

برآورد میزان آلاینده‌های NOx در یک محفظه احتراق توربین گاز صنعتی با روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و مدل‌سازی شبکه رآکتور

محمدعلی سرودی^{۱*}، سارا منتظری‌نژاد^۲، احسان ملاحسن‌زاده^۳، سجاد رضایت^۴ و محمد شهسواری^۵

۱- کارشناس ارشد، مهندسی هوافضا، شرکت توربوتک، تهران (نویسنده مخاطب)، m.soroudi@turbotec-co.com

۲- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، شرکت توربوتک، تهران، s.montazerinejad@turbotec-co.com

۳- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، شرکت توربوتک، تهران، e.hassanzadeh@turbotec-co.com

۴- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، شرکت توربوتک، تهران، s.rezayat@turbotec-co.com

۵- دکتری، مهندسی هوافضا، شرکت توربوتک، تهران، m.shahsavari@turbotec-co.com

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۹۷/۰۱/۰۱، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۷/۰۲/۱۷، پذیرش: ۹۷/۰۲/۲۸)

چکیده: مطالعه حاضر به برآورد آلاینده‌های NOx در محفظه احتراق یک موتور توربین گاز صنعتی با استفاده از رویکرد مدل‌سازی شبکه رآکتور می‌پردازد. تولید شبکه رآکتور بر مبنای توزیع زمانی- مکانی کسر مخلوط در بالادست جبهه شعله و زمان اقامت جریان در حجم شعله انجام شده است. بدین منظور، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ برای ارزیابی توزیع کسر مخلوط در بالادست جبهه شعله مورد استفاده قرار گرفته و زمان اقامت با استفاده از مدل‌سازی RANS محاسبه شده است. علاوه بر این، موقعیت جبهه شعله و حجم شعله با استفاده از شبیه‌سازی RANS و نیز با استفاده از نرم‌افزار ENERGIICO تعیین شده است. نتایج محاسبات با استفاده از اطلاعات تجربی موتور صحت‌گذاری شده و دقت بالای رویکرد پیشنهادی در برآورد میزان آلاینده‌های NOx در محفظه مورد مطالعه را تایید کرده است. مطالعات پارامتری مختلفی برای ارزیابی آثار ترکیب سوخت، سینتیک شیمیایی، موقعیت شعله، و رژیم احتراقی بر مسیرهای تولید NOx نیز انجام شده است. نتایج مطالعات نشان داده که موقعیت شعله و ترکیب سوخت بیشترین تاثیر را بر میزان تولید NOx دارند. با استفاده از این رویکرد، محفظه مورد بحث از نظر آلاینده‌های NOx ارتقا یافته و میزان این آلاینده‌ها از سطح ۲۵ ppmvd به ۱۵ ppmvd کاهش داده شده‌اند.

کلیدواژگان: توربین گاز، آلاینده‌های NOx، شبکه رآکتور، مدل‌سازی، ارتقای محفظه

مقدمه

در دهه‌های اخیر، کاهش آلاینده‌های احتراق یکی از چالش‌های اصلی در مسیر توسعه موتورهای توربین گاز هوایی [۱] و صنعتی [۲] بوده است. در موتورهای توربین گاز صنعتی دارای محفظه‌های احتراق مجهز به تکنولوژی کنترل آلاینده‌های خشک (بدون استفاده از تزریق آب یا بخار آب درون محفظه) موسوم به DLE/DLN^۱، مهم‌ترین آلاینده‌های ناشی از احتراق سوخت گاز طبیعی عبارت‌اند از اکسیدهای نیتروژن (NOx) و کربن مونوکسید (CO) [۳].

مهم‌ترین پارامترهای تاثیرگذار بر تولید NOx در محفظه‌های DLE/DLN عبارت‌اند از دمای شعله، زمان اقامت^۲، فشار کاری و کیفیت اختلاط (با فرض عدم تغییر در ترکیب سوخت). تولید اکسیدهای نیتروژن در شرایط کاری محفظه‌های احتراق

1. Dry low emissions/dry low NOx
2. Residence time

ممکن است از مسیرهای مختلف شامل (الف) NOx فوری^۱ یا فنیمور^۲، (ب) مکانیزم حرارتی^۳ یا زلدوویچ^۴، (ج) مسیر N₂O، (د) مسیر NNH و (ه) مسیر NO₂/NO₃ صورت گیرد و در صورت حضور نیتروژن در پیوندهای سوخت (FBN)^۵، تولید اکسیدهای نیتروژن از این مکانیزم نیز متاثر خواهد شد [۵،۴]. ذکر این نکته لازم است که اگرچه منظور از NOx مجموع مقادیر NO و NO₂ است، ولی عموماً درون محفظه احتراق توربین‌های گاز، NO₂ با مقادیر بسیار اندک تولید شده (عمدتاً در مرز مشترک ورودی هوای رقیق‌سازی در پایین‌دست شعله و در مرزهای نواحی نسبتاً سرد سوخت که احتراق کامل نیست ولی آشکافت^۶ سوخت رخ می‌دهد) و عمدتاً در گازهای خروجی ممکن است آلاینده NO در حضور کربن مونوکسید یا هیدروکربن‌های نسوخته (UHC)^۷ خروجی از محفظه احتراق تحت شرایط مناسب به NO₂ تبدیل شود [۶].

مقادیر آلاینده CO در محفظه‌های DLE/DLN، در ناحیه شعله و در طی تجزیه سوخت، به مقادیر مافوق تعادلی^۸ می‌رسد و در ناحیه پس‌اشعله^۹، با نرخ‌هایی که به صورت نمایی وابسته به دماست، مصرف می‌شود. بنابراین مقدار CO خروجی از محفظه از یک سو وابسته به سینتیک واکنش سریع تولید CO و از سوی دیگر تحت کنترل مسیر مصرف نسبتاً کند CO و تبدیل آن به CO₂ است. تولید CO معرف احتراق ناقص بوده و عموماً ناشی از اطفای محصولات داغ احتراق به دلیل اختلاط سریع با گازهای سرد و نیز بیرون‌رفتن سوخت و هوای مخلوط‌نشده از ناحیه احتراق است. کم‌شدن زمان اقامت و کاهش دمای مواد واکنشی میزان تولید این آلاینده را افزایش می‌دهد [۷].

در محفظه‌های احتراق DLE/DLN صنعتی، عموماً، با استفاده از پیش‌اختلاط مناسب سوخت و هوا، استفاده از مخلوط‌های رقیق و کاهش دمای شعله، می‌توان به مقادیر بسیار اندک NOx دست یافت. در حال حاضر، حداقل مقدار قابل حصول اکسیدهای نیتروژن در میان سیستم‌های احتراق توربین گاز صنعتی مربوط به موتورهای 6B و 7E شرکت GE است که هر دو موتور از سیستم احتراق موسوم به +DLN1 [۸] بهره می‌برند. مقدار اکسیدهای نیتروژن خروجی از این موتورها در شرایط کاری بار کامل^{۱۰} و در صورت استفاده از سوخت گاز طبیعی در حدود ۴ ppmvd در حضور ۱۵ درصد حجمی اکسیژن گزارش شده است [۹]. همچنین، برای کاهش CO در محفظه‌های DLE/DLN عموماً از بهبود طراحی مشعل و لاجیک مرحله‌بندی سوخت^{۱۱} و یا استفاده از سیستم کنارگذر^{۱۲} در بارهای پایین استفاده می‌شود. در حال حاضر، حداقل مقدار قابل حصول کربن مونوکسید خروجی موتورهای توربین گاز صنعتی دارای سیستم DLE/DLN در حدود ۹ ppmvd در حضور ۱۵ درصد حجمی اکسیژن گزارش شده است [۹، ۱۰]. کاهش همزمان NOx و CO در محفظه‌های احتراق DLE/DLN در کل محدوده کاری موتور یک چالش جدی بوده و عموماً، در شرایط کاری بار پایین، گلوگاه اصلی کنترل آلاینده‌ها مربوط به CO و در شرایط کاری بار بالا، مربوط به آلاینده‌های NOx است. در حال حاضر، رکورد کاهش همزمان آلاینده‌های مزبور در میان تمام انواع توربین‌های گاز صنعتی مربوط به موتور 7F شرکت GE است که به مقادیر ۵ ppmvd و ۹ ppmvd در حضور ۱۵ درصد حجمی اکسیژن به ترتیب برای آلاینده‌های NOx و CO دست یافته است (با استفاده از سوخت گاز طبیعی استاندارد در شرایط کاری بار کامل و شرایط محیطی ISO) [۹]. ذکر این نکته لازم است که این موتور از سیستم احتراق پیشرفته موسوم به DLN2.6+ بهره می‌برد [۱۱]. با وجود اهمیت کاربردی بررسی و کاهش آلاینده کربن مونوکسید، در این مطالعه، تنها آلاینده NOx مورد توجه قرار خواهد گرفت. جزئیات برآورد میزان آلاینده CO در موتور مورد نظر در مرجع [۱۲] ارائه شده است.

1. Prompt
2. Fenimore
3. Thermal
4. Zel'dovich
5. Fuel-bond nitrogen
6. Pyrolysis
7. Unburned hydrocarbon
8. Super-equilibrium
9. Post-flame
10. Base load
11. Fuel staging
12. Bypass

مطالعات تجربی مرجع [۱۳] در شرایط کاری متعارف موتورهای توربین گاز صنعتی نشان داده که برای تحلیل میزان تولید آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن می‌توان تولید NOx را به دو بخش مربوط به شرایط کاملاً آمیخته و تصحیحات ناشی از عدم اختلاط کامل تقسیم کرد. مهم‌ترین پارامترهای تاثیرگذار بر تولید اکسیدهای نیتروژن در شرایط کاملاً آمیخته عبارت‌اند از دمای شعله، زمان اقامت و فشار کاری (با فرض عدم تغییر در ترکیب سوخت). افزایش دمای شعله غالباً منجر به افزایش اکسیدهای نیتروژن می‌شود. افزایش زمان اقامت، اگرچه در زمان‌های اقامت پایین موجب افزایش اکسیدهای نیتروژن می‌شود، ولی به‌ازای مقادیر بالاتر زمان اقامت، تاثیر کمتری بر این آلاینده خواهد داشت. دلیل این رفتار مربوط به دو مقیاس زمانی کنترل‌کننده مختلف تولید اکسیدهای نیتروژن در شرایط متعارف محفظه‌های DLE/DLN است [۱۳]. غالباً مسیر کندتر مربوط به مکانیزم زلدوویچ (که شدیداً وابسته به دماست) بوده و مسیر سریع‌تر مربوط به سایر مکانیزم‌ها (فنیومور، N_2O و NNH) است (با وابستگی دمایی کمتر). به همین دلیل، اغلب، مدل‌سازی تولید اکسیدهای نیتروژن به دو بخش سریع (ناحیه شعله) و کند (ناحیه پساشعله) تقسیم می‌شود. در برخی مراجع نیز، براساس همین ایده، تقسیم‌بندی نواحی تولید اکسیدهای نیتروژن بر مبنای عدد دامکالر^۱ انجام شده و دو ناحیه مزبور به ترتیب ناحیه فلیملت^۲ و ناحیه پساشعله نامیده می‌شوند [۱۴، ۱۵]. اثر فشار بر میزان اکسیدهای نیتروژن حتی در شرایط کاملاً آمیخته نیز از پیچیدگی‌های خاصی برخوردار است. به‌عنوان مثال، مطالعات مرجع [۱۴] نشان داده است که در صورت استفاده از سوخت گاز طبیعی، وابستگی فشاری نواحی شعله و پساشعله متفاوت و عکس یکدیگر است، به‌نحوی که در ناحیه شعله مقدار NOx با افزایش فشار کاهش یافته، ولی در ناحیه پساشعله، با افزایش فشار، افزایش می‌یابد.

سیستم‌های احتراق DLE/DLN صنعتی عملاً فاصله قابل توجهی با شرایط ایدئال اختلاط کامل دارند. این شرایط هم نتیجه عدم اختلاط^۳ مکانیکی در سطح ماکرو^۴ (به دلیل مرحله‌بندی سوخت و یا عدم اختلاط کامل در بخش پیش‌مخلوط‌کننده^۵) و هم منتج از عدم اختلاط مولکولی در سطح میکرو^۶ (ناشی از حضور آشفستگی حتی در شرایط کاملاً آمیخته در سطح مکانیکی) است. به‌منظور بررسی وابستگی NOx به میزان عدم اختلاط، معمولاً از نمودار L-S^۷ استفاده می‌شود [۱۶]. مطالعات مرجع [۱۶] نشان داده که برای سیستم‌های احتراق کاملاً آمیخته، در محدوده وسیعی از تغییرات دمای ورودی، فشار کاری، و زمان اقامت محفظه و همچنین با استفاده از انواع پیکربندی مشعل، مقدار NOx ناشی از احتراق گاز طبیعی تنها تابعی از دمای شعله است. نمایی از این نمودار در شکل ۱ نمایش داده شده است. با استفاده از این نمودار می‌توان حداقل مقدار قابل حصول آلاینده NOx در شرایط کاری محفظه احتراق کاملاً آمیخته را تنها برآوردی از دمای شعله استخراج کرد. نمودار L-S در صنعت توربین گاز یک نمودار استاندارد جهت ارزیابی عملکرد تولید NOx سیستم پیش‌اختلاط موتورهای DLE/DLN با سوخت گاز طبیعی (متان) به‌شمار می‌رود. نتایج شکل ۱ در مطالعات جدیدتر نیز تایید شده [۱۸، ۱۷] و همچنین روندهای قابل مشاهده حتی برای تولید NOx سوخت متان حاوی مقادیر تا حدود ۶۰ درصد (حجمی) هیدروژن در انواع چرخاننده‌های^۸ متعارف و کم‌پیچش^۹ (تحت شرایط کاری موتورهای توربین گاز) نیز صادق بوده است [۱۷]. همان‌گونه که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، با فاصله‌گرفتن از شرایط اختلاط کامل در یک مجموعه از شرایط کاری ثابت، مقدار NOx به نحو چشمگیری افزایش خواهد یافت. لذا، با توجه به مشاهدات می‌توان دریافت که برای تعیین آلاینده‌های NOx باید عدم اختلاط سوخت و هوا درون محفظه با دقت مطالعه شود. به بیان دیگر، برای مدل‌سازی دقیق تولید

1. Damkohler
2. Flamelet
3. Unmixedness
4. Macro-mixing
5. Premixer
6. Micro-mixing
7. Leonard-Stegmaier
8. Swirler
9. Low-swirl

اکسیدهای نیتروژن در محفظه‌های احتراق DLE/DLN صنعتی، مدل‌سازی دقیق توزیع زمانی و مکانی نسبت سوخت به هوا ضروری است. اغلب برای مدل‌سازی این تغییرات در ناحیه بالادست شعله، که عملاً معرف کیفیت اختلاط مکانیکی یا ماکروست، از توابع دانسیته احتمال (PDF) مناسب استفاده می‌شود (ذکر این نکته ضروری است که روندهای قابل مشاهده در شکل ۱، لزوماً در مورد آلاینده CO صادق نیست).

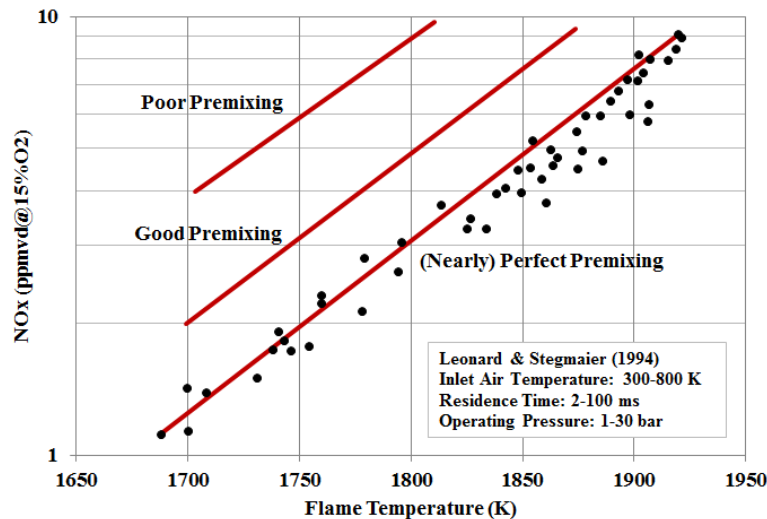


Figure 1- NOx emissions vs. flame temperature for perfectly premixed burners and effect of unmixedness on NOx formation

شکل ۱- تغییرات NOx بر حسب دمای شعله برای محفظه‌های کاملاً پیش‌آمیخته و اثر عدم اختلاط بر تولید NOx

یکی دیگر از نکات قابل تامل در حوزه برآورد میزان اکسیدهای نیتروژن در محفظه‌های احتراق پیش‌آمیخته رقیق‌سوز، تاثیر آشفته‌گی بر میزان NOx و یا به بیان دیگر، اثر اختلاط مولکولی یا میکرو در تولید NOx در شرایط کاملاً آمیخته است. این مسئله به تفصیل در مرجع [۱۹] بررسی شده و برای مدل‌سازی اثر آشفته‌گی بر تولید NOx از مدل راکتور آمیخته جزئی (PaSR)^۲ استفاده شده است. پارامترهای آشفته‌گی (از قبیل شدت آشفته‌گی و مقیاس زمانی اختلاط آشفته) و مشخصات شعله (از قبیل طول متوسط شعله و لذا زمان اقامت ناحیه شعله) با استفاده از اندازه‌گیری همزمان PIV/OH-PLIF تعیین شده و به‌عنوان ورودی به مدل داده شده است. مطالعات این مرجع نشان داده که در شرایط کاملاً پیش‌آمیخته در سطح ماکرو، تاثیر کلی میزان آشفته‌گی بر NOx خروجی اندک است. اگرچه افزایش میزان آشفته‌گی تا حدی موجب تشدید نرخ تولید NOx در ناحیه شعله می‌شود، ولیکن با افزایش شدت آشفته‌گی طول شعله نیز کاهش یافته و لذا مقدار کل آلاینده NOx در ناحیه شعله (که به‌وسیله اثر خالص آشفته‌گی بر زمان اختلاط آشفته و زمان اقامت شعله تعیین می‌شود) تقریباً بدون تغییر باقی می‌ماند. همچنین، اثر آشفته‌گی بر تشکیل NOx در ناحیه پس‌اشعله نیز قابل صرف‌نظر بوده است.

درنهایت، باید توجه داشت که به‌دلیل تعاملات موجود، بررسی آثار مربوط به تغییرات فشار و عدم اختلاط بهتر است به‌صورت همزمان و تحت شرایط کاری اصلی محفظه صورت پذیرد [۱۴]. اهمیت عدم اختلاط بر میزان تولید اکسیدهای نیتروژن در مشعل‌های DLE/DLN با تفصیل بیشتری در مرجع [۲۰] بررسی شده است.

یکی از سوالات اصلی در کاربردهای صنعتی و در حین پروسه ارزیابی، ارتقا و طراحی سیستم‌های DLE/DLN، و برآورد میزان آلاینده‌های NOx با دقت مناسب و در زمان معقول است. برآورد میزان آلاینده‌های NOx با استفاده مستقیم از ابزار

1. Probability density function
2. Partially stirred reactor

CFD همچنان با چالش‌های جدی روبرو است، زیرا، به‌منظور برآورد دقیق گونه‌های میانی و ارزیابی کامل آثار تغییر در ترکیب سوخت در یک میدان جریان واکنشی، لازم است تا محاسبات CFD به‌همراه توصیفی کامل از سینتیک شیمیایی صورت پذیرد. در نظر گرفتن مکانیزم واکنش پیچیده سوخت‌های کاربردی با ده‌ها تا صدها گونه شیمیایی و صدها تا چند هزار واکنش شیمیایی در کدهای احتراق آشفته سه‌بعدی در ابعاد و هندسه واقعی محفظه‌های کاربردی، از نظر زمان و حجم محاسبات، کاملاً غیرعملی است. پیچیدگی محاسبات پدیده‌های شیمیایی از یک سو مربوط به تعداد زیاد مکانیزم‌های شیمیایی (و لذا تعداد بالای معادلات دیفرانسیل حاکم بر مسئله) و از سوی دیگر مربوط به گستره وسیع مقیاس‌های زمانی این پدیده‌ها و اصطلاحاً سخت بودن معادلات دیفرانسیل مربوطه و لذا نیاز به استفاده از گام‌های زمانی کوچک و تکنیک‌های غالباً زمان‌بر ویژه حل معادلات سخت است.

برای مقابله با این معضل در متون علمی دو رویکرد اساسی پیشنهاد شده که عبارت‌اند از: (الف) توصیف دقیق میدان جریان به‌همراه توصیف ساده‌ای از پدیده‌های شیمیایی از قبیل مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی کاهیده^۲ و اسکلتی^۳، واکنش(های) شیمیایی کلی^۴، و یا استفاده از شیمی جدول‌بندی شده^۵ [۲۱] و (ب) استفاده از توصیف دقیق پدیده‌های شیمیایی (با استفاده از مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی کامل^۶) به‌همراه توصیفی ساده از میدان جریان. هر گاه هدف از مطالعه بررسی آلاینده‌های احتراق یا سایر پدیده‌های شیمیایی تحت کنترل سینتیک شیمیایی کامل باشد، عموماً راهکار دوم ارجحیت خواهد داشت، زیرا پدیده‌های شیمیایی با دقت بالاتری مدل‌سازی خواهد شد.

اغلب مطالعات انجام‌شده در رویکرد دوم، در قالب روش شبکه راکتورهای شیمیایی (ECRN)^۷ صورت گرفته‌اند که در آن شبکه راکتورهای معادل محفظه از حل CFD استخراج می‌شود [۲۲]. روش نظام‌مند^۸ ECRN مبتنی بر سه گام اصلی است. ابتدا یک حل CFD میدان جریان واکنشی (گرم) با استفاده از واکنش‌های شیمیایی کلی (که معمولاً شامل یک تا چهار گام‌اند) یا سایر رویکردهای توصیف ساده پدیده‌های شیمیایی تولید می‌شود؛ سپس، نتایج CFD پس‌پردازش شده و با اعمال مجموعه‌ای از معیارهای کلی و یا با توجه به ساختارهای کلی جریان، فضای محفظه به نواحی مختلف تقسیم می‌شود و در ادامه این نواحی بسته به ساختار جریان به‌صورت راکتور کاملاً آمیخته^۹ (PSR) یا راکتور پلاگ^{۱۰} (PFR) شبیه‌سازی می‌شوند و ارتباط بین این راکتورها نیز با توجه به حل CFD تبیین می‌شود؛ در نهایت، این ECRN با استفاده از یک مکانیزم سینتیک واکنش شیمیایی کامل حل شده و مقادیر آلاینده‌ها محاسبه می‌شود. الگوریتم‌های مختلفی، تا به امروز، برای تولید ECRN ارائه شده [۲۳، ۲۴] و این رویکرد به‌نحوی موفقیت‌آمیز در برآورد آلاینده‌ها در انواع شعله‌های آزمایشگاهی دیفیوژنی متان [۲۵] و دی‌متیل اتر^{۱۱} (DME) [۲۶، ۲۷] و شعله‌های دارای پیش‌گاز [۲۸-۳۰]، سیستم‌های احتراق صنعتی [۳۱-۳۳] و کوره‌ها و دیگ‌های بخار [۳۴، ۳۵]، و انواع موتورهای توربین گاز مانند موتور DGT-5 شرکت دوسان^{۱۲} [۵]، انواع محفظه‌های DLN/DLE [۳۶، ۳۷، ۳۸]، محفظه احتراق SoLoNOx شرکت سولار^{۱۳} [۳۹، ۳۸]، محفظه احتراق موتور SGT-400 [۴۰] و انواع موتورهای هوایی [۴۱، ۴۲] و میکروتوربین [۴۳] استفاده شده است. در مرجع [۴۴] نیز نحوه مدل‌سازی انواع محفظه‌های دیفیوژنی و DLN/DLE با روش ECRN بررسی شده است. اخیراً، مروری بر روش‌های ECRN در مرجع [۴۵] ارائه شده است.

1. Stiff
2. Reduced mechanism
3. Skeletal mechanism
4. Global mechanism
5. Tabulated chemistry
6. Detailed mechanism
7. Equivalent chemical reactor network
8. Systematic
9. Perfectly stirred reactor
10. Plug flow reactor
11. Dimethyl ether
12. Doosan
13. Solar

همان‌گونه که اشاره شد، روش ECRN در خانواده روش‌های پس‌پردازش نتایج CFD قرار می‌گیرد. سوال مهمی که عموماً قبل از کاربرد رویکرد ECRN برای برآورد آلاینده‌ها باید مورد توجه قرار گیرد این است که آیا، از نظر فیزیکی، کاربرد روش‌های پس‌پردازش برای برآورد تولید NOx قابل قبول است؟ برای پاسخ به این سوال باید توجه داشت که چون مقدار کل اکسیدهای نیتروژن تشکیل شده در طی فرایند احتراق پیش‌آمیخته رقیق معمولاً خیلی کمتر از حدود 100 ppmvd است، تاثیر تشکیل NOx بر فرآیند آزادسازی حرارت و غلظت گونه‌های پایدار و رادیکال‌های مهم‌تر قابل صرف‌نظر است. لذا، می‌توان برآورد غلظت اکسیدهای نیتروژن را از محاسبات آزادسازی حرارت اصلی مجزا^۱ کرد. البته این رویکرد تنها زمانی قابل اجراست که ترم‌های چشمه شیمیایی مربوط به تولید NOx با دقت کافی از حل میدان جریان حاصل شده باشند. در این صورت می‌توان حلگر CFD را در یک گام پس‌پردازش برای حل معادلات انتقال اکسیدهای نیتروژن و برآورد غلظت این گونه‌ها مورد استفاده قرار داد و در این میان مقادیر متغیرهای اصلی را تثبیت‌شده^۲ فرض کرد [۴۶]. باید توجه داشت که اتخاذ رویکردی مشابه برای برآورد آلاینده CO غالباً به نتایج قابل قبولی منتهی نخواهد شد، زیرا اکسیداسیون CO از طریق آزادسازی حرارت کل با میدان جریان کوپل می‌شود و برآورد CO به‌شدت وابسته به برآورد دقیق توزیع آزادسازی حرارت در محفظه است و بالعکس [۴۷]. به بیان دقیق‌تر، انتخاب نوع مدل‌سازی CO بستگی به تعامل شیمی و آشفستگی (TCI)^۳ دارد. به‌عنوان مثال، در حین شبیه‌سازی متعارف RANS^۴ با استفاده از مدل‌های نرخ محدود اضمحلال گردابه (FR/ED)^۵، اگر توزیع پارامتر نسبت نرخ اضمحلال گردابه آشفته (نرخ احتراق آشفته) نسبت به نرخ سینتیک واکنش اصلی تبدیل CO و CO₂ (بسته به نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی مورد استفاده) را در نظر بگیریم، هر کجای محفظه که این نسبت کمتر از ۱ باشد (یعنی نرخ احتراق آشفته کمتر از نرخ سینتیک بوده و احتراق تحت کنترل اختلاط باشد)، رویکرد شبکه راکتور ارزش خود را در برآورد CO از دست خواهد داد (استفاده از مکانیزم سینتیک شیمیایی کامل تنها در نواحی از محفظه که تحت کنترل سینتیک‌اند منجر به نتایج دقیق‌تر خواهد شد) [۴۲]. چنین ملاحظاتی در مطالعات جدیدتر در حوزه محاسبه CO در نظر گرفته شده (به‌ویژه در شرایط بار پایین که شرایط بحرانی تولید CO محسوب می‌شود) و تشکیل CO عموماً در دو ناحیه مجزای شعله و ناحیه تکمیل احتراق^۶ با دو مقیاس زمانی مختلف تعقیب می‌شود [۴۸،۴۷]. تقسیم‌بندی میدان جریان به دو ناحیه شعله و ناحیه تکمیل احتراق بر این فرض استوار است که در ناحیه اول نرخ اختلاط محدودکننده بوده و در ناحیه دوم نرخ سینتیک تعیین‌کننده میزان تولید CO است. گذار از ناحیه اول به دوم را نیز می‌توان بر مبنای یک عدد دامکلا بر مبنای CO تعیین کرد. برای هر کدام از دو ناحیه گفته‌شده از رویکردهای مناسب مدل‌سازی استفاده می‌شود. همچنین، در برآورد CO آثاری از قبیل کشیدگی شعله^۷ یا اتلاف حرارت قابل صرف‌نظر نیست. لذا، به‌عنوان مثال، مدل‌سازی ناحیه شعله با راکتور PSR آدیاباتیک به مقادیر بسیار بالاتر CO در مقایسه با رویکرد فلیمنت منتج می‌شود. موضوع برآورد آلاینده CO در محفظه احتراق مورد نظر در مرجع [۱۲] بررسی شده و این نوشتار تنها به موضوع محاسبه آلاینده‌های NOx می‌پردازد.

در این مقاله، از نتایج شبیه‌سازی میدان جریان غیرواکنشی با استفاده از رویکرد LES^۸ برای تولید شبکه راکتور و برآورد میزان NOx استفاده شده است. یکی از مزایای روش پیشنهادی برآورد دقیق‌تر فرایند پیش‌اختلاط در ناحیه بالادست جبهه شعله است. در رویکرد مورد بحث در این مقاله، پس از استخراج نتایج حل LES، ناحیه اصلی^۹ احتراق به تعداد زیادی ناحیه با حجم‌های مساوی تقسیم شده و فرایند احتراق در هر ناحیه به‌صورت یک راکتور PSR در نظر گرفته شده است. دمای ورودی و

1. Decouple
2. Frozen
3. Turbulence-chemistry interaction
4. Reynolds-averaged Navier-Stokes
5. Finite rate eddy dissipation
6. Burnout
7. Flame stretch
8. Large eddy simulation
9. Primary zone

فشار کاری تمام رآکتورها یکسان فرض شده، ولی توزیع نسبت هم‌ارزی در این مجموعه از رآکتورها به دقت برحسب نتایج حل LES استخراج و اعمال شده است. قسمت انتهایی محفظه نیز با یک رآکتور PFR منفرد مدل‌سازی شده است. رویکردی مشابه در مطالعات قبلی نیز برای برآورد میزان آلاینده‌ها در موتورهای دارای مشعل ای-وی (EV)^۱ (مشابه مشعل بررسی شده در این مطالعه) [۱۵،۱۴] و سایر محفظه‌ها [۴۹-۵۱] استفاده شده است. جزئیات بیشتر این روش در ادامه ارائه شده است. در بخش‌های آتی مقاله، ابتدا، سیستم احتراق DLE/DLN موتور توربین گاز صنعتی مورد بررسی تشریح شده است. سپس، جزئیات روش پیشنهادی برای برآورد میزان آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن بیان شده است. در ادامه نتایج برآورد میزان آلاینده‌های NOx در شرایط کاری نامی موتور ارائه و اعتبارسنجی شده است. در نهایت، مطالعات پارامتری گسترده‌ای جهت ارزیابی آثار ورودی‌های مختلف مدل‌سازی از قبیل تنظیمات شبکه رآکتور، ترکیبات سوخت و نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی مورد استفاده، و طراحی مشعل و لاجیک سوخت بر میزان NOx انجام شده است.

معرفی سیستم احتراق

هدف از این مطالعه، توسعه ابزار تحلیل مهندسی برای برآورد آلاینده‌های NOx در موتور توربین گاز ملی ایران موسوم به IGT25 (ویرایش بومی و ارتقایافته موتور SGT-600 شرکت زیمنس^۲) با دقت مناسب و زمان اجرای معقول بوده است. موتور توربین گاز صنعتی دومحوره IGT25 یک توربین سبز دوستدار محیط زیست با سطح آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن و کربن مونوکسید کمتر از ۲۵ ppmvd با سوخت گاز طبیعی بوده و قابلیت استفاده از طیف وسیعی از سوخت‌های گازی و مایع را داراست. این موتور با توان نامی ۲۵ مگاوات و بازده حدود ۳۵ درصد (در شرایط کاری استاندارد) دارای نسبت فشار ۱۴ بوده و دبی و دمای گازهای خروجی از آن نیز به ترتیب معادل ۸۰/۴ کیلوگرم بر ثانیه و ۵۴۳ درجه سانتی‌گراد است. مروری بر فعالیت‌های انجام‌شده در زمینه بومی‌سازی و توسعه فناوری سیستم احتراق این توربین در مرجع [۵۲] ارائه شده است. ویرایش ارتقایافته این موتور به IGT25+ موسوم بوده و به‌عنوان مثالی از پارامترهای ارتقایافته این موتور جدید، می‌توان به سطح آلاینده‌های NOx آن اشاره کرد که از مقدار ۲۵ ppmvd به کمتر از ۱۵ ppmvd تقلیل یافته است.

نمایی از این توربین گاز به‌همراه مولفه‌های اصلی سیستم احتراق آن در شکل ۲ ارائه شده است. سیستم احتراق توربین گاز IGT25/IGT25+ متشکل از دیفیوزر^۳ ورودی، محفظه احتراق (شامل مشعل‌ها، لاینر^۴ و کیسینگ^۵)، و سیستم‌های جانبی (شامل چندراه سوخت^۶، سیستم اشتعال، سیستم پایش شعله^۷، و سیستم کنارگذر) است. وظیفه چندراه سوخت، تامین سوخت گاز و مایع در مسیرهای سوخت اصلی و پایلوت^۸، و وظیفه سیستم کنارگذر نیز عبور دادن بخشی از هوای محفظه از اطراف محفظه و کاهش دبی هوای ورودی به ناحیه اصلی احتراق، به‌منظور افزایش بازده احتراق و کنترل سطح آلاینده کربن مونوکسید در شرایط کاری بار پایین توربین است. محفظه احتراق حلقوی توربین متشکل از ۱۸ عدد مشعل نوع EV نسل دوم [۵۳] است. نمایی از جزئیات و مدهای^۹ کاری مشعل مزبور به‌همراه طرحواره عملکرد سیستم کنارگذر نیز در شکل ۲ ارائه شده است.

مشعل EV یکی از انواع مهم مشعل‌های DLE/DLN در کاربردهای موتورهای توربین گاز بوده [۵۴] و در حال حاضر نسل دوم این مشعل یکی از پرکاربردترین مشعل‌های DLE/DLN در کشور است. در مطالعات پیشین سرودی و همکاران، نتایج بررسی

1. Environmental burner
2. SIEMENS
3. Diffuser
4. Liner
5. Casing
6. Fuel manifold
7. Flame monitoring system
8. Pilot
9. Mode

قابلیت کارکرد^۱ و آلاینده‌های سیستم احتراق مورد نظر به تفصیل ارائه شده است. بدین منظور، در مطالعات مزبور، نتایج تحلیل عملکرد اشتعال جرقه و تعیین محدوده اشتعال محفظه [۵۵]، بررسی پایداری شعله و محاسبه محدوده خاموشی رقیق مشعل [۵۶]، مشخصات و محدوده ناپایداری ترموآکوستیکی سیستم احتراق [۵۷]، و همچنین برآورد آلاینده‌های CO در این محفظه احتراق [۱۲] ارائه شده است. سوخت مورد بررسی در این مطالعه نیز گاز طبیعی خط لوله ایران است که طیف ترکیبات این سوخت به همراه مطالعه تفصیلی اثر ترکیب آن بر پارامترهای احتراقی توربین مورد نظر در مطالعات پیشین ارائه شده است [۵۸].

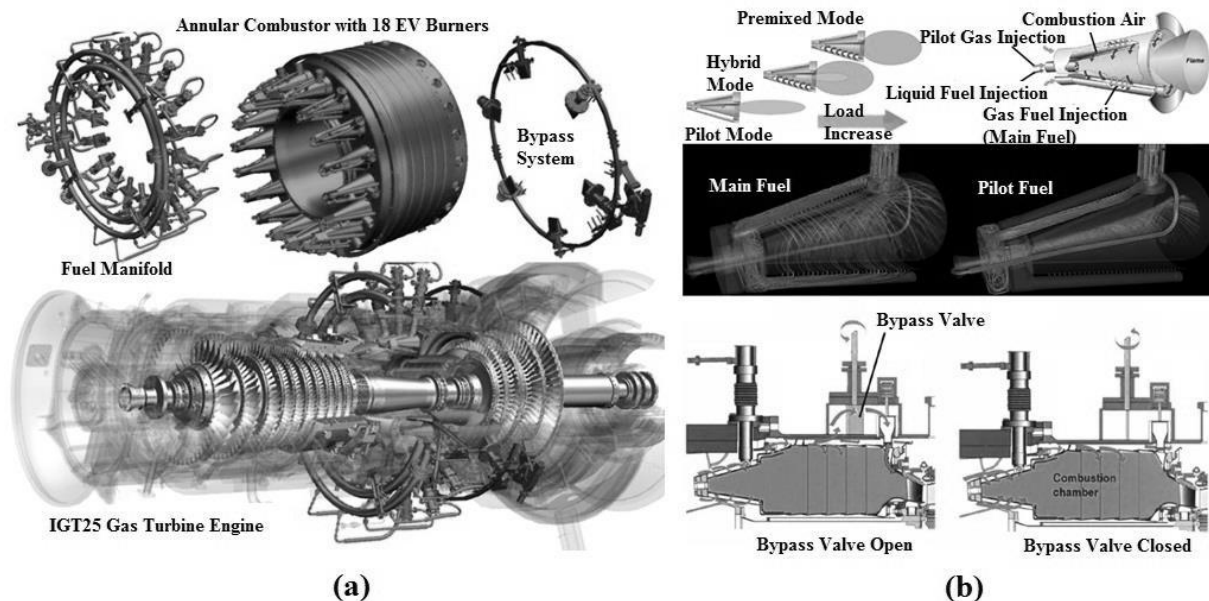


Figure 2- Schematic of (a) IGT25 gas turbine with major components of the combustion system and (b) details of the EV burner operation modes, with main and pilot fuel paths and combustor bypass system for air staging

شکل ۲- طرح‌های از (a) توربین گاز IGT25 و مولفه‌های اصلی سیستم احتراق آن و (b) جزئیات و مدهای کاری مشعل EV به همراه مسیرهای تزریق سوخت گازی اصلی و پایلوت و فلسفه کاری سیستم بای‌پس برای مرحله‌بندی هوای محفظه

مدل‌سازی شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل محفظه

استفاده از رآکتورهای PSR و PFR در تحلیل احتراق ایده‌ای به‌ظاهر ساده، ولی بسیار هوشمندانه بود که توسط برگ در اوایل دهه ۱۹۵۰ میلادی معرفی شد [۵۹]. در کاربردهای اولیه، مدل‌سازی فرایندهای موجود در حجم محفظه احتراق موتورهای توربین گاز با استفاده از یک رآکتور PSR و به‌دنبال آن یک رآکتور PFR انجام می‌شد. در دهه ۱۹۷۰ میلادی، رآکتورهای ایده‌آل در یک شبکه اصطلاحاً ساختاری^۲ یا سنتی^۳ مورد استفاده قرار گرفت که در آن نوع و تعداد رآکتورها محدود بود (معمولاً حداکثر چند ده رآکتور) و انتخاب نوع، چیدمان و تعامل آن‌ها عمدتاً بر مبنای تجربه کاربر و با تکیه بر اطلاعات تجربی یا نتایج شبیه‌سازی‌های عددی استخراج می‌شد. این ایده توسط ملور برای ارزیابی میزان آلاینده‌ها [۶۰، ۶۱] و همچنین توسط سویزنبنک و همکاران به‌عنوان یک ابزار مدل‌سازی قابل اطمینان در فرایند تحلیل و طراحی انواع محفظه احتراق موتور توربین گاز به‌کار گرفته شد [۶۲، ۶۳]. نمونه‌هایی از کاربرد این رویکرد در مدل‌سازی محفظه احتراق موتورهای توربین گاز را، به‌عنوان نمونه، می‌توان در مراجع [۳۸]، [۴۴] و [۶۴، ۶۵] مشاهده کرد. همچنین، در مراجع جدیدتر، نمونه‌هایی از کاربرد این رویکرد

1. Operability
2. Structural
3. Classic

در انواع محفظه‌های احتراق توربین گاز صنعتی [۶۶-۶۸]، هوایی [۶۹-۷۱] و کوره‌های پیشرفته [۷۲] ارائه شده است. ذکر این نکته لازم است که بعدها، در دهه ۱۹۹۰ میلادی، کوربا [۷۳] و چن [۷۴] ایده PSR را توسعه داده و رآکتور PaSR را معرفی کردند که در آن امکان ارزیابی کمی تعامل آشفته‌گی و شیمی احتراق وجود داشت (در رآکتور PSR اختلاط کامل تا سطح مولکولی انجام شده، ولی در رآکتور PaSR اختلاط ماکرو تکمیل شده ولی میزان اختلاط مولکولی و ارتباط آن با شدت آشفته‌گی به صورت مصنوعی و از طریق پارامترهای ورودی مدل قابل کنترل است). در همین دوران، مطالعات مشابهی توسط کرافت و همکاران صورت گرفت و رآکتور PaSPFR^۱ نیز به‌عنوان نمونه ارتقایافته مشابه برای رآکتور PFR معرفی شد [۷۵]. در واقع، دو رآکتور PaSR و PaSPFR را می‌توان به ترتیب ویرایش تصادفی^۲ رآکتورهای PSR و PFR در نظر گرفت. به دلیل پیچیدگی و زمان‌بر بودن محاسبات مربوط به این دو نوع رآکتور، اغلب در مدل‌سازی شبکه رآکتورهای معادل محفظه احتراق از رآکتورهای PSR و PFR استفاده می‌شود.

در کنار روش‌های ساختاری، در اواخر دهه ۱۹۹۰ میلادی، رویکرد دیگری برای تولید شبکه رآکتورهای معادل محفظه احتراق توسط اهره‌ارت و همکاران معرفی شد [۲۲]. در این رویکرد نظام‌مند، شبکه رآکتور مستقیماً با پس‌پردازش نتایج حل CFD تولید می‌گردد و سلیقه کاربر کمتر در تولید شبکه معادل محفظه موثر است. علاوه بر این، زمان تولید شبکه رآکتور معادل، به‌ویژه برای پیکربندی‌های پیچیده محفظه احتراق نیز، با استفاده از رویکرد نظام‌مند به شکل چشمگیری کاهش می‌یابد. همان‌گونه که قبلاً نیز اشاره شد، گام‌های اساسی روش تولید شبکه معادل با استفاده از رویکرد نظام‌مند شامل موارد ذیل است: (الف) میدان جریان واکنشی محفظه با استفاده از مکانیزم سینتیک شیمیایی ساده به کمک شبیه‌سازی‌های عددی حل می‌شود (هدف از این مرحله مدل‌سازی دقیق پدیده‌های انتقال با استفاده از یک شبکه محاسباتی ریز و با صرف حداقل زمان محاسباتی برای مدل‌سازی پدیده‌های شیمیایی است و لذا اغلب در این مرحله از واکنش‌های شیمیایی کلی با استفاده از مدل‌های احتراق آشفته خانواده شیمی نرخ محدود^۳ و یا شیمی جدول‌بندی‌شده با استفاده از مدل‌های احتراق آشفته خانواده فلیمنت استفاده می‌شود)؛ (ب) با استفاده از الگوریتم‌های مناسب، دامنه محاسباتی به المان‌های حجمی تقسیم می‌شود که سایز آن‌ها به مراتب بزرگ‌تر از سایز شبکه محاسباتی حل عددی گام قبل است و در ادامه هر یک از این حجم‌ها به‌عنوان یک رآکتور شیمیایی ایدئال (به‌عنوان مثال، PSR، PFR و غیره) در نظر گرفته می‌شوند و با تعریف ارتباط بین این حجم‌ها، شبکه رآکتور معادل محفظه تولید می‌شود؛ (ج) شبکه رآکتور حاصله با استفاده از یک مکانیزم سینتیک شیمیایی کامل حل شده و میزان گونه‌های میانی، آلاینده‌های مورد نظر و سایر پارامترهای عملکردی برآورد می‌شود. باید توجه داشت که اساس تفاوت رویکردهای ساختاری و نظام‌مند بیشتر مربوط به گام‌های (الف) و (ب) است. در رویکرد ساختاری، طراح ممکن است، با مشاهدات تجربی و بررسی توپولوژی شعله ورودی‌های مورد نیاز برای تولید شبکه رآکتور را استخراج کند و تقسیم فضای محفظه به حجم‌های مختلف نیز، به‌جای استفاده از الگوریتم‌های اتوماتیک، با استفاده از برداشت‌های فیزیکی کاربر از ماهیت میدان جریان محفظه صورت پذیرد. الگوریتم نظام‌مند تولید شبکه معادل، پس از معرفی اولیه، توسعه بیشتری یافته [۳۱، ۲۳-۳۴] و در انواع مشعل‌های DLN/DLE [۲۴، ۳۶]، شعله‌های دیفیوژن [۲۵]، شعله‌های دارای پیچش [۲۹، ۳۰]، و انواع شعله‌های آشفته [۷۶-۷۸] استفاده شده است. ذکر این نکته لازم است که در مرجع [۷۹] روشی نزدیک به روش شبکه رآکتورهای معادل مورد بحث معرفی شده که در آن تمام سلول‌های شبکه محاسباتی CFD به‌صورت رآکتورهای شیمیایی مجزا در نظر گرفته می‌شوند. طبیعتاً، حجم محاسبات چنین رویکردی بسیار بالا بوده و کاربرد چنین روشی در این مطالعه مورد توجه نیست. اخیراً، یوسفیان و همکاران مروری بر انواع و کاربردهای روش شبکه رآکتورهای معادل محفظه احتراق انجام داده‌اند [۴۵]. عمده‌ترین ابزارهای نرم‌افزاری موجود برای تولید شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل محفظه عبارت‌اند از نرم‌افزار

1. Partially stirred plug flow reactor
2. Stochastic
3. Finite rate chemistry

ENERGICO [۳۶] (با حل‌گر سینتیک شیمیایی نرم‌افزار CHEMKIN-PRO) شرکت ANSYS و نرم‌افزار KPP [۷۷] و ویرایش جدیدتر آن، یعنی KPPSMOKE [۷۸]، که در پلی تکنیک میلان^۱ توسعه یافته است. در این میان، ابزار نرم‌افزاری ENERIGICO، به دلیل وجود الگوریتم‌های اتوماتیک تولید شبکه رآکتور، امکان تولید سریع و انعطاف‌پذیر انواع شبکه رآکتور، امکان حل مستقل معادله انرژی، و قابلیت‌های پس‌پردازش قابل قبول، در حال حاضر، بهترین ابزار صنعتی تولید اتوماتیک شبکه رآکتور معادل محفظه در کاربردهای صنعتی به‌شمار می‌رود. این نرم‌افزار، علاوه بر تولید شبکه رآکتور معادل، قابلیت‌های دیگری، از قبیل امکان تعیین محل شعله و همچنین ارزیابی وضعیت خاموشی محلی در نقاط مختلف محفظه را نیز، دارد. در مرجع [۸۰]، جزئیات نحوه کاربرد ابزار ENERIGICO برای تولید نظام‌مند شبکه رآکتورهای معادل محفظه احتراق موتور توربین گاز IGT25/IGT25+، به‌منظور برآورد آلاینده‌های این موتور صنعتی، به‌تفصیل بررسی شده است. با وجود این، در این مطالعه، رویکردی متفاوت برای برآورد میزان آلاینده‌های NOx در موتور مورد نظر معرفی و استفاده شده است. گام‌های اصلی روش مورد استفاده در این مطالعه به قرار زیر است:

(الف) تعیین محدوده جبهه شعله و فضای اشغال‌شده توسط شعله: بدین منظور، ابتدا، حل میدان جریان گرم (واکنشی) محفظه احتراق با استفاده از ابزار ANSYS FLUENT به کمک روش‌های مبتنی بر معادلات میانگین‌گیری شده رینولدز و با استفاده از مکانیزم شیمیایی کلی پولیفک [۴۶] تولید می‌شود. تعیین محل جبهه شعله، ابتدا، با استفاده مستقیم از این حل CFD و با استفاده از تعاریف مختلف برای تعیین جبهه شعله انجام می‌شود. علاوه بر این، برای اطمینان از موقعیت پیش‌بینی‌شده برای جبهه شعله، رویکرد دیگری نیز استفاده شده است. در این روش، نتایج حل CFD به‌عنوان ورودی در نرم‌افزار ENERIGICO فراخوانی می‌شود. سپس، با استفاده از ابزار موجود در ENERIGICO، محل شعله تعیین می‌شود. همان‌گونه که در قسمت نتایج اشاره خواهد شد، استفاده از رویکردها و الگوریتم‌های مختلف یادشده منجر به تفاوت اندکی در محل جبهه شعله می‌شود. با وجود این، نتایج نشان داده است که در مورد مشعل مورد بحث، همین جابه‌جایی اندک تاثیری قابل توجه بر میزان NOx دارد. در ادامه، با توجه به نتایج CFD و ENERIGICO، قسمت انتهایی حجم اصلی شعله نیز تعیین می‌شود. بدین ترتیب، صفحات ابتدایی و انتهایی حجم شعله مشخص خواهد شد.

(ب) تعیین PDF کسر مخلوط در جبهه شعله و زمان اقامت متوسط حجم شعله: در این مرحله، با استفاده از نتایج حل LES سرد میدان جریان، PDF توزیع سوخت در صفحه جبهه شعله (و یا صفحات مختلف احتمالی حضور جبهه شعله)، که در گام قبلی تعیین شد، محاسبه می‌شود. میانگین‌گیری زمانی کسر مخلوط در حین فرایند حل LES این اطمینان را حاصل می‌کند که تغییرات زمانی^۲ کسر مخلوط در هر نقطه در صفحه جبهه شعله در محاسبات لحاظ شده است. از سوی دیگر، محاسبه PDF کسر مخلوط در صفحه مزبور تغییرات مکانی^۳ این پارامتر را به دقیق‌ترین شکل ممکن مدل‌سازی خواهد کرد. بدین ترتیب، تغییرات زمانی-مکانی^۴ کسر مخلوط در جبهه شعله با دقت کافی محاسبه می‌شود. اهمیت ارزیابی تغییرات زمانی-مکانی کسر مخلوط (یا توزیع زمانی-مکانی پارامتر عدم اختلاط) در بررسی آلاینده‌های NOx محفظه‌های DLE/DLN به‌تفصیل در مرجع [۲۰] بررسی شده است. همچنین، برای محاسبه زمان اقامت متوسط در حجم شعله، از نتایج حل CFD جریان غیرواکنشی استفاده شده است. بدین ترتیب، با تزریق ذرات ردگیر از سوراخ‌های تزریق سوخت و تعقیب ذرات مورد نظر درون ناحیه شامل شعله، توزیع زمان اقامت (RTD)^۵ تعیین شده و می‌توان زمان اقامت متوسط درون حجم شعله را محاسبه کرد. برای محاسبه زمان اقامت متوسط در حجم شعله با استفاده از شبیه‌سازی عددی، در ورودی‌های مشعل، ذرات بی‌اثر کرومی شکل با قطر ۱ میکرومتر و با دبی ۰/۰۱ kg/s رها شده‌اند. سپس، حرکت این ذرات به کمک مدل فاز گسسته دنبال شده

1. Politecnico di Milano
2. Temporal
3. Spatial
4. Spatiotemporal
5. Residence time distribution

است. با این کار می‌توان زمان اقامت محصولات احتراق را در نواحی مختلف محفظه محاسبه کرد. بررسی‌های انجام‌شده نشان می‌دهد که زمان ماند جریان سیال از ابتدای ورود سوخت و هوا به محفظه تا انتهای شعله به صورت متوسط $6/5$ ms است. (ج) تدوین شبکه رآکتور معادل محفظه و حل شبکه با استفاده از مکانیزم سینتیک شیمیایی کامل: در گام انتهایی حل، باید نتایج برآورد فرایند پیش‌اختلاط در ناحیه بالادست جبهه شعله را به دقت به شبکه رآکتور منتقل کرد. بدین منظور، حجم ناحیه شعله به تعداد زیادی ناحیه (در این مطالعه غالباً در حدود ۱۰۰ ناحیه) با حجم‌های مساوی تقسیم شده و فرایند احتراق در هر ناحیه به صورت یک رآکتور PSR آدیاباتیک در نظر گرفته شده و معادله انرژی برای تمام رآکتورها حل شده است. دمای ورودی و فشار کاری تمام رآکتورها یکسان فرض شده، ولی توزیع نسبت هم‌ارزی در این مجموعه از رآکتورها به دقت، برحسب نتایج حل LES و PDF کسر مخلوط استخراج‌شده در صفحه جبهه شعله، اعمال شده است. قسمت انتهایی محفظه نیز (شامل ورودی‌های رقیق‌سازی، خنک‌کاری و کنارگذر) با یک رآکتور PFR منفرد مدل‌سازی شده است. طرحواره‌ای از شبکه رآکتور تولیدشده در شکل ۳ نمایش داده شده است. شرایط کاری نامی محفظه نیز در این شکل گزارش شده است. در نهایت، با چیدمان شبکه رآکتورهای شیمیایی در نرم‌افزار CHEMKIN-PRO و ورود اطلاعات محاسبه شده از حل CFD و با بهره‌گیری از مکانیزم سینتیک شیمیایی کامل مناسب، آلاینده NOx محاسبه می‌شود. پیش از پرداختن به نتایج برآورد NOx در شرایط مختلف، در بخش‌های آتی، کلیاتی در مورد نحوه شبیه‌سازی‌های CFD ارائه شده است.

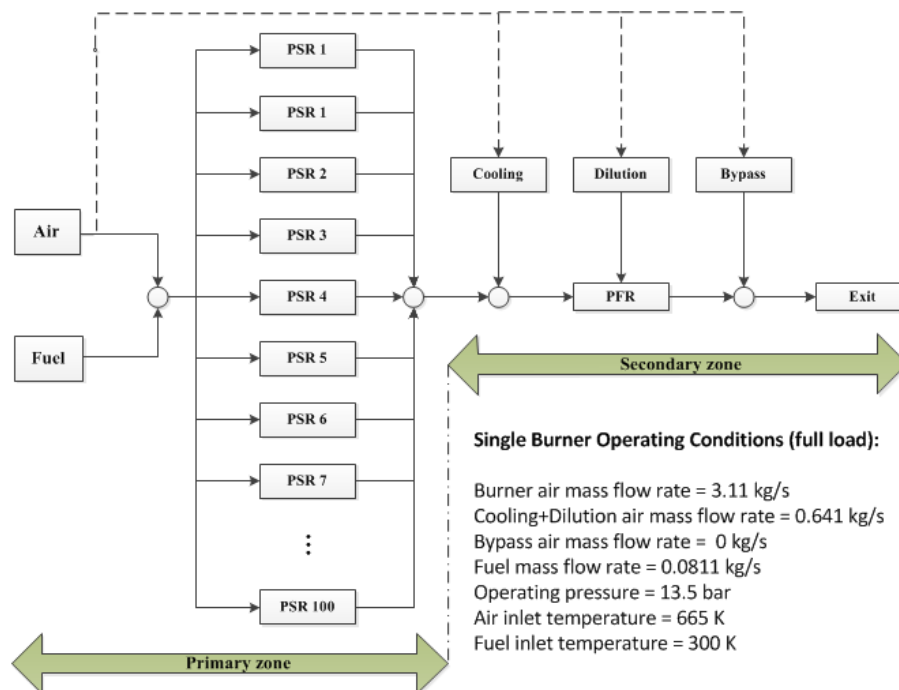


Figure 3- Equivalent chemical reactor network for NOx emission investigation

شکل ۳- شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل برای برآورد NOx

دامنه حل عددی

پس از تولید مدل محفظه با استفاده از نرم‌افزار تجاری NX، ابتدا، هندسه محفظه با استفاده از نرم‌افزار تجاری SolidWorks ساده‌سازی شده و سپس شبکه محاسباتی (شامل میدان جریان مرکزی و میدان جریان نزدیک دیواره یا لایه مرزی، دیواره‌های فلزی، و همچنین پوشش حرارتی TBC) برای هندسه سرد و گرم (منبسط‌شده) با استفاده از نرم‌افزار تجاری GAMBIT تولید می‌شود. شرایط ورودی محفظه با استفاده از یک نرم‌افزار اختصاصی شبیه‌سازی دینامیکی سیکل کاری موتور در تمام محدوده

کاری توربین استخراج شده و علاوه بر این، نحوه توزیع دبی هوا درون محفظه نیز با استفاده از یک کد اختصاصی یک‌بعدی (در محیط MATLAB) برآورد می‌شود. نحوه تقسیم سوخت در مسیرهای اصلی و پایلوت نیز از دیگر اطلاعات مورد نیاز شبیه‌سازی است که با توجه به لاجیک کنترل موتور تعیین می‌شود. سایر اطلاعات مورد نیاز از قبیل خواص مواد نیز تعیین شده و با مشخص شدن خواص، شرایط مرزی و اطلاعات نقطه کاری مورد نظر، شبیه‌سازی میدان جریان واکنشی (گرم) و غیرواکنشی (سرد) در محیط نرم‌افزار ANSYS FLUENT صورت می‌پذیرد. در مطالعه حاضر، با توجه به حجم بالای محاسبات مورد نیاز، از یک سیستم پردازش موازی شامل ۲۲۴ عدد واحد پردازش مرکزی ۲/۸ گیگاهرتزی به همراه ۷۶۸ گیگابایت RAM در محاسبات استفاده شده است. نمونه‌ای از نتایج حل عددی میدان جریان واکنشی در یک قطاع $1/18$ از محفظه (از ابتدای دیفیوزر تا انتهای محفظه) در شکل ۴ ارائه شده است.

محفظه احتراق توربین گاز IGT25 دارای هندسه پیچیده‌ای است، به نحوی که تنها در یک قطاع $1/18$ این محفظه، بیش از ۳۰۰ عدد سوراخ با قطر بین حدود ۱ تا ۱۰ میلی‌متر وجود دارد. همچنین، حضور شکاف‌های متعدد خنک‌کاری با ارتفاع حدود $0/5$ تا ۳ میلی‌متر نیز به پیچیدگی محفظه و چالش‌های مربوط به تولید شبکه محاسباتی آن افزوده است. از سوی دیگر، مشعل مورد استفاده نیز هندسه‌ای پیچیده داشته و هر مشعل استاندارد دارای ۶۰ سوراخ سوخت اصلی (دو ردیف ۳۰ سوراخ در ورودی هر شکاف) و ۱۲ سوراخ سوخت پایلوت است. علاوه بر این، با توجه به نوع جریان درون مشعل، ملاحظات ویژه‌ای برای تولید شبکه محاسباتی در این مولفه نیز لحاظ شده است.

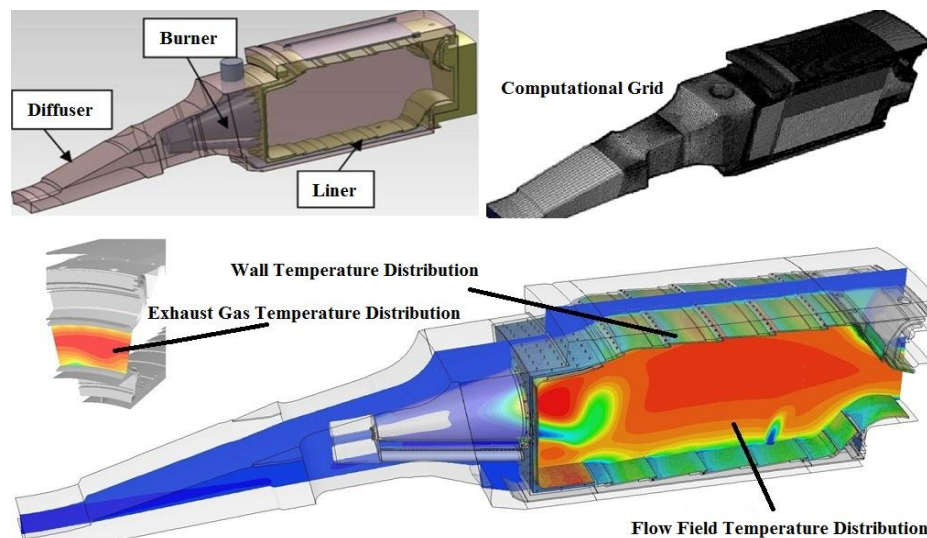


Figure 4- Single sector model geometry and computational grid (top) with sample simulation outputs of temperature distribution contours in the flow field, solid walls, and combustor exit of the IGT25 gas turbine (bottom)

شکل ۴- نمایی از هندسه و شبکه قطاع تک مشعلی (بالا) به همراه نمونه‌ای از نتایج محاسبه توزیع دما در میدان جریان، دیواره و خروجی محفظه احتراق توربین گاز IGT25 (پایین)

همان‌گونه که اشاره شد، نتایج شبیه‌سازی میدان جریان به کمک حل معادلات ناویر-استوکس میانگین‌گیری شده رینولدز برای شناسایی محل جبهه شعله و تعیین زمان اقامت متوسط حجم شعله استفاده شده است. به منظور تعیین محل جبهه شعله، یا نتایج حل CFD مستقیماً مورد استفاده قرار می‌گیرند و یا نتایج CFD به عنوان ورودی به نرم‌افزار ENERGICO وارد شده و با استفاده از ابزار اختصاصی این نرم‌افزار محل جبهه شعله تعیین می‌شود. سپس، برای ارزیابی PDF کسر مخلوط در جبهه شعله شبیه‌سازی‌ها به روش LES غیرواکنشی انجام شده است. در ادامه، جزئیات نحوه انجام شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از نرم‌افزار ANSYS FLUENT به صورت خلاصه ارائه می‌شود.

مدل سازی جریان واکنشی به کمک حل معادلات ناویر - استوکس میانگین گیری شده رینولدز

در شبیه سازی ها به کمک حل معادلات ناویر-استوکس میانگین گیری شده رینولدز، به منظور مدل سازی ترم تنش های رینولدز از روش کی اپسیلون تحقیق پذیر^۱ استفاده شده است. این مدل دقت بسیار خوبی در پیش بینی رفتار جریان های همراه با پیچش، لایه مرزی، گرادیان های فشار مخالف، جدایش و نواحی بازگردشی دارد. مطالعات انجام شده بر روی یک جریان پیچشی در داخل یک محفظه احتراق نشان می دهد که روش بالا از تمامی روش های هم خانواده دومعادله ای دقت بیشتری در پیش بینی ابعاد و محل ناحیه بازگردشی در مقایسه با نتایج تجربی دارد [۸۱، ۱۲]. همچنین، برای مدل سازی ترم های مجهول نرخ واکنش در معادلات میانگین گیری شده، از مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال گردابه استفاده شده است. در مدل احتراقی اضمحلال گردابه، نرخ واکنش به وسیله حرکات جریان آشفته کنترل می شود. به عبارت دیگر، واکنش شیمیایی به صورت مجموعه ای از گازهای سوخته و نسوخته دیده می شود که به وسیله گردابه های جریان آشفته حمل می شوند و احتراق آن ها وابسته به انرژی اختلاط در میدان جریان آشفته است. همچنین، در این مطالعه، از مکانیزم دومرحله ای پولیفک برای ترکیب سوخت و هوا برای مدل سازی واکنش های شیمیایی استفاده شده است. جزئیات بیشتر روش ها و مدل های ارائه شده فوق در مطالعات پیشین شهسواری و همکاران ارائه شده است [۱۲]. در مقاله حاضر، برای گسسته سازی معادلات حاکم از روش مرتبه دوم استفاده شده است. همچنین، کوپلینگ فشار و سرعت به کمک روش SIMPLE انجام شده است.

برای شبکه بندی هندسه حاضر از $3/4$ میلیون مش ترکیبی مثلثی و مربعی استفاده شده است. شبکه بندی در نزدیکی دیواره ها، ورودی های هوای خنک کاری و هوای رقیق سازی، مجاری ورودی هوا و سوخت، محل شعله و لایه های برشی، ریز شده است. به منظور شبیه سازی دقیق لایه مرزی، در نزدیکی دیواره ها، شبکه از 10 لایه با نرخ رشد $1/2$ تشکیل شده است. سائز متوسط المان های انتخاب شده در کل دامنه حل 3 میلی متر است. به منظور ارزیابی استقلال شبکه، محاسبات برای شبکه ها با تعداد مش $2/4$ ، $5/7$ ، $8/8$ میلیون نیز انجام شده است. شکل 5 توزیع شعاعی سرعت محوری بی بعد شده با یک سرعت مبنا ($U_0=10\text{m/s}$) در محفظه احتراق مورد بررسی در شرایط حداکثر توان و برای شبکه های مختلف در مقطع بالادست شعله در داخل مشعل را نشان می دهد. با توجه به این نتایج، شبکه با $3/4$ میلیون مش برای مطالعات حاضر کافی است.

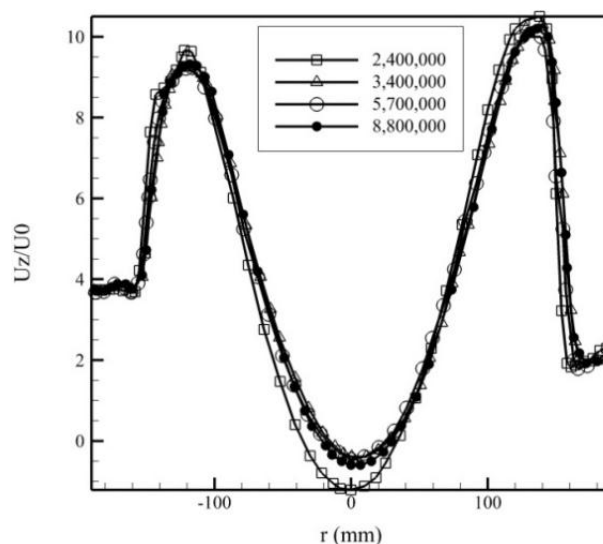


Figure 5- Grid sensitivity analysis on radial distribution of the axial velocity upstream of the flame front
 شکل ۵- آنالیز حساسیت شبکه محاسباتی در قالب توزیع سرعت در بالادست شعله در شبکه های مختلف

1. k- ϵ (realizable)

در بخشی از تحلیل‌های انجام‌شده، تولید آلاینده NOx با استفاده از مدل تحلیل این آلاینده، که به صورت پیش‌فرض در نرم‌افزار ANSYS FLUENT موجود است، نیز بررسی شده است. برای این منظور، مکانیزم‌های تولید NOx شامل مکانیزم NOx فوری، مکانیزم حرارتی و مسیر N₂O در نظر گرفته شده است. در مکانیزم حرارتی از فرض شبه‌تعادلی برای رادیکال O و از فرض شبه‌پایا در مسیر N₂O استفاده شده است.

مدل‌سازی جریان غیرواکنشی به روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ

در این مطالعه، برای شبیه‌سازی به روش گردابه‌های بزرگ از معادلات میانگین‌گیری‌شده فاوور استفاده شده است [۸۱، ۸۲]. در این راستا، اثر ساختارهای زیرشبکه بر میدان جریان به کمک مدل زیرشبکه اسماغورینسکی-لیلی^۱ مدل‌سازی شده است [۸۳]. در حل عددی حاضر، برای همگرایی هر گام زمانی ۱۰ تکرار لحاظ شده و کل زمان محاسبات حدود ۰/۰۲ ثانیه بوده است. در اجرای حل ناپایا، ابتدا معادل ۰/۰۲ ثانیه حل انجام شده تا نوسانات آشفته به نحو مطلوب تولید شود و آثار ناشی از حل اولیه نیز حذف شود. سپس، به مدت ۰/۰۲ نیز حل ادامه یافته و در طول این مدت نمونه‌برداری از میدان حل و میانگین‌گیری فعال شده است. کلیه شبیه‌سازی‌های ناپایا با گام زمانی 2×10^{-5} ثانیه (گام زمانی بی‌بعد حدود $t/U \cdot D = 0/01$) انجام شده است.

شبکه محاسباتی مورد استفاده برای LES شامل حدود ۵ میلیون سلول برای محفظه تک‌مشعلی است. به منظور کاستن از تعداد سلول‌های شبکه و حجم محاسبات، سوراخ‌های هوای خنک‌کاری محفظه به صورت شیار در نظر گرفته شده است. حداکثر سایز مش در مشعل و خروجی آن و همچنین در لایه‌های برشی و نواحی اختلاط محفظه حدود ۱ میلی‌متر و در ناحیه پایدارسازی شعله کمتر از ۲ میلی‌متر انتخاب شده است. همچنین، حداقل حدود ۱۰ سلول در خروجی سوراخ‌های سوخت لحاظ شده تا تزریق و اختلاط سوخت با دقت مناسبی مدل‌سازی شود. حداکثر سایز بی‌بعد شبکه (Δ_{max}/D) در ناحیه اصلی احتراق نیز کمتر از ۰/۰۲ انتخاب شده است. نمایی از شبکه محاسباتی مورد استفاده در شکل ۶ ارائه شده است. همچنین، در این شکل و به منظور صحت‌گذاری اولیه نتایج، نمودار چگالی طیفی توان نوسانات سرعت محوری در خروجی مشعل نیز ارائه شده است.

با توجه به نمودار شکل ۶ می‌توان مشاهده کرد که در نواحی فرکانس بالا، انتقال انرژی هماهنگ با قانون $5/3$ -کولموگوروف^۲ صورت گرفته و لذا شبیه‌سازی مناسبی در مقیاس‌های میانی صورت پذیرفته است. همچنین، نمونه‌ای از نتایج شبیه‌سازی LES نیز در شکل ۷ ارائه شده است. جزئیات بیشتر در مورد حل LES جریان سرد در محفظه فوق توسط ملاحسن‌زاده و همکاران در مراجع [۵۵] و [۸۴] ارائه شده است.

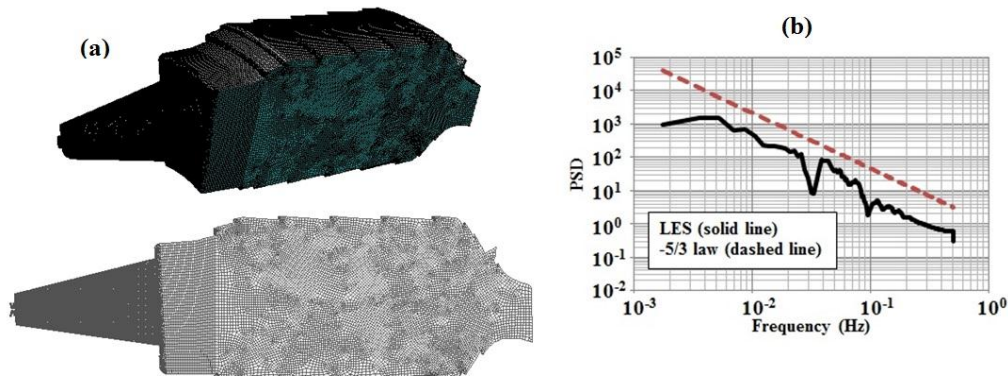


Figure 6- Schematic of (a) LES computational grid and (b) power spectral density (PSD) of axial velocity fluctuations at burner exit
شکل ۶- نمایی از (a) شبکه محاسباتی مورد استفاده در حل LES و (b) چگالی طیفی توان نوسانات سرعت محوری در خروجی مشعل

1. Smagorinsky-Lilly
2. Kolmogorov

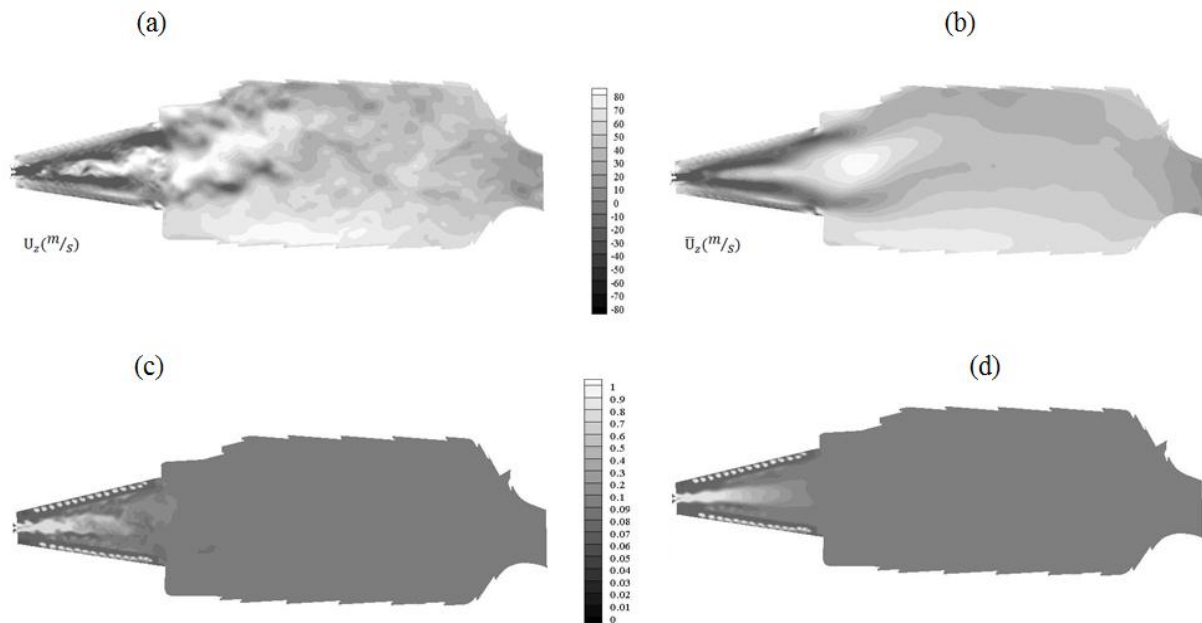


Figure 7- Contour plots of (a) instantaneous axial velocity, (b) mean axial velocity, (c) instantaneous distribution of methane mass fraction, and (d) mean mass fraction of methane in the combustor mid-plane

شکل ۷- نمایی از کانترهای (a) مقادیر لحظه‌ای سرعت محوری، (b) مقادیر میانگین سرعت محوری، (c) مقادیر لحظه‌ای کسر جرمی سوخت متان و (d) مقادیر میانگین کسر جرمی سوخت متان در صفحه میانی محفظه

کلیه شبیه‌سازی‌ها در حالت غیرواکنشی و با حضور سوخت انجام شده‌اند. سوخت در این محفظه از مسیرهای اصلی و پایلوت تزریق می‌شود و نسبت دبی سوخت پایلوت به سوخت کل (PFR) نیز با توجه به لاجیک کنترل موتور تعیین می‌شود. در ورودی‌های هوا از پروفیل‌های مناسب استفاده شده و تمام خواص به صورت تابعی از دما فرض شده‌اند. شرایط مرزی در ورودی‌های سوخت و هوا، برای مدل‌سازی جریان سرد محفظه احتراق توربین گاز مورد نظر، شامل شرط مرزی پروفیل دبی و جهت جریان در شکاف‌های مشعل، نرخ جریان جرمی در شیارهای خنک‌کاری و شرط مرزی گرادیان فشار صفر در خروجی است. پروفیل دبی در شکاف‌های مشعل با مدل‌سازی کامل محفظه و دیفیوژر به دست آمده است. با توجه به مورد نیاز بودن حل سرد میدان جریان و ثابت بودن دما در کل میدان، شرط مرزی معادله انتقال انرژی در دیواره‌ها اثری در حل نداشته و از این رو دیواره‌ها آدیاباتیک و با فرض عدم لغزش مدل شده‌اند. شرایط کاری محفظه در شرایط مدل‌سازی نیز از اطلاعات میدانی توربین گاز و شبیه‌سازی دینامیکی سیکل حاصل شده است. برای حل عددی، از نتایج شبیه‌سازی‌های غیرواکنشی مبتنی بر معادلات ناویر-استوکس میانگین‌گیری شده رینولدز، به عنوان شرط اولیه حل، استفاده شده است.

گسسته‌سازی‌های مکانی همواره با روش QUICK^۱ صورت گرفته، به جز متغیر فشار که گسسته‌سازی آن از نوع مرتبه دوم است. پس از استخراج نتایج حل پایا، شبیه‌سازی LES انجام گرفته و در این شبیه‌سازی‌ها نیز گسسته‌سازی مکانی تکانه و انرژی با روش تفاضل مرکزی محدود شده و گسسته‌سازی فشار با روش مرتبه دوم صورت گرفته و سایر متغیرها با روش QUICK گسسته‌سازی شده‌اند. گسسته‌سازی زمانی نیز با روش مرتبه دوم ضمنی انجام شده است. انتخاب رویکردهای گسسته‌سازی و انتخاب مدل‌ها برای شبیه‌سازی‌های RANS و LES با بررسی مجموعه کاملی از نتایج مطالعات شبیه‌سازی مشابه در محفظه یادشده و همچنین، انجام مطالعات پارامتری صورت پذیرفته که جهت خلاصه‌سازی از پرداختن به این جزئیات صرف نظر شده است.

1. Quadratic upstream interpolation for convective kinematics

نتایج مدل‌سازی آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن

در این بخش از نوشتار، نتایج مدل‌سازی آلاینده‌های NOx برای سیستم احتراق موتور IGT25/IGT25+ ارائه شده است. بدین منظور، ابتدا نتایج NOx در شرایط کاری نامی (بار کامل، سوخت متان، شرایط محیطی ISO) توربین IGT25 ارائه و با استفاده از نتایج تجربی موجود صحت‌گذاری شده است. صرفاً برای مقایسه، در برخی شرایط کاری نتایج محاسبه NOx با استفاده از ابزار پس‌پردازش NOx نرم‌افزار ANSYS FLUENT نیز ارائه شده است. برای انجام این محاسبات، پس از تولید حل CFD واکنشی مورد استفاده در محاسبات مربوط به برآورد محل شعله، ابزار مورد نظر فعال شده و محاسبات مربوطه انجام شده است. در ادامه، پس از ارائه نتایج اولیه و اعتبارسنجی نتایج، مطالعات پارامتری مختلفی برای بررسی و حساسیت‌سنجی ورودی‌های مختلف مدل از قبیل چیدمان و لاجیک تزریق سوخت (و یا به بیان دیگر، نحوه تنظیم میزان سوخت ورودی به محفظه و نیز تعیین نحوه تقسیم دبی سوخت ورودی بین مسیرهای اصلی و پایلوت در شرایط کاری مختلف)، ترکیب سوخت و نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی مورد استفاده، و تنظیمات مدل‌سازی شبکه راکتور انجام شده و نتایج آن گزارش شده است.

همان‌گونه که اشاره شد، گام اول در روش پیشنهادی برآورد دقیق موقعیت شعله است. بدین منظور، حل میدان جریان واکنشی محفظه با دقت کافی در توزیع دما (محل شعله) با استفاده از مدل‌های احتراق و آشفتگی مناسب و شرایط مرزی دقیق صورت پذیرفته است. پس از دستیابی به یک حل همگرای مناسب از میدان جریان واکنشی، نتایج حل عددی شامل اطلاعات شبکه محاسباتی، و داده‌های دما و فشار استاتیک، دانسیته، مولفه‌های سرعت، کسر جرمی تمامی گونه‌های شیمیایی، و انرژی و نرخ اضمحلال آشفته ذخیره می‌شود. پس از آن، با استفاده از ماژول تعیین محل شعله و برآورد محدوده خاموشی نرم‌افزار ENERIGICO، موقعیت مکانی دقیق شعله برآورد می‌شود. نمونه‌ای از نتایج برآورد موقعیت صفحه جبهه شعله و همچنین انتهای حجم ناحیه شعله با استفاده از نرم‌افزار ENERIGICO در شکل ۸ ترسیم شده است. علاوه بر این، همان‌گونه که گفته شد، مرز شعله با استفاده مستقیم از نتایج CFD و با استفاده از پارامترهای مختلف برای تعریف جبهه شعله نیز تعیین شده است. به‌عنوان نمونه، در شکل ۸، ناحیه شعله بر مبنای ۱ درصد نرخ واکنشی پیشنهادی تعیین شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های عددی جریان واکنشی در محفظه احتراق مزبور در مطالعات پیشین شهسواری و همکاران [۱۲] ارائه شده، لذا، برای کسب اطلاعات بیشتر در مورد مشخصات میدان جریان احتراقی در این محفظه، می‌توان به این مقاله مراجعه کرد.

پس از تعیین محل جبهه شعله و انتهای حجم شعله، نتایج LES برای تعیین PDF توزیع نسبت سوخت به هوا در جبهه شعله استفاده شده و علاوه بر آن، از زمان اقامت متوسط ناحیه شعله محاسبه‌شده با رویکرد CFD نیز برای تنظیم زمان اقامت راکتورهای ناحیه شعله استفاده می‌شود. همان‌گونه که اشاره شد، تابع PDF برای تعیین نسبت سوخت به هوا در هر یک از راکتورهای ناحیه شعله استفاده می‌شود. نمونه‌ای از نحوه توزیع مقدار سوخت به هوا، به‌ازای دو مقدار مختلف PFR، در شکل ۹ ارائه شده است. به‌وضوح، با افزایش PFR، یکنواختی نسبت سوخت به هوا در نواحی مرکزی کمتر شده است.

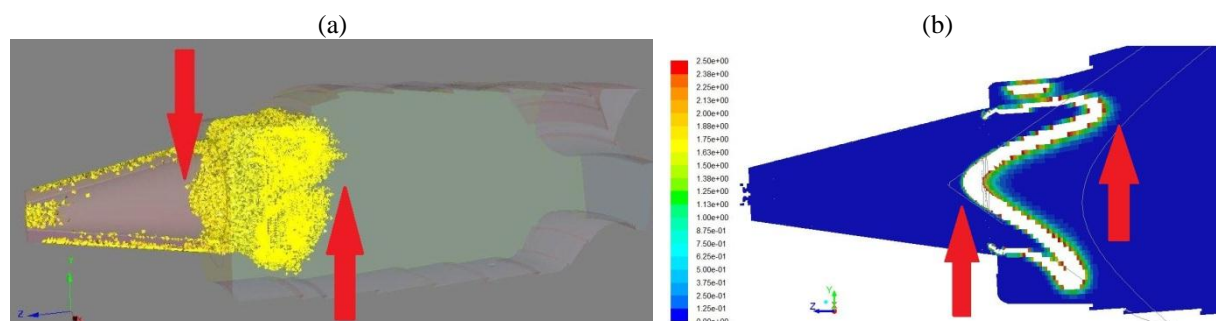


Figure 8- Flame front and flame volume location identified using (a) ENERIGICO software and (b) reacting flow simulations
 شکل ۸- موقعیت جبهه شعله و حجم شعله تعیین شده با استفاده از (a) نرم‌افزار ENERIGICO و (b) شبیه‌سازی‌های احتراقی

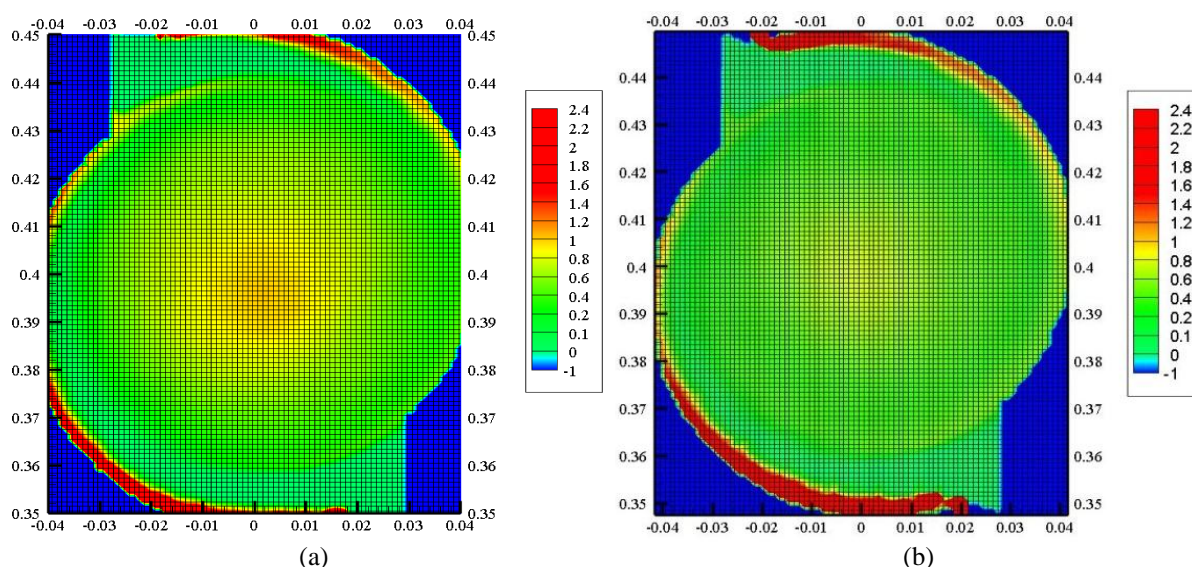


Figure 9- Equivalence ratio distribution contours at flame front plane for (a) PFR=0.28 and (b) PFR=0.16
 شکل ۹- کانتورهای توزیع نسبت هم‌ارزی در صفحه جبهه شعله برای مقادیر PFR=0.28 (a) و PFR=0.16 (b)

چون اغلب در کاربردهای صنعتی، به دلیل پیچیدگی شبکه محاسباتی و حضور دیواره، داده‌های شبیه‌سازی بر روی یک شبکه نامنظم و غیریکنواخت تولید می‌شوند، باید ابتدا نتایج توزیع نسبت هم‌ارزی خروجی شبیه‌سازی عددی را به یک شبکه منظم و یکنواخت، مشابه شکل ۹، منتقل کرد. چنانچه توزیع نسبت هم‌ارزی خروجی شبیه‌سازی عددی مستقیماً استفاده شود، به دلیل وجود تراکم بالای شبکه در بعضی از نقاط، توزیع PDF به نواحی تمرکز گره‌ها تمایل یافته و وابسته به شبکه خواهد بود. اما با استفاده از شبکه محاسباتی منظم، دانسیته تعداد نقاط موجود در هر بازه از نسبت هم‌ارزی و همچنین دبی مربوط به هر بازه با درجه اهمیت یکسان تولید شده و PDF مستقل از شبکه می‌شود. برای این منظور، کدی اختصاصی در محیط نرم‌افزار MATLAB توسعه داده شده که پس از تشکیل یک شبکه منظم با اندازه دلخواه، انتقال اطلاعات CFD به شبکه یکنواخت منظم را به صورت خودکار انجام می‌دهد. همچنین، پس از انتقال داده‌ها به شبکه منظم یکنواخت، کد اختصاصی دیگری نیز در محیط نرم‌افزاری MATLAB توسعه داده شده که با در اختیار داشتن نسبت هم‌ارزی در نقاط مرکزی شبکه‌های با سازمان و تعیین میزان بازه گستردگی آن، به تعیین احتمال و یا تعداد حضور داده‌ها در هر بازه مشخص می‌پردازد. در نهایت، PDF نسبت هم‌ارزی در صفحه جبهه شعله تعیین خواهد شد.

نمونه‌ای از PDF محاسبه‌شده برای دو طرح مختلف تزریق سوخت با مقدار PFR مشابه در شکل ۱۰ ارائه شده است. تفاوت دو طرح در شکل ۱۰ در تعداد و قطر سوراخ‌های تزریق سوخت مسیر اصلی است که چنین تغییراتی عدم اختلاط مشعل را تحت تاثیر قرار می‌دهد [۸۵، ۸۴]. در مشعل اصلی موتور IGT25 تعداد این سوراخ‌ها در هر شکاف هوا ۳۰ عدد بوده (یعنی در هر مشعل کلا ۶۰ سوراخ)، ولی در طرح ارتقایافته موتور IGT25+، این تعداد به ۱۵ سوراخ در هر شکاف هوا (یعنی در هر مشعل کلا ۳۰ سوراخ) کاهش یافته و قطر آن‌ها نیز، به منظور یکسان‌سازی مقدار سوخت عبوری، اندکی افزایش یافته است.

همان‌گونه که در شکل ۱۰ نیز مشاهده می‌شود، در طرح ارتقایافته ۱۵ سوراخه، توزیع PDF دارای نقاط بیشینه مشخص‌تر و لذا کیفیت اختلاط بهتر است. ذکر این نکته لازم است که نسبت هم‌ارزی نامی در شرایط مورد بررسی برای هر دو مشعل حدود ۰/۴۵ است و در صفحه شعله، یکنواختی توزیع نسبت هم‌ارزی و لذا اختلاط هر دو مشعل وضعیت بسیار مناسبی داشته، ولی با وجود این کیفیت اختلاط طرح ۱۵ سوراخه اندکی بهتر است. همان‌گونه که اشاره خواهد شد، همین تفاوت اندک در توزیع PDF موجب کاهش حدود ۵۰ درصد در مقدار NOx مشعل ۱۵ سوراخه می‌شود. پس از تولید اطلاعات و ورودی‌های مورد نیاز، مقدار NOx برای حالات مختلفی محاسبه شده است (جدول ۱).

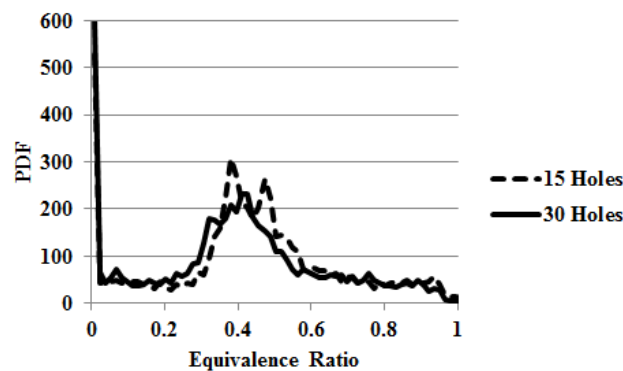


Figure 10- Equivalence ratio PDF distribution for two burners with 15 and 30 main fuel holes
 شکل ۱۰- توزیع PDF نسبت هم‌ارزی برای مشعل‌های دارای ۱۵ و ۳۰ سوراخ تزریق سوخت اصلی

جدول ۱- مقادیر غلظت آلاینده NOx محاسبه‌شده توسط مدل ECRN، شبیه‌سازی عددی و مقایسه با داده‌های تجربی

Table 1- NOx emissions predicted by CFD and ECRN along with the experimental data

Case ¹	Input data						ECRN Results	Experimental Results ³	CFD Results
	Burner Design and Fuel Staging Specifications		Fuel Composition and Chemical Kinetic Reaction Mechanism		ECRN Settings		NOx (ppmvd@15%O ₂)		
	Number of Main Fuel Holes (MFH)	Pilot Fuel Ratio (%PFR)	Natural Gas Composition (% Vol.)	Chemical Kinetic Reaction Mechanisms ²	Flame Position (cm)	Number of Reactors			
1	30	28	CH ₄ (100)	C ₂ _NO _x	4.9	100	47.76	-	61.30
2	30	16			4.9	100	19.35	21.81	17.65
3	15	16			4.9	100	11.60	-	4.83
4	30	28			4.9	100	53.14	-	61.30
5	30	16			4.9	100	20.35	21.81	17.65
6	15	16			4.9	100	12.92	-	4.83
7	30	28	CH ₄ (98) C ₂ H ₆ (0.7) C ₃ H ₈ (0.3) N ₂ (1%)	AramcoMech2.0 Combined with NO _x Mechanism of C ₂ _NO _x	4.9	100	56.96	-	-
8	30	16			4.9	100	20.86	21.97	-
9	15	16			4.9	100	12.92	-	-
10	30	16			4.7 - 5.3	100	25.24±8	21.97	-
11	15	16				100	16.68±7	-	-
12	15	16			4.9	25 - 100	12.92±1	21.97	-
13	30	28	CH ₄ (100%)	Different Chemical Kinetic Mechanisms ⁵	4.9	100	55.89±11	-	61.30
14	30	16			4.9	100	22.94±5	21.81	17.65
15	30	28	Iranian Pipeline Natural Gas ⁴	AramcoMech2.0 Combined with NO _x Mechanism of C ₂ _NO _x	4.9	100	44.53±12	-	-
16	30	16			4.9	100	18.41±5	-	-

- All current simulations have been performed at nominal operating conditions (base load at ISO conditions).
- Combination of chemical kinetic mechanisms have been accomplished using the Reaction Workbench software.
- Experimental results presented herein have been derived from the engine OEM (SIEMENS) data.
- Iranian Natural Gas pipeline contains at least 81% of methane, C₂≤14%, C₄≤6%, N₂≤7%, CO₂≤3% and small amounts of H₂S.
- Including UCSD, Konnov, GRI3.0, C₂_NO_x, AramcoMech2.0 combined with NO_x subset of C₂_NO_x and NG-III combined with NO_x subset of C₂_NO_x.

نتایج حالت ۵ جدول ۱ مربوط به بهترین نتایج شبیه‌سازی در شرایط کار نامی است که به اختلاف کمتر از ۱۰ درصد در برآورد آلاینده NOx انجامیده است. اطلاعات حالت ۸ نیز که مربوط به ترکیب دیگری از گاز طبیعی است، به سطح خطای مشابهی انجامیده است. بنابراین، با توجه به اطلاعات موجود، می‌توان از اعتبار نتایج روش ECRN مورد استفاده اطمینان حاصل کرد. پس از اعتبارسنجی نتایج، مطالعات پارامتری مختلف برای حساسیت‌سنجی ورودی‌ها و مدل‌ها انجام شده که نتایج آن در ذیل به تفصیل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

(الف) یکی از مهم‌ترین پارامترهای ورودی مدل، که تاثیری چشمگیر بر میزان NOx مشعل دارد، موقعیت انتخابی برای محل شعله است. این مسئله، به‌طور مستقیم، PDF نسبت هم‌ارزی را در مشعل مورد بحث تحت تاثیر قرار می‌دهد. مطالعات پارامتریک انجام‌شده در این مطالعه در حالات ۱۰ و ۱۱ جدول ۱ نشان داده است که تغییر در محل شعله در بازه ۴/۷ تا ۵/۳ سانتی‌متری از دهانه مشعل (با توجه به شکل ۸، نوک جبهه شعله مشعل مورد نظر تا حدودی درون فضای پیش‌اختلاط کشیده می‌شود)، یعنی به اندازه ۶ میلی‌متر، مقدار NOx تولیدی را تا بیش از ۴۰ درصد تغییر می‌دهد. به هر حال، در تمام محاسبات، غیر از حالات گفته‌شده، از موقعیت شعله ۴/۹ سانتی‌متری استفاده شده است.

(ب) اثر ترکیب سوخت گاز طبیعی ایران با استفاده از ۱۱ نوع سوخت خط لوله سراسری و چندین ترکیب سوخت سرچاهی^۱ (پارس جنوبی) با استفاده از این مدل بررسی شد. سوخت‌های مورد نظر به‌طور متوسط شامل حداقل ۸۱ درصد متان، حداکثر ۱۴ درصد C₂₋₃، حداکثر ۶ درصد C₄₊، حداکثر ۷ درصد N₂، حداکثر ۳ درصد CO₂، و حداکثر کمتر از ۱ درصد H₂S بوده‌اند. نتایج محاسبات حالات ۱۵ و ۱۶ جدول ۱ نشان داده است که این بازه از تغییرات در ترکیب گاز طبیعی منجر به اختلاف کمتر از حدود ۳۰ درصد در مقادیر NOx خروجی محافظه خواهد شد. البته ذکر این نکته لازم است که در این تحلیل فرض بر آن بوده که PDF توزیع سوخت با تغییر در ترکیب سوخت ثابت باقی بماند و به بیان دیگر، تنها آثار شیمیایی تغییر سوخت مطالعه شده است. مطالعات انجام‌شده توسط سرودی و همکاران (که نتایج آن جهت خلاصه‌سازی در این مقاله ارائه نشده است) نشان داده که تغییر در ترکیب سوخت، به‌دلیل تاثیر بر عمق نفوذ سوراخ‌های فواره^۲ سوخت اصلی، کیفیت اختلاط و توزیع PDF را به‌طور مستقیم تحت تاثیر قرار می‌دهد. این مسئله در مطالعات بعدی با دقت بیشتری بررسی شده و برای هر ترکیب سوخت یک حل LES مجزا تولید خواهد شد.

(ج) مسئله مورد توجه بعدی، اثر نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی مورد استفاده بر میزان NOx است. در این مطالعه، از ۶ مکانیزم شیمیایی مختلف برای شبیه‌سازی استفاده شده است. این مکانیزم‌ها عبارت‌اند از مکانیزم شیمیایی UCSD^۳ [۸۶] شامل ۶۳ گونه شیمیایی^۴ و ۳۰۰ واکنش بنیادی^۵ که به‌اختصار به فرم (63*300) نمایش داده می‌شود، مکانیزم شیمیایی GRI3.0 [۸۷] (53*325) و ویرایش اصلاح‌شده آن Konnov [۸۸] (53*325)، مکانیزم شیمیایی C₂-NOx [۸۹] (99*693) و همچنین مکانیزم‌های AramcoMech2.0 [۹۰] (493*2716) و NG-III [۹۱] (330*1906) که با زیرمجموعه واکنش‌های اکسیدهای نیتروژن مکانیزم واکنشی C₂-NOx (69*313) تلفیق شده‌اند. تلفیق زیرمجموعه NOx مکانیزم شیمیایی C₂-NOx با دو مکانیزم اخیر نیز با استفاده از ابزار Reaction Workbench در بسته نرم‌افزاری ANSYS صورت پذیرفته است. بررسی‌های حالات ۱۳ و ۱۴ جدول ۱ نشان می‌دهد که استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مختلف می‌تواند مقدار NOx را در شرایط کاری محافظه احتراق مورد نظر تا حدود ۲۰ درصد دستخوش تغییر کند. بهترین نتایج این مطالعه مربوط به مکانیزم تلفیقی AramcoMech2.0 با زیرمجموعه NOx مکانیزم C₂-NOx بوده است (530*3029).

(د) مطالعات پارامتری همچنین نشان داده است که در بررسی‌های حالت ۱۲ جدول ۱، تغییر پیوسته در تعداد راکتورها، از ۱۰۰ عدد به ۲۵ عدد، میزان NOx خروجی را در حدود کمتر از ۱۰ درصد تغییر می‌دهد. با وجود این، باید توجه داشت که این میزان اختلاف برای شرایط کاری مشاهده شده است که مشعل در بهترین حالت از نظر اختلاط قرار دارد. تجربه محاسبات مختلف در شرایط کاری متفاوت نشان داده که استفاده از حدود ۱۰۰ راکتور به بهترین نتایج در بررسی NOx مشعل مورد نظر در شرایط کاری مختلف منتج می‌شود.

1. Wellhead
2. Jet
3. University of California at San Diego
4. Species
5. Elementary reaction

(ه) یکی از خروجی‌های مهم مدل استفاده از آن در فرآیند ارتقای مشعل موتور IGT25 در راستای توسعه سیستم احتراق موتور IGT25+ بوده است. همان‌گونه که اشاره شد، به‌ازای یک مقدار ثابت از PFR، کاهش تعداد سوراخ‌های تزریق سوخت اصلی از ۳۰ به ۱۵ در هر شکاف مشعل و افزایش قطر سوراخ‌ها منجر به کاهش میزان تولید NOx خواهد شد. این مسئله را می‌توان به‌خوبی با مقایسه حالات ۸ و ۹ در جدول ۱ ملاحظه کرد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با تغییر چیدمان سوخت مقدار NOx خروجی از حدود ۲۵ ppmvd به کمتر از حدود ۱۵ ppmvd رسیده است. همچنین، با ثابت نگه‌داشتن تعداد سوراخ‌ها و چیدمان آن‌ها، در صورت تغییر در لاجیک تزریق سوخت و تغییر PFR، مقدار NOx به نحو چشمگیری تغییر خواهد کرد (به‌عنوان مثال حالات ۷ و ۸ جدول ۱). باید توجه داشت که اگرچه کامل‌کردن اختلاط از منظر تولید NOx ایدئال است، ولیکن معضلاتی از قبیل ناپایداری احتراق و یا خاموشی ناخواسته شعله موجب می‌شود تا طراح عمداً از شرایط کاملاً آمیخته فاصله بگیرد. به بیان دیگر، اگرچه نمودار L-S شکل ۱ کمینه تولید NOx را برای محفظه‌های DLE/DLN با سوخت گاز طبیعی تعیین می‌کند، با وجود این، عملاً نزدیک‌شدن به این حدود بهینه بسیار چالش‌زاست. برای مقایسه شرایط بهینه نمودار L-S با شرایط کاری موتور مورد بحث، نتایج سه حالت مختلف از حالات جدول ۱ بر روی نمودار L-S در شکل ۱۱ نمایش داده شده است (دمای آدیاباتیک شعله به‌جای محاسبه با نرم‌افزارهای تعادلی مستقیماً از لاجیک موتور خوانده شده است).

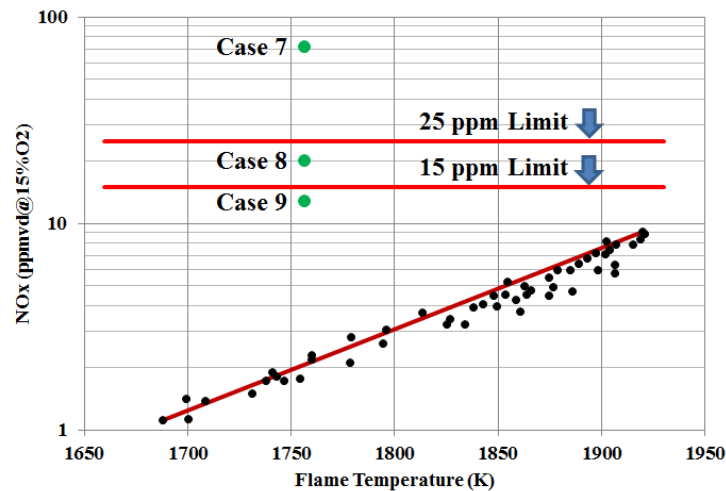


Figure 11- L-S diagram with the NOx emissions data for the cases 7, 8 and 9 of Table 1
 شکل ۱۱- دیاگرام L-S به‌همراه مقادیر NOx خروجی برای حالات ۷، ۸ و ۹ جدول ۱

به‌منظور تحلیل دقیق‌تر علت بهبود مقادیر NOx خروجی در حالات ۷ تا ۹ جدول ۱، میزان اهمیت مسیرهای واکنش مختلف تولید NOx برای هر حالت به تفکیک بررسی شده است. برای شناسایی میزان اهمیت مسیرهای مختلف تولید NOx از روشی که ابتدا در مرجع [۹۲] معرفی شده و در مراجع دیگر از قبیل [۳۰] نیز مورد استفاده قرار گرفته، بهره برده شده است. در این روش، ابتدا، واکنش‌های کلیدی برای هر مسیر شناسایی شده و به‌ترتیب در هر بار اجرای فرآیند حل مسئله، تنها یک مسیر فعال نگه‌داشته می‌شود. بدین ترتیب، می‌توان سهم هر مسیر واکنش را به‌صورت مجزا بررسی کرد. البته، این روش دو خطای اصلی در محاسبات ایجاد خواهد کرد. اول اینکه برخی واکنش‌ها ممکن است در دو یا چند مسیر مختلف مشارکت داشته باشند. دوم این که حذف یک مسیر معین ممکن است نرخ واکنش سایر مسیرها را تغییر دهد. برای حل مشکل اول، نباید واکنش‌های مشترک را حذف کرد. با وجود این، احتمال بروز مشکل دوم همواره وجود دارد. به همین دلیل، برای اطمینان از نتایج تفکیک مسیرها، مجموع مقادیر اکسیدهای نیتروژن مسیرهای منفرد با مقدار NOx برآوردی با استفاده از مکانیزم اصلی مقایسه می‌شود. بدین ترتیب می‌توان اطمینان حاصل کرد که سهم تمام مسیرهای اصلی با تقریب خوبی در نظر گرفته شده

است. برای فعال یا غیرفعال کردن هر مسیر تولید NOx و شناسایی واکنش‌های اصلی هر مسیر، با توجه به اطلاعات مراجع [۳۰] و [۹۲]، در این مطالعه از قیود جدول ۲ استفاده شده است. برای شبیه‌سازی کلیه مسیرها، از زیرمجموعه برآورد فرایندهای تشکیل اکسیدهای نیتروژن مکانیزم C₂-NOx استفاده شده که شامل ۶۹ گونه شیمیایی و ۳۱۳ واکنش بنیادی است (69*313). در شکل ۱۲، سهم هر مسیر واکنش به تفکیک برای حالات ۷ تا ۹ جدول ۱ ترسیم شده است. همان‌گونه که اشاره شد، به دلیل بهبود اختلاط سوخت و هوا با کاهش PFR و کاهش تعداد سوراخ‌های مسیر سوخت اصلی، میزان تولید NOx به نحو چشمگیری کاهش یافته است. در این شکل، برای هر حالت، میزان مشارکت هر مسیر تولید اکسیدهای نیتروژن به تفکیک بررسی شده است. همان‌گونه که در شکل ۱۲ ملاحظه می‌شود، با بهبود اختلاط (از طریق کاهش PFR یا کاهش تعداد سوراخ‌های تزریق سوخت اصلی) سهم NOx زلدوویچ یا حرارتی رفته‌رفته کاهش یافته و سهم مسیرهای فنیمور و N₂O پررنگ‌تر شده است. میزان NOx تولیدی از طریق دو مسیر دیگر نیز همواره در شرایط کاری محفظه مورد نظر ناچیز بوده است.

جدول ۲- مسیرهای مختلف تشکیل NOx و واکنش‌های کلیدی آنها

Table 2- NOx formation pathways and key reactions

NOx Formation Roots	Key Reactions
Thermal (Zel'dovich)	$N+O_2=NO+O$ $N+NO=N_2+O$ b $N+OH=NO+H$
Prompt (Fenimore)	All Reactions Including HCN, NCN, NCO, HNCO, HOCN, and CN
N ₂ O Reactions	All Reactions Including N ₂ O
NNH Reactions	All Reactions Including NNH
NO ₂ /NO ₃ Reactions	All Reactions Including NO ₂ /NO ₃
Fuel Bond Nitrogen (FBN)	Not Considered in This Study (No FBN Nitrogen)

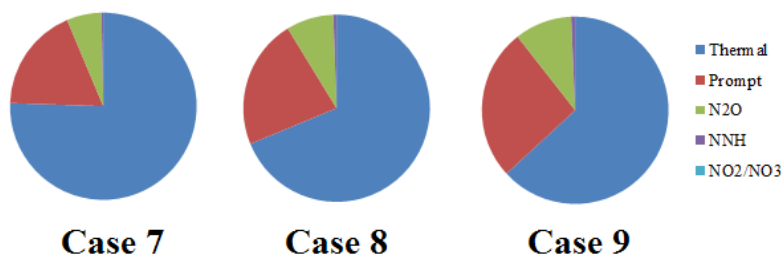


Figure 12- Main routes of NOx formation for the cases 7, 8 and 9 of Table 1

شکل ۱۲- سهم مسیرهای مختلف تشکیل NOx برای حالات ۷، ۸ و ۹ جدول ۱

در نهایت، در شکل ۱۳ نیز، اطلاعات خروجی مدلسازی برای ترکیب سوخت مورد استفاده در حالات ۷ تا ۱۲ جدول ۱ با استفاده از مکانیزم تلفیقی AramcoMech2.0 با زیرمجموعه NOx مکانیزم C₂-NOx و با استفاده از ۱۰۰ راکتور PSR در ناحیه شعله (با فرض فاصله ۴/۹ سانتی‌متری جبهه شعله از دهانه مشعل) برای مقادیر مختلف نسبت سوخت پایلوت (PFR=0.16 و PFR=0.28) و تعداد متفاوت سوراخ تزریق سوخت اصلی در هر شکاف ورودی هوای مشعل (MFH=15 و MFH=30) ترسیم شده است. به منظور مقایسه بهتر، داده‌های تجربی مرجع [۹۳] نیز ارائه شده و همچنین نتایج حل RANS نیز برای مقایسه ارائه شده است. ذکر این نکته لازم است که حل RANS با استفاده از مکانیزم سینتیک شیمیایی کلی پولیفک و اطلاعات سوخت متان خالص انجام شده است. همچنین، در این نمودار، از نتایج استخراج‌شده از رابطه ارائه‌شده اخیر در مرجع [۹۴] نیز استفاده شده است. باید توجه داشت که همان‌طور که در شکل ۱۳ مشاهده می‌شود، تغییرات NOx تابعیت نمایی نسبت به PFR دارد. تغییرات نمایی NOx نسبت به PFR برای مشعل‌های خانواده EV در مطالعات مختلف از قبیل

مراجع [۱۵] و [۹۴] تایید شده است. به‌طور ویژه، در مرجع [۹۴]، رابطه $NO_x = A \cdot \exp(B \cdot T_{flame} + C \cdot PFR) \cdot P^D \cdot \phi^E$ برای برآورد میزان اکسیدهای نیتروژن (برحسب ppmvd@15%O₂) ارائه شده است. در این رابطه، پارامترهای P ، PFR ، T_{flame} و ϕ به ترتیب معرف دمای شعله، نسبت سوخت پایلوت، فشار کاری محفظه و نسبت هم‌ارزی‌اند. پارامترهای A تا D نیز ثوابت همبستگی‌اند. این رابطه همبستگی برای سوخت متان و دمای شعله حدود ۱۷۱۰ تا ۱۸۱۰ کلوین، مقادیر PFR بین ۰ تا ۲۰ درصد، فشار ۱ تا ۱۰ بار و نسبت هم‌ارزی ۰/۴۸ تا ۰/۵۲ ارائه شده است. مشعل مورد استفاده نیز مشعل مقیاس‌شده مشابه مشعل مورد استفاده در این مطالعه (البته با چیدمان تزریق سوخت پایلوت متفاوت) است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، نتایج روش پیشنهادی هم در مقایسه با نتایج حل عددی به کمک شبیه‌سازی‌ها مبتنی بر معادلات میانگین‌گیری‌شده رینولدز و هم در مقایسه با رابطه پیشنهادی مرجع [۹۴] تطابق بهتری با اطلاعات تجربی ارائه‌شده برای موتور مورد نظر دارد. در انتها، خواننده علاقه‌مند برای بررسی دقیق‌تر فرایندهای تولید NO_x در سامانه‌های احتراقی به مراجع [۹۵-۹۷] ارجاع داده می‌شود.

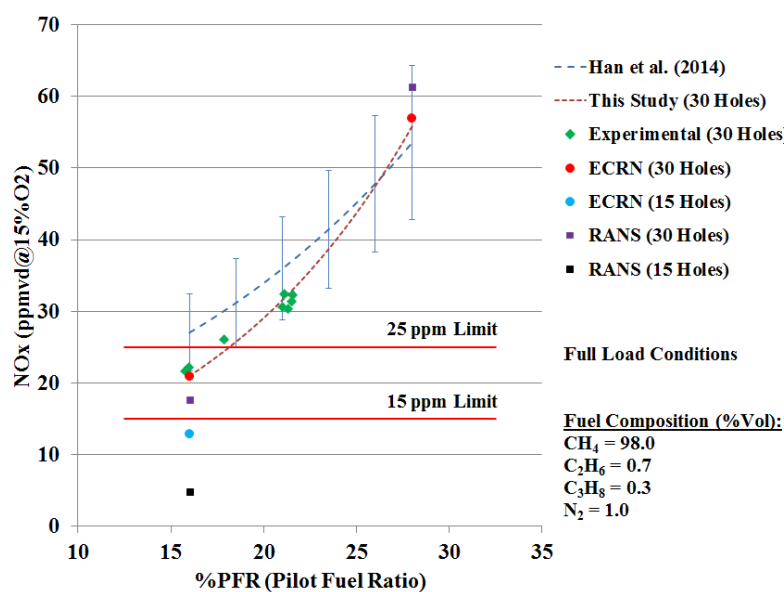


Figure 13- Variation of NO_x emissions as a function of PFR
 شکل ۱۳- منحنی تغییرات غلظت آلاینده NO_x برحسب PFR

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله، الگوریتم برآورد NO_x با استفاده از روش شبکه راکتورهای شیمیایی معادل معرفی شد و در شرایط کاری نامی یک موتور توربین گاز صنعتی مورد استفاده قرار گرفت. پس از صحت‌گذاری نتایج با استفاده از داده‌های تجربی، مطالعات پارامتری مختلفی به‌منظور بررسی آثار تغییر ترکیب سوخت، نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی، و چیدمان و لاجیک تزریق سوخت مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. نتایج مطالعات حاضر بیانگر قابلیت روش پیشنهادی در برآورد NO_x با خطای کمتر از ۱۰ درصد در موتور مورد نظر بوده است. با استفاده از این ابزار، می‌توان علاوه بر جزئیات هندسی و شرایط کاری، آثار ترکیب و نوع سوخت و نیز سهم مسیرهای مختلف تولید NO_x را به‌دقت بررسی کرد. نتایج مطالعات پارامتری نشان داده که عدم قطعیت در تعیین محل جبهه شعله مقدار NO_x برآوردی مدل را در حدود ۴۰ درصد، تغییر در ترکیب گاز طبیعی خط لوله ایران و گازهای سرچاهی مقدار NO_x خروجی از موتور مزبور را در حدود ۳۰ درصد و نوع مکانیزم سینتیک شیمیایی مورد استفاده نیز این پارامتر را در حدود ۲۰ درصد تغییر داده است. همچنین، با استفاده از نتایج محاسبات حاضر، مشعل توربین

گاز ملی ارتقا یافته و کلاس آلاینده‌های NOx خروجی این موتور مورد بحث از سطح ۲۵ ppmvd به کمتر از ۱۵ ppmvd رسیده است.

منابع

1. A. H. Epstein, "Aircraft engines' needs from combustion science and engineering," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 1791-1792.
2. T. C. Lieuwen, M. Chang and A. Amato, "Stationary gas turbine combustion: Technology needs and policy considerations," *Combustion and Flame*, 160, 2013, pp. 1311-1314.
3. T. C. Lieuwen and V. Yang, *Gas Turbine Emissions*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2013.
4. P. Jansohn, *Modern Gas Turbine Systems: High Efficiency, Low Emission, Fuel Flexible Power Generation*, Woodhead Publishing Limited, Cambridge, UK, 2013.
5. J. Park, T. H. Nguyen, D. Joung, K. Y. Huh and M. C. Lee, "Prediction of NOx and CO emissions from an industrial lean-premixed gas turbine combustor using a chemical reactor network model," *Energy & Fuels*, 27, 2013, pp. 1643-1651.
6. S. M. Correa, "Power generation and aeropropulsion gas turbines: From combustion science to combustion technology," *Proceedings of the Combustion Institute*, 27, 1998, pp. 1793-1807.
7. G. J. Sturgess, J. Zelina, D. T. Shouse and W. M. Roquemore, "Emissions reduction technologies for military gas turbine engines," *Journal of Propulsion and Power*, 21, 2005, pp. 193-217.
8. L. L. Thomas, D. W. Simons, P. Popovic, C. E. Romoser, D. D. Vandale and J. V. Citenio, "E-class DLN technology advancements, DLN1+," *ASME Paper GT2011-45944*, 2011.
9. <https://powergen.gepower.com/products.html>, Accessed on July 2017.
10. http://www.mhps.com/en/products/thermal_power_plant/gas_turbin/index.html, Accessed on July 2017.
11. K. Venkataraman, S. E. Lewis, J. Natarajan, S. R. Thomas and J. V. Citenio, "F-class DLN technology advancements: DLN2.6+," *ASME Paper GT2011-45373*, 2011.
12. M. Shahsavari, M. A. Soroudi, M. Yazdani, S. Montazerinejad and Y. Bagheri, "CO pollutant prediction of a stationary gas turbine combustor using finite rate eddy dissipation combustion model," *Journal of Fuel and Combustion*, Official Journal of the Iranian Section of the Combustion Institute, 10, 2018, pp. 33-49. (in Persian)
13. K. J. Syed, K. Roden and P. Martin, "A novel approach to predicting NOx emissions from dry low emissions gas turbines," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129, 2007, pp. 672-479.
14. F. Biagioli and F. Guthe, "Effect of pressure and fuel-air unmixedness on NOx emissions from industrial gas turbine burners," *Combustion and Flame*, 151, 2007, pp. 274-288.
15. F. Biagioli, A. De Pascale and F. Guthe, "Modelling NOx emissions from lean partially premixed flames in industrial burners," *Proceedings of the European Combustion Meeting*, Louvain-la-Neuve, Belgium, April 2005.
16. G. Leonard and J. Stegmaier, "Development of an aeroderivative gas turbine dry low emissions combustion system," *Journal of Engineering for Turbines and Power*, 116, 1994, pp. 102-107.
17. R. K. Cheng, D. Littlejohn, P. A. Strakey and T. Sidwell, "Laboratory investigations of a low-swirl injector with H2 and CH4 at gas turbine conditions," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32, 2009, pp. 3001-3009.
18. A. M. Elkady, J. Herbon, D. M. Kalitan, G. Leonard, R. Akula, H. Karim, and M. Hadley, "Gas Turbine Emission Characteristics in Perfectly Premixed Combustion," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 134, 2012, p. 061501.
19. A. S. AlAdawy, J. G. Lee and B. Abdelnabi, "Effect of turbulence on NOx emission in a lean perfectly-premixed combustor," *Fuel*, 208, 2017, pp. 160-167.
20. S. Dederichs, N. Zarzalis, P. Habisreuther, C. Beck, B. Prad and W. Krebs, "Assessment of a gas turbine NOx reduction potential based on a spatiotemporal unmixedness parameter," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 135, 2013, p. 111504.
21. M. A. Soroudi, *Using Simplified Chemical Kinetics in Natural-Gas Combustion Modeling*, M.Sc. Thesis, Faculty of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2004. (In Persian)
22. K. Ehrhardt, P. Toqan, P. Jansohn, J. D. Teare, J. M. Beer, G. Sybon and W. Leuckel, "Modeling of NOx reburning in a pilot scale furnace using detailed reaction kinetics," *Combustion Science and Technology*, 131, 1998, pp. 131-146.
23. M. Falcitelli, S. Pasini, N. Rossi and L. Tognotti, "CFD+reactor network analysis: an integrated methodology for the modeling and optimisation of industrial systems for energy saving and pollution reduction," *Applied Thermal Engineering*, 22, 2002, pp. 971-979.
24. V. Fichet, M. Kanniche, P. Plion and O. Gicquel, "A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines," *Fuel*, 89, 2010, pp. 2202-2210.
25. R. F. D. Monaghan, R. Tahir, A. Cuoci, G. Bourque, M. Furi, R. L. Gordon, T. Faravelli, A. Frassoldati and H. J. Curran, "Detailed multi-dimensional study of pollutant formation in a methane diffusion flame," *Energy & Fuels*, 26, 2012, pp. 1598-1611.

26. Y. Kang, Q. Wang, X. Lu, H. Wan, X. Ji, H. Wang, Q. Guo, J. Yan, and J. Zhou, "Experimental and numerical study on NO_x and CO emission characteristics of dimethyl ether/air jet diffusion flame," *Applied Energy*, 149, 2015, pp. 204-224.
27. Y. Kang, S. Wei, P. Zhang, X. Lu, Q. Wang, X. Gou, X. Huang, S. Peng, D. Yang and X. Ji, "Detailed multi-dimensional study on NO_x formation and destruction mechanisms in dimethyl ether/air diffusion flame under the moderate or intense low-oxygen dilution (MILD) condition," *Energy*, 119, 2017, pp. 1195-1211.
28. S. Goke, S. Schimek, S. Terhaar, T. Reichel, K. Gockeler, O. Kruger, J. Fleck, P. Griebel and C. O. Paschereit, "Influence of pressure and steam dilution on NO_x and CO emissions in a premixed natural gas flame," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 136, 2014, p. 091508.
29. A. Frassoldati, S. Frigerio, E. Colombo, F. Inzoli, and T. Faravelli, "Determination of NO_x emissions from strong swirling confined flames with an integrated CFD-based procedure," *Chemical Engineering Science*, 60, 2005, pp. 2851-2869.
30. R. F. D. Monaghan, R. Tahir, G. Bourque, R. L. Gordon, A. Cuoci, T. Faravelli, A. Frassoldati and H. J. Curran, "Detailed emissions prediction for a turbulent swirling nonpremixed flame," *Energy & Fuels*, 28, 2014, pp. 1470-1488.
31. M. Falcitelli, L. Tognotti and S. Pasini, "An algorithm for extracting chemical reactor network models from CFD simulation of industrial combustion systems," *Combustion Science and Technology*, 174, 2002, pp. 27-42.
32. M. Falcitelli, S. Pasini and L. Tognotti, "Modelling practical combustion systems and predicting NO_x emissions with an integrated CFD based approach," *Computers & Chemical Engineering*, 26, 2002, pp. 1171-1183.
33. D. Benedetto, S. Pasini, M. Falcitelli, C. La Marca and L. Tognotti, "NO_x emission prediction from 3-D complete modelling to reactor network analysis," *Combustion Science and Technology*, 153, 2000, pp. 279-294.
34. T. Faravelli, L. Bua, A. Frassoldati, A. Antifora, L. Tognotti and E. Ranzi Zhou, "A new procedure for predicting NO_x emissions from furnaces," *Computers & Chemical Engineering*, 25, 2001, pp. 613-618.
35. Y. Kang, X. Lu, Q. Wang, X. Ji, S. Miao, C. Zong, G. Luo and H. Liu, "An experimental and modeling study of NO_x and CO emission behaviors of dimethyl ether (DME) in a boiler furnace," *Fuel Processing Technology*, 122, 2014, pp. 129-140.
36. S. A. Drennan, C. P. Chou, A. F. Shelburn, D. W. Hodgson, C. Wang, C. V. Naik, E. Meeks and H. Karim, "Flow field derived equivalent reactor networks for accurate chemistry simulation in gas turbine combustors," *ASME Paper GT2009-59861*, 2009.
37. E. M. M. Orbegoso, C. D. Romeiro, S. B. Ferreira and L. F. F. da Silva, "Emissions and thermodynamic performance simulation of an industrial gas turbine," *Journal of Propulsion and Power*, 27, 2011, pp. 78-93.
38. I. V. Novosselov, P. C. Malte, S. Yuan, R. Srinivasan and J. C. Y. Lee, "Chemical reactor network application to emissions prediction for industrial DLE gas turbine," *ASME Paper GT2006-90282*, 2006.
39. I. V. Novosselov and P. C. Malte, "Development and application of an eight-step global mechanism for CFD and CRN simulations of lean-premixed combustors," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 130, 2008, p. 021502.
40. R. Hackney, S. K. Sadasivuni, J. W. Rogerson and G. Bulat, "Predictive emissions monitoring system for small Siemens dry low emissions combustors: validation and application," *ASME Paper GT2016-57656*, 2016.
41. A. Innocenti, A. Andreini, D. Bertini, B. Facchini and M. Motta, "Turbulent flow-field effects in a hybrid CFD-CRN model for the prediction of NO_x and CO emissions in aero-engine combustor," *Fuel*, 215, 2018, pp. 853-864.
42. F. Xu, V. Nori, and J. Basani, "CO prediction for aircraft gas turbine combustors," *ASME Paper GT2013-94282*, 2013.
43. C. Russo, G. Mori, V. V. Anisimov and J. Parente, "Micro gas turbine combustor emissions evaluation using the chemical reactor modelling approach," *ASME Paper GT2007-27687*, 2007.
44. A. Andreini and B. Facchini "Gas turbines design and off-design performance analysis with emissions evaluation," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 126, 2004, pp. 83-91.
45. S. Yousefian, G. Bourque and R. F. D. Monaghan, "Review of hybrid emissions prediction tools and uncertainty quantification methods for gas turbine combustion systems," *ASME Paper GT2017-64271*, 2017.
46. W. Polifke, K. Dobbeling, T. Sattelmayer, D. G. Nicol and P. C. Malte, "A NO_x prediction scheme for lean-premixed gas turbine combustion based on detailed chemical kinetics," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118, 1996, pp. 765-772.
47. B. Wegner, U. Gruschka, W. Krebs, Y. Egorov, H. Forkel, J. Ferreira and K. Aschmoneit, "CFD prediction of partload CO emissions using a two-timescale combustion model," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 133, 2011, p. 071502.
48. N. Klarmann, B. T. Zoller and T. Sattelmayer, "Numerical modeling of CO-emissions for gas turbine combustors operating at part-load conditions," *Proceedings of Shanghai 2017 Global Power and Propulsion Forum*, GPPS-2017-129, 2017.
49. A. Bhargava, D. W. Kendrick, M. B. Colket, W. A. Sowa, K. H. Casleton and D. J. Maloney, "Pressure effect on NO_x and CO emissions in industrial gas turbines," *ASME Paper 2000-GT-0097*, 2000.
50. D. L. Allaire, I. A. Waitz, and K. E. Wilcox, "A comparison of two methods for predicting emissions from aircraft gas turbine combustors," *ASME Paper GT2007-28346*, 2007.
51. F. Guethe, M. de la Cruz Garcia, and A. Burdet, "Flue gas recirculation in gas turbine: Investigation of combustion reactivity and NO_x emission," *ASME Paper GT2009-59221*, 2009.

52. M. A. Soroudi, M. Yazdani, M. Abedini and Y. Bagheri, "Localization and development of Iranian national gas turbine combustion system technology," *First International Comprehensive Competition Conference of Engineering Sciences in Iran*, Anzali, Iran, 2016. (In Persian)
53. K. Döbbling, J. Hellat and H. Koch, "25 years of BBC/ABB/Alstom lean premix combustion technologies," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129, 2005, pp. 2-12.
54. A. H. Lefebvre and D. P. Ballal, *Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions*, Third Edition, Taylor and Francis Group, New York, USA, 2010.
55. M. A. Soroudi, E. Mollahasanzadeh and N. Rasooli, "Prediction of spark ignition performance in an industrial gas turbine combustor," *Proceedings of the 7th European Combustion Meeting (ECM2015)*, Budapest, Hungary, 2015.
56. M. A. Soroudi, S. Hadi Bafekr, M. Timaji and N. Rasooli, "A priori calculation of lean blowout limit in an industrial gas turbine combustor," *Proceedings of the 6th European Combustion Meeting (ECM2013)*, Lund, Sweden, 2013.
57. N. Safari, S. Montazerinejad, M. Shahsavari and M. A. Soroudi, "Thermoacoustic instability analysis in an industrial gas turbine combustor," *The Seventh Fuel and Combustion Conference of Iran (FCCI-2018)*, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2018. (In Persian)
58. M. A. Soroudi and N. Rasooli, "Natural gas composition effects on DLE gas turbine combustor operability and emissions," *CSME International Congress*, Toronto, Canada, 2014.
59. S. L. Bragg, "Application of reaction rate theory to combustion chamber analysis," Aeronautical Research Council Pub. ARC 16170, Ministry of Defense, London, England, 1953, pp. 1629-1633.
60. A. M. Mellor, "Current kinetic modeling techniques for continuous flow combustors," *Emissions from Continuous Combustion Systems*, W. Coruelius and W.G. Agnew (Eds.), Plenum Press, New York, 1972.
61. A. M. Mellor, "Gas turbine engine pollution," *Pollution Formation and Destruction in Flames, Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 1, N. A. Chigier (Ed.), Pergamon, Oxford, 1976.
62. J. Swithenbank, I. Poll, M. Vincent and D. Wright, "Combustion design fundamentals," *Proceedings of the Combustion Institute*, 14, 1973, pp. 627-638.
63. D. S. Prior, J. Swithenbank and P. G. Felton, "Stirred reactor modelling of a low pollution liquid fuelled combustor," *Turbulent Combustion, Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 58, L. A. Kennedy (Ed.), 1978.
64. N. K. Rizk, and H. C. Mongia, "A semianalytical emission model for diffusion flame, rich/lean and premixed lean combustors," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 117, 1995, pp. 290-301.
65. H. Mohamed, H. Ben Ticha and S. Mohamed, "Simulation of pollutant emissions from a gas-turbine combustor," *Combustion Science and Technology*, 176, 2004, pp. 819-834.
66. N. T. Hao, "A chemical reactor network for oxides of nitrogen emission prediction in gas turbine combustor," *Journal of Thermal Science*, 23, 2014, pp. 279-284.
67. I. R. Sigfrid, R. Whiddon, R. Collin, and J. Klingmann, "Experimental and reactor network study of nitrogen dilution effects on NOx formation for natural gas and syngas at elevated pressures," *ASME Paper GT2013-94355*, 2013.
68. Y. Xiao, Y. Liu, Z. Zhang, W. Shao, F. Lei and H. Wang, "Experimental and numerical studies of pressure effects on syngas combustor emissions," *Applied Thermal Engineering*, 102, 2016, pp. 318-328.
69. A. B. Lebedev, A. N. Secundov, A. M. Starik, N. S. Titova and A. M. Schepin, "Modeling study of gas-turbine combustor emission," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32, 2009, pp. 2941-2947.
70. A. M. Starik, A. B. Lebedev, A. M. Savel'ev, N. S. Titova, and P. Leyland, "Impact of operating regime on aviation engine emissions: Modeling study," *Journal of Propulsion and Power*, 29, 2013, pp. 709-717.
71. R. Xue, Ch. Hu, T. Nikolaidis and P. Pilidis, "Effect of steam addition on the flow field and NOx emissions for Jet-A in an aircraft combustor," *International Journal of Turbo & Jet-Engines*, 33, 2015, pp. 381-393.
72. M. Mancini, P. Schwöppe, R. Weber and S. Orsino, "On mathematical modelling of flameless combustion," *Combustion and Flame*, 150, 2007, pp. 54-59.
73. S. Correa, "Turbulence-chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion," *Combustion and Flame*, 93, 1993, pp. 41-60.
74. J.-Y. Chen, "Stochastic modeling of partially stirred reactors," *Combustion Science and Technology*, 122, 1997, pp. 63-94.
75. M. Kraft, H. Fey, A. Schlegel, J.-Y. Chen, and H. Bockhorn, "A numerical study on the influence of mixing intensity on NOx formation," *Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems*, Heidelberg, Germany, 1997.
76. A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, E. Ranzi, S. Colantuoni, P. Di. Martino and G. Cinqu, "Experimental and modeling study of a low NOx combustor for aero-engine turbofan," *Combustion Science Technology*, 181, 2009, pp. 483-495.
77. A. Cuoci, A. Frassoldati, A. Stagni, T. Faravelli and E. Ranzi, "Numerical modeling of NOx formation in turbulent flames using a kinetic postprocessing technique," *Energy & Fuels*, 27, 2013, pp. 1104-1122.
78. A. Stagni, A. Cuoci, A. Frassoldati, T. Faravelli and E. Ranzi, "A fully coupled, parallel approach for the post-processing of CFD data through reactor network analysis," *Computers & Chemical Engineering*, 60, 2014, pp. 197-212.
79. M. S. Skjoth-Rasmussen, O. Holm-Christensen, M. Stberg, T. S. Christensen, T. Johannessen, A. D. Jensen, P. Glarborg, and H. Livbjerg, "Postprocessing of detailed chemical kinetic mechanisms onto CFD simulations," *Computers & Chemical Engineering*, 28, 2004, pp. 2351-2361.

80. M. A. Soroudi, S. Montazerinejad and E. Mollahasanzadeh, "Equivalent chemical reactor network modeling of combustor and pollutant emissions prediction in gas turbine engines," *The Seventh Fuel and Combustion Conference of Iran (FCCI-2018)*, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2018. (In Persian)
81. T. Poinso and D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, 3rd Ed., R.T. Edwards, 2012.
82. M. Shahsavari, M. Farshchi and M. H. Arabnejad, "Large eddy simulations of unconfined non-reacting and reacting turbulent low swirl jets," *Flow, Turbulence and Combustion*, 98, 2017, pp. 817-840.
83. J. Smagorinsky, "General circulation experiments with the primitive equations," *Monthly Weather Review*, 91, 1963, pp. 99-165.
84. E. Mollahasanzadeh, M. A. Soroudi, Y. Bagheri, A. R. Mirbagheri, H. Khaledi, "Optimization of injector arrangement in an industrial gas turbine using LES," *5th National Gas Turbine Conference, Iran University of Science and Technology*, Tehran, Iran, 2016. (In Persian)
85. V. D. Vasil'ev, L. A. Bulysova, and A. L. Berne, "Effect of the air-fuel mixing on the NO_x yield in a low-emission gas-turbine plant combustor," *Thermal Engineering*, 63, 2016, pp. 246-252.
86. Chemical Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, San Diego Mechanism web page, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego, <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>, Accessed on January 2018.
87. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, Jr, V. V. Lissianski, Z. Qin, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, Accessed on January 2018.
88. A. A. Konnov and J. De Ruyck, "Temperature dependent rate constant for the reaction $\text{NNH} + \text{O} \rightarrow \text{NH} + \text{NO}$," *Combustion and Flame*, 125, 2001, pp. 1258-1264.
89. C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng, and T. T. Tsotsis, "Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels," *Combustion and Flame*, 158, 2011, pp. 434-445.
90. C. W. Zhou, Y. Li, E. O'Connor, K. P. Somers, S. Thion, C. Keese, O. Mathieu, E. L. Petersen, T. A. DeVerter, M. A. Oehlschlaeger, G. Kukkadapu, C. Sung, M. Al-Refae, F. Khaled, A. Farooq, P. Dirrenberger, P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, J. Santner, Y. Ju, T. Held, F. M. Haas, F.L. Dryer and H. J. Curran, "A comprehensive experimental and modeling study of isobutene oxidation," *Combustion and Flame*, 167, 2016, pp. 353-379.
91. D. Healy, D. M. Kalitan, C. J. Aul, E. L. Petersen, G. Bourque and H. J. Curran, "Oxidation of C1-C5 alkane quinary natural gas mixtures at high pressures," *Energy & Fuels*, 24, 2010, pp. 1521-1528.
92. K. B. Fackler, M. F. Karalus, I. V. Novoselov, J. C. Kramlich and P. C. Malte, "Experimental and numerical study of NO_x formation from the Lean premixed combustion of CH₄ mixed with CO₂ and N₂," *ASME Paper GT2011-45090*, 2011.
93. M. Andersson, A. Larsson, and A. M. Carrera, "Pentane rich fuels for standard Siemens DLE gas turbines," *ASME Paper GT2011-46099*, 2011.
94. D. S. Han, G. B. Kim, H. S. Kim and C. H. Jeon, "Experimental study of NO_x correlation for fuel staged combustion using lab-scale gas turbine combustor at high pressure," *Experimental Thermal and Fluid Science*, 58, 2014, pp. 62-69.
95. J.A. Miller, and C. T. Bowman, "Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 15, 1989, pp. 287-338.
96. S. C. Hill, and L. Douglas Smoot, "Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems," *Progress in Energy and Combustion Science*, 26, 2000, pp. 417-458.
97. P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscic, and S.J. Klippenstein, "Modeling nitrogen chemistry in combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 67, 2018, pp. 31-68.

English Abstract

Prediction of NO_x emissions in an industrial gas turbine combustor using large eddy simulation and reactor network modeling

Mohammad Ali Soroudi^{1*}, Sara Montazerinejad², Ehsan Mollahasanazadeh³, Sajjad Rezayat⁴ and Mohammad Shahsavari⁵

1- Aerospace Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, m.soroudi@turbotec-co.com

2- Mechanical Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, s.montazerinejad@turbotec-co.com

3- Mechanical Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, h.hasanzadeh@turbotec-co.com

4- Aerospace Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, s.rezayat@turbotec-co.com

5- Aerospace Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, m.shahsavari@turbotec-co.com

*Corresponding author

(Received: 2018.03.21, Received in revised form: 2018.05.7, Accepted: 2018.05.18)

The present investigation concerns prediction of NO_x emissions in a stationary gas turbine combustor using reactor network modeling approach. Here, the reactor network is constructed based on spatiotemporal distribution of mixture fraction upstream of the flame front and flow residence time in the flame volume. To such aim, large eddy simulation is carried out to evaluate mixture fraction distribution upstream of the flame front, while the residence time is calculated by using RANS simulations. Moreover, the flame front position and flame volume is discerned using both RANS simulations and ENERGICO software. Obtained results are validated against experimental data. Such validations show that present method can accurately predict NO_x emissions in the dry low emissions combustor. In an attempt to enrich the present investigation, parametric studies are carried out to evaluate effects of fuel composition, chemical kinetics, flame location, and combustion regime on the NO_x production paths. Obtained results reveal that flame position and fuel composition have the most considerable effects on the NO_x emissions among the investigated parameters. Based on above investigations, the present combustor is modified to reduce the NO_x emissions from 25 ppmvd to 15 ppmvd.

Keywords: Gas turbine, NO_x emissions, Reactor network, Modeling, Combustor upgrading