

مدل سازی سینتیک سوختن نفت گاز و اصلاح پارامترهای سیستم کنترل احتراق توربین گاز نیروگاهی

مهدی عباسی*^۱

۱- استادیار، مهندسی مکانیک- تبدیل انرژی، دانشگاه تهران، دانشکده فنی، دانشکده فنی کاسپین، تهران mehdi.abbasi67@ut.ac.ir
* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۱/۱۴، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۳/۰۲/۱۲، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۳/۰۴)

چکیده: نفت گاز به عنوان یکی از پرکاربردترین سوخت‌های صنعتی، نقش به سزایی در صنعت نیروگاهی در سطح کشور و جهان دارد، که یکی از این موارد کاربرد آن در سیستم توربین گاز است. نظر به اینکه فرایند احتراق سوخت نقش کلیدی در سیستم توربین گاز دارد، شناخت این فرایند در بهینه‌سازی کل سیستم به لحاظ عملکرد و نیز کاهش اثرات زیست محیطی از اهمیت ویژه برخوردار است. این امر از طریق مدل‌سازی سینتیک، توسعه‌ی مدل جایگزین نفت گاز و سپس معرفی ترکیبات جایگزین نفت گاز انجام می‌گیرد که محور اصلی پژوهش پیش روست. بدین منظور، از داده‌های اندازه‌گیری زمان تأخیر اشتعال در شرایط مختلف آزمایشگاهی برای شبیه‌سازی و صحت‌سنجی مدل استفاده می‌شود. قسمت آخر این پژوهش معطوف به تغییر پارامترهای مدل کنترلی واحد توربین گاز است که بر مبنای داده‌های خروجی مدل‌سازی سینتیک احتراق، و به طور مشخص اصلاح ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی بر مبنای ترکیب جایگزین به دست آمده برای نفت گاز انجام می‌شود. در انتها نیز نتایج حاصل از این تغییرات با حالت پیش از آن مقایسه می‌شود.

کلیدواژگان: سیستم کنترل توربین گاز، احتراق نفت گاز، مدل‌سازی سینتیک احتراق، مدل‌سازی جایگزین

مقدمه

سوخت نفت گاز از انواع سوخت‌های ترکیبی به شمار می‌رود، که به دلیل کاربرد گسترده در بخش‌های مختلف صنعتی، از بخش حمل‌ونقل گرفته تا کشاورزی، از اهمیت بالایی برخوردار است [۱]. در صنعت نیروگاهی نیز، سوخت نفت گاز در هر دو نوع پایه فسیلی و پایه زیستی آن، در کنار گاز طبیعی به عنوان یکی از رایج‌ترین سوخت‌های مورد استفاده در تجهیزات توربین گاز مورد استفاده قرار می‌گیرد. امروزه، تجهیزات توربین گاز و نیروگاه‌های بر پایه‌ی این فناوری به صورت فراگیر درآمده است و اهمیت آن‌ها در سالیان آینده نیز رو به فزونی خواهد گذاشت. به همین علت، کنترل و بهینه‌سازی فرایند احتراق توربین‌های گازی گازوئیل‌سوز دارای اهمیت ویژه هستند. این امر در وحله‌ی اول نیازمند شناخت فرایند احتراق نفت گاز است. امروزه مدل‌سازی سینتیک فرایند احتراق به عنوان یک ضرورت در شناخت و بررسی فرایند پیچیده‌ی احتراق به شمار می‌رود، که امکان افزایش راندمان فرایند سوختن و کاهش آلاینده‌های زیست محیطی را نیز فراهم می‌آورد.

سوخت‌های متداول تقطیر شده از نفت خام، مانند نفت سفید، بنزین، نفت گاز و همچنین برخی از سوخت‌های زیستی از صدها هیدروکربن مختلف تشکیل شده‌اند که هر یک از آن‌ها در هنگام احتراق گونه‌های میانی متفاوتی تولید می‌کنند. هیدروکربن‌های موجود در سوخت‌های رایج شامل پارافین‌ها، نفتن‌ها و هیدروکربن‌های آروماتیک هستند. به طور معمول مدل‌های شیمیایی جایگزین^۱ به منظور مدل‌سازی ترکیبات مختلف مورد استفاده قرار می‌گیرند. علی‌رغم سادگی، این مدل‌ها دارای اجزای خاصی هستند که با کمک آنها خصوصیات فیزیکی و شیمیایی سوخت‌های ترکیبی را می‌توان به دقت پیش‌بینی

1. Surrogate Models

کرد. از جمله ویژگی‌های فیزیکی می‌توان به محتوای انرژی سوخت، گرمای نهان جوش و انجماد، نقطه‌ی اشتعال، هدایت حرارتی، کشش سطح، گرانیوی (ویسکوزیته) اشاره کرد [۲]. اصلی‌ترین خصوصیات شیمیایی مربوط به ترکیب شیمیایی سوخت‌ها نیز عبارتند از: نسبت تعداد اتم‌های کربن به هیدروژن C/H، میزان غلظت گونه‌ها، زمان تأخیر اشتعال^۱، سرعت شعله‌ی آرام^۲ و تمایل به تولید دوده^۳. خصوصیات شیمیایی و فیزیکی سوخت به شدت با یکدیگر ارتباط دارند و به طور معمول با مشخصات استاندارد برای سوخت توربین مشخص می‌شوند [۲]. با این حال از میان آن‌ها، زمان تأخیر اشتعال در بازه‌های مختلف دمایی و فشار اولیه، و همچنین سرعت شعله‌ی آرام دارای اهمیت ویژه هستند، زیرا پیش‌بینی این داده‌ها با دقت مناسب، علاوه بر تنظیم دقیق واکنش‌های شیمیایی و پارامترهای سینتیک، نیازمند پیش‌بینی درست ویژگی‌های ترموشیمیایی^۴ و خواص انتقالی^۵ توسط مدل نیز هستند. با این حال، در مورد انواع سوخت‌های ترکیبی، این ویژگی‌ها می‌توانند برای ترکیبات رایج استاندارد، بسیار متفاوت باشند. شکل (۱) مقایسه‌ای از ترکیب‌بندی هیدروکربنی دو مخلوط استاندارد دیزل را نمایش می‌دهد. همان‌طور که از این نمودار پیداست، توزیع گروه‌های هیدروکربنی در این دو مخلوط متفاوت است، که این تفاوت موجب بروز اختلاف در سایر ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی این دو ترکیب نفت‌گاز می‌شود.

بدیهی است که وجود تفاوت در ترکیب سوخت واقعی خود موجب ایجاد تفاوت در مدل‌های جایگزین موجود در منابع مختلف است. به دلیل عدم قطعیت در میزان و تعداد ترکیبات مختلف هیدروکربنی موجود در انواع مختلف نفت‌گاز، مطالعه و مدل‌سازی کامل و جزیه‌جز ترکیب واقعی تقریباً غیرممکن است.

بنابراین، استفاده از مدل‌های جایگزین، در شبیه‌سازی‌های عددی که قابلیت باز تولید خواص اصلی فیزیکی و شیمیایی سوخت را در شرایط مختلف، و با دقت مورد نیاز را داشته باشد تنها گزینه‌ی عملی است. مختصراً لازم به ذکر است که مدل جایگزین خود از دو جزء «ترکیب جایگزین^۶» و «مدل سینتیک جایگزین^۷» تشکیل می‌شود.

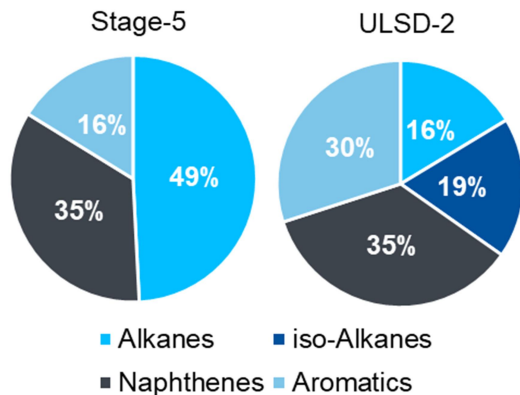


Figure 1- Hydrocarbon classes of two different conventional diesel blends, ULSD-2 (right) and Stage-V (left) [19, 41]
 شکل ۱- هیدروکربن‌های تشکیل‌دهنده‌ی دو ترکیب استاندارد نفت‌گاز با محتوای کم گوگرد ULSD (سمت راست) و Stage-V (سمت چپ) [19, 41]

1. Ignition Delay Time (IDT)
2. Laminar Flame Speed (LFS)
3. Soot Index
4. Thermochemical Properties
5. Transport Properties
6. Surrogate Formula
7. Surrogate Kinetic Model

مدل سینتیکی نیز به نوبه‌ی خود از سه رکن: «مکانیسم واکنش‌های شیمیایی^۱» «داده‌های ترمودینامیکی گونه‌ها^۲» و «خواص انتقالی گونه‌ها^۳» تشکیل می‌شود، که می‌باید دربرگیرنده‌ی تمامی اطلاعات لازم در مورد گونه‌های پیش‌بینی شده و چگونگی و نحوه واکنش گونه‌های شیمیایی با یکدیگر را منعکس کند. بدیهی‌است که در وهله‌ی اول تعداد اجزای موجود در ترکیب جایگزین، تعیین کننده اندازه‌ی مدل است. در ادامه مروری کوتاه بر مدل‌های جایگزین تاکنون منتشر شده خواهیم داشت.

مروری بر مدل‌های جایگزین تاکنون منتشر شده

در مطالعات اولیه، هپتان C_7H_{16} به عنوان یکی از موارد جایگزین در نظر گرفته شده بود. دلیل این انتخاب نزدیکی عدد ستان آن نزدیک به مخلوط واقعی انواع دیزل است. از جمله علت‌های دیگر، شناخته شده بودن احتراق هپتان و وجود تعداد کافی پژوهش‌های نظری و عملی در موضوع شیمی احتراق هپتان است [۳]. با این حال مکانیسم احتراق هپتان نمی‌تواند فرایند سوختن همه گروه‌های هیدروکربنی موجود در ترکیب واقعی دیزل یعنی: آلکان‌ها، سیکلوآلکان‌ها و آروماتیک‌ها را دقیق توصیف کند، که خود منجر به بروز خطا در پیش‌بینی میزان آزادسازی گرما می‌شود [۴-۷]. علاوه بر این، میزان انتشار آلاینده‌های هپتان به خصوص در بحث تشکیل دوده با نفت‌گاز تفاوت مبنایی دارد [۸]. جهت ارائه‌ی راه حل برای مسئله‌ی ذکر شده، پژوهش‌های مختلفی با تمرکز بر مدل‌سازی دو و چند جزئی به خصوص در سالیان اخیر انجام شده است، که اغلب آن‌ها بر مبنای انجام پژوهش آزمایشگاهی به ترکیب جایگزین دیزل دست یافته‌اند [۹-۱۵]. تنها بخشی از این مطالعات با محوریت معرفی مدل‌سازی جایگزین سینتیک نفت‌گاز انجام گرفته‌اند [۱۶-۱۹]. که تقریباً تمامی مدل‌های معرفی شده، اعم از مکانیسم‌های جامع و کاهش یافته، با استفاده از مزیت نردبانی بودن ساختار مکانیسم جایگزین، و از برهم‌نهی زیرمدل‌های تاکنون انتشار یافته شکل گرفته‌اند. نقطه ضعف اصلی این مکانیسم‌ها، عدم استفاده از زیرمکانیسم‌های واکنش شیمیایی دقیق به خصوص در مورد نحوه‌ی اشتعال خودکار در دماهای زیر هزار درجه‌ی کلوین هستند، که از اهمیت ویژه برخوردارند. همچنین مسئله عدم بهره‌مندی آن‌ها از جدیدترین تحقیقات انجام شده برای زیر مدل شیمی گونه‌های کوچک^۴، زیر مدل مربوط به آلکان‌های حلقوی، و زیرمدل مربوط به تشکیل هیدروکربن‌های آروماتیک مرکب^۵ نکته دیگر قابل توجه است، که مستقیماً بر روی پیش‌بینی داده‌های زمان تأخیر اشتعال، سرعت شعله آرام، و تشکیل پیش‌نیازهای دوده تأثیر منفی می‌گذارند. علاوه بر این، مشاهده شده است که اغلب پژوهش‌های یاد شده، از مکانیسم‌های بسیار کاهش یافته برای معرفی ترکیب جایگزین بهره جسته‌اند، که این موضوع خود می‌تواند باعث کاهش شدید دقت مدل، به خصوص روی مدل‌سازی در سایر شرایط آزمایشگاهی و یا صنعتی پیش‌بینی نشده شود. لذا با توجه به عدم وجود یک مکانیسم جامع نیمه‌گسترده^۶ برای احتراق دیزل، ضرورت توسعه مکانیسم و مدل‌سازی دقیق، با تمرکز روی مسئله اشتعال خودکار در هر دو منطقه بالایی و پایینی دمایی بیش از پیش مشخص می‌شود.

روش و مراحل توسعه مدل جایگزین

نکته‌ی کلیدی در مدل‌سازی سوخت، قابلیت بازتولید خصوصیات شیمیایی، فیزیکی و احتراق مخلوط‌های سوخت است. به منظور دستیابی به این اهداف، روش پیشرفته‌ی طراحی مدل سوخت^۷ در ایجاد فرمول ورودی جایگزین^۸ مورد استفاده قرار

1. Chemical Reaction Mechanism
2. Thermochemical Properties
3. Transport Properties
4. C_0 - C_3 Chemistry
5. Poly Aromatic Hydrocarbons (PAH)
6. Semi-Detailed Mechanism
7. FMD (Fuel Model Design)
8. IFS (Input Formula of Surrogate)

می‌گیرد [۲]. این امر با چندین حلقه‌ی تکرار در الگوریتم پیشنهادی «حلقه تکرار بهینه‌سازی مدل‌سازی جایگزین^۱» انجام می‌گیرد [۲۰]. در نهایت، ترکیب به دست آمده از مدل جایگزین باید با نتایج تجربی احتراق عملی سازگار باشد. شکل ۲ این فرایند را توضیح می‌دهد [۲۱].

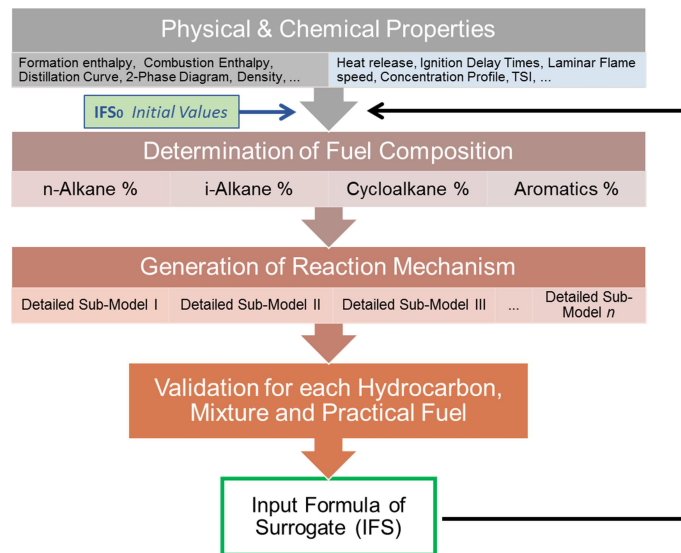


Figure 2-Algorithm of the surrogate modeling procedure [21]

شکل ۲- الگوریتم کلی فرایند مدل‌سازی جایگزین [21]

فرایند مدل‌سازی جایگزین دارای ماهیت تکرارشونده است و بر اساس اصل آزمون و خطا کار می‌کند. حلقه‌ی تکرار و تصحیح تا زمانی ادامه می‌یابد تا جواب مدل در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی که گویای رفتار احتراقی سوخت هدف است، انطباق و دقت مناسب را ارائه دهد. بر این اساس، در گام اول می‌باید گروه‌های هیدروکربنی که همان اجزای تشکیل‌دهنده‌ی فرمول جایگزین هستند، به همراه ترکیب اولیه‌ی از آن‌ها به عنوان حدس اولیه تعیین شوند، که معمولاً این کار با توجه به بررسی خواص فیزیکی سوخت واقعی انجام می‌گیرد. گام بعدی، مربوط به ساخت مدل‌های سینتیک^۲ برای هر گروه هیدروکربنی موجود در ترکیب است. هر یک از این مدل‌ها در واقع نقش زیرمدل را در ترکیب کلی سوخت جایگزین ایفا می‌کنند و از برهم‌نهی و تصحیح نقاط اشتراک آن‌ها، نسخه اولیه مدل سینتیک جایگزین تشکیل می‌شود. سپس پاسخ این مدل نسبت به داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شده، نقاط ضعف و قوت مدل شناسایی، و براساس تحلیل انجام گرفته در هر مرحله شرایط بهبود کارکرد مدل کلی بررسی می‌شود. در حلقه‌ی بعدی تکرار، معمولاً در ابتدا اولویت با تغییر درصد مولی اجزای سوخت است، و در نهایت در صورتی که دیده شود، پاسخ مدل دچار تغییرات چندانی در نقاط ضعف اولیه نشد، به اعمال تغییرات در مدل سینتیک واکنش‌های شیمیایی و پارامترهای آن پرداخته می‌شود. این روند تا حصول نتیجه دلخواه ادامه خواهد داشت. با این ترتیب، ریسک بزرگی که در همان ابتدا متوجه فرایند مدل‌سازی می‌شود، مربوط به انتخاب ترکیب اولیه و زیر مدل‌های مربوطه است.

انتخاب گروه‌های هیدروکربنی باید به گونه‌ای باشد که تا جای ممکن تمامی گروه‌های اصلی هیدروکربنی موجود در سوخت واقعی را در برگیرد. به طور کلی دسته بندی هیدروکربن‌های ترکیب جایگزین شامل چهار دسته: نرمال آلکان^۳، ایزو-

1. Surrogate Optimization Loop (SOL)
2. Kinetic Models
3. n-Alkane

آلکان^۱، آلکان حلقوی^۲ و آروماتیک^۳ هستند. اغلب مدل‌های جایگزین منتشر شده برای نفت‌گاز دارای 2-5 جزء در ترکیب جایگزین خود هستند. با وجود اینکه مدل‌های دو جزئی در نتایج ارائه شده، دارای دقت مناسب به نظر می‌رسند، اما به طور حتم می‌توان گفت که اگر در گستره‌ی داده‌های بیشتری مورد مطالعه قرار گیرند، قادر به پیش‌بینی بسیاری از جنبه‌های رفتار احتراقی نخواهند بود. این نکته توسط پیترز و مولر [۲۲]. هم مورد تأکید قرار گرفته است. بنابراین به نظر می‌رسد که در نظر گرفتن دست کم سه جزء که قادر به پوشش هر چهار خانواده‌ی هیدروکربنی اشاره شده باشند، برای تامین دقت مطلوب مدل، مورد نیاز است.

در مورد اغلب مدل‌های جایگزین منتشرشده، هیدروکربن‌های انتخاب شده دارای ساختار پیچیده و اندازه بزرگ مولکولی هستند، که انتخاب آن‌ها بیشتر با انگیزه‌ی انطباق حداکثری فرمول متوسط سوخت جایگزین با مخلوط واقعی دیزل، و گنجاندن نزدیکترین ساختار به ترکیبات هیدروکربنی موجود در مخلوط اصلی است. با این حال مشکل اصلی که متوجه این راهبرد است، در گام دوم و سوم مدل‌سازی است، که مربوط به گسترش مدل سینتیک جایگزین، و مشخصاً در مورد مکانیسم واکنش‌هاست. همان طور که در قسمت قبل نیز اشاره شد، اغلب مدل‌های تاکنون انتشار یافته برای نفت‌گاز (دیزل)، از مکانیسم‌های بسیار کاهش یافته با تعداد پایین گونه‌های میانی و واکنش‌های شیمیایی استفاده کرده اند. دلیل اصلی این امر، تلاش برای جلوگیری از بروز پیچیدگی‌های ناشی از به کار بردن هیدروکربن‌های بزرگ است؛ عدم وجود پژوهش‌های کافی چه در زمینه مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی، و چه داده‌های آزمایشگاهی برای این ساختارها بر پیچیدگی و ریسک عدم پایان فرایند مدل‌سازی می‌افزاید.

انتخاب درصد ترکیب اجزای موجود در سوخت یکی دیگر از نکات قابل توجه در تنظیم فرمول اولیه سوخت جایگزین است. در حقیقت میزان کسر مولی ترکیب، تعیین کننده وزن مولکولی میانگین و فرمول نهایی مخلوط جایگزین می‌باشد، اما علاوه بر این، بیانگر میزان تأثیر هر یک از گروه‌های هیدروکربنی است و مشخص می‌کند که مخلوط نهایی در هریک از مشخصه‌های احتراقی تا چه حد تحت تأثیر هر یک از گروه‌های هیدروکربنی خود قرار دارد. برای تنظیم این پارامترها می‌باید در درجه‌ی اول نگاهی به ترکیب سوخت واقعی به لحاظ آرایش گروه‌های هیدروکربنی موجود در آن داشته باشیم که عموماً توسط تولیدکنندگان در دسترس قرار می‌گیرد (شکل ۱). در مورد نفت‌گاز تولید ایران اطلاعات دقیقی از این حیث مشخص نشده است.

نکته‌ی مهم دیگر که باید در انتخاب ترکیب اولیه جایگزین مدنظر داشت، توجه به ساختار مدل واکنش‌های شیمیایی و لزوم رعایت اصل سادگی تا جای ممکن است؛ باید سعی شود تا از استفاده از هیدروکربن‌هایی که دارای ساختار پیچیده هستند پرهیز کرد، چرا که همان‌طور که اشاره شد، ممکن است منابع پژوهشی کافی نظری و آزمایشگاهی برای آنها وجود نداشته باشند. از طرف دیگر نیز، ساده‌سازی اجزای انتخابی و تنظیم کسر مولی نباید به گونه‌ای باشد که موجب افت دقت ساختاری در مدل شود، به گونه‌ای که با تصحیح واکنش‌ها و پارامترهای سینتیک نیز اصلاح‌پذیر نباشد.

توسعه مدل واکنش‌های شیمیایی با استفاده از مدل مرجع

انتخاب مدل پایه باید به گونه‌ای باشد که از نظر نوع هیدروکربن‌های تشکیل‌دهنده، نوع گونه‌های میانی، و دسته‌ی واکنش‌های شیمیایی شباهت کافی به سوخت هدف را داشته باشد. نفت‌گاز از دیرباز به‌عنوان سوخت اصلی موتورهای دیزلی در حمل‌ونقل جاده‌ای و دریایی مورد استفاده قرار گرفته است. سوخت جت JP-8 نیز ترکیب ویژه‌ای است که در پیش‌رانه‌های جت نظامی نیز استفاده می‌شود. اما نکته‌ای که در این بین وجود دارد، نزدیکی شاخص‌های اشتعال خودکار و انتشار دوده‌ی این دو سوخت است (جدول ۲).

- 1.iso-Alkane
- 2.Cyclic Alkane (Naphthene)
- 3.Aromatic

جدول ۲- مقایسه مشخصات سوخت جت JP-8 و دیزل کم سولفور ULSD-2.

Table 2-Comparison of certain properties of the JP-8 and ULSD-2 fuels.

ULSD-2 دیزل [24-26]	JP-8 [23]	مشخصه‌ها
50.4	50.1	Derived Cetane Number (DCN)
1.87	1.93	H/C نسبت هیدروژن به کربن
42.975	43.3	LHV (MJ/kg)
194	160.96	وزن مولکولی (g/mol)
28	22.96	Threshold Sooting Index (TSI)

این نزدیکی ویژگی‌ها خود نشانه‌ای از تشابه میان گروه و حتی درصد هیدروکربن‌های موجود است که موجب می‌شود تا محصولات و گونه‌های میانی احتراق آن‌ها نیز مشابه باشد. استفاده از انواع ترکیبات سوخت جت در سالیان اخیر در توربین‌های گاز و وسایل نقلیه‌ی زمینی نیز به خصوص در بخش نظامی رواج پیدا کرده است [۲۷]. یو و همکاران [۱۸-۲۷، ۲۷] در مجموعه‌ی پژوهش‌های سالیان بر روی این موضوع به‌طور مشخص متمرکز شده‌اند، و حتی با در نظر گرفتن یک نوع توزیع هیدروکربنی در فرمول نهایی و استفاده از مدل سینتیک یکسان، تنها با کسر مولی متفاوت برای این دو سوخت، به مطالعه رفتار احتراقی آن‌ها پرداخته‌اند. به این ترتیب با در نظر گرفتن شباهت ساختاری اشاره شده، می‌توان از مدل جایگزین جت^۱ به عنوان مدل پایه برای مدل جایگزین سوخت دیزل^۲ و از ترکیب نهایی جایگزین^۳ آن به عنوان ترکیب اولیه ورودی^۴ (شکل ۲) بهره جست. برای این منظور، در این پژوهش از مدل جایگزین جت مرکز هوافضای آلمان^۵ [۲۹، ۳۰] استفاده خواهد شد. نسخه‌ی اولیه‌ی این مدل توسط اسلاوینسکایا و همکاران Slavinskaya et al. [۲۰، ۳۱، ۳۲] تدوین شد. که دیرتر با گسترش مکانیسم نیمه جزئی سیکلوهاگزان [2, 21]، متان و گاز سنتز^۶ (مجموعه CO و H₂) [۳۳، ۳۴]، و افزودن آن‌ها به مجموعه‌ی زیرمدل‌ها، به مدل جدیدتری ارتقا پیدا کرد [۳۰]. این نسخه به‌صورت گسترده در سال‌های اخیر مورد استفاده قرار گرفته است بر این اساس ترکیب پیشنهادی برای سوخت جت^۷ متشکل از ۴۰ درصد دودکان^۸، ۲۰ درصد سیکلوهاگزان^۹، ۲۵ درصد ایزو-اوکتان^{۱۰}، و ۱۵ درصد تولوئین^{۱۱} ارائه شد [۳۵]. این مدل متشکل از ۱۷۰ گونه و ۱۰۲۴ واکنش است که کارکرد خوبی در برابر داده‌های آزمایشگاهی زمان تأخیر اشتعال اندازه گیری شده به خصوص در تجهیزات لوله‌ی شوک^{۱۲} از خود نشان می‌دهد. اخیراً نیز مدل جدید استیلن C₂H₂ [۳۶] به‌عنوان پایه‌ی شیمی C₀-C₃ و همین‌طور مدل پیش‌نیاز آروماتیک، به آن افزوده شده است، که دقت پیش‌بینی و درجه‌ی جزئیات آن افزایش چشمگیری یافته است. نکته قابل توجه، بهره‌مندی این مدل از به روزترین و کامل‌ترین مدل تشکیل PAH است که پیش‌نیاز تشکیل دوده و ریزگردها محسوب می‌شوند. این مدل قادر است تشکیل PAH را تا گونه‌هایی با بزرگی ۵ حلقه آروماتیک (بنزنی) بررسی کند. بدنه‌ی اسکلتی این مدل شامل ۸ گروه هیدروکربنی اصلی بزرگ‌تر از زنجیره‌ی کربنی C₄ نیز، از بوتان C₄H₁₀ آغاز شده و تا دودکان C₁₂H₂₆ ادامه می‌یابد.

1. Jet Fuel Surrogate (JFS)
2. Diesel Fuel Surrogate (DFS)
3. Surrogate Formula
4. Input Formula of Surrogate (IFS)
5. Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)
6. Syngas
7. Jet-A1
8. n-Dodecane
9. Cyclohexane
10. iso-Octane
11. Toluene
12. Shock Tube (ST)

نتایج و تحلیل

تحلیل نتایج مدل سازی جایگزین

با توجه به ترکیب اولیه جایگزین جت که در [۳۵] معرفی شده است، و نیز با بررسی ویژگی‌های فیزیکی نفت‌گاز، ترکیب پیشنهادی جایگزین SRG1 معرفی می‌شود، که می‌باید در گام بعد به‌منظور شبیه‌سازی ویژگی‌های مهم احتراقی مورد استفاده قرار بگیرد. نمودار شکل ۳ نحوه پیکربندی این ترکیب پیشنهادی را نشان می‌دهد.

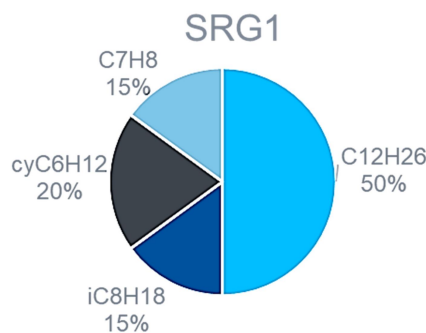


Figure 3- Distribution of hydrocarbon groups, forming the final surrogate formula.

شکل ۳- هیدروکربن‌های تشکیل‌دهنده ترکیب جایگزین معرفی شده.

مدل سینتیک جایگزین نفت‌گاز به همراه ترکیب به‌دست آمده بر روی طیف گسترده‌ای از داده‌های اندازه‌گیری، شامل تمامی داده‌های اشتعال خودکار که تاکنون منتشر شده‌اند، و نیز داده‌های سرعت شعله مورد تأیید قرار گرفته است. اخیراً نتایج به‌دست آمده از این مدل به تفصیل در [۳۷] ارائه شده است. در مقاله‌ی حاضر، منتخبی از عملکرد این مدل بر روی داده‌های زمان تأخیر اشتعال که مورد استفاده در تجهیزات توربین گاز، به‌طور مشخص برای قسمت دوم این پژوهش یعنی بازآرایی سیستم کنترل توربین گاز مورد نیاز است، ارائه می‌شود.

کلیه مجموعه داده‌های اشتعال خودکار توسط نرم‌افزار [۳۸] و با استفاده از راکتور بمبی^۲ شبیه‌سازی شده‌اند. نمودارهای شکل ۴ نتایج شبیه‌سازی داده‌های زمان تأخیر اشتعال [۳۹] را در نسبت‌های هم‌ارزی 1، 0/5، و $\phi=0/5$ برای مخلوط Stage-5 و در بازه فشار $P=6, 10, 20$ bar و در بازه‌ی $T \geq 1000$ K نشان می‌دهد. پاسخ مدل احتراقی با فرمول جایگزین، انطباق مطلوبی از نظر عددی و روند تغییرات، با داده‌های آزمایشگاهی دارند. نتایج مشابهی نیز از شبیه‌سازی سایر داده‌های آزمایشگاهی در دماهای بالا و در سایر نسبت‌های هم‌ارزی $\phi \leq 1$ و حتی در فشارهای بالاتر $P=20$ bar به‌دست آمده است که به‌طور مفصل در [۳۷]. تشریح و به آن پرداخته شده است. چنین انطباقی به معنی انتخاب و تنظیم مناسب سازوکارها و دسته‌های اصلی واکنش‌های موثر، و تنظیم مناسب پارامترهای سینتیک آن‌هاست.

نمودارهای شکل ۵ نیز نتایج شبیه‌سازی داده‌های زمان تأخیر اشتعال در دماهای پایین $T < 1000$ K را به تصویر می‌کشند. این داده‌ها توسط [۴۰] در تجهیزات تراکم سریع RCM اندازه‌گیری شده‌اند که دو ترکیب متفاوت رایج نفت‌گاز، یعنی FD9A و USLD-2 را در $\phi=0/5, 0/7, 1$ و در فشارهای افزوده $P=10, 15, 20$ bar مورد بررسی قرار داده‌اند.

1.ANSYS CHEMKIN-PRO V.2017
2.Calorimetric Bomb Reactor

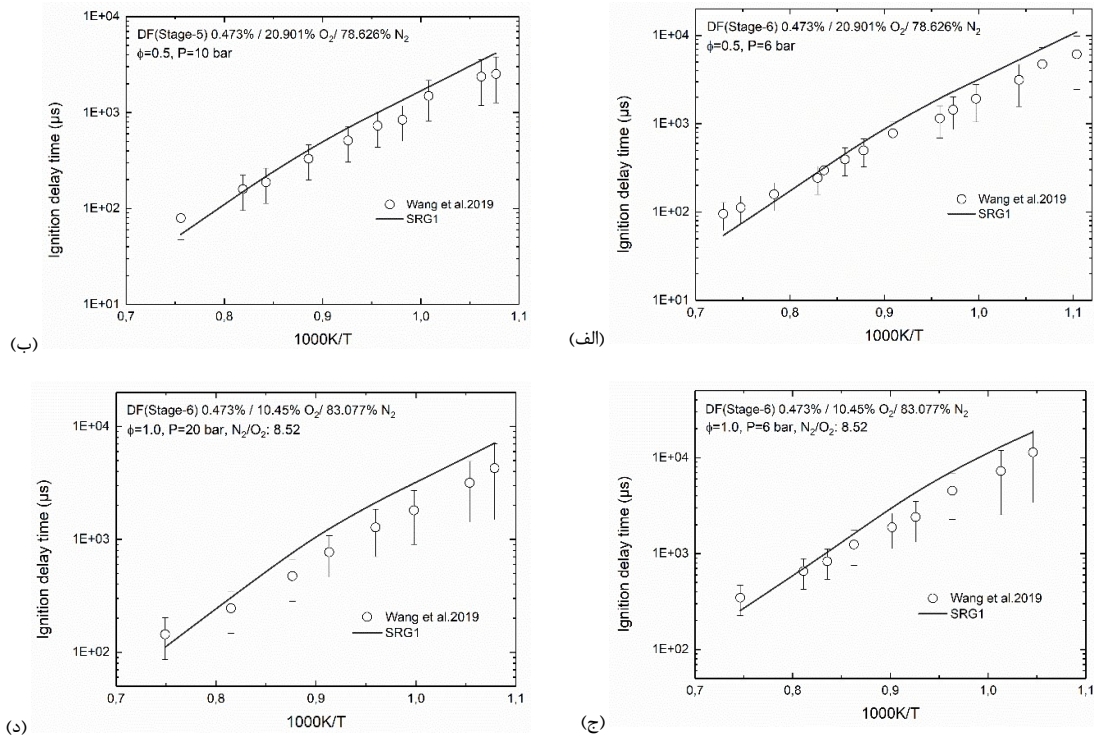


Figure 4- Comparison of the experimentally determined IDT data by Wang et al. [39] (white symbols) for $T=900-1400$ K, and the performance of the surrogate model of present work with SRG1 input formula (solid lines) for Stage-6 diesel mixture with synthetic air at: a) $\phi=0.5$, $P=6$ bar; b) $\phi=0.5$, $P=10$ bar; c) $\phi=1.0$, $P=6$ bar; d) $\phi=1.0$, $P=20$ bar.

شکل ۴- مقایسه داده‌های آزمایشگاهی زمان تاخیر اشتعال در بازه‌ی دمایی $T=900-1400$ K، انجام شده توسط وانگ و همکاران [39] (دایره سفید) و عملکرد مدل جایگزین و ترکیب SRG1 (خط مشکی توپر) برای ترکیب Stage-6 با هوا در فشار افزوده در: الف) $\phi=0.5$ ، $P=6$ bar، ب) $\phi=0.5$ ، $P=10$ bar، ج) $\phi=1.0$ ، $P=6$ bar، د) $\phi=1.0$ ، $P=20$ bar.

دسته‌ی دیگر داده‌ها متعلق به یو و همکاران [۴۱] است که اشتعال خودکار مخلوط Stage-6 و هوا را در شرایط پیشنهادی و مدل توسعه‌یافته نیز بررسی نمودارهای ذکر شده قابل رویت هستند که دارای دقت پیش‌بینی خوب و در بازه عدم قطعیت پیش‌بینی شده از داده‌های عملی آزمایش [۴۰] قرار دارند. نکته قابل توجه پیش‌بینی بسیار موفق ناحیه ضرایب دمایی منفی^۱ در تمامی نمودارهای فوق است، امری که غالباً در مدل‌سازی جایگزین به عنوان چالش مهمی مطرح است، و اغلب مدل‌های احتراقی در پیش‌بینی شیب و روند تغییرات داده‌های آزمایشگاهی با دشواری روبرو هستند. این چالش در مورد مدل‌های جایگزین سوخت‌های مرکب، مانند نفت‌گاز نیز در مقایسه با سوخت‌های ساده‌تر هیدروکربنی، بسیار جدی‌تر می‌شود، زیرا سوخت‌های مرکب خود از اختلاط چندین گروه هیدروکربنی حاصل می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، مدل احتراقی وجود این ناحیه را با دقت مطلوب و با همخوانی با داده‌های آزمایشگاهی منعکس می‌کند، که به منزله‌ی تأییدی بر دسته واکنش‌های انتخابی، سازوکارهای شیمیایی مناسب، و همچنین تنظیم دقیق ویژگی‌های ترمودینامیکی است. در مورد داده‌های [۴۱] به نظر می‌رسد که روند داده‌های آزمایشگاهی در این سری، ناحیه NTC واضح‌تری را در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی و هم با داده‌های مشابه که توسط کوکاداپو و همکاران [۴۰] اندازه‌گیری شده‌اند، نشان می‌دهد. این نکته گویای

1. Negative Temperature Coefficient (NTC)

میزان اختلاف عددی قابل توجه در داده‌های آزمایشگاهی با یکدیگر و میزان بالای عدم قطعیت بین آن‌هاست. در مجموع در تمامی این نمودارها، مطابق انتظار، بیشترین میزان این عدم قطعیت در بازه دمایی متناظر با ناحیه NTC مشاهده می‌شود. (شکل ۵-د).

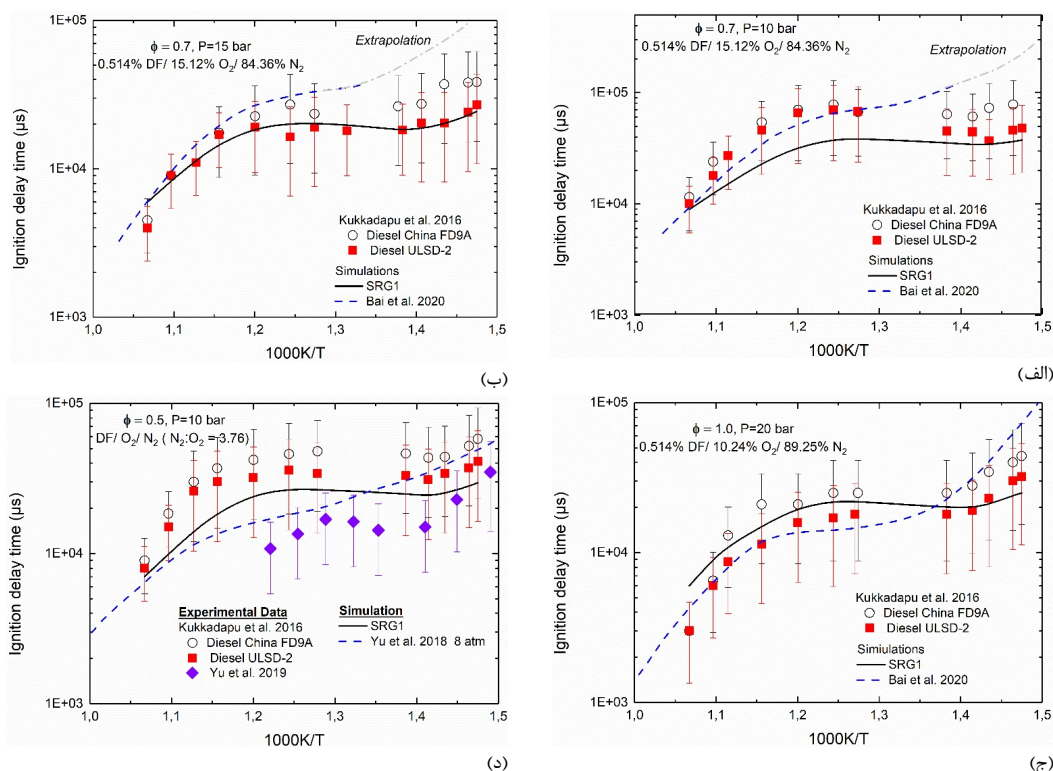


Figure 5- Experimentally determined IDT data by Kukkadapu et al. [40] (white and red symbols), and Yu et al. [41] (violet symbols) for $T=650-900 \text{ K}$, versus the simulations by the surrogate model of present work with SRG1 (solid lines), compared with other models from [9, 18] (dash-lines). The mixtures in following conditions: a) $\phi=0.7, P=10 \text{ bar}$; b) $\phi=0.7, P=15 \text{ bar}$; c) $\phi=1.0, P=20 \text{ bar}$ diluted in N₂; d) $\phi=0.5, P=10 \text{ bar}$ diluted in N₂.

شکل ۵- داده‌های آزمایشگاهی زمان تأخیر اشتعال، انجام شده توسط کوکاداپو و همکاران [40] (نمادهای سفید و قرمز) و یو و همکاران [41] (نمادهای بنفش) برای بازه دمایی $T=650-900 \text{ K}$ در مقایسه با شبیه سازی با مدل جایگزین با ترکیب SRG1 (خطوط توپر)، و سایر مدل‌های توسعه یافته توسط [9] و [18] (خط‌چین) در نسبت هم‌ارزی $\phi=0/7$ ترکیب نفت‌گاز با هوا، رقیق شده در نیتروژن و فشار افزوده: الف) $P=10 \text{ bar}$ ، ب) $P=15 \text{ bar}$ ، ج) نسبت هم‌ارزی $\phi=1/0$ ترکیب نفت‌گاز با هوا، رقیق شده در نیتروژن و فشار افزوده $P=20 \text{ bar}$ ، د) نسبت هم‌ارزی $\phi=0/5$ ترکیب نفت‌گاز با هوا، رقیق شده در نیتروژن و فشار افزوده $P=10 \text{ bar}$.

مقایسه نتایج شبیه‌سازی صورت گرفته با دو مدل جایگزین اخیر توسط بی و همکاران [9] و یو و همکاران [18] نیز در شکل ۵ گنجانده شده است. در نسبت هم‌ارزی $\phi=0/7$ نتایج شبیه‌سازی توسط مدل بی و همکاران [9] از دمای $T=800 \text{ K}$ به بالا به لحاظ مقدار یخونایی بسیار خوبی با داده‌های آزمایشگاهی دارند، اما با کاهش دما دقت پیش‌بینی داده‌ها نیز کاهش چشم‌گیر می‌یابد. از آنجایی که این نتایج تنها از دمای $T=720 \text{ K}$ موجود هستند، برای دماهای کمتر پاسخ این مدل با توجه به شیب تغییرات و روند داده‌های موجود برون‌یابی^۱ شده است (خط‌چین طوسی)، که گویای افزایش زیاد زمان تأخیر اشتعال در این نقاط

1.Extrapolation

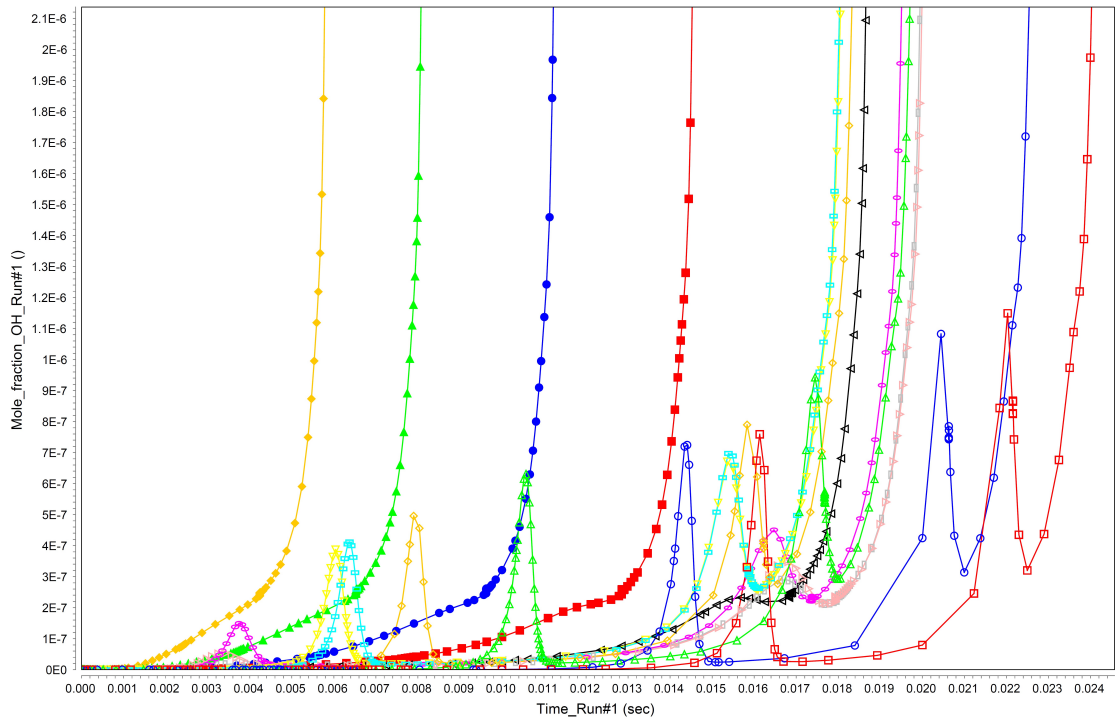


Figure 6- OH concentration profiles obtained from simulation of experimental datasets of [40] at $\phi=0.7$, $P=15$ bar and 14 different temperature points, provided by the present surrogate model and SRG1 formula. The cool flame and early ignition points are recognizable where the OH concentration sees several local peaks before the final ignition.

شکل ۶- نمودار غلظت OH با بزرگنمایی در شبیه‌سازی داده‌های آزمایشگاهی زمان تاخیر اشتعال، انجام شده توسط [40] در نسبت هم‌ارزی $\phi=0/7$ و فشار $P=15$ bar و نقاط دمایی بررسی شده (۱۴ نقطه)، توسط مکانیسم توسعه داده شده و با ترکیب جایگزین SRG1. نقاط مربوط به شعله سرد و احتراق‌های زودرس پیش از احتراق نهایی، در نقاط متناظر با بیشینه افزایش غلظت OH قابل تشخیص هستند.

دمایی است. مجموع نتایج موجود و برون‌یابی شده تصویر نسبتاً کاملی از پاسخ مدل بی و همکاران [۹] را نمایش می‌دهد، که در آن پدیده NTC به شکل ملایم‌تری نسبت به مدل توسعه یافته این پژوهش و درمقایسه با داده‌های اندازه‌گیری پیش‌بینی شده است. این مطلب در نسبت هم‌ارزی استوکیومتریکی و فشار $P=20$ bar نیز مجدداً تأیید می‌شود که در مجموع نشان دهنده‌ی تطبیق بهتر پاسخ مدل جایگزین توسعه‌یافته در این پژوهش است. شکل ۵-۵ پاسخ مشابه مدل [۱۸] را در نسبت هم‌ارزی و فشار $P=8$ bar در مقایسه با داده‌های [۴۰] (دایره سفید و مربع قرمز) و توسط یو و همکاران Yu et al., 2019 [۴۱] که در فشار $P=10$ bar استخراج شده‌اند، و نیز نتایج شبیه‌سازی SRG1 را نمایش می‌دهد. نتایج این مدل هرچند که در بازه‌ی عدم قطعیت مورد نظر قرار دارد، اما چه به لحاظ روند داده‌ها و چه به لحاظ شناسایی منطقه‌ی NTC دارای دقت لازم نیست، و همان‌طور که مشاهده می‌شود وقوع NTC را بسیار ضعیف‌تر از آنچه که در آزمایش تعیین شده است، پیش‌بینی می‌کند.

نکته دیگر حائز اهمیت، مسئله‌ی احتراق زودرس در دماهای پایین، و وجود پدیده‌ی سرد است، که در دماهای پایین اتفاق می‌افتد و به معنای افزایش ناگهانی اولیه‌ی دما، فشار، و نیز غلظت رادیکال OH در فاصله بین شعله‌ی

1. Cool Flame

سرد، و احتراق نهایی (ثابت ماندن نهایی دما و فشار در ناحیه زمانی بعد از احتراق) محسوب می‌شود. همچنین ممکن است در همین بازه، یک یا چند مرحله احتراق زودرس نیز رخ دهد. شکل ۶ نمودار شبیه‌سازی پروفایل غلظت OH در برابر زمان را با بزرگ‌نمایی گرافیکی نشان می‌دهد. بر روی نمودار تشکیل پدیده‌ی شعله‌ی سرد، که مربوط به اولین نقطه‌ی بیشینه است، در نقاط دمایی اول تا دهم، متناظر با $T=678-833\text{ K}$ ، قابل تشخیص است. علاوه بر این، وقوع احتراق زودرس دو مرحله‌ای پیش از احتراق نهایی توسط مدل پیش‌بینی شده است، که به تدریج با افزایش دمای اولیه اثر آن نیز کاسته می‌شود.

نتایج اصلاح پارامترهای کنترلی مدل توربین گاز

پس از تعیین ترکیب جایگزین به دلیل تأثیر تغییر ارزش حرارتی سوخت نسبت به حالت پایه و به طبع آن تغییر میزان اکسیژن مورد نیاز، تنظیم پارامترهای مدل ریاضی و کنترلر آن می‌باید با توجه به شرایط اولیه‌ی جدید انجام گیرد. مدل ریاضی موجود توربین گاز را براساس داده‌های اندازه‌گیری شده عملی از نیروگاه واقعی توربین گاز بر مبنای سوخت گاز طبیعی، در شرایط کارکرد و بارگذاری مختلف توسعه داده شده، و صحت و دقت عملکرد آن پیش‌تر تأیید شده است [۴۲].

شکل ۷ به صورت گرافیکی یک سیکل باز توربین گاز را نشان می‌دهد. تغییرات قابل اعمال، مربوط به طراحی سوخت است که با توجه به آن، عملکرد بخش احتراق توربین گاز و مشخصاً محفظه‌ی احتراق و مشعل و ورودی‌های سوخت و هوا تحت تأثیر قرار خواهند گرفت. برای محاسبه اطلاعات مورد نیاز، خروجی یکی از نقاط شبیه‌سازی زمان تأخیر اشتعال در رآکتور بمبی، توسط مدل احتراقی جایگزین و با ترکیب جایگزین نهایی SRG1 برای انجام محاسبات و تخمین اطلاعات مورد نیاز، به خصوص ارزش حرارتی پائینی^۱ و بالایی^۲ مورد استفاده قرار می‌گیرد. این نقطه در $T=800\text{ K}$ و در فشار اتمسفر، مشابه یکی از شرایط کارکرد نیروگاه واقعی توربین گاز است که در مجموعه‌ی نیروگاهی گیلان در گزارش آنالیز کارکرد این نیروگاه منعکس شده است [۴۳].

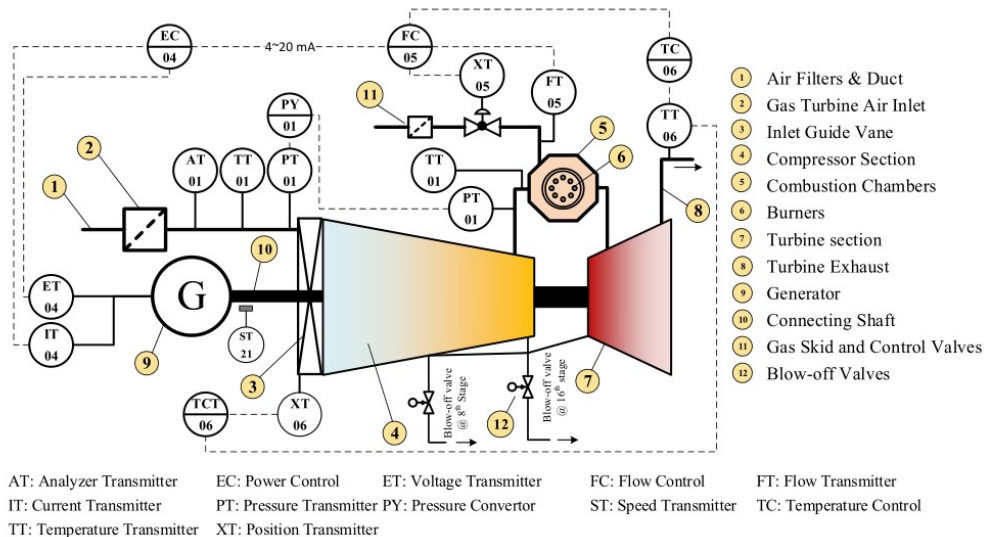


Figure 7- Schematic of a gas turbine system used in a power plant, together with other control system and power supply components [42].

شکل ۷- سیستم توربین گاز نیروگاهی و اجزای تشکیل‌دهنده آن، از جمله اجزای مولد نیرو و سیستم‌های کنترل [42].

1. Lower Heating Value (LHV)
2. Higher Heating Value (HHV)

Components	Density		
Toluene	C7H8	15%	Mole %
Cy-Hexane	cyC6H12	20%	Mole %
N-Dodecane	C12H26	50%	Mole %
I-Octane	iC8H18	15%	Mole %
Hexane, Avg.	C6H14	0%	Mole %
Heptane, Avg.	C7H16	0%	Mole %
N-Octane	C8H18	0%	Mole %
Nitrogen	N2	0%	Mole %
Moist	H2O	0%	Mole %
Carbon dioxide	CO2	0%	Mole %
Density at 15°C	STP	764,35	kg/m3
Gas Molecular weight	M g	132,7	kg/kmol
Gross Heating value (HHV)	H o	45776,002	kJ/kg
Net Heating value (LHV)	H u	41564,28536	kJ/kg
Compressibility factor at STP	Z n	0.99	-
	No.	kg/ mole	Weight %
C content	9,45	113,4	0,854559
S content	0	0	0
N content	0	0	0
H content	19,3	19,3	0,145441
O content	0	0	0
Net	28,75	132,7	1
C/H ratio	0,489637		
Ambient (barometric) pressure	p amb	1,01927	bar
Fuel Gas Pressure	p e, FG	1,01927	bar
Fuel gas temperature	T FG	298	K

Figure 8- Determination of the required input parameters for mathematical model of gas turbine unit, based on the simulation of the fuel ignition in calorimetric bomb reactor at T=800 K, P=1 atm, provided by the surrogate model.

شکل ۸- تعیین پارامترهای سوخت جایگزین، به عنوان ورودی مدل کنترلی (ریاضی) واحد توربین گاز، بر مبنای تحلیل خروجی فرایند احتراق در رآکتور بمبی در دمای اولیه T=800 K و فشار اتمسفر با استفاده از مدل جایگزین

داده‌های مورد نیاز برای ورودی مدل کنترلی را می‌توان در شکل ۸ مشاهده نمود. میزان HHV و LHV ترکیب جایگزین به ترتیب در حدود ۴۵/۷ MJ/kg و ۴۱/۵ تعیین شده است، که با توجه به داده‌های ثبت شده بر مبنای اندازه‌گیری عملی برای محلول‌های واقعی ULSD، که به ترتیب در حدود ۴۵/۷ MJ/kg و ۴۲/۸ اندازه‌گیری شده‌اند [۴۴]، ارقام محاسبه شده مطابقت خوبی با ترکیب واقعی نشان می‌دهند.

شکل ۹ نتایج اولیه‌ی شبیه‌سازی عملکرد توربین گاز با پارامترهای جدید را با نتایج شبیه‌سازی پیشین مقایسه می‌کند. در حالت اول که شبیه‌سازی با ترکیب اولیه، یعنی بدون به کار بردن مدل‌سازی سینتیک و ترکیب جایگزین است، عملکرد توربین گاز، به خصوص از دقیقه ۳۰۰ زیر حالت ایدئال است. در حالی که با توجه به نزدیکی ارزش حرارتی دو سوخت، عملکرد نهایی توربین گاز در تولید توان خروجی نباید فاصله زیادی داشته باشند. قابل پیش‌بینی است که با افزایش زمان شبیه‌سازی با توجه به روندی که نشان داده شده است، فاصله این دو عملکرد هر چه بیشتر و اگر خواهد بود (شکل ۹-الف). بعد از جایگزینی مشخصات SRG1، نتایج شبیه‌سازی تغییرات عمده‌ای را نسبت به حالت اول نشان می‌دهد، که در آن مشخصاً توان خروجی توربین به حالت ایدئال، یعنی کارکرد گاز طبیعی نزدیک شده، و با توجه به روند زمانی نمودار، همگرا خواهد شد (شکل ۹-ب).

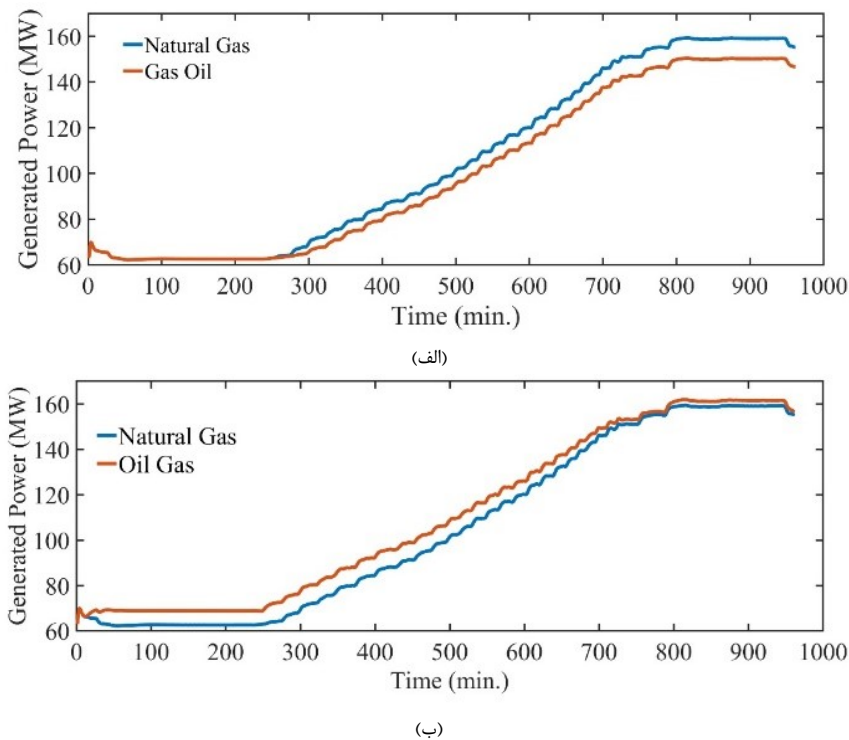


Figure 9- Simulation results of gas turbine power generation rate by the mathematical model, burning natural gas (blue lines) and diesel (red lines): a) Before kinetic model modification (top); b) after inserting the surrogate model parameters

شکل ۹- نتایج شبیه سازی کارکرد توربین گاز با استفاده از مدل کنترلی توسعه یافته در حال سوخت با گاز طبیعی (خط آبی) و نفت گاز (خط قرمز) در: الف) پیش از اعمال تغییرات مدل (بالا)، ب) بعد از جایگزینی پارامترهای مدل جایگزین.

نتیجه گیری

بنابر آنچه گذشت، در این پژوهش تلاش شد تا با استفاده از فناوری مدل سازی سینتیک، ایجاد و توسعه مدل احتراقی نفت گاز انجام شود، مدلی که بتواند رفتار کلی احتراق نفت گاز را با دقت و در شرایط مختلف به خوبی پیش بینی کند، تا بر این اساس با تنظیم ترکیب جایگزین نفت گاز، از آن به عنوان ورودی برای مدل کنترلی تجهیزات توربین گاز با کارکرد نفت گاز استفاده شود. برای این منظور می بایست با تنظیم یک ترکیب اولیه که منطبق بر ویژگی های فیزیکی ترکیبات واقعی نفت گاز باشد، به شروع مدل سازی پرداخت و با گسترش مدل سینتیکی نفت گاز، طی یک فرایند آزمون خطا با مقایسه نتایج شبیه سازی در هر مرحله با داده های آزمایشگاهی به ترکیب ایدئال دست یافت.

به دلیل وجود تشابه ساختاری میان سوخت جت و سوخت نفت گاز، از آخرین نسخه ی مدل سینتیکی که پیش تر برای سوخت جت توسط نگارنده و سایر همکاران در سازمان هوای فضای آلمان ایجاد شده بود، به عنوان مدل مرجع استفاده شده و این مدل با اعمال تغییراتی برای استفاده شبیه سازی نفت گاز متناسب شده است. داده های مورد نیاز برای مرحله ی صحت سنجی مدل و در نهایت تنظیم ترکیب نهایی جایگزین، شامل داده های تأخیر اشتعال هستند که در تجهیزات لوله شوک و ماشین تراکم سریع در بازه ی دمایی، فشاری، و نسبت های هم ارزی مختلف سوخت و اکسید کننده (اغلب هوا) اندازه گیری شده اند. بر این اساس ترکیب جایگزینی با محتوای ۵۰ درصد دودکان (آلکان خطی)، ۱۵ درصد ایزو-اوکتان (ایزو-آلکان)، ۲۰ درصد سیکلو هگزان (آلکان حلقوی یا نفتن)، ۱۵ درصد تولوئین (آروماتیک) به عنوان ترکیب جایگزین نفت گاز معرفی شد. نتایج شبیه سازی داده های آزمایشگاهی به کمک نسخه نهایی مدل سینتیک نفت گاز و با استفاده از این ترکیب جایگزین، با

داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شد، که بر روی مجموعه داده‌های زمان تأخیر اشتعال، نتایج تطبیق بالایی را به لحاظ دقت و روند (شیب تغییرات) نشان می‌دهند، به‌خصوص در بازه‌ی دمایی بالای $T > 1000$ K میزان این هماهنگی قابل توجه است (شکل ۴).

در مورد داده‌های زمان تاخیر اشتعال در دمای پایین نیز هماهنگی قابل قبولی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های اندازه‌گیری در شرایط مختلف آزمایشگاهی و نسبت‌های مختلف هم‌آزری دیده می‌شود (شکل ۵). همچنین دیده شده است که نتایج شبیه‌سازی وجود NTC را به خوبی نشان می‌دهند و همچنین وقوع احتراق‌های زودرس و شعله‌ی سرد را نیز به خوبی پیش‌بینی می‌کند (شکل ۶). اهمیت پیش‌بینی موفق این دست از داده‌ها در بازه‌ی دمای پائین، در صحت‌سنجی مدل است، چرا که چنان‌که عنوان شد، مدل موفق جایگزین می‌باید قابلیت انعکاس و بازتولید پدیده‌های احتراقی را داشته باشد. با توجه به رویکرد مقاله در مورد سیستم‌های توربین گاز، اهمیت این موضوع در لحظات اولیه شروع به کار توربین، بعد از ایجاد فشار میانی (بسته به نوع توربین و نسبت تراکم اسمی تا $P=20$ bar) در کمپرسورها تا قبل از ایجاد ساختار شعله است.

در نهایت، با محاسبه‌ی پارامترهای موردنیاز سوخت برای بخش مدل کنترلی توربین گاز، که پیش‌تر در [۴۲] منتشر شده و توسعه داده شده است، به بررسی تفاوت‌های عملکرد شبیه‌سازی شده‌ی توربین گاز و توان خروجی، پیش و پس از جاگذاری ترکیب نهایی تعیین شده در قسمت مدل‌سازی سینتیک پرداخته شده است. ویژگی‌های مورد نیاز برای ورودی مدل کنترلی، بیشتر مربوط به ترکیب اولیه سوخت، چگالی استاندارد، و به خصوص HHV, LHV که برای تخمین آن‌ها از نتایج شبیه‌سازی این ترکیب با استفاده از مدل احتراقی، در راکتور بمب‌بهره گرفته شده است. همان‌طور که عنوان شد، تفاوت قابل ملاحظه‌ای میان عملکرد شبیه‌سازی در این دو حالت وجود دارد، و تأمین توان خروجی با استفاده از ترکیب جایگزین SRG1 به عملکرد ایدئال توربین گاز (حالت احتراق با گاز طبیعی) همگرا می‌شود.

تشکر و قدردانی

پژوهش حاضر به عنوان بخشی از گزارش نهایی طرح پژوهش پسادکتری نگارنده، در قالب همکاری با مرکز تعاملات بین‌المللی معاونت علمی- فناوری ریاست جمهوری، به شماره‌ی قرارداد ۱۱/۲۳۵۹۹ ارائه شده است. با تشکر از دکتر علی چائی‌بخش لنگرودی، عضو هیات علمی مهندسی مکانیک دانشگاه گیلان، که با کمک و مساعدت ایشان انجام این پژوهش ممکن شد.

منابع

- [1] B. N. Ghilchi, Theoretical and Practical Effect of Hight on the Operation and Pollution Emission Parameters of Diesel Engines, Master Thesis, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2017 (in Persian).
- [2] Abbasi, M., and Slavinskaya, N. A., "Development of the Basis Naphthene Oxidation Kinetic Model for Simulation of the Practical Fuel Combustion", HiSST: International Conference on High-Speed Vehicle Science Technology, 26-29 November, Moscow, Russian Federation, 2018.
- [3] Curran, H. J, Gaffuri, P., Pitz, W.J., and Westbrook, C. K., "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation", Combustion and Flame, vol., pp. 149-177, 1998.
- [4] Battin-Leclerc, F., Prog. Energy Combust. Sci., vol. 34, pp. 440-498, 2008.
- [5] Hernandez, J. J., Sanz-Argent, J., Benajes, J., Molina, S., Fuel, vol. 87 no. 6, pp. 655-665, 2008.
- [6] Kolaitis, D. I., Founti, M. A., Proc. Combust. Inst., vol. 32, no.2, pp. 3197-3205, 2009.
- [7] Luo, J., Yao, M., Liu, H., Yang, B., Fuel, vol. 97, pp. 621-629, 2012.
- [8] Weber, J., Won, H. W., Peters, N., SAE Paper 2007-01-1842, 2007.
- [9] Bai, Y., Wang, Y., Wang, X., and Wang, P., "Development of a skeletal mechanism for tri-component diesel surrogate fuel: N-hexadecane/iso-cetane/1-methylnaphthalene", Fuel, vol. 259, p. 116217, 2020.

- [10] Natelson, R. H., Kurman, M. S., Cernansky, N. P., and Miller, D. L., "Experimental investigation of surrogates for jet and diesel fuels", *Fuel*, vol. 87, pp. 2339–2342, 2008.
- [11] Bergman, M. and Golovitchev, V. I., "Modification of a Diesel Oil Surrogate Model for 3D CFD Simulation of Conventional and HCCI Combustion", *SAE Paper 2008-01-2410*, 2008.
- [12] Chen, W., Shuai, S., and Wang, J., "Effect of the Cetane Number on the Combustion and Emissions of Diesel Engines by Chemical Kinetics Modeling", *Energy Fuels*, vol. 24, pp. 856–862, 2010.
- [13] Liang, L., Naik, C. V., Puduppakkam, K., Wang, C., Modak, A., and Meeks, E., "Efficient Simulation of Diesel Engine Combustion Using Realistic Chemical Kinetics in CFD", *SAE Paper 2010-01-0178*, 2010.
- [14] Yoshikawa, T., and Reitz, R. D., "Validation of a grid independent spray model and fuel chemistry mechanism for low temperature diesel combustion", *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, vol. 1 no.3, pp. 283-316, 2009.
- [15] Ramirez L., Hadj-Ali, K., Dievert, P., Moreac, G., and Dagaut, P., "Kinetics of Oxidation of Commercial and Surrogate Diesel Fuels in a Jet-Stirred Reactor: Experimental and Modeling Studies", *Energy Fuels*, vol.24, pp. 1668–1676, 2010.
- [16] Ra, Y., and Reitz, R., "A combustion model for IC engine combustion simulations with multi-component fuels", *Combustion and Flame*, vol. 158, pp.69-90, 2011.
- [17] Chang, Y., Ming, J., Liu, Y., Li, Y., Xie, M., Wang, H., and Reitz, R. D., "Development of a skeletal mechanism for diesel surrogate fuel by using a decoupling methodology", *Combust and Flame*, vol. 162, no.10, pp. 3785-3802, 2015.
- [18] Yu, W., Zhao, F., Yang, W., Tay, K., and Xu, H., "Development of an optimization methodology for formulating both jet fuel and diesel fuel surrogates and their associated skeletal oxidation mechanism", *Fuel*, vol. 231, p. 361–372, 2018.
- [19] Naik, C. V., Puduppakkam, K., Wang, C., Kottalam, J., Liang, L., Hodgson, D., and Meeks, E., *SAE Paper 2010-01-0541*, 2010.
- [20] Slavinskaya, N.A., and Zizin, A., "On surrogate fuel formulation", *Proc. of GT2009, ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air, 2009, Orlando, USA, GT2009-60012*, 2009.
- [21] M. Abbasi, *Kinetic Modelling of Cyclohexane Oxidation with the PAH Precursor Formation*, Stuttgart, Germany: Ph.D. thesis, Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering (IVLR), Universität Stuttgart, 2019.
- [22] Pitz, W. J., and Mueller, C. J., "Recent progress in the development of diesel surrogate fuels", *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 37, pp. 330-350, 2011.
- [23] A. Shrestha, *Jp-8 Surrogates For Diesel Engine Application: Development, Validation, And CFD Simulation*, Wayne State University Dissertations. Paper 1024.
- [24] Kook, S., Pickett, and L. M., "Soot volume fraction and morphology of conventional, Fischer-Tropsch Coal-Derived, and Surrogate Fuel at Diesel Conditions", *SAE Technical Paper 2012-01-0678*, 2012.
- [25] Lemaire R, Faccinetto A, Therssen E, Ziskind M, Focsa C, and Desgroux P, "Experimental comparison of soot formation in turbulent flames of Diesel and surrogate Diesel fuels", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no.1, pp, 737-744, 2009.
- [26] Tat, M. E., Wang, P. S., Van Gerpen, J.H., and Clemente, T. E., "Exhaust emissions from an engine fueled with biodiesel from high-oleic soybeans", *J Am Oil Chem Soc* 2007;84:865–9.
- [27] Yu, W., Tay, K., Zhao, F., Yang, W., Li, H., and Xu, H., "Development of a new jet fuel surrogate and its associated reaction mechanism coupled with a multistep soot model for diesel engine combustion", *Applied Energy*, vol. 228, pp. 42-56, 2018.
- [28] Yu, W., and Zhao, F., "Formulating of model-based surrogates of jet fuel and diesel fuel by an intelligent methodology with uncertainties analysis", *Fuel*, vol. 268, p. 117393, 2020.
- [29] Eckel, G., Grohmann, J., Cantu, L., Slavinskaya, N. A., Kathrotia, T., Rachner, M., Le Clercq, P., Meier, W., and Aigner, M., "LES of a swirl-stabilized kerosene spray flame with a multi-component vaporization model and detailed chemistry", *Proc. Combustion and Flame* (2019) 1–19.
- [30] Kathrotia, T., Richter, S, C. Naumann, Slavinskaya, N., Methling, T., Braun-Unkhoff, M., and Riedel, U., "Reaction Model Development for Synthetic Jet Fuels – Surrogate Fuels as a Flexible Tool to Predict Their Performance," *Proceedings of ASME Turbo Expo 2018, Turbomachinery Technical Conference and Exposition, GT 2018, June 11-15, 2018, Oslo, Norway*.
- [31] N. Slavinskaya, A. Zizin and U. Riedel, "Towards Kerosene Reaction Model Development: Propylcyclohexane, cyC9H18, n-Dodecane, C12H26, and Hexadecane C16H34 Combustion", *48th AIAA ASM*, Orlando, Florida, 2010.
- [32] Slavinskaya, N., Riedel, U., Saibov, E., Herzler, J., Naumann, C., Saffaripour, M., and Thomas, L., "Kinetic Surrogate Model for GTL Kerosene", *52nd Aerospace Sciences Meeting AIAA SciTech*, National Harbor, Maryland, U.S., 2014.

- [33] Slavinskaya, N. A., Abbasi, M., Starcke, J. H., Whitside, R., Mirzayeva, A., Riedel, U., Li, W., Oreluk, J., Hegde, A., Packard, A., Frenklach, M., Gerasimov, G., and Shatalov, O., "Development of an UQ-Predictive Chemical Reaction Model for Syngas Combustion ."Energy&Fuels 2016, Energy Fuels, 2017, 31 (3), pp 2274-2297 .
- [34] N. A. Slavinskaya, M. Abbasi, J. H. Starcke, and O.J. Haidn, "Methane Skeletal Mechanism for Space Propulsion Applications", 52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, AIAA Propulsion and Energy Forum, (AIAA 2016-4781) , Salt Lake City, USA ..
- [35] Richter, S., Braun-Unkhoff, M., Kathrotia, T., Naumann, C., Kick, T., Slavinskaya, N., and Riedel, U. , "Methods and tools for the characterisation of a generic jet fuel ",CEAS Aeronautical Journal volume, vol.10, <https://doi.org/10.1007/s13272-019-00364-7>, p. 925–935, 2019 .
- [36] Slavinskaya, N., Mirzayeva, A., Whitside, R., Starcke, J. H., Abbasi, M., Auyelkhanzy, M., and Chernov, V., "A modelling study of acetylene oxidation and pyrolysis ", Combustion and Flame , vol. 210, pp. 25-42, 2019 .
- [37] Abbasi, M. and Slavinskaya, N., "Development of a 4-Component Surrogate Model for Combustion of Gasoil, including investigation of PAH Formation", 10th International Seminar on Flame Structure (10th ISFS) ,Novosibirsk, Russian Federation, 9-13 October 2023 .
- [38] ANSYS, 2017. ANSYS Chemkin-Pro: Combustion Simulation Software, <http://www.ansys.com/en-gb/products/fluids/ansys-chemkin-pr>. [Accessed: 31.03.2024]
- [39] Wang, S., Mao, Y., Raza, M., Yu, L., and Lu, X., "Autoignition of diesel/oxygen/nitrogen mixture under elevated temperature in a heated shock tube ",Fuel , vol.254, p. 115635, 2019 .
- [40] Kukkadapu, G., and Sung, C.J., "Autoignition study of ULSD#2 and FD9A diesel blends ",Combust. Flame, vol. 166, pp. 45-54, 2016 .
- [41] Yu, L., Mao, Y., Li, A., Wang, S., Qiu, Y., Qian, Y., Han, D., Zhu, L., and Lu, X., "Experimental and modeling validation of a large diesel surrogate: Autoignition in heated rapid compression machine and oxidation in flow reactor ",Combustion and Flame, vol.202, pp. 195-207, 2019
- [42] Amirkhani, S., Chaibakhsh, A., Ghaffari, A., "Nonlinear robust fault diagnosis of power plant gas turbine using Monte Carlo-based adaptive threshold approach ",ISA Transaction, vol. 100, pp. 171-184, May 2020 .
- [43] "Operation Test of G12 Power Unit of Guilan Powerplant after Overhauling", Technical Report by Pars Power Control Company, 2011, Tehran, Iran (in Persian).
- [44] ESSOM CO., LTD., "Heating Values of Hydrogen and Fuels,": <https://pdf4pro.com/cdn/heating-values-of-hydrogen-and-fuels-67a6e6.pdf> [Accessed: 26.04.2024]

English Abstract

Development of Kinetic Model for Diesel Combustion and Correction of the Relevant Parameters in Gas Turbine Control System

Mehdi Abbasi^{1*}

1- Mechanical Engineering and Energy Conversion, Caspian Faculty of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran,
mehdi.abbasi67@ut.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 02.04.2024, Received in revised form: 01.05.2024, Accepted: 24/05/2024)

Gasoil is widely known as one of the mostly used industrial fuels which plays a significant role in the power plant industry, particularly in gas turbine systems. Considering that the fuel combustion process plays a key role in the gas turbine system, studying this process is of particular importance in optimizing the entire system in terms of performance and reducing environmental effects. This is done through kinetic modeling and the development of the gasoil surrogate model and formula, which is the focus of the current research. To this aim, the measured ignition delay data at different experimental conditions are used for simulation and validation of the model. The last part of this research is about to changing the input parameters of gas turbine mathematical model, also known as control model. This is done based on the output of the surrogate model of diesel. At the end, the results of these changes are compared with the state before the change.

Keywords: Control System of Gas Turbine, Diesel Combustion Model, Kinetic Modeling of Combustion, Surrogate Modeling