

تبخیر گذرای قطره دوجزئی در دما و فشار زیاد

مهنا مرادی^۱ و حجت قاسمی^{۲*}

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی هوافضا، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، mohana_moradi96@mecheng.iust.ac.ir

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، h_ghassemi@iust.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۲/۲۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۳۹۹/۰۳/۲۵، پذیرش: ۱۳۹۹/۰۵/۲)

چکیده: در این مقاله، تبخیر گذرای قطره دوجزئی در دما و فشار زیاد به صورت عددی مدل سازی شده است. در فاز گاز، معادلات بقای جزء، تکانه و انرژی و در فاز مایع، معادلات بقای جزء و انرژی، با رویکرد حجم محدود حل شده اند. تغییرات خواص ترموفیزیکی برحسب دما و فشار در نظر گرفته شده است. همچنین فرض تعادل فوگاسیتی در سطح مشترک و معادله حالت پنگ-رابینسون لحاظ شده است. قطره کروی فرض شده و از انحلال پذیری گاز در مایع و اثرات شتاب گرانش صرف نظر شده است. نتایج مدل برای قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان درگستره های دمایی و فشاری گسترده اعتبارسنجی شدند و مطابقت خوبی با داده های تجربی موجود در ادبیات نشان دادند. اثر تغییرات فشار در دماهای مختلف بر تبخیر قطره بررسی شد. مشاهده شد که در یک دمای ثابت با افزایش فشار تا ۲ مگاپاسکال، عمر قطره افزایش یافته ولی افزایش فشار به ۲/۵ مگاپاسکال منجر به کاهش عمر قطره می شود. رفتار تبخیری قطره با ترکیبات مختلف تغییری نداشت. نقش معادلات حالت مختلف بر پیش بینی عمر قطره مطالعه شده و در نهایت تأثیر فشار و دمای محیط بر فوق بحرانی شدن دمای سطح قطره بررسی و مشاهده شد که در فشار و دمای به اندازه کافی زیاد قطره می تواند به حالت بحرانی برسد.

کلیدواژگان: تبخیر قطره، دوجزئی، فشار زیاد، فوگاسیتی، پنگ-رابینسون

مقدمه

تحقیقات تئوری در زمینه تبخیر افشانه^۱ و فرایندهای احتراقی دستگاه های مصرف کننده سوخت مایع معمولاً نیازمند محاسبه نرخ تبخیر قطرات است. تخمین مشخصه های مهم موتورهای احتراق داخلی، مانند میزان مصرف سوخت و تولید آلاینده ها، بستگی قابل توجهی به دقت مدل های ارائه شده برای تبخیر قطرات دارد. در اغلب این کاربردها، شرایط محیطی برای قطرات نزدیک یا وراء شرایط بحرانی آن هاست. مطالعه اولیه در زمینه تبخیر گذرا در شرایط فوق بحرانی توسط اسپالدینگ صورت گرفته است [۱]. در این مطالعه، تغییرات چگالی مایع نادیده گرفته شده و گاز ایدئال فرض شده است. تبخیر قطره تک جزئی کربن دی اکسید و هگزادکان در فشار زیاد با معادله حالت ردلیچ-کونگ به ترتیب توسط مانریک و بورمن [۲] و ماتلوز و همکاران [۳] مطالعه شد. کادوتا و هیرویاسو [۴] تبخیر هپتان در فشار زیاد را با دو فرض گاز ایدئال و معادله حالت ردلیچ-کونگ^۲ مطالعه کرده و دریافتند که استفاده از معادله حالت گاز ایدئال نتایج قابل قبولی ارائه نمی کند. ژو و آگاروال [۵] تبخیر قطره تک جزئی در محیط فوق بحرانی را به صورت عددی بررسی کردند. آن ها نقش معادلات حالت مختلف شامل ردلیچ-کونگ، سو-ردلیچ-کونگ^۳ و پنگ-رابینسون^۴ را بر مدل سازی تبخیر قطره مطالعه کرده و دریافتند که تحت شرایط محیطی مختلف استفاده از معادله حالت پنگ-رابینسون بهترین مطابقت را با داده های تجربی دارد. استفاده از این معادله حالت در مطالعات کرتیس و فارل [۶، ۷] و کیم و سانگ [۸] نیز دیده می شود.

1. Spray

2. Redlich-Kwong

3. Soave-Redlich and Kwong

4. Peng-Robinson

جین و بورمن [۹] مدلی برای تبخیر قطره چندجزئی در فشار زیاد با در نظر گرفتن جابه‌جایی اجباری در فاز گاز ارائه کردند و نشان دادند که با افزایش فشار محیط، اختلاف بین نرخ تبخیر اجزا کمتر می‌شود. تبخیر قطره دوجزئی به صورت گذرا در دما و فشار زیاد با در نظر گرفتن انحلال‌پذیری گاز در مایع و با استفاده از معادله حالت سو-دیلیچ-کونگ توسط استنگل و همکاران [۱۰] مطالعه شد. مطالعات آن‌ها برای مدل نفوذ محدود نشان می‌دهد که در دمای زیاد (۲۰۰۰ کلوین) با افزایش فشار، عمر قطره کاهش پیدا می‌کند، در حالی که در دمای متوسط (۸۰۰ کلوین) عمر قطره ابتدا افزایش و سپس کاهش پیدا خواهد کرد. نتایج مطالعات آگاروال و ژو [۱۱] روی قطرات تک‌جزئی و چندجزئی نشان می‌دهد که در فشار زیاد تبخیر قطره حساسیت بیشتری به مدل انتقال حرارت قطره نسبت به ترکیب آن دارد. برگر و همکاران [۱۲] تبخیر قطرات چندجزئی مانند کروسین، دیزل و بنزین را به کمک منحنی تقطیر مدل کرده و به منظور مطالعه در فشارهای مختلف، تاثیر گاز واقعی را لحاظ کرد. مدل‌سازی تبخیر قطره متحرک در فشار زیاد توسط ژانگ و همکاران [۱۳] انجام شد. آن‌ها دریافتند که وقتی فشار کاهیده محیط کمتر از ۲ باشد، میانگین ثابت تبخیر تابع خطی از تغییرات فشار است. در فشارهای بحرانی بزرگ‌تر، تغییرات ثابت تبخیر با فشار به سرعت جریان آزاد بستگی دارد. همچنین، عمر قطره با افزایش فشار محیط و یا افزایش سرعت اولیه جریان آزاد، کاهش می‌یابد. نتایج مطالعه لانگ و همکاران [۱۴]، برای شبیه‌سازی تبخیر قطره سوخت چندجزئی در دما و فشار زیاد، نشان داد که اثر تشعشع روی رفتار تبخیری قطره به قطر آن و دمای محیط وابسته است. تاثیر تغییر قطر قطره دوجزئی روی نرخ تبخیر در محیط آشفته تا فشار ۱۰ بار و دمای ۱۰۰ درجه سلسیوس توسط وروی و بیروک [۱۵] آزمایش شد. نتایج نشان می‌دهد که بین قطر اولیه قطره و نرخ تبخیر پایای آشفته رابطه خطی برقرار است. تبخیر افشانه و قطره چندجزئی در محیط آشفته و در دما و فشار زیاد با رهیافت شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) توسط سیریواستاوا و جابری [۱۶] مطالعه شد.

تحقیقات اخیر در حوزه تبخیر قطره در فشار زیاد با استفاده از معادله حالت پنگ-رابینسون صورت گرفته است. گائو و همکاران [۱۷] تبخیر قطره تک‌جزئی و چندجزئی را با فرض شبه‌پایا برای حل معادلات انرژی و بقای جزء در فاز گاز بررسی کرده و به صورت تجربی و عددی به مطالعه نرخ تبخیر و عمر قطره پرداختند. ری و همکاران [۱۸]، با در نظر گرفتن انحلال‌پذیری گاز محیط در قطره، تبخیر قطره سه‌جزئی را در فشار زیاد مطالعه کرده و تاثیر فشار، دما و ترکیب قطره را روی انحلال‌پذیری بررسی کردند. آنان [۱۹]، در مطالعه دیگر، تبخیر قطره دوجزئی را در فشار زیاد با در نظر گرفتن اثر گرانش و انحلال‌پذیری مطالعه کردند. نتایج نشان داد که افزایش سرعت نیتروژن در محیط سبب کاهش عمر قطره می‌شود. پیشتر، عرب‌خلج و همکاران [۲۰] تبخیر قطره چندجزئی را با رویکرد گذرا در فشار اتمسفریک مطالعه کردند. از آنجایی که در اغلب کاربردها قطرات در محیطی با فشار و دمای نزدیک یا فراتر از بحرانی تبخیر می‌شوند، در این مقاله، با ادامه کار آنان، به مطالعه این موضوع و تفسیر چگونگی فرایند تبخیر در چنین شرایطی پرداخته شد.

تبخیر قطرات دوجزئی در فشار زیاد در مطالعات محدودی دیده شد. با وجود این، جزئیات تغییرات شرایط ترمودینامیکی در قطره و پیرامون آن به صورت عمومی مطرح نشده است. از این رو، برای هر ترکیبی از قطره لازم است تا شرایط منحصر به آن بررسی شود. برای دست‌یابی به دید کلی در این موضوع، تبخیر یک قطره دوجزئی با تفاوت زیاد در فراریت مطالعه شده است. به‌طور ویژه، در این مطالعه، به کمک معادله حالت مناسب و با انتخاب خواص ترموفیزیکی متناسب با محدوده دما و فشار مدنظر، اعتبارسنجی مدل در محدوده وسیعی صورت گرفته است. تاثیر دما و فشار محیط و ترکیب قطره بر عمر آن بررسی شده و شرایط محیطی لازم برای تبخیر فوق بحرانی قطرات دوجزئی به خوبی بیان شده است.

معادلات حاکم

در این بخش، معادلات حاکم بر تبخیر قطره، در محیطی شامل نیتروژن ساکن، با رویکرد گذرا براساس معادلات ارائه‌شده در مرجع [۲۱] توضیح داده شده است. سیستم یک‌بعدی و متقارن و کروی بوده و از اثرات دوفور و سورت، شتاب گرانش و نفوذ فاز گاز به فاز مایع صرف نظر شده است. در سطح مشترک مایع و بخار، تعادل ترمودینامیکی برقرار بوده و برای در نظر گرفتن

نفوذ جرم و گرما به ترتیب از قانون فیک و فوریه استفاده شده است. ذکر این نکته لازم است که خواص ترموفیزیکی تابعی از فشار و دما در نظر گرفته شدند.

فاز گاز

دامنه مطالعه شده از مرکز قطره تا فاصله بسیار زیاد آن گسترده در نظر گرفته شده است. قطره با شعاع لحظه‌ای r_s مرز بین فاز مایع و فاز گاز را جدا می‌کند. معادلات حاکم در فاز گازی ($r > r_s$) به شرح زیر است.

$$\frac{\partial \rho_{kg}}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_{kg} u r^2) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho_g D_{kg} r^2 \frac{\partial}{\partial r} (Y_{kg}) \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_g u}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_g u r^2) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_g r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_g h_g}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_g h_g u r^2) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_g r^2 \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \rho_g \sum_{k=1}^{N_g} (D_{kg} h_{kg} \frac{\partial}{\partial r} (Y_{kg})) \quad (3)$$

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + u_1 b V + u_2 b^2} \quad (4)$$

معادله (۱) بقای جزء، معادله (۲) بقای تکانه، معادله (۳) بقای انرژی و معادله (۴) شکل عمومی معادله حالت مکعبی برای گاز واقعی است. در این معادلات، N_g تعداد اجزای فاز گاز، t نماینده زمان، r نشان‌دهنده مکان، u سرعت فاز گاز، ρ_{kg} و h_{kg} به ترتیب چگالی، ضریب نفوذ و آنتالپی جزء k ام در فاز گاز، μ_g ضریب گرانشی، k_g ضریب هدایت حرارتی و h_g آنتالپی مخلوط گاز است. مجهولات آن‌ها نیز T_g ، u و $\frac{\rho_k}{\rho} = Y_{kg}$ به ترتیب دما، سرعت و کسر جرمی در فاز گازند. ضرایب a ، b ، u_1 و u_2 در معادله (۴)، برای معادلات حالت مختلف در مرجع [۲۲] موجودند.

فاز مایع

در فاز مایع، ($r < r_s$) معادله انرژی و بقای جزء، به ترتیب، به صورت روابط (۵) و (۶) است.

$$\frac{\partial \rho_{lk}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho_l D_l r^2 \frac{\partial}{\partial r} (Y_{lk}) \right), \quad k=1, \dots, N_l \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho_l C_{pl} T_l}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_l r^2 \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \sum_{k=1}^{N_l} \rho_l D_{kl} h_k \frac{\partial}{\partial r} (Y_{kl}) \right) \quad (6)$$

که در آن N_l تعداد اجزای فاز مایع، C_{pl} ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت بوده و مجهولات این معادلات کسر جرمی فاز مایع و دمای قطره T_l است. معادله تکانه در فاز مایع، به دلیل در نظر گرفتن سرعت داخل قطره، حل نمی‌شود.

شرایط مرزی و اولیه

طرحواره از قطره و محیط اطراف آن در شکل ۱ نشان داده شده است. در مرکز قطره ($r=0$)، گرادیان دما و گرادیان غلظت صفر است ($\frac{\partial Y_{kl}}{\partial r} = 0$ و $\frac{\partial T_l}{\partial r} = 0$). در فواصل خیلی دورتر از سطح ($r=\infty$) نیز شرایط $u=0$ ، $Y_{N_2} \rightarrow 1$ ، $Y_{O_2} \rightarrow 0$ ، $P \rightarrow P_\infty$ و $T \rightarrow T_\infty$ برقرار است. در سطح قطره ($r=r_s$)، برای برقراری تعادل جرم و انرژی به ترتیب از روابط (۷) و (۸) استفاده می‌شود [۲۱].

$$\dot{m} Y_{kl} - \rho_l D_{kl} A_s \frac{\partial Y_{kl}}{\partial r} \Big|_{r=r_s^-} = \dot{m} Y_{kg} - \rho_g D_{kg} A_s \frac{\partial Y_{kg}}{\partial r} \Big|_{r=r_s^+} \quad (7)$$

$$-K_l \frac{\partial T_l}{\partial r} \Big|_{r=r_s^-} A_s = -K_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r=r_s^+} A_s + \sum_{k=1}^N \left(\dot{m} Y_{kg} - \rho_g D_{kg} \frac{\partial Y_{kg}}{\partial r} \Big|_{r=r_s^+} \right) \Delta H_{vk} - a \sigma (T_\infty^4 - T_s^4) A_s \quad (8)$$

که در آن Y_{kl} و Y_{kg} به ترتیب کسر جرمی فاز گاز و فاز مایع، A_s مساحت سطح قطره در هر لحظه، K_l ضریب هدایت حرارتی فاز مایع، σ ثابت استفان-بولتزمن و a ضریب جذب سطح است. این ضریب تابعی از دما و قطر قطره و نوع سوخت بوده [۲۳، ۲۴] و در کار حاضر بین ۰.۷ تا ۰.۹ انتخاب شده است. تنها مجهول این معادلات $\dot{m}$ است.

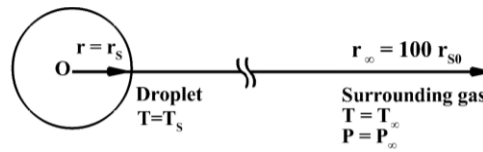


Figure 1- Schematic of droplet and environment

شکل ۱- طرحواره قطره و محیط اطراف

تبادل فاز بخار و مایع

فرض برقراری تعادل فاز روی سطح قطره به منظور تعیین کسر جرمی بخار سوخت در فاز گاز است. در فشار کم، رفتار گاز و مایع ایدئال بوده و تعادل فاز از قانون راولت (رابطه ۹)) پیروی می کند. طبق این قانون، بخار سوخت در مجاورت قطره در حالت اشباع قرار دارد و کسر مولی هر جزء به کمک فشار بخار آن در دمای سطح قطره تعیین می شود [۲۵].

$$Y_{is} = X_{is} \frac{P_{vpi}}{P_{\infty}} \quad (9)$$

در این رابطه، P_{vpi} فشار اشباع جزء i ، P_{∞} فشار محیط، X کسر مولی فاز مایع و Y کسر مولی فاز گاز است. در فشارهای زیاد، رفتار مخلوط مایع از حالت ایدئال فاصله گرفته و در نتیجه استفاده از رابطه بالا مناسب نیست. به طور کلی، برای برقراری تعادل ترمودینامیکی روی سطح قطره، باید دما، فشار و فوگاسیتی هر جزء در فاز مایع و گاز باهم برابر باشند. برای محاسبه ضریب فوگاسیتی از معادله حالت پنگ-رابینسون استفاده شده است. بدین منظور، ابتدا با معلوم بودن کسر مولی فاز مایع در سطح از رابطه (۹) تقریب اولیه برای کسر مولی سطح در فاز گاز به دست می آید. سپس، مطابق رابطه (۱۰) ضریب تراکم پذیری هم برای مخلوط گاز و هم برای مخلوط مایع در سطح قطره محاسبه می شود. جزئیات و ضرایب مورد استفاده در مرجع [۲۶] موجودند. سپس، ضریب فوگاسیتی برای هر جزء در هر فاز از رابطه (۱۱) حساب می شود [۲۲].

$$Z^3 - (1 - B - u_1 B) Z^2 + (A + u_2 B^2 - u_1 B - u_1 B^2) Z - AB - u_2 B^2 - u_2 B^3 = 0, \quad A = \frac{aP}{R^2 T^2}, \quad B = \frac{bP}{RT} \quad (10)$$

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b_m} (Z_m - 1) - \ln(Z_m - B_m) - \frac{A_m}{B_m \sqrt{8}} \times \left(\frac{b_i}{b_m} - \delta_i \right) \times \ln \left(\frac{2Z + (1 + \sqrt{2})B_m}{2Z + (1 - \sqrt{2})B_m} \right) \quad (11)$$

$$\delta_i = \frac{2\sqrt{a_i}}{a_m} \sum_j X_j a_j^{\frac{1}{2}} (1 - \bar{k}_{ij}) \quad (12)$$

ضرایب روابط بالا مشابه ضرایب رابطه (۱۰) و قاعده اختلاط آن تعریف می شود. همچنین، $\bar{k}_{ij}$ ضریب اندرکنش دوتایی است که برای مواد مختلف در جداول مرجع [۲۶] موجود است. در نهایت با برابر قراردادن فوگاسیتی دو فاز در سطح مطابق رابطه (۱۳) کسر مولی فاز گاز تعیین می شود.

$$Y_i \phi^v = X_i \phi^l \quad (13)$$

کسر مولی جزء آخر در فاز گاز از رابطه (۱۴) محاسبه می شود.

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (14)$$

بعد از محاسبه نرخ تبخیر سرعت گاز روی سطح قطره از رابطه (۱۵) تعیین می شود.

$$\dot{m} = \rho_g A_s \left(u - \frac{dR(t)}{dt} \right) \Big|_{r=r_s^+} \quad (15)$$

برای محاسبه شعاع در هر لحظه از رابطه (۱۶) استفاده می شود.

$$\frac{dR(t)}{dt} = \frac{-\dot{m}}{4\pi R^2 \rho_{lm}} + \frac{R(t)}{3\rho_{lm}} \frac{d\rho_{lm}}{dt} \quad (16)$$

در سمت راست این رابطه، عبارت اول نشان دهنده نقش تبخیر روی کاهش شعاع قطره بوده و عبارت دوم تاثیر تغییرات چگالی را نشان می دهد. شایان ذکر است که انبساط حرارتی توسط ترم دوم لحاظ شده است.

به عنوان شرط اولیه، برای فشار و دمای قطره مایع و گاز محیط مقادیر مشخصی انتخاب شده و ترکیب محیط نیز نیتروژن در نظر گرفته شده است.

$$\begin{cases} r \leq R(t): & T_l = T_0 \\ r \geq R(t): & T_g = T_\infty, Y_{g-fuel} = 0, Y_{N_2} = 1, u = 0 \end{cases} \quad (17)$$

خواص فاز مایع و گاز

خواص مورد استفاده برای هر جزء در فاز گاز شامل چگالی، ظرفیت گرمایی ویژه، آنتالپی، لزجت، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ است. در فاز مایع، علاوه بر خواص یادشده در فاز گاز، فشار بخار و گرمای نهان تبخیر نیز مورد نیاز است. روش محاسبه این خواص، با ذکر مرجع، در جدول ۱ ذکر شده است.

جدول ۱- خواص فاز گاز و مایع

Table 1- Gas and liquid properties

Property	Rules
Gas Phase	
Density	Peng-Robinson EOS [26]
Specific heat	Low pressure from NASA polynomial [27] and high pressure from Lee -Kesler [28]
Enthalpy	Lee -Kesler [28]
Viscosity	Chung method [25]
Thermal Conductivity	Low pressure from NASA polynomial [29] and high pressure from Lee -Kesler [28]
Diffusion	Chapman-Enskog method [25]
Liquid phase	
Density	Alto method [25]
Specific heat	Bondi method [28]
Viscosity	From API-TDB [26]
Thermal Conductivity	From [26]
Diffusion	From Wilke-Chung method [25]
Vapor pressure	Antoin equation [25]
Latent heat	From [25]

روابط مورد استفاده برای محاسبه خواص مخلوط در فاز مایع و گاز به شرح زیرند.

فاز گاز

$$\rho_m = \frac{PM_m}{Z_m RT} \quad (18)$$

لزجت و ضریب هدایت حرارتی مخلوط گاز از روش چانگ و همکاران [۲۵] و ظرفیت حرارتی ویژه از روش لی-کسلر [۲۸] محاسبه می شود.

فاز مایع

$$V_m = V_{s,m} \frac{AP_{c,m} + C^{(D-T_{r,m})^B} (P - P_{vp})}{AP_{c,m} + C(P - P_{vp})}, \quad \rho_m = \frac{I}{V_m} \quad (19)$$

$$C_{pl,m} = \sum_{i=1}^N X_{l,i} C_{pl,i} \quad (20)$$

$$\ln \mu_m^l = \sum_{i=1}^N X_{l,i} \ln \mu_i^l \quad (21)$$

$$K_m^l = \sqrt{\frac{I}{\sum_{i=1}^N \frac{X_{l,i}}{(K_i^l)^2}}} \quad (22)$$

الگوریتم حل

ابتدا، به علت عدم برابری تعداد مجهولات با معادلات، باید فرضیات اولیه‌ای به مسئله وارد شود. به همین دلیل، ابتدا، دمای سطح قطره و دبی تبخیر حدس زده شده است که این حدس در مراحل بعدی اصلاح می‌شود. در کنار این حدس به تمامی مجهولات مسئله یک مقدار اولیه معقول نیز نسبت داده می‌شود. در گام بعدی، خواص مورد نیاز برای حل معادلات مانند چگالی و ضریب نفوذ و ضریب هدایت و لزجت با دمای اولیه به دست آورده می‌شود. سپس، تغییر شعاع اولیه با این خواص محاسبه شده و وارد معادله بقای فاز گاز می‌شود و در آنجا کسر جرمی اجزای مختلف فاز گاز محاسبه شده و بنابر قانون پایستگی جرم، کسر جرمی جزء آخر (نیترژن) به دست می‌آید. پس از آن، دبی تبخیر حدس زده شده با داشتن مقادیر معلوم اصلاح می‌شود. در ادامه، سرعت فاز گاز با حل معادله تکانه، کسر جرمی اجزای مختلف فاز مایع با حل معادله بقای جزء و دمای مایع با حل معادله انرژی در فاز مایع به دست می‌آید. در این مرحله، دمای سطح مایع، که حدس زده شده بود، اصلاح می‌شود. حال، با بررسی تفاوت مقادیر به دست آمده با حدس‌های اولیه، در صورت عدم تطابق، با جایگزینی مقادیر به دست آمده به عنوان حدس اولیه، مجدداً، روند حل تکرار می‌شود و در صورت نزدیکی آن‌ها وارد گام زمانی بعدی می‌شود [۳۰]. همین روند تا زمانی که نسبت مربع شعاع قطره به شعاع اولیه‌اش برابر 0.05 برسد یا دما به دمای بحرانی مخلوط برسد، ادامه پیدا می‌کند. فلوچارت الگوریتم حل در شکل ۲ نشان داده شده است.

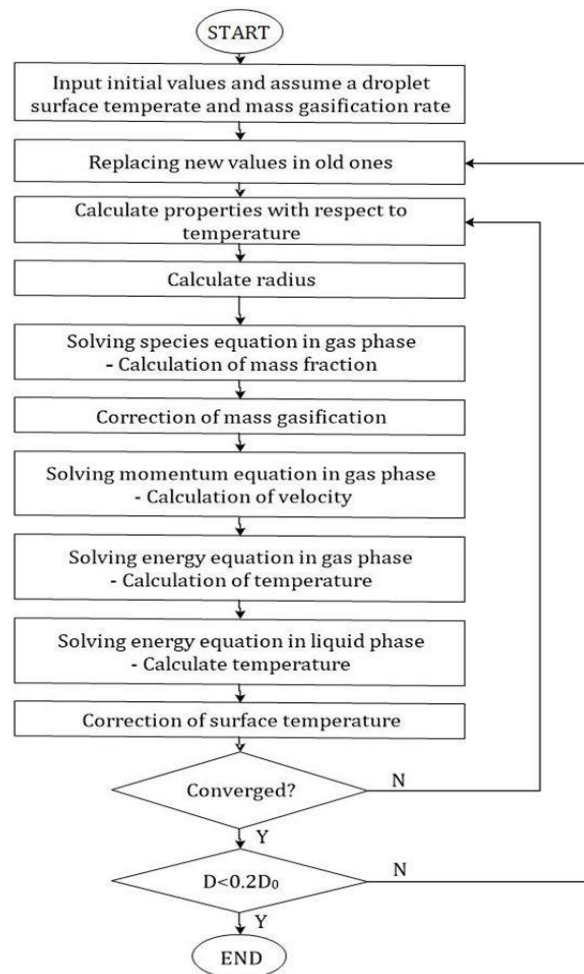


Figure 2- Flowchart of the droplet evaporation model [20]

شکل ۲- الگوریتم حل تبخیر قطره [۲۰]

معیار همگرایی برای دمای سطح $|T_s - T_{s-old}|/T_s < 10^{-4}$ و برای نرخ تبخیر $|\dot{m} - \dot{m}_{old}|/\dot{m}_{old} < 10^{-4}$ است. در ادامه روند حل مقادیر به دست آمده با مقادیر حدس زده شده مقایسه می شوند و در صورت قرار گرفتن در محدوده معیار همگرایی، کد وارد گام زمانی بعدی می شود. این روند حل تا زمانی ادامه پیدا می کند که مربع نسبت قطر قطره به قطر اولیه آن ۰/۰۵ شود و یا دمای قطره به دمای بحرانی مخلوط برسد. دمای بحرانی مخلوط با تعریف پارامتر $\phi_j = \frac{Y_j V_{cj}}{\sum_i Y_i V_{ci}}$ که در آن Y_j کسر مولی، V_{cj} حجم ویژه بحرانی و T_{Cj} دمای بحرانی جزء j ام است، از رابطه (۲۳) محاسبه می شود [۲۲].

$$T_{CT} = \sum_j \phi_j T_{Cj} \quad (23)$$

گام زمانی کمتر از ۰/۰۱ ثانیه، بسته به مورد، انتخاب شده و تعداد گره های محاسباتی برای فاز مایع ۱۰۰ گره یکنواخت و برای فاز گاز ۷۰۰ گره نایکنواخت در نظر گرفته شده است. همچنین، معادلات دیفرانسیلی حاکم با رویکرد حجم محدود گسسته سازی و با روش بادسو مرتبه اول حل شده اند [۳۱]. این روش نسبت به سایر روش ها ساده تر بوده و زمان محاسبات کوچک تری داشته، در عین حال، با توجه به یکنوایی اغلب مولفه های پاسخ در میدان، از دقت بسیار خوبی نیز برخوردار است. مجموعه معادلات حاکم و زیرمدل های انتخابی، در یک برنامه به زبان فورتن، یک پارچه شده است و از هیچ گونه کد یا نرم افزار تجاری استفاده نشده است.

استقلال از شبکه

به منظور ارزیابی استقلال از شبکه، تبخیر قطره دوجزئی هپتان و هگزادکان با درصد حجمی ۵۰-۵۰ در دمای ۸۷۳ کلین و فشار ۱ مگاپاسکال، شبکه هایی با تعداد ۲۵، ۵۰، ۱۰۰ و ۲۰۰ در فاز مایع و ۱۷۵، ۳۵۰، ۷۰۰ و ۱۴۰۰ در فاز گاز بررسی شدند. همان طور که در شکل ۳ مشخص است، با تغییر اندازه در شبکه از ۱۰۰-۷۰۰ به ۲۰۰-۱۴۰۰ حداکثر میزان اختلاف ۱/۰۶ درصد خواهد شد. به دلیل کمربودن زمان محاسبات، شبکه ۱۰۰-۷۰۰ برای مطالعات انتخاب شده است.

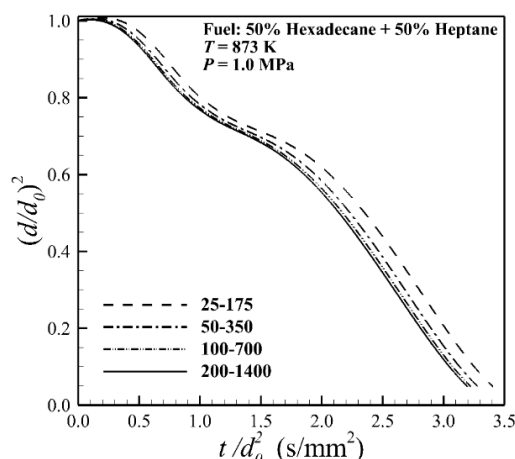


Figure 3- Mesh independency study for a bi-component droplet consists of 50% heptane and 50% hexadecane

شکل ۳) استقلال از شبکه برای قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان

اعتبارسنجی

اعتبارسنجی تبخیر قطره دوجزئی هپتان- هگزادکان با داده های تجربی قاسمی و همکاران [۳۲] به سه صورت انجام گرفته است. در حالت اول، تبخیر قطره دوجزئی با درصد حجمی ثابت ۵۰-۵۰، به قطر ۱/۱ میلی متر و در دمای ثابت ۶۰۰ درجه سلسیوس در فشارهای ۰/۵، ۱، ۱/۵، ۲ و ۲/۵ مگاپاسکال بررسی می شود. همان طور که در شکل ۴ مشخص است، مدل حاضر علاوه بر عمر، فرایند تبخیر را نیز به خوبی نشان می دهد.

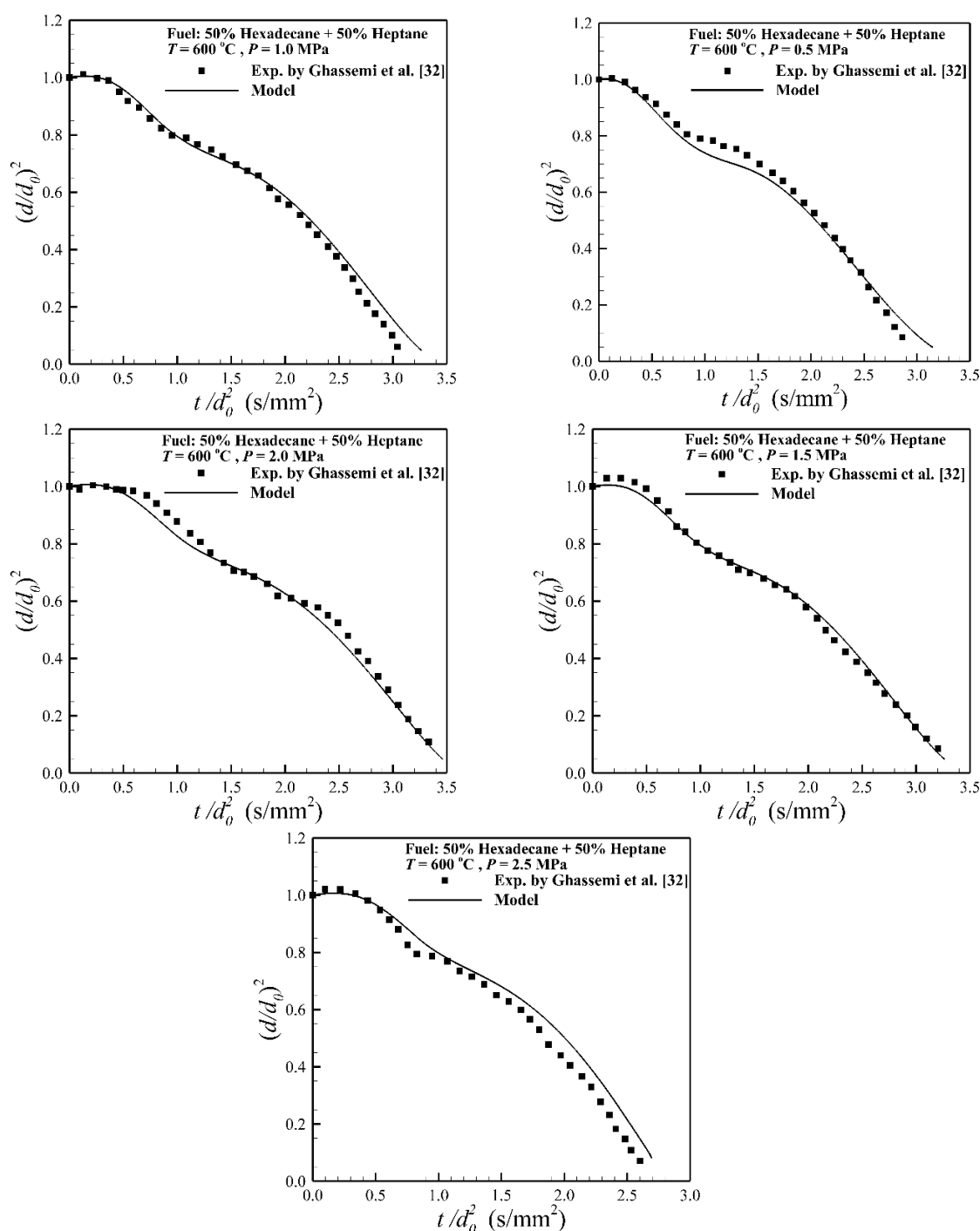


Figure 4- Comparison of a bi-component droplet lifetime consists of 50% heptane and 50% hexadecane with the experiment of Ghassemi et al [32] at $T = 600^{\circ}\text{C}$ and different pressures

شکل ۴- مقایسه عمر قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان با داده‌های تجربی قاسمی [۳۲] در $T=600^{\circ}\text{C}$ و فشارهای مختلف

دومین حالت در اعتبارسنجی مدل حاضر مربوط به تبخیر در فشار ثابت ۱ مگاپاسکال و همان ترکیب در دماهای ۴۰۰، ۵۰۰، ۶۰۰ و ۷۰۰ درجه سلسیوس است. نتایج این حالت در شکل ۵ نشان داده شده است.

با توجه به این نمودارها می‌توان فرایند تبخیر قطرات دوجزئی را به سه مرحله تقسیم کرد که در آن نرخ تبخیر به ترتیب توسط جزء سبک‌تر (در اینجا هپتان)، هر دو جزء و سپس جزء سنگین‌تر (در اینجا هگزادکان) کنترل می‌شود. اولین مرحله شامل گرمایش اولیه و تبخیر جزء فرارتر (هپتان) است. در بازه زمانی گرمایش اولیه، با افزایش دمای قطره، چگالی آن کاهش یافته و سبب افزایش حجم قطره می‌شود. سپس، تبخیر شروع شده و حجم قطره کاهش می‌یابد.

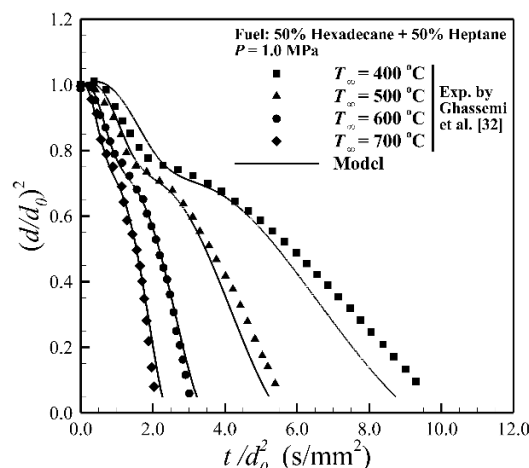


Figure 5- Comparison of a bi-component droplet lifetime consists of 50% heptane and 50% hexadecane with the experiment of Ghassemi et al [32] at $P = 1 \text{ MPa}$ and different temperatures

شکل ۵- مقایسه عمر قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان با داده‌های تجربی قاسمی [۳۲] در فشار ۱ مگاپاسکال و دماهای مختلف

بعد از اطمینان از صحت کد در شرایط دمایی و فشاری مختلف، لازم است تا این صحت‌سنجی در ترکیب‌های مختلف اجزای سازنده قطره نیز انجام شود. به همین منظور، نمودار عمر قطره دوجزئی هپتان و هگزادکان در درصد حجمی‌های مختلف در دمای ۶۰۰ درجه سلسیوس و فشار ۱ مگاپاسکال برای قطره‌ای به قطر ۱/۱ میلی‌متر در شکل ۶ آورده شده است. همان‌طور که در این شکل مشخص است، رفتار تبخیر و عمر قطره در درصد حجمی‌های مختلف به‌خوبی با داده‌های تجربی مطابقت دارد.

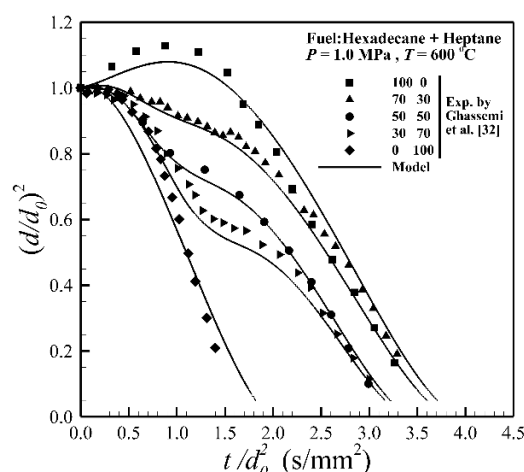


Figure 6- Comparison of a bi-component droplet lifetime consists of heptane and hexadecane with the experiment of Ghassemi et al [32] at constant temperature and pressure with different compositions

شکل ۶- مقایسه عمر قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان با داده‌های تجربی قاسمی [۳۲] در دما و فشار ثابت با ترکیبات مختلف

نتایج و بحث

در زیر نتایج مطالعات، تاثیر فشار و دمای محیط و همچنین ترکیب قطره بر عمر آن ارائه شده است. علاوه بر این، نقش معادله حالت در این مطالعه با انتخاب سه معادله حالت مکعبی مطرح بررسی شده است. همچنین، اثر فشار و دمای محیط بر بحرانی شدن شرایط قطره مطالعه شده است.

تاثیر فشار و دمای محیط بر عمر قطره

دما و فشار محیط دو عامل مهمی اند که روی عمر قطره تاثیرگذارند. اثر این عوامل در تبخیر قطره‌ای از نسبت مساوی هپتان-هگزادکان مطالعه شده است. همان‌طور که در شکل ۷ نشان داده شده است، ارتباط عمر قطره با فشار لزوماً خطی نیست، ولی روند مشخصی دارد، به‌طوری که با افزایش فشار تا ۲ مگاپاسکال، با کاهش نفوذ جرم و نرخ تبخیر، در تمامی دماهای مطالعه شده عمر قطره افزایش پیدا کرده و پس از آن برای فشار بالاتر (۲/۵ مگاپاسکال) با کاهش کشش سطحی [۳۲] و گرمای نهان تبخیر، نرخ تبخیر افزایش یافته و عمر قطره کاهش می‌یابد. تغییرات نرخ تبخیر با زمان در دمای ۸۷۳ کلوین در شکل ۸ نشان داده شده است.

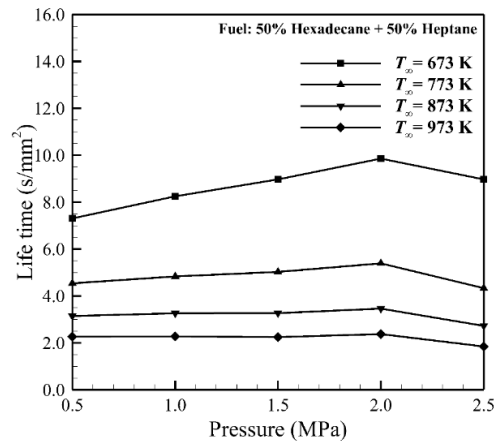


Figure 7- Changes in the lifetime of a bi-component droplet consists of 50% heptane and 50% hexadecane with pressure at different ambient temperatures

شکل ۷- تغییرات عمر قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان با فشار در دماهای مختلف

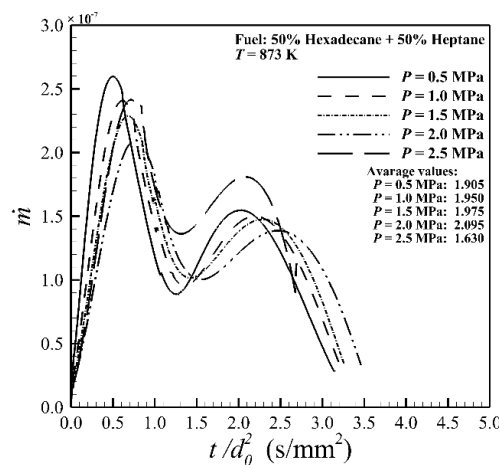


Figure 8- Changes in the evaporation rate of a bi-component droplet consists of 50% heptane and 50% hexadecane with normalized time at $T = 873 \text{ K}$ and different ambient pressures

شکل ۸- تغییرات نرخ تبخیر قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان با زمان نرمال شده در دمای ۸۷۳K و فشارهای مختلف

ذکر این نکته لازم است که مقدار میانگین این تغییرات مثبت و افزایشی-کاهشی است، در حالی که طبق رابطه (۱۶) قرینه نرخ تبخیر در محاسبه شعاع استفاده شده و سبب تغییرات عمر مطابق روند یادشده می‌شود. این عدم یکنواختی تغییرات عمر قطره با فشار در مطالعات تجربی قاسمی و همکاران [۳۲] نیز مشاهده شده است. در این مطالعه تجربی نیز، با گذر از فشار ۲ مگاپاسکال در دمای ثابت ۸۷۳ کلوین، تغییر روند در عمر قطرات دوجزئی مشاهده شده است.

تغییرات عمر با فشار در دماهای کمتر محسوس‌تر است، به گونه‌ای که در دماهای بیشتر با افزایش فشار، عمر قطره تقریباً ثابت باقی می‌ماند. از این رو، می‌توان گفت، در دماهای بالا، تاثیر دما از فشار به مراتب بیشتر است. در یک فشار ثابت با افزایش دما، میزان تغییرات عمر قطره کاهش می‌یابد، به طوری که در فشار ۱٫۵ مگاپاسکال، با افزایش دما از ۶۷۳ به ۷۷۳ کلوین، عمر قطره ۴۴٪ کاهش یافته، اما در همین فشار با افزایش دما از ۸۷۳ به ۹۷۳ کلوین، عمر قطره ۳۱٪ کاهش می‌یابد.

طبق رابطه (۷)، نرخ تبخیر متأثر از پدیده نفوذ در فاز مایع و گاز است. ابتدا، توزیع اجزا در فاز مایع یکنواخت بوده، ولی به دلیل اختلاف فراریت بین آن‌ها، با تبخیر هپتان، گرادیان غلظت به وجود آمده داخل قطره سبب نفوذ اجزا در داخل قطره می‌شود. این پدیده در گازها قوی‌تر از مایعات بوده و با توجه به اهمیت بیشتر چگالی در قانون نفوذ فیک، روند مشاهده شده در تغییرات نرخ تبخیر ناشی از نحوه تغییرات چگالی بوده که به تغییرات فشار بخار اجزا وابسته است. برای تفسیر این فرایند، تغییرات چگالی اجزای سوخت در فاز گاز، مخلوط آن‌ها با نیتروژن و کسر جرمی اجزا در هر دو فاز روی سطح قطره در فشار ۱ مگاپاسکال و دمای ۸۷۳ کلوین در شکل ۹ رسم شده است.

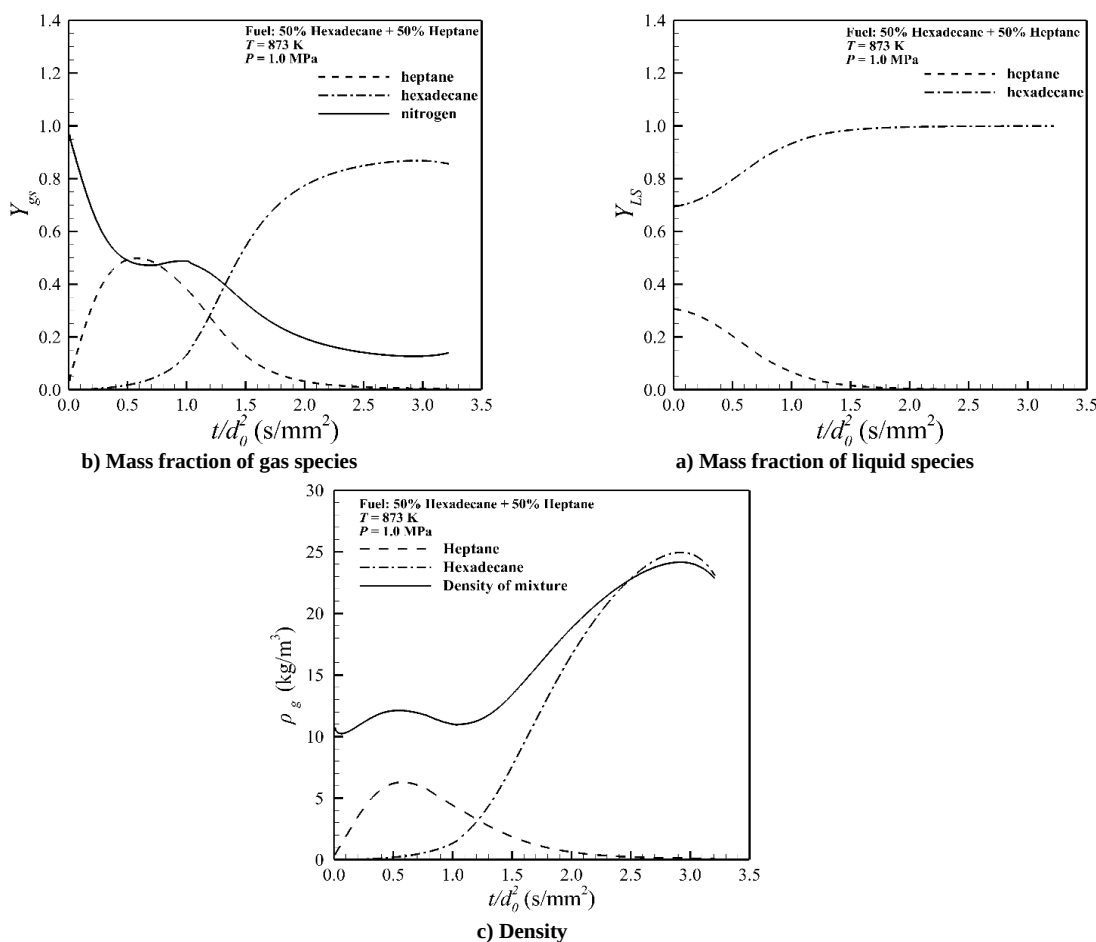


Figure 9- Density of gas phase and mass fraction of species in the liquid phase and the gas phase at the droplet surface with normalized time

شکل ۹- چگالی فاز گاز و کسر جرمی اجزا در فاز مایع و گاز با زمان نرمال شده در سطح قطره

طبق شکل ۹-ب، تا زمان $0.5 \frac{\text{S}}{\text{mm}^2}$ هپتان به تنهایی در حال تبخیر بوده و هگزادکان در مرحله گرمایش اولیه قرار دارد. بنابراین، با افزایش کسر جرمی هپتان، چگالی نیز افزایش پیدا می‌کند. سپس، با تبخیر هگزادکان و اتمام تدریجی هپتان در فاز مایع (شکل ۹-الف) به مرور فشار جزئی (چگالی) هپتان در حال کاهش بوده و عکس این فرایند برای هگزادکان رخ می‌دهد. پس از نفوذ کامل بخارهای هپتان در محیط اطراف، بخار هگزادکان روی سطح قطره را فرا گرفته و با ثابت ماندن فشار، افزایش دمای قطره منجر به کاهش چگالی و در نتیجه نرخ تبخیر می‌شود.

تأثیر تغییر ترکیب قطره و فشار محیط روی عمر قطره

به منظور بررسی تأثیر تغییر ترکیب روی عمر قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان به قطر $1/1$ میلی‌متر در دمای 600 درجه سلسیوس، مطالعات در سه فشار 0.5 ، 1 و 2 مگاپاسکال با درصد حجمی‌های $30-70$ ، $50-50$ و $70-30$ به ترتیب برای هپتان و هگزادکان انجام شده و نتایج در شکل ۱۰ نشان داده شده است. با تغییر فشار، رفتار تبخیر قطره یکسان است و با افزایش درصد جزء فرارتر (هپتان)، شیب نمودار در مرحله اول تبخیر بیشتر می‌شود، اما شیب نمودار در مرحله سوم تبخیر (مرحله‌ای که هگزادکان کنترل‌کننده است) در تمامی ترکیب‌ها یکسان است. زیرا، همواره قبل از رسیدن به این مرحله هپتان کاملاً تبخیر شده و در مرحله سوم هگزادکان تبخیر می‌شود. از طرفی، با توجه به شکل ۴، نرخ تبخیر هگزادکان در این مرحله با تغییر فشار ثابت مانده است. همچنین، مانند بخش قبل، در دمای ثابت، با افزایش فشار تا 2 مگاپاسکال، عمر قطره افزایش پیدا کرده و ترکیب قطره روی این ویژگی تأثیری ندارد. در یک فشار ثابت، با افزایش درصد هگزادکان، به دلیل فراریت کمتر آن، عمر قطره افزایش یافته است.

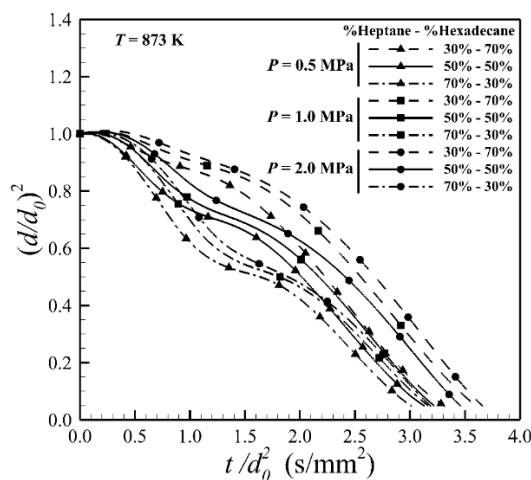


Figure 10- Changes in the lifetime of a bi-component droplet consists of heptane and hexadecane with pressure and composition at constant temperature

شکل ۱۰- تغییرات عمر قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان با تغییر فشار و ترکیب در دمای ثابت

نقش معادله حالت

به منظور بررسی نقش معادله حالت در شبیه‌سازی فرایند تبخیر قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان با درصد حجمی $50-50$ ، در فشار 1 مگاپاسکال و دمای 873 کلوین، فوگاسیتی و چگالی با معادلات حالت پنگ-رابینسون (PR)، ردلیچ-کوونگ (RK) و سو-ردلیچ-کوونگ (SRK) محاسبه شده‌اند. تغییر مساحت بی‌بعدشده با زمان در شکل ۱۱ نشان داده شده است. با تغییر معادله حالت، علاوه بر اینکه رفتار تبخیری قطره از حالت واقعی خود فاصله می‌گیرد، معادله حالت RK مراحل سه‌گانه تبخیر را نیز به درستی نشان نداده و تبخیر قطره را همانند تبخیر قطره‌های تک‌جزئی مدل می‌کند. همان‌طور که در

مطالعات ژو و آگاروال [۵] نیز آورده شده، تغییر معادله حالت سبب تغییر نرخ تبخیر شده و در نتیجه عمر قطره را کمتر از مقدار واقعی آن پیش‌بینی می‌کند. بنابراین، مشخص است که معادله حالت پنگ-راینسون بهترین نتیجه را برای مدل‌سازی تبخیر قطرات در فشار زیاد دارد.

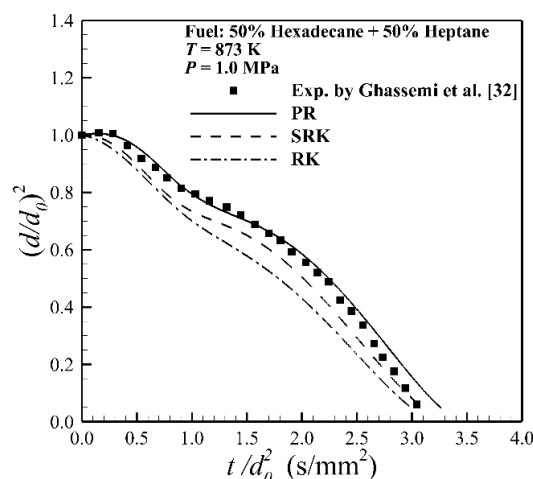


Figure 11- Changes in the droplet lifetime with equation of state

شکل ۱۱- تغییرات عمر قطره با تغییر معادله حالت

تأثیر فشار و دمای محیط بر بحرانی شدن دمای سطح

این مطالعه بر یک مخلوط حجمی ۵۰-۵۰ از دو سوخت هپتان و هگزادکان تمرکز دارد. برخی از ویژگی‌های شاخص این سوخت‌ها در جدول ۲ آمده است. با مشاهده جرم مولکولی، می‌توان گفت که هگزادکان به‌عنوان سوخت سنگین‌تر و هپتان به - عنوان سوخت سبک‌تر ایفای نقش می‌کنند.

جدول ۲- ویژگی سوخت‌ها [۲۵]

Table 2- Properties of fuels [25]

Fuel	Chemical formula	Molecular mass (g/mole)	Critical temperature (K)	Critical pressure (MPa)
Heptane	C ₇ H ₁₆	100.2	540.2	2.7
Hexadecane	C ₁₆ H ₃₄	226.45	723.0	1.4

در قطره‌های چندجزئی، به‌منظور بررسی شرایط مورد نیاز برای بحرانی شدن دمای سطح قطره، دما و فشار بحرانی مخلوط تعریف می‌شوند [۲۲]. فشار بحرانی مخلوط از رابطه (۲۴) محاسبه می‌شود که در این رابطه ω ضریب بی‌مرکزی بوده و P^* و T^* از روابط موجود در مرجع [۲۲] تعیین می‌شوند. همان‌طور که از روابط (۲۳) و (۲۴) مشخص است، دما و فشار بحرانی مخلوط عمدتاً تابعی از ترکیب قطره‌ها، ترکیب آن نیز عوض می‌شود و با اختیار کسر مولی اجزا در سطح قطره، دما و فشار بحرانی به‌کمک معادلات (۲۳) و (۲۴) به‌دست آمده و در شکل‌های ۱۲ و ۱۳، در طول زمان تبخیر نشان داده شده‌اند. این نتایج نشان می‌دهند که در یک دمای ثابت با تغییر فشار و یا در یک فشار ثابت با تغییر دما، محدوده تغییرات آن‌ها باریک و محدود به ۵۰ کلوین و ۱/۲ مگاپاسکال است.

$$P_{CT} = P^* \left[1 + (5.808 + 4.93\omega) \left(\frac{T_{CT}}{T^*} - 1 \right) \right] \quad (24)$$

محدوده تغییرات دمای بحرانی مخلوط برای قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان با زمان نرمال‌شده، بین ۶۷۰ تا ۷۲۲/۶ کلوین است. وقتی دمای محیط ۷۷۳، ۸۷۳ و ۹۷۳ کلوین باشد، قطره در محیطی با دمای بیشتر از دمای

بحرانی مخلوط خود قرار می‌گیرد. ذکر این نکته لازم است که در دمای ۶۷۳ کلوین، قطره ابتدا در محیطی با دمای بیشتر از دمای بحرانی مخلوط است، اما، طبق شکل ۱۲، با گذشت اندک زمانی، این دما افزایش یافته و از ۶۷۳ بیشتر می‌شود.

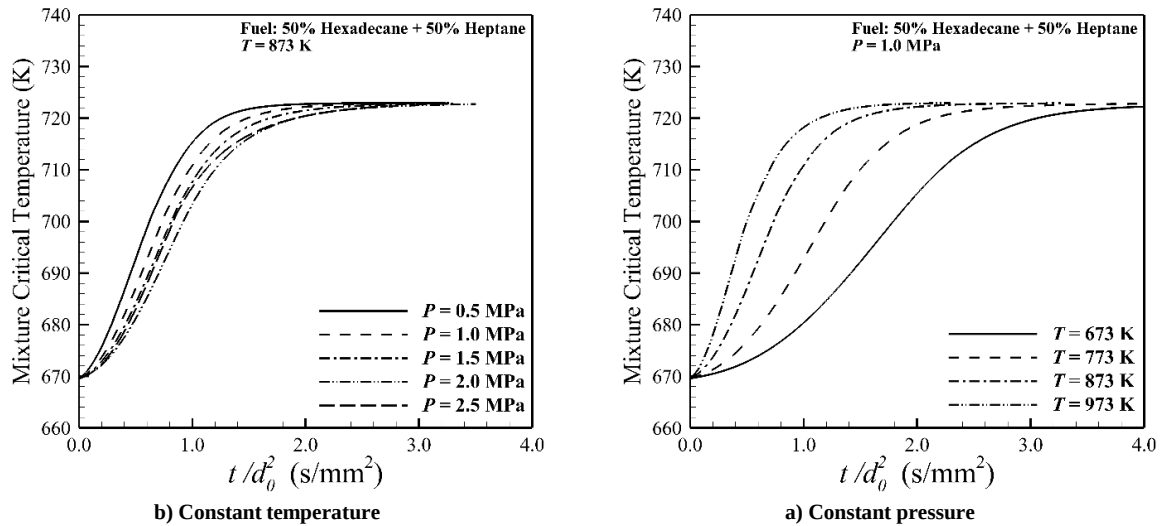


Figure 12- Changes in the mixture critical temperature of a droplet consists of 50% heptane and 50% hexadecane at constant pressure and temperature with normalized time

شکل ۱۲) تغییرات دمای بحرانی مخلوط قطره متشکل از ۵۰٪ هگزادکان و ۵۰٪ هپتان در دما و فشار ثابت با زمان نرمال شده

ازطرفی، محدوده تغییرات فشار بحرانی مخلوط با زمان بین ۱/۴ تا ۲/۶ است. پس، طبق شکل ۱۳، وقتی فشار محیط ۱/۵، ۲ و ۲/۵ مگاپاسکال باشد، به ترتیب بعد از زمان نرمال شده ۱/۸، ۱ و ۰/۶، با گذشت زمان، فشار بحرانی مخلوط از فشار محیط کمتر می‌شود. با توجه به اینکه دما و فشار محیط در حالت‌های یادشده فراتر از دما و فشار بحرانی مخلوط‌اند، می‌توان گفت که قطره در محیطی با شرایط فوق بحرانی قرار می‌گیرد.

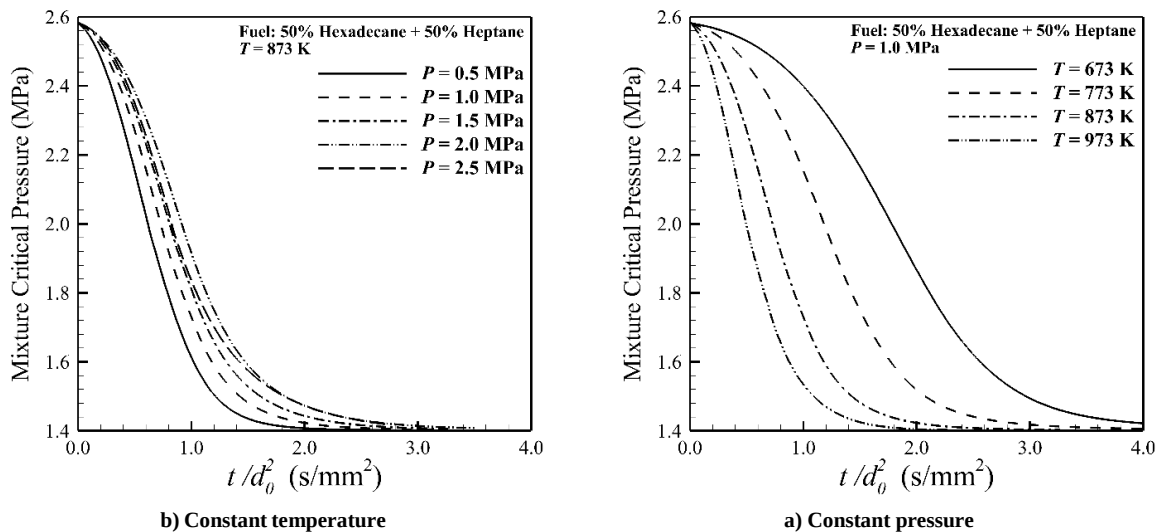


Figure 13- Changes in the mixture critical pressure of droplet consisting of 50% heptane and 50% hexadecane at constant pressure and temperature with normalized time

شکل ۱۳- تغییرات فشار بحرانی ترکیب قطره متشکل از ۵۰٪ هگزادکان و ۵۰٪ هپتان در دما و فشار ثابت با زمان نرمال شده

در شکل ۱۴، با ثابت نگه داشتن دمای محیط برای قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان به شعاع ۱/۱ میلی‌متر، تغییرات دمای سطح با زمان در فشارهای مختلف رسم شده است. وقتی قطره در محیطی با دمای ۸۷۳ کلوین و فشار ۲/۵ مگاپاسکال تبخیر شود، سطح قطره شرایط فوق بحرانی را تجربه می‌کند. همچنین، با افزایش دمای محیط به ۹۷۳ کلوین نیز، سطح قطره همچنان در فشار ۲/۵ مگاپاسکال در شرایط فوق بحرانی قرار می‌گیرد. دلیل این اتفاق این است که در این فشار قطره مدت زمان بیشتری در محیط فوق بحرانی قرار داشته و زمان کافی برای فوق بحرانی شدن را داشته است.

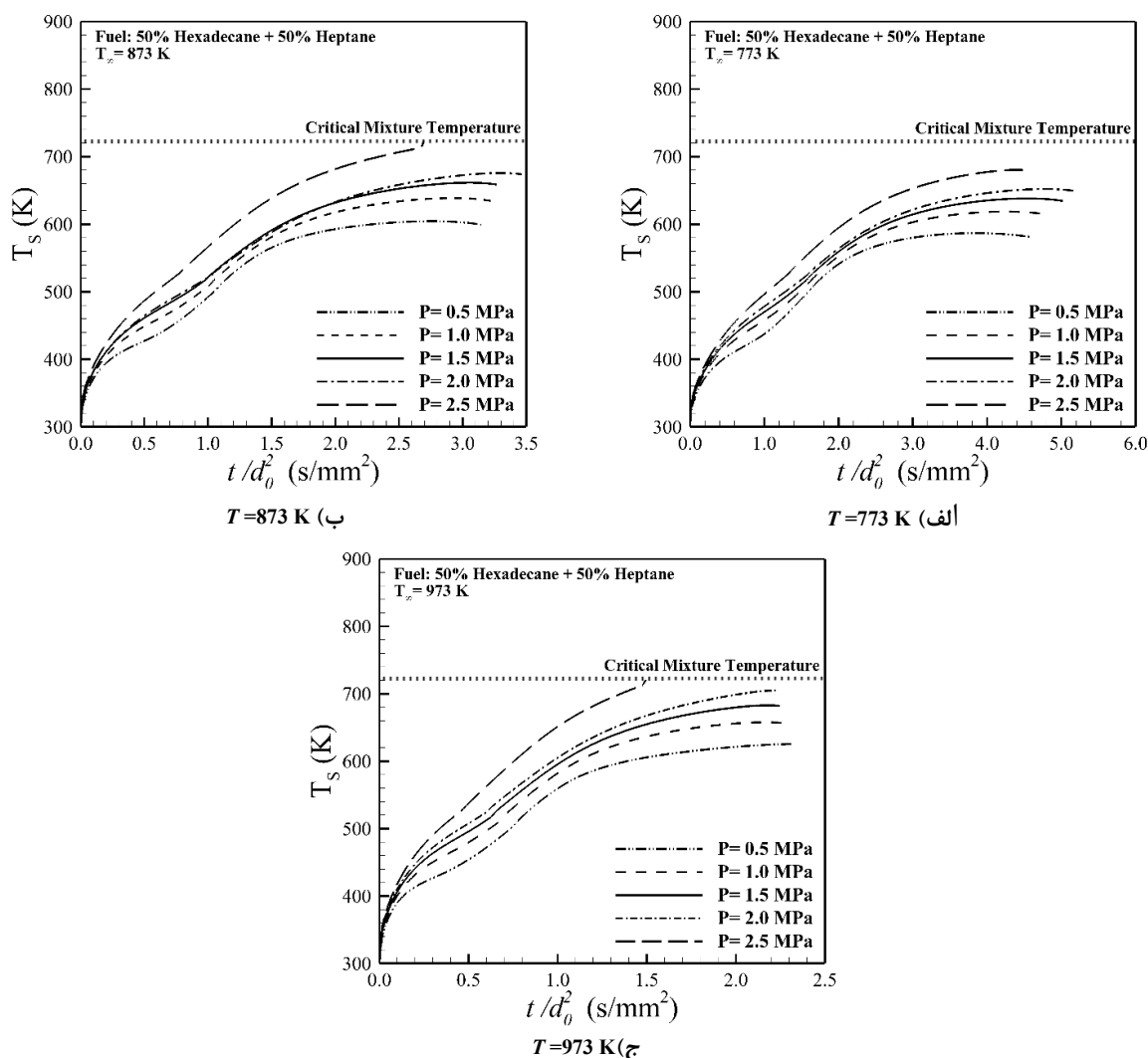


Figure 14- Changes in the surface temperature of droplet consisting of 50% heptane and 50% hexadecane at constant temperature with pressure

شکل ۱۴- تغییرات دمای سطح قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان در دمای ثابت و در فشارهای مختلف

در دمای ۸۷۳ کلوین و فشار ۲/۵ مگاپاسکال، اگر قطره به صورت دو جزء مجزا با دما و فشار بحرانی منحصر به هر جزء در نظر گرفته شود، در زمان نرمال ۰/۸۵ دمای سطح به دمای بحرانی هپتان (۵۴۰ کلوین) می‌رسد. طبق شکل ۱۵ در این زمان مقدار کسر جرمی هپتان روی سطح، که در حالت فوق بحرانی قرار گرفته، ۰/۱۲۵ است. از آنجایی که هپتان تا زمان ۲/۵ روی سطح قطره وجود دارد و دمای آن رفته رفته از دمای بحرانی فراتر می‌رود، اگر فشار از فشار بحرانی هپتان (۲/۷ مگاپاسکال) بیشتر بود، تبخیر هپتان فوق بحرانی می‌شد.

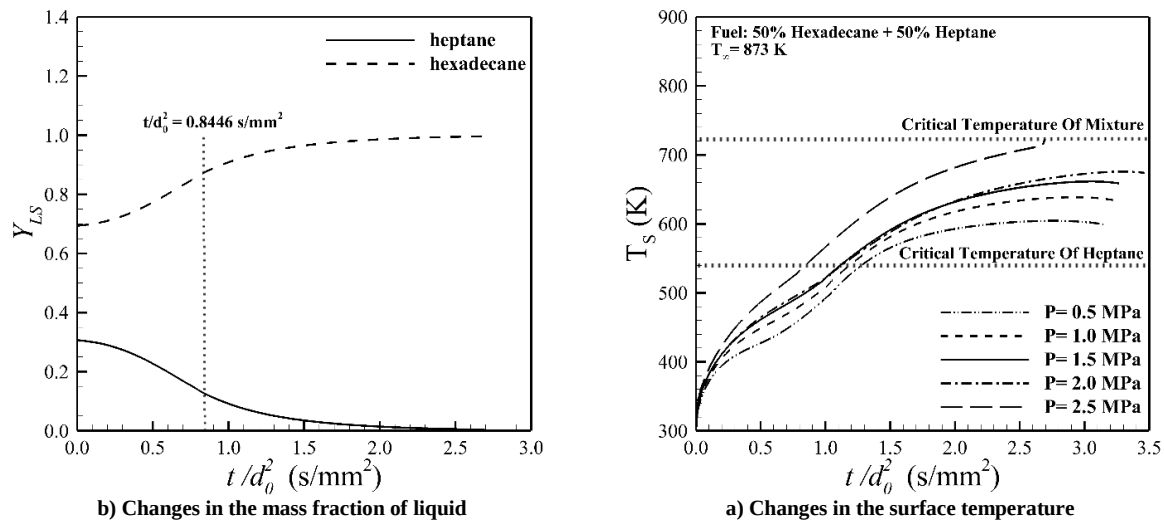


Figure 15- Bi-component droplet consists of 50% heptane and 50% hexadecane at $T=873$ K and $P=2.5$ MPa
 شکل ۱۵- قطره دوجزئی متشکل از ۵۰٪ هپتان و ۵۰٪ هگزادکان در دمای ۸۷۳ کلوین و فشار ۲٫۵ مگاپاسکال

نتیجه‌گیری

در این مقاله، تبخیر قطره دوجزئی هپتان-هگزادکان با درصد حجمی ۵۰-۵۰ در دما و فشار زیاد مدل‌سازی شده است. این مطالعه در حالت ریزگرانش و بدون در نظر گرفتن انحلال‌پذیری گاز در مایع است. معادلات حاکم با رویکرد گذرا و با روش حجم محدود گسسته‌سازی و حل شده‌اند. تعادل فوگاسیتی روی سطح مشترک برقرار بوده و از معادله حالت گاز واقعی پنگ-رابینسون استفاده شده است. خواص ترموفیزیکی متناسب با محدوده دما و فشار محیط پیرامون انتخاب شدند. اعتبارسنجی مدل، در محدوده گسترده‌ای از دما و فشار محیط، از دقت خوبی برخوردار است. نتایج اصلی مطالعه به شرح زیرند:

- فشار و دمای محیط نقش زیادی روی عمر قطره دارند. با افزایش فشار تا ۲ مگاپاسکال، کاهش نرخ تبخیر، که متأثر از رفتار چگالی فاز گاز است، سبب افزایش عمر قطره می‌شود، در حالی که کاهش عمر با افزایش بیشتر فشار تا ۲٫۵ مگاپاسکال ناشی از افزایش نرخ تبخیر و از سوی دیگر کاهش کشش سطحی و گرمای نهان تبخیر است. در یک فشار ثابت، افزایش دمای محیط با نفوذ بیشتر گرما به داخل قطره همراه بوده و عمر آن را کاهش می‌دهد.
- تبخیر قطره با ترکیب‌های مختلفی از اجزای تشکیل‌دهنده آن نشان داد که تغییرات عمر با فشار به ترکیب وابسته نیست و رفتاری مشابه با آنچه قبلاً ذکر شد، به وقوع می‌پیوندد. با افزایش درصد حجمی هپتان، نرخ تبخیر در مرحله اول تبخیر افزایش می‌یابد، این در حالی است که نرخ تبخیر هگزادکان همواره ثابت می‌ماند.
- نقش معادله حالت گاز واقعی به‌منظور تخمین درست مراحل تبخیر و عمر قطره اهمیت زیادی دارد. پس از مطالعه این موضوع، ضمن تأکید بر نتایج کارهای پیشین، معادله حالت پنگ-رابینسون به‌عنوان یک معادله حالت مناسب انتخاب شد.
- با محاسبه دما و فشار بحرانی مخلوط و مقایسه آن با دما و فشار مورد مطالعه، شرایط لازم برای فوق بحرانی‌بودن محیط در تبخیر قطرات دوجزئی مشخص شد. تغییرات دمای سطح قطره و کسر جرمی اجزای آن نشان داد که وقتی قطره در محیطی با شرایط فوق بحرانی قرار می‌گیرد، الزاماً تبخیر فوق بحرانی رخ نخواهد داد. با گذشت زمان، در صورتی که دما و فشار به اندازه کافی زیاد باشند این امر محقق خواهد شد. برای قطره مورد مطالعه در فشار ۲٫۵ مگاپاسکال و دماهای ۸۷۳ و ۹۷۳ کلوین سطح قطره به دمای بحرانی می‌رسد.

فهرست علائم

$R.r$	شعاع قطره (m)
$\dot{m}$	نرخ تبخیر (kg/s)
M	جرم مولی (g/mole)
T	دما (K)
P	فشار (MPa)
t	زمان (s)
X	کسر مولی
Y	کسر جرمی
A	مساحت (m^2)
h	آنتالپی (kJ/kg)
U, u	سرعت (m/s)
C_p	ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (kJ/kg.k)
D	ضریب نفوذ (m^2/s)
P_{CT}	فشار بحرانی مخلوط (bar)
T_{CT}	دمای بحرانی مخلوط (K)

علائم یونانی

ρ	چگالی (kg/m^3)
α	ضریب جذب سطح
σ	ثابت استفان بولتزمن (W/m^2K^4)
μ	لزجت دینامیک (cp)

زیرنویس‌ها

S	سطح قطره
∞	خیلی دور
l	فاز مایع
g	فاز گاز
v	بخار
i	جزء
T	کل
F	سوخت

منابع

1. D. Spalding, "Theory of particle combustion at high pressures," *ARS journal*, 29, No. 11, 1959, pp. 828-835.
2. J. A. Manrique and G. L. Borman, "Calculations of steady state droplet vaporization at high ambient pressures," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 12, No. 9, 1969, pp. 1081-1095.
3. R. Matlosz, S. Leipziger and T. Torda, "Investigation of liquid drop evaporation in a high temperature and high pressure environment," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15, No. 4, 1972, pp. 831-852.

4. T. Kadota and H. Hiroyasu, "Evaporation of a single droplet at elevated pressures and temperatures: 2nd report, theoretical study," *Bulletin of JSME*, 19, No. 138, 1976, pp. 1515-1521.
5. G. Zhu and S. Aggarwal, "Transient supercritical droplet evaporation with emphasis on the effects of equation of state," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43, No. 7, 2000, pp. 1157-1171.
6. E. Curtis and P. Farrell, "A numerical study of high-pressure droplet vaporization," *Combustion and Flame*, 90, No. 2, 1992, pp. 85-102.
7. E. Curtis and P. Farrell, "Droplet vaporization in a supercritical microgravity environment," *Acta Astronautica*, 17, No. 11-12, 1988, pp. 1189-1193.
8. H. Kim and N. Sung, "The effect of ambient pressure on the evaporation of a single droplet and a spray," *Combustion and Flame*, 135, No. 3, 2003, pp. 261-270.
9. J. Jin and G. Borman, "A model for multicomponent droplet vaporization at high ambient pressures," *SAE Technical Paper*, 0148-7191, 1985.
10. J. Stengele, H. J. Bauer and S. Wittig, "Numerical study of bicomponent droplet vaporization in a high pressure environment," *ASME 1996 International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exhibition*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, New York, 1996.
11. S. Aggarwal, Z. Shu, H. Mongia and H. Hura, "Multicomponent and single-component fuel droplet evaporation under high pressure conditions," *34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, University of Illinois, Chicago, 1998.
12. M. Burger, R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schäfer, R. Koch and S. Wittig, "Droplet evaporation modeling by the distillation curve model: accounting for kerosene fuel and elevated pressures," *International journal of heat and mass transfer*, 46, No. 23, 2003, pp. 4403-4412.
13. H. Zhang, V. Raghavan and G. Gogos, "Subcritical and supercritical droplet evaporation within a zero-gravity environment: Low Weber number relative motion," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 35, No. 4, 2008, pp. 385-394.
14. W. Long, P. Yi, M. Jia, L. Feng and J. Cui, "An enhanced multi-component vaporization model for high temperature and pressure conditions," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 90, 2015, pp. 857-871.
15. C. Verwey and M. Birouk, "Fuel vaporization: Effect of droplet size and turbulence at elevated temperature and pressure," *Combustion and Flame*, 189, 2018, pp. 33-45.
16. S. Srivastava and F. Jaber, "Large eddy simulations of complex multicomponent diesel fuels in high temperature and pressure turbulent flows," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 104, 2017, pp. 819-834.
17. S. Gao, J. Yan, M. Wang and C. F. Lee, "Modeling of Quasi-1D Multi-Component Fuel Droplet Vaporization using Discrete Approach with Experimental Validation," *SAE Technical Paper*, 0148-7191, 2018.
18. S. Ray, V. Harsha and V. Raghavan, "Prediction of vapor-liquid equilibrium of ternary system at high pressures," *Archives of Thermodynamics*, 40, 2019, pp. 137-149.
19. S. Ray, V. Raghavan and G. Gogos, "Two-phase transient simulations of evaporation characteristics of two-component liquid fuel droplets at high pressures," *International Journal of Multiphase Flow*, 111, 2019, pp. 294-309.
20. A. Arabkhalaj, A. Azimi, H. Ghassemi and R. S. Markadeh, "A fully transient approach on evaporation of multi-component droplets," *Applied Thermal Engineering*, 125, 2017, pp. 584-595.
21. G. S. Zhu, R. D. Reitz and S. K. Aggarwal, "Gas-phase unsteadiness and its influence on droplet vaporization in sub-and super-critical environments," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44, No. 16, 2001, pp. 3081-3093.
22. R. C. Reid, J. M. Prausnitz and B. E. Poling, *The properties of gases and liquids*, Fourth Edition, New York, McGraw Hill, 1987.
23. S. Sazhin, W. Abdelghaffar, E. Sazhina, S. Mikhlovsky, S. Meikle and C. Bai, "Radiative heating of semi-transparent diesel fuel droplets," *Journal of heat transfer*, 126, No. 1, 2004, pp. 105-109.
24. B. Abramzon and S. Sazhin, "Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48, No. 9, 2005, pp. 1868-1873.
25. B. E. Poling, J. M. Prausnitz and J. P. O'Connell, *The properties of gases and liquids*, New York, McGraw-hill, 2001.
26. M. Riazi, *Characterization and properties of petroleum fractions*. First Edition, ASTM international, West Conshohocken, PA, 2005.
27. C. L. Yaws, *Handbook of thermodynamic diagrams: volume and enthalpy diagrams for major organic chemicals and hydrocarbons*, Texas, Elsevier, 2, 1996.
28. B. I. Lee and M. G. Kesler, "A generalized thermodynamic correlation based on three- parameter corresponding states," *AIChE Journal*, 21, No. 3, 1975, pp. 510-527.
29. B. J. McBride, M. J. Zehe and S. Gordon, *NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species*, First Edition, Ohio, National Aeronautics and Space Administration, John H. Glenn Research Center at Lewis Field, 2002.
30. A. A. Asghar Azimi and H. Ghassemi, "Influences of Unsteadiness on the Multicomponent Fuel Droplets," *Modares Mechanical Engineering*, 17, 2017, pp. 293-304.
31. S. Patankar, *Numerical heat transfer and fluid flow*, CRC press, New York, 2018.
32. H. Ghassemi, S. W. Baek and Q. S. Khan, "Experimental study on binary droplet evaporation at elevated pressures and temperatures," *Combustion science and technology*, 178, No. 6, 2006, pp. 1031-1053.

English Abstract

Transient evaporation of a bi-component droplet at high temperature and pressure

Mohana Moradi¹ and Hojat Ghassemi^{*2}

1-Master student, Aerospace Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, mohana_moradi96@mecheng.iust.ac.ir

2-Associated Professor, Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, h_ghassemi@iust.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2020.05.10, Received in revised form: 2020.06.14, Accepted: 2020.07.23)

Transient evaporation of a bi-component droplet at high temperature and pressure condition has been modeled numerically. In the gas phase, the equations of species, momentum, and energy, and in the liquid phase, the equations of species and energy by assuming fugacity equilibrium, and Peng-Robinson equation of state using the finite volume method have been solved. The droplet is assumed to be spherical, the solubility of the gas in the liquid and effect of gravity have been neglected. The results of the proposed model for heptane-hexadecane droplet in various temperatures and pressures have been validated against the available experimental data. Results were in good agreement. The effect of pressure on the evaporation showed that at a constant temperature, by increasing pressure up to 2 MPa the droplet lifetime increases but further increase in pressure (up to 2.5 MPa) reduces droplet lifetime. Evaporation behavior does not change with different compositions. The role of different equations of state on the prediction of binary droplet lifetime was studied, and finally the effect of ambient temperature and pressure on the surface temperature of the droplet was investigated. It was observed that at high enough pressure and temperature, the droplet surface could reach the critical condition.

Keywords: droplet evaporation, bi-component, high ambient pressure, fugacity, Peng-Robinson