

مطالعه اثرات نسبت هم‌ارزی و نوع سوخت بر روی یک جریان واکنشی با فشار و دمای متغیر و زمان اقامت کوتاه

امیر مردانی^۱، محمدصالح عبدالله پور^۲ و وحید رضائی^۳

۱- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، mardani@sharif.edu

۲- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران (نویسنده مخاطب)، sa_abdollahpour@yahoo.com

۳- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، vahidrezaei@alum.sharif.edu

(تاریخ دریافت: ۹۳/۷/۱۷، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۳/۱۱/۲۰، پذیرش: ۹۳/۱۲/۴)

آیروترمودینامیک گاز در واقع مطالعه ترمودینامیک گازها در سرعت بالاست که همراه با تبادل حرارت و انرژی مکانیکی است. از جمله سیستم‌هایی که دارای این ویژگی‌اند می‌توان به سیستم‌های پیش‌ران‌ش راکتی اشاره کرد. در سیستم‌های پیش‌ران‌ش راکتی، که دارای نازل همگرا-واگراست، در طول نازل مقدار فشار و دما تغییر کرده و سرعت بالای این نوع سیستم‌ها موجب کاهش زمان اقامت می‌شود. به همین منظور، در این مطالعه، به بررسی موتور سوخت مایع و اثرات تغییر نوع سوخت و نسبت هم‌ارزی بر روی احتراق و پارامترهای عملکردی موتور پرداخته شده است. حل عددی با استفاده از مدل آشفستگی $k - \epsilon$ و مدل احتراقی EDC و فرض دبی ثابت در جریان ورودی برای دو سوخت هیدروژن و کروسین با استفاده از نرم‌افزار فلونت انجام شده است. برای شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی کروسین از مکانیزم کاهش یافته ۹ مرحله‌ای و هیدروژن ۱۴ مرحله‌ای استفاده شده است. به منظور صحت‌سنجی نتایج حل عددی از داده‌های تجربی استفاده شده است که تطابق نسبتاً مناسبی بین آن‌ها مشاهده می‌شود. از نتایج مهم این مطالعه می‌توان به رفتار نسبتاً مشابه حل حالت گونه‌های تثبیت‌شده و نرخ محدود در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی در محفظه احتراق اشاره کرد. همچنین، با افزایش نسبت هم‌ارزی، در محدوده مکانی وسیع‌تری از موتور (محفظه و قسمتی از نازل همگرا)، می‌توان حل حالت گونه‌های تثبیت‌شده و نرخ محدود را یکسان در نظر گرفت. از دیگر نتایج مهم، می‌توان به وقوع واکنش‌هایی با نرخ محدود در قسمت واگرای نازل برای سوخت کروسین و یکسان بودن مکان بیشینه عدد دامکوهلر برای دو سوخت اشاره کرد.

کلیدواژگان: احتراق، نسبت هم‌ارزی، دینامیک سیالات محاسباتی، کروسین، هیدروژن

مقدمه

فرایند احتراق و تحلیل آن از مسائل پیچیده‌ای است که همواره توجه محققان را به خود معطوف کرده است. در زمینه احتراق، شبیه‌سازی و کارهای عددی بسیاری در سامانه‌های با سرعت پایین مثل دیگ بخار نیروگاه‌ها انجام شده است، ولی در جریان‌های واکنشی فراصوتی، که فشار و دما بالاست، بررسی اثر متقابل واکنش شیمیایی و دینامیک جریان همچنان با پیچیدگی‌های زیادی روبروست. بیش‌ترین کاربرد این‌گونه جریان‌ها در نازل موشک‌هاست که سرعت و فشار خروجی نازل نقش مهمی در تولید نیروی پیش‌ران ایفا می‌کنند. امروزه روش‌های عددی به‌عنوان یک ابزار توانمند برای تحلیل سیستم‌ها با هندسه و جریان پیچیده شناخته می‌شوند. از مزایای این روش، می‌توان به قابلیت شبیه‌سازی مسائل با فیزیک واقعی و کم‌هزینه بودن آن اشاره کرد [۲، ۱].

در روش عددی، به منظور مدل سازی جریان واکنشی، فرایند احتراق همراه با پدیده های دیگر (آشفتگی، تزریق سوخت و غیره) مدل می شود. شجاعی فرد و همکارانش [۳] بدون در نظر گرفتن احتراق، رفتار گذرا بین محدوده فروصوت و فراصوت نازل را به صورت تجربی و عددی بررسی کردند. آن ها با رسم کانتورهای چگالی و سرعت در دو نسبت فشار نازل، محل ایجاد موج های ضربه ای و جدایش جریان را به دست آوردند. ردی و همکارانش [۴]، به منظور شبیه سازی جریان محفظه احتراق راکت با نازل زنگوله ای^۱، مدل های مختلف آشفتگی را بررسی کردند. آن ها به این نتیجه رسیدند که معادلات $k - \epsilon$ حجم محاسباتی کمتری نسبت به روش های دیگر دارد. پسندیده فرد و همکارانش [۵] به مطالعه عددی احتراق در یک جریان مادون صوت تراکم پذیر آشفته پرداختند. در این مطالعه از مدل آشفتگی $k - \epsilon$ و مدل احتراقی اتلاف گردابه ای^۲ استفاده کردند. آن ها جریان های سوخت و هوای موازی و عمود برهم را در محفظه های مختلف مطالعه کردند. دس از جمله کسانی است که تحقیقات خود را بر جریان پلوم متمرکز کرد. وی در مرجع [۶] برای مدل سازی پلوم دو روش عددی مختلف را با یکدیگر مقایسه کرد. در سال ۱۹۸۱ دس [۷] به معرفی روش عددی اسکپی^۳ برای جریان های تک یا چندفازی پلوم پرداخت. او در تحقیقی دیگر [۸] به بررسی بیشتر کد استفاده شده در مرجع [۷] پرداخت و یک مدل رایانه ای جدید به نام سیوس^۴ را به منظور پیش بینی ساختار موج ضربه ای فرا انبساط و فروانبساط ارائه داد. دس در دو تحقیق دیگر توجه خود را به تلاطم جریان در پلوم معطوف کرد [۹، ۱۰]. احمدی کیا و طالبی [۱۱] به بررسی جریان آشفته سطح بیرونی موشک و پلوم پرداختند؛ در این تحقیق از روش تجزیه شار و نلیر با دقت مرتبه دوم ضمنی در گسسته سازی استفاده شده است. نتایج آن ها نشان داد که عدد ماخ و فشار پلوم تأثیر زیادی در آرایش جریان پشت موشک به خصوص در تشکیل و انعکاس امواج فشاری و انبساطی دارد. در سال ۲۰۱۴، کنگ و سان [۱۲] به شبیه سازی عددی خنک کاری بازیابی محفظه موتور سوخت مایع با پیشران هیدروژن-اکسیژن پرداختند. با توجه به این مرجع، استفاده از روش شبیه سازی به همراه نرخ محدود شیمیایی، پیش بینی مناسبی از انتقال حرارت موتور سوخت مایع دارد. کیم و همکارانش [۱۳] احتراق آشفته و جریان داخل نازل محفظه احتراق با خنک کاری بازیابی را شبیه سازی کردند. آن ها از معادلات RANS برای شبیه سازی میدان جریان آشفته و از مدل فلیملت^۵ جهت ارتباط احتراق و آشفتگی استفاده کردند. نتایج شبیه سازی آن ها با نتایج آزمایش های تجربی تطابق مناسبی داشته است. چن و همکارانش [۱۴]، به منظور شبیه سازی احتراق موتور راکتی هیبریدی، کدی را گسترش دادند که در این کد با استفاده از جداول جستجو هزینه محاسباتی را به شدت کاهش دادند. نتایج این کد با داده های تجربی مقایسه شده و دارای انطباق مناسبی است. ماسکلت و همکارانش [۱۵] احتراق ناپایا موتور راکتی با پیشران اکسیژن مایع و هیدروژن گازی را شبیه سازی کردند. هدف اصلی آن ها ارزیابی دقت و صحت روش پیشنهاد شده است که در این روش از مدل LES^۶ به صورت دوبعدی استفاده شده است. نتایج ارائه شده در این مقاله با داده های تجربی هم خوانی دارد.

همان طور که مشاهده شد، مطالعه جریان واکنشی در داخل موتور راکتی از منظر احتراقی کمتر مورد توجه قرار گرفته و هنوز نیازمند مطالعات عمیق تر و دقیق تر است. در این مطالعه، به شبیه سازی جریان واکنشی در داخل محفظه احتراق و نازل یک موتور سوخت مایع و تأثیرات تغییر نوع سوخت (هیدروژن و کروسین) و نسبت هم آرزوی بر روی احتراق (سرعت واکنش های شیمیایی) و پارامترهای عملکردی موتور (فشار محفظه، ضربه ویژه) پرداخته می شود و یک نقطه بهینه به منظور طراحی با ساختار ثابت موتور ارائه می شود. از طرفی دیگر، در تحلیل و طراحی احتراقی این موتورها، آگاهی از مقیاس زمانی واکنش های شیمیایی و عدد بی بعد دامکوهرل (نسبت مقیاس زمانی میدان جریان به مقیاس زمانی واکنش های شیمیایی) مهم است. لذا، در این مطالعه، این عدد بی بعد بررسی می شود. جهت صحت سنجی حل عددی از داده های تجربی موجود استفاده شده است.

1. Bell Shaped
2. Eddy Dissipation
3. SCIPPY
4. SCIPVIS
5. Flamelet
6. Large Eddy Simulation

معادلات حاکم

جهت بررسی پدیده‌های مختلف به روش عددی، نیاز به حل معادلات حاکم بر پدیده است. به همین منظور، در مسئله حاضر معادلات جریان، گونه‌ها، انرژی و آشفستگی به صورت هم‌زمان در نرم‌افزار فلوئنت حل می‌شوند. برای برقراری رابطه بین سرعت و فشار از روش کوپل^۱ استفاده شده و تمامی معادلات به صورت مرتبه دوم پیشرو^۲ گسسته‌سازی شده‌اند. مدل آشفستگی استفاده شده برای این شبیه‌سازی $k-\varepsilon$ (RNG) است. این مدل آشفستگی با توجه به دقت جواب آن نسبت به داده تجربی در مقایسه با دیگر مدل‌های آشفستگی انتخاب شده است. در این مدل آشفستگی، دو معادله انتقال برای محاسبه انرژی جنبشی و اتلاف آشفستگی به صورت زیر حل می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2)$$

که در این معادلات، k انرژی جنبشی آشفستگی، ε نرخ اتلاف انرژی جنبشی آشفستگی، G_k انرژی آشفستگی تولیدی در اثر تغییرات سرعت متوسط، G_b انرژی آشفستگی تولیدشده در اثر نیروی شناوری، Y_M سهم نوسانات انبساط در آشفستگی تراکم‌پذیر به نرخ کلی اتلاف آشفستگی را نمایش می‌دهند. در این معادلات ضرایب ثابت $C_{1\varepsilon} = 1.42$ ، $C_{2\varepsilon} = 1.68$ و $C_{3\varepsilon} = 0.0845$ است. معادله گونه‌ها جهت پیش‌بینی کسر جرمی گونه‌های موجود در احتراق استفاده می‌شود. وقتی گونه‌ها به صورت گازی اند مدل انتقال گونه‌ها^۳ یک معادله انتقال را برای هر گونه به صورت زیر حل می‌کند:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{j}_i + R_i \quad (3)$$

که Y_i کسر جرمی گونه i ام، j_i پخش گونه i ام و R_i نرخ خالص تولید یا مصرف گونه i ام است. به منظور کاهش حجم محاسبات از مکانیزم کاهش‌یافته جوی [۱۶] برای سوخت کروسین و مکانیزم هیتچ و سنسر [۱۷] برای هیدروژن استفاده می‌شود. این دو مکانیزم به ترتیب در جداول ۱ و ۲ آمده است.

به طور کلی برای مدل‌سازی کوپلینگ آشفستگی-احتراق چندین مدل در نرم‌افزار فلوئنت در دسترس است. در مدل اتلاف گردابه‌ای، آشفستگی کنترل‌کننده نرخ واکنش است، در حالی که در مدل نرخ محدود^۴ نرخ واکنش به وسیله رابطه آرنیوس^۵ محاسبه و تأثیر آشفستگی در تبدیل گونه‌ها نادیده گرفته می‌شود. در مدل اتلاف گردابه/نرخ محدود نرخ واکنش از تلفیق دو روش ذکر شده به دست می‌آید که در آن کمترین نرخ واکنش به دست آمده از دو مدل به عنوان نرخ واکنش در نظر گرفته می‌شود. حال آنکه مدل اتلاف گردابه/نرخ محدود فقط می‌تواند برای یک یا دو واکنش در مکانیزم شیمیایی به خوبی عمل کند. مدل مفهومی اتلاف گردابه^۶ گسترش‌یافته مدل اتلاف گردابه است که اثرات واکنش‌های شیمیایی را در آشفستگی در نظر می‌گیرد. با توجه به وجود ۹ واکنش برای مکانیزم انتخاب‌شده برای کروسین-اکسیژن [۲۰] و ۱۴ واکنش برای مکانیزم هیدروژن-اکسیژن [۱۷]، مدل کوپلینگ آشفستگی-احتراق برای مسئله حاضر مدل مفهومی اتلاف گردابه است.

از آنجایی که خواص مخلوط مانند گرمای ویژه در فشار ثابت، پخش مولکولی و خواص دیگر، وابستگی شدیدی به نوع ترکیب مخلوط، دما و فشار دارند، گرمای ویژه مخلوط از طریق قانون مخلوط، چگالی مخلوط با استفاده از گاز ایدئال و گرانی و رسانایی حرارتی از روش میانگین وزنی قانون مخلوط محاسبه می‌شوند.

1. Couple
2. Second Order Upwind
3. Species Transport
4. Finite Rate
5. Arrhenius
6. Eddy Dissipation Concept (EDC)

جدول ۱ - مکانیزم کاهش یافته جوی [۱۶] برای احتراق کروسین

شماره	واکنش	فاکتور ثابت (A)	توان دما (n)	انرژی فعال سازی (E)
**۱	$CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M$	$5/3 \times 10^{13}$	۰	-۴۵۴۰
*۲	$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	$4/4 \times 10^6$	۱/۵	-۷۴۰
*۳	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons OH + OH$	$1/7 \times 10^{13}$	۰	۴۸۰۰۰
*۴	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	$2/6 \times 10^{14}$	۰	۱۶۸۰۰
*۵	$OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H$	$2/2 \times 10^{13}$	۰	۵۱۵۰
*۶	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	$1/8 \times 10^{10}$	۱	۸۹۰۰
*۷	$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	$6/3 \times 10^{13}$	۰	۱۰۹۰
**۸	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	$6/4 \times 10^{17}$	-۱	۰
**۹	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	$2/2 \times 10^{22}$	-۲	۰

نرخ واکنش‌ها با استفاده از فرمول آرنیوس ($K(T) = AT^n \exp(-E/R_u T)$) محاسبه می‌شود.
 R_u ثابت جهانی گازها بوده و واحد آن $Cal/(gmol.K)$ و برابر با $1/98733$ است.
 E انرژی فعال سازی بوده که واحد آن $Cal/gmol$ است.
 واحد ضریب A برای واکنش‌های *، $Cm^3/(gmol.s)$ و برای واکنش‌های **، $Cm^3/(gmol^2.s)$ است.

جدول ۲ - مکانیزم کاهش یافته هیتچ و سنسر [۱۷] برای احتراق هیدروژن

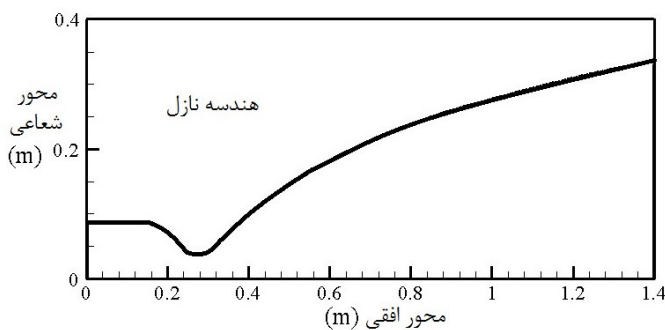
شماره	واکنش	فاکتور ثابت (A)	توان دما (n)	انرژی فعال سازی (E)
**۱	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	$5/44 \times 10^{18}$	-۱/۳	۰
**۲	$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	$2/21 \times 10^{22}$	-۲	۰
**۳	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	$2/0.8 \times 10^{20}$	-۱/۶۲	۰
**۴	$HO_2 + M \rightleftharpoons O + OH + M$	$6/8 \times 10^{19}$	-۰/۴۳	۶۴۰۰۰
*۵	$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	$6/38 \times 10^6$	۲	۲۹۵۹
*۶	$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	$1/69 \times 10^{17}$	-۰/۹	۱۷۳۸۰
*۷	$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	$1/0.8 \times 10^4$	۲/۸	۵۹۱۸
*۸	$H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	$6/62 \times 10^{13}$	۰	۲۱۲۵
*۹	$H + HO_2 \rightleftharpoons OH + OH$	$1/69 \times 10^{14}$	۰	۸۷۳/۸
*۱۰	$O + HO_2 \rightleftharpoons OH + O_2$	$1/75 \times 10^{13}$	۰	-۳۹۷/۲
*۱۱	$OH + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2O$	$1/45 \times 10^{16}$	-۱	۰
**۱۲	$H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	$1/29 \times 10^{33}$	-۴/۸۶	۵۳۲۱۰
*۱۳	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	$4/82 \times 10^{13}$	۰	۷۹۴۳
*۱۴	$HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	$1/81 \times 10^{12}$	۰	۰

نرخ واکنش‌ها با استفاده از فرمول آرنیوس ($K(T) = AT^n \exp(-E/R_u T)$) محاسبه می‌شود.
 R_u ثابت جهانی گازها بوده و واحد آن $Cal/(gmol.K)$ و برابر با $1/98733$ است.
 E انرژی فعال سازی بوده که واحد آن $Cal/gmol$ است.
 واحد ضریب A برای واکنش‌های *، $Cm^3/(gmol.s)$ و برای واکنش‌های **، $Cm^3/(gmol^2.s)$ است.

1. Pre-exponential Factor
2. Temperature Exponent
3. Activation Energy

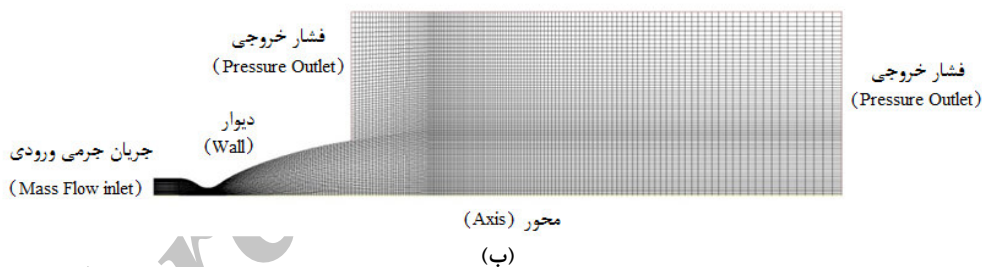
شبکه حل و شرایط مرزی

نازل همگرا-واگرا استفاده شده در این مطالعه، برگرفته از کار سانتاناچونیور و سندووال [۱۸] است. این نازل دارای نسبت انبساط $۷۶/۲۳$ ، مساحت گلوگاه $۰/۰۰۴۶۴$ مترمربع و به صورت زنگوله‌ای است که جزئیات نازل در شکل ۱-الف آورده شده است. به منظور کم کردن حجم محاسبات و به دلیل تقارن در هندسه و جریان، میدان به صورت متقارن محوری و با استفاده از یک شبکه حل دوبعدی با سازمان تطبیق یافته، بدون در نظر گرفتن صفحه انژکتور شبیه‌سازی شده است (شکل ۱-ب). در واقع تحلیل انجام شده بر روی ناحیه بعد از پاشش انجام شده است. جهت اطمینان استقلال حل از شبکه محاسباتی از سه شبکه محاسباتی با تعداد سلول محاسباتی ۵۰۴۹ ، ۲۰۱۹۶ و ۸۰۷۸۴ استفاده شده است و شبکه محاسباتی ۲۰۱۹۶ انتخاب شده است. تطبیق شبکه حل در نزدیکی دیواره و گلوگاه، بعد از دستیابی به مش مناسب، انجام پذیرفته است.



(الف)

فشار خروجی (Pressure Outlet)



(ب)

شکل ۱-الف) هندسه مورد استفاده (ابعاد به میلی‌متر)، ب) شبکه حل و شرایط مرزی

ترکیب شیمیایی جریان ورودی به نازل به وسیله نرم‌افزار CEA^۱ بر اساس ماژول HP^۲ مشخص شده است. سوخت و اکسیدکننده مورد استفاده در این مطالعه کروسین-اکسیژن و هیدروژن-اکسیژن است که کسر مولی مواد حاصل از احتراق برای حالت‌های مورد بررسی برای سوخت کروسین ($C_{10}H_{21}$) در جدول ۳ و برای سوخت هیدروژن در جدول ۴ بیان شده است. نسبت هم‌ارزی متداول در موتورهای با پیشران کروسین-اکسیژن حدود $۱/۴$ و در موتورهای با پیشران هیدروژن-اکسیژن در حدود $۲/۱$ است. برای مطالعه اثر نسبت هم‌ارزی در نتایج تحقیق جاری، نسبت‌های هم‌ارزی $۱/۰$ ، $۱/۴$ و $۱/۸$ برای پیشران کروسین-اکسیژن و نسبت‌های هم‌ارزی $۱/۰$ ، $۲/۰$ و $۳/۰$ برای پیشران هیدروژن-اکسیژن در نظر گرفته شده است.

1. Chemical Equilibrium Compositions and Applications

۲. نرم‌افزار CEA دارای ۹ ماژول است که یکی از آنها ماژول HP است. در این ماژول ورودی فشار، نسبت هم‌ارزی و نوع سوخت و اکسند است و خروجی آن ترکیب گونه‌های شیمیایی حاصل از احتراق است.

جدول ۳ - کسر مولی گونه‌های ناشی از احتراق سوخت $C_{10}H_{21}$ خروجی کد CEA در نسبت هم ارزی‌های مختلف

گونه	$\Phi = 1/8$	$\Phi = 1/4$	$\Phi = 1/0$
CO	$4/17 \times 10^{-1}$	$3/34 \times 10^{-1}$	$2/18 \times 10^{-1}$
CO ₂	$5/72 \times 10^{-2}$	$1/13 \times 10^{-1}$	$1/75 \times 10^{-1}$
H	$3/20 \times 10^{-2}$	$4/06 \times 10^{-2}$	$2/67 \times 10^{-2}$
H ₂	$2/22 \times 10^{-1}$	$1/06 \times 10^{-1}$	$4/33 \times 10^{-2}$
H ₂ O	$2/52 \times 10^{-1}$	$3/10 \times 10^{-1}$	$3/02 \times 10^{-1}$
O	$1/41 \times 10^{-2}$	$1/39 \times 10^{-2}$	$3/51 \times 10^{-2}$
OH	$1/80 \times 10^{-2}$	$6/79 \times 10^{-2}$	$1/07 \times 10^{-1}$
O ₂	$6/15 \times 10^{-4}$	$1/54 \times 10^{-2}$	$9/29 \times 10^{-2}$

جدول ۴ - کسر مولی گونه‌های ناشی از احتراق سوخت H₂ خروجی کد CEA در نسبت هم ارزی‌های مختلف

گونه	$\Phi = 3/0$	$\Phi = 2/0$	$\Phi = 1/0$
H	$6/13 \times 10^{-2}$	$2/81 \times 10^{-2}$	$4/12 \times 10^{-2}$
HO ₂	$1/42 \times 10^{-8}$	$2/02 \times 10^{-6}$	$2/71 \times 10^{-4}$
H ₂	$6/62 \times 10^{-1}$	$4/82 \times 10^{-1}$	$1/31 \times 10^{-1}$
H ₂ O	$3/31 \times 10^{-1}$	$4/77 \times 10^{-1}$	$6/56 \times 10^{-1}$
H ₂ O ₂	$3/35 \times 10^{-8}$	$1/37 \times 10^{-6}$	$4/92 \times 10^{-5}$
O	$4/79 \times 10^{-6}$	$3/91 \times 10^{-4}$	$1/94 \times 10^{-2}$
OH	$8/96 \times 10^{-4}$	$1/22 \times 10^{-2}$	$1/15 \times 10^{-1}$
O ₂	$9/65 \times 10^{-7}$	$1/50 \times 10^{-4}$	$3/69 \times 10^{-2}$

در حل عددی در نظر گرفتن شرایط مرزی یکی از مهم‌ترین پارامترهاست. در مسئله حاضر شرایط مرزی دمایی دیوار، ثابت و برابر با ۷۰۰ کلین مطابق با کار تجربی سانتاناجونیور و سندووال [۱۸] و شرایط مرزی سرعت دیوار، عدم لغزش^۱ فرض شده است. در این مطالعه، از شبیه‌سازی پاشش صرف‌نظر شده است، که این امر موجب سادگی و کاهش قسمتی از پیچیدگی‌های مسئله می‌شود. دبی پیشران ورودی به محفظه احتراق در همه نسبت‌های هم‌ارزی برابر با ۲۱/۳۳۴ کیلوگرم بر ثانیه است که مطابق با دبی پیشران راکت بررسی شده برای صحت‌سنجی حل است. برای هر نسبت هم‌ارزی دو حالت حل عددی گونه‌های تثبیت‌شده^۲ و نرخ محدود انجام گرفته است. منظور از گونه‌های تثبیت‌شده عبارت است از این که ترکیب شیمیایی ورودی به نازل تا خارج شدن از نازل ثابت است و با همان نسبت مولی ورودی از نازل خارج می‌شوند.

صحت‌سنجی

صحت‌سنجی حل عددی با داده‌های تجربی سوخت کروسین در نسبت هم‌ارزی ۱/۳۸۸۶، که توسط گروه تحقیقاتی سانتاناجونیور و سندووال [۱۸] ارائه شده، صورت گرفته است. مقایسه داده‌های تجربی و عددی در جدول ۵ آورده شده است. منظور از ضربه ویژه در جدول ۳ تقسیم تراست بر شتاب گرانش و دبی جرمی موتور است که در حقیقت ضربه ویژه لحظه‌ای است. مشاهده شد که داده‌های عددی و تجربی انطباق نسبتاً خوبی دارند. به‌عنوان مثال، فشار محفظه در مطالعات تجربی برای نسبت هم‌ارزی ۱/۳۸۸۶، برابر با ۸ مگاپاسکال است که در حل عددی حالت گونه‌های تثبیت‌شده، فشار محفظه ۸/۳ مگاپاسکال (۳/۷ درصد خطا) و در حالت نرخ محدود برابر با ۸/۵ مگاپاسکال (۵ درصد خطا) پیش‌بینی شده است. به طور کلی می‌توان بیان کرد که حل حالت نرخ محدود دارای جواب‌های نزدیک‌تری به داده‌های تجربی نسبت به حل حالت گونه‌های تثبیت‌شده است.

1. NO Slip
2. Frozen Species

جدول ۵- مقایسه داده‌های عددی و تجربی

پارامتر مورد نظر	داده تجربی	حالت گونه‌های تثبیت شده سوخت کروسین	خطا	حالت نرخ محدود سوخت کروسین	خطا
تراست (N)	۷۳۲۷۰	۶۸۳۰۳	۶/۸٪	۷۲۴۶۴	۱٪
ضربه ویژه (Sec)	۳۶۵/۹	۳۲۷/۹	۱۰/۳٪	۳۴۷/۹	۵٪
فشار محفظه (Mpa)	۸/۰	۸/۳	۳/۷٪	۸/۵	۵٪
دمای محفظه (K)	۳۶۷۲	۳۷۹۵	۳/۳٪	۳۷۹۵	۳/۳٪

نتایج حل عددی

در این مطالعه، با دو فرض نرخ محدود و گونه‌های تثبیت شده به شبیه‌سازی جریان داخل یک موتور با سوخت کروسین و هیدروژن در سه نسبت هم‌ارزی مختلف پرداخته می‌شود. سپس، تأثیرات تغییر نوع سوخت و نسبت هم‌ارزی بر روی واکنش‌های شیمیایی و پارامترهای مهم موتور بررسی می‌شود. در نهایت نیز حل انجام شده با حالت تعادلی مقایسه می‌شود.

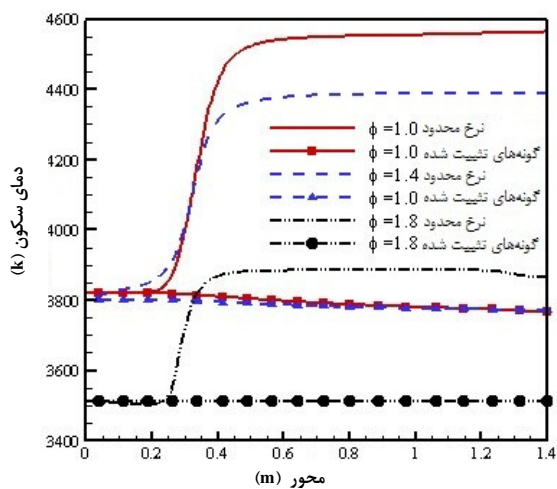
کروسین

در این قسمت، به مطالعه احتراق سوخت کروسین در داخل محفظه توصیف شده، پرداخته می‌شود و فشار، دمای سکون، غلظت گونه‌ها، نرخ واکنش و پارامترهای دیگر در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف از دو روش نرخ محدود و گونه‌های تثبیت شده با یکدیگر مقایسه می‌شود. فشار محفظه، یکی از پارامترهای اصلی برای موتور است، که براساس نوع چرخه، مرحله کاری موتور و تغییرات ضربه ویژه تعیین می‌شود. به همین منظور، فشار استاتیک روی محور ($R=0$) در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در شکل ۲ ترسیم شده است. با افزایش نسبت هم‌ارزی، مقدار فشار محفظه افزایش می‌یابد و در تمامی نسبت‌ها، فشار محفظه در حالت نرخ محدود بیشتر از فشار حالت گونه‌های تثبیت شده است. در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف فشار محفظه بین ۸/۶ مگاپاسکال تا ۷/۸ مگاپاسکال تغییر می‌کند.

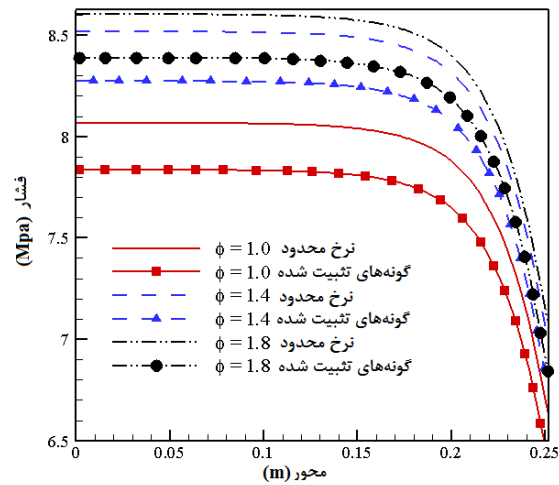
تغییرات دمای سکون روی محور موتور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت شده در شکل ۳ آورده شده است. همان‌گونه که در شکل مشاهده می‌شود، نتایج مربوط به قسمت محفظه ($x \leq 0.3$) بیانگر آن است که حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت شده تفاوت چندانی ندارد، ولی در قسمت نازل و اگر نتایج دارای اختلاف‌اند که این اختلاف به دلیل وجود واکنش در حالت نرخ محدود است. در توضیح این مطلب می‌توان بیان کرد که با کاهش فشار، واکنش‌های شیمیایی تمایل به پیشرفت در جهت تعداد مول بیشتر دارند و با توجه به ساختار واکنش کروسین، که در آن تعداد مول محصولات بیشتر از واکنش دهنده‌هاست، در صورت کاهش فشار، واکنش به سمت کامل شدن و آزادسازی انرژی پیش می‌رود که این امر موجب افزایش دمای سکون می‌شود. از آنجایی که در طول موتور تنها در حالت نرخ محدود واکنش‌ها صورت می‌پذیرد و در حالت گونه‌های تثبیت شده واکنشی رخ نمی‌دهد، دمای سکون در حالت گونه‌های تثبیت شده تقریباً ثابت می‌ماند. افت ناچیزی که در دمای سکون برای حالت گونه‌های تثبیت شده رخ می‌دهد، به دلیل انتقال حرارت بین گاز و دیواره است. از دیگر نتایج این شکل می‌توان به این موضوع اشاره کرد که با افزایش نسبت هم‌ارزی نتایج داخل محفظه بدون تغییرند، ولی در قسمت نازل و اگر اختلاف دمای سکون بین حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت شده کاهش می‌یابد.

هیدروکسیل (OH) یکی از گونه‌های مهم در احتراق است که وجود این گونه نشان دهنده منطقه‌ای است که واکنش‌های شیمیایی در دمای بالا انجام می‌پذیرد. در شکل ۴ تغییرات شدت آشفستگی و کسر مولی هیدروکسیل روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در حالت نرخ محدود نمایش داده شده است. با افزایش نسبت هم‌ارزی، مقدار بیشینه شدت آشفستگی افزایش می‌یابد و به سمت ابتدای محفظه حرکت می‌کند. از طرفی، مقدار هیدروکسیل نیز در فاصله کمتری از ابتدای محفظه تقریباً به صفر می‌رسد. تغییرات شدت آشفستگی نمایانگر انتهای ناحیه واکنش شیمیایی است [۱۹]. همچنین، روند مصرف گونه OH در این محدوده درستی این نتیجه‌گیری را تأیید می‌کند. پس، می‌توان نتیجه گرفت با افزایش نسبت هم‌ارزی

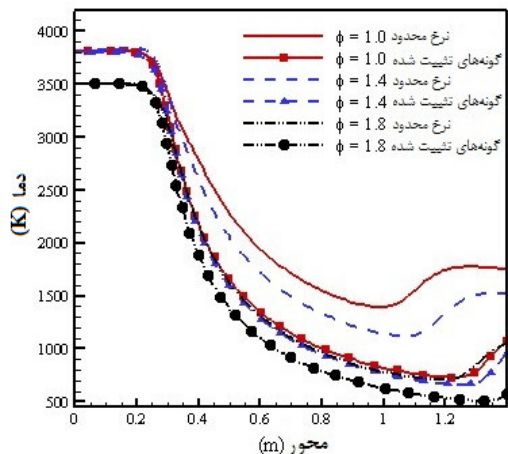
ناحیه واکنش کوچک تر می شود. تغییرات دمای استاتیک روی محور برای نسبت های هم آری مختلف در شکل ۵ مشاهده می شود. در صورت فرض ثابت بودن آنتروپی می توان نتیجه گرفت، با کاهش فشار در فرآیند انبساط، دما کاهش می یابد. در تمامی نسبت های هم آری دمای استاتیک حالت نرخ محدود بیشتر از گونه های تثبیت شده است که این امر به دلیل وجود واکنش هاست. افزایش دما در انتهای نازل به علت عبور از موج ضربه ای مایل است و شکل ۴، که تغییرات شدت آشفستگی را نمایش می دهد، وجود موج ضربه ای مایل را تأیید می کند. همچنین، در شکل ۵ مشاهده می شود که با افزایش نسبت هم آری اختلاف حل حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده جهت پیش بینی دمای استاتیک کاهش یافته است (در نسبت هم آری ۱/۸ اختلاف بین دما کمتر از ۲۰ درصد است).



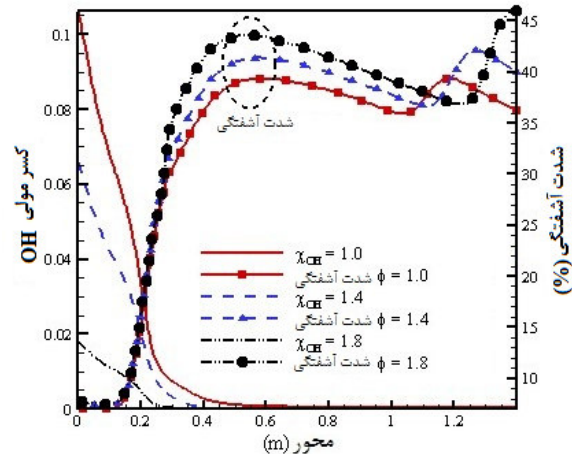
شکل ۳- تغییرات دمای سکون روی محور برای نسبت های هم آری مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده با پیشران کروسین-اکسیژن



شکل ۲- تغییرات فشار روی محور برای نسبت های هم آری مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده با پیشران کروسین-اکسیژن



شکل ۵- تغییرات دمای استاتیک روی محور برای نسبت های هم آری مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده با پیشران کروسین-اکسیژن



شکل ۴- تغییرات کسر مولی هیدروکسیل و شدت آشفستگی روی محور برای نسبت های هم آری مختلف در حالت نرخ محدود با پیشران کروسین-اکسیژن

از اعداد بی بعد مهم در فرآیند احتراق، می توان به عدد دامکوهلر اشاره کرد که نسبت مقیاس زمانی انتقالی ($\tau_{Conv.}$) به شیمی ($\tau_{Chem.}$) است. در این مطالعه از دو روش برای بیان عدد دامکوهلر استفاده می شود. در روش اول، این عدد بی بعد، نسبت مقیاس زمانی کلی همرفت به واکنش شیمیایی است که به آن عدد دامکوهلر اول^۱ می گویند. در روش دوم، عدد دامکوهلر با توجه به کوچک ترین گردابه ها (کولموگروف) تعریف می شود که به آن عدد دامکوهلر آشفتگی^۲ می گویند.

$$(4) \quad \text{چگالی / نرخ کرنش / بیشینه نرخ واکنش آرنیوس} \left(\text{عدد دامکوهلر اول} \right) Da = \frac{\tau_{Conv.}}{\tau_{Chem.}}$$

$$(5) \quad \text{عدد دامکوهلر آشفته} = R.R. \times \left(\frac{V}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{2}}$$

در معادله (۲)، $R.R.$ ، نرخ واکنش شیمیایی بیشینه در هر مکان است که براساس وزن مولکولی و چگالی مخلوط، V (گرانروی سینماتیکی) و ϵ (نرخ اتلاف انرژی جنبشی آشفتگی) بی بعد شده است. برای اعداد دامکوهلر کوچکتر از یک، نرخ واکنشها به وسیله سرعت انجام واکنشهای شیمیایی محدود می شوند و اختلاط عامل محدودکننده نیست. به بیان دیگر، با مشخص کردن عدد دامکوهلر می توان ارزیابی انجام واکنشهای شیمیایی با توجه به زمان اقامت در جریان سیال واکنشی را انجام داد. تغییرات این پارامترها در طول محور محفظه و نازل در نسبتهای هم ارزی مختلف در شکل ۶ مشاهده می شود. می توان نتیجه گرفت که در داخل محفظه عدد دامکوهلر بسیار بزرگ است و به این معناست که در تمامی نسبتهای هم ارزی، آشفتگی کنترل کننده واکنشها در محفظه است، اما داخل نازل با توجه به کوچک بودن عدد دامکوهلر ($Da < 1$) سرعت انجام واکنشها تأثیرگذارترین پارامتر است. به منظور بررسی جامع تر موتور، موتور به سه قسمت محفظه (بدون در نظر گرفتن قسمت همگرا $x \leq 0.175$)، قسمت همگرای نازل ($0.175 \leq x \leq 0.324$) و قسمت واگرای نازل ($0.324 \leq x \leq 1.4$) تقسیم می شود. در شکل های ۷ تا ۹ عدد دامکوهلر اول برای نسبتهای هم ارزی مختلف در این سه قسمت ترسیم شده است. در داخل محفظه در تمامی نسبتهای هم ارزی، عدد دامکوهلر بسیار بیشتر از ۱ است و با افزایش نسبت هم ارزی بیشینه عدد دامکوهلر کاهش می یابد (جدول ۶). در نتیجه در داخل محفظه در تمامی نسبتهای هم ارزی آشفتگی کنترل کننده نرخ واکنشهاست و می توان با استفاده از مدل های واکنش سریع (نظیر مدل اتلاف گردابه) به شبیه سازی محفظه احتراق پرداخت.

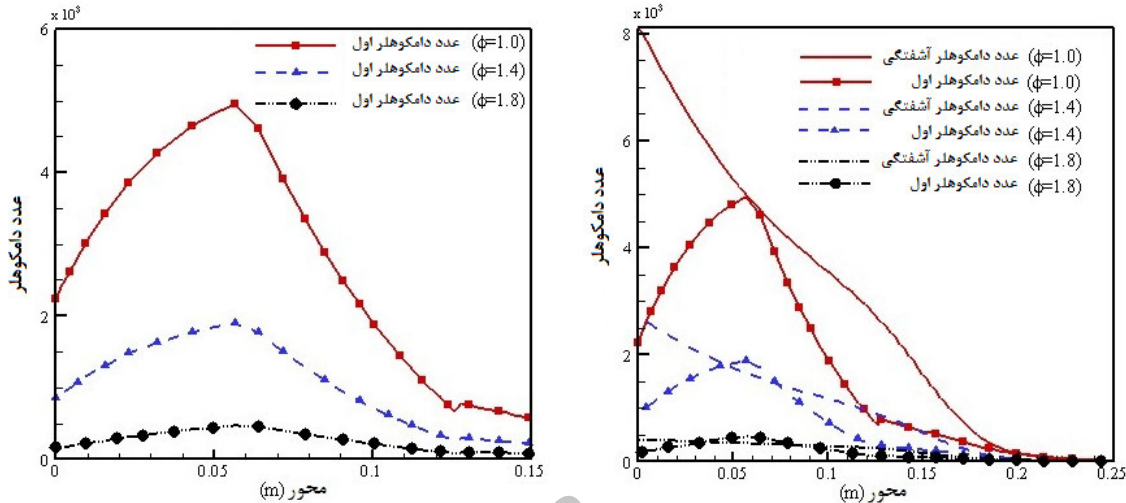
جدول ۶- مقدار عدد دامکوهلر اول در سه محدوده مختلف موتور با پیشران کروسین - اکسیژن

مکان مقدار کمینه (m)	مقدار کمینه	مکان مقدار بیشینه (m)	مقدار بیشینه	نسبت هم ارزی	مکان
B	۳۲۹	A	۴۹۴۵	۱	محفظه ($x \leq 0.175$)
C	۰/۲۲۸	B	۳۲۹	۱	نازل همگرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)
D	$5/3 \times 10^{-6}$	C	۰/۲۲۸	۱	نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)
B	۱۲۴	A	۱۸۹۱	۱/۴	محفظه ($x \leq 0.175$)
C	۰/۲۱۵	B	۱۲۴	۱/۴	نازل همگرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)
D	$3/4 \times 10^{-6}$	C	۰/۲۱۵	۱/۴	نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)
B	۵۴	A	۴۷۰	۱/۸	محفظه ($x \leq 0.175$)
C	۰/۰۵۲	B	۵۴	۱/۸	نازل همگرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)
D	$1/2 \times 10^{-6}$	C	۰/۰۵۳	۱/۸	نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)

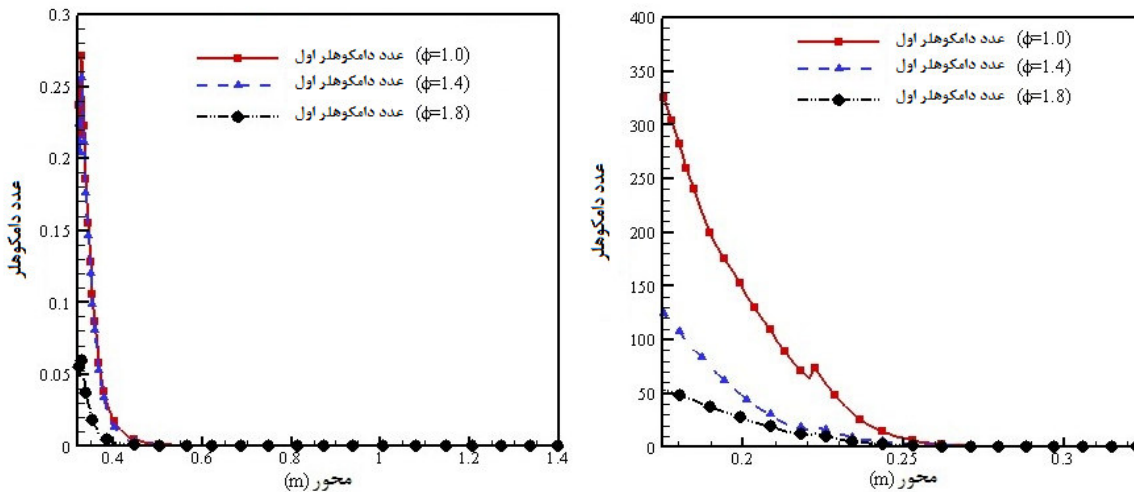
A = ۰/۰۶۵, B = ۰/۱۷۵, C = ۰/۳۲۴, D = ۱/۴

1. First Damkohler Number
2. Turbulent Da

در داخل محفظه برای تمامی نسبت‌های هم‌ارزی، مقدار بیشینه عدد دامکوهلر در $x = 0.056$ و مقدار کمینه این عدد، در ورودی به نازل هم‌گرا ($x = 0.175$) است. برای نسبت‌های هم‌ارزی ۱، $1/4$ و $1/8$ عدد دامکوهلر به ترتیب در مکان‌های 0.269 ، 0.265 و 0.255 به مقدار ۱ می‌رسد که این مکان‌ها در قسمت نازل هم‌گرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$) واقع‌اند. همچنین، با افزایش نسبت هم‌ارزی، مکانی که عدد دامکوهلر برابر با یک می‌شود به سمت ابتدای محفظه حرکت می‌کند. در قسمت نازل و اگر عدد دامکوهلر کوچک‌تر از یک است که می‌توان نتیجه گرفت که در جریان فراصوت برای سوخت کروسین می‌توان از مدل نرخ محدود استفاده کرد.



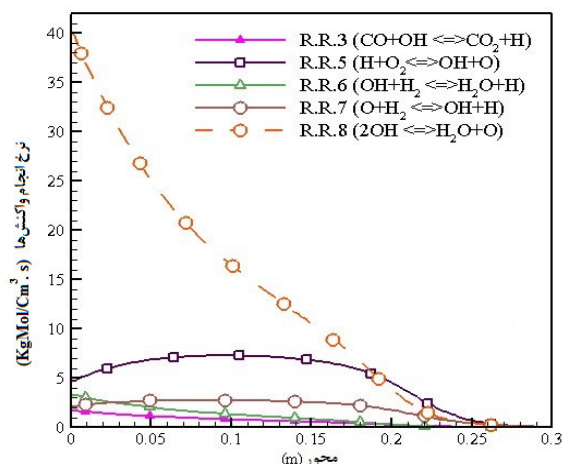
شکل ۶- تغییرات عدد دامکوهلر اول و آشفتنگی روی محور در
نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران کروسین-اکسیژن



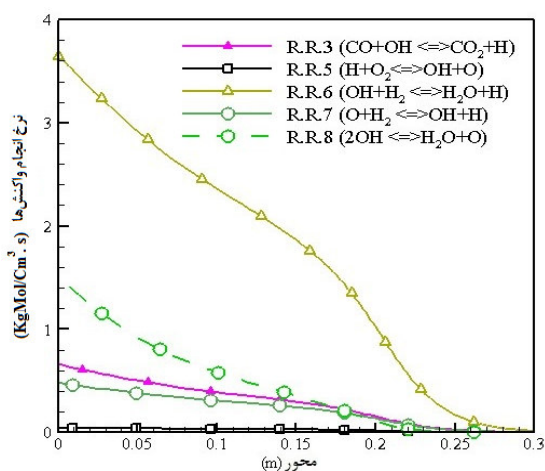
شکل ۷- تغییرات عدد دامکوهلر اول روی محور در داخل نازل و اگر
نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران کروسین-اکسیژن

شکل ۸- تغییرات عدد دامکوهلر اول روی محور در داخل نازل هم‌گرا
نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران کروسین-اکسیژن

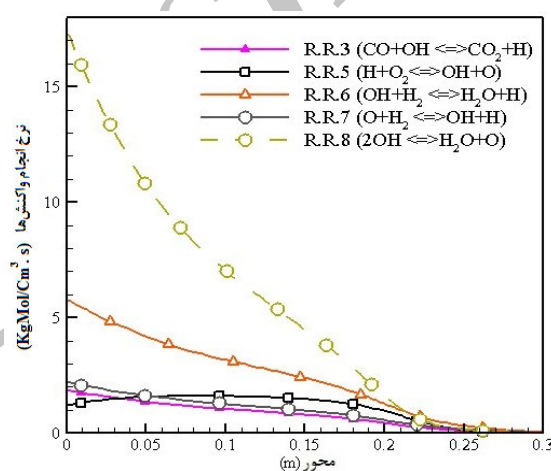
یکی از عوامل تأثیرگذار بر روی تولید گونه‌ها نرخ واکنش است که در نسبت‌های هم‌ارزی و دماهای مختلف متفاوت است. در شکل‌های ۱۰ تا ۱۲ نرخ انجام واکنش‌های موثر به ترتیب برای نسبت‌های هم‌ارزی ۱، $1/4$ و $1/8$ آورده شده است.



شکل ۱۰- نرخ انجام واکنش‌ها روی محور در نسبت هم‌ارزی ۱ برای پیشران کروسین-اکسیژن



شکل ۱۲- نرخ انجام واکنش‌ها روی محور در نسبت هم‌ارزی ۱/۸ برای پیشران کروسین-اکسیژن



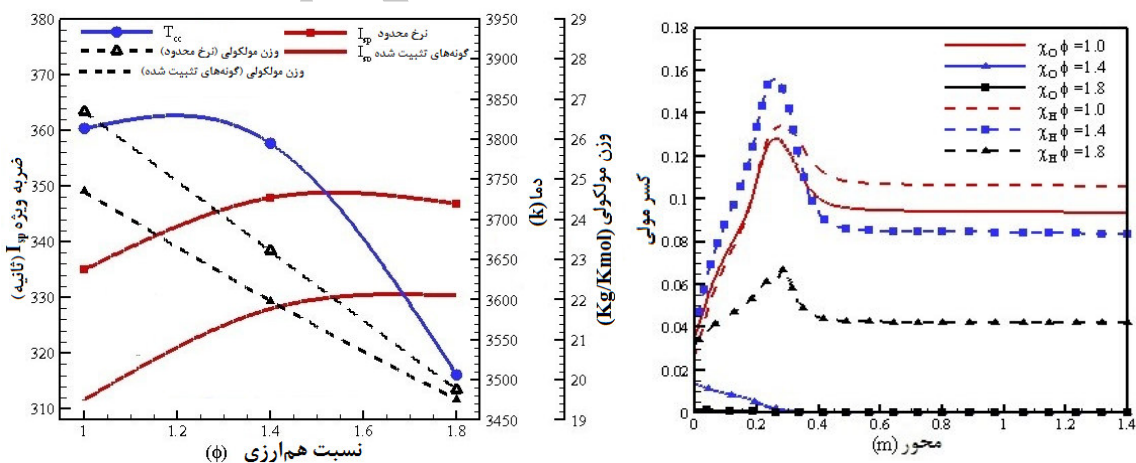
شکل ۱۴- نرخ انجام واکنش‌ها روی محور در نسبت هم‌ارزی ۱/۴ برای پیشران کروسین-اکسیژن

برای پیشران کروسین-اکسیژن ۹ واکنش ابتدایی^۱ در نظر گرفته شده است که این واکنش‌ها در واقع یک سری واکنش‌های زنجیره‌ای^۲ هستند. مونوکسید کربن با سرعت بسیار آهسته با هوا اکسید می‌شود، ولی در صورت وجود مقدار کمی عناصر حاوی هیدروژن مانند آب و هیدروکسیل، سرعت اکسید شدن این عنصر به شدت افزایش می‌یابد [۲۰]. واکنش شماره ۸ باعث تولید آب و رادیکال اکسیژن می‌شود. رادیکال اکسیژن تولید شده در واکنش ۷ ($O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$) با هیدروژن ترکیب شده و موجب به وجود آمدن هیدروکسیل (OH) می‌شود. هیدروکسیل تولیدی، در واکنش ۳ مورد استفاده قرار گرفته و باعث تولید دی اکسید کربن می‌شود. در واقع واکنش ۳ را می‌توان به عنوان کلیدی‌ترین واکنش برای تولید دی اکسید کربن در نظر گرفت که این واکنش یک واکنش انتشار زنجیره‌ای^۳ است. پس می‌توان نتیجه گرفت در حالتی که نرخ واکنش ۸ بیشینه است، واکنش به سمت کامل تر شدن پیش می‌رود و محصولات احتراق دی اکسید کربن و آب است. در حالتی که واکنش ۶ بیشینه مقدار نرخ واکنش را دارا باشد، هیدروکسیل تولید شده در این واکنش نیز مورد استفاده قرار گرفته و مقدار کمتری هیدروکسیل برای شرکت در

1. Elementary
2. Chain
3. Chain-Propagating

واکنش ۳ وجود دارد. در نتیجه مقدار مونوکسید کربن کمتری تبدیل به دی اکسید کربن می شود که این امر نشان دهنده انجام واکنش ها به صورت ناقص است. در نسبت های هم آری ۱ و ۱/۴ (بین فشار ۸ الی ۸/۵ مگاپاسکال و دمای ۳۸۰۰ کلوین) واکنش $8(OH \rightleftharpoons H_2O + O)$ دارای بیشینه مقدار نرخ واکنش است، ولی در نسبت هم آری ۱/۸ (دمای ۳۵۰۰ کلوین)، واکنش ۶ $(OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H)$ دارای بیشینه نرخ واکنش است. نرخ واکنش ۸ در نسبت هم آری ۱ بسیار بیشتر از نسبت هم آری ۱/۴ است که این امر نشان دهنده واکنش کامل تر در نسبت هم آری ۱ است. از طرفی، می توان گفت در نسبت هم آری ۱/۴ واکنش ۶ بعد از واکنش ۸ دارای بیشینه نرخ واکنش است که این امر باعث مصرف هیدروکسیل و در نتیجه تولید کمتر دی اکسید کربن می شود و احتراق به سمت ناقص شدن پیش می رود. با مقایسه نرخ واکنش ها در نسبت های هم آری مختلف می توان به این نتیجه رسید که با افزایش نسبت هم آری نرخ واکنش ها به شدت کاهش می یابد و در نسبت هم آری ۱/۸ تقریباً تمامی واکنش ها دارای یک مرتبه اند. از نتایج مهم دیگر می توان به محدوده انجام واکنش های سوخت کروسین اشاره کرد که انجام واکنش ها برای کروسین در نسبت های هم آری متفاوت محدود به محفظه و قبل از گلوگاه $(x \leq 0.324)$ است و تمامی واکنش ها تا $x=0.3$ انجام می پذیرند. روند تغییرات رادیکال های هیدروژن و اکسیژن در نسبت های هم آری مختلف بر روی محور در شکل ۱۳ نمایش داده شده است. در حالت استوکیومتری مقدار رادیکال اکسیژن تولیدی در محفظه افزایش می یابد و سپس در نازل مصرف می شود. تولید رادیکال اکسیژن در این حالت به دلیل دمای بالای محفظه است. با افزایش نسبت هم آری، حداکثر غلظت رادیکال اکسیژن در محفظه کاهش یافته و این روند به دلیل کاهش دمای محفظه و تمایل تشکیل مولکول اکسیژن به صورت پایدار است. به نظر می رسد در اثر بالا بودن دمای محفظه و انرژی فعال سازی کمتر برای شکستن پیوندهای هیدروژن نسبت به اکسیژن، در ابتدای محفظه و در تمامی نسبت های هم آری امکان تولید رادیکال هیدروژن بیش از رادیکال اکسیژن وجود داشته و این امر موجب می شود روندی صعودی-نزولی برای هیدروژن در تمامی نسبت های هم آری قابل مشاهده باشد. مقدار بیشینه رادیکال هیدروژن در نسبت استوکیومتری وجود دارد و با افزایش نسبت هم آری مقدار رادیکال هیدروژن خروجی کاهش می یابد. این امر نشان دهنده افزایش مونواکسید کربن در خروجی و عدم انجام واکنش ۳ است.

یکی از پارامترهای عملکردی مهم در موتور ضربه ویژه است. ضربه ویژه در واقع مقدار تراست نسبت به دبی جرمی تعریف می شود. در حالتی که دبی جرمی پیشران یکسان باشد، مقدار ضربه ویژه بیشتر، نمایش دهنده تراست تولیدی بالاتر است. در شکل ۱۴ مقدار تغییرات ضربه ویژه، دمای محفظه و جرم مولکولی خروجی در نسبت های هم آری مختلف برای دو حالت گونه های تثبیت شده و نرخ محدود مشاهده می شود.



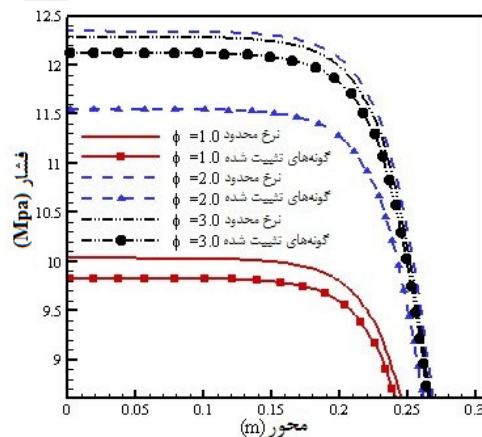
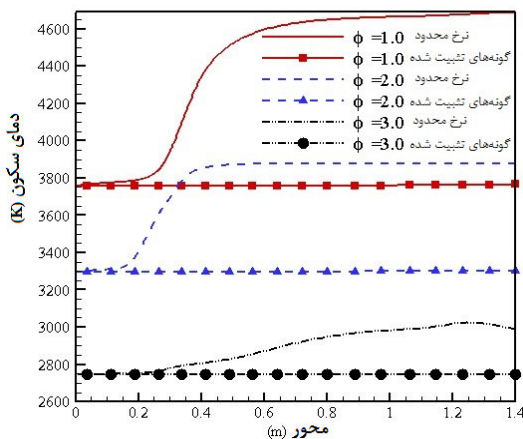
شکل ۱۳- تغییرات رادیکال هیدروژن و اکسیژن روی محور در نسبت های هم آری مختلف برای پیشران کروسین- اکسیژن
 شکل ۱۴- تغییرات مشخصه های موتور در نسبت های هم آری متفاوت برای پیشران کروسین- اکسیژن

مقدار ضربه ویژه در حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده دارای یک نقطه بیشینه است که این نقطه بیشینه به ترتیب در نسبت هم‌ارزی ۱/۴ و ۱/۷ اتفاق می‌افتد. با افزایش نسبت هم‌ارزی، به دلیل به وجود آمدن مونواکسیدکربن به جای دی‌اکسیدکربن، وزن مولکولی کاهش می‌یابد. لذا، افزایش ضربه ویژه احتمالاً بیشتر متأثر از کاهش جرم مولکولی گازهای خروجی از نازل است.

هیدروژن

در این قسمت اثرات تغییر سوخت بر روی یک‌رموتور با پیکربندی ثابت بررسی می‌شود. ابتدا در شکل ۱۵ تغییرات فشار روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف برای دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده در داخل محفظه مشاهده می‌شود. در این حالت نیز فشار محفظه در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی در حالت نرخ محدود بیشتر از حالت گونه‌های تثبیت‌شده است. فشار محفظه با سوخت هیدروژن بیشتر از سوخت کروسین است و برای سوخت هیدروژن، اختلاف فشار در محفظه در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده بسیار کم است. در نتیجه برای تخمین فشار محفظه استفاده از فرض نرخ محدود یا گونه‌های تثبیت‌شده برای سوخت هیدروژن تفاوت چندانی ندارد و با درصد خطای تقریبی ۱۰، مقدار فشار محفظه را می‌توان پیش‌بینی کرد.

تغییرات دمای سکون روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده در شکل ۱۶ نمایش داده شده است. در این حالت، به دلیل انجام واکنش‌ها در محفظه، مقدار دمای سکون در نازل افزایش می‌یابد. در حالت گونه‌های تثبیت‌شده تغییرات بسیار اندکی در دمای سکون مشاهده می‌شود و می‌توان جریان را به صورت آیزنتروپیک در نظر گرفت. این امر به دلیل سرعت بالای گازها و در نتیجه زمان کم به منظور تبادل حرارت است. مانند حالت استفاده از سوخت کروسین، در این حالت نیز با افزایش نسبت هم‌ارزی اختلاف حل حالت گونه‌های تثبیت‌شده و نرخ محدود کاهش می‌یابد. در محفظه نیز هیچ تفاوتی بین حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده برای دما مشاهده نمی‌شود.



شکل ۱۵- تغییرات فشار روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده با پیشران هیدروژن-اکسیژن

شکل ۱۶- تغییرات دمای سکون روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده با پیشران هیدروژن-اکسیژن

تغییرات دمای استاتیک روی محور در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده در شکل ۱۷ ترسیم شده است. حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده دارای اختلاف کمی در پیش‌بینی دمای محفظه است. افزایش دما در خروجی، به دلیل به وجود آمدن موج ضربه‌ای مایل در نازل است. با افزایش نسبت هم‌ارزی تفاوت پیش‌بینی دما برای حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده کمتر می‌شود. پس می‌توان نتیجه گرفت که در نسبت‌های هم‌ارزی بالا حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده به منظور محاسبه دما و فشار تفاوت چندانی با یکدیگر ندارند. از

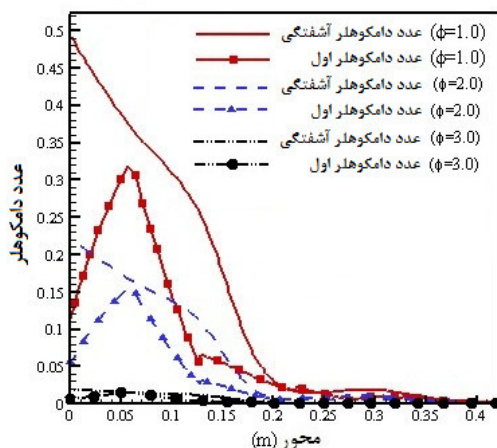
طرفی، با وجود دمای یکسان محفظه برای سوخت‌های هیدروژن و کروسین، فشار محفظه با سوخت هیدروژن بیشتر از کروسین است که این موضوع به دلیل جرم مولکولی کم محصولات هیدروژن نسبت به کروسین است، زیرا حجم محفظه و دبی جرمی ورودی برای هر دو پیشران یکسان است.

عدد دامکوهلر نیز در این قسمت به دو روش ذکر شده محاسبه شده است و مقدار آن در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در طول محور محفظه و نازل در شکل ۱۸ رسم شده است. برای سوخت هیدروژن نیز، در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی، آشفستگی کنترل‌کننده نرخ انجام واکنش‌ها در داخل محفظه است. مانند قسمت قبل، به منظور بررسی دقیق‌تر، موتور به سه قسمت مجزا (محفظه، نازل هم‌گرا، نازل واگرا) تقسیم می‌شود. در شکل‌های ۱۹ تا ۲۱ عدد دامکوهلر بر روی محور در سه قسمت مجزای اشاره‌شده ترسیم شده است. در تمامی نسبت‌های هم‌ارزی عدد دامکوهلر در داخل محفظه بیشتر از ۱ است (جدول ۷). نتیجه، برای سوخت هیدروژن نیز پیشنهاد می‌شود که در داخل محفظه از مدل‌های واکنش سریع (نظیر مدل اتلاف گردابه) استفاده شود.

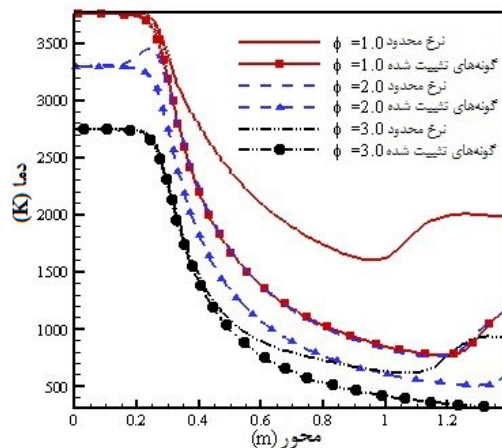
جدول ۷ - مقدار عدد دامکوهلر اول در سه محدوده مختلف موتور با پیشران هیدروژن - اکسیژن

مکان	نسبت هم‌ارزی	مقدار بیشینه	مکان مقدار بیشینه (m)	مقدار کمینه	مکان مقدار کمینه (m)
محفظه ($x \leq 0.175$)	۱	۳۱۸	A	۳۹	B
نازل هم‌گرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)	۱	۳۹	B	۸/۵۵	C
نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)	۱	۸/۵۵	C	1×10^{-4}	D
محفظه ($x \leq 0.175$)	۲	۱۵۴	A	۱۳	B
نازل هم‌گرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)	۲	۱۳	B	۵/۰۴	C
نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)	۲	۵/۰۴	C	7×10^{-7}	D
محفظه ($x \leq 0.175$)	۳	۱۴	A	۱/۹	B
نازل هم‌گرا ($0.175 \leq x \leq 0.324$)	۳	۱/۹	B	۰/۱۲۲	C
نازل واگرا ($0.324 \leq x \leq 1.4$)	۳	۰/۱۲۲	C	8×10^{-7}	D

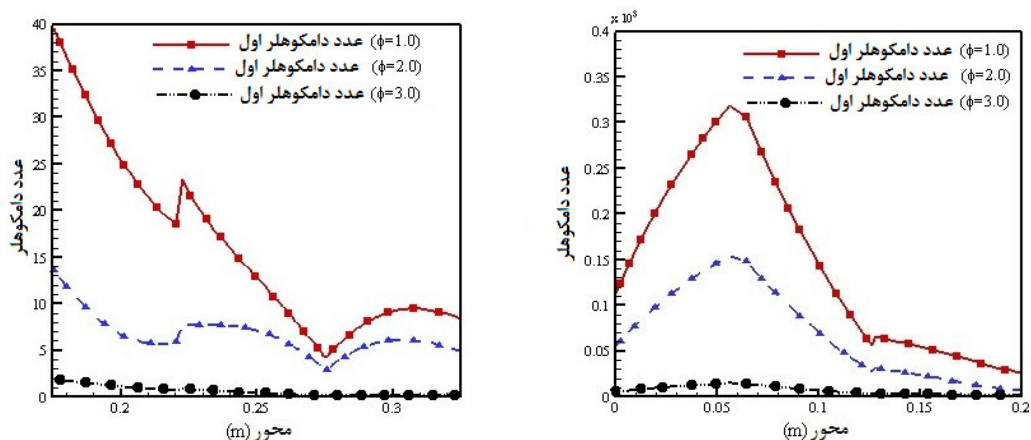
A = ۰/۰۶۵, B = ۰/۱۷۵, C = ۰/۳۲۴, D = ۱/۴



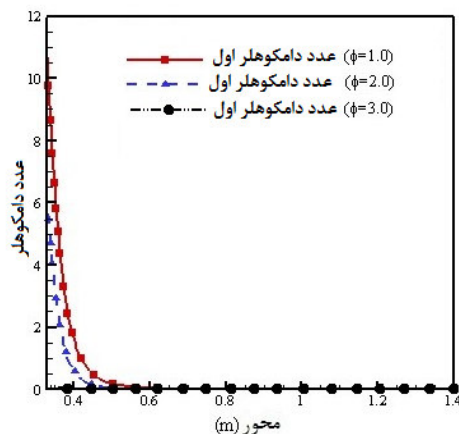
شکل ۱۸- عدد دامکوهلر اول و آشفستگی روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران هیدروژن - اکسیژن



شکل ۱۷- تغییرات دمای استاتیک روی محور برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده با پیشران هیدروژن - اکسیژن



شکل ۱۹- تغییرات عدد دامکوهلر اول روی محور در داخل محفظه برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران هیدروژن-اکسیژن هم‌گرا برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران هیدروژن-اکسیژن



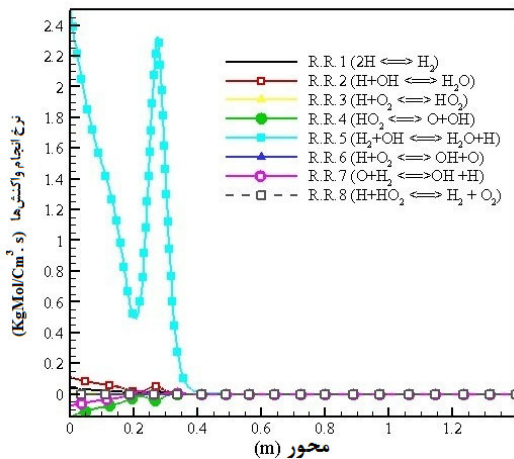
شکل ۲۰- تغییرات عدد دامکوهلر اول روی محور در داخل نازل واگرا برای نسبت‌های هم‌ارزی مختلف با پیشران هیدروژن-اکسیژن

نکته قابل توجه این است که مقدار عدد دامکوهلر در داخل محفظه در حالت سوخت هیدروژن به شدت کمتر از کروسین است. در قسمت هم‌گرا عدد دامکوهلر نسبت به محفظه کاهش یافته و در نسبت هم‌ارزی ۳، مقدار عدد دامکوهلر در نازل هم‌گرا ($x = 0.205$) به یک می‌رسد، ولی در نسبت‌های هم‌ارزی ۱ و ۲ عدد دامکوهلر در قسمت واگرای نازل به ترتیب در مکان‌های ۰/۴۱۸ و ۰/۳۸۴ به یک می‌رسد. می‌توان گفت که برای سوخت هیدروژن در محدوده خاصی از جریان فرا صوت حل حالت نرخ محدود پیشنهاد می‌شود. در واقع در این حالت مقیاس زمانی واکنش‌های شیمیایی به اندازه‌ی نیست که قابل مقایسه با سرعت جریان باشد و این موضوع حاصل واکنش‌پذیری بالای هیدروژن است. از دیگر نکات مهم می‌توان به یکسانی مکان عدد دامکوهلر حداکثر برای دو سوخت اشاره کرد ($x = 0.065$).

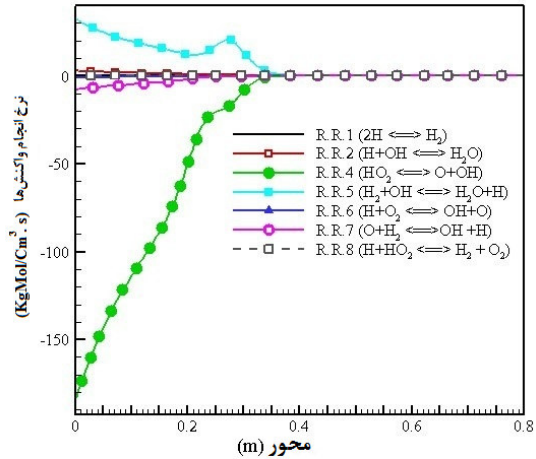
نرخ واکنش‌ها بر روی محور در نسبت هم‌ارزی ۱، ۲ و ۳ به ترتیب در شکل ۲۲، ۲۳ و ۲۴ مشاهده می‌شود. برای پیشران هیدروژن-اکسیژن ۱۴ واکنش ابتدایی در نظر گرفته شده است. واکنش ۵ در این حالت باعث تولید رادیکال هیدروژن می‌شود و این رادیکال تولیدشده در واکنش‌های اول، ششم و هشتم موجب تولید رادیکال‌های هیدروکسیل و اکسیژن می‌شود. رادیکال‌های تولیدی از این واکنش‌ها موجب تولید رادیکال هیدروپروکسی (HO_2) و هیدروژن پروکساید (H_2O_2) می‌شوند که تولید این دو رادیکال نمایش‌دهنده حرکت واکنش به سمت کامل شدن است. در نتیجه هرچقدر نرخ انجام واکنش ۵ بیشتر

باشد، مقدار تولید این دو رادیکال افزایش یافته و واکنش به صورت کامل تر انجام می شود. در تمامی نسبت های هم ارزی، واکنش ۵ $(H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H)$ دارای بیشینه نرخ واکنش است. نرخ انجام واکنش ها برای سوخت هیدروژن تا $x=0.4$ به صفر می رسد. این بدان معناست که انجام واکنش ها تا بعد از گلوگاه $(x=0.324)$ ادامه دارد.

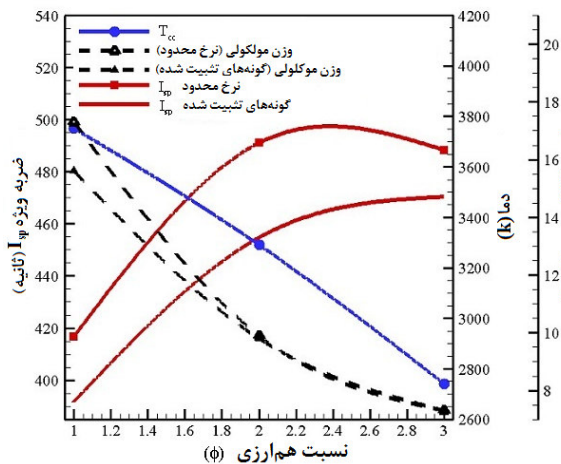
مقدار ضربه ویژه رابطه مستقیم با سرعت خروجی گازها دارد. سرعت خروجی گازها از موتور نیز تابعی از نوع سوخت و نسبت انبساط است. در شکل ۲۵ مقدار تغییرات ضربه ویژه، دمای محفظه و جرم مولکولی خروجی در نسبت های هم ارزی مختلف برای دو حالت گونه های تثبیت شده و نرخ محدود مشاهده می شود. مقدار ضربه ویژه در حالت نرخ محدود در نسبت هم ارزی ۲ بیشینه است و با افزایش نسبت هم ارزی مقدار ضربه ویژه برای دو حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده به یکدیگر نزدیک می شوند. با افزایش نسبت هم ارزی، به دلیل احتراق ناقص، دما افت کرده و وزن مولکولی نیز کاهش می یابد. مشاهده می شود که با افزایش نسبت هم ارزی اختلاف ضربه ویژه در حالت نرخ محدود و گونه های تثبیت شده کاهش می یابد که در تحقیقات [۲۱] نیز بیان شده است.



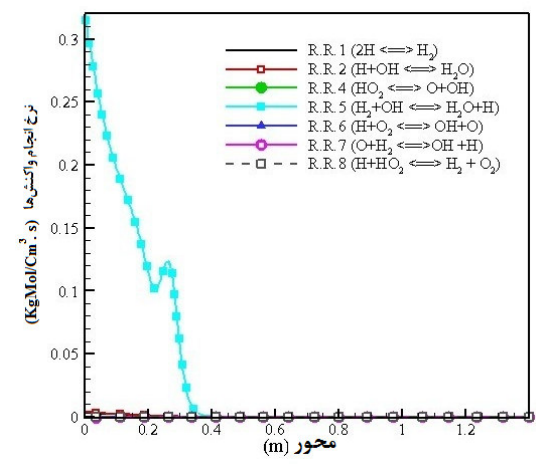
شکل ۲۳- نرخ انجام واکنش ها روی محور در نسبت هم ارزی ۲ برای پیشران هیدروژن-اکسیژن



شکل ۲۲- نرخ انجام واکنش ها روی محور در نسبت هم ارزی ۱ برای پیشران هیدروژن-اکسیژن

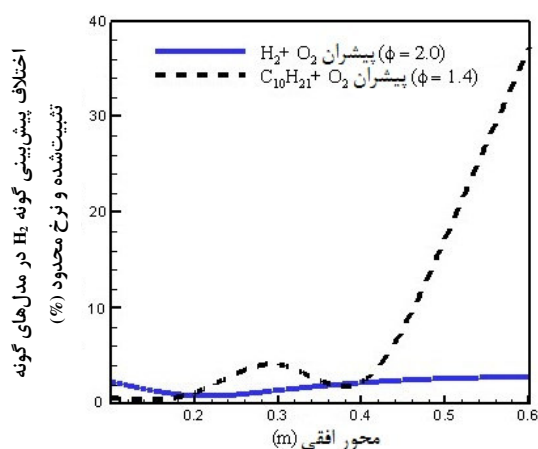


شکل ۲۵- تغییرات مشخصه های موتور در نسبت های هم ارزی متفاوت برای پیشران هیدروژن-اکسیژن



شکل ۲۴- نرخ انجام واکنش ها روی محور در نسبت هم ارزی ۳ برای پیشران هیدروژن-اکسیژن

در ادامه به بررسی اختلاف بین حل تعادلی و نرخ محدود برای سوخت کروسین و هیدروژن به ترتیب در نسبت هم‌ارزی ۱/۴ و ۲ پرداخته می‌شود. برای محاسبه مقدار تعادلی از نرم‌افزار CEA استفاده شده است؛ بدین صورت که در هر موقعیت مکانی با استفاده از مقادیر دما و فشار محلی (که از حل دو بعدی فلوئنت به دست آمده‌اند)، حل تعادلی انجام شده است. نتایج نرخ محدود به وسیله مدل‌سازی عددی (CFD) به دست آمده است. درصد اختلاف حل تعادلی با نرخ محدود برای پیش‌بینی گونه هیدروژن در شکل ۲۶ مشاهده می‌شود. از شکل ۲۶ می‌توان نتیجه گرفت که اختلاف بین حل تعادلی و نرخ محدود برای سوخت هیدروژن بسیار کم (کمتر از ۲ درصد) است، اگر چه در ناحیه نازل واگرا افزایش می‌یابد، اما این اختلاف در خصوص سوخت کروسین و مخصوصاً در ناحیه نازل واگرا قابل توجه بوده و در پایین دست گلوگاه به شدت افزایشی است. پس برای پیش‌بینی گونه‌ها به صورت تقریبی می‌توان در محدوده فشاری ۱ تا ۱۲۳ بار و محدوده دمایی ۱۴۰۰ تا ۳۳۰۰ کلوین برای پیشران هیدروژن-اکسیژن حل را به صورت تعادلی انجام داد و نتایج مناسبی به دست آورد.



شکل ۲۶- درصد اختلاف پیش‌بینی گونه هیدروژن در دو حالت حل تعادلی و حل نرخ محدود برای سوخت هیدروژن در نسبت هم‌ارزی ۲ و کروسین در نسبت هم‌ارزی ۱/۴

جمع بندی

در این مطالعه، ابتدا شبیه‌سازی موتور سوخت مایع با پیشران کروسین-اکسیژن در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف در دو حالت نرخ محدود (با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی کاهش‌یافته) و گونه‌های تثبیت‌شده انجام شد و نتایج آن باهم مقایسه شد. در ادامه اثرات تغییر سوخت (هیدروژن) در پیکربندی یکسان بررسی شد. در این حالت نیز حل برای نسبت‌های هم‌ارزی متفاوت در دو حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده انجام شد. در انتها نیز حل نرخ محدود با حل حالت تعادلی مقایسه شد. از میان مشاهدات این تحقیق می‌توان موارد زیر را بیان کرد:

- ۱- نتایج این تحقیق موید این مطلب است که با استفاده از سوخت سبک‌تر می‌توان مقدار فشار محفظه را به شدت افزایش داد و به تبع آن مقدار سرعت خروجی را افزایش داد. در این حالت مقدار ضربه ویژه موتور افزایش یافته و به‌زای دبی جرمی یکسان مقدار تراست بیشتر می‌شود.
- ۲- برای سوخت کروسین-اکسیژن حل حالت نرخ محدود مناسب‌تر و به حالت واقعی نزدیک‌تر است. در حالت نرخ محدود یک نقطه بهینه از نظر ضربه ویژه وجود دارد که برای این موتور نسبت هم‌ارزی ۱/۵ است.

۳- در داخل محفظه حل حالت نرخ محدود و گونه‌های تثبیت‌شده تفاوت چندانی در پیش‌بینی دما و فشار محفظه ندارد و با افزایش نسبت هم‌ارزی در محدوده مکانی بیشتری از نازل نیز این دو حل یکسان‌اند. اختلاف بین حل گونه‌های تثبیت‌شده و نرخ محدود برای سوخت کروسین بسیار بیشتر از سوخت هیدروژن است.

۴- در مدلسازی به روش گونه‌های تثبیت‌شده برای پیشران کروسین-اکسیژن افت دمای سکون بیشتری نسبت به پیشران هیدروژن-اکسیژن مشاهده شد که احتمالاً به علت سرعت کمتر جریان گاز و فرصت زمانی بیشتر انتقال حرارت بین گاز و دیواره‌ها برای پیشران کروسین-اکسیژن است. لذا محاسبات جریان آیزنتروپیک برای سوخت‌های هیدروکربنی احتمالاً با خطای بالاتری همراه خواهد بود.

۵- محدوده انجام واکنش‌ها در پیشران کروسین-اکسیژن محدود به داخل محفظه است، ولی در حالتی که پیشران هیدروژن-اکسیژن است، نرخ انجام واکنش‌ها در محدوده بیشتری (قسمتی از نازل و اگر) قابل توجه است. با این وجود در این دو سوخت مکان بیشینه عدد دامکوهلر یکسان است.

۶- در محدوده داخل محفظه احتراق، کنترل‌کننده نرخ واکنش‌ها برای دو سوخت کروسین و هیدروژن آشفتگی است و می‌توان به منظور مدل‌سازی از مدل‌های واکنش سریع استفاده کرد. برای سوخت کروسین در جریان فراصوت (قسمت و اگر) نازل) بهتر است از مدل نرخ محدود استفاده کرد، ولی برای سوخت هیدروژن تنها در محدوده خاصی از جریان فراصوت، لازم است که از این مدل‌ها استفاده کرد.

منابع

1. K. A. Hoffmann and S. T. Chiang, *Computational Fluid Dynamics*, Volume I, 4th Edition, Wichita, Kansas, Engineering Education System, 2000.
2. H. K. Versteeg and M. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Second Edition, Harlow, Pearson Education Limited, 1960.
3. M. H. Shojaeefard, A. R. Noorpoor, V. Keshtiarast, "Numerical Simulation of a Transonic Nozzle Flow," *The Second International and Fifth National Conference of Iranian Aerospace Society*, Aerospace Research Institute, Tehran, Iran, 2004.
4. S. K. Reddy, K. M. Pandey, A. P. Singh, "Numerical Simulation with k- ϵ Turbulence Model for Combustion Chamber of Rocket Engines," *The 11th Asian International Conference on Fluid Machinery and The 3rd Fluid Power Technology Exhibition*, IIT Madras, Chennai, India November 21-23, 2011.
5. M. Pasandideh Fard, M. Saedi Amiri, "2D and 3D Analysis of Outlet Flow of Convergent-Divergent Nozzle with its Plume Entering Elastic Viscous Environment," *7th Annular International Conference of Iranian Aerospace Society*, Sharif University of Technology, Tehran, Iran February 2008. (In Persian)
6. S. M. Dash, "Overlaid Viscous/Inviscid Model for the Prediction of Near Field Jet Entrainment," *AIAA Journal*, Vol. 17, pp. 950-958, 1979.
7. S. M. Dash and R. D. Thorpe, "Shock Capturing Model for One and Two Phase Supersonic Exhaust Flow," *AIAA Journal*, Vol. 19, pp. 842-851, 1981.
8. S. M. Dash, "Analysis of Turbulent Underexpanded Jets," *AIAA Journal*, Vol. 21, pp. 505-514, 1985.
9. S. M. Dash, "Observation on Practical Turbulent Modeling for High Speed Jet/Plume Flow Fields," *AIAA paper* 91-1789, 1991.
10. S. M. Dash, "Recent Advances in Jet Flowfield Simulation," *AIAA paper* 93-4390, 1993.
11. H. Ahmadi, Sh. Talebi, "Supersonic Turbulent Flow over a Rocket with its Plume," *10th Fluid Dynamics Conference*, Yazd University, Iran, November 2006. (In Persian)
12. Y. D. Kang and B. Sun, "Numerical Simulation of Liquid Rocket Engine Thrust Chamber Regenerative Cooling," *J. of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 25, No. 1, January-March 2014.
13. S. K. Kim, M. Joh, H. S. Choi and T. S. Park, "Multidisciplinary Simulation of a Regeneratively Cooled Thrust Chamber of Liquid Rocket Engine: Turbulent Combustion and Nozzle Flow," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 70, 2013, pp. 1066-1077.
14. Y. S. Chen, T. H. Chou, B. R. Gu, J. S. Wu, B. Wu, Y. Y. Lian and L. Yang, "Multiphysics Simulations of Rocket Engine Combustion," *J. of Computers & Fluids*, 45, 2011, pp. 29-36.

15. M. Masquelet, S. Menon, Y. Jin and R. Fredrich, "Simulation of Unsteady Combustion in a LOX-GH₂ Fueled Rocket Engine," *J. of Aerospace Science and Technology*, 13, 2009, pp. 466-474.
16. J. Y. Choi "A Quasi Global Mechanism of Kerosene Combustion for Propulsion Applications," *47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, San Diego, California, 31 July - 03 August 2011.
17. B. D. Hitch and D. W. Senser, "Reduced H₂-O₂ Mechanisms for use in Reacting Flow Simulation," *AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, Nevada, USA, January 11-14, 1988.
18. A. Santana Junior and L. C. Sandoval Góes, "Design and Dynamic Characteristics of a Liquid-Propellant Thrust Chamber," *In: Fundamental Course in Engine Design*. São José dos Campos, CTA/IAE, 2000.
19. A. Mardani, S. Tabejamaat and M. B. Mohammadi, "Numerical Study of Effect of Turbulence on Rate of Reaction in the MILD Combustion Regime," *Journal of Combustion Theory and Modelling*, 15, No. 6, 2011, pp. 753-772.
20. S. R. Turns and S. J. Mantel, *An Introduction to Combustion*, Third Edition, New York, McGraw Hill, 2012.
21. W. T. Olson, "Recombination and Condensation Processes in High Area Ratio Nozzles," *J. Amer. Rocket Soc.*, 32, No. 5, May 1962, pp. 672-680.

English Abstract

Study of Equivalence Ratio and Propellant Effects on a Reactive Flow with Low Residence Time and Highly Variable Temperature and Pressure

Mohammad Saleh Abdollahpour, Amir Mardani and Vahid Rezaei

Department of Aerospace Engineering, Sharif University, Tehran, Iran

(Received: 2014/10/9, Received in revised form: 2015/2/9, Accepted: 2015/2/23)

Gas aerothermodynamics is the thermodynamics of a gas in high velocity associated with heat transfer. One of the devices which takes advantage of this field is a rocket system. High velocity flow field with intensely varying pressure and temperature along the nozzle axis leads to reduction of residence time. This means the balance between chemical and flow time scales is changing in the flow stream. In this study, reacting flow composition variations in combustion chamber and nozzle of a liquid rocket engine is numerically investigated for hydrogen and kerosene fuels regarding combustion efficiency and performance of the engine. Numerical modeling has been conducted with the aid of commercial code FLUENT. $k - \epsilon$ turbulence and EDC combustion models have been used to consider turbulence effects on the flow field. 9-step and 14-step skeletal mechanisms have been utilized to represent chemical oxidation of kerosene and hydrogen, respectively. Results show a reasonable accuracy in comparison with experimental measurements. As a result of this study, it can be concluded that in combustion chamber and convergent nozzle, the frozen and finite rate modeling have almost same results in all equivalence ratios. However, in divergent section of the nozzle some reactions proceed in finite rate regarding to fuel type. Finally, it can be noted that maximum Damkohler number occurs in the same axial position for both kerosene and hydrogen fuels.

Keywords: Combustion, Equivalence ratio, Computational fluid dynamics, Kerosene, Hydrogen.