی شامل شعله‌های ناپایا، موج تراک و DDT را دارد، اما این موضوع هنوز از لحاظ عددی بررسی نشده است.

در این رویکرد، از مدل آرنیوسی برای محاسبه نرخ واکنش‌ها استفاده می‌شود. بنابراین، این مدل توانایی شبیه‌سازی پدیده‌های گوناگونی نظیر افروزش و خاموشی شعله، پایدارشدن شعله، اندرکنش شعله-دیوار و غیره را بدون نیاز به زیرمدل‌های اضافی داراست. این رویکرد قابلیت اعمال بر روی سینتیک‌های چندمرحله‌ای را نیز دارد [۱۹]. البته با افزایش F برابری ضخامت شعله، پاسخ شعله ضخیم‌شده به طیف گردابه‌های موجود در جریان آشفته شبیه به شعله واقعی نخواهد بود. در این حالت مقیاس طولی قسمت عمده‌ای از گردابه‌های موجود، در مقایسه با ضخامت شعله، بسیار کوچک بوده و بنابراین این گردابه‌ها چین‌خوردگی مؤثری را در سطح شعله ایجاد نمی‌کنند. برای غلبه بر این مشکل، سرعت سوزش شعله در این رویکرد توسط تابع عملکرد، E ، تصحیح می‌شود. درحقیقت به تابع عملکرد می‌توان به دید یک مدل زیرشبکه برای به حساب آوردن اندرکنش

1. Sub Grid Scale
2. Artificial Thickened Flame

شعله-آشفتگی نگاه کرد [۲۰]. در کار حاضر، از تابع عملکرد ارائه شده توسط کولین و همکاران [۱۹] استفاده شده است. این تابع عملکرد به صورت نسبت ضریب چین خوردگی شعله واقعی با ضخامت δ_l^0 به ضریب چین خوردگی شعله ضخیم شده با ضخامت δ_l^1 تعریف می شود. ضریب چین خوردگی سطح شعله، ξ ، در این روش به صورت تابعی از نسبت اندازه فیلتر تست به ضخامت شعله (Δ_e/δ_l^0) و نسبت نوسانات سرعت زیر شبکه به سرعت سوزش شعله آرام (u'_{Δ_e}/S_l^0) بیان می شود:

$$E = \frac{\xi(\delta_l^0)}{\xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0}} \quad (1)$$

$$\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \right) = 0.75 \exp \left[-1.2 / \left(\frac{u'_{\Delta_e}}{S_l^0} \right)^{0.3} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l} \right)^{2/3} \quad (2)$$

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3 C_{ms} (Re_t^{1/2} - 1)}, \quad (3)$$

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (3)$$

در روابط بالا، Re_t عدد رینولدز آشفته، l_t مقیاس طولی انتگرالی، u' نوسانات سرعت آشفته در مقیاس انتگرالی، C_{ms} ثابت مدل و برابر 0.28 و β ثابتی از مرتبه یک است. Δ_e متفاوت از اندازه فیلتر LES، Δ ، بوده و همانند فیلتر آزمون در مدل دینامیکی ژرمانو^۱ است. براساس نظر کولین گزینه مناسب برای اندازه فیلتر تست، ده برابر اندازه شبکه محاسباتی $\Delta_x \approx 10 \Delta_e$ است. تابع Γ از انتگرال گیری از نرخ کرنش مؤثر حاصل از تمام مقیاس های تأثیر پذیرفته از ضخیم سازی مصنوعی شعله، یعنی مقیاس هایی مابین مقیاس کولموگروف و Δ_e ، به دست آمده است. برای محاسبه u'_{Δ_e} روش های مختلفی وجود دارد. کولین و همکاران رابطه ساده و دقیق زیر را برای محاسبه u'_{Δ_e} پیشنهاد دادند [۱۹]:

$$u'_{\Delta_e} = C_2 \Delta_x^3 |\nabla^2 (\nabla \times \vec{u})| \quad (4)$$

ثابت C_2 تقریباً برابر ۲ در نظر گرفته می شود. u نیز بردار سرعت حل شونده بر روی شبکه محاسباتی است. این روش محاسبه u'_{Δ_e} دارای مزیت های گوناگونی است. اول عملگر انتخاب شده برای محاسبه u'_{Δ_e} (گرادیان مرتبه بالا) عملگری مکانی بوده و به راحتی توسط روش های حجم محدود قابل محاسبه است. این موضوع به خصوص برای نواحی ای که سرعت حل شونده دارای نوساناتی با عدد موج بالاست از اهمیت بیشتری برخوردار است [۲۱]. دوم این رابطه تضمین می کند که u'_{Δ_e} در نواحی غیر چرخشی حاصل از انبساط حجمی صفر بوده و تنها قسمت چرخشی میدان سرعت حل شونده که مستقیماً وابسته به گردابه هاست، به حساب می آید. سوم در این تابع عملکرد نه تنها گردابه هایی کوچک تر از پهنای فیلتر Δ به حساب می آیند، بلکه تأثیر گردابه هایی تا اندازه $\Delta_e \approx 10 \Delta_x$ نیز (که بر روی شبکه LES حل می شوند اما تأثیرشان بر روی شعله ضخیم شده همانند واقعیت نیست) مدل می شوند. این کار باعث می شود تا پاسخ شعله ضخیم شده به گردابه های آشفته موجود در جریان به شعله واقعی نزدیک تر شود [۲۰].

در نهایت معادله انتقال گونه ها در این مدل به صورت زیر نوشته می شود:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \tilde{u}_j Y_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{FE} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (5)$$

به طوری که u ، ρ و Y_k بیانگر مولفه های سرعت، چگالی، کسر جرمی و نرخ واکنش گونه k ام هستند. بالانویس (~) نیز نشانگر فیلترگیری جرمی است. البته تغییرات مشابهی نیز در معادله بقای انرژی اعمال می شود [۱۹].

1. Germano

شایان ذکر است که در سال‌های اخیر استفاده از رویکرد شعله ضمیم شده مصنوعی به همراه مدل LES گسترش فراوانی یافته و شبیه‌سازی‌های مختلفی در احتراق پیش‌آمیخته و پاره‌ای پیش‌آمیخته و برای پیکربندی‌های مختلف با دقتی مناسب توسط این مدل انجام گرفته است. ژیاو و همکاران [۲۲، ۲۳] با استفاده از مدل ATF به بررسی انتشار و تغییر شکل شعله در محفظه‌های بسته با استفاده از سینتیک چندمرحله‌ای پرداخته و نشان دادند که این مدل قادر به بازتولید سرعت شعله و همچنین سطح فشار ایجاد شده در محفظه است. کیولاتر و همکاران [۲۴] نیز نشان دادند که مدل LES/ATF توانایی بازتولید رفتار شعله در عبور از موانع پشت سرهم و همچنین پیش‌بینی فشار بیشینه درون محفظه را با استفاده از سینتیک‌های تک‌مرحله‌ای و دومرحله‌ای دارد.

در شبیه‌سازی LES حاضر لزجت آشفته زیر شبکه برحسب انرژی جنبشی آشفته زیر شبکه k_{SGS} و پهنای فیلتر، Δ بیان می‌شود. k_{SGS} نیز از معادله انتقال ارائه شده توسط یوشیزاوا و هوریوتی به دست می‌آید [۲۵]. دقت این مدل در شبیه‌سازی DDT در لوله‌ای با یک مانع و همچنین در شبیه‌سازی شتاب‌گیری شعله در حضور موانع مختلف مناسب ارزیابی شده است [۲۶، ۱۴].

سینتیک شیمیایی و روش جدول‌سازی

در کار حاضر، به منظور تخمین دقیق‌تر پارامترهایی نظیر ضخامت و سرعت سوزش شعله آرام، دمای شعله، زمان تأخیر واکنش‌های شیمیایی و سرعت تراک CJ در مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا از سینتیک ۹ گونه‌ای-۲۱ مرحله‌ای پیشنهاد شده توسط لای و همکاران [۲۷] استفاده شده است. سرعت سوزش آرام، دمای شعله بی‌دررو و زمان تأخیر واکنش‌های شیمیایی به دست آمده از این سینتیک برای بازه گسترده‌ای از فشارهای اولیه (۱-۲۰ atm) و نسبت‌های هم‌ارزی (۵-۰) تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی دارد [۲۷].

به هنگام استفاده از سازوکارهای تفصیلی، فارغ از نحوه مدل‌سازی اندرکنش شیمی-آشفته‌گی در مقیاس زیر شبکه، جمله‌های نرخ واکنش در معادله انتقال گونه‌ها از حل یک دستگاه ODE سرسخت^۱ به دست می‌آیند. این دستگاه در هر سلول محاسباتی و در هر گام زمانی باید حل شود. بدیهی است در حل میدان‌های پیچیده احتراقی، به علت حجم بالای شبکه محاسباتی و همچنین تعداد زیاد گام‌های زمانی و یا تکرارهای مورد نیاز، حل سینتیک درصد قابل توجهی از زمان حل کلی را به خود اختصاص می‌دهد. به منظور کاهش زمان حل سینتیک در کار حاضر از روش جدول‌سازی درجای تطبیق‌پذیر، ISAT^۲، استفاده شده است. در این روش، که در زیرمجموعه روش‌های ذخیره‌سازی-بازیابی قرار می‌گیرد، در طول اجرای محاسبات در هنگام نیاز به صورت درجا جدول شیمیایی ساخته و توسعه داده می‌شود. جزئیات این روش را می‌توان در مرجع [۲۸] یافت. به طور خلاصه می‌توان بیان کرد که حساسیت هر دستگاه ODE به تغییرات شرط اولیه خود با استفاده از ماتریس ژاکوبین آن دستگاه به دست می‌آید. در فضای حالت این دستگاه، که بعد آن برابر بعد مجهولات دستگاه (در اینجا تعداد گونه‌های شیمیایی حاضر در سینتیک شیمیایی) است، می‌توان فضایی را حول هر شرط اولیه تعریف کرد که حل دستگاه در آن فضا حساسیت کمی نسبت به تغییرات آن شرط اولیه خاص داشته باشد. به این فضا منطقه دقت یا ROA^۳ گفته می‌شود. بنابراین، اگر شرایط اولیه بعدی ورودی به دستگاه در آن فضا قرار داشته باشند، می‌توان با تقریب خوبی به جای حل دستگاه از جواب‌های قبلی ذخیره شده در جدول ISAT استفاده کرد. این مرحله بازیابی نامیده می‌شود. منظور از جدول نیز اطلاعات ذخیره شده در حافظه سیستم است که ساختاری به شکل درخت دو دویی دارد. منطقه دقت در ISAT توسط یک بیضی‌گون به مرکزیت شرط اولیه ذخیره شده در جدول تقریب زده می‌شود. این بیضی‌گون، که به اصطلاح بیضی‌گون دقت یا EOA^۴ نامیده می‌شود، با استفاده از خطای مجاز تعیین شده توسط کاربر (ϵ_{tol}) ساخته می‌شود.

1. Stiff
2. In Situ Adaptive Tabulation
3. Region Of Accuracy
4. Ellipsoid of accuracy

در صورت عدم بازیابی، باید دستگاه را به‌طور مستقیم با شرط اولیه جدید حل کرد. پس از حل، در صورت امکان EOA یافت‌شده از مرحله قبل اصلاح و یا به‌اصطلاح رشد یافته و یا شرط اولیه جدید به‌همراه EOA حول آن در درخت دو دویی ذخیره می‌شود. با پیشرفت حل درخت دو دویی توسعه پیدا کرده و به‌دنبال آن احتمال بازیابی حل دستگاه از جدول به‌جای حل مستقیم آن به‌صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد. نتیجه این عمل کاهش قابل ملاحظه زمان حل است. در ISAT برای کنترل خطای محلی (خطای استفاده از جواب‌های ذخیره‌شده حل به‌جای حل مستقیم دستگاه) از خطای مجاز ورودی توسط کاربر (ϵ_{tol}) استفاده می‌شود. در کار حاضر خطای مجاز ورودی برابر 0.1001 در نظر گرفته شده است. یعنی مجموع اختلاف بردارهای شرط اولیه ورودی، که در اینجا کسر جرمی گونه‌های موجود در هر سلول محاسباتی به‌همراه دمای آن سلول است، نباید از 0.1001 تجاوز کند. در کار حاضر، به‌جهت اهمیت حل دقیق در نزدیکی جبهه شعله و همچنین در مجاورت نقاط داغ، علاوه بر ورودی، ترانس‌های جزئی نیز برای رادیکال‌های موجود (در اینجا H_2O_2 ، OH ، HO_2 و H و O) لحاظ شده است. این ترانس‌های جزئی برابر با 0.1001 در نظر گرفته شده‌اند. این ترانس‌های جزئی در خطای مجاز ورودی ضرب شده و به‌صورت محلی دقت حل رادیکال‌ها (نه کل حل) را افزایش می‌دهند.

استفاده از روش ISAT در بعضی از مسائل پایا، در مقایسه با انتگرال‌گیری مستقیم افزایش سرعتی در حدود 100 تا 1000 بار به‌دست داده است [۲۸]. از این روش برای محاسبات شعله‌های پیش‌آمیخته آرام یک و دوبعدی ناپایا و یا در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ [۲۹، ۳۰] استفاده شده است. نتایج حاصله از سرعت و دقت بالای این روش حکایت دارند، به‌طوری که در این مسائل ناپایا افزایش سرعتی در حدود 4.5 تا 13 برابر گزارش شده است. تمامی این پژوهش‌ها به کاربرد روش ISAT در شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی با عدد ماخ پایین محدودند. بررسی‌های بسیار کمی در مورد کاربرد روش ISAT در جریان‌های واکنشی تراکم‌پذیر مافوق صوت و یا موج تراک وجود دارد که از آن جمله می‌توان به مطالعات مرجع [۳۱] در شبیه‌سازی دوبعدی موج تراک اشاره کرد. دونگ و همکاران [۳۱] با استفاده از روش ISAT اصلاح‌شده به بیشینه افزایش سرعتی در حدود 17.9 برابر در حل معادلات سینتیک دست یافتند. در مورد شتاب‌گیری شعله آشفته نیز تاکنون استفاده از روش ISAT گزارش نشده است. این موضوع به‌خاطر آن است که در این موارد حالت‌های ترموشیمیایی به‌شدت با زمان و مکان تغییر کرده (به‌خصوص در جبهه شعله) و در نتیجه اطلاعات ذخیره‌شده در زمان‌های قبل ممکن است که در گام‌های زمانی بعدی استفاده نشوند. بنابراین در این‌گونه موارد اندازه جدول به‌سرعت افزایش یافته و محاسبات با محدودیت حافظه مواجه می‌شوند. به‌منظور کاهش تبعات این مشکل در کار حاضر، با عبور اندازه جدول از حد معینی کل جدول به‌صورت خودبه‌خود پاک شده و عملیات ساخت جدول دوباره انجام می‌گیرد. جبهه شعله نیز، که دارای نوسانات زیادی در حالت‌های ترموشیمیایی خود است، با استفاده از انتگرال‌گیری مستقیم حل شده و داده‌های حاصل از حل آن به جدول اضافه نمی‌شوند. این کار باعث جلوگیری از رشد بی‌رویه جدول می‌شود.

اهمیت نفوذ مولکولی در انتشار شعله آرام

اگرچه در اغلب کدهای احتراقی آشفته، جایی که نفوذ اغتشاشی بر نفوذ مولکولی غلبه دارد، ضریب نفوذ مولکولی تمامی گونه‌ها یکسان فرض می‌شود، یعنی $D_i=D$ [۱۷]، اما به‌هنگام شبیه‌سازی انتشار شعله آرام با استفاده از سازوکارهای شیمیایی، به‌منظور تخمین دقیق سرعت سوزش شعله آرام، D_i باید از مدل‌های انتقال مولکولی دقیق‌تری استفاده کرد. در غیر این‌صورت سرعت سوزش شعله آرام به‌درستی محاسبه نشده که این موضوع بر شتاب‌گیری اولیه شعله و در نهایت فشار ایجادشده در محفظه تأثیرگذار خواهد بود. از آنجایی که استفاده از مدل‌های انتقال مولکولی هزینه محاسباتی نسبتاً زیادی را تحمیل می‌کند، در بسیاری از کدهای CFD، ضریب نفوذ مؤثر هر گونه شیمیایی به‌صورت جداگانه و با فرض اعداد لوئیس یا اشمیت معین محاسبه می‌شوند. اسموک و گیوانگیلی [۳۲] اولین محققانی بودند که استفاده از روش لوئیس ثابت را پیشنهاد دادند. آن‌ها با شبیه‌سازی‌های یک‌بعدی که بر روی شعله پیش‌آمیخته و همچنین شعله غیرپیش‌آمیخته جریان معکوس متان-هوا

انجام دادند، نتیجه گرفتند که عددهای لوئیس هر گونه معمولاً در عبور از جبهه شعله تغییر اندکی را تجربه می‌کنند؛ بنابراین می‌توان برای هر گونه در تمامی دماها یک عدد لوئیس پیشنهاد داد. در این حالت می‌توان ضریب نفوذ مولکولی گونه k ام نسبت به مخلوط را با استفاده از رابطه $D_k = \alpha/Le_k$ به دست آورد، به طوری که α ضریب نفوذ حرارتی مخلوط است. روش دیگر محاسبه D_k ها، استفاده از عددهای اشمیت ثابت برای هر گونه شیمیایی به صورت $D_k = \nu/Sc_k$ است [۳۳]. گیاکومزی و همکاران [۳۴] نشان دادند که فرض عدد اشمیت ثابت صحیح‌تر از فرض عدد لوئیس ثابت است؛ زیرا برای شعله‌های پیش‌آمیخته و غیرپیش‌آمیخته تغییر عدد اشمیت هر گونه نسبت به دما کمتر از تغییرات عدد لوئیس است. درحقیقت عدد اشمیت تنها به ترکیب شیمیایی وابسته بوده و وابستگی آن به دما کمتر از عدد لوئیس است. اعداد اشمیت گزارش شده در منابع با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی شعله‌های آرام (پیش‌آمیخته یا غیرپیش‌آمیخته) متفاوت به دست می‌آیند. این شبیه‌سازی‌ها معمولاً با استفاده از مجموعه نرم‌افزاری کمکین^۱ انجام می‌گیرند. برای شعله‌های پیش‌آمیخته در اغلب موارد، مقادیر اشمیت گونه‌های محاسبه شده توسط کد Premix در گازهای سوخته اندازه‌گیری می‌شود [۳۳]. در کار حاضر نیز به منظور تخمین دقیق سرعت سوزش شعله آرام از اعداد اشمیت متفاوت برای گونه‌های شیمیایی مختلف استفاده شده است. این اعداد اشمیت با استفاده از شبیه‌سازی یک‌بعدی شعله آرام پیش‌آمیخته، که با استفاده از کد Premix از مجموعه نرم‌افزاری کمکین ویرایش ۲ [۳۵] انجام گرفته، به دست می‌آیند. این اعداد برای مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا در جدول ۱ گزارش شده‌اند. ضخامت و سرعت سوزش شعله آرام برای مخلوط هیدروژن-هوای استوکیومتری با استفاده از محاسبات یک‌بعدی به ترتیب برابر ۰/۳۵ mm و ۲/۳۱ m/s به دست آمده است.

جدول ۱- اعداد اشمیت متفاوت برای گونه‌های شرکت کننده در احتراق مخلوط هیدروژن-هوا

H ₂	O ₂	H	O	OH	HO ₂	H ₂ O ₂	H ₂ O	گونه
۰/۲۱۸	۰/۷۸	۰/۱۲۸	۰/۵۰۸	۰/۵۱۷	۰/۷۸۴	۰/۷۸۹	۰/۵۶۸	عدد اشمیت

روش عددی

شبیه‌سازی حاضر در مختصات استوانه‌ای یکنواخت برای جریان تراکم‌پذیر صورت گرفته است. از آنجایی که گرادیان‌های سرعت در جهت شعاعی و محوری نسبت به جهت مماسی بیشترین مقدار را دارند، حذف جهت مماسی با فرض تقارن محوری تأثیر چندانی بر تولید آشفتگی در جریان نخواهد داشت [۱۵، ۱۴]. انتگرال‌گیری زمانی با استفاده از روش کرانک-نیکلسون صورت گرفته است. به منظور کاهش نفوذ و پخش عددی از یک روش TVD^۲ (مرتب دوم/مرتب اول) برای جمله‌های جابه‌جایی و همچنین از تقریب تفاضل مرکزی مرتبه دوم برای جمله‌های نفوذی در معادلات اندازه حرکت، بقای انرژی و گونه‌ها استفاده می‌شود. برای حل مسئله جفت‌شدگی میدان‌های سرعت و فشار از الگوریتم تصحیح فشار PISO^۳، که یک روش تکراری است، استفاده شده است.

حلگر حاضر بر پایه حلگر rhoReactingFOAM از بسته نرم‌افزاری آپن‌فوم^۴ ویرایش ۱/۷ توسعه داده شده است [۳۶]. rhoReactingFOAM حلگری برای شبیه‌سازی جریان‌های احتراقی تراکم‌پذیر آشفته با امکان استفاده از سازوکارهای شیمیایی چندمرحله‌ای و مدل‌های اغتشاشی بوده که امکاناتی نظیر روش جدول‌سازی JSAT، مدل احتراقی ATF و امکان استفاده از اعداد اشمیت متفاوت برای گونه‌های شیمیایی مختلف به آن اضافه شده است. شبیه‌سازی حاضر با استفاده از یک سیستم پردازش موازی با حافظه مشترک انجام گرفته است. این مجموعه شامل ۲ پردازشگر ۶ هسته‌ای (در مجموع ۱۲ هسته فیزیکی یا ۲۴ هسته مجازی) Intel®Xeon®E5645 با سرعت و پردازش ۲/۴ GHz، به همراه ۶۴ GB حافظه قابل دسترسی (RAM)

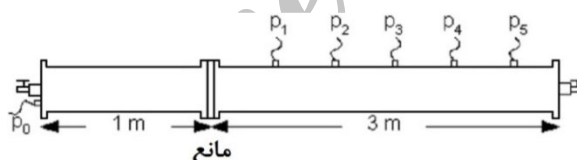
1. CHEMKIN
2. Total Variation Diminishing
3. Pressure Implicit with Splitting of Operators
4. OpenFOAM

است. محاسبات حاضر با استفاده از شبکه‌ای یکنواخت با اندازه‌ای برابر 0.5 mm انجام گرفته است. با اعمال ضریب ضخیم‌کننده 1.0 ، ضخامت شعله مصنوعی توسط 7 سلول محاسباتی حل می‌شود. البته شبکه محاسباتی با توجه به محدودیت توان رایانه‌ای در دسترس و همچنین زمان اجراهای رایانه‌ای انتخاب شده است. مدت زمان اجرا برای شبیه‌سازی حاضر در حدود 53 روز به طول انجامیده است. کمترین شبکه مورد استفاده توسط واگساتر و همکاران [۱۴] و همچنین گائوگ و همکاران [۱۶] نیز به ترتیب برابر 1 mm و 0.5 mm انتخاب شده است. البته شایان ذکر است استفاده از شبکه‌های ریزتر مسلماً جزئیات دقیق‌تری از فرآیند تحت مطالعه را نشان خواهد داد.

شرایط اولیه به صورت مخلوط احتراقی ساکن با فشار 1 bar و دمای 298 K است. شرایط مرزی بی‌دررو و عدم لغزش برای دیواره‌های عمودی و افقی و سطوح مانع اعمال شده است. جرقه نیز توسط یک ناحیه نیم‌کروی داغ به شعاع 7 mm و دمای اولیه 2200 K مدل می‌شود.

میدان محاسباتی

پیکربندی لوله مورد مطالعه در شکل ۱ آورده شده است. میدان محاسباتی محفظه احتراقی استوانه‌ای به قطر 107 mm و طول 4 m بوده که حاوی مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هواست. همان‌طور که شکل ۱ نشان می‌دهد، یک مانع در فاصله 1 m از محل جرقه قرار داده شده است. قطر قسمت باز مانع برابر 30 mm بوده که نسبت انسدادی برابر 92 درصد را ایجاد می‌کند. حسگر P_0 در محل جرقه و حسگرهای دیگر به ترتیب از 0.5 متری پایین دست مانع و با فاصله 0.5 m از یکدیگر نصب شده‌اند. اندازه سلولی تراک در مخلوط هیدروژن هوای استوکیومتری در حدود $2-1 \text{ cm}$ گزارش شده است [۳۷]. از آنجایی که قطر محفظه چندین برابر اندازه سلولی تراک است، گذار به تراک در این محفظه بسیار محتمل است. واگساتر و همکاران [۱۴، ۱۵] نیز در مطالعات تجربی و عددی خود بر روی این محفظه فرآیند گذار از شعله به تراک را مشاهده کرده‌اند.

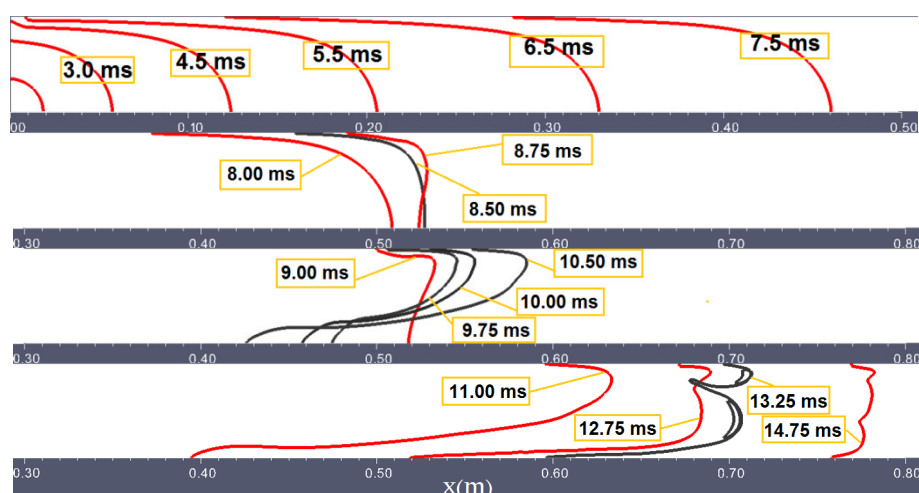


شکل ۱- طرحواره‌ای از پیکربندی محفظه احتراق به همراه یک مانع با نسبت انسداد 92%

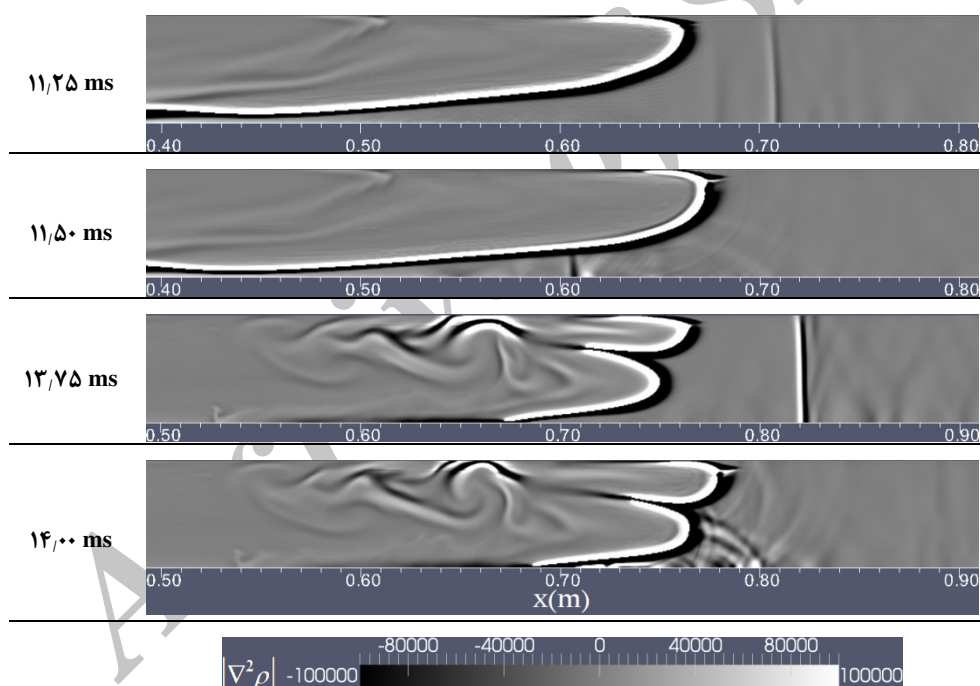
نتایج و بحث

انتشار و شتاب‌گیری شعله آرام در لوله

پس از زدن جرقه، هسته شعله اولیه به صورت کروی منبسط شده و نهایتاً به دیواره‌های لوله برخورد می‌کند. از این لحظه به بعد در اثر خاموشی قسمتی از شعله در کنار دیواره‌ها، که به علت نبود مواد واکنش‌دهنده روی می‌دهد، سطح شعله به مرور کاهش می‌یابد. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، جبهه شعله پس از زدن جرقه و طی مراحل اولیه انتشار خود، در زمان 8.5 ms تخت شده و پس از آن وارونگی شعله و پدیده شعله لاله‌ای اتفاق می‌افتد. تا این لحظه انتشار و شکل شعله تحت تأثیر امواج تراکمی، که در اثر شتاب‌گیری شعله در جلو شعله ایجاد می‌شوند، نیست و شکل‌گیری شعله لاله‌ای به پیدایش دو گردابه در پشت شعله و در کنار دیواره‌ها، رشد آن‌ها و اندرکنش آن‌ها با جبهه شعله باز می‌گردد. البته بحث در زمینه نحوه شکل‌گیری شعله لاله‌ای و سازوکارهای مؤثر بر آن خارج از اهداف مقاله حاضر است. برای مطالعه بیشتر در این زمینه می‌توان به مراجع [۲۲] و [۳۸] رجوع کرد. در شکل ۳ تصاویر سایه‌نگاری ($\nabla^2 \rho$) از اندرکنش امواج فشاری انعکاسی با جبهه شعله در زمان‌های 11.25 ، 11.50 ، 13.75 و 14.00 هزارم ثانیه مشاهده می‌شود.



شکل ۲- انتشار جبهه شعله در قسمت اول از لوله مورد بررسی (محفظه شعله)؛ در این شکل تغییرات جبهه شعله در زمان‌های مختلف مشاهده می‌شود.

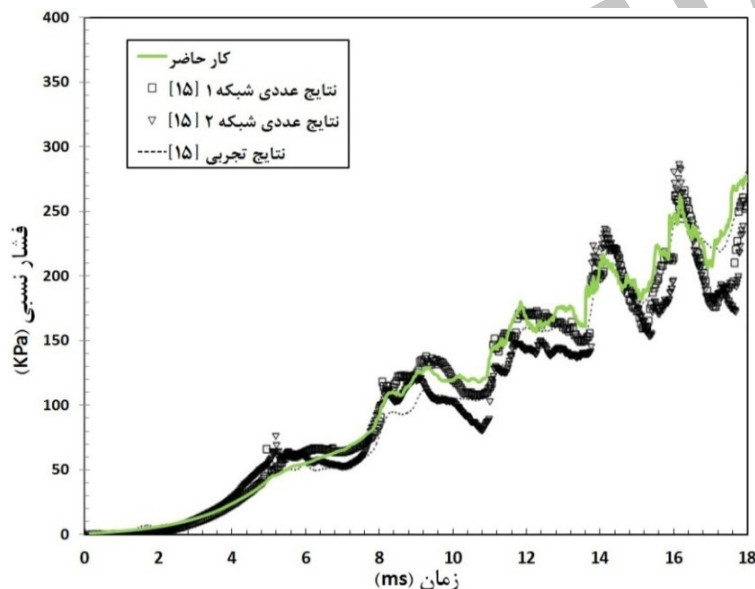


شکل ۳- تصاویر سایه‌نگاری ($|\nabla^2 p|$) از اندرکنش امواج شوک انعکاسی با جبهه شعله؛ تصاویر اول و دوم مربوط به نزدیک شدن اولین موج شوک انعکاسی و تصاویر سوم و چهارم مربوط به نزدیک شدن موج شوک انعکاسی دوم و اندرکنش آن با جبهه شعله است.

در زمان ۱۱۰ ms اولین موج تراکمی منعکس شده از مانع در حال نزدیک شدن به جبهه شعله است. در حدود زمان ۱۱٫۵ ms این موج فشاری به شعله برخورد کرده و شکل آن را تغییر می‌دهد. این تغییر در شکل‌های ۲ و ۳ در زمان ۱۳٫۲۵ ms تا ۱۳٫۷۵ ms به خوبی قابل مشاهده است. در اثر این اندرکنش مواد نسوخته به صورت یک قیف به درون مواد سوخته کشیده می‌شوند. اندرکنش موج فشاری با شعله و پیدایش ورتیسیتی‌های باروکلینیک در این حالت حتی بر ساختار شعله نیز تأثیر می‌گذارد که این موضوع نیز در این زمان‌ها قابل مشاهده است. در زمان ۱۳٫۷۵ ms دومین موج فشاری که

قوی‌تر از موج اول است به سمت جبهه شعله در حال حرکت است. این موج در زمان $14/0$ ms به شعله برخورد کرده و چین‌خوردگی‌های بیشتری را در سطح شعله ایجاد می‌کند. در این زمان تأثیر اولیه این اندرکنش به صورت بازتاب امواج آکوستیکی از سطح شعله قابل مشاهده است. به هر حال انتشار شعله در این محفظه، علاوه بر سازوکارهای مؤثر بر انتشار شعله آرام، تحت تأثیر اندرکنش با امواج تراکمی منعکس شده از مانع و دیواره بسته سمت چپ محفظه نیز قرار دارد.

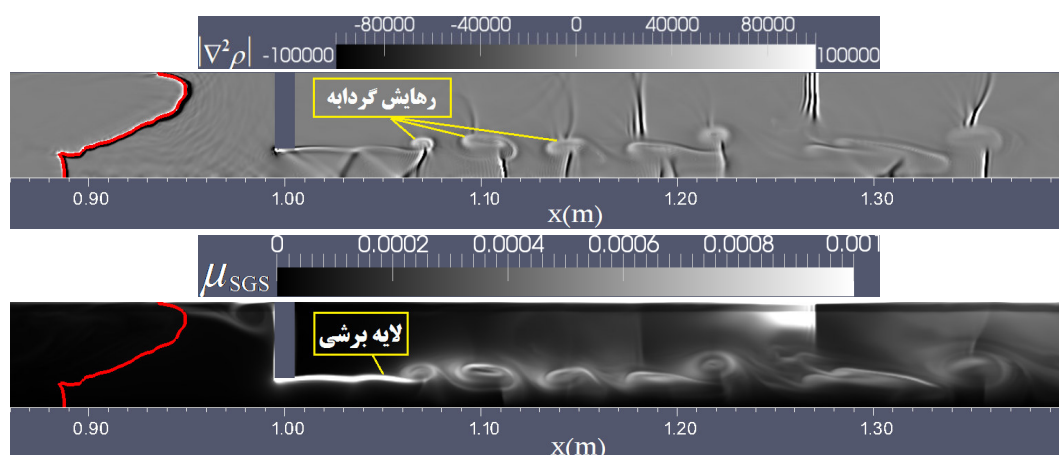
به منظور صحت‌سنجی شبیه‌سازی حاضر در شکل ۴ تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P_0 در کنار نتایج عددی و تجربی مرجع [۱۵] رسم شده است. نتایج عددی این مرجع با استفاده از دو شبکه مختلف با اندازه سلول محاسباتی 1 mm و 2 mm انجام گرفته است که این شبکه‌ها از شبکه عددی شبیه‌سازی حاضر بزرگ‌ترند. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، نمودار فشار حاضر از تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی و عددی برخوردار بوده و بیشینه‌ها و کمینه‌های فشار را با دقت بیشتری نسبت به نتایج عددی مرجع [۱۵] پیش‌بینی می‌کند. در این نمودار با برخورد شعله به دیواره‌های جانبی نوساناتی دوره‌ای در نمودار فشار شروع شده که این نوسانات با برخورد امواج فشاری با سطح شعله اغتشاشات بیشتری را تجربه می‌کنند. از تطابق خوب نمودار فشار به دست آمده با نتایج تجربی می‌توان نتیجه گرفت که سرعت انتشار شعله نیز در این محفظه به درستی پیش‌بینی شده است.



شکل ۴- تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P_0 (در این بازه زمانی شعله در محفظه اول در حال انتشار است).

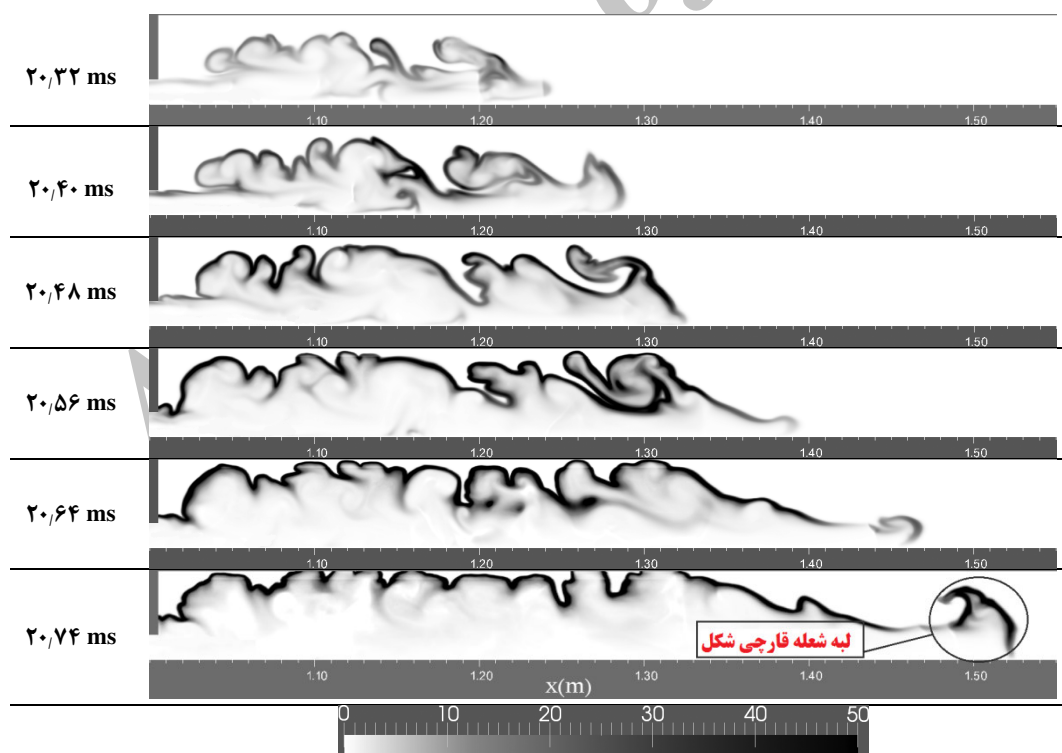
ساختار جت جریان و شعله در عبور از مانع

با شتاب‌گیری شعله به سمت مانع سرعت جریان عبوری از مانع زیاد شده و در نهایت قبل از رسیدن شعله به مانع یک جت مافوق صوت در عبور از مانع شکل می‌گیرد. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، همانند دیگر جت‌های مافوق صوت یک ساختار الماس‌مانند در پایین دست مانع قابل مشاهده است. این ساختار از امواج شوک مایل و امواج انبساطی تشکیل می‌شود. از طرفی یک لایه برشی آشفته نیز در پایین دست مانع شکل گرفته که منبع رهایش گردابه‌های بزرگ مقیاس است. اندرکنش این گردابه‌ها و امواج شوک در این شکل به خوبی مشاهده می‌شود. در این شکل، همچنین، به منظور ارزیابی آشفتگی در جت جریان، کانتور لزجت گردابه‌ای زیر شبکه آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، لایه برشی حاصل از مانع به شدت آشفته و ناپایدار بوده، اما آشفتگی خاصی در هسته اصلی جریان جت مشاهده نمی‌شود. اندرکنش شعله با این جریان جت در زمان‌های بعد باعث شکل‌گیری یک جت شعله پرسرعت آشفته خواهد شد.



شکل ۵- شکل گیری جت آشفته مافوق صوت در پایین دست مانع در زمان ۱۹,۰ ms؛ در تصویر بالا، سایه‌نگاری از میدان جریان و در تصویر پایین کانتور لزجت گردابه‌ای زیر شبکه مشاهده می‌شود. در این تصاویر خط رسم شده در بالادست مانع نشانگر جبهه شعله است.

همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، شعله به‌هنگام عبور از مانع به‌شدت تحت تأثیر ساختار جریان بوده و اندرکنش آن با لایه برشی ناپایدار پشت مانع، چین‌خوردگی‌های بزرگ مقیاسی را در سطح شعله ایجاد می‌کند. در حقیقت با ورود شعله به این جت آشفته مساحت سطح شعله به ناگهان افزایش شدیدی را تجربه کرده و بنابراین نرخ آزادسازی انرژی و به‌دنبال آن سرعت انتشار شعله نیز به‌ناگاه افزایش می‌یابند.



شکل ۶- کانتور نرخ آزادسازی انرژی (J/s) به‌هنگام عبور جت مانند شعله از مانع؛ تصاویر فوق از بالا به پایین مربوط به زمان‌های ۲۰,۳۲، ۲۰,۴۰، ۲۰,۴۸، ۲۰,۵۶، ۲۰,۶۴ و ۲۰,۷۴ هزارم ثانیه‌اند.

در حدود زمان ۲/۷۴ ms در لبه حمله شعله، ناپایداری رایلی-تیلور^۱ فعال شده و جبهه قارچمانندی، که نشانه این نوع ناپایداری است، به وجود می‌آید. در این حالت مساحت سطح شعله بیش از پیش افزایش یافته که منجر به شتاب‌گیری بیشتر شعله و شکل‌گیری یک موج شوک قوی در جلو شعله می‌شود. از این رو شعله شتاب‌گیرنده با عبور از مانع در طی مسیری کمتر از ۱ m و در زمانی کمتر از ۲ ms به تراک تبدیل می‌شود که جزئیات آن در ادامه بررسی می‌شود.

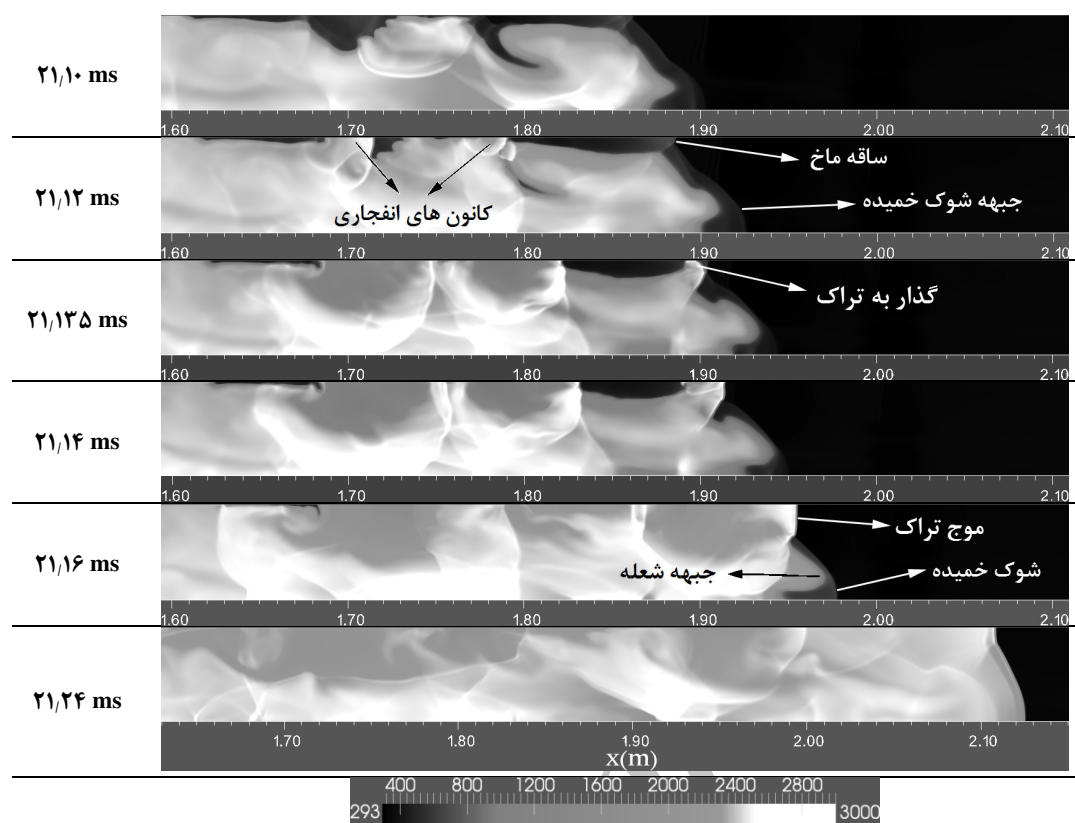
گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله

در شکل ۷ مراحل پایانی انتشار شعله و گذار به تراک مشاهده می‌شود. در این زمان‌ها یک موج شوک خمیده قوی در جلوی شعله شکل گرفته که انعکاس آن از دیواره لوله یک ساقه ماخ را تشکیل می‌دهد. در زمان ۲۱/۱۲ ms دو انفجار محلی در پشت لبه حمله شعله قابل مشاهده است. این انفجارها در لایه‌ای از مواد نسوخته مجاور دیوار که در اثر انبساط عرضی شعله متراکم شده‌اند روی می‌دهند. البته این انفجارهای محلی، از آنجایی که توسط مواد سوخته احاطه شده‌اند، قادر به گسترش نیستند. رخداد چنین انفجارهای محلی در پشت لبه حمله شعله توسط گائاوغ و همکاران [۱۶] نیز گزارش شده است. در حدود زمان ۲۱/۱۳۵ ms یک کانون انفجاری دیگر درست در پشت ساقه ماخ پیشرو و در مجاورت دیواره لوله شکل گرفته و به صورت یک موج تراک به سمت مواد نسوخته حرکت می‌کند. این موج تراک به مرور کل پهنای محفظه را در بر گرفته و به صورت یک تراک با ساختاری سه‌موجی منتشر می‌شود. فاصله طی شده از مانع (محل شکل‌گیری جت شعله آشفته) تا مکان DDT در حدود ۸/۵ برابر قطر لوله است. پس از شکل‌گیری موج تراک با ساختار سه‌موجی، جبهه موج با سرعت متوسطی در حدود ۱۸۳۰ m/s فاصله بین حسگرهای P₂ تا P₅ را طی می‌کند. این سرعت ثبت‌شده در حدود ۷/۵ درصد کمتر از سرعت تراک CJ در این مخلوط است که با توجه به تأثیر دیواره‌های محفظه و انحنای جبهه موج مورد انتظار است.

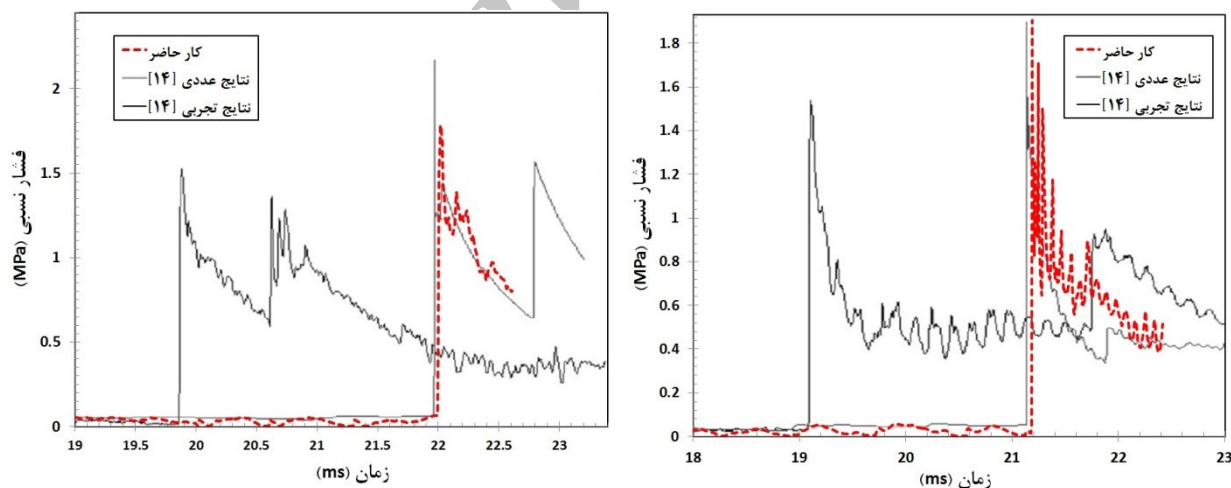
مشاهدات حاضر نشان می‌دهد که اگر محفظه‌ای که جت شعله در آن تخلیه می‌شود دارای محدودیت زیادی باشد (مثلاً همانند کار حاضر دارای قطر کم باشد) دیواره‌ها تأثیر بسزایی در رفتار شعله و آغازش تراک خواهند داشت، به طوری که آغازش تراک دقیقاً در مجاورت دیواره و درست در پشت ساقه ماخ شکل گرفته در اثر انعکاس شوک پیشرو از دیواره روی می‌دهد. بنابراین، گذار به تراک در محفظه حاضر که دارای قطر روزنه به اندازه سلولی تراک بسیار کمی است ($d/\lambda \approx 2$) نیز مشاهده می‌شود. این نسبت بسیار شبیه به معیار ارائه‌شده توسط لیبرمن و همکاران [۱۱] ($d/\lambda \geq 1-2$) است.

به منظور ارزیابی دقیق‌تر شبیه‌سازی حاضر در بازتولید فرآیند DDT و فشار ایجادشده در محفظه در شکل ۸ تاریخچه فشار ثبت‌شده در حسگرهای P₂ و P₅ در کنار نتایج تجربی و عددی مرجع [۱۴] آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج عددی حاضر و نتایج عددی مرجع [۱۴] در حدود ۲ ms رخداد DDT را دیرتر پیش‌بینی می‌کنند که این مقدار بیانگر تقریباً ۱۰ درصد خطای نسبی است. این موضوع نشان می‌دهد که سرعت سوزش آرام و آشفته شعله، که تحت تأثیر شبکه محاسباتی، مدل‌سازی ضریب نفوذ مولکولی آرام و مدل‌های زیرشبکه اغتشاشی‌اند، با اندکی اختلاف نسبت به واقعیت پیش‌بینی شده‌اند. از آنجایی که شبکه محاسباتی در شبیه‌سازی‌های عددی بسیار بزرگ‌تر از مقیاس طولی نقاط داغ است، این احتمال وجود دارد که دمای نقاط داغ در طول سلول متوسط‌گیری شده و در نهایت دمای نقاط داغ کمتر پیش‌بینی شود که این موضوع وقوع DDT را به تأخیر می‌اندازد. از طرفی گائاوغ و همکاران [۳۹] در مطالعات تجربی خود نشان داده‌اند که پس از وارونگی شعله در محفظه اول، فرض دوبعدی بودن شعله فرض دقیقی نیست که این موضوع بر شتاب‌گیری شعله در مراحل اولیه تأثیر گذار است. البته تاریخچه‌های فشار رسم‌شده با دقت قابل قبولی رفتار نمودار فشار در محفظه را بازسازی کرده‌اند. باید توجه داشت که مکان و زمان DDT در مطالعات تجربی نیز به علت طبیعت تصادفی ظهور نقاط داغ و آغازش تراک از پراکندگی قابل توجهی برخوردارند که این موضوع نیز تأثیر زیادی بر اختلاف نتایج عددی و تجربی خواهد داشت.

1. Rayleigh-Taylor instability



شکل ۷- کانتور دما (K) برای مراحل پایانی شتابگیری شعله و گذار به تراک؛ DDT در پشت ساقه ماخ و در مجاورت دیوار روی می‌دهد. تصاویر فوق به ترتیب مربوط به زمان‌های ۲۱،۱۰، ۲۱،۱۲، ۲۱،۱۳۵، ۲۱،۱۴، ۲۱،۱۶ و ۲۱،۲۴ هزارم ثانیه است.



شکل ۸- تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P2 (سمت راست) و حسگر P5 (سمت چپ)

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در کار حاضر به‌منظور بررسی و ارزیابی رویکرد عددی LES/ATF/ISAT و همچنین شناخت بهتر از فیزیک فرآیند گذار از جت شعله آشفته به تراک به مطالعه عددی فرآیند شتابگیری شعله و آغازش تراک در لوله‌ای با یک مانع و با فرض تقارن

محوری پرداخته شد. این شبیه‌سازی دارای ویژگی‌های متفاوت و بعضاً خاصی نسبت به دیگر مطالعات انجام گرفته بر روی پدیده DDT در محفظه‌های بدون مانع و حتی محفظه‌هایی با موانع متعدد پشت سرهم است. در ابتدا، پس از زدن جرقه، شعله به‌صورت آرام منتشر می‌شود. در شبیه‌سازی انتشار شعله آرام محاسبه دقیق ضریب نفوذ مولکولی گونه‌های شیمیایی و همچنین دقت شبکه عددی از اهمیت خاصی برخوردار است. از آنجایی که ضخامت شعله آرام کمتر از ضخامت شعله آشفته است، برای حل ساختار شعله آرام به شبکه ریزتری نیاز است. با شتاب‌گیری شعله امواج تراکمی‌ای در جلوی شعله ایجاد شده که پس از انعکاس از موانع با سطح شعله برخورد کرده که این موضوع بر رفتار و تغییر شکل شعله تأثیرگذار خواهد بود. ویژگی دیگر این مطالعه شکل‌گیری یک جت آشفته مافوق صوت در ناحیه پایین‌دست مانع است. در مرحله‌ای از شتاب‌گیری شعله جریان در گلوگاه مانع خفه می‌شود. بنابراین، پس از مانع، جریان مافوق صوت شده و ساختاری الماس‌مانند متشکل از امواج شوک مایل و انبساطی قابل ملاحظه است. ویژگی دیگر این مطالعه ورود شعله به این ساختار الماسی و اندرکنش با لایه برشی آشفته حاصل از مانع است. در مجموع، از آنجایی که در این مطالعه پدیده‌های فیزیکی متفاوتی مشاهده می‌شوند، می‌توان ارزیابی دقیقی از رویکرد عددی LES/ATF/ISAT به‌دست آورد. همان‌طور که مشاهده شد، شبیه‌سازی‌های حاضر به‌خوبی مراحل مختلف انتشار یک شعله در محفظه نیمه‌بسته را بازتولید کرده‌اند. نمودار فشار ثبت‌شده در محفظه به‌هنگام انتشار شعله و همچنین پس از آغازش تراک با نتایج تجربی مقایسه شدند که در مورد اول تطابق بسیار خوبی مشاهده شد. نتایج حاضر آغازش تراک در این محفظه را اندکی دیرتر از نتایج تجربی گزارش کرده که البته در مورد عوامل مؤثر بر آن بحث شد. آغازش تراک در این محفظه در مجاورت دیوار و درست در پشت ساقه ماخ شکل‌گرفته در محفظه روی می‌دهد که این موضوع نشانگر تأثیر بسزای دیواره‌ها در ایجاد موج تراک است. البته این گذار به‌دنبال یک سری انفجارهای محلی روی داده در کنار دیوار و در پشت لبه حمله شعله به‌وقوع می‌پیوندد. در کار حاضر فاصله طی‌شده از مانع (محل شکل‌گیری جت شعله آشفته) تا مکان DDT در حدود ۸٫۵ برابر قطر لوله به‌دست آمد. مطالعه حاضر نشان داد که رویکرد عددی پیشنهادشده از توانایی قابل قبولی در بررسی فرآیندهای شتاب‌گیری شعله و گذار از جت شعله آشفته به تراک برخوردار است. البته به‌منظور بهبود نتایج حاضر می‌توان تأثیر مدل زیرشبکه آشفته‌گی و همچنین تابع عملکرد مدل ATF را دقیق‌تر مطالعه کرد.

منابع

1. J. H. S. Lee and I. O. Moen, "The Mechanism of Transition from Deflagration to Detonation in Vapor Cloud Explosions," *Progress in Energy and Combustion Science*, 6, 1980, pp. 359-389.
2. A. J. Higgins, P. Pinard, A. C. Yoshinaka and J. H. S. Lee, "Sensitization of Fuel-Air Mixtures for Deflagration-to-Detonation Transition," G. D. Roy, S. M. Frolov, D. W. Netzer and A. A. Borisov Editors, *High-Speed Deflagration and Detonation: Fundamentals and Control*, ELEX-KM Publishers, Moscow, Russia, 2001, pp. 45-62.
3. R. Knystautas, J. H. S. Lee, I. Moen and H. G. Wagner, "Direct Initiation of Spherical Detonation by a Hot Turbulent Gas Jet," *Proceedings of the Combustion Institute*, 17, 1979, pp. 1235-1245.
4. D. J. Mackay, S. B. Murray, I. O. Moen and P. A. Thibault, "Flame-Jet Ignition of Large Fuel-Air Clouds," *Proceedings of the Combustion Institute*, 22, 1988, pp. 1339-1353.
5. I. O. Moen, D. Bjerketvedt, T. Engebretsen, A. Jenssen, B. H. Hjertager and J. R. Bakke, "Transition to Detonation in a Flame Jet," *Combustion and Flame*, 75, 1989, pp. 297-308.
6. A. Üngüt and P. Shuff, "Deflagration to Detonation Transition from a Venting Pipe," *Combustion Science and Technology*, 63, 1989, pp. 75-87.
7. F. Carnasciali, J. H. S. Lee, R. Knystautas and F. Fineschi, "Turbulent Jet Initiation of Detonation," *Combustion and Flame*, 84, 1991, pp. 170-180.
8. M. Inada, J. H. S. Lee and R. Knystautas, "Photographic Study of the Direct Initiation of Detonation by a Turbulent Jet," *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 153, 1993, pp. 253-269.
9. S. B. Dorofeev, A. V. Bezmelnitsin, V. P. Sidorov, J. G. Yankin and I. D. Matsukov, "Turbulent Jet Initiation of Detonation in Hydrogen-Air Mixtures," *Shock Waves*, 6, 1996, pp. 73-78.
10. J. C. Krok, *Jet initiation of deflagration and detonation*, PhD Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 1997.
11. D. H. Lieberman, K. L. Parkin and J. E. Shepherd, "Detonation Initiation by a Hot Turbulent Jet for Use in Pulse Detonation Engines," *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Indianapolis, USA, 2002, AIAA 02-3909.

12. G. O. Thomas and A. Jones, "Some Observations of the Jet Initiation of Detonation," *Combustion and Flame*, 120, 2000, pp. 392-398.
13. S. P. Medvedev, S. V. Khomik, H. Olivier, A. N. Polenov, A. M. Bartenev and B. E. Gelfand, "Hydrogen Detonation and Fast Deflagration Triggered by a Turbulent Jet of Combustion Products," *Shock Waves*, 14, No. 3, 2005, pp. 193-203.
14. K. Vaagsaether, V. Knudsen and D. Bjerketvedt, "Simulation of Flame Acceleration and DDT in H₂-Air Mixture with a Flux Limiter Centered Method," *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 2007, 2186-2191.
15. K. Vaagsaether, *Modelling of gas explosions*, PhD Thesis, Faculty of Technology, Telemark University College, Norway, 2010.
16. A. V. Gaathaug, K. Vaagsaether and D. Bjerketvedt, "Experimental and Numerical Investigation of DDT in Hydrogen-Air Behind a Single Obstacle," *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 2012, pp. 17606-17615.
17. T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and Numerical combustion*, Second Edition, R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, USA, 2005.
18. T. D. Butler and P. J. O'rourke, "A Numerical Method for Two Dimensional Unsteady Reacting Flow," *Proceedings of the Combustion Institute*, 16, 1977, pp. 1503-1515.
19. C. Colin, F. Ducros, D. Veynante and T. Poinso, "A Thickened Flame Model for Large Eddy Simulations of Turbulent Premixed Combustion," *Physics of Fluids*, 12, 2000, pp. 1843-1863.
20. C. Angelberger, D. Veynante and F. Egolfopoulos, "LES of Chemical and Acoustic Forcing of a Premixed Dump Combustor," *Flow, Turbulence and Combustion*, 65, 2000, pp. 205-222.
21. F. Charlette, C. Meneveau, D. Veynante and T. Poinso, "A Power-Law Flame Wrinkling Model for LES of Premixed Turbulent Combustion, part I Non-Dynamic Formulation and Initial Tests," *Combustion and Flame*, 131, 2002, pp. 159-180.
22. H. Xiao, X. Shen and J. Sun, "Experimental Study and Three-Dimensional Simulation of Premixed Hydrogen/Air Flame Propagation in a Closed Duct," *International Journal of Hydrogen Energy*, 37, 2012, pp. 11466-11473.
23. H. Xiao, W. An, Q. Duan and J. Sun, "Dynamics of Premixed Hydrogen/Air Flame in a Closed Combustion Vessel," *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.07.082>.
24. P. Quillatre, O. Vermorel and T. Poinso, "Large Eddy Simulation of Turbulent Premixed Flames Propagation in a Small Scale Venting Chamber: Influence of Chemistry and Transport Modeling," *7th Mediterranean Combustion Symposium*, Sardinia, Italy, Sep 11-15, 2011.
25. A. Yoshizawa and K. Horiuti, "A Statistically-Derived Subgrid-Scale Kinetic Energy Model for the Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows," *Journal of the Physical Society of Japan*, 54, 1985, pp. 2834-2839.
26. S. Emami and K. Mazaheri, "Numerical Investigation of the Effects of Blockage Ratio and Obstruction Geometry on Flame Acceleration and Overpressure of Gas Explosion," *Fuel and Combustion*, 5, No. 2, 2012, pp. 1-24. (in Farsi)
27. J. Li, Z. Zhao, A. Kazakov and F.L. Dryer, "An Updated Comprehensive Kinetic Model of Hydrogen Combustion," *International Journal of Chemical Kinetics*, 36, 2004, pp. 566-575.
28. S. B. Pope, "Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry using in Situ Adaptive Tabulation," *Combustion Theory and Modelling*, 1, 1997, pp. 41-63.
29. M. A. Singer and S. B. Pope, "Exploiting ISAT to Solve the Reaction-Diffusion Equation," *Combustion Theory Modelling*, 8, 2004, pp. 361-383.
30. M. A. Singer, S. B. Pope and H. N. Najm, "Modeling Unsteady Reacting flow with Operator Splitting and ISAT," *Combustion and Flame*, 147, 2006, pp. 150-162.
31. G. Dong, B. Fan and Y. Chen, "Acceleration of Chemistry Computations in Two-Dimensional Detonation Induced by Shock Focusing using Reduced ISAT," *Combustion Theory and Modelling*, 11, 2007, pp. 823-837.
32. M. D. Smooke and V. Giovangigli, "Formulation of the Premixed and Nonpremixed Test Problem," *Lecture Notes in Physics*, 384, pp. 1-28, Springer-Verlag, New York, 1991.
33. L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, P. Kaufmann, W. Krebs and D. Veynante, "Large-Eddy Simulation of Turbulent Combustion for Gas Turbines with Reduced Chemistry," *Proceedings of the Summer Program 2002*, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2002.
34. E. Giacomazzi, F. R. Picchia and N. Arcidiacono, "On the Distribution of Lewis and Schmidt Numbers in Turbulent Flames," *30th Meeting on Combustion*, The Italian Section of The Combustion Institute, Napoli, Italy, June 20-22, 2007.
35. R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke and J. A. Miller, "A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames," Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.
36. H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak and C. A. Fureby, "A Tensorial Approach To Computational Continuum Mechanics using Object-Oriented Techniques," *Computers and Physics*, 126, 1988, pp. 620-631.
37. V. N. Gamezo, T. Ogawa and E. S. Oran, "Numerical Simulations of Flame Propagation and DDT in Obstructed Channels Filled With Hydrogen-Air Mixture," *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, 2007, pp. 2463-2471.
38. C. Clanet and G. Searby, "On the Tulip Flame Phenomenon," *Combustion and Flame*, 105, 1996, pp. 225-238.
39. A. V. Gaathaug, D. Bjerketvedt and K. Vaagsaether, "Experiments with Flame Propagation in a Channel with a Single Obstacle and Premixed Stoichiometric H₂-Air," *Combustion Science and Technology*, 182, No. 11, 2010, pp. 1693-1706.

English Abstract

Numerical Study of the Transition from Turbulent Flame Jet to Detonation in a Tube with a Single Obstacle

Sobhan Emami Koopaei, Kiumars Mazaheri and Ali Shamooinpour
Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

(Received: 2013.12.11, Received in revised form: 2014.3.16, Accepted: 2014.3.19)

In the present study, a large eddy simulation (LES) of the flame acceleration and the transition from turbulent flame jet to detonation in a tube with a single obstacle containing premixed stoichiometric hydrogen-air was conducted. The subgrid-scale combustion was represented by the artificially thickened flame (ATF) approach. For detailed modeling of chemical reactions effects on the present phenomenon, a 21-step kinetic scheme was used. In situ adaptive tabulation (ISAT) method was also exploited to reduce the computational cost of using detailed chemistry. The present results show that the proposed LES/ATF/ISAT approach well reproduces the physical phenomenon that occurs during the flame propagation and the transition from turbulent flame jet to detonation. It is observed that the flame behavior and the detonation initiation are influenced by tube walls. Indeed, detonation initiation occurs close to the wall and behind a Mach stem which is formed due to reflection of the leading shock from the wall. Moreover, the detonation initiates following a series of local explosions that occurs behind the leading shock.

Keywords: Turbulent flame jet, Detonation initiation, Flame acceleration, Large eddy simulation, Artificial thickend flame model