

شبیه‌سازی تبخیر قطره مازوت با استفاده از ترمودینامیک پیوسته

حجت قاسمی

دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک-دانشگاه علم و صنعت ایران

h_ghassemi@iust.ac.ir

مریم عالی‌زاده

کارشناسی‌ارشد، مهندسی مکانیک-دانشگاه علم و صنعت ایران

mona.alizadeh1991@gmail.com

چکیده

در این مقاله تبخیر قطره‌ی مازوت با استفاده از مدلی مبتنی بر ترمودینامیک پیوسته شبیه‌سازی شده است. ترمودینامیک پیوسته از یک تابع توزیع چگالی احتمال برای توصیف ساختار سوخت استفاده می‌کند. معادلات انتقال گونه‌های شیمیایی برحسب پارامترهای تابع توزیع، توسعه داده شده و برای بخار سوخت، متوسط و ممان دوم توزیع نوشته شده‌اند. همچنین فرم ترمودینامیک پیوسته‌ی معادله‌ی انرژی و روابط محاسبه‌ی خواص فیزیکی برحسب متغیر توزیع انتخابی نیز توسعه داده شده‌اند. حل عددی این معادلات و معادلات بقای جرم و گونه‌ها در سطح قطره، تغییرات ساختار مایع با زمان و تغییرات ساختار بخار با زمان و مکان را توصیف می‌کند. بررسی این تغییرات نشان می‌دهد که با تبخیر قطره، فاز مایع و بخار پیوسته سنگین‌تر می‌شوند؛ چرا که اجزا به ترتیب فراریت تبخیر می‌شوند. همچنین مشاهده می‌شود که بیش‌تر حرارت منتقل شده به قطره در ابتدا صرف گرمایش آن می‌شود؛ پس از مدتی تبخیر شروع شده و با رسیدن قطره به دمای پایا، گرمایش متوقف می‌شود.

کلمات کلیدی: تبخیر، ترمودینامیک پیوسته، مازوت، قطره چندجزئی

مقدمه

در مهندسی، به‌ویژه در محفظه‌های احتراق و موتورهایی که مشتقات نفتی را می‌سوزانند اغلب با تبخیر قطره‌های مخلوط‌های مایع پیچیده که صدها و یا هزارها جزء دارند مواجهیم. مازوت نیز یکی از این مخلوط‌ها است که از پالایش نفت خام به دست می‌آید. مطالعات اولیه‌ی انجام‌شده در زمینه مدل‌سازی تبخیر، مخلوط را به‌صورت مجموعه‌ای از تعداد کمی جزء گسسته در نظر گرفته‌اند.

بیش‌تر کارهای انجام‌شده بر روی قطرات چندجزئی، متمرکز بر قطرات دوجزئی بوده و پژوهش‌های خیلی کمی به تبخیر قطره با بیش از دو جزء پرداخته‌اند. نیوبالد و آموندسان [۱] و تینینی و کسالی [۲] تبخیر قطره سه‌جزئی، ما و همکارانش تبخیر قطره شش‌جزئی [۳] و هالت و رایکارد [۴] تبخیر قطره‌ی هفت‌جزئی را بررسی کرده‌اند. همچنین فهمی کیفی از رفتار سوخت‌های نفتی تجاری با آزمایش‌های چن و الوکیل [۵]، برید و همکاران [۶]، نامورا و همکاران [۷]، قاسمی و همکاران [۸] و چاوو و همکاران [۹] به دست آمده است؛ لیکن مدلی عمومی برای تبخیر و احتراق مخلوط‌های پیچیده وجود ندارد.

یکی از راه‌های جایگزینی که در منابع برای مدل‌سازی تبخیر مخلوط‌هایی با تعداد زیادی جزء ارائه شده‌است ترمودینامیک پیوسته است. در این روش ساختار سوخت با استفاده از یک تابع توزیع چگالی احتمال ارائه می‌شود.

ایده‌ی استفاده از توابع پیوسته برای توصیف مخلوط‌های پیچیده به‌جای اجزای گسسته نخستین بار توسط کتز و برون [۱۰] در حدود ۸۰ سال پیش مطرح شد. این ایده برای مدتی طولانی مورد توجه قرار نگرفت اما نهایتاً افراد مختلفی با بهره‌گیری از متغیرهای توزیع متفاوت سعی در استفاده از آن کردند؛ مثلاً هافمن [۱۱]، پروسنیتز و کاترمن [۱۲]، کلن و

راتش [۱۳]، و هاینس و متیوز [۱۴] از نقطه‌ی جوش نرمال مخلوط به‌عنوان متغیر توزیع استفاده کردند. گالور [۱۵]، ویتسون [۱۶]، چو و پروسنیتز [۱۷]، بینگ و همکاران [۱۸] از جرم مولکولی بهره گرفتند و ویلمن و تجا [۱۹] تعداد کربن‌ها را برگزیدند. همه‌ی کاربردهای ترمودینامیک پیوسته‌ی پیش از کار تمیم و هالت [۲۰] در سال ۱۹۹۵ در شرایطی بوده‌اند که فرآیندهای انتقال (دیفیوژن و جابه‌جایی) مهم نبوده است؛ لذا آن‌ها مدل جدیدی با در نظر گرفتن جابه‌جایی (کانوکشن) و نفوذ (دیفیوژن) ارائه دادند. پس از آن‌ها لیپرت و رایتز [۲۱] با استفاده از توزیع‌های پیوسته تبخیر قطرات دیزل و بنزین را مدل کردند. تفاوت کار آن‌ها با کارهای پیشین این بود که از فرض یک‌بعدی بودن صرف‌نظر کردند. در سال ۲۰۰۵ عبدالقادر و هالت [۲۲] با استفاده از ترمودینامیک پیوسته، نقش اختلاط مایع در تبخیر مخلوط‌های چندجزئی پیچیده را بررسی کردند. در سال ۲۰۰۹ ویکرام گارنیا [۲۳] با استفاده از ترمودینامیک پیوسته احتراق افشانه‌ای سوخت‌های سنگین نفتی را مدل کرد. او سوخت سنگین نفتی را مجموعه‌ای از چهار جزء در نظر گرفت و برای هر جزء یک تابع توزیع مجزا در نظر گرفت. علاوه بر این‌ها از ترمودینامیک پیوسته برای مدل‌سازی تبخیر بیوفیول‌ها و بیودیزل نیز استفاده شده‌است [۲۴].

در این مقاله مدل ترمودینامیک پیوسته‌ی تمیم برای شبیه‌سازی تبخیر قطره مازوت به‌کارگرفته شده‌است. در گام اول معادلات حاکم بر مسئله‌ی تبخیر به فرم پیوسته برحسب تابع توزیع توصیف‌کننده‌ی ساختار سوخت نوشته شده و سپس به صورت عددی حل شده‌اند. دقت شود که به منظور به دست آوردن معادلات به فرم پیوسته روابط خواص مازوت برحسب متغیر توزیع توسعه داده شده‌اند. نتایج حاصل، ساختار فاز مایع و بخار در هر گام زمانی و ساختار فاز بخار را به نسبت فاصله‌ای که از سطح قطره دارد توصیف می‌کنند.

معادلات انتقالی فاز بخار

مسئله‌ی فیزیکی حل شده در این‌جا قطره‌ایست که به صورت ناگهانی در یک محیط گرم با دمای T_∞ قرار می‌گیرد و شروع به گرم شدن و تبخیر می‌کند. از واکنش شیمیایی صرف نظر شده‌است. وظیفه‌ی اصلی در ایجاد یک مدل ترمودینامیک پیوسته برای این فرآیند توصیف نفوذ بخار مخلوط در گاز محیط است. بدین منظور از معادلات زیر استفاده شده‌است [۲۰]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot cv^* = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(cy_F) + \nabla \cdot (cv^*y_F) = \nabla \cdot (c\bar{D}\nabla y_F) \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(cy_F\theta) + \nabla \cdot (cv^*y_F\theta) = \nabla \cdot (c\bar{D}\nabla(y_F\theta)) \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(cy_F\psi) + \nabla \cdot (cv^*y_F\psi) = \nabla \cdot (c\bar{D}\nabla(y_F\psi)) \quad (4)$$

$$\bar{c}_p \frac{\partial}{\partial t}(cT) + \bar{c}_p \nabla \cdot (cv^*.T) = [(a_c - c_{PA})c\bar{D}\nabla y_F + b_c\theta c\bar{D}\nabla y_F]\nabla T + \nabla \cdot \lambda \nabla T \quad (5)$$

که $\gamma = I$ مرجع، α و β پارامترهای کنترل کننده‌ی شکل و $\Gamma(\alpha)$ تابع گاماست. با استفاده از روابط فوق و فرم پیوسته‌ی قانون راولت، رابطه‌های زیر مابین پارامترهای توزیع در فازهای بخار و مایع حاصل شده است:

$$\theta - \gamma = \frac{(\theta_L - \gamma)}{1 + AB\sigma_L^2/(\theta_L - \gamma)} \quad (13)$$

$$\sigma^2 = \sigma_L^2 \left[\frac{\theta - \gamma}{\theta_L - \gamma} \right]^2 \quad (14)$$

گاما در هر دو فاز یکی است که بازتابنده‌ی این ایده است که جزء با کم‌ترین جرم مولکولی در هر دو فاز موجود است.

مازوت

جهت تعیین پارامترهای توزیع و روابط خواص مازوت برحسب متغیر توزیع از داده‌های تقطیر مازوت ارائه شده در جدول (۱) استفاده شده است؛ این داده‌ها از مرجع [۲۵] گرفته شده است.

جدول (۱) داده‌های تقطیر مازوت [۲۵]

وزن مخصوص	درصد حجمی (%)	جرم مولکولی	دمای جوش (K)
چندجزئی			
۰,۷۹۸۵	۴,۲۱	۱۲۸	۴۲۳
۰,۸۲۶۳	۱,۵۸	۲۱۳	۵۳۵
۰,۸۴۴۵	۱,۹۳	۲۳۳	۵۶۰
۰,۸۵۳۳	۲,۶۴	۲۵۷	۵۸۵
۰,۸۷۲۵	۳,۲۵	۲۷۹	۶۱۰
۰,۸۹۲۴	۶,۱۷	۳۰۸	۶۴۰
۰,۹۲۲۰	۸,۳۱	۳۴۴	۶۷۸
۰,۹۳۳۴	۶,۳۳	۳۸۰	۷۱۱
۰,۹۴۶۵	۶,۰۹	۴۰۷	۷۳۶
۰,۹۵۷۸	۵,۹۳	۴۳۴	۷۶۱
۰,۹۶۷۵	۸,۰۰	۴۶۷	۷۸۸
۰,۹۷۸۹	۸,۸۷	۵۰۵	۸۲۱
۰,۹۸۹۶	۷,۴۳	۵۴۷	۸۵۵
۱,۰۰۲۰	۶,۳۳	۵۸۶	۸۸۸
۱,۰۱۳۱	۵,۵۳	۶۲۰	۹۱۸
۱,۰۲۵۸	۵,۹۹	۶۶۰	۹۵۳
۱,۰۴۱۷	۵,۳۰	۷۱۰	۹۹۸
۱,۰۵۸۸	۳,۰۷	۷۶۴	۱۰۴۸
۱,۰۷۷۱	۳,۰۴	۸۱۹	۱۱۰۳

برای محاسبه‌ی α و β توزیع گامای مازوت مایع، دمای جوش و کسر حجمی‌های انباشتی ارائه شده در جدول بالا را در نظر گرفته و سپس مقادیر کسر حجمی‌های انباشتی متناظر با این دماها را با استفاده از تابع از پیش تعریف شده‌ی GAMMADIST در میکروسافت اکسل برای یک α و β ی فرضی محاسبه می‌کنیم. دو پارامتر α و β باید تا رسیدن به بهترین انطباق با داده‌های آزمایشگاهی تغییر داده شوند. میزان دقت انطباق با استفاده از ضریب تعیین (R^2) و خطای جذر میانگین مربعات (RMSE) که با معادلات زیر تعریف می‌شوند محاسبه می‌شود:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{act} - y_{pred})^2}{n}} \quad (15)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{act} - y_{pred})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{act} - \bar{y}_{act})^2} \quad (16)$$

معادله‌ی اول، معادله‌ی پیوستگی؛ معادلات دوم، سوم و چهارم به ترتیب شکل پیوسته‌ی معادلات انتقال گونه‌های شیمیایی برای بخار سوخت، متوسط و ممان دوم توزیع و معادله‌ی آخر فرم پیوسته‌ی معادله‌ی انرژی هستند. در این روابط c چگالی مولی (kmol/m^3)، v^* سرعت متوسط مولی (m/s)، y_F کسر مولی بخار سوخت، θ متوسط توزیع، ψ ممان دوم توزیع، C_{pA} ظرفیت حرارتی ویژه‌ی هوا، $\bar{D}$ نفوذپذیری متوسط، $\bar{C}_p$ گرمای ویژه‌ی مخلوط (kJ/kmol.K) و $a_C(T)$ و $b_C(T)$ چندجمله‌ای‌های موجود در رابطه‌ی ظرفیت حرارتی ویژه بخار برای مازوت هستند که روابط مربوط به محاسبه‌ی هر کدام از این پارامترها و شرایط مرزی و اولیه حل در مرجع [۲۰] آمده است.

بالانس‌های فاز مایع

فاز مایع کاملاً مخلوط در نظر گرفته شده است؛ چرا که اختلافات با حالت کاملاً مخلوط اغلب در شرایطی که تنها دو جزء با نقاط جوش بسیار متفاوت در مخلوط موجود باشند مشاهده می‌شود و برای مخلوط‌هایی که اجزایی با نقاط جوش مشابه دارند این اختلافات خیلی کم اهمیت‌تر هستند. با این فرض جریان همرفتی خیلی سریع‌تر از پخش حرارتی در مایع روی می‌دهد و لذا دما و غلظت مایع یک‌نواخت هستند.

با نوشتن بالانس‌های مولی و حرارتی در سطح قطره رابطه پس‌روی سطح، پارامترهای توزیع فاز مایع و گرمایش سطح به صورت زیر به دست می‌آید [۲۰].

$$N(1 - y_{FR}) = -c\bar{D} \frac{\partial y_F}{\partial r} \Big|_R \quad (6)$$

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{1}{C_L} \left(N + \frac{R}{3} \frac{dC_L}{dt} \right) \quad (7)$$

$$\frac{d\theta_L}{dt} = \frac{3}{C_L R} [N(\theta_L - y_F \theta) + c\bar{D} \frac{\partial}{\partial r} (y_F \theta)] \Big|_R \quad (8)$$

$$\frac{d\psi_L}{dt} = \frac{3}{C_L R} \left[N(\psi_L - y_F \psi) + c\bar{D} \frac{\partial}{\partial r} (y_F \psi) \right] \Big|_R \quad (9)$$

$$\frac{dT_L}{dt} = \frac{3}{C_{PL} C_L R} (q - N h_{fg}) \quad (10)$$

در این روابط N شار مولی تبخیرشونده، R شعاع قطره و q شار حرارتی روی سطح قطره از طریق جابه‌جایی و تابش، C_{PL} گرمای ویژه‌ی مازوت مایع، h_{fg} آنالپی تبخیر آن و $\bar{D}$ و $\bar{D}$ نفوذپذیری‌های متوسط دوم و سوم هستند. زیرنویس‌های L و R به ترتیب نشان‌دهنده‌ی فاز مایع و سطح قطره هستند.

تعادل بخار-مایع

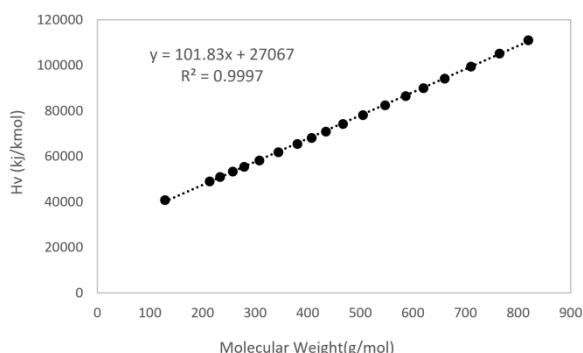
محلول مایع و مخلوط بخار حاصل از آن ایده‌آل فرض شده است. در ای حالت فشار بخار از معادله‌ی کلازیوس-کلاپیرون به صورت زیر به دست می‌آید [۲۰]:

$$P_V(I) = P_{ATM} \exp [A(1 - BI)] \quad (11)$$

$$A = \frac{S_{fg}}{R} \left(1 - \frac{a_B}{T} \right)$$

$$B = \frac{b_B}{T - a_B}$$

در این رابطه با استفاده از قانون تروتن، $S_{fg} = ۸۷/۹$ (kJ/kmol.K) است. a_B و b_B ضرایب موجود در رابطه‌ی دمای جوش و I متغیر توزیع هستند تابع توزیع گاما به همراه جرم مولکولی به عنوان متغیر توزیع برای هر دو فاز بخار و مایع انتخاب شده است. این تابع با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود [۲۰]:



شکل (۳) نمودار تغییرات آنتالپی تبخیر با جرم مولکولی

$$\Delta H_{vap} = A_H + B_H I \Rightarrow \quad (18)$$

$$\Delta H_{vap} = 27067 + 101.83I$$

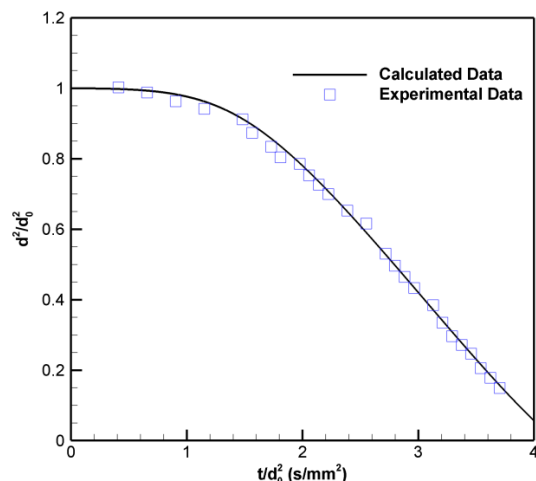
برای تعیین سایر خواص از روابط بیان شده در جدول (۲) استفاده شده است.

جدول (۲) روابط خواص استفاده شده [۲۵]

خواص	رابطه استفاده شده
چگالی مایع	رابطه اصلاح شده راکت
هدایت حرارتی مازوت	رابطه ساتو و ریدل
هدایت حرارتی فاز بخار	رابطه میسون و ساکسنا
دیفیوزیویته	رابطه چاپمن انسکاگ
فشار بخار	رابطه ریدل
ظرفیت حرارتی مایع	رابطه لی-کسلر
ظرفیت حرارتی فاز بخار	رابطه لی-کسلر

نتایج و بحث

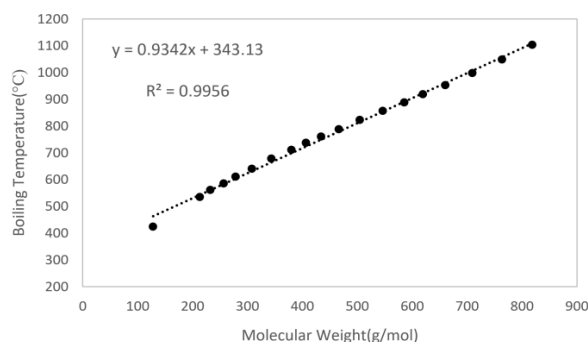
به منظور بررسی صحت مدل به کار گرفته شده، نمودار مربوط به تغییرات مربع قطر بی‌بعدشده قطره دیزلی به قطر اولیه ۰/۹ میلی‌متر و دمای اولیه ۲۹۸ کلوین که در محیطی با دمای ۸۲۳ کلوین قرار دارد رسم شده است؛ که در این حالت پارامترهای توزیع دیزل با استفاده از منحنی تقطیر ارائه شده توسط کالینو [۲۶] به دست آمده است. سپس این نمودار با نمودار حاصل از تبخیر قطره‌ای دیزل در همین شرایط در آزمایشگاه [۳] مقایسه شده و صحت مدل به کار گرفته شده تایید شده است.



شکل (۴) مقایسه‌ی مقادیر محاسبه شده با استفاده از مدل ترمودینامیک پیوسته

$$f(I) = \frac{(I - \gamma)^{\alpha-1}}{\beta^{\alpha} \Gamma(\alpha)} \exp \left[-\left(\frac{I - \gamma}{\beta} \right) \right] \quad (12)$$

که در آن γ_{act} مقدار واقعی (آزمایشگاهی)، γ_{pred} مقدار پیش‌بینی شده از مدل، $\bar{\gamma}_{act}$ متوسط مقادیر واقعی و n تعداد نقاط هستند. برای تعیین رابطه‌ی بین جرم مولکولی و دمای جوش مازوت، نقاط موجود در جدول را مطابق زیر در نموداری رسم کرده و با توجه به رویه‌ی آن‌ها، بهترین رابطه‌ی منطبق‌شونده بر نقاط را تعیین می‌کنیم.



شکل (۱) نمودار تغییرات دمای جوش مازوت برحسب جرم مولکولی

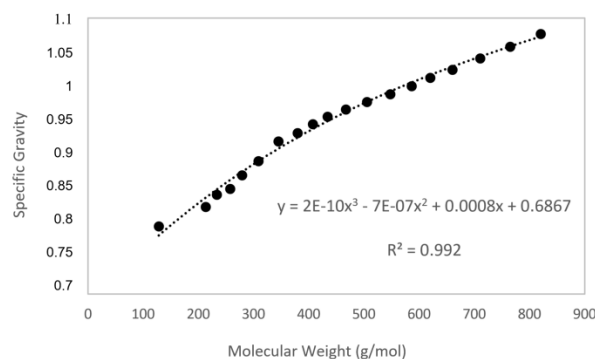
داریم:

$$T_B = a_B + b_B I \quad (17)$$

$$a_B = 3.4313E02$$

$$b_B = 0.9342$$

برای تعیین رابطه‌ی بین جرم مولکولی و وزن مخصوص نیز از روش فوق استفاده می‌کنیم که حاصل آن رابطه‌ی (۱۸) می‌باشد.



شکل (۲) نمودار تغییرات وزن مخصوص برحسب جرم مولکولی

$$SC = B0 + B1 * \theta_L + B2 * \theta_L^2 + B3 * \theta_L^3 \quad (18)$$

$$B0 = 0.6867$$

$$B1 = 8.0E - 04$$

$$B2 = -7.0E - 07$$

$$B3 = 2.0E - 10$$

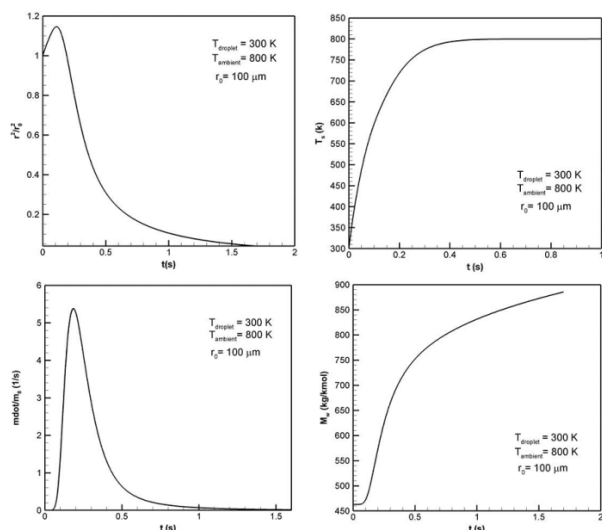
برای تعیین آنتالپی تبخیر در دمای جوش نرمال رابطه زیر استفاده شده است [۲۵]:

$$\Delta H_{vap}^{nbp} = 37.32315 T_b^{1.14086} SG^{9.77089 \times 10^{-3}} \quad (19)$$

مقدار آنتالپی تبخیر را با استفاده از رابطه‌ی فوق در نقاط موجود در جدول (۱) به دست آورده و مجموعه نقاط با طولی برابر جرم مولکولی و عرضی برابر آنتالپی تبخیر را رسم می‌کنیم. سپس معادله خط گذرنده از این مجموعه نقاط را تعیین می‌کنیم که همان رابطه‌ی مورد نظر ماست. به‌منظور شبیه‌سازی تبخیر قطره مازوت با استفاده از مدل بیان‌شده توزیع

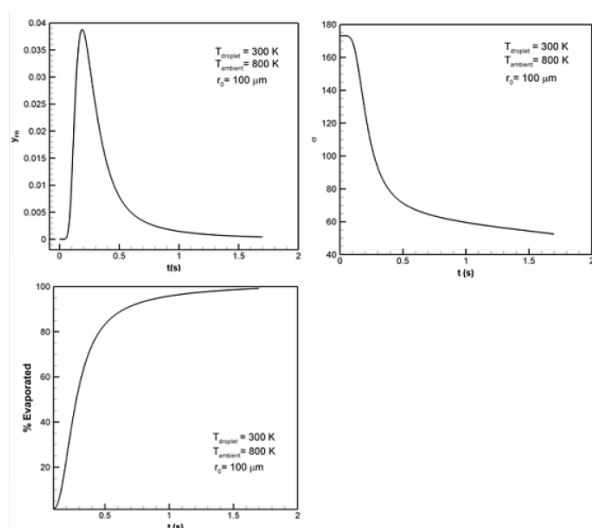
برای دیزل با داده‌های آزمایشگاهی ما و همکارانش [۳]

می‌گذارند و در نهایت با توجه به شکل تقریباً متقارن توزیع، این روند به صورت معکوس تکرار می‌شود. باید توجه داشت که اضافه شدن اجزای جدا شده از فاز مایع به فاز بخار موجب افزایش پیوسته‌ی جرم مولکولی متوسط فاز بخار نیز می‌شود.



شکل (۶) تغییرات خواص فاز مایع در طول عمر قطره از بالا سمت چپ؛ نرخ تبخیر، سمت راست؛ نسبت شعاع به شعاع اولیه، پایین سمت چپ؛ دمای سطح و پایین سمت راست، جرم مولکولی متوسط

با توجه به شکل (۷)، با پیش رفتن تبخیر مقادیر پایینی توزیع (جرم مولکولی‌های پایینی) حذف می‌شوند و لذا واریانس (عرض توزیع) با گذر زمان کاهش می‌یابد. هر چه نرخ تبخیر بالا می‌رود بخار سوخت بیش‌تری در سطح قطره ایجاد می‌شود. پس از مدتی که نرخ تبخیر دچار سیر نزولی می‌شود کسر مولی بخار نیز کاهش می‌یابد.



شکل (۷) تغییرات خواص مایع در طول عمر قطره از بالا سمت چپ؛ کسر مولی سوخت در سطح قطره، سمت راست؛ تغییرات واریانس، و پایین سمت چپ؛ درصد سوخت تبخیر شده

شکل (۸)، تغییرات نمودارهای خواص فاز مایع در طول عمر قطره با افزایش دمای محیط را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، با

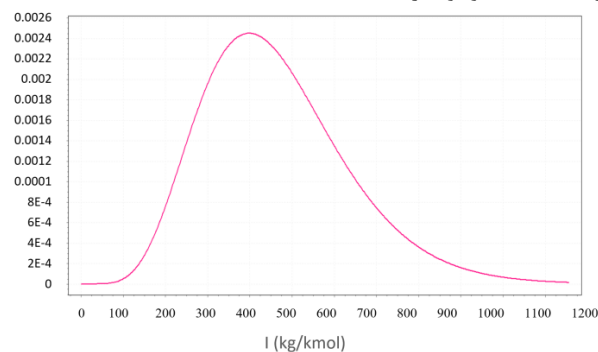
متناظر با مازوت مشخص شده‌است. پارامترهای توزیع انتخابی برای ساختار مایع اولیه عبارتند از:

$$\alpha = 7/15$$

$$\beta = 64/29967, \sigma^2 = 463 \Rightarrow \theta = 74$$

$$\gamma = .$$

این توزیع در شکل (۵) نشان داده شده‌است. پارامترهای توزیع مازوت به گونه‌ای محاسبه شده‌اند که داده‌هایی که تولید می‌کنند بیش‌ترین نزدیکی را به داده‌های موجود در داشته باشند.



شکل (۵) توزیع محاسبه شده برای مازوت

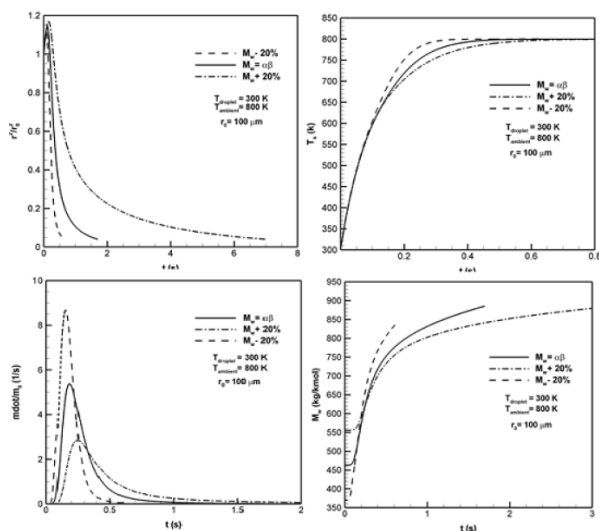
شکل (۶) و (۷) تغییرات خواص مختلف فاز مایع در طول عمر قطره را نشان می‌دهد. قطر قطره‌ی اولیه ۱۰۰ میکرومتر، دمای سطح آن ۳۰۰ K و دمای محیط ۸۰۰ K در نظر گرفته شده‌است.

با توجه به شکل (۶)، بیش‌تر حرارت جذب شده در ابتدا صرف بالا رفتن دمای قطره می‌شود و لذا نرخ تبخیر پایینی است. به‌مرور که اجزا به دمای جوش‌شان می‌رسند، نرخ تبخیر افزایش می‌یابد و پس از گذشت مدتی که اجزای سبک تبخیر شوند سیر نزولی پیدا می‌کند. مادامی که نرخ تبخیر از نرخ انبساط گرمایی کم‌تر است قطر قطره زیاد می‌شود و سپس با افزایش نرخ تبخیر قطر قطره شروع به کاهش می‌کند تا کل آن تبخیر شود. اجزایی که دمای جوش پایین‌تری دارند (اجزای فرارتر) با سرعت بیش‌تری تبخیر می‌شوند و لذا تغییرات قطر قطره در ابتدا تندتر است. پس از تبخیر شدن اجزای سبک مدت زمامت بیش‌تری طول می‌کشد تا اجزای سنگین تبخیر شوند و لذا شیب تغییرات قطر در ادامه کندتر می‌شود.

همان‌طور که بیان شد از ابتدای عمر قطره‌ی مازوت تا رسیدن دمای مایع به دمای جوش سبک‌ترین جزء سوخت تنها گرمایش انجم می‌شود. پس از این مرحله تبخیر شروع می‌شود و گرما صرف دو فرآیند تبخیر و گرمایش به‌طور همزمان می‌شود. در این حالت دمای سطح قطره پیوسته افزایش می‌یابد تا دمایی برابر با دمای محیط حاصل شود. در این شرایط همه‌ی اجزای سبک تبخیر شده‌اند و گرمای رسیده به قطره تنها صرف تامین گرمای نهان تبخیر اجزای سنگین آن می‌شود.

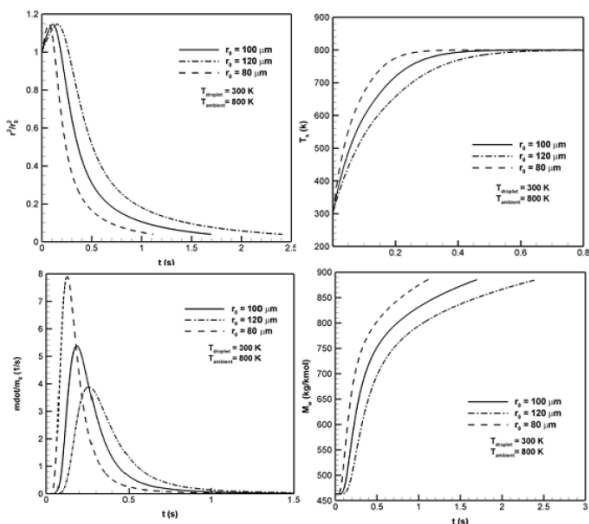
تغییرات جرم مولکولی متوسط مایع در تمام مدت عمر قطره روندی افزایشی دارد. دلیل این مطلب این است که با تبخیر پیوسته‌ی اجزای سبک، تنها اجزای سنگین باقی می‌مانند که جرم مولکولی بالایی دارند؛ البته این افزایش ابتدا نرخ کندی دارد، به مرور تند می‌شود و سپس دوباره کند می‌شود. دلیل این مطلب این است که در ابتدا اجزایی با پایین‌ترین جرم مولکولی که با توجه به توزیع، چگالی کمی دارند تبخیر می‌شوند. به مرور اجزایی تبخیر می‌شوند که چگالی بیش‌تری دارند و لذا تاثیر بیش‌تری بر جرم مولکولی کل

که به ازای میزان یکسان افزایش و کاهش جرم مولکولی، تاثیر افزایش بر روی طول عمر قطره خیلی بیش تر است. دلیل این مسئله وجود اجزای با دمای جوشی بسیار بیش تر از ۸۰۰ K در سوخت سنگین تر دانست که با رسیدن سطح به دمای ۸۰۰ K هم چنان باید گرما بگیرند تا تبخیر شوند. با سنگین تر شدن سوخت شار مولی تبخیرشونده کاهش محسوسی یافته است. هم چنین هر چه جرم مولکولی متوسط اولیه بیش تر شده مقادیر متوسط جرم مولکولی در انتها نیز به مقادیر بیش تری نیل می کند.



شکل (۹) مقایسه‌ی نمودارهای خواص فاز مایع در طول عمر قطره به ازای افزایش کاهش جرم مولکولی متوسط اولیه

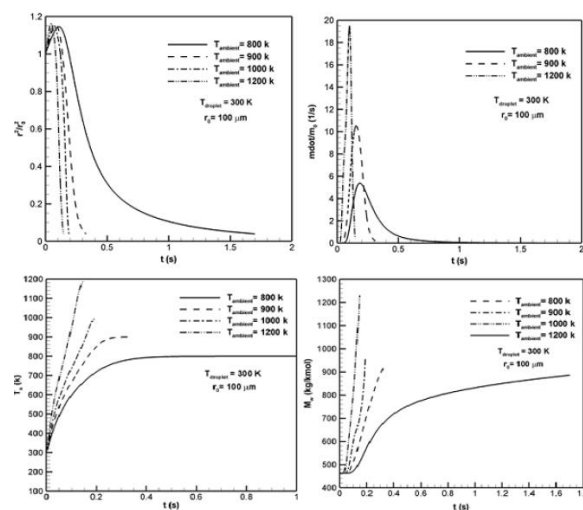
شکل (۱۰)، تاثیر تغییر اندازه‌ی قطر اولیه‌ی قطره را نشان می دهد. به طور کلی اندازه‌ی قطره به عواملی از جمله لزجت و کشش سطحی سوخت، سطح سوراخ نازل، فشار پاشش و .. بستگی دارد. لزجت و کشش سطحی بالاتر سوخت های سنگینی نظیر مازوت سبب می شوند که عموماً قطرات بزرگ تری داشته باشند.



شکل (۱۰) مقایسه‌ی نمودارهای تغییرات خواص فاز مایع در طول عمر قطره با تغییر قطر اولیه‌ی قطره

روند کلی تغییرات در هر سه حالت یکسان است؛ ولیکن نرخ تبخیر قطره‌ی کوچک تر بزرگ تر است و همین امر موجب تغییرات سریع تر شعاع، دمای سطح و جرم مولکولی متوسط در آن شده است. این مسئله در تئوری

افزایش دمای محیط عمر قطره کاهش می یابد؛ لیکن روند کلی تغییرات خواص در دماهای مختلف مشابه است.



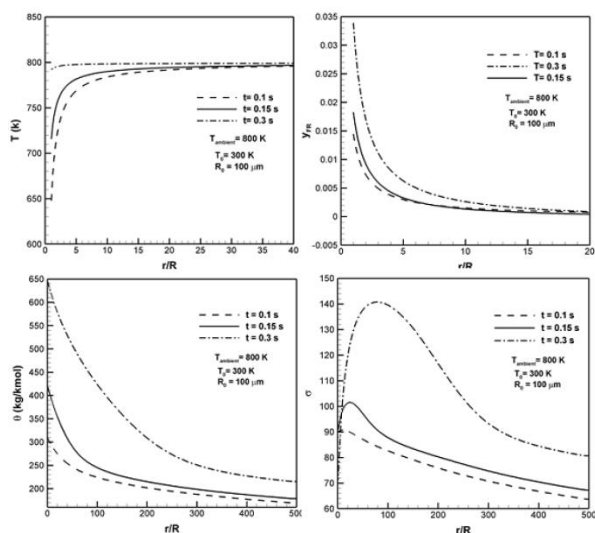
شکل (۸) مقایسه‌ی تغییرات خواص فاز مایع در طول عمر قطره به ازای دمای محیط مختلف

تغییر در طول عمر قطره، در دماهای پایین تر بیش تر است؛ برای مثال وقتی از ۸۰۰ K به ۹۰۰ K می رویم عمر قطره حدود ۱/۳ ثانیه کوتاه می شود در حالی که با تغییر دمای محیط از ۱۱۰۰ K به ۱۲۰۰ K عمر قطره تنها ۰/۲ ثانیه کاهش می یابد. دلیل این مطلب را می توان در دمای جوش اجزای مختلف مازوت و توزیع در نظر گرفته شده برای اجزا جست وجو کرد. مطابق با منحنی توزیع جرم مولکولی، تعداد بیش تری از اجزا دمای جوشی بین ۸۰۰-۹۰۰ K دارند و لذا وقتی از ۸۰۰ K به ۹۰۰ K می رویم دمای محیط را به بالاتر از دمای جوش تعداد بیشتری از اجزا افزایش داده ایم و در نتیجه تغییرات شدیدتر خواهند بود. با افزایش دمای محیط، نرخ تبخیر نیز افزایش می یابد؛ چراکه حرارت منتقل شده به قطره در زمان یکسان، بیش تر خواهد شد و بنابراین نرخ تبخیر در زمان کوتاه تر به مقدار بیش تری می رسد. مشاهده می شود که تغییرات ناشی از افزایش دمای محیط در دماهای پایین تر شدیدتر است؛ به طوری که اگر دمای محیط را از ۸۰۰ K به ۹۰۰ K افزایش دهیم، نرخ تبخیر دو برابر می شود در صورتی که با افزایش دما تا ۱۲۰۰ K نرخ تبخیر تنها ۴ برابر می شود.

نمودار تغییرات دمای سطح در دماهای مختلف محیط نشان می دهد که در دماهای بالا که شیب تغییرات بسیار تند است ناحیه‌ی شبه پایا حذف شده و تمام فرآیند تبخیر به صورت گذرا انجام می شود. دلیل این مسئله آن است که در دماهای بالاتر همه‌ی اجزا هم زمان با گرمایش به دمای جوش خود می رسند و تبخیر می شوند. هم چنین مشاهده می شود که هر چه دما بیش تر می شود سرعت افزایش متوسط جرم مولکولی نیز افزایش می یابد ولی مقدار نهایی این کمیت افزایش اندکی دارد. در حالتی که دمای محیط از دمای جوش همه‌ی اجزا بیش تر شده مقدار نهایی جرم مولکولی متوسط افزایش چشم گیری داشته است.

شکل (۹) نشان می دهد که اگر جرم مولکولی متوسط سوخت را بیش تر یا کم تر در نظر بگیریم چه تغییراتی در فرآیند تبخیر سوخت حاصل می شود. مشاهده می شود که به ازای افزایش جرم مولکولی (سنگین تر شدن سوخت) تبخیر آن مدت زمان بیش تری طول می کشد و وقتی سوخت را سبک تر فرض می کنیم، طول عمر قطره کاهش می یابد. اما باید توجه داشته باشیم

نقاط دور از سطح افزایش می‌یابد. همان‌طور که در نمودار مشخص است با گذر زمان از شیب نمودار کسر مولی نسبت به شعاع کاسته می‌شود. تغییرات جرم مولکولی متوسط بخار سوخت در فواصل مختلف از سطح قطره با گذر زمان نشان می‌دهد که هر چه زمان می‌گذرد تبخیر سوخت مایع و پخش شدن بخار سوخت تبخیر شده موجب افزایش جرم مولکولی بخار سوخت در فواصل دورتر از سطح قطره می‌شود.



شکل (۱۱) تغییرات خواص فاز بخار با زمان در فاصله‌های مختلف از سطح؛ بالا سمت چپ: دمای سطح، بالا سمت راست: کسر مولی فاز بخار، پایین سمت چپ: جرم مولکولی متوسط و پایین سمت راست: انحراف استاندارد.

تغییرات واریانس توزیع بخار سوخت در فواصل مختلف از سطح قطره با گذر زمان نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که هر چه زمان می‌گذرد واریانس در ابتدا یک سیر صعودی پیدا می‌کند. دلیل این مسئله آن است که بر اثر اختلاط توزیع‌ها در شعاع‌های متفاوت از طریق دیفیوژن، توزیع همان‌طور که به سمت محیط پخش می‌شود وسیع می‌گردد. در فواصل دور از سطح قطره که در آن غلظت سوخت به مقادیر ناچیزی می‌رسد، این اثر ناپدید می‌شود. آن‌چه مسلم است این است که ساختار سوخت تغییرات چشم‌گیری در فواصل مختلف دارد.

نتیجه‌گیری

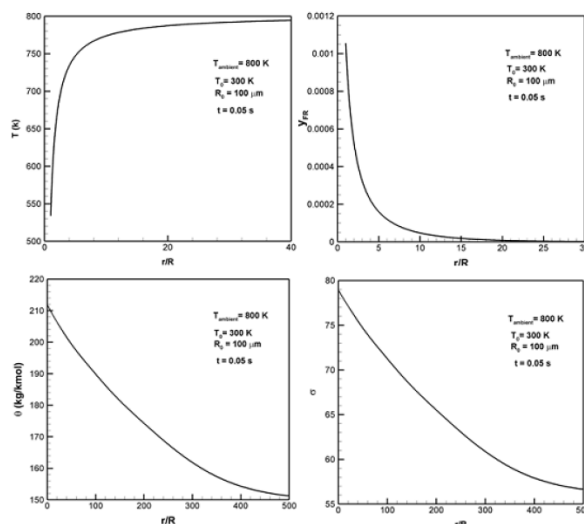
ترمودینامیک پیوسته روش مفیدی برای ارائه‌ی ساختار سوخت‌های با تعداد جزء زیاد مانند مازوت است که با استفاده از آن به‌جای حل تعداد بسیار زیادی معادله برای همه‌ی گونه‌ها معادله‌ی پیوستگی، سه معادله برای انتقال گونه‌ها و معادله‌ی انرژی حل می‌شود و بنابراین زمان موردنیاز برای محاسبات به‌مقدار زیادی کاهش می‌یابد. نتایج بررسی تبخیر مازوت با مدلی که از ترمودینامیک پیوسته استفاده می‌کند نشان می‌دهد که تبخیر اجزای قطره به‌ترتیب فراربت روی می‌دهد. نرخ تبخیر در ابتدا کم است و بیش‌تر حرارت رسیده به قطره در ابتدا صرف گرمایش می‌شود. به مرور تبخیر شروع می‌شود و پس از تبخیر اجزای سبک و رسیدن به شرایط پایا گرمایش متوقف شده و کل حرارت صرف تبخیر می‌ود.

برای فاز گاز مطابق مدل، ساختار متفاوتی در زمان و مکان‌های مختلف به‌دست آمد که دلیل این مسئله دیفیوژن بخار سوخت حین تبخیر قطره است.

3- Ma, X., Zhang, F., Han, K., Yang, B., and Song, G.,

کلاسیک قطره نیز بیان شده است؛ بدین صورت که شار جرمی تبخیرشونده برحسب (kg/m^2s) متناسب با $(1/R)$ است و لذا قطرات بزرگ‌تر شار جرمی کم‌تر و حرارت بیش‌تری برای گرمایش دارند.

حال تغییرات دما، کسر مولی، جرم مولکولی متوسط و واریانس فاز گاز از روی سطح قطره تا فاصله‌ی ۵۰۰ برابری شعاع (بی‌نهایت) بررسی می‌شود. از آن جایی که خواص فاز گاز به زمان نیز وابسته هستند بررسی پس از گذشت $t = 0.5$ انجام شده است.



شکل (۱۰) تغییرات خواص فاز بخار با فاصله از سطح قطره؛ سمت چپ بالا: تغییرات دمای سطح، سمت چپ پایین: جرم مولکولی متوسط، سمت راست بالا: کسر مولی بخار سوخت، سمت راست پایین: انحراف استاندارد.

شکل (۱۰) نتایج این بررسی را نشان می‌دهد. تغییرات شدید دما و کسر مولی در فاصله‌ای خیلی نزدیک به سطح قطره روی می‌دهد، پس از عبور از این فاصله شیب تغییرات خیلی کند می‌شود و از جایی حدود ۱۵۰ برابری شعاع به بعد، دیگر تغییری مشاهده نمی‌شود. بدیهی است که در این فاصله دما از دمای سطح قطره تا دمای محیط افزایش می‌یابد؛ حال آن‌که کسر مولی از میزان کسر مولی سوخت محاسبه شده در سطح قطره تا میزان آن در محیط کاهش پیدا می‌کند.

در مورد جرم مولکولی و واریانس تغییرات تدریجی‌تر هستند. جرم مولکولی بخار از روی سطح قطره که بیش‌ترین بخار سوخت در آن وجود دارد تا فاصله‌ای دور از سطح قطره کاهش می‌یابد. دلیل این مسئله کاهش مقدار بخار سوخت موجود با افزایش فاصله از سطح قطره است. واریانس فاز بخار نیز با افزایش فاصله از سطح قطره کاهش می‌یابد. دلیل این مسئله غلظت ناچیز سوخت دور از سطح قطره است.

تغییرات این خواص با زمان نیز بررسی شده است. بدین منظور نمودار تغییرات ساختار فاز بخار در لحظات $t = 0.1$ S, $t = 0.15$ S, و $t = 0.3$ S در مکان‌های مختلف رسم شده است.

بنا بر شکل (۱۱) تغییرات دما در زمان‌های مختلف هم‌چنان در نزدیکی سطح قطره متمرکز است. هر چه زمان می‌گذرد دما در سطح قطره بیش‌تر شده و لذا شیب نمودار کم‌تر می‌شود تا در نهایت دمای سطح با دمای محیط برابر شود.

نمودار کسر مولی بخار سوخت موجود در سطح قطره نیز موید تغییرات متمرکز در نزدیکی سطح قطره است، اگرچه هر چه زمان می‌گذرد بخار موجود در سطح قطره از طریق دیفیوژن پخش می‌شود و کسر مولی بخار

فهرست علائم

A	مساحت سطح قطره، m^2
c	چگالی مولی بخار، $kmol/m^3$
c_L	چگالی مولی مایع، $kmol/m^3$
$\bar{C}_p$	گرمای ویژه مخلوط، $kJ/kmolK$
$\bar{D}, \tilde{D}, \hat{D}$	ضریب نفوذهای متوسط، m^2/s
f(I)	تابع چگالی احتمال
h_{fg}	آنتالپی تبخیر، $kJ/kmol$
I	پارامتر توزیع
N	شار مولی از قطره، $kmol/m^2s$
P_v	فشار بخار، kPa
q	شار حرارتی به سطح قطره از طریق هدایت و تشعشع، W/m^2
r	موقعیت شعاعی، m
R	شعاع قطره، m
S_{fg}	آنتروپی تبخیر، $kJ/kmolK$
t	زمان، s
T	دما، K
T_B	دمای جوش، K
V^*	سرعت متوسط مولی، m/s
y_f	کسر مولی بخار

فهرست علائم یونانی

α, β	پارامترهای توزیع گاما
γ	مبدأ توزیع
Γ	تابع گاما
λ	هدایت حرارتی، W/mK
θ, θ_L	میانگین جرم‌های مولکولی توزیع به ترتیب در فاز بخار و مایع
ρ_L	چگالی جرمی مایع، kg/m^3
σ, σ_L	انحراف استاندارد توزیع به ترتیب برای فاز بخار و مایع
$\psi = \theta^2 + \sigma^2$	ممان دوم حول مبدأ تابع چگالی (فاز بخار)
ψ_L	ممان دوم حول مبدأ تابع چگالی (فاز مایع)

زیرنویس‌ها

A	هوا
F	سوخت
L	مایع
R	سطح قطره
∞	شرایط محیط

مراجع

- 1- Newbold, F. R., Amundson, N. R., 1973, "A model for evaporation of a multicomponent droplet", *AIChE J.*, **19**, 22–30.
- 2- Tonini, S., Cossali, G. E., 2012, "An analytical model of liquid drop evaporation in gaseous environment", *International Journal of Thermal Sciences*, **57**, 45–53.

2015, "Evaporation characteristics of acetone–butanol–ethanol and diesel blends droplets at high ambient temperatures", *Fuel*, **160**, 43-49.

4- Hallett, W. L. H., Ricard, M. A., 1992, "Calculations of the Auto-Ignition of Liquid Hydrocarbon Mixtures as Single Droplets", *Fuel*, **71**(2), 225-229.

5- Chen, C. S., El-Wakil M. M., 1969, "Experimental and Theoretical Studies of Burning Drops of Hydrocarbon Mixtures", *Proceedings for Instrumentation and Mechanical Engineers*, **184**(Pt. 3J), 95-108.

6- Braide K. M., Isles, G. L., Jordan, J. B., Williams, A., 1979, "The combustion of single droplets of some fuel oils and alternative liquid fuel combinations", *Energy*, **52**, 115-124.

7- Nomura, H., Ujiie, Y., Rath, H. J., Sato J. I., Kono, M., 1996, "Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions", *Proceedings of the Combustion Institute*, **26**, 1267-1273.

8- Ghassemi, H., Baek, S. W., Khan, Q. S., 2006, "Experimental study on binary droplet evaporation at elevated pressures and temperatures", *Combustion science and technology*, **178**, 1031-1053.

9- Chauveau, C., Halter, F., Lalonde, A., Gokalp, I., 2008, "An experimental study on the droplet vaporization: effects of heat conduction through the support fiber", *Proceedings of 22nd Annual Conference, Lake Como, Italy*.

10- Katz, D.L., Brown, G. G., 1933, "Vapor pressure and vaporization of petroleum fractions", *Ind. Eng. Chem.*, **25**(12), 1373-1384.

11- Hoffman, E.J., 1968, "Flash calculations for petroleum fractions", *Chemical Engineering Science*, **23**(9), 957-964.

12- Prausnitz, J. M., Cotterman, R. L., 1990, "Application of continuous thermodynamics to natural gas mixtures", *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **45**(5), 633-643.

13- Kehlen, H., Ratzsch, M.T., 1987, "Complex multicomponent distillation calculations by Continuous Thermodynamics. *Chemical Engineering science*, **42**(2), 221-232.

14- Haynes, W. H., Matthews, A. M., 1991, "Continuous-mixture vapor-liquid equilibria computations based on true boiling point distillation", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **30**, 1911-1915.

15- Gal-Or, B., Cullinan, H. T. and Galli, R., 1975, "New thermodynamic transport theory for systems with continuous component density distributions", *Chem. Engng Sci.*, **30**, 1085-1092.

16- Whitson, C. H., 1983, "Characterizing hydrocarbon plus fractions", *Soc. Pet. Engng*, **23**, 683-694.

17- Chou, G. F., Prausnitz, J. M., 1986, "Adiabatic flash calculations for continuous or semicontinuous mixtures using an equation of state", *Fluid Phase Equilibria*, **30**, 75-82.

18- Ying, X., Ye, R., and Hu, Y., 1989, "Phase Equilibria for Complex Mixtures. Continuous Thermodynamics Method Based on Spline Fit", *Fluid Phase Equilibria*, **53**, 407-414.

- 19- Willman, B., Teja, A. S., 1987, "Prediction of dew points of semi-continuous natural gas and petroleum mixtures, Industrial & engineering chemistry research, **26**(5), 948-952.
 - 20- Tamim, J., Hallett, W. L., 1995, "A continuous thermodynamics model for multicomponent droplet vaporization". Chemical Engineering Science, **50**(18), 2933-2942.
 - 21- Lippert, A. M., Reitz, R. D., 1997, "Modeling of multicomponent fuels using continuous distributions with application to droplet evaporation and sprays", SAE Technical Paper, No. 972882.
 - 22- Abdel-Qader, Z., Hallett, W. L., 2005, "The role of liquid mixing in evaporation of complex multicomponent mixtures: modelling using continuous thermodynamics", Chemical Engineering Science, **60**(6), 1629-1640.
 - 23- Garaniya, V. B., 2009, "Modelling of heavy fuel oil spray combustion using continuous thermodynamics", Doctoral dissertation, University of Tasmania.
 - 24- Hallett, W. L. H., Legault, N. V., 2011, "Modelling biodiesel droplet evaporation using continuous thermodynamics", Fuel, **90**(3), 1221-1228.
- ۲۵- رسول شاهسون مارکده، ۱۳۹۶، "مدل سازی گاز سازی قطره سوخت های سنگین نفتی، پایان نامه دکتری، دانشگاه علم و صنعت
- 26- Kallio, N. N., Moyes, B. W., Webster, G. D., & Whyte, R. B., 1985, "Effect of Low Cetane Fuels on Diesel Engine Performance 2-Combustion Performance of a Detroit Diesel 3-71 Engine", SAE Technical Paper, 850052.