

مدل سازی احتراق مغشوش با استفاده از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح شده

علی شهانقی^۱ و هادی پاسدارشهری^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ali.shahanaghi@modares.ac.ir

۲- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، pasdar@modares.ac.ir

* نویسنده مخاطب

تاریخ دریافت: ۹۷/۸/۱۷، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۱۰/۱، پذیرش: ۹۷/۱۰/۲۶

چکیده: در این مقاله به بررسی تاثیر اضافه کردن جمله اثر میدان جریان در رابطه محاسبه تغییرات گونه در مدل برهم کنش احتراق و اغتشاشات واکنشگاه اختلاط ایدئال (PSR) پرداخته شده است. نتایج مدل اصلاح شده با نتایج مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال مقایسه و تحلیل شده است. مدل احتراقی مورد استفاده در این مقاله مدل اتلاف گردابه بوده و میدان سیال مغشوش با استفاده از مدل اغتشاشی k-ε استاندارد شبیه سازی شده است. هندسه مورد استفاده مشعل سندیا D است که به صورت متقارن محوری در نظر گرفته شده است. سینتیک در نظر گرفته شده برای شبیه سازی واکنش ها سینتیک ۱۹ گونه ای DRM بوده و شبیه سازی ها به وسیله نرم افزار اپن فوم انجام گرفته و مدل احتراقی و مدل برهم کنش احتراق و اغتشاشات به صورت جداگانه بر روی این نرم افزار پیاده سازی شده است. در نهایت، نتایج به دست آمده با استفاده از نتایج تجربی صحت سنجی شده است. نتایج به دست آمده بیانگر توانایی مدل اصلاح شده در بهبود پیش بینی ها در ناحیه با اختلاط بالای شعله به سبب اعمال تاثیر اغتشاشات در محاسبه نرخ تغییرات گونه است. نتایج نشان دادند در راستای محور شعله استفاده از مدل اصلاح شده به بهبود پیش بینی ها در توزیع اسکالرهای واکنشی و همچنین سرعت خواهد انجامید و ناحیه شعله به درستی پیش بینی خواهد شد. میزان بهبود نتایج در پیش بینی سرعت، دما و گونه ها به ترتیب تا ۱۰، ۱۴ و ۱۵ درصد است. نتایج در راستای شعاعی تفاوت چندانی با مدل اصلاح نشده نداشت، زیرا اثر جمله اختلاط مغشوش در نواحی دورتر از ناحیه مرکزی، به دلیل کاهش اختلاط در این نواحی، اندک است.

کلیدواژگان: واکنشگاه اختلاط ایدئال، شعله سندیا، مدل اتلاف گردابه، احتراق مغشوش، شبیه سازی عددی

مقدمه

احتراق و جریان مغشوش هردو پدیده ای پیچیده به شمار می روند. لذا، شبیه سازی برهم کنش این دو پدیده به عنوان چالش اصلی در زمینه مدل سازی احتراق مغشوش به حساب می آید. با توجه به این مسئله که در بازه وسیعی از مسائل صنعتی و کاربردی احتراق میدان جریان موجود، میدان جریان مغشوش است، مدل سازی برهم کنش احتراق و اغتشاش حائز اهمیت است. یکی از مهم ترین ویژگی های احتراق مغشوش وقوع پدیده خاموشی محلی است که در صورت افزایش این نواحی به خاموشی کلی شعله می انجامد. این پدیده توانایی ایجاد تغییر در مشخصات مهم احتراق مانند پایداری شعله، مصرف سوخت، انتقال حرارت و گسترش شعله را دارد. این مشخصات دارای اولویت اصلی در محفظه های احتراق، موتورهای احتراق و تسهیلات خاموشی آتش اند. به صورت کلی، با مطالعه خاموشی محلی، اطلاعات جدیدی در زمینه ساختارهای کوچک جریان مغشوش و تعامل آن ها با واکنش های شیمیایی در دسترس قرار خواهد گرفت. سه مکانیزم اصلی تاکنون برای خاموشی محلی ارائه شده است [۱،۲]:

- خاموشی آئرو دینامیکی: مکانیزمی که در آن شعله به دلیل اغتشاشات ناشی از حرکت سریع سیال و کاهش زمان ماند گونه های واکنشی در ناحیه شعله به وقوع می پیوندد.

- خاموشی به دلیل اتلاف حرارت: این مکانیزم شامل خاموشی شعله به دلیل تضعیف شعله به وسیله اتلاف حرارت است. به عنوان مثال: اتلاف حرارت تشعشعی یا اتلاف حرارت به دلیل تبخیر قطرات آب در سیستم‌های خاموشی آتش یا تماس با دیواره سرد.
 - خاموشی به دلیل رقیق‌سازی: در این مکانیزم به دلیل تضعیف شعله بر اثر کاهش تامین سوخت یا اکسیدکننده در ناحیه شعله خاموشی رخ خواهد داد.
- لکستره و همکاران [۳] با استفاده از تئوری انرژی فعال‌سازی تقریبی^۱ رابطه‌ای به منظور در نظر گرفتن تمامی مکانیزم‌های ذکر شده ارائه کردند. نتیجه نهایی این بررسی ارائه یک رابطه برای خاموشی محلی بر حسب عدد دمکولر بحرانی بود.
- لیسنکو و همکاران [۴] با استفاده از روش شبیه‌سازی گردابه بزرگ و متوسط‌گیری رینولدز به شبیه‌سازی شعله سیدنی (HMI) و سندیا (CHNA) پرداختند. مدل احتراقی مورد استفاده در این مقاله مدل مفهوم اتلاف گردابه بود که به منظور بررسی برهم‌کنش اغتشاشات و شعله با مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال و سینتیک شیمیایی کامل احتراق متان (GRI 3.0) و سینتیک کاهش‌یافته همراه شده بود. نتایج به دست آمده نشان دادند که دقت تحلیل میدان جریان مغشوش و واکنش‌های شیمیایی سهم برابری در بهبود نتایج حاصل از شبیه‌سازی دارند. لیلبرگ و همکاران [۵] از روش پیش‌پردازش داده‌ها به منظور شبیه‌سازی خاموشی محلی در شعله‌های سندیا D و E استفاده کردند. در این مطالعه، از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال به منظور محاسبه زمان مشخصه ماند واکنشگاه به‌ازای شرایط مختلف دما و سرعت ورودی استفاده شد. در ادامه، زمان مشخصه بحرانی شیمیایی، که به‌ازای مقادیر کمتر زمان مشخصه ماند منجر به خاموشی می‌شد، محاسبه شد و در نهایت این اطلاعات به صورت جدولی به‌ازای دماهای مختلف ورودی ذخیره و برای پیش‌بینی خاموشی محلی در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از این روش قاسمی و همکاران [۶] به شبیه‌سازی شعله‌های جت سوخت متان پرداختند. همچنین، در این پژوهش، آن‌ها به آنالیز حساسیت نسبت به مدل اغتشاشی پرداختند. استفاده از مدل‌های مختلف متوسط‌گیری رینولدز به نتایج مشابهی انجامید. اسنگیرو و تسوی [۷] از تئوری واکنشگاه اختلاط ایدئال برای محاسبه و ارائه مدلی برای خاموشی محلی در آتش استفاده کردند. در این پژوهش، با استفاده از این تئوری دمای بحرانی شعله محاسبه شد. سپس، با استفاده از این دمای بحرانی، مقدار بحرانی زمان مشخصه ماند محاسبه شد. در ادامه، با استفاده از نتایج آزمایشگاهی مقدار عددی مرتبه واکنش کلی در نظر گرفته شده اصلاح شد و در نهایت از واکنش اصلاح شده برای پیش‌بینی مقادیر بحرانی گونه‌های رقیق‌کننده در احتراق استفاده شد و با نتایج حاصل از اندازه‌گیری‌های تجربی مقایسه شد. زهیروبیچ و همکاران [۸] با استفاده از مدل مفهوم اتلاف گردابه به همراه سینتیک کاهش‌یافته^۲ ARM به شبیه‌سازی شعله جت با سوخت متان پرداختند. در این پژوهش، نسخه‌های مختلف مدل اغتشاشی $k-\epsilon$ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان دادند که مدل $realizable\ k-\epsilon$ ناحیه شعله را به میزان کمی بهتر از سایر مدل‌ها پیش‌بینی می‌کند. در ادامه، ضریب $C_{\epsilon 1}$ به $1/6$ تغییر داده شد تا به این وسیله دقت نتایج پیش‌بینی شده بر روی خط مرکزی جت بهبود یابد. مشابه این نتیجه در پژوهش دالی و همکاران [۹] و مسری و همکاران [۱۰] نیز به دست آمده است. پژوهش‌های دیگر [۱۱، ۱۲] بر این شعله‌ها نشان دادند که کاهش ضریب $C_{\epsilon 2}$ به $1/8$ به نتایج مشابهی خواهد انجامید. لی و همکاران [۱۳] به شبیه‌سازی مشعل جت با جریان پایلوت دمابالا پرداختند. در این شبیه‌سازی، از روش متوسط‌گیری رینولدز برای تحلیل جریان مغشوش استفاده شد. هدف این مطالعه مقایسه تاثیر پارامترهای مختلف اعم از مدل‌های اغتشاشی، نسخه‌های متفاوت مدل اتلاف گردابه و تاثیر تغییر ضرایب این مدل‌ها بر دقت نتایج شبیه‌سازی بود. در این پژوهش، همچنین نتایج حاصل از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال و مدل واکنشگاه جریان قالبی (PFR)^۴ با یکدیگر مقایسه شدند. نتایج نشان داد استفاده از مدل PFR در نتایج نهایی تغییر بسزایی ایجاد نمی‌کند. همچنین نتایج مدل اتلاف گردابه با

1. large activation energy asymptotic
 2 Damkohler
 3 Augmented Reduced Mechanism
 4 Plug Flow Reactor

نتایج مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط^۱ مقایسه شد و هردو مدل نتایج قابل قبولی در مقایسه با اندازه گیری های تجربی ارائه دادند. تاثیر در نظر گیری انتقال حرارت تشعشی در معادله انرژی واکنشگاه اختلاط ایدئال در پژوهش اسنگیرو [۱۴] مورد بررسی قرار گرفت. با این تغییر مدل خاموشی ارائه شده توانایی پیش بینی خاموشی بر اثر اتلاف حرارت تشعشی را دارا بود.

مدل های احتراقی که توانایی پیش بینی پدیده برهم کنش شعله و اغتشاشات را دارند را می توان به سه دسته کلی روش های اختلاط آشفته، مانند مدل اتلاف گردابه، مدل های بر پایه آنالیز هندسی، مانند مدل فلیملت [۱۵] و مدل های آماری [۱۶] تقسیم بندی کرد. در مقاله حاضر، از مدل اختلاط آشفته اتلاف گردابه برای شبیه سازی احتراق استفاده شد. در سال ۱۹۷۷، مگنسن و همکاران، با در نظر گرفتن مدل آبشار انرژی، مدل مفهوم اتلاف گردابه [۱۷] را توسعه دادند. در این روش، سلول محاسباتی به دو بخش ناحیه ریز ساختار و سیال اطراف آن تقسیم می شود و ناحیه ریز ساختار به عنوان یک واکنشگاه اختلاط ایدئال بی درو و فشار ثابت در نظر گرفته می شود و معادله بقای گونه برای این واکنشگاه نوشته می شود و در صورتی که زمان مشخصه جریان عبوری از واکنشگاه کمتر از ماند این واکنشگاه شود، خاموشی رخ خواهد داد. اطلاعات بیشتر در مورد این مدل در بخش مدل احتراقی توضیح داده شده است.

مدل های متعددی به منظور بررسی برهم کنش شعله و اغتشاشات در شعله سنديا D مورد استفاده قرار گرفته اند. پیچ و استینر [۱۸] از مدل فلیملت لاگرانژی^۲ و روش شبیه سازی گردابه بزرگ برای شبیه سازی این شعله استفاده کردند. ورمن و همکاران [۱۹] با استفاده از مدل FGM^۳ به شبیه سازی گردابه بزرگ سنديا D و E پرداختند. نتایج نشان دادند چند راه^۴ ساخته شده بر اساس شعله غیر پیش آمیخته توانایی بیشتری در شبیه سازی رژیم های مختلف احتراق در این شعله ها را داراست. ایهمه و پیچ [۲۰] به شبیه سازی شعله سنديا D و E با استفاده از مدل فلیملت همراه متغیر پیشرفت واکنش پرداختند. در این پژوهش، خاموشی محلی و احتراق مجدد این شعله ها مورد بررسی قرار گرفت. توزیع اسکالرهای واکنشی پیش بینی شده مقاله ذکر شده مطابقت قابل قبولی با نتایج تجربی داشت. به طور کلی، برای شبیه سازی پدیده خاموشی، دو روش مستقیم و ضمنی اتخاذ می شود. در روش مستقیم، یک محدوده از شرایط، وابسته به مدل احتراقی انتخاب می شود و در صورتی که این شرایط در ناحیه ای از میدان محاسباتی حاکم شود، به صورت صریح نرخ واکنش در آن ناحیه صفر خواهد شد. این مدل ها به طور معمول دارای تقریب بوده و به هندسه، سینتیک شیمیایی و شرایط مسئله وابسته اند. پژوهش های متعددی در این زمینه انجام گرفته و در نتیجه محدوده های خاموشی متناسب با مدل احتراقی تعریف شده اند [۵،۷،۲۱،۲۲]. در پژوهش پیشین انجام گرفته توسط نویسندگان این مقاله، به بررسی نتایج مدل خاموشی صریح و ضمنی پرداخته شد و مشاهده شد نتایج مدل خاموشی، با توجه به استفاده از سینتیک کاهش یافته و حجم پایین محاسبات، قابل قبول است [۲۳]. در روش ضمنی، این پدیده به صورت ضمنی توسط مدل برهم کنش واکنشگاه اختلاط ایدئال در نظر گرفته می شود.

مطالعات متعددی به منظور بررسی توانایی مدل های مختلف احتراقی در زمینه پیش بینی برهم کنش شعله و میدان مغشوش بر روی شعله سنديا D به سبب ویژگی های این مشعل انجام گرفته است. با توجه به این مسئله، در این مقاله به تفاوت پیش بینی دو مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح شده و اصلاح نشده در شعله سنديا D پرداخته شده است. علت انتخاب این هندسه دو ویژگی اختلاط ایجاد شده در ورودی نازل به محفظه احتراق و رینولدز بالای آن است که وجود این دو ویژگی این هندسه را به هندسه ای مناسب برای شبیه سازی احتراق مغشوش تبدیل می کند. هدف این مقاله بررسی تاثیر اعمال اثر میدان جریان مغشوش در معادله تغییرات گونه مدل برهم کنش واکنشگاه اختلاط ایدئال است. این مدل همراه با مدل احتراقی اتلاف گردابه برای شبیه سازی شعله سنديا D استفاده شده است. ذکر این نکته لازم است که بنا به اطلاع نویسندگان این مسئله در پژوهش های پیشین مورد بررسی واقع نشده است.

1 Partially Stirred Reactor
2 Lagrangian Flamelet
3 Flamelet Generated Manifold
4 Manifold

شبیه‌سازی عددی

معادلات حاکم

معادلات حاکم معادلات متوسط‌گیری شده برای جریان بوده و از مدل اغتشاشی k-ε استاندارد استفاده شده است. معادله پیوستگی و بقای تکانه و گونه و انرژی به شرح زیرند:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{u}_j'') + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\tau}_{ij} \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{Y}_k'' \right) + \bar{\omega}_k \quad (k = 1 \dots N_{species}) \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \alpha \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{h}'' \right) + \bar{S}_h \quad (4)$$

که در آن \bar{p} فشار، $\bar{\tau}_{ij}$ تنش لزجی، D ثابت نفوذ جرمی، $\bar{\omega}_k$ نرخ متوسط تولید گونه k و \bar{S}_h ترم تولید انرژی درونی است. برای محاسبه ضریب نفوذ گونه‌ها از جداول جنف کتابخانه این فوم استفاده شده است. در این تحقیق، با توجه به ماهیت جریان، مقدار عدد لوییز برای همه گونه‌ها ۱ در نظر گرفته شده است. ترم تنش رینولدزی و $\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{h}''$ و $\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{Y}_k''$ مطابق روابط زیر مدل می‌شوند:

$$\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{u}_j'' = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \delta_{ij} \quad (5)$$

$$-\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{Y}_k'' = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (6)$$

$$-\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{h}'' = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \quad (7)$$

مقادیر اعداد پرانتل Pr_t و اشمیت اغتشاشی Sc_t برابر ۱ قرار داده شده است. همچنین دو معادله انتقال برای انرژی جنبشی اغتشاشی و نرخ اضمحلال اغتشاشی حل خواهد شد:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) + G - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \quad (8)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{\epsilon})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\epsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_j} \right) + \frac{C_{\epsilon 1} \epsilon}{\tilde{k}} G - \frac{C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (9)$$

که $C_{\epsilon 1}$ و $C_{\epsilon 2}$ و σ_k و σ_ϵ ثوابت مدل و همچنین $G = -\bar{\rho} \tilde{u}_i' \tilde{u}_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$ ترم تولید انرژی جنبشی اغتشاشی است.

مدل احتراقی اتلاف گردابه

مدل احتراقی اتلاف گردابه توسط مگنسن و همکاران در سال ۱۹۷۶ ارائه شده و در طی زمان توسعه یافته است [۱۷]. این مدل به محاسبه نرخ متوسط واکنش می‌پردازد (رابطه ۳). این مدل فرض می‌کند که واکنش‌های شیمیایی در محلی که اضمحلال اغتشاش رخ می‌دهد صورت می‌گیرد که این ناحیه ریزساختار نامیده می‌شود و طول مشخصه آن از مرتبه مقیاس کولموگروف است. این ساختارها به صورت یکنواخت در زمان و مکان مشخصی وجود ندارند، اما بخشی از جریان را اشغال کرده‌اند. در نوشتار زیر (*) مربوط به ریزساختار و $\bar{\rho}$ مربوط به متوسط کمیت در شبکه محاسباتی است.

$$\gamma^* = C_\gamma \left(\frac{\nu \epsilon}{\tilde{k}^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (10)$$

γ^* کسر حجمی اشغال شده توسط ناحیه ریزساختار در سلول محاسباتی است.

1Janaf

2OpenFOAM v4.1

این مدل فرض می‌کند که نرخ واکنش شیمیایی بسیار سریع است. لذا، این واکنش‌ها توسط نرخ انتقال جرم بین ناحیه ریزساختار و محیط کنترل می‌شوند. مدت زمان حضور واکنش‌دهنده‌ها در ناحیه واکنش توسط رابطه زیر قابل بیان است.

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{V}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

که در آن τ^* زمان ماند و V گرانروی سینماتیکی ناحیه ریزساختار است. این مدل فرض می‌کند که نرخ متوسط واکنش تابعی از کسر جرمی ریزساختار و اختلاف بین کسر جرمی گونه‌ها در ناحیه ریزساختار و محیط است و توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\dot{\omega}_s = -\frac{\bar{\rho}\gamma^2}{\tau^*(1-\gamma^2)}(\bar{Y}_s - Y_s^*), C_\tau = 0.4063, C_\gamma = 2.1377 \quad (12)$$

ذکر این نکته لازم است که نسخه مدل مفهوم اتلاف گردابه استفاده شده در این مقاله مطابق نسخه ارائه شده توسط مگنسن در سال ۲۰۰۵ است [۲۴]. به‌طور کلی، مدل مفهوم اتلاف گردابه به‌تنهایی توانایی پیش‌بینی پدیده خاموشی آئرودینامیکی را ندارد. زیرا، در این مدل (رابطه ۱۲) با افزایش عدد رینولدز جریان و کاهش زمان ماند در ناحیه ریزساختار نه تنها خاموشی رخ نمی‌دهد، بلکه باعث بیشتر پیش‌بینی شدن نرخ متوسط واکنش در این نواحی می‌شود. در نتیجه، برای در نظرگیری تعامل بین میدان جریان مغشوش و واکنش‌های شیمیایی مگنسن دو راهکار برای اصلاح پیش‌بینی‌ها می‌توان ارائه کرد: استفاده از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح شده و استفاده از مدل صریح خاموشی محلی [۲۵، ۲۱].

مدل برهم‌کنش احتراق و اغتشاشات واکنشگاه اختلاط ایدئال

مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال به‌صورت جداگانه به‌عنوان رژیم احتراقی برای محاسبه تغییرات گونه و حل معادلات دیفرانسیل معمولی مربوط به سینتیک شیمیایی نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد. مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال یا در برخی منابع [۱۳] مدل واکنشگاه جریان قالبی (PFR)، در صورت استفاده همراه با مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه، به‌منظور در نظر گرفتن سینتیک کامل برای محاسبه کسر جرمی گونه‌ها در ناحیه ریزساختار به‌کار برده می‌شود.

معادلات اصلی تشکیل‌دهنده این مدل همراه با مدل مفهوم اتلاف گردابه به این ترتیب است که معادلات کسر حجمی ریزساختارها و نحوه محاسبه نرخ انتقال جرم بین ریزساختار و محیط و همچنین رابطه نرخ واکنش مانند حالات پیشین است و تفاوت در نحوه محاسبه کسر جرمی گونه‌ها در ناحیه ریزساختار است. در مدل مفهوم اتلاف گردابه برای محاسبه کسر جرمی هریک از گونه‌ها، با فرض شدن ناحیه ریزساختار به‌عنوان یک واکنشگاه اختلاط ایدئال معادلات حاکم بر این واکنشگاه حل می‌شود. یک جریان ثابت از واکنش‌دهنده‌ها از ورودی با ترکیب و دمای مشخص وارد می‌شود. شار جرمی ورودی با شار جرمی خروجی مساوی است و همچنین فشار در هر سلول ثابت در نظر گرفته می‌شود. معادلات واکنشگاه اختلاط ایدئال ناپایا به شکل زیر بیان می‌شود [۱۳].

$$\frac{dp^*}{dt} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{dh^*}{dt} = 0 \quad (14)$$

$$\frac{dY_s^*}{dt} = \dot{\omega}_s \quad (15)$$

$\dot{\omega}_s$ بیانگر نرخ مصرف یا تولید گونه‌هاست که از روابط سینتیک شیمیایی محاسبه می‌شود.

مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح شده

مگنسن، به‌منظور در نظر گرفتن واکنش‌های شیمیایی در مدل‌سازی احتراق آشفته، ویرایش جدیدی از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال را ارائه کرد. به‌عبارت دیگر، در این مدل هم تأثیر اختلاط مولکولی بر نرخ احتراق و هم تأثیر واکنش‌های شیمیایی بر روی آن دیده شده است.

در این مقاله به بررسی تاثیر اعمال ترم مربوط به اختلاط مولکولی در معادله تغییرات گونه با زمان در این دستگاه معادلات پرداخته شده است. لذا، در این مدل نیز فرض بی‌دررو و فشار ثابت بودن این واکنشگاه اعمال شده، اما برای محاسبه ترم تغییرات گونه با زمان از رابطه زیر استفاده شده است [۱۷].

$$\frac{dY_s^*}{dt} = \dot{\omega}_s + \frac{1}{\tau^*} (Y_s^* - \bar{Y}_s) \quad (16)$$

جمله $\dot{\omega}_s$ که بیانگر نرخ تولید یا مصرف گونه k در واکنشگاه ریزساختار است از محاسبات سینتیکی به دست می‌آید. باید توجه داشت که زمان اقامت در این چنین واکنشگاهی برابر τ^* است و اگر این زمان مشخصه کمتر از زمان مشخصه شیمیایی باشد. واکنش‌ها خاموش می‌شوند و این‌گونه تأثیر اغتشاشات بر احتراق اعمال می‌شود. حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی تشکیل شده از نظر عددی بسیار دشوار است. در پژوهش حاضر، برای حل این دستگاه معادلات از حلگر با الگوریتم RADAU5 استفاده شد [۲۶].

سینتیک شیمیایی

سینتیک مورد استفاده در این شبیه‌سازی، سینتیک DRM است که مکانیزم کاهش یافته ۱۹ گونه‌ای احتراق متان است [۲۷].

هندسه شبیه‌سازی، روش حل و شرایط مرزی

هندسه شبیه‌سازی شده یک قطاع متقارن محوری از شعله سندیا D است. قطر داخلی نازل ۷/۲ میلی‌متر و قطر پایلوت ۷/۷ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. همچنین، قطر خارجی پایلوت برابر ۱۸/۲ میلی‌متر است. همچنین، در شبیه‌سازی عددی طول محفظه ۳۰۰ برابر قطر و شعاع آن ۲۰/۸۳ برابر قطر نازل در نظر گرفته شد. در شکل ۱ طرحواره هندسه شبیه‌سازی قابل مشاهده است.

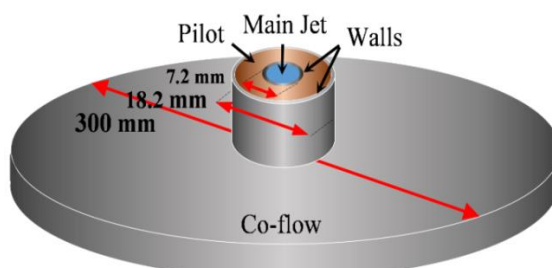


Figure 1- Schematic of the simulation geometry

شکل ۱- طرحواره هندسه شبیه‌سازی

برای حل معادلات از حلگر اصلاح شده reactingFOAM با اضافه شدن مدل‌های مذکور توسط نگارنده استفاده شده است. برای ترم‌های جابه‌جایی از تقریب مرتبه اول بادسوز^۱ و ترم‌های نفوذی از تقریب مرتبه دوم استفاده شده است. برای حل معادلات سینتیک از حلگر RADAU5 (که به کد اضافه شده است) استفاده شده که قابلیت حل دستگاه معادلات استیف‌آرا دارد. معیار همگرایی برای معادلات 10^{-6} است. برای اعمال کوپلینگ سرعت و فشار از الگوریتم PIMPLE استفاده شده است. میزان شدت اغتشاشی در شرط مرزی ورودی با توجه به معیار آزمایشگاهی تعیین شده است. در جریان جت اصلی این مقدار ۰/۱ و در جریان جت پایلوت، ۰/۰۱ در نظر گرفته شده است.

1Upwind
2Stiff

تعداد شبکه ۴۰۰۰۰ در نظر گرفته شد و استقلال از شبکه در این تعداد به دست آمد. نتایج استقلال از شبکه در شکل ۲ قابل مشاهده است.

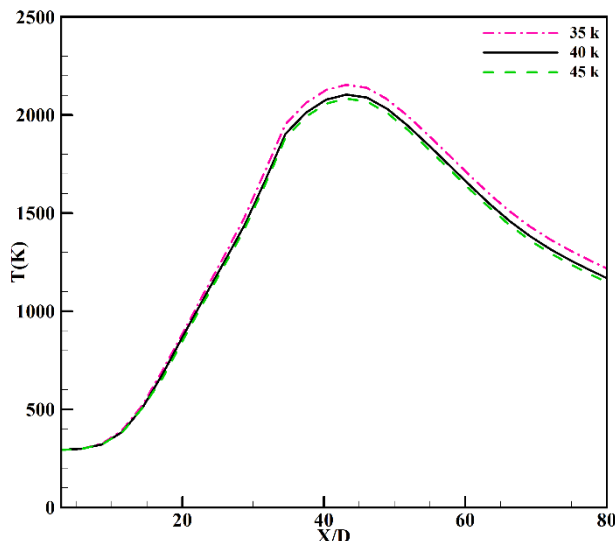


Figure 2- Mesh independency results (axial temperature)
شکل ۲- نتایج استقلال از شبکه (دما در راستای محوری)

شرایط مرزی مربوط به ورودی شعله سنديا D و مورد استفاده در شبیه‌سازی در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱- مشخصات جریان در ورودی شعله

Table 1- Inlet conditions

	Inlet temperature	Inlet velocity
Main Jet	294	49.6
Pilot Jet	1880	11.4
Co-flow	291	0.9

نتایج و بحث روی نتایج

در این بخش، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی شعله سنديا D با استفاده از مدل اغتشاشی تنش رینولدزی $k-\epsilon$ و مدل احتراق مغشوش اتلاف گردابه با مدل‌های برهم‌کنش احتراق و اغتشاشات واکنشگاه اختلاط ایدئال برای سینتیک ۱۹ گونه‌ای کاهش یافته احتراق متان مقایسه شده و در نهایت با نتایج تجربی [۲۸،۲۹] بر روی محور تقارن مقایسه شدند. نتایج در راستای محور تقارن مورد بررسی قرار گرفت تا توانایی مدل‌ها در پیش‌بینی ناحیه شعله و همچنین نرخ واکنش در ناحیه مرکزی جت، که دارای بیشترین میزان اختلاط است، با یکدیگر مقایسه شوند. در مجموع، استفاده سینتیک کامل دقیق‌ترین نتایج را نسبت به نتایج تجربی به دست می‌دهد و اختلاف بین نتایج و نتایج تجربی با احتساب استفاده از سینتیک کاهش یافته قابل قبول است. توزیع سرعت در راستای محوری در هر دو روش مطابق اندازگیری‌های تجربی بود. در شکل ۳، تغییرات سرعت در راستای محور شعله مورد بررسی قرار گرفته است.

همان‌طور که در شکل ۳ قابل مشاهده است تغییرات سرعت‌ها در راستای محوری تطابق قابل قبولی با نتایج تجربی دارد. این به این معنی است که مدل اغتشاشی ($k-\epsilon$ استاندارد) انتخاب شده به خوبی اختلاط موجود در ناحیه خروجی نازل به محفظه را پیش‌بینی کرده است و برای بهبود پیش‌بینی میدان جریان به تغییر ضرایب مدل احتیاج نیست. این مسئله همچنین پیش‌تر در پژوهش لی و همکاران [۱۳] مشاهده شده بود. اما، همان‌طور که در شکل نیز مشخص است، در ناحیه رقیق شعله

نتایج مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال کمتر از مقادیر تجربی است که این مسئله به دلیل کوپلینگ دما و سرعت است و به این دلیل است که دماهای کمتر از مقادیر تجربی منجر به بالارفتن چگالی شده که در نهایت منجر به افت سریع تر سرعت در راستای محوری شعله شده است. اما، در ناحیه غلیظ عامل بالابودن دما از ویژگی نیمه پیش آمیخته بودن شعله ناشی می شود؛ به این معنی که به دلیل وجود اکسیژن در جت سوخت در این نواحی با کاهش سرعت و فراهم شدن اختلاط لازم کسر جرمی واکنش دهنده ها به شرایط استوکیومتری رسیده و با شروع واکنش ها دما بالا می رود و باعث شروع واکنش ها و نهایتاً بیشتر پیش بینی شدن دما می شود.

در شکل ۴ تغییرات دما بر روی محور شعله مورد بررسی واقع شده و با نتایج تجربی مقایسه شده است. استفاده از مدل اصلاح شده تا ۱۰ درصد باعث بهبود نتایج در نمودار سرعت شد.

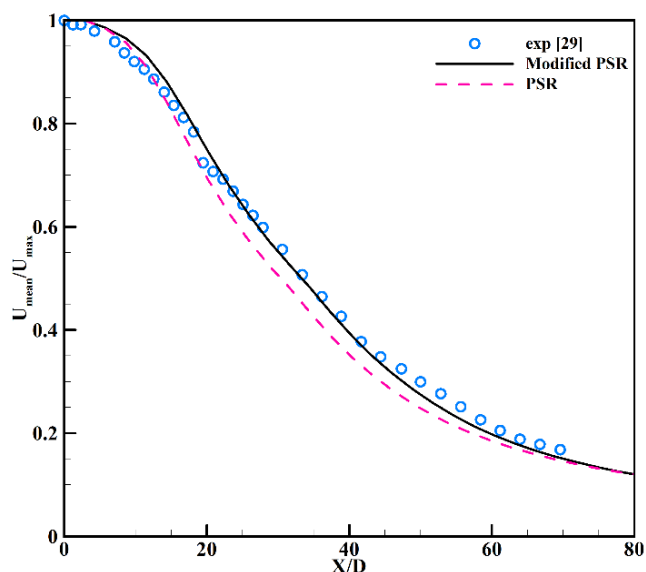


Figure 3- axial velocity profiles: Circles (experiments [29])
 شکل ۳- توزیع سرعت ها در راستای محوری (دایره: نتایج تجربی [۲۹])

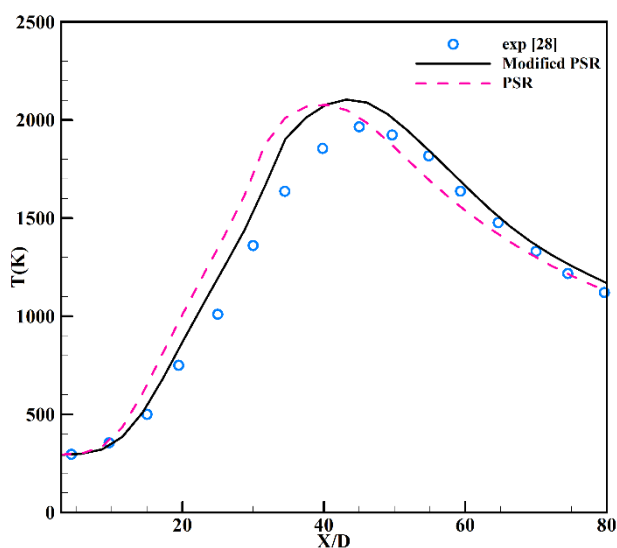


Figure 4- axial temperature distribution: Circles (experiments [28])
 شکل ۴- توزیع دما در راستای محوری (دایره: نتایج تجربی [۲۸])

توزیع دما نشان دهنده تاثیر متقابل اختلاط مغشوش و نرخ انتقال حرارت ناشی از نرخ تغییرات گونه است. آنچه به وضوح قابل مشاهده است، بهبود نتایج مدل اتلاف گردابه با اعمال اثر اختلاط در مدل برهمکنش واکنشگاه اختلاط ایدئال نسبت به نتایج مدل اتلاف گردابه بدون اعمال این اثر است. در راستای محور تقارن دمای ماکزیمم هردو روش به طور مساوی مقداری بیشتر از نتایج تجربی را نشان می دهد. یکی از عوامل بیشتر پیش بینی شدن بیشینه دما نادیده گرفتن واکنش ها و واکنش دهنده ها با استفاده از سینتیک کاهش یافته است. به صورت کلی، استفاده از مدل اصلاح شده تا ۱۴ درصد باعث بهبود نتایج در نمودار دما شد. همان طور که قابل مشاهده است، استفاده از مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح شده با کنترل نرخ واکنش و نرخ انتقال حرارت در ناحیه اختلاط منجر به منتقل شدن شعله به پایین دست شده است که این مسئله مطابق اندازه گیری های تجربی است. با توجه به این مسئله که عبارت مورد بررسی در مدل برهمکنش احتراق و اغتشاشات، معادله تغییرات گونه است، لذا توزیع گونه ها نیز بر روی محور تقارن مورد بررسی واقع شده اند.

شکل ۵ توزیع کسر جرمی سوخت در راستای محور شعله را نشان می دهد. در مقایسه با مدل اصلی در مدل اصلاح شده نرخ مصرف سوخت در راستای طولی کاهش یافته است. با این حال هر دو مدل میزان نرخ مصرف سوخت را بیش از حد پیش بینی کرده اند. این مسئله همچنین در توزیع سایر گونه ها، یعنی O_2 ، CO و CO_2 ، نیز قابل مشاهده است.

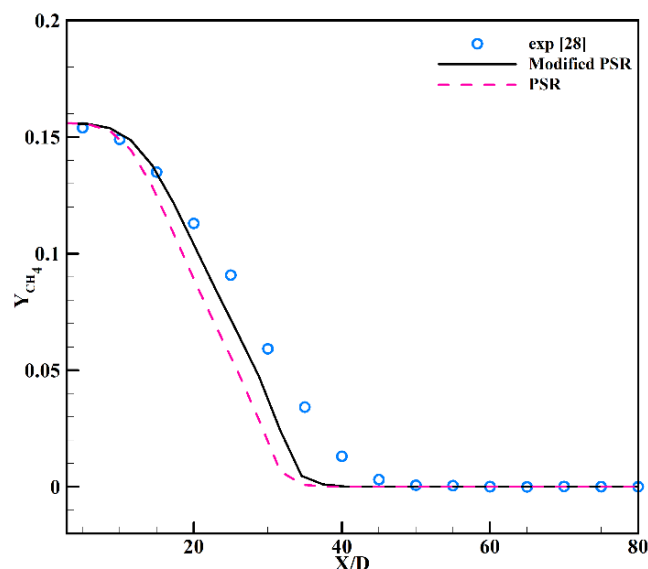


Figure 5- axial CH_4 mass fraction distribution: Circles (experiments [28])
شکل ۵- توزیع کسر جرمی سوخت در راستای محوری، دایره (نتایج تجربی [۲۸])

در شعله سندیا D جریان رقیق شده سوخت و اکسیژن باعث ایجاد شعله نیمه پیش آمیخته می شود. این مسئله منجر به آزاد شدن حرارت در نواحی پیش آمیخته با غلظت بالا در شعله می شود که نهایتاً منتهی به بالارفتن بیش از حد دما و گونه هایی مانند CO و CO_2 در نزدیکی خروجی نازل می شود. همان طور که در شکل ۸-۶ قابل مشاهده است، مدل اصلاح شده توزیع گونه ها در راستای محور شعله را بهتر پیش بینی کرده است. شکل ۶ نشان می دهد که با استفاده از هردو روش تقریباً تمام اکسیژن در خروجی نازل مصرف شده است و در نهایت در پایین دست پس از مخلوط شدن با جریان هوای موازی به مقدار کافی رسیده است. این مسئله همچنین باعث بالارفتن بیش از حد دما و پیش بینی بیش از حد گونه CO_2 می شود (شکل ۸). از سوی دیگر واکنش تاثیرگذار بر شکل گیری گونه CO به اندازه ای سریع نیست که به تعادل شیمیایی برسد. لذا، برای مدل سازی

صحیح این واکنش باید از سینتیک کامل استفاده کرد. همچنین، بیشتر پیش‌بینی‌شدن گونه‌هایی مانند CO و CO₂ در محل شعله (محل اختلاط جریان) به دلیل عدم وجود واکنش‌های مصرف‌کننده این گونه‌ها در سینتیک مورد استفاده است. نتایج پیش‌بینی مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اصلاح‌شده و اصلاح‌نشده در راستای شعاعی، به دلیل غالب بودن ترم اختلاط در ناحیه محور شعله، تفاوت چندانی با یکدیگر نداشتند. استفاده از مدل اصلاح‌شده تا ۱۵ درصد پیش‌بینی توزیع گونه‌ها را در راستای محوری بهبود بخشید. همچنین، با توجه به این مسئله که اصلاح مدل بر روی تغییرات گونه در مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال است، مشاهده می‌شود با اعمال این مدل پیش‌بینی مدل برهمکنش بهبود یافته است.

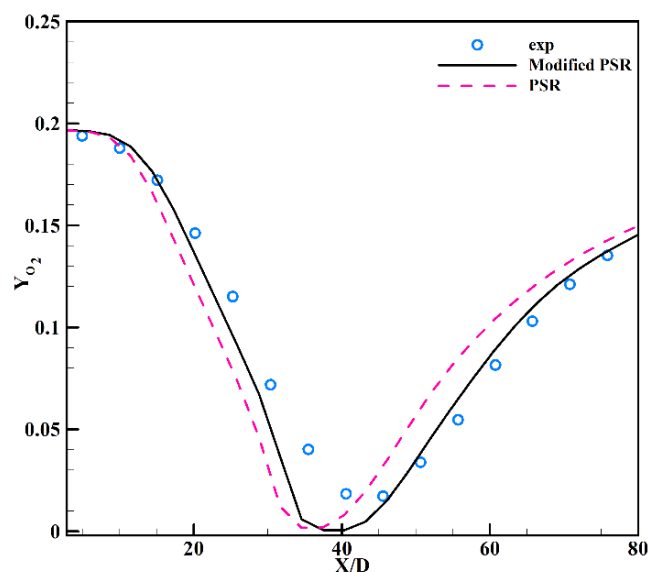


Figure 6- axial O₂ mass fraction distribution (Circles: experiments [28])
 شکل ۶- توزیع کسر جرمی اکسیدکننده در راستای محوری، دایره (نتایج تجربی [۲۸])

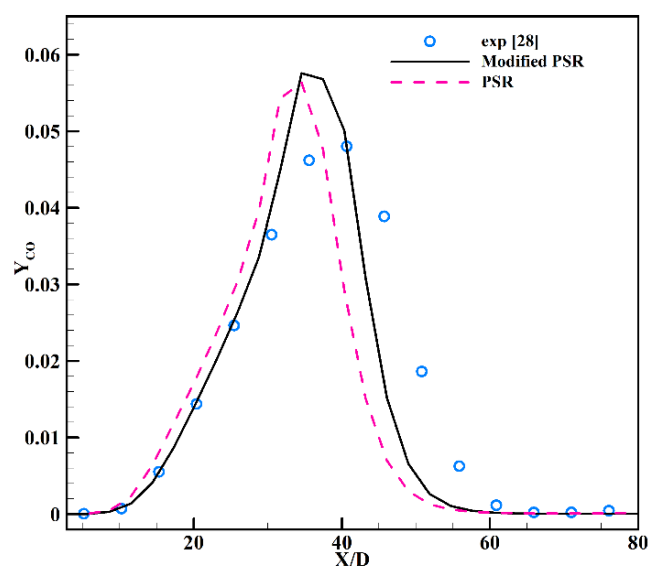


Figure 7- axial CO mass fraction distribution: Circles (experiments [28])

شکل ۷- توزیع کسر جرمی CO در راستای محوری (دایره: نتایج تجربی [۲۸])

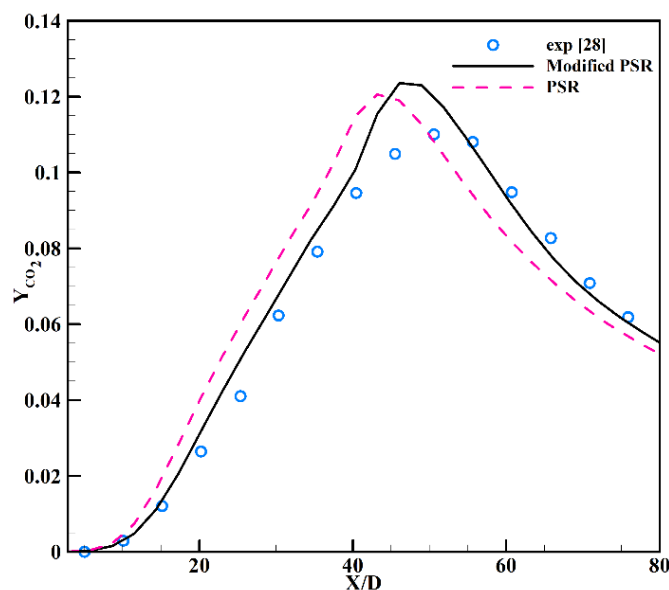


Figure 8- axial CO₂ mass fraction distribution (Circles: experiments [28])
 شکل ۸- توزیع کسر جرمی CO₂ در راستای محوری (دایره: نتایج تجربی [۲۸])

نتیجه گیری

شبیه‌سازی دقیق برهمکنش اغتشاشات و احتراق، با توجه به پیچیدگی ذاتی هردو پدیده و همچنین کاربرد وسیع این پدیده در صنایع، حائز اهمیت است. لذا، شبیه‌سازی این پدیده با دقت مناسب ضروری است. در نظر گرفتن تاثیر اغتشاشات جریان بر روی احتراق، تاثیر بسزایی بر افزایش دقت و صحت نتایج شبیه‌سازی دارد. یکی از روش‌های شبیه‌سازی این پدیده استفاده از مدل برهمکنش اختلاط ایدئال (PSR) است. اثر میدان جریان مغشوش با در نظر گرفتن سلول محاسباتی به‌عنوان یک واکنشگاه فشار ثابت بی‌دررو بر مدل احتراق آشفته اعمال می‌شود. در استفاده از این مدل همراه با مدل احتراقی مفهوم اتلاف گردابه ناحیه ریزساختار به‌عنوان واکنشگاه اختلاط ایدئال در نظر گرفته شده و اثر زمان ماند این ناحیه به‌صورت ضمنی یا صریح بر نرخ واکنش پیش‌بینی شده توسط این مدل احتراقی اعمال می‌شود. در این پژوهش از روش ضمنی برای اصلاح نرخ واکنش مدل مفهوم اتلاف گردابه استفاده شد. برای اعمال این اثر ترم اختلاط جریان مغشوش در معادله تغییرات گونه مدل واکنشگاه اختلاط ایدئال اضافه می‌شود. در این پژوهش، به بررسی اثر اعمال این اصلاح در معادلات واکنشگاه اختلاط ایدئال پرداخته شد. نتایج نشان دادند که به‌وسیله اعمال اثر پارامتر زمان ماند واکنشگاه به‌تاخیرافتادن شعله بهتر پیش‌بینی شده و پروفیل دما روی محور مرکز شعله نسبت به نتایج مدل اتلاف گردابه همراه با مدل برهمکنش اصلاح‌نشده، دقیق‌تر محاسبه می‌شود. شبیه‌سازی شعله سن‌دیا D با استفاده از مدل احتراقی اتلاف گردابه به‌همراه استفاده از مدل برهمکنش اصلاح‌شده، با توجه به در نظر گرفتن تاثیر میدان جریان مغشوش بر تغییرات گونه‌ها، باعث بهبود نتایج می‌شود، اما همچنان می‌توان گفت استفاده از سینتیک کامل دقیق‌ترین پاسخ‌ها را به‌همراه دارد. علت این امر بهتر پیش‌بینی شدن خواص سیال با توجه به در نظر گرفتن صحیح‌تر گونه‌های موجود در میدان محاسبات و همچنین بهبود پیش‌بینی توزیع گونه‌های واکنش‌دهنده و به‌دنبال آن نرخ واکنش و سپس توزیع دماست. در انتها، برای تعمیم نتایج حاصل به یک هندسه کلی نیاز به بررسی بیشتر هندسه‌های دیگر با رژیم‌های احتراقی متفاوت است.

1. N. Peters, *Turbulent combustion*, vol. 54, Cambridge university press, 2000.
2. C. K. Law, *Combustion physics*, Cambridge university press, 2006.
3. V. R. Lecoustre, P. Narayanan, H. R. Baum and A. Trouvé, "Local extinction of diffusion flames in fires," *Fire Saf. Sci.*, 10, 2011, pp. 583–95.
4. D. A. Lysenko, I. S. Ertesvåg, K. E. Rian, B. Lilleberg and D. Christ, "Numerical simulation of turbulent flames using the Eddy Dissipation Concept with detailed chemistry," *Seventh National Conference on Computational Mechanics*, Trondheim, 13-14 May 2013.
5. B. Lilleberg, D. Christ, I. S. Ertesvåg, K. E. Rian and R. Kneer, "Numerical simulation with an extinction database for use with the eddy dissipation concept for turbulent combustion," *Flow, Turbul Combust*, 2, 2013, pp. 319–46.
6. E. Ghasemi, S. Soleimani and C. X. Lin, "RANS simulation of methane-air burner using local extinction approach within eddy dissipation concept by OpenFOAM," *Int Commun Heat Mass Transf*, 54, 2014, pp. 96–102.
7. A. Y. Snegirev and A. S. Tsoy, "Treatment of local extinction in CFD fire modeling," *Proc Combust Inst*, 35, 2015, pp. 2519–7489.
8. S. Zahirović, R. Scharler, P. Kilpinen and I. Obernberger, "Validation of flow simulation and gas combustion sub-models for the CFD-based prediction of NO_x formation in biomass grate furnaces," *Combust Theory Model*, 15, 2010, pp. 61–87.
9. B. B. Dally, D. F. Fletcher and A. R. Masri, "Flow and mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames," *Combust Theory Model*, 2, No. 2, 1998, pp.193-219.
10. A. R. Masri, R. Cao, S. B. Pope and G. M. Goldin, "PDF calculations of turbulent lifted flames of H₂/N₂ fuel issuing into a vitiated co-flow," *Combust Theory Model*, 8, No. 1, 2004, pp.1-22.
11. A. Habibi, B. Merci and D. Roekaerts, "Turbulence radiation interaction in Reynolds-averaged Navier–Stokes simulations of nonpremixed piloted turbulent laboratory-scale flames," *Combust Flame*, 151, 2007, pp. 303–20.
12. B. Merci and E. Dick, "Influence of computational aspects on simulations of a turbulent jet diffusion flame" *Int J Numer Methods Heat Fluid Flow*, 13, 2003, pp. 887–98.
13. Z. Li, A. Cuoci, A. Sadiki and A. Parente, "Comprehensive numerical study of the Adelaide Jet in Hot-Coflow burner by means of RANS and detailed chemistry," *Energy*, 139, 2017, pp. 555–70.
14. A. Y. Snegirev, "Perfectly stirred reactor model to evaluate extinction of diffusion flame," *Combust Flame*, 162, 2015, pp. 2180–3622.
15. N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion." *Prog Energy Combust Sci*, 10, 1984, pp. 319–39.
16. J. Xu and S. B. Pope, "PDF calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinction," *Combust Flame*, 123, 2000, pp. 281–307.
17. B. F. Magnussen and B. H. Hjertager, "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion," *Symp. Combust*, 16, 1977, pp. 719–29.
18. H. Pitsch and H. Steiner, "Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D)," *Phys Fluids*, 12, 2000, pp. 2541–54.
19. A. W. Vreman, B. A. Albrecht, J. A. van Oijen, L. P. H. de Goeij and R. J. M. Bastiaans, "Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F," *Combust Flame*, 153, 2008, pp. 394–416.
20. M. Ihme and H. Pitsch, "Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2. Application in LES of Sandia flames D and E," *Combust Flame*, 155, 2008, pp. 90–107.
21. S. Byggstøyl, B. F. Magnussen, "A model for flame extinction in turbulent flow," *Turbul. Shear Flows*, 4, 1985, pp. 381–95.
22. S. Vilfayeau, *Large eddy simulation of fire extinction phenomena*, PHD Thesis, University Of Maryland, College Park, 2015.
23. A. Shahanaghi, H. Pasdarshahri, "Numerical simulation local extinction in a premixed flame," 17th Fluid Dynamic Conference, (FDC) Shahrood, Iran, FD2017, Aug. 2017
24. B. F. Magnussen, "The Eddy Dissipation Concept- A Bridge Between Science and Technology," *ECCOMAS Them. Conf. Comput. Combust.*, Libson, Portugal, 2005.
25. B. Magnussen, "On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow," 19th Aerospace Sciences Meeting, St. Louis, USA, 1981.
26. G. Wanner and E. Hairer, "Solving ordinary differential equations II: Stiff and differential-algebraic problems," 2nd ed. Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag (1996).
27. A. Kazakov and M. Frenklach, Reduced reaction sets based on GRI-Mech. 1.2, Univ. Calif. Berkeley, Berkeley, CA, 1994, [Http://Www Me Berkeley Edu/Drm](http://www.Me.Berkeley.Edu/Drm), Accessed 20 Sep. 2018.
28. R. S. Barlow, *Proceedings of the international workshop on measurement and computation of turbulent non premixed flames*, No. SAND-96-8564, CONF-9607206, Sandia National Labs., Livermore, CA (United States), 1996.
29. C. Schneider, A. Dreizler, J. Janicka and E. P. Hassel, "Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames," *Combust Flame*, 135, 2003, pp. 185–90.

English Abstract

A Comprehensive study on simulation of turbulent combustion using modified perfectly stirred reactor model

Ali Shahanaghi¹ and Hadi Pasdarsahri

1- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, ali.shahanaghi @ modares.ac.ir

2- 2- Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, pasdar@modares.ac.ir

(Received: 2018.11.8, Received in revised form: 2018.12.22, Accepted: 2019.1.16)

Different versions of Perfectly Stirred Reactor (PSR) have been examined in the simulation of a methane-air jet flame, Sandia flame D. These models have been incorporated with a turbulent mixing based combustion model, Eddy Dissipation Concept (EDC), to address the interaction between turbulent flow field and chemical reactions. Turbulent small scale effects were modeled using Reynolds Average Navier Stokes (RANS) approach. A reduced chemical mechanism (DRM) was used in order to calculate the species reaction rates. Velocity profiles were in good agreement with experimental data. The modified model applied the effect of turbulent mixing by altering the PSR's species transport equation. Using the modified model resulted in an inevitable enhancement on the reactive scalar's distribution along the central axis. However the distribution of the scalar showed a slight over-prediction at the flame location, which was originated from using the reduced mechanism. The model capability in predicting the turbulent flame interaction was examined using a Computational Fluid Dynamic (CFD) toolbox, OpenFOAM.

Keywords: Perfectly Stirred Reactor, Turbulent Combustion, Eddy Dissipation Concept, Sandia flame D, RANS simulation