Archive of SID

نشریه علمی-پژوهشی سوخت و احتراق
سال پنجم، شماره اول، بهار و تابستان ۱۳۹۱

انجمن احتراق ایران

مدل‌سازی شتاب‌گیری شعله در انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ به وسیله مدل احتراقی ترکیبی جدید

مهدی تیماجی[*] و کیومرث مظاهری[**]
دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده فنی و مهندسی، بخش مکانیک
(دریافت: ۱۳۹۰/۱۲/۱۶، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۱/۷/۱۳، پذیرش: ۹۱/۷/۳۰)

در انفجار ابر گازی، به دلیل همراه شدن پدیده انتشار شعله و میدان جریان آشفته، که بر اثر وجود موانعی در مسیر انتشار شعله ایجاد می‌شود، چین و چروک‌هایی با ابعاد مختلف در جبهه شعله ایجاد می‌شود. به دلیل بر هم‌کنش شعله-گردابه، نرخ گسترش شعله و افزایش فشار تشدید می‌شود. چالش اساسی در مدل‌سازی این پدیده چگونگی محاسبه سرعت سوزش آشفتگی است. در این مقاله از ترکیب دو روش معادله انتقال چروکیدگی سطحی شعله و SCOPE3، که برای محاسبه چگالی سطحی شعله در انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ ارائه شده است، استفاده شده است. روش SCOPE3 به دلیل درنظرگرفتن نقش آشفتگی‌های بالا، توانایی مدل‌سازی انفجار ابر گازی در حضور موانع زیاد را داراست. از این رو، نتایج عددی حاصل از ترکیب معادله انتقال چروکیدگی سطحی شعله و SCOPE3، مقدار بیشینه فشاری و زمان رسیدن به آن را در شبیه‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ بسیار خوب پیش‌بینی می‌کند.

کلیدواژه: انفجار ابر گازی، مدل ترکیبی، چگالی سطحی شعله، مدل SCOPE3، مقیاس بزرگ

مقدمه

انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ پدیده‌ای قابل ملاحظه در صنایع مرتبط با مواد قابل اشتعال، از جمله صنعت نفت، است. در این گونه صنایع، پیش‌بینی حوادث و رخدادهای ناشی از انفجار ابر گازی در اطمینان از ایمنی تجهیزات نصب‌شده بسیار حائز اهمیت است. به دلیل بالابودن هزینه‌های آزمایش انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، متأسفانه داده‌های کافی برای پیش‌بینی رخدادهای ناشی از این پدیده در دسترس نیست[۲،۱]. بنابراین، کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) در شبیه‌سازی عددی انفجار ابر گازی، برای ارزیابی خطرات ناشی از آن و طراحی ایمن‌تر تجهیزات، روز به روز در حال افزایش است.

یکی از عوامل تشدید خسارات ایجادشده، وجود موانع متعدد در مسیر انتشار شعله است. به دلیل حضور موانع در مسیر جریان ایجادشده در مقابل شعله، گردابه‌هایی در پشت آن‌ها تولید می‌شود. این گردابه‌ها، موجب به‌هم ریختگی سطح شعله و افزایش سطح آن می‌شوند. تاکنون مطالعات بسیاری در زمینه شبیه‌سازی انفجار ابر گازی و بررسی اثر موانع در شتاب‌گیری شعله صورت پذیرفته است[۳-۷]. با این حال، همچنان مطالعه و بررسی بر روی نقش موانع در آشفتگی سطح شعله و شتاب‌گیری آن در هندسه‌های مختلف در حال انجام است. بررسی این مسئله در مقیاس بزرگ، به دلیل هزینه بالای آزمایش انفجار ابر گازی در این مقیاس، با محدودیت‌های بسیاری همراه است. از این رو، بیشتر مطالعات صورت‌گرفته در این زمینه در مقیاس کوچک است[۳-۷]. با این حال، به دلیل اهمیت انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، مطالعاتی توسط شرکت‌ها و یا گروه‌های تحقیقاتی گوناگون بر روی این پدیده صورت گرفته است[۸]. نتایج این مطالعات به دلایل مختلف، از جمله دلایل اقتصادی، به صورت محدود منتشر شده است[۱،۲].

* کارشناس ارشد (ایمیل: mehdi.timaji@gmail.com)
** استاد- نویسنده مخاطب (ایمیل: kiumars@modares.ac.ir)

www.SID.ir

Archive of SID

یکی از مشکلات اساسی در مدل‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ محاسبه نرخ سوزش شعله است. در مرجع [۸] مروری بر انواع روش‌های CFD در مدل‌سازی این پدیده صورت گرفته است. مطابق مطالعات صورت‌گرفته در این مرجع، روش‌های مدل‌سازی CFD این پدیده را می‌توان به دو دسته کلی تقسیم کرد. دسته اول روش‌هایی را شامل می‌شود که در آن‌ها، به دلیل بزرگ‌بودن اندازه سلول‌های محاسباتی در مقیاس بزرگ، معمولاً از ضرایب تجربی برای اصلاح مدل احتراقی استفاده می‌شود[۹،۱۰]. نرم‌افزارهای AutoReaGas [۹] و یا McNEWT [۱۰] نمونه‌هایی از این دسته‌اند. دسته دیگر روش‌هایی است که مدل احتراقی مورد استفاده در آن‌ها بر پایه نتایج حاصل از آزمایش‌های با مقیاس بزرگ به‌دست آمده است[۱۱،۱۲]. نرم‌افزار FLACS [۱۱] و یا مدل SCOPE[1] [۱۲] از جمله روش‌های دسته‌بندی‌شده در این گروه‌اند. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، به دلیل هزینه‌بربودن انجام آزمایش در مقیاس بزرگ، جزئیات مربوط به مدل‌های احتراقی به‌کاررفته در این روش‌ها به صورت بسیار محدود منتشر شده و یا اصلاً منتشر نمی‌شود[2]. بنابراین، در مدل‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، انتخاب مدلی مناسب جهت محاسبه نرخ سوزش از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است.

یکی از مدل‌های تجربی، که با استفاده از تحلیل نتایج آزمایشگاهی در مقیاس بزرگ ارائه شده است، مدل SCOPE است. این مدل برای اولین‌بار در سال ۱۹۹۱ توسط کیتس و ساموئل ارائه شد[۱۳]. مدل ارائه‌شده توسط آن‌ها با ۶۷ آزمایش انفجار گاز در محفظه‌های نیمه‌باز به ابعاد m^3 ۳۵ کالیبره شد[۲]. مدل ارائه‌شده توسط کیتس و ساموئل در سال ۱۹۹۳ با بهبود مدل‌های داخلی آن و با نام SCOPE2 اصلاح شد. پس از آن، با افزایش اطلاعات در مورد سازوکار انفجار و اصلاح مدل احتراقی، مدل SCOPE3 (که در مقاله حاضر از آن استفاده شده است) در سال ۱۹۹۷ ارائه شد[۱۲]. این مدل با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی بالغ بر ۳۰۰ انفجار در کانالی با ابعاد بزرگ همراه با مجموعه‌ای از موانع اصلاح شده است[۱۲]. یکی از مهم‌ترین نقاط قوت این مدل، توانایی مدلسازی انفجار در محفظه‌های نیمه‌باز و انفجار بیرونی حاصل از آن است. روش SCOPE3 چگالی سطحی شعله را با فرض آشفته‌بودن شعله محاسبه می‌کند. تاکنون استفاده از این روش به مدل‌سازی منطقه‌ای میدان جریان[3] [۱۲-۱۴] محدود شده است. در پژوهش حاضر، با ترکیب این روش با معادله انتقال چگالی سطحی شعله، مدل‌سازی انفجار ابر گازی درون محفظه نیمه‌باز به روش دینامیک سیالات محاسباتی انجام شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها توانایی مدل ترکیبی معادله انتقال چگالی سطح شعله و مدل تجربی SCOPE3 را در مقایسه با مدل احتراقی چگالی سطح شعله وِلر[4] [۱۵-۱۷] در مدل‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ نشان می‌دهد.

یکی دیگر از متغیرهای مهم در مطالعه انفجار ابر گازی بررسی نقش مانع در شتاب‌گیری شعله است. با توجه به مطالعات صورت‌گرفته، به دلیل پیچیدگی‌های بسیار در شبیه‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، تمرکز بیشتر پژوهش‌ها در زمینه ارائه مدل‌های فیزیکی مناسب یا اصلاح مدل‌های موجود و یا مدل‌های مناسب جهت ساده‌سازی هندسه جریان بوده است. اما در مطالعات آزمایشگاهی، پژوهش‌های بیشتری در زمینه نقش مانع در انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ صورت گرفته است. انفجار گاز در لوله باز برای اولین‌بار در مقیاس بزرگ توسط آرتی‌یو و همکارانش در سال ۱۹۸۳[۱۸] صورت پذیرفت. پس از آن آزمایش‌هایی در مقیاس بزرگ‌تر توسط اِلس‌ورث و همکارانش[۱۹] انجام شد. این آزمایش‌ها هر دو در یک مخلوط با شرط اولیه ساکن صورت پذیرفته است. در آزمایش اِلس‌ورث و همکارانش، به دلیل ابعاد بزرگ‌تر موانع نسبت به مقیاس آزمایش آرتی‌یو و همکارانش، شعله‌ای با سرعت بیشتر مشاهده شده است. در سال ۲۰۱۰ نیز بوونس و همکارانش[۲۰] انفجار ابر گازی در اتاقکی مستطیلی به ابعاد m^3 ۴/۶×۴/۶×۳ در حضور موانعی با سطح مقطع مربعی به ابعاد m ۰/۴×۰/۴×۳ را آزمایش کردند.

1. Shell Code for Overpressure Prediction in gas Explosion

۲. به عنوان مثال از سال ۱۹۹۸ به بعد اطلاعاتی در زمینه اصلاح مدل احتراقی به‌کار گرفته شده در نرم‌افزار FLACS منتشر نشده است.

۳. مدل‌های منطقه‌ای (Zonal models) یا پدیدار شناختی (Phenomenological models) مدل‌های فیزیکی ساده‌شده‌ای‌اند که تنها فیزیک اساسیِ حاکم بر پدیده انفجار را درنظر می‌گیرند. در این مدل‌ها، هندسه‌های پیچیده مانند پالایشگاه‌ها به مجموعه‌ای از هندسه‌های ساده‌تر تقسیم می‌شود. در واقع در این ساده‌سازی، هندسه واقعی مدل نشده و هندسه به صورت ساده‌شده درنظر گرفته می‌شود.

4. Weller

www.SID.ir

Archive of SID

ایشان در مطالعات خود به بررسی اثر مکان جرقه، اندازه خروجی محفظه و موانع در نرخ تغییرات فشار پرداخته‌اند. طبق مطالعات ایشان، فشار بیشینه می‌تواند تحت تأثیر عوامل مختلفی از جمله نرخ افزایش سطح شعله و امواج فشاری تولیدشده بر اثر انفجار بیرونی قرار گیرد. با این حال، همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، مطالعه عددی چندانی در زمینه تأثیر موانع در انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ صورت نگرفته است. از این رو، در این پژوهش، به بررسی نقش مانع در شتاب‌گیری شعله در مقیاس بزرگ پرداخته شده است. با توجه به نتایج به‌دست‌آمده، مشاهده می‌شود که تغییرات فشاری شدید در لحظه عبور شعله از روی موانع رخ می‌دهد؛ به همین منظور، کانتور ورتی‌سیتی[1] جریان در لحظات عبور شعله از روی موانع بررسی شده است. در ادامه ابتدا به بیان معادلات حاکم پرداخته شده و پس از آن توضیح مختصری در زمینه روش عددی به‌کاررفته در شبیه‌سازی‌ها داده شده است. سپس بر اساس معادلات بیان‌شده به تحلیل نتایج حاصل از شبیه‌سازی پرداخته شده است.

مدل‌سازی میدان جریان

پدیده انفجار ابر گازی، مانند دیگر پدیده‌های جریان سیالات، با استفاده از معادلات فیزیکی حاکم بر جریان سیال مدل می‌شود. مدل‌سازی جریان سیالِ واکنشی با استفاده از حل دستگاهی متشکل از معادلات انتقال جرم، تکانه[2]، انرژی و معادله انتقال کسر جرمی گونه‌ها صورت می‌پذیرد. از این معادلات در روش مدل‌سازی RANS متوسط زمانی گرفته می‌شود. با متوسط‌گیری از این معادلات، کمیت‌های مجهولی ظاهر می‌شوند که نیازمند مدل‌کردن‌اند تا نهایتاً دستگاه معادلات حاکم بسته شود. یکی از مهم‌ترین جمله‌هایی که بر اثر متوسط‌گیری ظاهر می‌شود عبارت تنش‌های رینولدز $\widetilde{u_j'' u_i''}$ است. در پژوهش حاضر، عبارت تنش‌های رینولدز با استفاده از مدل آشفتگی اصلاح‌شده لاندر و شارما، k-ε، مدل شده است. این مدل از دسته مدل‌های رینولدز پایین است[۲۱]. مشخصه بارز این دسته روش‌ها درنظرگرفتن تأثیر دیواره است. در مدل لاندر و شارما، k-ε ، از چندین تابع میرایی برای اصلاح انرژی جنبشی آشفتگی و انرژی اتلافی در نزدیکی سطوح جامد استفاده می‌شود. جزئیات بیشتر در مورد این روش در مراجع [۸] و [۲۱] ارائه شده است.

در مدل‌سازی جریان سیالِ واکنشی، به مجموعه معادلات جرم، تکانه و انرژی، به تعداد گونه‌ها، معادلات بقا اضافه می‌شود. علاوه بر این، برای محاسبه عبارت منبع در معادله بقای گونه‌ها، نیاز به حل یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی (ODE)[3] نیز هست. حل این دستگاه، به دلیل سخت‌بودن[4]، بسیار زمان‌بر است. نتیجه اضافه‌شدن این معادلات افزایش چشمگیر زمان انجام محاسبات در جریان واکنشی نسبت به جریان غیرواکنشی است. از این رو محققان بسیاری درصدد ساده‌سازی معادلات احتراقی و کاهش زمان محاسباتِ مربوط به آن بوده‌اند. یکی از این ساده‌سازی‌ها برآمده از تحلیل بری-موس-لیبی[5] است. پیش‌فرض این تحلیل نازک‌بودن سطح شعله است[۲۲]. در این حالت می‌توان میدان جریان را به سه ناحیه واکنش‌دهنده‌ها، محصولات و ناحیه واکنش تقسیم کرده و فرض کرد که واکنش در صفحات نازکی رخ می‌دهد. رژیم حاکم بر این نوع میدان رژیم فلیملت نامیده می‌شود[۲۲]. در این رژیم فرض می‌شود که ساختار درونی شعله تحت تأثیر آشفتگی قرار نمی‌گیرد. این امر هنگامی رخ می‌دهد که مقیاس طولی گردابه‌ها از ضخامت شعله آرام بزرگ‌تر باشد[۲۲]. در این شرایط، با گذر از سطح شعله، چگالی گاز و دیگر خصوصیات میدان جریان به صورت ناگهانی تغییر خواهد کرد. در این صورت می‌توان شعله را به صورت سطحی که مواد سوخته و نسوخته را از هم جدا می‌کند فرض کرد. در این شرایط، می‌توان از سینتیک جزئی صرف‌نظر کرده و واکنش را به صورت زیر فرض کرد:

$$\text{Reactant} \rightarrow \text{Product}$$

1. Vorticity
2. Mumentum
3. Ordinary Diferrential Equation
4. Stiff
5. Bray-Moss-Libby (BML)

www.SID.ir

Archive of SID

خصوصیات ترمودینامیکی واکنش‌دهنده‌ها و محصولات نیز از مجموع وزنیِ کسر جرمی[1] به‌دست می‌آید. بنابراین، مطابق تحلیل بری-موس-لیبی و با فرض شیمی سریع[2]، می‌توان متغیری تعریف کرد که در مواد نسوخته مقدار ۱ و در مواد سوخته مقداری معادل با صفر داشته باشد. در این‌صورت، با متوسط‌گیری تجمعی[3] از میدان حاصل، معادله انتقال متغیر پیشرفت واکنش ($\tilde{b}$) به‌دست خواهد آمد. نحوه به‌دست‌آوردن این معادله در مرجع [۱۶] آورده شده است. معادله انتقال متغیر پیشرفت واکنش[4] ($\tilde{b}$) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\tilde{b}\right)+\frac{\partial\left(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{b}\right)}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_c}\frac{\partial\tilde{b}}{\partial x_j}\right)+\bar{\dot{\omega}} \qquad (۱)$$

در معادله بالا، Sc_c عدد اشمیت آشفتگی برای متغیر پیشرفت واکنش است. در حل معادله بالا، مهم‌ترین و مشکل‌ترین موضوع، مدل‌سازی نرخ واکنش شیمیائی، $\bar{\dot{\omega}}$، به‌منظور بستن معادلات بقاست. این پیچیدگی به علت ماهیت بسیار غیرخطی نرخ سینتیک شیمیایی، که معمولاً به‌طور نمایی است، و وابستگی موجود مابین نرخ واکنش و اختلاط در مقیاس‌های کوچک است[۲۳]. با توجه به رژیم حاکم بر میدان جریانِ واکنشی، می‌توان نرخ واکنش شیمیائی را با استفاده از فرض فلیملت آرام[5] مدل کرد. در تئوری فلیملت آرام، شعله پیش‌آمیخته به صورت مجموعه‌ای از شعله‌های آرام نازک درنظر گرفته می‌شود که کنار هم جمع شده‌اند. در این تئوری، متوسط نرخ واکنش به صورت حاصل‌ضرب متوسط نرخ واکنش بر واحد سطح فلیملت در متوسط سطح شعله بر واحد حجم بیان می‌شود[۱۰]. این مفهوم، با استفاده از فاکتور چروکیدگی سطح شعله[6] (Ξ)، به صورت زیر بیان می‌شود[۱۵-۱۷]:

$$\bar{\dot{\omega}}=\bar{\rho}_u S_L \Xi\left|\nabla\tilde{b}\right| \qquad (۲)$$

حال مسئله اصلی ارائه یک مدل برای Ξ است. این مدل می‌تواند یک عبارت جبری ساده بوده و یا از حل یک معادله انتقال حاصل شود. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، به دلیل ماهیت غیرخطی نرخ واکنش، انتخاب روش مناسب تأثیر بسزایی در مدل‌سازی احتراق دارد. این مسئله در مدل‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ با چالش‌های بسیاری همراه است. عدم انتشار نتایج آزمایش‌های انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ نقش مهمی در پیچیدگی مدل‌سازی این پدیده ایفا می‌کند. این امر به دلیل عدم انتشار مدل‌های تجربی و یا نحوه اصلاح مدل‌های موجود است. در این مقاله سعی شده است، با ترکیب معادله انتقال فاکتور چروکیدگی سطح شعله با مدل SCOPE3، مدلی ترکیبی برای مدل‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ ارائه شود. معادله انتقال فاکتور چروکیدگی سطح شعله توسط ولر در سال ۱۹۹۷ ارائه شده است. مدل تجربی مورد استفاده در معادله ولر مدل گالدر است[۱۶]. این مدل با داده‌های آزمایشگاهی در مقیاس کوچک کالیبره شده است. در مدل ترکیبی، مدل جبری گالدر با مدل SCOPE3، که توسط پاتوک و همکارانش در شرکت شل[7] برای مدلسازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ ارائه شده است، جایگزین شده است. معادلات مربوط به مدل ترکیبی در بخش بعد ارائه شده است.

مدل احتراقی ترکیبی

مسئله اصلی در مدل‌سازی میدان جریان واکنش‌پذیر ارائه یک مدل برای فاکتور چروکیدگی سطح شعله است. برای مدل‌کردن Ξ، روش‌هایی بر اساس مقدار ثابت، معادله جبری و معادله انتقال ارائه شده است. شکل‌های گوناگونی از معادلات تعادل برای

1. Mass fraction weighted
2. Fast chemistry
3. Ensemble averaging
4. Reaction progress variable
5. Laminar flamelet

۶. فاکتور چروکیدگی سطح شعله (Flame wrinkling factor) بیانگر نسبت سطح شعله به تصویر سطح شعله در راستای آن است.

7. Shell

www.SID.ir

Archive of SID

چگالی سطح شعله در مقالات مختلف ارائه شده‌اند. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، در کار حاضر از معادله انتقال ولر (معادله ۳) برای مدل‌کردن چروکیدگی سطح شعله استفاده می‌شود[۱۵-۱۷]:

$$\frac{\partial \Xi}{\partial t}+u_s.\nabla\Xi = G\,\Xi - R\,(\Xi-1)+(\sigma_s-\sigma_t)\,\Xi \qquad (۳)$$

در این معادله، σ_s و σ_t[۱] به‌ترتیب نشان‌دهنده نرخ کرنش وابسته به سرعت منطقه‌ای سطح شعله (u_s) و سرعت مؤثر سطح شعله (u_t) هستند. دو ترم $G\Xi$ و $R(\Xi\text{-}1)$ در معادله بالا بیانگر نرخ تولید و اضمحلال آشفتگی در مقیاس زیرشبکه‌اند. ضرایب G و R به صورت زیر محاسبه می‌شوند[۱۵-۱۷]:

$$G = R\,\frac{\Xi_{eq}-1}{\Xi_{eq}} \qquad (۴)$$

$$R = \frac{0.28}{\tau_\eta}\frac{\Xi^*_{eq}}{\Xi^*_{eq}-1} \qquad (۵)$$

با فرض توازن در نرخ تولید و اضمحلال فاکتور چروکیدگی سطح شعله (Ξ)، این متغیر فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله (Ξ_{eq}) نامیده می‌شود. فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله برابر با نسبت سرعت شعله آشفته به شعله آرام است. این فرض[۲]، اساس بیشتر مدل‌های تجربی در محاسبه فاکتور چروکیدگی سطح شعله است. بنابراین، طبق پیشنهاد ولر، می‌توان این متغیر را با استفاده از روش‌های تجربی محاسبه کرد[۱۶]. در مدل ارائه‌شده توسط ولر، این متغیر با استفاده از رابطه گالدر محاسبه می‌شود. مطابق مطالعات پاتوک و همکارانش[۱۲]، روش گالدر در نرخ‌های آشفتگی بالا مناسب نیست. ایشان با ارائه مدلی، که بخشی از مدل منطقه‌ای SCOPE3 است، نرخ‌های آشفتگی بالا را نیز درنظر گرفتند. در این مدل چگالی سطحی شعله از دو مقدار چگالی سطحی شعله در رینولدزهای بالا ($\Xi^*_{eq}\big|_H$) و پایین ($\Xi^*_{eq}\big|_L$) محاسبه می‌شود. مدلی که رابطه بین این دو را برقرار کند و بر داده‌های آزمایشگاهی نیز منطبق باشد، به صورت زیر ارائه شده است[۱۲]:

$$\Xi^*_{eq} = \left\{\left(\Xi^*_{eq}\big|_L\right)^{-4}+\left(\Xi^*_{eq}\big|_H\right)^{-4}\right\}^{-1/4} \qquad (۶)$$

چگالی سطحی شعله در شدت‌های پایین آشفتگی ($\Xi^*_{eq}\big|_L$) از رابطه گالدر (۱۹۹۰) محاسبه می‌شود[۱۲]:

$$\Xi^*_{eq} = 1+0.62\sqrt{\frac{u'}{S_u}}\,\mathrm{Re}_K \qquad (۷)$$

که در آن $\mathrm{Re}_K = u'/\sqrt{\varepsilon\tau_K}$ عدد رینولدز در مقیاس کولموگروف بوده و τ_K مقیاس زمانی کولموگروف است[۱۲]:

$$\tau_K = \sqrt{\frac{\mu}{\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}}} \qquad (۸)$$

چگالی سطحی شعله در شدت‌های بالای آشفتگی ($\Xi^*_{eq}\big|_H$) در مدل SCOPE3 توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود[۱۲]:

$$\Xi^*_{eq} = 1.60\,(Ka\times Ma)^{-1/3} \qquad (۹)$$

که در این معادله عدد کارلوویتز[۳] (Ka) طبق رابطه ارائه‌شده توسط عبدل قائد و همکاران[۲۴] به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\mathrm{Ka} = 0.157\left(\frac{u'}{S_L}\right)\mathrm{Re}_T^{-0.5} \qquad (۱۰)$$

---

۱. نحوه محاسبه این مقادیر در مرجع [۱۴] ارائه شده است.

۲. منظور برابربودن فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله (Ξeq) با نسبت سرعت شعله آشفته به شعله آرام است.

۳. عدد کارلوویتز (Karlovitz) برای گردابه‌های کوچک تعریف شده و به صورت نسبت مقیاس زمانی احتراق آرام (τ_c) نسبت به کوچک‌ترین مقیاس زمانی میدان جریان آشفته یعنی مقیاس زمانی کولموگروف (τ_K) بیان می‌شود.

www.SID.ir

Archive of SID

در معادله (۱۰)، $\mathrm{Re}_T = \frac{\bar{\rho}_u \tilde{k}^2}{\mu_u \tilde{\varepsilon}}$ عدد رینولدز در مقیاس انتگرالی است. در رابطه(۱۰)، اثر کشیدگی آشفتگی[1] بر نرخ سوزش توسط عدد مارکشتاین[2] (Ma) نشان داده شده است. این عدد تأثیر نرخ آزادشدن گرما بر انحنای محلی شعله یا تغییرات سطح شعله در امتداد جبهه آن را نشان می‌دهد. تاکنون مطالعات آزمایشگاهی بسیاری (به عنوان مثال [۲۵] و [۲۶])، در تعیین عدد مارکشتاین صورت پذیرفته است. یکی از راه‌های محاسبه عدد مارکشتاین برازش بر داده‌های آزمایشگاهی است. به عنوان مثال، در مرجع [۲۷]، برازشی خطی بر داده‌های آزمایشگاهی ارائه شده است. در روش SCOPE3، عدد مارکشتاین به وسیله چندجمله‌ایِ مرتبه ۶ (معادله زیر)، که بر داده‌های آزمایشگاهی تیلور[۲۸] در محدوده‌های مختلف نسبت هم‌ارزی برازش شده است، محاسبه می‌شود:

$$\mathrm{Ma} = a_6\varphi^6 + ... + a_1\varphi + a_0 = poly\left(\varphi, a_n\right) \qquad (۱۱)$$

در معادله (۱۱)، φ بیانگر نسبت هم‌ارزی مخلوط است. مقادیر a_n نیز با توجه به محدوده نسبت هم‌ارزی مخلوط گازی مورد نظر تعیین می‌شوند[۲۹]. در صورتی که نسبت هم‌ارزی بیشتر از یک باشد، مقادیر a_n برابر با ضرایب محدوده بالای جدول ۱ هستند؛ همچنین، در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر از یک، از ضرایب محدوده پایین جدول ۱ استفاده می‌شود.

جدول ۱- ضرایب چندجمله‌ای برازش‌شده بر عدد مارکشتاین مخلوط پروپان/هوا در شرایط استاندارد T_{ref}=۳۰۰K و P_{ref}=۱bar [۱۲][3]

محدوده نسبت هم‌ارزی	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
۰/۵ < φ < ۰/۷۵	۳/۷۳۹	-۵/۱۲۴	-۳۸/۱۴	-۱۳۴/۸	-۲۲۴/۶	-۱۴۴/۳	۰/۰
۰/۷۵ < φ < ۱/۲	۳/۷۳۹	-۵/۱۲۴	-۳۸/۱۴	-۱۳۴/۸	-۱۳۴/۸	-۱۳۴/۸	۰/۰

شبیه‌سازی عددی

در مقاله حاضر، اعتبارسنجی روش ترکیبیِ معادله انتقال وِلر و روش تجربی SCOPE3 در شبیه‌سازی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ با مدل‌سازی آزمایش صورت‌گرفته در شرکت FM Global بررسی شده است. هندسه به‌کار گرفته شده در این آزمایش‌ها، در شکل ۱ به صورت طرحواره نشان داده شده است. نتایج اندازه‌گیری‌های صورت‌گرفته نیز در مرجع [۲۰] ارائه شده است. مطابق مرجع [۲۰]، ابعاد هندسه شکل ۱، m^3 ۳×۴/۶×۴/۶ با خروجی مربعی‌شکل به مساحت m^2 ۵/۴ است. موانع به موازات دیواره‌های عمودی و با سطح مقطع مربعی‌شکل به ابعاد ۴۰×۴۰cm هستند که مطابق شکل ۱-(ب) قرار گرفته‌اند. مخلوط اولیه به وسیله تزریق پروپان خالص از یک ورودی، که در کف اتاقک تعبیه شده است، تهیه می‌شود. مخلوط حاصل، با استفاده از یک فن، در تمام اتاقک یکنواخت و همگن می‌شود. نسبت هم‌ارزی به وسیله طیف‌نگار جرمی سیرس[4] اندازه‌گیری می‌شود. تزریق پروپان تا هنگامی ادامه می‌یابد که نسبت هم‌ارزی مخلوط حاصل برابر با واحد شود.

فرایند آغازش در آزمایش صورت‌گرفته در شرکت FM Global با استفاده از یک جرقه‌زن میله‌ای کربنی، که در وسط اتاقک قرار داده شده است، صورت گرفته است. مدل‌سازی فرایند آغازش در روش عددی مدل‌سازی احتراق پیش‌مخلوط به دو دسته تقسیم می‌شود. در روش اول، متغیر پیشرفت واکنش در مدت زمان مشخصی از ۱ به صفر می‌رسد. در این روش، با توجه به سرعت سوزش آرام و نرخ رشد هسته اولیه شعله، متغیر پیشرفت واکنش با شیب مشخصی و در مدت زمان مشخصی، در ناحیه‌ای که جرقه درنظر گرفته می‌شود، از ۱ به صفر می‌رسد. فرایند شتاب‌گیری شعله به میزان بسیار زیادی به شیب درنظر گرفته شده و مدت زمان آن وابسته است. در واقع این متغیرها به نوع جرقه‌زن وابسته است. از این رو بهره‌گیری از این مدل در

1. Turbulent stretch
2. Markstein number

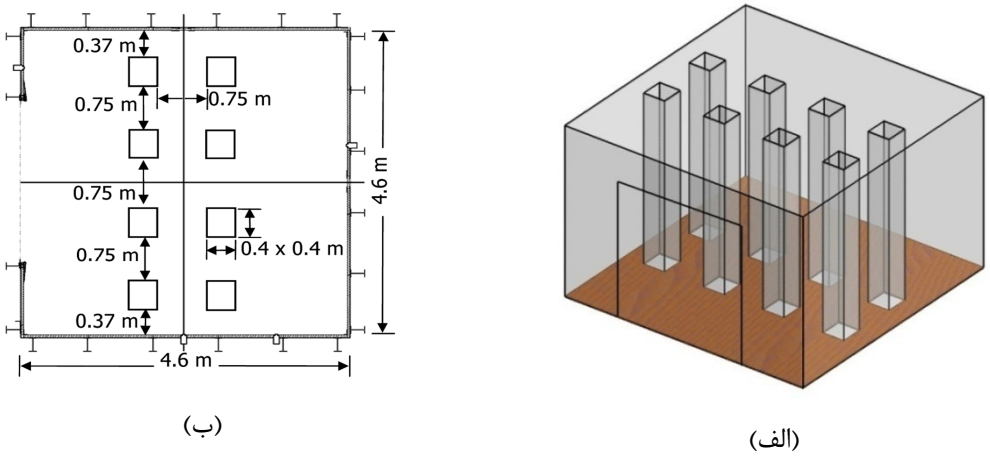
۳. ضریب a_6 چندجمله‌ای برازش‌شده بر مقادیر تجربی عدد مارکشتاین مخلوط پروپان/هوا برابر با صفر است.

4. Cirrus mass spectrometer

www.SID.ir

Archive of SID

مدل‌سازی میدان جریان نیازمند اطلاعات مربوط به جرقه‌زن در محاسبه صحیح نرخ رشد هسته شعله است. روش دیگر، صرف‌نظرکردن از فرایند جرقه و درنظر گرفتن ناحیه‌ای سوخته است. در این روش، فرایند رشد هسته اولیه شعله درنظر گرفته نمی‌شود. این روش به طور گسترده در مدل‌سازی پدیده شتاب‌گیری شعله به‌کار رفته است. شبیه‌سازی جرقه در حل عددی حاضر مدنظر نبوده و فرایند آغازش، مطابقِ مراجع [۳۰] تا [۳۲]، با استفاده از تعریف ناحیه‌ای با فرض b=۰/۵ و دمای شعله بی‌دررو[1]، صورت پذیرفته است. مطابق تعریفِ متغیر پیشرفت واکنش (b)، فرض b=۰/۵ به معنی مصرف‌شدن نیمی از سوخت در ناحیه آغازش و تأمین انرژی مورد نیاز جهت ادامه واکنش است.



(ب) (الف)

شکل ۱- نمای سه‌بعدی (الف) و تصویر دو بعدی [۲۰] (ب) از هندسه مورد مطالعه و مکان قرارگیری موانع در آن

شبیه‌سازی عددی به وسیله یک حلگر اصلاح‌شده به نام XiLargeScaleFoam[2] در نرم‌افزار اپن‌فوم[3] [۳۳] صورت پذیرفته است. در این حلگر، دستگاه معادلات بقای تراکم‌پذیرِ متوسط‌گیری‌شده با استفاده از الگوریتم PISO[4] [۳۳] حل می‌شود. گسسته‌سازی زمانی با استفاده از طرح مرتبه اول اولر صورت پذیرفته است. گسسته‌سازی مکانی سرعت با استفاده از طرح تفاضل مرکزی انجام شده است. متغیرهای اسکالر دیگر نیز با استفاده از طرح سوئبی[5] [۳۴]، که از مجموعه طرح‌های TVD[6] است، گسسته شده‌اند. روش سوئبی، همانند دیگر روش‌های TVD، در نزدیکی ناپیوستگی‌ها از مرتبه اول و در نواحی هموار از مرتبه‌های بالاتر (تفاضل مرکزی) بهره می‌برد. در این روش گذر از مرتبه بالاتر به مرتبه پایین‌تر، با استفاده از محدودکننده شیبی که روی متغیر اسکالر مورد نظر اعمال می‌شود، انجام می‌شود. جزئیات این روش در مرجع [۳۴] توضیح داده شده است.

مدل‌سازی انفجار با استفاده از شرط مرزی گرادیان صفر برای متغیرهای اسکالر دما (T) و متغیر پیشرفت واکنش (b) در خروجی و روی دیواره‌ها شکل می‌گیرد. سرعت نیز از شرط مرزی عدم لغزش در روی دیواره‌ها و شرط مرزی گرادیان صفر در خروجی بهره می‌برد. شرط مرزی فشار در دیواره‌ها از نوع گرادیان صفر است. در خروجی نیز از شرط مرزی غیرانعکاسی برای فشار استفاده شده است. در این نوع شرط مرزی، امواج برخوردکننده با مرز خروجی، جذب سطح مرزی شده و به درون محیط منعکس نمی‌شوند. جزئیات بیشتر در این مورد در مرجع [۳۵] آورده شده است.

1. Adiabatic flame temperature
۲. این حلگر بر پایه حلگر XiFoam، توسط مؤلفان اصلاح شده است. جزئیات بیشتر در مورد این حلگر در مرجع [۸] آورده شده است.
3. OpenFOAM
4. Pressure Implicit with Splitting of Operators
5. Sweby
6.Total Variation Diminishing

www.SID.ir

Archive of SID

گسسته‌سازیِ هندسه نشان داده شده در شکل ۱ با استفاده از شبکه‌بندی سازمان‌یافته صورت گرفته است. تعداد سلول‌هایِ محاسباتی به‌کار رفته در شبکه‌بندی این مسئله ۱۲۳۶۶۲۰ است. این شبکه‌بندی متشکل از سلول‌های شش‌وجهی منتظم با ابعاد ۴×۴×۴cm است. دو شبکه‌بندی ریزتر و درشت‌تر نیز، جهت بررسی عدم وابستگی حل عددی به شبکه‌بندی، استفاده شده است. با ریزتر و درشت‌ترکردن شبکه محاسباتی، بیشینه فشاری به‌دست‌آمده در محدوده بیشینه فشاری آزمایشگاهی است.

سرعت سوزش آرام در شبیه‌سازی انفجار مخلوط استوکیومتریک پروپان/هوا به صورت تابعی از فشار و دما فرض شده است. مقدار سرعت سوزش آرام این مخلوط مطابق مرجع [۱۰] برابر با ۰/۴۳ m/s درنظر گرفته شده است. ظرفیت گرمایی ویژه و آنتالپی کل مخلوط نیز به صورت چندجمله‌هایی از دما مطابق معادلات (۱۲) و (۱۳) فرض شده‌اند. ضرایب این چندجمله‌ای‌ها در جدول ۲ نشان داده شده است. لزجت مولکولی نیز با استفاده از قانون ساترلند[1] محاسبه شده است.

$$\frac{C_p^\circ}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \qquad (۱۲)$$

$$\frac{H^\circ}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \qquad (۱۳)$$

جدول ۲- ضرایب چندجمله‌ای برازش‌شده بر داده‌های جداول ترمودینامیکی مرجع [۳۶] در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه و آنتالپی کل

	محدوده دمایی	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
واکنش دهنده‌ها	۱۰۰۰-۲۰۰	۳/۴۷۶۹۶	۳/۶۷۴۹۹e-۴	۱/۸۴۸۶۶e-۶	-۹/۸۹۹۳e-۱۰	-۳/۱۰۲۱۴e-۱۴	-۱۵۷۰/۸۱
	۶۰۰۰-۱۰۰۰	۳/۲۸۰۶۹	۱/۹۵۰۳۵e-۳	-۶/۵۳۴۸۳e-۷	۱/۰۰۲۳۹e-۱۰	-۵/۶۴۶۵۳e-۱۵	-۱۶۰۹/۵۵
محصولات	۱۰۰۰-۲۰۰	۳/۴۹۶۱۲	۶/۵۰۳۶۴e-۴	-۲/۰۸۰۲۹e-۷	۱/۲۲۹۱e-۹	-۷/۷۳۶۹۷e-۱۳	-۱۱۰۸۰/۳
	۶۰۰۰-۱۰۰۰	۳/۱۰۶	۱/۷۹۶۸۲e-۳	-۵/۹۴۳۸۲e-۷	۹/۰۴۹۹۸e-۱۱	-۵/۰۸۰۳۳e-۱۵	-۱۱۰۰۳/۷

شبیه‌سازی با استفاده از مجموعه‌ای متشکل از ۱۰ رایانه با پردازنده دوهسته‌ای از نوع پنتیوم D با قدرت پردازش ۳/۴GHz و ۳GB حافظه جانبی انجام شده است. تقسیم میدان با استفاده از روش‌های مرتبه‌ای[2] صورت پذیرفته است. در روشِ مرتبه‌ای، تقسیم میدان محاسبات در سه جهت مختصاتی به ترتیب جهت معرفی شده (xyz)، تقسیم می‌شود[۳۳]. انجام یک شبیه‌سازی در روش ترکیبی با بهره‌گیری از شبکه‌بندی سازمان‌یافته با سلول‌های مکعبی‌شکل به ابعاد ۴×۴×۴cm، که در مجموع ۱۲۳۶۶۲۰ سلول محاسباتی را شامل می‌شود، حدود ۵۰ ساعت زمان لازم دارد.

نتایج

در شکل ۲، تغییرات فشار اندازه‌گیری‌شده در آزمایش انفجار ابر گازی توسط مرکز تحقیقاتی شرکت FM Global، متعلق به حسگر فشار P1، همراه با نمودار تغییرات فشار، محاسبه‌شده در مدل‌سازی حاضر، نشان داده شده است. روند تغییرات فشار در مدل‌سازی عددی همانند نتایج آزمایشگاهی یک بیشینه فشاری غالب را نشان می‌دهد. مقدار بیشینه فشاری در حدود ۰/۵ s پس از آغاز واکنش به‌دست آمده است که با نتایج آزمایشگاهی هم‌خوانی دارد.

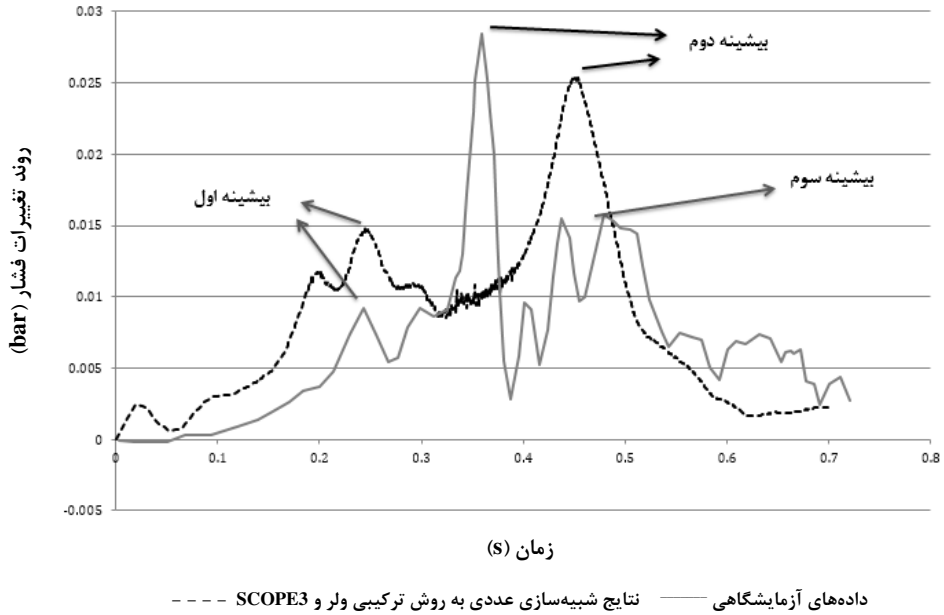
مطابق مطالعات برکبی و همکارانش[۱۰]، مدل‌سازی انتشار آرام شعله در لحظات اولیه نقش بسیار مهمی در محاسبات ایفا می‌کند. طبق مطالعات ایشان، نادیده‌گرفتن این پدیده موجب خطای بسیار در روند تغییرات فشار می‌شود. ایشان علت این پدیده را بیشتر محاسبه‌شدن فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله با استفاده از روش‌های تجربی در لحظات اولیه دانستند.

1. Sutherland's law
2. Hierarchical

www.SID.ir

Archive of SID

بنابراین، با استفاده از عدد رینولدز محلی جریان، بین شعله آرام و آشفته تمییز قائل شدند. با این وجود، در روش حاضر، مقدار فاکتور چروکیدگی به‌دست آمده از روش تجربی، با استفاده از معادله انتقال، تصحیح می‌شود. بنابراین، در لحظات اولیه که شعله به صورت آرام منتشر می‌شود، این روش قادر به پیش‌بینی مناسب رفتار شعله است. با این حال، مقادیر فشار در لحظات اولیه همچنان با خطا همراه است. دلیل این خطا در ادامه بررسی شده است.



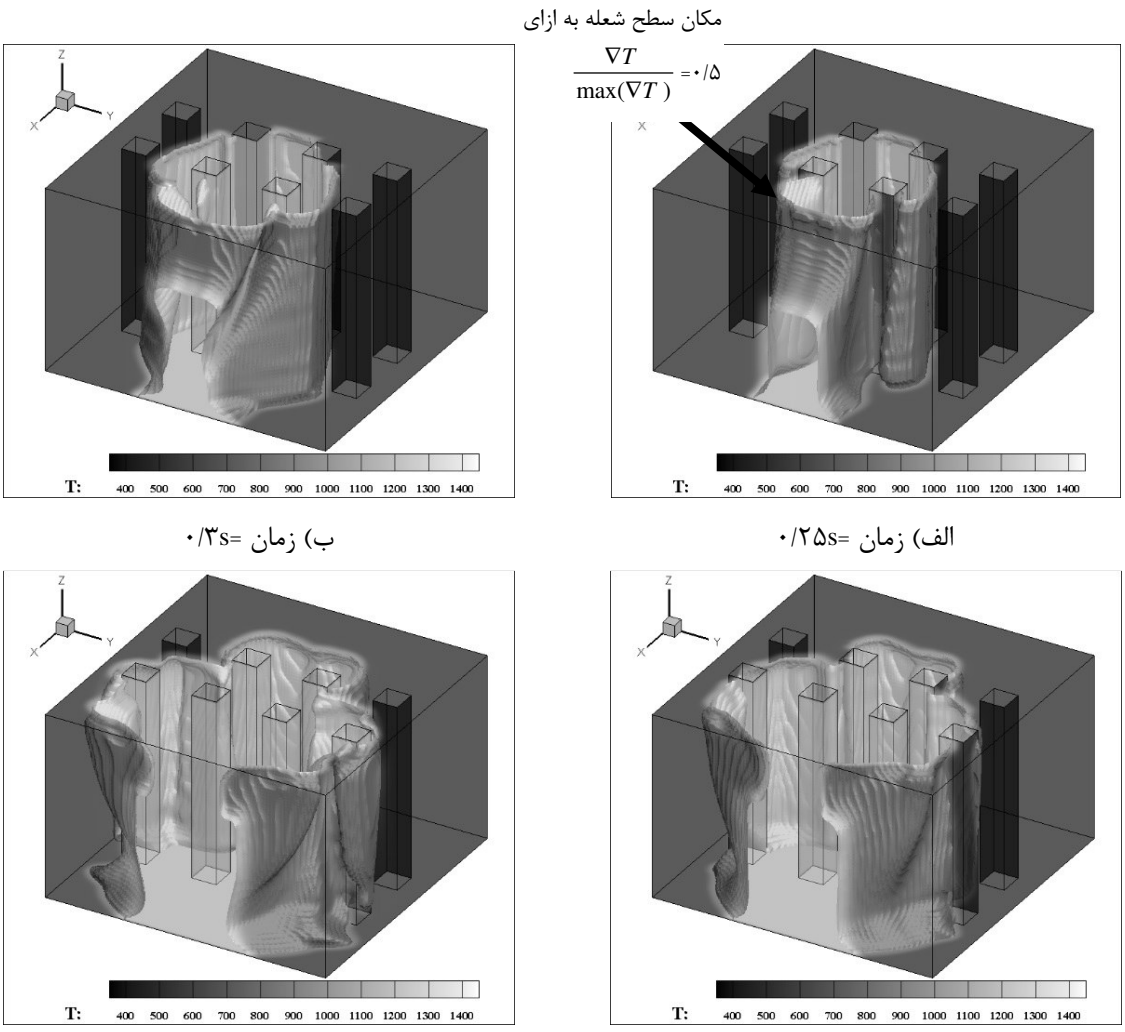
شکل ۲ مقایسه نتایج عددی و نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۷]، تغییرات فشار حاصل از انفجار مخلوط استوکیومتریک پروپان/هوا و آغازش از وسط محفظه

بیشتربودن فشار محاسبه‌شده در لحظات اولیه و مقدار بیشینه فشاری قبل از s ۰/۰۵ احتمالاً بر اثر فرض اولیه آغازش است. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، در مدل‌سازی ارائه‌شده، فرایند آغازش با فرض ناحیه‌ای با مقدار b=۰/۵ و دمای شعله بی‌دررو مدل شده است. مطابق این فرض، در گذر از ناحیه سوخته به نسوخته، پرشی در مقادیر دما و متغیر پیشرفت واکنش وجود دارد. بنابراین، احتمال دارد که آغازش درنظر گرفته‌شده در این مدل‌سازی، با تشدید شرایط ناپایداری، باعث بیشترشدن مقدار بیشینه فشاری در لحظات اولیه شده باشد. همچنین، در لحظات اولیه واکنش، شعله به صورت آرام منتشر می‌شود. در این شرایط، آشفتگی میدان جریان کم بوده و سطح هموار شعله، تنها به دلیل ناپایداری لاندا-داریوس[۳۷]، به میزان کمی ناهموار می‌شود. از این رو بهره‌گیری از مدلی که شعله را به صورت آشفته در نظر می‌گیرد موجب ایجاد خطایی در روند محاسبات می‌شود.

در شکل ۳ کانتور سطح شعله، در زمان‌های قبل و بعد از عبور شعله از روی موانع، نشان داده شده است. با توجه به رژیم حاکم بر انتشار شعله (رژیم فلیملت)، شعله سطح نازکی مابین محصولات و واکنش‌دهنده‌ها بوده که با گرادیان دمایی بالا همراه است. از این رو، برای مشخص‌کردن بهتر مکان سطح شعله در کانتور دما، نرمال گرادیان دما محاسبه شده است. با استفاده از این متغیر، سطحی با مقدار نرمال گرادیان دمای ۰/۵ به عنوان سطح شعله در زمان‌های مختلف مشخص شده است. با توجه به نتایج به‌دست آمده در شکل ۲، افزایش ناگهانی فشار (بیشینه‌های فشاری اول و دوم) در زمان عبور شعله از روی موانع رخ می‌دهد. به صورت دقیق‌تر در این لحظات دو تاج شعله پس از عبور از موانع به هم رسیده‌اند. این نتایج حاکی از آن است که روش مدل‌سازی گذرای RANS قابلیت محاسبه تغییرات سریع فشار در هنگام عبور شعله از روی موانع را داراست.

www.SID.ir

Archive of SID



الف) زمان =۰/۲۵s ب) زمان =۰/۳s

ج) زمان =۰/۴۵s د) زمان =۰/۵s

شکل ۳- کانتور سطح شعله به ازای نرمال گرادیان دمای ۰/۵ در انفجار ابر گازی پروپان/هوای استوکیومتریک با آغازش از وسط محفظه

علاوه بر مطالب بیان‌شده، مقادیر اندازه‌گیری‌شده از طریق آزمایش نیز عاری از خطا نیست[۲۰]. همان‌طور که در جدول ۳ مشاهده می‌شود، مقادیر بیشینه فشار اندازه‌گیری‌شده از طریق آزمایش بین ۰/۰۲۵ تا ۰/۰۳۱ بار تغییر کرده است. خطای موجود در بیشینه فشاریِ اندازه‌گیری‌شده در داده‌های آزمایشگاهی می‌تواند به دلایل مختلف از جمله بر اثر انحراف در شرایط اولیه[۱] موجود در آزمایش باشد.

جدول ۳- نتایج آزمایشگاهی تغییرات بیشینه فشاریِ انفجار مخلوط استوکیومتریک پروپان/هوا[۲۰]

آزمایش	آزمایش ۱	آزمایش ۲	آزمایش ۳
فشار بیشینه (بار)	۰/۰۲۵	۰/۰۲۷	۰/۰۳۱

۱- شرایط اولیه حاکم بر مسئله، مانند فرایند آغازش، در آزمایش‌های مکرر دقیقاً یکسان نیست[۲۰]. همچنین، بیشینه فشاری اندازه‌گیری‌شده به دقت تجهیزات اندازه‌گیری وابسته است. این شرایط بر مقدار بیشینه فشاری اندازه‌گیری‌شده اثر گذاشته و بنابراین با انجام مجدد آزمایش بیشینه فشاری جدیدی اندازه‌گیری می‌شود.

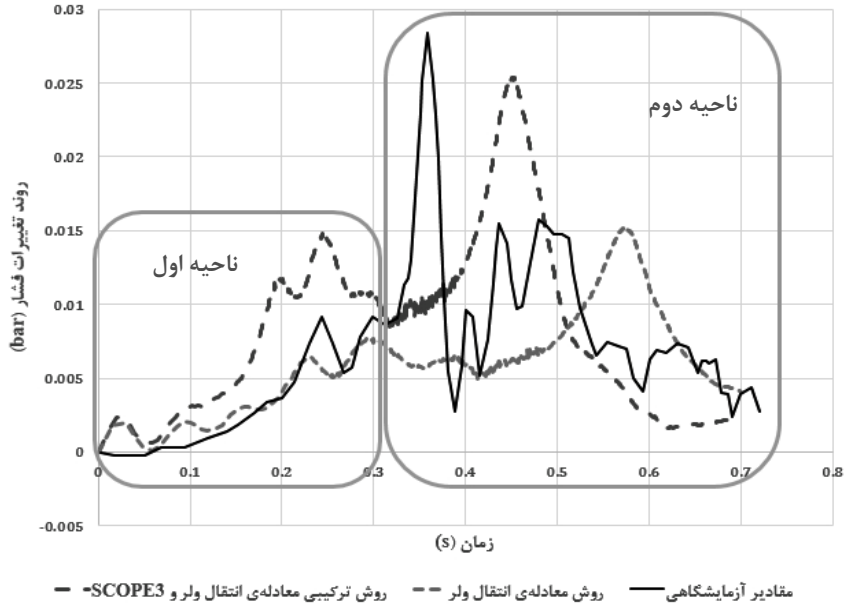
www.SID.ir

Archive of SID

با توجه به روند تغییرات فشار اندازه‌گیری‌شده از طریق آزمایش، بیشینه فشاری سومی نیز مشهود است. این در حالی است که این بیشینه فشاری در نتایج به‌دست آمده از مدل‌سازی عددی مشاهده نمی‌شود. دیده‌نشدن بیشینه فشاری سوم در نتایج عددی احتمالاً بر اثر نادیده‌گرفتن انفجار بیرونی است. با شروع واکنش، بر اثر انبساط سطح شعله، گازهای سوخته‌نشده در راستای حرکت شعله هل داده می‌شوند. در اثر این پدیده، جریانِ گاز سوخته نشده‌ای به بیرون از محفظه شکل می‌گیرد. با جریان این گاز پیش‌مخلوط به بیرون، ابر گازی رقیق‌تری در بیرون از محفظه تشکیل خواهد شد. هنگامی که شعله به بیرون از محفظه راه می‌یابد، انفجاری در بیرون از محفظه نیز رخ می‌دهد. امواج فشاری حاصل از این انفجار باعث بالارفتن فشار در داخل محفظه می‌شود. بنابراین، می‌توان بیشینه سوم مشاهده‌شده در نتایج آزمایشگاهی را بر اثر انفجار بیرونی دانست. در شبیه‌سازی ارائه‌شده، فقط فضای داخل محفظه شکل ۱ مدل شده است. بنابراین اثر انفجار بیرونی در آن مشاهده نشده است.

بررسی مدل فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله در روش احتراقی ترکیبی

یکی از ویژگی‌های مهم روش ترکیبی استفاده از روش جبری SCOPE3 در محاسبه فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله (Ξ_{eq}^{*}) است. در شکل ۴ روند تغییرات فشار روش ترکیبی با معادله انتقال وِلر مقایسه شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، بیشیینه غالبِ (بیشینه دوم) محاسبه‌شده با استفاده روش ترکیبی معادله انتقال وِلر و SCOPE3 در مقایسه با معادله انتقال وِلر از دقت بالاتری برخوردار است. با وجود این، در لحظات اولیه (ناحیه اول)، روند تغییرات فشار در روش معادله انتقال وِلر بسیار بهتر از روش ترکیبی است. از این رو مقایسه این دو روش در دو ناحیه مجزا صورت پذیرفته است.



شکل ۴- مقایسه نمودار نتایج عددی روش احتراقیِ ترکیبی با معادله انتقال وِلر در محاسبه تغییرات فشار حاصل از انفجار مخلوط استوکیومتریک پروپان/هوا در مقیاس بزرگ و آغازش از وسط محفظه

در روش ارائه‌شده توسط وِلر، مقدار فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله (Ξ_{eq}^{*}) با استفاده از رابطه گالدر به صورت زیر محاسبه می‌شود[۱۲]:

$$\Xi_{eq}^{*} = 1 + 0.62\sqrt{\frac{u'}{S_L}}\,\mathrm{Re}_K \qquad (۱۴)$$

www.SID.ir

Archive of SID

اما در روش ترکیبی وِلر و SCOPE3، فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله، با استفاده از نوعی متوسط‌گیری از مقادیر فاکتور چروکیدگی سطح شعله در رینولدزهای بالا (رابطه ۱۵) و پایین (رابطه ۱۴)، به‌دست می‌آید. در این روش، اثر آشفتگی‌های بالا با استفاده از معادله زیر درنظر گرفته می‌شود[۱۲]:

$$\Xi_{eq}^{*} = 1.60\left(\mathrm{Ka}\times\mathrm{Ma}\right)^{-1/3} \qquad (۱۵)$$

در معادله (۱۵)، تأثیر آشفتگی‌های بالا به صورت حاصل‌ضرب دو عدد بی‌بعد کارلویتز و مارکشتاین درنظر گرفته شده است. عدد کارلویتز نسبت مقیاس زمانی احتراق آرام (τ_c) را به کوچک‌ترین مقیاس زمانی میدان جریان آشفته، مقیاس زمانی کولموگروف (τ_K)، بیان می‌کند. بر اثر افزایش میزان آشفتگی، مقیاس زمانی کولموگروف کاهش می‌یابد؛ در این صورت عدد کارلویتز افزایش می‌یابد. از این رو تأثیر این عدد، با افزایش میزان آشفتگی، افزایش می‌یابد. اثر کشیدگی آشفتگی نیز در معادله (۱۵) به وسیله عدد مارکشتاین (Ma) نشان داده شده است. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، این عدد تأثیر نرخ آزادشدن گرما بر انحنای محلی شعله یا تغییرات سطح شعله در امتداد جبهه آن را نشان می‌دهد. پاتوک و همکارانش، با درنظر گرفتن حاصل‌ضرب این دو عدد، تأثیر آشفتگی‌های بالا را نیز درنظر گرفتند. ایشان با داده‌های بالغ بر ۳۰۰ آزمایش در مقیاس بزرگ، ضرایب این معادله را کالیبره کردند. از این رو انتظار می‌رود که عدم استفاده از معادله بالا در روش معادله انتقال وِلر، یا به بیان دیگر، درنظر نگرفتن اثر آشفتگی‌های بالا در این مدل، باعث شود فاکتور چروکیدگی تعادلی در رینولدزهای بالا کمتر محاسبه شود. این نتیجه در روند تغییرات فشاری حاصل از روش معادله انتقال وِلر در شکل ۴ به‌خوبی نمایان است. در این شکل، روند تغییرات فشار در روش معادله انتقال وِلر و روش ترکیبی نشان داده شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نادیده‌گرفتن اثر آشفتگی‌های بالا در روش معادله انتقال وِلر باعث کمتر پیش‌بینی‌شدن بیشینه فشاری شده است.

در لحظات آغازین واکنش، به دلیل انتشار آرام شعله، درنظر گرفتن کشیدگی سطح شعله می‌تواند باعث ایجاد خطا در محاسبه فاکتور چروکیدگی سطح شعله شود. این پدیده در ناحیه اولِ مقایسه نتایج حاصل از معادله انتقال وِلر و روش ترکیبی به‌خوبی نمایان است. همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، اختلاف فشار محاسبه‌شده با نتایج تجربی در نتایج حاصل از روش معادله انتقال وِلر، در مقایسه با روش ترکیبی، کمتر است. در لحظات اولیه که شعله به صورت آرام منتشر می‌شود، میزان آشفتگی میدان جریان نیز بسیار کم است. بنابراین، درنظر گرفتن اثر آشفتگی‌های بالا در لحظات اولیه انتشار شعله می‌تواند موجب پیش‌بینی مقدار بیشتر برای سطح شعله و در نتیجه افزایش فشار در روش ترکیبی در مقایسه با معادله انتقال وِلر باشد. این امر بر اثر استفاده از روش SCOPE3 در محاسبه فاکتور چروکیدگی تعادلی سطح شعله در روش ترکیبی است.

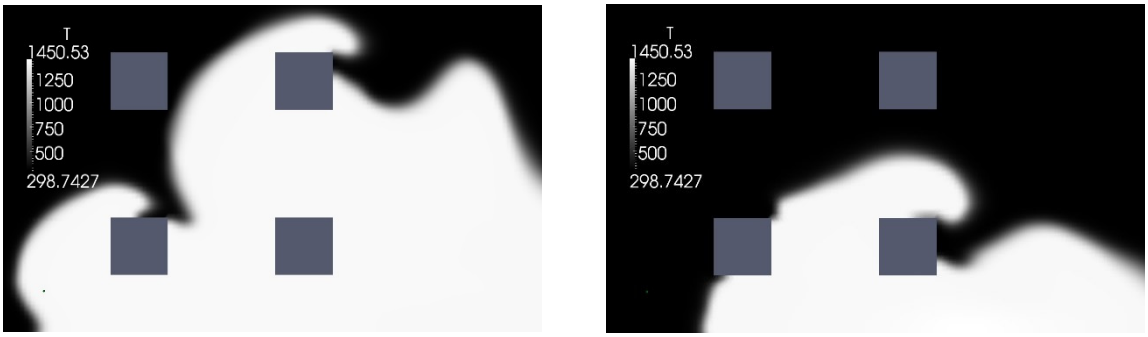
بررسی نمودار ورتی‌سیتی در شتاب‌گیری شعله

در شکل ۵، طرحی از دمای میدان و ورتیسیته جریان در هنگام عبور شعله از روی موانع نشان داده شده است. در این شکل، سطح شعله با توجه به اختلاف دمایی بالا بین واکنش‌دهنده‌ها و محصولات (ردیف بالایی) قابل تشخیص است. با توجه به نمودار تغییرات فشار، شکل ۴، بیشینه فشاری اول و دوم به ترتیب پس از زمان‌های ۰/۲۵ و ۰/۴۵ ثانیه مشاهده می‌شود. همان‌طور که در بخش پیش بیان شد، این بیشینه‌های فشاری زمانی رخ می‌دهد که شعله از روی موانع گذشته باشد. بنابراین، در شکل ۵ کانتور دما (ردیف اول) و ورتیسیته جریان (ردیف دوم) در زمان‌های ۰/۲۵ و ۰/۴۵ ثانیه رسم شده‌اند. در این شکل‌ها، به دلیل مقایسه بهتر نتایج، از مقیاس‌های برابر در نمایش ورتیسیته جریان استفاده شده است.

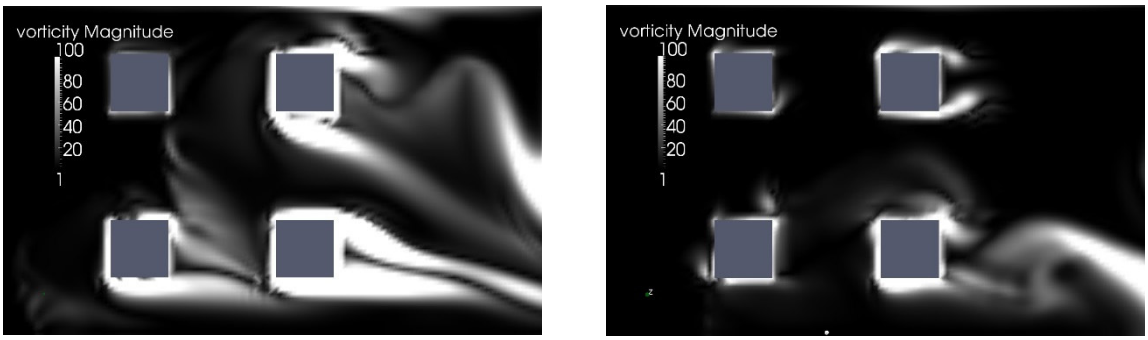
بر اثر انبساط گازهای سوخته، نیرویی به گازهای نسوخته مقابل شعله اعمال می‌شود. بر اثر این نیرو، جریانی در مقابل سطح شعله شکل می‌گیرد. با عبور این جریان از روی موانع، دنباله‌ای در پشت آن‌ها تشکیل می‌شود. بر اثر تشکیل این دنباله، گردابه‌هایی در مقابل سطح شعله شکل می‌گیرد. در شکل ۵، با رسم کانتور بزرگی ورتیسیته جریان، معیاری جهت قدرت این گردابه‌ها نشان داده شده است. ورتیسیته‌های تشکیل‌شده عامل اصلی به‌هم‌ریختگی و افزایش سطح شعله‌اند.

www.SID.ir

Archive of SID



نمودار دما

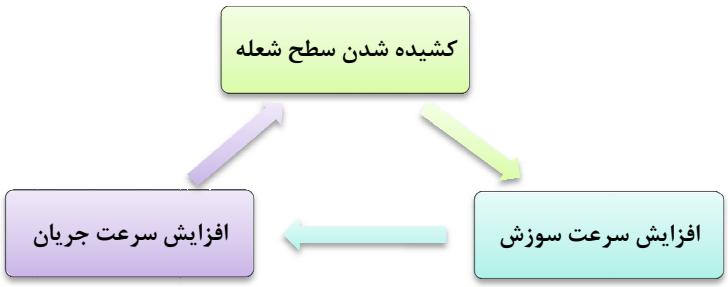


نمودار ورتیسیته جریان

زمان = ۰/۲۵s زمان = ۰/۴۵s

شکل ۵- کانتور دما (ردیف اول) و ورتی‌سیته جریان (ردیف دوم) در انفجار ابر گازی پروپان/هوای استوکیومتریک با آغازش از وسط محفظه

دی سارلی و همکارانش[۴]، در سال ۲۰۰۹، به بررسی این پدیده در شتاب‌گیری شعله در مقیاس کوچک پرداختند. ایشان با استفاده از میدان بردار سرعت به بررسی نقش موانع در شتاب‌گیری شعله پرداختند. مطابق نتایج آن‌ها، قدرت گردابه‌ها با عبور شعله از روی موانع متعدد افزایش می‌یابد. این مسئله به دلیل تقابل جریان تولیدشده در جریان پایین‌دست شعله با سطح شعله است. هنگامی که در مسیر انتشار شعله مانعی قرار داشته باشد، به دلیل ایجاد جریان چرخشی در پشت مانع، اختلاط افزایش پیدا کرده و در نتیجه نرخ سوزش نیز افزایش می‌یابد. افزایش نرخ سوزش موجب تقویت میدان جریان و افزایش سرعت آن می‌شود. این فرایند، مانند سیستمی با پس‌خوران مثبت (شکل ۶)، سبب شتاب‌گیری شعله می‌شود. در شکل ۵، تکرارشدن این پدیده با عبور شعله از روی موانع متعدد نشان داده شده است.



شکل ۶- سازوکار با پس‌خوران مثبت تأثیر موانع بر شتاب‌گیری شعله

www.SID.ir

Archive of SID

با مقایسه نمودار بزرگی ورتیسیته جریان در زمان‌های ۰/۲۵ و ۰/۴۵ ثانیه، مشاهده می‌شود که بزرگی ورتیسیته جریان، در پشت موانعی که شعله زودتر به آن‌ها می‌رسد، کوچک‌تر است. در هنگام عبور شعله از این موانع، گردابه‌های ضعیفی در پشت آن‌ها تشکیل می‌شود. این گردابه‌ها موجب چروکیده‌شدن سطح شعله و در نتیجه افزایش سطح آن می‌شوند. با افزایش سطح شعله، نرخ سوزش افزایش می‌یابد. با افزایش نرخ سوزش، میزان تولید محصولات نیز افزایش می‌یابد. از این رو نیروی واردشده بر گازهای نسوخته مقابل شعله افزایش یافته و در نتیجه سرعت جریان نیز افزایش می‌یابد. در زمان رسیدن شعله به موانع بعدی، به دلیل بیشتربودن تکانه جریان، گردابه‌های قوی‌تری در پشت مانع تشکیل می‌شود. این امر موجب افزایش چروکیدگی سطح شعله و در نتیجه افزایش نرخ سوزش در مقایسه با موانع پیشین می‌شود. در صورتی که موانع متعددی در مسیر انتشار شعله وجود داشته باشد، کشیده‌شدن سطح شعله موجب شتاب‌گرفتن شعله می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، به منظور بررسی انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، محفظه FM Global با هشت مانع مبنای مطالعه قرار گرفت. شبیه‌سازی با درنظر گرفتن انفجار ابر گازی در مخلوط استوکیومتریک پروپان/هوا صورت پذیرفت. انتشار شعله نیز با استفاده از مدل ترکیبی معادله انتقال فاکتور چروکیدگی سطح شعله وِلر و روش SCOPE3 مدل شد. این شبیه‌سازی به صورت سه‌بعدی و با استفاده از نرم‌افزار اپن‌فوم به صورت پردازش موازی انجام شد.

نتایج کار حاضر نشان می‌دهد که مدل ترکیبی معادله انتقال وِلر و مدل تجربی SCOPE3، در پیش‌بینی بیشینه فشاری در انفجار ابر گازی در مقیاس بزرگ، نسبت به مدل‌های معادله انتقال وِلر، دقیق‌تر عمل می‌کند. همان‌طور که در نتایج مدل‌سازی مشاهده شد، مدل احتراقی ترکیبی، مقدار و زمان رسیدن به بیشینه فشاری را با دقت بسیار خوبی پیش‌بینی می‌کند. البته روند تغییرات فشار در مدل انتقال وِلر، در نسبت‌های آشفتگی کم، دقیق‌تر از روش ترکیبی است. این پدیده احتمالاً به دلیل درنظر گرفتن آشفتگی‌های بالای میدان جریان در مدل SCOPE3 است. از این رو به‌نظر می‌رسد، با درنظر گرفتن معیاری مانند فاکتور چروکیدگی سطح شعله، نتایج حاصل از مدل SCOPE3 می‌تواند بهبود بخشیده شود.

استفاده از فرض انتشار شعله آرام در لحظات اولیه و انتقال به شعله آشفته با توجه به عدد رینولدز، اگر چه باعث بهبود محاسبه بیشینه فشاری می‌شود؛ با این حال زمان انتشار شعله همچنان کمتر پیش‌بینی می‌شود[۱۰]. اما با استفاده از معادله انتقال چگالی سطحی شعله و ترکیب آن با روش SCOPE3، علاوه بر بهبود در محاسبه بیشینه فشاری، زمان انتشار شعله نیز بسیار خوب پیش‌بینی شد. با این حال، به دلیل حل معادله انتقال سطحی شعله، زمان انجام محاسبات افزایش می‌یابد. بنابراین مطالعه بیشتر در این زمینه در راستای کاهش زمان انجام محاسبات ضروری است.

در این مقاله همچنین، نقش موانع در شتاب‌گیری شعله در انفجار ابر گازی با مقیاس بزرگ بررسی شد. همان‌گونه که مشاهده شد، موانع، با به‌هم‌ریختن سطح شعله، باعث بالارفتن نرخ سوزش می‌شوند. این امر موجب افزایش آشفتگی میدان جریان و در نتیجه افزایش چروکیدگی سطح شعله می‌شود. این فرایند مانند سازوکاری با پس‌خوران مثبت عمل کرده و موجب افزایش نرخ سوزش و به تبع آن افزایش آشفتگی جریان می‌شود. در صورت وجود موانع متعدد، این سازوکار مطابق شکل ۶ تکرار شده و موجب شتاب‌گرفتن شعله می‌شود.

مراجع

1. R. S. Cant, W. N. Dawes and A. M. Savill, "Advanced CFD and Modeling of Accidental Explosions," *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36, 2004, pp. 97-119.
2. C. J. Lea and H. S. Ledin, "A Review of the State of Art in Gas Explosion Modeling," Health and Safety Laboratory Report, HSL/2002/02, 2002.

www.SID.ir

Archive of SID

3. R. Hall, A. R. Masri, P. Yaroshchyk and S. S. Ibrahim, "Effects of Position and Frequency of Obstacles on Turbulent Premixed Propagating Flames," *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp. 439-446.
4. V. Di Sarli, A. Di Benedetto, G. Russo, S. Jarvis, E. J. Long and G. K. Hargrave, "Large Eddy Simulation and PIV Measurements of Unsteady Premixed Flames Accelerated by Obstacles," *Flow, Turbulence and Combustion*, 83, 2009, pp. 227-250.
5. C. T. Johansen and G. Ciccarelli, "Visualization of the Unburned Gas Flow Field Ahead of an Accelerating Flame in an Bstroucted Square Channel," *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp. 405-416.
6. D. J. Park, Y. S. Lee and A. R. Green, "Experiments on the Effects of Multiple Obstacles in Vented Explosion Chambers," *Journal of Hazardous Materials*, 153, 2008, pp. 340-350.
7. D. J. Park, A. R. Green, Y. S. Lee and Y. C. Chen, "Experimental Studies on Interactions between a Freely Propagating Flame and Single Obstacles in a Rectangular Confinement," *Combustion and Flame*, 150, 2007, pp. 27-39.
8. M. Timaji, "A Study on the Effect of Obstacle Arrangment on Acceleration of Flame in Vapor Cloud Explosion," MSc. Thesis, Faculty of Engineering, Tarbiat modares university, Iran, January 2012, (in Farsi).
9. M. Maremonti, G. Russo, E. Salzano and J. H. S. Lee, "Numerical Simulation of Turbulent Flame Acceleration," *17th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, Heidelberg, Germany, July 1999.
10. P. Birkby, R. S. Cant, A. M. Savill, "The Application of a Laminar Flamelet Model to Confined Explosion Hazards," *Flow, Turbulence and Combustion*, 63, 1999, pp. 361-377.
11. B. J. Arntzen, "Modelling of Turbulence and Combustion for Simulation of Gas Explosions in Complex Geometries", PhD Thesis, Faculty of Engineering Science & Technology, Norwegian University of Science and Technology, Norway, May 1998.
12. J. S. Puttock, M. R. Yardley and T. M. Cresswell, "Prediction of Vapour Cloud Explosions using the SCOPE Model," *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 13, 2000, pp. 419-431.
13. A. Cates and B. Samuels, "A Simple Assessment Methodology for Vented Explosions," *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 4, 1991, pp. 287-296.
14. J. S. Puttock, "Developments in the Congestion Assessment Method for the Prediction of Vapour-Cloud Explosions," *Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries*, Proceedings of the 10th International Symposium, Stockholm, Sweden, 2001, pp. 1107-1133.
15. H. G. Weller, C. J. Marooney and A. D. Gosman, "A New Spectral Method for Calculation of the Time-Varying Area of a Laminar Flame in Homogeneous Turbulence," *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 23, 1991, pp. 629-636.
16. H. G. Weller, "The Development of a New Flame Area Combustion Model using Conditional Averaging," Thermo-Fluids Section Report, TF/9307, 1993.
17. G. Tabor and H. G. Weller, "Large Eddy Simulation of Premixed Turbulent Combustion using Ξ Flame Surface Wrinkling Model", *Flow, Turbulence and Combustion*, 72, 2004, pp. 1-28.
18. P. A. Urtiew, J. Brandeis, and W. J. Hogan, "Experimental Study of Flame Propagation in Semiconfined Geometries with Obstacles," *Combustion Science and Technology*, 30, 1983, pp. 105-119.
19. J. E. Elsworth, J. A. Eyre and F. D. Wayne, "Liquefied Gas Spillages in Partially Confined Spaces," *Institution of Chemical Engineers*, 400, 1984, pp. 26-31.
20. C. R. Bauwens, J. Chaffee and S. Dorofeev, "Effect of Ignition Location, Vent Size, and Obstacles on Vented Explosion Overpressures in Propane-Air Mixtures," *Combustion Science and Technology*, 182, 2010, pp. 1915-1932.
21. G. Heidarinejad, "An introduction to turbulence," auther, 978-964-330-505-5, 2009, (in Farsi).
22. T. Poinsot and D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd Edition, PA 19118 USA, R. T. Edwards, Inc., 2005.
23. R. O. S. Prasad, R. N. Paul, Y. R. Sivathanu and J. P. Gore, "An Evaluation of Combined Flame Surface Density and Mixture Fraction Models for Nonisenthalpic Premixed Turbulent Flames," *Combustion and Flame*, 117, 1999, pp. 514-528.
24. R. G. Abdel-Ghayed, K. J. Al-Khishali, and D. Bradley, "Turbulent Burning Velocities and Flame Straining in Explosions," *Proceeding of the Royal Society of London*, 391,1984, pp. 393-414.
25. L. K. Tzeng, M. A. Ismail and G. M. Faeth, "Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers of Hydrocarbon/Air Flames," *Combustion and Flame*, 95, 1993, pp. 410-26.
26. X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley, "Laminar Burning Velocity and Markstein Lengths of Methane–Air Mixtures," *Combustion and Flame*, 121, 2000, pp. 41-58.
27. J. F. Driscoll, "Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities", Progress in Energy and Combustion Science, 34, 2008, pp. 91–134.
28. S. C. Taylor, "Burning Velocity and the influence of flame stretch", PhD Thesis, University of Leeds, UK. 1991.
29. L. Phillips, "Shell FRED; Fire, Release, Explosion, Dispersion; Hazard Consequence Modelling Package", Technical Guide, Shell Research Ltd., 2007.
30. M. P. Kirkpatrick, S. W. Armfield, A. R. Masri and S. S. Ibrahim, "Large Eddy Simulation of a Propagating Turbulent Premixed Flame," *Flow*, *Turbulence and Combustion*, 70, 2003, pp. 1-19.
31. A. R. Masri, S. S. Ibrahim and B. J. Cadwallader, "Measurements and Large Eddy Simulation of Propagating Premixed flames," *Experimental Thermal and Fluid Science*, 30, 2006, pp. 687-702.

www.SID.ir

Archive of SID

32. S. S. Ibrahim, S. R. Gubba, A. R. Masri and W. Malalasekera, "Calculations of Explosion Deflagrating Flames using a Dynamic flame Surface Density Model," *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 22, 2009, pp. 258-264.
33. http://www.openfoam.org/docs/user/.
34. P. K. Sweby, "High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws," *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21, 1984, pp. 995-1011.
35. S. Parvar, "Nonreflecting Boundary Condition in Detonation Simulatoin," MSc. Thesis, Faculty of Engineering, Tarbiat modares university, Iran, January 2010, (in Farsi).
36. W. Malcolmand Jr. Chase, *NIST-JANAF Thermochemical Tables*, Fourth Edition, Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph 9, 1998.
37. S. B. Dorofeev, "Flame Acceleration and Explosion Safety Applications," *Proceedings of the Combustion Institute*, 33, 2011, pp. 2161-2175.

English Abstract

Large Scale Flame Acceleration Modeling by a New Combined Combustion Model

M. Timaji and K. Mazaheri
Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University
(Received: 2012.3.6, Received in revised form: 2012.10.4, Accepted: 2012.10.21)

In a vapor cloud explosion, flame propagation phenomenon and turbulence flow field occur simultaneously. At the same time, the existence of obstacles in the flame propagation direction, leads to wrinkling of the flame front. The mechanism of flame wrinkling phenomenon occurs due to the effect of the flame-vortex interactions. Large scale vortices deform the flame front and increase its surface area. Increasing flame surface area ends in an increase of burning velocity and intensification of pressure build-up. The major challenge in modeling of large scale vapor cloud explosion is calculation of turbulent flame speed. In this paper a combined model of Weller's wrinkling factor transport equation and SCOPE3 model was utilized to calculate this parameter. The SCOPE3 model considers high intensity turbulence. Therefore,the combined model is suitable for modeling of the vapor cloud explosion in presence of significant obstacles. Numerical results also confirm the ability of this model to accurately predict pressure history.

Keywords: Vapor Cloud Explosion, Combined Model, Flame surface density, SCOPE3 Model, Large Scale

www.SID.ir