

مطالعه عددی گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله‌ای حاوی مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا

سبحان امامی کوپائی^۱، کیومرث مظاهری^۲، علی شمعونی پور^۳
دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده مهندسی مکانیک، آزمایشگاه دینامیک گازها
(* نویسنده مخاطب: Kiumars@modares.ac.ir)

چکیده

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 حاوی مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا می‌باشد، پرداخته شده است. به منظور شبیه‌سازی احتراق زیرشبکه از رویکرد شعله ضخیم شده مصنوعی (ATF) و به منظور 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 می‌دهد 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؛ به طوری که آغاز تراک دقیقاً در مجاورت دیواره و درست در پشت ساقه‌ی ماخ شکل گرفته در اثر انعکاس شوک پیشرو از دیوار روی می‌دهد. البته این آغاز به دنبال چندین انفجار محلی روی داده در پشت لبه حمله به وقوع می‌پیوندد.

واژه‌های کلیدی: جت شعله آشفته - آغاز تراک - شتاب‌گیری شعله - رویکرد LES/ATF.

۱- 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^۴ (DDT)، آغاز مستقیم حاصل از موج بلست، آغاز فوتو-شیمیایی 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^۵ (PDE) جزئی از چالش‌های اساسی در طراحی و ساخت این موتورها به حساب می‌آید، روش مناسبی برای تولید تراک 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 می‌باشد [۲]. امکان آغاز تراک به وسیله 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

۱-دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

۲-استاد مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

۳-کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

⁴. Deflagration to detonation transition

⁵. Pulse detonation engine

آغازش موج تراک در محیط اطراف (که با مخلوط قابل احتراق مشابه پر شده بود) شد. فرآیند آغازش بلافاصله در نزدیکی 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 می‌باشد. این محققین با بررسی تأثیر اندازه و شکل روزنه‌ها سه معیار ضروری برای رخداد DDT پیشنهاد کردند: ۱- وجود گردابه‌های آشفته پر انرژی بزرگ مقیاس از گازهای نسوخته در دنباله آشفته شکل گرفته در پائین 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 گردابان 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. مقیاس گردابه‌های بزرگ مورد نیاز حداقل باید در مرتبه اندازه سلولی تراک 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 شده‌است، 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 مورد بررسی قرار می‌گیرد. 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 می‌باشد که این سرعت با کاهش حساسیت مخلوط افزایش می‌یابد [۴].

بر خلاف مطالعات یاد شده، کاراناشیالی و همکاران [۷] و اینادا و همکاران [۸] به جای شتاب‌گیری شعله از پاره شدن 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 تراک می‌باشد که این موضوع بر سازوکار آغازش تراک تأثیر می‌گذارد. از این‌رو 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 پاره شدن دیافراگم هیچ میدان جریانی در پائین دست روزنه شکل نمی‌گیرد. در مطالعات کاراناشیالی و همکاران [۷] که بر روی مخلوط‌های قابل احتراق متفاوت انجام گرفت نشان داده شد که برای آغازش تراک می‌توان معیاری بر اساس نسبت قطر روزنه d ، به اندازه سلولی تراک λ ، ارائه کرد. این معیار قابل مقایسه با قطر بحرانی لوله برای انتشار تراک پایا یعنی $d/\lambda \geq 13$ می‌باشد. بر این اساس، بسته به هندسه روزنه و حساسیت مخلوط شرایط بحرانی برای آغازش تراک از طریق جت برابر $d/\lambda = 11-15$ می‌باشد.

دوروفیو و همکاران [۹] نیز آزمایش‌های بزرگ مقیاسی در زمینه آغازش تراک توسط جت داغی از محصولات احتراق در مخلوط هیدروژن هوا انجام دادند. در این پژوهش نیز جت داغ محصولات با پاره شدن یک غشای جداکننده شکل می‌گیرد. تأثیر غلظت هیدروژن، قطر روزنه جت و ترکیب مخلوط در محفظه انفجاری حجم ثابت مورد بررسی قرار گرفت. بر اساس این مطالعات به منظور آغازش تراک کمینه نسبت اندازه جت آشفته به اندازه سلولی تراک باید در حدود ۱۳-۱۲ باشد. کروک [۱۰] نیز با مطالعاتی که بر روی آغازش در مخلوط هیدروژن-اکسیژن رقیق شده با نیتروژن یا بخار آب انجام داد، معیار $2 < d/\lambda < 7$ را پیشنهاد داد. با توجه به مطالب بالا و بر اساس عقیده عده‌ای از محققان به نظر ارائه معیار عمومی فراگیری برای آغازش تراک از

¹. Shock wave amplification by coherent energy release

طریق جت امکان‌پذیر نیست [۸ و ۱۰]. زیرا که در این معیار اثری از هندسه محفظه و روزنه، حساسیت مخلوط، نحوه ایجاد جت داغ محصولات و همچنین نحوه شتاب‌گیری شعله در لوله شتاب‌دهنده لحاظ نشده است.

توماس و جونز [۱۱] نیز به بررسی رفتار جریان واکنشی به هنگام خروج از لوله شوک پرداختند. بر خلاف 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 به علت اثرات چرخشی حاصل از گردابه‌های بزرگ مقیاس خارجی. افزایش نرخ آزادسازی انرژی در جبهه واکنش آشفته منجر به فراهم آمدن شرایط خوداشتعالی در بسته‌هایی از مخلوط نسوخته می‌شود، جایی که گذار از یک نقطه داغ به تراک روی می‌دهد. مدودف و همکاران [۱۲] نیز به مطالعه نظام‌مند دینامیک آغازش تراک از طریق جت پرداختند. همچنین مقایسه مستقیمی بین روش‌های مختلف ایجاد جت یعنی روش غشای پاره شونده و روش صفحه سوراخ‌دار در کار آن‌ها صورت گرفت.

در سال‌های اخیر واگساتر و همکاران [۱۳ و ۱۴] و همچنین گائوگ و همکاران [۱۵] با استفاده از روش گردابه‌های بزرگ به مطالعه عددی فرآیند گذار از جت شعله به تراک در محفظه‌هایی به همراه یک مانع پرداخته‌اند. در مطالعات انجام گرفته توسط واگساتر و همکاران [۱۳ و ۱۴] هدف توسعه کد کامپیوتری بر پایه LES به منظور شبیه‌سازی DDT بوده است. به علت 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 به منظور مشاهده فاز نهایی DDT وابستگی نرخ واکنش به دما را نیز لحاظ کند. به این منظور در این مراجع نرخ واکنش کلی به صورت 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 می‌باشد. هدف از کار حاضر مطالعه عددی انتشار و شتاب‌گیری شعله و همچنین گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله‌ای شامل یک مانع می‌باشد. 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 می‌باشد. از این رو از نتایج تجربی و عددی منتشر شده توسط واگساتر و همکاران [۱۳ و ۱۴] برای راستی‌آزمایی شبیه‌سازی‌های انجام شده استفاده می‌شود.

۲- مدل‌سازی عددی

معادلات حاکم بر جریان آشفته واکنشی حاضر، همان معادلات ناویر-استوکس واکنشی تراکم‌پذیر ناپایا می‌باشند. از آنجایی که مقیاس‌های طولی متفاوتی در پدیده DDT مشاهده می‌شود، شبیه‌سازی مستقیم عددی این پدیده با توجه به توان رایانه‌ای در دسترس امکان‌پذیر نمی‌باشد. با توجه به پدیده‌های گذرای که در این پدیده روی می‌دهند مانند جدایش جریان، رهايش گردابه، اندرکنش شوک-شعله و غیره استفاده از رویکرد شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ مناسب‌تر می‌باشد. در روش LES ساختارهای آشفته بزرگ مقیاس پر انرژی بر روی شبکه محاسباتی حل شده در حالی که ساختارهای کوچک مقیاس (که دارای خصوصیت‌های بسیار عمومی‌تری هستند) به کمک مدل‌های زیرشبکه (SGS) محاسبه می‌شوند. لازم به ذکر است که در سالیان اخیر از روش LES با موفقیت برای شبیه‌سازی شتاب‌گیری شعله و DDT در لوله‌ای با یک مانع استفاده شده است [۱۳-۱۵] اما هنوز ارزیابی جامعی از دقت این رویکرد حاصل نشده است.

۲-۱- رویکرد LES-ATF

در شبیه‌سازی LES شعله‌های پیش‌آمیخته، از آنجایی که ضخامت شعله آرام δ_f^0 ، بسیار کوچک‌تر از اندازه پهنای فیلتر، Δ می‌باشد 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 روبرو می‌باشد [۱۶]. یکی از رویکردهای توسعه داده شده برای غلبه بر این مشکل مدل شعله ضخیم شده مصنوعی (ATF) است که توسط باتلر و اورز که ارائه شده است [۱۷]. ایده اصلی در این رویکرد افزایش مصنوعی ضخامت شعله پیش‌آمیخته می‌باشد 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 $1/F$ برابری ضریب پیش‌نمایی مدل آرنیوسی، ضخامت شعله F برابر شده ($\frac{1}{l} = F \frac{0}{l}$)، اما سرعت سوزش آرام شعله k_0 ثابت باقی می‌ماند [۱۷]. مقدار F به‌طور معمول به‌گونه‌ای انتخاب می‌شود که شعله ضخیم‌شده توسط ۱۰ گره محاسباتی حل شود ($\frac{1}{l} = 10\Delta x$) [۱۸]. اگرچه ارائه دهندگان این مدل معتقدند که این رویکرد توانایی حل جریان‌هایی شامل شعله ناپایا، تراک و DDT را دارد، اما این موضوع از لحاظ عددی به اثبات نرسیده است.

در این رویکرد از مدل آرنیوسی برای محاسبه نرخ واکنش‌ها استفاده می‌شود. از این‌رو این مدل توانایی شبیه‌سازی پدیده‌های گوناگونی نظیر افروزش و خاموشی شعله، پایدار شدن شعله، اندرکنش شعله-دیوار و غیره را بدون نیاز به زیرمدل‌های اضافی دارا می‌باشد. این رویکرد قابلیت اعمال بر روی سینتیک‌های چند مرحله‌ای را نیز دارد [۱۸]. 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 ضریب عملکرد E ، تصحیح می‌شود. در حقیقت به تابع عملکرد می‌توان به دید یک مدل زیرشبکه برای به حساب آوردن اندرکنش شعله-آشفته‌نگاه کرد [۱۹]. در کار حاضر از تابع عملکرد ارائه شده توسط کولین و همکاران [۱۸] استفاده شده است.

در نهایت معادله انتقال گونه‌ها در این مدل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_j Y_k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \rho D_{FE} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + \frac{\dot{\omega}_k}{F}, \quad (1)$$

به طوری که u ، Y_k و $\dot{\omega}_k$ بیانگر مولفه‌های سرعت، چگالی، کسر جرمی و نرخ واکنش گونه k ام می‌باشند. بالانویس (\sim) نیز نشانگر فیلترگیری جرمی می‌باشد. البته تغییرات مشابهی نیز در معادله بقای انرژی اعمال می‌شود [۱۸]. لازم به ذکر است که در سال‌های اخیر استفاده از رویکرد شعله ضخیم‌شده مصنوعی به‌همراه مدل LES گسترش فراوانی یافته و شبیه‌سازی‌های مختلفی در احتراق پیش‌آمیخته و پاره‌ای پیش‌آمیخته و برای پیکربندی‌های مختلف با دقت مناسب توسط این مدل انجام گرفته است.

در شبیه‌سازی LES حاضر لزجت آشفته زیرشبکه بر حسب انرژی جنبشی آشفته زیرشبکه k_{SGS} و پهنای فیلتر Δ ، بیان می‌شود. k_{SGS} نیز از معادله انتقال ارائه شده توسط یوشیزاوا و هوریوتی به دست می‌آید [۲۰].

۲-۲- سینتیک شیمیایی و روش جدول‌سازی

برای واکنش‌های شیمیایی روی داده در احتراق مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا از سینتیک ۹ گونه‌ای-۲۱ مرحله‌ای پیشنهاد شده توسط لای و همکاران [۲۱] استفاده شده است. سرعت سوزش آرام و دمای شعله بی‌دررو 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 [۲۱].

به‌هنگام استفاده از سازوکار تفصیلی، فارغ از نحوه‌ی مدل‌سازی اندرکنش شیمی-آشفته‌نگی در مقیاس زیرشبکه، جمله‌های نرخ واکنش در معادله انتقال گونه‌ها از حل یک دستگاه ODE سفت 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 در جای تطبیق‌پذیر، ISAT^۱، استفاده شده است. در این روش که در زیر مجموعه‌ی 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 [۲۲] یافت.

استفاده از روش ISAT در بعضی از مسائل پایا، در مقایسه با انتگرال‌گیری مستقیم افزایش سرعتی در حدود ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ بار به دست داده است [۲۲]. از این روش برای محاسبات شعله‌های پیش‌آمیخته آرام یک و دو بعدی ناپایا و یا در شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ [۲۳ و ۲۴] استفاده شده است. نتایج حاصله از سرعت و دقت بالای این روش حکایت دارند؛ به طوری که در این مسائل ناپایا افزایش سرعتی در حدود ۴/۵ تا ۱۳ برابر گزارش شده است. تمامی این پژوهش‌ها به کاربرد روش ISAT در شبیه‌سازی جریان‌های واکنشی با عدد ماخ پائین محدود می‌باشند. بررسی‌های محدودی 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 [۲۵] در شبیه‌سازی دو بعدی موج تراک اشاره کرد. دونگ و همکاران [۲۵] با استفاده از روش ISAT اصلاح شده به بیشینه افزایش سرعتی در حدود ۱۷/۹ برابر در حل معادلات سینتیک دست یافتند.

۲- اهمیت نفوذ مولکولی در انتشار شعله آرام

اگر چه در اغلب کدهای احتراقی آشفته، جایی که نفوذ اغتشاشی بر نفوذ مولکولی غلبه دارد، ضریب نفوذ مولکولی تمامی گونه‌ها یکسان فرض می‌شود، یعنی: $D_k = D$ [۱۶]، اما به هنگام شبیه‌سازی انتشار شعله آرام با استفاده از سازوکارهای شیمیایی به منظور تخمین دقیق سرعت شعله آرام r_f ، باید از مدل‌های انتقال مولکولی دقیق‌تری استفاده کرد. در غیر این صورت سرعت شعله آرام به درستی محاسبه نشده که این موضوع بر شتاب‌گیری اولیه شعله و در نهایت فشار ایجاد شده در محفظه تأثیر گذار 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 به صورت جداگانه و با فرض اعداد لوئیس یا اشمیت معین محاسبه می‌شوند. گیاکومزی و همکاران [۲۶] نشان دادند که فرض عدد اشمیت ثابت صحیح‌تر از فرض عدد لوئیس ثابت می‌باشد؛ زیرا که برای شعله‌های پیش‌آمیخته و غیرپیش‌آمیخته تغییر عدد اشمیت هر گونه نسبت به دما کمتر از تغییرات عدد لوئیس است. در حقیقت عدد اشمیت تنها به ترکیب شیمیایی وابسته بوده و وابستگی آن به دما کمتر از عدد لوئیس می‌باشد. 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 Chemkin انجام می‌گیرند. برای شعله‌های پیش‌آمیخته در اغلب موارد، مقادیر اشمیت گونه‌های محاسبه شده توسط کد Premix در گازهای سوخته اندازه‌گیری می‌شود. در کار حاضر نیز به منظور تخمین دقیق سرعت سوزش شعله آرام از اشمیت‌های متفاوت برای گونه‌های مختلف استفاده شده است. این اعداد اشمیت با استفاده از شبیه‌سازی یک بعدی شعله آرام پیش‌آمیخته که با استفاده از کد Premix از مجموعه نرم‌افزاری Chemkin و ویرایش ۲ [۲۷] انجام گرفته، به دست می‌آیند. این اعداد برای مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا در جدول (۱) گزارش شده‌اند.

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	۰٫۷۸۰	۰٫۱۲۸	۰٫۵۰۸	۰٫۵۱۷	۰٫۷۸۴	۰٫۷۸۹	۰٫۵۶۸	عدد اشمیت

^۱. In situ adaptive tabulation

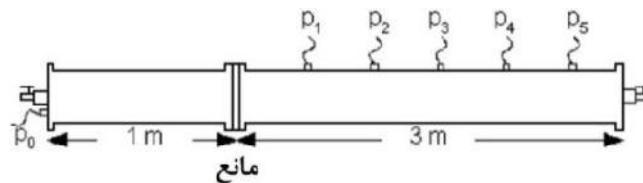
۲-۲- روش عددی

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 [۱۳ و ۱۴]. انتگرال‌گیری زمانی با استفاده از روش کرانک-نیکلسون صورت گرفته است. به منظور کاهش نفوذ و پخش عددی از یک روش TVD (مرتبه دوم/مرتبه 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، که یک روش تکراری می‌باشد، استفاده شده است.

حلگر حاضر بر پایه حلگر rhoReactingFoam از بسته نرم افزاری OpenFOAM ویرایش ۱٫۷ توسعه داده 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 پردازش ۲٫۴ GHz، به همراه ۶۴ GB حافظه قابل دسترسی (RAM) می‌باشد. محاسبات حاضر با استفاده از شبکه‌ای یکنواخت با اندازه‌ای برابر ۰٫۵ mm انجام گرفته است. با اعمال ضریب ضخیم‌کننده ۱۰، ضخامت شعله مصنوعی توسط ۷ 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 ۵۳ روز به طول انجامیده است. البته کمترین شبکه مورد استفاده توسط واگستار و همکاران [۱۳] و همچنین گائوگ و همکاران [۱۵] نیز به ترتیب برابر ۱ mm و ۰٫۵ mm انتخاب شده است. شرایط اولیه به صورت مخلوطی ساکن با فشار ۱ bar و دمای ۲۹۸ K می‌باشد. 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 ۷ mm و دمای اولیه ۲۲۰۰ K مدل می‌شود.

۲-۵- میدان محاسباتی

پیکربندی لوله مورد مطالعه در شکل (۱) قابل مشاهده است.



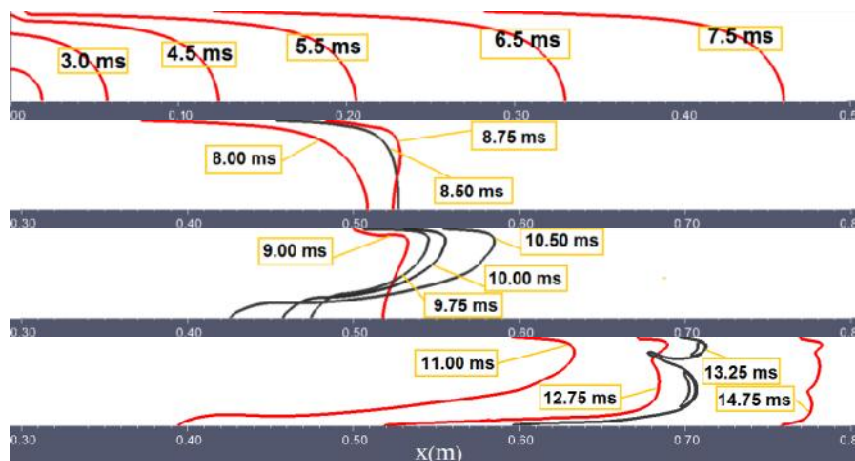
شکل ۱- طرحواره‌ای از پیکربندی محفظه احتراق به همراه یک مانع با نسبت انسداد ۹۲٪.

میدان محاسباتی محفظه احتراقی استوانه‌ای به قطر ۱۰۷ mm و طول ۴ m بوده که حاوی مخلوط استوکیومتری هیدروژن-هوا می‌باشد. همان‌طور که شکل (۱) نشان می‌دهد یک مانع در فاصله ۱ m از محل جرقه قرار داده شده است. قطر قسمت باز مانع برابر ۳۰ mm بوده که نسبت انسدادی برابر ۹۲٪ را ایجاد می‌کند. حسگر P_0 در محل جرقه و حسگرهای دیگر به ترتیب از ۰٫۵ متری پایین‌دست مانع و با فاصله ۰٫۵ m از یکدیگر نصب شده‌اند. انتشار شعله و آغازش تراک در این محفظه توسط واگستار و همکاران [۱۳ و ۱۴] مورد مطالعه تجربی و عددی قرار گرفته است.

۳- نتایج و بحث

- انتشار و شتاب‌گیری شعله آرام در لوله

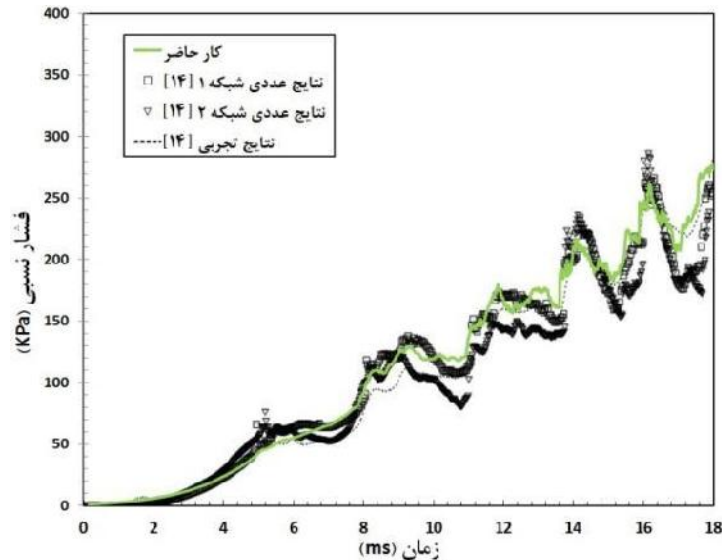
پس از زدن جرقه، هسته شعله اولیه به صورت کروی منبسط شده و در نهایت به دیواره‌های لوله برخورد می‌کند. از این لحظه به بعد در اثر خاموشی قسمتی از شعله در کنار دیواره‌ها که به علت نبود مواد واکنش‌دهنده روی می‌دهد، سطح شعله به مرور کاهش می‌یابد. همان‌طور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود جبهه شعله پس از زدن جرقه و طی مراحل اولیه انتشار خود، در زمان ۸/۵ 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 موجود در محفظه نمی‌باشد 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 می‌باشد. برای مطالعه بیشتر در این زمینه می‌توان به مرجع [۲۸] رجوع کرد. در حدود زمان ۱۱/۵ ms اولین موج تراکمی منعکس شده از مانع به شعله برخورد کرده و شکل آن را دست‌خوش تغییر می‌کند. این تغییر در شکل (۲) در زمان ۱۲/۷۵ ms تا ۱۳/۲۵ ms به خوبی قابل مشاهده است. در اثر این اندرکنش مواد سوخته به صورت یک قیف به درون مواد سوخته کشیده می‌شوند. اندرکنش موج فشاری با شعله و پیدایش رتیسیتی‌های باروکلینیک در این حالت حتی بر ساختار شعله نیز تأثیر می‌گذارد که این موضوع نیز در این زمان‌ها قابل مشاهده است. در زمان ۱۴/۰ ms دومین موج فشاری که قوی‌تر از موج اول است به جبهه شعله برخورد کرده و چین‌خوردگی‌های بیشتری را در سطح شعله ایجاد می‌کند. 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.



شکل ۲- انتشار جبهه شعله در قسمت اول از لوله مورد بررسی (محفظه شعله)، در تصویر اول جبهه شعله در زمان‌های ۱/۰۰، ۳/۰۰، ۴/۵۰، ۵/۵۰، ۶/۵۰ و ۷/۵۰ هزارم ثانیه مشاهده می‌شود. در تصویر دوم جبهه شعله در زمان‌های ۸/۰۰، ۸/۵۰ و ۸/۷۵ و در تصویر سوم در زمان‌های ۹/۰۰، ۹/۷۵، ۱۰/۰۰ و ۱۰/۵۰ هزارم ثانیه رسم شده است. در تصویر چهارم نیز جبهه شعله در زمان‌های ۱۱/۰۰، ۱۲/۷۵، ۱۳/۲۵ و ۱۴/۷۵ هزارم ثانیه قابل مشاهده است. در این تصاویر شرط تقارن محوری بر روی مرز پائینی اعمال شده است.

به منظور صحت‌سنجی شبیه‌سازی حاضر در شکل (۳) تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P_0 در کنار نتایج عددی و تجربی مرجع [۱۴] رسم شده است. نتایج عددی این مرجع با استفاده از دو شبکه مختلف با اندازه سلول محاسباتی ۱ mm و ۲ mm انجام گرفته است که این شبکه‌ها از شبکه عددی شبیه‌سازی حاضر بزرگ‌تر می‌باشند. 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 [۱۴] 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.

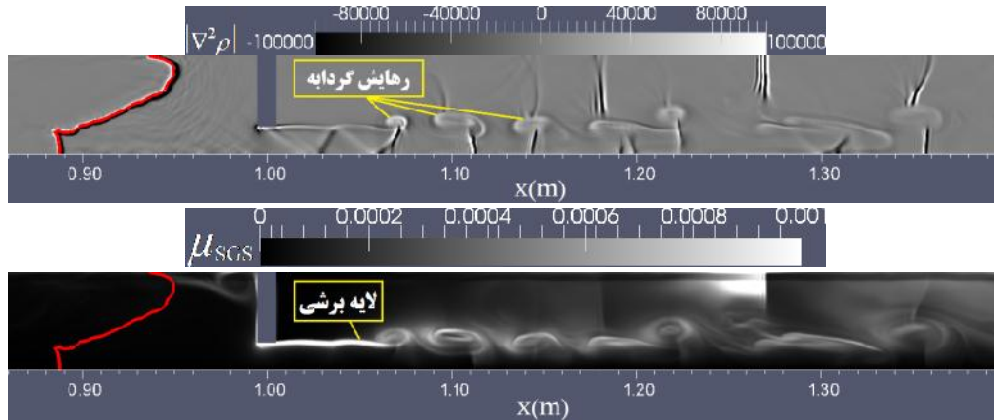


شکل ۳- تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P_0 ، در این بازه زمانی شعله در محفظه اول در حال انتشار است.

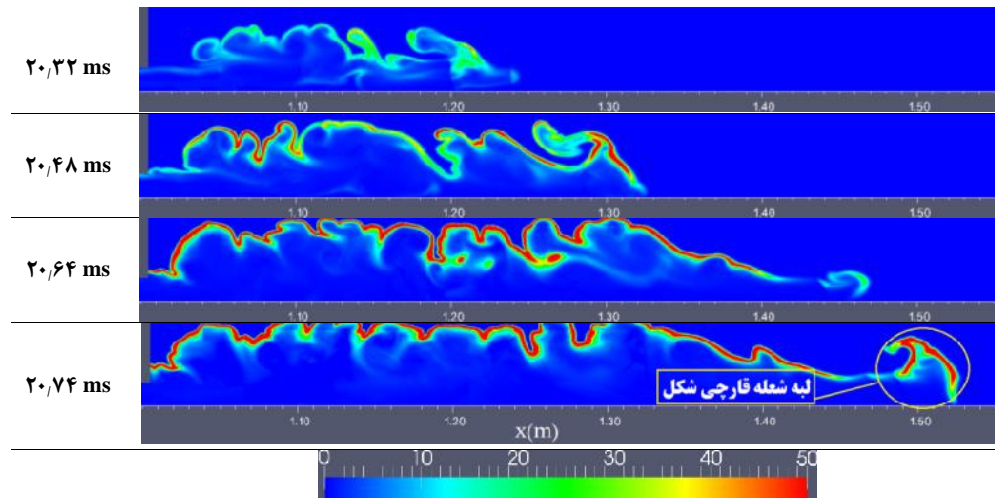
- - ساختار جت جریان و شعله در عبور از مانع

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 (۴) مشاهده می‌شود، همانند دیگر جت‌های مافوق صوت یک ساختار الماس‌مانند در پائین دست مانع قابل مشاهده است. این ساختار از امواج شوک مایل و امواج انبساطی تشکیل می‌شود. از طرفی یک لایه برشی آشفته نیز در پائین دست مانع شکل گرفته که منبع رهایش گردابه‌های بزرگ مقیاس می‌باشد. اندرکنش این گردابه‌ها و امواج شوک در این شکل به خوبی مشاهده می‌شود. در این شکل همچنین به منظور ارزیابی آشفته‌گی 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 آشفته‌گی خاصی در هسته اصلی جریان جت مشاهده نمی‌شود. اندرکنش شعله با این جریان جت در زمان‌های بعد باعث شکل‌گیری یک جت شعله پر سرعت آشفته خواهد شد.

همان‌طور که در شکل (۵) مشاهده می‌شود شعله به‌هنگام عبور از مانع به شدت 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 به دنبال آن سرعت انتشار شعله به ناگاه افزایش می‌یابد. این شتاب‌گیری به حدی است که در لبه حمله شعله ناپایداری رایلی-تیلور 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 و موج شوک قوی‌ای در جلو شعله ایجاد می‌شود. از این رو شعله با طی مسیری کمتر از ۱ متر و در زمانی کمتر از ۲ ms به تراک تبدیل می‌شود که جزئیات آن در ادامه مورد بررسی قرار می‌گیرد.



شکل ۴- انتشار شعله به سمت مانع در زمان ۱۹,۰ ms و شکل گیری جت آشفته مافوق صوت در گذار از مانع. در تصویر بالا، سایه‌نگاری از میدان جریان و در تصویر پائین کانتور لزجت گردابه‌ای زیر شبکه مشاهده می‌شود. در این تصاویر شرط تقارن محوری بر روی مرز پائینی اعمال شده است.

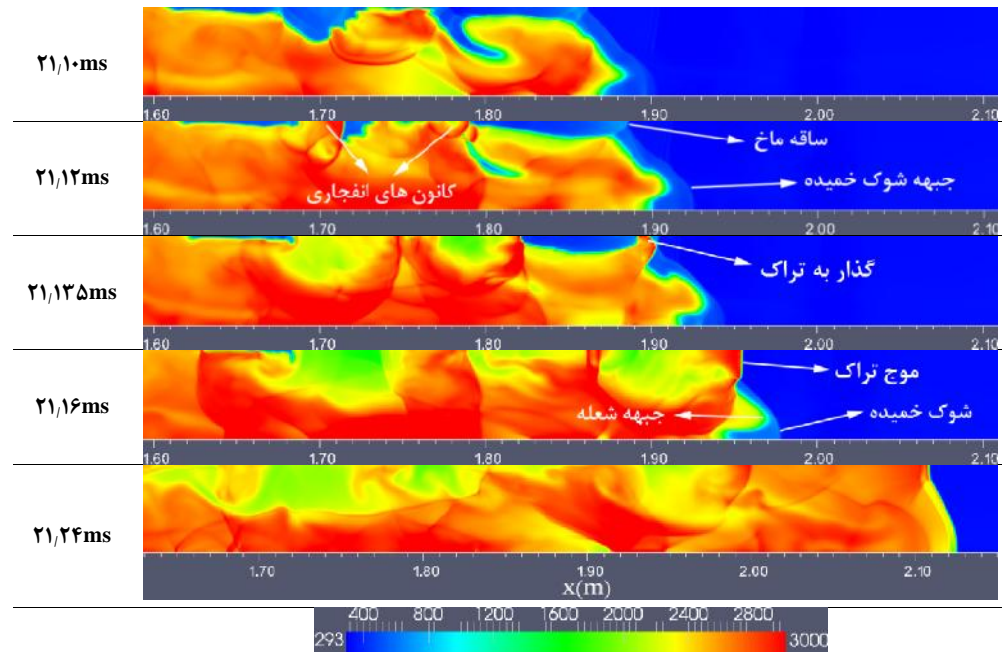


شکل ۵- کانتور نرخ آزادسازی انرژی (I/s) به هنگام عبور جت مانند شعله از مانع. تصاویر فوق از بالا به پائین مربوط به زمان‌های ۲۰,۳۲، ۲۰,۴۸، ۲۰,۶۴ و ۲۰,۷۴ هزارم ثانیه می‌باشند. در این تصاویر شرط تقارن محوری بر روی مرز پائینی اعمال شده است.

- گذار از جت شعله آشفته به تراک در لوله

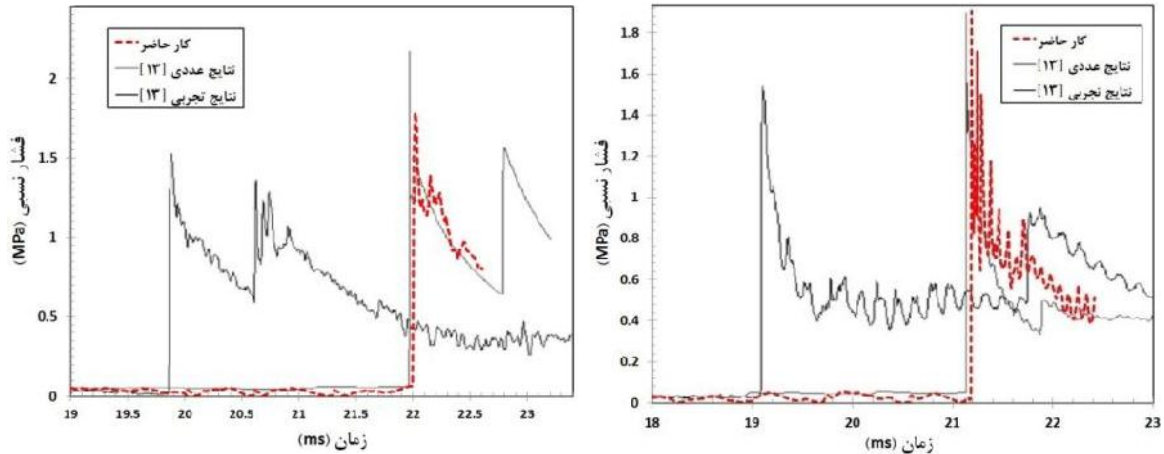
در شکل (۶) مراحل پایانی انتشار شعله و گذار به تراک مشاهده می‌شود. در این زمان‌ها یک موج شوک خمیده قوی در جلو شعله شکل گرفته که انعکاس آن از دیواره لوله یک ساقه ماخ را تشکیل می‌دهد. در زمان ۲۱,۱۲ ms دو انفجار محلی در پشت لبه حمله شعله قابل مشاهده است. این انفجارها در لایه‌ای از مواد نسوخته مجاور دیوار 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 [۱۵] نیز گزارش شده است. در حدود ۲۱,۱۳۵ ms یک کانون انفجاری دیگر درست در پشت ساقه ماخ پیشرو و در مجاورت دیوار 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

موج تراک با ساختاری سه موجی منتشر می‌شود. این مشاهدات 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.



شکل ۶- 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، ۲۱/۱۶ و ۲۱/۲۴ هزارم ثانیه می‌باشند. در این تصاویر شرط تقارن محوری بر روی مرز پائینی اعمال شده است.

به منظور ارزیابی دقیق‌تر شبیه‌سازی حاضر در بازتولید فرآیند DDT و فشار ایجاد شده در محفظه در شکل (۷) تاریخچه فشار ثبت شده در حسگرهای P_2 و P_5 در کنار نتایج تجربی و عددی مرجع [۱۳] آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج عددی حاضر و نتایج عددی مرجع [۱۳] در حدود ۲ ms رخداد DDT را دیرتر پیش‌بینی می‌کنند که این مقدار بیانگر تقریباً ۱۰٪ خطای نسبی می‌باشد. این موضوع نشان می‌دهد که سرعت سوزش آرام و آشفته شعله که تحت تأثیر شبکه محاسباتی، مدل‌سازی ضریب نفوذ مولکولی آرام و مدل‌های زیرشبکه اغتشاشی می‌باشند، 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. البته تاریخچه‌های فشار رسم شده 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 برخوردار هستند که این موضوع نیز تأثیر زیادی بر اختلاف نتایج عددی و تجربی خواهد داشت.



شکل ۷- تاریخچه فشار ثبت شده در حسگر P2 (سمت راست) و حسگر P5 (سمت چپ).

۴- جمع بندی و نتیجه گیری

در کار حاضر به منظور بررسی و ارزیابی رویکرد عددی LES/ATF/ISAT و همچنین شناخت بهتر و بیشتر از فیزیک فرآیند گذار از جت شعله آشفته به تراک به مطالعه عددی فرآیند شتاب گیری شعله و آغازش تراک در لوله‌ای بایک مانع و با فرض تقارن محوری پرداخته شد. شبیه‌سازی‌های حاضر به خوبی مراحل مختلف انتشار یک شعله در محفظه بسته را بازتولید کرده‌اند. نمودار فشار ثبت شده در محفظه به هنگام انتشار شعله و پس از آغازش تراک با نتایج تجربی مقایسه شد 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 در مورد عوامل مؤثر آن بحث شد. آغازش تراک در این محفظه در مجاورت دیوار و درست در پشت ساقه ماخ شکل گرفته در محفظه روی می‌دهد. البته این گذار به دنبال یک سری انفجارهای محلی روی داده در کنار دیوار و در پشت لبه حمله شعله به وقوع می‌پیوندد. مشاهده می‌شود کرد که رویکرد عددی پیشنهاد شده در کار حاضر در بررسی شتاب‌گیری شعله و گذار به تراک از توانایی قابل قبولی برخوردار است. البته به منظور بهبود نتایج حاضر می‌توان تأثیر مدل زیرشبکه آشفته‌گی و همچنین تابع عملکرد مدل ATF را دقیق‌تر مورد مطالعه قرار داد.

مراجع

1. Lee, J.H.S., and Moen, I.O., "The mechanism of transition from deflagration to detonation in vapor cloud explosions", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 6, pp. 359-389, 1980.
2. Higgins, A.J., Pinard, P., Yoshinaka, A.C., and Lee, J.H.S., "Sensitization of fuel-air mixtures for deflagration-to-detonation transition", in: Roy, G.D., Frolov, S.M., Netzer, D.W., and Borisov, A.A., editors, High-Speed Deflagration and Detonation: Fundamentals and Control, ELEX-KM Publishers, Moscow, Russia, pp. 45-62, 2001.
3. Knystautas, R., Lee, J.H.S., Moen, I., and Wagner, H.G., "Direct initiation of spherical detonation by a hot turbulent gas jet", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 17, pp. 1235-1245, 1979.
4. Mackay, D.J., Murray, S.B., Moen, I.O., and Thibault, P.A., "Flame-jet ignition of large fuel-air clouds", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 22, pp. 1339-1353, 1988.
5. Moen, I.O., Bjerketvedt, D., Engebretsen, T., Jenssen, A., Hjertager, B.H., and Bakke, J.R., "Transition to detonation in a flame jet", Combustion and Flame, Vol. 75, pp. 297-308, 1989.
6. Üngüt, A., and Shuff, P., "Deflagration to detonation transition from a venting pipe", Combustion Science and Technology, Vol. 63, pp. 75-87, 1989.
7. Carnasciali, F., Lee, J.H.S., Knystautas, R., and Fineschi, F., "Turbulent jet initiation of detonation", Combustion and Flame, Vol. 84, pp. 170-180, 1991.



8. Inada, M., Lee, J.H.S., and Knystautas, R., "Photographic study of the direct initiation of detonation by a turbulent jet", Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 153, pp. 253-269, 1993.
9. Dorofeev, S.B., Bezmelnitsin, A.V., Sidorov, V.P., Yankin, J.G., and Matsukov, I.D., "Turbulent jet initiation of detonation in hydrogen-air mixtures", Shock Waves, Vol. 6, pp. 73-78, 1996.
10. Krok, J.C., *Jet Initiation of Deflagration and Detonation*, Ph.D. Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 1997.
11. Thomas, G.O., and Jones, A., "Some observations of the jet initiation of detonation", Combustion and Flame, Vol. 120, pp. 392-398, 2000.
12. Medvedev, S.P., Khomik, S.V., Olivier, H., Polenov, A.N., Bartenev, A.M., and B.E., Gelfand, "Hydrogen detonation and fast deflagration triggered by a turbulent jet of combustion products", Shock Waves, Vol. 14, pp. 193-203, 2005.
13. Vaagsaether, K., Knudsen, V., and Bjerketvedt, D., "Simulation of flame acceleration and DDT in H₂-air mixture with a flux limiter centered method", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 32, pp. 2186-2191, 2007.
14. Vaagsaether, K., *Modelling of Gas Explosions*, Ph.D. Thesis, Faculty of Technology, Telemark University College, Norway, 2010.
15. Gaathaug, A.V., Vaagsaether, K., and Bjerketvedt, D., "Experimental and numerical investigation of DDT in hydrogen-air behind a single obstacle", International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 37, pp. 17606-17615, 2012.
16. Poinso, T., and Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd Edition, R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, USA, 2005.
17. Butler, T.D., and O'Rourke, P.J., "A numerical method for two dimensional unsteady reacting flow", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 16, pp. 1503-1515, 1977.
18. Colin, C., Ducros, F., Veynante, D., and Poinso, T., "A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion", Physics of Fluids, Vol. 12, pp. 1843-1863, 2000.
19. Angelberger, C., Veynante, D., and Egolfopoulos, F., "LES of chemical and acoustic forcing of a premixed dump combustor", Flow, Turbulence and Combustion, Vol. 65, pp. 205-222, 2000.
20. Yoshizawa, A., and Horiuti, K., "A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for the large-eddy simulation of turbulent flows", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 54, pp. 2834-2839, 1985.
21. Li, J., Zhao, Z., Kazakov, A., and Dryer, F.L., "An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion", International Journal of Chemical Kinetics, Vol. 36, pp. 566-575, 2004.
22. Pope, S.B., "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation", Combustion Theory and Modelling, Vol. 1, pp. 41-63, 1997.
23. Singer, M.A., and Pope, S.B., "Exploiting ISAT to solve the reaction-diffusion equation", Combustion Theory Modelling, Vol. 8, pp. 361-383, 2004.
24. Singer, M.A., Pope, S.B., and Najm, H.N., "Modeling unsteady reacting flow with operator splitting and ISAT", Combustion and Flame, Vol. 147, pp. 150-162, 2006.
25. Dong, G., Fan, B., and Chen, Y., "Acceleration of chemistry computations in two-dimensional detonation induced by shock focusing using reduced ISAT", Combustion Theory and Modelling, Vol. 11, pp. 823-837, 2007.
26. Giacomazzi, E., Picchia, F.R., and Arcidiacono, N., "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.
27. Kee, R.J., Grcar, J.F., Smooke, M.D., and Miller, J.A., "A Fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames", Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.
28. Clanet, C., and Searby, G., "On the 'tulip flame' phenomenon", Combustion and Flame, Vol. 105, pp. 225-238, 1996.