

## بررسی اثرات فشار و دما در شعله متقابل آرام‌گذر-بحرانی و فرا-بحرانی متان و اکسیژن مایع

حامد زینی‌وند<sup>۱</sup>، حسین عیشینی<sup>۲</sup>، محمد فرشچی<sup>۳\*</sup> و هادی رضایی<sup>۴</sup>

۱- دانشجوی دکترا، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران، zeinivand\_hamed@ae.sharif.ir

۲- کارشناسی ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، ایران، hossein\_ashini@yahoo.com

۳- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران، farshchi@sharif.edu

۴- دکترا، مهندسی مکانیک، پژوهشگاه فضایی ایران، پژوهشکده سامانه‌های حمل‌ونقل فضایی، تهران، ایران، H.rezaei@isrc.ac.ir

\* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۵/۶، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۹/۵، پذیرش: ۹۷/۹/۱۰)

**چکیده:** در مقاله حاضر یک شعله برخورد متقابل آرام متان-اکسیژن در شرایط ترمودینامیکی فرا-بحرانی و گذر-بحرانی مورد بررسی قرار گرفته است. از کد منبع باز کانتر برای محاسبه میدان جریان و حل سینتیک احتراق استفاده شده است و شرایط معادله حالت، معادله انرژی و خواص انتقال برای حل جریان گاز واقعی در شرایط ترمودینامیکی گذر-بحرانی و فرا-بحرانی اصلاح شده است. مشخصات ترمودینامیکی مانند ظرفیت حرارت ویژه با اضافه شدن ترم تکمیلی به ترم شرایط ایدئال بازنویسی شده است و معادله حالت نیز برای شرایط گاز واقعی به صورت کیوبیک آورده شده است. با حل میدان جریان در شرایط گذر بحرانی مشاهده می‌شود که اعمال شرایط گاز واقعی سبب پدیدار شدن شرایط شبه‌جوشش در میدان جریان می‌شود در صورتی که با حل گاز ایدئال این پدیده مشاهده نمی‌شود. در شرایط گذر بحرانی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می‌شود و همچنین در ناحیه‌ای بین ورودی اکسیژن و شعله یک افزایش ناگهانی در ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن اتفاق می‌افتد که ناشی از شبه‌جوشش است. حل گاز ایدئال چگالی اکسیژن را کمتر پیش‌بینی می‌کند. در شرایطی که دمای ورودی اکسیژن بالاتر از شرایط بحرانی باشد جابجایی خاصی در محل شعله اتفاق نمی‌افتد. در نهایت مشاهده می‌شود که شرایط گذر-بحرانی در مقایسه با شرایط فرا-بحرانی، شعله بسیار به اعمال رابطه گاز واقعی حساس‌تر است. در میدان کسر مخلوط اختلاف عمده‌ای بین حل گاز واقعی و گاز ایدئال دیده نمی‌شود که این نتیجه برای حل جریان آشفته بحرانی به روش فلیملت مهم است. در میدان فیزیکی اختلاف بین شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال از لحاظ موقعیت و ابعاد شعله برای حالت گذر-بحرانی قابل توجه است. برای شرایط کاملاً بحرانی در میدان فیزیکی نیز اختلاف قابل توجهی در شرایط موقعیت شعله رخ نمی‌دهد.

**کلیدواژگان:** شعله جریان متقابل، احتراق گذر بحرانی، پدیده شبه‌جوشش، کد کانتر، حل شبه یک‌بعدی

### مقدمه

افزایش فشار در سیستم‌های احتراقی، سبب افزایش بازده عملکردی این سیستم‌ها می‌شود. این مزایا تمایل به حرکت به سمت سیستم‌های احتراقی فشار بالا را افزایش داده است. امروزه، موتورهای توربینی پرنده در فشاری در حدود ۳۰ بار فعالیت می‌کنند. این مقدار به صورت تقریباً خطی در ۵۰ سال اخیر افزایش پیدا کرده است و پیش‌بینی می‌شود که همچنان این روند ادامه داشته باشد [۱]. مثال دیگر موتورهای دیزل است که فشار پس از اشتعال به محدوده ۶۰ اتمسفر می‌رسد [۲]. در بسیاری از موتورهای راکتی سوخت مایع، یکی از پیشرانها به صورت مایع وارد محفظه احتراق می‌شود، در حالی که دمای آن پایین‌تر از دمای بحرانی ترمودینامیکی و فشار آن بالاتر از فشار بحرانی است (شرایط گذر-بحرانی) [۳]. در بیشتر سیستم‌های احتراقی

فرض گاز ایدئال برای حل جریان واکنشی در نظر گرفته می‌شود. شرایط دما بالا و چگالی پایین شعله امکان در نظر گرفتن این فرض را در تحلیل جریان‌های واکنشی می‌دهد. اما در فشارهای خیلی بالا (بالتر از فشار بحرانی واکنش‌دهنده‌ها) دیگر نمی‌توان فرض گاز ایدئال را به کار برد و لازم است تا از فرض‌های مربوط به شرایط فشار بالا به‌خصوص برای واکنش‌دهنده‌ها استفاده کرد. به عبارت دیگر، در این حالت خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیال از شرایط گاز ایدئال تبعیت نمی‌کند و باید شرایط گاز واقعی را در محاسبات لحاظ کرد.

همان‌طور که اشاره شد، در تحلیل CFD جریان‌های آشفته فرا-بحرانی لازم است تا شرایط مربوط به خواص ترمودینامیکی، انتقال و انرژی گاز واقعی لحاظ شود. عموماً، در بیشتر جریان‌های آشفته فرا-بحرانی به دلیل بالا بودن چگالی و یا سرعت، عدد رینولدز بالا است و حل LES این جریان‌ها به لحاظ محاسباتی هزینه بیشتری تحمیل می‌کند. در این حالت به کار بردن مدل‌های احتراقی که تعداد زیادی معادله انتقال برای گونه‌ها در نظر می‌گیرند، شرایط را بغرنج‌تر می‌سازد. به همین دلیل استفاده از مدل‌های احتراقی خانواده فلیملت که بر اساس ذخیره‌سازی<sup>۱</sup> داده‌های ترمودینامیک واکنش عمل می‌کنند بسیار متداول‌تر است. در این حالت نیاز است تا یک ساختار شعله آرام برای تولید داده‌های فلیملت تولید شود. دو نوع از روش‌های متداول برای تولید این ساختار شعله آرام استفاده از مفهوم شعله‌های جریان متقابل و یا شعله‌های جریان برش محوری است. شعله‌های جریان متقابل علاوه بر کاربرد برای تولید ساختار شعله آرام جذابیت‌های دیگری نیز برای محققان دارند. یکی از علل توجه به شعله‌های جریان متقابل ویژگی‌های خاص آن در رابطه با یک‌بعدی بودن شعله آن‌ها و همچنین قابلیت تعیین و تغییر مقیاس‌های زمانی جریان مانند زمان اقامت در آن‌ها است که برای مطالعه شعله‌ها بسیار مهم است [۵،۴]. با توجه به تأکید مطالعه حاضر به شرایط فشار بالای میدان جریان، حل میدان جریان شعله متقابل، هم به لحاظ تحلیل میدان جریان و هم به-لحاظ تولید داده‌های ساختار جریان برای حل فلیملت یک شعله نفوذی فرا-بحرانی حائز اهمیت است.

منابع در حوزه شعله‌های نفوذی جریان متقابل گسترده بوده و همچنان در حال گسترش است. این مطالعات شامل روندهای تجربی، تحلیلی و عددی است [۶-۸]. از معدود پژوهش‌های تجربی صورت گرفته برای مطالعه ساختار شعله‌های نفوذی جریان متقابل و شرایط خاموشی آن‌ها، به کارهای نیمان و همکارانش در سال ۲۰۱۳ برمی‌گردد [۹]. در این مطالعه، در بازه فشاری ۱ تا ۲۰ بار، فرآیند احتراق هوا با سوخت‌های متان، اتان و اتیلن که با گاز نیتروژن و هلیوم رقیق شده‌اند، بررسی شده است. پروفیل دما (با استفاده از ترموکوپل‌ها) و نرخ‌های کرنش در شرایط خاموشی شعله اندازه‌گیری شده و نتایج با حل عددی حاصل از دو سینتیک شیمیایی متفاوت مقایسه شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌داد که نرخ کرنش خاموشی شعله، تا فشارهای حدود ۳ تا ۵ بار، با افزایش فشار، بیشتر شده و پس از آن و تا فشار ۲۰ بار، با افزایش فشار، کاهش می‌یافت. پارامتر دیگر مورد مطالعه، میزان شار حرارتی تشعشعی از شعله بوده که نتایج تجربی نشان می‌داد با افزایش فشار، این پارامتر افزایش می‌یابد. همان‌طور که اشاره شد، یک‌بعدی بودن شعله‌های جریان متقابل و همچنین امکان تغییر زمان ماندگاری جریان، این شعله‌ها را به لحاظ مطالعاتی جذاب کرده است. اگرچه بیشتر مطالعات برای شرایط فشار اتمسفریک و همچنین شرایط گاز ایدئال می‌باشند، برخی مطالعات جدید به روش عددی شرایط گاز واقعی را نیز در حل جریان‌های واکنشی متقابل مورد بررسی قرار داده‌اند. بیشتر مطالعات در خصوص واکنش‌دهنده‌های هیدروژن-اکسیژن است و مطالعات کمتری به شعله‌های هیدروکربنی جریان متقابل پرداخته است. به‌عنوان نمونه ریبرت و همکارانش [۱۰] نشان دادند که در شعله جریان متقابل ضخامت شعله و همچنین نرخ آزادسازی انرژی با مجذور حاصل ضرب فشار در نرخ کرنش رابطه دارد. همچنین اشاره کرده‌اند که در ناحیه شعله به دلیل دمای بالا، اثرات گاز واقعی کم می‌شود و در نظر گرفتن فرض گاز ایدئال قابل قبول است. ویلیامز [۱۱] اثرات انتقال مولکولی (انتقال به روش چندجزئی و میانگین مخلوط) و همچنین انتقال حرارت مولکولی بر روی ساختار شعله و همچنین مشخصات خاموشی شعله غیرپیش‌آمیخته برخوردی را بررسی و مشاهده کرد که نرخ کرنش خاموشی

1. Look-up

به خواص انتقال مولکولی حساس است. ویلیامز تأکید کرده که در نظر گرفتن روابط مناسب انتقال (شامل دیفیوژن مولکولی، هدایت حرارت مولکولی و گرانی) در پیش‌بینی ساختار شعله غیر پیش‌آمیخته جریان متقابل حائز اهمیت است. ونگ و همکاران [۱۲] با استفاده از راهبرد یکپارچه‌ای که تمامی محدوده فشاری را شامل می‌شود، توانستند کلیه نواحی منحنی S شعله (نمودار تغییرات دما براساس تغییرات نرخ کرنش و یا نرخ اضمحلال) را پوشش بدهند. در مطالعه آن‌ها، ساختار شعله‌های هیدروژن/اکسیژن و متان/اکسیژن در محدوده فشاری ۰/۵ تا ۲۰۰ اتمسفر بررسی شده و تأثیر پارامترهای مختلف و شرایط مرزی متفاوت تحلیل شده است. لاکاز و اوفلین [۱۳] پارامترهای مؤثر بر رفتار شعله هیدروژن گازی و اکسیژن مایع را در شرایط فرابحرانی مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها یک شعله جریان متقابل را به صورت دوبعدی و به روش عددی شبیه‌سازی کرده‌اند. در مطالعه آن‌ها حساسیت ساختار شعله به کشیدگی، فشار، دما و اثرات سیال حقیقی در شعله جریان متقابل مورد بررسی قرار گرفت. آن‌ها نشان داده‌اند که شعله به کشیدگی بسیار مقاوم است و فرض فلیملت برای شبیه‌سازی و بررسی، فرض مناسبی است. از طرفی، پدیده سیال واقعی می‌تواند تأثیر قابل توجهی بر توپولوژی شعله داشته باشد.

در ناحیه فشار فرا-بحرانی در دیاگرام فازی، شرایط سیال در حالت دمای زیر بحرانی با شرایط دمای بالای بحرانی بسیار متفاوت است. در شرایطی که در فشار بحرانی دما زیر دمای بحرانی باشد سیال رفتار مایع‌مانند دارد. اما در شرایطی که دما نیز بالاتر از دمای بحرانی قرار می‌گیرد رفتار سیال گازمانند می‌شود. خط widom که با خط قرمز در شکل ۱ نشان داده شده است، ناحیه گازمانند را از ناحیه مایع‌مانند در ناحیه فرا-بحرانی جدا می‌کند. به عبارت دیگر هنگامی که سیال از ناحیه گذر-بحرانی وارد ناحیه کاملاً فرا-بحرانی می‌شود به اصطلاح از خط widom در نمودار فازی عبور کرده است. یکی از ویژگی‌های بارز سیالی که به لحاظ دما و فشار بر روی این خط قرار می‌گیرد داشتن ظرفیت حرارتی قابل توجه در مقایسه با شرایط اطراف است. این رفتار را ((شبه‌جوشش)) می‌نامند. در تمام این تغییرات رفتاری، کشش سطحی وجود ندارد و جریان تک‌فاز است. بانوتی و همکارانش [۱۴-۱۶] در سال‌های اخیر تحقیقات زیادی بر روی پدیده شبه‌جوشش در جریان گذر-بحرانی انجام داده‌اند و نشان داده‌اند که در جریان گذر-بحرانی، خواص ترمو-فیزیکی به صورت تابعی غیرخطی از فشار موضعی و دما هستند.

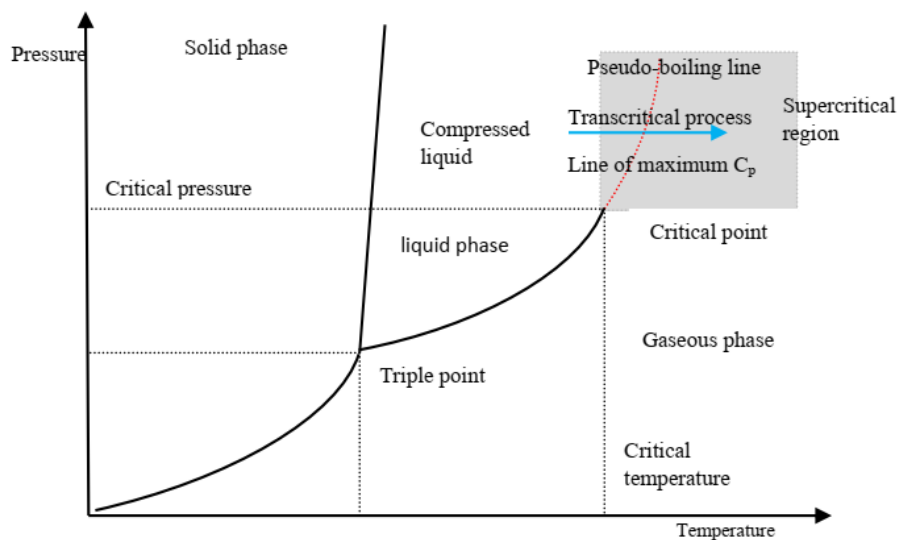


Figure 1- Transcritical conditions across the pseudo-boiling line in a phase diagram

شکل ۱- شرایط گذر بحرانی در دمای شبه‌جوشش در دیاگرام فازی

هدف اصلی مقاله حاضر، بررسی نقش و اهمیت شرایط گذر-بحرانی و فرا-بحرانی در پیش‌بینی رفتار جریان واکنشی است. در هنگامی که شرایط در فضای فیزیکی مورد بررسی قرار می‌گیرد، بین در نظر گرفتن شرایط گاز واقعی برای حالت گذر-

بحرانی و فرا-بحرانی تفاوت عمده مشاهده می‌شود و تأثیر آن مشخص می‌شود. اما یکی از مواردی که هدف اصلی مقاله است بررسی تفاوت در نظر گرفتن در شرایط فضای کسر مخلوط است. بسیاری از مقالاتی که در حوزه شبیه‌سازی میدان جریان آشفته فرا-بحرانی در تحقیقات مختلف ارائه می‌شود به دلیل حجم محاسبات بالا از مدل‌های خانواده فلیملت<sup>۱</sup> برای شبیه‌سازی احتراق استفاده کرده‌اند. برای مدل‌سازی این موضوع نیاز به در اختیار داشتن ساختار شعله آرام است که معمولاً براساس حل شعله جریان متقابل به دست می‌آید. در بیشتر مطالعات حوزه فرا-بحرانی این ساختار شعله از حل شعله جریان متقابل با در نظر گرفتن شرایط گاز واقعی حاصل می‌شود و محققان ساختار شعله آرام را نیز با حالت گاز واقعی حل می‌کنند که نیاز به تغییرات در حل جریان و همچنین به کار بستن هزینه و زمان است. در مقاله بالا نشان داده شده است که تغییرات ساختار شعله در فضای کسر مخلوط چه برای شرایط گذر-بحرانی و چه برای فرا-بحرانی ناچیز است و می‌توان از ساختار شعله آرام براساس گاز ایدئال تراکم‌پذیر نیز برای این منظور استفاده کرد، بدون آنکه خطای قابل توجهی در محاسبات وارد شود. این نکته کمک مؤثری به ساده‌سازی حل میدان جریان آشفته فرا-بحرانی با استفاده از مدل‌های خانواده فلیملت می‌کند. تاکنون مقاله‌ای به تفاوت استفاده از روابط گاز واقعی و گاز ایدئال در مشخصات شعله در فضای فیزیکی و فضایی کسر مخلوط برای شرایط گذر-بحرانی و فرا-بحرانی نپرداخته است و مقالات صرفاً به اهمیت به کارگیری معادلات حالت واقعی برای جریان‌های فرا-بحرانی اشاره کرده‌اند.

### توصیف میدان جریان

مدل فیزیکی مورد بررسی یک شعله نفوذی جریان متقابل است که به وسیله جریان خروجی از نازل‌های استوانه‌ای (همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است) ایجاد می‌شود. این هندسه متقارن محوری به طرز قابل توجهی معادلات حاکم را ساده می‌کند [۱۷]. معادلات دقیق حل میدان فوق به صورت مفصل توسط هو و همکارانش ارائه شده است [۱۸] و برای شعله برخوردی اکسیژن/هیدروژن برای شرایط گسترده ترمودینامیکی تفسیر شده است.

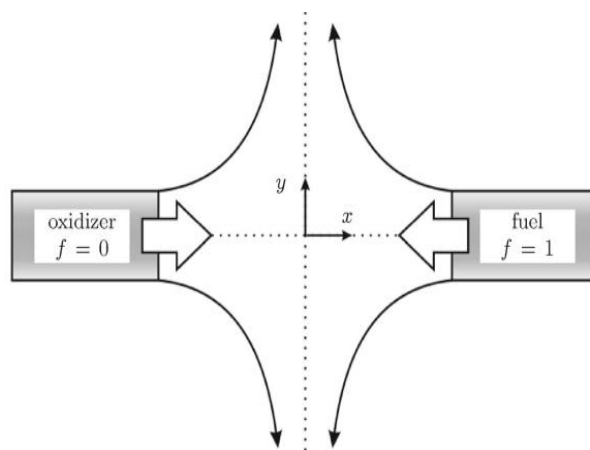


Figure 2- The schematic configuration of an opposed flow flame  
شکل ۲- طرحواره نحوه تشکیل شعله در جریان برخورد متقابل

در مقاله حاضر برای حل میدان جریان از فرمولاسیون هو و همکارانش، که کلیه معادلات جرم، تکانه، اجزاء و انرژی به علاوه خواص ترمودینامیکی و انتقال را در بر گرفته است، استفاده شده است. از کد منبع باز کانترا<sup>۲</sup> برای حل میدان جریان و سینتیک اجزاء استفاده شده است [۱۹]. با توجه به اینکه کد کانترا در حالت اولیه و بدون تغییرات، خواص انتقال و

1. Flamelet  
2. Cantera

ترمودینامیک را برای شرایط گاز ایدئال حل می‌کند، خواص ترمودینامیک به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. در این حال، برای چگالی از معادله SRK استفاده شده است [۲۰] و خواص آنتالپی و آنتروپی نیز شامل ترم حالت ایدئال به علاوه ترم اصلاحی است. همچنین، خواص انتقال براساس روابط چانگ به روز شده است. معادله انرژی نیز به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. با توجه به اینکه در این مطالعه شعله بر خوردی متان/اکسیژن مایع در شرایط فوق بحرانی مدنظر بوده است، از مکانیزم GRI.3 که شامل ۵۳ جزء شیمیایی و ۳۲۵ واکنش است استفاده شده است تا اثرات تمام اجزاء به دقت دیده شود. مکانیزم GRI.3 مخصوص مدل سازی دقیق احتراق متان در فشارهای بالاست، اما می‌توان برای کاربردهای که شرایط پایدار را در کار خود لحاظ می‌کند و دنبال پدیده‌ای گذرا مانند خاموشی و یا اشتعال نیست از این مکانیزم استفاده کرد. این مکانیزم تأثیر عمده‌ای در مواردی که مدنظر این تحقیق است، یعنی اثرات شرایط گذر بحرانی و فرا-بحرانی بر ساختار پایه شعله و همچنین تفاوت دو حالت در فضای کسر مخلوط، نمی‌گذارد. ضمن اینکه محققان دیگری نیز از این مکانیزم برای شرایط فشار بالای مشابه برای حل CFD و یا یک بعدی مسائل فشار بالا استفاده کرده‌اند [۲۱، ۲۲].

برای استخراج معادلات حاکم، فرض می‌شود که این جریان، پایا و متقارن محوری بوده و هیچ پارامتری در راستای محیطی آن،  $\theta$ ، تغییر نمی‌کند (هرچند که ممکن است سرعت محیطی  $\omega$  وجود داشته باشد). میدان جریان نیز تنها در راستای صفحه  $z-r$  بررسی می‌شود. در این مسئله، با استفاده از روش حل تشابهی، معادلات حاکم سه بعدی به معادله یک بعدی تقلیل یافته است. روند اثبات ارائه بر پایه دو فرض اساسی زیر است:

۱- میدان سرعت در قالب یک تابع جریان که فرم تفکیک پذیری به شکل زیر دارد، قابل توصیف است:

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

که در آن  $U(z)$  تابعی از  $z$  است.

۲- دما، ترکیب و چگالی تنها وابسته به  $z$  (تغییرات محوری) هستند.

همچنین مقدار تغییرات فشار نسبت به فشار ترمودینامیکی میانگین کوچک فرض می‌شود. با استفاده از این فرضیات و فرض استوکس که لزجت دینامیکی و توده‌ای را به صورت  $\kappa = -2\mu/3$  در نظر می‌گیرد، مجموعه معادلات دیفرانسیل پاره‌ای به صورت زیر ساده سازی می‌شوند.

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

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

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

$$\rho u \frac{\partial w}{\partial z} + \rho v \frac{\partial w}{\partial r} - \rho \frac{vw}{r} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left[ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial r} - \frac{w}{r} \right) \right] \quad (5)$$

بر اساس تعریف تابع جریان تقارن محوری، می‌توان گفت:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial r} &= \rho u r = 2rU \\ \frac{\partial \Psi}{\partial z} &= -\rho v r = -r^2 \frac{dU}{dz} \end{aligned} \quad (6)$$

که معادله بقای جرم را به صورت دقیق ارضا می‌کند. بر مبنای روابط بالا، عبارت‌هایی که برای جایگزینی در معادلات نویر-استوکس نیاز است، مطابق روابط زیر محاسبه می‌شوند.

$$\begin{aligned} \rho u &= 2U, \rho v = -r \frac{dU}{dz} \\ \frac{\partial u}{\partial z} &= 2 \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{U}{\rho} \right), \frac{\partial u}{\partial r} = 2U \frac{1}{r} \left( \frac{1}{\rho} \right) = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial z} &= -r \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right), \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{dU}{dz} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{r}{\rho} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \end{aligned} \quad (7)$$

ذکر این نکته لازم است که در روابط بالا، از مشتقات شعاعی چگالی، به‌خاطر اینکه چگالی تنها تابعی از  $z$  فرض شده، صرف‌نظر شده است. همچنین برای محاسبه عبارت دیورژانس سرعت در معادلات نویر-استوکس، براساس فرضیات، می‌توان به عبارت زیر رسید.

$$\nabla V = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 2 \left[ \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{U}{\rho} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right] \quad (8)$$

با جایگزینی این عبارات در داخل معادلات بقا و حذف عبارتهایی با مشتقات شعاعی چگالی و  $U$  و همچنین انجام ساده‌سازی‌ها می‌توان به معادلات دیفرانسیل کلی (ODE) زیر رسید:

تکانه محوری:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -4U \frac{dU}{dz} \left( \frac{U}{\rho} \right) + \frac{4}{3} \frac{d}{dz} \left[ 2\mu \frac{d}{dz} \left( \frac{U}{\rho} \right) + \frac{\mu}{\rho} \frac{dU}{dz} \right] - 2\mu \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right) \quad (9)$$

تکانه شعاعی:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} = 2U \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right) - \frac{1}{\rho} \left( \frac{dU}{dz} \right)^2 + \rho \left( \frac{w}{r} \right)^2 - \frac{d}{dz} \left[ \mu \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right) \right] \quad (10)$$

معادلات بالا به‌گونه‌ای که عبارت گرادیان فشار به‌تنهایی در سمت چپ معادله قرار گیرد نوشته شده تا بر این مطلب که سمت راست معادله تنها تابعی از  $z$  است، تأکید شود. اگر سرعت محیطی صفر باشد ( $w=0$ )، به‌وضوح مشخص است که سمت راست دو معادله بالا تنها تابعی از  $z$  است. در غیر این صورت می‌توان فرض کرد که عبارت  $W(z) = \omega/r$  باید تنها تابعی از  $z$  باشد. با توجه به این نکته، می‌توان بیان کرد که هر دو عبارت  $\frac{\partial p}{\partial z}$  و  $\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r}$  تنها تابعی از  $z$  هستند. با توجه به اینکه براساس تعریف تابع جریان، معادله مرتبه اول بقای جرم با تکانه شعاعی ترکیب شده است، معادله بقای تکانه شعاعی یک معادله مرتبه سوم حاصل شده است. اگر از تکانه شعاعی نسبت به  $z$  مشتق گرفته شود، مشخص می‌شود که عبارت  $\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} \right)$  تنها تابعی از  $z$  است.

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} \right) = F(z) \quad (11)$$

با توجه به اینکه فشار، تابع پیوسته مشتق‌پذیری از  $z$  و  $r$  است، می‌توان جایگزینی زیر را انجام داد:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\partial p}{\partial z} \right) = 0 \quad (12)$$

حال با توجه به اینکه عبارت  $\frac{\partial p}{\partial z}$  تنها تابعی از  $z$  است، مشتق شعاعی آن صفر خواهد بود. در نتیجه می‌توان دریافت که عبارت یک مقدار ثابت است. همچنین عبارت  $\Lambda_r$  به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = \Lambda_r = \text{constant}. \quad (13)$$

با جایگزینی تابع  $U$  با سرعت‌های فیزیکی، که در زیر آمده است، می‌توان به معادله‌ای با ترم‌هایی فیزیکی رسید.

$$\rho u = 2U, \quad \rho \frac{v}{r} = \rho V = -\frac{dU}{dz} \quad (14)$$

مشاهده می‌شود که سرعت  $V = \frac{v}{r}$  نیز صرفاً تابعی از  $z$  خواهد بود. این معادلات نهایی در زیر خلاصه شده است.

بقای جرم:

$$\frac{d(\rho u)}{dz} + 2\rho V = 0 \quad (15)$$

تکانه شعاعی:

$$-2U \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{r} \frac{dU}{dz} \right) + \frac{1}{\rho} \left( \frac{dU}{dz} \right)^2 - \rho \left( \frac{W}{R} \right)^2 = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{d}{dz} \left[ \mu \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{\rho} \frac{dU}{dz} \right) \right] \quad (16)$$

$$\rho u \frac{dV}{dz} + \rho(V^2 - W^2) = -\Lambda_r + \frac{d}{dz} \left( \mu \frac{dV}{dz} \right) \quad (17)$$

در صورت وجود مؤلفه محیطی سرعت، معادله تکانه محیطی به‌صورت زیر درمی‌آید:

$$2Ur \frac{dW}{dz} - r \frac{dU}{dz} \frac{\partial rw}{\partial r} - r \frac{dU}{dz} w = r \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu \left( \frac{\partial rw}{\partial r} - w \right) \right] + \frac{2\mu}{r} \left( \frac{\partial rw}{\partial r} \right) \quad (18)$$

با تقسیم عبارت بالا بر  $r$  و حذف مشتقات شعاعی  $W$  و چگالی، می توان به معادله زیر رسید.

$$\rho u \frac{dW}{dz} + 2\rho VW = \frac{d}{dz} \left( \mu \frac{dW}{dz} \right) \quad (19)$$

معادلات انرژی با فرض گاز کامل و بقای گونه‌ها، با فرض اینکه درجه حرارت و ترکیب گونه‌ها تنها ترکیبی از  $Z$  باشد، مطابق زیر خواهد بود.

$$\rho u c_p \frac{dT}{dz} \left( \lambda \frac{dT}{dz} \right) - \sum_{k=1}^N \rho Y_k V_k c_{pk} \frac{dT}{dz} - \sum_{k=1}^N h_k W_k \dot{\omega}_k \quad (20)$$

$$\rho u \frac{dY_k}{dz} = - \frac{d}{dz} (\rho Y_k V_k) + W_k \dot{\omega}_k \quad k = 1, k \quad (21)$$

با استفاده از معادله حالت گاز کامل، که ارتباط بین چگالی جرمی، فشار میانگین و همچنین دما و ترکیب موضعی گونه‌ها را به هم مرتبط می کند، مجموعه معادلات بالا بسته می شود [۱۷].

$$p = \rho RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \quad (22)$$

البته لازم به ذکر است در کار حاضر معادله حالت گاز براساس گاز واقعی نیز محاسبه شده است که در ادامه مورد اشاره قرار خواهد گرفت.

### شرایط مرزی

معادلات جریان متقابل پایا، یک مسئله مقدار مرزی است. معادله بقای جرم، مرتبه اول و معادلات بقای تکانه، انرژی و گونه‌ها معادله مرتبه دوم هستند. معادلات مرتبه دوم، نیازمند اطلاعات مستقلی از  $T, W, V$  و  $Y_k$  در هر دو انتهای دامنه  $Z$  بوده و معادله مرتبه اول بقای جرم، تنها به مشخص بودن سرعت  $u$  در یک مرز نیازمند است. بدین ترتیب شروط مرزی این مسئله را می توان به صورت زیر تعیین کرد.

در نقطه  $Z = Z_0$

$$\begin{aligned} T(z_0) &= T_0 \\ V(z_0) &= V_0 \\ \dot{m}_0 Y_{k,0} - j_k(z_0) - \rho(z_0) u(z_0) Y_k(z_0) &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

اگر دبی جرمی مشخص باشد، عبارت زیر حل می شود:

$$\rho(z_0) u(z_0) = \dot{m}_0 \quad (24)$$

در غیر این صورت:

$$\Lambda(z_0) = 0 \quad (25)$$

برای شرط مرزی قرار گرفته در نقطه  $Z_0$  در مرز خروجی، معادلات زیر حل می شود:

$$\begin{aligned} \Lambda(z_0) &= 0 \\ \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z_0} &= 0 \\ \left. \frac{\partial Y_k}{\partial z} \right|_{z_0} &= 0 \\ V(z_0) &= 0 \end{aligned} \quad (26)$$

برای شرط مرزی تقارن قرار گرفته در نقطه  $Z_0$ ، معادلات زیر حل می شود:

$$\begin{aligned} \rho(z_0) u(z_0) &= 0 \\ \left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_{z_0} &= 0 \\ \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z_0} &= 0 \\ j_k(z_0) &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

شرط مرزی برای سطحی که در آن واکنش شیمیایی رخ می‌دهد و در نقطه  $z_0$  قرار دارد، دمای  $T_0$  برای آن اعمال می‌شود. در این موقعیت معادلات زیر حل می‌شود:

$$\begin{aligned} \rho(z_0)u(z_0) &= 0 \\ V(z_0) &= 0 \\ T(z_0) &= T_0 \\ j_k(z_0) + W_k \dot{\omega}_k &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

که در عبارت‌های بالا، عبارت  $S_k$  نرخ مولی تولید گونه  $k$  که در فاز گازی قرار دارد، است.

### معادله حالت

با توجه به اینکه در حالت فرا-بحرانی مشخصات مربوط خواص ترمودینامیکی از حالت گاز ایدئال پیروی نمی‌کند، در اینجا از مدل SRK<sup>1</sup> برای اعمال اثر شرایط فرا-بحرانی بر چگالی مخلوط استفاده شده است. مدل SRK یکی از مدل‌های معروف برای محاسبه مشخصات ترمودینامیکی (چگالی) در شرایط فرا-بحرانی است. معادله کیوبیک<sup>2</sup> این مدل به صورت زیر معرفی می‌شود [20].

$$p = \frac{RuT}{v-b} - \frac{a(T)}{v^2+bv} \quad (29)$$

که در آن  $R_u$  ثابت جهانی گاز،  $V = M/\rho$  حجم مولی است که در آن  $M$  وزن مولکولی است. حجم مؤثر مولکول،  $b$ ، از رابطه  $b = 0.0866R_uT_{cr}/p_{cr}$  محاسبه می‌شود که در رابطه بالا  $cr$  بیان کننده نقطه بحرانی است. برهمکنش بین مولکولی به صورت زیر داده می‌شود.

$$a(T) = a_0[1 + n(1 - (T/T_c)^{0.5})]^2 \quad (30)$$

$a_0 = 0.4275R_u^2T_{cr}^2/p_{cr}$  و  $n = 0.480 + 1.57\omega_i - 0.176\omega_i^2$  که در آن  $\omega$  ضریب اسنتریک است. ضریب اسنتریک، مانند وزن مولکولی، فشار بحرانی، دمای بحرانی و حجم بحرانی به عنوان یک پارامتر استاندارد برای شناسایی مشخصات و ویژگی‌های مواد خالص شناخته می‌شود. این عدد بیان کننده میزان غیرکروی بودن مولکول است که در رفتار این ماده در شرایط فشار و دماهای بحرانی تأثیرگذار است [23]. خواص ترمودینامیکی می‌تواند به صورت مستقیم از روابط زیر استخراج شود.

$$\begin{aligned} e(T, \rho) &= e_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho \\ h(T, \rho) &= h_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho \\ s(T, \rho) &= s_0(T, \rho_0) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho \\ C_V(T, \rho) &= C_{V_0}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho}^2 / \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{\rho} \end{aligned} \quad (31)$$

در شکل ۳ مقایسه بین داده‌های NIST [24]، مدل SRK (استفاده شده در کار حاضر) و شرایط گاز ایدئال، برای چگالی و ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن برای دماهای مختلف و در فشار بحرانی اکسیژن (۶۰ بار) آورده شده است. در شرایطی که سیال در شرایط گذر-بحرانی قرار دارد اختلاف بین داده‌های NIST با شرایط گاز ایدئال فاصله بسیاری دارد و در دماهای بالاتر از بحرانی به داده‌های گاز ایدئال نزدیک می‌شود. باین حال در بیشتر نقاط داده‌های مدل SRK با داده‌های NIST همخوانی نسبتاً مناسبی دارد و به همین دلیل از این مدل می‌توان برای محاسبه خواص ترمودینامیکی در شرایط فوق بحرانی استفاده کرد.

1. Soave-Rdelich-Kwong  
2. Cubic



نکته قابل توجه در این قسمت تغییرات شدید خواص ترمودینامیکی شامل چگالی و ظرفیت حرارتی در مجاورت دمای شبه جوشش با تغییرات اندک دما است. در شرایط گاز ایدئال در بازه دمایی ۵۰ کلوین تا ۴۰۰ کلوین طبق داده‌های JANAF تغییرات ظرفیت حرارتی بسیار کم است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با رسیدن دما به محدوده ۱۵۸/۵ کلوین ظرفیت حرارتی ویژه به شدت افزایش می‌یابد. در عین حال مشاهده می‌شود به همراه این تغییرات، چگالی نیز در یک بازه دمایی کوچک به شدت افت می‌کند و به عبارت دیگر حجم مخصوص سیال در این شرایط به شدت افزایش پیدا می‌کند. این تغییرات شامل ظرفیت حرارتی و مهم‌تر از آن افزایش حجم (پدیده شبه جوشش)، شرایط جدیدی را در محفظه احتراق ایجاد می‌کند که نیاز است مورد بررسی قرار گیرد.

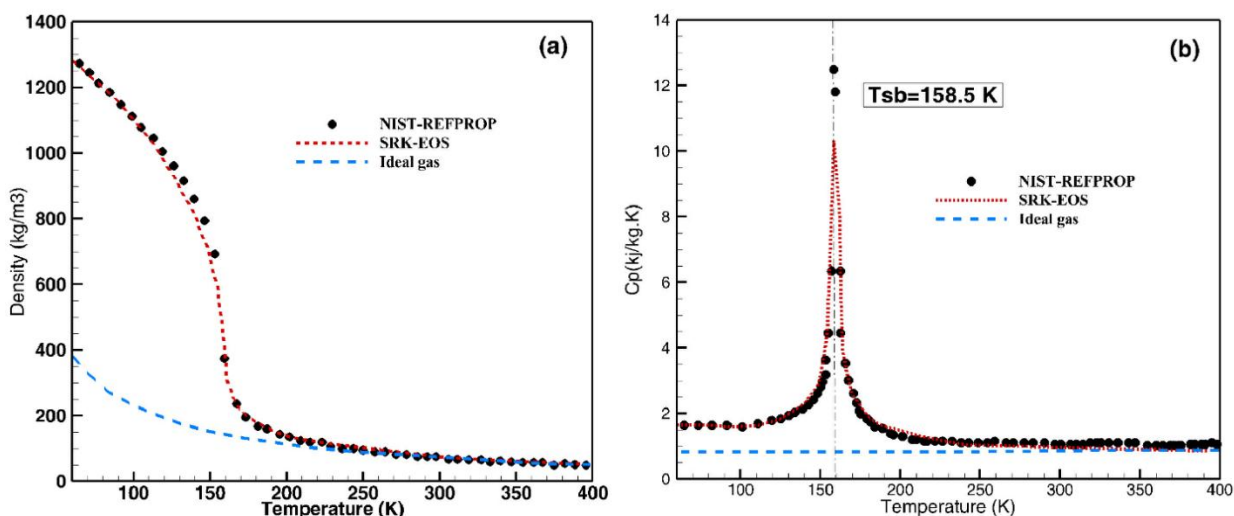


Figure 3- Comparison of NIST database with thermodynamic properties calculated with SRK equation of state for O<sub>2</sub> at 60 bar (a) density (b) constant-pressure specific of heat

شکل ۳- خواص ترمودینامیکی گاز ایدئال-مدل SRK و داده‌های NIST -ظرفیت حرارتی ویژه (راست)، چگالی (چپ) برای اکسیژن در فشار ۶۰ بار

### خواص انتقال در جریان واکنشی فرا-بحرانی

همانند خواص ترمودینامیکی برای خواص انتقال نیز لازم است تا اثر شرایط فرا-بحرانی را بر مخلوط اعمال کرد. رویکرد برای شرایط گاز واقعی در مورد گرانیوی بیشتر برپایه نتایج چانگ و همکارانش [۲۵] که براساس تئوری چاپمن-انسکوگ است استوار است. این تئوری اصولاً برای گازهای رقیق، فرموله شده است، اما برای فشار-بالا نیز توسعه داده شده است. برای مخلوط های فشار بالا (گاز واقعی)، گرانیوی  $\eta$  به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$\eta = \eta^* \eta^0 = \eta^* \frac{40.785 F_{Cm} (M_m T)^{1/2}}{V_{Cm}^{2/3} \Omega_v} \quad (32)$$

که در آن:

$$\eta^0 = \text{گرانیوی فشار پایین}$$

$$\eta^* = \text{ترم اصلاحی برای گرانیوی فشار بالا}$$

$$M_m = \text{وزن مولکولی مخلوط}$$

$$V_{Cm} = \text{حجم بحرانی مخلوط}$$

$$\Omega_v = \text{انتگرال برخورد و در نهایت } \Omega_v = 1 - 0.2756 \omega_m + 0.059035 \mu_{rm}^4 + \kappa_m$$

در معادله بالا  $F_{cm}$  و  $\omega_m$  ضریب استریک مخلوط و  $\kappa_m$  یک فاکتور مخصوص اصلاح برای مواد با شرایط قطبیت مولکولی بالا مانند الکل و اسیدها است. در شکل ۴ مقایسه بین داده‌های NIST، مدل چانگ و شرایط گاز ایدئال برای گرانیوی و ضریب هدایت حرارتی اکسیژن برای دماهای مختلف و در فشار ۶۰ بار آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در دماهای پایین‌تر از دمای شبه‌بحرانی اکسیژن و در شرایطی که سیال در شرایط گذر-بحرانی قرار دارد اختلاف بین داده‌های NIST با شرایط گاز ایدئال فاصله بسیاری دارد و در دماهای بالاتر از بحرانی به داده‌های گاز ایدئال نزدیک می‌شود. باین‌حال در بیشتر دماها داده‌های مدل چانگ با داده‌های NIST همخوانی نسبتاً مناسبی دارد و به همین دلیل از این مدل می‌توان برای محاسبه خواص انتقال در شرایط فوق بحرانی استفاده کرد.

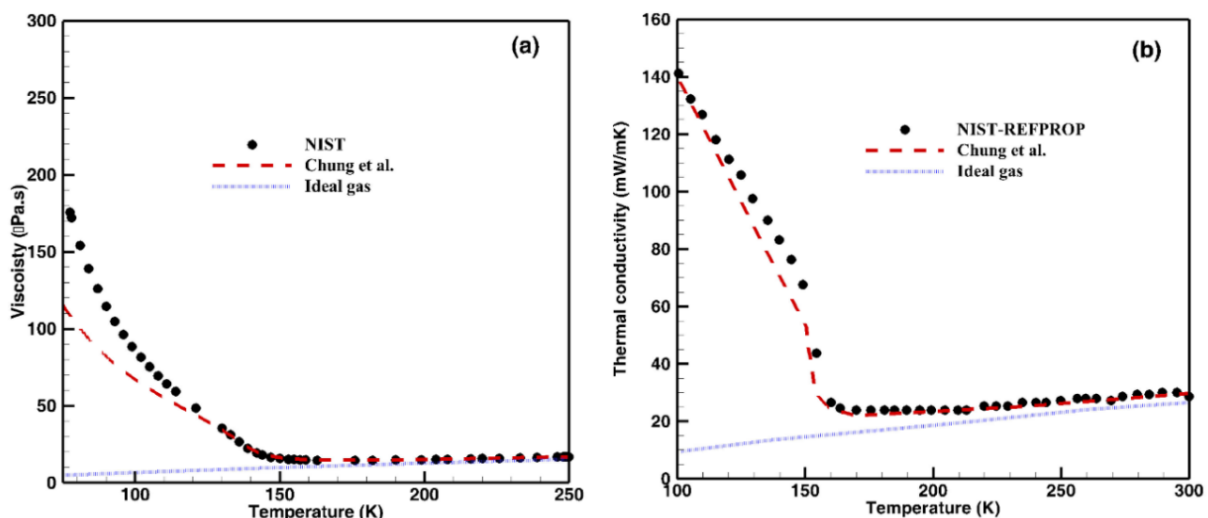


Figure 6- Comparison of NIST database with transport properties calculated with Chung et al model for O2 at 60 bar (a) viscosity (b) thermal conductivity

شکل ۴- خواص انتقال گاز ایدئال-مدل چانگ و داده‌های NIST-هدایت حرارتی (راست)، گرانیوی (چپ) برای اکسیژن در فشار ۶۰ بار

### مشخصات مسئله و شرایط مرزی

در مقاله حاضر از کد منبع باز کانترا برای حل میدان جریان و سینتیک اجزاء استفاده شده است. با توجه به اینکه نرم‌افزار در حال پایه خواص انتقال و ترمودینامیک را برای شرایط گاز ایدئال حل می‌کند، خواص ترمودینامیک و خواص انتقال به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. معادله انرژی نیز به شرایط گاز واقعی تغییر داده شده است. هندسه مسئله شامل دو جریان ورودی است که در فاصله ۱۰ میلی‌متری از یکدیگر قرار گرفته‌اند. شرایط مرزی ورودی به صورت شار جرمی است که با واحد در نظر گرفتن واحد سطح ورودی مشخصات سرعت ورودی تعیین می‌شود. دمای ورودی سوخت و اکسنده نیز داده می‌شود. تعداد شبکه در نظر گرفته شده به این صورت است که تعداد ۳۰ گره در مسئله در نظر گرفته می‌شود و سپس براساس الگوریتم موجود در کد تعداد گره‌ها در حل افزایش پیدا می‌کند تا مسئله همگرا شود. نودهای اضافه شده به صورت یکنواخت نیستند و براساس میزان گرادیان متغیرها در فضا توزیع می‌شوند. یک الگوریتم ترکیبی نیوتن-گام زمانی برای حل معادلات استخراج شده استفاده می‌شود.

با توجه به اینکه در این مطالعه شعله برخوردی متان/اکسیژن مایع در شرایط فوق بحرانی مدنظر بوده است، اثر تشعشع در انتقال حرارت در نظر گرفته نشده است. دمای ورودی متان ۳۰۰ کلوین در نظر گرفته شده است و برای اکسیژن مایع دماهای مختلف از ۱۲۰ کلوین تا ۲۵۰ کلوین در نظر گرفته شده است. همچنین، تحلیل نتایج در فشارهای مختلف از بازه ۱۰ اتمسفر تا ۱۰۰ اتمسفر انجام شده است. شار جرمی سوخت و اکسنده نیز به ترتیب برابر  $13/9$  و  $25/44$   $(kg/m^2.s)$  است.

### صحه گذاری نتایج

برای صحت گذاری حلگر، پروفیل دما با داده های تجربی در بالاترین فشار ممکن مقایسه شده است. پروفیل تجربی دما از مقاله نیمان [۹] و در فشار ۰/۸ MPa استخراج شده است. هندسه تجربی مدنظر دارای دو ورودی سوخت و اکسنده است. سوخت با نیتروژن مخلوط شده و از ورودی سوخت تزریق می شود و مخلوط رقیق شده اکسیژن نیز از ورودی اکسنده تزریق می شود. سوخت مورد استفاده در آزمایش متان است. فاصله بین ورودی سوخت و اکسنده در این آزمایش L=10 mm است. نرخ کرنش گزارش شده در آزمایش به صورت زیر تعریف شده که برای کار حاضر نیز از این رابطه استفاده شده است.

$$a = \frac{2u_2}{L} \left( 1 + \frac{u_1 \sqrt{\rho_1}}{u_2 \sqrt{\rho_2}} \right) \quad (33)$$

که در آن ۱ و ۲ به ترتیب مربوط به سوخت و اکسنده است. در کار تجربی بالا هوا دارای نسبت جرمی  $Y_{O_2,2} = 0.233$  و نسبت جرمی سوخت انتخابی  $Y_{CH_4,1} = 0.16$  است. ذکر این نکته لازم است که سوخت و اکسنده با دمای محیط وارد ناحیه واکنش می شوند ( $T_1 = T_2 = 298 \text{ k}$ ). شبیه سازی با شرایط مرزی یکسان و اندازه محیط یکسان اجرا شده است. همان طور که در شکل ۵ دیده می شود، تطابق خوبی بین شبیه سازی و نتایج آزمایشگاهی وجود دارد. اختلاف تقریبی در محل بیشینه دما می تواند ناشی از عدم دقت در شرایط مرزی و یا اندازه گیری تجربی در محل شعله باشد.

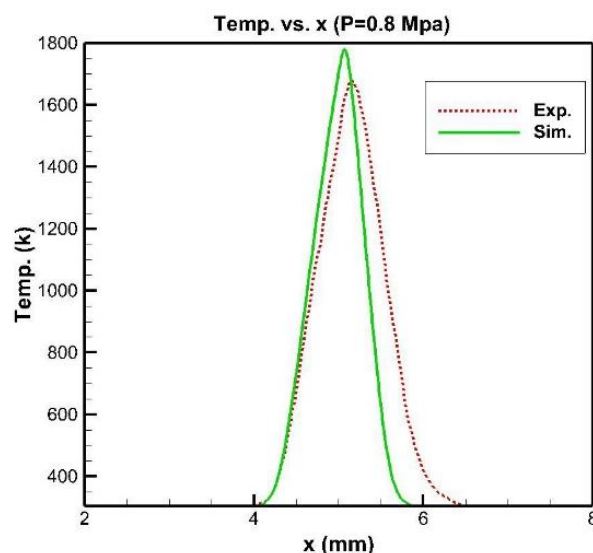


Figure 5- Temperature distribution for experiment and numerical data in 0.8 Mpa [9]  
 شکل ۵- توزیع دما بر اساس طول برای حالت تجربی و عددی در فشار ۰/۸ مگاپاسکال [۹]

همچنین، برای اطمینان از شبیه سازی عددی صورت گرفته، نتایج با بیشترین فشاری که به صورت عددی انجام شده و گزارش شده است نیز مورد مقایسه قرار گرفته است. برای این کار از نتایج حاصل از کار عددی وانگ و همکارانش [۱۲] استفاده شده است. این شبیه سازی برای فشار ۱۰۰ بار و نرخ کرنش ۱۰۰۰ بر ثانیه انجام شده است. شرایط مرزی و ابعادی در نظر گرفته شده مشابه کار وانگ و همکارانش است. نتایج حاصل از مقایسه دما در شکل ۶ نشان داده است. همان طور که مشاهده می شود، در بیشینه دما اختلاف اندکی دیده می شود که می تواند ناشی از به کارگیری مکانیزم های شیمیایی مختلف در دو تحقیق باشد. باین حال تطابق بین نتایج کار حاضر با کار عددی وانگ و همکارانش مناسب است.

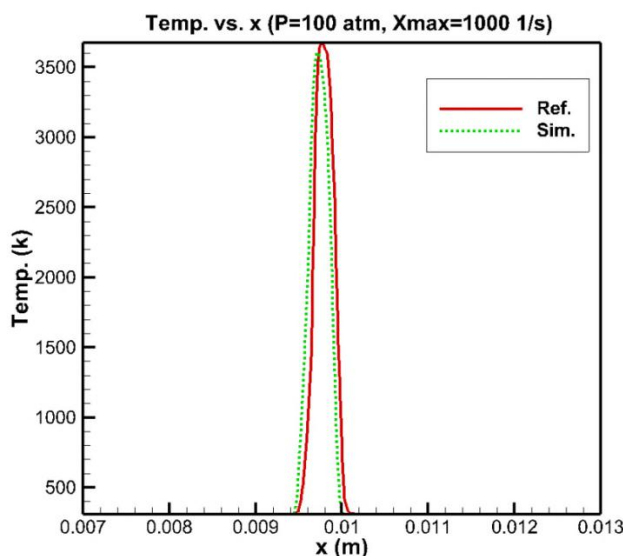


Figure 6- Comparison between current simulations with available similar simulation in 100 atm [12]

شکل ۶- مقایسه بین نتایج شبیه‌سازی حاضر با داده‌های عددی موجود در فشار ۱۰۰ بار و نرخ کرنش ۱۰۰۰ بر ثانیه [۱۲]

### بررسی نتایج

در قسمت نتایج به بررسی اثرات در نظر گرفتن شرایط گاز واقعی (به لحاظ مشخصات ترمودینامیکی و انتقال و انرژی) و گاز ایدئال برای شرایط مختلف فشار و دما و همچنین در فضای کسر مخلوط و فضای فیزیکی پرداخته شده است. روند بررسی نتایج به صورت جدول ۱ است.

جدول ۱- شرایط مختلف بررسی شده در بخش نتایج

Table 1- Simulation conditions the in discussion section

Fig number	variables	Pressure (atm)	Oxygen Temp (K)	EOS
7	Temp-mixture fraction	100	120	Ideal-Real
8	Cp/Temp-Norm length	100	120	Ideal-Real
9	Density- Norm length	10	120	Ideal-Real
10	Density- Norm length	100	120	Ideal-Real
11	OH- Norm length	60	120-300	Ideal
12	OH- Norm length	60	120-300	Real
13	Density- Norm length	10-100	120	Ideal
14	Density- Norm length	10-100	120	Real
15	Temp- Norm length	60	120-300	Ideal-Real
16	Density- Norm length	60	120-300	Ideal-Real
17	Velocity- Norm length	60	120-300	Ideal-Real

در شکل ۷ مقایسه بین شرایط شعله با جریان گاز ایدئال و گاز واقعی براساس کسر مخلوط برای فشار ۱۰۰ بار آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در شرایط گاز واقعی دمای بیشینه برحسب کسر مخلوط اندکی کاهش می‌یابد. باین‌حال موقعیت دمای بیشینه براساس کسر مخلوط برای شرایط گاز واقعی و همچنین گاز ایدئال تغییری نمی‌کند. کاهش جزئی دما را می‌توان در اضافه شدن ترم اصلاحی به ترم گاز ایدئال در معادله آنتالپی دانست. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در فضای کسر مخلوط تفاوت بین داده‌های حالت گاز واقعی و گاز ایدئال ناچیز است که می‌توان این موضوع را در مورد شبیه‌سازی جریان آشفته به روش فلیملت مدنظر قرار داد. از آنجاکه در مدل‌سازی میدان آشفته به روش فلیملت، داده‌های حاصل از ساختار شعله جریان آرام در فضای کسر مخلوط انتگرال‌گیری می‌شود، مشاهده می‌شود که در فضای کسر مخلوط، حالت گاز تأثیر عمده‌ای در شرایط گذر-بحرانی که پر چالش‌ترین قسمت است نخواهد داشت.

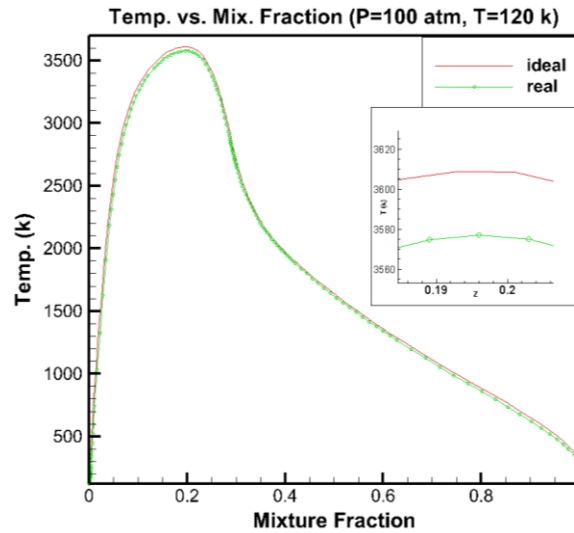


Figure 7- Temperature distribution vs. mixture fraction for ideal and real gas condition  
 شکل ۷- توزیع دما براساس کسر مخلوط برای شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال

در شکل ۸، تغییرات دما و همچنین ظرفیت گرمایی برحسب فاصله بی‌بعد شده برای دمای ورودی ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰۰ بار برای حالت گاز ایدئال و گاز واقعی نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با اعمال شرایط گاز واقعی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می‌شود و دمای بیشینه نیز کاهش می‌یابد. از طرفی همان‌طور که مشاهده می‌شود در شرایطی که گاز کامل در نظر گرفته می‌شود ظرفیت گرمایی، اثر افزایش شدید ناشی از پدیده شبه‌جوشش را ظاهر نمی‌کند. با اعمال شرایط گاز واقعی پیش از شعله و در قسمت ورودی اکسیژن یک افزایش ناگهانی در ظرفیت گرمایی اتفاق می‌افتد که ناشی از عبور سیال از خط Widom و در نتیجه ایجاد تغییرات شدید ترمودینامیکی باشد (مشابه افزایش شدید ظرفیت گرمایی در دمای شبه بحرانی در شکل ۳ در این حالت جریان از حالت مایع‌مانند به سرعت تبدیل به گازمانند می‌شود که این پدیده باعث کاهش شدید چگالی و افزایش سرعت می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که بیشینه دما با اعمال شرایط گاز واقعی اندکی کاهش می‌یابد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در فضای فیزیکی اختلاف بین شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال برای حالت گذر-بحرانی قابل توجه است.

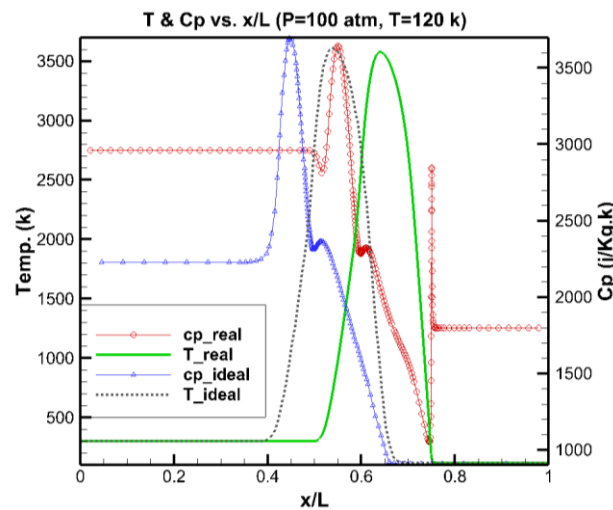


Figure 8- Temperature and constant specific heat vs. normalized length for ideal and real gas condition  
 شکل ۸- توزیع دما و ظرفیت گرمایی ویژه براساس عدد بی‌بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال

در شکل ۹ توزیع چگالی برحسب طول بی‌بعد شده بین سوخت و اکسنده در شرایط حل گاز ایدئال و گاز واقعی برای دمای ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰ بار نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در قسمت ورودی اکسیژن مایع به‌دلیل وجود شرایط گذر بحرانی اختلاف چگالی بین حل گاز ایدئال و گاز واقعی بیشتر از ورودی متان است. حل گاز ایدئال چگالی اکسیژن را کمتر پیش‌بینی می‌کند. در شکل ۱۰ همین توزیع برای شرایط ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشار ۱۰۰ بار نشان داده شده است و مشاهده می‌شود که اختلاف پیش‌بینی شده برای شرایط گاز ایدئال و واقعی بسیار بیشتر و در حدود ۳۰۰ درصد است که نشان می‌دهد فرض گاز ایدئال در این شرایط با خطای بسیار بیشتری همراه است. در شرایطی که فشار کمتر از فشار بحرانی باشد شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال در دمای زیر بحرانی کمتر از ۲۰ درصد خطا ایجاد می‌کند، در صورتی که برای فشار بالاتر از فشار بحرانی این میزان تا ۳۰۰ درصد نیز افزایش پیدا می‌کند.

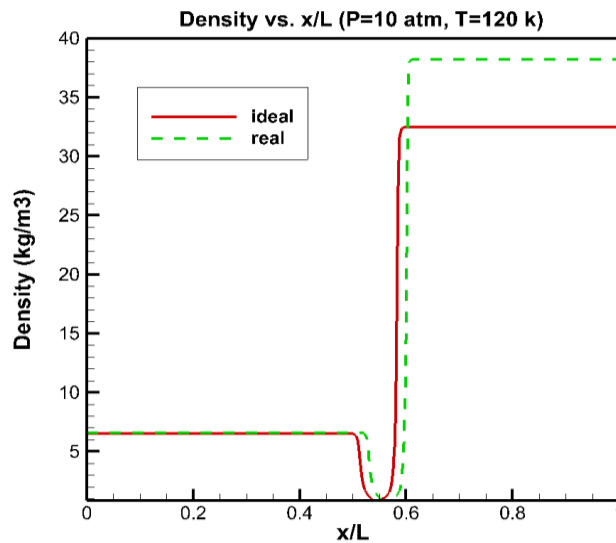


Figure 9- Density distribution vs. normalized length for ideal and real gas conditions in 10 bar  
 شکل ۹- توزیع چگالی براساس عدد بی‌بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال در فشار ۱۰ بار

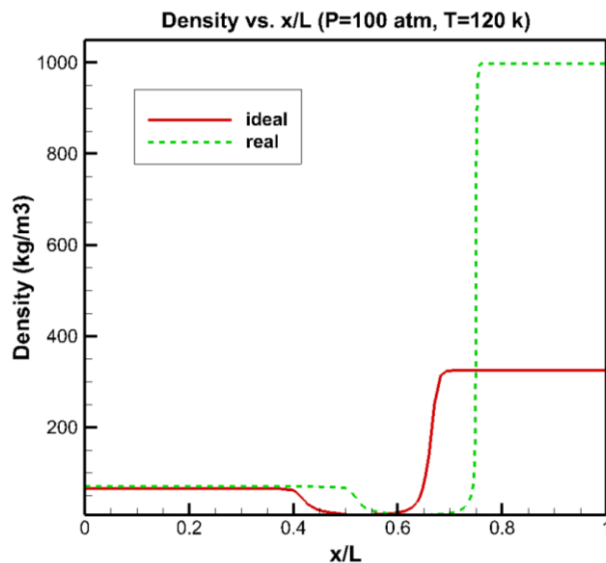


Figure 10- Density distribution vs. normalized length for ideal and real gas conditions in 100 bar  
 شکل ۱۰- توزیع چگالی براساس عدد بی‌بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال در فشار ۱۰۰ بار

شکل ۱۱ توزیع کسر جرمی مربوط به OH (به عنوان معیاری از محل شعله) بر حسب طول بی بعد شده برای فشار محیط ۶۰ بار و دمای ورودی های مختلف اکسیژن مایع را برای شرایط حل گاز ایدئال نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود با افزایش دما از ۱۲۰ کلوین به ۳۰۰ کلوین ضخامت شعله کاهش می یابد. در شکل ۱۲ همین شرایط برای حل گاز واقعی نشان داده شده است. کاهش ضخامت شعله در اثر افزایش دما در هر دو حالت تقریباً مشابه است که نشان دهنده این موضوع است که بیشتر ناشی از تغییر در شرایط سینتیک واکنش هاست که برای هر دو حالت یکسان است. تفاوت عمده در شرایط اعمال روابط گاز واقعی و گاز ایدئال را می توان در موقعیت شعله در شرایط گذر-بحرانی مشاهده کرد. همان طور که مشاهده می شود در شرایط گذر بحرانی (فشار بحرانی و دما زیر بحرانی، دمای ورودی ۱۲۰ و ۱۵۰ کلوین) با در نظر گرفتن حل گاز واقعی شعله به سمت ورودی اکسند جابجا می شود که می توان این را ناشی از کاهش ناگهانی چگالی و افزایش ظرفیت حرارتی در حین عبور از خط Widom دانست. اما در شرایط دمایی کاملاً بحرانی (فشار بحرانی و دما بحرانی، دماهای ورودی ۲۰۰ و ۳۰۰ کلوین) تغییر خاصی در موقعیت شعله برای شرایط حل گاز ایدئال و گاز واقعی دیده نمی شود.

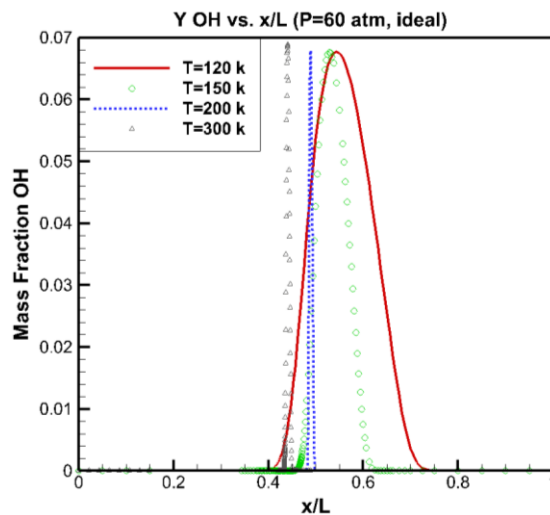


Figure 11- OH mass fraction distribution vs. normalized length for ideal gas condition and various oxygen temperature  
 شکل ۱۱- توزیع کسر جرمی OH براساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز ایدئال برای دمای ورودی مختلف اکسیژن

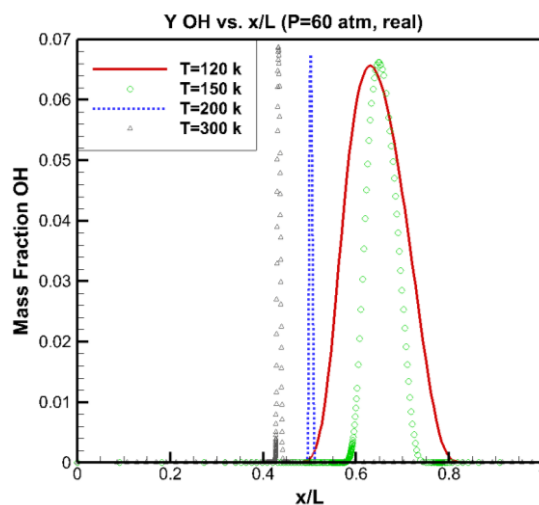


Figure 12- OH mass fraction distribution vs. normalized length for real gas condition and various oxygen temperature  
 شکل ۱۲- توزیع کسر جرمی OH براساس عدد بی بعد فاصله برای شرایط گاز واقعی برای دمای ورودی مختلف اکسیژن

در شکل ۱۳ توزیع چگالی برای دمای ورودی اکسیژن ۱۲۰ کلوین و فشارهای مختلف کاری برحسب فاصله بی‌بعد شده نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش فشار، چگالی سمت اکسیژن افزایش پیدا می‌کند. در شکل ۱۴ همین شرایط برای حل حالت گاز واقعی نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که در شرایط حل گاز واقعی اختلاف چگالی در شرایط فشارهای بالا کمتر می‌شود. همچنین، چگالی متان اختلاف کمتری را برای فشارهای مختلف نشان می‌دهد.

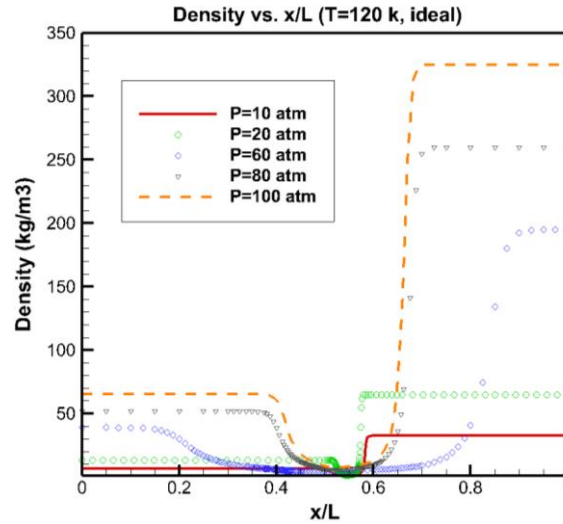


Figure 13- Density distribution vs. normalized length for ideal gas condition and various pressure  
 شکل ۱۳- توزیع چگالی برحسب طول بی‌بعد شده برای شرایط گاز ایدئال در فشارهای مختلف

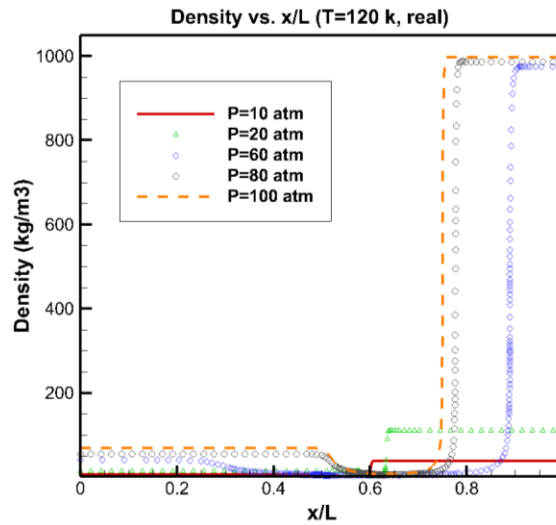


Figure 14- Density distribution vs. normalized length for real gas condition and various pressure  
 شکل ۱۴- توزیع چگالی برحسب طول بی‌بعد شده برای شرایط گاز واقعی در فشارهای مختلف

در شکل ۱۵ سمت چپ، توزیع دما در طول شعله برای حالت ایدئال ارائه شده است. همان‌طور که مشخص است، با افزایش دمای ورودی، شعله به سمت ورودی سوخت حرکت کرده و بیشینه دما به مقدار بسیار کم، ۱۵ کلوین برابر ۰/۴٪ زیاد می‌شود. این اتفاق به دلیل آن است که با افزایش دمای ورودی اکسیژن چگالی اکسیژن کاهش پیدا می‌کند. افت چگالی با افزایش دما در حالت ایدئال در شکل ۱۶ سمت چپ مشهود است. چگالی در دمای ۳۰۰ کلوین ۰/۲۵٪ مقدار چگالی در دمای ۱۲۰ کلوین است.



با ثابت نگه داشتن دبی ورودی، افت چگالی با افزایش دما در ورودی اکسنده، منجر به زیاد شدن سرعت محوری (با علامت منفی) در ورودی اکسنده به همان نسبت می شود. افزایش سرعت محوری ورودی در سمت اکسنده با افزایش دما نیز کاملاً در شکل ۱۷ سمت چپ دیده می شود.

در شکل ۱۵ سمت راست، توزیع دما در طول شعله برای حالت واقعی ارائه شده است. مشابه حالت ایدئال، با افزایش دمای ورودی، شعله به سمت ورودی سوخت حرکت کرده است، با این حال، همان طور که دیده می شود، در شرایطی که دمای اکسیژن کمتر از دمای بحرانی است (دمای ۱۲۰ و ۱۵۰ کلوین) که در واقع شرایط گذر بحرانی است، همان طور که در شکل ۱۶ دیده می شود، چگالی در دمای ۱۲۰ کلوین، ۵ برابر و در دمای ۱۵۰ کلوین، ۴ برابر چگالی در حالت گاز ایدئال است و به همین نسبت سرعت ورودی اکسنده نسبت به حالت ایدئال کمتر است. در این حالت، در حل گاز واقعی شعله به سمت ورودی اکسنده حرکت کرده و حل گاز ایدئال و واقعی ۵٪ مکانی نسبت به هم اختلاف دارند.

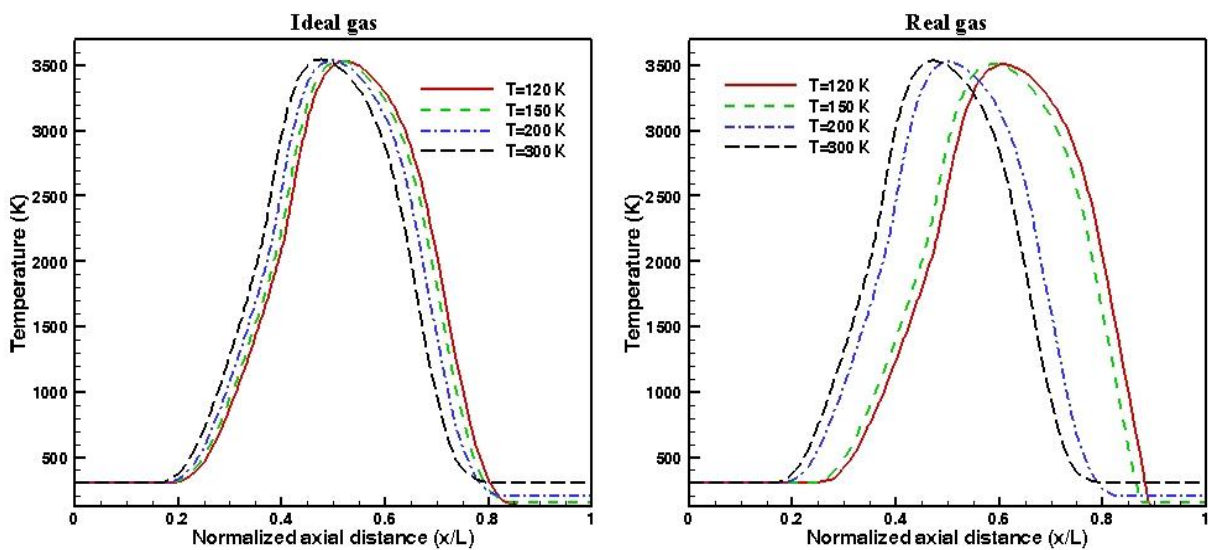


Figure 15- Temperature distribution vs. normalized length left) ideal gas and right) real gas for 60 atm  
 شکل ۱۵- توزیع دما در طول شعله (الف) گاز ایدئال (سمت چپ) (ب) گاز واقعی (سمت راست) برای فشار ۶۰ بار

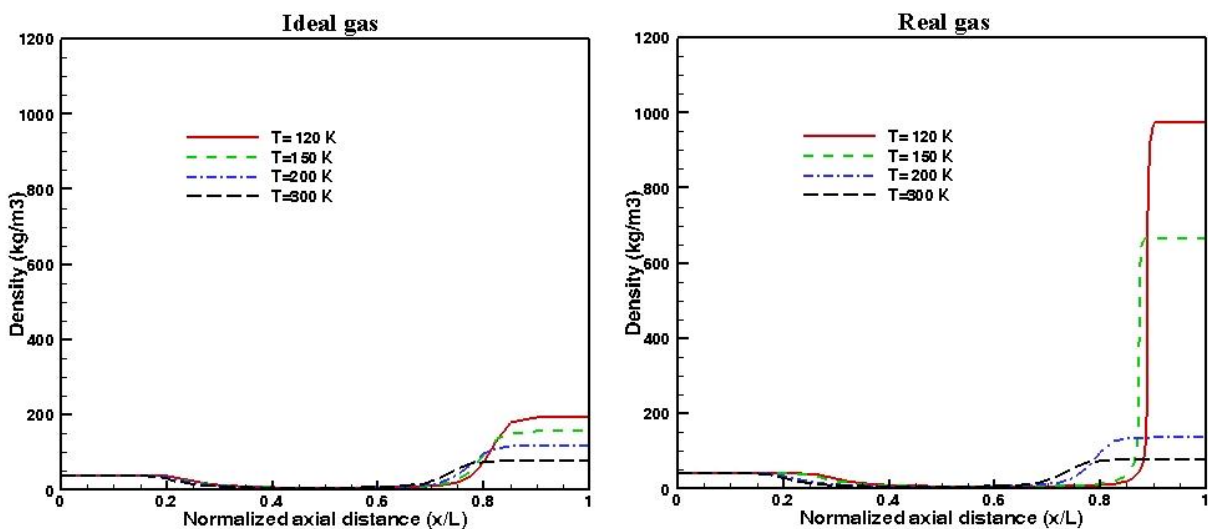


Figure 16- Density distribution vs. normalized length left) ideal gas and right) real gas for 60 atm  
 شکل ۱۶- توزیع چگالی در طول شعله (الف) گاز ایدئال (سمت چپ) (ب) گاز واقعی (سمت راست) برای فشار ۶۰ بار

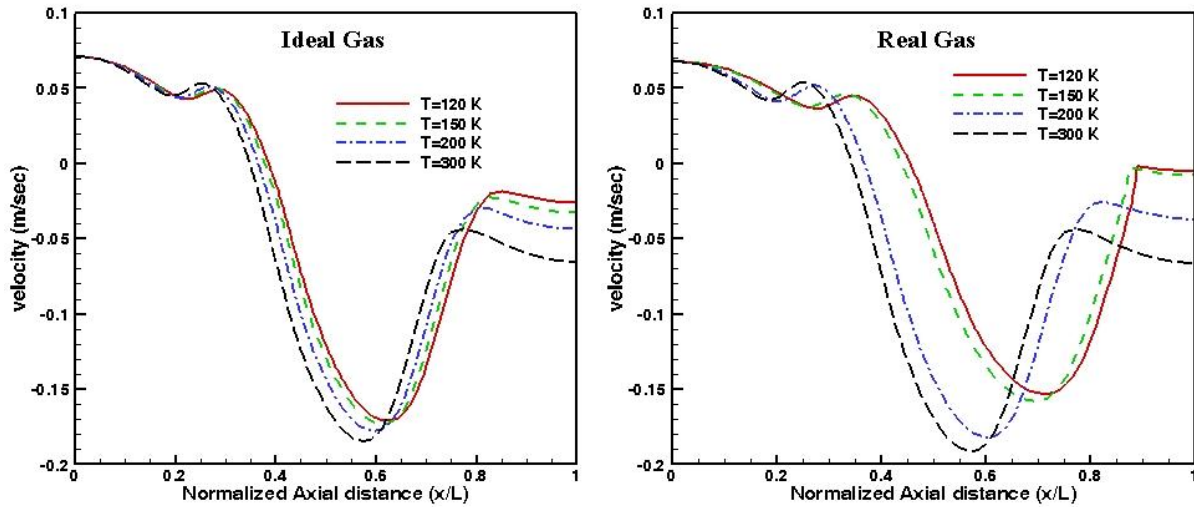


Figure 17- Velocity distribution vs. normalized length left) ideal gas and right) real gas for 60 atm

شکل ۱۷- توزیع سرعت محوری در طول شعله (الف) گاز ایدئال (سمت چپ) (ب) گاز واقعی (سمت راست) برای فشار ۶۰ بار

در شرایط دمایی بالاتر از دمای بحرانی (شرایط کاملاً بحرانی) به دلیل اینکه رفتار سیال مشابه رفتار گاز ایدئال است، چگالی در دمای ۲۰۰ کلوین، ۱/۲ برابر و در دمای ۳۰۰ کلوین، تقریباً برابر چگالی در حالت گاز ایدئال است و به همین دلیل سرعت جریان در سمت اکسنده در دو حالت نزدیک هم است و محل شعله در دماهای ۲۰۰ و ۳۰۰ کلوین در دو حالت تغییر محسوسی نمی‌کند و تقریباً در یک نقطه قرار دارد.

### نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر، یک شعله برخورد متقابل متان-اکسیژن در شرایط ترمودینامیکی فرا-بحرانی و گذر-بحرانی مورد بررسی قرار گرفته است. قسمت معادلات انرژی به صورت کامل برای اعمال شرایط فرا-بحرانی اعمال شده است. مشخصات ترمودینامیکی مانند ظرفیت حرارت ویژه با اضافه شدن ترم تکمیلی به ترم شرایط ایدئال بازنویسی شده است و معادله حالت نیز برای شرایط گاز واقعی به صورت کیوبیک آورده شده است. از نرم‌افزار منبع باز کانترا، برای محاسبه میدان جریان و حل سینتیک احتراق استفاده شده است و شرایط معادله حالت، معادله انرژی و خواص انتقال برای حل جریان گاز واقعی در شرایط ترمودینامیکی گذر-بحرانی و فرا-بحرانی اصلاح شده است. با حل میدان جریان در شرایط گذر بحرانی مشاهده می‌شود که اعمال شرایط گاز واقعی سبب پدیدار شدن شرایط شبه‌جوشش در میدان جریان می‌شود؛ در صورتی که با حل گاز ایدئال این پدیده مشاهده نمی‌شود. در شرایط گذر بحرانی شعله به سمت ورودی اکسیژن جابجا می‌شود و همچنین در ناحیه‌ای بین ورودی اکسیژن و شعله یک افزایش ناگهانی در ظرفیت حرارتی ویژه اکسیژن اتفاق می‌افتد که ناشی از شبه‌جوشش است. حل گاز ایدئال چگالی اکسیژن را کمتر پیش‌بینی می‌کند. در شرایطی که دمای ورودی اکسیژن بالاتر از شرایط بحرانی باشد جابجایی خاصی در محل شعله اتفاق نمی‌افتد. دمای پیش‌بینی شده در شرایط حل گاز واقعی اندکی کمتر از شرایط حل گاز واقعی است. در میدان کسر مخلوط اختلاف عمده‌ای بین حل گاز واقعی و گاز ایدئال دیده نمی‌شود که این نتیجه برای حل جریان آشفته بحرانی به روش فلیلمت مهم است. از آنجا که در مدل‌سازی میدان آشفته به روش فلیلمت، داده‌های حاصل از ساختار شعله جریان آرام در فضای کسر مخلوط انتگرال‌گیری می‌شود، مشاهده می‌شود که در فضای کسر مخلوط، حالت گاز تأثیر عمده‌ای در شرایط گذر-بحرانی که پر چالش‌ترین قسمت است نخواهد داشت. در میدان فیزیکی اختلاف بین شرایط گاز واقعی و گاز ایدئال از لحاظ

موقعیت و ابعاد شعله برای حالت گذر-بحرانی قابل توجه است. برای شرایط کاملاً بحرانی در میدان فیزیکی نیز اختلاف قابل توجهی در شرایط موقعیت شعله رخ نمی‌دهد.

## منابع

1. J. Foster and R. S. Miller, "Fundamentals of high pressure combustion, in: M. Lackner (Ed.), High Pressure Processes In Chemical Engineering," *Process Eng Engineering*, Wien, 2010.
2. G. M. Bianchi, P. Pelloni, F. E. Corcione, L. Allocca and F. Luppino, "Modeling atomization of high-pressure diesel sprays," *J. Eng. Gas Turb. Power*, 123, 2001, pp.419-427
3. 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.
4. C. K. Law, "Combustion physics," Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2006.
5. F. A. Williams, *Combustion theory*, 2nd ed., The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Menlo Park, CA, 1985.
6. L. Figura and A. Gomez, "Laminar counterflow steady diffusion flames under high pressure (P 6 3 MPa) conditions," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp.142-150
7. J. Juanos, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha and S. Candel, "Counterflow diffusion flames of general fluids: oxygen/hydrogen mixtures," *Combustion and Flame*, 154, 2008, pp.319-330.
8. V. Ricchiuti, R. E. Padilla, S. Karnani and D. Dunn-Rankin, "Cantera simulations of water-laden methane/air nonpremixed counterflow flames," *8th US National Combustion Meeting*, Utah, 2013.
9. U. Niemann, K. Seshadri and F.A. Williams, "Methane, ethane, and ethylene laminar counterflow diffusion flames at elevated pressures: experimental and computational investigations up to 2.0 MPa," *Combustion and Flame*, 161, 2014, pp. 138-146.
10. G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha and S. Candel, "Counterflow diffusion flames of general fluids: oxygen/hydrogen mixtures," *Combustion and Flame*, 154, 2008, pp.319-330.
11. B. A. Williams, "Sensitivity of calculated extinction strain rate to molecular transport formulation in nonpremixed counterflow flames," *Combustion and Flame*, 124, 2001, pp. 330-333.
12. X. Wang, H. Huo and V. Yang, "Counterflow diffusion flames of oxygen and n-alkane hydrocarbons (CH<sub>4</sub> - C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>) at subcritical and supercritical conditions," *Combustion Science and Technology*, 187, 2015, pp. 60-82.
13. G. Lacaze and J. Oefelein, "A non-premixed combustion model based on flame structure analysis," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 2087-2103.
14. D. T. Banuti, "Crossing the widom-line-supercritical pseduo-boiling," *Journal of Supercritical Fluids*, 98, 2015, pp.12-16.
15. D. T. Banuti and K. Hannemann, "Effect of injector wall heat flux on cryogenic injection," *AIAA Paper* 2010-7139, 2010.
16. 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.
17. R. J. Kee, J. A. Miller and G. H. Evans, "A computational model of the structure and extinction of strained, opposed flow, premixed methane-air flames," *Proceeding of International Symposium of Combustion Institute*, 1988, pp.1479-1494.
18. H. Huo, X. Wang and V. Yang, "A general study of counterflow diffusion flames at subcritical and supercritical conditions: oxygen/hydrogen mixtures," *Combustion and Flame*, 161, 2014, pp. 3040-3050.
19. Cantera Developers (2012). *Cantera: Chemical kinetics, Thermodynamics, Transport properties*. Available: <http://cantera.github.com/docs/sphinx/html/index.html>, Accessed 24/03/2018
20. Soave, "Equation constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chemical Engineering Science*, 27, 1972, pp. 1197-1203.
21. P. E. Lapenna, P. P. Ciottoli and F. Creta, "The Effect of Fuel Composition on the Non-premixed Flame Structure of LNG/LOx Mixtures at Supercritical Pressure," *AIAA-Paper* 2016-0690.
22. T. Kim, Y. Kim and S-K. Kim, "Effects of Pressure and Inlet Temperature on Coaxial Gaeous Methane/Liquid Oxygen Turbulent Jet Flame under Transcritical Condtions," *Journal of Supercritical Fluids*, 81, 2013, pp. 164-174.
23. R. Reid, J. Prausnitz and B. Poling, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, New York, 1987.
24. E. W. Lemmon, M. I. Huber and M. O. McLinden, "NIST standard reference database 23: reference fluid thermodynamic and transport properties-REFPROP, verison 9.1", National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg. 2013.
25. 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.

English Abstract

**Influence of inlet temperature and pressure in transcritical and supercritical laminar counter-flow flame of liquid Oxygen/Gaseous methane**

**Hamed Zeinivand<sup>1</sup>, Hossein Ashini<sup>2</sup>, Mohammad Farshchi<sup>3\*</sup> and Hadi Rezaei<sup>4</sup>**

1- PhD Candidate, Aerospace Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, zeinivand\_hamed@ae.sharif.ir

1-MSc, Aerospace Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, hossein\_ashini@yahoo.com

2-Professor, Aerospace Department, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, farshchi@sharif.edu

3-PhD, Mechanical engineering, Space Transport Research Institute, ISRC, Tehran, Iran, H.rezaei@isrc.ac.ir

\*Corresponding author

(Received: 2018.06.28, Received in revised form: 2018.11.26, Accepted: 2018.12.01)

In the present paper, a laminar counter-flow flame has been numerically investigated under the transcritical and supercritical conditions. The Cantera open source code has been used to calculate the flow field and the kinetic combustion solution. Furthermore, the energy equation, the thermodynamics and the transport properties have been modified for real gas solution. The thermodynamics properties, including density, enthalpy, and specific heat at constant pressure, are evaluated based on fundamental thermodynamics theories and the modified SRK equation of state (EOS). Transport properties, including thermal conductivity and dynamic viscosity, are estimated using Chung method. It can be seen that the pseudo-boiling phenomenon has been appeared in transcritical condition with real gas equations. The ideal gas solution is unable to capture this phenomenon. In the mixture fraction field, there is no major difference between the real gas and the ideal gas, which is important for solving the turbulent reacting flow by the flamelet models. However In the physical field, the difference between the real gas condition and the ideal gas is significant in terms of the position and dimensions of the flame for the transcritical state. For supercritical conditions in the physical field similar to mixture fraction field, there is no significant difference in the flame situation.

**Keywords:** Counter-flow flame, Transcritical flame, pseudo-boiling phenomenon, Cantera code, One-dimensional solution