

بررسی اثرات فشار و دما در شعله متقابل آرام گذر-بحرانی و فرا-بحرانی متان و اکسیژن مایع

حامدزینی وند

دانشجوی دکتری- دانشکده هوافضا-دانشگاه صنعتی شریف

Zeinivand_hamed@ae.sharif.edu

حسین عشینینی

دانشجوی کارشناسی ارشد- دانشکده هوافضا-دانشگاه صنعتی شریف

ashini@ae.sharif.edu

محمد فرشچی

استاد-دانشکده هوافضا-دانشگاه صنعتی شریف

farshchi@sharif.edu

چکیده

در مقاله حاضر یک شعله برخورد متقابل متان-اکسیژن در شرایط ترمودینامیکی فرا-بحرانی مورد بررسی قرار گرفته است. قسمت معادلات انرژی به صورت کامل جهت اعمال شرایط فرا-بحرانی اعمال شده است. مشخصات ترمودینامیکی مانند ظرفیت حرارت ویژه با اضافه شدن ترم تکمیلی به ترم شرایط ایده آل بازنویسی شده است و معادله حالت نیز برای شرایط گاز واقعی به صورت کیوبیک آورده شده است. از نرم افزار منبع باز Cantera جهت محاسبه میدان جریان و حل سینتیک احتراق استفاده شده است و شرایط معادله حالت، معادله انرژی و خواص انتقال جهت حل جریان گاز واقعی در شرایط ترمودینامیکی گذر-بحرانی و فرا-بحرانی اصلاح شده است. با حل میدان جریان در شرایط گذر بحرانی مشاهده می شود که اعمال شرایط گاز واقعی سبب پدیدار شدن شرایط شبه جوشش در میدان جریان می شود در صورتیکه با حل گاز ایده آل این پدیده مشاهده نمی شود. در شرایط گذر بحرانی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می شود و همچنین در ناحیه ای بین ورودی اکسیژن و شعله یک افزایش ناگهانی در ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن اتفاق می افتد که ناشی از شبه جوشش می باشد. حل گاز ایده آل چگالی اکسیژن را کمتر پیش بینی می کند. در شرایطی که دمای ورودی اکسیژن بالاتر از شرایط بحرانی باشد جابجایی خاصی در محل شعله اتفاق نمی افتد. دمای پیش بینی شده در شرایط حل گاز واقعی اندکی کمتر از شرایط حل گاز واقعی می باشد.

کلمات کلیدی: شعله جریان متقابل -احتراق گذر-بحرانی- پدیده شبه جوشش- کد کانترا- حل شبه یک بعدی

مقدمه

افزایش فشار در سیستمهای احتراقی سبب افزایش بازده ترمودینامیکی و همچنین سوخت شده، در عین حال که برخی آلاینده های حاصل از فرآیند احتراق را کاهش می دهد. این مزایا تمایل به حرکت به سمت سیستمهای احتراقی فشار بالا را افزایش داده است. برای مثال موتورهای توربینی هواپیماها امروزه در فشاری در حدود ۳۰ بار فعالیت می کنند. این مقدار به صورت تقریباً خطی در ۵۰ سال اخیر افزایش پیدا کرده است و پیش بینی می شود که همچنان این روند ادامه داشته باشد [1]. مثال دیگر موتورهای دیزل می باشد که فشار پس از اشتعال به محدوده ۶۰ اتمسفر می رسد [2]. در بسیاری از موتورهای راکت یکی از پروپلنتها در شرایط مایع که دمای آن پایین دمای بحرانی ولی فشار آن بالای فشار بحرانی است (شرایط گذر-بحرانی) وارد محفظه احتراق می شود [3]. در بیشتر سیستمهای احتراقی فرض گاز ایده آل برای حل جریان واکنشی در نظر گرفته می شود. شرایط فشار بالا و چگالی پایین امکان در نظر گرفتن این فرض را در شبیه سازی جریانهای واکنشی

می دهد. اما در فشارهای خیلی بالا دیگر نمی توان فرض گاز ایده آل را به کار برد و لازم است تا از فرضهای مربوط به شرایط فشار بالا به خصوص برای بیان شرایط حالت جریان استفاده کرد. یکی از علل توجه به شعله های جریان متقابل ویژگی های خاص آن در رابطه با یک بعدی بودن شعله آنها و همچنین قابلیت تعیین و تغییر مقیاس های زمانی جریان مانند زمان اقامت در آنها می باشد که بسیار جهت مطالعه شعله ها مهم می باشد [4,5]. از طرف دیگر از حل تحلیلی و عددی شعله های جریان متقابل برای تولید داده های مربوط به حل فیلیمت شعله های نفوذی و پیش آمیخته استفاده می شود. با توجه به تاکید مطالعه حاضر به شرایط فشار بالای میدان جریان، حل میدان جریان شعله متقابل هم به لحاظ تحلیل میدان جریان و هم به لحاظ تولید داده های ساختار جریان جهت حل فیلیمت یک شعله نفوذی فرا-بحرانی حائز اهمیت می باشد.

منابع در حوزه شعله های نفوذی جریان متقابل گسترده بوده و همچنان در حال گسترش می باشد. این مطالعات شامل روندهای تجربی، تحلیلی و عددی می باشد [6-8]. همانطور که اشاره شد یک بعدی بودن شعله های جریان متقابل و همچنین امکان تغییر زمان ماندگاری جریان این شعله ها را به لحاظ مطالعاتی جذاب کرده است. اگرچه بیشتر مطالعات برای شرایط فشار اتمسفریک و همچنین شرایط گاز ایده-آل می باشند، برخی مقالات جدید به روش عددی شرایط گاز واقعی را نیز در حل جریان های واکنشی متقابل مورد بررسی قرار داده اند. بیشتر مطالعات در خصوص واکنش دهنده های هیدروژن-اکسیژن می باشد و مطالعات کمتری به شعله های هیدروکربنی جریان متقابل پرداخته است. به عنوان نمونه ریبرت و همکارانش [9] نشان دادند که در شعله جریان متقابل ضخامت شعله و همچنین نرخ آزادسازی انرژی با مجذور حاصلضرب فشار در نرخ کرنش رابطه دارد. همچنین اشاره کرده اند که در شرایط گاز واقعی به دلیل شرایط گاز ایده آل در دماهای بالای شعله اثرات محدود می باشد. ویلیامز [10] اثرات انتقال مولکولی بر روی ساختار شعله و همچنین مشخصات خاموشی شعله غیر پیش آمیخته برخوردی بررسی کرد و مشاهده کرد که نرخ کرنش خاموشی به خواص انتقال مولکولی حساس می باشد. یک رفتار ویژه سیال در شرایط فوق بحرانی زمانی رخ می دهد که با افزایش در یک بازه محدود دمایی در مجاور دمای شبه جوشش (برای فشار مشخص) که با خط قرمز در شکل (۱) نشان داده شده است، ظرفیت حرارتی به بیشترین مقدار خود میرسد. در مجاورت دمای شبه جوشش سیال فوق بحرانی مانند یک مایع با چگالی بالا رفتار می کند وقتی که دما از دمای شبه جوشش کمتر است و در حالی که دما از دمای شبه جوشش بیشتر است رفتارش گاز مانند می شود. در تمام این تغییرات رفتاری کشش سطحی وجود ندارد و جریان تک فاز می باشد. بانوتی و همکارانش [11-13] در سالهای اخیر تحقیقات زیادی بر روی پدیده شبه جوشش در جریان گذر-بحرانی انجام داده اند و نشان داده اند که در جریان گذر-بحرانی،

اختلاط غالباً به صورت نفوذ صورت می گیرد که در آن خواص ترمو-فیزیکی به صورت تابعی غیر خطی از فشار موضعی و دما می باشند.

استخراج روابط جریان متقارن محوری با معادلات سه بعدی پایای نایبر استوکس آغاز می شود. اما جریان را تنها در صفحهی Z-r در نظر می گیرند [14].

در حالت کلی، ممکن است سرعت جانبی نیز وجود داشته باشد اما نمی تواند تغییرات هیچ خواصی در جهت θ وجود داشته باشد. استخراج روابط وابسته به دو فرض اساسی است.

ابتدا، فرض می شود که میدان سرعت در قالب یک تابع جریان که فرم تفکیک پذیری به شکل زیر دارد، قابل توصیف است:

$$\Psi(z, r) = -r^2 U(z) \quad (1)$$

که در آن $U(z)$ تابعی از Z است که هنوز مشخص نشده است.

دوم اینکه فرض می شود، دما، ترکیب و چگالی تنها وابسته به Z (تغییرات محوری) هستند.

فشار هرچند که ممکن است در جریان تغییر کند، اما شکل خاصی دارد که در ادامه می آید. همچنین مقدار تغییرات فشار نسبت به فشار ترمودینامیکی میانگین کوچک فرض می شود. با استفاده از این فرضیات و فرض استوکس که لزجت دینامیکی و توده ای را به صورت $\kappa = -2\mu/3$ در نظر می گیرد، مجموعه معادلات دیفرانسیل پاره ای به صورت زیر ساده سازی می شوند.

معادله بقای جرم در دستگاه استوانه ای به شکل زیر است:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \rho v}{\partial r} = 0 \quad (2)$$

معادله ی مومنوم محوری در دستگاه استوانه ای نیز به شکل زیر است:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial z} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot V \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu r \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] \quad (3)$$

معادله ی مومنوم شعاعی در دستگاه استوانه ای نیز به شکل زیر است:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial z} + \rho v \frac{\partial v}{\partial r} - \rho \frac{w^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot V \right] + \frac{2\mu}{r} \left[\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right] \quad (4)$$

از تعریف تابع جریان متقارن محوری و فرم پیش فرض تابع جریان، می توان دید که:

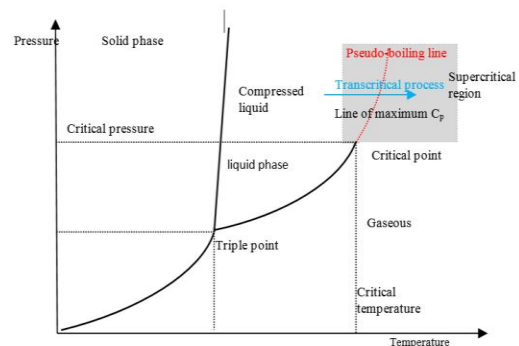
$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = \rho u r = 2rU \quad (5)$$

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial z} = \rho v r = -r^2 \frac{dU}{dz}$$

در نتیجه،

$$\left. \begin{aligned} \rho u = 2U \\ \rho v = -r \frac{dU}{dz} \end{aligned} \right\} \rightarrow \text{continuity} : \frac{\partial \rho u}{\partial z} + \frac{\partial \rho v}{\partial r} + \frac{\rho v}{r} = 0 \rightarrow 2 \frac{dU}{dz} - \frac{dU}{dz} - \frac{dU}{dz} = 0 \quad (6)$$

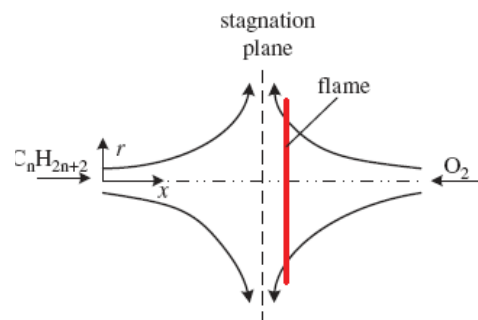
که معادله ی بقای جرم را دقیقاً ارضا می کند. باتوجه به عبارت $V = v/r$ دیده می شود که سرعت مقیاس شده ی $\rho \frac{v}{r} = \rho V = -\frac{dU}{dz}$ تنها تابعی از Z است.



شکل ۱: شرایط گذر بحرانی در دمای شبه جوشش در دیاگرام فازی

توصیف میدان جریان

مدل فیزیکی مورد بررسی یک شعله نفوذی جریان متقابل می باشد که به وسیله دو جت خروجی از نازل های استوانه ای (همانطور که در شکل (2) نشان داده شده است) خارج می شوند ایجاد می شود. این هندسه متقارن محوری به طرز قابل توجهی معادلات حاکم را به معادلات شبه یک بعدی تبدیل می کند [14]. معادلات در قسمت قبل به صورت کلی آورده شده است با این حال معادلات دقیق حل میدان فوق به صورت مفصل توسط هو و همکارانش ارائه شده است [15] و برای شعله برخوردی اکسیژن/هیدروژن برای شرایط گسترده ترمودینامیکی تفسیر شده است. در مقاله حاضر برای حل میدان جریان از فرمولاسیون فوق که کلیه معادلات جرم، مومنتم، اجزاء و انرژی به علاوه خواص ترمودینامیکی و انتقال را در بر گرفته است استفاده شده است. از نرم افزار منبع باز Cantera برای حل میدان جریان و سینتیک اجزاء استفاده شده است [16]. با توجه به اینکه نرم افزار در حال پایه خواص انتقال و ترمودینامیک را برای شرایط گاز ایده آل حل می کند. خواص ترمودینامیک به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است، در این حال برای چگالی از معادله SRK استفاده شده است [17] و خواص آنتالپی و آنتروپی نیز شامل ترم حال ایده آل به علاوه ترم اصلاحی می باشد. همچنین خواص انتقال بر اساس روابط چانگ به روز شده است. معادله انرژی نیز به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. با توجه به اینکه در این مطالعه شعله برخوردی متان/اکسیژن مایع در شرایط فوق بحرانی مد نظر بوده است از مکانیزم GRI.3 که شامل ۵۳ جزء شیمیایی و ۳۲۵ واکنش می باشد استفاده شده است تا اثرات تمام اجزاء به دقت دیده شود.



شکل ۲: شماتیک نحوه تشکیل شعله در جریان برخورد متقابل

بقای جرم:

$$\frac{d}{dz}(\rho u) + 2\rho V = 0 \quad (7)$$

مومنوم شعاعی:

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{d}{dz} \left(\mu \frac{dV}{dz} \right) - \Lambda_r - \rho u \frac{dV}{dz} - \rho V^2 \quad (8)$$

مومنوم محوری:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{du}{dz} = -\frac{dp}{dz} + \frac{4}{3} \frac{d}{dz} \left[\mu \frac{du}{dz} - \mu V \right] + 2\mu \frac{dV}{dz} \quad (9)$$

بقای گونه‌ها:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = -\rho u \frac{dY_k}{dz} - \frac{d}{dz}(\rho Y_k V_k) + W_k \omega_k \quad (k=1 \dots K) \quad (10)$$

بقای انرژی (با فرض گاز کامل):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho u c_p \frac{dT}{dz} + \frac{d}{dz} \left(\lambda \frac{dT}{dz} \right) - \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_k c_{p,k} \frac{dT}{dz} - \sum_{k=1}^K h_k W_k \omega_k \quad (11)$$

خواص ترمودینامیکی می تواند به صورت مستقیم از روابط زیر استخراج شود.

$$\begin{aligned} e(T, \rho) &= e_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[\frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho \\ h(T, P) &= h_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[\frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{P,T} \right] dP \\ s(T, \rho) &= s_0(T, \rho_0) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho,T} \right] d\rho \\ C_V(T, \rho) &= C_{V0}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho,T} \right] d\rho \\ &\quad + \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho}^2 / \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_V \end{aligned} \quad (14)$$

در شکل (3) مقایسه بین داده های NIST، [18] مدل SRK و شرایط گاز ایده آل برای چگالی و ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن برای دماهای مختلف و در فشار دمای شبه بحرانی اکسیژن و در شرایطی که سیال در شرایط گذر-بحرانی قرار دارد اختلاف بین داده های NIST با شرایط گاز ایده آل فاصله بسیاری دارد و در دماهای بالاتر از بحرانی به داده های گاز ایده آل نزدیک می شود. با این حال در بیشتر دماها داده های مدل SRK با داده های NIST همخوانی نسبتاً مناسبی دارد و به همین دلیل از این مدل می توان برای محاسبه خواص ترمودینامیکی در شرایط فوق بحرانی استفاده کرد. نکته قابل توجه در این قسمت تغییرات شدید خواص ترمودینامیکی شامل چگالی و ظرفیت حرارتی در مجاورت دمای شبه جوشش با تغییرات اندک دما می باشد.

در این فرمولاسیون، معادله‌ی مومنوم محوری از دیگر معادلات جدا می‌شود. به این معنا که میدان‌های سرعت، دما و ترکیب را می‌توان بدون درنظر گرفتن معادله‌ی مومنوم محوری تعیین کرد. با داشتن یک جواب برای دیگر متغیرها، معادله‌ی مومنوم محوری را می‌توان برای محاسبه‌ی گرادیان فشار محوری استفاده کرد.

این نکته نیز مهم است که رفتار مشابه نتیجه‌ی تقریب‌ها یا فرضیات نیست که تاثیرات فیزیکی خاصی صرف نظر شده باشند. در عوض، این شرایطی است که رفتار دوبعدی کامل را می‌توان با یک توضیح یک بعدی برای مجموعه‌ی خاصی از شرایط مرزی تکمیل کرد.

معادله حالت

با توجه به اینکه در حالت فرا-بحرانی مشخصات مربوط خواص ترمودینامیکی از حالت گاز ایده‌آل پیروی نمی کند در اینجا از مدل SRK برای اعمال اثر شرایط فرا-بحرانی بر چگالی مخلوط استفاده شده است. مدل Soave-Rdelich-Kwong (SRK) یکی از مدل‌های معروف جهت محاسبه مشخصات ترمودینامیکی (چگالی) در شرایط فرا-بحرانی می باشد. معادله cubic این مدل به صورت زیر معرفی می شود. [17]

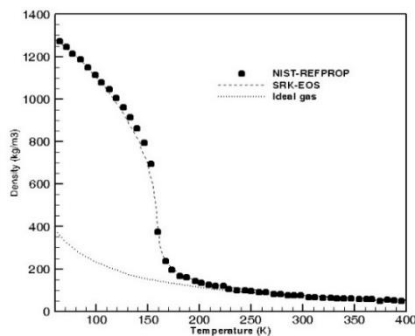
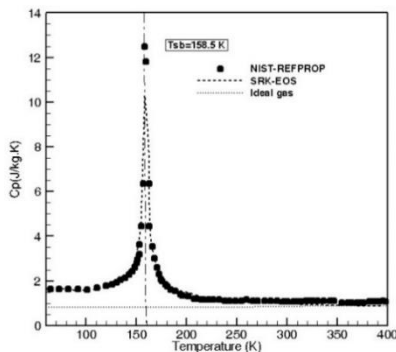
$$p = \frac{R_u T}{V-b} - \frac{a(T)}{V^2+bV} \quad (12)$$

که در آن R_u ثابت جهانی گاز، $V = M/\rho$ حجم مولی می باشد که در آن M وزن مولکولی می باشد.

حجم موثر مولکول، b ، از رابطه $b = 0.0866 R_u T_{cr} / p_{cr}$ محاسبه می شود که در رابطه فوق c_f بیان کننده نقطه بحرانی می باشد. برهمکنش بین مولکولی به صورت زیر داده می شود.

$$a(T) = a_0 [1 + n(1 - (T/T_c)^{0.5})]^2 \quad (13)$$

که در آن $a_0 = 0.4275 R_u^2 T_{cr}^2 / p_{cr}$ و $n = 0.480 + 1.57 \omega_1 - 0.176 \omega_1^2$ که در آن ω ضریب استریک می باشد.



شکل ۳: خواص ترمودینامیکی گاز ایده آل-مدل SRK و داده های NIST -ظرفیت حرارتی ویژه(بالا)- چگالی (پایین)

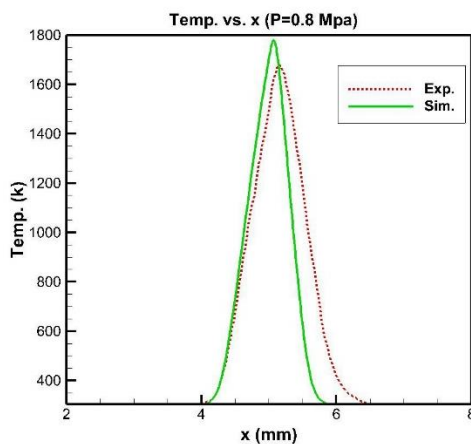
همانطور که مشاهده می شود با رسیدن دما به محدوده ۱۵۸٫۵ کلوین ظرفیت حرارتی ویژه به شدت افزایش می یابد. در عین حال مشاهده می شود به همراه این تغییرات، چگالی نیز در یک بازه دمایی کوچک به شدت افت می کند و به عبارت دیگر حجم مخصوص سیال در این شرایط به شدت افزایش

دماها داده های مدل چانگ با داده های NIST همخوانی نسبتاً مناسبی دارد و به همین دلیل از این مدل می توان برای محاسبه خواص انتقال در شرایط فوق بحرانی استفاده کرد.

در مقاله حاضر از نرم افزار منبع باز Cantera برای حل میدان جریان و سینتیک اجزاء استفاده شده است. با توجه به اینکه نرم افزار در حال پایه خواص انتقال و ترمودینامیک را برای شرایط گاز ایده آل حل می کند. خواص ترمودینامیک به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است، در این حال برای چگالی از معادله SRK استفاده شده است و خواص آنتالپی و آنتروپی نیز شامل ترم حال ایده آل به علاوه ترم اصلاحی می باشد. همچنین خواص انتقال بر اساس روابط چانگ به روز شده است. معادله انرژی نیز به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. با توجه به اینکه در این مطالعه شعله برخوردی متان/اکسیژن مایع در شرایط فوق بحرانی مد نظر بوده است از مکانیزم GRI.3 که شامل ۵۳ جزء شیمیایی و ۳۲۵ واکنش می باشد استفاده شده است تا اثرات تمام اجزاء به دقت دیده شود. اثر تشعشع در انتقال حرارت در نظر گرفته نشده است. دمای ورودی متان ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است و برای اکسیژن مایع دماهای مختلف از ۱۲۰ کلوین تا ۲۵۰ کلوین در نظر گرفته شده است. همچنین تحلیل نتایج در فشارهای مختلف از بازه ۱۰ اتمسفر تا ۱۰۰ اتمسفر انجام شده است.

صحه گذاری نتایج

جهت صحه گذاری کد توسعه داده شده، پروفیل دما با داده های تجربی موجود در بالاترین فشار [20] مورد مقایسه قرار گرفته است (فشار ۰٫۸ مگاپاسکال). شبیه سازی برای شرایط مرزی و ابعاد حل مشابه صورت گرفته است همانطور که در شکل (5) نشان داده شده است نتایج عددی حاضر با داده های تجربی تطابق مناسبی نشان می دهد.



شکل ۵: توزیع دما بر اساس طول برای حالت تجربی و عددی در فشار ۰٫۸ مگاپاسکال

همچنین جهت اطمینان از شبیه سازی عددی صورت گرفته، نتایج با

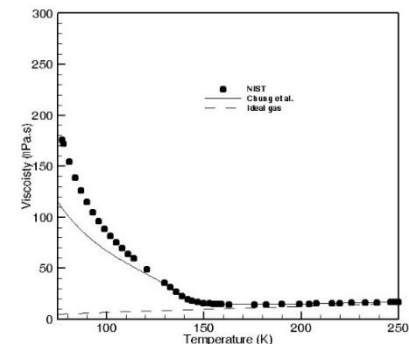
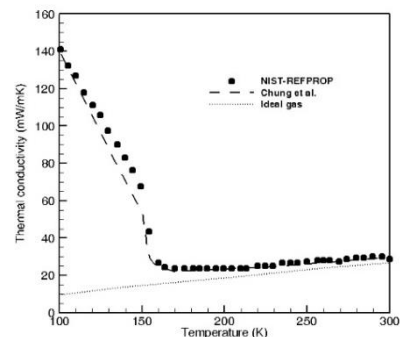
پیدا می کند. این تغییرات شامل ظرفیت حرارتی و به مهم تر از آن افزایش حجم شرایط جدیدی را در محفظه احتراق ایجاد می کند که نیاز است مورد بررسی قرار گیرد.

خواص انتقال در جریان واکنشی فرا-بحرانی

همانند خواص ترمودینامیکی برای خواص انتقال نیز لازم است تا اثر شرایط فرا-بحرانی را بر مخلوط اعمال کرد. رویکرد برای شرایط گاز واقعی در مورد ویسکوزیته بیشتر بر پایه نتایج چانگ و همکارانش [19] که بر اساس تئوری چاپمن-انسکوگ می باشد. این تئوری اصلاتاً برای گازهای رقیق فرموله شده است اما برای فشار-بالا نیز توسعه داده شده است. برای مخلوطهای فشار بالا (گاز واقعی)، ویسکوزیته η به صورت زیر نوشته می شود.

$$\eta = \eta^* \eta^0 = \eta^* \frac{40.785 F_{Cm} (M_m T)^{1/2}}{V_{Cm}^{2/3} \Omega_v} \quad (15)$$

که در آن η^0 ویسکوزیته فشار پایین η^* ترم اصلاحی برای ویسکوزیته فشار بالا M_m وزن مولکولی مخلوط V_{Cm} حجم بحرانی مخلوط $\Omega_v =$ انتگرال برخورد $F_{Cm} = 1 - 0.2756 \omega_m + 0.059035 \mu_{Tm}^4 + \kappa_m$ در معادله فوق F_{Cm} و ω_m ضریب استریک مخلوط و κ_m یک فاکتور مخصوص اصلاح برای مواد با شرایط پولاریته بالا مانند الکل و اسیدها می باشد. در شکل (4) مقایسه بین داده های NIST، مدل چانگ و شرایط گاز ایده آل برای ویسکوزیته و ضریب هدایت حرارتی اکسیژن برای دماهای مختلف و در فشار ۶۰ بار آورده شده است.



شکل ۴: خواص انتقال گاز ایده آل-مدل چانگ و داده های NIST-هدایت حرارتی (بالا) - ویسکوزیته (پایین)

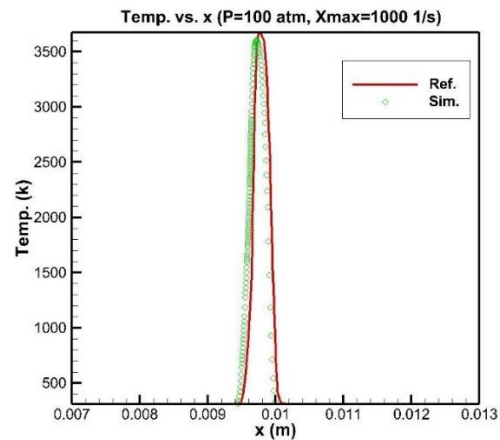
همانطور که مشاهده می شود در دماهای پایین تر از دمای شبه بحرانی اکسیژن و در شرایطی که سیال در شرایط گذر-بحرانی قرار دارد اختلاف بین داده های NIST با شرایط گاز ایده آل فاصله بسیاری دارد و در دماهای بالاتر از بحرانی به داده های گاز ایده آل نزدیک می شود. با این حال در

بیشتر

در دو تحقیق باشد. با این حال تطابق بین نتایج کار حاضر با کار عددی وانگ و همکارانش مناسب می باشد.

بیشترین فشاری که به صورت عددی مورد تحلیل قرار گرفته و گزارش شده است نیز مورد مقایسه قرار گرفته است. برای این کار نتایج حاصل از کار عددی وانگ و همکارانش [21] که در فشار ۱۰۰ بار و نرخ کرنش ۱۰۰۰ ثانیه انجام گرفته است مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج حاصل از مقایسه دما در شکل (6) نشان داده است. همانطور که مشاهده می شود در ماکزیمم دما اختلاف اندکی دیده می شود که می تواند ناشی از به کارگیری مکانیزمهای شیمیایی مختلف

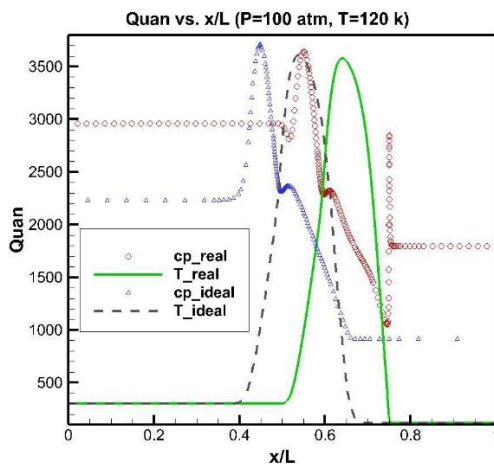
نظر گرفته می شود ظرفیت حرارتی اثر افزایش شدید ناشی از پدیده شبه جوشش را ظاهر نمی کند. با اعمال شرایط گاز واقعی پیش از شعله و در سمت ورودی اکسیژن یک افزایش ناگهانی در ظرفیت حرارتی اتفاق می افتد که ناشی از عبور شرایط ترمودینامیکی از خط Widom می باشد. در این حالت جریان از حالت مایع مانند به سرعت تبدیل به گاز مانند می شود که این پدیده باعث کاهش شدید چگالی و افزایش سرعت می شود. همچنین مشاهده می شود که بیشینه دما با اعمال شرایط گاز واقعی اندکی کاهش می یابد.



شکل ۶: مقایسه بین نتایج شبیه سازی حاضر با داده های عددی موجود [21]

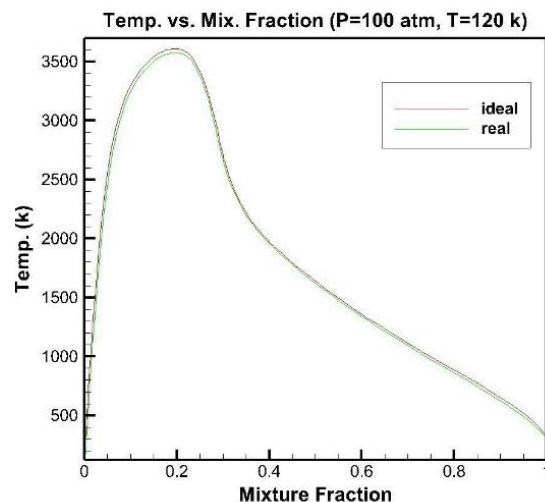
بررسی نتایج

در شکل (7) مقایسه بین شرایط شعله با جریان گاز ایده آل و گاز واقعی بر اساس کسر مخلوط برای فشار ۱۰۰ بار آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود در شرایط گاز واقعی دمای ماکزیمم بر حسب کسر مخلوط اندکی کاهش می یابد. با این حال موقعیت دمای ماکزیمم بر اساس کسر مخلوط برای شرایط گاز واقعی و همچنین گاز ایده آل تغییری نمی کند. این کاهش جزئی را می توان در اضافه شدن ترم اصلاحی به ترم گاز ایده آل در معادله آنتالپی دانست.



شکل ۸: توزیع دما و ظرفیت حرارتی ویژه بر اساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایده آل

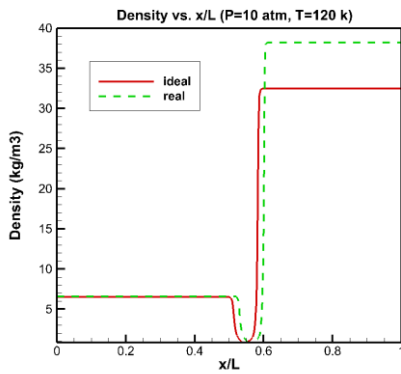
در شکل (9) توزیع چگالی بر حسب طول بی بعد شده بین سوخت و اکسنده در شرایط حل گاز ایده آل و گاز واقعی برای دمای ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰ بار نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود، در قسمت ورودی اکسیژن مایع به دلیل وجود شرایط گذر بحرانی اختلاف چگالی بین حل گاز ایده آل و گاز واقعی بیشتر از ورودی متان می باشد. حل گاز ایده آل چگالی اکسیژن را کمتر پیش بینی می کند. در شکل (10) همین توزیع برای شرایط ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰۰ بار نشان داده شده است و مشاهده می شود که اختلاف پیش بینی شده برای شرایط گاز ایده آل و واقعی بسیار بیشتر و در حدود ۳۰۰ درصد می باشد که نشان می دهد فرض گاز ایده آل در این شرایط با خطای بسیار بیشتری همراه است.



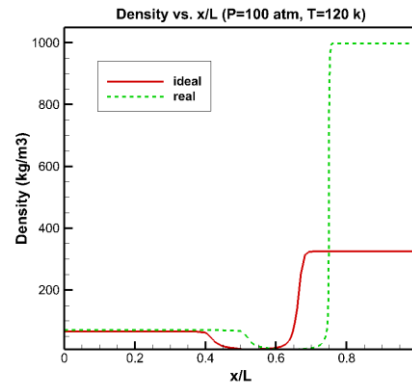
شکل ۷: توزیع دما بر اساس کسر مخلوط برای شرایط گاز واقعی و گاز ایده آل

در شکل (8) تغییرات دما و همچنین ظرفیت حرارتی بر حسب فاصله برای دمای ورودی ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰۰ بار برای حالت گاز ایده آل و گاز واقعی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با اعمال شرایط گاز واقعی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می شود و دمای ماکزیمم

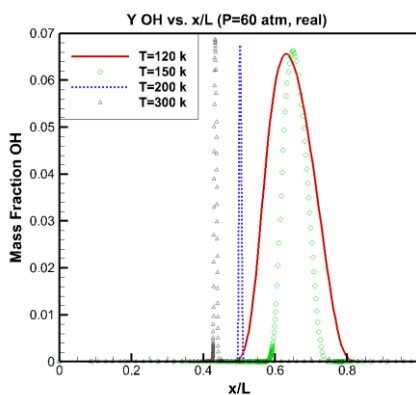
نیز کاهش می یابد. از طرفی همانطور که مشاهده می شود در شرایطی که گاز کامل در



شکل ۹: توزیع چگالی بر اساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایده آل در فشار ۱۰ بار

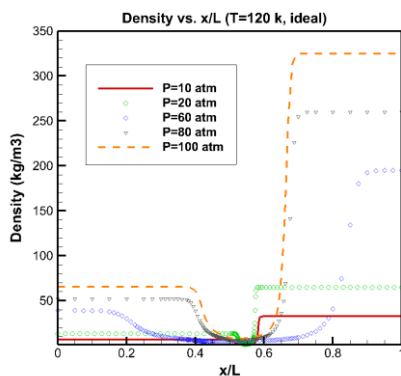


شکل ۱۰: توزیع چگالی بر اساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایده آل در فشار ۱۰۰ بار



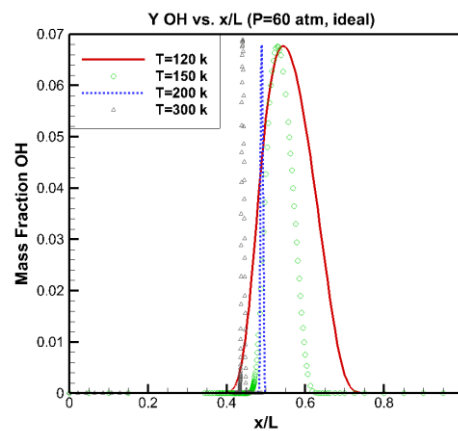
شکل ۱۲: توزیع کسر جرمی OH بر اساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی برای دمای ورودی مختلف اکسیژن

در شکل (13) توزیع چگالی برای دمای ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشارهای مختلف کاری بر حسب فاصله بی بعد شده بین ورودی ها نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش فشار چگالی سمت اکسیژن افزایش پیدا می کند. در شکل (14) همین شرایط برای حل حالت گاز واقعی نشان داده شده است. مشاهده می شود که در شرایط حل گاز واقعی اختلاف چگالی در شرایط فشارهای بالا کمتر می شود. همچنین چگالی هیدروژن اختلاف کمتری را برای فشارهای مختلف نشان می دهد.

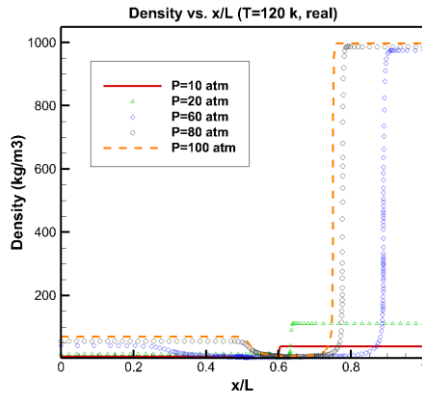


شکل ۱۳: توزیع چگالی بر حسب طول بی بعد شده برای شرایط گاز ایده آل در فشارهای مختلف

شکل (11) توزیع کسر جرمی مربوط به OH (به عنوان معیاری از محل شعله) بر حسب طول بی بعد شده برای فشار محیط ۶۰ بار و دمای ورودی های مختلف اکسیژن مایع را برای شرایط حل گاز ایده آل نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود با افزایش دما از ۱۲۰ کلوین (شرایط گذر-بحرانی) به ۳۰۰ کلوین (شرایط کاملا بحرانی) ضخامت شعله کاهش می یابد. در شکل (12) همین شرایط برای حل گاز واقعی نشان داده شده است. همین رفتار کاهش ضخامت شعله در شرایط حل گاز واقعی نیز قابل مشاهده می باشد. تفاوت عمده در ابعاد و موقعیت شعله را می توان در شرایط گذر-بحرانی مشاهده کرد. همانطور که مشاهده می شود در شرایط گذر بحرانی (فشار بحرانی و دما زیر بحرانی، دمای ورودی ۱۲۰ و ۱۵۰ کلوین) با در نظر گرفتن حل گاز واقعی شعله به سمت ورودی اکسند جابجا می شود که می توان این را ناشی از کاهش ناگهانی چگالی و افزایش ظرفیت حرارتی در حین عبود از خط Widom دانست. اما در شرایط دمای کاملا بحرانی (فشار بحرانی و دماهای بحرانی، دمای ورودی ۲۰۰ و ۳۰۰ کلوین) تغییر خاصی در شرایط حل گاز ایده آل و گاز واقعی دیده نمی شود.



شکل ۱۱: توزیع کسر جرمی OH بر اساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز ایده آل برای دمای ورودی مختلف اکسیژن



شکل ۱۴: توزیع چگالی بر حسب طول بی بعد شده برای شرایط گاز واقعی در فشارهای مختلف

- 10- B. A. Williams, "Sensitivity of calculated extinction strain rate to molecular transport formulation in nonpremixed counterflow flames" *Combust. Flame* 124 (2001) 330–333.
- 11- D. T. Banuti, "Crossing the widom-line-supercritical pseudo-boiling," *J. of Supercritical Fluids*, Vol. 98, p.12-16, 2015.
- 12- D. T. Banuti, K. Hannemann, "Effect of injector wall heat flux on cryogenic injection," *AIAA Paper* 2010-7139, 2010.
- 13- D. T. Banuti, V. Hannemann, K. Hannemann, and B. Weigand, "An efficient multi-fluid-mixing model for real gas reacting flows in liquid propellant rocket engines," *Combustion and Flame*, Vol. 168, p.98-112, 2016.
- 14- R.J. Kee, J.A. Miller, G.H. Evans, A computational model of the structure and extinction of strained, opposed flow, premixed methane-air flames, *Symp. (Int.) Combust.* (1988) 1479–1494.
- 15- H. Huo, X. Wang, V. Yang, A general study of counterflow diffusion flames at subcritical and supercritical conditions: oxygen/hydrogen mixtures, *Combust. Flame* 161 (2014) 3040–3050.
- 16- Cantera Developers (2012). Cantera: Chemical kinetics, Thermodynamics, Transport properties. Available: <http://cantera.github.com/docs/sphinx/html/index.html>
- 17- G. Soave, "Equation constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chem Eng Sci*, p. 1197, 1972.
- 18- E. W. Lemmon, M. I. Huber, M. O. McLinden, "NIST standard reference database 23: reference fluid thermodynamic and transport properties-REFPROP, version 9.1", National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg. 2013.
- 19- T. H. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee, and K. E. Starling, "Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 27, pp. 671-679, 1988.
- 20- U. Niemann, K. Seshadri, F.A. Williams, Methane, ethane, and ethylene laminar counterflow diffusion flames at elevated pressures: experimental and computational investigations up to 2.0 MPa, *Combust.*

نتیجه گیری

در مقاله حاضر یک شعله برخورد متقابل متان-اکسیژن در شرایط ترمودینامیکی فرا-بحرانی مورد بررسی قرار گرفته است. قسمت معادلات انرژی به صورت کامل جهت اعمال شرایط فرا-بحرانی اعمال شده است. مشخصات ترمودینامیکی مانند ظرفیت حرارت ویژه با اضافه شدن ترم تکمیلی به ترم شرایط ایده آل بازنویسی شده است و معادله حالت نیز برای شرایط گاز واقعی به صورت کیویک آورده شده است. از نرم افزار منبع باز Cantera جهت محاسبه میدان جریان و حل سینتیک احتراق استفاده شده است و شرایط معادله حالت، معادله انرژی و خواص انتقال جهت حل جریان گاز واقعی در شرایط ترمودینامیکی گذر-بحرانی و فرا-بحرانی اصلاح شده است. با حل میدان جریان در شرایط گذر-بحرانی مشاهده می شود که اعمال شرایط گاز واقعی سبب پدیدار شدن شرایط شبه جوشش در میدان جریان می شود در صورتیکه با حل گاز ایده آل این پدیده مشاهده نمی شود. در شرایط گذر-بحرانی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می شود و همچنین در ناحیه ای بین ورودی اکسیژن و شعله یک افزایش ناگهانی در ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن اتفاق می افتد که ناشی از شبه جوشش می باشد. حل گاز ایده آل چگالی اکسیژن را کمتر پیش بینی می کند. در شرایطی که دمای ورودی اکسیژن بالاتر از شرایط بحرانی باشد جابجایی خاصی در محل شعله اتفاق نمی افتد. دمای پیش بینی شده در شرایط حل گاز واقعی اندکی کمتر از شرایط حل گاز واقعی می باشد.

مراجع

- 1- Foster, R.S. Miller, *Fundamentals of high pressure combustion*, in: M. Lackner (Ed.), *High Pressure Processes In Chemical Engineering*, ProcessEng Engineer- ing, 2010, pp. 53–75.
- 2- G.M. Bianchi, P. Pelloni, F.E. Corcione, L. Allocca, F. Luppino, Modeling atomization of high-pressure diesel sprays, *J. Eng. Gas Turb. Power* 123 (2001) 419–427
- 3- W. Mayer, H. Tamura, Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine, *J. Propul. Power* 12 (1996) 1137–1147.
- 4- C.K. Law, *Combustion physics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2006.
- 5- F.A. Williams, *Combustion theory*, 2nd ed., The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Menlo Park, CA, 1985.
- 6- Lorenzo Figura, Alessandro Gomez, "Laminar counterflow steady diffusion flames under high pressure (P 6.3 MPa) conditions". *Combust. Flame*, 159 (2012) 142–150
- 7- A. J. Juanos, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, S. Candel, Counterflow diffusion flames of general fluids: oxygen/hydrogen mixtures, *Combust. Flame* 154 (2008) 319–330.
- 8- V. Ricchiuti, R.E. Padilla, S. Karnani, D. Dunn-Rankin, Cantera simulations of water-laden methane/air nonpremixed counterflow flames, 8th US National Combustion Meeting (2013).
- 9- G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, S. Candel, Counterflow diffusion flames of general

Flame 161 (2014) 138–146.

21- X. Wang , H. Huo , V. Yang , Counterflow diffusion flames of oxygen and n-alkane hydrocarbons (CH₄ –C₁₆H₃₄) at subcritical and supercritical conditions, Combust. Sci. Technol. 187 (2015) 60–82.

fluids: oxygen/hydrogen mixtures, Combust. Flame 154 (2008) 319–330.