

شبیهسازی عددی اختلاط و احتراق در شرایط فوق بحرانی در محفظه مدل

احسان بارانی و امیر مردانی ً

esnbarani@alum.sharif.edu ، کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، amardani@sharif.edu ۲- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران (نویسنده مخاطب)، amardani@sharif.edu (تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۶/۲۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۵/۱۰/۷، پذیرش: ۹۵/۱۲/۹)

چکیده: در این پژوهش، به مطالعه عددی اختلاط و احتراق در شرایط فوق بحرانی پرداخته شده است. رفتار سیال در شرایط فوق بحرانی بسیار پیچیده است. در این شرایط، کشش سطحی مایع صفر می شود و خواص ترمودینامیکی آن مانند ظرفیت حرارتی و چگالی بهشدت دچار تغییر می شود. بدین منظور دو هندسه RCM01 و RCM03 انتخاب شده است که بهترتیب جریان غیرواکنشی فواره فوق بحرانی نیتروژن در فشار حدود ۶۰ بار و جریان واکنشی فوق بحرانی هیدروژن گازی-اکسیژن مایع، که در آن فشار محفظه ۶۰ بار و بالاتر از فشار بحرانی هیدروژن و اکسیژن است، بررسی شده است. در مطالعه پاشش فواره نیتروژن، و با گسستهسازی مرتبه دوم معادلات حاکم، مدلهای مختلف اغتشاشی بررسی شده و مشاهده شده است که مدل $\kappa - \varepsilon$ Realizable نتایج بهتری درخصوص پیش بینی ناحیه لایه برشی، تشکیل گردابههای کناری و درنتیجه اختلاط آرائه میدهد. پیشبینی بهتر مدل *κ – ε* Realizable میتواند ناشی از تخمین بهتر جمله مربوط به گرانروی آشفتگی در فرض بوزینسک باشد. همچنین، مشاهده شده است که میزان بازشدگی فواره ورودی وابسته به نحوه پیش بینی گردابه مجاور دیواره در مدل های اغتشاشی مختلف است. هرچقدر میزان گردابه تخمین زدهشده بزرگتر باشد، اختلاط در هسته مرکزی جریان با نرخ کمتری صورت میگیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی دیرتر یکنواخت خواهد شد. همچنین، در بررسی جریان واکنشی LO_x-GH₂، مدلهای اغتشاشی مختلف و همچنین معادله حالتهای مختلف برای بررسی این شرایط، مطالعه شده است. عملکرد مدلهای مختلف اغتشاشی در پیشبینی شکل شعله و توزیع دما بررسی شده و دیده شده است که مدل *κ – ω* SST عملکرد بهتری در پیشبینی شکل شعله، در شرایطی که از گسستهسازی مرتبه اول بالادست معادلات استفاده شد، دارد. اثر اعمال شرایط گاز حقیقی با شرایط گاز ایدئال در پیشبینی شکل شعله بهخوبی نمایان میسازد که فرض گاز ایدئال در یک احتراق فوق بحرانی خطای زیادی در تخمین شکل و طول شعله به همراه دارد. همچنین، معادلات مختلف پیشنهادشده برای رفتار گاز حقیقی در هر دو آزمایش بررسی شد که مدل SRK دارای نزدیکترین نتایج به دادههای تجربی موجود است.

كليدواژگان: احتراق، فوق بحراني، معادله حالت حقيقي، معادله اغتشاشي، پاشش و اختلاط، هيدروژن و اكسيژن مايع

مقدمه

افزایش کارایی و بهینه کردن طراحیهای ساخت برای وسایل احتراقی فشار بالا، در وسایلی همچون راکتهای سوخت مایع، موتورهای توربینی[۱] و موتورهای دیزل، نیاز به یک درک جامع از پاشش، اختلاط و احتراق پیشرانها در محیطهای مختلف گذربحرانی^۲ و فوق بحرانی دارد. هر سیالی در نمودار ترمودینامیکی فشار حجم خود دارای نقطهای بهنام نقطه بحرانی^۲ است. ازلحاظ ترمودینامیکی، نقطه بحرانی جایی است که مرز بین فاز مایع و گاز از بین می رود. برای هر نقطه بحرانی، یک دمای راندان ازلحاظ را رای نقطهای به موتورهای مختلف بحرانی این راید محیطهای مختلف بعرانی (۲ مودینامیکی فشار حجم خود دارای نقطه ای به موتورانی کاری است. ازلحاظ ترمودینامیکی، نقطه بحرانی جایی است که مرز بین فاز مایع و گاز از بین می رود. برای هر نقطه بحرانی، یک دمای بحرانی (T_cr) و یک فشار بحرانی (۲_cr) تعریف می کنند. سیال فوق بحرانی به طورکلی به سیالی گفته می شود که دما و فشار آن

^{1.} Transcritical

^{2.} Critical point

بالای دما و فشار نقطه بحرانی باشد. اطلاعات در مورد مراحل احتراقی در فشارهای پایین از اطلاعات مربوط به دینامیک سیالات فوق بحرانی بسیار بیشتر است. لذا، محققانی به مطالعه تجربی و عددی برای شناخت مشخصههای احتراقی این نوع محفظهها بهمنظور کاهش هزینههای حاصل از ساخت و بررسی پارامترهای عملکردی برای بهبود آن پرداختهاند. در دهههای گذشته، برای درک بهتر پدیدههایی که در شرایط فشار بالا رخ می دهد، مطالعات تجربی روی این پدیده صورت پذیرفت. مراکز تحقیقاتی مانند AFRL'، DLR'، ماسکات⁷ و دانشگاه پرینستون با ساخت محفظه آزمایشگاهی، در بازه وسیعی از فشار و ماهای مختلف، به بررسی و مطالعات تجربی پرداختند. در فشارهای محفظه پایین، پدیده اختلاط به شکل کلاسیک است و با شار⁴ تکانه کنترل می شود، به این نحو که پس از پاشش، ابتدا لیگامنت⁶ و سپس قطره تشکیل می شود و این قطرات تبخیر می شوند. با افزایش فشار، نحوه اختلاط تغییر کرده و دیگر لیگامنت و قطرهای تشکیل نمی شود. بدین علت که کشش سطحی از بین می رود و سیال وارد فاز جدیدی می شود که بعضی از خواص آن مخلوطی از خواص فاز مایع و فاز گاز است و بعضی از نواص ترموفیزیکی دستخوش تغییر می شود. تغییراتی همچون به وجودآمدن گرادیانهای شد در چگالی، تغییر در رفتار گرمای نهان در فشار ثابت، تغییر در خواص انتقالی³، از بین رفتن آنتالپی تبخیر، عدم جود کشش سطحی، تغییر در خواص خلالیت سیال، بعضی از رفتارهای آن را شبیه به مایع، بعضی از آنها را شبیه به گاز و بعضی از رفتار آنها را متفاوت از دو فاز دکرشده می کند[7].

نیومن و برزوستوسکی [۳] به مطالعه پاشش سیال CO₂ با دمای ورودی ۲۹۵ درجه کلوین به درون محفظهای که مخلوط CO₂ و N₂ در نزدیکی شرایط بحرانی قرار دارد پرداختند. دما و فشار بحرانی CO₂ بهترتیب برابر با ۳۰۴ درجه کلوین و ۷۳ اتمسفر است و دما و فشار بحرانی N₂ بهترتیب برابر با ۱۲۶ درجه کلوین و ۳۴ اتمسفر است. برای تصویربرداری از فن شادوگرافی^۷ استفاده شد تا سیر تحولی و برهم کنش سیال پاشیده شده با سیال محیط اطراف بررسی شود. نتایج نشان می داد که در فشار فوق بحرانی، ساختار سطحی فواره^۸ و تشکیل افشانه^۹ بسیار به افزایش دما و غلظت CO₂ موجود در محفظه وابسته است. این وابستگی به علت ناپدید شدن کشش سطحی و بهبود تبخیر CO₂ در نزدیکی و بالای دمای بحرانی است. قطرات در اطراف مرز فواره مشاهده شد، اما اندازه آن ها با افزایش دمای محیط فوق بحرانی بعد فواره آسفته چگالی متغیر تکفاز بود، زمانی که فشار فوق بحرانی یا زیر بحرانی و دمای محیط فوق بحرانی بود.

مطالعات علمی مختلفی در این زمینه صورت پذیرفت تا شناخت بهتری از پاشش و اختلاط سیال فوق بحرانی فراهم شود. در این راستا، پاشش نیتروژن مایع بههمراه گاز هلیوم به محیط نیتروژن گازی در یک گستره وسیع فشاری انجام شد. چهرودی در این زمینه مطالعات فراوانی را انجام داده است. در سال ۱۹۹۹، او اولین فردی بود که که دادههای کمیای را از فواره نیتروژن پاشیدهشده به محیط نیتروژن در شرایط نزدیک بحرانی استخراج کرد[۵۰۴]. او نرخ رشد فواره و همچنین رفتار فواره را در این شرایط بهدست آورد. مطالعات او در سال ۲۰۰۰، بر سیال نیتروژن در شرایط فوق بحرانی، حاکی از خودمتشابه ^{۱۰} بودن جریان بود[۶]. بررسیهای او بر مشخصههای کمی، در فواره نیتروژن فشاربالا، بر نرخ رشد اولیه ^{۱۱} سیال بود و آنها را با جریانهای دیگر مقایسه کرد[۷]. تطابق دادههای مورد بررسی با فواره چگالی متغیر تراکمناپذیر بسار خوب بود.

- 7. Shadowgraphy
- 8. Jet
- 9. Spray
- 10. Self-similar

^{1.} Air Force Research Laboratory

^{2.} Deutsches Zentrum für Luftund Raumfahrt

^{3.} Mascotte

^{4.} Flux

^{5.} Ligament6. Transport Properties

^{11.} Initial growth rate

باشد[۸]. در ادامه، توسط گروه ایشان اثر امواج آکوستیک بر فواره نیتروژن مطالعه و میزان حساسیت فواره به نوسان امواج بررسی شده و امپدانس آکوستیکی و نسبت تکانه سوخت و اکسنده بهعنوان پارامترهایی برای پایداری در شرایط عملکردی متفاوت پیشنهاد شد[۱۰،۹].

آزمایشهای سیستماتیک پاشش سرد توسط مایر و همکارانش در آزمایشگاه DLR آلمان انجام شد[۱۱–۱۳]. پاشش نیتروژن مایع به محیط گازی نیتروژن-هلیوم با درنظر گرفتن و بدون درنظر گرفتن گاز هلیوم بررسی شد. فشار محفظه از ۱۰ تا ۶۰ اتمسفر تغییر می کرد و دمای آن ۳۰۰ درجه کلوین بود. دمای پاشش نیتروژن به ۹۰ درجه کلوین می سید، درحالی که دمای پاشش هلیوم گازی از ۱۰۰ تا ۳۷۰ کلوین متغیر بود. هنگامی که فشار از مقادیر زیر بحرانی تا فوق بحرانی افزایش پیدا می کرد، تغییرات مشابهی در ساختارهای سطح فواره در تصاویر شادوگرافی مشاهده شد. به علت ناپدیدشدن کشش سطحی سازوکار ^۱ اتمیزه شدن ^۲ به ناپایداری لایه برش تغییر پیدا کرد و اختلاط سیال متراکم نیتروژن با هلیوم یا گاز محیط، شبیه به فواره چگالی متغیر و لایه برش آشفته، در شرایط نزدیک یا فوق بحرانی، رفتار می کرد.

اندرسون در سال ۱۹۹۵ از تکنیک پراکنش رامان^۲ استفاده کرد تا توزیع دما و چگالی فوارههای نیتروژن را در آزمایشهای فشاربالا اندازهگیری کند[۱۴]. ایشان توانستند، با استفاده از حل تشابهی و توزیع چگالی بیبعدشده[†] در پاییندست، رفتار فوارهها را به سیال تکفاز چگالیمتغیر ارتباط دهند. توزیع دما و چگالی خط مرکز فواره کرایوژنیک⁶ در حدود فشار بحرانی (۴۰ اتمسفر) توسط اشوالد و شیک بهدست آمد[۱۵،۲]. آنها یادآور شدند که هنگامیکه دمای سیال از مقادیر زیر بحرانی به مقادیر فوق بحرانی افزایش پیدا میکند، سرعت تنزل کردن چگالی بیشتر خواهد شد، اگرچه دما در پاییندست دور توزیع ثابتی دارد. این موضوع به تغییرات خواص ترموفیزیکی خلاف قاعده در نزدیکی نقطه بحرانی نیتروژن نسبت داده میشود. این اندازهگیریهای کمی، که در فشارهای بالا انجام شد، زمینه را برای مطالعه احتراق و شناخت پدیدههای آن فراهم کرد.

مطالعات صورت گرفته بر احتراق فشار بالا به سوخت و اکسندههایی همچون هیدروژن-اکسیژن و متان-اکسیژن متمرکز است. برای مطالعات تجربی از روشهای اپتیکی مانند PLIF³، CARS⁷ و شادو گرافی بهره برده شده است. دادههای تجربی موجود در دو حوزه کانتورهای مربوط به رادیکال OH و توزیعهای دمایی صورت گرفته و توزیع سرعت در این حوزه وجود ندارد، و متأسفانه دادههای تجربی که در اختیار سایر پژوهشگران قرار دادهاند بسیار اندک است. برای بررسی احتراق، نمی توان از گونه O₂H استفاده کرد، زیرا این گونه، بعد از احتراق، در تمامی فضای محفظه موجود است، اما بررسی گونه OH می توان صلاعات سودمندی را در رابطه با ساختار شعله در اختیار قرار دهد. کندل و همکارانش با روش PLIF و اندازه گیری رادیکال OH، ساختار شعله هیدروژن-اکسیژن را بررسی کردند[۶۸]. مطالعات آنها نشان داد که با افزایش نسبت شار تکانه، زاویه بازشدگی شعله اندکی کاهش می یابد و تأثیر نسبت شار تکانه در این محدوده بسیار کم است. شایان ذکر است که ساختار شعله در فشارهای پایین توسط تبخیر قطراتی که از شکستهشدن و اتمیزهشدن فواره مایع تولید شده است، کنترل می شود که معله در فشارهای پایین توسط تبخیر قطراتی که از شکستهشدن و اتمیزهشدن فواره مایع تولید شده است، کنترل می شود که می در آن نسبت شار تکانه بسیار بر شکستهشدن مؤثر است. در فشارهای فوق بحرانی نرخ گسترش شعله به اختلاط آشفته ناشی محیط است که مقدار آن به میزان سطح مشترک و نرخ کرنش محلی آن وابسته است. سینگلا و همکارانش سوخت متان را مدنظر قرار داده و به مطالعه شکل شعله در بازههای مختلف فشار و دما پرداختند[۷]. آنها گزارش کردند که رخداد توامان

- 1. Mechanism
- 2. Atomization
- 3. Raman Scattering technique
- 4. Normalized density profiles .
- 5. Cryogenic
- 6. Planar laser-induced fluorescence7. Coherent anti-stokes raman scattering
- 7. Concrent anti-stokes raman scatterin

گذر سوخت و اکسنده از دمای بحرانی شکل و ساختار شعله را تغییر میدهد و متفاوت تر از زمانی است که سوخت یا اکسنده دمای زیر بحرانی داشته باشد.

برای بررسی و مطالعه تمام پارامترهای مهم در احتراق فوق بحرانی، مطالعات تجربی هزینه بسیار زیادی را تحمیل می کند. لذا، مطالعات عددی مختلفی برای شناخت بهتر این پدیده فیزیکی و تأثیر پارامترهای مختلف بر اختلاط و احتراق آن توسط پژوهشگران صورت پذیرفت. بلن و اکنگ مطالعات عددی را به روش DNS بر لایه اختلاط (، در شرایط غیر احتراقی فشار بالا، انجام دادند و اثر معادله حالت و اختلاط آشفته را بررسی کردند و بیان کردند که روش DNS بهخوبی قادر به شبیهسازی سیال فوق بحرانی، بهخصوص در ناحیه لایه اختلاط، است[۱۸-۲۱]. فوستر و میلر این مطالعات را به روش LES و DNS بر ساختار هیدروژن-اکسیژن در اعداد رینولدز بالا مطالعه کردند و یک روش تحلیلی را برای مقیاسهای کوچک آشفته ارائه کردند[۲۲, ۲۲]. اوفلین و یانگ اولین افرادی بودند که به مطالعه ناحیه پایداری شعله هیدروژن-اکسیژن، در ناحیه نزدیک انژکتور بعد از لبه ، پرداختند[۲۴]. آنها مشاهده کردند، در حالت اختلاط فوق حرانی و گذربحرانی، شعله در نزدیکی انژکتور پایدار میشود. زانگ و یانگ ناحیه نزدیک میدان را در انژکتور برشی در شرایط گذربحرانی متان-اکسیژن بر روی پایداری شعله مطالعه کردند[۲۵]. ژوپیتر ساختار شعله نفوذی را بر هیدروژن-اکسیژن در ارتباط با نرخ کرنش بررسی کرد [۲۷،۲۶]. مسکوالت محفظه شامل چند انژکتور را بهصورت دوبعدی و تقارن محوری مطالعه کرد و اثر احتراق را بر شار حرارتی دیواره بررسی کرد [۲۸]. کرتن و همکارانش ساختار شعله هیدروژن-اکسیژن را با روش RANS، مدل اغتشاشی $\omega - \kappa$ مدل احتراقی FPV، معادله حالت PR⁶ و جهار نوع سینتیک شیمیایی سینتیک لی⁷، سینتیک وارناتز^۲ جاچیموسکی⁶ و سینتیک مارينف بررسي كردند [٢٩]. نتايج ايشان بيان مي داشت كه رويكرد تكفاز اويلرين براي اين شبيهسازي مناسب است و سینتیک لی نتایج مناسبتری نسبت با سایر سینتیکها داشته است. پوشنر و فیتزر با استفاده از نرمافزار تجاری CFX، روش RANS، اعمال مدل اغتشاشي κ – ε Standard، معادله حالت گاز ايدئال و گاز واقعی (RK^{\\,},PR) به شبیهسازی احتراق هیدروژن-اکسیژن پرداختند[۳۰-۳۲]. هدف آنها شبیهسازی شرایط فوق بحرانی با نرمافزار تجاری CFX و اثر معادله حالت واقعی و بررسی شرایط گذربحرانی بود. آنها طول شعله را بیشتر از حالت واقعی پیشبینی کردند. جورجی، سیولتی و فیکارلا به مطالعه عددی در شرایط فوق بحرانی پرداختند و ترکیبهای مختلفی از مدلهای احتراقی، ترمودینامیکی و سنیتیکی را باهم مقایسه کردند[۳۳-۳۳]. پارک و کیم مدلهای مختلف الگوریتمهای فشارپایه در حالت PISO" را برای احتراق هيدروژن-اكسيژن در آزمون A-60، با استفاده از معادله حالت SRK^{۱۲}، مدل احتراقی فليملت و مدل اغتشاشی κ – ε Standard، بررسی کردند و اختلاف آنها و بهترین نتیجه از بین آنها را بیان کردند[۳۷]. نتایج آنها نشان داد که در حل عددی، با بهروزرسانی کسر مولی در حلقه تصحیح فشار، میتوان پایداری عددی را افزایش داد. ولی در مطالعات آنها طول شعله بلندتر از داده تجربی پیشبینی شده است. بانوتی و همکاران مدل ترمودینامیکی جدیدی برای معادله حالت پیشنهاد کردند و آن را با روش RANS در آزمایش A-60 اجرا کردند [۳۸]. نظر آنها بر این است که معادله حالت پیشنهادشده تطابق بهتری نسبت به سایر معادلههای حالت دارد. بنمنصور و همکاران هندسه ماسکات را بهصورت سهبعدی شبیهسازی کردند و

- 1. Mixing layer
- Subgrid-Scale
 Tip

- 6. Li-scheme
- Li-scheme
 Warnatz
- 8. Jachimowski
- 9. Marinov
- 10. Ridlick-Kwong
- 11. Pressure Implicit with Split Operator
- 12. Soave-Ridlick-Kwong

^{5.} Hp 4. Elsa

Flamelet progress variable
 Peng-Robinson

نتایج خود را با دادههای NIST^۲ مقایسه کردند و در آن یک روش جایگزینی برای استفاده از دادههای NIST در خواص انتقالی انتقالی ارائه دادند[۳۹]. مدل اغتشاشی EDM^۲ و *κ* – ε Realizable ، به همراه مدل احتراقی EDM^۲، در این مقاله مورد مطالعه شده است. همچنین، سازوکارهای شیمیایی تکمرحلهای و دومرحلهای مورد استفاده واقع شده است.

اکثر مطالعات صورت گرفته در این زمینه با معادله حالت ینگ-رابینسون (PR) [۴۰] و یا با معادله حالت ساو-ریدلیچ-وانگ (SRK)[۴۱] است و مدل اغتشاشی استفادهشده عمده مطالعات، κ – ε Standard است. در این زمینه اگرچه کار عددی صورت گرفته است و اطلاعات جامع نسبتا کمی در این حوزه در دسترس است، اما جا برای گسترش تحقیقات وجود دارد و می توان مطالعات بیشتری انجام داد. لذا، در تحقیق جاری، دو هندسه آزمایشگاهی RCM01"[۴۳،۴۲] و RCM03[۴۴]، که مورد مطالعه اکثر بررسیها بوده و در واقع دادههای تجربی بیشتری نسبت به سایر هندسهها در دسترس قرار داده، انتخاب شدهاند. در ابتدا، هندسه RCM01 مطالعه می شود که در آن پاشش نیتروژن مایع در محیط حاوی نیتروژن گازی آزمایش شده است. چگونگی رفتار معادلههای حالت گاز و همچنین مدلهای اغتشاشی بر پایه متوسط گیری رینولدز بررسی شده است و در انتها مقایسهای بین مدلهای مختلف و نتایج معتبر تجربی صورت پذیرفته است. سپس، به بررسی جریان واکنشی فوق بحرانی هیدروژن-اکسیژن مایع در محفظه احتراق RCM03 یرداخته شده است. نتایج حاصل از شبیهسازی با دادههای تجربی موجود مقایسه شده و در ادامه به بررسی رفتار جریان و شعله و همچنین نحوه پیش بینی مدل های اغتشاشی مختلف پرداخته شده است. همچنین، نقش رفتار معادلات حالت در پیشبینی شعله فوق بحرانی بررسی شده است. در مطالعه حاضر، سعی شده است با توجه به دادههای تجربی اندک، مقایسه تا حد امکان جامعتری بین نتایج شبیهسازی با دادههای تجربی موجود صورت پذیرد. لذا، با تمهیدات صورتپذیرفته، اطلاعات تجربی موجود پالایش بیشتری شده و از جنبههای مختلف بررسی شدهاند. از طرفی، با توجه به اینکه در اکثر مطالعات صورت گرفته تقریبا از یک یا تعداد محدودی مدل اغتشاشی و معادلات حالت حقیقی بهره بردهاند، در این تحقیق سعی شده، برای شناخت بهتر شرایط فوق بحرانی، انواع مدل های اغتشاشی دومعادلهای آزمایش و عملکرد آنها نشان داده شود. همچنین، مدنظر بوده است که اثر چندین معادله حالت بررسی شود که در این مطالعه، علاوهبر معادلات حالت ايدئال، سه معادله حالت گاز واقعی SRK ،PR و ARK الحاظ و ساختار شعله پيش بينی شده توسط هر كدام گزارش شدهاند. ضمنا جهت مدلسازی رابطه آشفتگی جریان و شیمی واکنش ها از مدل حجمی مفهوم اضمحلال گردابه (EDC)⁶، که کمتر قبلا در این مسئله لحاظ شده، استفاده شده است. سینتیک شیمیایی مورد استفاده نیز، سینتیک بورک[۴۵] است که آخرین سینتیک استخراجشده برای احتراق در فشارهای بالاست و در سال ۲۰۱۲ ارائه شده است.

معادلات حاكم

^{1.} National Institute of Standards and Technology

^{2.} Eddy Dissipation Concept

^{3.} Rocket Combustion Model

^{4.} Aungier -Ridlick-Kwong

^{5.} Eddy dissipation Concept

برای مدلسازی احتراق از مدل مشهور مفهوم اضمحلال گردابه (EDC) که توسعهیافته مدل اضمحلال گردابههاست استفاده شده است. مدل EDC یک مدل با رویکرد جزئیات احتراق در جریان آشفته است. فرض این مدل بر این اساس استوار است که واکنش در ساختارهای کوچک آشفتگی بهنام مقیاسهای کوچک انجام می شود. مقیاس طولی ساختارهای کوچک به صورت زیر محاسبه می شود [۵۱].

$$= 2.1377 \left(\frac{v\varepsilon}{k^2}\right)^{1/4} \tag{1}$$

همچنین، مقیاس زمانی انجام واکنش در ساختارها بهصورت زیر محاسبه میشود.

 $\tau=0.4082\left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2}$

ξ

که در آن ج، r ، r ، r و r بهترتیب نشان دهنده مقیاس طولی ساختارهای کوچک، مقیاس زمانی انجام واکنش در ساختارها، نرخ اضمحلال آشفته، انرژی جنبشی آشفته و گرانروی است. در این حالت فرض می شود که در هر ساختار احتراق به صورت فشار ثابت و مانند یک راکتور همگن انجام می شود. برای کاهش حجم محاسبات، از الگوریتم ISAT['] استفاده شده است تا سرعت حل تا ۲/۵ برابر افزایش پیدا کند. نرخ انجام واکنش برای هر گونه *i* به صورت زیر محاسبه می شود.

$$R_i = \frac{\rho\xi^2}{\tau[1-\xi^2]} (Y_{i,\tau} - Y_i)$$

در رابطه بالا، Y_{i,τ} کسر جرمی جزء i در ساختار مورد نظر پس از زمان τ است. در شبیه سازی حاضر، با توجه به شرایط فشاری محفظه احتراق، از سینتیک پیشنهادی بروک و همکارانش[۴۵] استفاده شده است که شامل ۱۳ جزء شیمیایی و ۲۷ واکنش است و برای احتراق هیدروژن-اکسیژن در فشار بالا ارائه شده است. که در جدول ۱ به آن اشاره شده است.

جدول ۱- سینتیک بروک[۴۵]

Table 1- Burke Mechanism							
Num#	Elementary reaction	А	n	Ea			
1	H + O2 = O + OH	1.04E+14	0	1.53E+04			
2	0 + H2 = H + OH	3.82E+12	0	7.95E+03			
3	H2 + OH = H2O + H	2.16E+08	1.51	3.43E+03			
4	OH + OH = O + H2O	3.34E+04	2.42	-1.93E+03			
5a	H2 + M = H + H + M	4.58E+19	-1.4	1.04E+05			
5b	H2 + Ar = H + H + Ar	5.84E+18	-1.1	1.04E+05			
5c	H2 + He = H + H + He	5.84E+18	-1.1	1.04E+05			
6a	0 + 0 + M = 02 + M	6.16E+15	-0.5	0.00E+00			
6b	0 + 0 + Ar = 02 + Ar	1.89E+13	0	-1.79E+03			
6c	0 + 0 + He = 02 + He	1.89E+13	0	-1.79E+03			
7	O + H + M = OH + M	4.71E+18	-1	0.00E+00			
8a	H2O + M = H + OH + M	6.06E+27	-3.32	1.21E+05			
8b	H20 + H20 = H + OH + H20	1.01E+26	-2.44	1.20E+05			
9	H + 02 (+M) = H02	4.65E+12	0.44	0.00E+00			
10	HO2 + H = H2 + O2	2.75E+06	2.9	-1.45E+03			
11	HO2 + H = OH + OH	7.08E+13	0	2.95E+02			
12	HO2 + O = O2 + OH	2.85E+10	1	-7.24E+02			
13	HO2 + OH = H2O + O2	2.89E+13	0	-4.97E+02			
14	HO2 + HO2 = H2O2 + O2	4.20E+14	0	1.20E+04			
15	H2O2(+M) = OH + OH(+M)	2.00E+12	0.9	4.88E+04			
16	H2O2 + H = H2O + OH	2.41E+13	0	3.97E+03			
17	H202 + H = H02 + H2	4.82E+13	0	7.95E+03			
18	H202 + 0 = OH + H02	9.55E+06	2	3.97E+03			
19	H202 + OH = H02 + H20	1.74E+12	0	3.18E+02			

1. In-Situ Adaptive Tabulation

(۲)

(٣)

معادلههای حالت، خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیال فوق بحرانی

عبارت پاشش فوق بحرانی می تواند به گونه های متفاوتی از فرایندهای پاشش ارجاع داده شود. در اینجا لازم است دمای کاهیده (T_r) و فشار کاهیده (P_r) را تعریف کنیم. اگر دمای سیال را به دمای بحرانی آن تقسیم کنیم، دمای کاهیده ⁽ محاسبه می شود و به همین صورت فشار کاهیده (I_r) را تعریف کنیم. اگر دمای سیال را به دمای بحرانی آن تقسیم کنیم، دمای کاهیده ⁽ محاسبه می شود و (T_r) و فشار کاهیده (I_r) را تعریف کنیم. اگر دمای سیال را به دمای بحرانی آن تقسیم کنیم، دمای کاهیده ⁽ محاسبه می شود و (T_r) و فشار کاهیده (I_r) را تعریف کنیم. اگر دمای سیال را به دمای بحرانی آن تقسیم کنیم، دمای کاهیده (I_r) را تعریف می شود. اندیس inj به پاشش و اندیس env به محیط باز می گردد. در حالت کلی، چهار دسته بندی را می توان درنظر گرفت که این دسته بندی در جدول ۲ و شکل ۱ قابل مشاهده است. اصطلاحا به پاشش های حالتهای d، c و b گذربحرانی گفته می شود، زیرا از خطوط مربوط به ناحیه فوق بحرانی عبور می کنند. سیال در نزدیکی نقطه بحرانی دارای گرمای ویژه بسیار بالاست و به این معنی است که می تواند گرمای زیادی را به خود جذب کند و تغییر دمای اندکی داندی دادی دارنی را در مانی در ناز را در می شرد. در حالت کلی در نزدیکی نقطه بحرانی دارای گرمای ویژه بسیار بالاست و به این معنی است که می تواند گرمای زیادی را به خود جذب کند و تغییر دمای اندکی داشته باشد. لذا، می توان آن را همانند یک چاه^۲ حرارتی درنظر گرفت.



Temperature

Figure 1- Supercritical fluid thermodynamic diagrams and different injection states شکل ۱– نمودار ترمودینامیکی سیال و نحوه تغییرات در محدوده فوق بحرانی

اگر یک حالت تعادلی فرض شود، برای مشخصشدن حالت آن به سه خاصیت فشار، دما و حجم نیاز است. یک معادله حالت تابعی بین سه پارامتر فشار، دما و حجم است. بیشتر معادلات حالت مورد استفاده امروز نیمه تجربی اند که پایه و اساس آن ها از تئوری استخراج شده است. معادله حالت گاز ایدئال توسط کلاپیرون^۲ در اوایل قرن نوزدهم بیان شد. این معادله برمبنای فرضیاتی بیان شده است و تا زمانی که در نوع مسئله مورد مطالعه این فرضیات صادق باشد، استفاده از این معادله را این معادله آن ها از تئوری استخراج شده است. معادله حالت گاز ایدئال توسط کلاپیرون^۲ در اوایل قرن نوزدهم بیان شد. این معادله برمبنای فرضیاتی بیان شده است و تا زمانی که در نوع مسئله مورد مطالعه این فرضیات صادق باشد، استفاده از این معادله صحیح است. اواخر سده نوزدهم، واندروالس[۵۲]، در مطالعات فشاربالا، عدم تطابق نتایج عددی و تجربی را مشاهده کرد. از این رو، دو فرض مهم را برای اصلاح معادله حالت گاز ایدئال درنظر گرفت. مطابق فرض اول، در فشارهای بالا تاثیر پذیری

^{1.} Reduced temperature

^{2.} Sink

^{3.} Clapeyron

مولکولها از یکدیگر غیرقابل انکار است. از این رو، نزدیکشدن مولکولها به یکدیگر باعث ایجاد نیروی جاذبه بین آنها میشود؛ بنابراین پارامتر جذب $a = a_0 \alpha$) را برای این اصلاح پیشنهاد کرد. مطابق فرض دوم، در فشارهای بالا تراکم مولکولها زیاد میشود، لذا حجمی از ظرف مربوط به مولکولهای اشغالشده است. بنابراین، حجم واقعی کمتر از حجم ظرف است. با استفاده از این دو فرض، معادله حالت گاز ایدئال را برای فشارهای بالا تصحیح و معادله حالت جدیدی را پیشنهاد کرد که پایه معادلات حالت مکعبی^۱ شد. ریدلیچ و وانگ[۵۵] در مطالعات خود متوجه شدند که محاسبات فوگاسیته در کسر مولیهای مختلف متفاوت است. فوگاسیته را میتوان بهعنوان میزان و تمایل ماده مورد نظر به ترک فازی که در آن قرار دارد درنظر گرفت. فوگاسیته نشاندهنده فراریت آن ماده از فاز است، زیرا فوگاسیته مشخص میکند که یک ماده به چه آسانی میتواند از یک فاز به فاز دیگر برود. مفهوم فوگاسیته توسط لوییس بیان شد[۵۴]. آنها در مطالعات تجربی خود برای پارامتر جذب واندروالس^۲ به

واندروالس[۵۲] اصل حالتهای مشابه^⁷ را بیان کرده بود. این اصل بیان میکند که سیالها در دما و فشار کاهشیافته یکسان داری حجم کاهشیافته یکساناند. بدین معنی که اگر دو گاز میزان انحراف آنها از حالتهای بحرانی خودشان مشابه هم باشد، همانند هم رفتار میکنند. با گذشت زمان، فرمولهای جدید و با دقت بیشتری برای حالتهای مشابه با پارامترهای بیشتر ساخته شد. ضریب ایسنتریک^۵ مفهومی است که توسط پیتزر[۵۵] در سال ۱۹۵۵ بیان شد و در تعیین مشخصههای مواد بسیار مفید و کاربردی است و همانند سایر خواص مواد خالص (وزن مولکولی، دمای بحرانی، فشار بحرانی، حجم بحرانی) یکی از مشخصههای صحیح مواد است. پیتزر با تحلیل منحنیهای فشار بخار مواد خالص به این ضریب دست پیدا کرد و برای منحنی فشار بخار، رابطه ترمودینامیکی کلاپیرون-کلازیوس را استفاده کرد. ضریب ایسنتریک میزان غیرکروی بودن (خروج از مرکز) یک مولکول را نمایش می دهد. لذا، پیتزر بیان داشت که سیالات با ضریب ایسنتریک میزان غیرکروی بودن (خروج از کاهیده و فشار کاهیده مشابه هم رفتار میکنند. در سال ۱۹۷۲، ساو[۴۱] با استفاده از این مفهوم که میزان جذب بین دو مولکول، علاوهبر دما، به میزان غیرکروی بودن دو مولکول وابسته است، ضریب جذب را علاوهبر وابسته بین دو ایسنتریک مرتبط کرد. از این رو، این ضریب دوستیره شد. مبنای این کار از آنجا نشت میگیرد که ساو برای بهبود نمایش مولکول، علاوهبر دما، به میزان غیرکروی بودن دو مولکول وابسته است، ضریب جذب را علوهبر وابسته بودن به دما، به ضریب مولکول، علاوهبر دما، به میزان غیرکروی بودن دو مولکول وابسته است، ضریب جذب را علوهبر وابسته بودن به دما، به ضریب مولکول، علوهبر دما، به میزان غیرکروی بودن دو مولکول وابسته است، ضریب جذب را علوهبر وابسته بودن به دما، به ضریب

در دهه ۱۹۷۰، پنگ [۴۰] معادله حالتی را برای سیستمهای گاز طبیعی گسترش داد. این معادله حالت بسیار به معادله حالت SRK نزدیک است. مناسب برای سیستم گاز-مایع است و برای نشاندادن چگالی در هیدروکربنهای بالاتر مناسبتر است. لذا، معادله حالت PR EOS پیشنهاد شد. معادله حالت ARK EOS، از معادله RK EOS استفاده کرده است و برای بخش اول معادله ضریب ع را اضافه کرده است. ضریب ع به مقدار دو مرتبه از مقدار b کوچکتر است. و این معادله به این علت این ضریب را تعریف کرده که در نزدیکی نقطه بحرانی، ازلحاظ ترمودینامیکی، شرایط پایدارتری داشته باشد. مقایسه نتایج او با نتایج تجربی نشان داده است که افزودن ضریب ع تأثیری در میدان جریان ندارد و تنها در حوالی نقطه بحرانی میتواند مهم باشد. در معادله می مقدار مار یستریک پیشنهاد می شود[۵۶]

از زمانی که معادله حالت گاز ایدئال پاسخگوی مسائل نبود، معادله حالتهای زیادی برای گاز واقعی بهوجود آمد و پیشنهاد شد. اما تعداد زیادی از آنها نتیجه خوبی درپی نداشتند و تعداد کمی از آنها، بهعلت دقت بالا و زمان محاسباتی کمتر، کاربرد وسیعتری از بقیه معادلات یافتند که معادلات ARK ،PR ،SRK را میتوان نام برد. هر سه معادله، مشتقاتی از معادله واندروالس هستند که بهتفضیل در بالا بیان شد. معادله حالتهای پیچیدهتر دیگری، با پارامترهای وسیعتر و دقت بالاتر،

^{1.} Qubic Equation of states

^{2.} Attractive van der waals parameter

^{3.} Ridlick-Kwong Equation of States

^{4.} Principle of Corresponding States (PCS)

^{5.} Acentric factor

^{6.} Saturation Pressure

همانند BWR EOS ¹LK EOS و BWR EOS ^۳ نیز وجود دارند که هنوز کاربرد وسیعی نیافتهاند. معادله حالتهای حقیقی فیمانند BWR EOS و BWR EOS و دارند که مناز کرد[۵۲]. ذکرشده در بالا را میتوان به شکل یک معادله حالت با ضرایب مطابق جدول ۳ بیان کرد[۵۲]. (۴)

P	=	$\overline{\tilde{v}-b+\xi}$	$\overline{\tilde{v}^2 + \Theta b \tilde{v} + \Xi b^2}$		(1)

Equation	Θ	Ξ	ξ	b	<i>a</i> ₀	$\alpha(T,\omega)$		
VDW	0	0	0	$\frac{RT_c}{8P_c}$	$\frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$	1		
RK	1	0	0	$\frac{0.08664RT_c}{P_c}$	$\frac{0.4275R^2T_c^{2.5}}{P_c}$	$\frac{1}{T^{0.5}}$		
SRK	1	0	0	$\frac{0.08664RT_c}{P_c}$	$\frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c}$	$[1 + (f_{\omega})(1 - T_r^{0.5})]^2$ $f_{\omega} = 0.48 + 1.57\omega - 0.176\omega^2$		
PR	2	-1	0	$\frac{0.07780RT_c}{P_c}$	$\frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c}$	$[1 + (f_{\omega})(1 - T_r^{0.5})]^2$ $f_{\omega} = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$		
ARK	1	0	$\frac{RT_c}{P_c + \frac{a_0}{V_c(V+b)} + b - V_c}$	$\frac{0.08664RT_c}{P_c}$	$\frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c}$	$\frac{1}{T^{-[0.4986+1.173\omega+0.475\omega^2]}}$		

جدول ۳ – ضرایب معادله حالتهای حقیقی Table 3- Coefficients of the Real equation of state

 a_0 که در آن P_c ، T_c و P_c بهترتیب دما، فشار و حجم بحرانی، T_r دمای کاهیده، R ثابت جهانی گازها، ω ضریب ایسنتریک، a_0 پارامتر مربوط به جذب مولکولی و d پارامتر مربوط به دفع مولکولی (شاخصهای از حجم مولکولهای اشغال شده) است. برای اختلاط چند گاز، معادله حالت، با به کار بردن قانون اختلاط غیرخطی، قابل استفاده است. لذا، برای محاسبه پارامترهای α و b در اختلاط چند گاز، می توان از معادله های زیر استفاده کرد.

$$a\alpha = \sum_{i=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} X_i X_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j} (1 - \kappa_{ij})$$

$$b = \sum_{i=1}^{N} X_i b_i$$
(δ)

که در آن، X_i کسر مولی اختلاط و _{Ki} ضریب اندرکنش دوتایی^[†] را بیان میکند. خواص ترمودینامیکی، همانند انرژی داخلی، آنتالپی، آنتروپی، گرمای ویژه در حجم ثابت و گرمای ویژه در فشارثابت، براساس تئوری ترمودینامیک پایهای محاسبه میشوند. هر خاصیت بهراحتی از جمع خواص گاز ایدئال در همان دما و توابع انحراف⁶، که برای سیال چگال اصلاحشده است، محاسبه میشود. زیروند 0، به حالت ایدئال در فشار اتمسفر ارجاع داده میشود.

Ν

3. Benedict-Webb-Rubin-Starling EOS

5. departure functions

^{1.} Lee Kesler EOS

^{2.} Benedict-Webb-Rubin EOS

^{4.} binary interaction coefficient

$$e(T,\rho) = e_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[\frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} (\frac{\partial P}{\partial T})_{\rho} \right]_T d\rho \tag{Y}$$

$$h(T,P) = h_0(T) + \int_{P_0}^{P} \left[\frac{1}{\rho} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_P\right]_T dP$$
(A)

$$s(T,\rho) = s_0(T,\rho_0) - \int_{\rho_0} \left[\frac{1}{\rho^2} (\frac{\partial P}{\partial T})_\rho \right]_T d\rho$$
(9)

$$C_{p}(T,\rho) = C_{V0}(T) - \int_{\rho_{0}}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial^{2} P}{\partial T^{2}} \right)_{\rho} \right]_{T} d\rho + \frac{T}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial^{2} P}{\partial T^{2}} \right)_{\rho} / \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T}$$
(1.)

خواص انتقالی گاز واقعی (گرانروی و رسانندگی گرمایی) در جریان فوق بحرانی برپایه نتایج چانگ و همکارانش [۵۷] و تئوری چاپمن-انسکوگ[۵۸] بیان شده است. این تئوری در اصل برای گازهای رقیق فرموله شده است، اما برای فشار بالا نیز توسعه داده شده است. برای مخلوطهای فشاربالا (گاز واقعی)، گرانروی (η) به صورت زیر نوشته می شود.

$$\eta = \eta^* \eta^0 = \eta^* \frac{40.785 F_{Cm} (M_m T)^{1/2}}{V_{Cm}^{2/3} \Omega_v} \tag{11}$$

که در آن، η^0 گرانروی فشار پایین، η^* عبارت اصلاحی برای گرانروی فشار بالا، M_m وزن مولکولی مخلوط، V_{cm} حجم بحرانی مخلوط، Ω_v انتگرال برخورد و F_{cm} ضریب اسنتریک مخلوط است.

هندسه و شرایط عملکردی محفظه

نیاز پژوهشگران برای دادههای تجربی، که حاوی اطلاعات میدان جریان در انژکتورها باشد، موجب شد که نشستهایی در زمینه افشانه مایعات برگزار شود. بیشتر مطالعاتی که بر روی افشانه جریانهای چندفازی صورت گرفته بود در دومین کارگاه بینالمللی مدل کردن احتراق راکت ارائه شد[۶۰،۵۹،۴۲]. هدف این کارگاه، مشخص کردن آزمایشهای تجربی در بین مطالعات صورت گرفته و همچنین مشخص کردن ابزار مورد نیاز دینامیک سیالات محاسباتی حاکم بر فیزیک جریان برای درک بهتری از احتراق افشانه بر روی سوختهای کرایوژنیک بود. آنها در این کارگاه چهار نمونه⁷ را مطالعه و بررسی کردند. در آن سمینار، جریان سرد نیتروژن در حالت گذربحرانی (A-100)، جریان سرد نیتروژن در حالت فوق بحرانی (RCM01-B)، جریان گرم تکانژکتور هیدروژن گازی-اکسیژن مایع در حالت زیربحرانی (RCM02) و جریان گرم تکانژکتور هیدروژن گازی-اکسیژن مایع در حالت فوق بحرانی (RCM03) انتخاب و مطالعه شدند.

در مطالعه حاضر، در ابتدا، برای درک بهتر یک محفظه احتراق در شرایط فوق بحرانی، سعی بر آن شده است که پاشش فوق بحرانی نیتروژن، به دور از پیچیدگیهای احتراقی، مطالعه شود. لذا، محفظه BCM01-B انتخاب شده است. در این محفظه پاشش نیتروژن در دمای ۱۲۸/۷ کلوین به محیط نیتروژن در دمای ۲۹۸ درجه کلوین و فشار ۵/۹۸ مگاپاسکال بررسی میشود. سپس، مطالعه احتراق در شرایط فوق بحرانی بر محفظه RCM03 لحاظ می شود.

محفظه آزمایشگاهی RCM01 در شرایط فوق بحرانی

طرحواره هندسه محفظه RCM01 در شکل ۲ نمایش داده شده است. این محفظه دارای یک استوانه به قطر ۱۲۲ میلیمتر و طول ۱۰۰۰ میلیمتر است. در مرکز این استوانه انژکتور آن متصل شده که قطر این انژکتور ۲/۲ میلیمتر و طول آن ۹۰

^{1.} The 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling (IWRCM)

^{2.} Case

میلیمتر است. اگر نسبت طول به قطر انژکتور بیش از ۴۰ باشد، یک توزیع سرعت کاملاً آشفته در هنگام ورود به محفظه ایجاد می کند. شرایط عملکردی هندسه در نقطه T₁ بیان میشود. محفظه RCM01 به بررسی جریان سرد می پردازد. در این محفظه نیتروژن مایع (LN₂) به یک محیط نیتروژن با دمای ۲۹۸ کلوین پاشیده میشود. بررسی این جریان سرد اثر معادله حالت گاز واقعی و تأثیر اختلاط آشفته را بدون درنظر گرفتن پیچیدگیهای احتراق نمایش می دهد. پیچیدگی شبیهسازی پاشش فوق بحرانی و اثرات معادله حالت، هندسه ساده و متقارن RCM01 را توجیه می کند. این محفظه در دومین کارگاه بینالمللی MRCM در دو شرایط مختلف A و B آزمایش شده و دادههای تجربی آن مورد استفاده پژوهشگرانی است که خواص ترموفیزیکی را در نزدیکی یا بالای نقطه بحرانی مطالعه می کنند. آزمایش A به بررسی می کند. دمای هردو مورد در نزدیکی دمای بحرانی ایتروژن قرار دارد و فشار هردو بالاتر از فشار بحرانی نیتروژن را بررسی می کند. دمای هردو مورد در نزدیکی دمای بحرانی ایتروژن قرار دارد و فشار هردو بالاتر از فشار بحرانی نیتروژن است. دادههای تجربی توزیع چگالی در راستای شعاعی در چند ناحیه محوری اندازه گیری شده است. محفظه با یک سیال و به صورت سرد آزمایش شده است در راستای شعاعی در چند ناحیه محوری اندازه گیری شده است. محفظه با یک سیال و به صورت سرد آزمایش شده است و همچنین خواص بحرانی سیال نیتروژن را نشان می دهد. موالا مور و برانی نیتروژن است. دادههای تجربی توزیع چگالی و همچنین خواص بحرانی سیال نیتروژن را نشان می دهد. مطالعه حاضر تنها بر مورد B صورت پذیرفته تا شبیه سازی جریان و قوق بحرانی نیتروژن مورد مطالعه قرار گیرد.



Figure 2- Schematic geometry of the RCM01 chamber شکل ۲- طرحواره هندسه محفظه RCM01

جدول ۴ - شرایط عملکردی آزمایش A و B

Table 4- Operating condition of case A and B						
	Case A	Case B				
Chamber Pressure (MPa)	3.97	5.98				
Inlet Temperature (K)	126.9	128.7				
Mass Flow rate (kg/s)	0.00995	0.01069				
Reduced Pressure	1.167	1.759				
Reduced Temperature	1.005	1.02				

عدول ۵- خواص بحرانی سیال نیتروژن

Table 5- Critical properties of N ₂				
Critical temperature (K)	126.192			
Critical pressure (MPa)	3.3958			
Critical density (kg/m ³)	313.300			
Acentric factor	0.0372			

میدان جریان درون محفظه کاملاً سهبعدی است. با اعمال برخی فرضیات ساده کننده، میدان جریان سهبعدی داخل محفظه بهصورت متقارن محوری با دقت قابل قبول مدلسازی میشود. شبیهسازی با استفاده از حل گر فشار پایه ^۱ بهصورت ضمنی^۲ در فضای متقارن محوری و بهصورت پایا حل شده است. برای ارتباط فشار با میدان سرعت از الگوریتم SimpleC استفاده شده فضای متقارن محوری و بهصورت پایا حل شده است. برای وی ایراط فشار با میدان سرعت از الگوریتم SimpleC استفاده شده فضای متقارن محوری و بهصورت پایا حل شده است. برای ارتباط فشار با میدان سرعت از الگوریتم SimpleC استفاده شده است. گسسته سازی تمامی معادلات با استفاده از روش Quick، که یک روش مرتبه ۲ است، صورت گرفته است. شکل ۳ میدان حل، شبکه محاسباتی و شرایط مرزی را بهوضوح نمایش می دهد. این شبکه به صورت چندبلوکه^۳ با شبکههای باسازمان^۴ ایجاد شده است. نکته قابل توجه در این شبکه لایه مرزی بر روی دیوارهها و ناحیه ورودی نیتروژن است که باید بسیار دقیق اعمال شده است. نکته قابل توجه در این شبکه لایه مرزی بر روی دیوارهها و ناحیه ورودی نیتروژن است که باید بسیار دقیق اعمال شده است. در این میام در این فرایط ای مرزی بر روی دیوارهها و ناحیه ورودی نیتروژن است که باید بسیار دقیق اعمال شده است. مورد می می دود می معادل در این شبکه به مورت چندبلوکه با شبکههای باسازمان^۴ ایجاد شده است. نکته قابل توجه در این شبکه لایه مرزی بر روی دیوارهها و ناحیه ورودی نیتروژن است که باید بسیار دقیق اعمال شده است. موجود می شود. بدین منظور، همواره شرایط 1 > ⁺ بر روی دیوارههای محفظه اعمال شده است.

برای اعمال شرط مرزی ورودی نیتروژن مایع، از شرط دبی جرمی ورودی^۵ استفاده شده است. دیواره انژکتور و دیوارهای که انژکتور به آن متصل میشود، با استفاده از شرط عدم لغزش و بهصورت بیدررو، و دیواره بالای محفظه، با شرط عدم لغزش بهصورت دماثابت، اعمال شده است. برای شرط مرزی خروجی از شرط فشار خروجی^۶ استفاده شده است. معادلات توسط کد تجاری Ansys Fluent 15.0 حل شدهاند. بهمنظور حصول اطمینان از عدم وابستگی حل عددی به شبکه محاسباتی مورد نظر، استقلال از شبکه مطالعه شد. بررسی با شبکههای مختلف صورت پذیرفته است که مستقل بودن از نتایج در دو شبکه محاسباتی با تعداد سلول محاسباتی ۱۲۱۷۵۰ و ۲۰۵۶، مستقل بودن شبکه ۱۲۱۷۵۰ را تایید میکند که به علت اختصار بیان نمی شود.



Figure 3- Computational domain, Boundary condition and computational Grid of RCM01 RCM01 شكل ۳- ميدان حل، شرايط مرزى و شبكه محاسباتى محفظه

محفظه آزمایشگاهی RCM03

طرحواره هندسه محفظه RCM03 در شکل ۴ نمایش داده شده است[۶۱،۴۴]. بیشتر مطالعات تجربی، که در این زمینه توسط این مرکز صورت گرفته، بهنام ماسکات است. دادهبرداری از محفظه احتراق توسط تصویربرداریهای اپتیکی CARS و PLIF صورت گرفته است. شکل شعله و طول آن برای سوختهای هیدروژن-اکسیژن و متان-اکسیژن در فشار و دبیهای مختلف اندازه گیری شده است. مقطع محفظه احتراق مقطع مربعی با ابعاد ۵۰mm × ۵۰mm طول آن ۴۵۸mm، قطر نازل آن ۹۳۳ طول قسمت همگرای آن ۲۰mm است. دارای یک انژکتور برشی است. قطر انژکتور مرکزی آن که مربوط به خروج اکسیژن است ۳/۶ mm و قسمت خروجی آن ۵۰mm است که با زاویه [°]۸ بههم متصل شدهاند. ورودی هیدروژن در انژکتور به صورت هم محور با اکسیژن است که قطر داخلی و خارجی آن به ترتیب ۳m ۸/۵ و ۲۰۰۰ است. نمونههای آزمایشگاهی بررسی شده

5. Mass Flow inlet

^{1.} Pressure based

^{2.} Impilicit

^{3.} Multi bluck 4. Structured

^{6.} Pressure outlet

احتراق هیدروژن −اکسیژن کد A و C هستند که در محدوده فشارهای ۰/۱ تا ۲ مگایاسکال واقع شدهاند. حرف C نسبت شار تکانه ٔ پایین و A نسبت شار تکانه بالا را نشان میدهند. فشارهای مختلف ۱، ۱۰، ۳۰ و ۶۰ بار مورد آزمایش قرار گرفتهاند. در این تحقیق، آزمایش مطالعهشده A-60 است که شرایط عملکردی آن در جدول ۳ بیان شده است. فشار محفظه برابر با ۶۰bar است که از فشار بحرانی اکسیژن (۵/۰۴MPa) بیشتر است، در حالی که دمای اکسیژن ۸۵K است که از دمای بحرانی اکسیژن (۱۵۴/۶K) کمتر است و هیدروژن در حالت فوق بحرانی به محفظه پاشیده می شود.

برای بررسی عددی، این هندسه بهصورت دوبعدی متقارن محوری مدلسازی شده است. شایان ذکر است که پوشنر و فیتزر[۳۱]، در مدلسازی خود، هندسه با مقطع مکعبی را بهصورت استوانهای با قطر ۲۸/۸۱mm درنظر گرفته و آن را بهشکل دوبعدي متقارن محوري مدلسازي كردند.

	Table 5- RCM03 (Mascotte A-60) Operation condition								
Species	Pressure [MPa]	Mass flow rate [g/s]	Temperature [K]	Density [kg/m ³]	Velocity [m/s]				
H_2	6	70	287	5.51	236				
O_2	6	100	85	1177.8	4.35				





Figure 4- Schematic geometry of the RCM03 شكل ۴- طرحواره هندسه محفظه RCM03

همان طور که بیان شد، هندسه پیچیده A-60 به مطالعه رفتار احتراق در شرایط فوق بحرانی می پردازد و بررسی این محفظه کمک شایانی به درک مفاهیم آن میکند. شبیهسازی با استفاده از حل گر فشار پایه، بهصورت ضمنی در فضای متقارن محوري و بهصورت پايا حل شده است. براي ارتباط فشار با ميدان سرعت از الگوريتم SimpleC استفاده شده است. شكل ۵، میدان حل، شبکه محاسباتی و شرایط مرزی را بهوضوح نمایش میدهد. این شبکه بهصورت چندبلوکه با شبکههای باسازمان و شبکههای بدون سازمان ٔ ایجاد شده است و بیش از ۹۴ درصد شبکه محاسباتی شبکه باسازمان در برمی گیرد. نکته قابل توجه در این شبکه درنظر گرفتن چندین گره در لایه مرزی بر روی دیوارهها و ناحیه لبه است.

برای اعمال شرط مرزی ورودی هیدروژن و اکسیژن، از شرط دبی جرمی ورودی استفاده شده است. تمامی دیوارههای محفظه، با استفاده از شرط عدم لغزش و بهصورت بىدررو اعمال شده است. براى شرط مرزى خروجي از شرط فشار خروجي استفاده شده است. معادلات توسط كد تجاري Ansys Fluent 15.0 حل شدهاند. به منظور حصول اطمينان از عدم وابستكي حل عددی به شبکه محاسباتی مورد نظر، استقلال از شبکه مطالعه شد. شبکههای مختلف مطالعه شده است. برای نمونه، بررسی

¹ Momentum flux ratio

^{2. 2}D axisymmeteric

^{3.} Unstructured

در حالت سرد، با دو شبکه مختلف با دو سلول محاسباتی ۳۵۷۲۰ و ۱۴۲۸۰۰ (شکل ۶) با معیار نصف کردن تمام سلول های دامنه محاسباتی، همچنین، بررسی در حالت گرم، با سه شبکه مختلف با تعداد سلول محاسباتی ۳۵۷۲۰، ۵۳۰۰۰ و ۷۰۰۰۰ با معیار ریزکردن ⁽ ناحیه OH (شکل ۷)، مستقلبودن از شبکه را تایید میکند. البته شایان ذکر است که برای گسستهسازی معادلات در این حل عددی از روش بالادست مرتبه اول استفاده شده است.



Figure 6- Grid study of RCM03 at two different computational grid, cold study (Compare Temerature, Density and Mass Fraction of O2) شکل ۶- بررسی استقلال از شبکه محاسباتی RCM03 در دو شبکه محاسباتی مختلف در حالت سرد (مقایسه دما، چگالی و کسر جرمی O2)

1. Adaptation



Figure 7- Grid study of RCM03 at three different computational grid, hot study (Compare Temerature and Mass Fraction of species) شکل ۲ – بررسی استقلال از شبکه محاسباتی RCM03 در سه شبکه محاسباتی مختلف در حالت گرم (مقایسه دما، کسر جرمی گونهها)

يافتهها

نتايج محفظه RCM01

نتایج حاصل از بررسی مدلهای اغتشاشی

ابتدا، معادله حالت واقعی SRK فرض میشود و مدل های اغتشاشی دومعادلهای برای تعیین مدل مناسب اغتشاش اعمال میشود. مدلهای اغتشاشی دومعادلهای بررسیشده، E Realizable $\kappa - \varepsilon$ RNG $\kappa - \varepsilon$ RNG $\kappa - \varepsilon$ RNG $\kappa - \varepsilon$ RNG میشود. مدلهای اغتشاشی دومعادلهای بررسیشده، E Standard می مد و مکان $\kappa - \kappa / d_{jet}$ برابر با ۵ و ۲۵، موجود هستند. صحتسنجی نتایج با داده های تجربی مربوط به چگالی در راستای شعاعی، در دو مکان κ / d_{jet} برابر با ۵ و ۲۵، موجود است. لذا، این توزیع چگالی برای مدلهای مختلف ارزیابی شده است. مطابق شکل ۸، داده های تجربی در سمت راست محور است. لذاه این توزیع چگالی برای مدل های مختلف ارزیابی شده است. مطابق شکل ۸، داده های تجربی در سمت راست محور بعد از لایه اختلاط کمی از واقعیت دورتر است و علت انحراف این قسمت از داده های تجربی در مرجع [۶۲] توضیح داده شده است. چون هندسه به صورت متقارن محوری مدل شده است. لذا مقایسه با سمټ چپ دادههای معول تر به نظر می آید. همان طور است. چون هندسه به صورت مقارن محوری مدل شده است، لذا مقایسه با سمټ چپ داده ها معقول تر به نظر می آید. همان طور شمل ۸-۵ می از واقعیت دورتر است و علت انحراف این قسمت از دادههای تجربی در مرجع [۶۲] توضیح داده شده است. چون هندسه به صورت متقارن محوری مدل شده است، لذا مقایسه با سمټ چپ دادهها معقول تر به نظر می آید. همان طور شرایط فوق بحرانی فواره، چگالی بسیار بیشتر از نواحی کناحیه با چگالی بالا در مرکز شکل می گیرد. در این ناحیه، به دلیل شرایط فوق بحرانی فواره، چگالی بسیار بیشتر از نواحی کناحیه با چگالی بالا در مرکز شکل می گیرد. در این ناحیه، به دلیل شرایط فوق بحرانی فواره، چگالی بسیار بیشتر از نواحی کنار است. در عین حال، بین جریان ورودی و میدان می شود. این شرایط فرق برشی ایجاد می شود در ایکن می می در این ناحیه، به دلیل شرایط فوق بحرانی فواره، چگالی بسیار بیشتر از نواحی کنار است. در عین حال، بین جریان ورودی و میدان می شود. این شرایط در اخلاف بین در ورد بر می در ایم بریا ی و مودین چگالی میدان می ورد پر مرمز و پی میند انرژی جنبشی آشفتگی و نرخ اضمحلال نمودارهای جریان و همچنین چگالی به نوع پیش بینی آن ها در مورد پارامترهایی مانند انرژی جنبشی آشفتگی و نرخ اضمحلال آن و به عبارتی گرانوی آشفتگی و است.

همه مدلهای استفاده شده چگالی در خط مرکز ⁽ را درست پیش بینی کرده اند، اما بعد از لایه اختلاط اختلافات شروع می شود که Realizable $\kappa - \varepsilon$ Realizable را بهتر پیش بینی کرده است و تطابق بهتری با داده های تجربی دارد. شکل $h - \varepsilon$ Realizable را در تحده اختلاط را بهتر پیش بینی کرده است و تطابق بهتری با داده های تجربی دارد. شکل $h - \varepsilon$ Realizable را در تحده اختلاط را بهتر پیش بینی کرده است و تطابق بهتری با داده های تجربی دارد. شکل $h - \varepsilon$ Realizable را در تحده اختلاط را بهتر پیش بینی کرده است و تطابق بهتری با داده های تجربی دارد. شکل $h - \varepsilon$ Realizable را در تحده از ناحیه اختلاط را بهتر پیش بینی کرده است و تطابق بهتری بیش بینی شده، اما با دارد. شکل $h - \varepsilon$ مرکز در تحده مرکز در بهتر پیش بینی شده ام با دارد. شکل محده از با داده های تجربی زیاد است. ε Realizable مرکز در تیجه شکل کلی توزیع را بهتر پیش بینی کرده و به داده های تجربی نزدیک تر است.

^{1.} Center line



Figure 8- Compare radial density profile at different turbulent models with Experimental data (in two section) for RCM01 شکل ۸ – مقایسه توزیع چگالی در راستای شعاعی برای مدل های اغتشاشی مختلف با دادههای تجربیRCM01[۶۲]

مدل E Realizable - K از یک تابع متغیر برای پیش بینی ضرایب مربوط به گرانروی آشفتگی استفاده می کند. به همین دلیل، برای جریان فوارههای محدود نتایج بهتری نسبت به دیگر مدلهای اغتشاشی ارائه می دهد. در واقع عبارت تنشهای رینولدز در معادله تکانه با دقت بهتری پیش بینی می شود. میزان باز شدگی فواره ورودی به نحوه پیش بینی گردابه مجاور دیواره در مدلهای اغتشاشی مختلف وابسته است، که شکل ۹ و جدول ۷ به وضوح این موضوع را بیان می دارد. گردابه شکل گرفته در نزدیکی دیواره وابسته به ابعاد محفظه است. هر چقدر میزان گردابه تخمین زده شده بزر گ تر باشد، اختلاط در هسته مرکزی جریان با نرخ کمتری صورت می گیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی دیرتر یکنواخت خواهد شد.



Figure 9- Contour of the Receculation zone created with different turbulence models for RCM01 شکل ۹- کانتور مربوط به گردابههای ایجادشده با مدلهای اغتشاشی مختلف برای RCM01

فواره پاشیده شده به یک محیط در راستای شعاعی دارای توزیع تابع گوسین است. لذا، برای میزان بازشدگی میتوان از معیارهای مختلف^۱ FWHM، FWHM و FWHM استفاده کرد. معیار FWHM مکان هندسی نقاطی است که در آنجا اختلاف بیا شرعای مختلف (FWHM و FWHM یا سرعت)، به نصف میرسد[۶۳]. از این معیار برای اندازه گیری میزان بازشدگی

^{1.} Full width at half maximum

^{2.} Full width at tenth maximum

^{3.} Half width at half maximum

استفاده شده است. برای دادههای تجربی موجود، میزان این بازشدگی با استفاده از همین معیار ۱۴۹/۰۹ گزارش شده است[۶۴]. دو توزیع گوسین چگالی در دو نقطه از محور، در امتداد راستای شعاعی موجود است. لذا، با بهدست آوردن مکان $r_{1/2}$ در دو توزیع چگالی، زاویه بازشدگی محاسبه میشود. جدول ۲ میزان بازشدگی پاشش فواره نیتروژن را با معیار FWHM نشان میدهد. برای مقایسه بهتر، دادههای موجود با معیار FWHM مقایسه شدهاند. اعداد بهدست آمده حاکی از این است که دشان می دهد. برای مقایسه بهتر، دادههای موجود با معیار معیار ۲۰۷۸ میزان بازشدگی محاسبه می شود. جدول ۲ میزان بازشدگی پاشش فواره نیتروژن را با معیار FWHM معیار ۲۰/۲

Turbulanca Modal	Spreading Angle	Error	1
		15.0	
$\kappa - \varepsilon$ Standard	11.95	-15.2	
$\kappa - \varepsilon$ RNG	15.4	9.3	
$\kappa - \varepsilon$ Realizble	13.6	-3.5	
$\kappa - \omega$ SST	13.4	-4.7	
Experimental	14.00		

RCM01 جدول ۷- میزان بازشدگی پاشش فواره نیتروژن با معیار FWHM برای Table 7- Spreading angle measured of nitrogen injected (FWHM criterion) for RCM01

نتايج حاصل از بررسى معادله حالت

نتایج حاصل از بررسی مدلهای اغتشاشی حاکی از آن بود که Realizable x - x دارای بهترین سازگاری بین مدلهای اغتشاشی دومعادلهای است. لذا، با انتخاب این مدل اغتشاشی به بررسی اثر معادله حالت پرداخته میشود. شکل ۱۰-۵ نتایج حاصل از شبیهسازی پاشش فواره نیتروژن با استفاده از مدل اغتشاشی عامی میشود و مشاهده میشود که معادلههای حالت، در حاصل از شبیهسازی پاشش فواره نیتروژن با استفاده از مدل اغتشاشی عاهر میشود و مشاهده میشود که معادله های حالت، در محال از شبیهسازی پاشش فواره نیتروژن با استفاده از مدل اغتشاشی دو مشاهده میشود که معادله حالت کر x/d_{jet} عالم x/d_{jet} عالم را نشان می دهد. در خط مرکز بیشینه چگالی ظاهر میشود و مشاهده میشود که معادله حالت SRK مدر x/d_{jet} ark reprint x/d_{jet} and the reprint x and the reprint x/d_{jet} and the reprind the reprint x/d_{jet} and the reprind the reprint $x/d_{$

^{1.} Core



PR دارای خطای کمتر از ۷ درصد و دو معادله حالت SRK و ARK داری خطای کمتر از ۱۱ درصدند. با فاصله گرفتن از خط مرکز، دادههای حاصل از شبیهسازی در بازه قابل قبولی نسبت به دادههای تجربی قرار می گیرند.

Figure 10- Compare radial density profile at different equation of states with Experimental data (in two section) for RCM01 شکل ۱۰- مقایسه توزیع چگالی در راستای شعاعی برای معادله حالتهای مختلف با دادههای تجربی RCM01[۶۲]

نتايج محفظه RCM03

نتايج حاصل از بررسى مدل اغتشاشى

دادههای تجربی موجود برای صحتسنجی شبیه سازی آزمایش A-60 بسیار اندک است. کانتور داده تجربی *OH برای مقایسه کیفی برای تطابق نتایج حاصل از شبیه سازی موجود است[۶۵]. در مطالعه حاضر، با تعریف پارامترهایی بر کانتور تجربی کیفی برای تطابق نتایج حاصل از شبیه سازی موجود است[۶۵]. در مطالعه حاضر، با تعریف پارامترهایی بر کانتور تجربی موجود، می توان مقایسه منطقی تری انجام داد. شکل ۱۱ کانتور داده تجربی *OH، که ابعاد آن بر حسب قطر انژکتور اکسیژن بی موجود، می توان مقایسه منطقی تری انجام داد. شکل ۱۱ کانتور داده تجربی *OH، که ابعاد آن بر حسب قطر انژکتور اکسیژن موجود، می توان مقایسه منطقی تری انجام داد. شکل ۱۱ کانتور داده تجربی *OH، که ابعاد آن بر حسب قطر انژکتور اکسیژن بی موجود، می توان مقایسه منطقی تری اندان است. این ناحیه با بی مد شده ند، را نشان می دهد. در شکل ۱۱، ناحیه ای مشاهده می شود که در آن نرخ بازشدگی *OH یکسان است. این ناحیه با از نمایش داده می شود که در محدوده صفر تا هشت برابر قطر انژکتور اکسیژن قرار دارد. در ناحیه L_1 ، میزان نیم زاویه بازشدگی اندازه گیری شده و با β نمایش داده می شود. معنوان مور تا ه مند براین قرار دارد. در ناحیه L_1 ، میزان نیم زاویه بازشدگی اندازه گیری شده و با β نمایش داده می شود. معیار اندازه گیری بر حسب بیشترین مقدار *OH در این ناحیه است. مقدار محاسبه شده برای آن β نمایش داده می شود. معیار اندازه گیری بر حسب بیشترین مقدار *OH در این ناحیه است. از شدگی ی شده و با (L_1) نمایش داده می شود که ۲۲ برابر قطر انژکتور محاسبه شده برای آن (L_2, L_2) موزن نگر برابر با یک و کمترین مقدار *OH ناحیه بنفش برابر با صفر فرض شود، بر حسب بی معدسازی صورت گرفته روی کانتور تجربی موجود، در حدود 5.0 = *OH، مکان طولی (L_1) و عرضی (L_2) بیشینه بازشدگی به تربی مقدار *OH و ۲/۲ برابر قطر انژکتور محاسبه می شود. حدان می موده می موده ای طولی (L_2) و عرضی (L_2) می شود، بر حسب بی برابر با ۲/۱ و ۲/۲ برابر قطر انژکتور محاسبه می شود. حدان با توجه به داده های استخراج شده از تحربی موجود، می توان مقایسه کمی خوبی انجام داد.



Figure 11- Experimental contour of OH*[65], non-dimentional with diameter of oxygen injector for RCM03 (شکل ۱۱- داده تجربی[۶۵] تصویربرداری کانتور *OH برای RCM03، (ابعاد طولی بیبعد شده برحسب قطر انژکتور اکسیژن) (فایل رنگی شکل در سایت نشریه قابل مشاهده است.)

همان طور که ذکر شد، شبیه سازی عددی احتراق فوق بحرانی، به علت تغییرات رفتار و وجود گرادیان های شدید در چگالی، ظرفیت حرارتی و سایر خواص ترموفیزیکی و همچنین پیچیدگی خود احتراق، بسیار مشکل است. ابتدا، معادله حالت واقعی SRK فرض می شود و مدل های اغتشاشی دومعادله ای برای تعیین مدل مناسب اغتشاش اعمال می شود. مدل های اغتشاشی دومعادلهای بررسی اعمال شده، $\kappa - \varepsilon$ Standard و $\kappa - \varepsilon$ Realizable $\kappa - \varepsilon$ RNG $\kappa - \varepsilon$ Standard دومعادلهای بررسی اعمال شده، $\kappa - \varepsilon$ Standard دومعادله در با تكر پارامترهای اندازه گیری شده برای معادلات اغتشاشی مختلف و جدول ۹ بیانگر خطای پارامترهای اندازه گیری شده برای معادلات اغتشاشی مختلف است. طول ناحیه L_1 ، در معادله اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ Standard و $\kappa - \varepsilon$ RNG و $\kappa - \varepsilon$ اغتشاشی مختلف است. طول ناحیه L_1 درصد، بیشتر و در معادله $\kappa - \omega$ SST و $\kappa - \omega \kappa - \varepsilon$ Realizable درصد، بیشتر و در معادله درصد، کمتر درصد، کمتر ایش بینی شده است. طول ناحیه L_2 ، که مربوط به بیشینه کسر جرمی رادیکال OH در محور است و معیاری از طول شعله است، در معادله اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ Realizable و $\kappa - \varepsilon$ RNG ، $\kappa - \varepsilon$ Standard اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ Realizable اغتشاشی اغتشاشی ا معادله، $\kappa - \omega$ SST معادله، $\kappa - \omega$ SST معادله، $\kappa - \omega$ SST معادله، معادله، معادله، $\kappa - \omega$ SST معادله، نشان میدهد با L_x نشان داده شده است که در معادله اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ Standard و $\kappa - \varepsilon$ RNG و $\kappa - \varepsilon$ result in the standard state of the stat درصد، بیشتر و در معادله $\kappa - \omega$ SST و $\kappa - \omega \kappa - \varepsilon$ Realizable درصد، کمتر پیشبینی ۳۴/۷ درصد، کمتر پیشبینی شده است. طولی که بیشترین بازشدگی شعله را در راستای شعاعی نیز نشان میدهد با L_v نشان داده شده است که در معادله اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ Realizable اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ SST و $\kappa - \varepsilon$ Standard و $\kappa - \varepsilon$ Standard اغتشاشی $\kappa - \varepsilon$ به ترتیب با خطای 1/7 و 1/7 درصد، کمتر پیش بنی شده است. توضیحات داده شده بیانگر وجود خطا در تمامی $\kappa - \epsilon \, \mathrm{RNG}$ $\kappa-\omega$ SST معادلات اغتشاشی است. لذا، برای مقایسه بهتر، میزان خطای کل با نرم دوم محاسبه شده است که معادله حالت و $\kappa - \varepsilon$ Standard و دارای کمترین خطایند.

					· · · · ·
	7.L ₁	7.L2	7.L _x	7.L _y	ï.β
Experiment	8	22	12.4	2.70	4.40
$\kappa - \varepsilon$ Standard	10.8	27	15.5	2.76	2.52
$k - \varepsilon$ RNG	12	31.7	16.7	2.45	1.51
$k - \varepsilon$ Realizable	6.2	31.4	9.4	2.68	8.13
$k - \omega$ SST	6.3	21	10.3	3.35	6.3

(RCM03) جدول ۸- پارامترهای اندازه گیریشده برای معادلات اغتشاشی Table 8- measured parameters for turbulence models (RCM03)

جدول ۹- خطای پارامترهای اندازه گیری شده برای معادلات اغتشاشی (RCM03)
Table 9- Erorr of measured parameters for turbulence models (RCM03)

	%L ₁	7.L ₂	7.L _x	7.L _y	7.β	Error
$k - \varepsilon$ Standard	35	22.7	25	2.2	-42.7	13.0
$k - \varepsilon RNG$	50	44.1	34.7	-9.3	-65.7	20.0
$k - \varepsilon$ Realizable	-22.5	42.7	-24.2	-0.7	84.8	20.1
$k - \omega$ SST	-21.2	-4.5	-16.9	24	43.2	11.3

داده تجربی دما بر روی خط مرکز وجود دارد. شکل ۱۲ بیانگر مقایسه تغییرات دما بر روی محور طولی برای مدلهای اغتشاشی مختلف در شبیهسازی عددی صورتگرفته با دادههای تجربی[۳۱] است. مقدار بیشینه دما در مدلهای اغتشاشی مختلف تقریباً یکسان است و اختلاف چندانی ندارد، اما محل بیشینه دما بر محور طولی در مدلهای مختلف متفاوت است که SST - w SST - بهترین تطابق را با دادههای تجربی موجود دارد. لذا، از بین معادلههای اغتشاشی، با توجه به بررسی کانتور تجربی OH و بررسی داده تجربی دما، بهترین نتیجه مربوط به SST - ست.

^{1.} L₂ Norm

میتواند ناشی از ابعاد ناحیههای مختلف پیشبینیشده توسط مدلهای اغتشاشی باشد. شایان ذکر است که شبیهسازی صورت گرفته در این تحقیق برمبنای گسستهسازی معادلات با روش بالادست مرتبه اول صورت پذیرفته است که ذاتا قدری استهلاک عددی به حل تزریق و اثرات مدلهای اغتشاشی را ممکن است کمرنگتر کند، اگرچه در این تحقیق تلاش شد با تطبیق مناسب شبکه محاسباتی و استفاده از شبکه ریزتر این اثرات مرتفع شوند. لذا، پیشنهاد قطعی این مدل اغتشاشی برای احتراق فوق بحرانی نیازمند گستهسازی بالاتر است. این تحقیق تلاش شد با محاسبقی مناسب شبکه محاسباتی و استفاده از شبکه ریزتر این اثرات مرتفع شوند. لذا، پیشنهاد قطعی این مدل اغتشاشی برای احتراق فوق بحرانی نیازمند گستهسازی با مراتب بالاتر است. البته، با توجه به پیششینه این مدل اغتشاشی در جریانهای دارای چرخش عملکرد قابل قبول آن نیز دور از انتظار نیست.



Figure 12- Compare axial Temperature variation for diffrent Turbulance models with Experimental data of RCM03 [71] RCM03 شكل 1۲ - مقايسه تغييرات دما بر روى محور طولى براى مدل هاى اغتشاشى مختلف با داده هاى تجربى

شکل ۱۳ خطوط مسیر مربوط به حل جریان احتراقی را نمایش میدهد. خطوط مسیر در جریان احتراق فوق بحرانی، با سایر احتراقهایی که در فشار زیربحرانی صورت میپذیرد، کمی متفاوت است. هسته سرد و چگال اکسیژن، در عبور از گذربحرانی، دچار گرادیان شدید چگالی میشود. سرعت اکسیژن در خروج از انژکتور دارای تغییرات اندک است. لذا، این انبساط ناگهانی در حجم بر بازشدگی جریان اثر میگذارد. از طرفی، جریان هیدروژن با سرعت بالا خارج شده، به دیواره برخورد میکند و بخشی از آن برمیگردد و گردابه را تشکیل میدهد که اختلاف فشار ایجادشده در اثر گردابه تأثیر متقابلی بر فواره خروجی هیدروژن میگذارد. تغییرات حجم ویژه اکسیژن در راستای شعاعی به شدت زیاد است. مسیر این تغییرات حجم توسط گردابه نزدیک به دیواره مشخص میشود و برگشت جریان را ممکن میسازد. از طرفی، فواره هیدروژن با برخورد به دیواره و گردابه نزدیک به دیواره مشخص میشود و برگشت جریان را ممکن می میازد. از طرفی، فرا تشکیل میدهد. وجود این گردابه ثانویه و نیز ساختار جریان بهدست آمده در نتایج پارک و همکاران[۲۷]، رویز[۶۶] ،کیم و همکاران[۶۷] و وانگ و همکاران[۸] نیز قابل مشاهده است.



(RCM03)(SRK و معادله حالت $\kappa - \omega$ SST شكل 1۳ ف مسير مربوط به حل جريان احتراقی (مدل اغتشاشی ST ω SST و معادله حالت) Figure 13- Fow field of LO_x-GH₂ Supercritical Combustion (RCM03) (Turbulance model: $\kappa - \omega$ SST and SRK EOS)

نتايج حاصل از بررسى معادله حالت

هنگامی که فشار بسیار بالا باشد، فرضیات گاز ایدئال دیگر صادق نیست و لذا نمی توان اندر کنش بین مولکولی را نادیده فرض کرد و همچنین، بهعلت کم شدن فاصله مولکول ها از هم، نادیده گرفتن حجم اشغال شده توسط مولکول ها فرض نادرستی است. نیاز به معادله حالت دقیق تر باعث به وجود آمدن معادله حالتهای مدرن شد. این معادلات حالت خواص ترمودینامیکی را بهتر پیش بینی می کردند. شکل ۱۴ ساختار شعله 60-A را با اعمال دو نوع معادله حالت ایدئال و غیرایدئال نشان می دهد. تمامی شرایط در هر دو یکسان است و تنها معادله حالت آن ها باهم متفاوت است. مشاهده می شود که ساختار شعله و طول شعله، در مسئله نزدیک تر است. چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور در معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. لذا، سرعت در هنگام خروج بیشتر می شود و طول شعله را بیشتر پیش بینی می کند. علت تفاوت در ساختار شعله معادله حالت آن ها باهم متفاوت است. مشاهده می شود که ساختار شعله و طول شعله، در مسئله نزدیک تر است. چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور در معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. لذا، سرعت در هنگام خروج بیشتر می شود و طول شعله را بیشتر پیش بینی می کند. علت تفاوت در ساختار شعله معادله حالت ایدئال ناشی از عدم پیش بینی صحیح چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور، فقدان هسته چگال اکسیژن^۳ در عبور از گذربحرانی و همچنین عدم توانایی در پیش بینی شه موش ^۱ هسته چگال اکسیژن^۳ در عبور از گذربحرانی است.

هنگامی که فشار محفظه از فشار بحرانی بالاتر باشد و دمای ورودی به محفظه از دمای بحرانی کمتر باشد، بهعلت وجود دمای بالای محفظه، دمای هسته چگال افزایش مییابد و باید از دمای بحرانی خود عبور کند. در هنگام عبور از دمای بحرانی گرادیانهای شدید در خواص ترموفیزیکی بهوجود میآید. به عنوان مثال، چگالی تا سه مرتبه کاهش مییابد؛ گرمای ویژه در فشارثابت دارای تغییرات شدید است و تا پنجبرابر نسبت به معادله ایدئال افزایش مییابد؛ بالارفتن گرمای ویژه موجب میشود که سیال دارای قابلیت جذب گرمای زیاد و تغییرات دمایی آن بسیار اندک باشد. به این حالت که تغییرات دمایی آن بسیار اندک است و رفتار آن همانند حالتی است که سیال در زمان تغییر فاز گرمای زیادی دریافت میکند و دمای آن تغییر نمی کند شبه جوشش گفته میشود.



Figure 14- Numerical study of Flame structure at Massotte test ring (A-60) (compare Real and Ideal EOS) شکل ۱۴- مطالعه عددی ساختار شعله هندسه ماسکات آزمایش A-60 (RCM03)، با اعمال دو نوع معادله حالت ایدئال و غیرایدئال

شکل ۱۵ بررسی اثر معادله حالت PR و ARK را بر ساختار شعله و مقایسه آن با معادله حالت SRK در کانتور دما و کسر جرمی OH نشان می دهد. با اعمال معادله حالت ARK، طول شعله نسبت به معادله SRK به میزان ۷ درصد کمتر پیش بینی شده است و لذا اختلاف بیشتری با کانتور تجربی دارد. طول شعله در معادله PR، نسبت به معادله SRK به میزان ۲ درصد کمتر پیش بینی شده است. بنابراین، معادله حالت SRK نزدیک ترین نتایج به داده های تجربی را داراست. همان طور که ذکر شد، برای محاسبه خواص ترمودینامیکی مانند آنتالپی، انرژی درونی، گرمای ویژه در فشار ثابت و سایر پارامترها، از جمله اصلاحی سیال چگال^۳ استفاده می شود که در آن روابط توابع انحراف^۴ به استخراج آن کمک می کند. توابع انحراف، برای

3. Dense Fluid correction term

^{1.} pseudo boiling

^{2.} Oxygen dense core

^{4.} Departure Function



بهدست آوردن معادلات خود، از معادله حالت بهره می گیرد. علت اختلاف را می توان به دید گاههای متفاوتی که برای تابع ضریب جذب فشار دارند مرتبط ساخت.

Figure 15- Effect of PR and ARK EOS at flame structure and compare them with SRK EOS (contour of Temperature and OH mass Fraction) (RCM03) شکل ۱۵– اثر معادله حالت PR و ARK بر ساختار شعله و مقایسه آن با معادله حالت SRK در کانتور دما و کسر جرمی OH

نتيجهگيرى

با استفاده از شبیه سازی عددی متقارن محوری و حل معادلات متوسط گیری شده نویر استوکس ^۱، در ابتدا، جریان فواره فوق بحرانی نیتروژن (از آزمایش CCM 01) در شرایط فشاری در حدود ۶۰ بار به صورت عددی بررسی شده است و نتایج آن با نتایج تجربی معتبر مقایسه شده است. مدل های مختلف اغتشاشی بررسی شده و با استفاده از گسسته سازی مرتبه دوم معادلات حاکم دیده شده است که مدل RCM 10) در شرایط فشاری در حدود ۶۰ بار به صورت عددی بررسی شده است و نتایج آن با حاکم دیده شده است که مدل RCM 10) در شرایط فشاری در حدود ۲۰ بار به صورت عددی بررسی شده است و نتایج آن با حاکم دیده شده است که مدل RCM 10 مختلف اغتشاشی بررسی شده و با استفاده از گسسته سازی مرتبه دوم معادلات حاکم دیده شده است که مدل Realizable $-\pi$ تنایج بهتری در خصوص پیش بینی ناحیه لایه برشی، تشکیل گردابه های گراروی آ شفتگی در فرض بوزینسک باشد. مدل Realizable $-\pi$ می تواند ناشی از تخمین بهتر جمله مربوط به گرانروی آ شفتگی در فرض بوزینسک باشد. مدل Realizable $-\pi$ بنایج بهتری در مقایسه با معیار RVM ارائه می دهد. گرانروی آ شفتگی در فرض بوزینسک باشد. مدل Realizable $-\pi$ بنایج بهتری در مقایسه با معیار تحل معادلات متوسط تعرین مشاهده شده است که میزان بازشدگی فواره ورودی وابسته به نحوه پیش بینی گردابه محاور دیواره در مدل همچنین، مشاهده شده است گردابه محاور دیواره و رودی وابسته به ابعاد هندسه است. هر چقدر میزان گردابه تخمین آزده شفتگی مختلف است. گردابه شکل گرفته در نزدیکی دیواره وابسته به ابعاد هندسه است. هر چقدر میزان گردابه تخمین زده شده برگتر باشد، اختلاط در هسته مرکزی جریان با نرخ کمتری صورت می گیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی زده شده بزرگتر باشد، اختلاط در هسته مرکزی جریان با نرخ کمتری صورت می گیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی در دیرتر یکنواخت خواهد شد. اثر معادلات مختلف حالت در پیش بینی جریان نیز بررسی شده است. معادله حالت کاری بوزین درین با نرخ کمتری صورت می گیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی درتر یکنواخت خواهد شد. اثر معادلات محتلف حالت در پیش بینی جریان نیز بررسی شده است. می دواده حالت مرور ی میزان باز خکمتری صورت می گیرد و نواحی همته نیتروژن در در ازم ی مردن در ازمای مرکزی تورن ی بود مر بازی مروی ی با درههای تجربی در نواحی هسته نیتروژن دارند. با دررای خطی مرکز، تمامی معادلات

سپس، جریان واکنشی فوق بحرانی هیدروژن-اکسیژن مایع بررسی عددی شده است. در شرایط فوق بحرانی، کشش سطحی اکسیژن مایع تزریقشده صفر میشود و شرایط ترمودینامیکی آن، مانند ظرفیت حرارتی و چگالی، بهشدت دچار تغییر میشود. هسته سرد و چگال اکسیژن، در عبور از گذربحرانی، دچار گرادیان شدید در چگالی میشود. سرعت اکسیژن در خروج از انژکتور دارای تغییرات اندک است. لذا، این انبساط ناگهانی در حجم بر بازشدگی جریان اثر میگذارد. پدیده شبهجوشش سبب تولید گردابههای درونی میشود که افزایش اختلاط را بههمراه دارد. برای بررسی این پدیده، از هندسه RCM03 و آزمایش 60-A استفاده شده است که در آن فشار محفظه ۶۰ بار و بالاتر از فشار بحرانی هیدروژن و اکسیژن است.

^{1. 2}D-Axi- RANS

هندسه بهصورت دوبعدی-متقارن محوری و حل معادلات متوسط گیریشده نویراستوکس شبیهسازی شده است. رفتار سیال پاشیده به محیط، همانند فواره گازی آشفته عمل میکند. مدلهای اغتشاشی مختلف و همچنین معادله حالتهای مختلف برای بررسی این شرایط مطالعه شده است. عملکرد مدلهای مختلف اغتشاشی در پیش بینی شکل شعله و توزیع دما بررسی شده است و با استفاده از گسسته سازی مرتبه اول بالادست معادلات حاکم دیده شده است که مدل SST w - x عملکرد بهتری در پیش بینی شکل شعله دارد. مقایسه تغییرات دما بر روی محور طولی برای مدلهای اغتشاشی مختلف با دادههای تعربی انجام شده است. مقدار بیشینه دما در مدلهای اغتشاشی مختلف تقریباً یکسان است که مدل SST بیشینه دما بر محور طولی در مدلهای مختلف متفاوت است که SST w - x بهترین تطابق را با دادههای تعربی موجود دارد. اثر اعمال شرایط گاز حقیقی با شرایط گاز ایدئال در پیش بینی شکل شعله بهخوبی نمایان است و اختلاف چندانی ندارد، اما محل اثر اعمال شرایط گاز حقیقی با شرایط گاز ایدئال در پیش مختلف تقریباً یکسان است و اختلاف را با دادههای تعربی موجود دارد. معادله حالت ایدال می مختلف متفاوت است که SST w - x بهترین تطابق را با دادههای تجربی موجود دارد. اثر اعمال شرایط گاز حقیقی با شرایط گاز ایدئال در پیش بینی شکل شعله بهخوبی نمایان می سازد که فرض گاز ایدئال در یک معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. ندا، به اچار، سرعت در هنگام خروج معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. ندا، به ناچار، سرعت در هنگام خروج معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. ندا، به ناچار، سرعت در هنگام خروج معادله حالت ایدئال، یک چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش بینی می کند. ندا، به اچار گاز حقیقی بررسی

تقدیر و تشکر

بدینوسیله نویسندگان از مشاورهها و همکاریهای صمیمانه و ارزشمند جناب آقای دکتر محمد فرشچی و آقای مهندس حامد زینیوند در انجام این تحقیق تشکر میکنند.

منابع

- 1. N. Tramecourt, S. Menon and J. Amaya, "LES of Supercritical Combustion in a Gas Turbine Engine," 40st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Florida, 2004.
- 2. R. Branam and W. Mayer, "Characterization of Cryogenic Injection at Supercritical Pressure," *Journal of Propulsion and Power*, 19, 2003, pp. 342-355.
- 3. J. A. Newman and T. A. Brzustowski, "Behavior of a Liquid Jet near the Thermodynamic Critical Region," AIAA Journal, 9, 1971, pp. 1595-1602.
- B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy, "Initial Growth Rate and Visual Characteristics of a Round Jet into a Sub- To Supercritical Environment of Relevance to Rocket, Gas Turbine, and Diesel Engines," 37th AIAA Aerospace Sciences IMeeting and Exhibit, Reno, NV, 1999.
- 5. B. Chehroudi, D. Talley and E. Coy, "Fractal Geometry and Growth Rate Changes of Cryogenic Jets Near the Critical Point," *35th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Los Angeles, California, 1999.
- 6. B. Chehroudi, R. Cohn, D. T. alley and A. Badakhshan, "Raman Scattering Measurements in the Initial Region of Suband Supercritical Jets," *36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Huntsville, Alabama, 2000.
- 7. B. Chehroudi, D. Talley and E. Coy, "Visual Characteristics and Initial Growth Rates of Round Cryogenic Jets at Subcritical and Supercritical Pressures," *Physics of Fluids*, 14, 2002, pp. 850-862.
- 8. B. Chehroudi, R. Cohn and D. Talley, "Cryogenic Shear Layers- Experiments and Phenomenological Modeling of the Initial Growth Rate Under Subcritical and Supercritical Conditions," *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23, 2002, pp. 554-563.
- 9. B. Chehroudi and D. Talley, "Interaction of Acoustic Waves with a Cryogenic Nitrogen Jet at Sub and Supercritical Pressures," *40th AIAA Aerospace Sciences IMeeting and Exhibit*, Reno, NV, 1999.
- 10. D. Davis and B. Chehroudi, "The Effects of Pressure and Acoustic Field on a Cryogenic Coaxial Jet," 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Nevada, 2004.
- 11. W. O. H. Mayer, A. H. A. Schik, B. Vielle, C. Chauveau, I. G-ograve, kalp, et al., "Atomization and Breakup of Cryogenic Propellants Under High-Pressure Subcritical and Supercritical Conditions," *Journal of Propulsion and Power*, 14, 1998, pp. 835-842.
- 12. W. Mayer and H. Tamura, "Propellant Injection in a liquid Oxygen/Gaseous Hydrogen Rocket Engine," Journal of Propulsion and Power, 12, 1996, pp. 1137-1147.
- 13. W. Mayer, A. Schik, M. Schaffler and H. Tamura, "Injection and Mixing Processes in High-Pressure Liquid Oxygen/Gaseous Hydrogen Rocket Combustors," *Journal of Propulsion and Power*, 16, 2000, pp. 823-829.

- 14. T. J. Anderson, R. D. Woodward, and M. Winter, "Oxygen Concentration Measurements in a High Pressure Environment using Raman Imaging," 33th AIAA Aerospace Sciences IMeeting and Exhibit, Reno, NV, 1995.
- 15. M. Oschwald and A. Schik, "Supercritical Nitrogen Free Jet Investigated by Spontaneous Raman Scattering," *Experiments in Fluids*, 27, 1999, pp. 497-506.
- S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scouflaire and C. Rolon, "Structure and Dynamics of Cryogenic Flames at Supercritical Pressure," *Combustion Science and Technology*, 178, 2006, pp. 161-192.
- 17. G. Singla, P. Scouflaire, C. Rolon and S. Candel, "Transcritical Oxygen/Transcritical or Supercritical Methane Combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, 30, 2005, pp. 2921-2928.
- 18. J. Bellan, "Supercritical (and subcritical) Fluid Behavior and Modeling: Drops, Streams, Shear and Mixing Layers, Jets And Sprays," *Progress in Energy and Combustion Science*, 26, 2000, pp. 329-366.
- J. Bellan, "Theory, Modeling and Analysis of Turbulent Supercritical Mixing," *Combustion Science and Technology*, vol. 178, pp. 253-281, 2006.
- N. Okong'o, K. Harstad and J. Bellan, "Direct NumericalSimulation of O2/H2 Temporal Mixing Layers under Supercritical Conditions," AIAA Journal, 40, 2002, pp. 914-926.
- 21. N. A. Okong'O and J. Bellan, "Direct Numerical Simulation of a Transitional Supercritical Binary Mixing Layer: Heptane and Nitrogen," *Journal of Fluid Mechanics*, 464, 2002, pp. 1-34.
- 22. J. Foster, A Priori Analysis of Subgrid Scalar Phenomena and Mass Diffusion Vectors in Turbulent Hydrogen-Oxygen Flames, PhD Thesis, Mechanical Engineering Department, Clemson University, 2009.
- 23. J. Foster and R. Miller, "A Priori Analysis of Subgrid Mass Flux Vectors from Massively Parallel Direct Numerical Simulations of High Pressure H2/O2 Reacting Shear Layers," *APS Meeting Abstracts*, Baltimore, Maryland, 2011.
- 24. J. C. Oefelein and V. Yang, "Modeling High-Pressure Mixing and Combustion Processes in Liquid Rocket Engines," *Journal of Propulsion and Power*, 14, 1998, pp. 843-857.
- 25. N. Zong and V. Yang, "Near-Field Flow And Flame Dynamics of LOX/Methane Shear-Coaxial Injector under Supercritical Conditions," *Proceedings of the Combustion Institute*, 31, 2007, pp. 2309-2317.
- 26. M. Juniper, N. Darabiha, and S. Candel, "The Extinction Limits of a hydrogen Counterflow Diffusion Flame above Liquid Oxygen," *Combustion and Flame*, 135, 2003, pp. 87-96.
- 27. M. Juniper and b. Candel, "Edge Diffusion Flame Stabilization Behind a Step over a Liquid Reactant," *Journal of Propulsion and Power*, 19, 2003, pp. 332-341.
- M. Masquelet, S. Menon, Y. Jin and R. Friedrich, "Simulation of Unsteady Combustion in a LOX-GH 2 Fueled Rocket Engine," *Aerospace Science and Technology*, 13, 2009, pp. 466-474.
- 29. L. Cutrone, P. De Palma, G. Pascazio and M. Napolitano, "A RANS flamelet–Progress-Variable Method for Computing Reacting Flows of Real-Gas Mixtures," *Computers & Fluids*, 39, 2010, pp. 485-498.
- 30. M. Poschner and M. Pfitzner, "CFD-Simulation of Supercritical LOX/GH2 Combustion Considering Consistent Real Gas Thermodynamics," *Proceedings of the European Combustion Meeting*, Vienna, Austria, 2009.
- M. M. Poschner and M. Pfitzner, "Real Gas CFD Simulation of Supercritical H2-LOX Combustion in the Mascotte Single-Injector Combustor using a Commercial CFD Code," 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, 2008.
- 32. M. M. Poschner and M. Pfitzner, "CFD-Simulation of the Injection and Combustion of LOX and H2 at Supercritical Pressures," *Proceedings of the European Combustion Meeting*, Reno, USA, 2009.
- 33. M. G. D. Giorgi and A. Leuzzi, "CFD Simulation of Mixing and Combustion in Lox/Ch4 Spray under Supercritical Conditions," *39th AIAA Fluid Dynamics Conference*, San Antonio, Texas, 2009.
- M. G. D. Giorgi, L. Tarantino, A. Ficarella, and D. Laforgia, "Numerical Modelling of High-Pressure Cryogenic Sprays," 40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Chicago, Illinois, 2010.
- 35. M. G. D. Giorgi, A. Sciolti, and A. Ficarella, "Different Combustion Models Applied to High Pressure LOX/CH4 Jet Flames," *4th European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, St Petersburg, Rusia, 2011.
- 36. M. De Giorgi, A. Sciolti, and A. Ficarella, "Application and Comparison of Different Combustion Models of High Pressure LOX/CH4 Jet Flames," *Energies*, 7, 2014, pp. 477-479.
- 37. T. S. Park and S. K. Kim, "A Pressure-Based Algorithm for Gaseous Hydrogen/Liquid Oxygen Jet Flame at Supercritical Pressure," *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 67, 2015, pp. 547-570.
- 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*, 168, 2016, pp. 98-112.
- 39. A. Benmansour, A. Liazid, P.-O. Logerais, and J. F. Durastanti, "A 3D Numerical Study of LO2/GH2 Supercritical Combustion in the ONERA-Mascotte Test-Rig Configuration," *Journal of Thermal Science*, 25, 2016, pp. 97-108.
- 40. D. Y. Peng and D. B. Robinson, "A New Two-Constant Equation of State," *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15, 1976, pp. 59-64.
- 41. G. Soave, "Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State," *Chemical Engineering Science*, 27, 1972, pp. 1197-1203.
- 42. J. Telaar, G. Schneider, J. Hussong, and W. Mayer, "Cryogenic Jet Injection: Description of Test Case RCM 1," *Proceedings 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, Lampoldshausen, Germany, 2001, pp. 25-27.
- 43. R. Branam, J. Telaar and W. Mayer, "Simulation of Cryogenic Jet Injection, RCM 1," 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling: Atomization, Combustion and Heat Transfer, Lampoldshausen, Germany, 2001.

- 44. O. J. Haidn and M. Habiballah, "Research on High Pressure Cryogenic Combustion," Aerospace Science and Technology, 7, 2003, pp. 473-491.
- 45. M. P. Burke, M. Chaos, Y. Ju, F. L. Dryer, and S. J. Klippenstein, "Comprehensive H2/O2 Kinetic Model for High-Pressure Combustion," *International Journal of Chemical Kinetics*, 44, 2012, pp. 444-474.
- 46. H. Versteeg and W. Malalasekera, An Introduction to Computational fluid Dynamics-The finite Volume Method, Prentice Hall, England, 1995.
- 47. B. E. Launder and D. B. Spalding, Mathematical Models of Turbulence, Academic Press, London, England, 1972.
- 48. S. A. Orszag, V. Yakhot, W. S. Flannery, F. Boysan, D. Choudhury, J. Maruzewski, et al., "Renormalization Group Modeling and Turbulence Simulations," *International Conference on Near-Wall Turbulent Flows*, Tempe, Arizona, 1993.
- 49. T. H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu, "A New k-€ Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows," *Computers & Fluids*, 24, 1995, pp. 227-238.
- 50. F. R. Menter, "Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications," AIAA journal, 32, 1994, pp. 1598-1605.
- 51. B. F. Magnussen and B. Hjertager, "On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow," *19th AIAA Aerospace Meeting*, St. Louis, USA, 1981.
- 52. R. C. Reid, J. M. Prausnitz and B. E. Poling, The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill, New York, 1987.
- 53. O. Redlich and J. N. Kwong, "On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions," *Chemical Reviews*, 44, 1949, pp. 233-244.
- 54. G. N. Lewis, "The Law of Physico-Chemical Change," Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences, 1901, pp. 49-69.
- 55. K. S. Pitzer, D. Z. Lippmann, R. Curl Jr, C. M. Huggins and D. E. Petersen, "The Volumetric and Thermodynamic Properties of Fluids. II. Compressibility Factor, Vapor Pressure and Entropy of Vaporization1," *Journal of the American Chemical Society*, 77, 1955, pp. 3433-3440.
- 56. R. Aungier, "A Fast, Accurate Real Gas Equation of State for fluid Dynamic Analysis Applications," *Journal of Fluids Engineering*, 117, 1995, pp. 277-281.
- 57. 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*, 27, 1988, pp. 671-679.
- 58. J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird and M. G. Mayer, *Molecular theory of gases and liquids*, Vol. 26, Wiley, New York, 1954.
- 59. L. Lequette, "The RCM2 10 Bars Test Case," Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Lampoldshausen, Germany, 2001.
- 60. J. Thomas and S. Zurbach, "Test Case RCM 3: Supercritical Spray Combustion at 60 bar at Mascotte," *Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling*, Lampoldshausen, Germany, 2001.
- 61. O. J. Haiden, "Test Case RCM-3 Mascotte Single Injector -60 Bar" Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Lampoldshausen, Germany, 2001.
- 62. G. C. Cheng and R. Farmer, "Real Fluid Modeling of Multiphase Flows in Liquid Rocket Engine Combustors," *Journal* of Propulsion and Power, 22, 2006, pp. 1373-1381.
- 63. http://mathworld.wolfram.com, visited at sepember 2015.
- 64. N. Ierardo, A. Congiunti and C. Bruno, "Mixing and Combustion in Supercritical O2/CH4 Liquid Rocket Injectors," 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, Nevada, 2004.
- M. Juniper, A. Tripathi, P. Scouflaire, J. C. Rolon and S. Candel, "Structure of Cryogenic Flames at Elevated Pressures," *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 1103-1109.
- 66. A. Ruiz, "Unsteady Numerical Simulations of Transcritical Turbulent Combustion in Liquid Rocket Engines," PhD Thesis, Mechanical Engineering Department, INP Toulouse University, 2012.
- 67. T. Kim, Y. Kim and S. K. Kim, "Numerical Study of Cryogenic Liquid Nitrogen Jets at Supercritical Pressures," *Journal of Supercritical Fluids*, 56, 2011, pp. 152-163.
- X. Wang, G. Cai, and H. Huo, "Numerical Study of High-Pressure GO2/GH2 Combustion of a Single-Element Injector," Science China Technological Sciences, 55, 2012, pp. 2757-2768.

Numerical Modeling of Mixing and Combustion at Supercritical Conditions for a Model Combustor

Ehsan Barani¹ and Amir Mardani²

1- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

2- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

(Received: 2016.8.12, Received in revised form: 2016.12.28, Accepted: 2017.2.28)

This paper discusses numerical modeling of the mixing and combustion at supercritical conditions for a rocket model combustor. Fluid behavior is very complex at supercritical conditions. At these conditions, the surface tension of the liquid is zero and the thermodynamic properties such as heat capacity and density are dramatically changed. Therefore, two test cases of RCM01 and RCM03 were selected for modeling using a 2D-Axi-RANS approach. In primary test cases (i.e. RCM01), supercritical nitrogen jet at 59.8bar, and in the second test cases (i.e. RCM03), supercritical flow of gaseous hydrogen-liquid oxygen at a chamber pressure of 60bar and above the critical pressure of hydrogen and oxygen, were investigated. For the nitrogen jet, turbulence models have been studied and it was observed that the $\kappa - \varepsilon$ Realizable predicts better results in the area of the shear layer and outer recirculation zone, and thus provides better mixing when the equations were discretized using a second order approach. Better predictions of the $\kappa - \varepsilon$ Realizable model could be due to better estimation of turbulent kinematic eddy viscosity term on the Boussinesq eddy viscosity assumption. It has been observed that the spreading angle depends on the Outer Recirculation Zone (ORZ) predicted by different turbulence models. As the estimated size of ORZ is larger, mixing at core occurs in lower rates and density profile will be uniform posterior. Also, combustion of cryogenic propellants LO_x/H₂ at very high pressure were examined using the EDC turbulent combustion model and a detailed chemical mechanism. Different turbulence models and equations of state were studied while an upwind first order discretization method was used. The performance of the turbulence models in predicting the flame shape and temperature distribution were investigated and it was found that the $\kappa - \omega$ SST better estimates the flame shape. Checking the ideal gas and real gas EOS revealed that ideal gas assumptions suffer from large errors in estimating the shape and length of the flame. Different suggestions for the equations of real gas behavior were studied in both experiments and the results showed that SRK EOS yields the closest results to the experimental data.

Keywords: Combustion, Supercritical, Mixing, Real EOS, Turbulance models, Hydrogen-LO_X