



Differential diffusion and pressure effects on heavily sooting 2D Kerosene/Air shear flames

Ayşe Korucu^{1*}, Richard Miller²

¹Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

²Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Clemson University, Clemson, 29634, SC, USA

Highlights:

- Unity Lewis Number effects on heavily sooting hydrocarbon flames
- Soot Load Characteristics
- Flame Temperature Characteristics

Keywords:

- Kerosene
- Soot
- DNS
- Generalized Diffusion
- Lewis Number

Article Info:

Research Article

Received: 02.08.2022

Accepted: 01.01.2023

DOI:

10.17341/gazimmfd.1153044

Correspondence:

Author: Ayşe Korucu

e-mail:

aysekorucu@iyte.edu.tr

phone: +90 232 750 6759

Graphical/Tabular Abstract

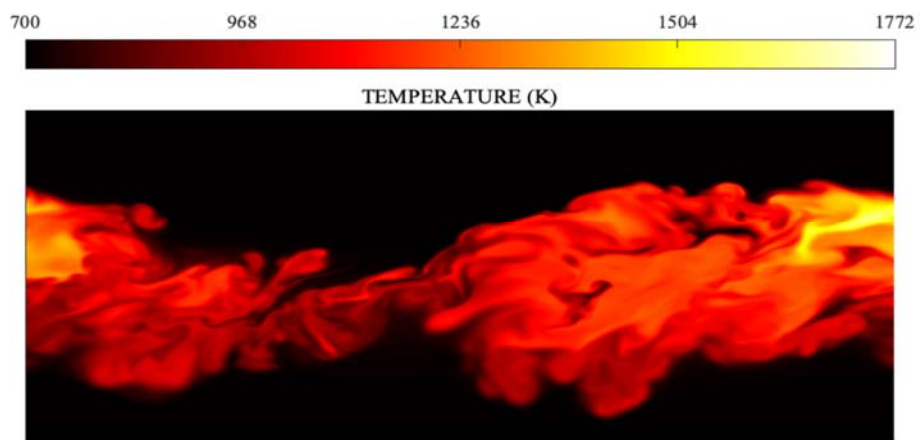


Figure A. 2D temperature contour plot

Purpose:

The current study aims to test the limits of the Unity Lewis number simplification coupled with both the ideal gas (IGL) and a real gas (RGL) equation of state (EOS) for predicting flame and soot characteristics of heavily sooting Kerosene/Air shear flames at 4 different operating pressures.

Theory and Methods:

Fully compressible Navier-Stokes equations are adopted in DNS environment. For the computational mesh, equivalently spaced grid points from $0 < x_1 < L_1$ are used, while in the cross-stream direction the mesh has been stretched in the x_2 direction. An 8th order central explicit finite difference method and a 4th order Runge-Kutta are employed to solve for the spatial and time derivatives, respectively. The temperature contour plot created using 2D DNS data are provided in Figure A. Boundary conditions of the problem: I - in x_2 direction, far from the flame kernel, flow is set to have free stream characteristics and II - in x_1 direction, periodic boundary conditions are embedded to solve the turbulent flow.

Results:

Comparisons to the earlier studies have been revealed that the mean peak flame temperature predictions done by the unity-Le number model are lessened; implying that the soot production/oxidation rates calculations will be debilitated comparably to the low mean flame temperature of the unity-Le number cases regardless of the operating pressure. The unity-Le number model's under-prediction of the flame temperatures results in intensifying incomplete combustion which not only emanates the soot load but also weakens the soot oxidation rate for the RGL EOS cases, while causes under-prediction of mass fraction of soot for the IGL EOS cases in comparison to the non-unity Le number results. As the operating pressure increases to 35 atm, the mean flame temperature increases hence, the soot load in the flame kernels increases even though the soot oxidation process is enhanced by the increasing flame temperature. An increase in the mean flame temperature has been noted for the IGL EOS model predictions at 35 atm case, which will cause an inevitable increment in soot load throughout the flame kernel.

Conclusion:

The analyses have revealed that the unity-Le number simplification estimates the average flame temperature lower than expected for each operating pressure increasing the possibility of an incomplete combustion or even local flame weakening and extinction which stems 'abnormally' high soot load throughout the flame kernel essentially for 10 and 35 atm operating pressure cases of the IGL EOS model.



Yüksek derecede kurum üreten 2B Gazyağı/Hava difüzyon alevleri üzerinde diferansiyel difüzyonun ve basıncın etkileri

Ayşe Korucu^{1*}, Richard Miller²

¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Mühendislik Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü, 35430, İzmir, Türkiye

²Clemson Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü, Clemson, 29634, SC, A.B.D.

Ö N E Ç İ K A N L A R

- Ağır kurumlu hidrokarbon alevleri üzerindeki Unity Lewis Sayısı etkileri
- Kurum Yükü Özellikleri
- Alev Sıcaklığı Özellikleri

Makale Bilgileri

Araştırma Makalesi

Geliş: 02.08.2022

Kabul: 01.01.2023

DOI:

10.17341/gazimmfd.1153044

Anahtar Kelimeler:

Gazyağı,
kurum,
difüzyon alevleri,
DNS,
gerçek gaz,
genelleştirilmiş difüzyon,
ideal gaz kanunu

ÖZ

Bu çalışmada, dört farklı ortam basıncında kurum, oluşum ve yıkım süreçlerini incelemek amacıyla, yoğun kurum üreten *Gazyağı/Hava* alevleri, gerçek gaz (GG) ve ideal gaz (İG) hal denklemleri ve Lewis (Le) sayısının bir olarak kabul edildiği modeller ele alınmıştır. Yarı-genel kurum oluşum ve yıkım modelini içeren indirgenmiş *Gazyağı/Hava* mekanizması (29-adım, 10 çeşit gaz) 2 boyutlu (2B) Direk Sayısal Simülasyon (DNS) verilerini oluşturmak için MPI FORTRAN ile kodu yazılmış bir program kullanılmıştır. Le sayısının bire eşit kabul edildiği alev tahminlerinin, Le sayısının bire eşit olmadığı (genelleştirilmiş difüzyon) durumların sayısal sonuçlarından elde edilen alev yapısı ve kurum özelliklerinin istatistiksel olarak benzerlik sağlayıp sağlamadığı araştırılmıştır. Bu bağlamda yapılan çalışmanın sonucunda, ortam basınçları 1, 5, 10 ve 35 atm olan Le sayısının bir olarak kabul edildiği GGLE ve İGLE modelleri ile üretilmiş 2B DNS alev tahminlerinin kurum özelliklerinin ve alev yapılarının yanlış hesaplanmasına yol açtığı belirlenmiştir.

Differential diffusion and pressure effects on heavily sooting 2D Kerosene/Air shear flames

H I G H L I G H T S

- Unity Lewis Number effects on heavily sooting hydrocarbon flames
- Soot Load Characteristics
- Flame Temperature Characteristics

Article Info

Research Article

Received: 02.08.2022

Accepted: 01.01.2023

DOI:

10.17341/gazimmfd.1153044

Keywords:

Kerosene,
soot,
diffusion flames,
DNS,
real gas equations,
generalized diffusion,
ideal gas law

ABSTRACT

For heavily sooting *Kerosene/Air* flames the ideal gas law (IGL) and a real gas (RGL) equation of state (EOS) models have been employed to study the assumption of the unity Lewis (Le) number effects on the soot production/oxidation processes for four different operating pressures. An MPI FORTRAN code containing a semi-global soot production/oxidation model for a reduced *Kerosene/Air* mechanism (29-step, 10 species) has been used to create 2D DNS data. For the aim of verifying the applicability of the unity Le assumption for *Kerosene/Air* flames comparisons between unity and non-unity Lewis (Le) number flame predictions must possess statistically similar trends in not only the flame structure but also the soot properties. 1, 5, 10 and 35 atm analyses of 2D DNS flame predictions of the RGL and the IGL EOS models have unveiled that the EOS coupled models with the unity-Le number mis-predicts the soot properties and the mean flame temperatures.

1. Giriş (Introduction)

Son yıllarda gelişen teknoloji ile türbülanslı akış karakteristiklerini (hız, sıcaklık vs.) göreceli olarak basit akışlar için makul doğruluk seviyelerinde hesaplamak daha olası hale gelmiştir [1-4]. Araştırmacılar sayısal ve hesaplama yöntemlerinde olan bu gelişmeler sayesinde daha önceleri sadece deneysel sonuçlar ile çalışmak zorunluluğundan kurtulmuşlardır. Araştırmacıların ve mühendislerin gaz türbinlerindeki türbülanslı akış hesaplarında sıklıkla kullandığı üç ana yöntem şu şekilde listelenebilir: Reynolds-Ortalama Navier-Stokes (RANS), Large-Eddy Simülasyonu (Large-Eddy Simulation, LES) ve Direk Sayısal Simülasyon (Direct Numerical Simulation, DNS).

RANS, türbülanslı akış modellemede en bilindik ve en yaygın kullanılan yöntem olarak araştırmacı ve mühendisler tarafından benimsenmiştir. Navier-Stokes denklemleri zamana göre ortalaması olan $\langle f \rangle$ ve düzensiz dalgalanmaları temsil eden f' olarak iki terime ayrılır [5]. Zamana göre ortalama alma prosedürü çözümü olmayan ve ortalama akım alanına düzensiz dalgalanmaların etkisini içermektedir [5]. Çeşitli varsayımlar aracılığı ile zamana göre ortalama prosedürü sırasında ortaya çıkan bu çözümü olmayan terimleri çözülebilir hale getirmek için birçok sayıda RANS modeli geliştirilmiştir [2]. Deneysel olarak elde edilen sabitlere dayalı olarak oluşturulan RANS modelleri özellikle kimyasal tepkime içeren türbülanslı akış özelliklerini hesaplamada yetersiz kalmaktadır. Bu nedenle araştırmacılar son yıllarda akış özelliklerini RANS'dan daha başarılı bir şekilde tahmin edebilen LES yöntemini ağırlıklı olarak kullanmaya başlamışlardır [6].

LES, türbülanslı akış hesaplarında RANS ve DNS arasında yere alan bir hesaplamalı akışkanlar mekaniği yöntemi olarak hem akademisyenler hem de mühendisler tarafından sürekli şekilde artan bir talep görmektedir. LES yöntemi türbülans enerjisinin büyük kısmına sahip olan büyük-ölçekli girdapları "filtreleyerek" çözerken, küçük ölçekli olan girdap etkilerini ise modellemektedir [7-9]. Filtreleme operatörü $\Theta = \bar{\Theta} + \Theta'$ şeklinde tanımlanır. Sınır koşullarından daha az etkilendikleri için büyük ölçekli girdapların aksine küçük ölçekli girdapların modelleri göreceli olarak daha basittir [8].

Kimyasal tepkime içeren türbülanslı akış problemlerini sayısal analiz yöntemlerinden DNS temel denklemleri hiçbir model kullanmadan çözdüğü için RANS ve LES yöntemlerine üstünlük sağlamaktadır. Bu yöntemde diğer iki yöntemin aksine hesaplama hataları sadece Navier-Stokes denklemlerini çözmek için kullanılan sayısal yöntemlerden oluşmaktadır [5]. DNS belirlenen sınır ve başlangıç koşulları için türbülanslı akıştaki bütün girdap ölçeklerini çözmeyi hedefler [10]. Bu nedenle de deneysel verilere en yakın tahminleri yaptığı araştırmacılar tarafından kabul edilmektedir. Ancak bunu yapabilmesi için hesaplama ağının en küçük biriminin Kolmogorov ölçeğine eşit ya da daha küçük bir değere sahip olması gerekmektedir. Sayısal hataları en az indirmek için yüksek mertebeli sayısal yöntemler kullanılması gerekir [5, 10]. Deneysel sonuçlara en yakın hesaplamaları yapabildiği yadsınamaz bir gerçek olmasına rağmen, DNS yöntemin doğası gereği var olan dezavantajlar bu yöntemin yaygın şekilde kullanımını sınırlamaktadır [5, 10]. Öncelikle RANS ve LES yöntemlerinin aksine, DNS basit geometriler ve göreceli olarak daha düşük Re sayılarında kullanılmaya uygundur [5, 10]. Ayrıca, Yüksek Başarımli Hesaplama merkezlerinde problem çözümü gerektirmesi ise yöntemi maddi olarak külfetli hale getirmektedir [5, 10]. Bu dezavantajlarına rağmen son yıllarda DNS, deneysel verilere en yakın sonuçları üretmesi sebebiyle özellikle hesaplama alınındaki gelişmelerle birlikte sıklıkla tercih edilmektedir. Endüstride hesaplama süresinin göreceli olarak daha kısa olması, daha yüksek Re sayılı ve

karmaşık geometrilere uygulanabilirliği nedeniyle tercih edilen RANS ve LES modellerine öncü olması ve türbülanslı akış karakteristikleri için veri üretmek gibi amaçlarla DNS, araştırmacılar tarafından rağbet görmektedir. Kimyasal tepkime içeren türbülanslı akışların gerçeğe en yakın şekilde sayısal yöntemlerle çözülmesi büyük önem arz etmektedir.

Hidrokarbon yakıtlara olan bağımlılık, çevre dostu ve yenilenebilir enerji kaynağı alternatifleri arayışını doğururken, hali hazırda var olan termik makinaların (heat engines) tasarımını yakın gelecek için uyarlayarak verimliliği artırma amaçlı çalışmalar hızla yaygınlaşmaktadır. Hidrokarbonların (yani fosil yakıtların) yanma sürecinde ortaya çıkan kurum, bilim adamları tarafından uzun yıllardır incelenen ve önlenmesi mümkün olmayan bir durumdur. Esasen, oksitleyici eksikliğinden (yani eksik yanma) dolayı zengin yakıt bulunan alev bölgesinde kurum oluşumu gözlemlenir [11]. Bu süreçte gaz halindeki hidrokarbonlar, temelde katı halde bulunan karbona yani kuruma dönüşür [12]. Kurum oluşum/yıkım süreçlerinin atmosferik ve ötesi çalışma basınçlarında derinlemesine incelenmesi termik makinalarda enerji üretimindeki basamakların çevre dostu olması için gereklidir. İklim değişikliği ya da bir diğer adı ile Küresel Isınmanın en büyük nedeninin fosil yakıtların olduğu artık yadsınamaz ancak tersine çevrilmesi gereken gerçek bir sorun olarak tanınmış olup sadece bilim insanlarını endişelendiren bir olgu olmaktan çıkmış olup devletler arası anlaşmalarla da tanınmış durumdadır. Bu kapsamda karbon emisyonunun azaltılması için eksik yanma sonucunda ortaya çıkan ve çevre kirliliğine yol açan kurum oluşum/yıkım mekanizmalarının daha iyi anlaşılması amacıyla DNS ile farklı çalışma basınçlarında analiz edilmesi gerekmektedir.

Tipik olarak kurum parçacıkları, gazlara kıyasla çok daha büyük difüzyon zaman adımlarına sahip olmasından dolayı yerel alev özelliklerinin değişmesine sebep olurken çeşitli türbülans ölçekleri tarafından alev çekirdeği boyunca dağıtılır [13]. Ayrıca H ve H₂ gibi daha hafif gazlar, difransiyel yayılımdan büyük ölçüde etkilenir [14]. H ve kurum öncülerinin (PAH) varlığında kurum oluşumu süreci, kurum yüzey alanındaki artış ve kurum parçacık demetleri H ve H₂'nin alev çekirdeğindeki dağılımı ile yeniden şekillendirilir [13]. Kurum oluşum ve büyüme süreçleri, H'nin alev boyunca taşınmasında önemli bir role sahip olan difransiyel difüzyon etkisi ile ortaya çıkar [13]. Bu nedenle yoğun kurum üreten difüzyon alevleri için alev ve kurum özelliklerini tahmin etme sürecinde termal difüzyonun, α , kütle difüzyona, D, eşit olması, ($Le = \frac{\alpha}{D} = 1$) varsayımının 'kabul edilebilir' bir yaklaşım olup olmadığı derinlemesine araştırılmalıdır.

Daha önceki çalışmalarda Korucu [15] 1, 5, 10 ve 35 atm çalışma basınçları için Gazyağı/Hava difüzyon alevleri üzerinde difransiyel difüzyonun etkilerini 3B DNS ile incelemişlerdir. Korucu [15] literatürde sıklıkla kullanılan; termal difüzyonun kütle difüzyonuna eşit olduğu ($Le = 1$) varsayımının yoğun kurum üreten alevler için 'uygunluğunu' atmosferik çalışma basıncı için iki farklı termodinamik hal denklemi ile elde edilen sonuçları karşılaştırarak test etmiştir. Öncelikle difransiyel difüzyonun ele alındığı, İG ve GG hal denklemlerini içeren MPI FORTRAN ile yazılmış olan kod aracılığı ile dört farklı çalışma basınçları ile DNS hesaplamaları yapılmıştır. Daha sonra ise aynı hesaplar daha basit bir difüzyon yaklaşımı olan $Le = 1$ modeli ile aynı çalışma basıncı için yinelenmiştir [15,16]. $Le = 1$ olması varsayımının 'uygunluğu' difransiyel difüzyon ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır [15, 16]. *Gazyağının* sıkıştırılabilirlik mertebesine göre seçilmiş olup, özellikle dizel motorlarda çalışma basıncı olan 35 atm için yaygın olarak kullanılan İG hal denklemi ve $Le = 1$ ikilisi (İGLE) merceğe alınmıştır. Tablo 1'de görüldüğü üzere *Gazyağının* sıkıştırılabilirliği 35 atm için İG'den büyük ölçüde sapmaktadır. Bu gerçeğe rağmen literatürdeki

çalışmaların büyük çoğunluğu matematiksel olarak problemi basitleştirmek ve hesaplama zamanından tasarruf etmek amaçlı olarak İG hal denkleminin uygun şekilde çalıştığı kabulü yapılarak çözümlenerek kalmayıp $Le = 1$ basitleştirmesi ile de birleştirilmiş modeller ile ele alınmaktadır. Yapılan bu basitleştirmelerin sayısal çözümlenme sürelerini kısaltırken alev özelliklerini hesaplama konusunda göz ardı edilmemesi gereken sorunlar yarattığına Korucu [15]'te dikkat çekilmiştir.

Diferansiyel difüzyon söz konusu olduğunda, İG hal denklem ile elde edilen sonuçlar GG hal denklemi ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırıldığında 35 atm çalışma basıncı için İG hal denklemi ile yapılan hesaplamaların alev ve kurum özelliklerini etkin bir şekilde tahmin edememiştir. Ancak çalışma basınçları 1, 5 ve 10 atm olarak atandığında İG hal denklem modelinin *Gazyacağı*ın sözü geçen basınç değerleri için 'makul' bir yaklaşım olabileceğini belirtmişlerdir. Bu çıkarımı ise atmosferik basınç alev tahminleri göz önüne alındığında, düşük basınçlarda ve yüksek sıcaklıklarda gazlar ideal gaz yasasına uyduğu için atmosferik çalışma basınçlarında gerçekleştirilen İG hal denklem yaklaşımının GG hal denklem yaklaşımına kıyasla yalnızca alev özellikleri için değil aynı zamanda kurum özellikleri için de istatistiksel olarak benzer sonuçlar ürettiğini belirterek açıklamışlardır.

Mevcut çalışma, 1, 5, 10 ve 35 atm çalışma basınçları için üretilmiş olan *Gazyacağı/Hava* difüzyon alevlerinin 2B DNS veri analizini sunmaktadır. $Le = 1$ olduğu varsayımı ile birleştirilmiş yarı global kurum oluşum/yıkım modelini de içeren 29 aşamalı, 10 tür içeren bir *Gazyacağı/Hava* indirgenmiş kimyasal mekanizma [17] geçici olarak gelişmekte olan *Gazyacağı/Hava* difüzyon alevlerindeki kurum süreçlerini incelemek amacıyla hali hazırda mevcut olan bir MPI FORTRAN koduna eklenmiştir. Bu çalışmadaki asıl amaç literatürde yaygın bir şekilde kullanılan $Le = 1$ varsayımının İdeal Gaz Yasası ile birleştirildiği sayısal çözümlenme yaklaşımının düşük ve yüksek basınçlarda yoğun kurum üreten *Gazyacağı/Hava* difüzyon alevleri için 'uygunluğunun' araştırılmasıdır. Diferansiyel difüzyon yaklaşımı ile üretilmiş olan sonuçlar ile bu çalışmada elde edilen sonuçlar karşılaştırılmış ve sadece yüksek çalışma basınçları için değil, atmosferik çalışma basıncı için dahi $Le = 1$ kabulünün bu tür alevler için uygun olmadığı sonucuna varılmıştır.

Tablo 1. *Gazyacağı*ın 1, 5, 10 ve 35 atm basınçlarındaki yoğunluk, ρ ve sıkıştırılabilirlik, Z değerleri
(The density, ρ and compressibility, Z of Kerosene at 1, 5, 10 and 35 atm flames)

P (atm)	Hal Denklemi	ρ (kg/m ³)	Z (sıkıştırılabilirlik)
1	GG	2,97	0,98
5	GG	16,1	0,92
10	GG	35,7	0,82
35	GG	255	0,4
1	İG	2,92	1
5	İG	14,6	1
10	İG	29,3	1
35	İG	102	1

2. Temel Denklemler ve Kimyasal Kinetik (Governing Equations and Chemical Kinetics)

Süreklilik, Navier-Stokes, enerji ve tür taşınım denklemlerinin sıkıştırılabilir formu Eş. 1 - 4 ile aşağıda verildiği gibidir.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j] = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_i u_j + P \delta_{ij} - \tau_{ij}] = 0, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\rho e_t + P) u_j - u_i \tau_{ij} + Q_j + \sum_{\alpha=1}^N H_\alpha J'_{j,\alpha} \right] \\ = S_e, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho Y_\alpha u_j + J'_{j,\alpha}] = S_{Y_\alpha} \quad (4)$$

Burada t zaman, x_i uzaysal koordinat vektörü, ρ karışım yoğunluğu, u_j karışım hızı, P basınç, δ_{ij} Kronecker delta tensörü, τ_{ij} (Newtonian) viskoz stres tensörü, e_t toplam spesifik enerji (iç + kinetik), Q_j ısı akısı vektörünün Bearman-Kirkwood biçimidir, $\sum_{\alpha=1}^N H_\alpha J'_{j,\alpha}$ entalpi akısıdır (N toplam tür sayısıdır) $H_\alpha = \frac{\partial H}{\partial X_\alpha}$ α türünün kısmi molar entalpisi iken X_α α türünün mol kesiridir, ve α türleri için molar kütle akı vektörü $J_{j,\alpha}$ ile ifade edilmiştir. $J_{j,\alpha} = M_\alpha J'_{j,\alpha}$ ilişkisi molar akı vektörünü kütle akı vektörüne dönüştürür (M_α , α türünün moleküler ağırlığı anlamına gelir), S_e enerji denklemi için kimyasal reaksiyon kaynak terimidir ($S_e = - \sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_\alpha \Delta H_\alpha^0$), burada $\dot{\omega}_\alpha$, α türü için reaksiyon hızı ve ΔH_α^0 oluşum entalpisidir. Eş. 4'te yer alan Y_α , α türünün kütle kesrini temsil ederken; S_{Y_α} α türü için kimyasal reaksiyon kaynağı terimidir.

Gerçek gaz etkilerini 'doğru' olarak hesaplayabilmek için kübik Peng-Robinson gerçek gaz hal denklemi kullanılmıştır.

$$P = \frac{RT}{V - B_m} - \frac{A_m}{V^2 + 2V B_m - B_m^2} \quad (5)$$

Eş. 5'te V özgül molar hacim, R evrensel gaz sabitidir ve T sıcaklıktır. A_m ve B_m karışım parametreleri Harstad vd. [18]'de bulunan doğrusal olmayan karıştırma kuralları ile hesaplanır. Ayrıca, ısı akısının en basit biçimleri Fourier yasasının, Eş. 6 ve Fickian yasasının kütle akımı, Eş. 7 sırasıyla $Le = 1$ varsayımı ile birleştirilir.

$$Q_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (6)$$

$$J'_{j,\alpha} = -D \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_\alpha} \quad (7)$$

Eş. 6'da κ termal iletkenlik iken, Eş. 7'deki D ise kütle difüzyon katsayısıdır ve bu her iki katsayının $Le = 1$ varsayımı kullanılarak hesaplanan değerleri tüm türler için aynı değere sahiptir. X_α , α türünün mol kesridir. Temel denklemlere ek olarak, gerçek gaz hal denkleminin alternatif olarak literatürde yaygın olarak kullanılan İdeal Gaz Yasası yaklaşımının etkinliğini test etmek için Eş. 8 kod algoritmasına eklenmiştir:

$$P = \rho_m R_m T \quad (8)$$

Eş. 8'da ρ_m karışım yoğunluğu, R_m karışım gaz sabiti ve T alev sıcaklığıdır. Mevcut çalışma, yalnızca temel denklemlerin özeti içeremekte olup, daha ayrıntılı formülasyon için [19-22] çalışmaları incelenmelidir.

3. Sonuçlar (Conclusions)

Hesaplamalı ağ için, x_1 yönünde $0 < x_1 < L_1$ 'e eşdeğer aralıklı ağ noktaları kullanılmaktadır. Ters akış yönünde Foster 2009'da önerilen analitik eşleme işlevi kullanılarak ağ x_2 yönünde uzatılmıştır. Girdap kalınlığı bölgesinde ince bir ağ aralığı ($\Delta x_2 \approx 0,8 \Delta x_1$) kullanılırken, serbest akış sınırlarının her biri yönünde ağ aralıkları katlanarak $\Delta x_2 \approx 10 \Delta x_1$ mertebesine kadar çıkarılmıştır [22]. Serbest akış bölgelerinde daha büyük elamanlara sahip bir ağ tahsis

edilerek hesaplama süresi önemli ölçüde azaltılmıştır. Mevcut çalışmada benimsenen haritalamanın detayı Foster [22]'de bulunabilir.

Sırasıyla uzaysal ve zaman türevlerini çözmek için sekizinci mertebeden merkezi açık sonlu fark yöntemi ve dördüncü mertebeden Runge-Kutta kullanılmıştır. Yapay salınımları kontrol etmek için her Runge-Kutta aşamasında onuncu mertebeden filtreleme uygulanmıştır. Kodun paralelleştirilmesi, her iki yönde de MPI rutinleri kullanılarak yapılmıştır. Sayısal algoritmalar hakkında daha fazla bilgi Foster [22]'de bulunabilir.

DNS veri hesaplamalarında kullanılan simülasyon alanı Şekil 1'de verilmiştir. Hava (yani oksitleyici) hesaplama alanının alt kısmında akarken bir difüzyon alevinin oluşmasına neden olan oksitleyicinin zıt yönünde akmakta olan $C_{12}H_{24}$ (yani yakıt, *Gazyacağı*), üst kısımda olacak şekilde hesaplama alanına yerleştirilmiştir. Karışım bölgesi hesaplama alanının tam ortasında yer almakta ve her ana değişken için kademeli olarak oksitleyicinin bulunduğu bölgeden yakıtın olduğu bölgeye başlangıç değerlerinden geçişlerin kademeli olmasını sağlayan bir fonksiyon kullanılmıştır. Oksitleyiciden yakıtta geçiş mesafesi girdap kalınlığı olan δ_0 aracılığı ile yapılmıştır. Başlangıç Reynolds sayısı girdap kalınlığı ve her iki akım için belirlenen başlangıç değerleri kullanılarak $Re_{\delta_0} = U_0 \delta_0 \rho_0 / \mu_0$ hesaplanmıştır. Burada, U_0 , iki akım arasındaki hız farkı iken, ρ_0 ve μ_0 her iki akımın ortalama yoğunluk ve viskozitesini temsil etmektedir. Bu tanımda yer alan bütün değişkenler her iki akış için de problemin tanımından gelmekte iken referans uzunluk olan δ_0 istenilen Re_{δ_0} sayısına ulaşmak için değişmekte ancak her zaman $\sim 10^{-5} m$ mertebesinde kalmaktadır. Bu çalışmada Yüksek Başarılı Hesaplama imkanı dahilinde en yüksek türbülans değerini verecek şekilde 2500 olarak seçilmiştir. Eş. 9 ve Eş. 10 aracılığı ile L_1 ve L_2 uzunlukları hesaplanmıştır.

$$L_1 = \delta_0 N_p \omega_1 \quad (9)$$

$$L_2 = 5 L_1 \quad (10)$$

Eş. 10'daki N_p , x_1 yönünde hesaplama alanına eklenen girdap sayısını, ω_1 , stabil olmayan dalgaboyu oranı vermekte olup sırasıyla 4 ve 8,2 değerleri başlangıç değeri olarak atanmıştır. Hesaplama alanı yaklaşık olarak 2B DNS için, $A_{DNS} \approx L_1 L_2 \approx 5 \times 10^{-7} m^2$ 'dir. Oksitleyici ve yakıt için serbest akım bölgesindeki hızlar Eş. 11 ve Eş. 12 ile hesaplanır.

$$U_o = \frac{2M_c a_o}{1 + \sqrt{\frac{\rho_o a_o}{\rho_f a_f}}} \quad (11)$$

$$U_f = -\sqrt{\frac{\rho_o}{\rho_f}} U_o \quad (13)$$

Eş. 11 ve Eş. 12'te 'o' ve 'f' alt indisleri sırasıyla saf oksitleyici ve saf yakıt bölgelerindeki değerleri temsil etmektedir. M_c taşınım Mach sayısı ise 0,35, ρ_o , ρ_f ve a_o , a_f ise sırasıyla oksitleyici ve yakıtta ait yoğunluk ve ses hızlarıdır. U_o 'dan U_f 'e geçiş $\eta = \text{erf}(\pi^{1/2} x_2 / \delta_0)$ fonksiyonu ile 'düzeltilmiştir'. Palle [19]'da lineer stabilite analizi ile hesaplanan stabil olmayan dalga boyu, $\omega_1 = \lambda_1 / \delta_0$ türbülans oluşumunu güçlendirmek için akış doğrultusunda (x_1 yönünde) olacak şekilde eklenmiştir. Bunlara ek olarak 'düzeltilmiş' hız alanı ile birleştirilmiş girdap perturbationları da sinus eğrisi şeklinde uyarı olarak x_1 yönünde başlangıç koşullarına eklenmiştir [23]. Bu çalışmada hesaplamalar x_1 yönünde $N_p = 4$ adet girdap ile başlatılmıştır. t_f^* ile ifade edilen nihai simülasyon zamanı için normalleştirilmiş zaman ölçeği $t^* = t U_o / \delta_0$ ile tanımlanır. 4 adet olarak simülasyon başlangıç değeri olarak atanmış olan girdapların birleşip tek bir girdaba dönüşmesi için geçen hesaplama süresi, $t_f^* = 80$ 'dir. Bölgesel Courant sayısı aracılığı ile türbülans enerji kaybı (dissipation), kütleli difüzyon, termal difüzyon ve advectif difüzyon ve kurum oluşum hızı ile hesaplanan zaman adımlarından en küçük olanına göre belirlenmiştir. Başlangıç Courant sayısı 0,5 iken konvektif Courant sayısı ise 0,2 olarak atanmıştır.

Problemin sınır koşulları aşağıdaki gibi belirlenmiştir:

- x_2 yönünde, alev çekirdeğinden uzakta, akış serbest akımın karakteristiğine sahip olacak şekilde ayarlanmıştır.
- x_1 yönünde, türbülanslı akışı çözmek için periyodik sınır koşulları atanmıştır.

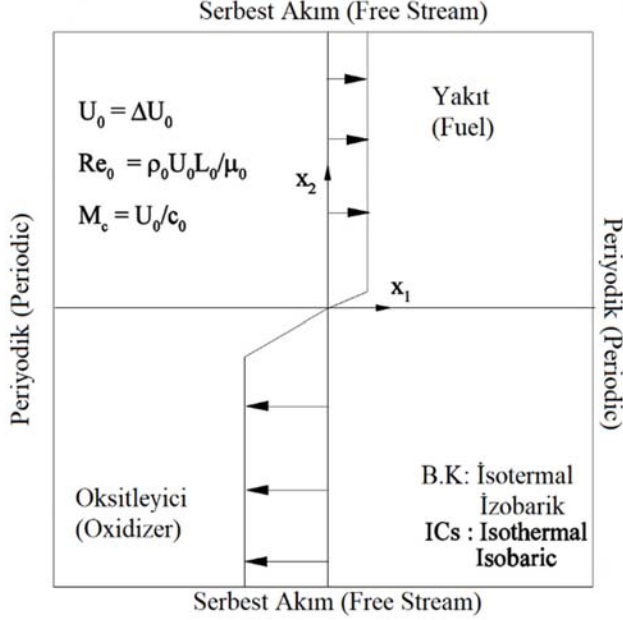
Heterojen ve homojen kurum yıkım adımlarını içeren yarı global kurum modeli Tablo 2'de verilmiştir. Ayrıntılı *Gazyacağı/Hava* indirgenmiş kimyasal mekanizması Wang [17] ve Korucu [15] kaynaklarında bulunabilir. Kurum oluşum global adımında *Gazyacağı*ın direk olarak kurumu oluşturduğu varsayımı yapılmış olup literatürde yaygınca kullanılan PAH kurum oluşumu ara ürünü kullanılmamıştır. Bu basitleştirme ile DNS metodundan kaynaklı olan yüksek hesaplama maliyetini ve süresini bir nebze kısaltmıştır.

Tablo 2. Kurum Oluşum/Yıkım Kimyasal Adımları (Soot Production/Oxidation Chemical Steps [17])

Reaction ¹	A	n	E/R	From
<i>Kurum Oluşumu Global Adım</i>				
$C_{12}H_{24} \rightarrow 12C_s + 12 H_2$	1,11935E+16	-1,94	1,610E+04	$[(C_{12}H_{24})^{1,81}][O_2^{-0,5}]$
<i>Heterojen Kurum Yıkımı</i>				
$C_s + 0,5 O_2 \rightarrow CO$	1	0	0	$72R_{ox}[\frac{C_s}{\rho_s D_s}]$
$R_{ox} = \frac{K_A P_{O_2} \kappa}{1 + K_Z P_{O_2}} + K_B P_{O_2} (1 - \kappa)$				
$\kappa = 1 / (1 + (\frac{K_T}{K_B}) P_{O_2})$				
K_A	2,0000E+01	0	1,5098E+04	-
K_B	4,4600E-03	0	7,6497E+03	-
K_T	1,5100E+05	0	4,8817E+04	-
K_Z	2,1300E+01	0	-2,063E+03	-
<i>Homojen Kurum Yıkımı</i>				
$C_s + OH = CO + H$	1,2200E+09	0,5	0	Standart

¹ $k = AT^n e^{-E/RT} [X][Y]$ değiştirilmiş Arrhenius eşitliğidir.

Söz konusu basitleştirmede kurum oluşum aşamasında ara ürün olan PAH'nin mekanizması dolaylı olarak kurum oluşumuna dahil edilmiştir. Bu yolla mekanizmadaki tür sayıları ve kimyasal adımlar azaltılırken kimyasal tepkimeler ile enerji korunumu açısından bir kayıp söz konusu olmayacaktır.



Şekil 1. 2B Doğrudan Sayısal Simülasyon Hesaplama Alanı (2D Direct Numerical Simulation Domain)

İndirgenmiş kimyasal mekanizmada tepkime hızlarını hesaplamada değiştirilmiş Arrhenius Eşitliği $k = AT^n e^{-E/RT} [X][Y]$ kullanılmıştır. Burada, A , frekans faktörü, T , mutlak sıcaklık, E , tepkime aktivasyon enerjisi, R , evrensel gaz sabiti, $[X]$ ve $[Y]$ ise X ve Y türlerinin anlık bölgesel konsantrasyonlarını temsil etmektedir. Değiştirilmiş Arrhenius eşitliği frekans faktörünü direk olarak sıcaklığa bağlamaktadır. C_s , yani gaz fazında bulunan karbon-grafit kurumu temsil etmektedir [24]. Kurum tanecikleri çok küçük boyutta olmalarından ötürü alev ile aynı sıcaklığa sahiptir [11]. Boyutlarının küçük olmasından ötürü sadece türbülans taşınım mekanizma aracılığı ile değil aynı zamanda da sıcaklık ve konantrasyon gradyentleri ile de alev çekirdeği boyunca difüzyona uğrar. Son derece karmaşık olan kurum oluşum mekanizmasını matematik modelleme adımları basitleştirmek amacıyla sadece en önemli aşamalar modellenmektedir [25]. Yüksek çalışma basınçlarında alev sıcaklıklarına erişilmesinden ötürü kurum yükünün hızla arttığı bilinmektedir.

2B DNS verileri, Gazyağı/Havanın gelişmekte olan difüzyon alevleri için ana denklemlerin çözülmesiyle üretilmiştir. Hesaplamalar için Clemson Üniversitesi'ndeki Palmetto Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi altyapısı kullanılmıştır. Mevcut çalışma için, İG veya GG hal denklemleri için $Le = 1$ varsayımıyla birleştirilmiş (bundan sonra İGLE ve GGLE olarak kullanılacaktır) çeşitli çalışma basınç değerleri Tablo 3'te özetlendiği gibi 8 farklı durum ele alınmıştır. Ele alınan bütün durumlar için Başlangıç basıncı P_0 , başlangıç sıcaklığı T_0 , 700K, başlangıç Reynolds sayısı $Re_0 = 2500$, ağ noktalarının sayısı sırasıyla x_1 ve x_2 yönlerinde N_1, N_2 . Boyutsuzlaştırılmış nihai simülasyon zamanı, t_f^* , tüm durumlar için 80'dir. Başlangıç sıcaklığı kullanılan kimyasal mekanizmadaki bütün türlerin gaz fazında kalmasını sağlamak amacı ile 700 K olarak atanmış olup çalışma basıncı 1 ile 35 atm arasında değişmektedir. Analiz, dört farklı çalışma basıncı için GGLE ve İGLE ile hesaplanan ortalama alev

sıcaklıklarının karşılaştırılmasıyla başlar. Şekil 2 ve Şekil 4'te yatay ekseninde yer alan değişken ϕ , karışım kesridir ve Eş. 13 ile verilmiştir.

Tablo 3. Dikkate alınan 8 durum için simülasyon parametrelerinin özeti.

(Summary of simulation parameters for 8 cases considered.)

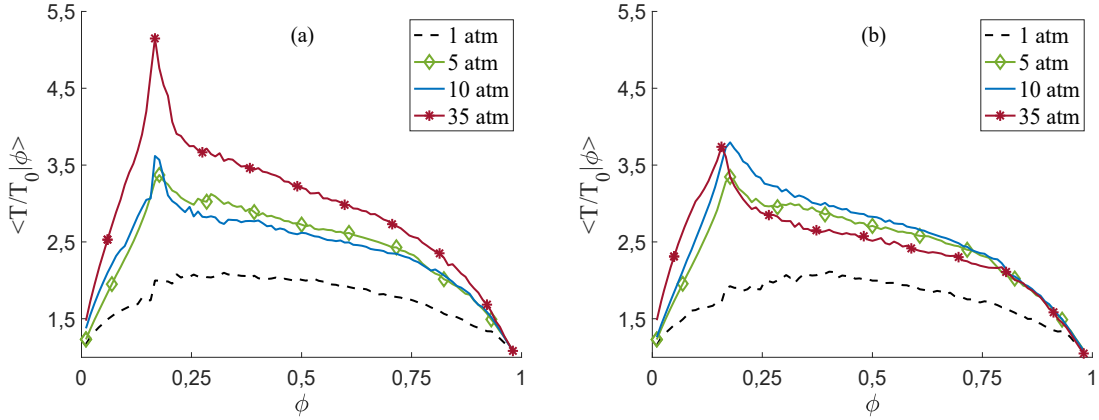
Simülasyon	P_0 (atm)	$N_1 \times N_2$	Hal Denklemi
1	1	400 x 608	GG
2	1	304 x 698	İG
3	5	304 x 544	GG
4	5	304 x 544	İG
5	10	240 x 480	GG
6	10	240 x 480	İG
7	35	240 x 640	GG
8	35	240 x 640	İG

$$\phi = \frac{sY^{C_{12}H_{24}-Y^{O_2}+Y^{O_2}}}{sY^{C_{12}H_{24}+Y^{O_2}}} \quad (13)$$

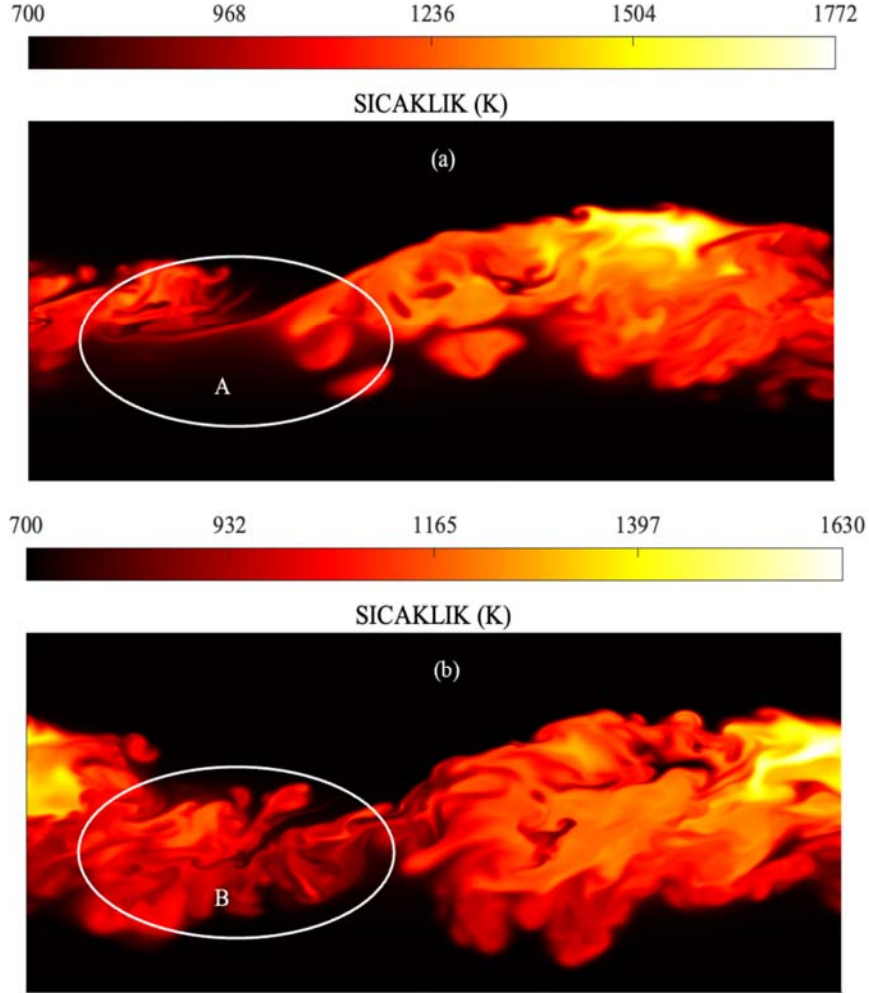
Burada, $0 \leq \phi \leq 1$ değişmekte, s , stokiyometrik katsayı olup sayısal değeri $\approx 0,16$ 'dır, $Y^{C_{12}H_{24}}$ ve Y^{O_2} sırasıyla yakıt ve oksitleyicinin kütle kesirleridir. Saf yakıt olan bölgede $\phi = 1$ iken, saf oksitleyicinin olduğu bölgede ise $\phi = 0$ değerlerine sahiptir. Ara değerler ise karışımın değişen derecelerini ifade etmektedir. Karışım kesri ve yayılımı türbülanslı yanma problemlerinde önemli bir role sahiptir. Alev dinamiklerinden olan tutuşma, sönmeye ve yeniden tutuşmanın yüksek oranda konuma bağlı olduğu bilinmektedir. Karışım kesri düzleminde sıcaklık ve tür mol kesirlerinin dağılımının incelenmesi alev karakteristiklerini anlamak için yaygın olarak kullanılan bir yaklaşımdır.

Şekil 2, her iki hal denklem modeli için ortalama alev sıcaklığı hakkında bir fikir vermektedir. Şekil 2a ve Şekil 2b sırasıyla, $Le = 1$ varsayımının İG veya GG hal denklem ile kullanılarak hesaplanan ortalama alev sıcaklığı tahminlerini içerir. Çalışma basıncının 35 atm olduğu durumda İGLE tahminleri için ortalama alev sıcaklığında bir artış kaydedildiği görülmektedir. Alev sıcaklığındaki bu artış alev çekirdeği boyunca kurum yükünde kaçınılmaz bir artışa neden olmaktadır. İGLE, 35 atm durumu için beklenen ortalama alev sıcaklığı tahminlerini üretmesine de atmosferik ve ara çalışma basınçları için beklenen davranışları yakalayabilmiştir (yani, GGLE tahminlerine istatistiksel olarak benzer sonuçlar üretebilmektedir). Bu bağlamda, kurum yükü tahminlerinin GGLE tarafından üretilen benzer istatistiksel davranışa sahip olacağı beklenmektedir. Ancak $Le = 1$ modeli ile tahmin edilen alev sıcaklıkları geliştirilmiş difüzyon modelinden elde edilen alev sıcaklıklarını ve dolayısıyla da kurum yüklerini olması gerekenden daha az hesapladığı göz ardı edilmemelidir.

Şekil 3, atmosferik çalışma basıncında 2B DNS sonuçlarına göre oluşturulmuş alev yapısını göstermektedir. Şekil 3a alevin boyutsuzlaştırılmış zaman, $t^* = 65$ anındaki alev yapısını gösterirken, Şekil 3b ise simülasyonun nihai boyutsuzlaştırılmış zamanı $t_f^* = 80$ anındaki yapısıdır. Alev sıcaklığı, simülasyon zamanı ilerledikçe yaklaşık olarak %10 civarında azalmaktadır. Şekil 3a ve Şekil 3b de A ve B ile gösterilen bölgeler incelendiğinde alev yapısındaki kıvrımlaşmaların kuvvetlendiği görülmüş ve alev çekirdeğinde x_2 yönünde bir genişlemenin söz konusu olduğu gözlenmektedir. Bu durum ise türbülans ile gaz türlerinin ve kurum parçacıklarının difüzyonunun zamanla arttığına dair bir göstergedir. Ayrıca öngörüldüğü üzere sıcaklığın düşmesi ile akış rejiminin daha da türbülanslı bir duruma geçtiği başka bir sonuç olarak not edilmelidir. Bütün bunlara ek olarak, alev yapısında artan kıvrımlaşmalar bölgesel olarak hem yakıt ve oksitleyicinin hem de yanma ürünlerinin taşınmasını kuvvetlendirecektir. Bu nedenle



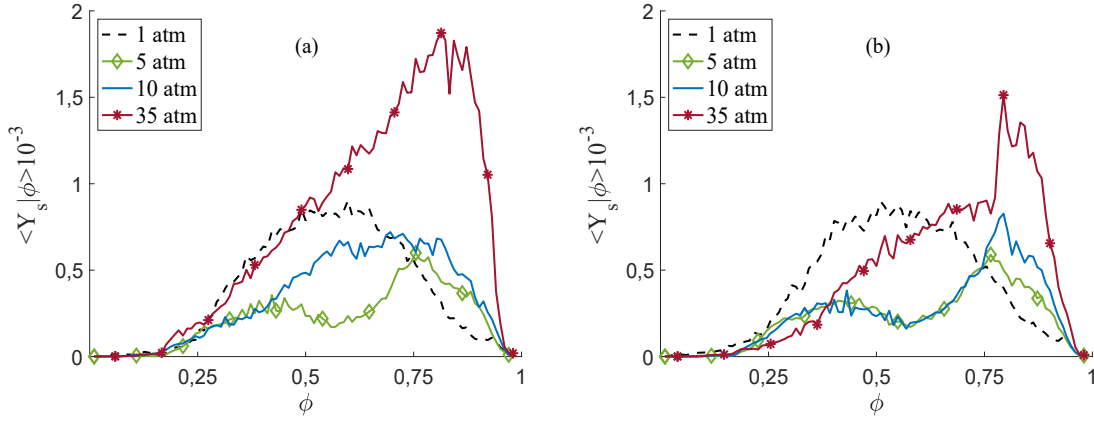
Şekil 2. Her bir hal denklem modeli için ortalama alev sıcaklığı üzerinde çalışma basıncının etkisi İGLE and (b) GGLE (Pressure effects on the Mean Temperature Profiles for each EOS model (a) The IGL EOS model (b) The RGL EOS model)



Şekil 3. Atmosferik basınçta GG hal denklem modeli oluşturulan 2B Alev Yapısının zamanla gelişimi, (a) $t^* = 65$ anındaki ve (b) $t^* = 80$ anındaki alev yapısı (Time evolution of 2D flame structure at atmospheric operating pressure coupled with RGL, (a) flame structure at $t_f = 65$ and (b) flame structure at $t_f = 80$)

kurumun alev boyunca genelleştirilmiş difüzyon modelinde elde edilen sonuçlardan farklı bir davranış sergilemesine sebep olmaktadır. Simülasyon süresince sistemde tam yanmanın elde edilemediği hatta bölgesel olarak alevin sönmeye yüz tuttuğu da çıkarılabilecek sonuçlar arasındadır. Şekil 4, $Le = 1$ varsayımıyla birleştirilmiş her

iki hal denklem modeli için kurum kütle oranı olan Y_s 'yi göstermektedir (bir diğer deyişle alev kurum yükünü göstermektedir). Şekil 4a ve sırasıyla $Le = 1$ ile birleştirilmiş İGLE ve GGLE ortalama Y_s tahminlerini içermektedir. Atmosferik ve 5 atm çalışma basınçlı alevler için İGLE, GGLE ile hesaplanmış olan alev çekirdeklerindeki



Şekil 4. Her bir hal denklem modeli için ortalama kurum kütle kesri üzerinde çalışma basıncının etkisi. (a) İGLE ve (b) GGLE (Pressure effects on the Mean Soot Mass Fraction Profiles for each EOS model (a) the IGL EOS model predictions, (b) the RGL EOS model predictions)

kurum yükü tahminlerine benzer sonuçlar üretmektedir. Analiz, İGLE 10 ve 35 atm alev tahminleriyle devam ettirildiğinde, GGLE tahminlerinden sapma görülmektedir. Bu çıkarım ise *Gazyağı/Hava* difüzyon alevleri için çalışma basıncı 10 atm ve üzeri olduğunda $Le = 1$ varsayımının İGLE ile birleştirilmesinin "uygun" olmayabileceğini göstermektedir. Nitekim genel olarak söz konusu basitleştirmenin her iki hal denklemi için de geliştirilmiş difüzyon modeli ile karşılaştırıldığında beklenen değerlerden daha yüksek kurum yük tahminleri yaptığı Korucu [15] ile yapılan karşılaştırmalarda görülmektedir. Bütün bunlara ek olarak $Le = 1$ olarak varsayımının yüksek mertebelerde bölgesel olarak karışımın gözlenmesi sonucu alev çekirdeği boyunca gaz türlerinin ve kurumun kalma süresinin (residence time) kısa olması nedeniyle kimyasal tepkime için gerekli olan zamana erişilemediği sonucu da çıkarılabilir. Gaz türlerinin ve kurumun kalma süresinin kısalması alev sıcaklığının geliştirilmiş difüzyon sonuçlarından daha düşük tahmin edilmesine sebep olmaktadır. Ayrıca artan çalışma basıncı ile artan alev sıcaklığı nedeniyle kurum yüklerinde gözlemlenen artış beklenen bir davranıştır. İGLE ve GGLE kurum yükünün 35 atm çalışma basıncında en yüksek değerlerin karışım düzleminde bölgesini yaklaşık olarak yakın bir bölgede tahmin etmiş olsa dahi değerler karşılaştırıldığında İGLE ile hesaplanan değer ~ 16 daha yüksek olarak tahmin ettiği görülmektedir. Bu da Şekil 2a'da gözlemlenen yüksek sıcaklık değeri ile örtüşmektedir. Aynı zamanda 35 atm alev kurum yüküne bakıldığında İGLE tahminlerinde kurum yükü sürekli yükselen bir davranış gösterirken, GGLE tahminlerinde karışımın düzleminde $\phi \approx 0,75$ 'ten sonra ani bir yükseliş sergilenmektedir.

4. Sonuçlar ve Tartışmalar (Results and Discussions)

Mevcut çalışma, *Gazyağı/Hava* difüzyon alevlerinde kurum oluşum/yıkım süreçleri üzerindeki yayılım ve basınç etkilerini analiz etmek için Le sayısının bire eşit olduğu varsayımıyla birleştirilmiş iki farklı hal denklem modeli kullanılmıştır. 2B DNS *Gazyağı/Hava* difüzyon alevi analizleri $Le = 1$ difüzyon modelinin İG hal denklemi (İGLE) ile dört farklı çalışma için yapılmıştır. Bu çalışmanın ana amacı, Korucu vd. [26] tarafından daha önce yapılmış bir çalışmayı genişletmektir. Yüksek çalışma basınçlarındaki (35 atm) İGLE yaklaşımının kabiliyetini test etmektedir. Analizler, her iki hal denklem modeli için de $Le = 1$ varsayımının benimsenmesi durumunda karşılaşılabilecek listelenen sorunları ortaya çıkarmıştır:

- Le sayısının bire eşit olduğu varsayımındaki basitleştirmenin, mevcut çalışma için kullanılan hal denklem modellerine ve çalışma basınçlarından bağımsız olarak, ortalama alev sıcaklığı

tahminlerinin geliştirilmiş difüzyon model tahmininden daha düşük olmasına neden olmaktadır. Ortalama alev sıcaklığının her bir çalışma basıncı için beklenenden daha düşük tahmin edilmesi ise eksik bir yanmaya hatta bölgesel olarak alevin güçsüzleşip yok olmasına neden olma olasılığını yükseltmektedir.

- Düşük ortalama sıcaklık tahminleri, esasen İGLE 10 ve 35 atm çalışma basıncı durumları için alev çekirdeği boyunca tamamlanmamış yanma nedeniyle 'anormal derecede' yüksek kurum yükü tahminlerine sebep olmaktadır.
- Sadece atmosferik değil, aynı zamanda daha yüksek çalışma basınçları için *Gazyağı/Hava* alevleri üzerindeki $Le = 1$ varsayımının etkilerini araştırmak için 3B DNS analizleri hem gerçek gaz hem de ideal gaz hal denklem modelleri ile yapılması gerekliliği ve bu tür bir basitleştirme ile yapılan analizlerin doğruluğunun /güvenilirliğinin test edilmesi göz ardı edilmemelidir.

Korucu vd. [15]'nin daha önceki çalışmalarıyla karşılaştırmalar, $Le = 1$ varsayım modeli ile yapılan ortalama en yüksek alev sıcaklığı tahminlerinin en az % 5, en fazla %23 oranında azaldığını; bu, kurum oluşum/yıkım oranları hesaplamalarının, çalışma basıncından bağımsız olarak, $Le = 1$ varsayımli durumlarda düşük ortalama alev sıcaklığı ile kıyaslanabilir şekilde zayıflayacağını gösterir. Ardından, mevcut çalışmanın ana konusu olan her bir hal denklem modeli her bir çalışma basıncı için analiz edilmiştir. Kurum kütle oranı olan Y_s üzerindeki incelemeler, *Gazyağı/Hava* difüzyon alevlerinde ortalama alev sıcaklığının önemini vurgular.

Söz konusu durumlar için $Le = 1$ varsayım modelinin geliştirilmiş difüzyon model sonuçlarıyla karşılaştırılması göstermiştir ki ortalama alev sıcaklıkları $Le = 1$ varsayım modeli ile düşük tahmin edilmektedir. Alev sıcaklığının olması gerekenden düşük tahmin edilmesinin sadece yanmanın tamamlanmasını etkilemediği ayrıca kurum yıkım sürecini de sekteye uğrattığı ve dolayısıyla da kurum yükünün olması gerekenden daha yüksek tahmin edilmesine sebep olduğu gözlenmiştir. Daha detaylı analizler Korucu [15]'te bulunabilir. Bütün bunlara ek olarak çalışma basıncının atmosferik basınçtan daha yüksek değerlere çıkılması ile doğru orantılı olarak ortalama alev sıcaklığı da artmaktadır. Artan alev sıcaklığı ile kurum oksidasyonu süreci güçlene bile alev çekirdeklerindeki kurum yükü artmaya devam etmektedir.

Gazyağı/Hava difüzyon alevlerinde en basit difüzyon modeli olan $Le = 1$ varsayımının kullanımı ile elde edilen DNS verilerinin alev karakteristiklerinde ve kurum yükü hesaplarında kullanılması,

oluşturulacak RANS ve LES model katsayılarının hatalı olmasına yol açacaktır. Bu nedenle deneysel sonuçlarla birebir örtüşen sonuçların alınabilmesi açısından DNS metodunda matematiksel basitleştirmelere gitmeden önce olası modellerin 'güvenilirlik' açısından test edilmesi gerekliliği göz ardı edilmemelidir.

Teşekkür (Acknowledgement)

Finansman: Yazarlar, mali destek için Türk Hükümetine teşekkürü bir borç bilir.

Kaynaklar (References)

- Garnier E., Adams N., Sagaut P. Large eddy simulation for compressible flows. Springer, A.B.D., 2009.
- Hewitt G.F. Vassilicos, J.C., Prediction of Turbulent Flow, Cambridge University Press, İngiltere, 2005.
- Oran E.S., Boris J.P., Numerical simulation of reactive flow, Cambridge University Press, A.B.D., 2001.
- Veynante D., Vervisch L., Turbulent combustion modelling, Progress Energy and Combustion Science, 28, (3), 293-266, 2002.
- Piomelli U. Large-eddy simulation: Achievements and challenges, Progress in Aerospace Sciences, 35, 335-362, 1999.
- Pitsch H. Large-eddy simulation of turbulent combustion, Annual Review of Fluid Mechanics, 38, 453-482, 2006.
- Germano M., Piomelli U., Moin P., & Cabot W.H., A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, Physics of Fluids, 3, 1760-1765, 1991.
- Martin M.P., Piomelli U., Candler G.V., Subgrid-scale models for compressible large-eddy simulation, Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 13, 361-376, 2000.
- Mohseni K., Kosovic B., Shkoller S., Marsden J.E., Numerical simulations of the lagrangian averaged navier-stokes equations for homogeneous isotropic turbulence, Physics of Fluids, 15, 524-543, 2003.
- Poinsot, T., Veynante, D. Theoretical and numerical combustion, R.T. Edwards Inc., A.B.D., 2001.
- Modest M.F., Radiative heat transfer, Academic Press, A.B.D., 2003.
- Kennedy I. M., Models of soot formation and oxidation, Progress Energy and Combustion Science, 23, 95-132, 1997
- Malik N., Lovas T., Mauss F., The effect of preferential diffusion on the soot initiation process in ethylene diffusion flames, Flow, Turbulence and Combustion, 87, 293-312, 2011.
- Pitsh H., Reismeier E., Peters N., Unsteady flamelet modeling of soot formation in turbulent diffusion flames, Combustion Science and Technology, 158, 389-406, 2000.
- Korucu A., Analysis of high Pressure H₂/O₂, H₂/Air and Kerosene/Air reacting shear flows, Doctoral thesis, Clemson University, Clemson, SC, A.B.D., 2016.
- Korucu A., Miller R. Numerical analysis of real gas and pressure effects on 2D Kerosene/Air shear flames, 22nd Congress on Thermal Science and Technology (CTST 2019), Kocaeli, Türkiye: 2019.
- Wang T.S., Thermophysics characterization of kerosene combustion, Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 15, 140-147, 2001.
- Harstad K.G, Miller R.S, Bellan J., Efficient high-pressure state equations, American Institute of Chemical Engineers Journals, 43, 1605-1610, 1997.
- Palle S. On real gas and molecular transport effects in high pressure mixing and combustion, Doctoral thesis, Clemson University, Clemson, SC, A.B.D., 2006.
- Palle S., Miller R.S., Analysis of high-pressure Hydrogen, Methane, and Heptane laminar diffusion flames: Thermal diffusion factor modeling, Combustion and Flame, 151, 581-600, 2007.
- Vasudevan R., Thermal diffusion coefficient modeling for high pressure combustion simulations, Master's thesis, Clemson University, Clemson, SC, A.B.D., 2007.
- Foster J., A priori analysis of subgrid scalar phenomena and mass diffusion vectors in turbulent Hydrogen-Oxygen flames, Master's thesis, Clemson University, Clemson, SC, A.B.D., 2009.
- Foster J., On simulation and modeling of turbulent non-premixed reacting shear flames at low and high pressure, Doctoral thesis., Clemson University, Clemson, SC, A.B.D., 2011.
- Leung K. M., Lindstedt R.P., Jones W. P., A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames, Combustion and Flame, 87, 289-305, 1991.
- Lignell D.O., Direct numerical simulation of soot formation and transport in turbulent nonpremixed ethylene flames, Doctoral thesis, The University of Utah, A.B.D., 2008.
- Korucu A., Miller R., Unity lewis number effects at atmospheric pressure kerosene/air flames, 14th International Combustion Symposium (INCOS2018); Karabuk, Türkiye, 2018.

