

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

احسان بارانی<sup>۱</sup> و امیر مردانی<sup>۲</sup>

۱- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، esnbarani@alum.sharif.edu  
۲- استادیار، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران (نویسنده مخاطب)، amardani@sharif.edu  
(تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۶/۲۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۵/۱۰/۷، 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 می‌شود و خواص ترمودینامیکی آن مانند ظرفیت حرارتی و چگالی به شدت دچار تغییر می‌شود. بدین منظور دو هندسه RCM01 و RCM03 انتخاب شده است که به ترتیب 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 در خصوص پیش‌بینی ناحیه لایه برشی، تشکیل گردابه‌های کناری و در نتیجه اختلاط ارائه می‌دهد. پیش‌بینی بهتر مدل  $\kappa - \varepsilon$  Realizable می‌تواند ناشی از تخمین بهتر جمله مربوط به گرانش آشفته‌گی در فرض بوزینسک باشد. همچنین، مشاهده شده است که میزان بازشدگی فواره ورودی وابسته به نحوه پیش‌بینی گردابه مجاور دیواره در مدل‌های اغتشاشی مختلف است. هرچقدر میزان گردابه تخمین زده شده 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  $\text{LO}_x\text{-GH}_2$ ، 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  $\kappa - \omega$  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 به خوبی 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 پیشنهاد شده برای رفتار گاز حقیقی در هر دو آزمایش بررسی شد که مدل SRK دارای نزدیک‌ترین نتایج به داده‌های تجربی موجود است.

**کلیدواژگان:** احتراق، فوق بحرانی، معادله حالت حقیقی، معادله اغتشاشی، پاشش و اختلاط، هیدروژن و اکسیژن مایع

### مقدمه

افزایش کارایی و بهینه‌کردن 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 گذر بحرانی<sup>۱</sup> و فوق بحرانی دارد. هر سیالی در نمودار ترمودینامیکی فشار-حجم خود دارای نقطه‌ای به نام نقطه بحرانی<sup>۲</sup> است. از لحاظ ترمودینامیکی، نقطه بحرانی جایی است که مرز بین فاز مایع و گاز از بین می‌رود. برای هر نقطه بحرانی، یک دمای بحرانی ( $T_{cr}$ ) و یک فشار بحرانی ( $P_{cr}$ ) تعریف می‌کنند. سیال فوق بحرانی به‌طور کلی به سیالی گفته می‌شود 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 می‌دهد، مطالعات تجربی روی این پدیده صورت پذیرفت. مراکز تحقیقاتی مانند AFRL<sup>۱</sup>، DLR<sup>۲</sup>، ماسکات<sup>۳</sup> و دانشگاه پرینستون با ساخت محفظه آزمایشگاهی، در بازه وسیعی از فشار و دماهای مختلف، به بررسی و مطالعات تجربی پرداختند. در فشارهای محفظه پایین، پدیده اختلاط به شکل کلاسیک است و با شار<sup>۴</sup> تکانه کنترل می‌شود، به این نحو که پس از پاشش، ابتدا لیگامنت<sup>۵</sup> و سپس قطره تشکیل می‌شود و این قطرات تبخیر می‌شوند. با افزایش فشار، نحوه اختلاط تغییر کرده و دیگر لیگامنت و قطره‌ای تشکیل نمی‌شود. بدین علت که کشش سطحی از بین می‌رود و سیال وارد فاز جدیدی می‌شود که بعضی از خواص آن مخلوطی از خواص فاز مایع و فاز گاز است و بعضی از خواص ترموفیزیکی دستخوش تغییر می‌شود. تغییراتی همچون به‌وجود آمدن گرادیان‌های شدید در چگالی، تغییر در رفتار گرمای نهان در فشار ثابت، تغییر در خواص انتقالی<sup>۶</sup>، از بین رفتن آنتالپی تبخیر، عدم جود کشش سطحی، تغییر در خواص حلالیت 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 ذکر شده می‌کند [۲].

نیومن و برزوستوسکی [۳] به مطالعه پاشش سیال CO<sub>2</sub> با دمای ورودی ۲۹۵ درجه کلوین به درون محفظه‌ای که مخلوط CO<sub>2</sub> و N<sub>2</sub> در نزدیکی شرایط بحرانی قرار دارد پرداختند. دما و فشار بحرانی CO<sub>2</sub> به ترتیب برابر با ۳۰۴ درجه کلوین و ۷۳ اتمسفر است و دما و فشار بحرانی N<sub>2</sub> به ترتیب برابر با ۱۲۶ درجه کلوین و ۳۴ اتمسفر است. برای تصویربرداری از فن شادوگرافی<sup>۷</sup> استفاده شد تا سیر تحولی و برهم‌کنش سیال پاشیده شده با سیال محیط اطراف بررسی شود. نتایج نشان می‌داد که در فشار فوق بحرانی، ساختار سطحی فواره<sup>۸</sup> و تشکیل افشانه<sup>۹</sup> بسیار به افزایش دما و غلظت CO<sub>2</sub> موجود در محفظه وابسته است. این وابستگی به علت ناپدید شدن کشش سطحی و بهبود تبخیر CO<sub>2</sub> در نزدیکی و بالای دمای بحرانی است. قطرات در اطراف مرز فواره مشاهده شد، اما اندازه آن‌ها با افزایش دمای محیط کاهش می‌یافت. رفتار کلی فواره شبیه به یک فواره آشفته 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 به همراه 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 داده‌های کمی‌ای را از فواره نیتروژن پاشیده شده به محیط نیتروژن در شرایط نزدیک بحرانی استخراج کرد [۵،۴]. او نرخ رشد فواره و همچنین رفتار فواره را در این شرایط به دست آورد. مطالعات او در سال ۲۰۰۰، بر سیال نیتروژن در شرایط فوق بحرانی، حاکی از خودمتشابه<sup>۱۰</sup> بودن جریان بود [۶]. بررسی‌های او بر مشخصه‌های کمی، در فواره نیتروژن فشار بالا، بر نرخ رشد اولیه<sup>۱۱</sup> سیال بود و آن‌ها را با جریان‌های دیگر مقایسه کرد [۷]. تطابق داده‌های مورد بررسی با فواره چگالی متغیر تراکم‌ناپذیر بسار خوب بود. همچنین، با بررسی فشارهای زیر بحرانی، او مدل منحصر به فردی برای نرخ رشد ارائه کرد که در هر دو شرایط بالا تطابق داشته

1. Air Force Research Laboratory
2. Deutsches Zentrum für Luftund Raumfahrt
3. Mascotte
4. Flux
5. Ligament
6. Transport Properties
7. Shadowgraphy
8. Jet
9. Spray
10. Self-similar
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 به عنوان پارامترهایی برای پایداری در شرایط عملکردی متفاوت پیشنهاد شد [۹، ۱۰].

آزمایش‌های سیستماتیک پاشش سرد توسط ماير و همکارانش در آزمایشگاه DLR آلمان انجام شد [۱۱-۱۳]. پاشش نیتروژن مایع به محیط گازی نیتروژن-هلیوم با در نظر گرفتن و بدون در نظر گرفتن گاز هلیوم بررسی شد. فشار محفظه از ۱۰ تا ۶۰ اتمسفر تغییر می‌کرد و دمای آن ۳۰۰ درجه کلون بود. دمای پاشش نیتروژن به ۹۰ درجه کلون می‌رسید، در حالی که دمای پاشش هلیوم گازی از ۱۰۰ تا ۳۷۰ کلون متغیر بود. هنگامی که فشار از مقادیر زیر بحرانی تا فوق بحرانی افزایش پیدا می‌کرد، تغییرات مشابهی در ساختارهای سطح فواره در تصاویر شادوگرافی مشاهده شد. به علت ناپدید شدن کشش سطحی سازوکار<sup>۱</sup> اتمیزه شدن<sup>۲</sup> 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 می‌کرد.

اندرسون در سال ۱۹۹۵ از تکنیک پراکنش رامان<sup>۳</sup> استفاده کرد تا توزیع دما و چگالی فواره‌های نیتروژن را در آزمایش‌های فشار بالا اندازه‌گیری کند [۱۴]. ایشان توانستند، با استفاده از حل تشابهی و توزیع چگالی بی‌بعد شده<sup>۴</sup> در پایین دست، رفتار فواره‌ها را به سیال تک‌فاز چگالی متغیر ارتباط دهند. توزیع دما و چگالی خط مرکز فواره کرایونیک<sup>۵</sup> در حدود فشار بحرانی (۴۰ اتمسفر) توسط اشوالد و شیک به دست آمد [۱۵، ۲]. آن‌ها یادآور شدند که هنگامی که دمای سیال از مقادیر زیر بحرانی به مقادیر فوق بحرانی افزایش پیدا می‌کند، سرعت تنزل کردن چگالی بیشتر خواهد شد، اگرچه دما در پایین دست 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 اکسندهایی همچون هیدروژن-اکسیژن و متان-اکسیژن متمرکز است. برای مطالعات تجربی از روش‌های اپتیکی مانند PLIF، CARS<sup>۶</sup> و شادوگرافی 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، نمی‌توان از گونه H<sub>2</sub>O استفاده کرد، زیرا این گونه، بعد از احتراق، در تمامی فضای محفظه موجود است، اما بررسی گونه OH می‌تواند اطلاعات سودمندی را در رابطه با ساختار شعله در اختیار قرار دهد. کندل و همکارانش با روش PLIF و اندازه‌گیری رادیکال OH، ساختار شعله هیدروژن-اکسیژن را بررسی کردند [۱۶]. مطالعات آن‌ها نشان داد که با افزایش نسبت شار تکانه، زاویه بازشدگی شعله اندکی کاهش می‌یابد 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 شکسته شدن و اتمیزه شدن فواره مایع تولید شده است، کنترل می‌شود که در آن نسبت شار تکانه بسیار بر شکسته شدن مؤثر است. در فشارهای فوق بحرانی نرخ گسترش شعله به اختلاط آشفته ناشی از گرادیان‌های چگالی اکسیژن وابسته است، در حالی که سازوکار کنترلی آن نیز انتقال جرم از فواره چگال به گاز چگالی پایین 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 [۱۷]. آن‌ها گزارش کردند که رخداد توامان

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

گذر سوخت و اکسنده از دمای بحرانی شکل و ساختار شعله را تغییر می‌دهد و متفاوت‌تر 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 می‌کند. 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<sup>۱</sup>، در شرایط غیر احتراقی فشار بالا، انجام دادند و اثر معادله حالت و اختلاط آشفته را بررسی کردند و بیان کردند که روش DNS به خوبی قادر به شبیه‌سازی سیال فوق بحرانی، به خصوص در ناحیه لایه اختلاط، است [۱۸-۲۱]. فوستر و میلر این مطالعات را به روش DNS و LES بر ساختار هیدروژن-اکسیژن در اعداد رینولدز بالا مطالعه کردند و یک روش تحلیلی را برای مقیاس‌های کوچک<sup>۲</sup> آشفته ارائه کردند [۲۲، ۲۳]. اوفلین و یانگ اولین افرادی بودند که به مطالعه ناحیه پایداری شعله هیدروژن-اکسیژن، در ناحیه نزدیک انژکتور بعد از لبه<sup>۳</sup>، پرداختند [۲۴]. آن‌ها مشاهده کردند، در حالت اختلاط فوق بحرانی و گذر بحرانی، شعله در نزدیکی انژکتور پایدار می‌شود. زانگ و یانگ ناحیه نزدیک میدان را در انژکتور برشی در شرایط گذر بحرانی متان-اکسیژن بر روی پایداری شعله مطالعه کردند [۲۵]. ژوپیتتر ساختار شعله نفوذی را بر هیدروژن-اکسیژن در ارتباط با نرخ کرنش بررسی کرد [۲۶، ۲۷]. مسکوالت محفظه شامل چند انژکتور را به صورت 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  $\kappa - \omega$ ، مدل احتراقی FPV<sup>۴</sup>، معادله حالت PR<sup>۵</sup> و چهار نوع سینتیک شیمیایی سینتیک لی<sup>۶</sup>، سینتیک وارناتز<sup>۷</sup> جاجیموسکی<sup>۸</sup> و سینتیک مارینف<sup>۹</sup> بررسی کردند [۲۹]. نتایج ایشان بیان می‌داشت که رویکرد تک‌فاز اولترین برای این شبیه‌سازی 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 اغتشاشی Standard  $\kappa - \epsilon$ ، مدل احتراقی CFX-RIF، معادله حالت گاز ایدئال و گاز واقعی (PR, RK<sup>۱۰</sup>) 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 گذر بحرانی 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 سینتیکی را باهم مقایسه کردند [۳۳-۳۶]. پارک و کیم مدل‌های مختلف الگوریتم‌های فشارپایه در حالت PISO<sup>۱۱</sup> را برای احتراق هیدروژن-اکسیژن در آزمون A-60، با استفاده از معادله حالت SRK<sup>۱۲</sup>، مدل احتراقی فلیملت و مدل اغتشاشی Standard  $\kappa - \epsilon$ ، 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 پیشنهاد شده تطابق بهتری نسبت به سایر معادله‌های حالت دارد. بن‌منصور و همکاران هندسه ماسکات را به صورت سه‌بعدی شبیه‌سازی کردند و

- 
1. Mixing layer
  2. Subgrid-Scale
  3. Tip
  4. Flamelet progress variable
  5. Peng-Robinson
  6. Li-scheme
  7. Warnatz
  8. Jachimowski
  9. Marinov
  10. Ridlick-Kwong
  11. Pressure Implicit with Split Operator
  12. Soave-Ridlick-Kwong

نتایج خود را با داده‌های NIST<sup>۱</sup> مقایسه کردند و در آن یک روش جایگزینی برای استفاده از داده‌های NIST در خواص انتقالی انتقالی ارائه دادند [۳۹]. مدل اغتشاشی  $\kappa - \varepsilon$  Standard و  $\kappa - \varepsilon$  Realizable، به همراه مدل احتراقی EDM<sup>۲</sup>، 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 پنگ-رابینسون (PR) [۴۰] و یا با معادله حالت ساو-ریدلیچ-وانگ (SRK) [۴۱] است و مدل اغتشاشی استفاده شده عمده مطالعات،  $\kappa - \varepsilon$  Standard است. در این زمینه اگرچه کار عددی صورت گرفته است و اطلاعات جامع نسبتاً کمی در این حوزه در دسترس است، اما جا برای گسترش تحقیقات وجود دارد و می‌توان 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 می‌شود 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 متوسط‌گیری 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 پرداخته شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی موجود مقایسه شده و در ادامه به بررسی رفتار جریان و شعله و همچنین نحوه پیش‌بینی مدل‌های 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 صورت پذیرفته، اطلاعات تجربی موجود پالایش بیشتری شده و از جنبه‌های مختلف بررسی شده‌اند. از طرفی، با توجه به اینکه در اکثر مطالعات صورت گرفته تقریباً 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 مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای آزمایش و عملکرد آن‌ها نشان داده شود. همچنین، مدنظر بوده است که اثر چندین معادله حالت بررسی شود که در این مطالعه، علاوه بر معادلات حالت ایدئال، سه معادله حالت گاز واقعی PR، SRK و ARK<sup>۴</sup> لحاظ و ساختار شعله پیش‌بینی شده توسط هر کدام گزارش شده‌اند. ضمناً جهت مدل‌سازی رابطه آشفته‌گی جریان و شیمی واکنش‌ها از مدل حجمی مفهوم اضمحلال گردابه (EDC)<sup>۵</sup>، که کمتر قبلاً در این مسئله لحاظ شده، استفاده شده است. سینتیک شیمیایی مورد استفاده نیز، سینتیک بورک [۴۵] است که آخرین سینتیک استخراج شده برای احتراق در فشارهای بالا است و در سال ۲۰۱۲ ارائه شده است.

## معادلات حاکم

در این مطالعه عددی، یک رویکرد ساده شده براساس سیال فوق بحرانی در شرایط پایا در نظر گرفته شده است. از معادلات بقای جرم، بقای تکانه و بقای انرژی و بقای گونه‌ها [۴۶] به شکل بقایی، برای یک جریان کاملاً آشفته و تراکم‌پذیر استفاده شده است که توسط نرم‌افزار تجاری فلونت حل شده‌اند. از نیروهای خارجی و انتقال حرارت تشعشعی صرف‌نظر شده است. برای کاهش هزینه محاسباتی، از روش RANS استفاده می‌شود که با آن می‌توان فیزیک جریان را مطالعه و بررسی کرد. از مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای شامل  $\kappa - \varepsilon$  Standard [۴۷]،  $\kappa - \varepsilon$  RNG [۴۸]،  $\kappa - \varepsilon$  Realizable [۴۹] و  $\omega$  SST [۵۰] برای بررسی پدیده آشفته‌گی و پیشنهاد جمله گرانیوی آشفته‌گی استفاده شده است که روابط و فرضیات مدل‌های اغتشاشی مذکور در مراجع ذکر شده قابل دسترسی است.

1. National Institute of Standards and Technology  
 2. Eddy Dissipation Concept  
 3. Rocket Combustion Model  
 4. Aungier-Ridlick-Kwong  
 5. Eddy dissipation Concept

برای مدل سازی احتراق از مدل مشهور مفهوم اضمحلال گردابه (EDC) که توسعه یافته 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 آشفته به نام مقیاس‌های کوچک انجام می‌شود. مقیاس طولی ساختارهای کوچک به صورت زیر محاسبه می‌شود [۵۱].

$$\xi = 2.1377 \left( \frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \quad (1)$$

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

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

که در آن  $\xi$ ،  $\tau$ ،  $\varepsilon$ ،  $k$  و  $\nu$  به ترتیب نشان‌دهنده مقیاس طولی ساختارهای کوچک، مقیاس زمانی انجام واکنش در ساختارها، نرخ اضمحلال آشفته، انرژی جنبشی آشفته و گرانیوی است. در این حالت فرض می‌شود که در هر ساختار احتراق به صورت فشار ثابت و مانند یک راکتور همگن انجام می‌شود. برای کاهش حجم محاسبات، از الگوریتم ISAT<sup>۱</sup> استفاده شده است تا سرعت حل تا ۲/۵ برابر افزایش پیدا کند. نرخ انجام واکنش برای هر گونه  $i$  به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$R_i = \frac{\rho \xi^2}{\tau [1 - \xi^2]} (Y_{i,\tau} - Y_i) \quad (3)$$

در رابطه بالا،  $Y_{i,\tau}$  کسر جرمی جزء  $i$  در ساختار مورد نظر پس از زمان  $\tau$  است. در شبیه‌سازی 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	A	n	Ea
1	H + O2 = O + OH	1.04E+14	0	1.53E+04
2	O + 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	O + O + M = O2 + M	6.16E+15	-0.5	0.00E+00
6b	O + O + Ar = O2 + Ar	1.89E+13	0	-1.79E+03
6c	O + O + He = O2 + 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	H2O + H2O = H + OH + H2O	1.01E+26	-2.44	1.20E+05
9	H + O2 (+M) = HO2	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	H2O2 + H = HO2 + H2	4.82E+13	0	7.95E+03
18	H2O2 + O = OH + HO2	9.55E+06	2	3.97E+03
19	H2O2 + OH = HO2 + H2O	1.74E+12	0	3.18E+02

## معادله‌های حالت، خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیال فوق بحرانی

عبارت پاشش فوق بحرانی می‌تواند به گونه‌های 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<sup>۱</sup> محاسبه می‌شود و به همین صورت فشار کاهیده نیز تعریف می‌شود. اندیس inj به پاشش و اندیس env به محیط باز می‌گردد. در حالت کلی، چهار دسته‌بندی را می‌توان در نظر گرفت که این دسته‌بندی در جدول ۲ و شکل ۱ قابل مشاهده است. اصطلاحاً به پاشش‌های حالت‌های b, c و d گذر بحرانی گفته می‌شود، زیرا از خطوط مربوط به ناحیه فوق بحرانی عبور می‌کنند. سیال در نزدیکی نقطه بحرانی دارای گرمای ویژه بسیار بالاست و به این معنی است که می‌تواند گرمای زیادی را به خود جذب کند و تغییر دمای اندکی داشته باشد. لذا، می‌توان آن را همانند یک چاه<sup>۲</sup> حرارتی در نظر گرفت.

جدول ۲- حالات مختلف پاشش فوق بحرانی

Table 2- Different supercritical injection states

Injection \ State	env		inj	
	$P_r$	$T_r$	$P_r$	$T_r$
(a)	>1	>1	>1	>1
(b)	>1	>1	>1	<1
(c)	<1	<1	>1	>1
(d)	>1	<1	>1	<1

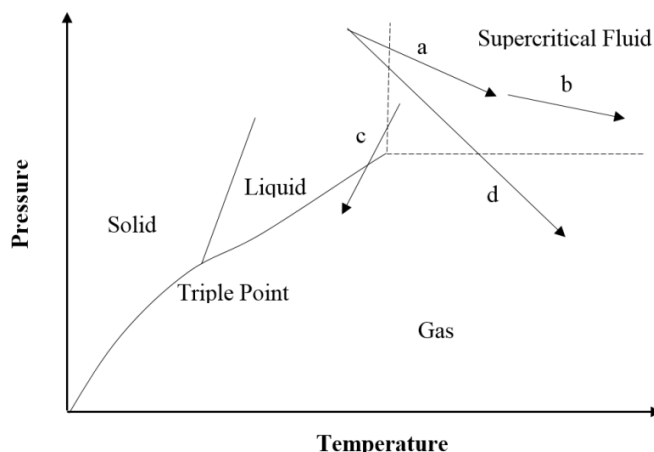


Figure 1- Supercritical fluid thermodynamic diagrams and different injection states

شکل ۱- نمودار ترمودینامیکی سیال و نحوه تغییرات در محدوده فوق بحرانی

اگر یک حالت تعادلی فرض شود، برای مشخص شدن 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 تجربی‌اند که پایه و اساس آن‌ها از تئوری استخراج شده است. معادله حالت گاز ایدئال توسط کلاپیرون<sup>۳</sup> در اوایل قرن نوزدهم بیان شد. این معادله بر مبنای 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، اندروالس [۵۲]، در مطالعات فشار بالا، عدم تطابق نتایج عددی و تجربی را مشاهده کرد. از این رو، دو فرض مهم را برای اصلاح معادله حالت گاز ایدئال در نظر گرفت. مطابق فرض اول، در فشارهای بالا تاثیرپذیری

1. Reduced temperature  
2. Sink  
3. Clapeyron

مولکول‌ها از یکدیگر غیرقابل انکار است. از این رو، نزدیک شدن مولکول‌ها به یکدیگر باعث ایجاد نیروی جاذبه بین آنها می‌شود؛ بنابراین پارامتر جذب  $a$  ( $a = a_0\alpha$ ) را برای این اصلاح پیشنهاد کرد. مطابق فرض دوم، در فشارهای بالا تراکم مولکول‌ها زیاد می‌شود، لذا حجمی از ظرف مربوط به مولکول‌های اشغال شده 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<sup>۱</sup> شد. ریدلیج و وانگ [۵۳] 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 در نظر گرفت. فوگاسیته نشان‌دهنده فراربت 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 و اندروالس<sup>۲</sup> به وابستگی دمای تجربی پی بردند و معادله RK EOS<sup>۳</sup> را پیشنهاد دادند.

واندروالس [۵۲] اصل حالت‌های مشابه<sup>۴</sup> را بیان کرده بود. این اصل بیان می‌کند که سیال‌ها در دما و فشار کاهش یافته یکسان داری حجم کاهش یافته 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<sup>۵</sup> 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 می‌دهد. لذا، پیتزر بیان داشت که سیالات با ضریب ایسنتریک یکسان در شرایط یکسان دمای کاهیده و فشار کاهیده مشابه هم رفتار می‌کنند. در سال ۱۹۷۲، ساو [۴۱] با استفاده از این مفهوم که میزان جذب بین دو مولکول، علاوه بر دما، به میزان غیرکروی بودن دو مولکول وابسته است، ضریب جذب را علاوه بر وابسته بودن به دما، به ضریب ایسنتریک مرتبط کرد. از این رو، این ضریب دومتغیره شد. مبنای این کار از آنجا نشئت می‌گیرد که ساو برای بهبود نمایش محاسبات فشار اشباع<sup>۶</sup> از داده‌های تجربی استفاده می‌کند. لذا معادله حالت SRK EOS را ارائه می‌دهد.

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 نشان دادن 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  $\xi$  را اضافه کرده است. ضریب  $\xi$  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، از لحاظ ترمودینامیکی، شرایط پایدارتری داشته باشد. مقایسه نتایج او با نتایج تجربی نشان داده است که افزودن ضریب  $\xi$  تأثیری در میدان جریان ندارد و تنها در حوالی نقطه بحرانی می‌تواند مهم باشد. در معادله ARK، رابطه‌ای برای ضریب توانی دما برحسب ضریب ایسنتریک پیشنهاد می‌شود [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 در پی نداشتند و تعداد کمی از آن‌ها، به‌علت دقت بالا و زمان محاسباتی کمتر، کاربرد وسیع‌تری از بقیه معادلات یافتند که معادلات SRK، PR، ARK 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. Cubic 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 LK EOS<sup>۱</sup>، BWR EOS<sup>۲</sup> و BWRS EOS<sup>۳</sup> نیز وجود دارند که هنوز کاربرد وسیعی نیافته‌اند. معادله حالت‌های حقیقی ذکر شده در بالا را می‌توان به شکل یک معادله حالت با ضرایب مطابق جدول ۳ بیان کرد [۵۲].

$$P = \frac{RT}{\tilde{v} - b + \xi} - \frac{a_0 \alpha(T, \omega)}{\tilde{v}^2 + \theta b \tilde{v} + \varepsilon b^2} \quad (۴)$$

جدول ۳ - ضرایب معادله حالت‌های حقیقی

Table 3- Coefficients of the Real equation of state

Equation	$\theta$	$\varepsilon$	$\xi$	$b$	$a_0$	$\alpha(T, \omega)$
VDW	0	0	0	$\frac{RT_c}{8P_c}$	$\frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c}$	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	$\frac{RT_c}{P_c + \frac{a_0}{V_c(V+b)} + b - V_c}$	$\frac{0.08664RT_c}{P_c}$	$\frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c}$	$\frac{1}{T - [0.4986 + 1.173\omega + 0.475\omega^2]}$

که در آن  $T_c$ ،  $P_c$  و  $V_c$  به ترتیب دما، فشار و حجم بحرانی،  $T_r$  دمای کاهیده،  $R$  ثابت جهانی گازها،  $\omega$  ضریب ایسنتریک،  $a_0$  پارامتر مربوط به جذب مولکولی و  $b$  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  $a\alpha$  و  $b$  در اختلاط چند گاز، می‌توان از معادله‌های زیر استفاده کرد.

$$a\alpha = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N X_i X_j \sqrt{a_i a_j \alpha_i \alpha_j} (1 - \kappa_{ij}) \quad (۵)$$

$$b = \sum_{i=1}^N X_i b_i \quad (۶)$$

که در آن،  $X_i$  کسر مولی اختلاط و  $\kappa_{ij}$  ضریب اندرکنش دوتایی<sup>۴</sup> را بیان می‌کند. خواص ترمودینامیکی، همانند انرژی داخلی، آنتالپی، آنتروپی، گرمای ویژه در حجم ثابت و گرمای ویژه در فشار ثابت، براساس تئوری ترمودینامیک پایه‌ای محاسبه می‌شوند. هر خاصیت به راحتی از جمع خواص گاز ایدئال در همان دما و توابع انحراف<sup>۵</sup>، که برای سیال چگال اصلاح شده است، محاسبه می‌شود. زیروند 0، به حالت ایدئال در فشار اتمسفر ارجاع داده می‌شود.

1. Lee Kesler EOS
2. Benedict-Webb-Rubin EOS
3. Benedict-Webb-Rubin-Starling EOS
4. binary interaction coefficient
5. departure functions

$$e(T, \rho) = e_0(T) + \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right] d\rho \quad (7)$$

$$h(T, P) = h_0(T) + \int_{P_0}^P \left[ \frac{1}{\rho} - \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{P} \right] dP \quad (8)$$

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

$$C_p(T, \rho) = C_{v0}(T) - \int_{\rho_0}^{\rho} \left[ \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_{\rho} \right] d\rho + \frac{T}{\rho^2} \left( \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right)_{\rho} / \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T} \quad (10)$$

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 فشار بالا (گاز واقعی)، گرانروی ( $\eta$ ) به صورت زیر نوشته می‌شود.

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

که در آن،  $\eta^0$  گرانروی فشار پایین،  $\eta^*$  عبارت اصلاحی برای گرانروی فشار بالا،  $M_m$  وزن مولکولی مخلوط،  $V_{Cm}$  حجم بحرانی مخلوط،  $\Omega_v$  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 مدل‌کردن احتراق راکت<sup>۱</sup> 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 کرایونیک بود. آن‌ها در این کارگاه چهار نمونه<sup>۲</sup> را مطالعه و بررسی کردند. در آن سمینار، جریان سرد نیتروژن در حالت گذر بحرانی (RCM01-A)، جریان سرد نیتروژن در حالت فوق بحرانی (RCM01-B)، جریان گرم تک‌انژکتور هیدروژن گازی-اکسیژن مایع در حالت زیر بحرانی (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 RCM01-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 می‌شود.

## 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

میلی متر است. اگر نسبت طول به قطر آنژکتور بیش از ۴۰ باشد، یک توزیع سرعت کاملاً آشفته در هنگام ورود به محفظه ایجاد می‌کند. شرایط عملکردی هندسه در نقطه  $T_1$  بیان می‌شود. محفظه RCM01 به بررسی جریان سرد می‌پردازد. در این محفظه نیتروژن مایع ( $LN_2$ ) 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 در نظر گرفتن پیچیدگی‌های احتراق نمایش می‌دهد. پیچیدگی شبیه‌سازی پاشش فوق بحرانی و اثرات معادله حالت، هندسه ساده و متقارن RCM01 را توجیه می‌کند. این محفظه در دومین کارگاه بین‌المللی IWRCM 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 می‌کنند. آزمایش A به بررسی خواص در نزدیکی نقطه بحرانی (گذر بحرانی) نیتروژن می‌پردازد، در حالی که آزمایش B شرایط فوق بحرانی نیتروژن را بررسی می‌کند. دمای هردو مورد در نزدیکی دمای بحرانی نیتروژن قرار دارد و فشار هردو بالاتر از فشار بحرانی نیتروژن است. داده‌های تجربی توزیع چگالی در راستای شعاعی در چند ناحیه محوری اندازه‌گیری شده است. محفظه با یک سیال و به صورت سرد آزمایش شده است ( $LN_2$ -GN<sub>2</sub>) تا برای مطالعه، پیچیدگی احتراق حذف شود. جدول ۴ و جدول ۵ به ترتیب شرایط عملکردی آزمایش‌های A و B و همچنین خواص بحرانی سیال نیتروژن را نشان می‌دهد. مطالعه حاضر تنها بر مورد B صورت پذیرفته تا شبیه‌سازی جریان فوق بحرانی نیتروژن مورد مطالعه قرار گیرد.

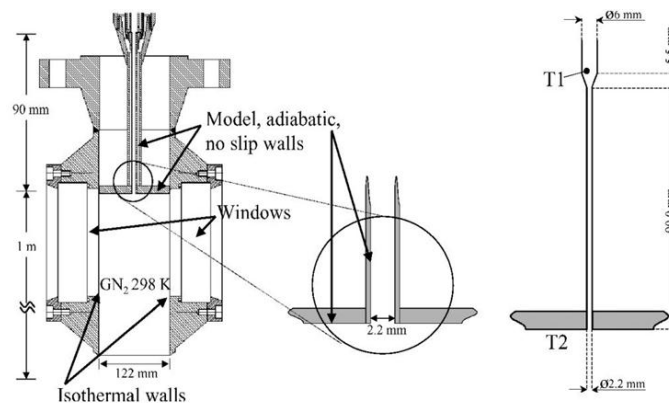


Figure 2- Schematic geometry of the RCM01 chamber  
شکل ۲- طرح حواره هندسه محفظه RCM01

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

جدول ۵- خواص بحرانی سیال نیتروژن

Table 5- Critical properties of N<sub>2</sub>

Critical temperature (K)	126.192
Critical pressure (MPa)	3.3958
Critical density (kg/m <sup>3</sup> )	313.300
Acentric factor	0.0372

میدان جریان درون محفظه کاملاً سه‌بعدی است. با اعمال برخی فرضیات ساده‌کننده، میدان جریان سه‌بعدی داخل محفظه به صورت متقارن محوری با دقت قابل قبول مدل‌سازی می‌شود. شبیه‌سازی با استفاده از حل گر فشار پایه<sup>۱</sup> به صورت ضمنی<sup>۲</sup> در فضای متقارن محوری و به صورت پایا حل شده است. برای ارتباط فشار با میدان سرعت از الگوریتم SimpleC استفاده شده است. گسسته‌سازی 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 به وضوح نمایش می‌دهد. این شبکه به صورت چندبُلوکه<sup>۳</sup> با شبکه‌های با سازمان<sup>۴</sup> ایجاد شده است. نکته قابل توجه در این شبکه لایه مرزی بر روی دیواره‌ها و ناحیه ورودی نیتروژن است که باید بسیار دقیق اعمال شود. عدم دقت مناسب در این نواحی موجب فاصله‌گرفتن داده‌های چگالی، بعد از مرز لایه اختلاط LN<sub>2</sub>-GN<sub>2</sub> با داده‌های تجربی موجود می‌شود. بدین منظور، همواره شرایط  $Y^+ < 1$  بر روی دیواره‌های محفظه اعمال شده است.

برای اعمال شرط مرزی ورودی نیتروژن مایع، از شرط دبی جرمی ورودی<sup>۵</sup> استفاده شده است. دیواره انژکتور و دیواره‌ای که انژکتور به آن متصل می‌شود، با استفاده از شرط عدم لغزش و به صورت بی‌دررو، و دیواره بالای محفظه، با شرط عدم لغزش به صورت دمابند، اعمال شده است. برای شرط مرزی خروجی از شرط فشار خروجی<sup>۶</sup> استفاده شده است. معادلات توسط کد تجاری Ansys Fluent 15.0 حل شده‌اند. به منظور 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 ۴۸۶۵۰۰، مستقل بودن شبکه ۱۲۱۷۵۰ را تایید می‌کند که به علت اختصار بیان نمی‌شود.

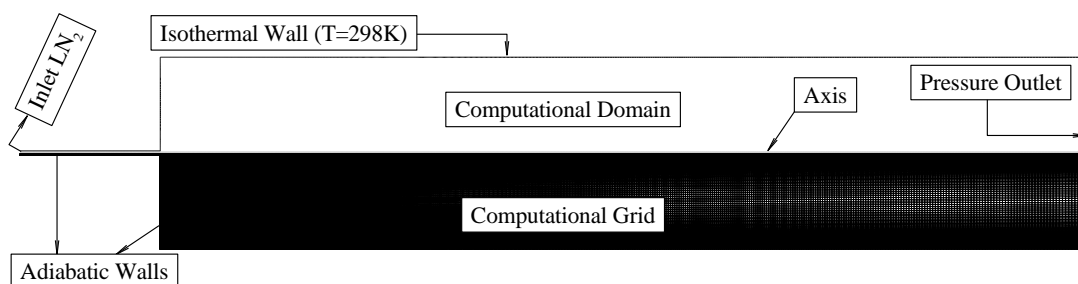


Figure 3- Computational domain, Boundary condition and computational Grid of RCM01

شکل ۳- میدان حل، شرایط مرزی و شبکه محاسباتی محفظه RCM01

### 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، به نام 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 اندازه‌گیری شده است. مقطع محفظه احتراق مقطع مربعی با ابعاد  $50\text{ mm} \times 50\text{ mm}$  طول آن  $458\text{ mm}$ ، قطر نازل آن  $9\text{ mm}$  و طول قسمت هم‌گرایی آن  $20\text{ mm}$  است. دارای یک انژکتور برشی است. قطر انژکتور مرکزی آن که مربوط به خروج اکسیژن است  $3/6\text{ mm}$  و قسمت خروجی آن  $5\text{ mm}$  است که با زاویه  $8^\circ$  به هم متصل شده‌اند. ورودی هیدروژن در انژکتور به صورت هم‌محور با اکسیژن است که قطر داخلی و خارجی آن به ترتیب  $5/6\text{ mm}$  و  $10\text{ mm}$  است. نمونه‌های آزمایشگاهی بررسی شده

1. Pressure based
2. Implicit
3. Multi block
4. Structured
5. Mass Flow inlet
6. Pressure outlet

احتراق هیدروژن-اکسیژن کد A و C هستند که در محدوده فشارهای ۰/۱ تا ۷ مگاپاسکال واقع شده‌اند. حرف C نسبت شار تکانه<sup>۱</sup> 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 مطالعه شده A-60 است که شرایط عملکردی آن در جدول ۳ بیان شده است. فشار محفظه برابر با ۶۰ bar 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 می‌شود. برای بررسی عددی، این هندسه به صورت دوبعدی متقارن محوری مدل‌سازی شده است. شایان ذکر است که پوشنر و فیتزر [۳۱]، در مدل‌سازی خود، هندسه با مقطع مکعبی را به صورت استوانه‌ای با قطر ۲۸/۸۱mm در نظر گرفته و آن را به شکل دوبعدی متقارن محوری<sup>۲</sup> مدل‌سازی کردند.

جدول ۶- شرایط عملکردی آزمایش آزمایش RCM03

Table 5- RCM03 (Mascotte A-60) Operation condition

Species	Pressure [MPa]	Mass flow rate [g/s]	Temperature [K]	Density [kg/m <sup>3</sup> ]	Velocity [m/s]
H <sub>2</sub>	6	70	287	5.51	236
O <sub>2</sub>	6	100	85	1177.8	4.35

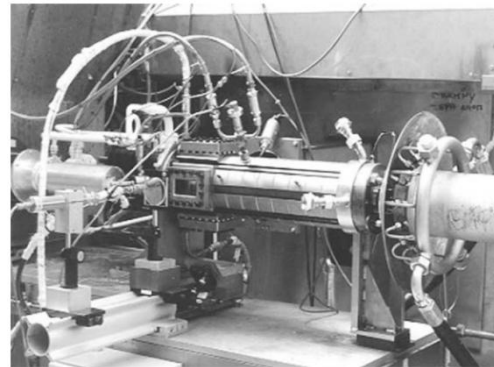
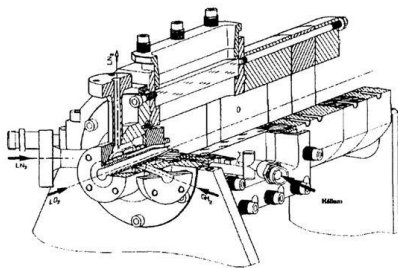


Figure 4- Schematic geometry of the RCM03

شکل ۴- طرحواره هندسه محفظه RCM03

همان‌طور که بیان شد، هندسه پیچیده A-60 به مطالعه رفتار احتراق در شرایط فوق بحرانی می‌پردازد و بررسی این محفظه کمک شایانی به درک مفاهیم آن می‌کند. شبیه‌سازی با استفاده از حل گر فشار پایه، به صورت ضمنی در فضای متقارن محوری و به صورت پایا حل شده است. برای ارتباط فشار با میدان سرعت از الگوریتم SimpleC استفاده شده است. شکل ۵، میدان حل، شبکه محاسباتی و شرایط مرزی را به وضوح نمایش می‌دهد. این شبکه به صورت چندبلاکه با شبکه‌های باسازمان و شبکه‌های بدون سازمان<sup>۳</sup> ایجاد شده است و بیش از ۹۴ درصد شبکه محاسباتی شبکه باسازمان در برمی‌گیرد. نکته قابل توجه در این شبکه در نظر 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 به صورت بی‌دررو اعمال شده است. برای شرط مرزی خروجی از شرط فشار خروجی استفاده شده است. معادلات توسط کد تجاری Ansys Fluent 15.0 حل شده‌اند. به منظور حصول اطمینان از عدم وابستگی 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. 2D axisymmetric  
3. Unstructured

در حالت سرد، با دو شبکه مختلف با دو سلول محاسباتی ۳۵۷۲۰ و ۱۴۲۸۰۰ (شکل ۶) با معیار نصف کردن تمام سلول‌های دامنه محاسباتی، همچنین، بررسی در حالت گرم، با سه شبکه مختلف با تعداد سلول محاسباتی ۳۵۷۲۰، ۵۳۰۰۰ و ۷۰۰۰۰ با معیار ریز کردن ناحیه OH (شکل ۷)، مستقل بودن 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.

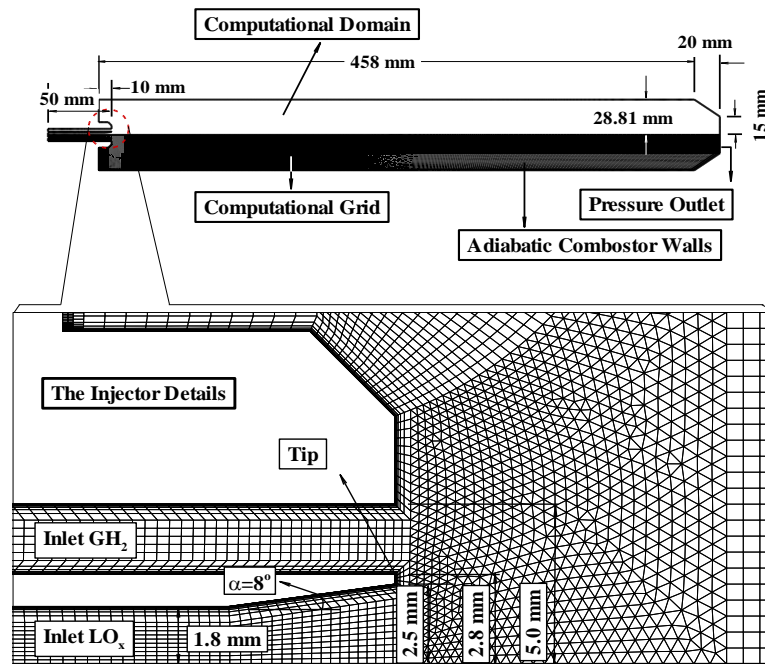


Figure 5- Computational domain, Boundary condition and computational Grid of RCM03

شکل ۵- میدان حل، شرایط مرزی و شبکه محاسباتی

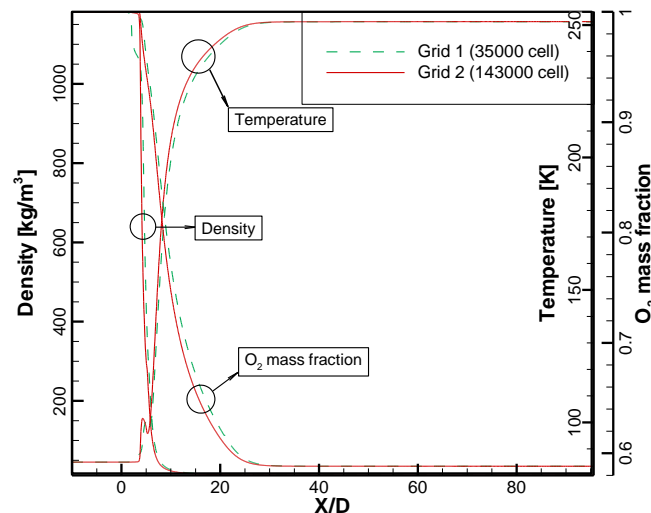


Figure 6- Grid study of RCM03 at two different computational grid, cold study (Compare Temperature, Density and Mass Fraction of O<sub>2</sub>)

شکل ۶- بررسی استقلال از شبکه محاسباتی RCM03 در دو شبکه محاسباتی مختلف در حالت سرد (مقایسه دما، چگالی و کسر جرمی O<sub>2</sub>)

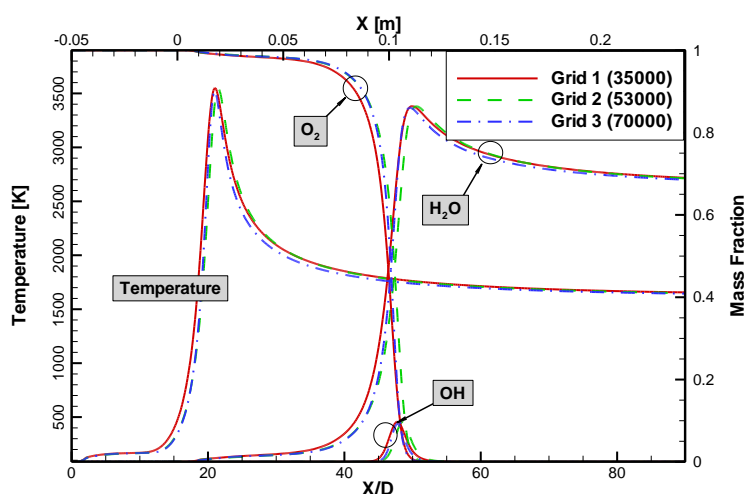


Figure 7- Grid study of RCM03 at three different computational grid, hot study (Compare Temperature and Mass Fraction of species)

شکل ۷- بررسی استقلال از شبکه محاسباتی RCM03 در سه شبکه محاسباتی مختلف در حالت گرم (مقایسه دما، کسر جرمی گونه‌ها)

## یافته‌ها

### نتایج محفظه RCM01

#### نتایج حاصل از بررسی مدل‌های اغتشاشی

ابتدا، معادله حالت واقعی SRK فرض می‌شود و مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای برای تعیین مدل مناسب اغتشاش اعمال می‌شود. مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای بررسی شده،  $\kappa - \varepsilon$  Standard،  $\kappa - \varepsilon$  RNG،  $\kappa - \varepsilon$  Realizable و  $\kappa - \omega$  SST هستند. صحت‌سنجی نتایج با داده‌های تجربی مربوط به چگالی در راستای شعاعی، در دو مکان  $x/d_{jet}$  برابر با ۵ و ۲۵، موجود است، لذا، این توزیع چگالی برای مدل‌های مختلف ارزیابی شده است. مطابق شکل ۸، داده‌های تجربی در سمت راست محور بعد از لایه اختلاط کمی 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 سمت چپ داده‌ها معقول‌تر به نظر می‌آید. همان‌طور که در شکل ۸-a مشاهده می‌شود، در ابتدای ورود فواره، یک ناحیه با چگالی بالا در مرکز شکل می‌گیرد. در این ناحیه، به دلیل شرایط فوق بحرانی فواره، چگالی بسیار بیشتر از نواحی کنار است. در عین حال، بین جریان ورودی و میدان جریان محفظه یک لایه برشی ایجاد می‌شود که در پایین دست سبب یکنواخت شدن شرایط جریان و همچنین چگالی میدان می‌شود. این شرایط در اختلاف بین دو نمودار شکل ۸ به خوبی قابل تشخیص است. نحوه پیش‌بینی مدل‌های اغتشاشی در رابطه با نمودارهای جریان و همچنین چگالی به نوع پیش‌بینی آن‌ها در مورد پارامترهایی مانند انرژی جنبشی آشفتگی و نرخ اضمحلال آن و به عبارتی گرانروی آشفتگی وابسته است.

همه مدل‌های استفاده شده چگالی در خط مرکز<sup>۱</sup> را درست پیش‌بینی کرده‌اند، اما بعد از لایه اختلاط اختلافات شروع می‌شود که  $\kappa - \varepsilon$  Realizable چگالی بعد از ناحیه اختلاط را بهتر پیش‌بینی کرده است و تطابق بهتری با داده‌های تجربی دارد. شکل ۸-b توزیع چگالی را در  $x/d_{jet}=25$  نشان می‌دهد. چگالی خط مرکز در  $\kappa - \omega$  SST بهتر پیش‌بینی شده، اما با فاصله گرفتن از محور، اختلاف آن با داده‌های تجربی زیاد است.  $\kappa - \varepsilon$  Realizable در نتیجه شکل کلی توزیع را بهتر پیش‌بینی کرده و به داده‌های تجربی نزدیک‌تر است.

1. Center line

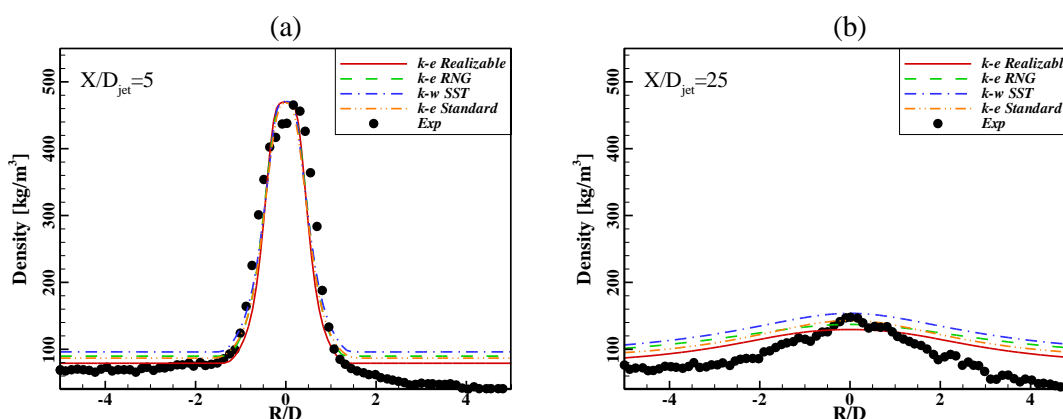


Figure 8- Compare radial density profile at different turbulent models with Experimental data (in two section) for RCM01

شکل ۸ - مقایسه توزیع چگالی در راستای شعاعی برای مدل‌های اغتشاشی مختلف با داده‌های تجربی RCM01 [۶۲]

مدل  $\kappa - \epsilon$  Realizable از یک تابع متغیر برای پیش‌بینی ضرایب مربوط به گرانیوی آشفتگی استفاده می‌کند. به همین دلیل، برای جریان فواره‌های محدود نتایج بهتری نسبت به دیگر مدل‌های اغتشاشی ارائه می‌دهد. در واقع عبارت تنش‌های رینولدز در معادله تکانه با دقت بهتری پیش‌بینی می‌شود. میزان بازشدگی فواره ورودی به نحوه پیش‌بینی گردابه مجاور دیواره در مدل‌های اغتشاشی مختلف وابسته است، که شکل ۹ و جدول ۷ به‌وضوح این موضوع را بیان می‌دارد. گردابه شکل‌گرفته در نزدیکی دیواره وابسته به ابعاد محفظه است. هر چقدر 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.

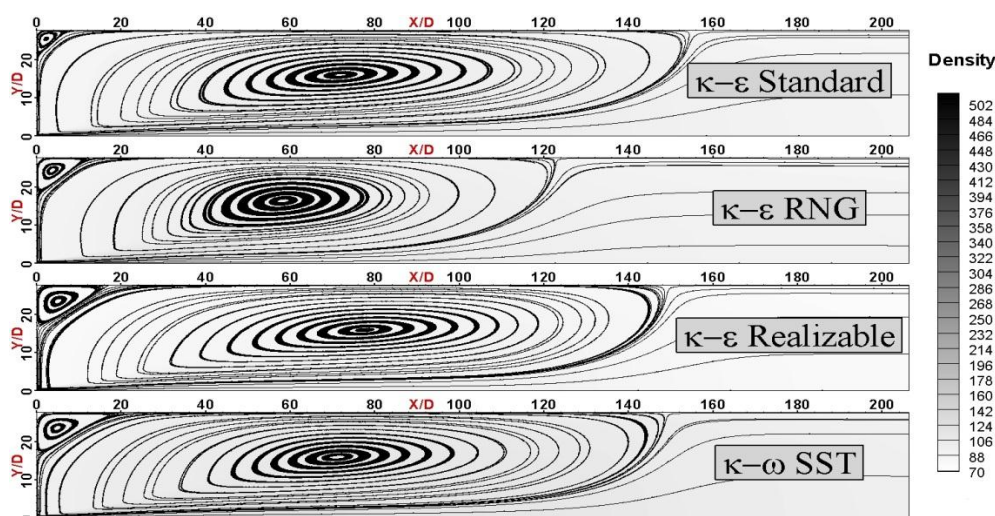


Figure 9- Contour of the Recirculation zone created with different turbulence models for RCM01

شکل ۹ - کانتور مربوط به گردابه‌های ایجادشده با مدل‌های اغتشاشی مختلف برای RCM01

فواره پاشیده‌شده به یک محیط در راستای شعاعی دارای توزیع تابع گوسین است. لذا، برای میزان بازشدگی می‌توان از معیارهای مختلف  $FWHM^1$ ،  $FWTM^2$  و  $HWHM^3$  استفاده کرد. معیار  $FWHM$  مکان هندسی نقاطی است که در آنجا اختلاف بیشینه و کمینه پارامتری (نظیر چگالی یا سرعت)، به نصف می‌رسد [۶۳]. از این معیار برای اندازه‌گیری 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 ۷ 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 مدل  $\kappa - \varepsilon$  Realizable با هم به داده‌های تجربی نزدیک‌تر است و دارای کمترین میزان خطاست.

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

Turbulence Model	Spreading Angle	Error
$\kappa - \varepsilon$ Standard	11.95	-15.2
$\kappa - \varepsilon$ RNG	15.4	9.3
$\kappa - \varepsilon$ Realizable	13.6	-3.5
$\kappa - \omega$ SST	13.4	-4.7
Experimental	14.09	-

شکل ۹ کانتورهای سرعت و گرادیان‌ها را برای هر چهار مدل اغتشاشی نشان می‌دهد. واضح است میدان جریان در داخل محفظه محدود موجب تولید گرادیان‌هایی می‌شود. طول گرادیان میزان قدرت گرادیان را مشخص می‌کند. هرچه طول گرادیان بزرگ‌تر باشد، قدرت گرادیان بیشتر است. لذا، با توجه به شکل ۹، علت اختلاف در بازشدگی پاشش فواره نیتروژن با مدل‌های اغتشاشی مختلف قابل بیان است. طول گرادیان در  $\kappa - \varepsilon$  Standard ۱۵۵ برابر طول انژکتور، در  $\kappa - \varepsilon$  RNG ۱۲۳ برابر طول انژکتور و در  $\kappa - \varepsilon$  Realizable و  $\kappa - \omega$  SST برابر با ۱۴۹ برابر طول انژکتور است. لذا،  $\kappa - \varepsilon$  RNG، به‌علت تشکیل گرادیان کوچک‌تر، قدرت کم‌تری دارد و میزان بازشدگی را بیشتر پیش‌بینی می‌کند و عکس این موضوع برای  $\kappa - \varepsilon$  Standard پیش می‌آید.  $\kappa - \varepsilon$  Realizable و  $\kappa - \omega$  SST تقریباً با اختلاف کمتری زاویه بازشدگی را پیش‌بینی کردند.

### نتایج حاصل از بررسی معادله حالت

نتایج حاصل از بررسی مدل‌های اغتشاشی حاکی از آن بود که  $\kappa - \varepsilon$  Realizable دارای بهترین سازگاری بین مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای است. لذا، با انتخاب این مدل اغتشاشی به بررسی اثر معادله حالت پرداخته می‌شود. شکل ۱۰-ا نتایج حاصل از شبیه‌سازی پاشش فواره نیتروژن با استفاده از مدل اغتشاشی  $\kappa - \varepsilon$  Realizable و بررسی انواع معادله‌های حالت، در  $x/d_{jet}$  برابر با ۵، را نشان می‌دهد. در خط مرکز بیشینه چگالی ظاهر می‌شود و مشاهده می‌شود که معادله حالت SRK و ARK تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارد. بیشینه چگالی داده‌های تجربی  $465 \text{ kg/m}^3$  است. این درحالی است که نتایج حاصل از شبیه‌سازی معادله حالت گاز ایدئال  $156 \text{ kg/m}^3$ ، معادله حالت PR  $519 \text{ kg/m}^3$ ، معادله حالت SRK  $470 \text{ kg/m}^3$  و معادله حالت ARK  $471 \text{ kg/m}^3$  است. بنابراین، معادله حالت گاز ایدئال چگالی را بسیار پایین‌تر از واقعیت پیش‌بینی کرده و دارای خطای ۶۶/۵ درصد است؛ لذا قادر به پیش‌بینی درستی از خواص در شرایط فوق بحرانی نیست. معادله حالت PR دارای خطای ۱۱/۸ درصدی است و بیشینه چگالی بالاتر از داده‌های تجربی پیش‌بینی شده است. معادله حالت SRK و ARK دارای خطای کمتر از ۲ درصدند و تطابق بهتری با داده‌های تجربی دارند. شکل ۱۰-ب نتایج حاصل از شبیه‌سازی پاشش فواره نیتروژن با معادلات حالت حقیقی تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارند. شکل ۱۰-ب نتایج حاصل از شبیه‌سازی پاشش فواره نیتروژن با استفاده از مدل اغتشاشی  $\kappa - \varepsilon$  Realizable و بررسی انواع معادله‌های حالت در  $x/d_{jet} = 25$  را نشان می‌دهد. معادله حالت گاز ایدئال قادر به پیش‌بینی اختلاف چگالی خط مرکز با محیط پیرامون نیست. در نتایج حاصل از شبیه‌سازی، معادله حالت

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

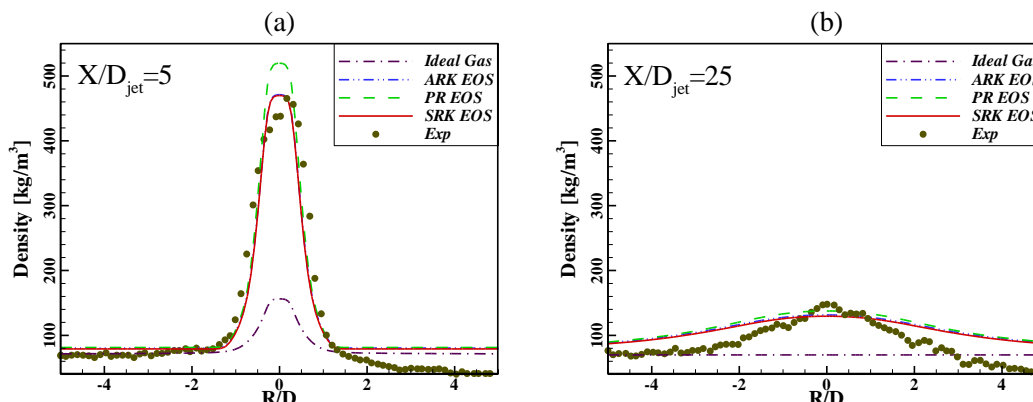


Figure 10- Compare radial density profile at different equation of states with Experimental data (in two section) for RCM01  
 شکل ۱۰- مقایسه توزیع چگالی در راستای شعاعی برای معادله حالت‌های مختلف با داده‌های تجربی [۶۲]RCM01

### نتایج محفظه RCM03

#### نتایج حاصل از بررسی مدل اغتشاشی

داده‌های تجربی موجود برای صحت‌سنجی شبیه‌سازی آزمایش A-60 بسیار اندک است. کانتور داده تجربی  $OH^*$  برای مقایسه کیفی برای تطابق نتایج حاصل از شبیه‌سازی موجود است [۶۵]. در مطالعه حاضر، با تعریف پارامترهایی بر کانتور تجربی موجود، می‌توان مقایسه منطقی‌تری انجام داد. شکل ۱۱ کانتور داده تجربی  $OH^*$ ، که ابعاد آن برحسب قطر انژکتور اکسیژن بی‌بعد شده‌اند، را نشان می‌دهد. در شکل ۱۱، ناحیه‌ای مشاهده می‌شود که در آن نرخ بازشدگی  $OH^*$  یکسان است. این ناحیه با  $L_1$  نمایش داده می‌شود که در محدوده صفر تا هشت برابر قطر انژکتور اکسیژن قرار دارد. در ناحیه  $L_1$ ، میزان نیم زاویه بازشدگی اندازه‌گیری شده و با  $\beta$  نمایش داده می‌شود. معیار اندازه‌گیری برحسب بیشترین مقدار  $OH^*$  در این ناحیه است. مقدار محاسبه شده برای آن  $\beta = 4.4^\circ$  است. مقدار بیشینه  $OH^*$  بر روی محور با  $L_2$  نمایش داده می‌شود که ۲۲ برابر قطر انژکتور محاسبه شده است. اگر بیشترین مقدار  $OH^*$  ناحیه قرمز رنگ برابر با یک و کمترین مقدار  $OH^*$  ناحیه بنفش برابر با صفر فرض شود، برحسب بی‌بعدسازی صورت گرفته روی کانتور تجربی موجود، در حدود  $OH^* = 0.5$ ، مکان طولی ( $L_x$ ) و عرضی ( $L_y$ ) بیشینه بازشدگی به ترتیب برابر با  $12/4$  و  $2/7$  برابر قطر انژکتور محاسبه می‌شود. حال، با توجه به داده‌های استخراج شده از کانتور تجربی موجود، می‌توان مقایسه کمی خوبی انجام داد.

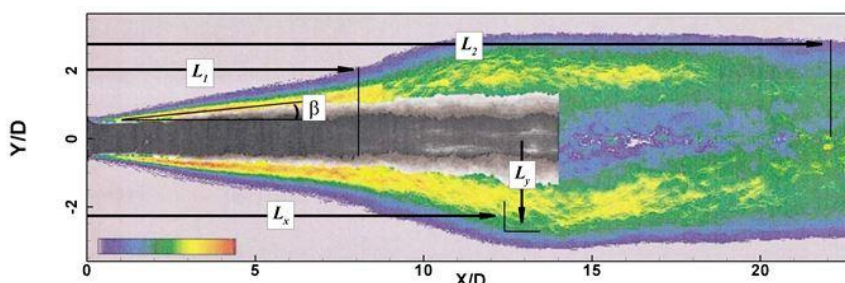


Figure 11- Experimental contour of  $OH^*$  [65], non-dimensional with diameter of oxygen injector for RCM03  
 شکل ۱۱- داده تجربی [۶۵] تصویربرداری کانتور  $OH^*$  برای RCM03. (ابعاد طولی بی‌بعد شده برحسب قطر انژکتور اکسیژن) (فایل رنگی شکل در سایت نشریه قابل مشاهده است.)

همان‌طور که ذکر شد، شبیه‌سازی عددی احتراق فوق بحرانی، به‌علت تغییرات رفتار و وجود گرادیان‌های شدید در چگالی، ظرفیت حرارتی و سایر خواص ترموفیزیکی و همچنین پیچیدگی خود احتراق، بسیار مشکل است. ابتدا، معادله حالت واقعی SRK فرض می‌شود و مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای برای تعیین مدل مناسب اغتشاش اعمال می‌شود. مدل‌های اغتشاشی دومعادله‌ای بررسی اعمال شده،  $k - \epsilon$  Standard،  $k - \epsilon$  RNG،  $k - \epsilon$  Realizable،  $k - \omega$  SST و  $k - \omega$  SST هستند. جدول ۸ بیانگر پارامترهای اندازه‌گیری‌شده برای معادلات اغتشاشی مختلف و جدول ۹ بیانگر خطای پارامترهای اندازه‌گیری‌شده برای معادلات اغتشاشی مختلف است. طول ناحیه  $L_1$ ، در معادله اغتشاشی  $k - \epsilon$  Standard و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۳۵ و ۵۰ درصد، بیشتر و در معادله  $k - \epsilon$  Realizable و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۲۲/۵ و ۲۱/۲ درصد، کمتر پیش‌بینی 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  $k - \epsilon$  Standard،  $k - \epsilon$  RNG،  $k - \epsilon$  Realizable و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۲۲/۷، ۴۴/۱ و ۴۲/۷ درصد، بیشتر و در معادله،  $k - \omega$  SST با خطای ۴/۵ درصد، کمتر پیش‌بینی شده است. طولی که بیشترین بازشدگی شعله را در راستای محوری نشان می‌دهد با  $L_x$  نشان داده شده است که در معادله اغتشاشی  $k - \epsilon$  Standard و  $k - \epsilon$  RNG به ترتیب با خطای ۲۵ و ۳۴/۷ درصد، بیشتر و در معادله  $k - \epsilon$  Realizable و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۲۴/۲ و ۱۶/۹ درصد، کمتر پیش‌بینی شده است. طولی که بیشترین بازشدگی شعله را در راستای شعاعی نیز نشان می‌دهد با  $L_y$  نشان داده شده است که در معادله اغتشاشی  $k - \epsilon$  Standard و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۲/۲ و ۲۴ درصد، بیشتر و در معادله  $k - \epsilon$  Realizable و  $k - \omega$  SST به ترتیب با خطای ۰/۷ و ۹/۳ درصد، کمتر پیش‌بینی شده است. توضیحات داده‌شده بیانگر وجود خطا در تمامی معادلات اغتشاشی است. لذا، برای مقایسه بهتر، میزان خطای کل با نرم دوم<sup>۱</sup> محاسبه شده است که معادله حالت  $k - \omega$  SST و  $k - \epsilon$  Standard دارای کمترین خطایند.

جدول ۸- پارامترهای اندازه‌گیری‌شده برای معادلات اغتشاشی (RCM03)

Table 8- measured parameters for turbulence models (RCM03)

	$\%L_1$	$\%L_2$	$\%L_x$	$\%L_y$	$\%\beta$
Experiment	8	22	12.4	2.70	4.40
$k - \epsilon$ Standard	10.8	27	15.5	2.76	2.52
$k - \epsilon$ RNG	12	31.7	16.7	2.45	1.51
$k - \epsilon$ Realizable	6.2	31.4	9.4	2.68	8.13
$k - \omega$ SST	6.3	21	10.3	3.35	6.3

جدول ۹- خطای پارامترهای اندازه‌گیری‌شده برای معادلات اغتشاشی (RCM03)

Table 9- Error of measured parameters for turbulence models (RCM03)

	$\%L_1$	$\%L_2$	$\%L_x$	$\%L_y$	$\%\beta$	Error
$k - \epsilon$ Standard	35	22.7	25	2.2	-42.7	13.0
$k - \epsilon$ RNG	50	44.1	34.7	-9.3	-65.7	20.0
$k - \epsilon$ 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  $k - \omega$  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  $k - \omega$  SST است. بیشترین تأثیر در جابه‌جایی نقطه بیشینه دما

1.  $L_2$  Norm

می‌تواند ناشی از ابعاد ناحیه‌های مختلف پیش‌بینی‌شده توسط مدل‌های اغتشاشی باشد. شایان ذکر است که شبیه‌سازی صورت‌گرفته در این تحقیق بر مبنای گسسته‌سازی معادلات با روش بالادست مرتبه اول صورت پذیرفته است که ذاتاً 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 گسسته‌سازی با مراتب بالاتر است. البته، با توجه به پیشینه این مدل اغتشاشی در جریان‌های دارای چرخش عملکرد قابل قبول آن نیز دور از انتظار نیست.

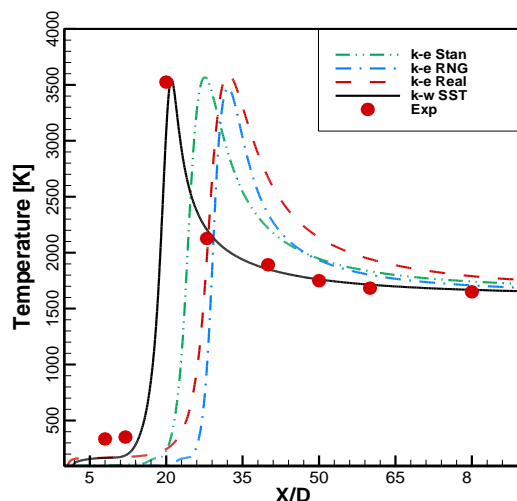
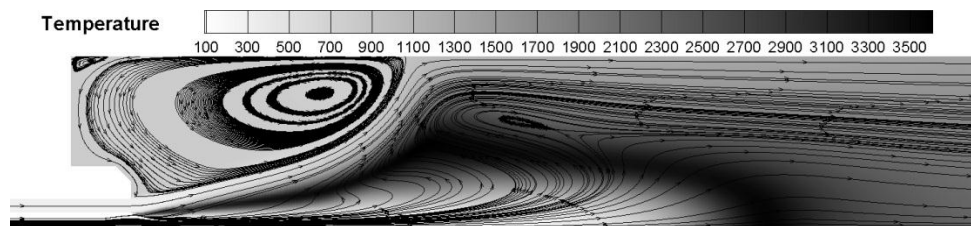


Figure 12- Compare axial Temperature variation for different Turbulence models with Experimental data of RCM03  
شکل ۱۲- مقایسه تغییرات دما بر روی محور طولی برای مدل‌های اغتشاشی مختلف با داده‌های تجربی RCM03 [۳۱]

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 زیر بحرانی صورت می‌پذیرد، کمی متفاوت است. هسته سرد و چگال اکسیژن، در عبور از گذر بحرانی، 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 ایجاد شده 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 ادامه مسیر در نزدیک دیواره، مسیر حجم انبساط یافته اکسیژن را مشخص می‌کند و گردابه ثانویه را تشکیل می‌دهد. وجود این گردابه ثانویه و نیز ساختار جریان به دست آمده در نتایج پارک و همکاران [۳۷]، رویز [۶۶]، کیم و همکاران [۶۷] و وانگ و همکاران [۶۸] نیز قابل مشاهده است.



شکل ۱۳- خطوط مسیر مربوط به حل جریان احتراقی (مدل اغتشاشی  $\kappa - \omega$  SST و معادله حالت (RCM03) SRK)  
Figure 13- Fow field of LO<sub>x</sub>-GH<sub>2</sub> Supercritical Combustion (RCM03) (Turbulence model:  $\kappa - \omega$  SST and SRK EOS)

### نتایج حاصل از بررسی معادله حالت

هنگامی که فشار بسیار بالا باشد، فرضیات گاز ایدئال دیگر صادق نیست و لذا نمی‌توان اندرکنش بین مولکولی را نادیده فرض کرد و همچنین، به‌علت کم‌شدن فاصله مولکول‌ها از هم، نادیده‌گرفتن حجم اشغال‌شده توسط مولکول‌ها فرض نادرستی است. نیاز به معادله حالت دقیق‌تر باعث به‌وجود آمدن معادله حالت‌های مدرن شد. این معادلات حالت خواص ترمودینامیکی را بهتر پیش‌بینی می‌کردند. شکل ۱۴ ساختار شعله A-60 را با اعمال دو نوع معادله حالت ایدئال و غیرایدئال نشان می‌دهد. تمامی شرایط در هر دو یکسان است و تنها معادله حالت آن‌ها باهم متفاوت است. مشاهده می‌شود که ساختار شعله و طول شعله، در دو نوع معادله حالت، بسیار با هم متفاوت است. ساختار معادله حالت حقیقی، با توجه به داده‌های تجربی موجود، به فیزیک مسئله نزدیک‌تر است. چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور در معادله حالت ایدئال، یک‌چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش‌بینی می‌کند. لذا، سرعت در هنگام خروج بیشتر می‌شود و طول شعله را بیشتر پیش‌بینی می‌کند. علت تفاوت در ساختار شعله معادله حالت ایدئال ناشی از عدم پیش‌بینی صحیح چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور، فقدان پیش‌بینی مناسب گرادیان چگالی هسته اکسیژن در عبور از گذربرانی و همچنین عدم توانایی در پیش‌بینی شبه‌جوشش<sup>۱</sup> هسته چگال اکسیژن<sup>۲</sup> در عبور از گذربرانی 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 فشار ثابت دارای تغییرات شدید است و تا پنج‌برابر نسبت به معادله ایدئال افزایش می‌یابد؛ بالا رفتن 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 نمی‌کند شبه‌جوشش گفته می‌شود.

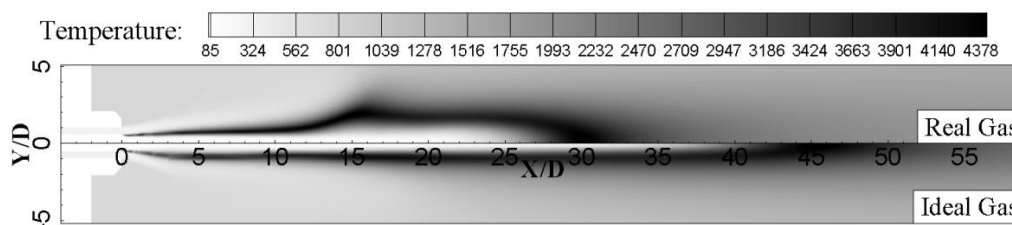


Figure 14- Numerical study of Flame structure at Massotte test ring (A-60) (compare Real and Ideal EOS)  
 شکل ۱۴- مطالعه عددی ساختار شعله هندسه ماسکات آزمایش A-60 (RCM03)، با اعمال دو نوع معادله حالت ایدئال و غیرایدئال

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 می‌دهد. با اعمال معادله حالت ARK، طول شعله نسبت به معادله SRK به میزان ۷ درصد کمتر پیش‌بینی شده است و لذا اختلاف بیشتری با کانتور تجربی دارد. طول شعله در معادله PR، نسبت به معادله SRK به میزان ۲ درصد کمتر پیش‌بینی شده است. بنابراین، معادله حالت SRK نزدیک‌ترین نتایج به داده‌های تجربی را داراست. همان‌طور که ذکر شد، برای محاسبه خواص ترمودینامیکی مانند آنتالپی، انرژی درونی، گرمای ویژه در فشار ثابت و سایر پارامترها، از جمله اصلاحی سیال چگال<sup>۳</sup> استفاده می‌شود که در آن روابط توابع انحراف<sup>۴</sup> به استخراج آن کمک می‌کند. توابع انحراف، برای

1. pseudo boiling  
 2. Oxygen dense core  
 3. Dense Fluid correction term  
 4. Departure Function

به دست آوردن معادلات خود، از معادله حالت بهره می‌گیرد. علت اختلاف را می‌توان به دیدگاه‌های متفاوتی که برای تابع ضریب جذب فشار دارند مرتبط ساخت.

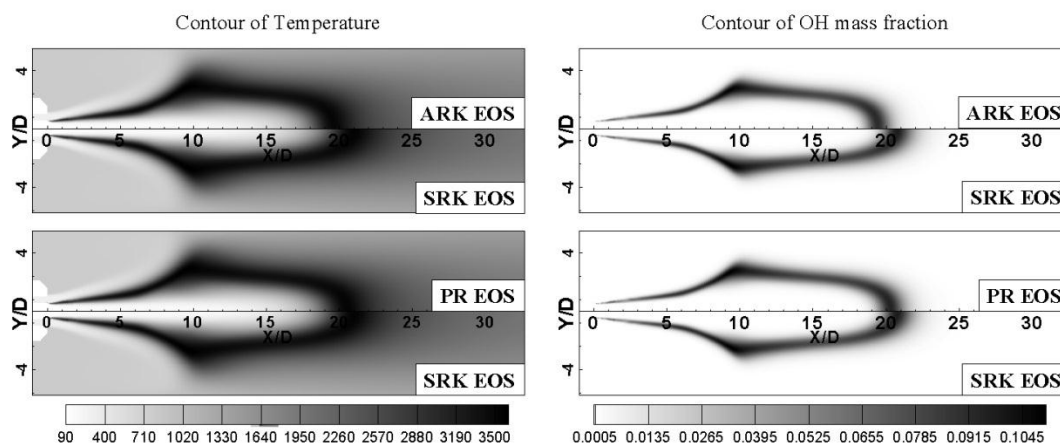


Figure 15- Effect of PR and ARK EOS at flame structure and compare them with SRK EOS (contour of Temperature and OH mass Fraction) (RCM03)

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

## نتیجه‌گیری

با استفاده از شبیه‌سازی عددی متقارن محوری و حل معادلات متوسط گیری‌شده نویراستوکس<sup>۱</sup>، در ابتدا، جریان فواره فوق بحرانی نیتروژن (از آزمایش RCM 01) در شرایط فشاری در حدود ۶۰ بار به صورت عددی بررسی شده است و نتایج آن با نتایج تجربی معتبر مقایسه شده است. مدل‌های مختلف اغتشاشی بررسی شده و با استفاده از گسسته‌سازی مرتبه دوم معادلات حاکم دیده شده است که مدل  $\kappa - \epsilon$  Realizable نتایج بهتری در خصوص پیش‌بینی ناحیه لایه برشی، تشکیل گردابه‌های کناری و در نتیجه اختلاط ارائه می‌دهد. پیش‌بینی بهتر مدل  $\kappa - \epsilon$  Realizable می‌تواند ناشی از تخمین بهتر جمله مربوط به گرانروی آشفته‌گی در فرض بوزینسک باشد. مدل  $\kappa - \epsilon$  Realizable نتایج بهتری در مقایسه با معیار FWHM ارائه می‌دهد. همچنین، مشاهده شده است که میزان بازشدگی فواره ورودی وابسته به نحوه پیش‌بینی گردابه مجاور دیواره در مدل‌های آشفته‌گی مختلف است. گردابه شکل‌گرفته در نزدیکی دیواره وابسته به ابعاد هندسه است. هر چقدر میزان گردابه تخمین زده شده بزرگ‌تر باشد، اختلاط در هسته مرکزی جریان با نرخ کمتری صورت می‌گیرد و نمودارهای مربوط به توزیع چگالی دیرتر یکنواخت خواهد شد. اثر معادلات مختلف حالت در پیش‌بینی جریان نیز بررسی شده است. معادله حالت ARK و SRK دارای خطای کمتر از ۲ درصد در نواحی مرکزی‌اند و تطابق بهتری با داده‌های تجربی در نواحی هسته نیتروژن دارند. با دور شدن از خط مرکز، تمامی معادلات حالت حقیقی تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارند.

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، به شدت دچار تغییر می‌شود. هسته سرد و چگال اکسیژن، در عبور از گذر بحرانی، 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 به همراه دارد. برای بررسی این پدیده، از هندسه RCM03 و آزمایش A-60 استفاده شده است که در آن فشار محفظه ۶۰ بار و بالاتر از فشار بحرانی هیدروژن و اکسیژن است.

هندسه به صورت دوبعدی-متقارن محوری و حل معادلات متوسط‌گیری شده نویراستوکس شبیه‌سازی شده است. رفتار سیال پاشیده شده 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 پیش‌بینی شکل شعله و توزیع دما بررسی شده است و با استفاده از گسسته‌سازی مرتبه اول بالادست معادلات حاکم دیده شده است که مدل  $\kappa - \omega$  SST عملکرد بهتری در پیش‌بینی شکل شعله دارد. مقایسه تغییرات دما بر روی محور طولی برای مدل‌های اغتشاشی مختلف با داده‌های تجربی انجام شده 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  $\kappa - \omega$  SST بهترین تطابق را با داده‌های تجربی موجود دارد. اثر اعمال شرایط گاز حقیقی با شرایط گاز ایدئال در پیش‌بینی شکل شعله به خوبی نمایان می‌سازد که فرض گاز ایدئال در یک احتراق فوق بحرانی خطای زیادی در تخمین شکل و طول شعله به همراه دارد. چگالی هسته اکسیژن در خروج از انژکتور در معادله حالت ایدئال، یک‌چهارم مقداری است که معادله حالت حقیقی پیش‌بینی می‌کند. لذا، به‌ناچار، سرعت در هنگام خروج بیشتر می‌شود و طول شعله را بیشتر پیش‌بینی می‌کند. همچنین، معادلات مختلف پیشنهاد شده برای رفتار گاز حقیقی بررسی شد. مدل SRK نزدیک‌ترین نتایج به داده‌های تجربی و مدل ARK بیشترین خطا را به همراه داشته‌اند.

## 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," *40th 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.
4. 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 Meeting 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. Talley and A. Badakhshan, "Raman Scattering Measurements in the Initial Region of Sub- and 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 Meeting 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-ograde, 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 Meeting and Exhibit*, Reno, NV, 1995.
15. M. Oswald and A. Schik, "Supercritical Nitrogen Free Jet Investigated by Spontaneous Raman Scattering," *Experiments in Fluids*, 27, 1999, pp. 497-506.
16. S. Candel, M. Juniper, G. Singla, P. Scoufflaire 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. Scoufflaire, 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.
19. J. Bellan, "Theory, Modeling and Analysis of Turbulent Supercritical Mixing," *Combustion Science and Technology*, vol. 178, pp. 253-281, 2006.
20. N. Okong'o, K. Harstad and J. Bellan, "Direct Numerical Simulation of O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 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.
28. 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/GH<sub>2</sub> Combustion Considering Consistent Real Gas Thermodynamics," *Proceedings of the European Combustion Meeting*, Vienna, Austria, 2009.
31. M. M. Poschner and M. Pfitzner, "Real Gas CFD Simulation of Supercritical H<sub>2</sub>-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 H<sub>2</sub> 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/CH<sub>4</sub> Spray under Supercritical Conditions," *39th AIAA Fluid Dynamics Conference*, San Antonio, Texas, 2009.
34. 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/CH<sub>4</sub> Jet Flames," *4th European Conference for Aerospace Sciences (EUCASS)*, St Petersburg, Russia, 2011.
36. M. De Giorgi, A. Sciolti, and A. Ficarella, "Application and Comparison of Different Combustion Models of High Pressure LOX/CH<sub>4</sub> 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.
38. 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 LO<sub>2</sub>/GH<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 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- $\epsilon$  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 Vaporization<sup>1</sup>," *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 september 2015.
64. N. Ierardo, A. Congiunti and C. Bruno, "Mixing and Combustion in Supercritical O<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> Liquid Rocket Injectors," *42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, Nevada, 2004.
65. 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.
68. X. Wang, G. Cai, and H. Huo, "Numerical Study of High-Pressure GO<sub>2</sub>/GH<sub>2</sub> Combustion of a Single-Element Injector," *Science China Technological Sciences*, 55, 2012, pp. 2757-2768.

## English Abstract

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

Ehsan Barani<sup>1</sup> and Amir Mardani<sup>2</sup>

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  $\text{LO}_x/\text{H}_2$  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, Turbulence models, Hydrogen- $\text{LO}_x$