

## بررسی عددی رفتار دینامیکی شعله پیش‌آمیخته هیدروژن-هوا در عبور از خم ۹۰ درجه‌ای

احمد مصلی‌نژاد<sup>۱</sup> و سبحان امامی‌کوپائی<sup>۲\*</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد، ایران، ahmad.mosallanejad@yahoo.com

۲- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد نجف آباد، دانشگاه آزاد اسلامی، نجف آباد، ایران، sobhan@pmc.iaun.ac.ir

\* نویسنده مخاطب

تاریخ دریافت: ۹۶/۱۰/۲۷، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۲/۲۶، پذیرش: ۹۷/۲/۲۸

**چکیده:** شعله پیش‌آمیخته منتشر شده در یک کانال به‌طور ذاتی ناپایدار است. این ناپایداری خود را به‌صورت وارونگی شعله و نهایتاً شعله لاله‌ای خود را نشان می‌دهد. در کار حاضر، به مطالعه تأثیر خم ۹۰ درجه‌ای بر انتشار شعله لاله‌ای پرداخته شده است. در این شبیه‌سازی عددی، که به‌صورت سه‌بعدی انجام گرفته، از رویکرد اغتشاشی شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) و مدل احتراقی شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF) به‌همراه سینتیک شیمیایی ۷ مرحله‌ای استفاده شده است. نتایج حاضر نشان می‌دهند که با شروع تغییر شکل شعله در قسمت افقی کانال، که هم‌زمان با کاهش رشد فشار و سرعت پیشروی جبهه شعله است، وارونگی در جبهه شعله روی می‌دهد. در این لحظات، شکل‌گیری یک جفت گردابه بزرگ مقیاس در گاز سوخته و در مجاورت شعله باعث تغییر میدان جریان اطراف جبهه شعله می‌شود. در بخش افقی کانال، نمای سه‌بعدی شعله به شکل یک شعله لاله‌ای با چهار زبانه کاملاً مشابه است. با ورود شعله به خم، زبانه‌های پایینی شعله سرعت پیشروی بیشتری داشته، به‌طوری‌که پس از مدتی زبانه‌های بالایی کاملاً محو شده و زبانه‌های پایینی کل عرض کانال را اشغال می‌کنند. اگر چه وجود خم تغییر قابل توجهی بر روند افزایشی فشار محفظه نداشته، اما دامنه نوسانات سرعت را تا حدی کاهش داده است.

**کلیدواژگان:** دینامیک شعله، شعله لاله‌ای، شعله لاله‌ای تاب‌خورده، مخلوط هیدروژن-هوا، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ

### مقدمه

ذخایر سوخت‌های فسیلی رایج، در حال حاضر، رو به پایان است. در سالیان اخیر، به‌دلیل نگرانی‌های اقتصادی و زیست‌محیطی که در استفاده از سوخت‌های فسیلی وجود دارد، از جمله قیمت بالای سوخت، گرم‌شدن کره زمین و آلودگی محیط زیست، توجه زیادی به سوخت‌های جایگزین جدید شده است. در این بین، هیدروژن، به‌لحاظ ویژگی‌های منحصربه‌فردی که دارد، به‌عنوان یک حامل انرژی در دهه‌های آتی شناخته می‌شود. از جمله این ویژگی‌ها می‌توان به بهره‌وری بالقوه بالا، بازده احتراقی بسیار زیاد، احتراق پاک، به‌علت عدم وجود کربن در ترکیب شیمیایی آن، برگشت‌پذیری چرخه تولید، ظرفیت انرژی بالا، قابلیت سوختن در موتورهای احتراق داخلی و پیل‌های هیدروژنی و فراوانی بسیار زیاد این عنصر در طبیعت اشاره کرد [۱، ۲]. البته، در مقایسه با سوخت‌های هیدروکربنی، هیدروژن خصوصیات دیگری نیز دارد که از آن جمله می‌توان به ضریب نفوذ حرارتی و جرمی بسیار بالا، سرعت سوزش آرام شعله بیشتر، محدوده اشتعال‌پذیری نسبتاً وسیع، به‌ویژه در مخلوط رقیق، و پایین‌بودن کمینه انرژی افروزش اشاره کرد. این خصوصیات نگرانی‌های بسیار جدی‌ای در زمینه تولید، ذخیره‌سازی، انتقال و استفاده از سوخت هیدروژن به‌وجود آورده که جامعه علمی را بر آن داشته تا مطالعات دقیقی در زمینه دینامیک شعله

پیش‌آمیخته هیدروژن-هوا در محیط‌های بسته و باز به‌انجام رساند. به‌طور کلی، بررسی دینامیک شعله پیش‌آمیخته منتشره در لوله یا کانال از اهمیت زیادی برخوردار بوده، زیرا که این موضوع ارتباط تنگاتنگی با شتاب‌گیری شعله، فشار ایجادشده در محفظه و در نهایت تولید امواج تراک<sup>۱</sup> دارد [۴،۳]. دینامیک شعله پیش‌آمیخته منتشر شده یک لوله به‌طور ذاتی ناپایدار است. این ناپایداری به‌صورت وارونگی شعله و در نهایت شعله لاله‌ای<sup>۲</sup> بروز می‌یابد [۶،۵]. اولین تصاویر از روی دادن وارونگی در جبهه شعله در حال انتشار توسط الیس در سال ۱۹۲۸ انتشار یافت. او مشاهده کرد که شکل شعله در حال انتشار در لوله حاوی مخلوط پیش‌آمیخته CO-O<sub>2</sub>، در مرحله‌ای به‌صورت ناگهانی از جبهه خمیده (محدب به‌سمت واکنش‌گرها) به‌صورت جبهه تخت درآمده و سپس به‌صورت جبهه‌ای مقعر (به‌سمت مواد نسوخته) تغییر می‌یابد [۷]. این شکل شعله بعدها شعله لاله‌ای نام گرفت [۸]. پس از زدن جرقه و آغاز واکنش‌ها، رفتار شعله در یک کانال را می‌توان به پنج مرحله تقسیم کرد: شعله کروی یا انبساط شعله به‌صورت کروی و با سرعت ثابت، شعله انگشتی که بیانگر گسترش بیشتر شعله در راستای طولی کانال است، تماس جبهه شعله با دیواره‌ها و به دنبال آن خاموشی شعله در مجاورت دیواره‌ها و شکل‌گیری شعله محدب، شعله لاله‌ای و در نهایت شعله لاله‌ای تاب‌خورده<sup>۳</sup>. در شکل ۱، طرحواره‌ای از مراحل مختلف انتشار شعله پیش‌آمیخته در یک کانال بسته نشان داده شده است. در حین مراحل اولیه انتشار، سطح شعله به سرعت افزایش می‌یابد. زمانی که دامنه‌های شعله به دیواره‌های کانال می‌رسند، سرعت شعله ناگهان کاهش می‌یابد. در این حالت، سطح شعله در اثر خاموشی رخ داده در کنار دیواره‌ها به‌سرعت کاهش می‌یابد. همچنین، شعاع خمیدگی قسمت جلویی شعله افزایش می‌یابد. با افت سرعت انتشار شعله تغییر شکل شعله از حالت خمیده به تخت و در نهایت وارونگی سطح شعله و ایجاد شعله لاله‌ای کلاسیک مشاهده می‌شود [۹]. بسته به نوع مخلوط احتراقی و همچنین شرایط مرزی، شعله لاله‌ای کلاسیک می‌تواند در ادامه انتشار خود به یک شعله لاله‌ای تاب‌خورده تبدیل شود. در این نوع شعله، تاب‌خوردگی‌هایی در لبه‌های اصلی شعله لاله‌ای پدیدار می‌شود [۱۰].

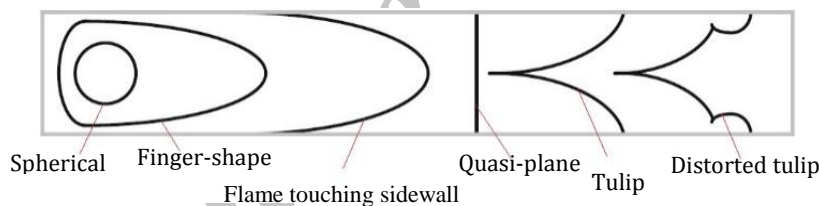


Figure 1- Stages of distorted tulip flame formation in a premixed mixture [11]

شکل ۱- مراحل شکل‌گیری شعله لاله‌ای تاب‌خورده در یک مخلوط پیش‌آمیخته [۱۱]

شکل‌گیری شعله لاله‌ای و سازوکار تشکیل آن به وسیله مدل‌های تجربی، نظری و عددی مختلفی مورد بررسی قرار گرفته و نظریات مختلفی درباره علت شکل‌گیری این نوع شعله ارائه شده است. به‌عنوان نمونه، عواملی نظیر ناپایداری‌های هیدرودینامیکی و به‌ویژه ناپایداری رایلی-تیلور (RT) [۱۲،۱۳]، اندرکنش شعله با جریان حاصل از شعله [۱۴]، اندرکنش امواج فشاری و شعله [۱۵]، تاثیر لایه مرزی و اثرات لزجتی بر جبهه شعله [۱۶،۱۷]، تاثیر جریان‌های چرخشی موجود در گازهای سوخته بر جبهه شعله [۱۸،۱۹]، و توزیع غیریکنواخت فشار در جلو جبهه شعله، که باعث ایجاد جریان برگشتی در مرحله قبل از وارونگی شعله می‌شود [۸]، به‌عنوان عوامل اصلی شکل‌گیری شعله لاله‌ای بیان شده‌اند. پیچیدگی فیزیک حاکم بر شکل‌گیری شعله لاله‌ای باعث شده که در حال حاضر نظر واحدی، حداقل درباره سازوکار آغازین شکل‌گیری این نوع شعله، وجود نداشته باشد. با این حال، بررسی‌های عددی نشان می‌دهد که در حین شکل‌گیری شعله لاله‌ای یک جفت گردابه بزرگ‌مقیاس در گاز

1. Detonation
2. Tulip Flame
3. Distorted tulip Flame
4. Rayleigh-Taylor

سوخته و در مجاورت شعله شکل گرفته که باعث تغییر میدان جریان اطراف جبهه شعله می‌شود [۱۵]. در سالیان اخیر، سازوکار شکل‌گیری شعله لاله‌ای تاب‌خورده نیز مورد بررسی بیشتری قرار گرفته است. اگر چه ژبائو و همکاران [۲۰] اندرکنش بین شعله و امواج فشاری را مسبب اصلی شکل‌گیری شعله لاله‌ای دانسته‌اند، اثرات ناشی از ناپایداری‌های هیدرودینامیکی، جریان القاشده توسط شعله و حضور مرزها و سطوح نیز بر شکل‌گیری شعله لاله‌ای تاب‌خورده بسیار تاثیرگذار است [۲۱].

اکثر مطالعات انجام‌شده تاکنون به دینامیک شعله در کانال‌های مستقیم اختصاص داشته‌اند، با وجود این، اجزای غیرمستقیمی، مانند سهراهی و خم (زانوئی)، به‌طور گسترده در بسیاری از لوله‌کشی‌ها و کانال‌کشی‌های صنعتی استفاده می‌شوند؛ بنابراین، بررسی تأثیر این اجزا بر دینامیک شعله نیز موضوع مهم و کاربردی است که کمتر مورد توجه قرار گرفته است. در یک مطالعه تجربی، که توسط تاگوا و همکاران [۲۲] بر روی ویژگی‌های انتقال حرارت شعله آشفته غیرپیش‌آمیخته در مجرای مربعی با خم ۱۸۰ درجه انجام پذیرفت، این نتیجه به‌دست آمد که با توجه به گرادیان فشار قوی در جهت شعاعی خم، پدیده انتقال حرارت به‌طور غیرعادی در خلاف جهت گرادیان انجام می‌گیرد. ژو و همکاران [۲۳] به مطالعه تجربی و عددی تأثیر خم ۹۰ درجه بر انتشار شعله پیش‌آمیخته پروپان-هوا پرداختند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد با نزدیکی شعله لاله‌ای به خم و تشکیل نواحی گردابی در گازهای نسوخته، که در مجاورت دیواره‌های بالایی و پایینی خم شکل می‌گیرند، لبه‌های شعله از دیواره‌های خم فاصله می‌گیرند. این پدیده ریزش شعله<sup>۱</sup> نامیده شد. ناحیه گردابی شکل‌گرفته در کنار سطح پایینی گسترده‌تر بوده و در این حالت لبه پایینی شعله با سرعت بیشتری وارد خم می‌شود. این شبیه‌سازی‌های عددی بدون مدل‌سازی دقیق ساختار شعله و بدون استفاده از سینتیک‌های چندمرحله‌ای و مدل اغتشاشی انجام گرفته است و چین‌خوردگی‌های غیرفیزیکی را در جبهه شعله عبوری از خم پیش‌بینی می‌کند. بررسی تأثیر خم ۹۰ درجه بر انتشار شعله لاله‌ای در مخلوط پیش‌آمیخته پروپان-هوا توسط ژبائو و همکاران [۲۴] نیز مورد مطالعه قرار گرفت. در کار آن‌ها، که با استفاده از مدل اغتشاشی LES<sup>۲</sup> و مدل احتراقی شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF)<sup>۳</sup> به‌همراه سینتیک تک‌مرحله‌ای صورت گرفت، مشاهده شد که در قسمت افقی کانال شعله لاله‌ای با ساختار سه‌بعدی و با چهار زبانه شکل می‌گیرد. با ورود شعله به خم، زبانه‌های پایینی با سرعت بیشتری منتشر می‌شوند. یافته‌های آن‌ها نشان می‌دهد که افت گرما از دیواره‌ها تأثیر بسزایی بر تغییر شکل جبهه شعله و فشار محفظه دارد. فشار پیش‌بینی‌شده در محفظه با فرض دیواره‌های بی‌دررو تفاوت زیادی با نتایج تجربی داشته که این موضوع با فرض دیواره‌های هم‌دما تا حدود بسیار زیادی تصحیح می‌شود. در مطالعه دیگری، ژبائو و همکاران [۲۵، ۲۶] به بررسی عددی و تجربی تأثیر خم ۹۰ درجه‌ای بر مراحل آغازین انتشار شعله پیش‌آمیخته پروپان-هوا پرداختند. اگر چه وجود خم در مسیر شعله انگشتی باعث حرکت سریع‌تر جبهه شعله در نزدیکی دیواره پایینی خم می‌شود، اما با ورود جبهه شعله به قسمت افقی کانال باز هم جبهه شعله لاله‌ای، البته با شکلی نامتقارن، شکل می‌گیرد.

بررسی عددی اثر خم بر روی انتشار شعله لاله‌ای موضوعی بسیار نوپا بوده که تنها برای مخلوط پروپان-هوا و با سینتیک تک‌مرحله‌ای انجام شده است. از آنجایی که مطالعات گذشته نشان داده‌اند که دینامیک شعله در حال انتشار به‌شدت تحت تأثیر ترکیب سوخت است [۲۱]، مطالعه تأثیر خم بر انتشار شعله پیش‌آمیخته هیدروژن-هوا ضروری به‌نظر می‌رسد. بر این اساس، در کار حاضر، دینامیک شعله پیش‌آمیخته هیدروژن-هوا در عبور از خم ۹۰ درجه‌ای و تأثیر آن بر تغییرات فشار محفظه مورد بررسی قرار می‌گیرد. این مطالعه به فهم دقیق‌تر ساختار و رفتار شعله لاله‌ای در عبور از خم و اندرکنش شعله با میدان جریان کمک خواهد کرد. از آنجایی که دقت مدل LES/ATF در شبیه‌سازی عددی شعله لاله‌ای و بازتولید رفتار شعله در حال انتشار به‌اثبات رسیده است [۲۴-۲۷]، مطالعه عددی حاضر به‌صورت سه‌بعدی و با استفاده از رویکرد اغتشاشی LES و رویکرد احتراقی ATF و به همراه سینتیک شیمیایی هفت‌مرحله‌ای برای مخلوط هیدروژن-هوای استوکیومتری انجام گرفته است.

1. Flame Shedding  
2. Large Eddy Simulation  
3. Artificial Thickened Flame

## معادلات حاکم و روش حل عددی

در شبیه‌سازی عددی حاضر، از رویکرد LES استفاده شده است. انتقال جرم، تکانه و انرژی در یک جریان آشفته به شدت وابسته به گردابه‌های بزرگ مقیاس است. این گردابه‌های بزرگ به وسیله شرایط مرزی مشخص و مستقل از یکدیگر متمایز می‌شوند [۲۸]. در LES گردابه‌های بزرگ بر روی شبکه محاسباتی مناسب حل می‌شوند و گردابه‌های کوچک مقیاس، که به صورت ایزوتروپیک و همگن فرض می‌شوند و رفتار عمومی تری از خود نشان می‌دهند، با استفاده از مدل‌هایی در مقیاس زیرشبکه (SGS) تخمین زده می‌شوند [۲۹].

در جریان‌های احتراقی سهم بسیار مهمی از واکنش‌ها و آزادسازی انرژی در سطح مقیاس زیرشبکه رخ می‌دهد؛ بنابراین فرآیند احتراق نیاز به مدل‌سازی دارد. در شبیه‌سازی عددی حاضر، از مدل احتراقی شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF) [۲۸] به همراه مدل LES استفاده شده است. در رویکرد ATF شعله به صورت مصنوعی ضخیم شده تا شبکه محاسباتی قادر به حل ساختار شعله شود. در این حالت، نیازی به مدل احتراقی زیرشبکه نیست. 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 [۳۰].

## معادلات حاکم

یکی از ویژگی‌های مهم جریان در کانال حاضر ایجاد جریان ثانوی به هنگام عبور از خم است [۲۲، ۳۱]. این موضوع در کنار ساختار سه‌بعدی شعله در حال انتشار سبب می‌شود تا استفاده از معادلات ناویر-استوکس به صورت سه‌بعدی ترجیح داده شود. در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، با فیلترگیری از معادلات ناویر-استوکس واکنشی در فضای مکانی و استفاده از روابط تکمیلی به منظور مدل‌سازی جملات مجهول ایجادشده در اثر فیلترگیری، معادلات حاکم به صورت زیر بازنویسی می‌شوند:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (۱)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( 2\mu_{\text{eff}} \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) \right) + \bar{\rho} g_i \quad (۲)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h})}{\partial x_j} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + 2\mu \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) : \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \sum_{m=1}^{N_s} \left( \left[ \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{\text{SGS}}}{Sc_{\text{SGS}}} \right] \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j} \right) \tilde{h}_m \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \left[ \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_{\text{SGS}}}{Pr_{\text{SGS}}} \right] \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}_e \quad (۳)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_m) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_m) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_m \quad (۴)$$

در معادلات بالا،  $\rho$  چگالی،  $t$  زمان،  $u_i$  مولفه‌های سرعت،  $p$  فشار،  $\mu_{\text{eff}}$  لزجت موثر (مجموع لزجت مولکولی سیال،  $\mu$ ، و لزجت زیرشبکه،  $\mu_{\text{SGS}}$ )،  $h$  آنتالپی مخصوص و  $\bar{S}_e$  جمله منبع حرارت در اثر واکنش‌های شیمیایی است. همچنین،  $\bar{\omega}_m$  و  $D_{\text{eff}}$  به ترتیب، کسر جرمی گونه  $m$ ، ضریب نفوذ موثر و نرخ تولید/مصرف گونه شیمیایی  $m$  هستند. Sc و Pr بیانگر اعداد بدون بعد پرنتل و اشمیت‌اند. علامت ":" نیز ضرب داخلی دوگانه است. تانسور  $\tilde{S}_{ij}$  در معادلات (۲) و (۳) تانسور نرخ کرنش برای مقیاس حل‌شونده بوده که به صورت رابطه (۵) تعریف می‌شود:

$$\tilde{S}_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (۵)$$

گازها به صورت گاز ایدئال فرض شده و معادله حالت گاز ایدئال به شکل رابطه (۶) وارد مجموعه معادلات حاکم می‌شود:

$$p = \rho RT \quad (۶)$$

که  $R$  ثابت گاز مخلوط واکنشی است.

در روابط بالا، بالانویس‌های  $(-)$  و  $(\sim)$  به ترتیب نشانگر فیلترگیری معمولی رینولدز و فیلترگیری جرمی فاور<sup>۱</sup> هستند. بیان ریاضی این نوع فیلترگیری‌ها به شکل زیر است [۲۹]:

$$\bar{\phi}(x, t) = \int_{V_{cv}} \phi(x', t) G(x, x') d^3 x' \quad (7)$$

$$\bar{\rho}(x, t) \bar{\phi}(x, t) = \int_{V_{cv}} \rho(x', t) \phi(x', t) G(x, x') d^3 x' \quad (8)$$

در اینجا، فیلتر LES با توجه به معادله (۹) در یک فضای فیزیکی و به صورت ضمنی با گسسته‌سازی با روش حجم محدود معرفی می‌شود ( $V_{cv}$  حجم سلول محاسباتی است).

$$G(x, x') = 0 \text{ و } G(x, x') = 1/V_{cv} \text{ if } x' \in V_{cv} \quad (9)$$

روش LES قادر به مدل‌سازی دقیق جریان سیال در هر دو محدوده جریان با رینولدز پایین و بالاست. برای مدل‌سازی لزجت زیرشبکه در کار حاضر از مدل اسماکورینسکی-لیلی<sup>۲</sup> استفاده شده است. در این مدل، لزجت زیرشبکه از طریق رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود [۳۲]:

$$\mu_{SGS} = \bar{\rho} L_s^2 |\bar{S}| \quad (10)$$

$$|\bar{S}| \equiv \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \quad (11)$$

در معادله (۱۰)،  $L_s$  طول اختلاطی برای مقیاس‌های زیرشبکه بوده که از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$L_s = \min(kd, C_s \Delta) \quad (12)$$

$k$  ثابت فون کارمن<sup>۳</sup> برابر  $0.4187$ ،  $d$  فاصله تا نزدیک‌ترین دیواره،  $C_s$  ثابت اسماکورینسکی و  $\Delta$  پهنای فیلتر LES است. لیلی مقدار  $0.23$  را برای  $C_s$  در یک جریان آشفته همگن ایزوتروپیک پیشنهاد داد. اما، از آنجایی که این مقدار باعث میرایی بیش از حد نوسانات بزرگ مقیاس در جریان‌های برشی، جریان‌های گذرا و در نواحی نزدیک به دیواره‌ها می‌شود، مقدار  $0.1$  بر اساس تجربه ترجیح داده می‌شود [۳۲]. در این مطالعه مقدار عدد پرائنتل و اشمیت زیرشبکه برابر  $0.7$  در نظر گرفته شده است.

### مدل شعله ضخیم‌شده مصنوعی (ATF)

مدل‌سازی انتشار یک شعله پیش‌آمیخته نیاز به ردیابی جبهه شعله بر روی شبکه محاسباتی دارد. با این حال، ضخامت یک شعله پیش‌آمیخته بسیار کوچک (معمولاً بسیار کمتر از اندازه سلول محاسباتی) است، به طوری که از نظر محاسباتی حل ساختار یک شعله گذرا حتی بر روی شبکه‌های تطبیق‌پذیر نیز مشکل است [۲۹]. در کار حاضر، برای مدل‌سازی انتشار شعله پیش‌آمیخته گذرا از رویکرد شعله ضخیم‌شده مصنوعی استفاده می‌شود. این رویکرد، اولین بار، به منظور مدل‌سازی ورقه‌های نازک شعله پیش‌آمیخته بر روی یک شبکه درشت عددی، توسط باتلر و اوروک، پیشنهاد شد [۳۳] و سپس به طور گسترده‌ای برای مدل‌سازی انتشار شعله و شعله لاله‌ای در لوله‌ها و کانال‌ها به کار گرفته شد [۲۴-۲۶، ۳۴]. بر اساس نظریه‌های موجود در مورد ورقه‌های نازک شعله [۳۵]، ضخامت شعله آرام  $\delta_l^0$  و سرعت سوزش شعله آرام  $S_l^0$ ، به شکل روابط (۱۳) و (۱۴)، محاسبه می‌شوند [۳۵]:

1. Favre  
2. Smagorinsky-Lilly model  
3. Von Karman Constant  
2. Smagorinsky-Lilly model  
3. Von Karman Constant

$$\delta_l^0 \propto \sqrt{D/\bar{\omega}} \quad (13)$$

$$S_l^0 \propto \sqrt{D\bar{\omega}} \quad (14)$$

که  $D$  ضریب نفوذ مولکولی و  $\bar{\omega}$  نرخ متوسط واکنش است.

ایده اصلی در مدل ATF افزایش مصنوعی ضخامت شعله پیش آمیخته است، به طوری که جبهه شعله حتی بر روی شبکه درشت نیز قابل حل باشد. این کار با اعمال ضریب ضخیم کننده مصنوعی شعله،  $F$ ، حاصل می شود. اگر مقدار  $F$  به اندازه کافی بزرگ باشد، ضخامت جبهه شعله آن قدر زیاد می شود که می توان آن را به وسیله شبکه محاسباتی LES حل کرد. برای این کار ضریب نفوذ مولکولی،  $D$ ، در ضریب  $F$  ضرب شده، در حالی که نرخ متوسط واکنش بر  $F$  تقسیم می شود. در این حالت، ضخامت شعله  $F$  برابر شده، اما سرعت سوزش آرام شعله، که با هر دو ضریب نفوذ و نرخ متوسط واکنش رابطه مستقیم دارد، ثابت باقی می ماند [۳۳].

ضریب ضخیم کننده مصنوعی شعله به شکل زیر محاسبه می شود:

$$F = N\Delta/\delta_l \quad (15)$$

که  $\Delta$  و  $N$  به ترتیب نمایانگر اندازه شبکه محاسباتی و تعداد سلول محاسباتی مورد نظر در شعله ضخیم شده اند. در کار حاضر، از ۸ سلول محاسباتی برای حل ساختار شعله ضخیم شده،  $N=8$ ، استفاده شده است.

اگر ضریب نفوذ مولکولی در تمامی میدان جریان افزایش یابد، باعث پیش بینی غیردقیق فرایند اختلاط و انتقال حرارت می شود. برای جلوگیری از این موضوع، در روش شعله ضخیم شده دینامیکی تابعی برای تعیین محدوده جبهه شعله، به شکل معادله (۱۶)، تعریف می شود [۳۶]:

$$\Omega = \tanh\left(\beta \frac{|\bar{\omega}|}{\max(|\bar{\omega}|)}\right) \quad (16)$$

تابع  $\Omega$  شاخص تعیین جبهه واکنش،  $|\bar{\omega}|$  مقدار مطلق نرخ فیلتر شده واکنش،  $\max(|\bar{\omega}|)$  بیشترین مقدار  $|\bar{\omega}|$  در میدان محاسباتی و  $\beta$  یک پارامتر تنظیم کننده و برابر مقدار ثابت ۱۰ است. مقدار  $\Omega$  از یک برای محدوده اطراف جبهه شعله تا صفر برای خارج محدوده شعله متغیر است.

در روش ATF، با افزایش  $F$  برابری ضخامت شعله، پاسخ شعله ضخیم شده به طیف گردابه های موجود در جریان آشفته شبیه به شعله واقعی (شعله ضخیم نشده) نخواهد بود. در این حالت، مقیاس طولی قسمت عمده ای از گردابه های موجود در جریان، در مقایسه با ضخامت شعله، بسیار کوچک بوده و بنابراین این گردابه ها چین خوردگی موثری را در سطح شعله ایجاد نمی کنند. در این حالت، سطح شعله، سرعت انتشار شعله آشفته و همچنین نرخ واکنش کلی کاهش می یابد [۳۶]. برای غلبه بر این مشکل ضریب نفوذ و نرخ های واکنش در پارامتر تصحیح کننده ای به نام تابع عملکرد،  $E$ ، ضرب می شوند.

این تابع عملکرد به صورت نسبت ضریب چین خوردگی سطح شعله واقعی با ضخامت  $\delta_l^0$  به ضریب چین خوردگی سطح شعله ضخیم شده با ضخامت  $\delta_l^1$  تعریف می شود [۳۲]:

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + A \left(\frac{u'_{SGS}}{S_l^0}\right)^{3/4} \left(\frac{F\Delta}{\delta_l^0}\right)^{1/4}}{1 + A \left(\frac{u'_{SGS}}{S_l^0}\right) \left(\frac{\Delta}{\delta_l^1}\right)^{1/4}}, \quad (17)$$

به طوری که  $\Xi$  ضریب چین خوردگی سطح شعله،  $u'_{SGS}$  نوسانات سرعت زیر شبکه و  $A$  ثابت مدل برابر ۰٫۵۲ است. در رابطه (۱۷)، از مدل سرعت آشفته شعله ارائه شده توسط زیمونت و همکاران [۳۷] استفاده شده است. زیمونت و همکاران [۳۸] نشان دادند که این مدل برای نواحی از جریان که تحت تاثیر پدیده نفوذ در خلاف جهت گرادیان قرار دارد نیز معتبر است. با توجه به مطالب بالا، ضریب نفوذ مؤثر گونه ها در معادله (۴) به صورت زیر بازنویسی می شود [۳۹]:

$$\rho D_{\text{eff}} = \frac{\mu}{Sc} E (1 + (F - 1)\Omega) + \frac{\mu_{\text{SGS}}}{Sc_{\text{SGS}}} (1 - \Omega). \quad (18)$$

شایان ذکر است که تغییرات مشابهی نیز در معادله بقای انرژی اعمال می‌شود. از مدل ATF می‌توان به همراه سینتیک‌های شیمیایی چندمرحله‌ای با دقت بالایی استفاده کرد [۳۰]. در کار حاضر، نیز، به منظور محاسبه دقیق سرعت سوزش آرام شعله و همچنین دمای شعله در شرایط اولیه مختلف از یک سینتیک تفصیلی کاهش یافته استفاده شده است. این سینتیک شیمیایی شامل هفت مرحله به همراه شش گونه شیمیایی ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ) است [۴۰]. این سینتیک قادر به بازتولید دقیق سرعت سوزش آرام و دمای شعله آدیاباتیک برای گستره وسیعی از نسبت‌های هم‌ارزی به‌ویژه برای شرایط استوکیومتری همراه با محاسبه اثرات فشار است [۴۰]. جزئیات این سینتیک، شامل واکنش‌های مقدماتی، ضرایب نرخ واکنش آرنیوسی و ضرائب عملکرد گونه‌هایی که به‌عنوان جسم سوم عمل می‌کنند، در جدول ۱ قابل مشاهده است. با توجه به اینکه واکنش‌های نیتروژن تاثیر چندانی بر پارامترهای شعله نظیر سرعت سوزش آرام، دمای آدیاباتیک شعله و ضخامت شعله ندارند، از واکنش‌های نیتروژن صرف‌نظر شده و نیتروژن به‌صورت گونه خنثی در نظر گرفته شده است.

جدول ۱- واکنش‌های مقدماتی و ضرایب نرخ واکنش برای سینتیک هفت مرحله‌ای هیدروژن-اکسیژن [۴۰]

Table 1- Elementary reactions and reaction rate parameters for seven-step  $\text{H}_2\text{-O}_2$  kinetic scheme [40]

Reaction	A ( $\text{cm}^3/\text{mol.S}$ )	$\beta$	$E_a$ (cal/mol)
$\text{H}+\text{O}_2=\text{O}+\text{OH}$	$3.62 \times 10^{17}$	-0.91	$1.653 \times 10^4$
$\text{O}+\text{H}_2=\text{H}+\text{OH}$	$1.53 \times 10^5$	2.67	$6.296 \times 10^3$
$\text{O}_2+\text{H}_2=\text{OH}+\text{OH}$	$5.13 \times 10^{13}$	0.00	$4.805 \times 10^4$
$\text{OH}+\text{H}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{H}$	$6.64 \times 10^{13}$	0.00	$5.155 \times 10^3$
$\text{OH}+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}$	$1.90 \times 10^{13}$	0.00	$1.091 \times 10^3$
$\text{H}+\text{OH}+\text{M}=\text{H}_2\text{O}+\text{M}$	$6.67 \times 10^{22}$	-2.00	0.000
$\text{H}+\text{H}+\text{M}=\text{H}_2+\text{M}$	$2.20 \times 10^{18}$	-1.00	0.000
Third body efficiencies: 2.5 for $\text{H}_2$ , 16 for $\text{H}_2\text{O}$ , and 1.0 for all other M			

به هنگام استفاده از سینتیک تفصیلی، جدا از نحوه مدل‌سازی برهمکنش شیمی-آشفتگی در مقیاس زیرشبکه، جمله‌های چشمه ناشی از سینتیک در معادله انتقال گونه‌ها از حل یک دستگاه معادلات دیفرانسیلی معمولی سرسخت<sup>۱</sup> به‌دست می‌آیند که در هر سلول محاسباتی و در هر گام زمانی باید حل شود. بدیهی است در حل میدان‌های پیچیده احتراقی، به‌علت حجم بالای شبکه محاسباتی و همچنین تعداد زیاد گام‌های زمانی و یا تکرارهای مورد نیاز، حل سینتیک سهم قابل توجهی از زمان کلی حل را به خود اختصاص می‌دهد [۴۱]. به منظور کاهش شدت این مشکل در کار حاضر، از روش جدول‌سازی درجای تطبیق‌پذیر<sup>۲</sup> (ISAT)، که برای اولین بار توسط پوپ [۴۲] ارائه شد، استفاده شده است.

## روش حل عددی

شبیه‌سازی جریان ناپایای سه‌بعدی حاضر با استفاده از نرم‌افزار Ansys Fluent نسخه ۱۶٫۰ انجام گرفته است. حلگر انتخاب برمبنای فشار بوده و برای حل مشکل جفت‌شدگی میدان‌های سرعت و فشار از الگوریتم PISO<sup>۳</sup> استفاده شده است. جملات جابه‌جایی در معادلات حاکم با استفاده از روش حجم محدود مرتبه سوم MUSCL<sup>۴</sup> گسسته شده است. گام زمانی به‌صورت محتاطانه و برابر مقدار ثابت  $5e^{-6}$  s انتخاب شده است. شرایط مرزی برای دیواره‌های محفظه به‌صورت عدم لغزش و بی‌دررو در نظر گرفته شده است.

1. Stiff
2. In Situ Adaptive Tabulation
3. Pressure Implicit with Splitting of Operator
4. Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws

این شبیه‌سازی با استفاده از یک سیستم پردازش موازی صورت گرفته که شامل ۳ پردازشگر ۸ هسته‌ای (در مجموع ۲۴ هسته فیزیکی یا ۴۸ هسته مجازی) IntelXeon با سرعت پردازش ۲٫۴ GHz، به‌همراه ۶۴ GB RAM است. مدت زمان شبیه‌سازی برای مسئله اول (انتشار شعله در کانال بسته مستقیم) در حدود ۳ هفته و برای مسئله اصلی (انتشار شعله در کانال بسته به‌همراه خم ۹۰ درجه‌ای) در حدود ۵۰ روز به‌طول انجامیده است.

## نتایج و بحث

### انتشار شعله در یک کانال مستقیم

جهت اعتباربخشیدن به نتایج حاضر، ابتدا، به مطالعه سه‌بعدی انتشار یک شعله پیش‌آمیخته در کانالی بسته با طول ۵۳۰ mm و سطح مقطع مربعی به ضلع ۸۲ mm پرداخته شده است. این کانال توسط مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا با دما و فشار اولیه ۲۹۸ K و ۱۰۱۳۲۵ Pa پر شده است [۶]. مطابق شکل ۲، حسگر فشار بر روی دیواره پایینی محفظه و به فاصله ۷٫۵ cm از دیواره انتهایی سمت راست محفظه نصب شده است. مکان جرقه برای شروع واکنش‌ها در فاصله ۵٫۵ cm از دیواره سمت چپ قرار دارد. به‌منظور ایجاد جرقه در میدان محاسباتی از یک ناحیه دمابالا با شعاع ۵ mm و دمای اولیه ۲۰۰۰ K در مکان جرقه استفاده شده است. ضخامت شعله آرام،  $\delta_l^0$  و سرعت سوزش شعله آرام،  $s_l^0$ ، برای مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا، به‌ترتیب، برابر ۰٫۴۱ mm و ۲۰۵ m/s در نظر گرفته شده است.

شبکه‌بندی در دو مرحله انجام گرفته است. ابتدا، ایجاد سلول‌های با اندازه ۲×۲×۲ mm که کل هندسه را دربر می‌گیرد و سپس، برای افزایش دقت محاسبات، در فاصله ۱ cm کنار دیواره‌ها اندازه شبکه به‌صورت تدریجی تا ۰٫۱ mm کاهش یافته است. این کار به‌منظور پیش‌بینی دقیق‌تر رفتار شعله به هنگام برخورد با دیواره‌ها انجام شده است. استفاده از این روش، درنهایت، باعث ایجاد ۱۱۶۷۲۰۸ سلول مکعبی شده است.



Figure 2- Schematic diagram of the closed channel (combustion chamber). Points S and P indicate the location of spark plug and pressure sensor, respectively

شکل ۲- طرحواره‌ای از پیکربندی کانال بسته (محفظه احتراق) مورد مطالعه (نقطه S مکان قرارگیری جرقه و نقطه P مکان قرارگیری حسگر ثبت فشار است.)

به‌منظور بررسی نتایج عددی حاضر در مقایسه با نتایج تجربی و عددی ژیاو و همکاران [۶]، در شکل ۳ نمودار تغییرات مکان لبه حمله شعله برحسب زمان رسم شده است. لبه حمله شعله موقعیتی در جبهه شعله است که در آن نیمی از مخلوط واکنشگرها سوخته باشد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در مراحل اولیه انتشار شعله تطابق نسبتاً خوبی بین نتایج عددی و تجربی برقرار است، اما از اواسط مرحله شعله انگشتی فاصله بین نمودارهای عددی و تجربی بیشتر می‌شود. در شکل ۴ نیز مقادیر عددی و تجربی برای تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر با یکدیگر مقایسه شده‌اند. اختلاف بین نتایج عددی و تجربی در این شکل نیز مشاهده می‌شود. براساس محاسبات حاضر، تا زمان ۱/۸ ms شعله به‌صورت کروی منتشر می‌شود. در زمان ۵/۱ ms شعله به دیواره‌های بالایی و پایینی محفظه برخورد کرده و در زمان ۶/۶ ms شعله لاله‌ای شکل می‌گیرد.

ژیاو و همکاران [۶] اختلاف بین نمودارهای تجربی و عددی در مراحل انتهایی انتشار شعله را به چین‌خوردگی جبهه شعله در این مراحل مربوط دانسته‌اند. آن‌ها معتقدند که در مراحل ابتدایی انتشار، چین‌خوردگی جبهه شعله نقش اندکی را در دینامیک شعله در مراحل ابتدایی ایفا می‌کند. به‌عبارت دیگر، سهم چین‌خوردگی جبهه شعله بر روی افزایش سرعت سوزش در



مراحل پایانی انتشار آن بسیار قابل توجه است. احتمالاً، مدل‌های زیرشبکه اسماگورینسکی-لیلی و تابع عملکرد مورد استفاده در مدل ATF (رابطه ۱۷) در مدل‌سازی این مراحل ضعف‌هایی دارند.

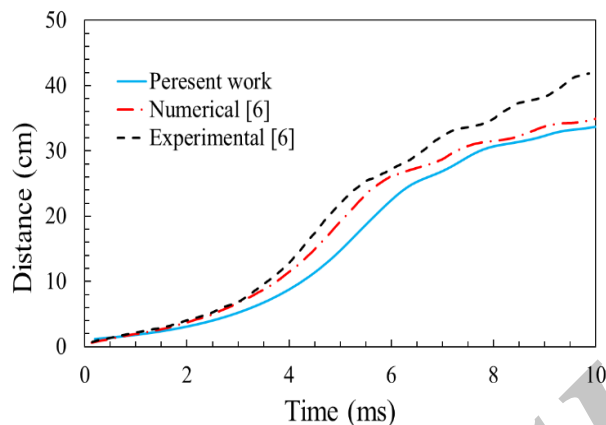


Figure 3- Time trace of flame front position in closed channel

شکل ۳- نمودار مکان جبهه شعله بر حسب زمان در کانال بسته

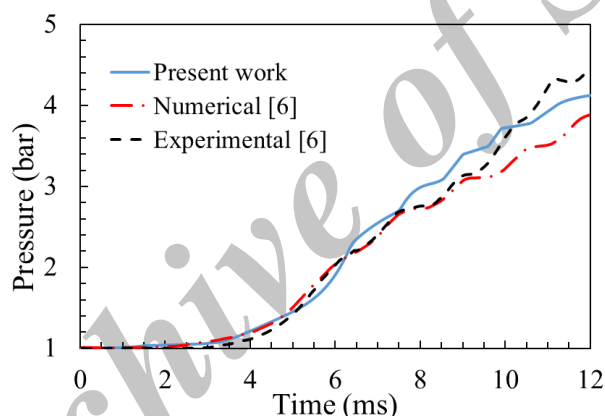


Figure 4- The chamber pressure history due to flame propagation

شکل ۴- تاریخچه فشار ثبت شده حاصل از انتشار شعله

ازجمله دلایل تفاوت نتایج کار حاضر با نتایج عددی ژیانو و همکاران [۶] می‌توان به عدم وجود اطلاعات کافی در مواردی نظیر مدل زیرشبکه اغتشاشی انتخابی، الگوریتم کوپلینگ فشار-سرعت، نحوه مدل‌سازی جرقه و اعداد اشمیت و پرنتل زیرشبکه در مرجع [۶] اشاره کرد. اعداد اشمیت و پرنتل زیرشبکه بر روی نفوذ حرارت و گونه، که سازوکار اصلی انتشار شعله است، تأثیرگذارند. انتخاب این اعداد باید با مطالعه پارامتریک انجام شود که به علت هزینه‌های محاسباتی بسیار زیاد فراتر از اهداف این مقاله است. مطلب بالا را می‌توان به تفاوت در اندازه شبکه مورد استفاده و حتی مدل زیرشبکه اغتشاشی نیز تعمیم داد. به هر حال، همان‌طور که از نمودارهای مکان شعله و تاریخچه فشار محفظه مشاهده می‌شود، شبیه‌سازی حاضر دینامیک شعله در حال انتشار را از لحاظ کیفی به‌خوبی بازتولید کرده است و در صورت امکان مطالعه بر روی بعضی از پارامترهای تأثیرگذار به‌نظر می‌توان تفاوت‌های کمی را نیز بسیار کاهش داد.

### دینامیک شعله در حال انتشار در کانال با خم ۹۰ درجه‌ای

در این قسمت، به بررسی انتشار شعله در کانالی بسته با سطح مقطع مربعی، که از یک بخش افقی طولانی، یک خم و یک بخش عمودی کوتاه تشکیل شده، می‌پردازیم (شکل ۵). سطح مقطع کانال  $82 \times 82$  mm، طول قسمت افقی کانال  $400$  mm و طول قسمت عمودی آن  $100$  mm است. شعاع داخلی خم  $90^\circ$  درجه‌ای برابر  $82$  mm و شعاع خارجی آن  $164$  mm است. شبکه‌بندی میدان مشابه مسئله قبل انجام شده و در نهایت  $1714366$  سلول مکعبی ایجاد می‌شود. مخلوط قابل احتراق، شرایط اولیه و سینتیک شیمیایی مورد استفاده نیز مشابه مسئله قبلی در نظر گرفته می‌شوند. منبع احتراق یک ناحیه دمابالاست که در محور کانال در فاصله  $5/5$  cm از دیواره سمت چپ قرار داده شده است.

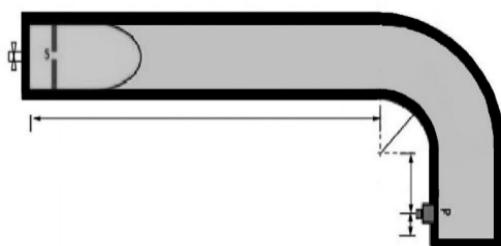


Figure 5- Schematic diagram of the closed channel with a  $90^\circ$  bend  
شکل ۵- طرحی از بیکر بندی کانال بسته محفظه احتراق با خم  $90^\circ$  درجه

در شکل ۶، کانتورهای دوبعدی دما بر روی صفحه عبوری از مرکز کانال در زمان‌های مختلف رسم شده است. در این تصاویر، تنها کانتور دما در قسمت افقی کانال قابل مشاهده است. مطابق شکل، در زمان  $6/5$  ms شعله کاملاً تخت شده و فرایند وارونگی شعله آغاز می‌شود. در زمان  $9/5$  ms شکل لاله‌ای شعله به خوبی مشاهده می‌شود. با ادامه انتشار شعله، چین خوردگی‌هایی در زبانه‌های شعله ایجاد شده، به طوری که در زمان  $12/8$  ms شعله لاله‌ای تاب‌خورده کاملاً قابل تشخیص است. این تصاویر نشان می‌دهند که در قسمت افقی کانال شکل شعله تقریباً متقارن باقی می‌ماند.

شایان ذکر است با ضخیم‌سازی جبهه شعله در رویکرد عددی حاضر، احتمالاً، چین خوردگی‌ها و بعضاً ناپایداری‌های مورد انتظار در جبهه شعله در حال انتشار بروز نمی‌یابند. به عبارت بهتر، با ضخیم‌سازی شعله عدد دامکولر (نسبت مقیاس زمانی آشفته‌گی به مقیاس زمانی واکنش‌های شیمیایی) کاهش یافته و حساسیت شعله به گردابه‌های آشفته موجود در جریان کاهش می‌یابد [۲۹]. البته، همان‌طور که مشاهده شد، با استفاده از تابع عملکرد و تصحیح نحوه محاسبه سرعت سوزش آشفته شعله، صحت نتایج حاضر مورد تایید است (رجوع به شکل ۳ و ۴).

در شکل ۷، کانتورهای دوبعدی دما به‌هنگام عبور شعله لاله‌ای از خم نوددرجه‌ای مشاهده می‌شوند. مطابق شکل، با ورود شعله لاله‌ای به خم زبانه پایینی به سرعت وارد خم شده، اما زبانه بالایی با سرعت کمتری وارد خم می‌شود، به طوری که پس از لحظاتی زبانه پایینی کاملاً بر انتشار شعله مسلط شده و زبانه بالایی از بین می‌رود. با ادامه انتشار شعله، زبانه پایینی کل عرض کانال را اشغال کرده و یک شعله خمیده معمولی شکل می‌گیرد. اگر چه در زمان  $14/1$  ms جلوترین نقطه شعله در کنار دیواره داخلی خم قرار دارد، اما به مرور این نقطه از کنار دیواره فاصله گرفته و به مرکز کانال متمایل می‌شود ( $15/9$  ms). نکته جالب توجه این است که اگر چه در ابتدای ورود شعله به خم آن قسمت از شعله که در کنار دیواره داخلی خم قرار دارد با سرعت وارد خم می‌شود، اما در لحظات انتهایی سرعت این قسمت بسیار افت کرده و در عوض قسمتی از شعله، که در کنار دیواره خارجی خم قرار دارد، به سرعت منتشر شده و عقب‌افتادگی خود را جبران می‌کند. این مشاهدات هم‌خوانی نزدیکی با مطالعات منتشر شده قبلی [۲۴، ۲۳] دارد.

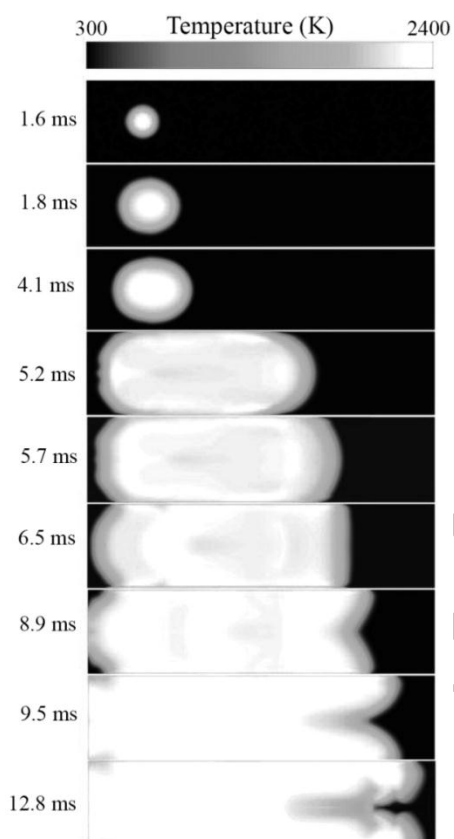


Figure 6- Time sequence of the flame shape in the horizontal section of the channel. The colors designate the temperature (K) from the unburned mixture (black) to the burnt gas (white)

شکل ۶- تغییر شکل شعله در حال انتشار در قسمت افقی کانال در زمان‌های مختلف. رنگ سیاه نشانگر مخلوط نسوخته و رنگ سفید بیانگر گازهای سوخته است.

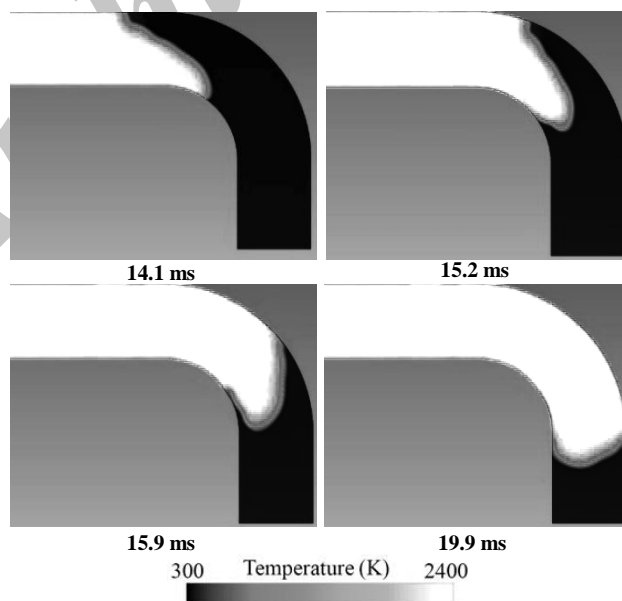


Figure 7- Time sequence of the flame shape passing through the 90° bend. The colors designate the temperature (K) from the unburned mixture (black) to the burnt gas (white)

شکل ۷- تغییر شکل شعله در حال عبور از خم نود درجه (رنگ سیاه نشانگر مخلوط نسوخته و رنگ سفید بیانگر گازهای سوخته است).

ژو و همکاران [۲۳]، در مطالعه‌ای که بر روی تأثیر خم ۹۰ درجه‌ای بر انتشار شعله پیش‌آمیخته پروپان-هوا انجام دادند، مشاهده کردند که با ورود شعله به خم سطح شعله از دیواره‌های بالایی و پایینی خم جدا می‌شود. آن‌ها این پدیده را ریزش شعله نام نهاده و علت آن را به اندرکنش شعله و گردابه‌های تشکیل شده در خم مربوط دانسته‌اند. در کار آن‌ها، پدیده ریزش شعله تا عبور کامل شعله از خم نیز ادامه می‌یابد. ذکر این نکته لازم است که در کار حاضر و همچنین مطالعه ژیاو و همکاران [۲۴] جدایش شعله از سطوح خم به شدتی که در کار مرجع [۲۳] گزارش شده مشاهده نشده است که این موضوع به علت استفاده نکردن از مدل اغتشاشی و احتراقی مناسب در کار ژو و همکاران [۲۳] و در نتیجه عدم توانایی در بازتولید صحیح اندرکنش گردابه و شعله در کار عددی آن‌ها بوده است. مشاهده بحث‌برانگیز دیگر در کار ژو و همکاران [۲۳] مشاهده شعله لاله‌ای ثانویه به هنگام عبور شعله از خم است که این پدیده نیز در کار حاضر و کار مرجع [۲۴] مشاهده نشده است.

به منظور بررسی بهتر دینامیک شعله در حال انتشار در محفظه خم‌دار، تصاویر سه‌بعدی از کانتور دما در شکل ۸ آورده شده است. این تصاویر نشان می‌دهند که مطابق با نتایج مراجع [۲۳] و [۲۴] ساختار سه‌بعدی شعله لاله‌ای از چهار زبانه تشکیل شده است. برخلاف نظر مرجع [۲۳]، که تورفتگی شعله در راستای افقی را بیشتر از راستای عمودی گزارش می‌کند، تصاویر حاضر نشان می‌دهند که در قسمت افقی کانال تورفتگی شعله در خط مرکزی محفظه بیشترین مقدار خود را دارد و چهار زبانه کاملاً مشابه در این لحظات شکل گرفته است. با ورود شعله به خم، زبانه‌های پایینی با سرعت بیشتری وارد خم شده‌اند. البته، همان‌طور که در زمان ۱۴/۱ ms مشاهده می‌شود، زبانه‌های پایینی در نواحی دیواره‌های جانبی بیشترین نفوذ را به ناحیه خم داشته‌اند.

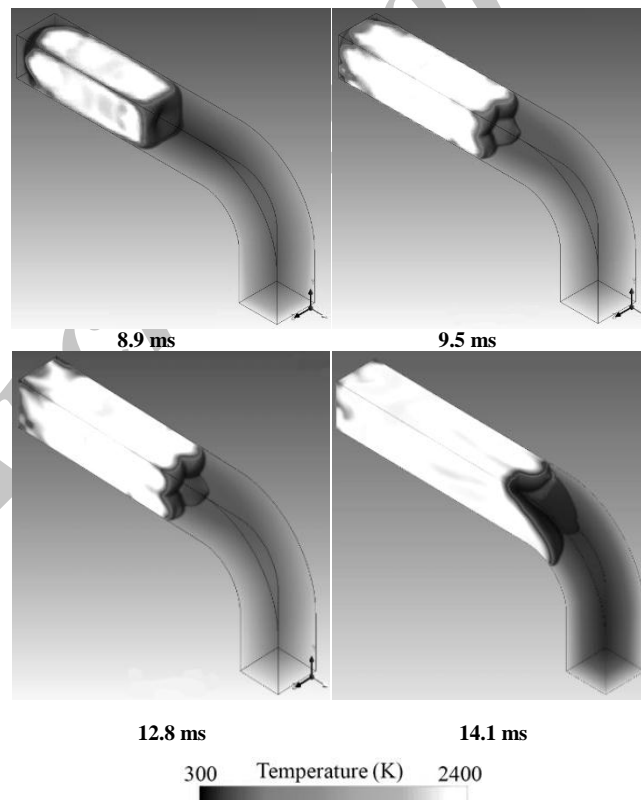


Figure 8- Time sequence of the 3-D flame shape propagating in closed channel with a 90° bend  
 شکل ۸- تغییر شکل شعله در حال انتشار در کانال بسته با خم ۹۰ درجه در زمان‌های مختلف

در شکل ۹، کانتور میدان فشار در لحظه ورود و خروج شعله به خم ۹۰ درجه نمایش داده شده است. همان طور که انتظار می رود، در اثر نیروی گریز از مرکز یک گرادیان فشار در راستای شعاعی در خم ایجاد شده، به طوری که فشار در نزدیکی دیواره داخلی خم کاهش می یابد. این کاهش فشار همراه با افزایش سرعت جریان بوده که نهایتاً منجر به بیشتر شدن سرعت جابه جایی لبه پایینی شعله نسبت به لبه بالایی آن می شود.

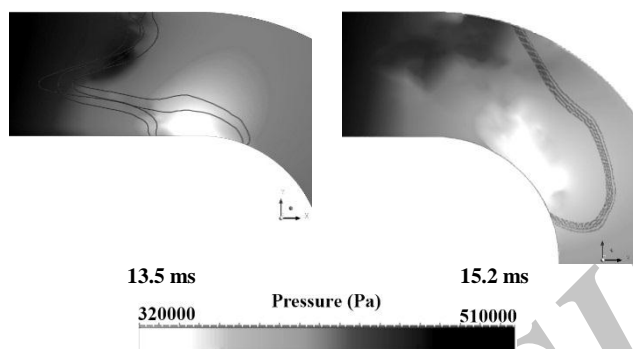


Figure 9- The pressure distribution (Pa) inside the channel when the flame front passing the 90° bend

شکل ۹- توزیع فشار در داخل کانال به هنگام عبور جبهه شعله از خم نوددرجه ای

### تاثیر دینامیک شعله بر نمودار فشار، مکان و سرعت شعله

در شکل ۱۰، تاریخچه فشار ثبت شده توسط حسگر گزارش شده است. همان طور که مشاهده می شود، در ابتدا، رشد فشار رفتار نمایی از خود نشان می دهد. با تخت شدن شعله و شروع وارونگی آن، که مصادف با زمان ۶/۵ ms است، نوسانات فشاری آشکاری در میدان به وجود می آید. احتمالاً، بروز چنین نوساناتی طبیعت آکوستیکی دارد [۴۳، ۱۱]. با توقف شتاب گیری شعله در اثر برخورد آن با دیواره های جانبی، موج فشاری در طول کانال منتشر شده که بسته به هم جهت بودن موج با انتشار شعله و یا خلاف جهت بودن با انتشار آن تاثیراتی را بر سرعت شعله و فشار محفظه ایجاد می کند [۴۳]. بر اساس محاسبات صورت گرفته، نوسانات فشاری دارای نیم طول موجی برابر با طول کانال اند [۱۱]. شکل ۱۰ نشان می دهد که با ورود شعله به خم و شتاب گیری سریع زبانه پایینی شعله، یک نوسان با دامنه بالاتر در زمان های ۱۵ ms مشاهده می شود. نمودار فشار نشان می دهد که با عبور شعله از خم تغییرات قابل ملاحظه ای در روند فشار محفظه ایجاد نمی شود.

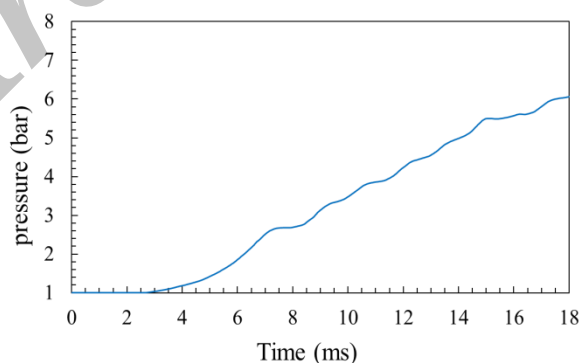


Figure 10- The chamber pressure history due to flame propagation in the closed channel with 90° bend

شکل ۱۰- تاریخچه فشار ثبت شده حاصل از انتشار شعله در محفظه بسته با خم نود درجه

در شکل های ۱۱ و ۱۲، به ترتیب، مکان لبه حمله شعله در خط مرکزی کانال و سرعت متناسب با آن به صورت تابعی از زمان ترسیم شده اند. همان طور که مشاهده می شود، سرعت شعله به صورت نمایی تا ۷۷ m/s رشد یافته و پس از برخورد شعله

با دیواره‌ها و خاموشی جبهه شعله در کنار دیواره‌ها به‌طور ناگهانی افت می‌کند. به‌عبارت بهتر، انبساط و پیش‌روی شعله در مراحل اولیه انتشار آن که در تمامی جهات صورت می‌گیرد، سبب افزایش نمایی سطح شعله می‌شود (رجوع شود به شکل ۶). از آنجایی که مساحت سطح شعله ارتباط مستقیمی با سرعت انتشار آن دارد [۱۶]، در این مراحل افزایش سرعت جبهه شعله نیز کاملاً مشهود است. با برخورد جبهه شعله به دیواره‌های جانبی کانال، به‌علت عدم امکان پیش‌روی عرضی جبهه شعله و خاموشی قسمت عمده‌ای از آن در کنار دیواره‌ها، مساحت جبهه شعله و به‌دنبال آن سرعت انتشار افت ناگهانی‌ای را تجربه می‌کنند. پس از این برخورد، نوسانات سرعت شعله آغاز شده و با ورود شعله به خم، با دامنه کمتری، ادامه پیدا می‌کنند. پس از عبور کامل شعله از خم، این نوسانات به‌مرور کاهش می‌یابند، به‌طوری که می‌توان دریافت که شتاب‌گیری شعله متوقف شده و شعله حرکتی با سرعت ثابت را تجربه می‌کند.

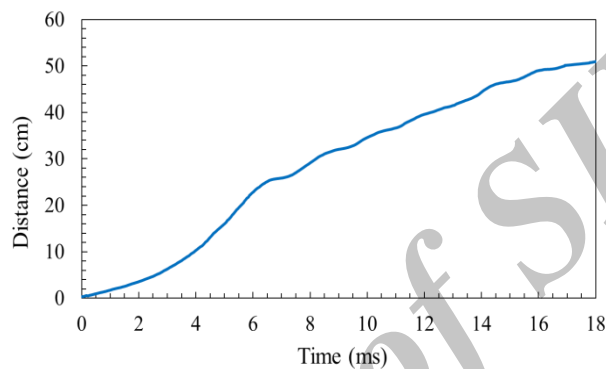


Figure 11- Time trace of flame front position in closed channel with a 90° bend  
 شکل ۱۱- نمودار مکان جبهه شعله برحسب زمان در محفظه بسته با خم ۹۰ درجه

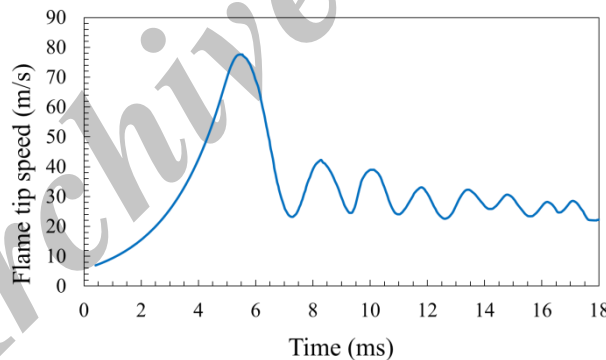


Figure 12- Time trace of flame tip speed in closed channel with a 90° bend  
 شکل ۱۲- تاریخچه سرعت انتشار لبه شعله در محفظه بسته با خم ۹۰ درجه

### بررسی میدان جریان در حین انتشار شعله در کانال خم دار

در شکل ۱۳، خطوط دماتابت (به‌منظور نمایش ناحیه واکنش) و بردارهای سرعت برای چهار زمان مختلف ترسیم شده‌اند. در لحظه ۶/۵ ms، درست در پشت جبهه شعله تخت شده، دو گردابه متقارن شکل گرفته است، به‌طوری که گردابه شکل گرفته در مجاورت دیواره بالایی ساعت‌گرد و گردابه مجاور دیواره پایینی پادساعت‌گرد است. شکل‌گیری این گردابه‌ها سبب ایجاد یک جریان برگشتی در بخش مرکزی کانال و در گازهای سوخته می‌شود. شکل‌گیری این گردابه‌ها، به‌نظر، به‌دلیل وجود اثر باروکلینیک<sup>۱</sup> است [۴۴]. از آنجایی که پس از برخورد شعله به دیواره‌های بالایی و پایینی محفظه شعله شتاب منفی به‌خود

1. Baroclinic

می‌گیرد، یک گرادیان فشار در جهت انتشار شعله در محفظه ایجاد می‌شود. این موضوع در کنار خمیدگی جبهه شعله (وجود گرادیان چگالی ناهم‌راستا با گرادیان فشار) باعث ایجاد گردابه‌های باروکلینیک در مجاورت جبهه شعله می‌شود. به‌مرور، زمان این دو گردابه در پشت جبهه شعله بزرگ‌تر شده و همان‌طور که مشاهده می‌شود، در زمان  $9.5 \text{ ms}$  جریان برگشتی قسمت عمده پشت جبهه شعله را اشغال می‌کند. پس از شکل‌گیری کامل شعله لاله‌ای، گردابه‌ها به سمت عقب حرکت کرده و به تدریج محو می‌شوند. پس از آن، در زمان  $12.8 \text{ ms}$ ، می‌توان شاهد شکل‌گیری شعله لاله‌ای تاب‌خورده بود. سپس، شعله به حرکت روبه‌جلو خود ادامه داده و وارد خم می‌شود. شکل لاله‌ای شعله با عبور از خم دچار تغییر می‌شود. در زمان  $14.1 \text{ ms}$  جریان برگشتی قابل ملاحظه‌ای درست چسبیده به لبه پایینی شعله مشاهده می‌شود. به‌هنگام عبور شعله از خم، ساختار گردابه‌ای شکلی در مجاورت لبه پایینی شعله شکل گرفته، در حالی که چنین ساختاری در مجاورت دیواره بالایی مشاهده نمی‌شود.

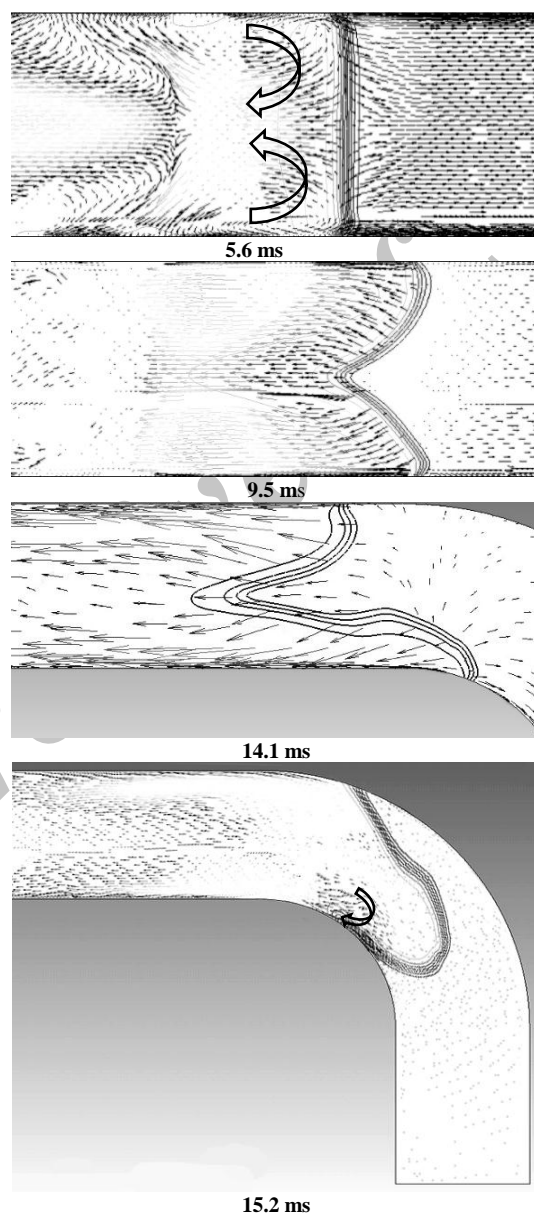


Figure 13- Time sequence of velocity vector field near the flame front. The black lines indicate the flame front  
 شکل ۱۳- میدان بردارهای سرعت در مجاورت جبهه شعله برای زمان‌های مختلف (خطوط سیاه‌رنگ نشان‌دهنده جبهه شعله‌اند).

## جمع بندی و نتیجه گیری

در کار حاضر، احتراق مخلوط هیدروژن-هوای پیش آمیخته در یک مجرای بسته با خم ۹۰ درجه‌ای به صورت عددی بررسی شد. مراحل انتشار شعله شامل شعله کروی، شعله انگشتی شکل، تماس شعله با دیواره‌ها، شعله لاله‌ای و شعله لاله‌ای تاب خورده توسط این شبیه سازی به خوبی بازتولید شدند. مشاهده شد که با ورود شعله لاله‌ای به خم توپولوژی سطح شعله تحت تاثیر خم قرار گرفت. مشابه مطالعات صورت گرفته بر روی مخلوط پروپان-هوا، نتایج حاضر برای مخلوط هیدروژن-هوا نیز نشان می‌دهند که در قسمت عمده‌ای از خم، زبانه پایینی شعله لاله‌ای بر انتشار شعله مسلط بوده و زبانه بالایی شعله لاله‌ای به طور قابل توجهی از بین می‌رود. کانتورهای فشار رسم شده نشان می‌دهند که با عبور جریان از خم، ناحیه‌ای با فشار کمتر و البته سرعت بیشتر در کنار دیواره داخلی خم شکل گرفته که این موضوع سبب افزایش سرعت جابه‌جایی لبه پایینی شعله نسبت به لبه بالایی آن می‌شود. با انتشار بیشتر شعله لاله‌ای در قسمت خمیده، زبانه بالایی در مجاورت دیواره بیرونی خم محو می‌شود. شبیه سازی سه بعدی حاضر نشان می‌دهد که شعله لاله‌ای، در واقع، به شکل شعله لاله‌ای چهارزبانه، با زبانه‌های کاملاً یکسان، در بخش افقی تکامل می‌یابد و این در حالی است که تاثیرات خم بر شعله لاله‌ای باعث محوشدن دو زبانه بالایی می‌شود. با توجه به نمودار سرعت، انتشار شعله در کانال حاضر یک حرکت شتاب دار با شتاب متغیر است، اما در مراحل پایانی، که شعله کاملاً از خم گذشته و شکلی خمیده به خود گرفته است، شتاب گیری شعله متوقف شده و شعله حرکتی با سرعت نسبتاً ثابت را تجربه می‌کند. با توجه به نتایج حاضر، مشاهده شد که وجود خم در مسیر انتشار شعله پیش آمیخته تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر فشار محفظه نداشته است. با این حال، نمودار سرعت شعله نشان می‌دهد که وجود خم دامنه نوسانات سرعت شعله را کاهش می‌دهد.

## منابع

1. S. Verhelst and T. Wallner, "Hydrogen-fueled internal combustion engines," *Progress in Energy and Combustion Science*, 35, No. 6, 2009, pp. 490-527.
2. C. K. Law, "Combustion at a crossroads: Status and prospects," *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, 2007, pp. 1-29.
3. V. V. Bychkov and M. A. Liberman, "Dynamics and stability of premixed flames," *Physics Reports*, 325, 2000, pp. 115-237.
4. S. B. Dorofeev, "Flame acceleration and explosion safety applications," *Proceedings of the Combustion Institute*, 33, 2011, pp. 2161-2175.
5. H. Xiao, D. Makarov, J. Sun and V. Molkov, "Experimental and numerical investigation of premixed flame propagation with distorted tulip shape in a closed duct," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 1523-1538.
6. 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.
7. D. Dunn-Rankin and R. Sawyer, "Tulip flames: changes in shape of premixed flames propagating in closed tubes," *Experiments in fluids*, 24, 1998, pp. 130-140.
8. G. Salamandra, T. Bazhenova and I. Naboko, "Formation of detonation wave during combustion of gas in combustion tube," *Proceedings of the Combustion Institute*, 7, 1958, pp. 851-855.
9. C. Clanet and G. Searby, "On the "tulip flame" phenomenon," *Combustion and flame*, 105, 1996, pp. 225-238.
10. H. Xiao, Q. Wang, X. He, J. Sun and X. Shen, "Experimental study on the behaviors and shape changes of premixed hydrogen-air flames propagating in horizontal duct," *international journal of hydrogen energy*, 36, 2011, pp. 6325-6336.
11. H. Xiao, *Experimental and numerical study of dynamics of premixed hydrogen-air flames propagating in ducts*, Springer Theses, Berlin Heidelberg, Springer-Verlag, 2016.
12. M. Matalon and J. L. McGreevy, "The initial development of a tulip flame," *Proceedings of the Combustion Institute*, 25, 1994, pp. 1407-1413.
13. J. Dold and G. Joulin, "An evolution equation modeling inversion of tulip flames," *Combustion and flame*, 100, 1995, pp. 450-456.
14. D. Dunn-Rankin, P. Barr and R. Sawyer, "Numerical and experimental study of "tulip" flame formation in a closed vessel," *Proceedings of the Combustion Institute*, 21, 1988, pp. 1291-1301.
15. T. Kratzel, E. Pantow and M. Fischer, "On the transition from a highly turbulent curved flame into a tulip flame," *International journal of hydrogen energy*, 23, 1998, pp. 45-51.



16. R. Starke and P. Roth, "An experimental investigation of flame behavior during cylindrical vessel explosions," *Combustion and Flame*, 66, 1986, pp. 249-259.
17. F. S. Marra and G. Continillo, "Numerical study of premixed laminar flame propagation in a closed tube with a full Navier-Stokes approach," *Proceedings of the Combustion Institute*, 26, 1996, pp. 907-913.
18. D. Rotman and A. Oppenheim, "Aerothermodynamic properties of stretched flames in enclosures," *Proceedings of the Combustion Institute*, 21, 1988, pp. 1303-1312.
19. H. Xiao, Q. Wang, X. He, J. Sun and L. Yao, "Experimental and numerical study on premixed hydrogen/air flame propagation in a horizontal rectangular closed duct," *International journal of hydrogen energy*, 35, 2010, pp. 1367-1376.
20. H. Xiao, R. W. Houim and E. S. Oran, "Effects of pressure waves on the stability of flames propagating in tubes," *Proceedings of the Combustion Institute*, 36, 2017, pp. 1577-1583.
21. K. Jin, Q. Duan, K. M. Liew, Z. Peng, L. Gong and J. Sun, "Experimental study on a comparison of typical premixed combustible gas-air flame propagation in a horizontal rectangular closed duct," *Journal of hazardous materials*, 327, 2017, pp. 116-126.
22. M. Tagawa, F. Matsubara and Y. Ohta, "Heat transfer characteristics of a non-premixed turbulent flame formed in a curved rectangular duct," *Combustion and flame*, 129, 2002, pp. 151-163.
23. B. Zhou, A. Sobiesiak and P. Quan, "Flame behavior and flame-induced flow in a closed rectangular duct with a 90 bend," *International Journal of Thermal Sciences*, 45, 2006, pp. 457-474.
24. H. Xiao, X. He, Q. Duan, X. Luo and J. Sun, "An investigation of premixed flame propagation in a closed combustion duct with a 90° bend," *Applied Energy*, 134, 2014, pp. 248-256.
25. H. Xiao, Q. Duan, L. Jiang, X. He and J. Sun, "Effect of bend on premixed flame dynamics in a closed duct," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 88, 2015, pp. 297-305.
26. H. Xiao, X. He, Q. Wang, J. Sun, "Experimental and numerical study of premixed flame propagation in a closed duct with a 90- curved section," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 66, 2013, pp. 818-822.
27. S. Emami, K. Mazaheri and A. Shamooni, "Numerical simulation of propagation and evolution of the premixed flame in a closed channel using artificially thickened flame approach," *12th Conference of Iranian Aerospace Society*, Amirkabir University, Tehran, Iran, February 2013. (in Persian)
28. F. Wang, *Computational fluid dynamics analysis*, Beijing, Tsinghua University Press, 2004.
29. T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and numerical combustion*, Second Edition, Philadelphia, RT Edwards, Inc., 2005.
30. O. 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.
31. J. Humphrey, A. Taylor and J. Whitelaw, "Laminar flow in a square duct of strong curvature," *Journal of Fluid Mechanics*, 83, 1977, pp. 509-527.
32. Ansys fluent theory guide, Release 14.0, ANSYS, Inc., 2011.
33. T. Butler and P. O'Rourke, "A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows," *Proceedings of the Combustion Institute*, 16, 1977, pp. 1503-1515.
34. H. Xiao, J. Sun and P. Chen, "Experimental and numerical study of premixed hydrogen/air flame propagating in a combustion chamber," *Journal of hazardous materials*, 268, 2014, pp. 132-139.
35. K. Kuo, *Principles of Combustion*, Second Edition, New York: John Wiley & Sons, Inc, 2005.
36. J. P. Legier, T. Poinso and D. Veynante, "Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion," *Proceedings of the Summer Program*, Stanford University, Center for Turbulence Research, pp. 157-168, 2000.
37. V. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, and W. Weisenstein, "An efficient computational model for premixed turbulent combustion at high reynolds numbers based on a turbulent flame speed closure," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 120, 1998, pp. 526-532.
38. V. Zimont, F. Biagioli, and K. Syed, "Modelling turbulent premixed combustion in the intermediate steady propagation regime," *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 1, 2001, pp. 14-28.
39. A. De and S. Acharya, "Large eddy simulation of premixed combustion with a thickened-flame approach," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 131, 2009, pp. 061501-061501-11.
40. G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinso and M. Oswald, "Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration," *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp. 1166-1180.
41. A. Shamooni, *Implementation of In Situ Adaptive Tabulation (ISAT) algorithm for simulation of flameless combustion furnaces*, MSc Thesis, Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, 2012. (In Persian).
42. S. B. Pope, "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation," *Combustion Theory and Modelling*, 1, 1997, pp. 41-63.
43. M. Gonzalez, R. Borghi and A. Saouab, "Interaction of a flame front with its self-generated flow in an enclosure: The "tulip flame" phenomenon," *Combustion and Flame*, 88, 1992, pp. 201-220.
44. M. Matalon and P. Metzener, "The propagation of premixed flames in closed tubes," *Journal of Fluid Mechanics*, 336, 1997, pp. 331-350.

## English Abstract

# Numerical study of the dynamic behavior of premixed hydrogen-air flame in a 90-degree bend duct

Ahmad Mosallanejad<sup>1</sup> and Sobhan Emami Koopaei<sup>2\*</sup>

1- Department of Mechanical Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran, ahmad.mosallanejad@yahoo.com

2- Department of Mechanical Engineering, Najafabad Branch, Islamic Azad University, Najafabad, Iran, sobhan@pmc.iaun.ac.ir

\*Corresponding author

(Received: 2018.01.17, Received in revised form: 2018.05.16, Accepted: 2018.05.18)

The dynamics of premixed flame propagating in a channel is inherently unstable. This instability shows itself as a flame inversion and finally tulip flame. The present study is investigated the effect of a 90° bend on the propagation of the tulip flame. The three-dimensional (3-D) large eddy simulation (LES) approach is performed utilizing the artificially thickened flame (ATF) combustion model with a 7-step chemical mechanism. The present results show that the onset of the flame deformation at the horizontal portion of the channel that coincides with the decreasing in the pressure growth and the flame front propagation speed, the flame inversion occurs. At this moment, the formation of a pair of large-scale vortex in the burned gas near the flame causes a change in the flow field around the flame front. In the horizontal section of the channel, the 3-D tulip flame forms with four tongues. After entering the bend, the lower tongues speed up and dominate the flame propagation. Hence, after a while, the upper tongues completely fade and the lower tongues occupy the entire width of the channel. Although the bend has not a significant change on the increasing trend of the chamber pressure, the amplitude of the flame speed oscillation decreases to some extent.

**Keywords:** Flame dynamics, Tulip flame, Distorted Tulip flame, hydrogen-air mixture, Large Eddy Simulation