

TOBB EKONOMİ VE TEKNOLOJİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DİKDÖRTGENSİ BİR KANAL İLE KUŞATILMIŞ SİLİNDİRİK BİR
ÇUBUK ÜZERİNDE SABİTLENMİŞ ÖNKARIŞIMLI LAMİNER
ALEVİN DENEYSEL İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Görkem ÖZTARLIK

Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Sıtkı USLU

Ağustos 2016

Fen Bilimleri Enstitüsü Onayı

.....
Prof. Dr. Osman EROĞUL
Müdür

Bu tezin Yüksek Lisans derecesinin tüm gereksinimlerini sağladığını onaylarım.

.....
Doç. Dr. Murat Kadri AKTAŞ
Anabilimdalı Başkanı

TOBB ETÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 141517007 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi **Görkem ÖZTARLIK**'nin ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı "**DİKDÖRTGENSİ BİR KANAL İLE KUŞATILMIŞ SİLİNDİRİK BİR ÇUBUK ÜZERİNDE SABİTLENMİŞ ÖN-KARIŞIMLI LAMİNER ALEVİN DENEYSEL İNCELENMESİ**" başlıklı tezi 05.08.2016 tarihinde aşağıda imzaları olan jüri tarafından kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı: **Yrd. Doç. Dr. Sıtkı USLU**
TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi

Eş Danışman: **Prof. Dr. Thierry POINSOT**
Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse

Jüri Üyeleri: **Prof. Dr. Ünver KAYNAK (Başkan)**
TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi

Prof. Dr. Yusuf ÖZYÖRÜK
Orta Doğu Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Abdullah ULAŞ
Orta Doğu Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Oğuz UZOL
Orta Doğu Teknik Üniversitesi

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, alıntı yapılan kaynaklara eksiksiz atıf yapıldığını, referansların tam olarak belirtildiğini ve ayrıca bu tezin TOBB ETÜ Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlandığını bildiririm.

Görkem ÖZTARLIK

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

DİKDÖRTGENSİ BİR KANAL İLE KUŞATILMIŞ SİLİNDİRİK BİR ÇUBUK ÜZERİNDE SABİTLENMİŞ ÖNKARIŞIMLI LAMİNER ALEVİN DENEYSEL İNCELENMESİ

Görkem ÖZTARLIK

TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Sıtkı USLU

Tarih: Ağustos 2016

Çalkantılı yayının etkilerinin bulunmadığı laminer alevler, alev yapısı, yanma kimyası ve akustik tahrik altında alevlerin davranışlarını incelemek amacıyla literatürde sıkça kullanılmaktadır. Bu çalışmada dikdörtgensel bir kanal ile kuşatılmış silindirik bir çubuk üzerinde sabitlenmiş önkarişimli laminer bir alev, alevin pozisyonunun belirlenmesi adına, hidrokarbon alevlerinin ürettiği ısının iyi bir niteliksel ölçütü olduğu bilinen CH* emisyon fotoğrafları ve tepkimeli akış için alev öncesi ve tepkimesiz durum için kamera görüş açısının elverdiği oranda hız alanının ölçülmesine olanak veren Parçacık Görüntü Hız ölçümü teknikleriyle deneysel incelenmiştir. Sayısal yöntemler kullanılarak deneysel düzenekteki akış, açık kaynak hesaplamalı akışkanlar dinamiği kodu OpenFOAM ve CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) tarafından geliştirilen hesaplamalı akışkanlar dinamiği kodu AVBP kullanılarak modellenmiştir. Elde edilen deneysel ölçümler ve HAD sonuçları uzlaşma durumunun değerlendirilebilmesi için birbirleriyle karşılaştırılmıştır ve aralarındaki uyum incelenmiştir. Deneysel sonuçlar ve hesaplamalar alevin tutunma mekanizmasının incelenmesinde kullanılmıştır. Tepkimesiz sıkıştırılamaz akış durumu için gerçekleştirilen HAD çalışmaları ve deneysel sonuçlar kullanılarak burgaç kopması fenomeni incelenmiş ve sınır tabaka ayrılma noktaları araştırılmıştır. Silindirik

çubuğun döndüğü durumlarda dönüş hızının burgaç kopması fenomenine etkisi araştırılmış ve kaldırma katsayıları incelenmiştir. Alev sönme mesafesi duvar sıcaklıkları, yanma kimyası ve gerilme etkilerine son derece bağlı olduğundan alev kök pozisyonu karışımın kompozisyonundan ve birbirleriyle ilişkili olan duvar sıcaklıklarından son derece etkilenecektir. Bu etki aynı serbestçe yayılan alev hızlarına sahip metan/hava ve hidrojenle zenginleştirilmiş metan/hava alevleri için karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Bunların yanında açık kaynak bir kimya çözücüsü olan CANTERA kodu kullanılarak değişik koşullar ve kimyasal mekanizmalar için serbestçe yayılan ve gerilim altındaki alev hızları, kendiliğinden tutuşma zamanları, ve denge kimyası hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Fosil yakıtlara iyi bir alternatif olarak düşünülen hidrojen ve hidrojenin çalışmada kullanılan metan gibi fosil yakıtlara katıldığındaki etkileri araştırılmıştır. Aynı serbestçe yayılan alev hızlarına sahip metan/hava ve hidrojen katkılı metan/hava alevleri için gerilim etkisi altındaki alevler ve deneysel düzeneğin HAD benzetimleri hesaplanmış ve alev hızları ile alev tutunma mekanizmaları karşılaştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Laminer alev, Deneysel, Modelleme.

ABSTRACT

Master of Science

Experimental Investigation of a Premixed Laminar Flame Stabilized on a
Cylindrical Rod Confined in a Rectangular Duct

Görkem ÖZTARLIK

TOBB University of Economics and Technology
Institute of Natural and Applied Sciences
Department of Mechanical Engineering

Supervisor: Assist. Prof. Sıtkı USLU

Date: August 2016

Laminar flames, in which the effect of turbulent diffusion is non-present, are widely used in the literature to study the flame structure, combustion chemistry and flame behavior under acoustic fluctuations. In this study a laminar flame stabilized on a cylindrical rod confined in a rectangular duct is investigated experimentally by utilizing CH* emission photographs; which is found to be a good representation of the qualitative heat release in hydrocarbon flames, to obtain the position of the flame and PIV measurements to acquire the velocity field prior to the flame and in a part of the chamber which can be accessed by the field of view of the camera for non-reacting cases. Also, open source CFD software OpenFOAM and AVBP CFD code developed by CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) has been utilized to simulate the flow to be compared to the experiments for the assessment of the degree of agreement. These measurements and calculations are then be used to study the flame stabilization mechanism on the rod. The CFD calculations for the non-reacting cases and the experiments have been used to study the Karman vortex shedding phenomenon and the location of the boundary layer separation points. When the rod is actuated, the effect of the speed of rotation of the rod on the vortex shedding mechanism and the lift coefficient has been investigated. As the flame quenching distance is depending on the wall temperature of the rod, combustion chemistry

and the effects of strain, the flame root position will be greatly affected by the composition of the mixture and the wall temperature of the rod. This study also includes non-stretched and stretched laminar flame speed, auto ignition delay time and equilibrium calculations for different conditions performed by open source chemistry solver CANTERA using different chemical mechanisms. As it is considered to be a good alternative to fossil fuels, there is specific interest on the effects of hydrogen addition to the primary fuel which is methane and the effects of hydrogen addition on flame speeds, extinction strain rates and equilibrium temperatures have been investigated. For the methane/air and hydrogen enriched methane air flames that have the same freely propagating flame speeds stretched flame speeds and CFD calculations of the experimental setup has been performed to assess the effect of hydrogen on stretched flame speeds and the flame stabilization mechanism on the rod.

Keywords: Laminar flame, Experimental, Simulation

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocam Yrd. Doç. Dr. Sıtkı USLU ve Prof. Dr. Thierry POINSOT, kıymetli tecrübelerinden faydalandığım TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi Makine Mühendisliği Bölümü öğretim üyelerine ve destekleriyle her zaman yanımda olan aileme ve arkadaşlarıma çok teşekkür ederim.

Ayrıca çalışmalarım süresince beni yönlendiren, uyum sağlamam için son derece yardımcı olan, fikirlerine son derece önem verdiğim Dr. Laurent SELLE'e teşekkürü bir borç bilirim. Ek olarak derin bilgilerinden faydalandığım ve ofisini paylaştığım Prof. Dr. Benoit BEDAT'a, yardımlarından dolayı Prof. Dr. T. Hikmet KARAKOÇ'a, yurt dışına çıkış sürecinde okulumuzun idari işlerinde beni yalnız bırakmayan Prof. Dr. Osman EROĞUL ve Doç. Dr. Murat Kadri AKTAŞ'a teşekkür ederim.

Bu çalışmada tecrübelerinden faydalandığım çalışma arkadaşlarım Dr. Pradip XAVIER, Dr. Daniel MEJIA, Dr. Christian KRAUS, Dr. Abdulla GHANI, Maxence BREBION ve Dr. Corentin LAYPERE'e, hem çalışmalarım hem de arkadaşlıkları ile yanımda olan Ziad HAMIDOUCHE, Thomas KAISER, Solene CHEVRIER, Valentin GOSSELIN, Qiancheng WANG, Ainur NIGMETOVA, Nicolas MONROLIN, Quentin DOUASBIN ve François AUDARD'a teşekkürlerimi sunarım.

Fransa'daki zamanımı son derece keyifli kılan ve misafirperverliklerini esirgemenen Nathalie CHAUVIERE SALAZAR, Elsa SANCHEZ, Filippo Di CECCA, Pierre-Yves LAMBOLEZ, Leslie HASSID, Guilhem FIRMIN, Marie Pierre GABIS, Eric SCHMITT'e dostluklarından dolayı, hem iş hem özel hayatımda hem de bu tez süresince her sıkıldığımda yanımda olan Ender Hepkaya'ya, zor zamanımda hızır gibi yetişen Yasin ŞÖHRET ve Fırat KIYICI'ya, fikirlerine her zaman güvendiğim Oğuz BAŞER'e, dostluğu, desteği ve yardımlarından dolayı Enis DÖNMEZ'e teşekkür ederim.

Hayatımın uzun bir bölümünde yanımda olan Pınar YAVUZ'a, eskimeyen dostluklarından dolayı Sapanca Takımı üyeleri Semih ÇULHAOĞLU, Burcu BOSTAN, Hayri Can AKYEL, Ezgi DEMİRALP, Ece YUYAR, Gökçe SÜRENKÖK'e teşekkürlerimi iletirim.

Lisans üstü öğrenimim boyunca araştırma bursu sağladığı için TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi'ne teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	ix
ŞEKİL LİSTESİ	xi
ÇİZELGE LİSTESİ	xviii
KISALTMALAR	xix
SEMBOL LİSTESİ	xx
RESİM LİSTESİ	xxi
1. GİRİŞ	1
1.1 Tezin Amacı	2
1.2 Literatür Araştırması	3
1.2.1 Kuşatmanın küt cisim etrafındaki akışa etkisi	5
1.2.2 Alevin küt cisim etrafındaki akışa etkisi	8
1.2.3 Alev geri tepmesi (Flashback)	8
1.2.4 Sınır tabakada alev geri tepmesi	9
1.3 Yakıt Olarak Hidrojen	10
1.3.1 Hidrojenle zenginleştirme	13
2. PIV	15
2.1 Parçacıklardan Saçınan Işık (Mie Rejimi)	18
2.2 Işık Kaynakları, Aydınlatma ve Lazerin Optik İşlenimi	18
2.3 Görüntülerin Kaydedilmesi ve Kameralar	19
2.4 Sayısallaştırılmış Parçacık Görüntüsü	21
2.5 Görüntü Analizi	21
3. DENEYSEL DÜZENEK VE SONUÇLAR	27
3.1 Deneysel Sonuçlar	32
3.2 PIV Sonuçları	32
3.3 CH* chemiluminescence Results	39
4. HAD HESAPLAMALARI	41
4.1 Eşitsiz HAD Hesaplamaları	41
4.2 Denge Kimyası ve Bir Boyutlu Alev Hesaplamaları	58
4.2.1 Serbestçe yayılan alev korunum denklemleri	59
4.2.2 Kendiliğinden tutuşma zamanları	65
4.3 Gerinim Etkisi Altındaki Alevler	69

4.3.1 Korunum denklemleri	69
4.3.2 Gerinimli alev sonuçları	70
4.4 Tepkimeli HAD Hesaplamaları	81
5. HAD SONUÇLARI İLE DENEYSEL VERİLERİN KARŞILAŞTIRILMASI VE HİDROJENLE ZENGİNLEŞTİRİLMİŞ ALEVİN TAHMİNİ	87
5.1 Sıkıştırılmaz Tepkimesiz HAD - Deneysel Sonuçlar Karşılaştırılması . . .	87
5.2 Tepkimeli HAD - Deneysel Sonuç Karşılaştırması	87
5.3 Hidrojenle Zenginleştirilmiş Alev	93
5.4 Sonuç	97
KAYNAKLAR	101
EKLER	109
ÖZGEÇMİŞ	161



ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1: Kuşatma oranı $r = 1/3$ olan kuşatılmış silindir etrafındaki akış, Reynolds sayısı $Re = 100$ [61].	6
Şekil 1.2: Küt cisim etrafındaki eşışıl akıştaki kilit özellikler. Üst kısımda zamana bağlı akış topolojisi gösterilmiş, alt kısımda ise zaman ortalamalı hız profilleri sunulmuştur. Bunlara ek olarak kuşatılmış tepkimeli durum için iz akışından jet akışına geçişi tanımlayan zaman ortalamalı hız profilleri alt sağ kısımda sunulmuştur [68].	8
Şekil 1.3: a-eşışıl ve b-tepkimeli durumlardaki hız vektörleri [22].	9
Şekil 1.4: Hidrojen, metan ve propan alevlerinin sönme mesafeleri [12]. . .	10
Şekil 1.5: Hidrojen üretiminde kullanılan işlemler ve kaynaklar [13].	12
Şekil 2.1: Geleneksel bir PIV sisteminin şematik temsili [59].	15
Şekil 2.2: Lüle içi akışın sorgulama pencerelerini gösteren PIV görüntüsü [3].	16
Şekil 2.3: Aynı konumda farklı zamanlarda alınmış parçacıkların hareketini gösteren iki görüntü [3].	16
Şekil 2.4: Korelasyon fonksiyonundaki pikin temsili görüntüsü [81].	17
Şekil 2.5: $1 \mu\text{m}$ çapındaki yağ damlacığının ışık saçınımı [59].	18
Şekil 2.6: $10 \mu\text{m}$ çapındaki yağ damlacığının ışık saçınımı [59].	18
Şekil 2.7: Lazerden çıkan sütun biçimindeki lazer ışınının optik işlenimi [59].	19
Şekil 2.8: Fotoğraf karesi taşınımı (frame transfer) CCD kameralarda sensör dağılımı [59].	20
Şekil 2.9: Fotoğraf karesi taşınımı (frame transfer) CCD kameralarda zamanlama diyagramı [59].	20
Şekil 2.10: PIV görüntüsündeki parlaklık dağılımı; parçacıklardan saçınan Gauss dağılımlı ışık I_p , münferit piksellerdeki rastlantısal gü-rültü I_{sp} , düşük frekanslı fon gürültü I_{lf} , tümleşik parlaklık da-ğılımı I_{tot} [3].	21
Şekil 2.11: PIV yöntemindeki görüntü işleme adımı; gri-skala yoğunluklar-dan oluşan G_1 görüntüsü ve akabindeki G_2 görüntüsü [3].	21
Şekil 2.12: En küçük ikinci dereceden fark [3].	22
Şekil 2.13: Korelasyon sinyalinin görsel temsili [3].	23
Şekil 2.14: FFT metodu ile korelasyon yönteminin görsel temsili [59]. . . .	24
Şekil 2.15: Korelasyon pikinin piksel altı konumunun tahmini ve uydurulan eğrinin temsili görseli [3].	25
Şekil 3.1: Deney düzeneği, (Daniel Mejia, kişisel görüşme, 2016).	28

Şekil 3.2: Deney düzeneğinin ölçüleri içeren şematik görüntüsü, (Daniel Mejia, kişisel görüşme, 2016).	29
Şekil 3.3: Büyütme oranının belirlenmesinde kullanılan kalibrasyon plakası.	29
Şekil 3.4: Ham görüntüden kesilen örnek bir sorgulama penceresi.	30
Şekil 3.5: Görüntü çiftinin ikinci görüntüsünden kesilen örnek bir arama penceresi.	31
Şekil 3.6: Örnek olarak sunulan sorgulama penceresi ve arama penceresinin korelasyonu.	32
Şekil 3.7: Silindirin sabit tutulduğu durum için ortalama deplasman alanı.	33
Şekil 3.8: Seçilen noktaların konumları ve X-yönündeki ortalama deplasman alanı konturları.	33
Şekil 3.9: x-deplasman alanının zaman ortalamasının görüntü çifti sayısına göre değişimi.	34
Şekil 3.10: Silindirin sabit tutulduğu durum için PIV yöntemi ile ölçülen U-hız alanı, siyah çizgi geri dönüş bölgesini temsil etmektedir.	35
Şekil 3.11: Silindirin sabit tutulduğu durumda vortisite alanı.	36
Şekil 3.12: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=2900.	36
Şekil 3.13: Vortisite alanı, RPM=2900.	37
Şekil 3.14: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=6000.	37
Şekil 3.15: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=7800.	38
Şekil 3.16: Tepkimeli akışta PIV ile ölçülen u-hız alanı, beyaz bölüm zeytin yağı damlacıklarının buharlaşıp yanmasından dolayı ölçümlerin mümkün olmadığı alev ve alev sonrası bölgelerini göstermektedir.	38
Şekil 3.17: Alevin anlık (instantaneous) CH* kimyasal ışıldama görüntüsü, $\phi=0.75$, RPM=0.	39
Şekil 3.18: Alevin ortalaması alınmış ve normalleştirilmiş CH* kimyasal ışıldama görüntüsü, $\phi=0.75$, RPM=0.	39
Şekil 3.19: Alevin ortalaması alınmış ve normalleştirilmiş CH* kimyasal ışıldama görüntüsü, $\phi=0.7$, RPM=0.	40
Şekil 4.1: HAD hesaplamalarında kullanılan giriş hız profili	41
Şekil 4.2: Silindir etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.	42
Şekil 4.3: Kanalin duvarları etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.	42
Şekil 4.4: Silindir etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.	43
Şekil 4.5: Çubuğun sabit olduğu eşisıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.	44

Şekil 4.6: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile baskın frekansının hesaplanması, RPM=0.	45
Şekil 4.7: Çubuğun 2900 RPM'de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.	46
Şekil 4.8: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile baskın frekansının hesaplanması, RPM=2900	47
Şekil 4.11: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile baskın frekansının hesaplanması, RPM=7800.	47
Şekil 4.9: Çubuğun 6000 RPM'de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.	48
Şekil 4.10: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile baskın frekansının hesaplanması, RPM=6000.	49
Şekil 4.12: Çubuğun 7800 RPM'de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.	49
Şekil 4.13: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynodls ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=0.	50
Şekil 4.14: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynodls ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=2900.	50
Şekil 4.15: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynodls ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=6000.	51
Şekil 4.16: Hız alanının x-yönündeki bileşenini. Siyah çizgi geri dönüş bölgesini temsil eden, hız alanının x-yönündeki bileşeninin sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=7800.	51
Şekil 4.17: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=0.	52
Şekil 4.18: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=2900.	53
Şekil 4.19: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=6000.	54

Şekil 4.20: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler akış teğetsel hızının silindirik çizgisel hızına eşit olduğu bölgeleri, mor çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi göstermektedir, RPM=7800. Akış kararlı duruma ulaşmıştır.	55
Şekil 4.21: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=0.	56
Şekil 4.22: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=2900.	57
Şekil 4.23: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=6000.	58
Şekil 4.24: Metan-hidrojen karışımlarının stokiyometrik hava/yakıt oranları.	62
Şekil 4.25: Metan-hidrojen karışımlarının 300 K sıcaklık ve atmosferik basınçtaki yoğunlukları.	62
Şekil 4.26: Hidrojen-metan/hava karışımları için eşdeğerlilik katsayısı ve hidrojen oranına denk gelen 300 K sıcaklık ve atmosferik basınçtaki yoğunlukları.	62
Şekil 4.27: Hidrojen-metan karışımları için alt ısıl değerleri.	63
Şekil 4.28: 300 K sıcaklıkta atmosferik basınçtaki tepkenler için hesaplanan eşdeğerlilik oranı - hidrojen oranı uzayındaki denge sıcaklığı sonuçları.	63
Şekil 4.29: 300 K önkarişim sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki saf metan/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesaplamaları, imleçler Gu et. al. [27], Hu et. al. [33] ve Hassan et. al. [31]'in deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.	63
Şekil 4.30: 300 K önkarişim sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki %20 oranında hidrojen ile zenginleştirilmiş-metan/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesaplamaları, imleçler Halter et al.[30] , Hu et al. [33]; Tanoue et al. [76] ve Yu et al. [83]'in deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.	64

Şekil 4.31: 300 K önkarişım sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki saf hid-rojen/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesapla-maları, imleçler Dowdy et al. [16]; Hu et al. [33]; Sun et al. [73]; Takahashi et al. [74]'ın deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.	64
Şekil 4.32: 300 K tepken sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki GRI-Mech 3.0 kimyasal mekanizması ile hesaplanan alevler için molar hid-rojen oranı ve eşdeğerlilik oranı uzayındaki alev hızları.	65
Şekil 4.33: Hesaplanan kendiliğinden tutuşma zamanlarının değişik eşde-ğerlilik oranları, basınçlar ve sıcaklıkları için sıcaklığın tersine göre değişimleri. İmleçler Hu et. al. [34]'ın deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.	66
Şekil 4.34: Hidrojen katkısı ile kendiliğinden tutuşma zamanının değişimi. Çizgiler: hesaplamalar, imleçler: Gersen et al. [24]'ın deneysel sonuçları.	68
Şekil 4.35: Birbirine karşı yerleştirilmiş iki lüle yapısı kullanılarak ikiz, gerinimli önkarişımlı alevlerin oluşturulabildiği karşıt lüle düze-neğinin şematik temsili [44].	69
Şekil 4.36: Denklem 4.32'de sunulan bölgesel gerinim oranının çizgisel temsili, dikey kesikli yeşil çizgi sıcaklığın $T_{green} = T_{inlet} + 3.0$ olduğu bölgeyi temsil etmekte ve bölgesel gerinim oranının ta-nımlandığı noktanın alevin ön ısıtma bölgesinden önce olduğunu göstermektedir.	70
Şekil 4.37: İki farklı kimyasal mekanizma kullanılarak Cantera yazılımı ile hesaplanan karşıt akışlı alevler ile Cuoci et. al. [10]'ın sonuçla-rının karşılaştırılması.	71
Şekil 4.38: Sönene kadar zorlanan, LU 19 ve Polimi mekanizması ile he-saplanan ve Cuoci et. al. [10]'ın sonuçları ile karşılaştırılan karşıt akışlı ikiz alevlerin maksimum sıcaklık cevapları.	72
Şekil 4.39: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevle-rin kimyasal tür profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s	74
Şekil 4.40: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alev-lerin sıcaklık ve eksenel hız profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s.	74
Şekil 4.41: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevle-rin tepkime ısısı profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s.	75
Şekil 4.42: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevle-rin kimyasal tür profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.	75
Şekil 4.43: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alev-lerin sıcaklık ve eksenel hız profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.	76

Şekil 4.44: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin tepkime ısısı profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.	76
Şekil 4.45: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönme noktasındaki kimyasal tür profilleri.	77
Şekil 4.46: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönme noktasındaki sıcaklık ve eksenel hız profilleri.	77
Şekil 4.47: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönme noktasındaki tepkime ısısı profilleri.	78
Şekil 4.48: LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları ile Jackson et. al. [37]'ın deneysel sonuçlarının karşılaştırılması. . .	78
Şekil 4.49: 573 K karışım sıcaklığı ve 1 atm basınç altında LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları.	79
Şekil 4.50: 300 K karışım sıcaklığı ve 1 atm basınç altında LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları.	79
Şekil 4.51: Gerinim etkisi altındaki alevler için alev hızlarının tanımı. . . .	80
Şekil 4.52: Saf metan/hava ve hidrojen katkılı metan/hava alevleri için gerinimli alev hızlarının gerinim oranına bağlı değişimi.	80
Şekil 4.53: Saf metan/hava ve hidrojen katkılı metan/hava alevleri için gerinimli alevlerde durma noktası sıcaklığının gerinim oranına bağlı değişimi.	80
Şekil 4.54: Tepkimeli akış benzetimlerinde kullanılan sonlu ağın silindirin etrafındaki görüntüsü.	81
Şekil 4.55: Tepkimeli akış benzetimlerinde kullanılan sonlu ağın alev etrafındaki görüntüsü.	82
Şekil 4.56: $\phi = 0.75$, $p = 1$ atm, $T_{in} = 300$ K için saf metan/hava alevi boyunca normalleştirilmiş Reynolds sayısının değişimi.	82
Şekil 4.57: $\phi = 0.75$ metan/hava alevinde gözlenen akış çizgileri ve alevin ürettiği ısı.	83
Şekil 4.58: $\phi = 0.7$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki akış çizgileri ve alevin ürettiği ısı.	83
Şekil 4.59: $\phi = 0.75$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki sıcaklık konturları.	84
Şekil 4.60: $\phi = 0.75$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki sıcaklık konturları.	84
Şekil 4.61: Her iki durum için $\Theta = 0.9$ eş-çizgileri.	85
Şekil 5.1: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=0.	88

Şekil 5.2: PIV ölçümleri ve tamamen tekdüze bir giriş hız profili kullanılarak hesaplanan OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=0.	89
Şekil 5.3: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=2900.	90
Şekil 5.4: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=6000.	91
Şekil 5.5: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=7800.	92
Şekil 5.6: AVBP HAD sonuçlarından elde edilen tepkime ısısı eşdeğer çizgisi ile normalleştirilmiş deneysel CH* kimyasal ışıldama ölçümlerinin karşılaştırmalı görüntüsü, $\phi=0.75$	93
Şekil 5.7: AVBP HAD sonuçlarından elde edilen tepkime ısısı eşdeğer çizgisi ile normalleştirilmiş deneysel CH* kimyasal ışıldama ölçümlerinin karşılaştırmalı görüntüsü, $\phi=0.7$	94
Şekil 5.8: PIV ölçümleri ve AVBP HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, $\phi=0.7$	95
Şekil 5.9: Karşılık gelen durumlar için $\Theta = 0.9$ eşdeğer çizgisi.	97

ÇİZELGE LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 1.1: Silindir etrafındaki akış için Reynolds sayısına bağlı olarak akış karakteristiği.	3
Çizelge 1.2: Hidrojenin fosil yakıtlarla karşılaştırmalı yanma özellikleri [17].	11
Çizelge 4.1: Reynolds sayısı ve dönüş oranının tanımında kullanılan değişik formüller ve deney düzeneğinde karşılık gelen değerleri. . . .	43
Çizelge 4.2: Değişik kabuller kullanılarak hesaplanmış dönüş hızlarında Strouhal sayıları ve dönüş hızlarına denk gelen değerleri. . . .	48
Çizelge 4.3: Sabit ortalama hız ve alev hızı için hesaplanan deneysel çalışma koşulları. <i>Re</i> hesaplanırken Poiseuille akış profili kabulü yapılmış ve merkez-çizgi hızı kullanılmıştır.	67
Çizelge 4.4: Karşılaştırmalı değerlendirme çalışmalarında kullanılan sınır koşulları.	71
Çizelge 4.5: Sönene kadar zorlanan alevlerin sınır koşulları.	72
Çizelge 4.6: Çizelge 4.5’de sunulan sınır koşullarına denk gelen alevlerin maksimum sıcaklık-bölgesel gerinim oranı cevapları.	73
Çizelge 5.1: Çalışılan işletme koşulları için denge ve silindir sıcaklıkları ve yanma odasının gücü.	96

KISALTMALAR

CCD	: Yk Baęlařımlı Kamera (Charge Coupled Device)
DC	: Doęru Akım (Direct Current)
HAD	: Hesaplamalı Akıřkanlar Dinamięi
LHV	: Alt Isıl Deęer (Lower Heating Value)
Nd:YAG	: Neodyum Katkılı İttriyum Alüminyum Garneti (Neodymium-Doped Yttrium Aluminium Garnet)
PIV	: Parçacık Görüntü Hızölçer (Particle Image Velocimetry)
PPM	: Milyonda Bir (Parts Per Million)
RPM	: Dakikadaki Devir Sayısı (Revolutions Per Minute)

SEMBOL LİSTESİ

Bu çalışmada kullanılmış olan simgeler açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler Açıklama

α	Dönüş oranı
α_{ki}	Üçüncül kütle için i tepkimesindeki çarpışma verimi
β	Hız üssü
C_L	Kaldırma katsayısı
c_p	Sabit basınçta özgül ısı
H	Entalpi
j_k	Kimyasal tür kütle akısı
k	Kimyasal tür indisi
$k_{f,i}$	İleri tepkime hızı
$k_{r,i}$	Geri tepkime hızı
$K_{c,i}$	i tepkimesinin denge sabiti
κ	Gerinim oranı
λ	Isıl yayılım katsayısı
μ	Viskozite
ν	Stokiyometrik katsayı
ω	Vortisite
$\dot{\omega}_k$	Kimyasal türün üretim/tüketim hızı
p	Basınç
ϕ	Eşdeğerlilik oranı
Φ	Korelasyon
q	Tepkime hızı
r	Kuşatma oranı
R	İdeal gaz sabiti (=8.31439J/molK)
Re	Reynolds sayısı
ρ	Yoğunluk
S	Entropi
S_L^0	Serbestçe yayılan alev hızı
S_L	Gerinim etkisi altındaki alev hızı
St	Strouhal sayısı
U	Hız
W	Molekül kütlesi
X_k	Molar oran
Y_k	Kütlesel oran

RESİM LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Resim 1.1: Yüksek performans SR-71 uçağında alevin tutunamaması sonucunda gerçekleşen alev süpürülmesi [48].	1
Resim 1.2: Atmosferde kolayca yayınabilen sera gazlarının konsantrasyonları ve radyasyon yükleri [32].	2
Resim 1.3: Silindir önü / arkası sanki-simetrik akış, $Re < 0.1$ [9].	5
Resim 1.4: Sınır tabaka ayrılması olmadan silindir önü / arkası asimetric akış: $Re = 5$ [9].	6
Resim 1.5: Simetrik burgaçlar: $Re = 24$ [9].	6
Resim 1.6: Burgaç kopması periyodu boyunca karşıt burgaçlara sarmalanan silindir arkasındaki kayma tabakaları: $Re = 70$ [9].	7
Resim 1.7: Kopan burgaçların Reynolds sayısına bağlı durumları ve serbest akışta sürüklenmeleri [9].	7
Resim 1.8: Hidrojen-doğal gaz karışımlarının yol testlerinde kullanılan otobüs [23].	13
Resim 3.1: Tepkimesiz durumda deney düzeneğinden alınan görüntü.	30

1. GİRİŞ

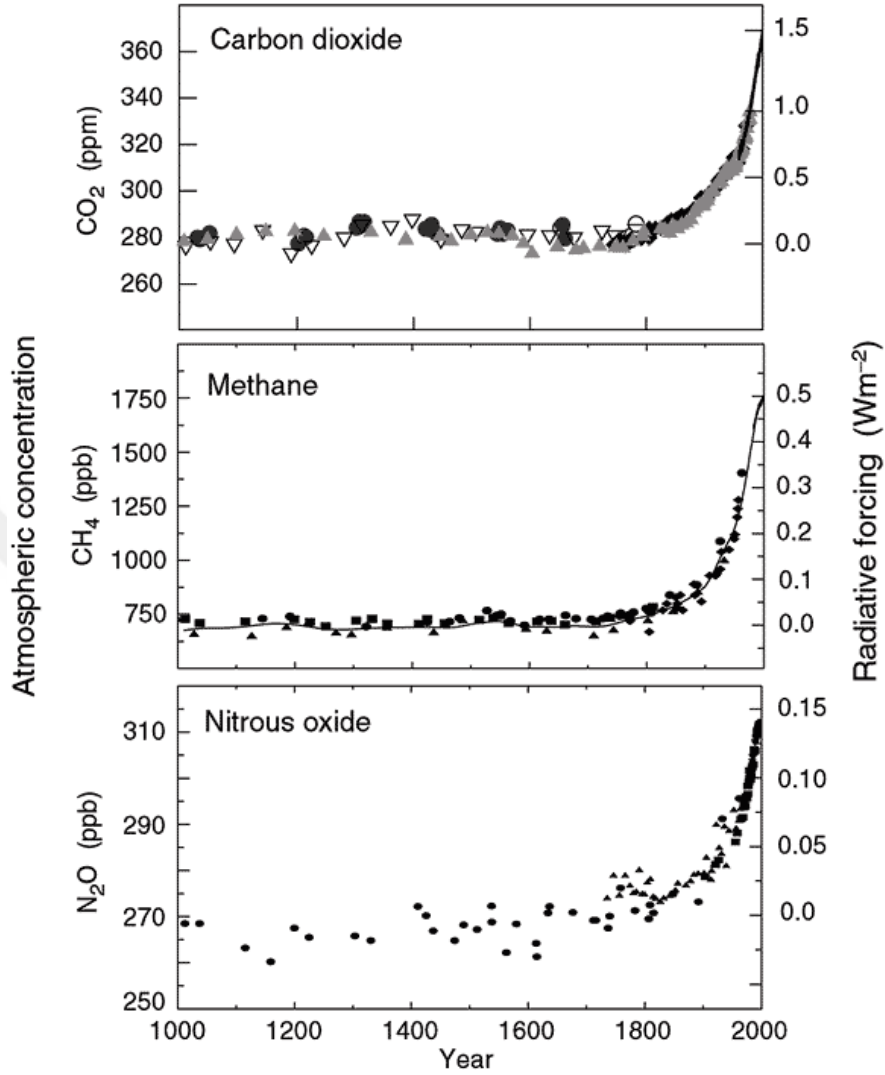
Küt cisimler arkasında alev sabitlenmesi, endüstriyel kazanlar, buhar türbinleri, ramjet ve turbojet motorlar gibi yığın akış hızının alev hızından daha büyük olduğu mühendislik sistemlerinde taze tepken gazların sürekli tutuşmasını sağlamak ve alevin akış tarafından süpürülmesini engellemek için sıklıkla kullanılmaktadır [18, 49]. Alevin tutunamadığı durumlar tehlike oluşturmakta ve tutunma mekanizmasının incelenmesi bilimsel öneminin yanında pratik sistemlerde de önemini korumaktadır [48]. Buna ek olarak silindirin dönüşü ile açığa çıkan asimetri etkisinin yanma kararsızlıkları üzerinde etkili olduğu literatürde sunulmuş ve yanma kararsızlıklarının tanımlanması ve kontrolü için kullanılabileceği düşünülmektedir [4, 5].



Resim 1.1: Yüksek performans SR-71 uçağında alevin tutunamaması sonucunda gerçekleşen alev süpürülmesi [48].

Ayrıca insanoğlunun sürekli artan enerji ihtiyacı fosil yakıtlara alternatif olarak kullanılabilecek daha temiz yakıtların araştırılması konusunu gündeme getirmiştir. Günümüzde harcanan enerjinin %80'e yakını fosil yakıtlardan karşılanmaktadır ve bu eğilimin kısa sürede değişmesi beklenmemektedir [36]. Sanayi devriminden günümüze katlanarak artan karbon içerikli emisyonlar [32], dünyanın radyasyon yükünü artırarak küresel ısınma sorularını uyandırmış ve hidrojen gibi karbon içermeyen ve yenilenebilir yakıtların araştırılmasında önemli bir itici güç olmuşlardır.

Global atmospheric concentrations of three well mixed greenhouse gases



Resim 1.2: Atmosferde kolayca yayınabilen sera gazlarının konsantrasyonları ve radyasyon yükleri [32].

1.1 Tezin Amacı

Bu çalışmanın amacı metan/hava alevlerinin deneysel teknikler ve hesaplamalı akışkanlar mekaniği çözümleri kullanılarak incelenmesi, alevin tutunma mekanizması ve deneysel ölçüm ve had sonuçları ile elde edilen alev konumları ile karşılaştırılması ile çözümlerin doğrulanması ardından bu çözüm tekniklerinin hidrojen katkılı alevlere uygulanarak hidrojen katkılı alevlerin incelenmesi ve tahminlerde bulunulmasıdır. Bunların yanında alevlerin hidrojen katkısı öncelikli olmak üzere, alev hızları, denge sıcaklıkları ve alevlerin davranışlarını etkileyen gerinim ve ısı kaybı gibi mekanizmaları ve bu mekanizmaların alevlerin tutunma özelliklerini nasıl etkilediklerinin karşılaştırmalı bir şekilde incelenip hidrojen katkısının etkisini yorumlamaktır.

Arařtırmalarda Paracık Grnt Hız lm (PIV) teknięi kullanılarak deney dze-
neęindeki hız alanının lm, CH* kimyasal ıřıldama lmleri kullanılarak alev ko-
numunun belirlenmesi gibi deneysel uygulamaların yanında Hesaplamalı Akıřkanlar
Dinamięi zmleri kullanılarak akıř ve reaksiyonlar benzetim yntemleri ile incelen-
miřtir.

1.2 Literatr Arařtırması

Kt cisimler etrafındaki akıř karakteristiklerinin akıřın Reynolds sayısı ile yakından
iliřkili oldukları bilinmektedir. Silindir etrafındaki akıř durumu iin akıř, Reynolds sa-
yısına baęlı olarak laminer kararlı rejim, laminer kararsız rejim ve trblanslı rejim
durumunda olabilir.

izelge 1.1: Silindir etrafındaki akıř iin Reynolds sayısına baęlı olarak akıř karakteris-
tięi.

Reynolds Sayısı $Re = \frac{U_{\infty} d_c}{\mu}$	Aıklama	Davranıř
$Re \leq 0.1$	Silindir n / arkası sanki-simetrik akıř	Reynolds sayısı ok dřktr, atalet etkisi buręalanma etkisi ile karřılařtırılabilir dzeydedir [9]
$0.1 \leq Re \leq 4.5$	Sınır tabaka ayrılması olmadan silindir n / arkası asimetrik akıř	Buręaların tařınımı yayınımlı ile karřılařtırıldıęında artmıřtır, sınır tabakası ayrılması yoktur, silindir etrafındaki akıř silindir arkası blge ile karřılařtırıldıęında silindir n blgede daha hızlıdır [9]
$4.5 \leq Re \leq 35$	Silindire tutunmuř bir geri dnř blgesi ile kararlı bir iz blgesi	Akıřın yavařlamasından kaynaklanan ters basın gradyanı silindir etrafındaki sınır tabakanın ayrılmasına neden olmuřtur ve Reynolds sayısı arttıęa ayrılma blgesi silindirin iki tarafında da silindir n blgeye doęru ilerlemektedir ve kayma blgeleri silindir arkası blgede birleřerek simetrik bir geri dnř blgesi oluřturmaktadır [9].

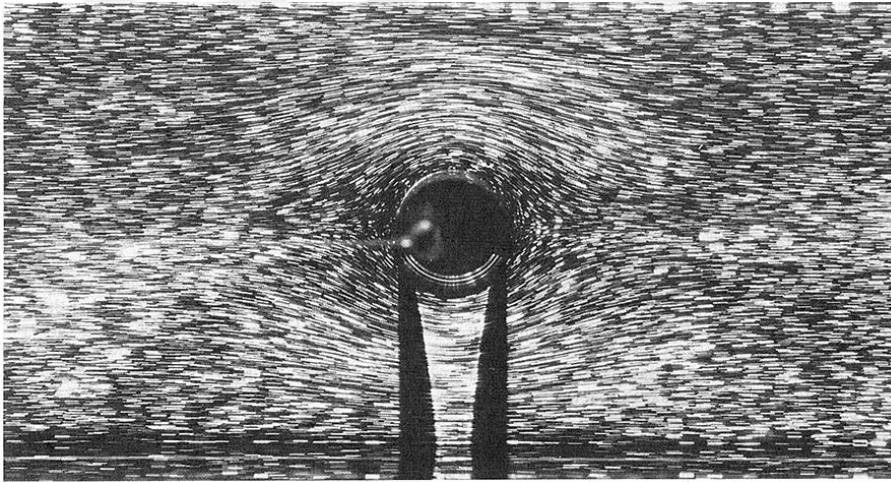
$35 \leq Re \leq 60$ [9] $Re < 49$ [82]	Sınır tabakada küçük düzensizlikler oluşumu ve geri dönüş bölgesindeki küçük bir asimetrinin varlığı [9]. Kararlı geri dönüş bölgesi [82].	Geri dönüş bölgesinin sınırlarında kısa süre var olup yayılan öncül düzensizlikler oluşmaktadır. İz bölgesi salınmaya başlamakta ve Reynolds sayısı yükseldikçe salınımların olduğu bu bölge silindire yaklaşmaktadır [9]. İki simetrik geri dönüş bölgesi oluşmaktadır ve geri dönüş bölgesinin uzunluğu Reynolds sayısı ile orantılıdır [82].
$47 \leq Re \leq 140 - 194$	Laminer Karman burgaç kopması	Geri dönüş bölgesinin silindir arkası bölgesinde kararsızlıklar oluşmaktadır ve bu kararsızlıkların genlikleri Reynolds sayısı ile orantılıdır. Salınımlar periyodik karakteristik göstermektedir [82].
$190 \leq Re \leq 260$	3B iz bölgesi geçiş rejimi	İki belirgin değişiklik oluşmaktadır; Reynolds sayısı $Re = 180 - 194$ civarında mod A şeklinde adlandırılan burgaç düğümleri görülmektedir ve laminer Karman burgaçlarının bozunması ile akış yönünde burgaç çiftleri oluşmaktadır. Reynolds sayısı $Re = 230 - 250$ civarında, mod A'dan akış yönünde daha ince burgaçlardan oluşan mod B'ye enerji transferi gerçekleşmektedir.
$260 \leq Re \leq 1000$	Üç boyutlu ince oluşumlarda düzensizliğin artması	Reynolds sayısı $Re = 260$ olduğunda emme basınç katsayısında Reynolds gerilmelerindeki artıştan kaynaklandığı düşünülen bir pik gözlemlenmektedir. Akış yönünde ince ölçekli üç boyutlu yapılarda düzensizliğin artması ile birlikte baskın kararsızlık laminer burgaç kopması rejimine oldukça yakındır. Reynolds sayısı arttıkça ince ölçekli yapılardaki düzensizlik artmaktadır.

$$1000 \leq Re \leq 20000$$

Kayma tabakası geçiş rejimi

Silindirin iki yanından ayrılan kayma tabakalarında kararsızlıklar gelişmektedir. Türbülanslı rejime geçiş bölgesi Reynolds sayısı arttıkça silindir önü bölgeye taşınmaktadır.

Çizelge 1.1’de sunulduğu üzere akış ilk önce kararlı laminer durumdadır. Reynolds sayısı arttıkça kararsız laminer duruma geçmekte ve silindirden Karman burgaçları kopmaktadır. Reynolds sayısının daha da artması sonucu üç boyutlu kararsızlıklar baş göstermekte ve kayma tabakası türbülanslı rejime geçmeye başlamaktadır. Bu durumun akabinde bu kararsızlıklar büyümekte ve Reynolds sayısının daha da artması sonucu üç boyutlu kararsızlıkların olduğu akış bölgesi silindir önü bölgelere taşınmakta ve sonunda silindir etrafındaki sınır tabakası da türbülanslı rejime ulaşmaktadır.

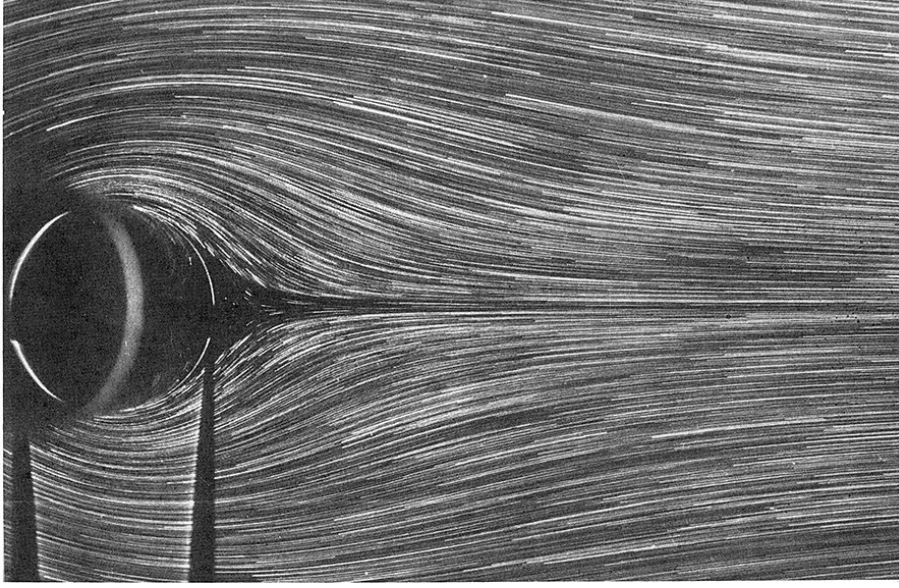


Resim 1.3: Silindir önü / arkası sanki-simetrik akış, $Re < 0.1$ [9].

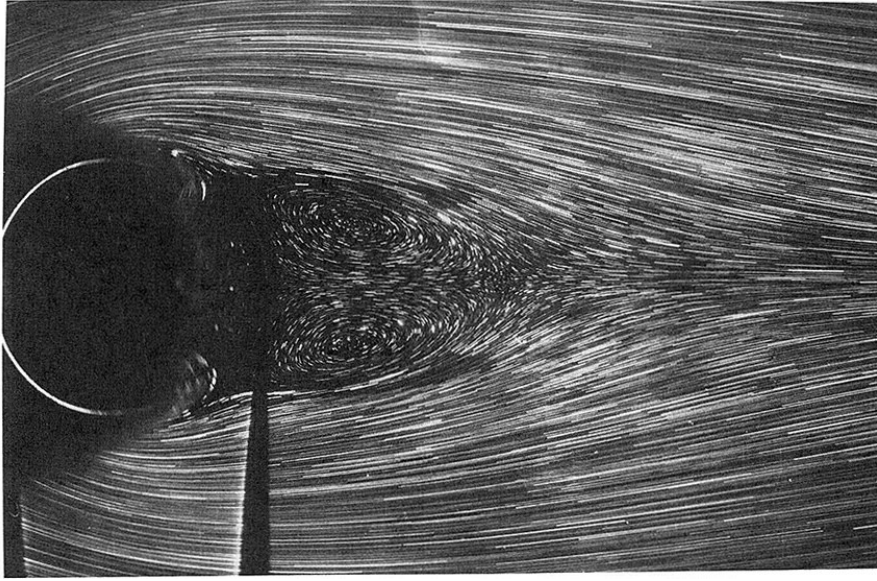
1.2.1 Kuşatmanın küt cisim etrafındaki akışa etkisi

Silindir etrafındaki akışlarda silindir paralel duvarlarla kuşatıldığında, duvarlar burgaç kopma frekanslarını ve silindir üzerindeki kuvvetleri etkiler ve hatta duvarlar arasındaki mesafe yeterince kısa ise burgaç kopmasının tam olarak sönümlenmesine neden olabilir [71].

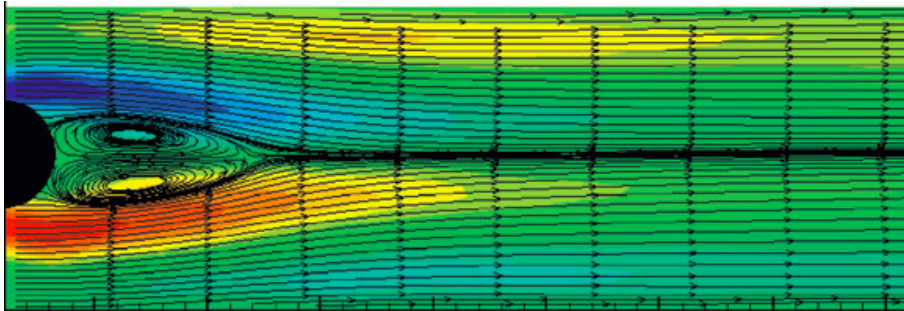
Deneysel ölçümler iz bölgesindeki kararsızlığın serbest akış içindeki silindirler için ölçülen Reynolds sayısı $Re = 47$ değerinden kuşatma oranı $r = 1/3$ olan kuşatılmış silindirler için $Re = 108$ değerine kadar geciktirdiği açıklamıştır [61]. Şekil 1.6 ve 1.1 karşılaştırıldığında kuşatmanın laminer Karman burgaç kopması rejiminden iki ters yönde dönen kararlı burgacın bulunduğu bir rejime taşıdığı gözlemlenebilir.



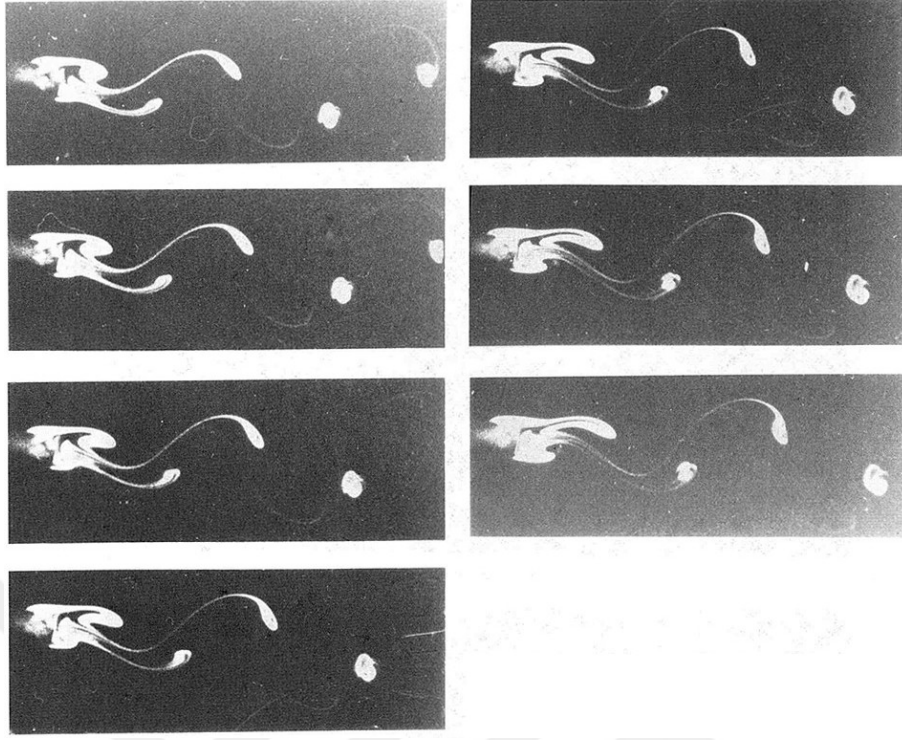
Resim 1.4: Sınır tabaka ayrılması olmadan silindir önü / arkası asimetrik akış: $Re = 5$ [9].



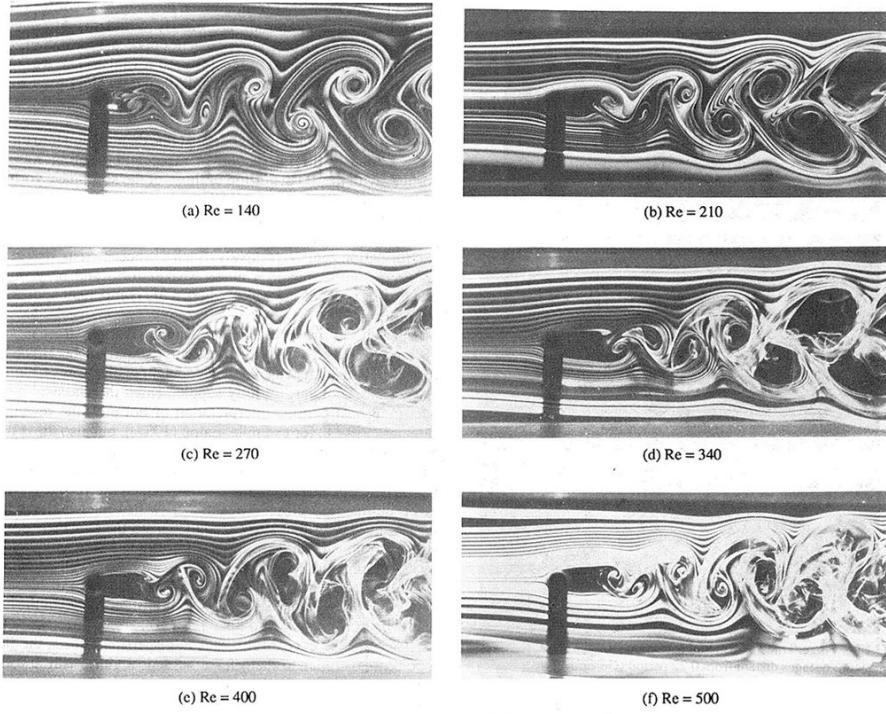
Resim 1.5: Simetrik burgaçlar: $Re = 24$ [9].



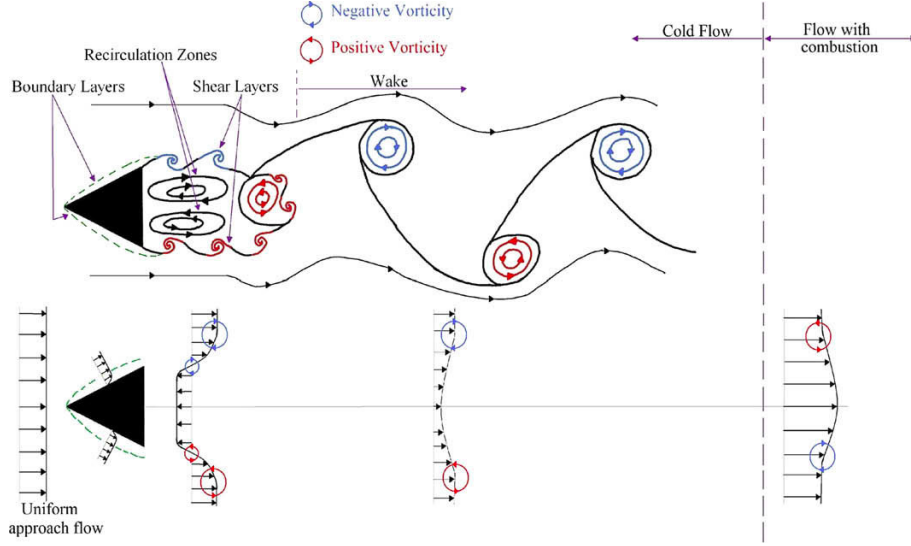
Şekil 1.1: Kuşatma oranı $r = 1/3$ olan kuşatılmış silindir etrafındaki akış, Reynolds sayısı $Re = 100$ [61].



Resim 1.6: Burgaç kopması periyodu boyunca karşıt burgaçlara sarmallanan silindir arkasındaki kayma tabakaları: $Re = 70$ [9].



Resim 1.7: Kopan burgaçların Reynolds sayısına bağlı durumları ve serbest akışta sü-rüklenmeleri [9].



Şekil 1.2: Küt cisim etrafındaki eşisıl akıştaki kilit özellikler. Üst kısımda zamana bağlı akış topolojisi gösterilmiş, alt kısımda ise zaman ortalamalı hız profilleri sunulmuştur. Bunlara ek olarak kuşatılmış tepkimeli durum için iz akışından jet akışına geçişi tanımlayan zaman ortalamalı hız profilleri alt sağ kısımda sunulmuştur [68].

1.2.2 Alevin küt cisim etrafındaki akışa etkisi

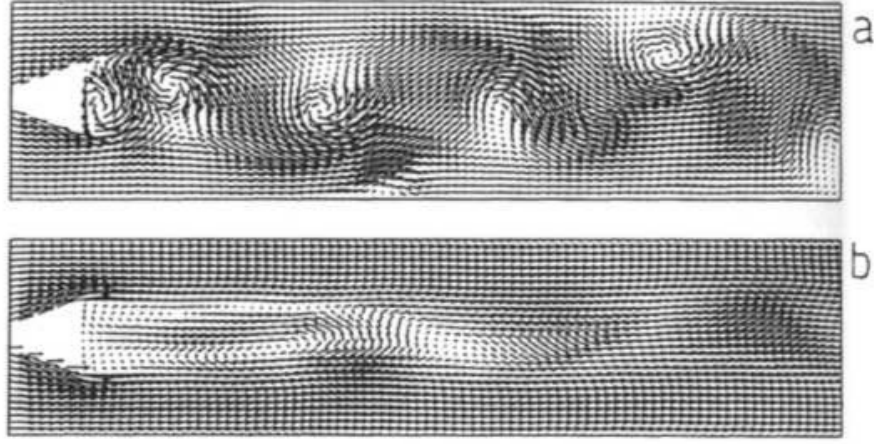
Küt cisimler etrafındaki akış için, akış alanı küt cismin hücum kenarından sınır tabaka ayrılma noktasına kadar uzanan küt cisim etrafındaki sınır tabaka bölgesi, sınır tabaka ayrılma noktası ve geri dönüş bölgesini içeren ayrılmış kayma tabakası bölgesi ve kayma tabakalarının birleşip etkileşime girdiği küt cisim arkasındaki iz bölgesi olarak Şekil 1.2’de sunulduğu gibi gruplanabilir.

Küt cisimler etrafındaki akışta ön karışımly bir alev bulunduğunda akış dinamiği değişmektedir. Literatürde alevin etkisi ile burgaçların güçsüzleştiği ve düzensizleştikleri raporlanmıştır [22]. Aynı zamanda geri dönüş bölgesindeki türbülans seviyelerinin eşisıl durumla karşılaştırıldığında çok düşük seviyelerde kaldığı raporlanmıştır [7] [21]. Bu durum yanmış gazların taze gazlara göre viskozitelerinin çok daha yüksek olmasıdır.

1.2.3 Alev geri tepmesi (Flashback)

Kararlı bir alev için akış hızının bölgesel alev hızına eşit olması gerekmektedir. Eğer bu koşul sağlanmazsa alev hızının akış hızına göre büyüklüğüne bağlı olarak alev taze gazlara doğru ilerleyecek, yada akış tarafından taze gazlardan uzağa süpürülecektir. Bu karşılaştırma alevin tepmesi (flashback) fenomeninin açıklanmasında da faydalıdır. Alevin tepmesi değişik şekillerde olabilir [6], genel olarak;

- Kendiliğinden tutuşma: karışımın kendiliğinden tutuşma zamanı azalır (sıcaklığın artması, eşdeğerlilik oranındaki değişimler vb. nedenlerden dolayı) yada kalım süresi artarsa (akış hızının artması); kendiliğinden tutuşma süresi n-besleme sistemi kalım süresinden daha düşük bir değere ulaşabilir ve bu durum taze gaz-



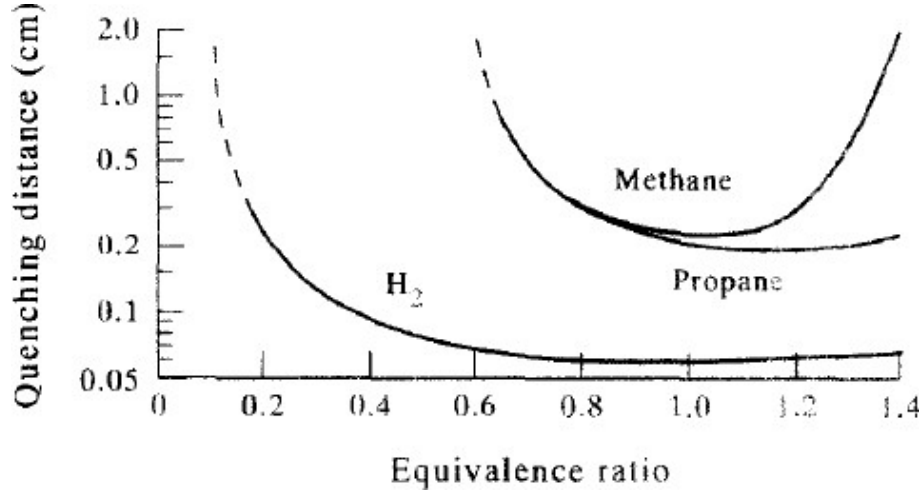
Şekil 1.3: a-eşışıl ve b-tepkimli durumlardaki hız vektörleri [22].

ların yanma odasının içi yerine besleme sistemi içerisinde tutuşmalarına neden olabilir.

- Yanma kararsızlığı: yanma odası içindeki akustik dalgalanmalar hız alanını etkilemektedir, ve bazı durumlarda ortalama hızın üzerine çıkarak akışın geri dönüşüne neden olabilirler [45]. Bu durum alevin bir düşük hız bölgesi üzerinden taze gazlara doğru ilerleyebilmesi imkanını doğurmaktadır.
- Alevin merkez akış içinde ilerlemesi: Bu durum türbülans nedeni ile alev hızının artması yada taze gazların termodinamik özelliklerinde değişiklikler olmasından dolayı alevin geriye yayılımı şeklinde açıklanabilir. Birden çok besleme sistemi içeren modern gaz türbinlerinde, sistemlerden birinde meydana gelen alev geri tepmesi basınç düşümünün artmasına neden olarak hava debisinin düşmesine neden olabilir. Bu durum fakir karışım çalışma koşullarında eşdeğerlilik oranını arttırarak diğer besleme sistemlerinde alev geri tepmesi meydana gelmesi riskini arttırabilir.
- Alevin sınır tabakasında yayılması: Sınır tabakalarda akış hızı yavaştır, dolayısıyla alev hızının akış hızını yenmesi olasılığı oluşmaktadır. Bu fenomen yüksek oranda duvar sıcaklıkları ile ilişkilidir.
- Yanma nedenli girdap bozunumu: bu alev geri tepmesi mekanizması girdap ile dengelenmiş yanma odalarına mahsustur. Eş-basınç ve eş-yoğunluk yüzeyleri arasındaki eksen kaçıklığından kaynaklanan baroklinik tork besleme sistemi çıkışında negatif hız bölgeleri oluşturmakta [66] ve alevin besleme sistemi içine yayılmasına olanak sağlamaktadır.

1.2.4 Sınır tabakada alev geri tepmesi

Sınır tabakalarda kaymazlık koşulundan dolayı hızlar düşmektedir. Bu durum bölgesel alev hızının akış hızından daha yüksek olması ve alevin yayılabilmesi ihtimalini beraberinde getirir. Bu duruma karşı olarak soğuk duvarlar yakınındaki ısı ve radikal kayıplarından dolayı bölgesel alev hızı düşmektedir. Bu durum sönme mesafesi kavramıdır.



Şekil 1.4: Hidrojen, metan ve propan alevlerinin sönme mesafeleri [12].

Aynı zamanda sınır tabakalardaki hız gradyanları alev üzerinde gerinme etkisine neden olacak ve alev hızlarını değiştirecektir.

1.3 Yakıt Olarak Hidrojen

Küresel enerji talebi yükseldikçe, daha temiz ve yenilenebilir yakıtlara olan ihtiyaçlar önemli bir problem haline gelmektedir. Kullanılan enerjinin %80'e yakını yanma olarak adlandırığımız kimyasal tepkimelerden karşılanmakta ve bu eğilimin yakın zamanda değişmesi beklenmemektedir [36]. CO_2 , CH_4 ve NO_2 gibi sera gazlarının emisyonları endüstriyel devrimden bu yana katlanarak artmaktadır [32]. Bu durumda karbon içermeyen yakıtların enerji ihtiyaçlarının karşılanmasında kullanılması bir çözüm olarak düşünülebilir.

Hidrojen düşük molekül ağırlığı, yüksek yayılım katsayısı, yüksek ısı iletkenlik ve düşük viskoziteye sahip bir enerji taşıyıcısı olmasının yanında yüksek alev hızı, küçük sönme mesafesi ve düşük tutuşma enerjisi gibi ilgi uyandırıcı yanma özellikleri barındırır [69]. Pratikte kullanılan alternatif yakıtlar arasında hidrojen, özellikle fosil yakıtlara katıldığında en geniş faydalı özellikleri taşımaktadır [75]. Hidrojen aynı zamanda zehirli ve kanserojen değildir [55].

Hidrojen mühendislik sistemlerinde şu şekillerde kullanılmaktadır:

- Hidrojen yakıtlı motorlar
- Yakıt pilleri
- Hidrojen katkılı yakıtlar
- Sentez gazı

Hidrojen yakıt olarak kullanıldığında bir çok avantajlı özelliğe sahiptir, bunlar aşağıda sunulduğu gibi özetlenebilir:

- Yenilenebilir yöntemlerle üretilebilir
- Karbon emisyonu yoktur
- Kütleli enerji yoğunluğu yüksektir
- Alevlenebilirlik sınırları geniştir

- Gerinim etkisine dayanıklıdır ve sönme gerinim oranı yüksektir
- Yayınım hızı yüksektir [55]
- Tutuşma enerjisi düşüktür
- Sönme mesafesi düşüktür

Bu iyi özelliklerle birlikte hidrojenin yakıt olarak kullanılması beraberinde bazı dezavantajları getirebilir:

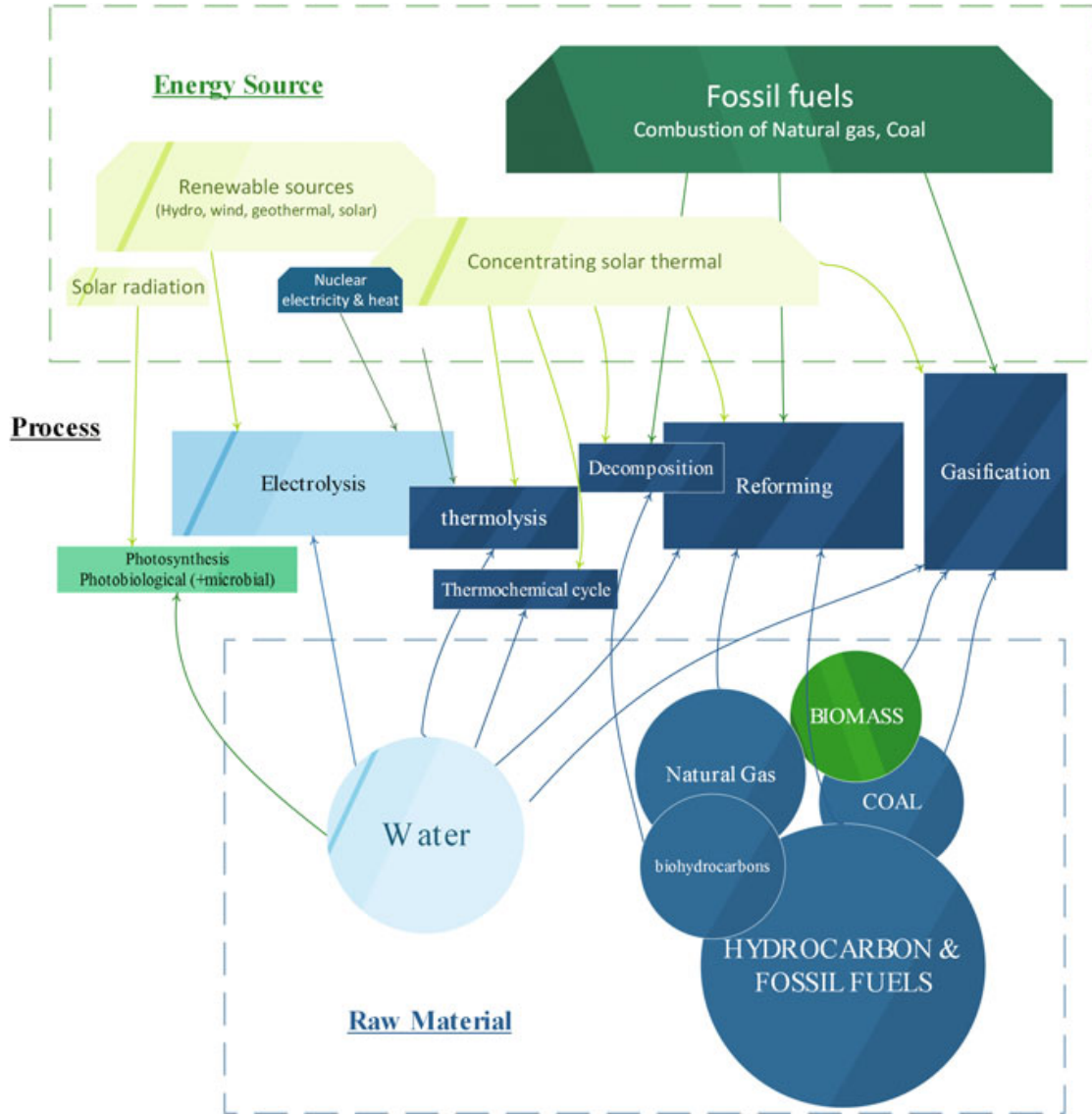
- Taşınımı ve depolanması lojistik nedenlerden dolayı zordur [13]
- Bazı durumlarda tehlikeli olabilir [58] [55]
- Hacimsel enerji yoğunluğu düşüktür
- Alev geri tepmesi olasılığını arttırabilir [13]
- Parlama rejiminden patlama rejimine geçişi nispeten daha olasıdır
- Muhtemel istenmeyen kendiliğinden tutuşma
- Doğal bir kaynak olarak bulunmadığından üretilmesi gerekmektedir

Hidrojen yakıt olarak kullanıldığında bir çok faydalı özelliği vardır. Bu özelliklerden bazıları fosil yakıtlarla karşılaştırılmalı olarak çizelge 1.2’de sunulmuştur.

Çizelge 1.2: Hidrojenin fosil yakıtlarla karşılaştırmalı yanma özellikleri [17].

Özellik	Hidrojen	CNG	Benzin	Metan
Yoğunluk (kg/m^3)	0.0824	0.72	730	0.651
Alevlenebilme sınırları (havadaki % hacim)	4-75	4.3-15	1.4-7.6	5.5-15
Alevlenebilme sınırları (ϕ)	0.1-7.1	0.4-1.6	~0.7-4	0.4-1.6
Havadaki kendiliğinden tutuşma sıcaklığı (K)	858	723	550	813
Havadaki minimum tutuşma enerjisi (mJ)	0.02	0.28	0.24	0.29
Alev hızı (m/s)	1.85	0.38	0.37-0.43	0.4
Adyabatik alev sıcaklığı (K)	2480	2214	2580	2226
Sönme mesafesi (mm)	0.64	2.1c	~2	2.5
Stokiyometrik yakıt/hava kütleli oranı	0.029	0.069	0.068	0.058
Stokiyometrik hacim oranı (%)	29.53	9.48	~2	9.48
Alt ısı değer (MJ/m^3)	9.9	32.6	42.0-44.0	32.6
Alt ısı değer (MJ/kg)	119.7	45.8	44.79	50
Yanma ısısı (MJ/kg hava)	3.37	2.9	2.83	2.9

Hidrojen fosil yakıtlar gibi hazır olarak bulunmamaktadır, pratik sistemlerde kullanılmadan önce üretilmesi gerekmektedir. Hidrojen doğalgazın buhar reformasyonu ile üretilir, fakat bu işlemler sırasında CO_2 gazı da açığa çıkmaktadır. Aynı zamanda hidrojen biyokütle gazlaştırması ve buhar reformasyonu, biyolojik organizmalar kullanılarak, elektroliz gibi yenilenebilir kaynaklar ve yöntemler kullanılarak da üretilir [28]. Şekil 1.5’de hidrojen üretimi için kullanılan yöntemler sunulmuştur.



Şekil 1.5: Hidrojen üretiminde kullanılan işlemler ve kaynaklar [13].

1.3.1 Hidrojenle zenginleştirme

Hidrojenle zenginleştirme, tipik olarak noksansız yanmaya yaklaşma, kararlılığın ve fakir karışımlarla çalışabilme yeteneğinin iyileştirilmesi amaçlarıyla hidrojenin diğer yakıtlara eklenmesidir. Hidrojenle zenginleştirme havacılıkta ve elektrik üretiminde kullanılan gaz türbinleri, pistonlu motorlar ve çeşitli brülörler gibi bir çok mühendislik sistemine uygulanabilir. Hatta hidrojen-doğal gaz karışımlarının araştırıldığı bazı çalışmalar laboratuvar testlerinde başarılı olduktan sonra yol testlerine kadar ilerlemişlerdir [23].

Hidrojenle zenginleştirmenin benzin [19, 40–42, 52, 55], dizel [29, 70], doğall gaz [14, 15, 51, 52, 54] ve kerosen [8, 20] gibi bir çok birincil yakıtta uygulaması vardır.



Resim 1.8: Hidrojen-doğall gaz karışımlarının yol testlerinde kullanılan otobüs [23].

Hidrojenle zenginleştirme, yanma hızlarını arttırmakta [15, 41], çevrimler arası farklılıkları [35, 52, 53] ve kısımla kayıplarını azaltmaktadır. Aynı zamanda fakir karışımla çalıştırılabilme özelliğini iyileştirdiğinden, özgül ısıl oranını arttırarak, daha yüksek sıkıştırma oranlarına olanak sağlamakta ve ısıl verimi arttırmaktadır [52]. Ayrıca hidrojenle zenginleştirmenin noksansız yanmaya yardım ederek yanmamış hidrokarbon emisyonlarının ve fakir karışımlarla çalışabilme yeteneğini iyileştirmesi sonucunda CO and NO_x emisyonlarının azalmasını sağlaması da önemli faydalı özelliklerindedir. Hidrojenle zenginleştirmenin bütün bu özellikleri enerji üreten sistemlerin verimlerinin artmasına olanak sağlayabilir.

Hidrojenle zenginleştirme aynı zamanda kimyasal radikal üretim hızlarını arttırarak alev çekirdeklenme süresini kısaltır, dolayısı ile yanma hızını arttırır [13]. Bunların yanında hidrojenle zenginleştirilmiş yakıtların daha düşük fakir alevlenebilme sınırlarına sahip olmasından dolayı aşırı fakir karışımlarla yanma sistemlerinin çalıştırılabilmesine olanak sağlamakta ve NO_x emisyonlarının azaltılmasına olanak sağlamaktadır [67]. Ek olarak hidrojenin karbon içermemesinden dolayı seyreltme etkisi ve noksansız yanmaya olan katkısı nedeni ile CO and CO_2 emisyonlarının düşürülmesinde de etkilidir. Düşük miktarda eklenen hidrojen bile pistonlu motorların performansını büyük ölçüde iyileştirmektedir.

Hidrojen katkılı yakıtların geliştirilmesi, hidrojenin kömür gazlaştırılması ve akışkan yatak reaktörleri gibi sistemlerin çıktılarında hazır olarak bulunması ve bu gazların düşük maliyetli bir enerji kaynağı olarak kullanılabilmesi imkanından dolayı önemlidir. Hidrojen katkısı aynı zamanda egzoz gazı ve benzin reformasyonunda da uygulanmaktadır. Benzin ve egzoz gazının bir kısmı endotermik katalitik reformasyon üniteleri ile hidrojen üretmek üzere işlendikten sonra ürünler emme manifolduna beslenmektedir [19].

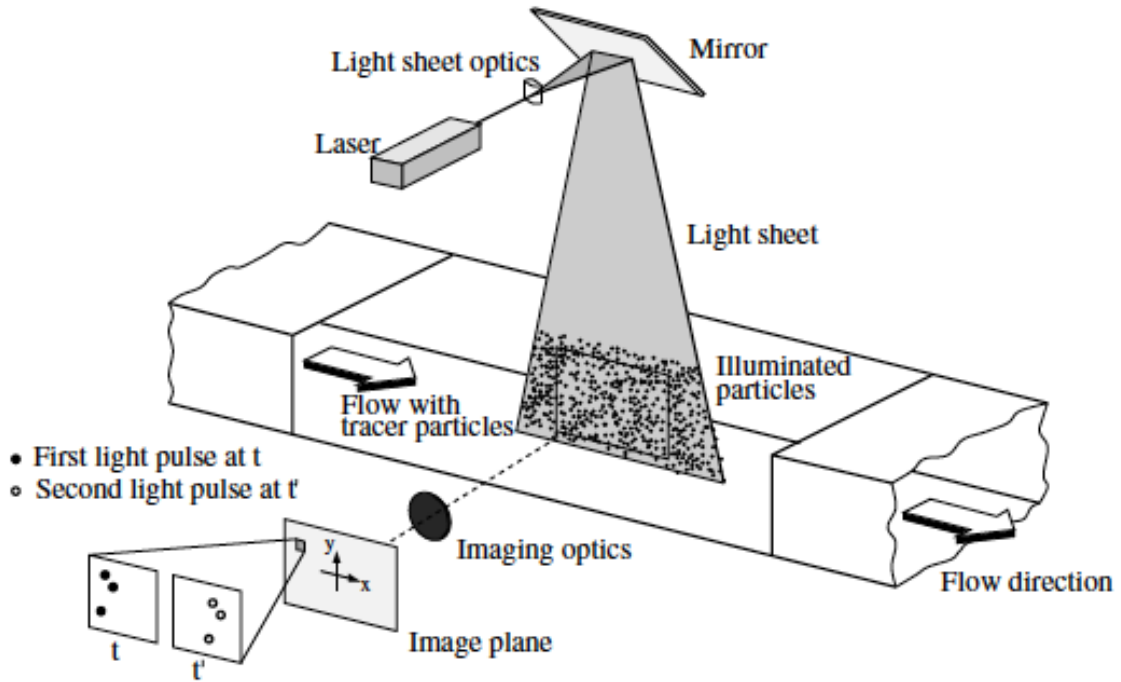
Bunun yanında var olan sistemlerin hidrojen katkılı yakıtlar kullanılarak çalıştırılması için bazı değişikliklerin yapılması gerekebilir. Bunlardan bazıları hidrojenin alev hızının yüksek olmasından kaynaklanan yükselen alev geri tepme olasılığını dengelemek için manifoldlara uygulanması gerekebilecek değişiklikler ve eğer sıvı halde depolanması düşünülüyorsa yanma odasına girmeden önce buharlaşabilmesi için yakıt besleme sistemine yapılması gerekebilecek değişiklikler [11] olarak örneklenebilir.

Hidrojen katkısı hava araçlarında da araştırma alanları bulabilmiştir. Snecma motoru üzerinde yapılan bir araştırma sonucunda hidrojenin motor performansına katkısı vurgulanmış ve özellikle kısmi önkarişimli bir biçimde kerosen ile birlikte yanma odasına enjekte edildiğinde bir hidrojen pilot alevi oluşturduğu ve fakir sönme sınırını düşürdüğü saptanmıştır [8]. Ek olarak laboratuvar ölçekli bir girdap ile dengelenmiş yanma odasında NO_2 emisyonlarını olumsuz şekilde etkilemeden CO emisyonlarının azaltılabileceği gözlenmiştir [67]. Bunun yanında %12 gibi düşük değerlerde eklenen hidrojenin daha kısa ve dayanıklı bir alev oluşturduğu paylaşılmıştır [67]. Gaz türbinleri üzerinde yapılan çalışmalar sonucu gaz türbinlerinin sıvı yakıtlar yerine hidrojen yakabilecek şekilde yenilenebileceği araştırılmıştır [28].

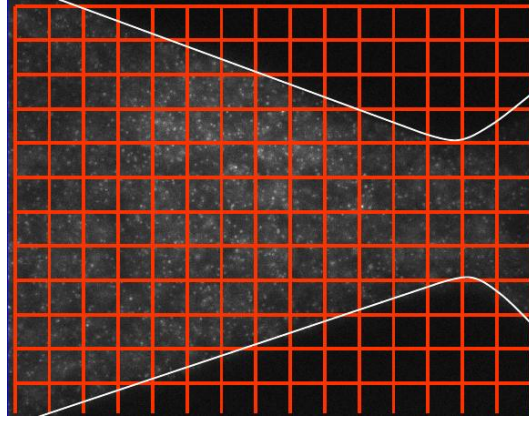
Hidrojen aynı zamanda askeri hava araçlarında da performans iyileştirmeleri sunabilir. Sıvı halde depolandığında yanma özelliklerinin yanında süpersonik yanmalı ramjet (scramjet) motorların yüksek hızda performanslarını büyük ölçüde etkileyen kompresör çıkış sıcaklığının düşürülerek emme havasının soğutulmasında kullanılabilmesi de önemli bir performans katkısı olabilir [78]. Hidrojen ile soğutmanın diğer bir uygulama alanı da motor bileşenlerinin soğutulması [56] ve hava araçlarının kontrol yüzeylerindeki akışın laminarlaştırılması kontrolü ile sürüklenme kuvvetlerinin düşürülmesinde kullanılması [62] olarak düşünülmektedir.

2. PIV

PIV, parçacık görüntüleme ve görüntü işleme yöntemlerinin kullanılarak ortalama parçacık hareketinden akış hızının elde edildiği, dolaylı ve nicel bir akış hızı ölçüm tekniğidir. Geleneksel PIV sistemlerinde akış, özel lensler kullanılarak düzlemsel bir lazer yaprağı üreten yüksek enerjili bir lazer sistemi tarafından aydınlatılan izleyici parçacıklar tarafından tohumlanır. İzleyici parçacıklardan saçılan ışık genellikle dijital kameralardan oluşan görüntü kaydedicilerle kaydedilir. İki boyutlu parçacık deseni hareketini içeren bu görüntüler daha sonra bir bilgisayara aktarılarak art işleme teknikleri ile ortalama parçacıkların hareketleri değerlendirilir. Art işleme teknikleri genellikle görüntülerin sorgulama penceresi olarak adlandırılan küçük parçalara bölündüğü ve ardışık görüntülerin karşılaştırılarak akışı tamamen takip ettiği varsayılan izleyici parçacıkların ortalama deplasman alanının çıkarıldığı adımlar içerir.



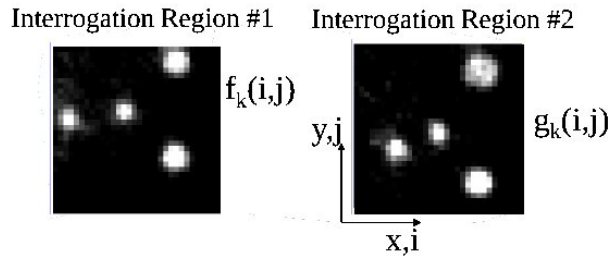
Şekil 2.1: Geleneksel bir PIV sisteminin şematik temsili [59].



Şekil 2.2: Lüle içi akışın sorgulama pencerelerini gösteren PIV görüntüsü [3].

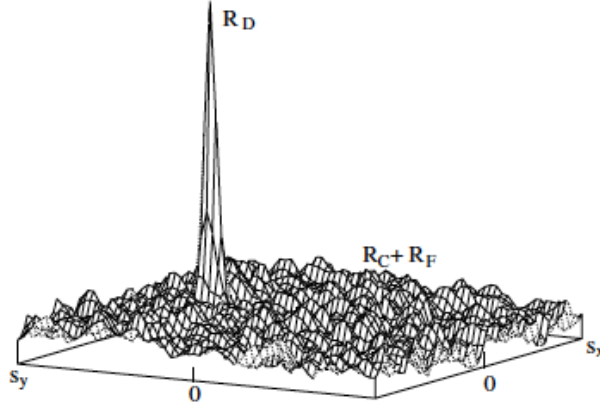
t_0 ve $t_0 + \Delta t$ zamanlarında kaydedilen görüntüler birbirleriyle karşılaştırılarak Δt zaman aralığında parçacıkların konumlarının ne kadar değiştiği değerlendirilir. Bu değerlendirme, görüntülerden kesilen ve sorgulama penceresi olarak adlandırılan küçük parçaların, istatistiki metotlar olan çapraz korelasyon algoritmalarıyla işlenerek, parçacıkların sorgulama penceresine bağlı olarak nasıl ilerlediklerinin incelenmesi ile yapılmaktadır. PIV istatistiki bir metottur, yani PIV yönteminde bireysel parçacıkların hareketi incelenmemektedir, bunun yerine sorgulama penceresi içerisindeki ortalama parçacık deseninin doğrusal hareketi incelenir. Bu yöntem PIV tekniğine gürbüzlük sağlar. Ham görüntü verisi küçük sorgulama pencerelerine bölünür ve sonrasında bu sorgulama pencereleri çapraz korelasyon algoritmaları ile işlenir. Görüntünün sorgulama pencerelerine bölünmesinin temsili bir örneği Şekil 2.2’de sunulmuştur.

Ardından bu görüntüler ardışık görüntü çiftinin Δt zaman aralığı sonrasında kaydedilmiş eşi ile karşılaştırılmaktadır. Parçacıkların temsili hareketi Şekil 2.3’de sunulan farklı zamanlarda alınmış iki görüntü parçasından gözlemlenebilir.



Şekil 2.3: Aynı konumda farklı zamanlarda alınmış parçacıkların hareketini gösteren iki görüntü [3].

Görüntüler basitçe açıklamak gerekirse sorgulama pencerelerinin ardışık görüntü çiftinden seçilen arama pencereleri ile çarpılmalarına benzetilebilecek çapraz korelasyon algoritmaları ile karşılaştırılmaktadır. Çarpım iki görüntü parçasındaki parçacıklar üst üste geldiklerinde büyük bir değere, parçacıklar fon gürültüsüne denk geldiklerinde küçük bir değere sonuç verecektir. Sorgulama penceresi arama penceresi üzerinde gezdirilirken korelasyon hesaplanır. Belirgin bir bağlı kayma için parçacıklar üst üste gelecek korelasyon düzleminde bir pik oluşturacaklardır. Bu pikin merkezden uzaklığı parçacık deseninin sorgulama penceresinde bağlı olarak ne kadar hareket ettiğini temsil eder. Korelasyon pikinin temsili bir örneği Şekil 2.4’de sunulmuştur.

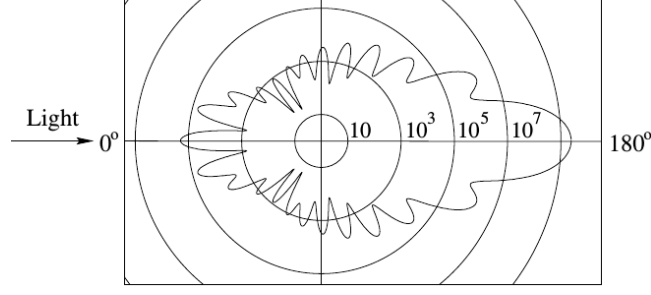


Şekil 2.4: Korelasyon fonksiyonundaki pikin temsili görüntüsü [81].

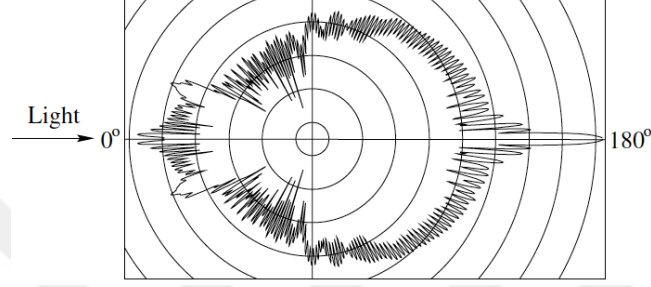
Akış genellikle zeytinyağı, mineral yağları ve su gibi sıvı yada polistiren ve alüminyum tanecikleri gibi katı izleyici parçacıklarla tohumlanmaktadır. PIV ölçümlerinde akış hızının parçacık hızına doğrudan bağlantılı olduğu varsayımından dolayı, bu varsayımın ve parçacıkların akışı ne durumda mükemmel olarak takip edemeyebileceğinin nedenleri araştırılmalıdır. Parçacıkların akışı iyi şekilde takip edemeyebileceği durumlar şu şekilde özetlenebilir:

1. Parçacık ataleti: parçacıklar genel olarak akışı takip etse bile, akıştaki yüksek ivmelenme bölgelerinde parçacık cevap süreleri akışla kıyaslandığında çok daha yavaş olabilir. Hava deniz seviyesi ve $15^{\circ}C$ sıcaklıkta $1.225kg/m^3$ yoğunluğa sahiptir. Buna karşın yağ damlacıklarının yoğunlukları $800 - 920kg/m^3$ civarındadır, ve hava ile karşılaştırıldıklarında yoğunlukları arasındaki fark yadsınamayacak kadar büyüktür. Bu sebepten dolayı yüksek ivmelenmenin olduğu bölgelerde parçacıklar aşmalar yaparak akışı mükemmel bir şekilde takip etmeyebilir.
2. Çökme: parçacıklar belirli bir boyuttan daha büyük olduklarında yer çekiminden etkilenerek deney düzeneğinin dibine doğru batabilir ya da yoğunluk farkına bağlı olarak deney düzeneğinin yüzeyine yükselebilirler.
3. Brown hareketi: parçacıkların rastgele ısıl titreşimleri bir gürültü kaynağı olarak kendini gösterip ölçüm kalitesini etkileyebilirler.
4. Katı sınırlar etrafındaki parçacıklar (yüksek hız gradyanı): katı bir sınırın yüzey normali boyunca sınır tabakada fevkalade bir ivmelenme vardır. Bu hız gradyanından dolayı parçacıklar dönmeye başlayabilir ve bu dönme sonucu oluşan kuvvetler parçacıkların duvardan uzaklaşmalarına neden olarak duvar sınırlarında parçacıkların bulunmadığı bölgeler oluşturabilir. Bu kuvvetler kayma tabakası kaynaklı kaldırma kuvveti olarak adlandırılmaktadırlar ve parçacıkların boyutları ile orantılı olduklarından sınır tabakanın duvara yakın bölgelerinde ölçüm alınmak isteniyorsa daha küçük parçaların seçilmesi gerekebilir. Bu durumdaki ampirik kural kaliteli ölçümlerin duvardan parçacıkların 10 katı kadar uzaklıkta yapılabileceği yönündedir.

Diğer bir yönden eğer akışın tohumlanmasında sıvı parçacıklar kullanılıyorsa, parçacıkların buharlaşması gibi daha farklı problemler açığa çıkabilir. Örneğin bu çalışmada



Şekil 2.5: 1 μm çapındaki yağ damlacığının ışık saçınımı [59].



Şekil 2.6: 10 μm çapındaki yağ damlacığının ışık saçınımı [59].

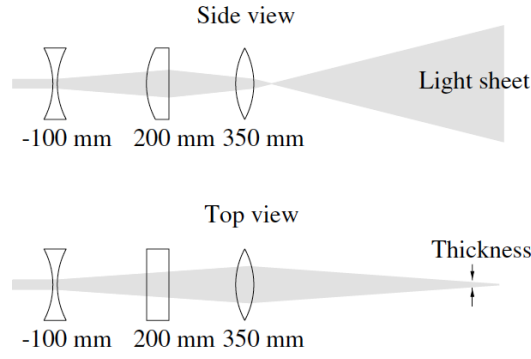
kullanılan deney düzeneğinde zeytinyağı damlacıkları alev bölgesinde buharlaşıp yandığından alev ve alev sonrası bölgelerinde ölçümler mümkün olmamaktadır. Aynı zamanda zeytinyağı deneysel düzenek yüzeylerini ince bir film şeklinde kaplayarak yüzey koşullarını değiştirebilir.

2.1 Parçacıklardan Saçınan Işık (Mie Rejimi)

PIV yönteminde izletici parçacıklardan saçılan ışık kameralarla kaydedilip işlendiğinden, aydınlatma PIV sisteminin önemli bir parçasını oluşturmaktadır. Eğer parçacıklar mikron mertebesinde ise boyutları aydınlatmada kullanılan ışığın dalga boyundan daha büyük olduğundan saçınım Mie rejimindedir. Şekil 2.5 ve 2.6'de Mie rejimi için saçınan ışığın şiddetleri sunulmuştur. Lazer ışını sol taraftan sıfır derece açı ile gelmekte ve grafiklerdeki çizgiler damlacıktan saçınan ışığın aydınlatma açısına bağlı olarak değişen gözlemci açısına göre saçınım şiddetini göstermektedir. PIV sistemlerinde genellikle kamera akışla 90° açı yapacak şekilde yerleştirilir. Bu açı saçınım verimi açısından çok iyi bir değer olmamasına karşın kameranın odak düzleminin lazer yaprağı ile hizalanmasına imkan vererek odak düzlemi dışında kalan parçacıklardan saçınan ışığın engellenmesine yardımcı olduğu için iyi bir tercih olarak kabul edilip, sıklıkla kullanılmaktadır.

2.2 Işık Kaynakları, Aydınlatma ve Lazerin Optik İşlenimi

Bu çalışmada kullanılan deney düzeneğinde ve geleneksel PIV sistemlerinde sıklıkla kullanılan ışık kaynağı çeşitlerinden biri 532 ηm dalga boyunda yeşil lazer ışını üreten



Şekil 2.7: Lazerden çıkan sütun biçimindeki lazer ışınının optik işlenimi [59].

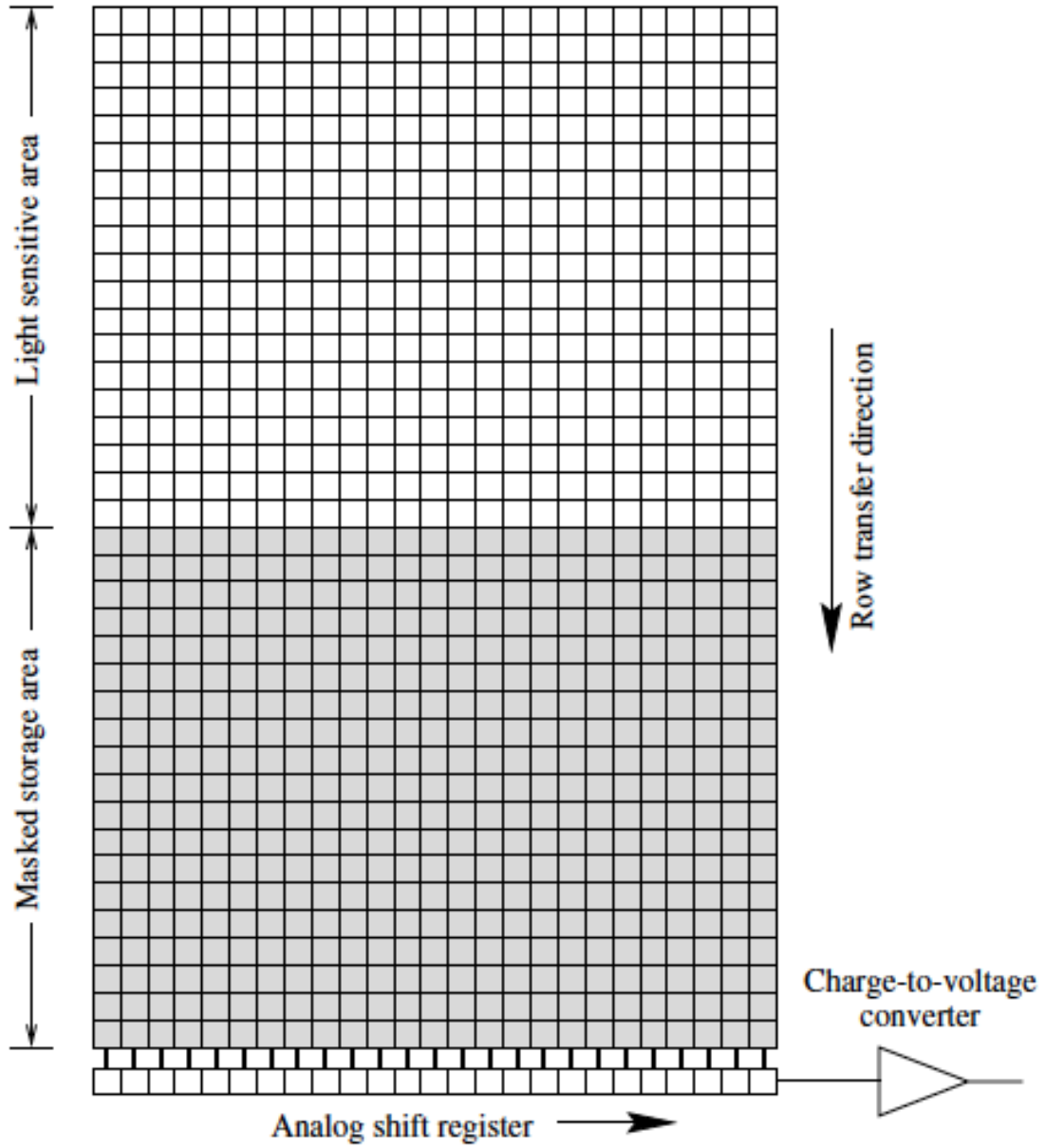
Nd:YAG lazerlerdir. Yeşil lazer ışınının tercih nedenlerinden biri olarak kameraların bu dalga boyundaki ışıklara oldukça hassas davranmalarındadır. Nd:YAG lazerden çıkan lazer ışını sütun biçiminde olduğundan optik yöntemlerle işlenerek kameranın odak düzlemi ile hizalanmış bir lazer yaprağı biçimine dönüştürülmesi gerekmektedir.

2.3 Görüntülerin Kaydedilmesi ve Kameralar

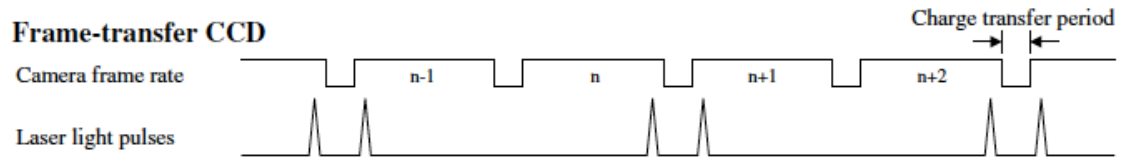
Günümüzde görüntüler elektronik kameralarla kaydedilmektedir. En sık biçimde kullanılan kameralar CCD kameralardır. Bu kameralarda bir foton piksel alanına çarptığında bir elektron üretilir ve bu elektronlar yük sepetlerinde saklanır. Bir piksel 20000 civarında elektron barındırabilir. Elektronlar piksellerde biriktirilir ve sonrasında okuma zamanı geldiğinde bütün elektronlar sayılır. Kameraların önemli özellikleri spektrum tepkisi, konumsal çözünürlük, zamansal çözünürlük ve dinamik aralıktır. Spektrum tepkisi kameranın belirli dalga boyundaki ışıklara nasıl tepki vereceğini belirtir. Dinamik aralık ölçebildiği en parlak ışığın kameranın tepki verebileceği en loş ışığa oranıdır. Bunların yanında kameranın ısıl gürültüye cevabı da önemli özellikleri arasında sıralanabilir.

CCD kameralar analog cihazlar gibi düşünülebilir. Yük sepetleri piksellere çarpan foton sayısı ile orantılı sayıda elektronlar içerir ve sonrasında bu elektronlar her piksel için sayılır. Analogdan dijitale çevrimin gerçekleştiği bu sayma aşaması okuma aşaması olarak adlandırılır ve kameranın hangi sıklıkta fotoğraf çekebileceğini belirleyen önemli bir parametredir. Fotoğraf karesi taşınımı (frame transfer) CCD kameralarda bu elektronlar piksellerden alınarak basitçe farklı bir sıra piksellerden oluşan depolama alanlarına aktarılmaktadır. Bu taşıma okuma aşamasından kısa olduğundan kamera bir sonraki kare için çok daha çabuk müsait duruma geçebilmektedir. Sonrasında bu yükler ayrı ayrı okunarak kameranın çok daha küçük zaman aralıklarında çalışması sağlanabilmektedir. Şekil 2.8'de fotoğraf karesi taşınımı CCD kameranın çalışma prensibinin şematik temsili sunulmuştur.

Birinci lazer vuruşu sırasında kamera kaydetmektedir. Daha sonra kamera üretilen elektronları depolama alanlarına aktarılır ve kamera tekrar kayıt için hazırlanır. Akabinde ikinci lazer vuruşu gerçekleşir ve kamera bu lazer vuruşu sırasında damlacıklardan saçılan ışığı da kaydeder. Bu iki lazer vuruşu arasındaki zaman aralığı Şekil 2.9'da sunulan PIV görüntüleri arasındaki zaman aralığıdır.



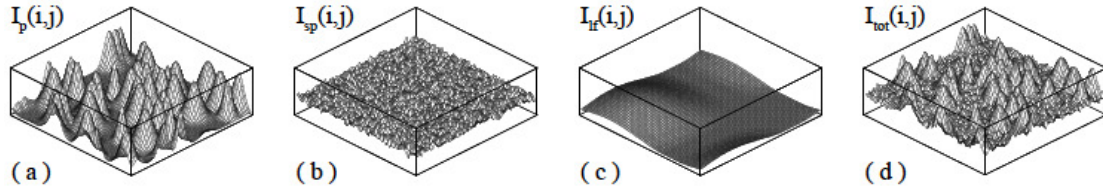
Şekil 2.8: Fotoğraf karesi taşınımlı (frame transfer) CCD kameralarda sensör dağılımı [59].



Şekil 2.9: Fotoğraf karesi taşınımlı (frame transfer) CCD kameralarda zamanlama diyagramı [59].

2.4 Sayısallaştırılmış Parçacık Görüntüsü

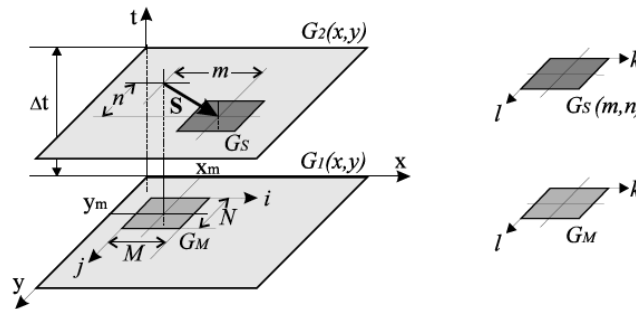
PIV görüntülerinde bir çok bilgi üst üste birleştirilmiş durumdadır. Yani görüntüler yalnızca parçacıklardan saçınan ışığı değil, aynı zamanda münferit piksellerdeki rastlantısal gürültüyü, ısı radyasyonunun piksellerde elektronlara çevrilmesi ile meydana gelen ısı radyasyon gürültüsünü, deneysel düzeneğin duvarlarından yansıyan ışığın piksellere çarparak parlak bölgeler oluşturması yada tekdüze olmayan aydınlatmadan meydana gelen düşük frekanslı fon gürültüyü içerir. Temsili bir görsel açıklama Şekil 2.10'de sunulmuştur.



Şekil 2.10: PIV görüntüsündeki parlaklık dağılımı; parçacıklardan saçınan Gauss dağılımlı ışık I_p , münferit piksellerdeki rastlantısal gürültü I_{sp} , düşük frekanslı fon gürültü I_f , tümleşik parlaklık dağılımı I_{tot} [3].

2.5 Görüntü Analizi

PIV tekniğinde münferit parçacıkların hareketlerinin yerine, parçacık deseninin ortalama hareketi incelenir. Görüntüler sorgulama pencerelerine bölündükten sonra bu sorgulama pencereleri akabindeki resimdeki arama pencereleri ile karşılaştırılarak parçacık deseninin hareketi irdelenir. Temsili bir örnek Şekil 2.11'de sunulmuştur.



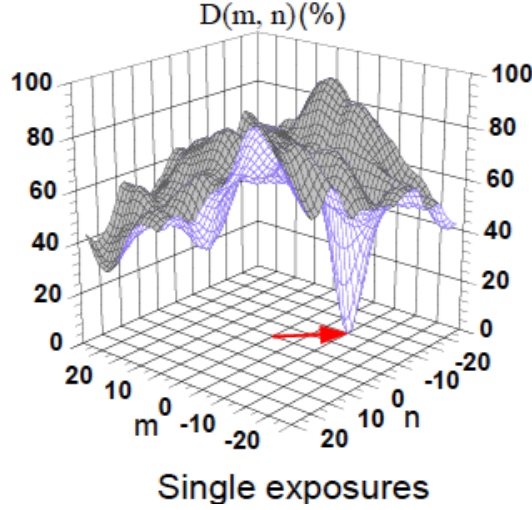
Şekil 2.11: PIV yöntemindeki görüntü işleme adımı; gri-skala yoğunluklardan oluşan G_1 görüntüsü ve akabindeki G_2 görüntüsü [3].

Korelasyonda kullanılacak alanın tanımlanmasında 2.1 ve 2.2 denklemleri kullanılabilir.

$$G_M(k,l) = G_1 \left(x_m - \frac{M}{2} + i, y_m - \frac{N}{2} + j \right) = g_1(i,j) \quad (2.1)$$

$$G_S(k,l) = G_2 \left(x_m - \frac{M}{2} + i + m, y_m - \frac{N}{2} + j + n \right) = g_2(i+m, j+n) \quad (2.2)$$

Denklem 2.1 ve 2.2'de sunulan x_m ve y_m noktaları, sorgulama pencerelerinin merkezlerine denk gelen ölçüm noktalarındaki x ve y konumlarıdır. Sorgulama penceresinin



Şekil 2.12: En küçük ikinci dereceden fark [3].

boyutları M ve N ile tanımlanmış olup, Şekil 2.11'deki koyu gri alanlara denk gelmektedir. i ve j koordinatların indisleridir.

Karşılaştırılan iki görüntü arasındaki karesel ortalama fark (RMS difference), piksel piksel hesaplanan parlaklık farkının karelerinin tüm pikseller boyunca toplamının karekökü olarak tanımlanabilir. Ardından sorgulama penceresi ikincil görüntü üzerinde gezdirilerek her bir konum için karesel ortalama fark hesaplanıp iki görüntünün birbirine en çok benzediği konum elde edilebilir.

$$\vec{V}_M = \{G_M(k, l), k = 0, 1, 2 \dots M-1, l = 0, 1, 2 \dots N-1\} \quad (2.3)$$

$$\vec{V}_S = \{G_S(k, l), k = 0, 1, 2 \dots M-1, l = 0, 1, 2 \dots N-1\} \quad (2.4)$$

$$|\Delta \vec{V}(m, n)| = |\vec{V}_M - \vec{V}_S| = \sqrt{\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} [G_M(k, l) - G_S(k, l)]^2} \quad (2.5)$$

$$= \sqrt{\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} [g_1(i, j) - g_2(i+m, j+n)]^2}$$

$$D(m, n) = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} [g_1(i, j) - g_2(i+m, j+n)]^2 \quad (2.6)$$

Denklem 2.6'de sunulan $D(m, n)$ en küçük ikinci dereceden fark olarak adlandırılır ve G_S 'in G_M 'e ne kadar benzediğinin bir ölçütüdür. $D(m, n)$ ne kadar küçükse iki görüntü arasındaki benzerlik o kadar fazladır. En küçük ikinci dereceden farkın temsili bir örneği Şekil 2.12'de sunulmuştur.

Bu yöntem hesaplama açısından masraflı olduğu için yavaş çalışan bir yöntemdir, fakat

daha hızlı yöntemler de mevcuttur. Denklem 2.6'deki üstel terim açıldığında:

$$D(m,n) = \frac{1}{MN} \left[\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1^2(i,j) - 2 \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1(i,j) \cdot g_2(i+m,j+n) + \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_2^2(i+m,j+n) \right] \quad (2.7)$$

Denklem 2.7'deki g_1^2 ve g_2^2 korelasyon açısından gerekli bir bilgi içermezler, faydalı olan terimler g_1 ve g_2 'yi karşılaştıran terimlerdir.

$$\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1(i,j)g_2(i+m,j+n) = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1^2(i,j) - M \times N \times D(m,n) + \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_2^2(i+m,j+n) \right] \quad (2.8)$$

Denklem 2.8'de sunulan $\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1(i,j) \cdot g_2(i+m,j+n)$ terimi çapraz korelasyon sonucudur. Denklem 2.7'in sağ tarafında en küçük ikinci dereceden fark sinyali ve ek olarak taban bileşenler bulunmaktadır. Bu sebeple çapraz korelasyon taban bileşenler içerdiğinden en küçük ikinci dereceden fark sinyali kadar temiz olmamakla birlikte en küçük ikinci dereceden fark sinyalini içermektedir.

$\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_2^2(i+m,j+n)$ terimi g_2 'nin pencere üstünde ortalanmış ortalama parlaklığıdır. Bu terim en küçük ikinci dereceden fark sinyalinin altında taban bir bileşendir.

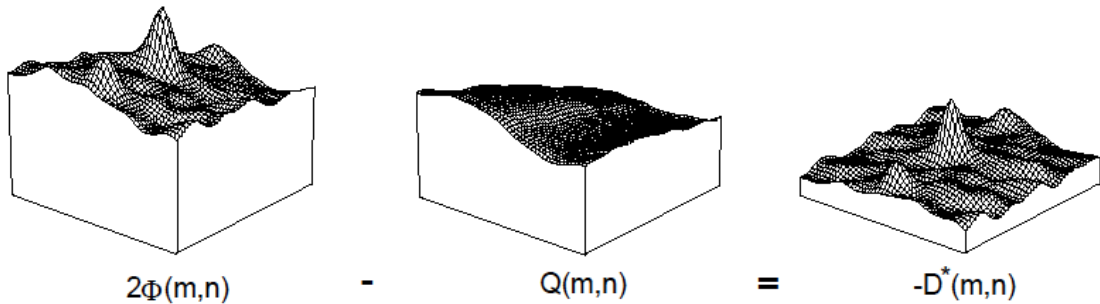
$$-D^*(m,n) = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1^2(i,j) \quad (2.9)$$

$$Q = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_2^2(i+m,j+n) \quad (2.10)$$

Bu adımlardan sonra 2.11'de sunulan korelasyon terimi Φ , Q and D^* 'nin farkı olarak şu şekilde tanımlanabilir:

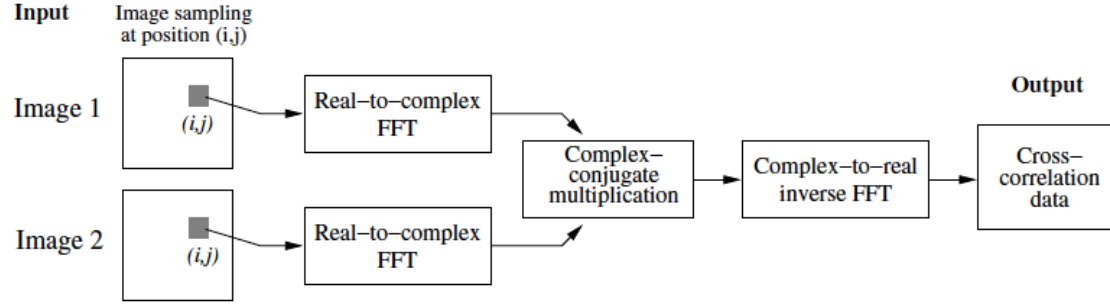
$$\Phi = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} g_1(i,j) \cdot g_2(i+m,j+n) = \frac{1}{2} [Q(m,n) - D^*(m,n)] \quad (2.11)$$

Denklem 2.11'in görsel bir temsili Şekil 2.13'de sunulmuştur.



Şekil 2.13: Korelasyon sinyalinin görsel temsili [3].

Wiener-Khinchin teoremi kullanılarak korelasyon sinyali çok daha hızlı bir şekilde hesaplanabilir. İki görüntünün hızlı Fourier dönüşümü alındıktan sonra ikinci görüntünün hızlı Fourier dönüşümünün karmaşık eşleniği ile birinci görüntünün hızlı Fourier dönüşümünün çarpımı sonrası elde edilen terim korelasyon sinyalinin hızlı Fourier dönüşümüdür. Bu terimin ters hızlı Fourier dönüşümü korelasyon sinyaline denk gelecektir. Bu metot denklem 2.8'de sunulan çift toplamdan daha hızlıdır. Hızlı Fourier dönüşümlerini içeren bu yöntemin görsel temsili Şekil 2.14'de sunulmuştur.



Şekil 2.14: FFT metodu ile korelasyon yönteminin görsel temsili [59].

Belirli bir noktada korelasyon korelasyon piki olarak adlandırılan en büyük değerine ulaşır. Buna ek olarak korelasyon sinyaline bir fonksiyon uydurularak korelasyon pikinin piksel altı konumu yaklaşık olarak hesaplanabilir. Bu korelasyon verisine korelasyon piki etrafında bir eğri uydurularak gerçekleştirilebilir. Sonrasında uydurulan fonksiyonun maksimum noktasının konumu, konumsal kısmi türevlerin sıfır olduğu durumlar olarak hesaplanabilir. Uydurulacak fonksiyon seçiminde iyi bir örnek denklem 2.12'de sunuların Gaus dağılımlı bir fonksiyondur.

$$z(x,y) = \exp(c_0 + c_1y + c_2x + c_3y^2 + c_4x^2) \quad (2.12)$$

Sonrasında eğri uydurma işlemi denklem 2.13'de sunulduğu üzere uygulanabilir.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln z(0,0) \\ \ln z(0,-1) \\ \ln z(0,1) \\ \ln z(-1,0) \\ \ln z(1,0) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

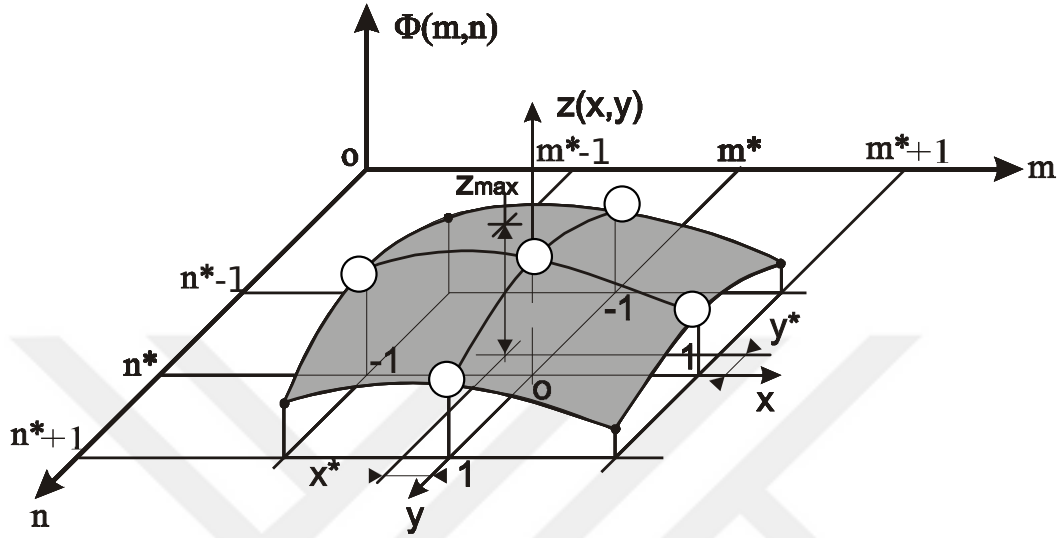
Denklem 2.13 matrisin tersi alınarak denklemin iki tarafı için çarpılması ile sabitler için çözülebilir. $z(x,y)$ fonksiyonu tanımlandıktan sonra maksimum noktasının konumu denklem 2.14'de sunulduğu üzere birincil mertebeden kısmi türevleri sıfıra eşitlenerek bulunabilir.

$$\left. \frac{\partial z(x,y)}{\partial x} \right|_{(x^*,y^*)} = 0 \quad \left. \frac{\partial z(x,y)}{\partial y} \right|_{(x^*,y^*)} = 0 \quad (2.14)$$

Denklem 2.14'de sunulan denklem sisteminin çözümü 2.5'da sunulmuştur.

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{\ln z(1,0) - \ln z(-1,0)}{4 \ln z(0,0) - 2 \ln z(-1,0) - 2 \ln z(1,0)} \\ y^* &= \frac{\ln z(0,1) - \ln z(0,-1)}{4 \ln z(0,0) - 2 \ln z(0,-1) - 2 \ln z(0,1)} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Korelasyon pikinin piksel altı konumunun tahmininde kullanılan adımların görsel temsili Şekil 2.15’de sunulmuştur.



Şekil 2.15: Korelasyon pikinin piksel altı konumunun tahmini ve uydurulan eğrinin temsili görseli [3].



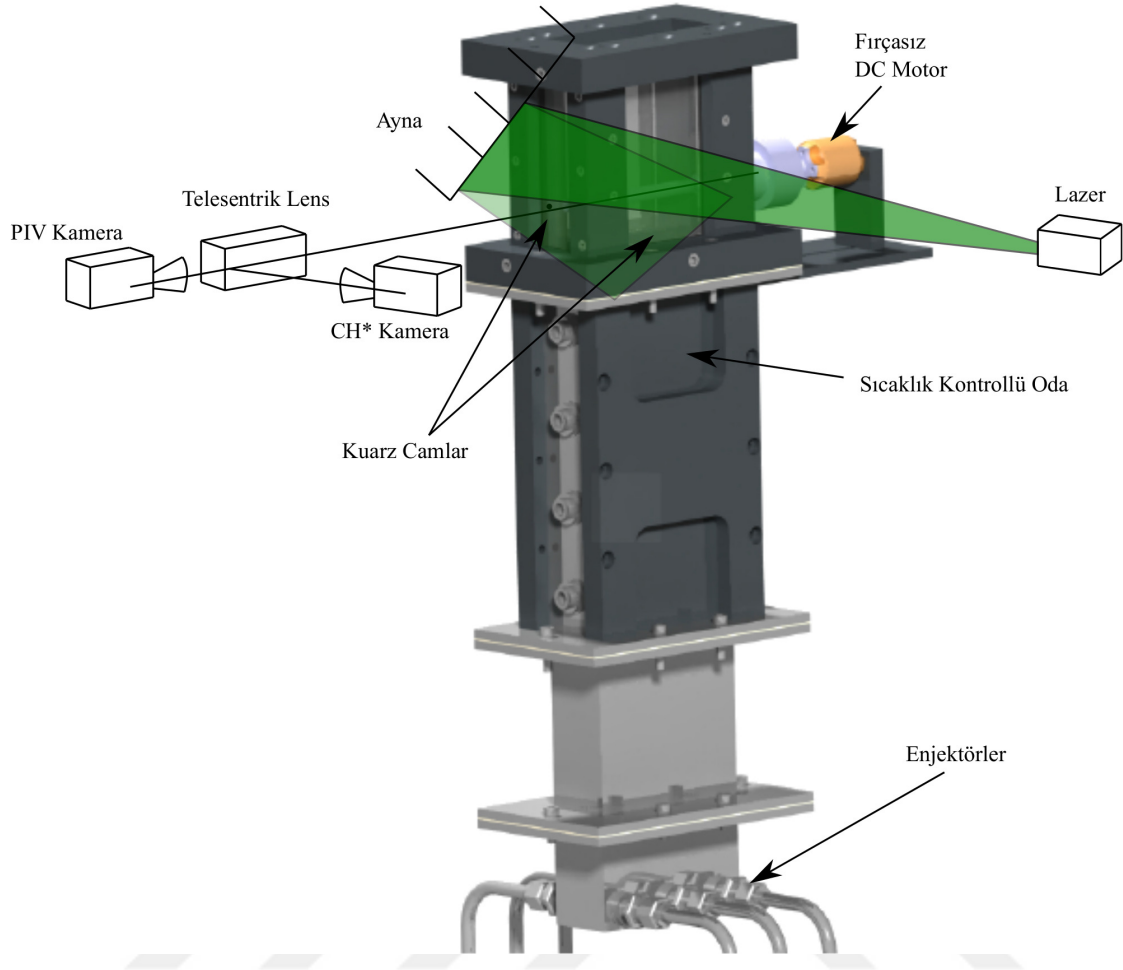
3. DENEYSSEL DÜZENEK VE SONUÇLAR

Deneysel düzenek dikdörtgensel bir kanal ile kuşatılmış silindirik bir çubuktan oluşmaktadır. Silindir çapı $d = 8\text{mm}$ ve kanal yüksekliği $h = 34\text{mm}$ ve kanal genişliği $w = 94\text{mm}$ şeklinde sabit kesit alanlı olduğundan kuşatma oranı $\theta = d/h = 0.235$ olacak şekilde silindir iki paralel duvar arasındadır. Hava 6 bar basınçlı bir laboratuvar hattı ile sağlanmaktadır. Hava ve metanın kütleli debileri ayrı hatlarda konuşlandırılmış Brokhorst kütleli debi ölçerler ile ölçülüp kontrol edilmiştir. Hava ve metan sonrasında karşıt akış düzeninde iki girişi ve iki tarafa bölünmüş altı çıkışı olan bir karıştırıcı manifolda enjekte edilmiş ve tepkenlerin tekdüze bir şekilde karışım odasına beslenmesi sağlanmıştır. Tepkimeli yada tepkimesiz akışların kolayca denenebilmesi için sistem her iki durumda da rahat bir şekilde çalışabilecek şekilde tasarlanmıştır. Deney düzeneğinin şematik görüntüleri şekil 3.1 ve 3.2’de sunulmuştur

Akabinde tepken karışımı cam bilyeler ile laminarize edilmekte ve bal peteği şeklindeki kanalcıklarla akış yönlendirilmektedir. Taze gazların sıcaklıklarının kontrolü için yanma odasından önceki oda (plenum) su kanalları ile soğutulmuştur. Silindirin arkasından tutuşturulan ön karışimli alev kaçıklığı olmayan simetrik silindirik çubuk üzerinde akış aşağı bölgede sabitlenmektedir. Silindir bir ucundan fırçasız bir doğru akım motoru ile istenilen devirde tahrik edilebilir biçimde sızdırmaz bir rulman yardımıyla diğer ucundan serbest olarak dönebilecek şekilde montajlanmıştır.

PIV ve CH* kimyasal ışılda ölçümlerine optik erişim sağlamak amacıyla ön ve iki yan tarafında kuvars camlar gömülüdür. PIV ölçümleri için akış $1\ \mu\text{m}$ çapındaki zeytin yağı damlacıkları ile tohumlanmıştır. Bu damlacıklar akıştaki eşdeğerlilik oranı tekdüzeliğinin korunması açısından sadece hava ile değil hava/yakıt ön karışımı ile atomize edilmiştir. Damlacıkların aydınlatılması Quentel Big Sky üreticisinden yüksek tekrarlama frekanslı çift kovuklu Nd:YAG lazer tarafından sağlanan $200\ \mu\text{s}$ ile ayrılmış ardışık lazer vuruşları ile sağlanmıştır. Lazer ışını bir çift birleştirilmiş küresel ve ıraksak silis lens tarafından ince bir lazer yaprağına dönüştürülmüştür. Silindirin arkasında oluşacak gölgenin giderilmesi için geçirilen lazer ışınlarının bir kısmı bir ayna kullanılarak gölge bölgesini aydınlatmak üzere geri gönderilmiştir. Yağ damlacıklarından saçılan ışık Lavisyon üreticisinden Imager intense PIV kamera ile toplanmıştır. Görüntüler 1 Hz frekansta 1376×1040 piksel çözünürlükle kaydedilmiştir. Yağ damlacıklarından saçılan ışığın daha belirgin bir şekilde yakalanması için kameranın önüne $\lambda_c = 532 \pm 10\ \text{nm}$ merkezli bir dar bantlı filtre yerleştirilmiştir. Paralaks etkisinin düzeltilmesi için f/16 182 mm telesentrik lens (TC4M64, Opto-engineering) kullanılmıştır. Görüntüler bir açık kaynak PIV yazılımı olan OpenPIV yazılımı ile işlenmiştir [77].

Deney düzeneğinde alev konumunun belirlenmesi için yoğunlaştırılmış PCO-Sensicam kamera ile kaydedilen CH* kimyasal ışılda ölçümleri kullanılmıştır. Kameranın CH* önüne kimyasal ışılda emisyonlarını filtreleyerek geçirecek şekilde dar bantlı bir lens ve paralaks etkisinin düzeltilmesi için bir f/16 180 mm telesentrik lens yerleştirilmiştir.



Şekil 3.1: Deney düzeneği, (Daniel Mejia, kişisel görüşme, 2016).

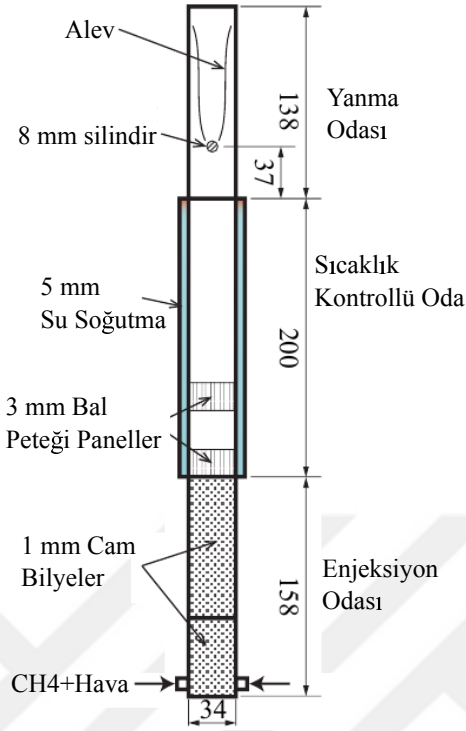
PIV ölçümlerinin öncesinde büyütme oranının belirlenmesi gerekmektedir. Büyütme oranının belirlenmesi şekil 3.3’de sunulan 4 mm x 4 mm ölçülerinde karelerden oluşan bir kalibrasyon plakası ile gerçekleştirilmiştir. Büyütme oranı milimetre başına 40 piksel olarak ölçülmüştür.

Her bir ölçüm için 90 görüntü çifti kaydedilmiştir. Görüntü çiftlerindeki ardışık görüntüler arasındaki Δt zamanı 200 μs olarak ayarlanmıştır. Bu zaman aralığı silindir ve duvarlardan uzak bölgelerde 10 piksel deplasman sağlayacak şekilde seçilmiştir.

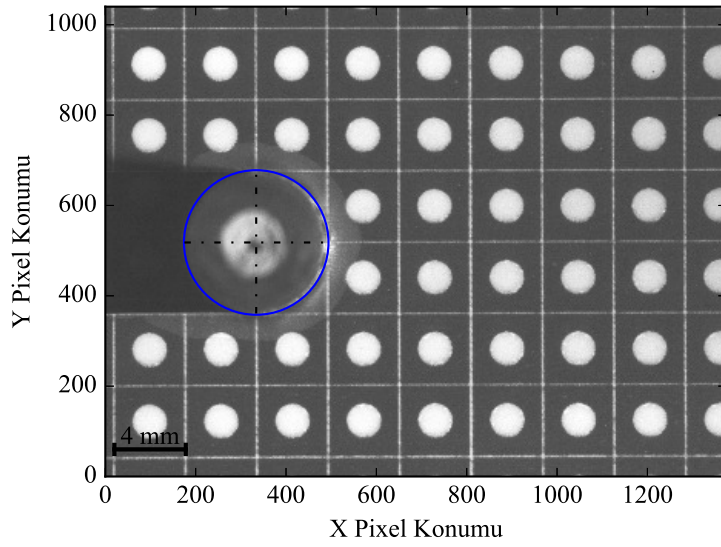
Şekil 3.1 tepkimesiz durumda deney düzeneğinden alınan bir görüntüyü sunmaktadır. Bu görüntü kümeleri PIV algoritmaları ile işlenerek deney düzeneğindeki hız ölçümlerinde kullanılmıştır.

Sorgu penceresinin boyutu 24x24 piksel olarak ayarlanmıştır ve ham görüntülerden kesilen örnek bir sorgu penceresi şekil 3.4’de sunulmuştur. Bu sorgulama penceresi PIV algoritması tarafından otomatik olarak oluşturulmaktadır ve bu şekil misal olarak sunulmuştur.

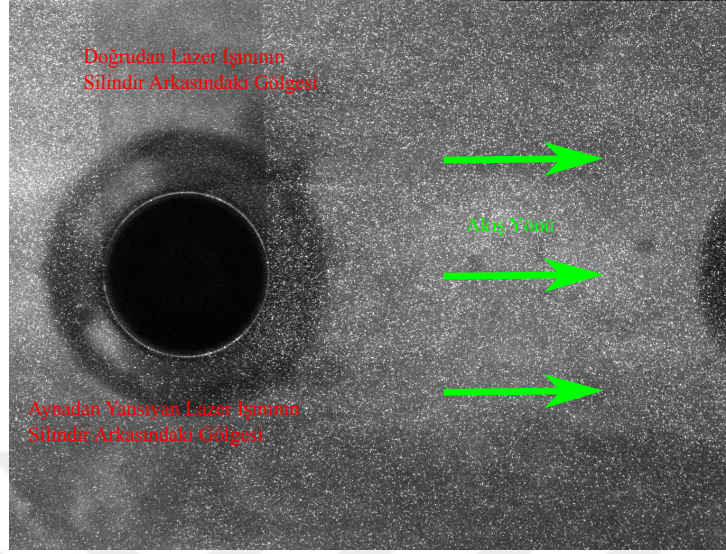
PIV algoritması uygulanırken yazılım ikinci görüntüden eş-merkezli bir arama penceresi oluşturup sorgulama penceresini arama penceresi ile karşılaştırarak ortalama parçacık hareketini hesaplamaktadır. Örnek bir arama penceresi Şekil 3.5’de sunulmuştur.



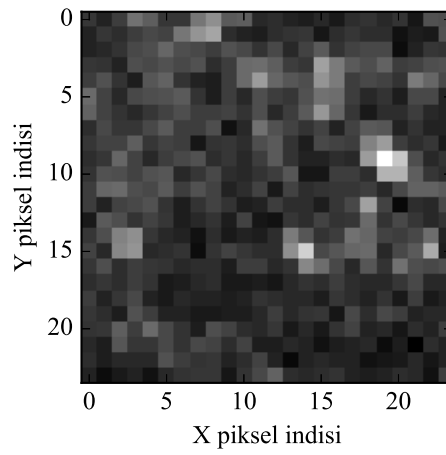
Şekil 3.2: Deneş düzeneğinin ölçüleri içeren şematik görüntüsü, (Daniel Mejia, kişisel görüşme, 2016).



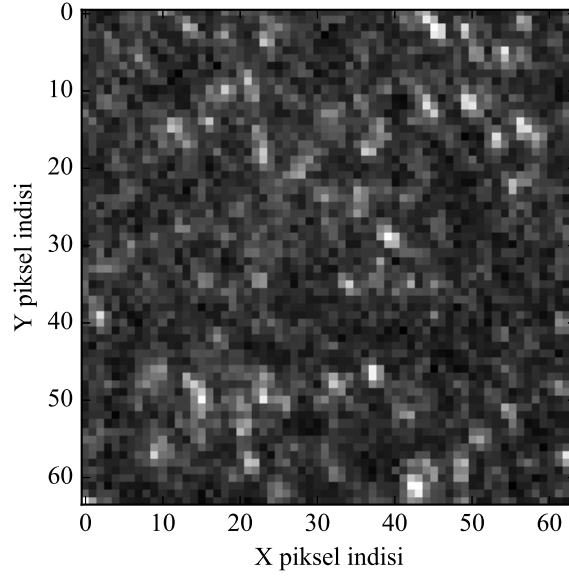
Şekil 3.3: Büyütme oranının belirlenmesinde kullanılan kalibrasyon plakası.



Resim 3.1: Tepkimesiz durumda deney düzeneğinden alınan görüntü.



Şekil 3.4: Ham görüntüden kesilen örnek bir sorgulama penceresi.

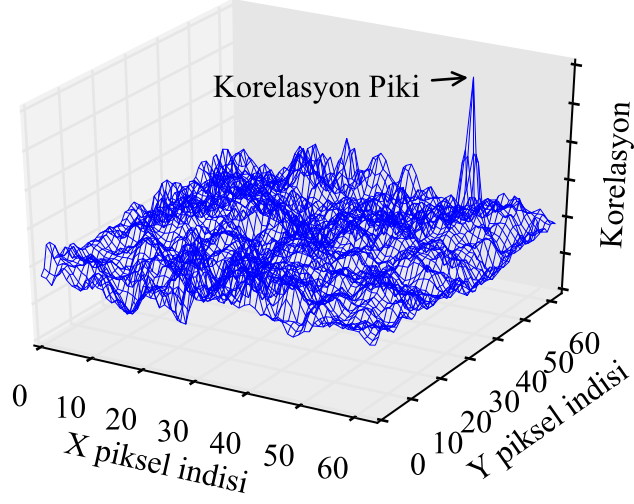


Şekil 3.5: Görüntü çiftinin ikinci görüntüsünden kesilen örnek bir arama penceresi.

Ardından Şekil 3.4 ve 3.5 görsellerinde sunulan görüntüler, FFT-bazlı bir korelasyon algoritması ile işlenerek damlacık grubunun en muhtemel yer değiştirmesi bilgisini içeren korelasyon elde edilmiştir. Korelasyon Şekil 3.6'da sunulmuştur.

Şekil 3.6'de sunulan korelasyona iki boyutlu bir fonksiyon uydurulup kısmi türevlerinin sıfıra eşitlenmesi ile korelasyon maksimumunun piksel altı konumunun tahmin edilmesinde kullanılmıştır.

PIV algoritmasının uygulanmasında önemli taraflardan biri sorgulama penceresinin sınırlarda bulunduğu zaman arama penceresinin nasıl seçileceğidir. İç bölgelerde sorgulama penceresi seçildikten sonra görüntü çiftinin ikinci görüntüsünden eş merkezli olarak şekilde nispeten daha büyük bir arama penceresi seçilmiştir. Fakat sınır bölgelerde arama penceresinin oluşturulmasında fazladan adımlar gerekmektedir. PIV algoritmasının değiştirilmeden bu bölgelerde de ilerleyebilmesi için seçilen arama penceresi eğer sınırlardaysa, sıfır şiddetli piksellerle tanımlanan arama penceresi boyutuna tamamlanarak PIV algoritmasının sınır bölgelerde de ilerleyebilmesi sağlanmıştır.



Şekil 3.6: Örnek olarak sunulan sorgulama penceresi ve arama penceresinin korelasyonu.

3.1 Deneysel Sonuçlar

Bu bölümde işlenmiş deneysel verilerden elde edilen sonuçlar sunulmuştur.

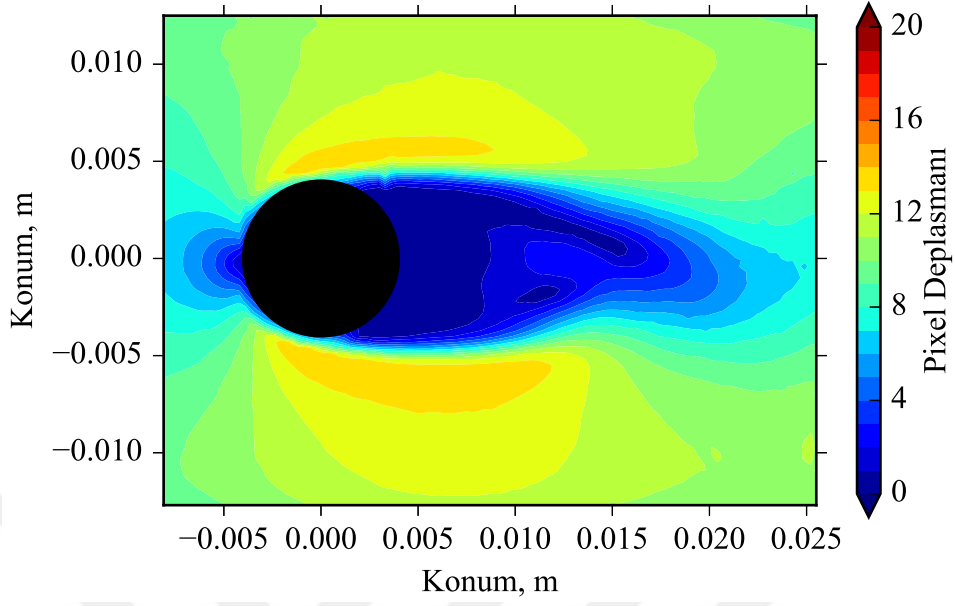
3.2 PIV Sonuçları

Kameradan elde edilen ham PIV görüntülerinin art işlemleri açık kaynak bir yazılım olan OpenPIV ile gerçekleştirilmiştir [77]. Tüm PIV art işlemlerinde sorgulama penceresi boyutu 24x24 piksel ve eş merkezli arama penceresi boyutu 64x64 piksel olarak seçilmiştir. Sağlama amacı ile arama penceresinin daha büyük olduğu durumlar da incelenmiş, fakat dikkate değer bir fark gözlemlenmemiştir.

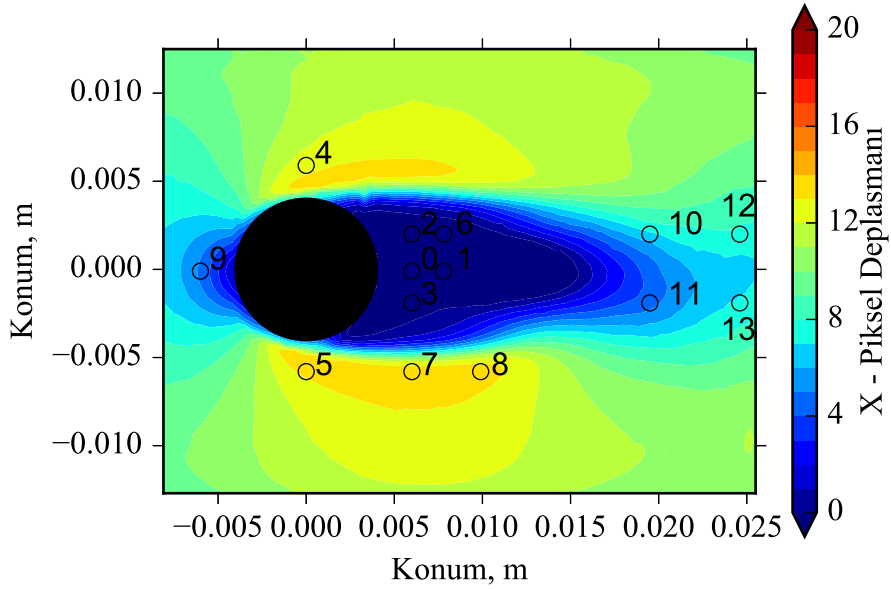
Silindir etrafındaki yansımadan kaynaklanacak hataların giderilmesi için yansıma bölgesini de içine alacak şekilde bir maske ile bu bölgeler parlaklığı sıfır olan piksellerle örtülmüştür. Bu maskelemenin amacı lazer ışınlarının silindirden yansıdığı bölgede oluşan düşük frekanslı gürültüyü önleyip hatalı hız alanı ölçümlerini engellemektir. Aynı zamanda benzer bir yöntem kamera görüş alanı kenarlarında kalan arama bölgelerinin seçilen boyutlara getirilerek PIV algoritmasının değiştirilmeye gerek kalmadan ilerleyebilmesi sağlanmıştır.

Şekil 3.7 silindirin sabit tutulduğu durum için ortalama deplasmanın büyüklüğünü göstermektedir.

Görüntü çiftleri 1Hz frekansta kaydedilmiştir ve ortalamanın hesaplanmasında 90 görüntü çifti kullanılmıştır. 90 görüntü çiftinin yeterli olup olmadığının araştırılması için çeşitli noktalar seçilmiş ve bu noktalardaki ortalamanın ortalama kullanılan görüntü çifti sayısına göre değişimi incelenmiştir. Seçilen noktaların konumları Şekil 3.8'de sunulmuştur.

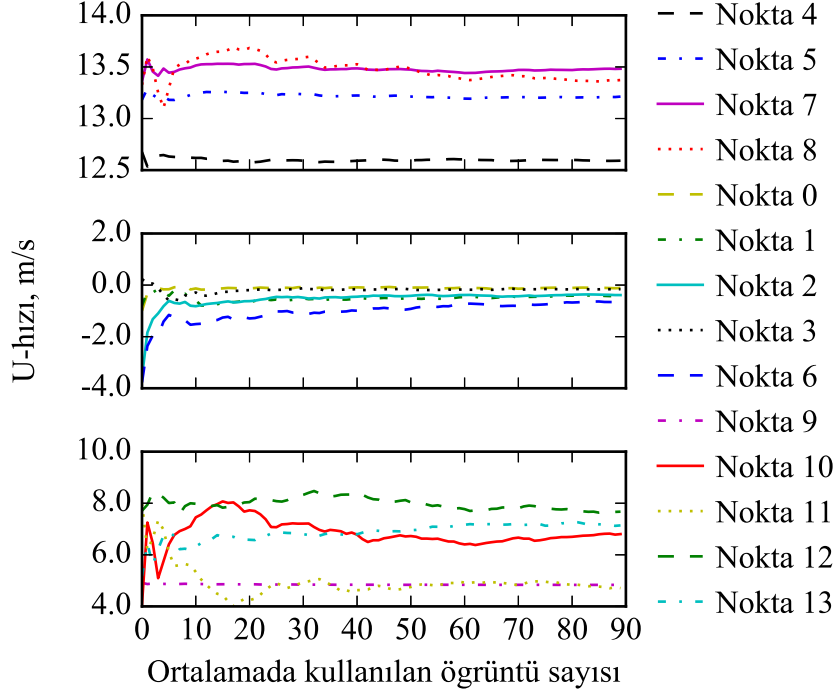


Şekil 3.7: Silindirin sabit tutulduğu durum için ortalama deplasman alanı.



Şekil 3.8: Seçilen noktaların konumları ve X-yönündeki ortalama deplasman alanı konturları.

Şekil 3.8’de sunulan noktalar, 90 görüntü çiftinin ortalamasının temsili konusunda yeterliliği hakkında bilgi sahibi olmak üzere, ortalama deplasmanın, ortalamada kullanılan görüntü çifti sayısına göre değişiminin araştırıldığı grafiklerle incelenmiş ve sonuçlar Şekil 3.9’de sunulmuştur.

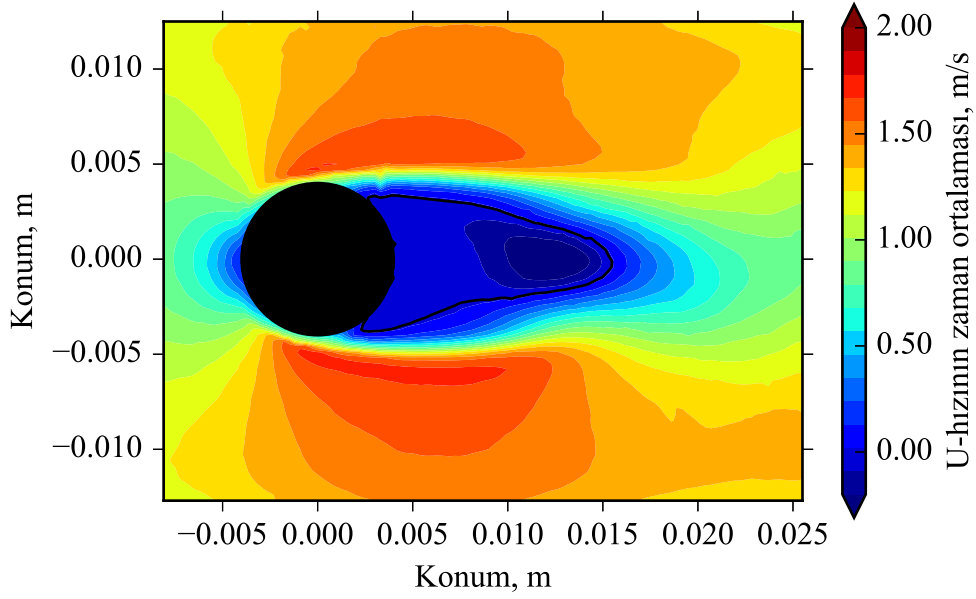


Şekil 3.9: x-deplasman alanının zaman ortalamasının görüntü çifti sayısına göre değişimi.

Elde edilen deplasman alanı akabinde hız alanının hesaplanmasında kullanılmıştır. Büyütme oranı ve zaman aralığının kullanılarak piksel biriminin fiziksel uzunluk olan metre ve görüntüler arası zaman biriminin fiziksel zaman birimi olan saniye birimlerine geçişin gerçekleştiği ve resimler arası deplasman alanından hız alanına geçişin sağlandığı aşama budur. Silindirin sabit olduğu durum için hesaplanan hız alanı Şekil 3.10’de sunulmuştur.

Şekil 3.10’de sunulan hız alanı incelendiğinde silindirin akış aşağı bölgesinde kalan kısımda ortalama bir geri dönüş bölgesinin olduğu anlaşılabilir. Aynı zamanda hız alanında ufak bir asimetri gözlemlenmiştir. Yanma odasının girişi kamera görüş alanının dışında kaldığından yanma odası girişindeki hız profilini PIV yöntemiyle ölçmek mümkün değildir. Yanma odası giriş hız profilindeki olası asimetri akışla birlikte akış aşağı bölgelere taşınabilir. Şekil 3.10’de de sol taraftaki kamera görüş alanı başlangıcı bölgesindeki asimetri giriş hız profilindeki belirsizlikle açıklanabilir. Bu asimetri geri dönüş bölgesinde de nispeten kendini göstermiştir.

Ortalama hız alanının gerekli kısmı türevleri alındıktan sonra z-yönündeki ortalama vortisite hesaplanabilir. Vortisitenin tanımı denklem 3.1’de sunulmuştur.



Şekil 3.10: Silindirin sabit tutulduğu durum için PIV yöntemi ile ölçülen U-hız alanı, siyah çizgi geri dönüş bölgesini temsil etmektedir.

$$\omega_z = \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (3.1)$$

Denklem 3.1 kullanılarak vortisite hesaplanmış ve Şekil 3.11’de sunulmuştur.

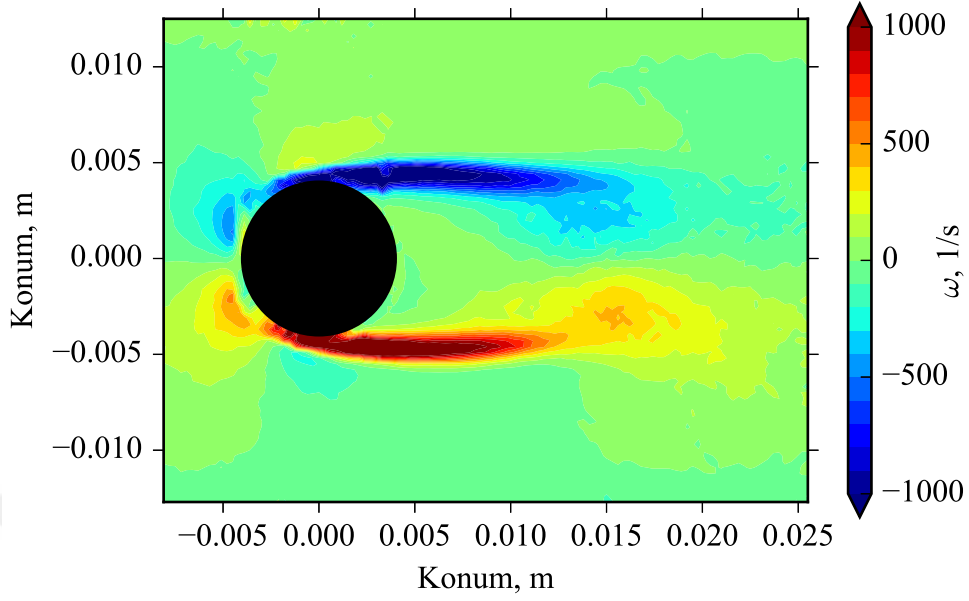
Şekil 3.12’de sunulduğu üzere silindir döndüğünde akış dönüş yönünde taşınmaktadır. Silindirin çizgisel hızı ile akış hızının aynı yönde olduğu silindirin üst kısmındaki akış silindirin çizgisel hızı ile akış hızının ters yönde olduğu silindirin alt kısmındaki akıştan daha hızlıdır. Bu durum kaymazlık koşulunun akışın ivmelenmesine neden olmasından kaynaklanmaktadır.

Silindir döndüğünde vortisite alanı da artık simetrik değildir, silindir tarafından dönüş yönünde taşınmıştır. Genel yapısı korunmakla birlikte vortisite alanı dönüş etkisi ile asimetric bir yapıya bürünmüştür. Silindirin 2900 RPM’de döndüğü durum için vortisite alanı Şekil 3.13’de sunulmuştur.

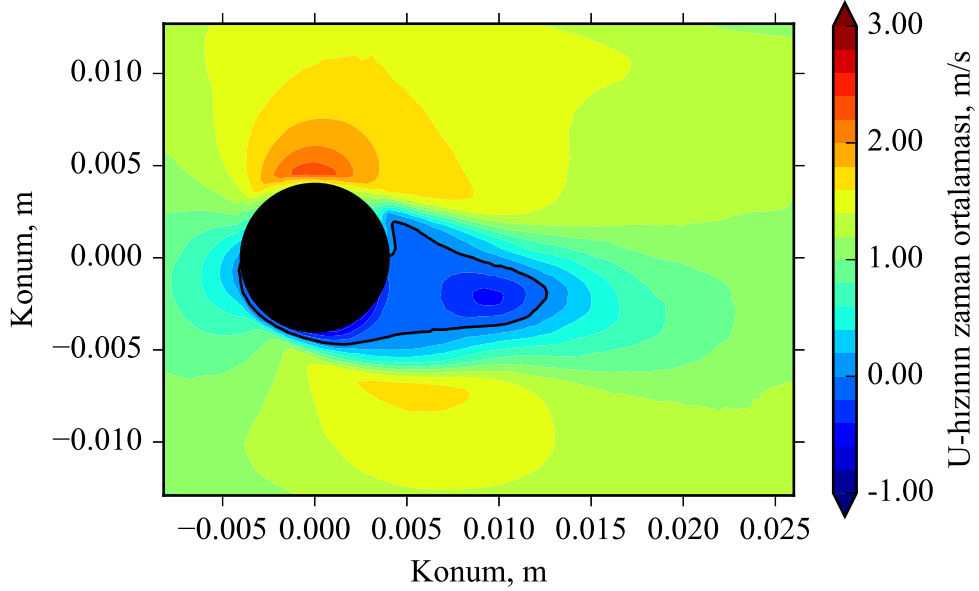
Silindirin dönüş hızı arttırıldığında, ivmelenme etkileri Şekil 3.14’de sunulduğu üzere daha belirgin bir şekilde kendilerini göstermektedir. Aynı zamanda PIV sonuçlarında geri dönüş bölgesinin ufaldığı gözlemlenmiştir. Üst sağ tarafta bulunan ortalama negatif hız bölgesi üst duvardan ayrılan sınır tabakanın kameranın görüş alanına giren kısmıdır.

Silindirin 7800 RPM’de döndüğü duruda Şekil 3.15’de gösterildiği üzere üst üst duvardaki sınır tabakadan ayrılan akışın kamera görüş alanına giren kısmı büyümüş ve daha fark edilebilir düzeye gelmiştir. Bu durum aynı zamanda akışın bu bölgesinin tohumlanmasında zorluklar yaratmıştır.

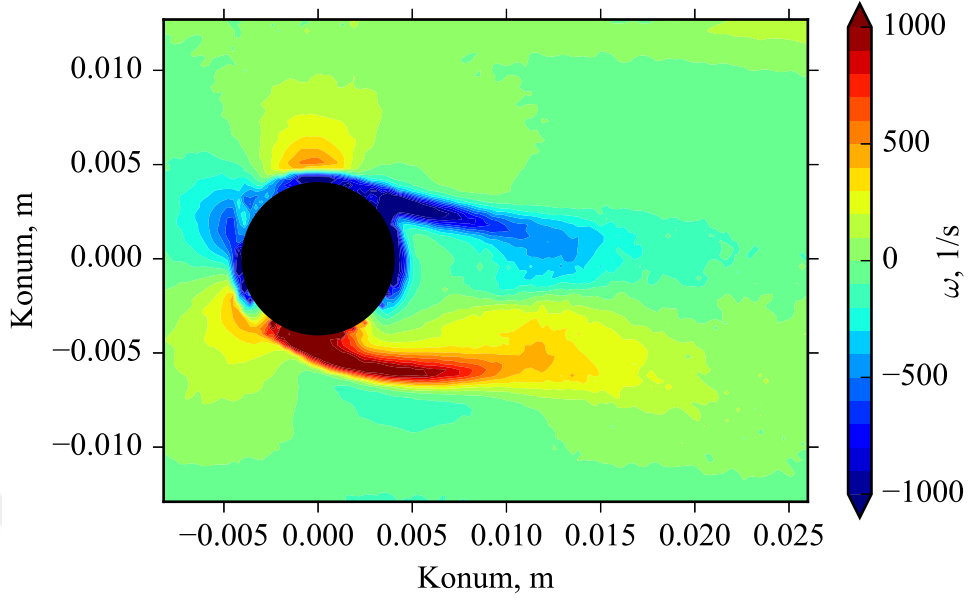
PIV ölçümleri tepkimeli durumlar için de gerçekleştirilmiştir. Tepkimeli akışın tohumlanmasında da kullanılan yağ damlacıkları alevde buharlaşıp yandıklarından alev ve alev sonrası bölgelerde PIV ölçümleri mümkün olmamaktadır. Aynı zamanda şu durumdan



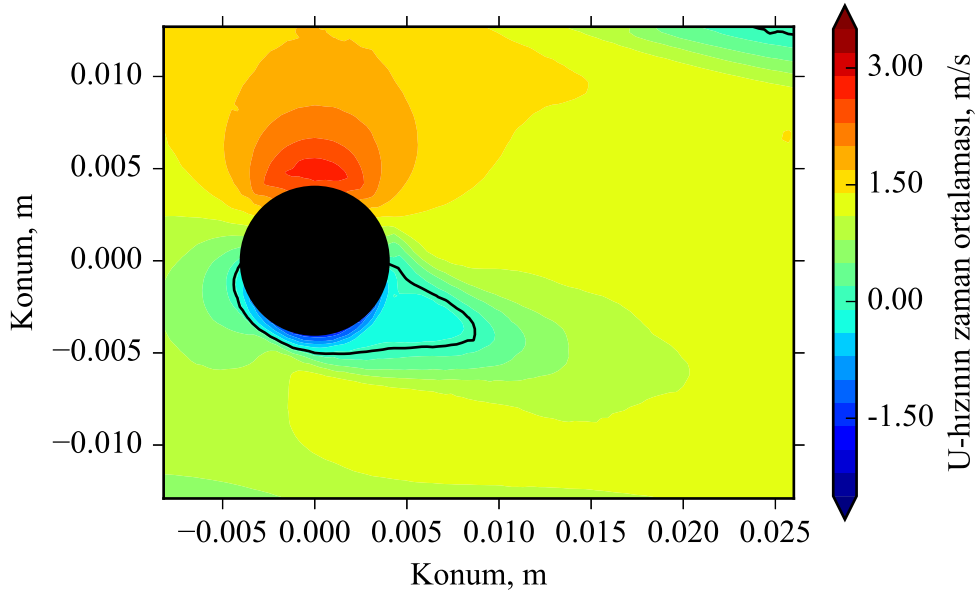
Şekil 3.11: Silindirin sabit tutulduğu durumda vortisite alanı.



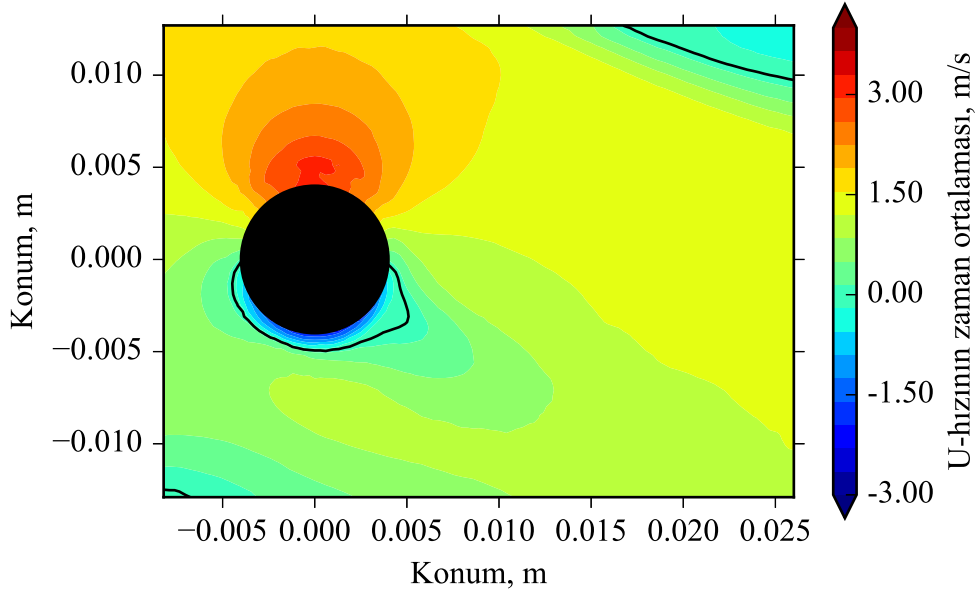
Şekil 3.12: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=2900.



Şekil 3.13: Vortisite alanı, RPM=2900.

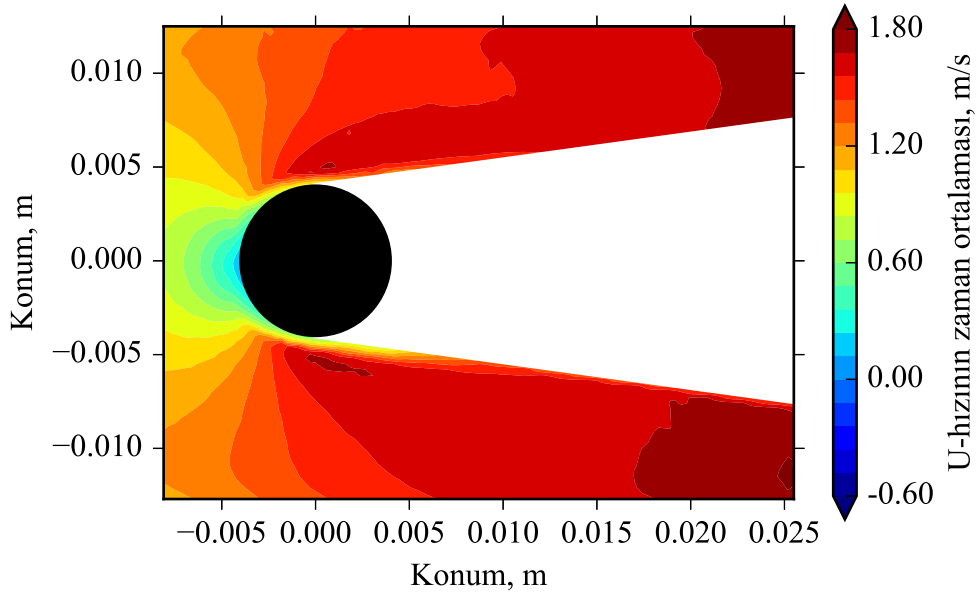


Şekil 3.14: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=6000.



Şekil 3.15: PIV ile ölçülen u-hız alanı, siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil etmektedir, RPM=7800.

da bahsedilmelidir ki alevin varlığı silindirin ısınmasına neden olduğundan ısıl etkiler silindirin etrafındaki ölçümlerin kalitesini de etkileyebilir.



Şekil 3.16: Tepkimeli akışta PIV ile ölçülen u-hız alanı, beyaz bölüm zeytin yağı damlacıklarının buharlaşıp yanmasından dolayı ölçümlerin mümkün olmadığı alev ve alev sonrası bölgelerini göstermektedir.

PIV ölçümleri ilerleyen bölümlerde deneysel sonuçların HAD çözümleri ile karşılaştırılmasında kullanılacaktır.

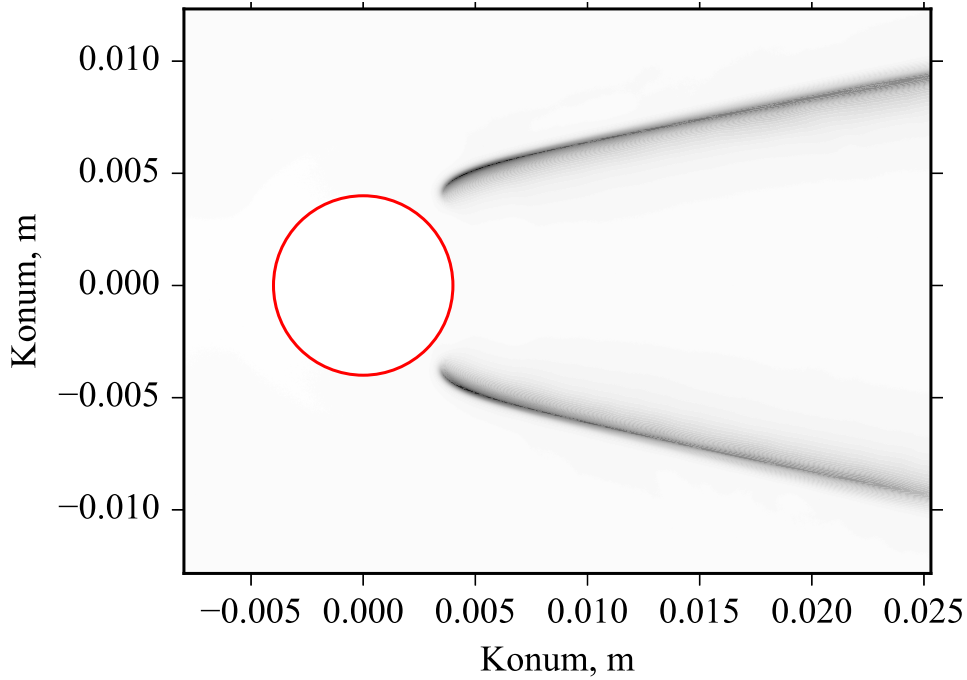
3.3 CH* chemiluminescence Results

CH* kimyasal ışıldaması alevde ısı üretiminin olduğu bölgelerin iyi bir göstergesi olduğundan bir alev işaretleyicisi olarak kullanılabilir [79]. Filtrelenen CH* emisyon görüntüleri önünde dar bantlı bir lens bulunan yoğunlaştırılmış PCO-Sensicam kamera ile kaydedilmiştir. $\phi=0.75$ metan/hava alevinden elde edilen ham görüntü Şekil 3.17’de sunulmuştur.

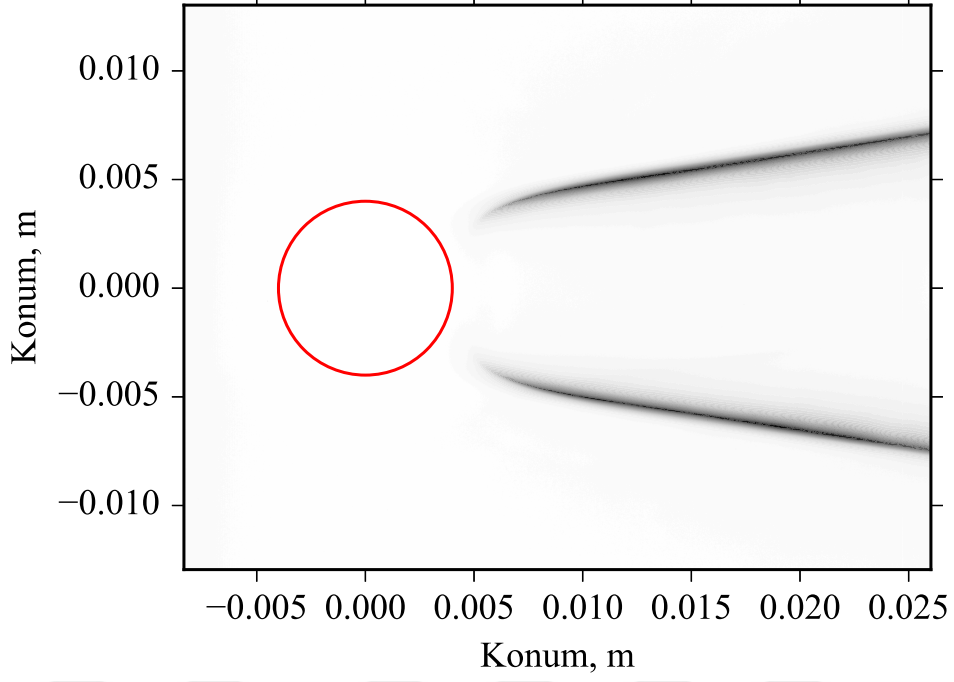


Şekil 3.17: Alevin anlık (instantaneous) CH* kimyasal ışıldama görüntüsü, $\phi=0.75$, RPM=0.

Bu görüntüler Şekil 3.18’de sunulduğu üzere ortalaması alınarak işlenmiş ve daha sonra da HAD sonuçları ile karşılaştırılmak üzere kullanılmıştır.



Şekil 3.18: Alevin ortalaması alınmış ve normalleştirilmiş CH* kimyasal ışıldama görüntüsü, $\phi=0.75$, RPM=0.



Şekil 3.19: Alevin ortalaması alınmış ve normalleştirilmiş CH* kimyasal ışıldaama görüntüsü, $\phi=0.7$, RPM=0.

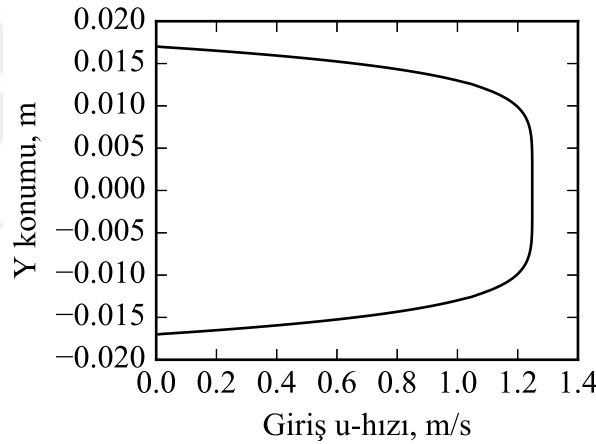
Şekil 3.18 ve 3.19'den gözlenebileceği üzere eşdeğerlilik oranı stokiyometrik değerinden uzaklaşacak şekilde düşürüldüğünde alev hızının azalması nedeniyle alev açısı küçülmüştür. Ayrıca $\phi = 0.75$ alevinin $\phi = 0.7$ alevi ile karşılaştırıldığında silindire daha yakın olduğu da görülebilir.

4. HAD HESAPLAMALARI

Bu bölüm serbestçe yayılan ve gerinmiş 1B alevler, denge kimyası, kendiliğinden tutuşma zamanı hesaplamaları ve dönen ve durağan çubuk için yapılan 2B HAD hesaplamalarını özetlemektedir.

4.1 Eşisıl HAD Hesaplamaları

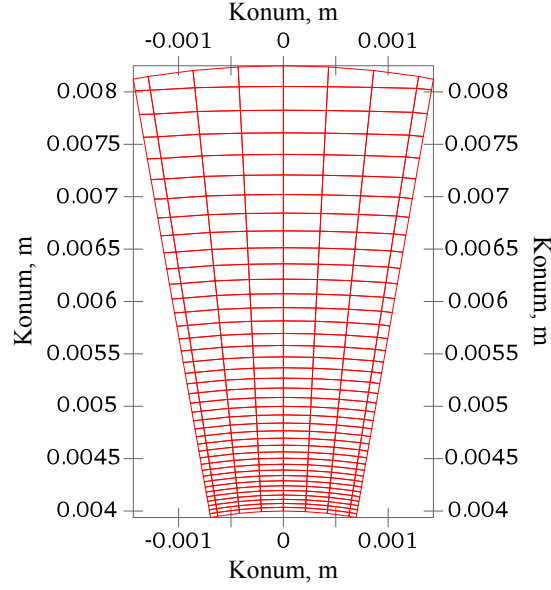
Eşisıl HAD hesaplamaları açık kaynak bir HAD yazılımı olan OpenFOAM [1] ile yapılmıştır. Çıkış basıncı atmosferik basınca ayarlanmış, ve giriş hız profili olarak deney düzeneğindeki profile yakın olduğu düşünülen Şekil 4.1’de sunulan profil kullanılmıştır. Kullanılan çözücü laminar ve sıkıştırılmaz akışlar için geliştirilen icoFoam çözücüsüdür.



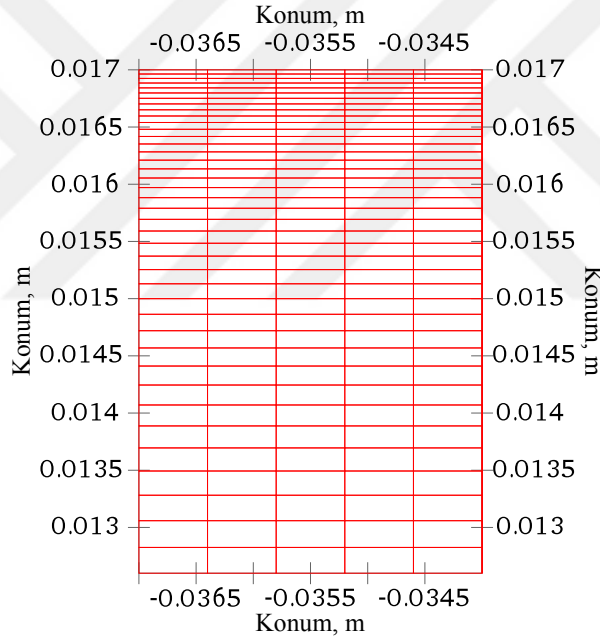
Şekil 4.1: HAD hesaplamalarında kullanılan giriş hız profili

Hesaplamalarda hiçbir türbülans modeli kullanılmamıştır ve momentum yayılımını sadece moleküler viskozite ve 2. mertebe sayısal yöntemlerden ve kullanılan sonlu hacim ağından kaynaklanabilecek olan sayısal yayınmadır.

İki boyutlu sonlu ağ yine bir açık kaynak yazılım olan SALOME [2] yazılımı kullanılarak oluşturulmuştur ve 44326 sonlu hacim içermektedir. Tertip edilen sonlu ağ, silindirdir ve duvarlar etrafında sınıra yakın bölgelerdeki akışı çözümlmek için dikdörtgensel hacimlerle inceltilmiştir. Duvarlardan uzak bölgelerde ise üçgensel hacimlerin ortalama kenar uzunlukları 0.6 milimetredir.



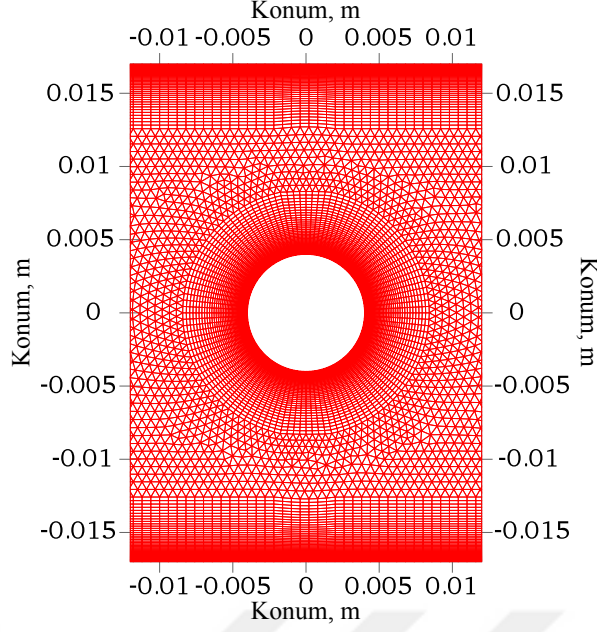
Şekil 4.2: Silindir etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.



Şekil 4.3: Kanalın duvarları etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.

Serbest akıştaki silindirler için, akış Reynolds sayısı $190 \approx 260$ civarlarında üç boyutlu düzensizliklere geçiş rejimindedir[82], fakat kanal içindeki silindirler için bu durum yeterince açıklanmış değildir. Kuşatma Karman periyodik burgaç rejimini serbest akıştaki silindirlerde görülen Reynolds sayısı ≈ 49 [61] civarlarından ≈ 108 [61] civarlarına çekmektedir. Bu durum kanal içi kuşatılmış silindirler için üç boyutlu düzensizliklere geçiş rejiminin başladığı Reynolds sayısının araştırmaya açık olduğunu gösterebilir. Bu yüzden bu çalışmada eşil durum için oluşturulan sonlu hacim ağı 2B Direk Sayısal Benzetme gibi derinlemesine bir sayısal çözüm için değil, daha çok büyük ölçekli burgaç yapılarını incelemek için oluşturulmuştur.

Akış kanal içinde olduğundan kanal girişinde bir hız profili mevcuttur, bu yüzden Reynolds sayısının tanımında bu hız profilinin etkisi gözardı edilmemelidir. Literatürde



Şekil 4.4: Silindir etrafındaki iki boyutlu sonlu ağ.

Çizelge 4.1: Reynolds sayısı ve dönüş oranının tanımında kullanılan değişik formüller ve deney düzeneğinde karşılık gelen değerleri.

RPM	0	2900	6000	7800	10500
Re_{∞}	539	539	539	539	539
Re	629	629	629	629	629
Re_{α}	0	2448	5064	6583	8862
α	0.00	0.97	2.01	2.62	3.52
α_{∞}	0.00	1.14	2.35	3.05	4.11

Reynolds sayısının tanımında yığın hız kullanılmakla birlikte durağan hız profilinin etkilerini hesaba katan giriş hız profilinin merkez eksenindeki değerinden türetilmiş Reynolds sayıları [61] [26] [63] kullanılmıştır. Bu değişik formüller denklem 4.1’de sunulmuştur.

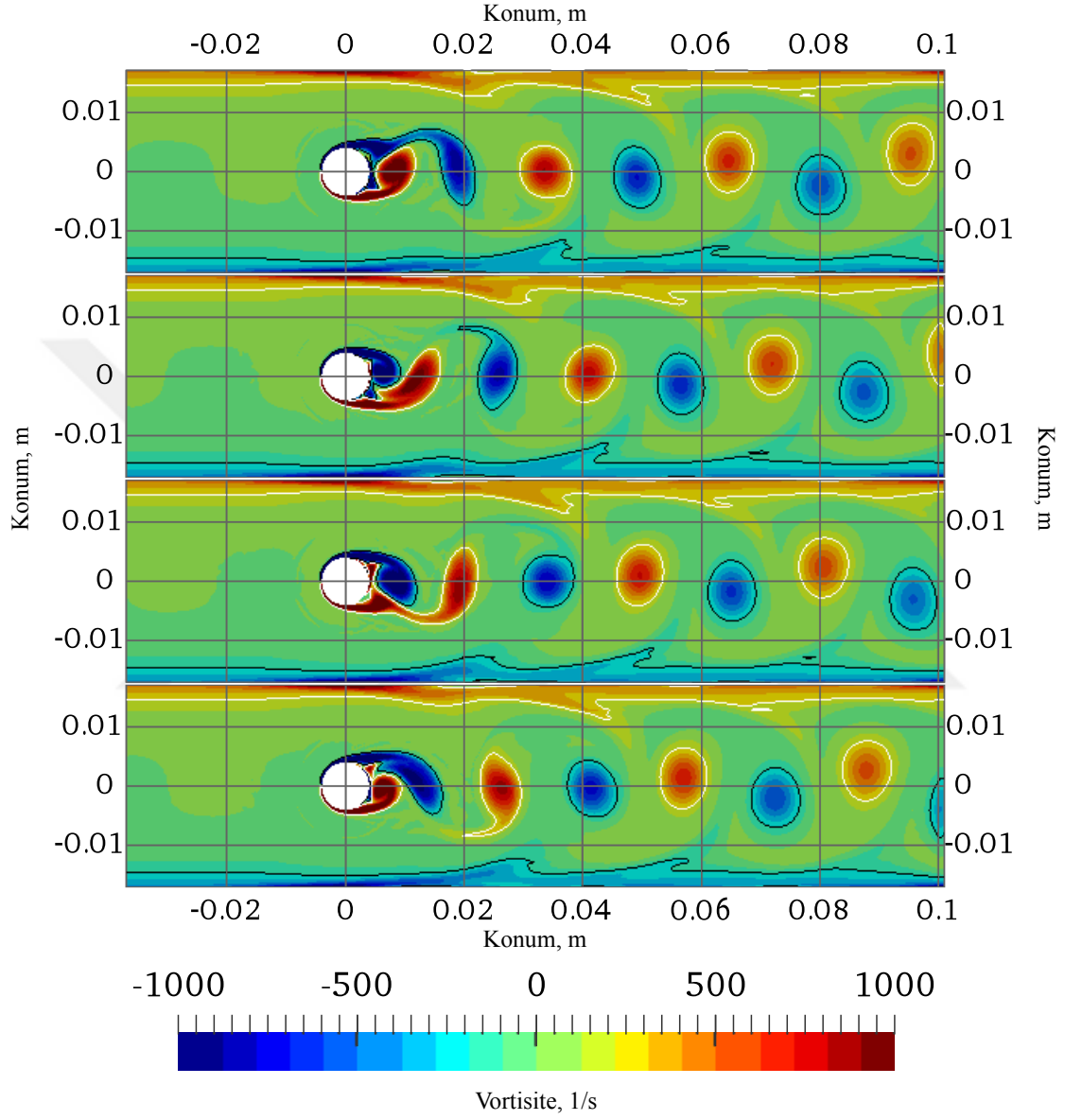
$$Re = \frac{\rho U_{inlet_{max}} d}{\mu} \quad Re_{\infty} = \frac{\rho U_{bulk} d}{\mu} \quad Re_{\alpha} = 2\rho\omega d^2/\mu \quad (4.1)$$

Önemli diğer bir parametre α sembolü ile ifade edilen denklem 4.2’de sunulan de dönüş oranıdır. Another important parameter in rotation rate α , defined as:

$$\alpha_{max} = \omega d/2U_{inlet_{max}} \quad \alpha = \omega d/2U_{bulk} \quad (4.2)$$

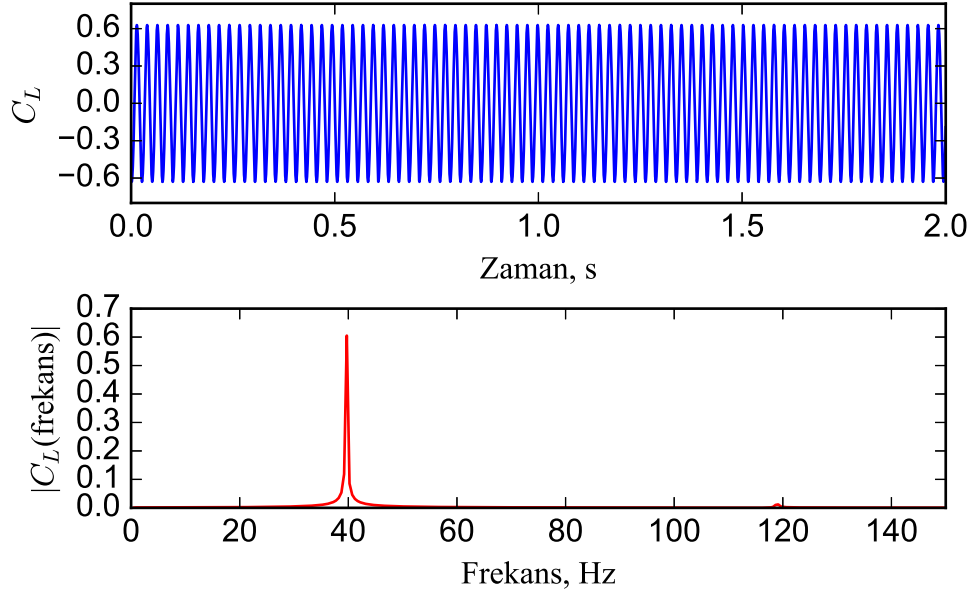
İncelenen durumlara karşılık gelen Reynolds sayıları ve dönüş oranları tablo 4.1’de sunulmuştur.

Çubuğun sabit tutulduğu durumda, silindi Şekil 4.5’de gösterildiği gibi baskın bir frekansta simetrik burgaçlar kopmaktadır. Baskın frekans, kaldırma katsayısı sinyalinin hızlı Fourier dönüşümünün maksimum genliğin denk geldiği frekans olarak tanımlanmıştır ve ortalama değerlerin hesaplanmasında bu hesaplanan frekanstan elde edilen 10



Şekil 4.5: Çubuğun sabit olduğu eşisıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.

periyot kullanılmıştır. Şekil 4.5’de gösterilen vortisite ve diğer bütün zamana bağlı şekillerde gösterilen zaman örnekleri kaldırma katsayısının ilk işaret değişimi, maksimumu, ikinci işaret değişimi ve minimumu olarak örneklendirilmiştir.



Şekil 4.6: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD’si ile baskın frekansının hesaplanması, RPM=0.

Silindirin sabit olduğu durum için baskın frekans 39.7 Hz olarak hesaplanmıştır.

Deney düzeneğindeki çubuk eksenini etrafında dönebildiğinden HAD hesaplamaları silindirin döndüğü durumlar için de gerçekleştirilmiştir. Silindirden kopan burgaçların çubuğun döndüğü durumlarda çubuğun dönüş yönünde itildiği gözlemlenmiştir.

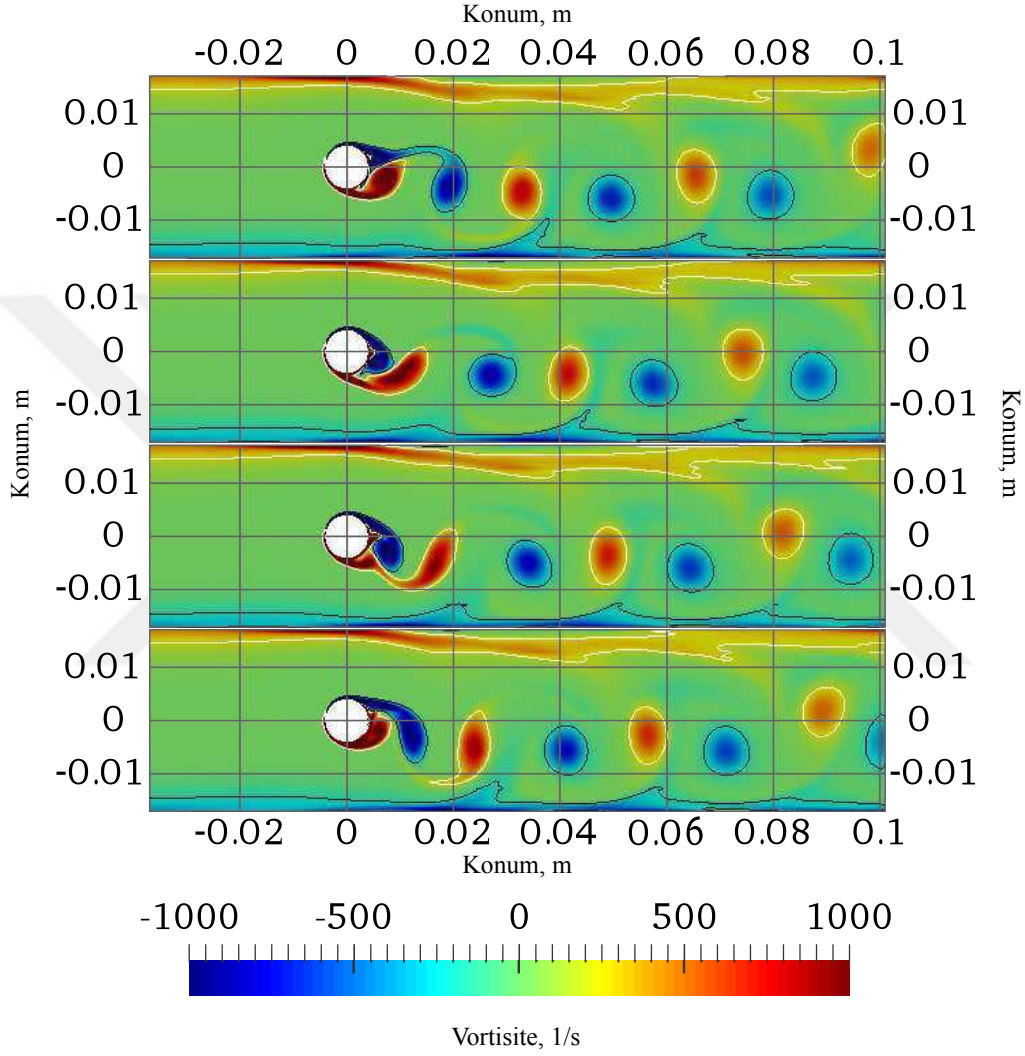
Çubuğun döndüğü durumlarda, silindirin sabit tutulduğu durumların aksine, kopan burgaç yapılarındaki simetri bozulmuştur. Çubuktan Karman burgaçları kopmaya devam etmektedir, fakat Şekil 4.8’de sunulduğu üzere kaldırma katsayısının ortalaması artık sıfır değildir. Bu durum silindirin bir tarafındaki yavaşlayan akışkanın silindiri tersi yönde itmesinden kaynaklanmaktadır. Aynı zamanda silindiri çevreleyen duvarların etrafındaki sınır tabaka da silindirin dönüşünden etkilenmiştir.

Aynı zamanda baskın frekans da değişmiş ve 2900 RPM dönüş hızı için 37.8 Hz değerine düşmüştür.

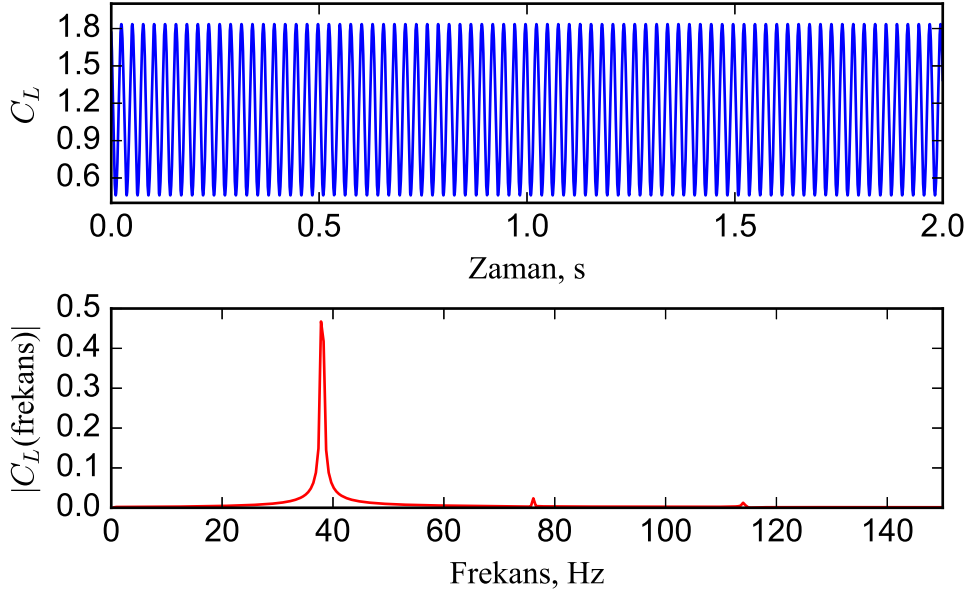
Şekil 4.9’de de görüldüğü üzere dönüş hızı arttırıldığında simetrisinin bozulması daha belirginleşmiştir. Burgaçlar yanma odasının duvarlarına doğru itilmiş ve burada duvar üzerindeki sınır tabakası ile etkileşime girdikten sonra yanma odasının simetri düzlemine doğru itilerek yanma odası dışına taşınmıştır.

Şekil 4.10’de sunulduğu üzere silindirin dönüşünden kaynaklanan kaldırma kuvvetinin ortalamasındaki artış daha da belirgin hale gelmiş, ve baskın frekans daha da düşerek 32.0 Hz olarak hesaplanmıştır.

Şekil 4.11’de de görüldüğü gibi silindirin dönüş hızı 7800 RPM’e çıkarıldığında HAD sonuçlarında bir değişiklik meydana gelmektedir. Burgaç kopması tamamen sonlanmış

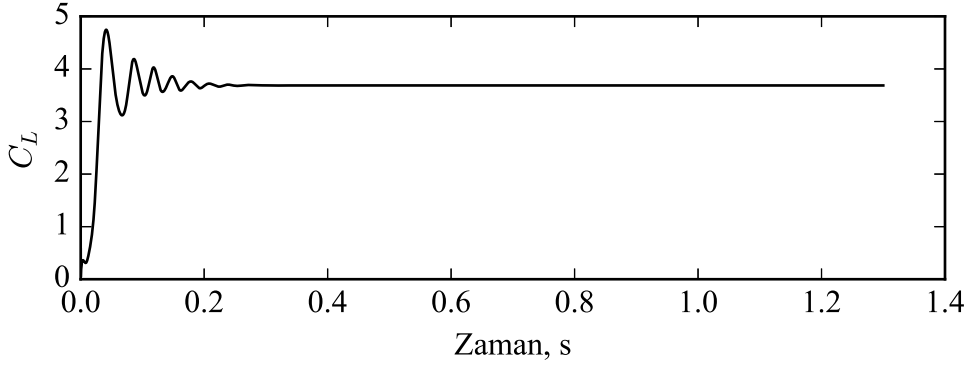


Şekil 4.7: Çubuğun 2900 RPM’de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.



Şekil 4.8: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile basınç frekansının hesaplanması, RPM=2900

ve akış kararlı hale yönelmiştir. Bu davranış kaldırma katsayılarında da gözlenmiş ve Şekil 4.11'de sunulmuştur.



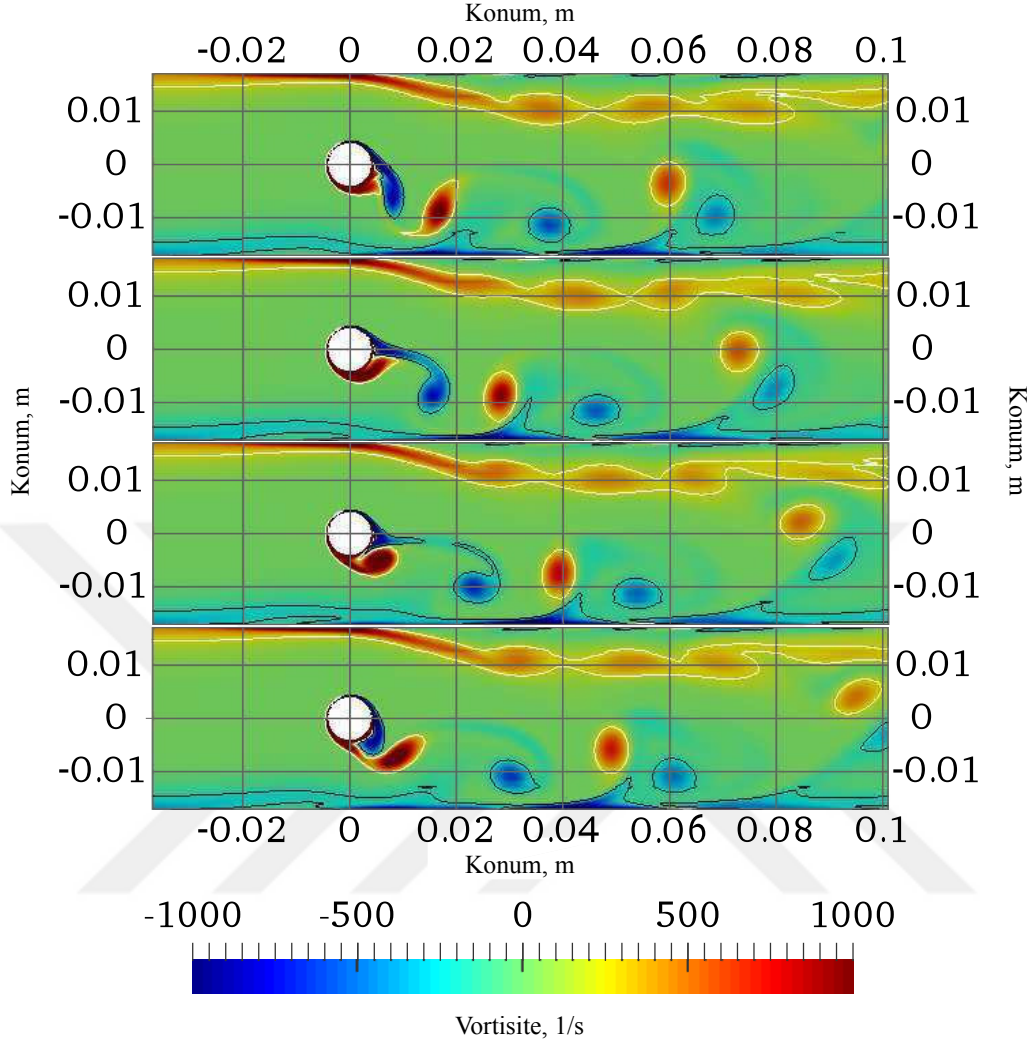
Şekil 4.11: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile basınç frekansının hesaplanması, RPM=7800.

Bu durum aynı zamanda Şekil 4.12'de sunulan vortisite görselinde de gözlemlenebilir.

Periyodik burgaç kopması durumlarında önemli diğer bir parametre de salınımların frekansını karakteristik uzunluklar ve akış hızına bağlayan Strouhal sayısıdır. Reynolds sayısının tanımında olduğu gibi Strouhal sayısının tanımında da kullanılan değişik formüller bulunmaktadır. Bu formüller denklem 4.3'da sunulmuştur.

$$St = \frac{fd}{U_{inlet,max}} \quad St_{\infty} = \frac{fd}{U_{bulk}} \quad (4.3)$$

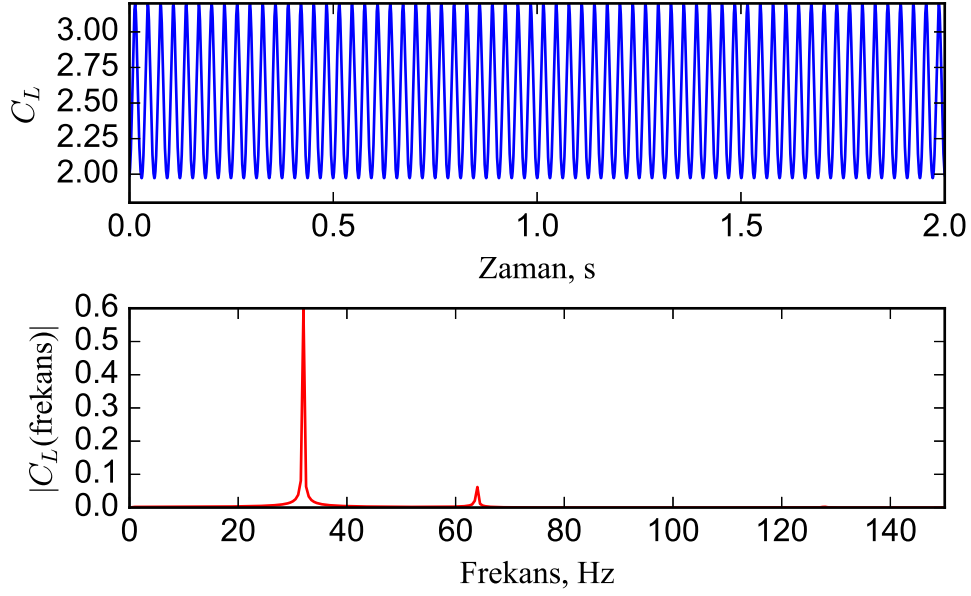
İki boyutlu eşışıl akışlarda gözlemlenen Strouhal sayıları tablo 4.2'da sunulmuştur.



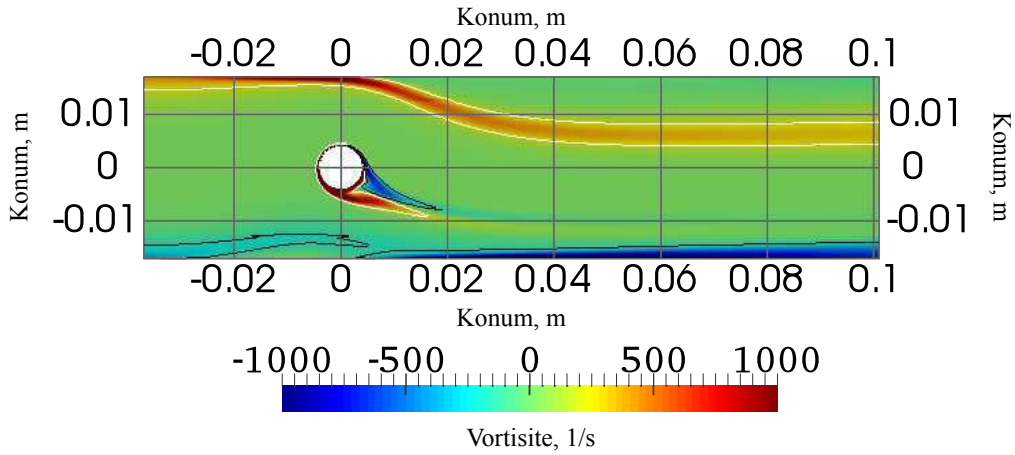
Şekil 4.9: Çubuğun 6000 RPM’de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.

Çizelge 4.2: Değişik kabuller kullanılarak hesaplanmış dönüş hızlarında Strouhal sayıları ve dönüş hızlarına denk gelen değerleri.

RPM	0	2900	6000	7800
Frequency	39.7	37.8	32	-
St	0.25	0.24	0.21	-
St_{∞}	0.30	0.28	0.24	-



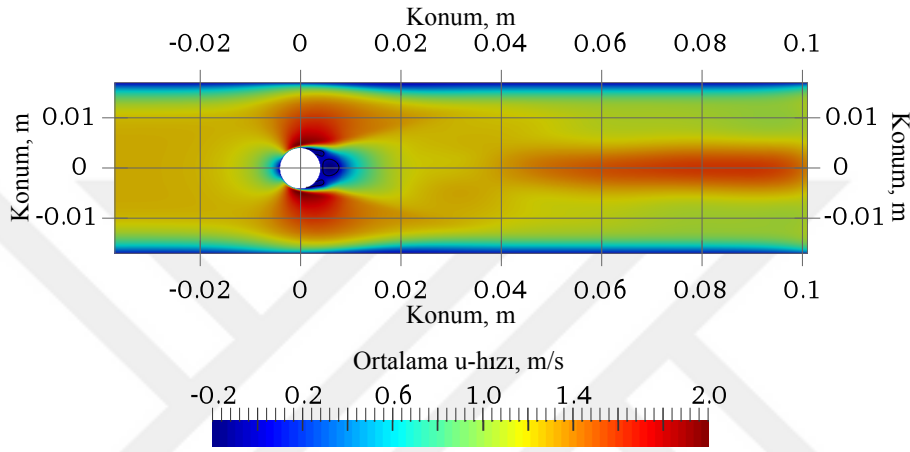
Şekil 4.10: Örneklenen silindir üzerindeki kaldırma katsayısı ve sinyalin HFD'si ile basınç frekansının hesaplanması, RPM=6000.



Şekil 4.12: Çubuğun 7800 RPM'de döndüğü eşışıl, 1.07 m/s yığın hız durumunda hesaplanan z-yönündeki vortisite. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür.

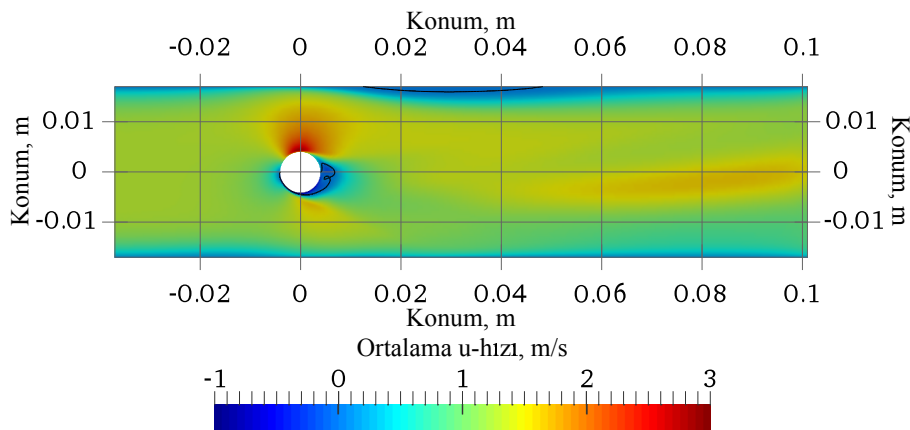
Literatürde Strouhal sayısının serbest akış için yaygın biçimde kabul edilen ≈ 0.21 değerinden [80] artan tıkanma oranları ile arttığı raporlanmıştır [43] [61] [63]. Dikkat edilmesi gereken durumlardan biri de literatürde Strouhal sayısının ölçümünde kullanılan deney düzeneklerinde Poiseuille profili kullanılmasına karşın deneylerde ölçülen değer bu profilden uzak olmasından dolayı deney düzeneği giriş hız profilini daha iyi temsil eden üssü pozisyon üssü 6 olan bir üstel profil kullanılmıştır.

Hız alanının Reynolds ortalaması hesaplanmış ve tür hesaplanan durumlar için sunulmuştur. Tüm görsellerde siyah çizgiler hız alanının x- yönündeki bileşeninin sıfır olduğu bölgeyi göstermekte ve bu çizginin içinde kalan akış hacmi geriye doğru yönlenebilmektedir.



Şekil 4.13: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynolds ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=0.

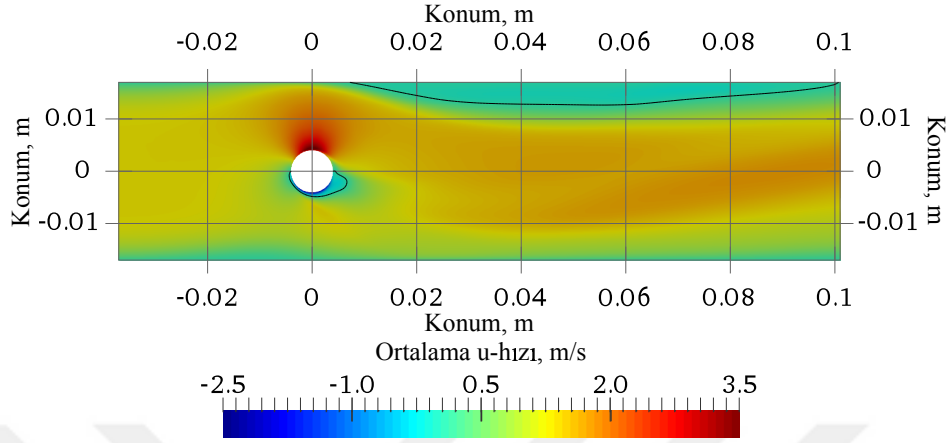
Şekil 4.13'de sunulan silindirin sabit olduğu durum için Reynolds ortalamalı hız alanının simetrik olduğu gözlemlenmiştir. Silindirin arkasında bir geri dönüş bölgesi ve bunun iki yanında küçük geri dönüş bölgeleri olduğu gözlemlenmiştir.



Şekil 4.14: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynolds ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=2900.

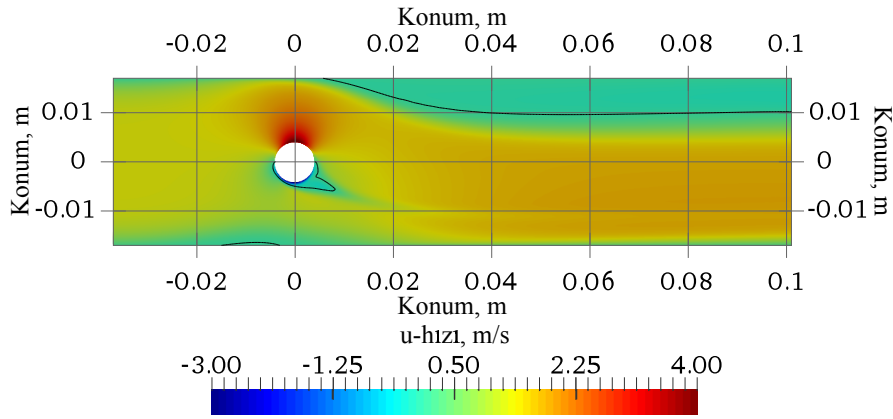
Silindirin döndüğü durumlar için Şekil 4.14'de görüldüğü üzere ortalama geri dönüş bölgesinin çubuk ile birlikte dönüş yönünde hareket ettiği gözlemlenmiştir. Diğer bir

önemli nokta da üst duvar sınır tabakasının ayrılması ile meydana gelen ortalama geri dönüş bölgesidir. Aynı zamanda silindirin üst tarafındaki akış, silindirin bu noktadaki çizgisel hızı ile aynı yönde olduğundan silindirin alt tarafındaki akış ve silindirin çizgisel hızının ters yönlere olduğu yavaşlayan akışın aksine hızlanmıştır, daha hızlıdır.



Şekil 4.15: Hız alanının x-yönündeki bileşeninin Reynolds ortalaması. Siyah çizgi ortalama geri dönüş bölgesini temsil eden, ortalama hız alanının x-yönündeki Reynolds ortalamasının sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=6000.

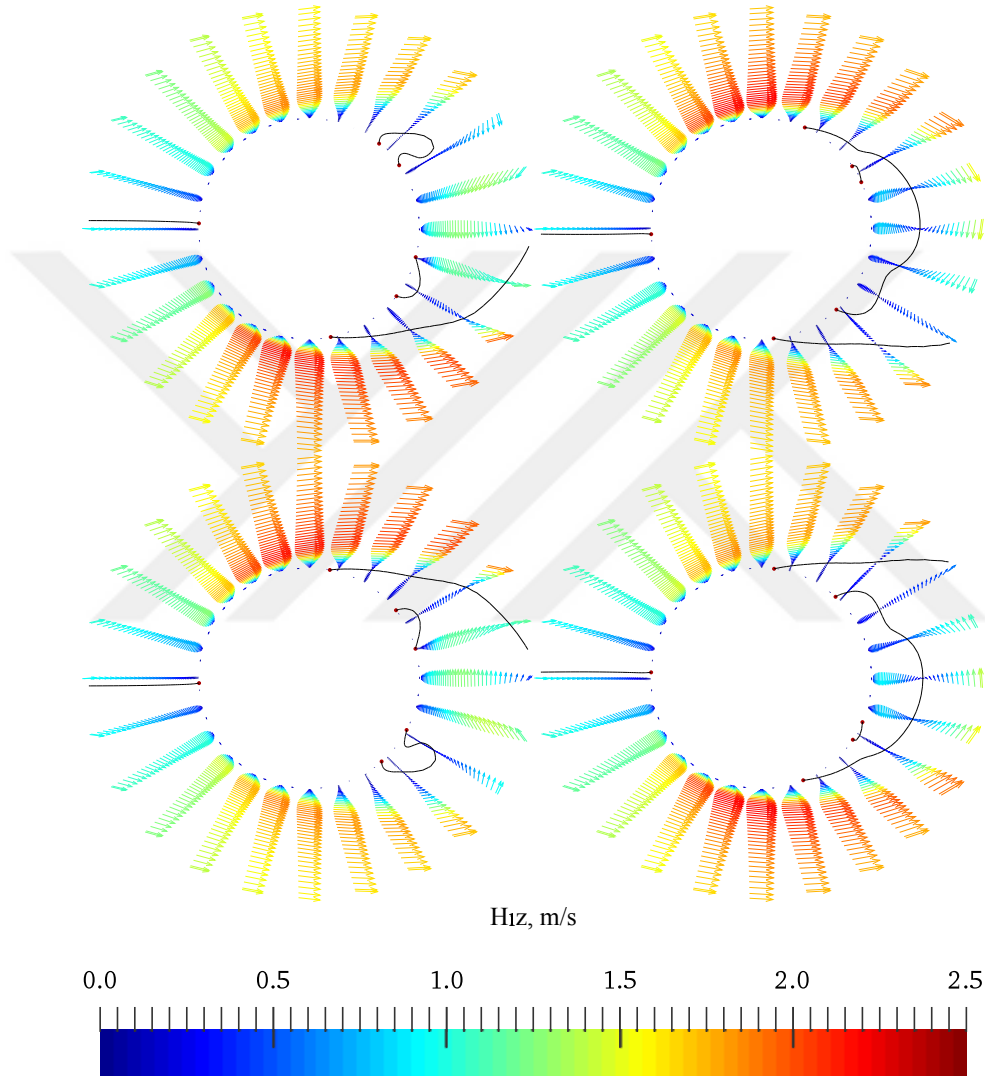
Silindirin dönüş hızı 6000 RPM'e kadar arttırıldığında geri dönüş bölgesi silindirle birlikte kaynak yönünde taşınmıştır. Şekil 4.15'de görülebileceği üzere üst duvardaki ortalama ayrılma bölgesi daha da büyümüşür. Aynı zamanda silindir arkası bölgede üst duvardaki ortalama geri dönüş bölgesinin büyümesinden dolayı kanalın alt yarısındaki ortalama akış hızı artmıştır.



Şekil 4.16: Hız alanının x-yönündeki bileşenini. Siyah çizgi geri dönüş bölgesini temsil eden, hız alanının x-yönündeki bileşeninin sıfır olduğu çizgiyi göstermektedir, RPM=7800.

Şekil 4.16'de sunulduğu üzere silindirin dönüş hızı 7800 RPM'e çıkarıldığında silindirin üzerindeki ayrılma bölgesi daha da büyümüş ve aynı zamanda akış kararlı hale gelmiştir. Aynı zamanda alt duvarda oluşmaya başlayan yeni bir ayrılma bölgesi meydana gelmiştir.

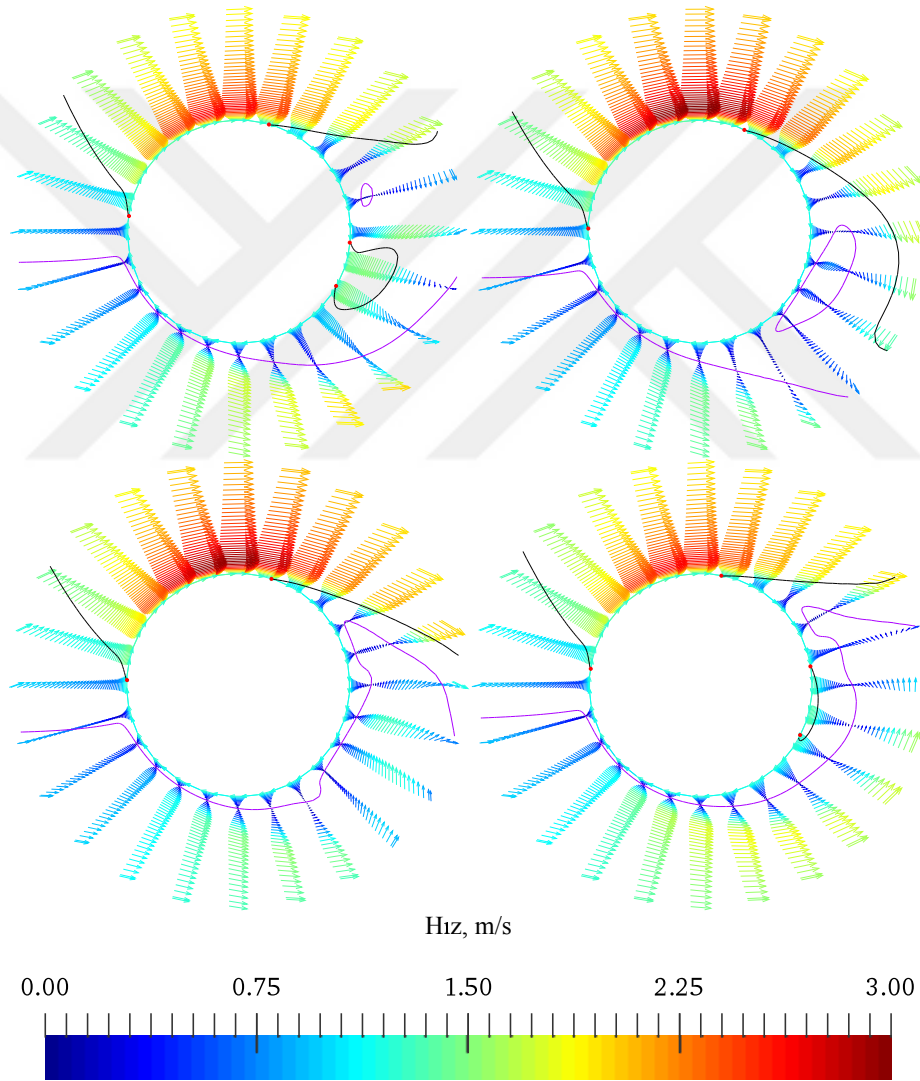
Dairesel engeller üzerindeki akış için sınır tabaka ayrılma ve tekrar birleşme bölgelerinin tayini silindir arkası bölgede kayma tabakalarının birleşmesi ve dairesel engel



Şekil 4.17: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=0.

boyunca akış yönü ile teğetsel normal arasındaki açı değiştiği için akış yönünün tayininin güçlüğünden dolayı zorlayıcı bir durumdur. Teğetsel yöndeki kayma gerilmesinin sıfır olduğu bölgelerde normal yöndeki hız türevi sıfır olduğundan sınır tabaka ayrılma noktalarının tayininde teğetsel yöndeki kayma gerilmesi kullanılmıştır.

Şekil 4.17'de de görüldüğü üzere sınır tabaka ayrılma noktaları zamana bağlı olarak hareket etmektedir. Silindirin sabit olduğu durumlarda silindirin arkasında kalan bölgede akış burçlu olduğundan hızın y-bileşeni zamana bağlı olarak işaret değiştirmektedir. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi temsil etmektedir.

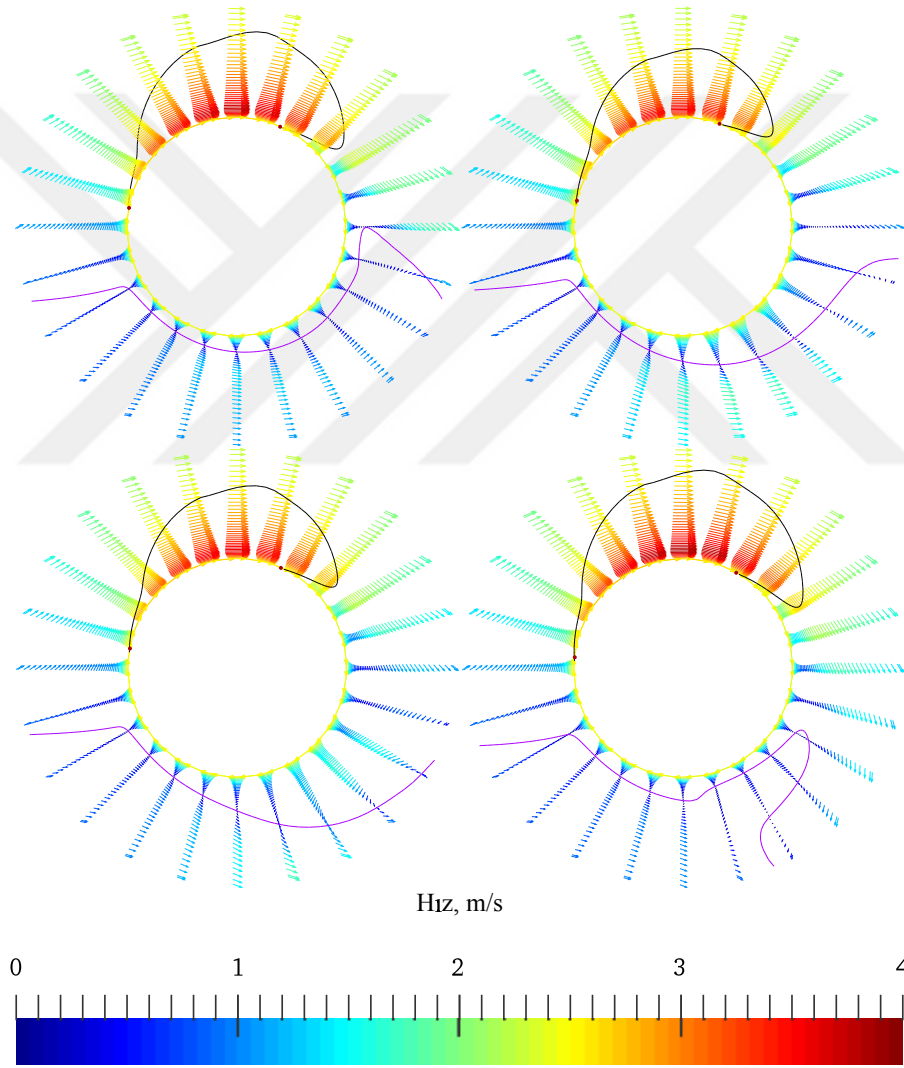


Şekil 4.18: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=2900.

Silindirin döndüğü durumlarda, silindirin dönüşü ve kaymazlık koşulunun oluşturduğu hız gradyanından kaynaklanan silindir çizgisel hızına eşit bir eşyüzey hızı tanımlaması ihtiyacını doğurmaktadır. Sınır tabaka ayrılma bölgesi, silindir üzerindeki yüzey normal boyunca teğetsel hızın tanımlanan çizgisel hızdan düşük olduğu bölgeler olarak

düşünülebilir. Bu bölgelerde akış silindirin dönüş hızından daha yavaş kalmakta ve sınır tabaka boyunca geriye doğru akmaktadır.

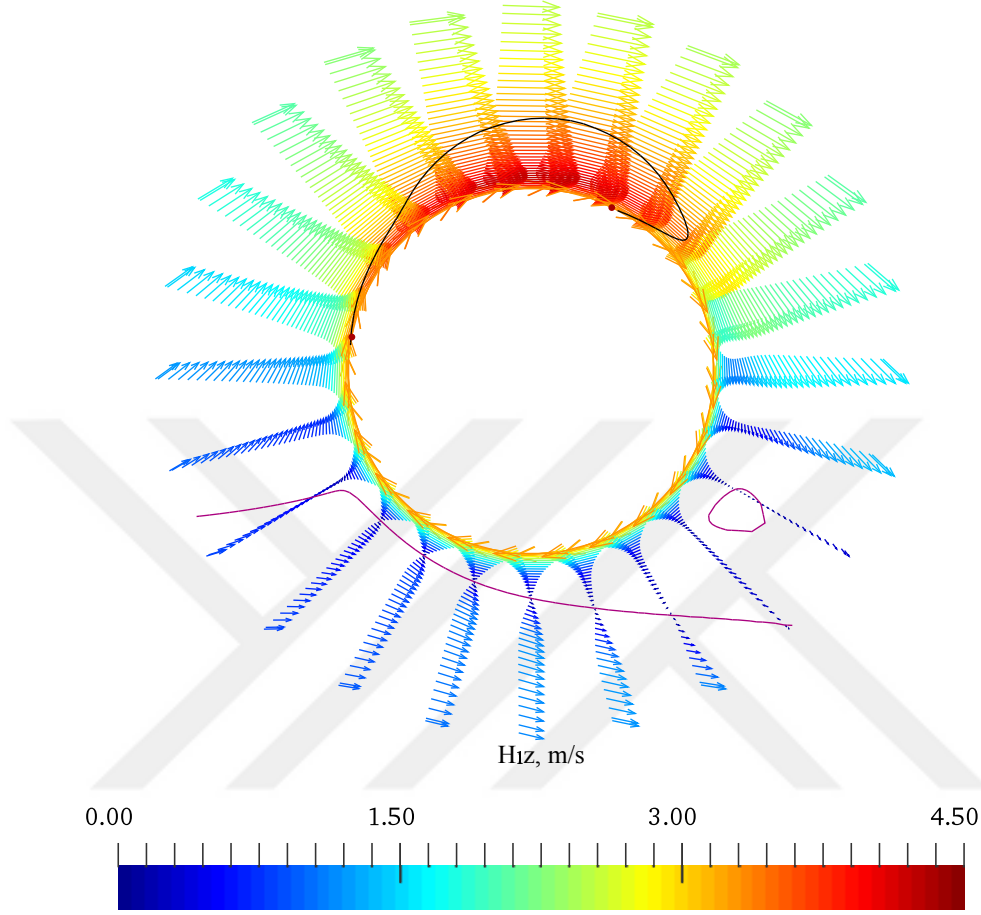
Şekil 4.18’de sunulduğu üzere silindirin döndüğü durumlarda silindirin ön tarafındaki durma bölgesi silindirin dönüşü ile beraber aynı yönde ilerlemektedir. Dikkate değer diğer bir konu da ikiz sınır tabaka ayrılma-birleşme noktalarının bu durumda görülmemeleridir, ikiz sınır tabaka ayrılma-birleşme noktaları birleşmiş ve zamana bağlı olarak oluşup yok olan bir yapı haline gelmiştir. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler akış teğetsel hızının silindir çizgisel hızına eşit olduğu bölgeleri, mor çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi göstermektedir.



Şekil 4.19: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri, RPM=6000.

Şekil 4.19 Silindirin daha yavaş döndüğü durumlarda gözlenen, silindir üzerindeki sınır tabaka ayrılma-birleşme noktaları silindir 6000 RPM’de dönerken tamamen yok olmuş ve sunulan zaman örneklerinde görülmemektedir. Sınır tabaka silindirin üst tarafında ayrılmamış, fakat alt tarafında ayrılmıştır. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine

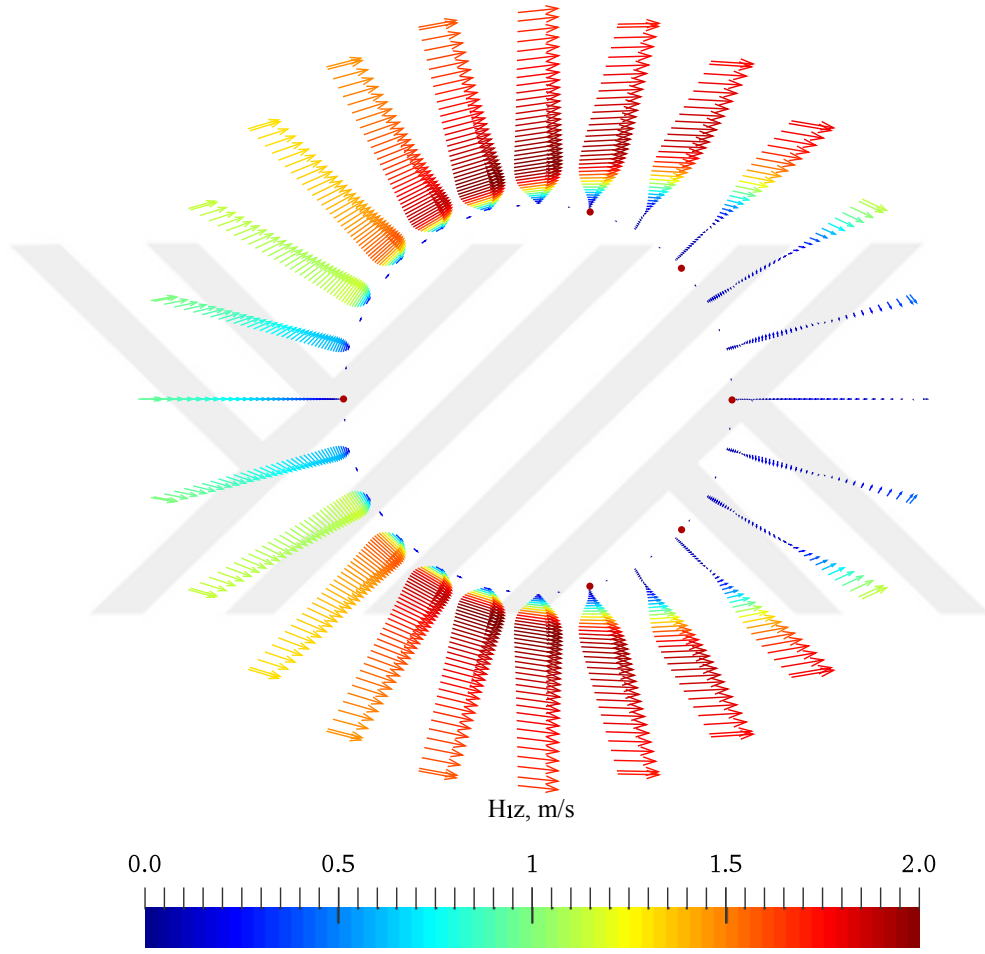
bölünmüştür. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler akış teğetsel hızının silindirin çizgisel hızına eşit olduğu bölgeleri, mor çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi göstermektedir.



Şekil 4.20: Hız büyüklüğü ile renklendirilen hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler akış teğetsel hızının silindirin çizgisel hızına eşit olduğu bölgeleri, mor çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi göstermektedir, RPM=7800. Akış kararlı duruma ulaşmıştır.

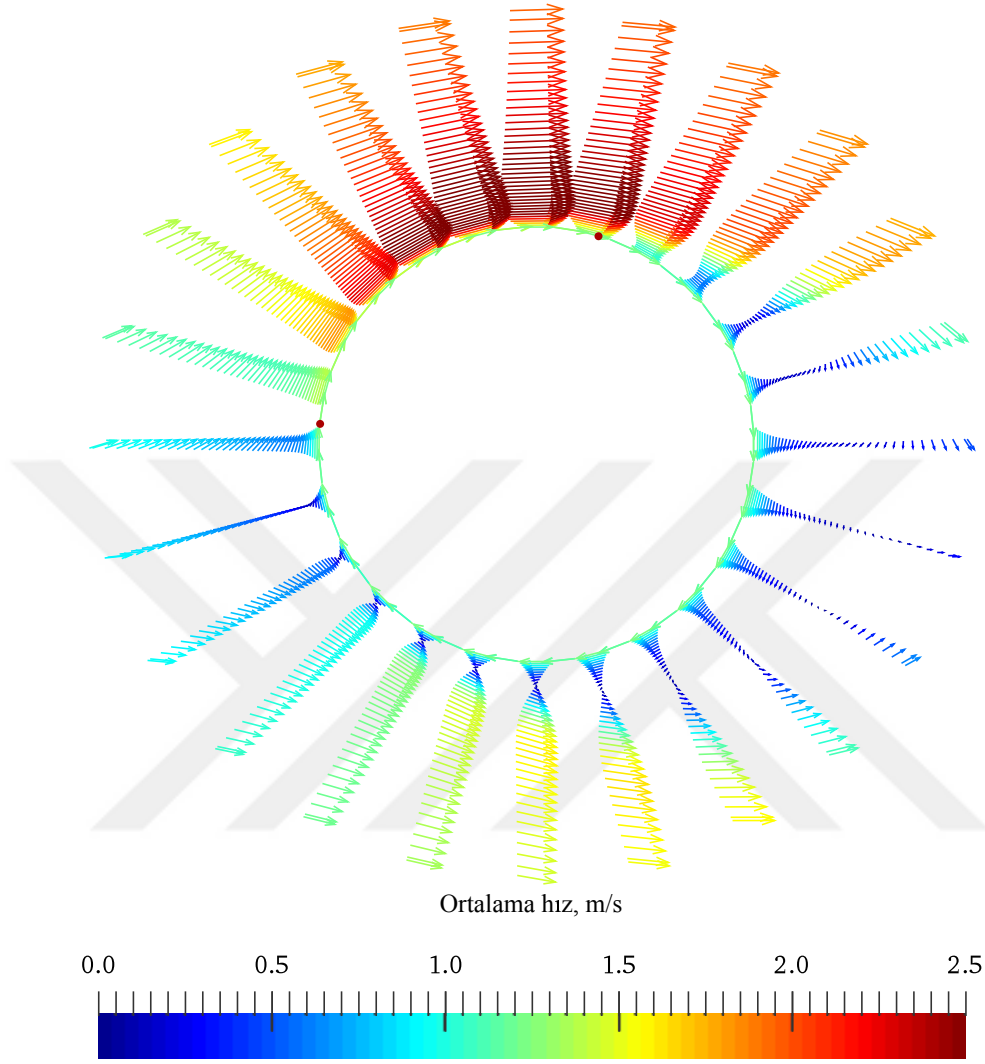
Dönüş hızı 7800 RPM'e yükseltildiğinde akış kararlı hale ulaşmaktadır. Şekil 4.20 de sunulduğu üzere silindirin altında kalan bölgede sınır tabakanın ayrıldığı bir bölge mevcuttur. Kopma periyodu, kaldırma katsayısının işaret değişimleri, azami ve asgari değerlerine denk gelecek şekilde dört zaman örneğine bölünmüştür. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur. Siyah çizgiler akış teğetsel hızının silindirin çizgisel hızına eşit olduğu bölgeleri, mor çizgiler teğetsel hızın sıfır olduğu bölgeyi göstermektedir.

Kayma gerilmesinin zamana bağlı ortalaması, ortalama sınır tabaka ayrılma bölgesi hakkında bilgi verebilir. Bu ortalama ayrılma bölgeleri duvar kayma gerilmesinin ortalamasının teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmıştır.



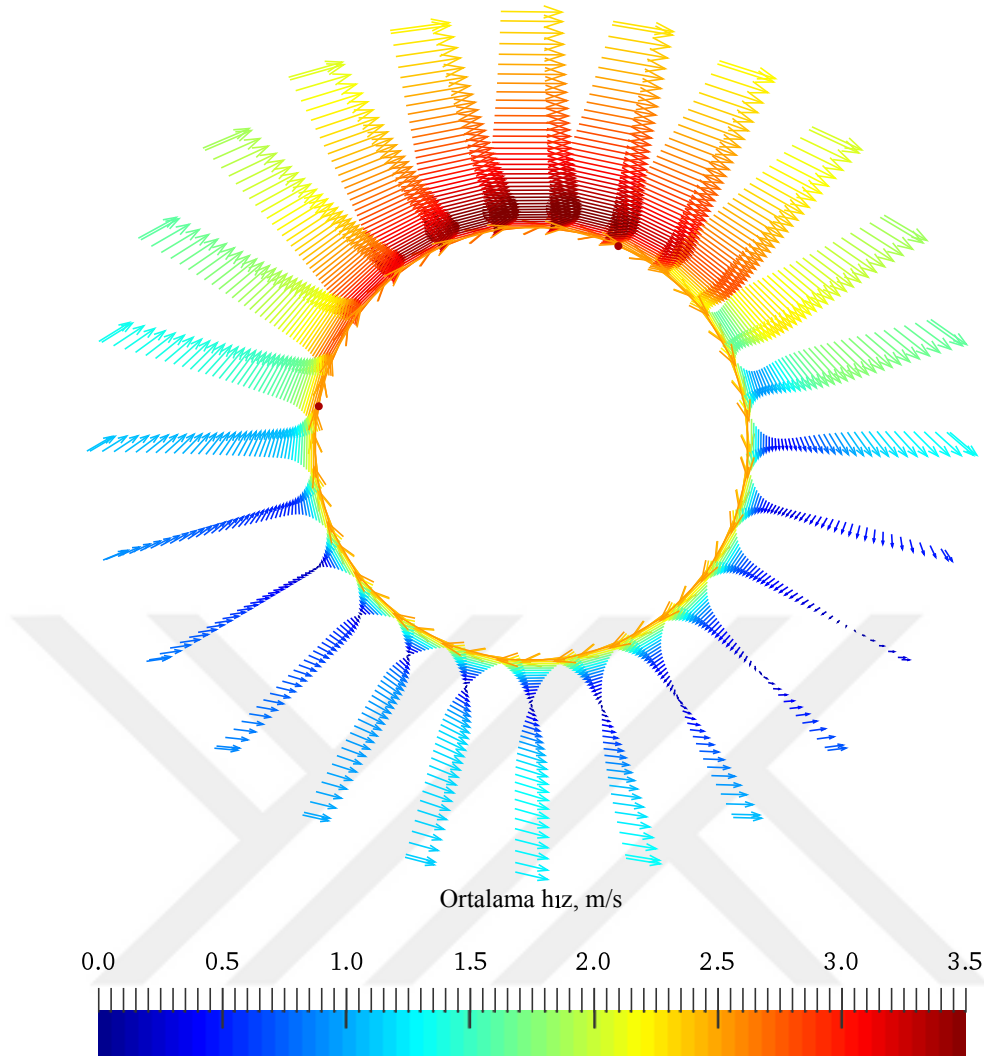
Şekil 4.21: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=0.

Şekil 4.21’de silindirin x yönündeki maksimum ve minimum noktalarındaki teğetsel duvar kayma gerilmesinin sıfır olduğu durma noktaları görülebilir. Aynı zamanda ortalama sınır tabaka ayrılma ve birleşme noktaları simetrik ikizler olarak görülmektedir.



Şekil 4.22: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=2900.

Şekil 4.22’de sunulduğu üzere silindir 2900 RPM’de dönerken ortalama ayrılma noktalarının simetrisi bozulmuştur. Bu durumda silindirin üst tarafında bulunan sadece iki ayrılma noktası vardır.



Şekil 4.23: Ortalama hız büyüklüğü ile renklendirilen ortalama hız vektörleri. Ayrılma bölgesi duvar üzerindeki ortalama kayma gerilmesinin teğetsel bileşeninin sıfır olduğu noktalar olarak tanımlanmış ve koyu kırmızı noktalar olarak sunulmuştur, RPM=6000.

Şekil 4.23’de silindir 6000 RPM’de dönerken elde edilmiş ortalama sınır tabaka ayrılma noktaları sunulmuştur. Ortalama ayrılma noktalarının silindirin dönüşü ile birlikte aynı yönde ilerledikleri gözlemlenmiştir.

4.2 Denge Kimyası ve Bir Boyutlu Alev Hesaplamaları

Serbestçe yayılan bir alevi temsil eden denklemler karalı, eşbasıncılı, sanki bir boyutlu haldedir ve taşınım ve yayılım terimlerini içerir [44]. Alev cepheleri sarp gradyanlar barındırdığından doğru sonuçların eldesi için yeterli sayıda noktalarla sonlu fark çözünürlüğünü sağlamak önemlidir.

Hidrojenle zenginleştirilmiş metan alevlerinin incelenmesi için, hidrojen oranını bakımından genişçe bir aralıkta geçerli, doğruluğunu koruyan ve aynı zamanda bilgisayar gücü bakımından masraflı HAD hesaplamalarında kullanılmak üzere basitleştirilmiş

kimyasal mekanizmalar gereklidir. Bu çalışmada metan alevleri için geliştirilen GRI-Mech 3.0 [72] mekanizması, 19-kimyasal tür içeren Lu ve Law tarafından basitleştirilmiş bir mekanizma olan LU19 mekanizması [50], Sankaran et. al. tarafından basitleştirilmiş 13-kimyasal tür içeren bir mekanizma [65] ve hidrojen alevleri için geliştirilmiş San Diego mekanizması [64] kullanılarak literatürdeki deneysel verilerle karşılaştırmalar aracılığıyla bu mekanizmaların alev hızı ve kendiliğinden tutuşma zamanı gibi önemli parametrelerin tahminindeki uygunluğu araştırılmıştır.

4.2.1 Serbestçe yayılan alev korunum denklemleri

Hal denklemi:

$$\rho = \frac{pW}{RT} \quad (4.4)$$

Denklem 4.4'de sunulan W ortalama moleküler kütle olup 4.5'de sunulduğu gibi ifade edilmektedir.

$$W = \sum_{k=1}^{K_g} X_k W_k \quad (4.5)$$

Net kütle akısı:

$$\dot{m}'' = \rho u \quad (4.6)$$

Kimyasal tür denklemi:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \dot{m}'' \frac{\partial Y_k}{\partial z} = -\frac{\partial j_k}{\partial z} + \dot{\omega}_k W_k \quad (4.7)$$

Enerji denklemi:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \dot{m}'' c_p \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_{k=1}^K c_{pk} j_{k,z} \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k \quad (4.8)$$

Aksi belirtilmediği sürece karışım ortalamalı taşınım özellikleri kullanılmıştır. Bu kabulde kimyasal türlerin yayınım akıları denklem 4.9'da gösterildiği gibi ifade edilmiştir.

$$j_k = -\rho \frac{W_k}{W} D'_{km} \frac{\partial X_k}{\partial z} \quad (4.9)$$

Denklem 4.9'de sunulan D'_{km} terimi k türünün karışım içindeki yayınma katsayısı olup denklem 4.10'da sunulduğu gibi ifade edilmiştir:

$$D'_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^K X_j / D_{jk}} \quad (4.10)$$

Denklem 4.10'de sunulan D_{jk} terimi j kimyasal türünün k kimyasal türü içindeki ikili yayınım katsayısıdır.

Isıl yayılım katsayısı denklem 4.11'deki sunulduğu haliyle tanımlanmıştır:

$$\lambda = 0.5 \left(\sum_k X_k \lambda_k + \frac{1}{\sum_k X_k / \lambda_k} \right) \quad (4.11)$$

k kimyasal türünün net üretim/tüketim hızı $\dot{\omega}_k$ denklem 4.12'de tanımlanmıştır:

$$\dot{\omega}_k = \sum_i v_{ki} q_i \quad v_{ki} = v''_{ki} - v'_{ki} \quad (4.12)$$

Denklem 4.12'deki q_i , i reaksiyonunun ilerleme hızı olup denklem 4.13'de tanımlanmıştır:

$$q_i = \left(\sum_{k=1}^K \alpha_{ki} [X_k] \right) \left(k_{f,i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{ki}} - k_{r,i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{ki}} \right) \quad (4.13)$$

Denklem 4.13'de sunulan α_{ki} , üçüncül kütlelerin i tepkimesindeki çarpışma verimidir.

İleri tepkime hızının Arrhenius formu denklem 4.14'de sunulmuştur:

$$k_{f,i} = AT^\beta e^{-E/RT} \quad (4.14)$$

Geri tepkime hızları denklem 4.16'deki sunulduğu haliyle denge sabitlerinden hesaplanmaktadır ve denklem 4.15'de sunulmuştur:

$$k_{r,i} = \frac{k_{f,i}}{K_{c,i}} \quad (4.15)$$

Denge sabitleri denklem 4.16'de sunulduğu şekliyle hesaplanmaktadır:

$$K_{c,i} = \left(\frac{p^0}{RT} \right)^{v_i} \exp \left(\frac{\Delta S_{r,i}^0}{R} - \frac{\Delta H_{r,i}^0}{RT} \right) \quad (4.16)$$

Denklem 4.16'da sunulan p^0 , $\Delta S_{r,i}^0$ ve $\Delta H_{r,i}^0$ terimleri sırasıyla referans basınç, entropi ve entalpileri temsil etmektedir.

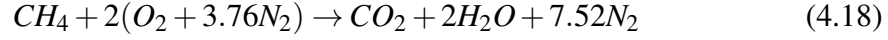
Bu denklemler açık kaynak bir kimyasal reaksiyon çözücüsü olan Cantera [25] yazılımı kullanılarak çözümlenip kullanılan kimyasal mekanizmaya karşılık gelen adyabatik laminar gerinimsiz alev hızları hesaplanmıştır.

Bu çalışmanın önemli hedeflerinden biri hidrojenin alev üzerindeki etkilerini araştırmak olduğundan, metan-hidrojen karışımı içindeki hidrojen miktarının belirlenmesi gerekmektedir. Bu miktarın karışımdaki H_2 miktarını belirleyen normalleştirilmiş molar bir oran olarak tanımlanması kolaylıklar sağlayacaktır. Bu büyüklük hidrojenin hidrojen-metan karışımındaki molar oranı olarak tanımlanmış ve denklem 4.17'de sunulmuştur.

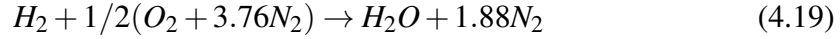
$$X_{H_2}^{fuel} = \frac{X_{H_2}}{X_{H_2} + X_{CH_4}} \quad (4.17)$$

Denklem 4.17'deki X_{H_2} termi hidrojenin yakıt içindeki molar oranını temsil etmektedir.

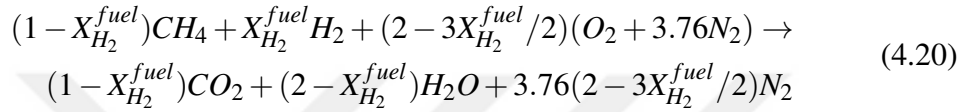
Yakıt metan ve hidrojen içerdiğinden, kimyasal denge ve eşdeğerlilik katsayısı değerleri gözden geçirilmelidir. Metan/hava tepkimeleri için stokiyometrik denge denklemi denklem 4.18'de sunulduğu haliyle yazılabilir:



Aynı şekilde hidrojen/hava tepkimeleri için stokiyometrik denge denklemi denklem 4.18'de sunulmuştur:



Ve $CH_4 - H_2$ karışımı için stokiyometrik denge denklemi denklem 4.20'de sunulduğu haliyle yazılabilir:



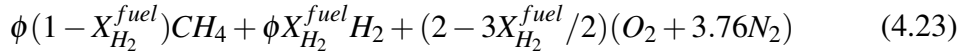
Stokiyometrik kütle oran s [57] referansında belirtildiği şekliyle denklem 4.21'de sunulduğu haliyle tanımlanabilir:

$$\left(\frac{Y_O}{Y_F}\right)_{st} = \frac{v'_O W_O}{v_F W_F} = s \quad (4.21)$$

Bu aşamada stokiyometrik oran [57]'de belirtildiği gibi denklem 4.22'de sunulduğu haliyle tanımlanabilir:

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} = \left(\frac{Y_F}{Y_O}\right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O}\right)_{st} \quad (4.22)$$

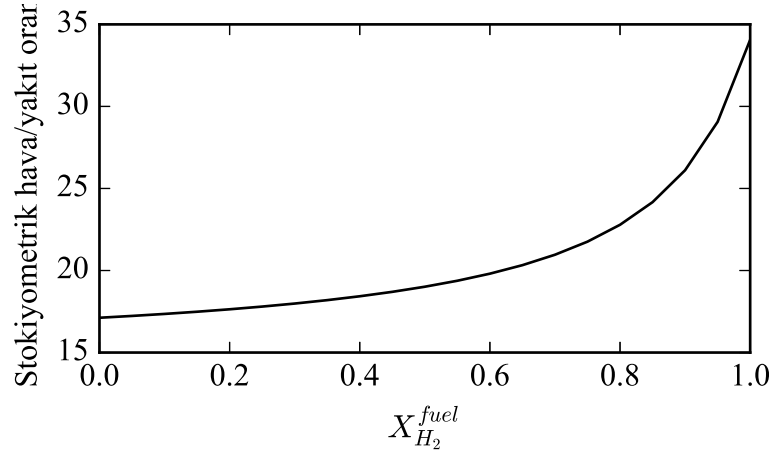
Zengin ve fakir karışımları temsil edecek şekilde kimyasal tepkimenin tepken tarafı denklem 4.23'de sunulmuştur:



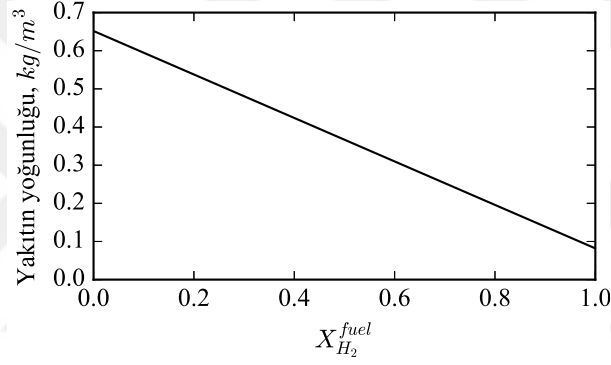
Hidrojenin kütle alt ısıl değeri (120 MJ/kg) çok yüksek olmasına rağmen, Şekil 4.25'de de sunulan düşük yoğunluğundan dolayı hacimsel alt ısıl değeri (9.82 MJ/m^3) metana göre düşüktür. Bu durum Şekil 4.27'de sunulmuştur. Şekil 4.26 hidrojen-metan/hava karışımlarının hidrojen oranına karşılık gelen yoğunluklarını göstermektedir. GRI-Mech 3.0 [72] kaynaklı termodinamik özelliklerle eş basınç ve entalpi için kimyasal denge hesaplamaları Cantera [25] yazılımı ile gerçekleştirilmiş ve sonuçlar Şekil 4.28'de sunulmuştur.

Alev hızlarının hesaplanmasında metan kimyası için kalibre edilmiş GRI-Mech 3.0 [72] mekanizması, hesaplama verimi için sanki-kararlı hal türlerinin analitik yöntemlerle çözüldüğü 19-kimyasal tür içeren LU19 mekanizması [50], 13-kimyasal tür içeren basitleştirilmiş LU19 mekanizması [65] ve hidrojen alevleri için kalibre edilmiş San Deigo mekanizması [64] kullanılmıştır. Adyabatik serbestçe yayılan alev denklemleri nesne yönelimli kimyasal kinetik yazılımı Cantera [25] sayısal yöntemler kullanılarak çözülmüştür.

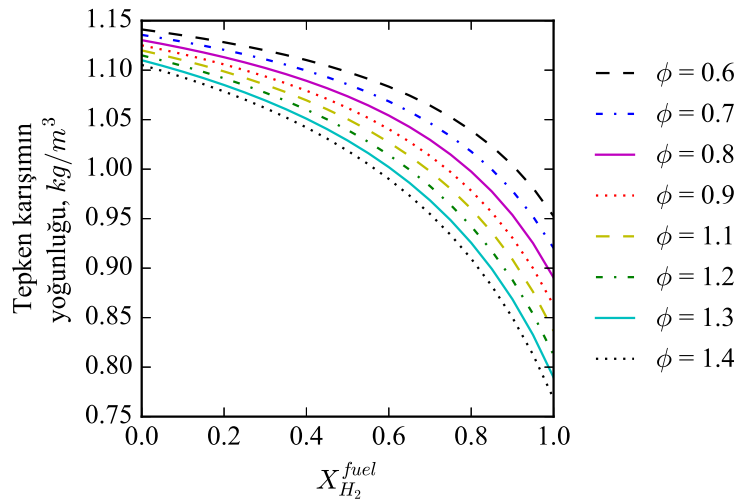
Şekil 4.29, 4.30 ve 4.31'den görülebileceği üzere GRI-Mech 3.0 mekanizması deneysel sonuçları yakın bir şekilde temsil etmekte ve saf hidrojen alevleri için de San Diego



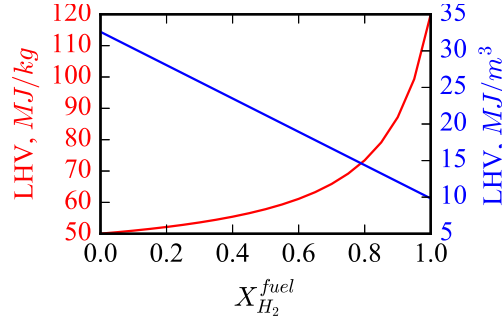
Şekil 4.24: Metan-hidrojen karışımlarının stokiyometrik hava/yakıt oranları.



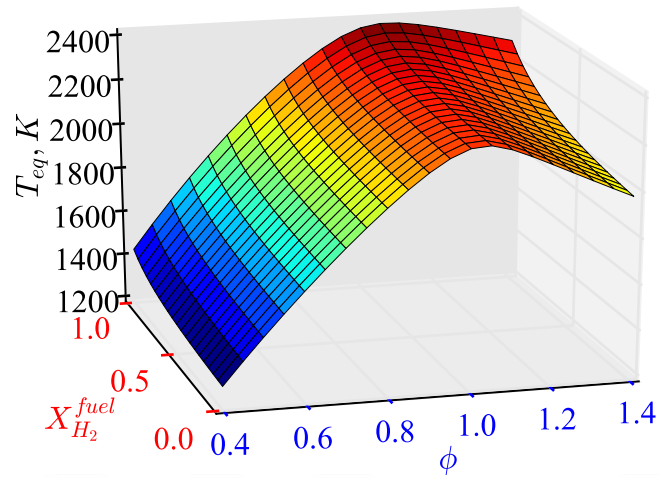
Şekil 4.25: Metan-hidrojen karışımlarının 300 K sıcaklık ve atmosferik basınçtaki yoğunlukları.



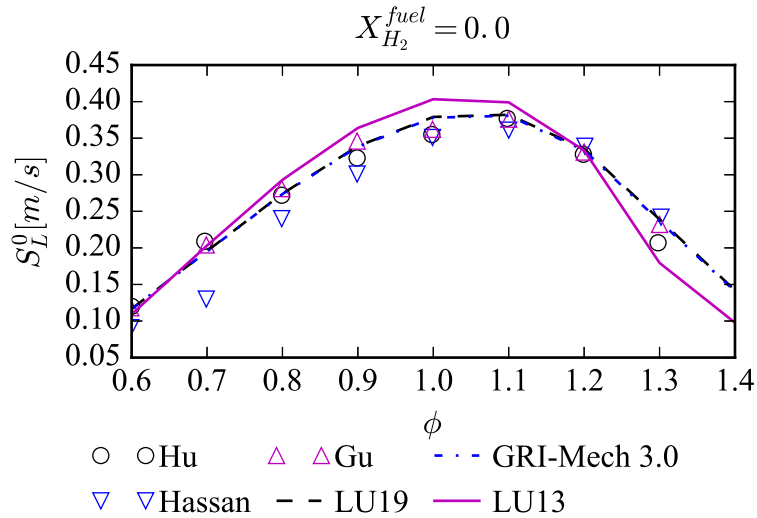
Şekil 4.26: Hidrojen-metan/hava karışımları için eşdeğerlilik katsayısı ve hidrojen oranına denk gelen 300 K sıcaklık ve atmosferik basınçtaki yoğunlukları.



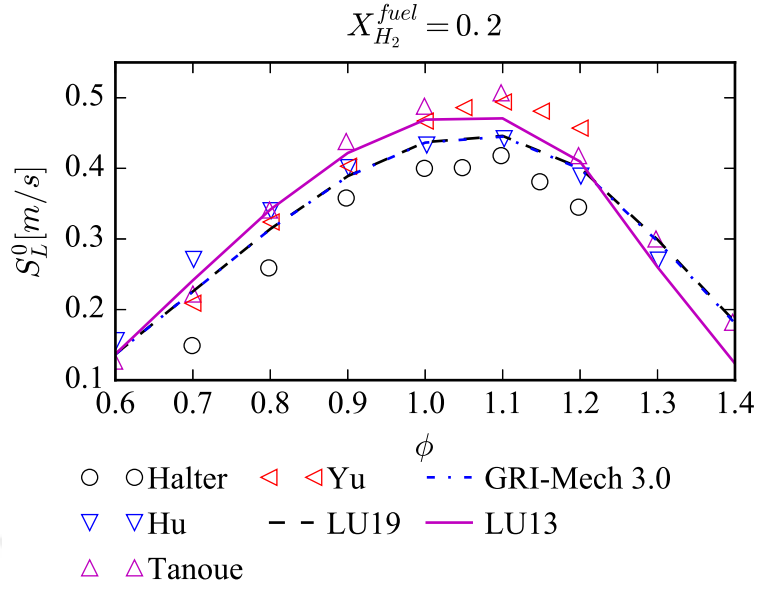
Şekil 4.27: Hidrojen-metan karışımları için alt ısıl değerleri.



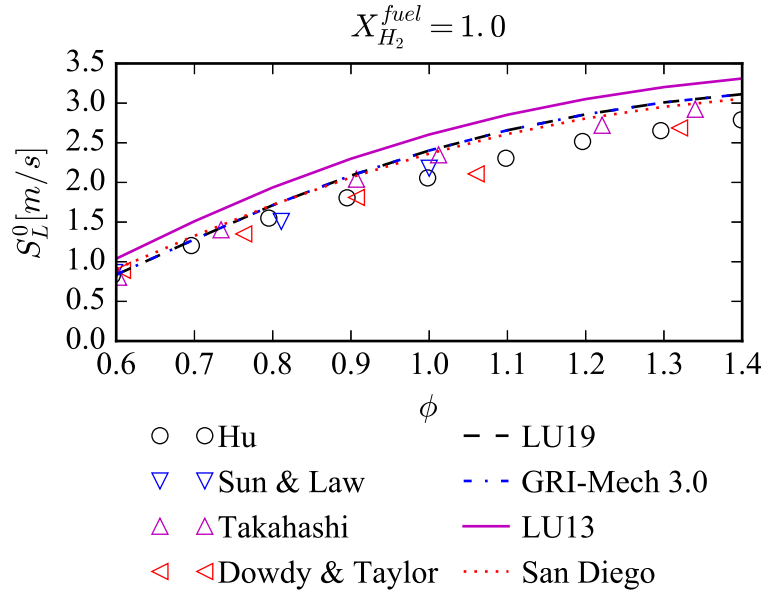
Şekil 4.28: 300 K sıcaklıkta atmosferik basıncındaki tepkenler için hesaplanan eşdeğerlilik oranı - hidrojen oranı uzayındaki denge sıcaklığı sonuçları.



Şekil 4.29: 300 K önkarışım sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki saf metan/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesaplamaları, imleçler Gu et. al. [27], Hu et. al. [33] ve Hassan et. al. [31]'in deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.

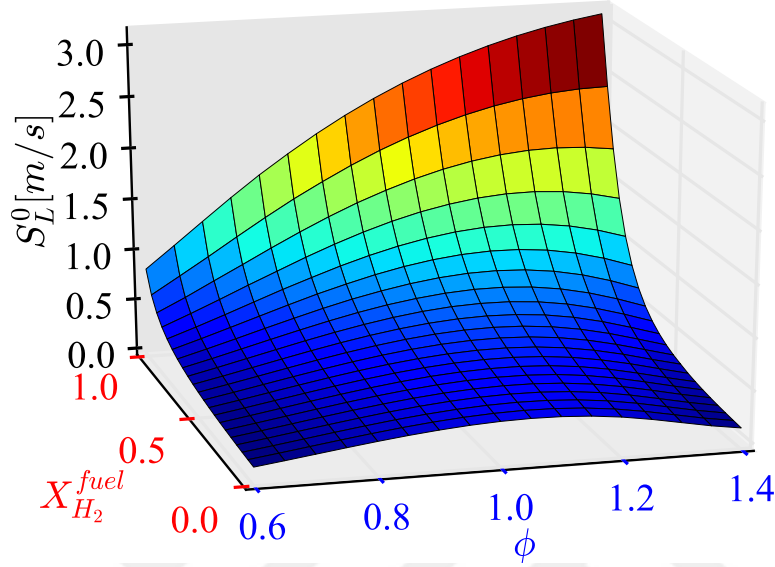


Şekil 4.30: 300 K önkarişım sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki %20 oranında hid-rojen ile zenginleştirilmiş-metan/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesaplamaları, imleçler Halter et al.[30] , Hu et al. [33]; Tanoue et al. [76] ve Yu et al. [83]'in deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.



Şekil 4.31: 300 K önkarişım sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki saf hidrojen/hava karışımları için alev hızları. Çizgiler sayısal hesaplamaları, imleçler Dowdy et al. [16]; Hu et al. [33]; Sun et al. [73]; Takahashi et al. [74]'in deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.

mekanizmasına çok yakın sonuçlar vermektedir. Aynı zamanda basitleştirilmiş bir mekanizma olan LU19 ve GRI-Mech 3.0 arasında mükemmel bir anlaşma vardır. LU19 mekanizması fakir metan alevleri için iyi sonuçlar vermesine karşın hidrojen oranı yada eşdeğerlilik oranı arttırıldığında alev hızları hafifçe kaymaktadır.



Şekil 4.32: 300 K tepken sıcaklığı ve atmosferik basınç altındaki GRI-Mech 3.0 kimyasal mekanizması ile hesaplanan alevler için molar hidrojen oranı ve eşdeğerlilik oranı uzayındaki alev hızları.

4.2.2 Kendiliğinden tutuşma zamanları

Pistonlu motorlar gibi mühendislik sistemleri için de önemli diğer bir husus da kendiliğinden tutuşma zamanıdır. Kendiliğinden tutuşma zamanlarının hesaplanmasında sabit basınç, sıfır boyutlu zamana bağlı reaktör denklemleri Cantera [25] yazılımı ile sayısal olarak çözülmüştür. Bu denklemler aşağıda sunulmuştur.

Kimyasal tür korunum denklemi:

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{\dot{\omega}_k W_k}{\rho} \quad (4.24)$$

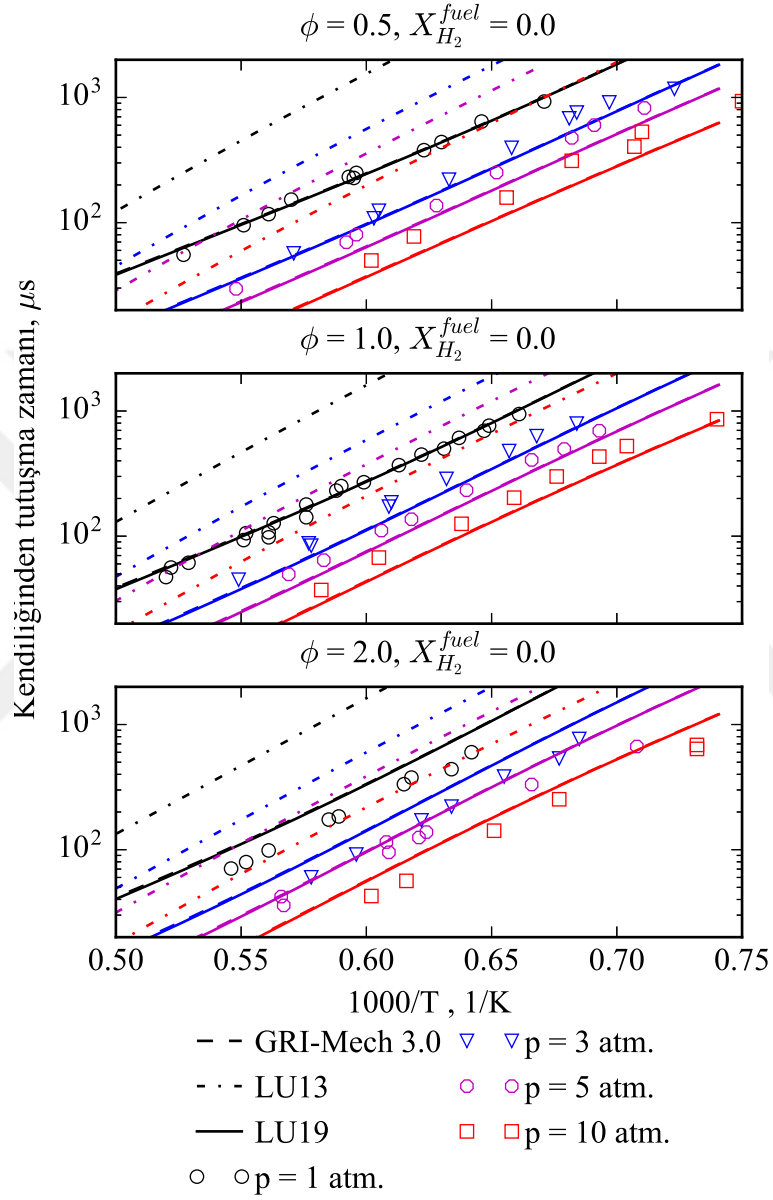
İdeal gaz denklemi:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum Y_k / W_k} \quad (4.25)$$

Entalpi denklemi:

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = - \sum h_k \dot{\omega}_k W_k \quad (4.26)$$

Şekil 4.33'de hesaplama yöntemlerinin ve kimyasal mekanizmaların doğruluğunun araştırıldığı karşılaştırmalı değerlendirme çalışmalarının sonuçları sunulmuştur.



Şekil 4.33: Hesaplanan kendiliğinden tutuşma zamanlarının değişik eşdeğerlilik oranları, basınçlar ve sıcaklıkları için sıcaklığın tersine göre değişimleri. İmleçler Hu et. al. [34]'ın deneysel sonuçlarını temsil etmektedir.

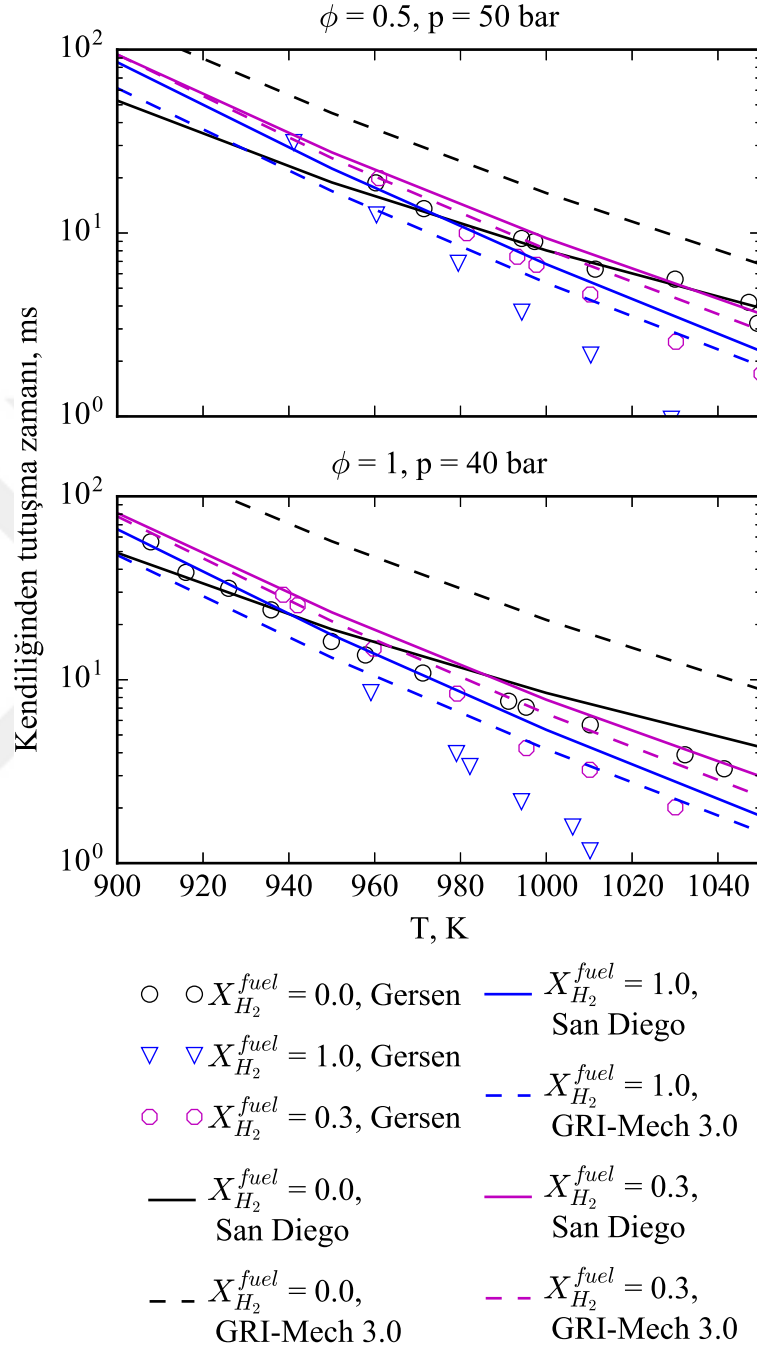
Şekil 4.33’de de görülebileceği gibi saf metan/hava karışımları için LU19 ve GRI-Mech 3.0 mekanizmaları çok yakın sonuç vermelerine ve deneysel sonuçları çok iyi temsil etmektedirler. LU13 mekanizması ile hesaplanan sonuçlarda çalışılan koşullar için kendiliğinden tutuşma zamanları deneylerden bir miktar fazla olarak gözlemlenmiştir.

Hidrojen ile zenginleştirilmiş karışımlar için kendiliğinden tutuşma zamanları biraz daha hassas bir durumdur. Bu hassasiyet hidrojen katkısının düşük sıcaklıklarda kendiliğinden tutuşma zamanlarını arttırıcı, yüksek sıcaklıklarda ise azaltıcı etkilerde bulunabilmesinden kaynaklanır. Gersen et al. [24]’ın deneylerinde hidrojenin metana katıldığında kendiliğinden tutuşma zamanının azalıp yada artacağına yönelik değiştirdiği bir çaprazlanma sıcaklığı gözlenmiştir. Bu çaprazlanma sıcaklığının üstünde hidrojen eklenmesi kendiliğinden tutuşma zamanını azaltırken altındaki sıcaklıklarda hidrojen eklenmesi kendiliğinden tutuşma zamanlarını arttırmıştır. Şekil 4.34’de görülebileceği gibi GRI-Mech 3.0 mekanizması kullanıldığında bu çaprazlanma sıcaklığı yakalanamamaktadır, fakat San Diego mekanizması kullanılarak yapılan hesaplamalarda bu davranış daha yakından temsil edilebilmiştir. Önemli noktalardan biri de bu deneylerin yüksek oranda Argon içermesidir ve aynı zamanda bu durum yapılan hesaplamalara da yansıtılmıştır.

Hidrojen katkılı alevlerin akustik cevaplarının araştırılabilmesi için alev topolojisini sabit tutmak adına alev hızı sabit tutulmak istenmiştir. Akış ve alev hızının sabit olduğu durum, sabit alev açısına denk gelecektir, fakat hidrojenin alev hızını arttırıcı etkisinin hesaba katılmasıyla eşdeğerlilik oranının düzeltilmesi gerekmektedir. Bu durum aynı zamanda alevin gücünü de değiştirmektedir. Hesaplanan çalışma koşulları tablo 4.3’de özetlenmiştir.

Çizelge 4.3: Sabit ortalama hız ve alev hızı için hesaplanan deneysel çalışma koşulları. Re hesaplanırken Poiseuille akış profili kabulü yapılmış ve merkez-çizgi hızı kullanılmıştır.

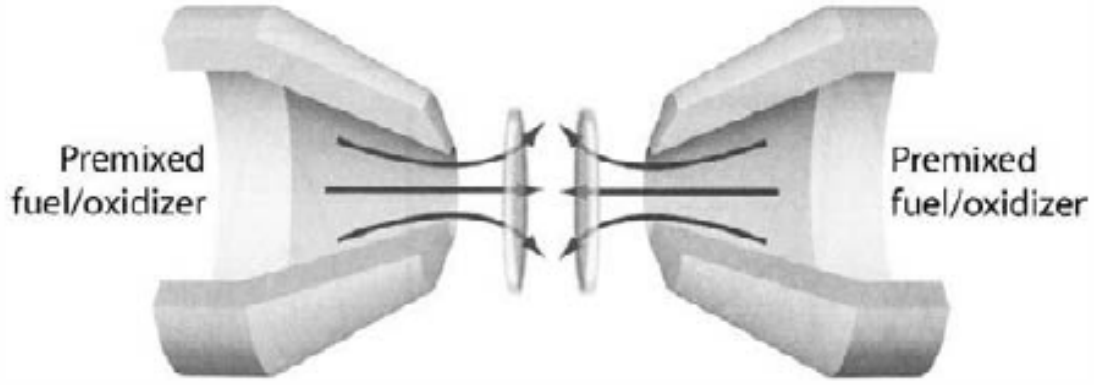
$X_{H_2}^{fuel}$	Flow velocity [m/s]	Flame Speed [m/s]	ϕ	Power [Watt]	Mass flow [g/s]	Re
0	1.07	0.19	0.7	7636.0	3.89	865
0.05	1.07	0.19	0.692	7555.8	3.88	863
0.1	1.07	0.19	0.684	7475.7	3.87	860
0.15	1.07	0.19	0.676	7390.9	3.85	857
0.2	1.07	0.19	0.667	7301.8	3.84	854
0.25	1.07	0.19	0.657	7206.5	3.83	851
0.3	1.07	0.19	0.647	7107.5	3.82	848
0.35	1.07	0.19	0.637	7003.1	3.8	844
0.4	1.07	0.19	0.625	6892.5	3.79	840
0.45	1.07	0.19	0.614	6777.7	3.77	836
0.5	1.07	0.19	0.601	6659.1	3.76	832



Şekil 4.34: Hidrojen katkısı ile kendiliğinden tutuşma zamanının değişimi. Çizgiler: hesaplamalar, imleçler: Gersen et al. [24]'in deneysel sonuçları.

4.3 Gerinim Etkisi Altındaki Alevler

Bir alev birörnek olmayan akışta ilerlerken, alevin alanını değiştiren gerinim ve eğrilik etkilerine maruz kalır [57]. Gerinimin alevler üzerindeki etkisinin anlaşılması sadece türbülans etkilerinin modellenmesi gibi teorik bir alanda öneme sahip olmayıp aynı zamanda neredeyse tüm mühendislik sistemlerindeki alevlerin gerinim etkisinde olmasından dolayı pratik sistemler için de önemlidir [47][46]. Gerinimin alevler üzerindeki etkilerinin incelenmesinde, ters akışlı bir şekilde yerleşmiş iki alevden oluşan ikiz alev yapısı incelenmiştir. Bu yapı deneysel düzeneklerde iki birbirine karşı şekilde konumlandırılmış iki lüle ile sağlanabilmekte, ve gerinim oranı lülelerden geçen kütle debisi ile kontrol edilebilmektedir [44].



Şekil 4.35: Birbirine karşı yerleştirilmiş iki lüle yapısı kullanılarak ikiz, gerinimli ön-karışımli alevlerin oluşturulabildiği karşıt lüle düzeneğinin şematik temsili [44].

Şekil 4.35’de gösterilen düzenek kullanılarak hafifçe gerinmiş alevlerden alev sönmesine kadar geniş bir aralıkta gerinim etkisi altındaki alevler incelenebilir [44]. Bu düzenek literatürde aynı zamanda alev hızlarının ölçülmesinde de kullanılmıştır [47] [38]. Eğer iki lüleden çıkan kütle debileri eşitse düzeneğin orta noktasında aksel hız sıfırdır ve bu noktanın iki tarafı simetriktir.

4.3.1 Korunum denklemleri

Süreklilik denklemi:

$$\frac{d}{dz}(\rho u) + 2\rho V = 0 \quad (4.27)$$

Denklem 4.27’de sunulan terimler:

$$V = v/r = -\frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \quad 2U = \rho u \quad (4.28)$$

Açısal momentum denklemi:

$$\rho \frac{dV}{dt} = \frac{d}{dz} \left(\mu \frac{dV}{dz} \right) - \lambda - \rho u \frac{dV}{dz} - \rho V^2 \quad (4.29)$$

Kimyasal tür korunum denklemi:

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = -\rho u \frac{dY_k}{dz} - \frac{dj_k}{dz} + W_k \dot{\omega}_k \quad (4.30)$$

Enerji denklemi:

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = -\rho c_p u \frac{dT}{dz} + \frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{dT}{dz} \right) - \sum_k W_k \dot{\omega}_k h_k - \sum_k j_k c_{p,k} \frac{dT}{dz} \quad (4.31)$$

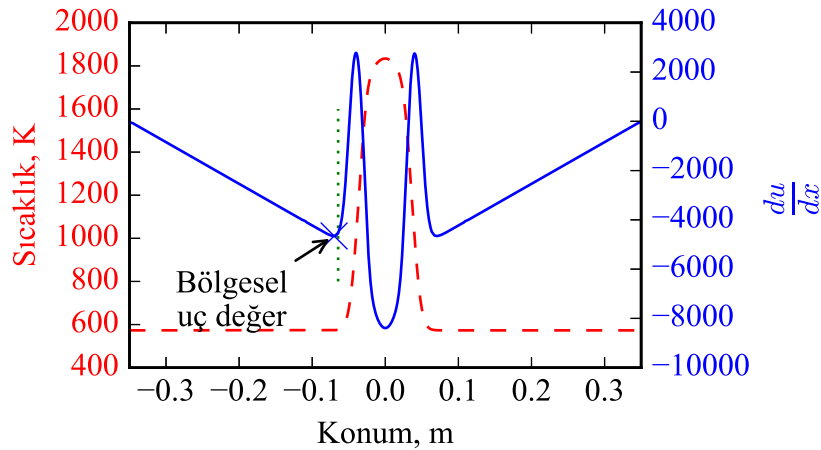
Bu denklemler sayısal yöntemler kullanılarak Cantera yazılımı ile çözülmüştür ve sonuçlar bir sonraki bölümde sunulmuştur.

4.3.2 Gerinimli alev sonuçları

Gerçekleştirilmiş tüm gerinimli ikiz alev hesaplamaları için iki sınır koşullarındaki kütleli debiler, sıcaklıklar, basınçlar ve gaz karışımının bileşenleri birbirlerine eşittir. Bu durum simetrik ikiz alevlerin oluşmasına neden olur. Gerinimin etkisini incelemek için bölgesel ve ortalama gerinim oranları denklem 4.32'de sunulduğu gibi hesaplanmıştır.

$$\kappa = - \left. \frac{du}{dx} \right|_{max} \quad \kappa_G = \frac{4u_{in}}{L} \quad (4.32)$$

Bölgesel gerinim oranının çizgisel gösterimi Şekil 4.36'de sunulmuştur.



Şekil 4.36: Denklem 4.32'de sunulan bölgesel gerinim oranının çizgisel temsili, dikey kesikli yeşil çizgi sıcaklığın $T_{green} = T_{inlet} + 3.0$ olduğu bölgeyi temsil etmekte ve bölgesel gerinim oranının tanımlandığı noktanın alevin ön ısıtma bölgesinden önce olduğunu göstermektedir.

Denklem 4.32'de sunulan L iki lüle arasındaki mesafedir. Yapılan bütün hesaplamalarda bu mesafe 7 mm olarak sabit tutulmuştur.

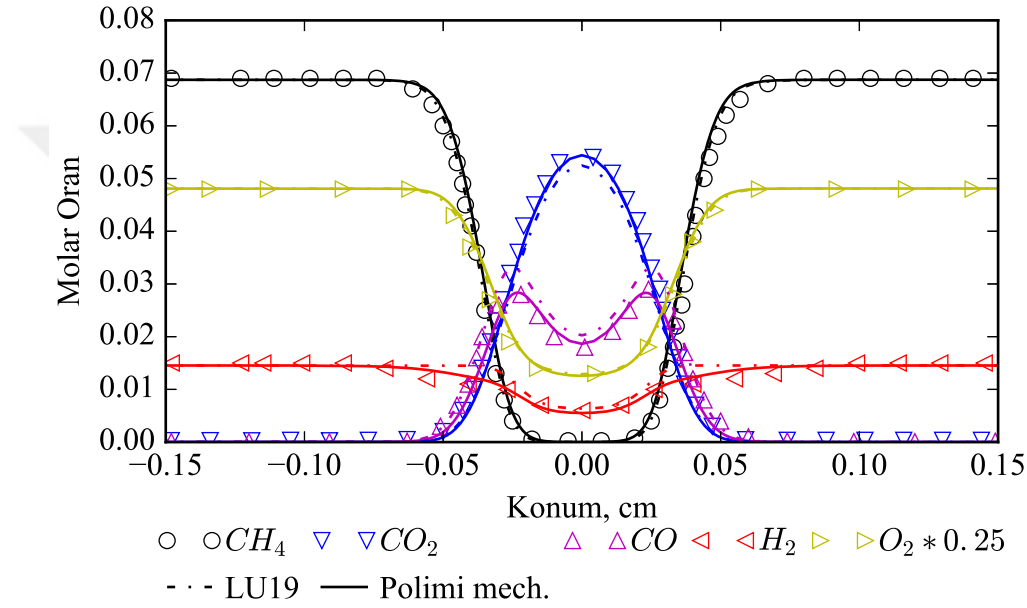
Birincil adım olarak karşılaştırmalı değerlendirme çalışmaları gerçekleştirilmiş ve Cantera ile elde edilen sonuçlar literatürdeki verilerle karşılaştırılmıştır. Şekil 4.37 Cuoci et.

Çizelge 4.4: Karşılaştırmalı değerlendirme çalışmalarında kullanılan sınır koşulları.

T, K	p, Pa	$u, m/s$	CH_4	H_2	O_2	N_2
573	101325	9.01	0.068741	0.014541	0.192433	0.724285

al. [10] sayısal sonuçları ile Cantera'dan elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Benzetimlerde kullanılan sınır koşulları çizelge 4.4'de sunulmuştur. Bunlara ek olarak sınırlardaki teğetsel hız gradyanı sıfır olarak ayarlanmıştır.

Çizelge 4.4'da sunulan sınır koşulları kullanılarak karşı gelen karşıt akışlı alevler hesaplanmıştır. LU19 [50] ve Polimi [60] kimyasal mekanizmaları kullanılarak elde edilen sonuçların karşılaştırmaları Şekil 4.37'de sunulmuştur.



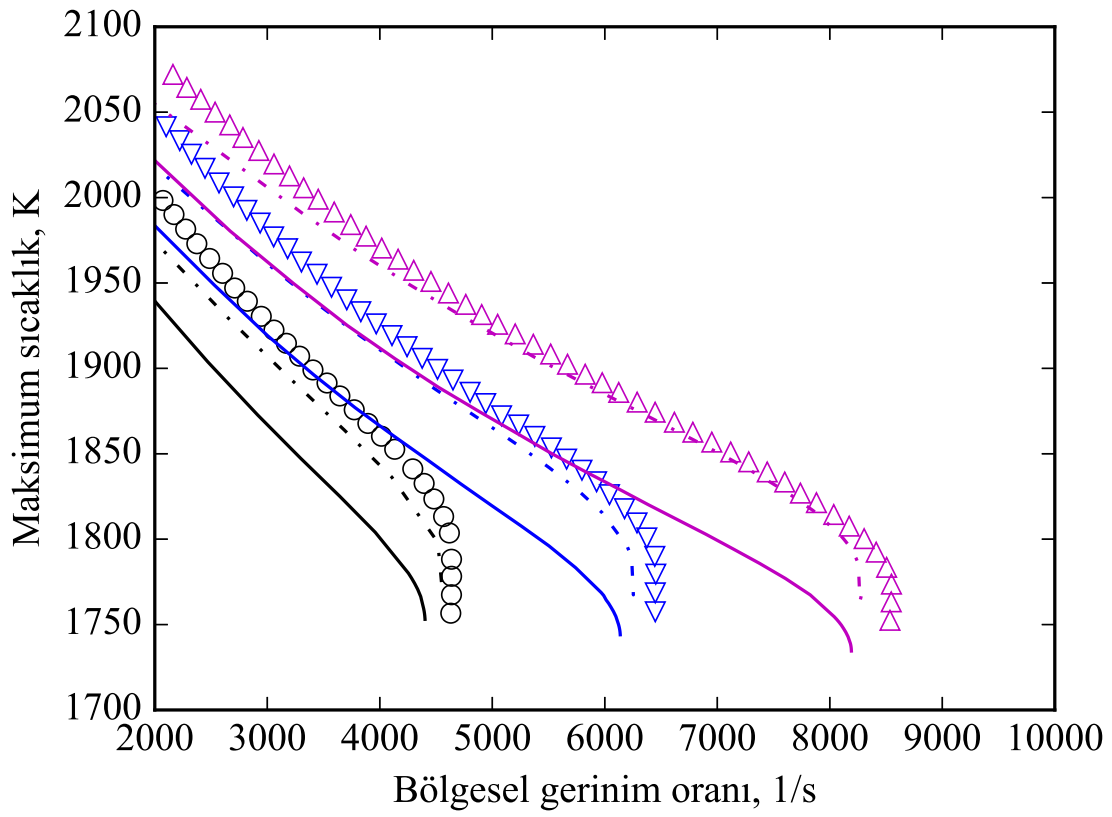
Şekil 4.37: İki farklı kimyasal mekanizma kullanılarak Cantera yazılımı ile hesaplanan karşıt akışlı alevler ile Cuoci et. al. [10]'ın sonuçlarının karşılaştırılması.

Şekil 4.37 sonuçlarının oldukça yakın olduğunu göstermektedir. Polimi ve LU19 kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerdeki H_2 ve CO 'in aksel profilindeki ufak farklılıkların, LU19 mekanizmasında kullanılan sanki-kararlı hal kabulü ve indirgenmiş kimyasal kinetik ifadelerden kaynaklandığı düşünülmektedir. Polimi ve LU19 mekanizmaları ile hesaplanan alevlerdeki bölgesel gerinim oranları sırasıyla $4603.21 s^{-1}$ and $4591.63 s^{-1}$ olarak gözlemlenmiştir.

Bu biçimdeki ters akışlı ikiz alevler geniş bölgesel gerinim oranları için hesaplanmıştır. Diğer önemli bir husus da, alevin kimyasal tepkimeleri daha fazla sürdürmeyecek sönüğü, kararlı hal problemin dönüm noktası olarak tanımlanan [44], sönme gerinim oranıdır. Maksimum sıcaklık - gerinim oranı grafiğinde bu nokta eğimin dik olduğu noktaya denk gelir. Bir sonraki adım olarak alevin sönme noktasına kadar getirilmesi ve iki farklı kimyasal mekanizma ile hesaplanan sönme gerinim oranlarının literatürdeki sayısal hesaplamalarla karşılaştırılması olarak seçilmiştir. Şekil 4.38 sönene kadar zorlanan alevlerin maksimum sıcaklık cevaplarını sunmaktadır. Bu alevlerin sınır koşulları çizelge 4.5'de sunulmuştur ve bunlara ek olarak sıcaklık 573 K ve basınç 1 atm olarak ayarlanmıştır.

Çizelge 4.5: Sönene kadar zorlanan alevlerin sınır koşulları.

Case	ϕ	$X_{H_2}^{fuel}$	CH_4	H_2	O_2	N_2
Flame VII	0.75	0.000	0.073159	0	0.194554	0.732288
Flame VIII	0.75	0.174	0.068741	0.014541	0.192433	0.724285
Flame IX	0.75	0.308	0.064419	0.028779	0.190349	0.716453



- ○ Flame VII, Cuoci et. al. - - - Flame VIII, Polimi Mech.
- ▽ ▽ Flame VIII, Cuoci et. al. — Flame VIII, LU19
- △ △ Flame IX, Cuoci et. al. - · - · Flame IX, Polimi Mech.
- · - · Flame VII, Polimi Mech. — Flame IX, LU19
- Flame VII, LU19

Şekil 4.38: Sönene kadar zorlanan, LU 19 ve Polimi mekanizması ile hesaplanan ve Cuoci et. al. [10]'ın sonuçları ile karşılaştırılan karşıt akışlı ikiz alevlerin maksimum sıcaklık cevapları.

Çizelge 4.6: Çizelge 4.5’de sunulan sınır koşullarına denk gelen alevlerin maksimum sıcaklık-bölgesel gerinim oranı cevapları.

Case	LU19		Polimi	
	T_{maxext}	K_{ext}	T_{maxext}	K_{ext}
Flame VII	1753.08	4402.10	1775.34	4556.77
Flame VIII	1744.05	6137.36	1771.25	6263.35
Flame IX	1734.52	8192.04	1768.24	8283.20

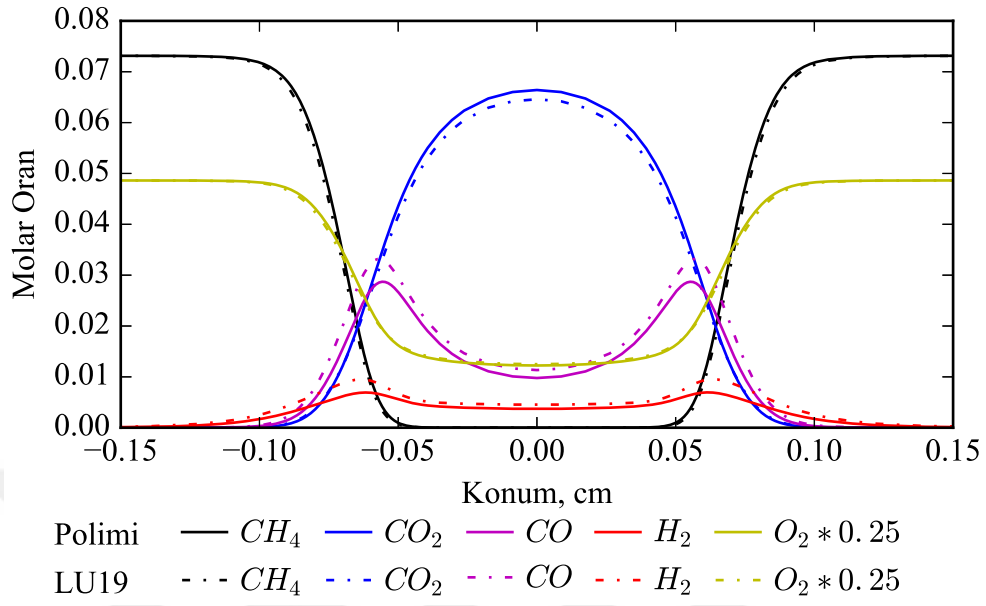
Sönme gerinim oranları ve karşı gelen maksimum sıcaklıklar çizelge 4.6’de sunulmuştur.

Bu sonuçlar hakkında önemli bir nokta bütün bu sonuçların eldesinde kullanılan yayılım modeli bölüm 4.2.1’de sunulan karışım ortalama yayılım modelidir. [10]’de kullanılan yayılım modeli belirtilmemekle birlikte, Polimi mekanizması ile hesaplanan sonuçlar ile [10]’da sunulan sonuçlar arasındaki çok küçük farklılıklar bu modellerin farklı olmasından kaynaklanıyor olabilir. Buna ek olarak Cuoci et. al [10]’ın çözüm tekniğine karşın, Cantera’da kararlı hal için geliştirilmiş bir çözüm tekniği kullanılmaktadır. Alevin sönme noktasındaki çözümün tekil olduğu bilinmekle birlikte Cantera’nın kararlı hal çözüm algoritması bu noktada uygun olmayabilir, fakat sönme noktasına ulaşmak için özel itina gösterilmiştir; alev sönme noktasını geçtiğinde sönmektedir. Sönme noktası, yanan son iki alevin maksimum sıcaklıklarının farkının $1 K$ ’in altında ve sönen son alev ile yanan son alevin hesaplamasında kullanılan aksel hız sınır koşulları arasındaki farkın $\%0.1$ ’in altında kalacak şekilde bir sonuç aranması ile sağlanmıştır. Bu yöntem sönme noktasına olabildiğince yaklaşılabilmesini sağlamaktadır.

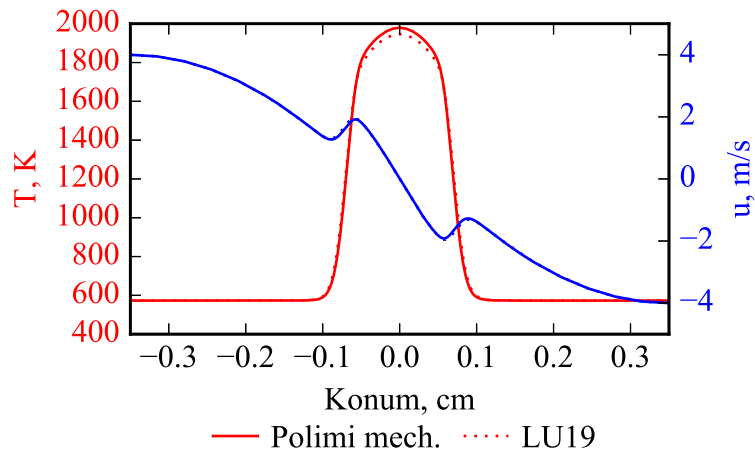
Aynı yapı LU19 mekanizması ile hesaplandığında, Polimi mekanizması ile elde edilen sonuçlardan farklı bir sonuç elde edilmiştir. Bunun nedeni olarak LU19 mekanizmasındaki indirgenmiş kimyasal kinetik yaşlaşımı, daha da detaylı olunması gerekirse CO kimyasını ve aynı zamanda sıcaklıkları etkileyen sanki-kararlı hal yaklaşımı olduğu düşünülmektedir. LU19 ve Polimi mekanizmaları ile hesaplanan alevlerdeki temel fark sıcaklıklardan kaynaklanmaktadır, çizelge 4.38’den de anlaşılacağı üzere sönme gerinim oranları oldukça yakındır. Sıcaklıklardaki farklılık Şekil 4.38’de sunulan maksimum sıcaklık - bölgesel gerinim oranı grafiğini aşağıya doğru kaydırmaktadır. Karşılaştırılan tüm sonuçların sayısal hesaplamalar olduğu göz önüne alındığında hangi mekanizmanın gerçeği daha iyi teslim ettiği konusunda yorumda bulunulması doğru olmayacaktır, çünkü Cuoci et. al’ın sonuçları ve karşılaştırılan bütün sonuçlar sayısal çözümlerdir.

Şekil 4.41, 4.44 ve 4.47’den görülebileceği üzere sınır hızları arttırıldığında alevler birbirlerine daha yakınlaşmıştır. Gerinim oranı alev hızlarını etkilemiştir ve bu durum alevlerin hızlarının artarak yanmaya devam edebilmeleri anlamına gelmektedir. Ancak belirli bir hıza erişildikten sonra taze karışımın ısınırken alevden aldığı ısı ve alevde üretilen ısı arasındaki denge bozulmakta ve alev sönmektedir.

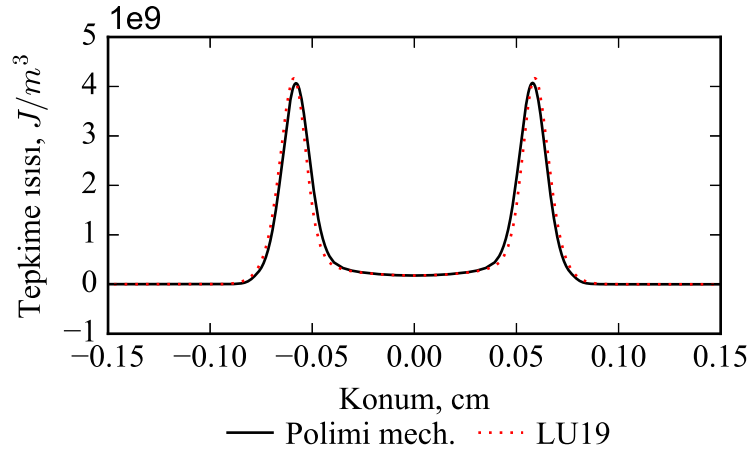
Şekil 4.48’de LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları ile Jackson et. al. [37]’in deneysel sonuçlarının karşılaştırılması sunulmuştur. Çalışılan eşdeğerlilik oranları için LU19 mekanizmasının deneysel verileri oldukça iyi takip ettiği gözlemlenmekle birlikte $X_{H_2}^{fuel} = 0.308$ durumu için $\phi = 0.6$ eşdeğerlilik oranında elde edilen



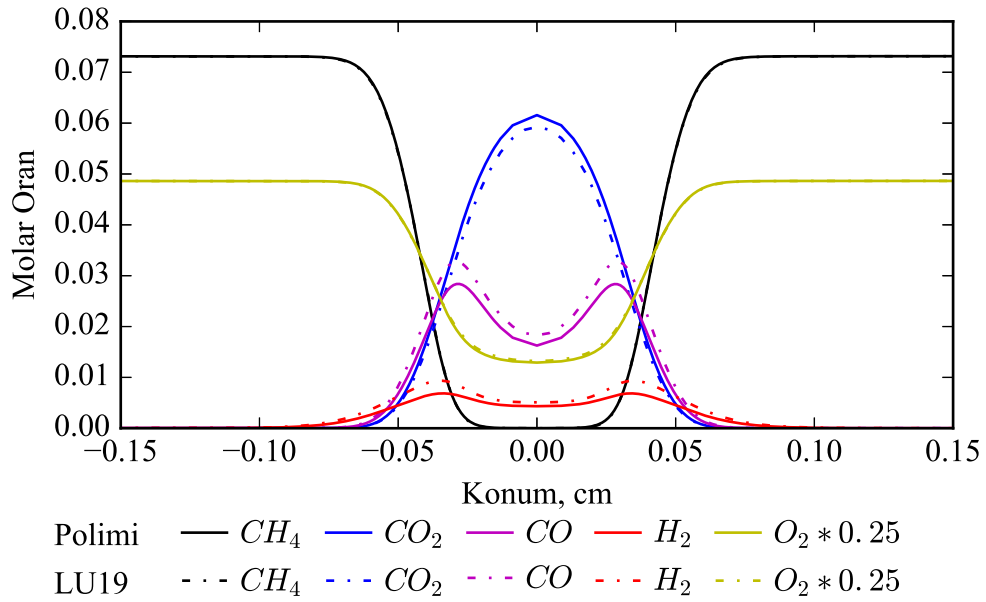
Şekil 4.39: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin kimyasal tür profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s



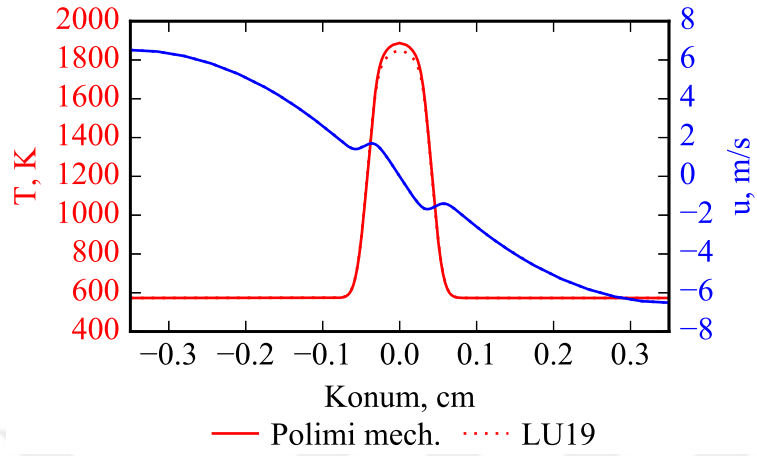
Şekil 4.40: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sıcaklık ve eksenel hız profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s.



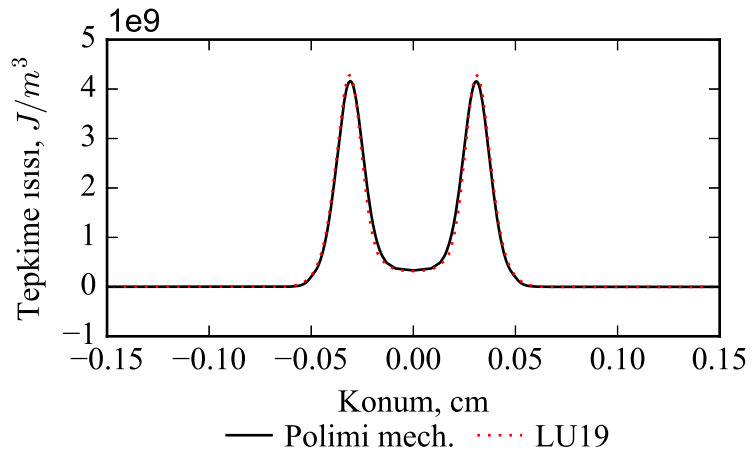
Şekil 4.41: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin tepkime ısı profilleri, sınır eksenel hızı $u=4.0$ m/s.



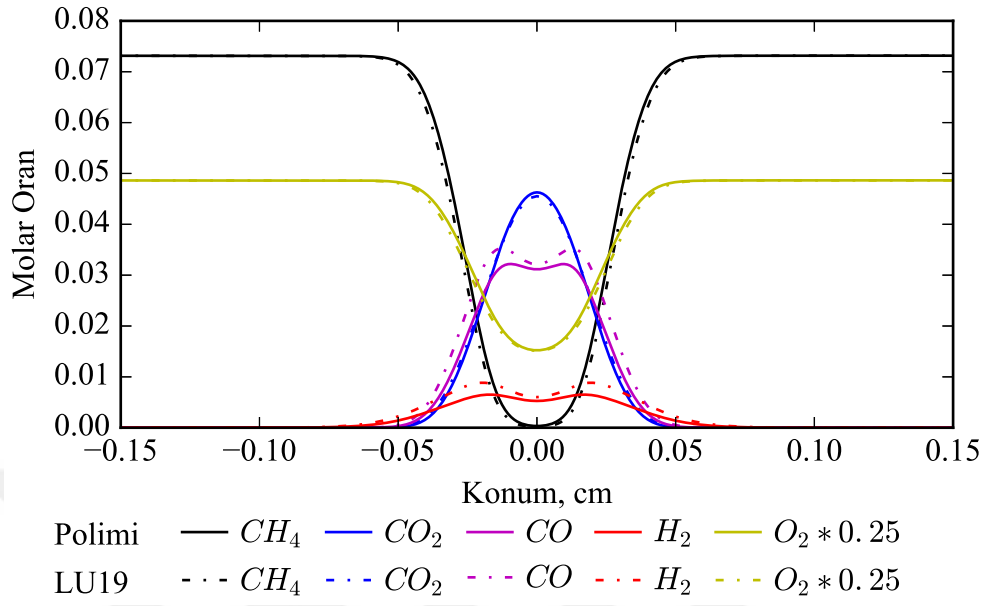
Şekil 4.42: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin kimyasal tür profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.



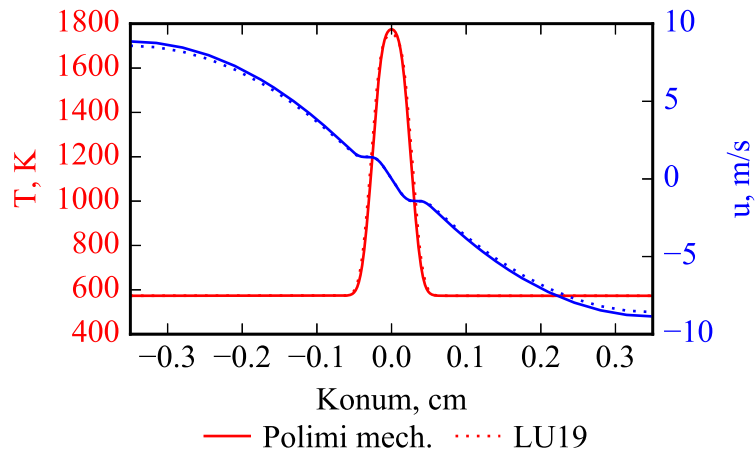
Şekil 4.43: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sıcaklık ve eksenel hız profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.



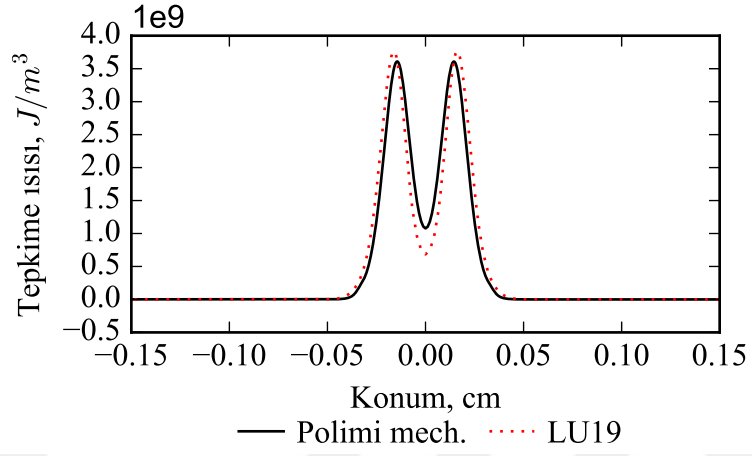
Şekil 4.44: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin tepkime ısısı profilleri, sınır eksenel hızı $u=6.51$ m/s.



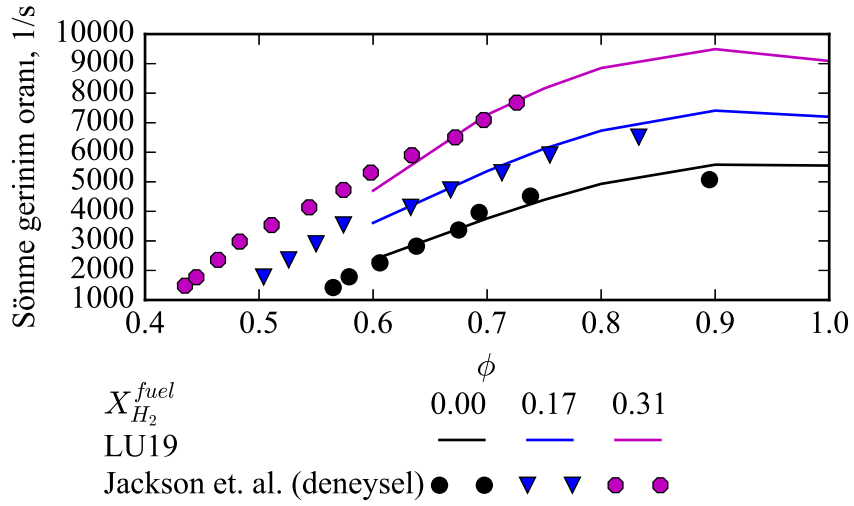
Şekil 4.45: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönme noktasındaki kimyasal tür profilleri.



Şekil 4.46: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönme noktasındaki sıcaklık ve aksenal hız profilleri.

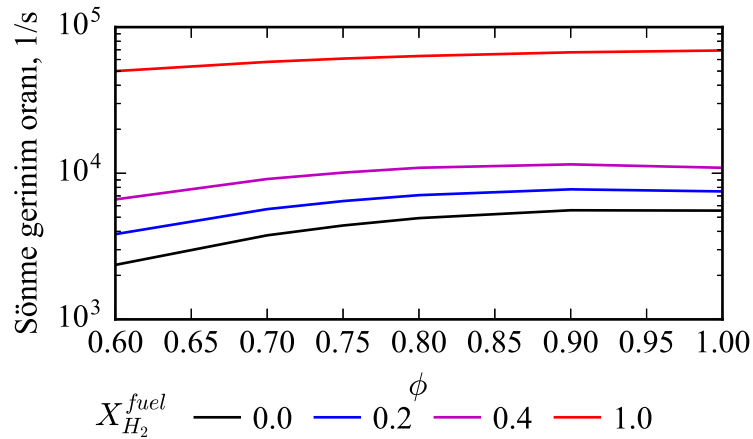


Şekil 4.47: LU19 ve Polimi kimyasal mekanizmaları ile hesaplanan alevlerin sönmeye noktasındaki tepkime ısısı profilleri.

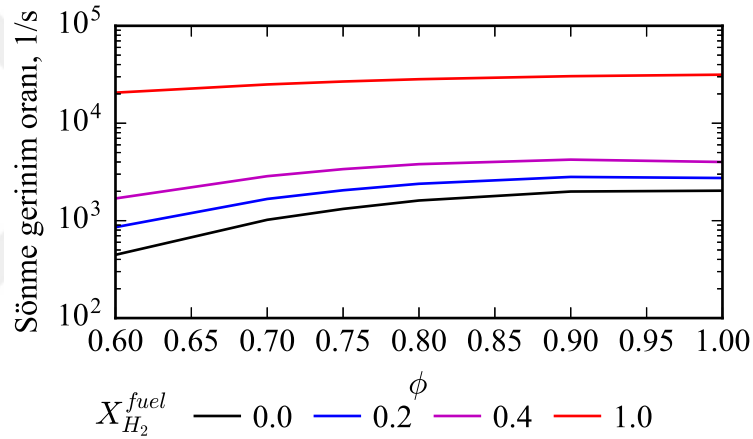


Şekil 4.48: LU19 mekanizması ile hesaplanan sönmeye gerinim oranları ile Jackson et. al. [37]'in deneysel sonuçlarının karşılaştırılması.

sonuç deneysel verilerden ufak bir miktar uzaklaşmıştır.



Şekil 4.49: 573 K karışım sıcaklığı ve 1 atm basınç altında LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları.

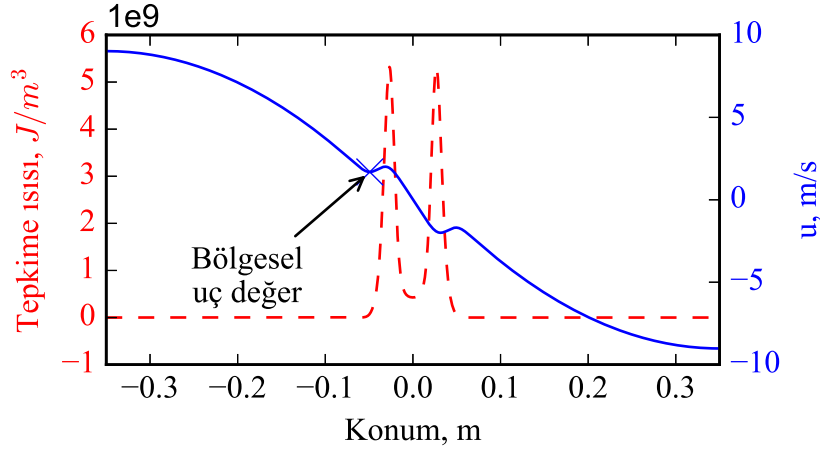


Şekil 4.50: 300 K karışım sıcaklığı ve 1 atm basınç altında LU19 mekanizması ile hesaplanan sönme gerinim oranları.

Şekil 4.49 ve 4.50’de LU19 mekanizması ile hesaplanan, sırasıyla 573 K ve 300 K önkarişım sıcaklıkları ve 1 atm basınç için hidrojen oranı ve eşdeğerlilik oranlarına bağlı sönme gerinim oranları sunulmuştur. Sönme gerinim oranlarının, kimyasal kinetikleri birinci dereceden etkileyen, önkarişım sıcaklıkları, hidrojen oranı ve eşdeğerlilik oranı gibi parametrelere oldukça bağlı olduğu gözlemlenebilir.

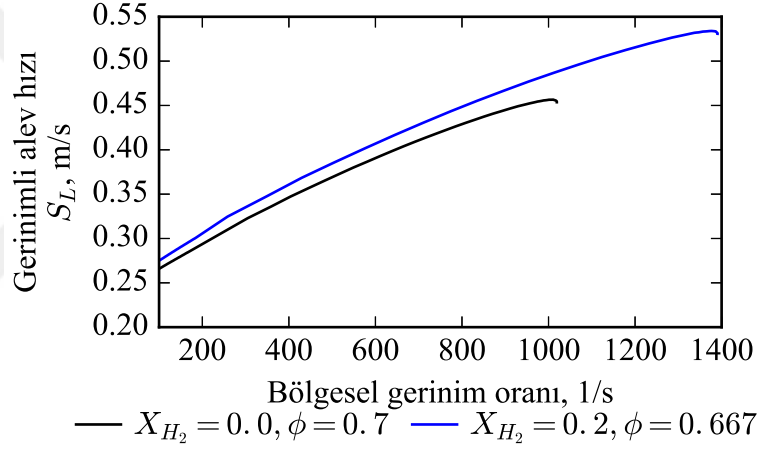
Sınırlardaki kütlelesel debiler arttırıldıkça alevler birbirlerine yaklaşmaktadır. Lewis sayısına bağlı olarak alev hızları değişmektedir [57]. Bu fenomenin araştırılabilmesi için gerinim etkisi altındaki alevlerde alev hızlarının tanımlanması gerekmektedir. Gerinim altındaki alevlerin alev hızları, alevden önceki minimum aksenal hız olarak tanımlanmış ve grafik temsili Şekil 4.51’de sunulmuştur.

İkiz alevler için gerinme oranı değiştiğinde, Lewis sayısına göre durma noktası sıcaklıkları ve alev hızları değişmektedir [57] [39]. Sıcaklık cevabı ve alev hızı Lewis sayısına ve gerinmenin pozitif yada negatif olmasına bağlı olarak değişir. Bu davranışın incelenmesi için 300 K önkarişım sıcaklığı ve 1 atm basınç için $\phi=0.7$ eşdeğerlilik oranındaki

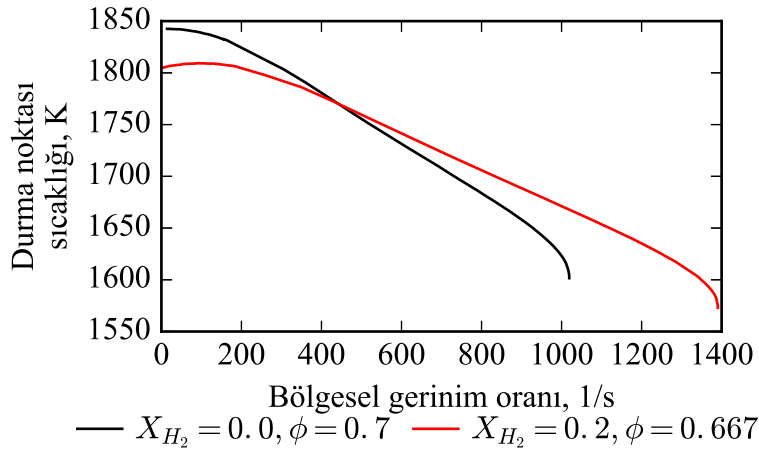


Şekil 4.51: Gerinim etkisi altındaki alevler için alev hızlarının tanımı.

0.19 m/s laminer alev hızına sahip saf metan/hava alevi ile aynı laminer alev hızına sahip %20 hidrojen-%80 metan / hava karışımı karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.52: Saf metan/hava ve hidrojen katkılı metan/hava alevleri için gerinimli alev hızlarının gerinim oranına bağlı değişimi.



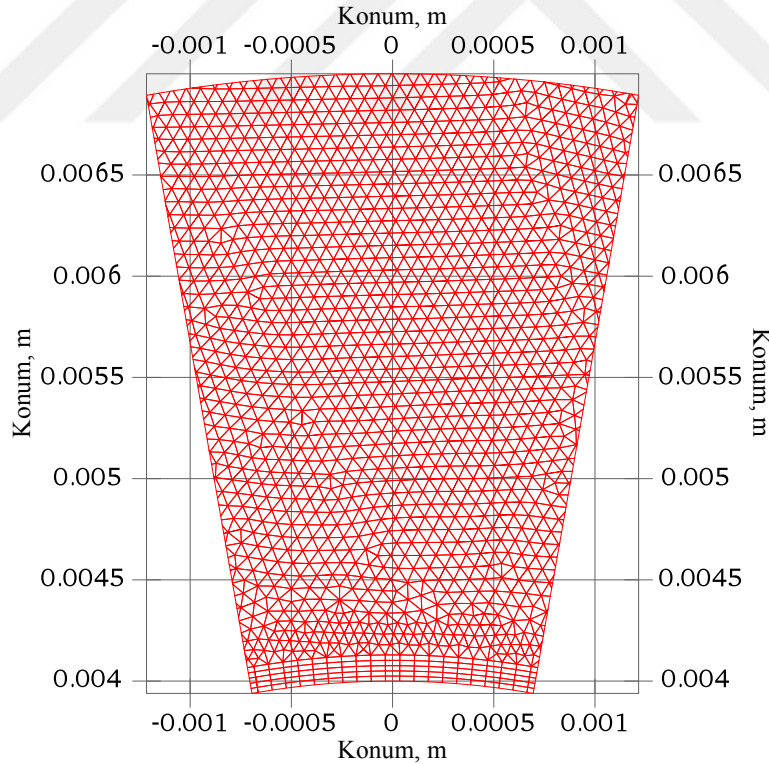
Şekil 4.53: Saf metan/hava ve hidrojen katkılı metan/hava alevleri için gerinimli alevlerde durma noktası sıcaklığının gerinim oranına bağlı değişimi.

4.4 Tepkimeli HAD Hesaplamaları

Tepkimeli akış benzetimleri CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) ve IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse) tarafından geliştirilen AVBP kodu ile gerçekleştirilmiştir. Giriş koşulu olarak sabit (uyarılmamış) bir hız profili uygulanmıştır. Silindir ve yanma odasının duvarları için IMFT mensubu Maxence BREBION tarafından geliştirilen gaz fazından silindire ve silindirden etrafa taşınım ve ışınlama ile ısı transferi etkilerini hesaba katan bir sınır koşulu uygulanmıştır. Bütün hesaplamalar literatürdeki büyük mekanizmalarla karşılaştırıldığında tatmin edici sonuçlar veren LU19 kimyasal mekanizması ile gerçekleştirilmiştir.

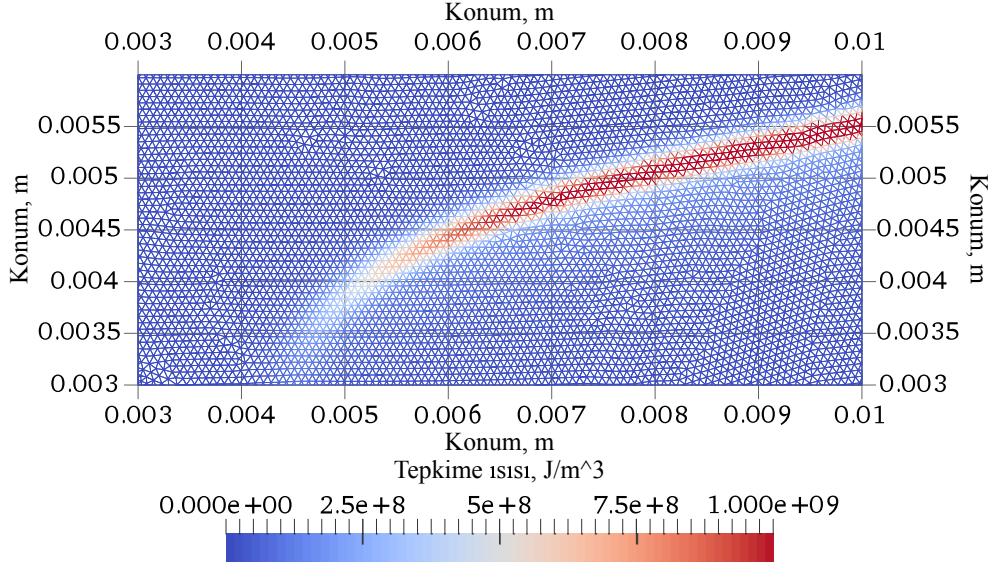
Benzeşimlerde herhangi bir türbülans modeli uygulanmamakla birlikte momentumun yayılımını sadece moleküler viskoziteden kaynaklanmaktadır. Reaksiyonların temsilinde bir alev kalınlığı model de uygulanmamış olup, benzeşim bir Direk Sayısal Benzetimdir.

Kullanılan iki boyutlu sonlu ağ ticari bir yazılım olan CENTAUR kullanılarak oluşturulmuş ve hesaplama yükü göz önünde bulundurularak hacmin sadece üst kısmı modellenmiştir. Oluşturulan sonlu ağ hacmin üst yarısı için 181915 sonlu hacim içermektedir. Silindir etrafında dikdörtgensel hacimler ve alev bölgesinde küçük boyutlu üçgensel hacimler ile akış karakteristiklerinin çözülmesi sağlanmıştır. Oluşturulan sonlu ağ Şekil 4.54 ve 4.55’de sunulmuştur.



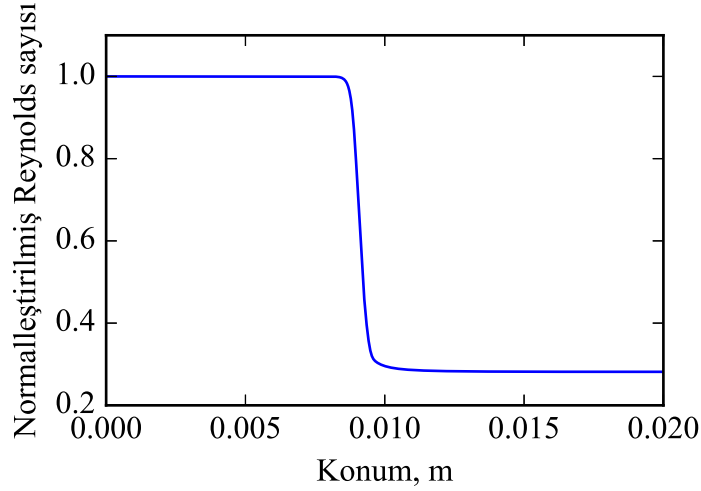
Şekil 4.54: Tepkimeli akış benzetimlerinde kullanılan sonlu ağın silindirin etrafındaki görüntüsü.

Tepkimeli akışta silindir eşışıl benzetimlerde olduğu gibi Karman burgaçları kopmaktadır. Bu durum alevin viskozite artırıcı etkisi ile Reynolds sayısını değiştirmesinden kaynaklanmaktadır. Şekil 4.56’da giriş noktası kullanılarak normalleştirilmiş Reynolds



Şekil 4.55: Tepkimeli akış benzetimlerinde kullanılan sonlu ağın alev etrafındaki görünüşü.

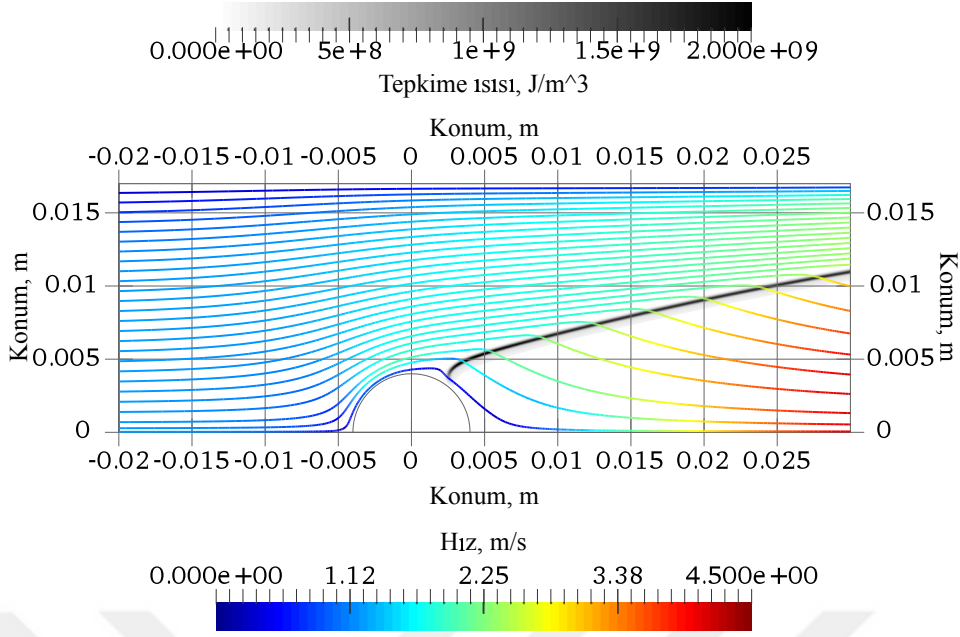
sayısının 300 K önkarışım sıcaklığı ve 0.7 eşdeğerlilik oranına denk gelen bir metan/hava alevi boyunca değişimi sunulmuştur. Alevin Reynolds sayısını değiştirerek başlangıçtaki değerinin neredeyse dörtte birine düşürdüğü gözlenebilir.



Şekil 4.56: $\phi = 0.75$, $p = 1$ atm, $T_{in} = 300$ K için saf metan/hava alevi boyunca normalleştirilmiş Reynolds sayısının değişimi.

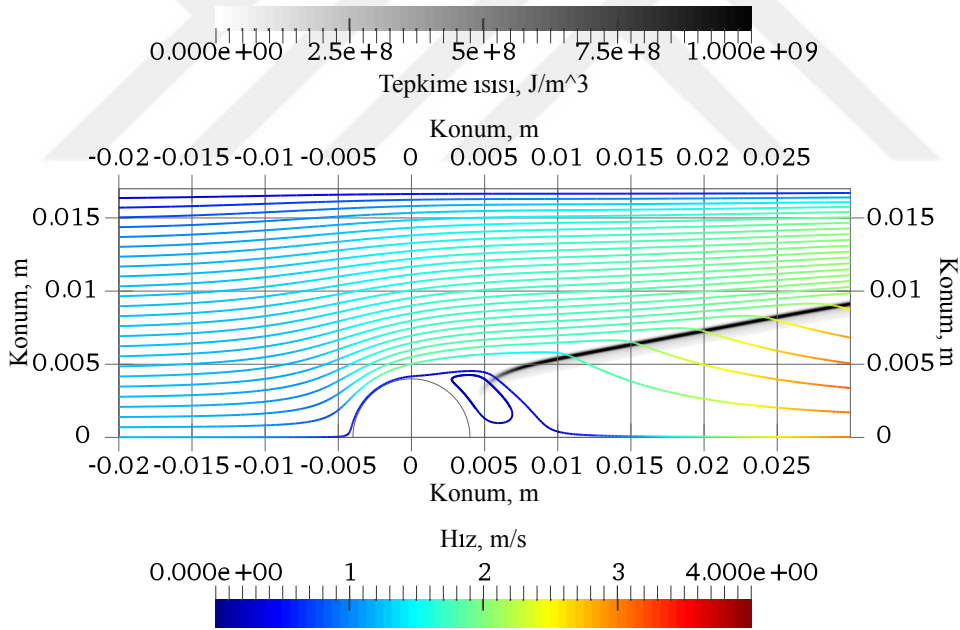
Taze gazlar aleve geldiğinde hızlarının alev dik bileşeni artmakta iken hızlarının teğetsel bileşenindeki değişim ihmal edilebilir düzeydedir. Bu durum akış çizgilerinin birbirlerinden uzaklaşmasına neden olmaktadır ve Şekil 4.57'de sunulmuştur.

Giriş hızı sabit tutularak eşdeğerlilik oranı $\phi = 0.7$ 'e düşürüldüğünde, alev silindirden uzaklaşmaktadır. Bunun nedeni alevin ısı kaybı etkilerine daha hassas hale gelmesi ve soğuk silindire olan ısı transferinin alevin yaklaşmasını engellemesidir. Silindirin sıcaklığı düşmekte, ve silindirin arka bölgesinde alevin tutunmasına yardımcı bir geri dönüş bölgesi oluşmaktadır. Aynı zamanda Şekil 4.58'de de gözlemlenebileceği gibi alev hızı-



Şekil 4.57: $\phi = 0.75$ metan/hava alevinde gözlenen akış çizgileri ve alevin ürettiği ısı.

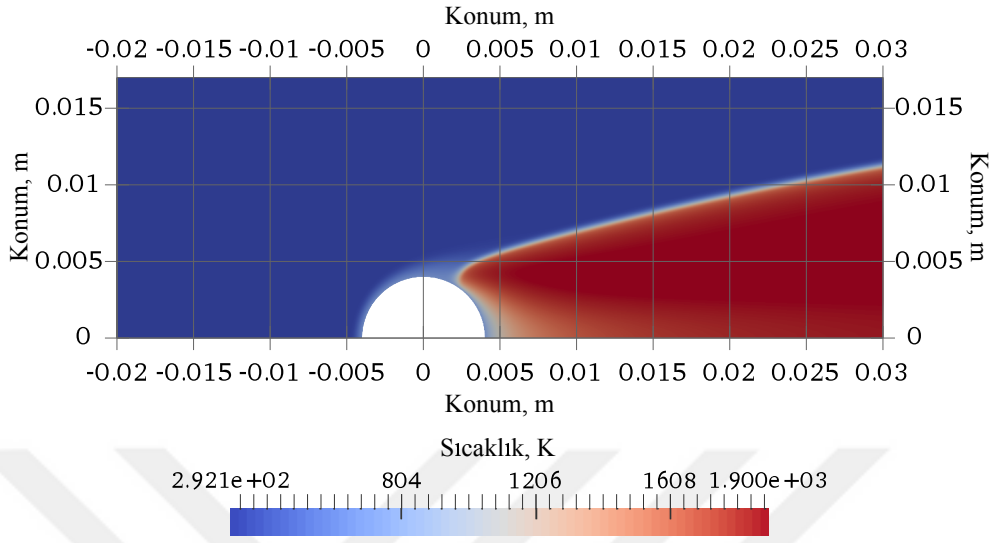
nın daha düşük olmasından dolayı alev açışı daralmıştır.



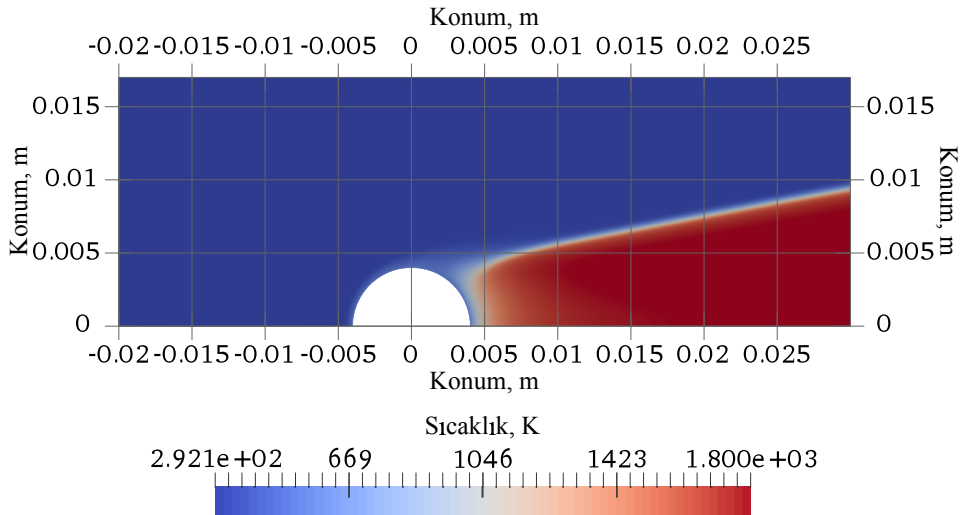
Şekil 4.58: $\phi = 0.7$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki akış çizgileri ve alevin ürettiği ısı.

Diğer bir dikkate değer husus da Şekil 4.59 ve 4.60'da sunulan sıcaklık konturlarından anlaşılacağı üzere silindir sıcaklığının önkarişım sıcaklığından daha fazla olması nedeniyle silindirin ön tarafındaki silindire yakın taze karışımın silindir tarafından ısıtılması ve alev öncesi bu bölgedeki gazların sıcaklıklarının artmasıdır.

Silindir sıcaklıkları $\phi = 0.75$ ve $\phi = 0.7$ durumları için sırasıyla 694.9 K and 510.4 K olarak hesaplanmıştır.



Şekil 4.59: $\phi = 0.75$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki sıcaklık konturları.

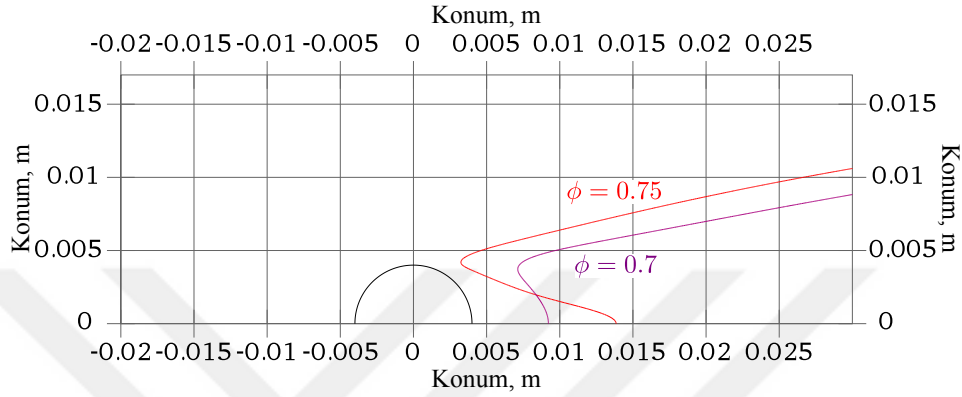


Şekil 4.60: $\phi = 0.75$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevindeki sıcaklık konturları.

Silindir sıcaklıkları, adyabatik alev sıcaklıkları ve alevlerin ürettikleri güç farklı olduğundan, alevlerin silindire olan uzaklığının tayini için normalleştirilmiş bir sıcaklık tanımlanmasının uygun olduğu düşünülmüştür. Bu normalleştirilmiş sıcaklığı tanımlayan denklem 4.33'de sunulmuştur.

$$\Theta = \frac{T - T_{in}}{T_{eq} - T_{in}} \quad (4.33)$$

Denklem 4.33'de T_{eq} sabit basınç ve entalpi koşullarındaki ünün denge sıcaklığıdır.



Şekil 4.61: Her iki durum için $\Theta = 0.9$ eş-çizgileri.

Şekil 4.61'de görülebileceği gibi $\phi = 0.75$ eşdeğerlilik oranına sahip alev, ısı kaybı etkilerine daha dayanıklı olduğundan daha küçük bir sönme mesafesi ile sonuçlanmakta ve silindire daha yakın konumlanmaktadır. $\phi = 0.75$ durumu için silindir sıcaklığı 694.9 K olarak hesaplanmıştır. $\phi = 0.7$ alevi silindirden daha uzakta konumlanmaktadır ve bu durum için silindir sıcaklığı 510.4 K olarak hesaplanmıştır.



5. HAD SONUÇLARI İLE DENEYSEL VERİLERİN KARŞILAŞTIRILMASI VE HİDROJENLE ZENGİNLEŞTİRİLMİŞ ALEVİN TAHMİNİ

Bu bölümde HAD sonuçları ve deneysel ölçümlerin karşılaştırmaları sunulmuş ve bu veriler kullanılarak hidrojen katkılı alevler hakkında tahminlerde bulunularak hidrojen katkılı alev genel yapısı ve silindire olan uzaklığı incelenmiştir.

5.1 Sıkıştırılmaz Tepkimesiz HAD - Deneysel Sonuçlar Karşılaştırılması

Sıkıştırılmaz tepkimesiz durumlar için PIV ile ölçülen hız profilleri OpenFOAM kullanılarak elde edilen HAD sonuçları ile karşılaştırılmış ve Şekil 5.1, 5.3, 5.4 ve 5.5'de sunulmuştur.

Şekil 5.1'de sunulduğu üzere PIV ölçümleri ile HAD sonuçları arasında ufak bir fark olması ile birlikte profilin şekli uygun bir biçimde yakalanmıştır ve sonuçlar makul bir biçimde örtüşmektedir. Aradaki farkın giriş profilindeki belirsizliklerden kaynaklandığı düşünülmektedir.

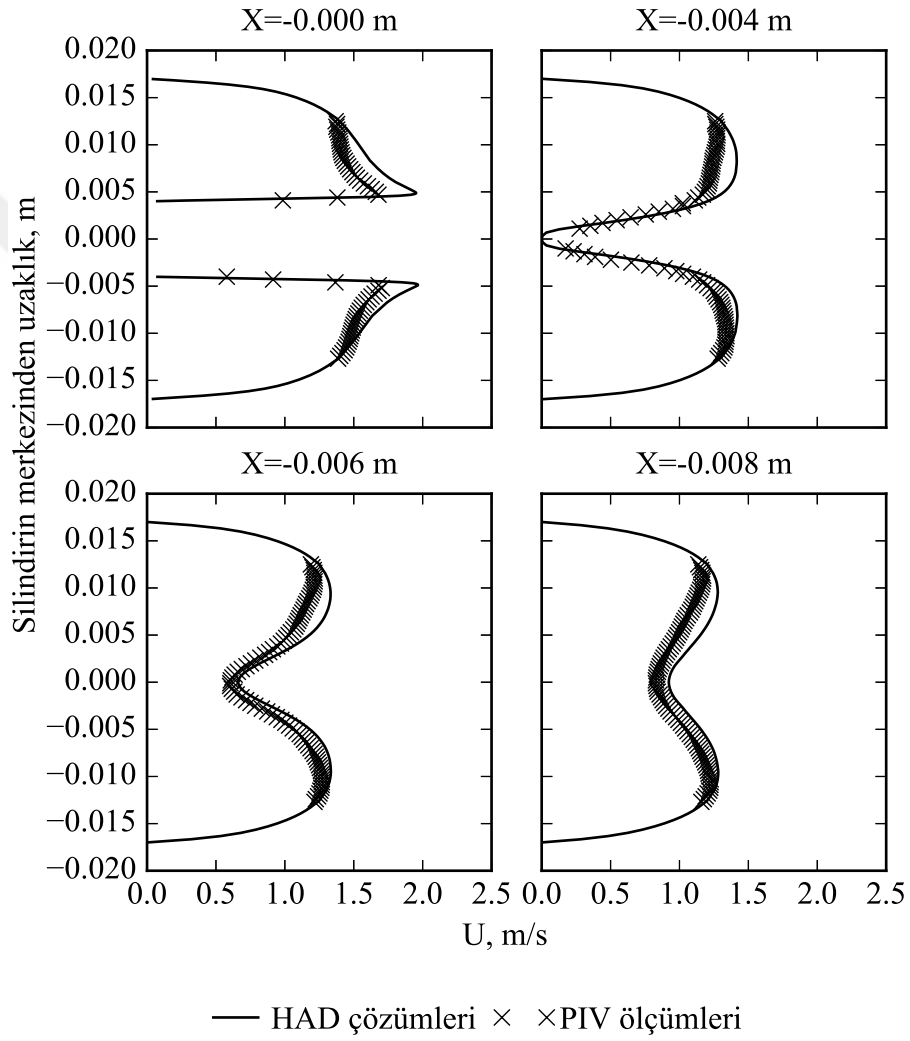
Giriş profilindeki değişimlerden kaynaklanabilecek farklılıklar tamamen tekdüze (uniform) bir giriş hız profili ile HAD çözümü aynı durum için tekrarlandığında elde edilen sonuçlar karşılaştırılarak sunulmuştur. Şekil 5.2'de, Şekil 5.1'da sunulan PIV ölçümleri ile tekdüze bir giriş hız profili ile elde edilen sonuçlar karşılaştırılmış ve yanma odası girişindeki hız profilinin akışaşağı bölgedeki akış üzerinde büyük etkisi olduğu gözlemlenmiştir. Bu giriş hızındaki farklılıklar sonuçları etkilediğinden ölçülen değerler ile HAD sonuçları arasındaki ufak farklılıkların kaynağı olarak düşünülmektedir.

Sonuçlar değerlendirildiğinde HAD sonuçları ile ölçülen değerler arasındaki farkın silindirin sınır tabakası bölgesinde yüksek olması ile birlikte diğer bölgelerde %10'dan az olduğu gözlemlenmiştir. Bir diğer yandan silindirin arkasında kalan bölgelerde olan farklılıkların tekdüze tohumlama eldesinin zorluğundan ve gradyanların yüksekliğinden dolayı kaynaklandığı düşünülebilir.

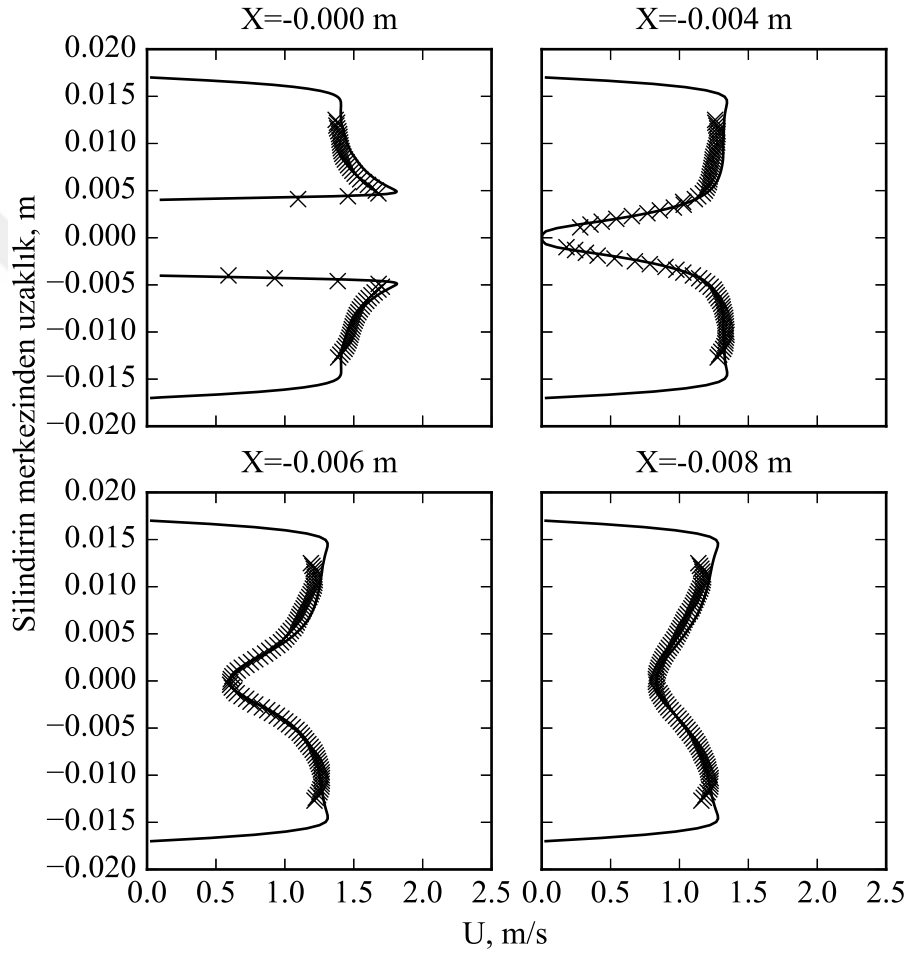
5.2 Tepkimeli HAD - Deneysel Sonuç Karşılaştırması

Tepkimeli durumlar için iki farklı çalışma koşulu incelenmiştir. Her iki çalışma koşulu için yığın hız sabit tutulmuş ve eşdeğerlilik oranı $\phi = 0.7$ ve $\phi = 0.75$ olacak şekilde değiştirilmiştir.

Şekil 5.6'de sunulduğu üzere AVBP ile elde edilen HAD sonuçları ile CH* kimyasal ışılda ölçümleri arasındaki uyumun tatmin edici düzeyde olduğu gözlemlenmiştir. Deneysel CH* kimyasal ışılda ölçümlerinde de ihmal edilebilecek derecede bir bakışimsızlık olduğu fark edilmekle birlikte bu durumun giriş koşulundaki belirsizliklerden kaynaklandığı düşünülmektedir.

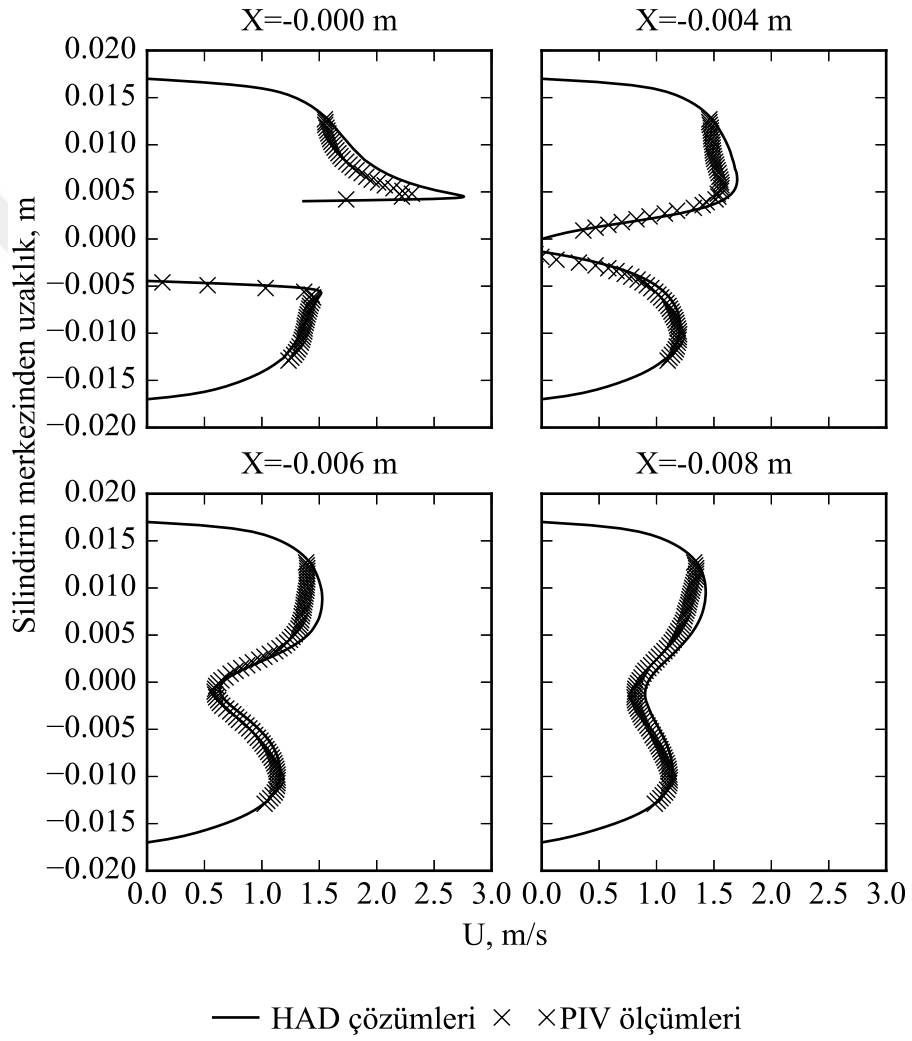


Şekil 5.1: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=0.

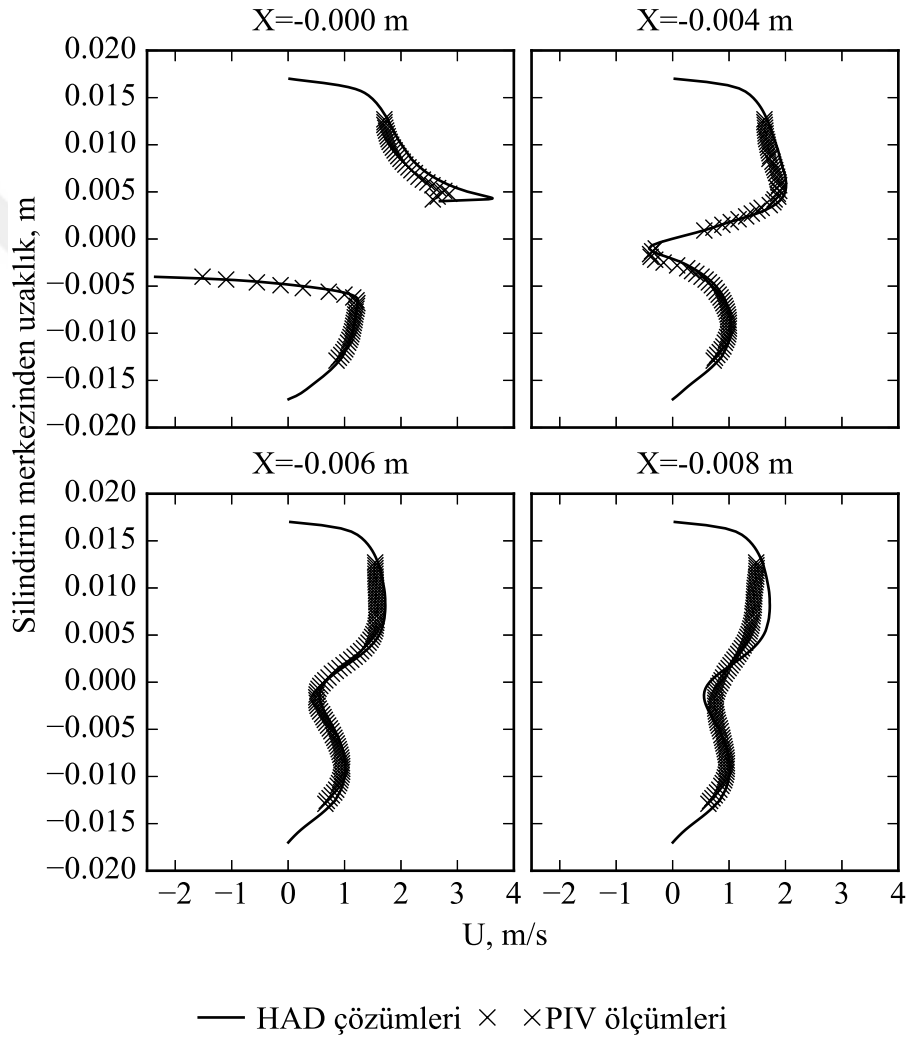


— HAD çözümleri × ×PIV ölçümleri

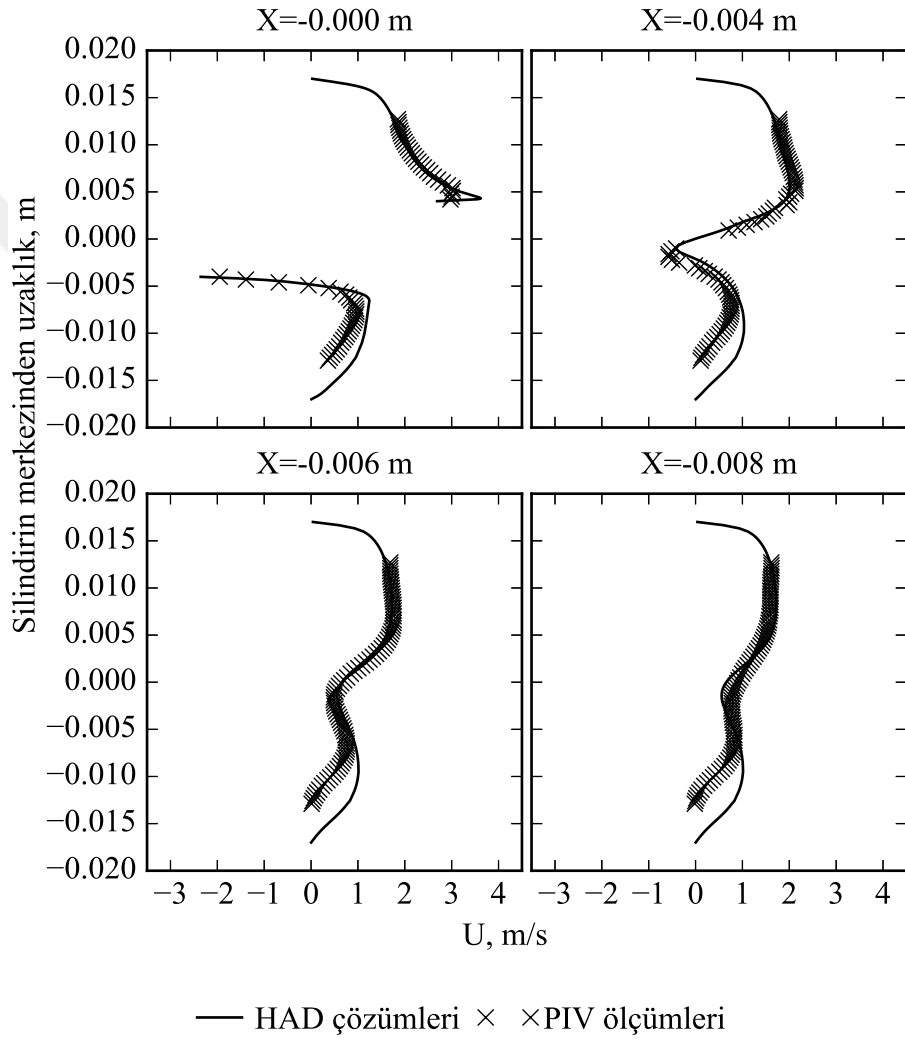
Şekil 5.2: PIV ölçümleri ve tamamen tekdüze bir giriş hız profili kullanılarak hesaplanan OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=0.



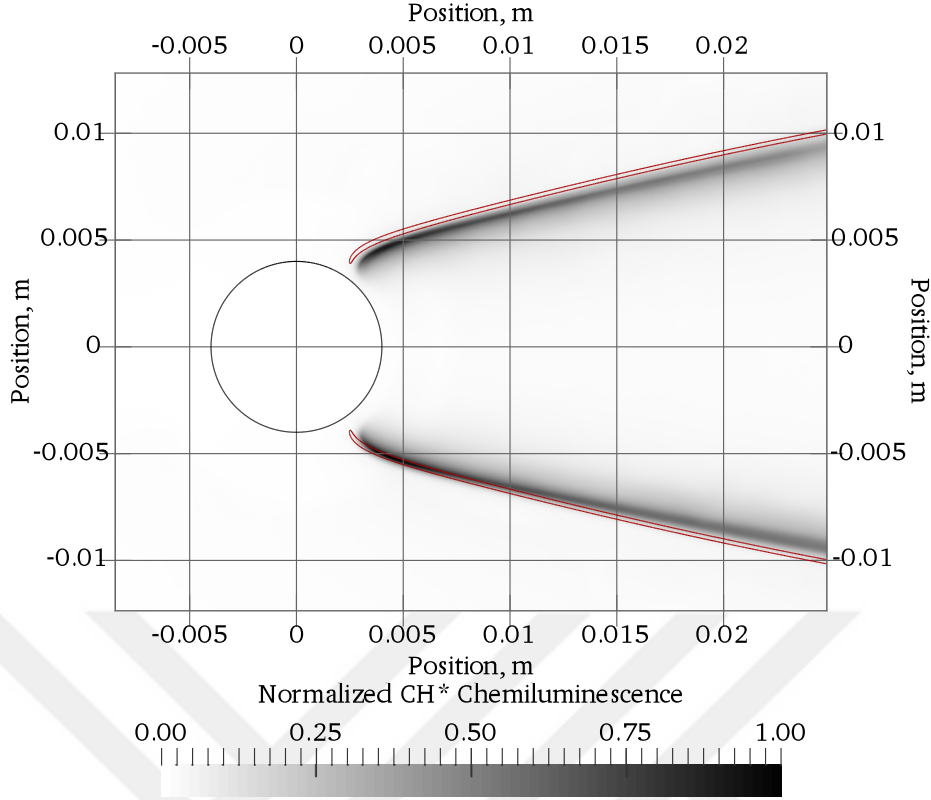
Şekil 5.3: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=2900.



Şekil 5.4: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=6000.



Şekil 5.5: PIV ölçümleri ve OpenFOAM HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, RPM=7800.



Şekil 5.6: AVBP HAD sonuçlarından elde edilen tepkime ısı eşdeğer çizgisi ile normalize edilmiş deneysel CH* kimyasal ışılda ölçümlerinin karşılaştırmalı görüntüsü, $\phi=0.75$.

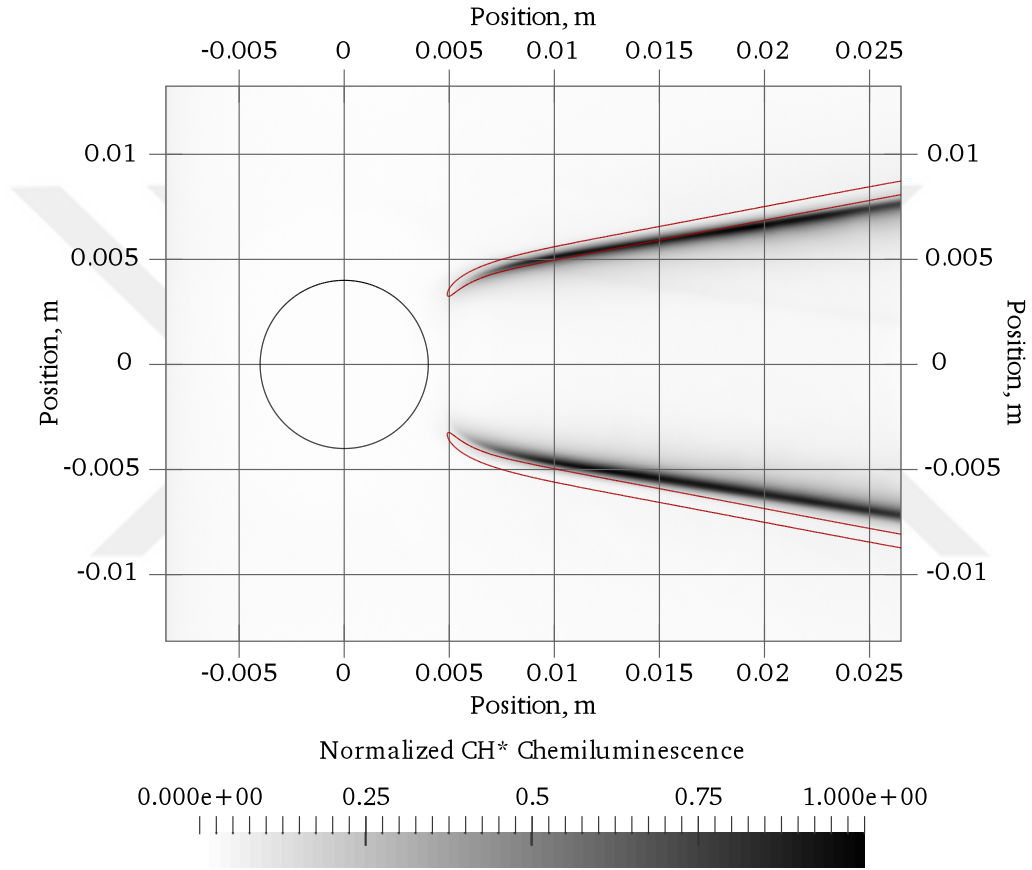
Eşdeğerlilik oranının $\phi = 0.7$ olduğu durum için aynı zamanda PIV ölçümleri de yapıldığından dolayı karşılaştırmada kullanılmak üzere daha fazla veri mevcuttur.

Şekil 5.7’de de görülebileceği üzere $\phi = 0.7$ durumunda alev açısında küçük bir farklılık ve çok küçük bir bakışimsızlık olması ile birlikte HAD sonuçlarının ve deneysel CH* kimyasal ışılda ölçümlerinin genel anlamda aralarında iyi bir uyuma olduğu gözlemlenmiştir.

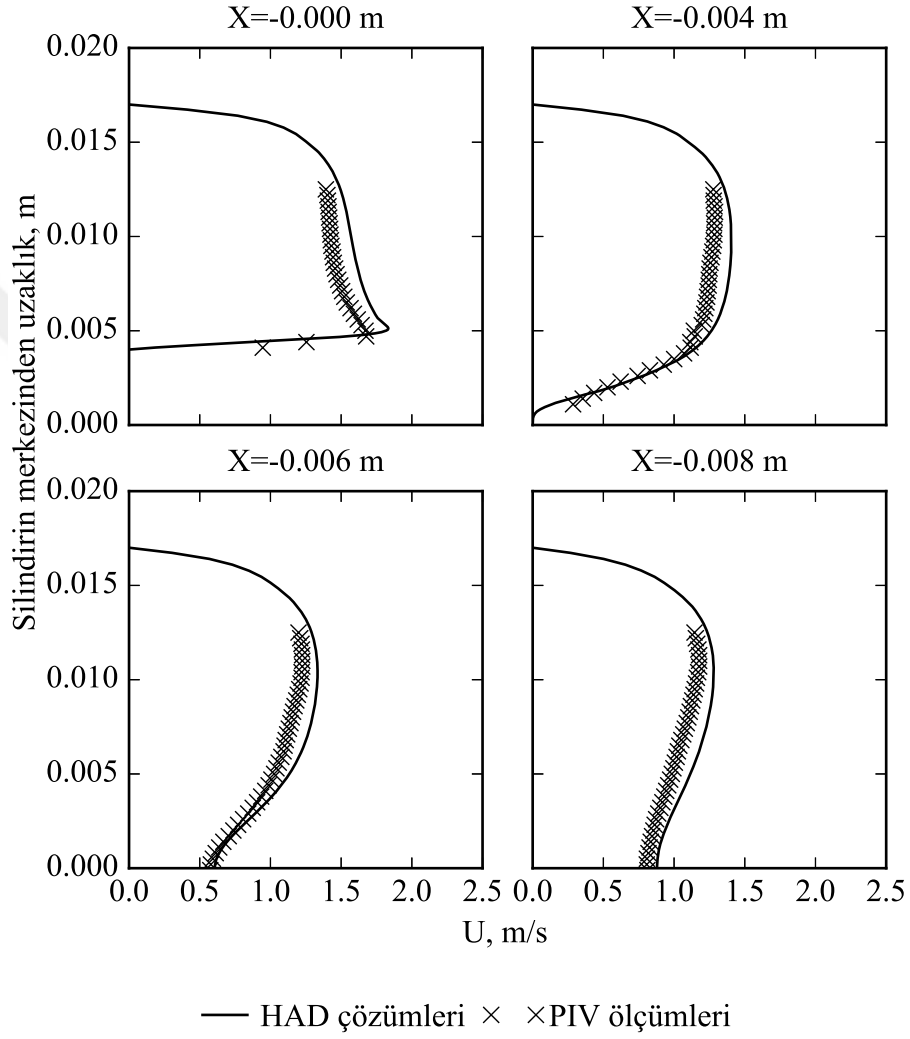
Tepkimeli durum için deneysel düzenekte Karman burgaç kopması gibi HAD benzetimlerinde simetri sınır koşulunu engelleyecek bir durum gözlemlenmediğinden HAD çözümlerinde hacmin sadece bir yarısı modellenmiştir ve PIV ölçümleri ile yapılan karşılaştırmalarda sadece bu bölümü incelenmiştir. Şekil 5.8’de sunulduğu üzere ölçümler ve hesaplamalar aralarındaki farkın %10 civarında kalması ile birlikte aralarındaki uyumun kabul edilebilir seviyede olduğu kanısına varılmıştır.

5.3 Hidrojenle Zenginleştirilmiş Alev

Bölüm 4.2’de sunulan alev hızları hesaplamaları sonucunda LU19 mekanizmasının hidrojen katkılı alevleri temsil edebildiği kanısına varılmıştır. Bunun yanında bölüm 5.2’de sunulan deneysel ölçümler ve benzetim sonuçları arasındaki uyum sonucunda metan/hava alevleri için HAD hesaplama yöntemlerinin uygun olduğu ve deneysel verileri iyi derecede temsil ettiği gözlemlenmiştir. Bu sonuçlar ışığında hesaplama yöntemlerinin ve LU19 kimyasal mekanizmasının hidrojen katkılı alevlerin hesaplanmasında da



Şekil 5.7: AVBP HAD sonuçlarından elde edilen tepkime ısısı eşdeğer çizgisi ile normalize edilmiş deneysel CH* kimyasal ışılda ölçümlerinin karşılaştırmalı görüntüsü, $\phi=0.7$.



Şekil 5.8: PIV ölçümleri ve AVBP HAD sonuçları ile elde edilmiş x-yönündeki hızların silindirden duvara çekilmiş bir doğru üzerindeki dağılımının karşılaştırılması, $\phi=0.7$.

Çizelge 5.1: Çalışılan işletme koşulları için denge ve silindir sıcaklıkları ve yanma odasının gücü.

	$\phi = 0.7$ $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$	$\phi = 0.75$ $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$	$\phi = 0.667$ $X_{H_2}^{fuel} = 0.2$
Denge sıcaklığı, K	1838.3	1920.3	1793.5
Silindir sıcaklığı, K	510.9	694.9	651.4
Yanma odası gücü, W	7636.0	8141.6	7301.8

uygun olacağı ve fiziksel durumun temsilinde değerli katkı sağlayacağı düşünülmektedir. Bu bölümde hidrojen katkılı alevler için tahminler sunulmuş ve hidrojen katkısının alevlerin tutunma mekanizması üzerindeki etkisi incelenmiştir.

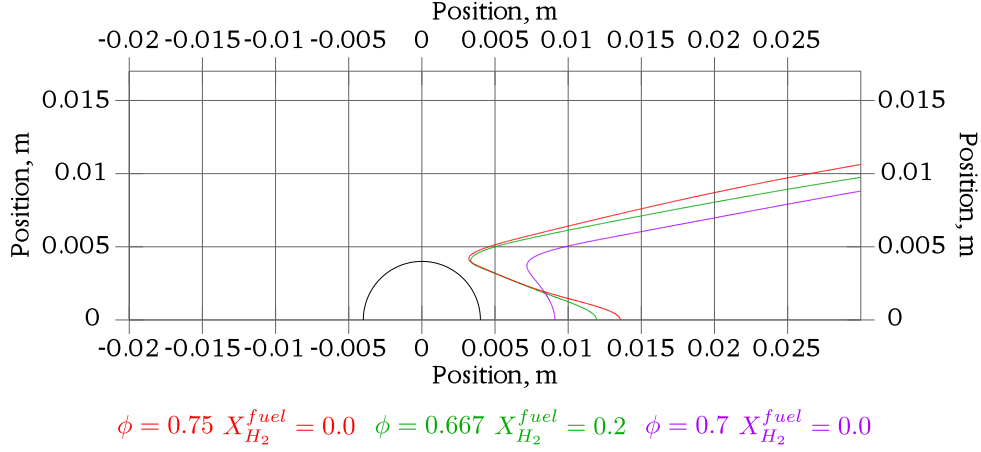
Eşdeğerlilik oranı $\phi = 0.7$ olan 300 K taze gaz sıcaklığı ve 1 atm basınç için alev hızı 0.19 m/s olarak hesaplanmıştır. Sabit eşdeğerlilik oranında hidrojen katkılı alevin alev hızı artacak, dolayısıyla alev açışı artacaktır. Alev topolojisinin benzer tutulabilmesi için yığın hızın ve alev hızının sabit tutulması gerektiği düşünüldüğünde aynı alev hızına sahip %20 hidrojen katkılı için bir eşdeğerlilik oranı hesaplanması gerekmektedir. Alev hızının 0.19 m/s olduğu %20 hidrojen katkılı alev için bu eşdeğerlilik oranı $\phi = 0.0667$ olarak hesaplanmıştır.

Çalışılan karışımların eşdeğerlilik oranları ve kimyasal tür oranları farklı olduğundan denge sıcaklıkları da farklıdır ve bu durum ısı transferi fenomenini etkileyecektir. Sonuçlar çizelge 5.1’de özetlenmiştir.

Çizelge 5.1’de sunulduğu üzere $\phi = 0.7$ eşdeğerlilik oranındaki metan/hava alevi ile aynı alev hızına sahip $\phi = 0.667$ eşdeğerlilik oranındaki %20 hidrojen katkılı metan/hava alevi çalışılan alevler arasında en düşük denge sıcaklığına sahiptir.

Çizelge 5.1’de sunulan bütün çalışma koşulları için güçler, denge sıcaklıkları ve silindir sıcaklıkları farklı olduğundan, normalleştirilmiş bir sıcaklık tanımlanmasının, alevin silindire olan yakınlığının incelenmesi açısından mantıklı bir kıstas olduğu düşünülmüştür. Karşılık gelen çalışma koşullarındaki silindir sıcaklıkları çizelge 5.1’de sunulmuştur. Eşdeğerlilik oranı ve hidrojen katkısı $\phi = 0.667$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.2$ olan çalışma koşulu için denge sıcaklığı eşdeğerlilik oranı ve hidrojen katkısı $\phi = 0.7$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$ olan çalışma koşulundan daha düşük olmasına rağmen silindir sıcaklıklarının daha yüksek olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum bölüm 1.2.4’de sunulduğu üzere hidrojen alevlerinin sönmeye mesafesinin daha düşük olmasından kaynaklanmaktadır. Dolayısıyla metana hidrojen katkısı uygulandığında alevlerin sönmeye mesafeleri düşmekte ve alevlerin soğuk duvarlara ilerlemesini kolaylaştırmaktadır. Bu durum aynı zamanda duvarların sıcaklıklarını arttırmakta ve ısı dengeye ulaşıncaya kadar alevlerin daha da yaklaşmasına neden olmaktadır.

Şekil 5.9 karşılık gelen çalışma koşulları için normalleştirilmiş sıcaklık $\Phi = 0.9$ eşdeğer çizgilerini göstermektedir. Bu şekilde $\phi = 0.667$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.2$ ve $\phi = 0.75$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$ alevlerinin silindirden uzaklıklarının son derece birbirine yakın olduğunun gözlemlenebilmesine karşın, çizelge 5.1’de sunulan silindirlerin yüzey sıcaklıkları farklıdır. Bu durum $\phi = 0.75$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$ alevinin daha güçlü olmasından kaynaklanan daha fazla ısı üretimi ve silindire ısı transferinin daha fazla olmasından kaynaklanmaktadır. Ayrıca



Şekil 5.9: Karşılık gelen durumlar için $\Theta = 0.9$ eşdeğer çizgisi.

$\phi = 0.7$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$ alevinin yanma odası simetri düzlemine yakın bölgelerde silindire daha yakın olmasının nedeni, bu çalışma koşulunda gözlemlenen ve Şekil 4.58’de sunulan geri dönüş bölgesinin, sıcak tepkime ürünlerini silindire doğru çekilmesinden kaynaklanmaktadır. Buna karşın silindir sıcaklığı $\phi = 0.7$, $X_{H_2}^{fuel} = 0.0$ durumu için çalışılan koşullar arasında en düşük değere ulaşmıştır.

5.4 Sonuç

Bu çalışmada dikdörtgeni bir kanal ile kuşatılmış silindirik bir çubuk üzerindeki sıkıştırılamaz tepkimesiz akış ile silindir üzerinde sabitlenmiş önkarişimli laminer metan/hava alevlerinin deneysel sonuçları ile HAD çözümleri karşılaştırmalı olarak incelenmiş ve deneysel sonuçlar ile HAD çözümlerinin aralarındaki uyum göz önünde bulundurularak çözüm yöntemlerinin deneysel koşulları yeterince iyi temsil ettiği sonucuna varılmıştır. PIV ölçümleri ile hız alanı CH^* kimyasal ışıltama ölçümleri kullanılarak alevin konumu doğrulanmış ve önkarişım eşdeğerlilik oranının ve silindir sıcaklığının alevin silindirden uzaklığı üzerinde, eşdeğerlilik oranının da alevin açısı üzerinde büyük etkisi olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, karışımın eşdeğerlilik oranının değişmesinden kaynaklanan sönme mesafesinin değişmesi ile açıklanabilir.

Sıkıştırılamaz tepkimesiz akış için deneysel sonuçlar ve HAD çözümleri karşılaştırılmış ve aradaki küçük farklılıkların nedeni giriş hız profili değiştirilerek araştırılmıştır. Sonuçta tekdüze bir hız profili kullanıldığında PIV ölçümleri ile HAD sonuçları arasındaki uyumun arttığı gözlenmiş ve giriş hız profilinin akış karakteristiği üzerinde büyük rol oynadığı sonucuna varılmıştır.

Sıkıştırılamaz tepkimesiz akışta silindirden kopan burgaçların silindirin sabit tutulduğu durumlarda simetrik bir davranış sergilediği ve burgaçlar koparken sınır tabaka ayrılma noktalarının hareket ettiği gözlemlenmiştir. Silindir döndüğünde bu simetri durumu bozulmuş ve sınır tabaka ayrılma noktaları dönüş yönünde hareket etmişlerdir. Aynı zamanda silindirden kopan burgaçların frekansları dönüş etkisi ile azalmış ve dönüş etkisinden kaynaklanan ortalama bir kaldırma katsayısı ve kaldırma kuvveti olduğu görülmüştür.

Kimyasal mekanizmaların literatürde yayınlanan deneysel sonuçlar kullanılarak geniş eşdeğerlilik oranı ve hidrojen katkısı uzayında doğrulamaları gerçekleştirilmiş ve indirgenmiş bir mekanizma olan LU19 mekanizmasının LU13 mekanizması ile karşılaştırıldığında zengin karışımlar ve geniş bir hidrojen katkısı yelpazesinde serbestçe yayılan alevler için alev hızlarının tahmininde deneysel verileri ve metan alevleri için geliştirilen çok kapsamlı fakat HAD hesaplamaları için çok masraflı olan Gri-MECH 3.0 mekanizmasını çok daha yakından takip ettiği gözlemlenmiştir. Hidrojen katkılı metan alevlerinde alev hızının katlanarak artan bir oranla hidrojenin molar oranına bağlı olduğu raporlanmış ve hidrojen alevleri için kimyasal denge sıcaklıklarının eşdeğerlilik oranı ≈ 1.05 civarında maksimum değerine ulaşmasına karşın alev hızının çok daha zengin koşullarda maksimum değerine ulaştığı gözlemlenmiştir.

Çeşitli kimyasal mekanizmalar kullanılarak kendiliğinden tutuşma zamanları hesaplanarak deneysel sonuçlarla karşılaştırılmış ve LU13 mekanizmasının kendiliğinden tutuşma zamanlarını deneysel sonuçlarla karşılaştırıldığında fazla tahmin etmesine karşın LU19 ve Gri-MECH 3.0 mekanizmalarının metan/hava önkarişimleri için deneysel sonuçları ve birbirlerini son derece iyi temsil ettiği sonucuna varılmıştır. Bunun yanında literatürden elde edilen hidrojen katkılı metan hava önkarişimlerinin, hidrojen katkısının kendiliğinden tutuşma zamanlarındaki tutuşma zamanını artırıcı yada azaltıcı etki yapacağı bir geçiş sıcaklığı olduğu gözlemlenmiş ve bu fenomenin Gri-MECH 3.0 mekanizması ile temsil edilememesine karşın San Diego mekanizması ile yakalandığı sonucuna varılmıştır.

Alev hızlarının üzerinde büyük etkisi olan ve pratik sistemlerde de sıklıkla karşılaşılan gerinim etkisi altındaki alevler için sanki 1B benzetimler gerçekleştirilmiş ve LU19 mekanizmasının Polimi mekanizması ile karşılaştırıldığında yakın sonuçlar üretmesinin yanında sıcaklıkların bir miktar daha düşük sonuçlandığı gözlemlenmiştir. Bu farkın, LU19 mekanizmasındaki sanki kararlı hal kabulünden kaynaklanan, *CO* molar oranlarında farklılıklar oluşturabilen ve sonucunda sıcaklıkların daha düşük sonuçlanmasına neden olan nüanslar olduğu düşünülmektedir. Serbestçe yayılan alev hızları sabit olan saf metan/hava ve %20 hidrojenle zenginleştirilmiş metan/hava önkarişimli alevlerinde alev hızları aynı olmasına karşın hidrojenle zenginleştirilmiş alevin gerinim etkisine karşı daha dayanıklı olduğu gözlemlenmiştir.

Alevin olduğu durumda yanmış gazların viskozitelerinin çok daha yüksek olmasından kaynaklı Karman burgaç kopması fenomeninin gerçekleşmediği gözlemlenmiştir. Ek olarak alevin varlığı aleve dik olan hız bileşeninin artmasına neden olduğundan akış çizgilerinin birbirinden uzaklaşmalarına neden olduğu fark edilmiştir.

Metan/hava önkarişimli alevleri sayısal ve deneysel tekniklerle incelenmiş ve hesaplamalar ile ölçümler arasındaki uyumun kabul edilebilir derecede olduğu sonucuna varılmıştır. Aynı zamanda kullanılan kimyasal mekanizmaların hidrojen katkılı alevlerin temsili konusunda da yeterli olduğu, serbestçe yayılan ve gerinim etkisi altındaki alevler gibi hesaplama gücü açısından daha az masraflı yöntemlerle saptanmıştır. Ardından HAD çözümlerinde kullanılan teknikler, hidrojen katkılı metan alevlerinin tutunma mekanizmalarının incelenmesinde sayısal hesaplamalarda kullanılmıştır. Bu incelemelerin ana fikri, hesaplama tekniklerinin, sınır koşullarının ve kimyasal mekanizmaların, metan/hava alevleri için doğrulamaları ile birlikte sunulmasının yanında bu yöntemlerin hidrojen katkılı metan alevlerini de temsil edebileceklerinin tasarlandığı, dolayısıyla

hidrojen katkılı metan alevlerinin sayısal incelenmesinde gerçeęi temsil edebilecek sonuçlar verebileceęi kanısı ile incelenebileceęi düşünceşidir.

Elde edilen önemli sonuçlardan biri olarak hidrojen katkısının metan alevlerinin tutunma mekanizmalarını deęiştirdięi olarak sunulabilir. Aynı zamanda metan alevleri ile aynı serbestçe yayılan laminar alev hızına sahip hidrojen katkılı metan alevlerinin soęuk duvarlara daha yakın ilerleyebildięi, dolayısıyla daha yüksek duvar sıcaklıklarına sonuç verebilecekleri gözlenmiştir. Duvar sıcaklıklarının alevlerin dinamik davranışları üzerinde büyük etkisi olduęu göz önünde bulundurulduğunda, hidrojen katkısının alevlerin dinamik davranışları üzerinde etkisinin olabileceęi düşünülebilir.

Gelecekte hidrojen katkılı alevlerin akustik etkilere karşı cevaplarının ve metan/hava alevlerinde silindir döndüğünde sönmeye başlayan alev kolu üzerindeki etkinin araştırılması faydalı bir çalışma olabilir. Hidrojen kolay yayınabilen bir molekül olduğundan silindir döndüğünde sönen alev kolunu aleve yayınarak tekrar yanmasını sağlayabileceęi bir ihtimal olarak düşünülmektedir. Bu tür çalışmalar sonucunda elde edilebilecek faydalı sonuçların, gelecekte muhtemel bir yakıt olarak düşünülen hidrojenin, mühendislik sistem uygulamalarında da ortaya çıkabilecek problemlerin tanımlanabilmesi açısından uygulamada kolaylıklar sağlayabileceęi düşünülmektedir.



Kaynakça

- [1] OpenFOAM® - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox.
- [2] SALOME Platform.
- [3] ME 592: Fundamentals of Particle Image Velocimetry, feb 2016.
- [4] **Bauerheim, M., Cazalens, M., and Poinso, T.** A theoretical study of mean azimuthal flow and asymmetry effects on thermo-acoustic modes in annular combustors. *Proceedings of the Combustion Institute* 35, 3 (2015), 3219–3227.
- [5] **Bauerheim, M., Salas, P., Nicoud, F., and Poinso, T.** Symmetry breaking of azimuthal thermo-acoustic modes in annular cavities: a theoretical study. *Journal of Fluid Mechanics* 760 (2014), 431–465.
- [6] **Benim, A. C., and Syed, K. J.** *Flashback Mechanisms in Lean Premixed Gas Turbine Combustion*. Elsevier Science, 2014.
- [7] **Bill, R. G. J., and Tarabanis, K.** The Effect of Premixed Combustion on the Recirculation Zone of Circular Cylinders. *Combustion Science and Technology* 47, 1-2 (may 1986), 39–53.
- [8] **Burguburu, J., Cabot, G., Renou, B., Boukhalfa, A. M., and Cazalens, M.** Effects of H₂ enrichment on flame stability and pollutant emissions for a kerosene/air swirled flame with an aeronautical fuel injector. *Proceedings of the Combustion Institute* 33, 2 (2011), 2927–2935.
- [9] **Coutanceau, M., and Defaye, J.-R.** Circular Cylinder Wake Configurations: A Flow Visualization Survey. *Applied Mechanics Reviews* 44, 6 (jun 1991), 255–305.
- [10] **Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., and Ranzi, E.** Extinction of laminar, premixed, counter-flow methane/air flames under unsteady conditions: Effect of H₂ addition. *Chemical Engineering Science* 93 (apr 2013), 266–276.
- [11] **Dahl, G., and Suttrop, F.** Engine control and low-NO_x combustion for hydrogen fuelled aircraft gas turbines. *International Journal of Hydrogen Energy* 23, 8 (aug 1998), 695–704.
- [12] **Das, L. M.** Hydrogen-oxygen reaction mechanism and its implication to hydrogen engine combustion. *International Journal of Hydrogen Energy* 21, 8 (aug 1996), 703–715.

- [13] **De Falco, M., and Basile, A.** *Enriched Methane: The First Step Towards the Hydrogen Economy*. Green Energy and Technology. Springer International Publishing, 2015.
- [14] **Deng, J., Ma, F., Li, S., He, Y., Wang, M., Jiang, L., and Zhao, S.** Experimental study on combustion and emission characteristics of a hydrogen-enriched compressed natural gas engine under idling condition. *International Journal of Hydrogen Energy* 36, 20 (oct 2011), 13150–13157.
- [15] **Dimopoulos, P., Bach, C., Soltic, P., and Boulouchos, K.** Hydrogen?natural gas blends fuelling passenger car engines: Combustion, emissions and well-to-wheels assessment. *International Journal of Hydrogen Energy* 33, 23 (dec 2008), 7224–7236.
- [16] **Dowdy, D. R., Smith, D. B., Taylor, S. C., and Williams, A.** The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. *Symposium (International) on Combustion* 23, 1 (1991), 325–332.
- [17] **Dunn-Rankin, D.** *Lean Combustion: Technology and Control*. Elsevier Science, 2011.
- [18] **Ebrahimi, H.** Overview of Gas Turbine Augmentor Design, Operation, and Combustion Oscillation. In *42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, Joint Propulsion Conferences. American Institute of Aeronautics and Astronautics, jul 2006.
- [19] **Fennell, D., Herreros, J., and Tsolakis, A.** Improving gasoline direct injection (GDI) engine efficiency and emissions with hydrogen from exhaust gas fuel reforming. *International Journal of Hydrogen Energy* 39, 10 (mar 2014), 5153–5162.
- [20] **Frenillot, J. P., Cabot, G., Cazalens, M., Renou, B., and Boukhalfa, M. A.** Impact of H₂ addition on flame stability and pollutant emissions for an atmospheric kerosene/air swirled flame of laboratory scaled gas turbine. *International Journal of Hydrogen Energy* 34, 9 (may 2009), 3930–3944.
- [21] **Fujii, S., and Eguchi, K.** A Comparison of Cold and Reacting Flows Around a Bluff-Body Flame Stabilizer. *Journal of Fluids Engineering* 103, 2 (jun 1981), 328–334.
- [22] **Fureby, C., and Löfström, C.** Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion Large-eddy simulations of bluff body stabilized flames. *Symposium (International) on Combustion* 25, 1 (1994), 1257–1264.
- [23] **Genovese, A., Contrisciani, N., Ortenzi, F., and Cazzola, V.** On road experimental tests of hydrogen/natural gas blends on transit buses. *International Journal of Hydrogen Energy* 36, 2 (jan 2011), 1775–1783.
- [24] **Gersen, S., Darmeveil, H., and Levinsky, H.** The effects of CO addition on the autoignition of H₂, CH₄ and CH₄/H₂ fuels at high pressure in an RCM. *Combustion and Flame* 159, 12 (dec 2012), 3472–3475.

- [25] **Goodwin, D. G., Moffat, H. K., and Speth, R. L.** Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes. [\url{http://www.cantera.org}](http://www.cantera.org), 2016.
- [26] **Griffith, M. D., Leontini, J., Thompson, M. C., and Hourigan, K.** Vortex shedding and three-dimensional behaviour of flow past a cylinder confined in a channel. *Journal of Fluids and Structures* 27, 5?6 (jul 2011), 855–860.
- [27] **Gu, X. J., Haq, M. Z., Lawes, M., and Woolley, R.** Laminar burning velocity and Markstein lengths of methane?air mixtures. *Combustion and Flame* 121, 1?2 (apr 2000), 41–58.
- [28] **Gupta, K. K., Rehman, A., and Sarviya, R. M.** Bio-fuels for the gas turbine: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 14, 9 (dec 2010), 2946–2955.
- [29] **Hairuddin, A. A., Yusaf, T., and Wandel, A. P.** A review of hydrogen and natural gas addition in diesel HCCI engines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 32 (apr 2014), 739–761.
- [30] **Halter, F., Chauveau, C., Djebaili-Chaumeix, N., and Gökalp, I.** Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane?hydrogen?air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute* 30, 1 (jan 2005), 201–208.
- [31] **Hassan, M. I., Aung, K. T., and Faeth, G. M.** Measured and predicted properties of laminar premixed methane/air flames at various pressures. *Combustion and Flame* 115, 4 (dec 1998), 539–550.
- [32] **Houghton, J. T., Ding, Y., Griggs, D. J., Noguier, M., van der Linden, P. J., Dai, X., and Maskell, K.** CLIMATE CHANGE 2001: THE SCIENTIFIC BASIS.
- [33] **Hu, E., Huang, Z., He, J., Jin, C., and Zheng, J.** Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane-hydrogen-air flames. *International Journal of Hydrogen Energy* 34, 11 (2009), 4876–4888.
- [34] **Hu, E., Li, X., Meng, X., Chen, Y., Cheng, Y., Xie, Y., and Huang, Z.** Laminar flame speeds and ignition delay times of methane?air mixtures at elevated temperatures and pressures. *Fuel* 158 (oct 2015), 1–10.
- [35] **Huang, B., Hu, E., Huang, Z., Zheng, J., Liu, B., and Jiang, D.** Cycle-by-cycle variations in a spark ignition engine fueled with natural gas?hydrogen blends combined with EGR. *International Journal of Hydrogen Energy* 34, 19 (oct 2009), 8405–8414.
- [36] **IEA.** World Energy Outlook 2013, 2013.
- [37] **Jackson, G. S., Sai, R., Plaia, J. M., Boggs, C. M., and Kiger, K. T.** Influence of H₂ on the response of lean premixed CH₄ flames to high strained flows. *Combustion and Flame* 132, 3 (feb 2003), 503–511.
- [38] **Jackson, G. S., Sai, R., Plaia, J. M., Boggs, C. M., and Kiger, K. T.** Influence of H₂ on the response of lean premixed CH₄ flames to high strained flows. *Combustion and Flame* 132, 3 (feb 2003), 503–511.

- [39] **Jarosinski, J., and Veyssiere, B.** *Combustion Phenomena: Selected Mechanisms of Flame Formation, Propagation and Extinction*. CRC Press, 2009.
- [40] **Ji, C., and Wang, S.** Effect of hydrogen addition on combustion and emissions performance of a spark ignition gasoline engine at lean conditions. *International Journal of Hydrogen Energy* 34, 18 (sep 2009), 7823–7834.
- [41] **Ji, C., and Wang, S.** Combustion and emissions performance of a hybrid hydrogen?gasoline engine at idle and lean conditions. *International Journal of Hydrogen Energy* 35, 1 (jan 2010), 346–355.
- [42] **Ji, C., Wang, S., and Zhang, B.** Combustion and emissions characteristics of a hybrid hydrogen?gasoline engine under various loads and lean conditions. *International Journal of Hydrogen Energy* 35, 11 (jun 2010), 5714–5722.
- [43] **Kang, S.** Uniform-shear flow over a circular cylinder at low Reynolds numbers. *Journal of Fluids and Structures* 22, 4 (may 2006), 541–555.
- [44] **Kee, R. J., Coltrin, M. E., and Glarborg, P.** *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*. Wiley, 2005.
- [45] **Keller, J. ., Vaneveld, L., Korschelt, D., Hubbard, G. L., Ghoniem, A. F., Daily, J. W., and Oppenheim, A. K.** Mechanism of Instabilities in Turbulent Combustion Leading to Flashback. *AIAA Journal* 20, 2 (feb 1982), 254–262.
- [46] **Law, C. K., Sung, C. J., Yu, G., and Axelbaum, R. L.** On the structural sensitivity of purely strained planar premixed flames to strain rate variations. *Combustion and Flame* 98, 1 (1994), 139–154.
- [47] **Law, C. K., Zhu, D. L., and Yu, G.** Twenty-First Symposium (International on Combustion) Propagation and extinction of stretched premixed flames. *Symposium (International) on Combustion* 21, 1 (1988), 1419–1426.
- [48] **Lieuwen, T. C.** *Unsteady Combustor Physics*. Cambridge University Press, 2012.
- [49] **Lovett, J., Brogan, T., Philippona, D., Kiel, B., and Thompson, T.** Development Needs for Advanced Afterburner Designs. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Joint Propulsion Conferences. American Institute of Aeronautics and Astronautics, jul 2004.
- [50] **Lu, T., and Law, C. K.** A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry. *Combustion and Flame* 154, 4 (sep 2008), 761–774.
- [51] **Ma, F., Wang, M., Jiang, L., Chen, R., Deng, J., Naeve, N., and Zhao, S.** Performance and emission characteristics of a turbocharged CNG engine fueled by hydrogen-enriched compressed natural gas with high hydrogen ratio. *International Journal of Hydrogen Energy* 35, 12 (jun 2010), 6438–6447.
- [52] **Ma, F., and Wang, Y.** Study on the extension of lean operation limit through hydrogen enrichment in a natural gas spark-ignition engine. *International Journal of Hydrogen Energy* 33, 4 (feb 2008), 1416–1424.

- [53] **Ma, F., Wang, Y., Liu, H., Li, Y., Wang, J., and Ding, S.** Effects of hydrogen addition on cycle-by-cycle variations in a lean burn natural gas spark-ignition engine. *International Journal of Hydrogen Energy* 33, 2 (jan 2008), 823–831.
- [54] **Ma, F., Wang, Y., Liu, H., Li, Y., Wang, J., and Zhao, S.** Experimental study on thermal efficiency and emission characteristics of a lean burn hydrogen enriched natural gas engine. *International Journal of Hydrogen Energy* 32, 18 (dec 2007), 5067–5075.
- [55] **MacLean, H. L., and Lave, L. B.** Evaluating automobile fuel/propulsion system technologies. *Progress in Energy and Combustion Science* 29, 1 (2003), 1–69.
- [56] **Mikolowsky, W. T., and Noggle, L. W.** The potential of liquid hydrogen as a military aircraft fuel. *International Journal of Hydrogen Energy* 3, 4 (1978), 449–460.
- [57] **Poinsot, T., and Veynante, D.** *Theoretical and Numerical Combustion*. CNRS, 2011.
- [58] **Poulton, M. L.** Alternative fuels for road vehicles.
- [59] **Raffel, M., Willert, C. E., Wereley, S., and Kompenhans, J.** *Particle Image Velocimetry: A Practical Guide*. Experimental Fluid Mechanics. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [60] **Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. P., and Law, C. K.** Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels. *Progress in Energy and Combustion Science* 38, 4 (aug 2012), 468–501.
- [61] **Rehimi, F., Aloui, F., Nasrallah, S. B., Doublicz, L., and Legrand, J.** Experimental investigation of a confined flow downstream of a circular cylinder centred between two parallel walls. *Journal of Fluids and Structures* 24, 6 (aug 2008), 855–882.
- [62] **Reshotko, E.** Drag Reduction by Cooling in Hydrogen-Fueled Aircraft. *Journal of Aircraft* 16, 9 (sep 1979), 584–590.
- [63] **Sahin, M., and Owens, R. G.** A numerical investigation of wall effects up to high blockage ratios on two-dimensional flow past a confined circular cylinder. *Physics of Fluids* 16, 5 (2004).
- [64] **San Diego Mechanism, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), U. o. C. a. S. D.** Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications.
- [65] **Sankaran, R., Hawkes, E. R., Chen, J. H., Lu, T., and Law, C. K.** Structure of a spatially developing turbulent lean methane-air Bunsen flame. *Proceedings of the Combustion Institute* 31, 1 (jan 2007), 1291–1298.
- [66] **Sayad, P., Schönborn, A., and Klingmann, J.** Experimental investigation of the stability limits of premixed syngas-air flames at two moderate swirl numbers. *Combustion and Flame* (2009).

- [67] **Schefer, R. W., Wicksall, D. M., and Agrawal, A. K.** Combustion of hydrogen-enriched methane in a lean premixed swirl-stabilized burner. *Proceedings of the Combustion Institute* 29, 1 (2002), 843–851.
- [68] **Shanbhogue, S. J., Husain, S., and Lieuwen, T.** Lean blowoff of bluff body stabilized flames: Scaling and dynamics. *Progress in Energy and Combustion Science* 35, 1 (feb 2009), 98–120.
- [69] **Sherif, S. A., Goswami, D. Y., Stefanakos, E. K., and Steinfeld, A.** *Handbook of Hydrogen Energy*. Mechanical and Aerospace Engineering Series. Taylor & Francis, 2014.
- [70] **Shirk, M. G., McGuire, T. P., Neal, G. L., and Haworth, D. C.** Investigation of a hydrogen-assisted combustion system for a light-duty diesel vehicle. *International Journal of Hydrogen Energy* 33, 23 (dec 2008), 7237–7244.
- [71] **Singha, S., and Sinhamahapatra, K. P.** Flow past a circular cylinder between parallel walls at low Reynolds numbers. *Ocean Engineering* 37, 8?9 (jun 2010), 757–769.
- [72] **Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, Jr, W. C., Lissianski, V. V., and Qin, Z.** GRI-Mech 3.0.
- [73] **Sun, C. J., Sung, C. J., He, L., and Law, C. K.** Dynamics of weakly stretched flames: quantitative description and extraction of global flame parameters. *Combustion and Flame* 118, 1?2 (jul 1999), 108–128.
- [74] **Takahashi, F., Mizomoto, M., Ikai, S., and Veziroglu, T.** Nuclear energy/synthetic fuels. *Nejat Veziroglu T, editor. Alternative energy sources III* 5 (1983), 447–457.
- [75] **Tang, C., Zhang, Y., and Huang, Z.** Progress in combustion investigations of hydrogen enriched hydrocarbons. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 30 (feb 2014), 195–216.
- [76] **Tanoue, K., Goto, S., Shimada, F., and Hamatake, T.** Effects of hydrogen addition on stretched premixed laminar methane flames (1st report, effects on laminar burning velocity). *Nippon Kikai Gakkai Ronbunshu, B Hen/Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Part B* 69, 677 (2003), 162–168.
- [77] **Taylor, Z. J., Gurka, R., Kopp, G. A., and Liberzon, A.** Long-Duration Time-Resolved PIV to Study Unsteady Aerodynamics, 2010.
- [78] **Tsujikawa, Y., and Hirano, M.** Effects of precooling of suction air on the performance of liquid hydrogen-fueled supersonic aircraft engine. *International Journal of Hydrogen Energy* 13, 11 (1988), 691–700.
- [79] **Vagelopoulos, C. M., and Frank, J. H.** An experimental and numerical study on the adequacy of CH as a flame marker in premixed methane flames. *Proceedings of the Combustion Institute* 30, 1 (jan 2005), 241–249.

- [80] **White, F. M.** *Fluid Mechanics*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw Hill, 2011.
- [81] **Willert, C. E., and Gharib, M.** Digital particle image velocimetry. *Experiments in Fluids* 10, 4, 181–193.
- [82] **Williamson, C. H. K.** Vortex Dynamics in the Cylinder Wake. *Annual Review of Fluid Mechanics* 28, 1 (jan 1996), 477–539.
- [83] **Yu, G., Law, C. K., and Wu, C. K.** Laminar flame speeds of hydrocarbon + air mixtures with hydrogen addition. *Combustion and Flame* 63, 3 (mar 1986), 339–347.





EKLER

EK 1 : LU19 mekanizması

EK 2 : LU13 mekanizması



EK 1

```
1 C
2 C
3 C
4 C A 15-step reduced mechanism based on GRI3.0
5 C
6 C by Tianfeng Lu
7 C Email: tlu@engr.uconn.edu
8 C
9 C Reference:
10 C Tianfeng Lu and Chung K. Law,
11 C "A criterion based on computational singular perturbation
12 C for the identification of quasi steady state species:
13 C A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry,"
14 C Combustion and Flame, Vol.154 No.4 pp.761-774, 2008.
15 C
16 C
17 C
18 C
19 C SUBROUTINE CKWYP (P, T, Y, ICKWRK, RCKWRK, WDOT)
20 C IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
21 C DIMENSION ICKWRK(*), RCKWRK(*), WDOT(*), Y(*)
22 C DIMENSION RF(184), RB(184), RKLOW(22), XQ(11), C(19)
23 C
24 C CALL YTCP(P, T, Y, C)
25 C CALL RATT(T, RF, RB, RKLOW)
26 C CALL RATX(T, C, RF, RB, RKLOW)
27 C CALL QSSA(RF, RB, XQ)
28 C CALL RDOT(RF, RB, WDOT)
29 C END
30 C
31 C
32 C
33 C SUBROUTINE YTCP (P, T, Y, C)
34 C IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
35 C DIMENSION Y(*), C(*)
36 C DATA SMALL/1.D-50/
37 C
38 C C(1) = Y(1)*4.96046521D-1
39 C C(2) = Y(2)*9.92093043D-1
40 C C(3) = Y(3)*6.25023433D-2
41 C C(4) = Y(4)*3.12511716D-2
42 C C(5) = Y(5)*5.87980383D-2
43 C C(6) = Y(6)*5.55082499D-2
44 C C(7) = Y(7)*3.02968146D-2
45 C C(8) = Y(8)*2.93990192D-2
46 C C(9) = Y(9)*6.65112065D-2
47 C C(10) = Y(10)*6.23323639D-2
48 C C(11) = Y(11)*3.57008335D-2
49 C C(12) = Y(12)*2.27221341D-2
50 C C(13) = Y(13)*3.33039255D-2
51 C C(14) = Y(14)*3.12086189D-2
52 C C(15) = Y(15)*3.84050525D-2
53 C C(16) = Y(16)*3.56453112D-2
54 C C(17) = Y(17)*3.32556033D-2
55 C C(18) = Y(18)*2.37882046D-2
56 C C(19) = Y(19)*3.56972032D-2
57 C
58 C SUM = 0.0
59 C DO K = 1, 19
60 C SUM = SUM + C(K)
```

```

61      ENDDO
62      SUM = P/(SUM*T*8.314510D7)
63 C
64      DO K = 1, 19
65          C(K) = C(K) * SUM
66      ENDDO
67      END
68
69 C-----C
70 C
71      SUBROUTINE RATT (T, RF, RB, RKLOW)
72      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
73      PARAMETER (RU=8.314510D7, PATM=1.01325D6, SMALL = 1.D-200)
74      DIMENSION RF(*), RB(*), RKLOW(*), EQK(184), SMH(30), EG(30)
75 C
76      ALOGT = LOG(T)
77      TI = 1.0D0/T
78      TI2 = TI*TI
79 C
80      RF(1) = 1.2D17*TI
81      RF(2) = 5.0D17*TI
82      RF(3) = EXP(1.05635949D1 +2.7D0*ALOGT -3.15013634D3*TI)
83      RF(4) = 2.0D13
84      RF(5) = EXP(1.60803938D1 +2.0D0*ALOGT -2.01286667D3*TI)
85      RF(6) = 5.7D13
86      RF(7) = 8.0D13
87      RF(8) = 1.5D13
88      RF(9) = 1.5D13
89      RF(10) = 5.06D13
90      RF(11) = EXP(2.07430685D1 +1.5D0*ALOGT -4.32766334D3*TI)
91      RF(12) = EXP(2.36136376D1 -1.20017175D3*TI)
92      RF(13) = 3.0D13
93      RF(14) = 3.0D13
94      RF(15) = EXP(3.12945828D1 -1.781387D3*TI)
95      RF(16) = 1.0D13
96      RF(17) = 1.0D13
97      RF(18) = EXP(1.28687606D1 +2.5D0*ALOGT -1.55997167D3*TI)
98      RF(19) = EXP(1.17752897D1 +2.5D0*ALOGT -2.51608334D3*TI)
99      TMP = EXP(2.0D0*ALOGT -9.56111669D2*TI )
100     RF(20) = 1.35D7 * TMP
101     RF(21) = 6.94D6 * TMP
102     RF(22) = 3.0D13
103     TMP = EXP(1.83D0*ALOGT -1.10707667D2*TI )
104     RF(23) = 1.25D7 * TMP
105     RF(167) = 6.7D6 * TMP
106     RF(24) = 2.24D13
107     RF(25) = EXP(1.83130955D1 +1.92D0*ALOGT -2.86330284D3*TI)
108     RF(26) = 1.0D14
109     TMP = EXP(-4.02573334D3*TI)
110     RF(27) = 1.0D13 * TMP
111     RF(76) = 5.0D13 * TMP
112     RF(28) = EXP(2.81906369D1 -6.79342501D2*TI)
113     RF(29) = EXP(2.85473118D1 -2.40537567D4*TI)
114     RF(30) = EXP(3.22361913D1 -2.01286667D4*TI)
115     RF(31) = EXP(4.24761511D1 -8.6D-1*ALOGT)
116     TMP = EXP(-1.24D0*ALOGT)
117     RF(32) = 2.08D19 * TMP
118     RF(34) = 2.6D19 * TMP
119     RF(33) = EXP(4.38677883D1 -7.6D-1*ALOGT)
120     RF(35) = EXP(3.78159211D1 -6.707D-1*ALOGT -8.57531523D3*TI)
121     RF(36) = 1.0D18*TI
122     RF(37) = EXP(3.90385861D1 -6.D-1*ALOGT)

```

123 RF(38) = EXP(4.55408762D1 -1.25D0*ALOGT)
 RF(39) = 5.5D20*TI2
 125 RF(40) = 2.2D22*TI2
 RF(41) = EXP(2.90097872D1 -3.37658384D2*TI)
 127 RF(42) = EXP(3.14332293D1 -5.37435401D2*TI)
 RF(43) = EXP(3.20618379D1 -3.19542584D2*TI)
 129 RF(44) = EXP(1.6308716D1 +2.D0*ALOGT -2.61672667D3*TI)
 RF(45) = EXP(2.99336062D1 -1.81158D3*TI)
 131 RF(46) = 1.65D14
 RF(47) = 6.D14
 133 RF(48) = 3.D13
 RF(49) = EXP(3.71706652D1 -5.34D-1*ALOGT -2.69724134D2*TI)
 135 RF(50) = EXP(2.03077504D1 +1.62D0*ALOGT -5.45486868D3*TI)
 RF(51) = EXP(2.77171988D1 +4.8D-1*ALOGT +1.30836334D2*TI)
 137 RF(52) = 7.34D13
 RF(53) = EXP(2.7014835D1 +4.54D-1*ALOGT -1.81158D3*TI)
 139 RF(54) = EXP(2.7014835D1 +4.54D-1*ALOGT -1.30836334D3*TI)
 RF(55) = EXP(1.78655549D1 +1.9D0*ALOGT -1.3798201D3*TI)
 141 RF(56) = EXP(2.76845619D1 +5.D-1*ALOGT -4.32766334D1*TI)
 RF(57) = 2.D13
 143 RF(58) = EXP(2.58292113D1 +6.5D-1*ALOGT +1.42913534D2*TI)
 RF(59) = EXP(3.11214496D1 -9.D-2*ALOGT -3.06962167D2*TI)
 145 RF(60) = EXP(2.85189124D1 +5.15D-1*ALOGT -2.51608334D1*TI)
 RF(61) = EXP(1.7541204D1 +1.63D0*ALOGT -9.68188869D2*TI)
 147 RF(62) = 2.D13
 RF(63) = EXP(2.80364862D1 +5.D-1*ALOGT +5.53538334D1*TI)
 149 RF(64) = EXP(3.31993656D1 -2.3D-1*ALOGT -5.38441834D2*TI)
 TMP = EXP(2.1D0*ALOGT -2.45066517D3*TI)
 151 RF(65) = 1.7D7 * TMP
 RF(66) = 4.2D6 * TMP
 153 RF(67) = EXP(2.93537877D1 -1.20772D3*TI)
 RF(68) = EXP(2.94360258D1 +2.7D-1*ALOGT -1.40900667D2*TI)
 155 RF(69) = 3.D13
 RF(70) = EXP(2.7014835D1 +4.54D-1*ALOGT -9.15854335D2*TI)
 157 RF(71) = EXP(1.4096923D1 +2.53D0*ALOGT -6.15937201D3*TI)
 RF(72) = EXP(4.07945264D1 -9.9D-1*ALOGT -7.95082335D2*TI)
 159 RF(73) = 2.D12
 RF(74) = EXP(1.85604427D1 +1.9D0*ALOGT -3.78922151D3*TI)
 161 RF(75) = 1.D14
 RF(77) = EXP(3.00558238D1 -1.72502674D3*TI)
 163 RF(78) = EXP(1.75767107D1 +1.5D0*ALOGT -4.00560467D4*TI)
 RF(79) = EXP(1.9190789D1 +1.51D0*ALOGT -1.72603317D3*TI)
 165 RF(80) = EXP(3.19350862D1 -3.7D-1*ALOGT)
 RF(81) = EXP(1.0482906D1 +2.4D0*ALOGT +1.06178717D3*TI)
 167 RF(82) = EXP(3.03051698D1 +2.51608334D2*TI)
 RF(83) = EXP(2.83241683D1 -2.14873517D2*TI)
 169 RF(84) = EXP(4.19771599D1 -1.47996022D4*TI)
 RF(85) = 5.D13
 171 RF(86) = 3.D13
 RF(87) = 2.D13
 173 RF(88) = EXP(1.62403133D1 +2.D0*ALOGT -1.50965D3*TI)
 RF(89) = 3.D13
 175 RF(90) = EXP(4.24725733D1 -1.43D0*ALOGT -6.69278168D2*TI)
 RF(91) = EXP(1.78408622D1 +1.6D0*ALOGT -2.72743434D3*TI)
 177 RF(92) = EXP(4.10064751D1 -1.34D0*ALOGT -7.13058018D2*TI)
 RF(93) = EXP(1.84206807D1 +1.6D0*ALOGT -1.570036D3*TI)
 179 RF(94) = EXP(1.76783433D1 +1.228D0*ALOGT -3.52251667D1*TI)
 RF(95) = 5.D13
 181 RF(96) = EXP(2.19558261D1 +1.18D0*ALOGT +2.2493785D2*TI)
 RF(97) = 5.D12
 183 RF(98) = 5.D12
 RF(99) = EXP(1.41801537D1 +2.D0*ALOGT +4.22702001D2*TI)

185 RF(100) = EXP(1.56560602D1 +2.D0*ALOGT -7.54825001D2*TI)
RF(101) = EXP(-8.4310155D0 +4.5D0*ALOGT +5.03216668D2*TI)
187 RF(102) = EXP(-7.6354939D0 +4.D0*ALOGT +1.00643334D3*TI)
RF(103) = 5.D12
189 RF(104) = EXP(1.50964444D1 +2.D0*ALOGT -1.25804167D3*TI)
RF(105) = EXP(1.50796373D1 +2.12D0*ALOGT -4.37798501D2*TI)
191 RF(106) = EXP(2.96459241D1 -1.00643334D3*TI)
RF(107) = EXP(2.55908003D1 +8.20243168D2*TI)
193 RF(108) = EXP(3.36712758D1 -6.03860001D3*TI)
RF(109) = 2.D13
195 RF(110) = 1.D12
RF(111) = 3.78D13
197 RF(112) = EXP(3.26416564D1 -1.18759134D4*TI)
RF(113) = EXP(1.55382772D1 +2.D0*ALOGT -6.03860001D3*TI)
199 RF(114) = EXP(3.16914641D1 -2.89852801D2*TI)
RF(115) = 5.D13
201 RF(116) = 6.71D13
RF(117) = EXP(3.23131523D1 -1.56500384D3*TI)
203 RF(118) = EXP(2.93732401D1 +3.79928584D2*TI)
RF(119) = 4.D13
205 RF(120) = 3.D13
RF(121) = 6.D13
207 RF(122) = 5.D13
RF(123) = EXP(3.28780452D1 -7.94679762D3*TI)
209 RF(124) = EXP(3.21806786D1 +2.59156584D2*TI)
RF(125) = 5.D13
211 TMP = EXP(-7.54825001D2*TI)
RF(126) = 5.D12 * TMP
213 RF(171) = 5.8D12 * TMP
RF(172) = 2.4D12 * TMP
215 RF(127) = EXP(1.31223634D1 +2.D0*ALOGT -3.63825651D3*TI)
RF(128) = EXP(3.500878D1 -6.01041988D3*TI)
217 RF(129) = 4.D13
RF(130) = EXP(1.47156719D1 +2.D0*ALOGT -4.16160184D3*TI)
219 RF(131) = EXP(2.74203001D1 +5.D-1*ALOGT -2.26950717D3*TI)
RF(132) = 3.D13
221 RF(133) = EXP(3.03390713D1 -3.01930001D2*TI)
RF(134) = 2.8D13
223 RF(135) = 1.2D13
RF(136) = 7.D13
225 RF(137) = EXP(4.07167205D1 -1.16D0*ALOGT -5.76183084D2*TI)
RF(138) = 3.D13
227 TMP = EXP(2.86833501D2*TI)
RF(139) = 1.2D13 * TMP
229 RF(140) = 1.6D13 * TMP
RF(141) = 9.D12
231 RF(142) = 7.D12
RF(143) = 1.4D13
233 RF(144) = EXP(3.13199006D1 +2.76769167D2*TI)
RF(145) = EXP(3.12033668D1 -1.53380444D4*TI)
235 RF(146) = EXP(2.84682686D1 -1.02228466D4*TI)
RF(147) = EXP(1.01064284D1 +2.47D0*ALOGT -2.60666234D3*TI)
237 RF(148) = EXP(3.87538626D1 -1.18D0*ALOGT -3.29103701D2*TI)
RF(149) = EXP(2.95538088D1 +1.D-1*ALOGT -5.33409668D3*TI)
239 RF(150) = 2.648D13
RF(151) = EXP(8.10772006D0 +2.81D0*ALOGT -2.94884967D3*TI)
241 TMP = EXP(1.5D0*ALOGT -5.00197368D3*TI)
RF(152) = 3.D7 * TMP
243 RF(153) = 1.D7 * TMP
RF(154) = EXP(1.23327053D1 +2.D0*ALOGT -4.62959334D3*TI)
245 RF(155) = EXP(1.56303353D1 +1.74D0*ALOGT -5.25861418D3*TI)
TMP = EXP(-1.D0*ALOGT -8.55468335D3*TI)

```

247 RF(156) = 1.5D18 * TMP
RF(157) = 1.87D17 * TMP
249 RF(158) = EXP(3.02300002D1 -2.01286667D2*TI)
RF(159) = EXP(3.05213929D1 -4.52895001D2*TI)
251 RF(160) = EXP(-2.84796532D1 +7.6D0*ALOGT +1.77635484D3*TI)
RF(161) = EXP(3.83630605D1 -1.39D0*ALOGT -5.10764918D2*TI)
253 RF(162) = EXP(2.97104627D1 +4.4D-1*ALOGT -4.36641103D4*TI)
RF(163) = EXP(2.74566677D1 -1.94996459D3*TI)
255 RF(164) = EXP(2.87941719D1 -4.29747034D2*TI)
RF(165) = 1.D13
257 RF(166) = 3.37D13
RF(168) = EXP(3.61482143D1 -8.72074485D3*TI)
259 RF(169) = EXP(2.28027074D1 +5.D-1*ALOGT +8.83145252D2*TI)
RF(170) = EXP(2.83090547D1 +4.3D-1*ALOGT +1.86190167D2*TI)
261 RF(173) = EXP(3.29293385D1 -5.52984796D3*TI)
RF(174) = EXP(2.49457104D1 +2.5D-1*ALOGT +4.70507584D2*TI)
263 RF(175) = EXP(2.64369986D1 +2.9D-1*ALOGT -5.53538334D0*TI)
RF(176) = EXP(1.41059389D1 +1.61D0*ALOGT +1.932352D2*TI)
265 RF(177) = EXP(2.69105027D1 +4.22D-1*ALOGT +8.83145252D2*TI)
RF(178) = 1.5D14
267 RF(179) = 1.81D10
RF(180) = 2.35D10
269 RF(181) = 2.2D13
RF(182) = 1.1D13
271 RF(183) = 1.2D13
RF(184) = 3.01D13
273 C
CALL RDSMH (T, SMH)
275 DO N = 1, 29
EG(N) = EXP(SMH(N))
277 ENDDO
C
279 PFAC = PATM / (RU*T)
PFAC2 = PFAC*PFAC
281 PFAC3 = PFAC2*PFAC
C
283 EQK(1)=EG(4)/EG(3)/EG(3)/PFAC
EQK(2)=EG(5)/EG(2)/EG(3)/PFAC
285 EQK(3)=EG(2)*EG(5)/EG(1)/EG(3)
EQK(4)=EG(4)*EG(5)/EG(3)/EG(7)
287 EQK(5)=EG(5)*EG(7)/EG(3)/EG(8)
EQK(6)=EG(2)*EG(15)/EG(3)/EG(10)
289 EQK(7)=EG(2)*EG(17)/EG(3)/EG(11)
EQK(8)=EG(1)*EG(15)/EG(3)/EG(12)
291 EQK(9)=EG(2)*EG(17)/EG(3)/EG(12)
EQK(10)=EG(2)*EG(18)/EG(3)/EG(13)
293 EQK(11)=EG(5)*EG(13)/EG(3)/EG(14)
EQK(12)=EG(16)/EG(3)/EG(15)/PFAC
295 EQK(13)=EG(5)*EG(15)/EG(3)/EG(17)
EQK(14)=EG(2)*EG(16)/EG(3)/EG(17)
297 EQK(15)=EG(5)*EG(17)/EG(3)/EG(18)
EQK(16)=EG(5)*EG(18)/EG(3)/EG(19)
299 EQK(17)=EG(5)*EG(18)/EG(3)/EG(20)
EQK(18)=EG(5)*EG(19)/EG(3)/EG(21)
301 EQK(19)=EG(5)*EG(20)/EG(3)/EG(21)
EQK(20)=EG(2)*EG(27)/EG(3)/EG(22)
303 EQK(21)=EG(11)*EG(15)/EG(3)/EG(22)
EQK(22)=EG(2)*EG(28)/EG(3)/EG(23)
305 EQK(23)=EG(13)*EG(17)/EG(3)/EG(24)
EQK(24)=EG(13)*EG(18)/EG(3)/EG(25)
307 EQK(25)=EG(5)*EG(25)/EG(3)/EG(26)
EQK(26)=EG(2)*EG(15)*EG(15)/EG(3)/EG(27)*PFAC

```


309 EQK(27)=EG(5)*EG(27)/EG(3)/EG(28)
 EQK(28)=EG(11)*EG(16)/EG(3)/EG(28)
 311 EQK(29)=EG(3)*EG(16)/EG(4)/EG(15)
 EQK(30)=EG(7)*EG(17)/EG(4)/EG(18)
 313 EQK(31)=EG(7)/EG(2)/EG(4)/PFAC
 EQK(32)=EQK(31)
 315 EQK(33)=EQK(31)
 EQK(34)=EQK(31)
 317 EQK(35)=EG(3)*EG(5)/EG(2)/EG(4)
 EQK(36)=EG(1)/EG(2)/EG(2)/PFAC
 319 EQK(37)=EQK(36)
 EQK(38)=EQK(36)
 321 EQK(39)=EQK(36)
 EQK(40)=EG(6)/EG(2)/EG(5)/PFAC
 323 EQK(41)=EG(3)*EG(6)/EG(2)/EG(7)
 EQK(42)=EG(1)*EG(4)/EG(2)/EG(7)
 325 EQK(43)=EG(5)*EG(5)/EG(2)/EG(7)
 EQK(44)=EG(1)*EG(7)/EG(2)/EG(8)
 327 EQK(45)=EG(5)*EG(6)/EG(2)/EG(8)
 EQK(46)=EG(1)*EG(9)/EG(2)/EG(10)
 329 EQK(47)=EG(13)/EG(2)/EG(11)/PFAC
 EQK(48)=EG(1)*EG(10)/EG(2)/EG(12)
 331 EQK(49)=EG(14)/EG(2)/EG(13)/PFAC
 EQK(50)=EG(1)*EG(13)/EG(2)/EG(14)
 333 EQK(51)=EG(18)/EG(2)/EG(17)/PFAC
 EQK(52)=EG(1)*EG(15)/EG(2)/EG(17)
 335 EQK(53)=EG(19)/EG(2)/EG(18)/PFAC
 EQK(54)=EG(20)/EG(2)/EG(18)/PFAC
 337 EQK(55)=EG(1)*EG(17)/EG(2)/EG(18)
 EQK(56)=EG(21)/EG(2)/EG(19)/PFAC
 339 EQK(57)=EG(1)*EG(18)/EG(2)/EG(19)
 EQK(58)=EG(5)*EG(13)/EG(2)/EG(19)
 341 EQK(59)=EG(6)*EG(12)/EG(2)/EG(19)
 EQK(60)=EG(21)/EG(2)/EG(20)/PFAC
 343 EQK(61)=EG(19)/EG(20)
 EQK(62)=EG(1)*EG(18)/EG(2)/EG(20)
 345 EQK(63)=EG(5)*EG(13)/EG(2)/EG(20)
 EQK(64)=EG(6)*EG(12)/EG(2)/EG(20)
 347 EQK(65)=EG(1)*EG(19)/EG(2)/EG(21)
 EQK(66)=EG(1)*EG(20)/EG(2)/EG(21)
 349 EQK(67)=EG(23)/EG(2)/EG(22)/PFAC
 EQK(68)=EG(24)/EG(2)/EG(23)/PFAC
 351 EQK(69)=EG(1)*EG(22)/EG(2)/EG(23)
 EQK(70)=EG(25)/EG(2)/EG(24)/PFAC
 353 EQK(71)=EG(1)*EG(23)/EG(2)/EG(24)
 EQK(72)=EG(26)/EG(2)/EG(25)/PFAC
 355 EQK(73)=EG(1)*EG(24)/EG(2)/EG(25)
 EQK(74)=EG(1)*EG(25)/EG(2)/EG(26)
 357 EQK(75)=EG(12)*EG(15)/EG(2)/EG(27)
 EQK(76)=EG(1)*EG(27)/EG(2)/EG(28)
 359 EQK(77)=EG(13)*EG(15)/EG(2)/EG(28)
 EQK(78)=EG(18)/EG(1)/EG(15)/PFAC
 361 EQK(79)=EG(2)*EG(6)/EG(1)/EG(5)
 EQK(80)=EG(8)/EG(5)/EG(5)/PFAC
 363 EQK(81)=EG(3)*EG(6)/EG(5)/EG(5)
 EQK(82)=EG(4)*EG(6)/EG(5)/EG(7)
 365 EQK(168)=EQK(82)
 EQK(83)=EG(6)*EG(7)/EG(5)/EG(8)
 367 EQK(84)=EQK(83)
 EQK(85)=EG(2)*EG(15)/EG(5)/EG(9)
 369 EQK(86)=EG(2)*EG(17)/EG(5)/EG(10)
 EQK(87)=EG(2)*EG(18)/EG(5)/EG(11)

371 EQK(88)=EG(6)*EG(10)/EG(5)/EG(11)
 EQK(89)=EG(2)*EG(18)/EG(5)/EG(12)
 373 EQK(90)=EG(21)/EG(5)/EG(13)/PFAC
 EQK(91)=EG(6)*EG(11)/EG(5)/EG(13)
 375 EQK(92)=EG(6)*EG(12)/EG(5)/EG(13)
 EQK(93)=EG(6)*EG(13)/EG(5)/EG(14)
 377 EQK(94)=EG(2)*EG(16)/EG(5)/EG(15)
 EQK(95)=EG(6)*EG(15)/EG(5)/EG(17)
 379 EQK(96)=EG(6)*EG(17)/EG(5)/EG(18)
 EQK(97)=EG(6)*EG(18)/EG(5)/EG(19)
 381 EQK(98)=EG(6)*EG(18)/EG(5)/EG(20)
 EQK(99)=EG(6)*EG(19)/EG(5)/EG(21)
 383 EQK(100)=EG(6)*EG(20)/EG(5)/EG(21)
 EQK(101)=EG(2)*EG(28)/EG(5)/EG(22)
 385 EQK(102)=EG(13)*EG(15)/EG(5)/EG(22)
 EQK(103)=EG(6)*EG(22)/EG(5)/EG(23)
 387 EQK(104)=EG(6)*EG(23)/EG(5)/EG(24)
 EQK(105)=EG(6)*EG(25)/EG(5)/EG(26)
 389 EQK(106)=EG(6)*EG(27)/EG(5)/EG(28)
 EQK(107)=EG(4)*EG(8)/EG(7)/EG(7)
 391 EQK(108)=EQK(107)
 EQK(109)=EG(5)*EG(18)/EG(7)/EG(11)
 393 EQK(110)=EG(4)*EG(14)/EG(7)/EG(13)
 EQK(111)=EG(5)*EG(20)/EG(7)/EG(13)
 395 EQK(112)=EG(5)*EG(16)/EG(7)/EG(15)
 EQK(113)=EG(8)*EG(17)/EG(7)/EG(18)
 397 EQK(114)=EG(3)*EG(15)/EG(4)/EG(9)
 EQK(115)=EG(2)*EG(22)/EG(9)/EG(13)
 399 EQK(116)=EG(3)*EG(17)/EG(4)/EG(10)
 EQK(117)=EG(2)*EG(11)/EG(1)/EG(10)
 401 EQK(118)=EG(2)*EG(18)/EG(6)/EG(10)
 EQK(119)=EG(2)*EG(22)/EG(10)/EG(11)
 403 EQK(120)=EG(2)*EG(23)/EG(10)/EG(13)
 EQK(121)=EG(2)*EG(24)/EG(10)/EG(14)
 405 EQK(122)=EG(27)/EG(10)/EG(15)/PFAC
 EQK(123)=EG(15)*EG(17)/EG(10)/EG(16)
 407 EQK(124)=EG(2)*EG(28)/EG(10)/EG(18)
 EQK(125)=EG(15)*EG(22)/EG(10)/EG(27)
 409 EQK(127)=EG(2)*EG(13)/EG(1)/EG(11)
 EQK(128)=EG(1)*EG(22)/EG(11)/EG(11)
 411 EQK(129)=EG(2)*EG(24)/EG(11)/EG(13)
 EQK(130)=EG(13)*EG(13)/EG(11)/EG(14)
 413 EQK(131)=EG(28)/EG(11)/EG(15)/PFAC
 EQK(132)=EG(15)*EG(23)/EG(11)/EG(27)
 415 EQK(133)=EG(11)/EG(12)
 EQK(138)=EQK(133)
 417 EQK(141)=EQK(133)
 EQK(142)=EQK(133)
 419 EQK(134)=EG(2)*EG(5)*EG(15)/EG(4)/EG(12)*PFAC
 EQK(135)=EG(6)*EG(15)/EG(4)/EG(12)
 421 EQK(136)=EG(2)*EG(13)/EG(1)/EG(12)
 EQK(137)=EG(21)/EG(6)/EG(12)/PFAC
 423 EQK(139)=EG(2)*EG(24)/EG(12)/EG(13)
 EQK(140)=EG(13)*EG(13)/EG(12)/EG(14)
 425 EQK(143)=EG(15)*EG(18)/EG(12)/EG(16)
 EQK(144)=EG(13)*EG(25)/EG(12)/EG(26)
 427 EQK(145)=EG(3)*EG(20)/EG(4)/EG(13)
 EQK(146)=EG(5)*EG(18)/EG(4)/EG(13)
 429 EQK(147)=EG(7)*EG(14)/EG(8)/EG(13)
 EQK(148)=EG(26)/EG(13)/EG(13)/PFAC
 431 EQK(149)=EG(2)*EG(25)/EG(13)/EG(13)
 EQK(150)=EG(14)*EG(15)/EG(13)/EG(17)

433 EQK(151)=EG(14)*EG(17)/EG(13)/EG(18)
 435 EQK(152)=EG(14)*EG(19)/EG(13)/EG(21)
 EQK(153)=EG(14)*EG(20)/EG(13)/EG(21)
 437 EQK(154)=EG(14)*EG(23)/EG(13)/EG(24)
 EQK(155)=EG(14)*EG(25)/EG(13)/EG(26)
 EQK(156)=EG(2)*EG(15)/EG(17)*PFAC
 439 EQK(157)=EQK(156)
 EQK(158)=EG(7)*EG(15)/EG(4)/EG(17)
 441 EQK(159)=EG(7)*EG(18)/EG(4)/EG(19)
 EQK(160)=EG(7)*EG(18)/EG(4)/EG(20)
 443 EQK(161)=EG(17)*EG(18)/EG(4)/EG(23)
 EQK(162)=EG(1)*EG(22)/EG(24)*PFAC
 445 EQK(163)=EG(7)*EG(24)/EG(4)/EG(25)
 EQK(164)=EG(5)*EG(15)*EG(15)/EG(4)/EG(27)*PFAC
 447 EQK(165)=EG(15)*EG(15)*EG(22)/EG(27)/EG(27)*PFAC
 EQK(167)=EG(2)*EG(29)/EG(3)/EG(24)
 449 EQK(170)=EG(13)/EG(1)/EG(10)/PFAC
 EQK(172)=EG(3)*EG(18)/EG(4)/EG(11)
 451 EQK(175)=EG(3)*EG(29)/EG(4)/EG(23)
 EQK(176)=EG(7)*EG(22)/EG(4)/EG(23)
 453 EQK(177)=EG(29)/EG(2)/EG(28)/PFAC
 EQK(181)=EG(13)*EG(17)/EG(2)/EG(29)
 455 EQK(182)=EG(1)*EG(28)/EG(2)/EG(29)
 EQK(183)=EG(6)*EG(28)/EG(5)/EG(29)
 457 EQK(184)=EG(17)*EG(19)/EG(5)/EG(29)

C

459 RB(1) = RF(1) / MAX(EQK(1) ,SMALL)
 RB(2) = RF(2) / MAX(EQK(2) ,SMALL)
 461 RB(3) = RF(3) / MAX(EQK(3) ,SMALL)
 RB(4) = RF(4) / MAX(EQK(4) ,SMALL)
 463 RB(5) = RF(5) / MAX(EQK(5) ,SMALL)
 RB(6) = RF(6) / MAX(EQK(6) ,SMALL)
 465 RB(7) = RF(7) / MAX(EQK(7) ,SMALL)
 RB(8) = RF(8) / MAX(EQK(8) ,SMALL)
 467 RB(9) = RF(9) / MAX(EQK(9) ,SMALL)
 RB(10) = RF(10) / MAX(EQK(10) ,SMALL)
 469 RB(11) = RF(11) / MAX(EQK(11) ,SMALL)
 RB(12) = RF(12) / MAX(EQK(12) ,SMALL)
 471 RB(13) = RF(13) / MAX(EQK(13) ,SMALL)
 RB(14) = RF(14) / MAX(EQK(14) ,SMALL)
 473 RB(15) = RF(15) / MAX(EQK(15) ,SMALL)
 RB(16) = RF(16) / MAX(EQK(16) ,SMALL)
 475 RB(17) = RF(17) / MAX(EQK(17) ,SMALL)
 RB(18) = RF(18) / MAX(EQK(18) ,SMALL)
 477 RB(19) = RF(19) / MAX(EQK(19) ,SMALL)
 RB(20) = RF(20) / MAX(EQK(20) ,SMALL)
 479 RB(21) = RF(21) / MAX(EQK(21) ,SMALL)
 RB(22) = RF(22) / MAX(EQK(22) ,SMALL)
 481 RB(23) = RF(23) / MAX(EQK(23) ,SMALL)
 RB(24) = RF(24) / MAX(EQK(24) ,SMALL)
 483 RB(25) = RF(25) / MAX(EQK(25) ,SMALL)
 RB(26) = RF(26) / MAX(EQK(26) ,SMALL)
 485 RB(27) = RF(27) / MAX(EQK(27) ,SMALL)
 RB(28) = RF(28) / MAX(EQK(28) ,SMALL)
 487 RB(29) = RF(29) / MAX(EQK(29) ,SMALL)
 RB(30) = RF(30) / MAX(EQK(30) ,SMALL)
 489 RB(31) = RF(31) / MAX(EQK(31) ,SMALL)
 RB(32) = RF(32) / MAX(EQK(32) ,SMALL)
 491 RB(33) = RF(33) / MAX(EQK(33) ,SMALL)
 RB(34) = RF(34) / MAX(EQK(34) ,SMALL)
 493 RB(35) = RF(35) / MAX(EQK(35) ,SMALL)
 RB(36) = RF(36) / MAX(EQK(36) ,SMALL)

495 RB(37) = RF(37) / MAX(EQK(37),SMALL)
 RB(38) = RF(38) / MAX(EQK(38),SMALL)
 497 RB(39) = RF(39) / MAX(EQK(39),SMALL)
 RB(40) = RF(40) / MAX(EQK(40),SMALL)
 499 RB(41) = RF(41) / MAX(EQK(41),SMALL)
 RB(42) = RF(42) / MAX(EQK(42),SMALL)
 501 RB(43) = RF(43) / MAX(EQK(43),SMALL)
 RB(44) = RF(44) / MAX(EQK(44),SMALL)
 503 RB(45) = RF(45) / MAX(EQK(45),SMALL)
 RB(46) = RF(46) / MAX(EQK(46),SMALL)
 505 RB(47) = RF(47) / MAX(EQK(47),SMALL)
 RB(48) = RF(48) / MAX(EQK(48),SMALL)
 507 RB(49) = RF(49) / MAX(EQK(49),SMALL)
 RB(50) = RF(50) / MAX(EQK(50),SMALL)
 509 RB(51) = RF(51) / MAX(EQK(51),SMALL)
 RB(52) = RF(52) / MAX(EQK(52),SMALL)
 511 RB(53) = RF(53) / MAX(EQK(53),SMALL)
 RB(54) = RF(54) / MAX(EQK(54),SMALL)
 513 RB(55) = RF(55) / MAX(EQK(55),SMALL)
 RB(56) = RF(56) / MAX(EQK(56),SMALL)
 515 RB(57) = RF(57) / MAX(EQK(57),SMALL)
 RB(58) = RF(58) / MAX(EQK(58),SMALL)
 517 RB(59) = RF(59) / MAX(EQK(59),SMALL)
 RB(60) = RF(60) / MAX(EQK(60),SMALL)
 519 RB(61) = RF(61) / MAX(EQK(61),SMALL)
 RB(62) = RF(62) / MAX(EQK(62),SMALL)
 521 RB(63) = RF(63) / MAX(EQK(63),SMALL)
 RB(64) = RF(64) / MAX(EQK(64),SMALL)
 523 RB(65) = RF(65) / MAX(EQK(65),SMALL)
 RB(66) = RF(66) / MAX(EQK(66),SMALL)
 525 RB(67) = RF(67) / MAX(EQK(67),SMALL)
 RB(68) = RF(68) / MAX(EQK(68),SMALL)
 527 RB(69) = RF(69) / MAX(EQK(69),SMALL)
 RB(70) = RF(70) / MAX(EQK(70),SMALL)
 529 RB(71) = RF(71) / MAX(EQK(71),SMALL)
 RB(72) = RF(72) / MAX(EQK(72),SMALL)
 531 RB(73) = RF(73) / MAX(EQK(73),SMALL)
 RB(74) = RF(74) / MAX(EQK(74),SMALL)
 533 RB(75) = RF(75) / MAX(EQK(75),SMALL)
 RB(76) = RF(76) / MAX(EQK(76),SMALL)
 535 RB(77) = RF(77) / MAX(EQK(77),SMALL)
 RB(78) = RF(78) / MAX(EQK(78),SMALL)
 537 RB(79) = RF(79) / MAX(EQK(79),SMALL)
 RB(80) = RF(80) / MAX(EQK(80),SMALL)
 539 RB(81) = RF(81) / MAX(EQK(81),SMALL)
 RB(82) = RF(82) / MAX(EQK(82),SMALL)
 541 RB(83) = RF(83) / MAX(EQK(83),SMALL)
 RB(84) = RF(84) / MAX(EQK(84),SMALL)
 543 RB(85) = RF(85) / MAX(EQK(85),SMALL)
 RB(86) = RF(86) / MAX(EQK(86),SMALL)
 545 RB(87) = RF(87) / MAX(EQK(87),SMALL)
 RB(88) = RF(88) / MAX(EQK(88),SMALL)
 547 RB(89) = RF(89) / MAX(EQK(89),SMALL)
 RB(90) = RF(90) / MAX(EQK(90),SMALL)
 549 RB(91) = RF(91) / MAX(EQK(91),SMALL)
 RB(92) = RF(92) / MAX(EQK(92),SMALL)
 551 RB(93) = RF(93) / MAX(EQK(93),SMALL)
 RB(94) = RF(94) / MAX(EQK(94),SMALL)
 553 RB(95) = RF(95) / MAX(EQK(95),SMALL)
 RB(96) = RF(96) / MAX(EQK(96),SMALL)
 555 RB(97) = RF(97) / MAX(EQK(97),SMALL)
 RB(98) = RF(98) / MAX(EQK(98),SMALL)

557 RB(99) = RF(99) / MAX(EQK(99),SMALL)
559 RB(100) = RF(100) / MAX(EQK(100),SMALL)
RB(101) = RF(101) / MAX(EQK(101),SMALL)
561 RB(102) = RF(102) / MAX(EQK(102),SMALL)
RB(103) = RF(103) / MAX(EQK(103),SMALL)
563 RB(104) = RF(104) / MAX(EQK(104),SMALL)
RB(105) = RF(105) / MAX(EQK(105),SMALL)
RB(106) = RF(106) / MAX(EQK(106),SMALL)
565 RB(107) = RF(107) / MAX(EQK(107),SMALL)
RB(108) = RF(108) / MAX(EQK(108),SMALL)
567 RB(109) = RF(109) / MAX(EQK(109),SMALL)
RB(110) = RF(110) / MAX(EQK(110),SMALL)
569 RB(111) = RF(111) / MAX(EQK(111),SMALL)
RB(112) = RF(112) / MAX(EQK(112),SMALL)
571 RB(113) = RF(113) / MAX(EQK(113),SMALL)
RB(114) = RF(114) / MAX(EQK(114),SMALL)
573 RB(115) = RF(115) / MAX(EQK(115),SMALL)
RB(116) = RF(116) / MAX(EQK(116),SMALL)
575 RB(117) = RF(117) / MAX(EQK(117),SMALL)
RB(118) = RF(118) / MAX(EQK(118),SMALL)
577 RB(119) = RF(119) / MAX(EQK(119),SMALL)
RB(120) = RF(120) / MAX(EQK(120),SMALL)
579 RB(121) = RF(121) / MAX(EQK(121),SMALL)
RB(122) = RF(122) / MAX(EQK(122),SMALL)
581 RB(123) = RF(123) / MAX(EQK(123),SMALL)
RB(124) = RF(124) / MAX(EQK(124),SMALL)
583 RB(125) = RF(125) / MAX(EQK(125),SMALL)
RB(126) = 0.0
585 RB(127) = RF(127) / MAX(EQK(127),SMALL)
RB(128) = RF(128) / MAX(EQK(128),SMALL)
587 RB(129) = RF(129) / MAX(EQK(129),SMALL)
RB(130) = RF(130) / MAX(EQK(130),SMALL)
589 RB(131) = RF(131) / MAX(EQK(131),SMALL)
RB(132) = RF(132) / MAX(EQK(132),SMALL)
591 RB(133) = RF(133) / MAX(EQK(133),SMALL)
RB(134) = RF(134) / MAX(EQK(134),SMALL)
593 RB(135) = RF(135) / MAX(EQK(135),SMALL)
RB(136) = RF(136) / MAX(EQK(136),SMALL)
595 RB(137) = RF(137) / MAX(EQK(137),SMALL)
RB(138) = RF(138) / MAX(EQK(138),SMALL)
597 RB(139) = RF(139) / MAX(EQK(139),SMALL)
RB(140) = RF(140) / MAX(EQK(140),SMALL)
599 RB(141) = RF(141) / MAX(EQK(141),SMALL)
RB(142) = RF(142) / MAX(EQK(142),SMALL)
601 RB(143) = RF(143) / MAX(EQK(143),SMALL)
RB(144) = RF(144) / MAX(EQK(144),SMALL)
603 RB(145) = RF(145) / MAX(EQK(145),SMALL)
RB(146) = RF(146) / MAX(EQK(146),SMALL)
605 RB(147) = RF(147) / MAX(EQK(147),SMALL)
RB(148) = RF(148) / MAX(EQK(148),SMALL)
607 RB(149) = RF(149) / MAX(EQK(149),SMALL)
RB(150) = RF(150) / MAX(EQK(150),SMALL)
609 RB(151) = RF(151) / MAX(EQK(151),SMALL)
RB(152) = RF(152) / MAX(EQK(152),SMALL)
611 RB(153) = RF(153) / MAX(EQK(153),SMALL)
RB(154) = RF(154) / MAX(EQK(154),SMALL)
613 RB(155) = RF(155) / MAX(EQK(155),SMALL)
RB(156) = RF(156) / MAX(EQK(156),SMALL)
615 RB(157) = RF(157) / MAX(EQK(157),SMALL)
RB(158) = RF(158) / MAX(EQK(158),SMALL)
617 RB(159) = RF(159) / MAX(EQK(159),SMALL)
RB(160) = RF(160) / MAX(EQK(160),SMALL)

```

619 RB(161) = RF(161) / MAX(EQK(161),SMALL)
621 RB(162) = RF(162) / MAX(EQK(162),SMALL)
623 RB(163) = RF(163) / MAX(EQK(163),SMALL)
625 RB(164) = RF(164) / MAX(EQK(164),SMALL)
627 RB(165) = RF(165) / MAX(EQK(165),SMALL)
629 RB(166) = 0.0
631 RB(167) = RF(167) / MAX(EQK(167),SMALL)
633 RB(168) = RF(168) / MAX(EQK(168),SMALL)
635 RB(169) = 0.0
637 RB(170) = RF(170) / MAX(EQK(170),SMALL)
639 RB(171) = 0.0
641 RB(172) = RF(172) / MAX(EQK(172),SMALL)
643 RB(173) = 0.0
645 RB(174) = 0.0
647 RB(175) = RF(175) / MAX(EQK(175),SMALL)
649 RB(176) = RF(176) / MAX(EQK(176),SMALL)
651 RB(177) = RF(177) / MAX(EQK(177),SMALL)
653 RB(178) = 0.0
655 RB(179) = 0.0
657 RB(180) = 0.0
659 RB(181) = RF(181) / MAX(EQK(181),SMALL)
661 RB(182) = RF(182) / MAX(EQK(182),SMALL)
663 RB(183) = RF(183) / MAX(EQK(183),SMALL)
665 RB(184) = RF(184) / MAX(EQK(184),SMALL)
C
667 RKLOW(1) = EXP(3.40312786D1 -1.50965D3/T)
669 RKLOW(2) = EXP(5.99064331D1 -2.76D0*ALOGT -8.05146668D2/T)
671 RKLOW(3) = EXP(7.69484824D1 -4.76D0*ALOGT -1.22784867D3/T)
673 RKLOW(4) = EXP(5.61662604D1 -2.57D0*ALOGT -2.13867084D2/T)
675 RKLOW(5) = EXP(7.39217399D1 -4.82D0*ALOGT -3.28600484D3/T)
677 RKLOW(6) = EXP(6.98660102D1 -4.8D0*ALOGT -2.79788467D3/T)
679 RKLOW(7) = EXP(7.28526099D1 -4.65D0*ALOGT -2.55634067D3/T)
681 RKLOW(8) = EXP(9.59450043D1 -7.44D0*ALOGT -7.08529068D3/T)
683 RKLOW(9) = EXP(9.34384048D1 -7.27D0*ALOGT -3.63322434D3/T)
685 RKLOW(10) = EXP(6.9414025D1 -3.86D0*ALOGT -1.67067934D3/T)
687 RKLOW(11) = EXP(9.61977483D1 -7.62D0*ALOGT -3.50742017D3/T)
689 RKLOW(12) = EXP(9.50941235D1 -7.08D0*ALOGT -3.36400342D3/T)
691 RKLOW(13) = EXP(6.37931383D1 -3.42D0*ALOGT -4.24463259D4/T)
693 RKLOW(14) = EXP(4.22794408D1 -9.D-1*ALOGT +8.55468335D2/T)
695 RKLOW(15) = EXP(8.42793577D1 -5.92D0*ALOGT -1.58010034D3/T)
697 RKLOW(16) = EXP(6.54619238D1 -3.74D0*ALOGT -9.74227469D2/T)
699 RKLOW(17) = EXP(7.69748493D1 -5.11D0*ALOGT -3.57032226D3/T)
701 RKLOW(18) = EXP(8.81295053D1 -6.36D0*ALOGT -2.536212D3/T)
703 RKLOW(19) = EXP(9.56297642D1 -7.03D0*ALOGT -1.38988444D3/T)
705 RKLOW(20) = EXP(1.17889265D2 -9.3D0*ALOGT -4.92145901D4/T)
707 RKLOW(21) = EXP(5.91374013D1 -2.8D0*ALOGT -2.96897834D2/T)
709 RKLOW(22) = EXP(9.67205025D1 -7.63D0*ALOGT -1.93939704D3/T)
C
667 END
C
669 C
671 C
673 C
C
675 SUBROUTINE RDSMH (T, SMH)
677 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
679 DIMENSION SMH(*), TN(5)
C
675 TLOG = LOG(T)
677 TI = 1.0D0/T
679 TN(1) = TLOG - 1.0
677 TN(2) = T
679 TN(3) = TN(2)*T
677 TN(4) = TN(3)*T

```

```

681 TN(5) = TN(4)*T
C
683 IF (T .GT. 1.D3) THEN
C
685 SMH(1) = -3.20502331D+00 + 9.50158922D+02*TI
* + 3.33727920D+00*TN(1) - 2.47012365D-05*TN(2)
687 * + 8.32427963D-08*TN(3) - 1.49638662D-11*TN(4)
* + 1.00127688D-15*TN(5)
689 SMH(2) = -4.46682914D-01 - 2.54736599D+04*TI
* + 2.50000001D+00*TN(1) - 1.15421486D-11*TN(2)
691 * + 2.69269913D-15*TN(3) - 3.94596029D-19*TN(4)
* + 2.49098679D-23*TN(5)
693 SMH(3) = 4.78433864D+00 - 2.92175791D+04*TI
* + 2.56942078D+00*TN(1) - 4.29870569D-05*TN(2)
695 * + 6.99140982D-09*TN(3) - 8.34814992D-13*TN(4)
* + 6.14168455D-17*TN(5)
697 SMH(4) = 5.45323129D+00 + 1.08845772D+03*TI
* + 3.28253784D+00*TN(1) + 7.41543770D-04*TN(2)
699 * - 1.26327778D-07*TN(3) + 1.74558796D-11*TN(4)
* - 1.08358897D-15*TN(5)
701 SMH(5) = 4.47669610D+00 - 3.85865700D+03*TI
* + 3.09288767D+00*TN(1) + 2.74214858D-04*TN(2)
703 * + 2.10842047D-08*TN(3) - 7.32884630D-12*TN(4)
* + 5.87061880D-16*TN(5)
705 SMH(6) = 4.96677010D+00 + 3.00042971D+04*TI
* + 3.03399249D+00*TN(1) + 1.08845902D-03*TN(2)
707 * - 2.73454197D-08*TN(3) - 8.08683225D-12*TN(4)
* + 8.41004960D-16*TN(5)
709 SMH(7) = 3.78510215D+00 - 1.11856713D+02*TI
* + 4.01721090D+00*TN(1) + 1.11991007D-03*TN(2)
711 * - 1.05609692D-07*TN(3) + 9.52053083D-12*TN(4)
* - 5.39542675D-16*TN(5)
713 SMH(8) = 2.91615662D+00 + 1.78617877D+04*TI
* + 4.16500285D+00*TN(1) + 2.45415847D-03*TN(2)
715 * - 3.16898708D-07*TN(3) + 3.09321655D-11*TN(4)
* - 1.43954153D-15*TN(5)
717 SMH(9) = 4.80150373D+00 - 8.54512953D+04*TI
* + 2.49266888D+00*TN(1) + 2.39944642D-05*TN(2)
719 * - 1.20722503D-08*TN(3) + 3.11909191D-12*TN(4)
* - 2.43638946D-16*TN(5)
721 SMH(10) = 5.48497999D+00 - 7.10124364D+04*TI
* + 2.87846473D+00*TN(1) + 4.85456841D-04*TN(2)
723 * + 2.40742758D-08*TN(3) - 1.08906541D-11*TN(4)
* + 8.80396915D-16*TN(5)
725 SMH(11) = 6.17119324D+00 - 4.62636040D+04*TI
* + 2.87410113D+00*TN(1) + 1.82819646D-03*TN(2)
727 * - 2.34824328D-07*TN(3) + 2.16816291D-11*TN(4)
* - 9.38637835D-16*TN(5)
729 SMH(12) = 8.62650169D+00 - 5.09259997D+04*TI
* + 2.29203842D+00*TN(1) + 2.32794319D-03*TN(2)
731 * - 3.35319912D-07*TN(3) + 3.48255000D-11*TN(4)
* - 1.69858183D-15*TN(5)
733 SMH(13) = 8.48007179D+00 - 1.67755843D+04*TI
* + 2.28571772D+00*TN(1) + 3.61995018D-03*TN(2)
735 * - 4.97857247D-07*TN(3) + 4.96403870D-11*TN(4)
* - 2.33577197D-15*TN(5)
737 SMH(14) = 1.84373180D+01 + 9.46834459D+03*TI
* + 7.48514950D-02*TN(1) + 6.69547335D-03*TN(2)
739 * - 9.55476348D-07*TN(3) + 1.01910446D-10*TN(4)
* - 5.09076150D-15*TN(5)
741 SMH(15) = 7.81868772D+00 + 1.41518724D+04*TI
* + 2.71518561D+00*TN(1) + 1.03126372D-03*TN(2)

```

```

743 *           - 1.66470962D-07*TN(3) + 1.91710840D-11*TN(4)
745 *           - 1.01823858D-15*TN(5)
SMH(16) = 2.27163806D+00 + 4.87591660D+04*TI
747 *           + 3.85746029D+00*TN(1) + 2.20718513D-03*TN(2)
*           - 3.69135673D-07*TN(3) + 4.36241823D-11*TN(4)
749 *           - 2.36042082D-15*TN(5)
SMH(17) = 9.79834492D+00 - 4.01191815D+03*TI
*           + 2.77217438D+00*TN(1) + 2.47847763D-03*TN(2)
751 *           - 4.14076022D-07*TN(3) + 4.90968148D-11*TN(4)
*           - 2.66754356D-15*TN(5)
753 SMH(18) = 1.36563230D+01 + 1.39958323D+04*TI
*           + 1.76069008D+00*TN(1) + 4.60000041D-03*TN(2)
755 *           - 7.37098022D-07*TN(3) + 8.38676767D-11*TN(4)
*           - 4.41927820D-15*TN(5)
757 SMH(19) = 5.81043215D+00 + 3.24250627D+03*TI
*           + 3.69266569D+00*TN(1) + 4.32288399D-03*TN(2)
759 *           - 6.25168533D-07*TN(3) + 6.56028863D-11*TN(4)
*           - 3.24277101D-15*TN(5)
761 SMH(20) = 2.92957500D+00 - 1.27832520D+02*TI
*           + 3.77079900D+00*TN(1) + 3.93574850D-03*TN(2)
763 *           - 4.42730667D-07*TN(3) + 3.28702583D-11*TN(4)
*           - 1.05630800D-15*TN(5)
765 SMH(21) = 1.45023623D+01 + 2.53748747D+04*TI
*           + 1.78970791D+00*TN(1) + 7.04691460D-03*TN(2)
767 *           - 1.06083472D-06*TN(3) + 1.15142571D-10*TN(4)
*           - 5.85301100D-15*TN(5)
769 SMH(22) = -1.23028121D+00 - 2.59359992D+04*TI
*           + 4.14756964D+00*TN(1) + 2.98083332D-03*TN(2)
771 *           - 3.95491420D-07*TN(3) + 3.89510143D-11*TN(4)
*           - 1.80617607D-15*TN(5)
773 SMH(23) = 7.78732378D+00 - 3.46128739D+04*TI
*           + 3.01672400D+00*TN(1) + 5.16511460D-03*TN(2)
775 *           - 7.80137248D-07*TN(3) + 8.48027400D-11*TN(4)
*           - 4.31303520D-15*TN(5)
777 SMH(24) = 1.03053693D+01 - 4.93988614D+03*TI
*           + 2.03611116D+00*TN(1) + 7.32270755D-03*TN(2)
779 *           - 1.11846319D-06*TN(3) + 1.22685769D-10*TN(4)
*           - 6.28530305D-15*TN(5)
781 SMH(25) = 1.34624343D+01 - 1.28575200D+04*TI
*           + 1.95465642D+00*TN(1) + 8.69863610D-03*TN(2)
783 *           - 1.33034445D-06*TN(3) + 1.46014741D-10*TN(4)
*           - 7.48207880D-15*TN(5)
785 SMH(26) = 1.51156107D+01 + 1.14263932D+04*TI
*           + 1.07188150D+00*TN(1) + 1.08426339D-02*TN(2)
787 *           - 1.67093445D-06*TN(3) + 1.84510001D-10*TN(4)
*           - 9.50014450D-15*TN(5)
789 SMH(27) = -3.93025950D+00 - 1.93272150D+04*TI
*           + 5.62820580D+00*TN(1) + 2.04267005D-03*TN(2)
791 *           - 2.65575783D-07*TN(3) + 2.38550433D-11*TN(4)
*           - 9.70391600D-16*TN(5)
793 SMH(28) = 6.32247205D-01 + 7.55105311D+03*TI
*           + 4.51129732D+00*TN(1) + 4.50179872D-03*TN(2)
795 *           - 6.94899392D-07*TN(3) + 7.69454902D-11*TN(4)
*           - 3.97419100D-15*TN(5)
797 SMH(29) = -5.04525100D+00 - 4.90321800D+02*TI
*           + 5.97567000D+00*TN(1) + 4.06529550D-03*TN(2)
799 *           - 4.57270667D-07*TN(3) + 3.39192000D-11*TN(4)
*           - 1.08800850D-15*TN(5)
801 C
      ELSE
803 C
      SMH(1) = 6.83010238D-01 + 9.17935173D+02*TI

```


805 * + 2.34433112D+00*TN(1) + 3.99026037D-03*TN(2)
806 * - 3.24635850D-06*TN(3) + 1.67976745D-09*TN(4)
807 * - 3.68805881D-13*TN(5)
SMH(2) = -4.46682853D-01 - 2.54736599D+04*TI
809 * + 2.50000000D+00*TN(1) + 3.52666409D-13*TN(2)
* - 3.32653273D-16*TN(3) + 1.91734693D-19*TN(4)
811 * - 4.63866166D-23*TN(5)
SMH(3) = 2.05193346D+00 - 2.91222592D+04*TI
813 * + 3.16826710D+00*TN(1) - 1.63965942D-03*TN(2)
* + 1.10717733D-06*TN(3) - 5.10672187D-10*TN(4)
815 * + 1.05632986D-13*TN(5)
SMH(4) = 3.65767573D+00 + 1.06394356D+03*TI
817 * + 3.78245636D+00*TN(1) - 1.49836708D-03*TN(2)
* + 1.64121700D-06*TN(3) - 8.06774591D-10*TN(4)
819 * + 1.62186419D-13*TN(5)
SMH(5) = -1.03925458D-01 - 3.61508056D+03*TI
821 * + 3.99201543D+00*TN(1) - 1.20065876D-03*TN(2)
* + 7.69656402D-07*TN(3) - 3.23427778D-10*TN(4)
823 * + 6.82057350D-14*TN(5)
SMH(6) = -8.49032208D-01 + 3.02937267D+04*TI
825 * + 4.19864056D+00*TN(1) - 1.01821705D-03*TN(2)
* + 1.08673369D-06*TN(3) - 4.57330885D-10*TN(4)
827 * + 8.85989085D-14*TN(5)
SMH(7) = 3.71666245D+00 - 2.94808040D+02*TI
829 * + 4.30179801D+00*TN(1) - 2.37456025D-03*TN(2)
* + 3.52638152D-06*TN(3) - 2.02303245D-09*TN(4)
831 * + 4.64612562D-13*TN(5)
SMH(8) = 3.43505074D+00 + 1.77025821D+04*TI
833 * + 4.27611269D+00*TN(1) - 2.71411208D-04*TN(2)
* + 2.78892835D-06*TN(3) - 1.79809011D-09*TN(4)
835 * + 4.31227182D-13*TN(5)
SMH(9) = 4.53130848D+00 - 8.54438832D+04*TI
837 * + 2.55423955D+00*TN(1) - 1.60768862D-04*TN(2)
* + 1.22298708D-07*TN(3) - 6.10195741D-11*TN(4)
839 * + 1.33260723D-14*TN(5)
SMH(10) = 2.08401108D+00 - 7.07972934D+04*TI
841 * + 3.48981665D+00*TN(1) + 1.61917771D-04*TN(2)
* - 2.81498442D-07*TN(3) + 2.63514439D-10*TN(4)
843 * - 7.03045335D-14*TN(5)
SMH(11) = 1.56253185D+00 - 4.60040401D+04*TI
845 * + 3.76267867D+00*TN(1) + 4.84436072D-04*TN(2)
* + 4.65816402D-07*TN(3) - 3.20909294D-10*TN(4)
847 * + 8.43708595D-14*TN(5)
SMH(12) = -7.69118967D-01 - 5.04968163D+04*TI
849 * + 4.19860411D+00*TN(1) - 1.18330710D-03*TN(2)
* + 1.37216037D-06*TN(3) - 5.57346651D-10*TN(4)
851 * + 9.71573685D-14*TN(5)
SMH(13) = 1.60456433D+00 - 1.64449988D+04*TI
853 * + 3.67359040D+00*TN(1) + 1.00547588D-03*TN(2)
* + 9.55036427D-07*TN(3) - 5.72597854D-10*TN(4)
855 * + 1.27192867D-13*TN(5)
SMH(14) = -4.64130376D+00 + 1.02466476D+04*TI
857 * + 5.14987613D+00*TN(1) - 6.83548940D-03*TN(2)
* + 8.19667665D-06*TN(3) - 4.03952522D-09*TN(4)
859 * + 8.33469780D-13*TN(5)
SMH(15) = 3.50840928D+00 + 1.43440860D+04*TI
861 * + 3.57953347D+00*TN(1) - 3.05176840D-04*TN(2)
* + 1.69469055D-07*TN(3) + 7.55838237D-11*TN(4)
863 * - 4.52212249D-14*TN(5)
SMH(16) = 9.90105222D+00 + 4.83719697D+04*TI
865 * + 2.35677352D+00*TN(1) + 4.49229839D-03*TN(2)
* - 1.18726045D-06*TN(3) + 2.04932518D-10*TN(4)

```

867 *      - 7.18497740D-15*TN(5)
SMH(17) = 3.39437243D+00 - 3.83956496D+03*TI
869 *      + 4.22118584D+00*TN(1) - 1.62196266D-03*TN(2)
*      + 2.29665743D-06*TN(3) - 1.10953411D-09*TN(4)
871 *      + 2.16884433D-13*TN(5)
SMH(18) = 6.02812900D-01 + 1.43089567D+04*TI
873 *      + 4.79372315D+00*TN(1) - 4.95416685D-03*TN(2)
*      + 6.22033347D-06*TN(3) - 3.16071051D-09*TN(4)
875 *      + 6.58863260D-13*TN(5)
SMH(19) = 5.47302243D+00 + 3.19391367D+03*TI
877 *      + 3.86388918D+00*TN(1) + 2.79836152D-03*TN(2)
*      + 9.88786318D-07*TN(3) - 8.71100100D-10*TN(4)
879 *      + 2.18483639D-13*TN(5)
SMH(20) = 1.31521770D+01 - 9.78601100D+02*TI
881 *      + 2.10620400D+00*TN(1) + 3.60829750D-03*TN(2)
*      + 8.89745333D-07*TN(3) - 6.14803000D-10*TN(4)
883 *      + 1.03780500D-13*TN(5)
SMH(21) = -1.50409823D+00 + 2.56427656D+04*TI
885 *      + 5.71539582D+00*TN(1) - 7.61545645D-03*TN(2)
*      + 1.08740193D-05*TN(3) - 5.92339074D-09*TN(4)
887 *      + 1.30676349D-12*TN(5)
SMH(22) = 1.39397051D+01 - 2.64289807D+04*TI
889 *      + 8.08681094D-01*TN(1) + 1.16807815D-02*TN(2)
*      - 5.91953025D-06*TN(3) + 2.33460364D-09*TN(4)
891 *      - 4.25036487D-13*TN(5)
SMH(23) = 8.51054025D+00 - 3.48598468D+04*TI
893 *      + 3.21246645D+00*TN(1) + 7.57395810D-04*TN(2)
*      + 4.32015687D-06*TN(3) - 2.98048206D-09*TN(4)
895 *      + 7.35754365D-13*TN(5)
SMH(24) = 4.09733096D+00 - 5.08977593D+03*TI
897 *      + 3.95920148D+00*TN(1) - 3.78526124D-03*TN(2)
*      + 9.51650487D-06*TN(3) - 5.76323961D-09*TN(4)
899 *      + 1.34942187D-12*TN(5)
SMH(25) = 4.70720924D+00 - 1.28416265D+04*TI
901 *      + 4.30646568D+00*TN(1) - 2.09329446D-03*TN(2)
*      + 8.28571345D-06*TN(3) - 4.99272172D-09*TN(4)
903 *      + 1.15254502D-12*TN(5)
SMH(26) = 2.66682316D+00 + 1.15222055D+04*TI
905 *      + 4.29142492D+00*TN(1) - 2.75077135D-03*TN(2)
*      + 9.99063813D-06*TN(3) - 5.90388571D-09*TN(4)
907 *      + 1.34342886D-12*TN(5)
SMH(27) = 1.24904170D+01 - 2.00594490D+04*TI
909 *      + 2.25172140D+00*TN(1) + 8.82751050D-03*TN(2)
*      - 3.95485017D-06*TN(3) + 1.43964658D-09*TN(4)
911 *      - 2.53324055D-13*TN(5)
SMH(28) = 1.22156480D+01 + 7.04291804D+03*TI
913 *      + 2.13583630D+00*TN(1) + 9.05943605D-03*TN(2)
*      - 2.89912457D-06*TN(3) + 7.78664640D-10*TN(4)
915 *      - 1.00728807D-13*TN(5)
SMH(29) = 9.55829000D+00 - 1.52147660D+03*TI
917 *      + 3.40906200D+00*TN(1) + 5.36928700D-03*TN(2)
*      + 3.15248667D-07*TN(3) - 5.96548583D-10*TN(4)
919 *      + 1.43369250D-13*TN(5)

```

```

ENDIF
END

```

```

C
C
C

```

```

C
C
C

```

```

SUBROUTINE RATX ( T, C, RF, RB, RKLOW)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
PARAMETER (SMALL = 1.D-200)
DIMENSION C(*), RF(*), RB(*), RKLOW(*)

```

```

929 DIMENSION CTB(184)
C
931 ALOGT = LOG(T)
CTOT = 0.0
933 DO K = 1, 19
CTOT = CTOT + C(K)
935 ENDDO
C
937 CTB(1) = CTOT + 1.4D0*C(1) + 1.44D1*C(6) + C(10) + 7.5D-1*C(11)
*
+ 2.6D0*C(12) + 2.D0*C(17)
939 CTB(2) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(6) + C(10) + 5.D-1*C(11) + C(12)
*
+ 2.D0*C(17)
941 CTB(47) = CTB(2)
CTB(51) = CTB(2)
943 CTB(53) = CTB(2)
CTB(54) = CTB(2)
945 CTB(56) = CTB(2)
CTB(60) = CTB(2)
947 CTB(67) = CTB(2)
CTB(68) = CTB(2)
949 CTB(70) = CTB(2)
CTB(72) = CTB(2)
951 CTB(78) = CTB(2)
CTB(80) = CTB(2)
953 CTB(90) = CTB(2)
CTB(122) = CTB(2)
955 CTB(131) = CTB(2)
CTB(137) = CTB(2)
957 CTB(148) = CTB(2)
CTB(162) = CTB(2)
959 CTB(170) = CTB(2)
CTB(177) = CTB(2)
961 CTB(12) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(4) + 5.D0*C(6) + C(10)
*
+ 5.D-1*C(11) + 2.5D0*C(12) + 2.D0*C(17)
963 CTB(31) = CTOT - C(4) - C(6) - 2.5D-1*C(11) + 5.D-1*C(12)
*
+ 5.D-1*C(17) - C(19)
965 CTB(36) = CTOT - C(1) - C(6) + C(10) - C(12) + 2.D0*C(17)
CTB(40) = CTOT - 2.7D-1*C(1) + 2.65D0*C(6) + C(10) + 2.D0*C(17)
967 CTB(49) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(6) + 2.D0*C(10) + 5.D-1*C(11)
*
+ C(12) + 2.D0*C(17)
969 CTB(157) = CTOT + C(1) - C(6) + C(10) + 5.D-1*C(11) + C(12)
*
+ 2.D0*C(17)
C
971 PR = RKLOW(1) * CTB(12) / RF(12)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
973 RF(12) = RF(12) * PCOR
975 RB(12) = RB(12) * PCOR
C
977 PR = RKLOW(2) * CTB(47) / RF(47)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
979 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
FCENT = 4.38D-1*EXP(-T/9.1D1) + 5.62D-1*EXP(-T/5.836D3)
981 *
+ EXP(-8.552D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
983 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
985 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG
987 PCOR = FC * PCOR
RF(47) = RF(47) * PCOR
989 RB(47) = RB(47) * PCOR
C

```

```

991 PR = RKLOW(3) * CTB(49) / RF(49)
992 PCOR = PR / (1.0 + PR)
993 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
994 FCENT = 2.17D-1*EXP(-T/7.4D1) + 7.83D-1*EXP(-T/2.941D3)
995 * + EXP(-6.964D3/T)
996 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
997 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
998 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
999 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1000 FC = 10.0**FLOG
1001 PCOR = FC * PCOR
1002 RF(49) = RF(49) * PCOR
1003 RB(49) = RB(49) * PCOR
C
1005 PR = RKLOW(4) * CTB(51) / RF(51)
1006 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1007 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1008 FCENT = 2.176D-1*EXP(-T/2.71D2) + 7.824D-1*EXP(-T/2.755D3)
1009 * + EXP(-6.57D3/T)
1010 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1011 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1012 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1013 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1014 FC = 10.0**FLOG
1015 PCOR = FC * PCOR
1016 RF(51) = RF(51) * PCOR
1017 RB(51) = RB(51) * PCOR
C
1019 PR = RKLOW(5) * CTB(53) / RF(53)
1020 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1021 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1022 FCENT = 2.813D-1*EXP(-T/1.03D2) + 7.187D-1*EXP(-T/1.291D3)
1023 * + EXP(-4.16D3/T)
1024 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1025 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1026 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1027 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1028 FC = 10.0**FLOG
1029 PCOR = FC * PCOR
1030 RF(53) = RF(53) * PCOR
1031 RB(53) = RB(53) * PCOR
C
1033 PR = RKLOW(6) * CTB(54) / RF(54)
1034 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1035 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1036 FCENT = 2.42D-1*EXP(-T/9.4D1) + 7.58D-1*EXP(-T/1.555D3)
1037 * + EXP(-4.2D3/T)
1038 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1039 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1040 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1041 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1042 FC = 10.0**FLOG
1043 PCOR = FC * PCOR
1044 RF(54) = RF(54) * PCOR
1045 RB(54) = RB(54) * PCOR
C
1047 PR = RKLOW(7) * CTB(56) / RF(56)
1048 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1049 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1050 FCENT = 4.D-1*EXP(-T/1.D2) + 6.D-1*EXP(-T/9.D4)
1051 * + EXP(-1.D4/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))

```

```

1053 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1054 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1055 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1056 FC = 10.0**FLOG
1057 PCOR = FC * PCOR
1058 RF(56) = RF(56) * PCOR
1059 RB(56) = RB(56) * PCOR
C
1061 PR = RKLOW(8) * CTB(60) / RF(60)
1062 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1063 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1064 FCENT = 3.D-1*EXP(-T/1.D2) + 7.D-1*EXP(-T/9.D4)
1065 * + EXP(-1.D4/T)
1066 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1067 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1068 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1069 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1070 FC = 10.0**FLOG
1071 PCOR = FC * PCOR
1072 RF(60) = RF(60) * PCOR
1073 RB(60) = RB(60) * PCOR
C
1075 PR = RKLOW(9) * CTB(67) / RF(67)
1076 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1077 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1078 FCENT = 2.493D-1*EXP(-T/9.85D1) + 7.507D-1*EXP(-T/1.302D3)
1079 * + EXP(-4.167D3/T)
1080 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1081 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1082 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1083 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1084 FC = 10.0**FLOG
1085 PCOR = FC * PCOR
1086 RF(67) = RF(67) * PCOR
1087 RB(67) = RB(67) * PCOR
C
1089 PR = RKLOW(10) * CTB(68) / RF(68)
1090 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1091 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1092 FCENT = 2.18D-1*EXP(-T/2.075D2) + 7.82D-1*EXP(-T/2.663D3)
1093 * + EXP(-6.095D3/T)
1094 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1095 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1096 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1097 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1098 FC = 10.0**FLOG
1099 PCOR = FC * PCOR
1100 RF(68) = RF(68) * PCOR
1101 RB(68) = RB(68) * PCOR
C
1103 PR = RKLOW(11) * CTB(70) / RF(70)
1104 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1105 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1106 FCENT = 2.47D-2*EXP(-T/2.1D2) + 9.753D-1*EXP(-T/9.84D2)
1107 * + EXP(-4.374D3/T)
1108 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1109 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1110 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1111 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1112 FC = 10.0**FLOG
1113 PCOR = FC * PCOR
1114 RF(70) = RF(70) * PCOR

```

```

1115 RB(70) = RB(70) * PCOR
C
1117 PR = RKLOW(12) * CTB(72) / RF(72)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1119 PRLOG = LOG10(MAX(PR, SMALL))
FCENT = 1.578D-1*EXP(-T/1.25D2) + 8.422D-1*EXP(-T/2.219D3)
1121 * + EXP(-6.882D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT, SMALL))
1123 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1125 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0*FLOG
1127 PCOR = FC * PCOR
RF(72) = RF(72) * PCOR
1129 RB(72) = RB(72) * PCOR
C
1131 PR = RKLOW(13) * CTB(78) / RF(78)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1133 PRLOG = LOG10(MAX(PR, SMALL))
FCENT = 6.8D-2*EXP(-T/1.97D2) + 9.32D-1*EXP(-T/1.54D3)
1135 * + EXP(-1.03D4/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT, SMALL))
1137 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1139 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0*FLOG
1141 PCOR = FC * PCOR
RF(78) = RF(78) * PCOR
1143 RB(78) = RB(78) * PCOR
C
1145 PR = RKLOW(14) * CTB(80) / RF(80)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1147 PRLOG = LOG10(MAX(PR, SMALL))
FCENT = 2.654D-1*EXP(-T/9.4D1) + 7.346D-1*EXP(-T/1.756D3)
1149 * + EXP(-5.182D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT, SMALL))
1151 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1153 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0*FLOG
1155 PCOR = FC * PCOR
RF(80) = RF(80) * PCOR
1157 RB(80) = RB(80) * PCOR
C
1159 PR = RKLOW(15) * CTB(90) / RF(90)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1161 PRLOG = LOG10(MAX(PR, SMALL))
FCENT = 5.88D-1*EXP(-T/1.95D2) + 4.12D-1*EXP(-T/5.9D3)
1163 * + EXP(-6.394D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT, SMALL))
1165 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1167 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0*FLOG
1169 PCOR = FC * PCOR
RF(90) = RF(90) * PCOR
1171 RB(90) = RB(90) * PCOR
C
1173 PR = RKLOW(16) * CTB(122) / RF(122)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1175 PRLOG = LOG10(MAX(PR, SMALL))
FCENT = 4.243D-1*EXP(-T/2.37D2) + 5.757D-1*EXP(-T/1.652D3)

```

```

1177 *      + EXP(-5.069D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1179 XN      = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1181 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG
1183 PCOR = FC * PCOR
RF(122) = RF(122) * PCOR
1185 RB(122) = RB(122) * PCOR

C
1187 PR = RKLOW(17) * CTB(131) / RF(131)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1189 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
FCENT = 4.093D-1*EXP(-T/2.75D2) + 5.907D-1*EXP(-T/1.226D3)
1191 *      + EXP(-5.185D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1193 XN      = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1195 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG
1197 PCOR = FC * PCOR
RF(131) = RF(131) * PCOR
1199 RB(131) = RB(131) * PCOR

C
1201 PR = RKLOW(18) * CTB(137) / RF(137)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1203 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
FCENT = 3.973D-1*EXP(-T/2.08D2) + 6.027D-1*EXP(-T/3.922D3)
1205 *      + EXP(-1.018D4/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1207 XN      = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1209 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG
1211 PCOR = FC * PCOR
RF(137) = RF(137) * PCOR
1213 RB(137) = RB(137) * PCOR

C
1215 PR = RKLOW(19) * CTB(148) / RF(148)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1217 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
FCENT = 3.81D-1*EXP(-T/7.32D1) + 6.19D-1*EXP(-T/1.18D3)
1219 *      + EXP(-9.999D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1221 XN      = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1223 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG
1225 PCOR = FC * PCOR
RF(148) = RF(148) * PCOR
1227 RB(148) = RB(148) * PCOR

C
1229 PR = RKLOW(20) * CTB(162) / RF(162)
PCOR = PR / (1.0 + PR)
1231 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
FCENT = 2.655D-1*EXP(-T/1.8D2) + 7.345D-1*EXP(-T/1.035D3)
1233 *      + EXP(-5.417D3/T)
FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1235 XN      = 0.75 - 1.27*FCLOG
CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1237 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
FC = 10.0**FLOG

```

```

1239 PCOR = FC * PCOR
1240 RF(162) = RF(162) * PCOR
1241 RB(162) = RB(162) * PCOR
C
1243 PR = RKLOW(21) * CTB(170) / RF(170)
1244 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1245 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1246 FCENT = 4.22D-1*EXP(-T/1.22D2) + 5.78D-1*EXP(-T/2.535D3)
1247 * + EXP(-9.365D3/T)
1248 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1249 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1250 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1251 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1252 FC = 10.0*FLOG
1253 PCOR = FC * PCOR
1254 RF(170) = RF(170) * PCOR
1255 RB(170) = RB(170) * PCOR
C
1257 PR = RKLOW(22) * CTB(177) / RF(177)
1258 PCOR = PR / (1.0 + PR)
1259 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
1260 FCENT = 5.35D-1*EXP(-T/2.01D2) + 4.65D-1*EXP(-T/1.773D3)
1261 * + EXP(-5.333D3/T)
1262 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
1263 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
1264 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
1265 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
1266 FC = 10.0*FLOG
1267 PCOR = FC * PCOR
1268 RF(177) = RF(177) * PCOR
1269 RB(177) = RB(177) * PCOR
C
1271 RF(1) = RF(1)*CTB(1)*C(3)*C(3)
1272 RF(2) = RF(2)*CTB(2)*C(3)*C(2)
1273 RF(3) = RF(3)*C(3)*C(1)
1274 RF(4) = RF(4)*C(3)*C(7)
1275 RF(5) = RF(5)*C(3)*C(8)
1276 RF(6) = RF(6)*C(3)
1277 RF(7) = RF(7)*C(3)
1278 RF(8) = RF(8)*C(3)
1279 RF(9) = RF(9)*C(3)
1280 RF(10) = RF(10)*C(3)*C(9)
1281 RF(11) = RF(11)*C(3)*C(10)
1282 RF(12) = RF(12)*C(3)*C(11)
1283 RF(13) = RF(13)*C(3)
1284 RF(14) = RF(14)*C(3)
1285 RF(15) = RF(15)*C(3)*C(13)
1286 RF(16) = RF(16)*C(3)
1287 RF(17) = RF(17)*C(3)
1288 RF(18) = RF(18)*C(3)*C(14)
1289 RF(19) = RF(19)*C(3)*C(14)
1290 RF(20) = RF(20)*C(3)*C(15)
1291 RF(21) = RF(21)*C(3)*C(15)
1292 RF(22) = RF(22)*C(3)
1293 RF(23) = RF(23)*C(3)*C(16)
1294 RF(24) = RF(24)*C(3)
1295 RF(25) = RF(25)*C(3)*C(17)
1296 RF(26) = RF(26)*C(3)
1297 RF(27) = RF(27)*C(3)*C(18)
1298 RF(28) = RF(28)*C(3)*C(18)
1299 RF(29) = RF(29)*C(4)*C(11)
RF(30) = RF(30)*C(4)*C(13)

```


1301 RF(31) = RF(31)*CTB(31)*C(2)*C(4)
 RF(32) = RF(32)*C(2)*C(4)*C(4)
 1303 RF(33) = RF(33)*C(2)*C(4)*C(6)
 RF(34) = RF(34)*C(2)*C(4)*C(19)
 1305 RF(35) = RF(35)*C(2)*C(4)
 RF(36) = RF(36)*CTB(36)*C(2)*C(2)
 1307 RF(37) = RF(37)*C(2)*C(2)*C(1)
 RF(38) = RF(38)*C(2)*C(2)*C(6)
 1309 RF(39) = RF(39)*C(2)*C(2)*C(12)
 RF(40) = RF(40)*CTB(40)*C(2)*C(5)
 1311 RF(41) = RF(41)*C(2)*C(7)
 RF(42) = RF(42)*C(2)*C(7)
 1313 RF(43) = RF(43)*C(2)*C(7)
 RF(44) = RF(44)*C(2)*C(8)
 1315 RF(45) = RF(45)*C(2)*C(8)
 RF(46) = RF(46)*C(2)
 1317 RF(47) = RF(47)*C(2)
 RF(48) = RF(48)*C(2)
 1319 RF(49) = RF(49)*C(2)*C(9)
 RF(50) = RF(50)*C(2)*C(10)
 1321 RF(51) = RF(51)*C(2)
 RF(52) = RF(52)*C(2)
 1323 RF(53) = RF(53)*C(2)*C(13)
 RF(54) = RF(54)*C(2)*C(13)
 1325 RF(55) = RF(55)*C(2)*C(13)
 RF(56) = RF(56)*C(2)
 1327 RF(57) = RF(57)*C(2)
 RF(58) = RF(58)*C(2)
 1329 RF(59) = RF(59)*C(2)
 RF(60) = RF(60)*C(2)
 1331 RF(61) = RF(61)*C(2)
 RF(62) = RF(62)*C(2)
 1333 RF(63) = RF(63)*C(2)
 RF(64) = RF(64)*C(2)
 1335 RF(65) = RF(65)*C(2)*C(14)
 RF(66) = RF(66)*C(2)*C(14)
 1337 RF(67) = RF(67)*C(2)*C(15)
 RF(68) = RF(68)*C(2)
 1339 RF(69) = RF(69)*C(2)
 RF(70) = RF(70)*C(2)*C(16)
 1341 RF(71) = RF(71)*C(2)*C(16)
 RF(72) = RF(72)*C(2)
 1343 RF(73) = RF(73)*C(2)
 RF(74) = RF(74)*C(2)*C(17)
 1345 RF(75) = RF(75)*C(2)
 RF(76) = RF(76)*C(2)*C(18)
 1347 RF(77) = RF(77)*C(2)*C(18)
 RF(78) = RF(78)*C(1)*C(11)
 1349 RF(79) = RF(79)*C(5)*C(1)
 RF(80) = RF(80)*C(5)*C(5)
 1351 RF(81) = RF(81)*C(5)*C(5)
 RF(82) = RF(82)*C(5)*C(7)
 1353 RF(83) = RF(83)*C(5)*C(8)
 RF(84) = RF(84)*C(5)*C(8)
 1355 RF(85) = RF(85)*C(5)
 RF(86) = RF(86)*C(5)
 1357 RF(87) = RF(87)*C(5)
 RF(88) = RF(88)*C(5)
 1359 RF(89) = RF(89)*C(5)
 RF(90) = RF(90)*C(5)*C(9)
 1361 RF(91) = RF(91)*C(5)*C(9)
 RF(92) = RF(92)*C(5)*C(9)

1363 RF(93) = RF(93)*C(5)*C(10)
 RF(94) = RF(94)*C(5)*C(11)
 1365 RF(95) = RF(95)*C(5)
 RF(96) = RF(96)*C(5)*C(13)
 1367 RF(97) = RF(97)*C(5)
 RF(98) = RF(98)*C(5)
 1369 RF(99) = RF(99)*C(5)*C(14)
 RF(100) = RF(100)*C(5)*C(14)
 1371 RF(101) = RF(101)*C(5)*C(15)
 RF(102) = RF(102)*C(5)*C(15)
 1373 RF(103) = RF(103)*C(5)
 RF(104) = RF(104)*C(5)*C(16)
 1375 RF(105) = RF(105)*C(5)*C(17)
 RF(106) = RF(106)*C(5)*C(18)
 1377 RF(107) = RF(107)*C(7)*C(7)
 RF(108) = RF(108)*C(7)*C(7)
 1379 RF(109) = RF(109)*C(7)
 RF(110) = RF(110)*C(7)*C(9)
 1381 RF(111) = RF(111)*C(7)*C(9)
 RF(112) = RF(112)*C(7)*C(11)
 1383 RF(113) = RF(113)*C(7)*C(13)
 RF(114) = RF(114)*C(4)
 1385 RF(115) = RF(115)*C(9)
 RF(116) = RF(116)*C(4)
 1387 RF(117) = RF(117)*C(1)
 RF(118) = RF(118)*C(6)
 1389 RF(120) = RF(120)*C(9)
 RF(121) = RF(121)*C(10)
 1391 RF(122) = RF(122)*C(11)
 RF(123) = RF(123)*C(12)
 1393 RF(124) = RF(124)*C(13)
 RF(126) = RF(126)*C(4)
 1395 RF(127) = RF(127)*C(1)
 RF(129) = RF(129)*C(9)
 1397 RF(130) = RF(130)*C(10)
 RF(131) = RF(131)*C(11)
 1399 RF(133) = RF(133)*C(19)
 RF(134) = RF(134)*C(4)
 1401 RF(135) = RF(135)*C(4)
 RF(136) = RF(136)*C(1)
 1403 RF(137) = RF(137)*C(6)
 RF(138) = RF(138)*C(6)
 1405 RF(139) = RF(139)*C(9)
 RF(140) = RF(140)*C(10)
 1407 RF(141) = RF(141)*C(11)
 RF(142) = RF(142)*C(12)
 1409 RF(143) = RF(143)*C(12)
 RF(144) = RF(144)*C(17)
 1411 RF(145) = RF(145)*C(9)*C(4)
 RF(146) = RF(146)*C(9)*C(4)
 1413 RF(147) = RF(147)*C(9)*C(8)
 RF(148) = RF(148)*C(9)*C(9)
 1415 RF(149) = RF(149)*C(9)*C(9)
 RF(150) = RF(150)*C(9)
 1417 RF(151) = RF(151)*C(9)*C(13)
 RF(152) = RF(152)*C(9)*C(14)
 1419 RF(153) = RF(153)*C(9)*C(14)
 RF(154) = RF(154)*C(9)*C(16)
 1421 RF(155) = RF(155)*C(9)*C(17)
 RF(156) = RF(156)*C(6)
 1423 RF(157) = RF(157)*CTB(157)
 RF(158) = RF(158)*C(4)

1425 RF(159) = RF(159)*C(4)
 RF(160) = RF(160)*C(4)
 1427 RF(161) = RF(161)*C(4)
 RF(162) = RF(162)*C(16)
 1429 RF(163) = RF(163)*C(4)
 RF(164) = RF(164)*C(4)
 1431 RF(166) = RF(166)*C(3)*C(9)
 RF(167) = RF(167)*C(3)*C(16)
 1433 RF(168) = RF(168)*C(5)*C(7)
 RF(169) = RF(169)*C(5)*C(9)
 1435 RF(170) = RF(170)*C(1)
 RF(171) = RF(171)*C(4)
 1437 RF(172) = RF(172)*C(4)
 RF(174) = RF(174)*C(6)
 1439 RF(175) = RF(175)*C(4)
 RF(176) = RF(176)*C(4)
 1441 RF(177) = RF(177)*C(2)*C(18)
 RF(178) = RF(178)*C(3)
 1443 RF(179) = RF(179)*C(4)
 RF(180) = RF(180)*C(4)
 1445 RF(181) = RF(181)*C(2)
 RF(182) = RF(182)*C(2)
 1447 RF(183) = RF(183)*C(5)
 RF(184) = RF(184)*C(5)
 1449 RB(1) = RB(1)*CTB(1)*C(4)
 RB(2) = RB(2)*CTB(2)*C(5)
 1451 RB(3) = RB(3)*C(2)*C(5)
 RB(4) = RB(4)*C(5)*C(4)
 1453 RB(5) = RB(5)*C(5)*C(7)
 RB(6) = RB(6)*C(2)*C(11)
 1455 RB(7) = RB(7)*C(2)
 RB(8) = RB(8)*C(1)*C(11)
 1457 RB(9) = RB(9)*C(2)
 RB(10) = RB(10)*C(2)*C(13)
 1459 RB(11) = RB(11)*C(5)*C(9)
 RB(12) = RB(12)*C(12)
 1461 RB(13) = RB(13)*C(5)*C(11)
 RB(14) = RB(14)*C(2)*C(12)
 1463 RB(15) = RB(15)*C(5)
 RB(16) = RB(16)*C(5)*C(13)
 1465 RB(17) = RB(17)*C(5)*C(13)
 RB(18) = RB(18)*C(5)
 1467 RB(19) = RB(19)*C(5)
 RB(20) = RB(20)*C(2)
 1469 RB(21) = RB(21)*C(11)
 RB(22) = RB(22)*C(2)*C(18)
 1471 RB(23) = RB(23)*C(9)
 RB(24) = RB(24)*C(9)*C(13)
 1473 RB(25) = RB(25)*C(5)
 RB(26) = RB(26)*C(2)*C(11)*C(11)
 1475 RB(27) = RB(27)*C(5)
 RB(28) = RB(28)*C(12)
 1477 RB(29) = RB(29)*C(3)*C(12)
 RB(30) = RB(30)*C(7)
 1479 RB(31) = RB(31)*CTB(31)*C(7)
 RB(32) = RB(32)*C(7)*C(4)
 1481 RB(33) = RB(33)*C(7)*C(6)
 RB(34) = RB(34)*C(7)*C(19)
 1483 RB(35) = RB(35)*C(3)*C(5)
 RB(36) = RB(36)*CTB(36)*C(1)
 1485 RB(37) = RB(37)*C(1)*C(1)
 RB(38) = RB(38)*C(1)*C(6)

1487 RB(39) = RB(39)*C(1)*C(12)
 RB(40) = RB(40)*CTB(40)*C(6)
 1489 RB(41) = RB(41)*C(3)*C(6)
 RB(42) = RB(42)*C(4)*C(1)
 1491 RB(43) = RB(43)*C(5)*C(5)
 RB(44) = RB(44)*C(7)*C(1)
 1493 RB(45) = RB(45)*C(5)*C(6)
 RB(46) = RB(46)*C(1)
 1495 RB(47) = RB(47)*C(9)
 RB(48) = RB(48)*C(1)
 1497 RB(49) = RB(49)*C(10)
 RB(50) = RB(50)*C(9)*C(1)
 1499 RB(51) = RB(51)*C(13)
 RB(52) = RB(52)*C(1)*C(11)
 1501 RB(55) = RB(55)*C(1)
 RB(56) = RB(56)*C(14)
 1503 RB(57) = RB(57)*C(1)*C(13)
 RB(58) = RB(58)*C(5)*C(9)
 1505 RB(59) = RB(59)*C(6)
 RB(60) = RB(60)*C(14)
 1507 RB(61) = RB(61)*C(2)
 RB(62) = RB(62)*C(1)*C(13)
 1509 RB(63) = RB(63)*C(5)*C(9)
 RB(64) = RB(64)*C(6)
 1511 RB(65) = RB(65)*C(1)
 RB(66) = RB(66)*C(1)
 1513 RB(68) = RB(68)*C(16)
 RB(69) = RB(69)*C(1)*C(15)
 1515 RB(71) = RB(71)*C(1)
 RB(72) = RB(72)*C(17)
 1517 RB(73) = RB(73)*C(1)*C(16)
 RB(74) = RB(74)*C(1)
 1519 RB(75) = RB(75)*C(11)
 RB(76) = RB(76)*C(1)
 1521 RB(77) = RB(77)*C(9)*C(11)
 RB(78) = RB(78)*C(13)
 1523 RB(79) = RB(79)*C(2)*C(6)
 RB(80) = RB(80)*C(8)
 1525 RB(81) = RB(81)*C(3)*C(6)
 RB(82) = RB(82)*C(4)*C(6)
 1527 RB(83) = RB(83)*C(7)*C(6)
 RB(84) = RB(84)*C(7)*C(6)
 1529 RB(85) = RB(85)*C(2)*C(11)
 RB(86) = RB(86)*C(2)
 1531 RB(87) = RB(87)*C(2)*C(13)
 RB(88) = RB(88)*C(6)
 1533 RB(89) = RB(89)*C(2)*C(13)
 RB(90) = RB(90)*C(14)
 1535 RB(91) = RB(91)*C(6)
 RB(92) = RB(92)*C(6)
 1537 RB(93) = RB(93)*C(9)*C(6)
 RB(94) = RB(94)*C(2)*C(12)
 1539 RB(95) = RB(95)*C(6)*C(11)
 RB(96) = RB(96)*C(6)
 1541 RB(97) = RB(97)*C(6)*C(13)
 RB(98) = RB(98)*C(6)*C(13)
 1543 RB(99) = RB(99)*C(6)
 RB(100) = RB(100)*C(6)
 1545 RB(101) = RB(101)*C(2)*C(18)
 RB(102) = RB(102)*C(9)*C(11)
 1547 RB(103) = RB(103)*C(6)*C(15)
 RB(104) = RB(104)*C(6)

1549 RB(105) = RB(105)*C(6)
RB(106) = RB(106)*C(6)
1551 RB(107) = RB(107)*C(4)*C(8)
RB(108) = RB(108)*C(4)*C(8)
1553 RB(109) = RB(109)*C(5)*C(13)
RB(110) = RB(110)*C(4)*C(10)
1555 RB(111) = RB(111)*C(5)
RB(112) = RB(112)*C(5)*C(12)
1557 RB(113) = RB(113)*C(8)
RB(114) = RB(114)*C(3)*C(11)
1559 RB(115) = RB(115)*C(2)*C(15)
RB(116) = RB(116)*C(3)
1561 RB(117) = RB(117)*C(2)
RB(118) = RB(118)*C(2)*C(13)
1563 RB(119) = RB(119)*C(2)*C(15)
RB(120) = RB(120)*C(2)
1565 RB(121) = RB(121)*C(2)*C(16)
RB(123) = RB(123)*C(11)
1567 RB(124) = RB(124)*C(2)*C(18)
RB(125) = RB(125)*C(11)*C(15)
1569 RB(127) = RB(127)*C(2)*C(9)
RB(128) = RB(128)*C(1)*C(15)
1571 RB(129) = RB(129)*C(2)*C(16)
RB(130) = RB(130)*C(9)*C(9)
1573 RB(131) = RB(131)*C(18)
RB(132) = RB(132)*C(11)
1575 RB(133) = RB(133)*C(19)
RB(134) = RB(134)*C(2)*C(5)*C(11)
1577 RB(135) = RB(135)*C(11)*C(6)
RB(136) = RB(136)*C(9)*C(2)
1579 RB(137) = RB(137)*C(14)
RB(138) = RB(138)*C(6)
1581 RB(139) = RB(139)*C(2)*C(16)
RB(140) = RB(140)*C(9)*C(9)
1583 RB(141) = RB(141)*C(11)
RB(142) = RB(142)*C(12)
1585 RB(143) = RB(143)*C(11)*C(13)
RB(144) = RB(144)*C(9)
1587 RB(145) = RB(145)*C(3)
RB(146) = RB(146)*C(5)*C(13)
1589 RB(147) = RB(147)*C(7)*C(10)
RB(148) = RB(148)*C(17)
1591 RB(149) = RB(149)*C(2)
RB(150) = RB(150)*C(10)*C(11)
1593 RB(151) = RB(151)*C(10)
RB(152) = RB(152)*C(10)
1595 RB(153) = RB(153)*C(10)
RB(154) = RB(154)*C(10)
1597 RB(155) = RB(155)*C(10)
RB(156) = RB(156)*C(2)*C(11)*C(6)
1599 RB(157) = RB(157)*CTB(157)*C(2)*C(11)
RB(158) = RB(158)*C(7)*C(11)
1601 RB(159) = RB(159)*C(7)*C(13)
RB(160) = RB(160)*C(7)*C(13)
1603 RB(161) = RB(161)*C(13)
RB(162) = RB(162)*C(1)*C(15)
1605 RB(163) = RB(163)*C(7)*C(16)
RB(164) = RB(164)*C(5)*C(11)*C(11)
1607 RB(165) = RB(165)*C(11)*C(11)*C(15)
RB(167) = RB(167)*C(2)
1609 RB(168) = RB(168)*C(4)*C(6)
RB(170) = RB(170)*C(9)

```

1611      RB(172) = RB(172)*C(3)*C(13)
1613      RB(175) = RB(175)*C(3)
1613      RB(176) = RB(176)*C(7)*C(15)
1615      RB(181) = RB(181)*C(9)
1615      RB(182) = RB(182)*C(18)*C(1)
1617      RB(183) = RB(183)*C(6)*C(18)
1617 C
1619 C
1619 C
1621 C
1621      SUBROUTINE QSSA(RF, RB, XQ)
1623      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
1625      PARAMETER (SMALL = 1.D-200)
1625      DIMENSION RF(*), RB(*), XQ(*)
1627 C
1627      RF(119) = 0.D0
1629      RF(125) = 0.D0
1629      RF(128) = 0.D0
1631      RF(132) = 0.D0
1631      RF(165) = 0.D0
1633      RF(173) = 0.D0
1633      RB(180) = 0.D0
1635      RB(184) = 0.D0
1635 C
1637 C
1637      DEN = +RF( 85) +RF(114) +RF(115) +RB( 46)
1639      A1_0 = ( +RB( 85) +RB(114) +RB(115) )/MAX(DEN, SMALL)
1639      A1_2 = ( +RF( 46) )/MAX(DEN, SMALL)
1641 C
1641      CH
1641      DEN = +RF( 6) +RF( 46) +RF( 86) +RF(116) +RF(117)
1643      * +RF(118) +RF(120) +RF(121) +RF(122) +RF(123) +RF(124)
1643      * +RF(170) +RB( 48) +RB( 88)
1645      A2_0 = ( +RB( 6) +RB(118) +RB(119) +RB(121) +RB(124)
1645      * +RB(125) +RB(170) )/MAX(DEN, SMALL)
1647      A2_1 = ( +RB( 46) )/MAX(DEN, SMALL)
1647      A2_3 = ( +RF( 88) +RB(117) )/MAX(DEN, SMALL)
1649      A2_4 = ( +RF( 48) )/MAX(DEN, SMALL)
1649      A2_5 = ( +RB( 86) +RB(116) +RB(123) )/MAX(DEN, SMALL)
1651      A2_8 = ( +RB(120) )/MAX(DEN, SMALL)
1651      A2_10 = ( +RB(122) )/MAX(DEN, SMALL)
1653 C
1653      CH2
1653      DEN = +RF( 7) +RF( 47) +RF( 87) +RF( 88) +RF(109)
1655      * +RF(126) +RF(127) +RF(129) +RF(130) +RF(131) +RF(171)
1655      * +RF(172) +RB( 21) +RB( 28) +RB( 91) +RB(117) +RB(133)
1657      * +RB(138) +RB(141) +RB(142) +RB(178)
1657      A3_0 = ( +RF( 21) +RF( 28) +RB( 47) +RB( 87) +RF( 91)
1659      * +RB(109) +RB(119) +RB(126) +RB(127) +RB(128) +RB(128)
1659      * +RB(129) +RB(130) +RB(131) +RB(171) +RB(172) +RB(173)
1661      * +RB(173) )/MAX(DEN, SMALL)
1661      A3_2 = ( +RB( 88) +RF(117) )/MAX(DEN, SMALL)
1663      A3_4 = ( +RF(133) +RF(138) +RF(141) +RF(142) )/MAX(DEN, SMALL)
1663      A3_5 = ( +RB( 7) )/MAX(DEN, SMALL)
1665      A3_8 = ( +RB(132) )/MAX(DEN, SMALL)
1665      A3_11 = ( +RF(178) )/MAX(DEN, SMALL)
1667 C
1667      CH2(S)
1667      DEN = +RF( 8) +RF( 9) +RF( 48) +RF( 89) +RF(133)
1669      * +RF(134) +RF(135) +RF(136) +RF(137) +RF(138) +RF(139)
1669      * +RF(140) +RF(141) +RF(142) +RF(143) +RF(144) +RF(174)
1671      * +RB( 59) +RB( 64) +RB( 75) +RB( 92)
1671      A4_0 = ( +RB( 8) +RB( 89) +RF( 92) +RB(134) +RB(135)
1671      * +RB(136) +RB(137) +RB(139) +RB(140) +RB(143) +RB(174) )

```

1673 * /MAX(DEN, SMALL)
 A4_2 = (+RB(48))/MAX(DEN, SMALL)
 1675 A4_3 = (+RB(133) +RB(138) +RB(141) +RB(142))/MAX(DEN, SMALL)
 A4_5 = (+RB(9))/MAX(DEN, SMALL)
 1677 A4_6 = (+RF(59))/MAX(DEN, SMALL)
 A4_7 = (+RF(64))/MAX(DEN, SMALL)
 1679 A4_9 = (+RB(144))/MAX(DEN, SMALL)
 A4_10 = (+RF(75))/MAX(DEN, SMALL)
 1681 C HCO
 DEN = +RF(13) +RF(14) +RF(51) +RF(52) +RF(95)
 1683 * +RF(150) +RF(156) +RF(157) +RF(158) +RB(7) +RB(9)
 * +RB(15) +RB(23) +RB(30) +RB(55) +RB(86) +RB(96)
 1685 * +RB(113) +RB(116) +RB(123) +RB(151) +RB(161) +RB(181)
 A5_0 = (+RB(13) +RB(14) +RF(15) +RF(23) +RF(30)
 1687 * +RB(51) +RB(52) +RF(55) +RB(95) +RF(96) +RF(113)
 * +RB(150) +RF(151) +RB(156) +RB(157) +RB(158))/MAX(DEN, SMALL)
 1689 A5_2 = (+RF(86) +RF(116) +RF(123))/MAX(DEN, SMALL)
 A5_3 = (+RF(7))/MAX(DEN, SMALL)
 1691 A5_4 = (+RF(9))/MAX(DEN, SMALL)
 A5_8 = (+RF(161))/MAX(DEN, SMALL)
 1693 A5_11 = (+RF(180) +RF(180) +RF(181) +RF(184))/MAX(DEN, SMALL)
 C CH2OH
 1695 DEN = +RF(16) +RF(56) +RF(57) +RF(58) +RF(59)
 * +RF(97) +RF(159) +RB(18) +RB(53) +RB(61) +RB(65)
 1697 * +RB(99) +RB(152)
 A6_0 = (+RB(16) +RF(18) +RF(53) +RB(56) +RB(57)
 1699 * +RB(58) +RF(65) +RB(97) +RF(99) +RF(152) +RB(159))
 * /MAX(DEN, SMALL)
 1701 A6_4 = (+RB(59))/MAX(DEN, SMALL)
 A6_7 = (+RF(61))/MAX(DEN, SMALL)
 1703 A6_11 = (+RF(184))/MAX(DEN, SMALL)
 C CH3O
 1705 DEN = +RF(17) +RF(60) +RF(61) +RF(62) +RF(63)
 * +RF(64) +RF(98) +RF(160) +RB(19) +RB(54) +RB(66)
 1707 * +RB(100) +RB(111) +RB(145) +RB(153)
 A7_0 = (+RB(17) +RF(19) +RF(54) +RB(60) +RB(62)
 1709 * +RB(63) +RF(66) +RB(98) +RF(100) +RF(111) +RF(145)
 * +RF(153) +RB(160))/MAX(DEN, SMALL)
 1711 A7_4 = (+RB(64))/MAX(DEN, SMALL)
 A7_6 = (+RB(61))/MAX(DEN, SMALL)
 1713 C C2H3
 DEN = +RF(22) +RF(68) +RF(69) +RF(103) +RF(161)
 1715 * +RF(175) +RF(176) +RB(67) +RB(71) +RB(104) +RB(120)
 * +RB(132) +RB(154)
 1717 A8_0 = (+RB(22) +RF(67) +RB(68) +RB(69) +RF(71)
 * +RB(103) +RF(104) +RF(154) +RB(176))/MAX(DEN, SMALL)
 1719 A8_2 = (+RF(120))/MAX(DEN, SMALL)
 A8_5 = (+RB(161))/MAX(DEN, SMALL)
 1721 A8_11 = (+RB(175))/MAX(DEN, SMALL)
 C C2H5
 1723 DEN = +RF(24) +RF(72) +RF(73) +RF(163) +RB(25)
 * +RB(70) +RB(74) +RB(105) +RB(144) +RB(149) +RB(155)
 1725 A9_0 = (+RB(24) +RF(25) +RF(70) +RB(72) +RB(73)
 * +RF(74) +RF(105) +RF(149) +RF(155) +RB(163))/MAX(DEN, SMALL)
 1727 A9_4 = (+RF(144))/MAX(DEN, SMALL)
 C HCCO
 1729 DEN = +RF(26) +RF(75) +RF(164) +RB(20) +RB(27)
 * +RB(76) +RB(106) +RB(122)
 1731 A10_0 = (+RF(20) +RB(26) +RF(27) +RF(76) +RF(106)
 * +RB(125) +RB(164) +RB(165) +RB(165))/MAX(DEN, SMALL)
 1733 A10_2 = (+RF(122))/MAX(DEN, SMALL)
 A10_4 = (+RB(75))/MAX(DEN, SMALL)

```

1735     A10_8 = ( +RB(132) )/MAX(DEN, SMALL)
C     CH2CHO
1737     DEN = +RF(178) +RF(179) +RF(180) +RF(181) +RF(182)
*     +RF(183) +RF(184) +RB(167) +RB(175) +RB(177)
1739     A11_0 = ( +RF(167) +RF(177) +RB(179) +RB(182) +RB(183) )
*     /MAX(DEN, SMALL)
1741     A11_5 = ( +RB(181) )/MAX(DEN, SMALL)
     A11_8 = ( +RF(175) )/MAX(DEN, SMALL)
1743 C
     A2_0 = A2_0 + A2_1*A1_0
1745     DEN = 1 -A2_1*A1_2
     A2_0 = A2_0/MAX(DEN, SMALL)
1747     A2_4 = A2_4/MAX(DEN, SMALL)
     A2_5 = A2_5/MAX(DEN, SMALL)
1749     A2_3 = A2_3/MAX(DEN, SMALL)
     A2_10 = A2_10/MAX(DEN, SMALL)
1751     A2_8 = A2_8/MAX(DEN, SMALL)
     A4_0 = A4_0 + A4_9*A9_0
1753     DEN = 1 -A4_9*A9_4
     A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
1755     A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
     A4_5 = A4_5/MAX(DEN, SMALL)
1757     A4_3 = A4_3/MAX(DEN, SMALL)
     A4_6 = A4_6/MAX(DEN, SMALL)
1759     A4_10 = A4_10/MAX(DEN, SMALL)
     A4_7 = A4_7/MAX(DEN, SMALL)
1761     A5_0 = A5_0 + A5_11*A11_0
     A5_8 = A5_8 + A5_11*A11_8
1763     DEN = 1 -A5_11*A11_5
     A5_0 = A5_0/MAX(DEN, SMALL)
1765     A5_4 = A5_4/MAX(DEN, SMALL)
     A5_2 = A5_2/MAX(DEN, SMALL)
1767     A5_3 = A5_3/MAX(DEN, SMALL)
     A5_8 = A5_8/MAX(DEN, SMALL)
1769     A3_0 = A3_0 + A3_11*A11_0
     A3_5 = A3_5 + A3_11*A11_5
1771     A3_8 = A3_8 + A3_11*A11_8
     A6_0 = A6_0 + A6_11*A11_0
1773     A6_5 = A6_11*A11_5
     A6_8 = A6_11*A11_8
1775     A8_0 = A8_0 + A8_11*A11_0
     A8_5 = A8_5 + A8_11*A11_5
1777     DEN = 1 -A8_11*A11_8
     A8_0 = A8_0/MAX(DEN, SMALL)
1779     A8_2 = A8_2/MAX(DEN, SMALL)
     A8_5 = A8_5/MAX(DEN, SMALL)
1781     A2_0 = A2_0 + A2_8*A8_0
     A2_5 = A2_5 + A2_8*A8_5
1783     DEN = 1 -A2_8*A8_2
     A2_0 = A2_0/MAX(DEN, SMALL)
1785     A2_4 = A2_4/MAX(DEN, SMALL)
     A2_5 = A2_5/MAX(DEN, SMALL)
1787     A2_3 = A2_3/MAX(DEN, SMALL)
     A2_10 = A2_10/MAX(DEN, SMALL)
1789     A5_0 = A5_0 + A5_8*A8_0
     A5_2 = A5_2 + A5_8*A8_2
1791     DEN = 1 -A5_8*A8_5
     A5_0 = A5_0/MAX(DEN, SMALL)
1793     A5_4 = A5_4/MAX(DEN, SMALL)
     A5_2 = A5_2/MAX(DEN, SMALL)
1795     A5_3 = A5_3/MAX(DEN, SMALL)
     A3_0 = A3_0 + A3_8*A8_0

```



```

1797 A3_2 = A3_2 + A3_8*A8_2
A3_5 = A3_5 + A3_8*A8_5
1799 A6_0 = A6_0 + A6_8*A8_0
A6_2 = A6_8*A8_2
1801 A6_5 = A6_5 + A6_8*A8_5
A10_0 = A10_0 + A10_8*A8_0
1803 A10_2 = A10_2 + A10_8*A8_2
A10_5 = A10_8*A8_5
1805 A4_0 = A4_0 + A4_7*A7_0
A4_6 = A4_6 + A4_7*A7_6
1807 DEN = 1 -A4_7*A7_4
A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
1809 A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
A4_5 = A4_5/MAX(DEN, SMALL)
1811 A4_3 = A4_3/MAX(DEN, SMALL)
A4_6 = A4_6/MAX(DEN, SMALL)
1813 A4_10 = A4_10/MAX(DEN, SMALL)
A6_0 = A6_0 + A6_7*A7_0
1815 A6_4 = A6_4 + A6_7*A7_4
DEN = 1 -A6_7*A7_6
1817 A6_0 = A6_0/MAX(DEN, SMALL)
A6_4 = A6_4/MAX(DEN, SMALL)
1819 A6_2 = A6_2/MAX(DEN, SMALL)
A6_5 = A6_5/MAX(DEN, SMALL)
1821 A4_0 = A4_0 + A4_10*A10_0
A4_2 = A4_2 + A4_10*A10_2
1823 A4_5 = A4_5 + A4_10*A10_5
DEN = 1 -A4_10*A10_4
1825 A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
1827 A4_5 = A4_5/MAX(DEN, SMALL)
A4_3 = A4_3/MAX(DEN, SMALL)
1829 A4_6 = A4_6/MAX(DEN, SMALL)
A2_0 = A2_0 + A2_10*A10_0
1831 A2_4 = A2_4 + A2_10*A10_4
A2_5 = A2_5 + A2_10*A10_5
1833 DEN = 1 -A2_10*A10_2
A2_0 = A2_0/MAX(DEN, SMALL)
1835 A2_4 = A2_4/MAX(DEN, SMALL)
A2_5 = A2_5/MAX(DEN, SMALL)
1837 A2_3 = A2_3/MAX(DEN, SMALL)
A4_0 = A4_0 + A4_6*A6_0
1839 A4_2 = A4_2 + A4_6*A6_2
A4_5 = A4_5 + A4_6*A6_5
1841 DEN = 1 -A4_6*A6_4
A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
1843 A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
A4_5 = A4_5/MAX(DEN, SMALL)
1845 A4_3 = A4_3/MAX(DEN, SMALL)
A4_0 = A4_0 + A4_3*A3_0
1847 A4_2 = A4_2 + A4_3*A3_2
A4_5 = A4_5 + A4_3*A3_5
1849 DEN = 1 -A4_3*A3_4
A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
1851 A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
A4_5 = A4_5/MAX(DEN, SMALL)
1853 A2_0 = A2_0 + A2_3*A3_0
A2_4 = A2_4 + A2_3*A3_4
1855 A2_5 = A2_5 + A2_3*A3_5
DEN = 1 -A2_3*A3_2
1857 A2_0 = A2_0/MAX(DEN, SMALL)
A2_4 = A2_4/MAX(DEN, SMALL)

```

```

1859 A2_5 = A2_5/MAX(DEN, SMALL)
A5_0 = A5_0 + A5_3*A3_0
1861 A5_4 = A5_4 + A5_3*A3_4
A5_2 = A5_2 + A5_3*A3_2
1863 DEN = 1 -A5_3*A3_5
A5_0 = A5_0/MAX(DEN, SMALL)
1865 A5_4 = A5_4/MAX(DEN, SMALL)
A5_2 = A5_2/MAX(DEN, SMALL)
1867 A4_0 = A4_0 + A4_5*A5_0
A4_2 = A4_2 + A4_5*A5_2
1869 DEN = 1 -A4_5*A5_4
A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
1871 A4_2 = A4_2/MAX(DEN, SMALL)
A2_0 = A2_0 + A2_5*A5_0
1873 A2_4 = A2_4 + A2_5*A5_4
DEN = 1 -A2_5*A5_2
1875 A2_0 = A2_0/MAX(DEN, SMALL)
A2_4 = A2_4/MAX(DEN, SMALL)
1877 A4_0 = A4_0 + A4_2*A2_0
DEN = 1 -A4_2*A2_4
1879 A4_0 = A4_0/MAX(DEN, SMALL)
XQ(4) = A4_0
1881 XQ(2) = A2_0 +A2_4*XQ(4)
XQ(5) = A5_0 +A5_4*XQ(4) +A5_2*XQ(2)
1883 XQ(3) = A3_0 +A3_4*XQ(4) +A3_2*XQ(2) +A3_5*XQ(5)
XQ(6) = A6_0 +A6_4*XQ(4) +A6_2*XQ(2) +A6_5*XQ(5)
1885 XQ(10) = A10_0 +A10_4*XQ(4) +A10_2*XQ(2) +A10_5*XQ(5)
XQ(7) = A7_0 +A7_4*XQ(4) +A7_6*XQ(6)
1887 XQ(8) = A8_0 +A8_2*XQ(2) +A8_5*XQ(5)
XQ(11) = A11_0 +A11_5*XQ(5) +A11_8*XQ(8)
1889 XQ(9) = A9_0 +A9_4*XQ(4)
XQ(1) = A1_0 +A1_2*XQ(2)
1891 C
RF( 6) = RF( 6)*XQ( 2)
1893 RF( 7) = RF( 7)*XQ( 3)
RB( 7) = RB( 7)*XQ( 5)
1895 RF( 8) = RF( 8)*XQ( 4)
RF( 9) = RF( 9)*XQ( 4)
1897 RB( 9) = RB( 9)*XQ( 5)
RF( 13) = RF( 13)*XQ( 5)
1899 RF( 14) = RF( 14)*XQ( 5)
RB( 15) = RB( 15)*XQ( 5)
1901 RF( 16) = RF( 16)*XQ( 6)
RF( 17) = RF( 17)*XQ( 7)
1903 RB( 18) = RB( 18)*XQ( 6)
RB( 19) = RB( 19)*XQ( 7)
1905 RB( 20) = RB( 20)*XQ(10)
RB( 21) = RB( 21)*XQ( 3)
1907 RF( 22) = RF( 22)*XQ( 8)
RB( 23) = RB( 23)*XQ( 5)
1909 RF( 24) = RF( 24)*XQ( 9)
RB( 25) = RB( 25)*XQ( 9)
1911 RF( 26) = RF( 26)*XQ(10)
RB( 27) = RB( 27)*XQ(10)
1913 RB( 28) = RB( 28)*XQ( 3)
RB( 30) = RB( 30)*XQ( 5)
1915 RF( 46) = RF( 46)*XQ( 2)
RB( 46) = RB( 46)*XQ( 1)
1917 RF( 47) = RF( 47)*XQ( 3)
RF( 48) = RF( 48)*XQ( 4)
1919 RB( 48) = RB( 48)*XQ( 2)
RF( 51) = RF( 51)*XQ( 5)

```

1921 RF(52) = RF(52)*XQ(5)
 RB(53) = RB(53)*XQ(6)
 1923 RB(54) = RB(54)*XQ(7)
 RB(55) = RB(55)*XQ(5)
 1925 RF(56) = RF(56)*XQ(6)
 RF(57) = RF(57)*XQ(6)
 1927 RF(58) = RF(58)*XQ(6)
 RF(59) = RF(59)*XQ(6)
 1929 RB(59) = RB(59)*XQ(4)
 RF(60) = RF(60)*XQ(7)
 1931 RF(61) = RF(61)*XQ(7)
 RB(61) = RB(61)*XQ(6)
 1933 RF(62) = RF(62)*XQ(7)
 RF(63) = RF(63)*XQ(7)
 1935 RF(64) = RF(64)*XQ(7)
 RB(64) = RB(64)*XQ(4)
 1937 RB(65) = RB(65)*XQ(6)
 RB(66) = RB(66)*XQ(7)
 1939 RB(67) = RB(67)*XQ(8)
 RF(68) = RF(68)*XQ(8)
 1941 RF(69) = RF(69)*XQ(8)
 RB(70) = RB(70)*XQ(9)
 1943 RB(71) = RB(71)*XQ(8)
 RF(72) = RF(72)*XQ(9)
 1945 RF(73) = RF(73)*XQ(9)
 RB(74) = RB(74)*XQ(9)
 1947 RF(75) = RF(75)*XQ(10)
 RB(75) = RB(75)*XQ(4)
 1949 RB(76) = RB(76)*XQ(10)
 RF(85) = RF(85)*XQ(1)
 1951 RF(86) = RF(86)*XQ(2)
 RB(86) = RB(86)*XQ(5)
 1953 RF(87) = RF(87)*XQ(3)
 RF(88) = RF(88)*XQ(3)
 1955 RB(88) = RB(88)*XQ(2)
 RF(89) = RF(89)*XQ(4)
 1957 RB(91) = RB(91)*XQ(3)
 RB(92) = RB(92)*XQ(4)
 1959 RF(95) = RF(95)*XQ(5)
 RB(96) = RB(96)*XQ(5)
 1961 RF(97) = RF(97)*XQ(6)
 RF(98) = RF(98)*XQ(7)
 1963 RB(99) = RB(99)*XQ(6)
 RB(100) = RB(100)*XQ(7)
 1965 RF(103) = RF(103)*XQ(8)
 RB(104) = RB(104)*XQ(8)
 1967 RB(105) = RB(105)*XQ(9)
 RB(106) = RB(106)*XQ(10)
 1969 RF(109) = RF(109)*XQ(3)
 RB(111) = RB(111)*XQ(7)
 1971 RB(113) = RB(113)*XQ(5)
 RF(114) = RF(114)*XQ(1)
 1973 RF(115) = RF(115)*XQ(1)
 RF(116) = RF(116)*XQ(2)
 1975 RB(116) = RB(116)*XQ(5)
 RF(117) = RF(117)*XQ(2)
 1977 RB(117) = RB(117)*XQ(3)
 RF(118) = RF(118)*XQ(2)
 1979 RF(120) = RF(120)*XQ(2)
 RB(120) = RB(120)*XQ(8)
 1981 RF(121) = RF(121)*XQ(2)
 RF(122) = RF(122)*XQ(2)

1983 RB(122) = RB(122)*XQ(10)
 RF(123) = RF(123)*XQ(2)
 1985 RB(123) = RB(123)*XQ(5)
 RF(124) = RF(124)*XQ(2)
 1987 RF(126) = RF(126)*XQ(3)
 RF(127) = RF(127)*XQ(3)
 1989 RF(129) = RF(129)*XQ(3)
 RF(130) = RF(130)*XQ(3)
 1991 RF(131) = RF(131)*XQ(3)
 RB(132) = RB(132)*XQ(8)
 1993 RF(133) = RF(133)*XQ(4)
 RB(133) = RB(133)*XQ(3)
 1995 RF(134) = RF(134)*XQ(4)
 RF(135) = RF(135)*XQ(4)
 1997 RF(136) = RF(136)*XQ(4)
 RF(137) = RF(137)*XQ(4)
 1999 RF(138) = RF(138)*XQ(4)
 RB(138) = RB(138)*XQ(3)
 2001 RF(139) = RF(139)*XQ(4)
 RF(140) = RF(140)*XQ(4)
 2003 RF(141) = RF(141)*XQ(4)
 RB(141) = RB(141)*XQ(3)
 2005 RF(142) = RF(142)*XQ(4)
 RB(142) = RB(142)*XQ(3)
 2007 RF(143) = RF(143)*XQ(4)
 RF(144) = RF(144)*XQ(4)
 2009 RB(144) = RB(144)*XQ(9)
 RB(145) = RB(145)*XQ(7)
 2011 RB(149) = RB(149)*XQ(9)
 RF(150) = RF(150)*XQ(5)
 2013 RB(151) = RB(151)*XQ(5)
 RB(152) = RB(152)*XQ(6)
 2015 RB(153) = RB(153)*XQ(7)
 RB(154) = RB(154)*XQ(8)
 2017 RB(155) = RB(155)*XQ(9)
 RF(156) = RF(156)*XQ(5)
 2019 RF(157) = RF(157)*XQ(5)
 RF(158) = RF(158)*XQ(5)
 2021 RF(159) = RF(159)*XQ(6)
 RF(160) = RF(160)*XQ(7)
 2023 RF(161) = RF(161)*XQ(8)
 RB(161) = RB(161)*XQ(5)
 2025 RF(163) = RF(163)*XQ(9)
 RF(164) = RF(164)*XQ(10)
 2027 RB(167) = RB(167)*XQ(11)
 RF(170) = RF(170)*XQ(2)
 2029 RF(171) = RF(171)*XQ(3)
 RF(172) = RF(172)*XQ(3)
 2031 RF(174) = RF(174)*XQ(4)
 RF(175) = RF(175)*XQ(8)
 2033 RB(175) = RB(175)*XQ(11)
 RF(176) = RF(176)*XQ(8)
 2035 RB(177) = RB(177)*XQ(11)
 RF(178) = RF(178)*XQ(11)
 2037 RB(178) = RB(178)*XQ(3)
 RF(179) = RF(179)*XQ(11)
 2039 RF(180) = RF(180)*XQ(11)
 RF(181) = RF(181)*XQ(11)
 2041 RB(181) = RB(181)*XQ(5)
 RF(182) = RF(182)*XQ(11)
 2043 RF(183) = RF(183)*XQ(11)
 RF(184) = RF(184)*XQ(11)

```

2045 C
      END
2047 C
      C
2049 C
      SUBROUTINE RDOT(RF, RB, WDOT)
2051 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
      DIMENSION RF(*), RB(*), WDOT(*), ROP(184)
2053 C
      DO I = 1, 184
2055     ROP(I) = RF(I) - RB(I)
      ENDDO
2057 C
      C
      H2
2059     WDOT( 1) =  -ROP( 3)  +ROP( 8)  +ROP( 36)  +ROP( 37)
      *           +ROP( 38)  +ROP( 39)  +ROP( 42)  +ROP( 44)
2061     *           +ROP( 46)  +ROP( 48)  +ROP( 50)  +ROP( 52)
      *           +ROP( 55)  +ROP( 57)  +ROP( 62)  +ROP( 65)
2063     *           +ROP( 66)  +ROP( 69)  +ROP( 71)  +ROP( 73)
      *           +ROP( 74)  +ROP( 76)  -ROP( 78)  -ROP( 79)
2065     *           -ROP(117) -ROP(127) +ROP(128) -ROP(136)
      *           +ROP(162) +ROP(166) +ROP(169) -ROP(170)
2067     *           +ROP(174) +ROP(182)
      C
      H
2069     WDOT( 2) =  -ROP( 2)  +ROP( 3)  +ROP( 6)  -ROP( 7)
      *           -2*ROP( 8)  -ROP( 9)  +ROP(10)  +ROP(14)
2071     *           -ROP(17)  +ROP(19)  +ROP(20)  +2*ROP(21)
      *           -ROP(24)  +ROP(25)  +ROP(26)  +2*ROP(28)
2073     *           -ROP(31)  -ROP(32)  -ROP(33)  -ROP(34)
      *           -ROP(35)  -2*ROP(36) -2*ROP(37) -2*ROP(38)
2075     *           -2*ROP(39) -ROP(40) -ROP(41) -ROP(42)
      *           -ROP(43) -ROP(44) -ROP(45) -ROP(46)
2077     *           -3*ROP(47) -3*ROP(48) -ROP(49) -ROP(50)
      *           -ROP(51) -ROP(52) -ROP(53) -ROP(55)
2079     *           -ROP(56) -ROP(57) -ROP(58) +ROP(59)
      *           -2*ROP(60) -ROP(61) -2*ROP(62) -2*ROP(63)
2081     *           -ROP(65) -2*ROP(68) -2*ROP(69) -2*ROP(72)
      *           -2*ROP(73) +ROP(75) -ROP(76) -ROP(77)
2083     *           +ROP(79) +ROP(85) +ROP(86) -ROP(87)
      *           -2*ROP(88) -ROP(89) +2*ROP(91) +2*ROP(92)
2085     *           +ROP(94) -ROP(98) +ROP(100) +ROP(101)
      *           -ROP(103) +ROP(104) +ROP(105) -2*ROP(109)
2087     *           +ROP(111) +ROP(115) +3*ROP(117) +ROP(118)
      *           -ROP(119) +2*ROP(120) +ROP(121) +ROP(124)
2089     *           -ROP(126) -ROP(127) -4*ROP(128) -ROP(129)
      *           -2*ROP(130) -2*ROP(131) -ROP(132) -ROP(134)
2091     *           -2*ROP(135) -ROP(136) -2*ROP(137) -ROP(139)
      *           -2*ROP(140) -2*ROP(143) -ROP(144) +ROP(145)
2093     *           +2*ROP(149) +ROP(153) +ROP(154) +ROP(155)
      *           +ROP(156) +ROP(157) -ROP(160) -ROP(161)
2095     *           -ROP(163) +ROP(166) +2*ROP(167) -2*ROP(172)
      *           -2*ROP(173) -2*ROP(174) -ROP(176) +2*ROP(178)
2097     *           -ROP(179) -ROP(180) -2*ROP(181) -2*ROP(182)
      *           -ROP(183) -ROP(184)
2099 C
      O
2101     WDOT( 3) = -2*ROP( 1)  -ROP( 2)  -ROP( 3)  -ROP( 4)
      *           -ROP( 5) -2*ROP( 6)  -ROP( 7)  -ROP( 8)
      *           -ROP( 9)  -ROP(10)  -ROP(11)  -ROP(12)
2103     *           -ROP(13)  -ROP(14)  -ROP(15)  -ROP(16)
      *           -ROP(17)  -ROP(18)  -ROP(19)  -ROP(20)
2105     *           -ROP(21) -2*ROP(22) -ROP(23) -ROP(24)
      *           -ROP(25)  -ROP(26)  -ROP(27)  -ROP(28)

```

2107	*	+ROP(29)	+ROP(35)	+ROP(41)	+ROP(48)	
	*	+ROP(67)	-ROP(68)	-ROP(69)	+ROP(71)	
2109	*	+ROP(81)	-ROP(85)	-ROP(86)	+ROP(88)	
	*	-ROP(103)	+ROP(104)	-ROP(115)	-ROP(117)	
2111	*	-ROP(118)	-ROP(119)	-ROP(121)	-ROP(122)	
	*	-ROP(123)	-ROP(124)	-ROP(125)	+ROP(132)	
2113	*	+ROP(145)	+ROP(154)	-ROP(161)	-ROP(166)	
	*	-ROP(167)	-ROP(170)	+ROP(172)	-ROP(176)	
2115	*	-ROP(178)				
	C	O2				
2117		WDOT(4) =	+ROP(1)	+ROP(4)	+2*ROP(6)	+ROP(8)
	*		+ROP(13)	+ROP(14)	-ROP(15)	+ROP(16)
2119	*		-ROP(18)	-ROP(20)	-ROP(21)	+ROP(22)
	*		-ROP(23)	+ROP(26)	-ROP(27)	-ROP(28)
2121	*		-ROP(29)	-2*ROP(30)	-ROP(31)	-ROP(32)
	*		-ROP(33)	-ROP(34)	-ROP(35)	+ROP(42)
2123	*		+ROP(46)	+ROP(47)	-ROP(48)	+ROP(51)
	*		+ROP(52)	-ROP(53)	-ROP(55)	+ROP(56)
2125	*		+ROP(57)	+ROP(58)	-ROP(61)	-ROP(64)
	*		-ROP(65)	-ROP(67)	+ROP(68)	+ROP(69)
2127	*		-ROP(71)	-ROP(76)	+ROP(82)	+ROP(85)
	*		+ROP(86)	+ROP(87)	-ROP(88)	+ROP(89)
2129	*		-ROP(91)	-ROP(92)	+ROP(95)	-ROP(96)
	*		+ROP(97)	-ROP(99)	+ROP(103)	-ROP(104)
2131	*		-ROP(106)	+ROP(107)	+ROP(108)	+ROP(109)
	*		+ROP(110)	-ROP(113)	+ROP(115)	+ROP(117)
2133	*		+2*ROP(118)	+3*ROP(119)	+ROP(120)	+2*ROP(121)
	*		+ROP(122)	+ROP(123)	+2*ROP(124)	+3*ROP(125)
2135	*		+ROP(127)	+2*ROP(128)	+ROP(129)	+ROP(130)
	*		+ROP(131)	+ROP(132)	+ROP(136)	+ROP(137)
2137	*		+ROP(139)	+ROP(140)	+ROP(143)	+ROP(144)
	*		-ROP(145)	-ROP(146)	+ROP(150)	-ROP(151)
2139	*		-ROP(152)	-ROP(154)	+ROP(156)	+ROP(157)
	*		-ROP(160)	-ROP(161)	-ROP(163)	+2*ROP(165)
2141	*		+ROP(168)	+2*ROP(170)	+2*ROP(173)	+ROP(174)
	*		-ROP(178)	-ROP(179)	-3*ROP(180)	-ROP(181)
2143	*		-2*ROP(184)			
	C	OH				
2145		WDOT(5) =	+ROP(2)	+ROP(3)	+ROP(4)	+ROP(5)
	*		+ROP(11)	+ROP(13)	+ROP(15)	+ROP(16)
2147	*		+ROP(17)	+ROP(18)	+ROP(19)	+ROP(20)
	*		+ROP(25)	-ROP(26)	+2*ROP(27)	+ROP(35)
2149	*		-ROP(40)	+2*ROP(43)	+ROP(45)	+ROP(58)
	*		+ROP(63)	-ROP(75)	+ROP(76)	-ROP(79)
2151	*		-2*ROP(80)	-2*ROP(81)	-ROP(82)	-ROP(83)
	*		-ROP(84)	-ROP(85)	-ROP(86)	-ROP(87)
2153	*		-ROP(88)	-ROP(89)	-ROP(90)	-ROP(91)
	*		-ROP(92)	-ROP(93)	-ROP(94)	-ROP(95)
2155	*		-ROP(96)	-ROP(97)	-ROP(98)	-ROP(99)
	*		-ROP(100)	-ROP(101)	-ROP(102)	-ROP(103)
2157	*		-ROP(104)	-ROP(105)	+ROP(109)	+ROP(111)
	*		+ROP(112)	+ROP(122)	-ROP(125)	+ROP(126)
2159	*		-ROP(132)	+ROP(134)	+ROP(146)	-2*ROP(165)
	*		-ROP(168)	-ROP(169)	+ROP(179)	+ROP(180)
2161	*		-ROP(183)	-ROP(184)		
	C	H2O				
2163		WDOT(6) =	+ROP(40)	+ROP(41)	+ROP(45)	+ROP(59)
	*		+ROP(64)	+ROP(79)	+ROP(81)	+ROP(82)
2165	*		+ROP(83)	+ROP(84)	+ROP(88)	+ROP(91)
	*		+ROP(92)	+ROP(93)	+ROP(95)	+ROP(96)
2167	*		+ROP(97)	+ROP(98)	+ROP(99)	+ROP(100)
	*		+ROP(103)	+ROP(104)	+ROP(105)	+ROP(106)

2169	*	-ROP(118)	+ROP(135)	-ROP(137)	+ROP(168)	
	*	-ROP(174)	+ROP(183)			
2171	C	HO2				
		WDOT(7) =	-ROP(4)	+ROP(5)	-ROP(6)	+ROP(7)
2173	*		+ROP(9)	-ROP(13)	-ROP(14)	+ROP(15)
	*		-ROP(16)	+ROP(18)	+ROP(23)	+2*ROP(30)
2175	*		+ROP(31)	+ROP(32)	+ROP(33)	+ROP(34)
	*		-ROP(41)	-ROP(42)	-ROP(43)	+ROP(44)
2177	*		-ROP(46)	+ROP(48)	-ROP(51)	-ROP(52)
	*		+ROP(53)	+ROP(55)	-ROP(56)	-ROP(57)
2179	*		-ROP(58)	-ROP(59)	+ROP(61)	+ROP(65)
	*		-ROP(82)	+ROP(83)	+ROP(84)	+ROP(88)
2181	*		-ROP(95)	+ROP(96)	-ROP(97)	+ROP(99)
	*		-2*ROP(107)	-2*ROP(108)	-ROP(109)	-ROP(110)
2183	*		-ROP(111)	-ROP(112)	-ROP(117)	-ROP(118)
	*		-ROP(119)	-ROP(120)	-ROP(121)	-ROP(122)
2185	*		-ROP(124)	-ROP(125)	+ROP(147)	-ROP(150)
	*		+ROP(151)	+ROP(152)	-ROP(156)	-ROP(157)
2187	*		+ROP(160)	+ROP(161)	+ROP(163)	-ROP(168)
	*		-ROP(170)	+ROP(176)	+2*ROP(180)	+ROP(181)
2189	*		+2*ROP(184)			
	C	H2O2				
2191		WDOT(8) =	-ROP(5)	-ROP(44)	-ROP(45)	+ROP(80)
	*		-ROP(83)	-ROP(84)	+ROP(107)	+ROP(108)
2193	*		+ROP(113)	-ROP(147)		
	C	CH3				
2195		WDOT(9) =	-ROP(10)	+ROP(11)	+ROP(23)	+ROP(24)
	*		+ROP(47)	-ROP(49)	+ROP(50)	+ROP(58)
2197	*		+ROP(63)	+ROP(77)	-ROP(90)	-ROP(91)
	*		-ROP(92)	+ROP(93)	+ROP(102)	-ROP(110)
2199	*		-ROP(111)	-ROP(115)	-ROP(120)	+ROP(127)
	*		-ROP(129)	+2*ROP(130)	+ROP(136)	-ROP(139)
2201	*		+2*ROP(140)	+ROP(144)	-ROP(145)	-ROP(146)
	*		-ROP(147)	-2*ROP(148)	-2*ROP(149)	-ROP(150)
2203	*		-ROP(151)	-ROP(152)	-ROP(153)	-ROP(154)
	*		-ROP(155)	-ROP(166)	-ROP(169)	+ROP(170)
2205	*		+ROP(181)			
	C	CH4				
2207		WDOT(10) =	-ROP(11)	+ROP(49)	-ROP(50)	-ROP(93)
	*		+ROP(110)	-ROP(121)	-ROP(130)	-ROP(140)
2209	*		+ROP(147)	+ROP(150)	+ROP(151)	+ROP(152)
	*		+ROP(153)	+ROP(154)	+ROP(155)	
2211	C	CO				
		WDOT(11) =	+ROP(7)	+ROP(8)	+ROP(9)	-ROP(12)
2213	*		-ROP(14)	+ROP(15)	+2*ROP(20)	+ROP(21)
	*		+ROP(23)	+2*ROP(27)	-ROP(29)	+ROP(30)
2215	*		+ROP(48)	-ROP(51)	+ROP(55)	-ROP(75)
	*		+2*ROP(76)	+ROP(77)	-ROP(78)	+ROP(88)
2217	*		-ROP(94)	+ROP(96)	+ROP(102)	+2*ROP(106)
	*		-ROP(112)	+ROP(113)	-ROP(115)	-ROP(117)
2219	*		-ROP(118)	-ROP(119)	-ROP(120)	-ROP(121)
	*		+ROP(123)	-ROP(124)	-2*ROP(125)	+ROP(126)
2221	*		-ROP(131)	-ROP(132)	+ROP(134)	+ROP(135)
	*		+ROP(143)	+ROP(151)	+ROP(161)	-2*ROP(165)
2223	*		+ROP(166)	-ROP(170)	+ROP(179)	+2*ROP(180)
	*		+ROP(181)	+ROP(184)		
2225	C	CO2				
		WDOT(12) =	-ROP(7)	-ROP(8)	-ROP(9)	+ROP(12)
2227	*		+ROP(14)	+ROP(21)	+2*ROP(28)	+ROP(29)
	*		-ROP(47)	-ROP(48)	+ROP(59)	+ROP(64)
2229	*		+ROP(75)	-ROP(87)	-ROP(88)	-ROP(89)
	*		+ROP(91)	+ROP(92)	+ROP(94)	-ROP(109)

2231	*	+ROP(112)	+ROP(117)	-ROP(119)	-ROP(123)
	*	-ROP(126)	-ROP(127)	-2*ROP(128)	-ROP(129)
2233	*	-ROP(130)	-ROP(131)	-ROP(132)	-ROP(134)
	*	-ROP(135)	-ROP(136)	-ROP(137)	-ROP(139)
2235	*	-ROP(140)	-2*ROP(143)	-ROP(144)	-ROP(172)
	*	-2*ROP(173)	-ROP(174)	+2*ROP(178)	
2237	C	CH2O			
		WDOT(13) =	+ROP(10)	-ROP(15)	+ROP(18)
2239	*		+ROP(24)	-ROP(30)	+ROP(51)
	*		-ROP(56)	-ROP(58)	-ROP(59)
2241	*		-ROP(63)	-ROP(64)	+ROP(65)
	*		+ROP(78)	+ROP(87)	+ROP(89)
2243	*		+ROP(99)	+ROP(100)	+ROP(109)
	*		-ROP(113)	+ROP(118)	-ROP(124)
2245	*		+ROP(145)	+ROP(146)	-ROP(151)
	*		+ROP(153)	+ROP(161)	+ROP(169)
2247	*		+ROP(174)	+ROP(179)	+ROP(184)
	C	CH3OH			
2249		WDOT(14) =	-ROP(18)	-ROP(19)	+ROP(56)
	*		-ROP(65)	-ROP(66)	+ROP(90)
2251	*		-ROP(100)	+ROP(137)	-ROP(152)
	C	C2H2			
2253		WDOT(15) =	-ROP(20)	-ROP(21)	-ROP(67)
	*		-ROP(101)	-ROP(102)	+ROP(103)
2255	*		+ROP(119)	+ROP(125)	+ROP(128)
	*		+ROP(165)	+ROP(173)	+ROP(176)
2257	C	C2H4			
		WDOT(16) =	-ROP(23)	-ROP(24)	+ROP(25)
2259	*		-ROP(71)	-ROP(72)	+ROP(74)
	*		+ROP(105)	+ROP(121)	+ROP(129)
2261	*		+ROP(144)	+ROP(149)	-ROP(154)
	*		-ROP(162)	-ROP(167)	+ROP(155)
2263	C	C2H6			
		WDOT(17) =	-ROP(25)	+ROP(72)	-ROP(74)
2265	*		-ROP(144)	+ROP(148)	-ROP(155)
	C	CH2CO			
2267		WDOT(18) =	-ROP(27)	-ROP(28)	+ROP(67)
	*		-ROP(69)	+ROP(71)	-ROP(76)
2269	*		+ROP(101)	-ROP(103)	+ROP(104)
	*		+ROP(120)	+ROP(124)	+ROP(131)
2271	*		+ROP(154)	-ROP(161)	+ROP(167)
	*		-ROP(178)	-ROP(179)	-ROP(180)
2273	*		-ROP(184)		-ROP(181)
	C	N2			
2275		WDOT(19) =	0.0		
2277	C	END			

EK 2

```

C
2 C   A 13-species reduced mechanism for lean atmospheric CH4/air
C
4 C   Contact:
C   Tianfeng Lu
6 C   University of Connecticut
C   Email: tlu@engr.uconn.edu
8 C
C   Reference:
10 C   R. Sankaran, E.R. Hawkes, J.H. Chen, T.F. Lu, C.K. Law,
C   "Structure of a spatially developing turbulent lean methane/air Bunsen
12 C   flame,"
C   Proceedings of the Combustion Institute 31 (2007) 1291-1298.
C
14 C   SUBROUTINE CKWYP (P, T, Y, ICKWRK, RCKWRK, WDOT)
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H, O-Z), INTEGER (I-N)
C
16 C   PARAMETER (RU=8.314510D7, RUC=RU/4.184D7, PATM=1.01325D6)
18 C   DIMENSION Y(*), ICKWRK(*), RCKWRK(*), WDOT(*)
C   DIMENSION C(13), XQ(4)
20 C   DIMENSION RF(73), RB(73), ROP(73)
C   DIMENSION EG(17), EQK(73), SMH(17), CTB(73), RKLOW(5)
22 C   DATA RF, RB /73*0.D0, 73*0.D0/
C
24 C   SMALL = 1.D-50
C
26 C   convert Y to C
C
28 C   C(1) = MAX(Y(1), SMALL)*4.96046521D-1
C   C(2) = MAX(Y(2), SMALL)*9.92093043D-1
30 C   C(3) = MAX(Y(3), SMALL)*6.25023433D-2
C   C(4) = MAX(Y(4), SMALL)*3.12511716D-2
32 C   C(5) = MAX(Y(5), SMALL)*5.87980383D-2
C   C(6) = MAX(Y(6), SMALL)*5.55082499D-2
34 C   C(7) = MAX(Y(7), SMALL)*3.02968146D-2
C   C(8) = MAX(Y(8), SMALL)*6.65112065D-2
36 C   C(9) = MAX(Y(9), SMALL)*6.23323639D-2
C   C(10) = MAX(Y(10), SMALL)*3.57008335D-2
38 C   C(11) = MAX(Y(11), SMALL)*2.27221341D-2
C   C(12) = MAX(Y(12), SMALL)*3.33039255D-2
40 C   C(13) = MAX(Y(13), SMALL)*3.56972032D-2
C
42 C   SUM = 0.0
C   DO K = 1, 13
44 C       SUM = SUM + C(K)
C   ENDDO
46 C   SUM = P/(SUM*T*8.314510D7)
C
48 C   DO K = 1, 13
C       C(K) = C(K) * SUM
50 C   ENDDO
C
52 C   forward reaction rates
C
54 C   ALOGT = LOG(T)
C   TI = 1.0D0/T
56 C   TI2 = TI*TI
C
58 C   RF(1) = 1.2D17*TI
C   RF(2) = 5.D17*TI

```

60 RF(3) = EXP(1.08197783D1 +2.67D0*ALOGT -3.16523284D3*TI)
 RF(4) = 2.D13
 62 RF(5) = 8.D13
 RF(6) = 1.5D13
 64 RF(7) = 8.43D13
 RF(8) = EXP(2.07430685D1 +1.5D0*ALOGT -4.32766334D3*TI)
 66 RF(9) = EXP(3.40312786D1 -1.50965D3*TI)
 RF(10) = 3.D13
 68 RF(11) = 3.D13
 RF(12) = EXP(3.12945828D1 -1.781387D3*TI)
 70 RF(13) = 1.D13
 RF(14) = EXP(2.85473118D1 -2.40537567D4*TI)
 72 RF(15) = EXP(3.22361913D1 -2.01286667D4*TI)
 RF(16) = EXP(4.24761511D1 -8.6D-1*ALOGT)
 74 TMP = EXP(-1.72D0*ALOGT)
 RF(17) = 3.D20 * TMP
 76 RF(19) = 3.75D20 * TMP
 RF(18) = EXP(4.36851114D1 -7.6D-1*ALOGT)
 78 RF(20) = EXP(3.20498617D1 -7.25286183D3*TI)
 RF(21) = 1.D18*TI
 80 RF(22) = EXP(3.90385861D1 -6.D-1*ALOGT)
 RF(23) = EXP(4.55408762D1 -1.25D0*ALOGT)
 82 RF(24) = 5.5D20*TI2
 RF(25) = 2.2D22*TI2
 84 RF(26) = EXP(2.90097872D1 -3.37658384D2*TI)
 RF(27) = EXP(3.09632256D1 -5.37435401D2*TI)
 86 RF(28) = EXP(3.25288609D1 -3.19542584D2*TI)
 RF(29) = EXP(3.77576522D1 -8.D-1*ALOGT)
 88 RF(30) = EXP(3.70803784D1 -6.3D-1*ALOGT -1.92731984D2*TI)
 RF(31) = EXP(2.03077504D1 +1.62D0*ALOGT -5.45486868D3*TI)
 90 RF(32) = EXP(2.77171988D1 +4.8D-1*ALOGT +1.30836334D2*TI)
 RF(33) = 7.34D13
 92 RF(34) = EXP(2.7014835D1 +4.54D-1*ALOGT -1.81158D3*TI)
 RF(35) = EXP(2.38587601D1 +1.05D0*ALOGT -1.64803459D3*TI)
 94 RF(36) = 2.D13
 RF(37) = 1.2D13
 96 RF(38) = 6.D12
 RF(39) = EXP(1.75767107D1 +1.5D0*ALOGT -4.00560467D4*TI)
 98 RF(40) = EXP(1.9190789D1 +1.51D0*ALOGT -1.72603317D3*TI)
 RF(41) = EXP(1.0482906D1 +2.4D0*ALOGT +1.06178717D3*TI)
 100 RF(42) = EXP(3.09983169D1 +2.51608334D2*TI)
 RF(43) = 2.D13
 102 RF(44) = 3.D13
 RF(45) = EXP(1.78408622D1 +1.6D0*ALOGT -2.72743434D3*TI)
 104 RF(46) = 2.501D13
 RF(47) = EXP(1.84206807D1 +1.6D0*ALOGT -1.570036D3*TI)
 106 RF(48) = EXP(1.76783433D1 +1.228D0*ALOGT -3.52251667D1*TI)
 RF(49) = 5.D13
 108 RF(50) = EXP(2.19558261D1 +1.18D0*ALOGT +2.2493785D2*TI)
 RF(51) = 5.D12
 110 RF(52) = 2.D13
 RF(53) = 1.D12
 112 RF(54) = EXP(3.26416564D1 -1.18759134D4*TI)
 RF(55) = EXP(3.02112379D1 -7.54825001D2*TI)
 114 RF(56) = EXP(1.31223634D1 +2.D0*ALOGT -3.63825651D3*TI)
 RF(57) = EXP(1.47156719D1 +2.D0*ALOGT -4.16160184D3*TI)
 116 RF(58) = EXP(3.03390713D1 -3.01930001D2*TI)
 RF(59) = 2.8D13
 118 RF(60) = 1.2D13
 RF(61) = 7.D13
 120 RF(62) = 3.D13
 RF(63) = EXP(3.04036098D1 +2.86833501D2*TI)

```

122 RF(64) = 9.D12
123 RF(65) = 7.D12
124 RF(66) = 1.4D13
125 RF(67) = EXP(2.43067848D1 -4.49875701D3*TI)
126 RF(68) = 2.648D13
127 RF(69) = EXP(8.10772006D0 +2.81D0*ALOGT -2.94884967D3*TI)
128 TMP = EXP(-1.D0*ALOGT -8.55468335D3*TI )
129 RF(70) = 2.244D18 * TMP
130 RF(71) = 1.87D17 * TMP
131 RF(72) = EXP(2.96591694D1 -2.01286667D2*TI)
132 RF(73) = EXP(3.05213929D1 -4.52895001D2*TI)
C
134 C thermal data
C
135 TN1 = ALOGT - 1.0
136 TN2 = T
137 TN3 = TN2*T
138 TN4 = TN3*T
139 TN5 = TN4*T
C
142 C IF (T .GT. 1.D3) THEN
C
144 SMH(1) = -3.20502331D+00 + 9.50158922D+02*TI
* + 3.33727920D+00*TN1 - 2.47012365D-05*TN2
146 * + 8.32427963D-08*TN3 - 1.49638662D-11*TN4
* + 1.00127688D-15*TN5
148 SMH(2) = -4.46682914D-01 - 2.54736599D+04*TI
* + 2.50000001D+00*TN1 - 1.15421486D-11*TN2
150 * + 2.69269913D-15*TN3 - 3.94596029D-19*TN4
* + 2.49098679D-23*TN5
152 SMH(3) = 4.78433864D+00 - 2.92175791D+04*TI
* + 2.56942078D+00*TN1 - 4.29870569D-05*TN2
154 * + 6.99140982D-09*TN3 - 8.34814992D-13*TN4
* + 6.14168455D-17*TN5
156 SMH(4) = 5.45323129D+00 + 1.08845772D+03*TI
* + 3.28253784D+00*TN1 + 7.41543770D-04*TN2
158 * - 1.26327778D-07*TN3 + 1.74558796D-11*TN4
* - 1.08358897D-15*TN5
160 SMH(5) = 4.47669610D+00 - 3.85865700D+03*TI
* + 3.09288767D+00*TN1 + 2.74214858D-04*TN2
162 * + 2.10842047D-08*TN3 - 7.32884630D-12*TN4
* + 5.87061880D-16*TN5
164 SMH(6) = 4.96677010D+00 + 3.00042971D+04*TI
* + 3.03399249D+00*TN1 + 1.08845902D-03*TN2
166 * - 2.73454197D-08*TN3 - 8.08683225D-12*TN4
* + 8.41004960D-16*TN5
168 SMH(7) = 3.78510215D+00 - 1.11856713D+02*TI
* + 4.01721090D+00*TN1 + 1.11991007D-03*TN2
170 * - 1.05609692D-07*TN3 + 9.52053083D-12*TN4
* - 5.39542675D-16*TN5
172 SMH(8) = 6.17119324D+00 - 4.62636040D+04*TI
* + 2.87410113D+00*TN1 + 1.82819646D-03*TN2
174 * - 2.34824328D-07*TN3 + 2.16816291D-11*TN4
* - 9.38637835D-16*TN5
176 SMH(9) = 8.62650169D+00 - 5.09259997D+04*TI
* + 2.29203842D+00*TN1 + 2.32794319D-03*TN2
178 * - 3.35319912D-07*TN3 + 3.48255000D-11*TN4
* - 1.69858183D-15*TN5
180 SMH(10) = 8.48007179D+00 - 1.67755843D+04*TI
* + 2.28571772D+00*TN1 + 3.61995018D-03*TN2
182 * - 4.97857247D-07*TN3 + 4.96403870D-11*TN4
* - 2.33577197D-15*TN5

```

184 SMH(11) = 1.84373180D+01 + 9.46834459D+03*TI
 * + 7.48514950D-02*TN1 + 6.69547335D-03*TN2
 186 * - 9.55476348D-07*TN3 + 1.01910446D-10*TN4
 * - 5.09076150D-15*TN5
 188 SMH(12) = 7.81868772D+00 + 1.41518724D+04*TI
 * + 2.71518561D+00*TN1 + 1.03126372D-03*TN2
 190 * - 1.66470962D-07*TN3 + 1.91710840D-11*TN4
 * - 1.01823858D-15*TN5
 192 SMH(13) = 2.27163806D+00 + 4.87591660D+04*TI
 * + 3.85746029D+00*TN1 + 2.20718513D-03*TN2
 194 * - 3.69135673D-07*TN3 + 4.36241823D-11*TN4
 * - 2.36042082D-15*TN5
 196 SMH(14) = 9.79834492D+00 - 4.01191815D+03*TI
 * + 2.77217438D+00*TN1 + 2.47847763D-03*TN2
 198 * - 4.14076022D-07*TN3 + 4.90968148D-11*TN4
 * - 2.66754356D-15*TN5
 200 SMH(15) = 1.36563230D+01 + 1.39958323D+04*TI
 * + 1.76069008D+00*TN1 + 4.6000041D-03*TN2
 202 * - 7.37098022D-07*TN3 + 8.38676767D-11*TN4
 * - 4.41927820D-15*TN5
 204 SMH(16) = 5.81043215D+00 + 3.24250627D+03*TI
 * + 3.69266569D+00*TN1 + 4.32288399D-03*TN2
 206 * - 6.25168533D-07*TN3 + 6.56028863D-11*TN4
 * - 3.24277101D-15*TN5
 208 C
 ELSE
 210 C
 212 SMH(1) = 6.83010238D-01 + 9.17935173D+02*TI
 * + 2.34433112D+00*TN1 + 3.99026037D-03*TN2
 * - 3.24635850D-06*TN3 + 1.67976745D-09*TN4
 214 * - 3.68805881D-13*TN5
 SMH(2) = -4.46682853D-01 - 2.54736599D+04*TI
 216 * + 2.50000000D+00*TN1 + 3.52666409D-13*TN2
 * - 3.32653273D-16*TN3 + 1.91734693D-19*TN4
 218 * - 4.63866166D-23*TN5
 SMH(3) = 2.05193346D+00 - 2.91222592D+04*TI
 220 * + 3.16826710D+00*TN1 - 1.63965942D-03*TN2
 * + 1.10717733D-06*TN3 - 5.10672187D-10*TN4
 222 * + 1.05632986D-13*TN5
 SMH(4) = 3.65767573D+00 + 1.06394356D+03*TI
 224 * + 3.78245636D+00*TN1 - 1.49836708D-03*TN2
 * + 1.64121700D-06*TN3 - 8.06774591D-10*TN4
 226 * + 1.62186419D-13*TN5
 SMH(5) = -1.03925458D-01 - 3.61508056D+03*TI
 228 * + 3.99201543D+00*TN1 - 1.20065876D-03*TN2
 * + 7.69656402D-07*TN3 - 3.23427778D-10*TN4
 230 * + 6.82057350D-14*TN5
 SMH(6) = -8.49032208D-01 + 3.02937267D+04*TI
 232 * + 4.19864056D+00*TN1 - 1.01821705D-03*TN2
 * + 1.08673369D-06*TN3 - 4.57330885D-10*TN4
 234 * + 8.85989085D-14*TN5
 SMH(7) = 3.71666245D+00 - 2.94808040D+02*TI
 236 * + 4.30179801D+00*TN1 - 2.37456025D-03*TN2
 * + 3.52638152D-06*TN3 - 2.02303245D-09*TN4
 238 * + 4.64612562D-13*TN5
 SMH(8) = 1.56253185D+00 - 4.60040401D+04*TI
 240 * + 3.76267867D+00*TN1 + 4.84436072D-04*TN2
 * + 4.65816402D-07*TN3 - 3.20909294D-10*TN4
 242 * + 8.43708595D-14*TN5
 SMH(9) = -7.69118967D-01 - 5.04968163D+04*TI
 244 * + 4.19860411D+00*TN1 - 1.18330710D-03*TN2
 * + 1.37216037D-06*TN3 - 5.57346651D-10*TN4

```

246 *      + 9.71573685D-14*TN5
SMH(10) = 1.60456433D+00 - 1.64449988D+04*TI
248 *      + 3.67359040D+00*TN1 + 1.00547588D-03*TN2
*      + 9.55036427D-07*TN3 - 5.72597854D-10*TN4
250 *      + 1.27192867D-13*TN5
SMH(11) = -4.64130376D+00 + 1.02466476D+04*TI
252 *      + 5.14987613D+00*TN1 - 6.83548940D-03*TN2
*      + 8.19667665D-06*TN3 - 4.03952522D-09*TN4
254 *      + 8.33469780D-13*TN5
SMH(12) = 3.50840928D+00 + 1.43440860D+04*TI
256 *      + 3.57953347D+00*TN1 - 3.05176840D-04*TN2
*      + 1.69469055D-07*TN3 + 7.55838237D-11*TN4
258 *      - 4.52212249D-14*TN5
SMH(13) = 9.90105222D+00 + 4.83719697D+04*TI
260 *      + 2.35677352D+00*TN1 + 4.49229839D-03*TN2
*      - 1.18726045D-06*TN3 + 2.04932518D-10*TN4
262 *      - 7.18497740D-15*TN5
SMH(14) = 3.39437243D+00 - 3.83956496D+03*TI
264 *      + 4.22118584D+00*TN1 - 1.62196266D-03*TN2
*      + 2.29665743D-06*TN3 - 1.10953411D-09*TN4
266 *      + 2.16884433D-13*TN5
SMH(15) = 6.02812900D-01 + 1.43089567D+04*TI
268 *      + 4.79372315D+00*TN1 - 4.95416685D-03*TN2
*      + 6.22033347D-06*TN3 - 3.16071051D-09*TN4
270 *      + 6.58863260D-13*TN5
SMH(16) = 5.47302243D+00 + 3.19391367D+03*TI
272 *      + 3.86388918D+00*TN1 + 2.79836152D-03*TN2
*      + 9.88786318D-07*TN3 - 8.71100100D-10*TN4
274 *      + 2.18483639D-13*TN5
    ENDIF
276 C
C equilibrium constants
278 C
    DO N = 1, 16
280     EG(N) = EXP(MIN(SMH(N), 230.26))
    ENDDO
282 C
    PFAC = PATM/(RU*T)
284     PFAC2 = PFAC*PFAC
    PFAC3 = PFAC2*PFAC
286 C
    EQK(1)=EG(4)/EG(3)/EG(3)/PFAC
288     EQK(2)=EG(5)/EG(2)/EG(3)/PFAC
    EQK(3)=EG(2)*EG(5)/EG(1)/EG(3)
290     EQK(4)=EG(4)*EG(5)/EG(3)/EG(7)
    EQK(5)=EG(2)*EG(14)/EG(3)/EG(8)
292     EQK(6)=EG(1)*EG(12)/EG(3)/EG(9)
    EQK(7)=EG(2)*EG(15)/EG(3)/EG(10)
294     EQK(8)=EG(5)*EG(10)/EG(3)/EG(11)
    EQK(9)=EG(13)/EG(3)/EG(12)/PFAC
296     EQK(10)=EG(5)*EG(12)/EG(3)/EG(14)
    EQK(11)=EG(2)*EG(13)/EG(3)/EG(14)
298     EQK(12)=EG(5)*EG(14)/EG(3)/EG(15)
    EQK(13)=EG(5)*EG(15)/EG(3)/EG(16)
300     EQK(14)=EG(3)*EG(13)/EG(4)/EG(12)
    EQK(15)=EG(7)*EG(14)/EG(4)/EG(15)
302     EQK(16)=EG(7)/EG(2)/EG(4)/PFAC
    EQK(17)=EQK(16)
304     EQK(18)=EQK(16)
    EQK(19)=EQK(16)
306     EQK(20)=EG(3)*EG(5)/EG(2)/EG(4)
    EQK(21)=EG(1)/EG(2)/EG(2)/PFAC

```

```

308   EQK(22)=EQK(21)
      EQK(23)=EQK(21)
310   EQK(24)=EQK(21)
      EQK(25)=EG(6)/EG(2)/EG(5)/PFAC
312   EQK(26)=EG(3)*EG(6)/EG(2)/EG(7)
      EQK(27)=EG(1)*EG(4)/EG(2)/EG(7)
314   EQK(28)=EG(5)*EG(5)/EG(2)/EG(7)
      EQK(29)=EG(10)/EG(2)/EG(8)/PFAC
316   EQK(30)=EG(11)/EG(2)/EG(10)/PFAC
      EQK(31)=EG(1)*EG(10)/EG(2)/EG(11)
318   EQK(32)=EG(15)/EG(2)/EG(14)/PFAC
      EQK(33)=EG(1)*EG(12)/EG(2)/EG(14)
320   EQK(34)=EG(16)/EG(2)/EG(15)/PFAC
      EQK(35)=EG(1)*EG(14)/EG(2)/EG(15)
322   EQK(36)=EG(1)*EG(15)/EG(2)/EG(16)
      EQK(37)=EG(5)*EG(10)/EG(2)/EG(16)
324   EQK(38)=EG(6)*EG(9)/EG(2)/EG(16)
      EQK(39)=EG(15)/EG(1)/EG(12)/PFAC
326   EQK(40)=EG(2)*EG(6)/EG(1)/EG(5)
      EQK(41)=EG(3)*EG(6)/EG(5)/EG(5)
328   EQK(42)=EG(4)*EG(6)/EG(5)/EG(7)
      EQK(43)=EG(2)*EG(15)/EG(5)/EG(8)
330   EQK(44)=EG(2)*EG(15)/EG(5)/EG(9)
      EQK(45)=EG(6)*EG(8)/EG(5)/EG(10)
332   EQK(46)=EG(6)*EG(9)/EG(5)/EG(10)
      EQK(47)=EG(6)*EG(10)/EG(5)/EG(11)
334   EQK(48)=EG(2)*EG(13)/EG(5)/EG(12)
      EQK(49)=EG(6)*EG(12)/EG(5)/EG(14)
336   EQK(50)=EG(6)*EG(14)/EG(5)/EG(15)
      EQK(51)=EG(6)*EG(15)/EG(5)/EG(16)
338   EQK(52)=EG(5)*EG(15)/EG(7)/EG(8)
      EQK(53)=EG(4)*EG(11)/EG(7)/EG(10)
340   EQK(54)=EG(5)*EG(13)/EG(7)/EG(12)
      EQK(55)=EG(5)*EG(14)/EG(4)/EG(8)
342   EQK(56)=EG(2)*EG(10)/EG(1)/EG(8)
      EQK(57)=EG(10)*EG(10)/EG(8)/EG(11)
344   EQK(58)=EG(8)/EG(9)
      EQK(62)=EQK(58)
346   EQK(64)=EQK(58)
      EQK(65)=EQK(58)
348   EQK(59)=EG(2)*EG(5)*EG(12)/EG(4)/EG(9)*PFAC
      EQK(60)=EG(6)*EG(12)/EG(4)/EG(9)
350   EQK(61)=EG(2)*EG(10)/EG(1)/EG(9)
      EQK(63)=EG(10)*EG(10)/EG(9)/EG(11)
352   EQK(66)=EG(12)*EG(15)/EG(9)/EG(13)
      EQK(67)=EG(5)*EG(15)/EG(4)/EG(10)
354   EQK(68)=EG(11)*EG(12)/EG(10)/EG(14)
      EQK(69)=EG(11)*EG(14)/EG(10)/EG(15)
356   EQK(70)=EG(2)*EG(12)/EG(14)*PFAC
      EQK(71)=EQK(70)
358   EQK(72)=EG(7)*EG(12)/EG(4)/EG(14)
      EQK(73)=EG(7)*EG(15)/EG(4)/EG(16)
360   C
      C Compute reverse reaction rates
362   C
      DO I = 1, 73
364     RB(I) = RF(I) / MAX(EQK(I),1.0D-100)
      ENDDO
366   C
      C rates at low pressure limit
368   C
      RKLOW(1) = EXP(6.33329483D1 -3.14D0*ALOGT -6.18956501D2/T)

```

```

370 RKLOW(2) = EXP(7.68923562D1 -4.76D0*ALOGT -1.22784867D3/T)
372 RKLOW(3) = EXP(5.55621468D1 -2.57D0*ALOGT -7.17083751D2/T)
RKLOW(4) = EXP(7.39217399D1 -4.82D0*ALOGT -3.28600484D3/T)
374 C RKLOW(5) = EXP(6.37931383D1 -3.42D0*ALOGT -4.24463259D4/T)
C
C   third-body concentrations
376 C
CTOT = 0.0
378 DO K = 1, 13
CTOT = CTOT + C(K)
380 ENDDO
C
382 CTB(1) = CTOT + 1.4D0*C(1) + 1.44D1*C(6)
*   + C(9) + 7.5D-1*C(10) + 2.6D0*C(11)
384 CTB(2) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(6)
*   + C(9) + 5.D-1*C(10) + C(11)
386 CTB(9) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(4)
*   + 5.D0*C(6) + C(9) + 5.D-1*C(10)
388 *   + 2.5D0*C(11)
CTB(16) = CTOT - C(4) - C(6)
390 *   - 2.5D-1*C(10) + 5.D-1*C(11) - C(13)
CTB(21) = CTOT - C(1) - C(6)
392 *   + C(9) - C(11)
CTB(25) = CTOT - 2.7D-1*C(1) + 2.65D0*C(6)
394 *   + C(9)
CTB(29) = CTOT + C(1) + 5.D0*C(6)
396 *   + C(9) + 5.D-1*C(10) + C(11)
CTB(30) = CTB(29)
398 CTB(32) = CTB(29)
CTB(34) = CTB(29)
400 CTB(39) = CTB(29)
CTB(71) = CTOT + C(1) - C(6)
402 *   + C(9) + 5.D-1*C(10) + C(11)
C
C   fall-off reactions
404 C
C
406 C
PR = RKLOW(1) * CTB(29) / RF(29)
408 PCOR = PR / (1.0 + PR)
PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
410 FCENT = 3.2D-1*EXP(-T/7.8D1) + 6.8D-1*EXP(-T/1.995D3)
*   + EXP(-5.59D3/T)
412 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
414 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
416 FC = 10.0*FLOG
PCOR = FC * PCOR
418 RF(29) = RF(29) * PCOR
RB(29) = RB(29) * PCOR
420 C
PR = RKLOW(2) * CTB(30) / RF(30)
422 PCOR = PR / (1.0 + PR)
PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
424 FCENT = 2.17D-1*EXP(-T/7.4D1) + 7.83D-1*EXP(-T/2.941D3)
*   + EXP(-6.964D3/T)
426 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
428 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
430 FC = 10.0*FLOG
PCOR = FC * PCOR

```

```

432 RF(30) = RF(30) * PCOR
433 RB(30) = RB(30) * PCOR
434 C
435 PR = RKLOW(3) * CTB(32) / RF(32)
436 PCOR = PR / (1.0 + PR)
437 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
438 FCENT = 2.176D-1*EXP(-T/2.71D2) + 7.824D-1*EXP(-T/2.755D3)
439 * + EXP(-6.57D3/T)
440 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
441 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
442 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
443 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
444 FC = 10.0**FLOG
445 PCOR = FC * PCOR
446 RF(32) = RF(32) * PCOR
447 RB(32) = RB(32) * PCOR
448 C
449 PR = RKLOW(4) * CTB(34) / RF(34)
450 PCOR = PR / (1.0 + PR)
451 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
452 FCENT = 2.813D-1*EXP(-T/1.03D2) + 7.187D-1*EXP(-T/1.291D3)
453 * + EXP(-4.16D3/T)
454 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
455 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
456 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
457 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
458 FC = 10.0**FLOG
459 PCOR = FC * PCOR
460 RF(34) = RF(34) * PCOR
461 RB(34) = RB(34) * PCOR
462 C
463 PR = RKLOW(5) * CTB(39) / RF(39)
464 PCOR = PR / (1.0 + PR)
465 PRLOG = LOG10(MAX(PR,SMALL))
466 FCENT = 6.8D-2*EXP(-T/1.97D2) + 9.32D-1*EXP(-T/1.54D3)
467 * + EXP(-1.03D4/T)
468 FCLOG = LOG10(MAX(FCENT,SMALL))
469 XN = 0.75 - 1.27*FCLOG
470 CPRLOG= PRLOG - (0.4 + 0.67*FCLOG)
471 FLOG = FCLOG/(1.0 + (CPRLOG/(XN-0.14*CPRLOG))**2)
472 FC = 10.0**FLOG
473 PCOR = FC * PCOR
474 RF(39) = RF(39) * PCOR
475 RB(39) = RB(39) * PCOR
476 C
477 RF(1) = RF(1)*CTB(1)*C(3)*C(3)
478 RF(2) = RF(2)*CTB(2)*C(3)*C(2)
479 RF(3) = RF(3)*C(3)*C(1)
480 RF(4) = RF(4)*C(3)*C(7)
481 RF(5) = RF(5)*C(3)
482 RF(6) = RF(6)*C(3)
483 RF(7) = RF(7)*C(3)*C(8)
484 RF(8) = RF(8)*C(3)*C(9)
485 RF(9) = RF(9)*CTB(9)*C(3)*C(10)
486 RF(10) = RF(10)*C(3)
487 RF(11) = RF(11)*C(3)
488 RF(12) = RF(12)*C(3)*C(12)
489 RF(13) = RF(13)*C(3)
490 RF(14) = RF(14)*C(4)*C(10)
491 RF(15) = RF(15)*C(4)*C(12)
492 RF(16) = RF(16)*CTB(16)*C(2)*C(4)
493 RF(17) = RF(17)*C(2)*C(4)*C(4)

```


494 RF(18) = RF(18)*C(2)*C(4)*C(6)
 RF(19) = RF(19)*C(2)*C(4)*C(13)
 496 RF(20) = RF(20)*C(2)*C(4)
 RF(21) = RF(21)*CTB(21)*C(2)*C(2)
 498 RF(22) = RF(22)*C(2)*C(2)*C(1)
 RF(23) = RF(23)*C(2)*C(2)*C(6)
 500 RF(24) = RF(24)*C(2)*C(2)*C(11)
 RF(25) = RF(25)*CTB(25)*C(2)*C(5)
 502 RF(26) = RF(26)*C(2)*C(7)
 RF(27) = RF(27)*C(2)*C(7)
 504 RF(28) = RF(28)*C(2)*C(7)
 RF(29) = RF(29)*C(2)
 506 RF(30) = RF(30)*C(2)*C(8)
 RF(31) = RF(31)*C(2)*C(9)
 508 RF(32) = RF(32)*C(2)
 RF(33) = RF(33)*C(2)
 510 RF(34) = RF(34)*C(2)*C(12)
 RF(35) = RF(35)*C(2)*C(12)
 512 RF(36) = RF(36)*C(2)
 RF(37) = RF(37)*C(2)
 514 RF(38) = RF(38)*C(2)
 RF(39) = RF(39)*C(1)*C(10)
 516 RF(40) = RF(40)*C(5)*C(1)
 RF(41) = RF(41)*C(5)*C(5)
 518 RF(42) = RF(42)*C(5)*C(7)
 RF(43) = RF(43)*C(5)
 520 RF(44) = RF(44)*C(5)
 RF(45) = RF(45)*C(5)*C(8)
 522 RF(46) = RF(46)*C(5)*C(8)
 RF(47) = RF(47)*C(5)*C(9)
 524 RF(48) = RF(48)*C(5)*C(10)
 RF(49) = RF(49)*C(5)
 526 RF(50) = RF(50)*C(5)*C(12)
 RF(51) = RF(51)*C(5)
 528 RF(52) = RF(52)*C(7)
 RF(53) = RF(53)*C(7)*C(8)
 530 RF(54) = RF(54)*C(7)*C(10)
 RF(55) = RF(55)*C(4)
 532 RF(56) = RF(56)*C(1)
 RF(57) = RF(57)*C(9)
 534 RF(58) = RF(58)*C(13)
 RF(59) = RF(59)*C(4)
 536 RF(60) = RF(60)*C(4)
 RF(61) = RF(61)*C(1)
 538 RF(62) = RF(62)*C(6)
 RF(63) = RF(63)*C(9)
 540 RF(64) = RF(64)*C(10)
 RF(65) = RF(65)*C(11)
 542 RF(66) = RF(66)*C(11)
 RF(67) = RF(67)*C(8)*C(4)
 544 RF(68) = RF(68)*C(8)
 RF(69) = RF(69)*C(8)*C(12)
 546 RF(70) = RF(70)*C(6)
 RF(71) = RF(71)*CTB(71)
 548 RF(72) = RF(72)*C(4)
 RF(73) = RF(73)*C(4)
 550 RB(1) = RB(1)*CTB(1)*C(4)
 RB(2) = RB(2)*CTB(2)*C(5)
 552 RB(3) = RB(3)*C(2)*C(5)
 RB(4) = RB(4)*C(5)*C(4)
 554 RB(5) = RB(5)*C(2)
 RB(6) = RB(6)*C(1)*C(10)

556 RB(7) = RB(7)*C(2)*C(12)
 RB(8) = RB(8)*C(5)*C(8)
 558 RB(9) = RB(9)*CTB(9)*C(11)
 RB(10) = RB(10)*C(5)*C(10)
 560 RB(11) = RB(11)*C(2)*C(11)
 RB(12) = RB(12)*C(5)
 562 RB(13) = RB(13)*C(5)*C(12)
 RB(14) = RB(14)*C(3)*C(11)
 564 RB(15) = RB(15)*C(7)
 RB(16) = RB(16)*CTB(16)*C(7)
 566 RB(17) = RB(17)*C(7)*C(4)
 RB(18) = RB(18)*C(7)*C(6)
 568 RB(19) = RB(19)*C(7)*C(13)
 RB(20) = RB(20)*C(3)*C(5)
 570 RB(21) = RB(21)*CTB(21)*C(1)
 RB(22) = RB(22)*C(1)*C(1)
 572 RB(23) = RB(23)*C(1)*C(6)
 RB(24) = RB(24)*C(1)*C(11)
 574 RB(25) = RB(25)*CTB(25)*C(6)
 RB(26) = RB(26)*C(3)*C(6)
 576 RB(27) = RB(27)*C(4)*C(1)
 RB(28) = RB(28)*C(5)*C(5)
 578 RB(29) = RB(29)*C(8)
 RB(30) = RB(30)*C(9)
 580 RB(31) = RB(31)*C(8)*C(1)
 RB(32) = RB(32)*C(12)
 582 RB(33) = RB(33)*C(1)*C(10)
 RB(35) = RB(35)*C(1)
 584 RB(36) = RB(36)*C(1)*C(12)
 RB(37) = RB(37)*C(5)*C(8)
 586 RB(38) = RB(38)*C(6)
 RB(39) = RB(39)*C(12)
 588 RB(40) = RB(40)*C(2)*C(6)
 RB(41) = RB(41)*C(3)*C(6)
 590 RB(42) = RB(42)*C(4)*C(6)
 RB(43) = RB(43)*C(2)*C(12)
 592 RB(44) = RB(44)*C(2)*C(12)
 RB(45) = RB(45)*C(6)
 594 RB(46) = RB(46)*C(6)
 RB(47) = RB(47)*C(8)*C(6)
 596 RB(48) = RB(48)*C(2)*C(11)
 RB(49) = RB(49)*C(6)*C(10)
 598 RB(50) = RB(50)*C(6)
 RB(51) = RB(51)*C(6)*C(12)
 600 RB(52) = RB(52)*C(5)*C(12)
 RB(53) = RB(53)*C(4)*C(9)
 602 RB(54) = RB(54)*C(5)*C(11)
 RB(55) = RB(55)*C(5)
 604 RB(56) = RB(56)*C(2)*C(8)
 RB(57) = RB(57)*C(8)*C(8)
 606 RB(58) = RB(58)*C(13)
 RB(59) = RB(59)*C(2)*C(5)*C(10)
 608 RB(60) = RB(60)*C(10)*C(6)
 RB(61) = RB(61)*C(8)*C(2)
 610 RB(62) = RB(62)*C(6)
 RB(63) = RB(63)*C(8)*C(8)
 612 RB(64) = RB(64)*C(10)
 RB(65) = RB(65)*C(11)
 614 RB(66) = RB(66)*C(10)*C(12)
 RB(67) = RB(67)*C(5)*C(12)
 616 RB(68) = RB(68)*C(9)*C(10)
 RB(69) = RB(69)*C(9)

```

618      RB(70) = RB(70)*C(2)*C(10)*C(6)
620      RB(71) = RB(71)*CTB(71)*C(2)*C(10)
622      RB(72) = RB(72)*C(7)*C(10)
624      RB(73) = RB(73)*C(7)*C(12)
C
C solving QSS species concentration
C
C CH2
626      ABV1 = RB(29) + RB(43) + RF(45)
        *      + RB(52) + RB(56) + RB(57)
628      DEN1 = RF(5) + RF(29) + RF(43)
        *      + RB(45) + RF(52) + RF(55)
630      *      + RF(56) + RF(57) + RB(58)
        *      + RB(62) + RB(64) + RB(65)
C
C CH2(S)
634      ABV2 = RB(6) + RB(44) + RF(46)
        *      + RB(59) + RB(60) + RB(61)
636      *      + RB(63) + RB(66)
        DEN2 = RF(6) + RB(38) + RF(44)
638      *      + RB(46) + RF(58) + RF(59)
        *      + RF(60) + RF(61) + RF(62)
640      *      + RF(63) + RF(64) + RF(65)
        *      + RF(66)
C
C HCO
644      ABV3 = RB(10) + RB(11) + RF(12)
        *      + RF(15) + RB(32) + RB(33)
646      *      + RF(35) + RB(49) + RF(50)
        *      + RB(68) + RF(69) + RB(70)
648      *      + RB(71) + RB(72)
        DEN3 = RB(5) + RF(10) + RF(11)
650      *      + RB(12) + RB(15) + RF(32)
        *      + RF(33) + RB(35) + RF(49)
652      *      + RB(50) + RB(55) + RF(68)
        *      + RB(69) + RF(70) + RF(71)
654      *      + RF(72)
C
C CH2OH
656      ABV4 = RB(13) + RF(34) + RB(36)
658      *      + RB(37) + RB(51) + RB(73)
        DEN4 = RF(13) + RB(34) + RF(36)
660      *      + RF(37) + RF(38) + RF(51)
        *      + RF(73)
C
662      F1 = ABV1/DEN1
664      A12 = (RF(58)+RF(62)+RF(64)+RF(65))/DEN1
        A13 = (RB(5)+RB(55))/DEN1
C
666      F2 = ABV2/DEN2
668      A21 = (RB(58)+RB(62)+RB(64)+RB(65))/DEN2
        A24 = RF(38)/DEN2
C
670      F3 = ABV3/DEN3
672      A31 = (RF(5)+RF(55))/DEN3
C
674      F4 = ABV4/DEN4
        A42 = RB(38)/DEN4
C
676      TEMP = 1 - A13*A31
678      FF1 = (F1 + A13*F3)/TEMP
        AA12 = A12/TEMP

```

```

680 C
    TEMP = 1 - A24*A42
682 FF2 = (F2 + A24*F4)/TEMP
    AA21 = A21/TEMP
684 C
    XQ(1) = (FF1 + AA12*FF2)/(1 - AA12*AA21)
686 XQ(2) = FF2 + AA21*XQ(1)
    XQ(3) = F3 + A31*XQ(1)
688 XQ(4) = F4 + A42*XQ(2)
C
690 C
C
692 C update rates of reactions involving QSS species
C
694     RF(5) = RF(5) * XQ(1)
        RB(5) = RB(5) * XQ(3)
696     RF(6) = RF(6) * XQ(2)
        RF(10) = RF(10) * XQ(3)
698     RF(11) = RF(11) * XQ(3)
        RB(12) = RB(12) * XQ(3)
700     RF(13) = RF(13) * XQ(4)
        RB(15) = RB(15) * XQ(3)
702     RF(29) = RF(29) * XQ(1)
        RF(32) = RF(32) * XQ(3)
704     RF(33) = RF(33) * XQ(3)
        RB(34) = RB(34) * XQ(4)
706     RB(35) = RB(35) * XQ(3)
        RF(36) = RF(36) * XQ(4)
708     RF(37) = RF(37) * XQ(4)
        RF(38) = RF(38) * XQ(4)
710     RB(38) = RB(38) * XQ(2)
        RF(43) = RF(43) * XQ(1)
712     RF(44) = RF(44) * XQ(2)
        RB(45) = RB(45) * XQ(1)
714     RB(46) = RB(46) * XQ(2)
        RF(49) = RF(49) * XQ(3)
716     RB(50) = RB(50) * XQ(3)
        RF(51) = RF(51) * XQ(4)
718     RF(52) = RF(52) * XQ(1)
        RF(55) = RF(55) * XQ(1)
720     RB(55) = RB(55) * XQ(3)
        RF(56) = RF(56) * XQ(1)
722     RF(57) = RF(57) * XQ(1)
        RF(58) = RF(58) * XQ(2)
724     RB(58) = RB(58) * XQ(1)
        RF(59) = RF(59) * XQ(2)
726     RF(60) = RF(60) * XQ(2)
        RF(61) = RF(61) * XQ(2)
728     RF(62) = RF(62) * XQ(2)
        RB(62) = RB(62) * XQ(1)
730     RF(63) = RF(63) * XQ(2)
        RF(64) = RF(64) * XQ(2)
732     RB(64) = RB(64) * XQ(1)
        RF(65) = RF(65) * XQ(2)
734     RB(65) = RB(65) * XQ(1)
        RF(66) = RF(66) * XQ(2)
736     RF(68) = RF(68) * XQ(3)
        RB(69) = RB(69) * XQ(3)
738     RF(70) = RF(70) * XQ(3)
        RF(71) = RF(71) * XQ(3)
740     RF(72) = RF(72) * XQ(3)
        RF(73) = RF(73) * XQ(4)

```

```

742 C
C Compute WDOT
744 C
      DO I = 1, 73
746         ROP(I) = RF(I) - RB(I)
      ENDDO
748 C
C Combine duplicated reactions
750 C
      ROP(16) = ROP(16) + ROP(17) + ROP(18) + ROP(19)
752 ROP(21) = ROP(21) + ROP(22) + ROP(23) + ROP(24)
      ROP(58) = ROP(58) + ROP(62) + ROP(64) + ROP(65)
754 ROP(70) = ROP(70) + ROP(71)
C
756     WDOT(1) = -ROP(3) +ROP(6) +ROP(21) +ROP(27)
      *           +ROP(31) +ROP(33) +ROP(35) +ROP(36)
758     *           -ROP(39) -ROP(40) -ROP(56) -ROP(61)
      WDOT(2) = -ROP(2) +ROP(3) +ROP(5) +ROP(7)
760     *           +ROP(11) -ROP(16) -ROP(20) -ROP(21) -ROP(21)
      *           -ROP(25) -ROP(26) -ROP(27) -ROP(28)
762     *           -ROP(29) -ROP(30) -ROP(31) -ROP(32)
      *           -ROP(33) -ROP(34) -ROP(35) -ROP(36)
764     *           -ROP(37) -ROP(38) +ROP(40) +ROP(43)
      *           +ROP(44) +ROP(48) +ROP(56) +ROP(59)
766     *           +ROP(61) +ROP(70)
      WDOT(3) = -ROP(1) -ROP(1) -ROP(2) -ROP(3)
768     *           -ROP(4) -ROP(5) -ROP(6) -ROP(7)
      *           -ROP(8) -ROP(9) -ROP(10) -ROP(11)
770     *           -ROP(12) -ROP(13) +ROP(14) +ROP(20)
      *           +ROP(26) +ROP(41)
772     WDOT(4) = +ROP(1) +ROP(4) -ROP(14) -ROP(15)
      *           -ROP(16) -ROP(20) +ROP(27) +ROP(42)
774     *           +ROP(53) -ROP(55) -ROP(59) -ROP(60)
      *           -ROP(67) -ROP(72) -ROP(73)
776     WDOT(5) = +ROP(2) +ROP(3) +ROP(4) +ROP(8)
      *           +ROP(10) +ROP(12) +ROP(13) +ROP(20)
778     *           -ROP(25) +ROP(28) +ROP(28) +ROP(37)
      *           -ROP(40) -ROP(41) -ROP(41) -ROP(42)
780     *           -ROP(43) -ROP(44) -ROP(45) -ROP(46)
      *           -ROP(47) -ROP(48) -ROP(49) -ROP(50)
782     *           -ROP(51) +ROP(52) +ROP(54) +ROP(55)
      *           +ROP(59) +ROP(67)
784     WDOT(6) = +ROP(25) +ROP(26) +ROP(38) +ROP(40)
      *           +ROP(41) +ROP(42) +ROP(45) +ROP(46)
786     *           +ROP(47) +ROP(49) +ROP(50) +ROP(51)
      *           +ROP(60)
788     WDOT(7) = -ROP(4) +ROP(15) +ROP(16) -ROP(26)
      *           -ROP(27) -ROP(28) -ROP(42) -ROP(52)
790     *           -ROP(53) -ROP(54) +ROP(72) +ROP(73)
      WDOT(8) = -ROP(7) +ROP(8) +ROP(29) -ROP(30)
792     *           +ROP(31) +ROP(37) -ROP(45) -ROP(46)
      *           +ROP(47) -ROP(53) +ROP(56) +ROP(57) +ROP(57)
794     *           +ROP(61) +ROP(63) +ROP(63) -ROP(67)
      *           -ROP(68) -ROP(69)
796     WDOT(9) = -ROP(8) +ROP(30) -ROP(31) -ROP(47)
      *           +ROP(53) -ROP(57) -ROP(63) +ROP(68)
798     *           +ROP(69)
      WDOT(10) = +ROP(6) -ROP(9) +ROP(10) -ROP(14)
800     *           +ROP(33) -ROP(39) -ROP(48) +ROP(49)
      *           -ROP(54) +ROP(59) +ROP(60) +ROP(66)
802     *           +ROP(68) +ROP(70) +ROP(72)
      WDOT(11) = +ROP(9) +ROP(11) +ROP(14) +ROP(48)

```

```
804 *      +ROP(54) -ROP(66)
      WDOT(12) = +ROP(7) -ROP(12) +ROP(13) -ROP(15)
806 *      +ROP(32) -ROP(34) -ROP(35) +ROP(36)
      *      +ROP(39) +ROP(43) +ROP(44) -ROP(50)
808 *      +ROP(51) +ROP(52) +ROP(66) +ROP(67)
      *      -ROP(69) +ROP(73)
810 WDOT(13) = 0.0
C
812 RETURN
      END
```



ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Görkem ÖZTARLIK
Uyruğu : T.C.
Doğum Tarihi ve Yeri : 08/07/1987, Kadıköy
E-posta : gorkemoztarlik@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 2011, Yıldız Teknik Üniversitesi, Makine Fakültesi,
Makine Mühendisliği Bölümü
- **Yüksek Lisans** : 2016, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi,
Makina Mühendisliği Anabilim Dalı,
Makine Mühendisliği Burslu Yüksek Lisans Programı

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

Yıl	Yer	Görev
2012-2016	TUSAŞ Motor Sanayii A.Ş.	Aerodinamik Yanma Mühendisi
2016-	Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse	Araştırmacı Mühendis

YABANCI DİL: İngilizce, Fransızca

TEZDEN TÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER:

- Öztarlık, G., Uslu, S., Selle, L., Poinot, T., 2016 Effect of Hydrogen Enrichment on Combustion Properties of Methane/Air Flames, Proceedings of ISSA-2016: International Symposium on Sustainable Aviation, May 29-June 1, İstanbul, Turkey.

DİĞER YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER:

- Öztarlık, G., Tuncer, O., 2015 Computational study of turbulent spray combustion within the reverse flow combustor of a turboshaft engine, Proceedings of ICS-13: 13th International Combustion Symposium, September 09-15, Bursa, Turkey
- Varol, G., Sarıkaya G., Tuncer O., Öztarlık, G. "Emissions Prediction of a Reverse Flow Combustor Using Network Models." Sustainable Aviation: Energy and Environmental Issues. S.l.: Springer, 2016. 167-76. Print.

