Fuel and Combustion 18 4 (2025)

Online ISSN : 2008 – 3637

Iranian Combustion Institute

Fuel and Combustion

Journal homepage: www.jfnc.ir

Development of a Rapid-Response Code Based on a Chemical Reactor Network for the Analysis of a Turbine Combustor

Amirreza Ahmadi Tonekaboni[1], Masoud Eidi Attarzade[2]

[1] School of Aerospace Engineering, College of Interdisciplinary Science and Technology, University of Tehran, Tehran, Iran, Amirrezaahamdi@ut.ac.ir

[2] **Corresponding author**, School of Aerospace Engineering, College of Interdisciplinary Science and Technology, University of Tehran, Tehran, Iran, Eidiattar@ut.ac.ir

ARTICLE INFO

Article type
Research Article

Article history
Received 2025.11.25
Received in revised form 2025.12.30
Accepted 2026.01.07
Available online 2026.01.09

Keywords
Rapid-Response
Chemical Reactor Network (CRN)
Turbine Combustor
Combustion

ABSTRACT

The gas turbine combustion chamber, as one of the key components, has been extensively studied. The temperature distribution in the combustion chamber is of great importance because it can not only lead to changes in the composition of exhaust gases but also cause significant damage to the chamber walls or turbine blades. Among the methods for investigating combustion chambers, analytical methods, with appropriate accuracy and high simplicity and computational speed, can provide an effective assessment of combustion chamber performance. In this research, the distribution of inlet air to a laboratory-scale cylindrical combustion chamber was initially investigated and validated using a one-dimensional code developed in the MATLAB environment. Subsequently, combustion and temperature distributions along the chamber were simulated and validated using the CANTERA software through a Chemical Reactor Network (CRN). Following this, the sensitivity of control parameters such as the number of reactors, the initial reactor temperature, and the number of time steps in the chamber was investigated. The results showed that increasing the number of reactors up to 50, although providing a more detailed temperature distribution along the combustion chamber, did not improve solution accuracy and even led to computational errors due to an excessive reduction in reactor size. Varying the initial temperature up to 2300 K had no noticeable effect on solution accuracy. In addition, a 50-fold increase in the number of time steps from 100 to 5000 showed no improvement in solution accuracy but resulted in an approximately twofold increase in computational time.

Introduction

Turbine combustors play a critical role in determining the efficiency, stability, and emission characteristics of power generation systems, with their performance being strongly influenced by flow structures, fuel–air mixing quality, and chemical reaction dynamics. These systems are commonly studied through experimental, numerical, and analytical approaches. Although experimental investigations provide high accuracy, they are often costly and time-consuming. Likewise, despite the capability of CFD to resolve complex three-dimensional reactive flows, its high computational cost—arising from strong turbulence, multiple combustion regimes, and detailed chemistry—limits its suitability for extensive parametric studies. In contrast, analytical models offer fast and cost-effective assessments by employing fundamental relations and empirical correlations for flame speed, adiabatic temperature, and pollutant formation, making them particularly useful in preliminary design stages.

For combustion modeling, the Chemical Reactor Network (CRN) approach decomposes the combustor into a series of perfectly stirred or plug flow reactors, allowing separate treatment of the primary (rapid reaction), intermediate (reaction completion), and dilution zones. Its predictive accuracy depends on proper geometric segmentation and the selected chemical kinetics mechanism. CRN methods have been widely used for flame extinction studies, fuel property assessments, combustor optimization, and clean fuel investigations. The perfectly stirred reactor model further provides a simplified yet effective framework for representing homogeneous reactive systems with complete mixing.

In this study, a fast one-dimensional computational tool is developed to compute the air flow distribution and thermodynamic properties of the passages and orifices from the combustor geometry and inlet conditions, and then directly transfer these outputs to the combustion module. Combustion is simulated using the Cantera software through a detailed Chemical Reactor Network. The main contribution of this work lies in the integration of a one-dimensional aerodynamic model with detailed chemical kinetics, enabling the simultaneous prediction of

Cite This Paper ارجاع‌دهی به این مقاله

Ahmadi Tonekaboni, Amirreza., and Eidi Attarzade, Masoud.(2025). Development of a Rapid-Response Code Based on a Chemical Reactor Network for the Analysis of a Turbine Combustor. Fuel and Combustion, 18 (4), 81-102. http//doi.org/10.22034/jfnc.2026.559273.1446 (In Persian)

temperature, combustion products, and pollutant emissions in less than one minute of computational time while maintaining engineering-level accuracy at a significantly reduced computational cost.

Methodology and Governing Relations

The present numerical model is developed based on the assumptions of steady, incompressible, and quasi-one-dimensional flow. Temporal fluctuations, radial velocity components, and flow recirculation are neglected to simplify the computational domain. The combustor geometry can be defined in either cylindrical or annular configurations, assuming a uniform flow field, particularly in the vicinity of the fuel injector. The computational framework comprises two primary modules: an aerodynamic module and a combustion module.

In the combustion module, the process is analyzed based on the flow structure previously determined by the aerodynamic module. The solution domain is discretized into a network of reactor elements, with the corresponding air and fuel mass flow rates assigned to each element. The chemical kinetics and combustion equations are solved using the Cantera software package , incorporating detailed reaction mechanisms. This model enables the extraction of key output parameters—including temperature distribution, species concentrations of combustion products, flame speed, and ignition delay—based on the specified boundary conditions and heat transfer coefficients.

Model Geometry

The geometry under consideration is a laboratory-scale cylindrical turbine combustor with a total length of 210 mm and a diameter of 67 mm. The configuration features six primary holes and twelve dilution holes positioned at distances of 50 mm and 130 mm from the swirler, respectively, with all orifices having a uniform diameter of 10 mm. The assembly utilizes an axial swirler with six blades, characterized by an outer diameter of 40 mm and an inner diameter of 30 mm. Additionally, the outer casing diameter is 300 mm.

Sensitivity Analysis Results

To evaluate the influence of numerical parameters on the outcomes of the Chemical Reactor Network (CRN) model, a sensitivity analysis was conducted by examining the initial reactor temperature, the number of reactors, and the number of time steps, while keeping all other parameters fixed. The effects of these parameters on pollutant formation and outlet temperature were then assessed.

Initial Temperature

Aanalysis of the effect of the initial temperature in the range of 1500 to 2300 K indicates that combustion does not initiate at 1500 K due to insufficient energy. However, at 1700 K and higher, chemical reactions begin to develop. However, further increases in the initial temperature do not have a significant influence on the accuracy of the solution or on the outlet temperature distribution. The numerical solution time remains nearly constant across the examined temperature range, while higher initial temperatures lead to an increase in the time required for the code to converge

Temporal Discretization

The analysis of the initial temperature over the range of 1500 to 2300 K indicates that combustion does not initiate at 1500 K due to insufficient energy. At 1700 K and higher, however, chemical reactions begin to develop. Further increases in the initial temperature do not have a significant influence on the accuracy of the solution or on the outlet temperature distribution. The numerical solution time remains nearly constant across the examined temperature range, while higher initial temperatures lead to an increase in the time required for the code to converge.

Conclusion

In this study, a fast computational code for predicting the aerodynamic and combustion behavior of a gas turbine combustor was evaluated. After specifying the geometry and inlet conditions, the air mass flow distribution was determined, and the aerodynamic results indicated that the errors across various regions were limited, with the maximum deviation (approximately 11%) occurring in the swirler section. The combustion analysis showed that running the simulation for up to fifteen times the residence time provides satisfactory accuracy, yielding an

outlet temperature error below 10% and an overall average combustor error of approximately 6.5%. The sensitivity analysis further demonstrated that increasing the number of reactors does not improve accuracy and may even lead to flame extinction due to the reduced residence time in each reactor, while simultaneously increasing computational cost. The investigation of initial temperature revealed that temperatures below 1500 K do not initiate combustion, whereas higher temperatures result in similar steady-state outcomes with no significant influence on accuracy or solution time. Finally, it was found that increasing the number of time steps does not enhance solution accuracy, owing to the steady behavior of the system and the relatively simple structure of the combustion model, and only leads to longer computational times.

CRediT Author Statement

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Funding

This research did not receive any specific grant from funding agencies in the public, commercial, or not-for-profit sectors.

Conflict of Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

سوخت و احتراق، دوره ۱۸، شماره ۴ (۱۴۰۴)

شاپا الکترونیکی : ۳۶۳۷-۲۰۰۸

سوخت و احتراق

Journal homepage: www.jfnc.ir

توسعه کد پاسخ سریع مبتنی بر شبکه رآکتور شیمیایی و تحلیل محفظه احتراق توربینی

امیررضا احمدی تنکابنی[۱]، مسعود عیدی عطارزاده[۲*]

[۱] کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران، Amirrezaahmadi@ut.ir

[۲] **نویسنده مخاطب**، استادیار، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران، تهران، eidiattar@ut.ac.ir

اطلاعات مقاله

نوع مقاله

مقاله پژوهشی

تاریخچه مقاله

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۹/۰۴

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۱۰/۰۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۱۰/۱۷

تاریخ انتشار: ۱۴۰۴/۱۰/۱۹

کلیدواژه‌ها:

پاسخ سریع

شبکه رآکتور شیمیایی (CRN)،

محفظه احتراق توربینی

احتراق

چکیده

محفظه احتراق توربین گاز به‌عنوان یکی از اجزا اصلی همواره مورد مطالعه و بررسی بوده است. توزیع دما در محفظه احتراق از آن جهت دارای اهمیت است که نه‌تنها می‌تواند منجر به تغییر ترکیب گازهای خروجی شود بلکه با آسیب به دیواره و یا پره‌های توربین خسارت زیادی به بار آورد. در میان روش‌های بررسی محفظه احتراق، روش تحلیلی بادقت مناسب و سهولت و سرعت بالا می‌تواند پاسخ مناسبی از عملکرد محفظه احتراق ارائه دهد. در این پژوهش در ابتدا توزیع هوای ورودی به محفظه احتراق استوانه‌ای آزمایشگاهی، توسط کد یک‌بعدی توسعه‌یافته بر بستر برنامه MATLAB مورد بررسی و اعتبارسنجی قرار گرفته است. سپس احتراق و توزیع دما در راستای محفظه توسط برنامه CANTERA و به‌وسیله شبکه رآکتورهای شیمیایی (CRN) حل شده و اعتبارسنجی شده است. در ادامه حساسیت پارامترهای کنترلی نظیر تعداد رآکتورها، دمای اولیه رآکتور، تعداد گام زمانی محفظه مورد بررسی قرار گرفت که نشان داد افزایش تعداد رآکتور تا ۵۰ عدد اگر چه توزیع دمای بیشتری در راستای محفظه احتراق نشان می‌دهد، اما در دقت حل بی تأثیر بوده و حتی با کوچک‌شدن بیش از حد رآکتور باعث خطای محاسباتی می‌شود. تغییر دمای اولیه تا ۲۳۰۰ کلوین در دقت حل موثر نبود. همچنین افزایش ۵۰ برابری گام زمانی از ۱۰۰ تا ۵۰۰۰ گام تأثیری در دقت حل نشان نداد اما منجر به با افزایش ۲ برابری، زمان پاسخ‌گویی برنامه شد.

مقدمه

محفظه‌های احتراق توربینی، به‌عنوان قلب اصلی سامانه‌های تولید توان و پیشرانش، نقش تعیین‌کننده‌ای در بازده، پایداری احتراق و انتشار آلاینده‌ها دارند. در این ساختار پیچیده، الگوی جریان هوا، اختلاط سوخت و واکنش‌های شیمیایی به‌طور درهم‌تنیده بر رفتار احتراقی و دمای خروجی تأثیر می‌گذارند؛ ازاین‌رو تحلیل دقیق آن برای درک پدیده‌های ترموفیزیکی ضروری است. مطالعات محفظه‌های احتراق به سه دسته تجربی، عددی (CFD) و تحلیلی تقسیم می‌شوند. روش تجربی، هرچند دارای اعتبار بالا در اندازه‌گیری پارامترهای واقعی است، اما هزینه و زمان زیادی می‌طلبد. مدل‌های عددی که معمولا به‌صورت دینامیک سیالات محاسباتی به کار گرفته میشود، باوجود دقت بالا در شبیه‌سازی سه‌بعدی، هزینه محاسباتی بالایی داشته و در مطالعات پارامتری وسیع کارایی کمتری دارند. همچنین به دلیل آشفتگی بالا و رژیم‌های احتراقی مختلف شبیه‌سازی احتراق در محفظه احتراق پیچیده است {Azimi, 2017 #111}. در مقابل، مدل‌های تحلیلی برای طراحی مقدماتی و تحلیل حساسیت احتراقی مناسب هستند زیر به کمک این روش می‌توان ده‌ها پیکربندی را در زمانی کوتاه و با هزینه‌ی ناچیز بررسی کرد.

روش تحلیلی بر حل روابط پایه‌ی جریان واکنشی، انتقال حرارت و جرم استوار است و با فرضیات ساده‌کننده و مدل‌های شعله پیش‌آمیخته یا غیرپیش‌آمیخته، رآکتورهای کاملاً آمیخته یا پیستونی، و فرمول‌بندی‌های تجربی–تحلیلی برای پیش‌بینی سرعت شعله [۲] و دمای آدیاباتیک شعله [۳] به‌کار می‌رود. بخش مهمی از مدل‌های تحلیلی بر معادلات و روابطی تکیه دارند

Cite This Paper **ارجاع‌دهی به این مقاله**

Ahmadi Tonekaboni, Amirreza., and Eidi Attarzade, Masoud.(2025). Development of a Rapid-Response Code Based on a Chemical Reactor Network for the Analysis of a Turbine Combustor. Fuel and Combustion, 18 (4), 81-102. http//doi.org/10.22034/jfnc.2026.559273.1446 (In Persian)

که اساساً از همبستگی‌های تجربی به‌دست آمده‌اند. به همین منظور روابطی برای پیش‌بینی آلاینده‌ها مانند NO_x [۴] یا CO [۵] یا شرایط خروجی محفظه نظیر الگوی جریان [۵] جهت ارزیابی یکنواختی میدان دمای خروجی استخراج شده است. این رویکرد امکان پاسخ سریع به تغییرات طراحی یا شرایط عملکردی را فراهم می‌کند، هرچند در پیش‌بینی پدیده‌های سه‌بعدی محدود بوده و نیازمند اعتبارسنجی عددی یا تجربی است. یکی از کاربردهای مهم این روش، تحلیل توزیع جریان هوا در محفظه احتراق با کدهای یک‌بعدی است.

مدل‌سازی شبکه جریان هوا، روشی عددی و مفهومی برای شبیه‌سازی توزیع جریان در سامانه‌های پیچیده است که در آن مسیرهای جریان، اتصالات و موانع به‌صورت شبکه‌ای از گره‌ها و المان‌ها نمایش داده می‌شوند [۶]. در این مدل، گره‌ها نقاطی هستند که ویژگی‌هایی نظیر فشار، دما و ترکیب جرمی در آن‌ها محاسبه می‌شود، و المان‌ها — شامل کانال‌ها، سوراخ‌ها و تجهیزات جریان — مسیرهای عبور یا موانعی هستند که اتصال میان گره‌ها را برقرار می‌کنند [۷]. شکل ۱ نمونه‌ای از این شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.

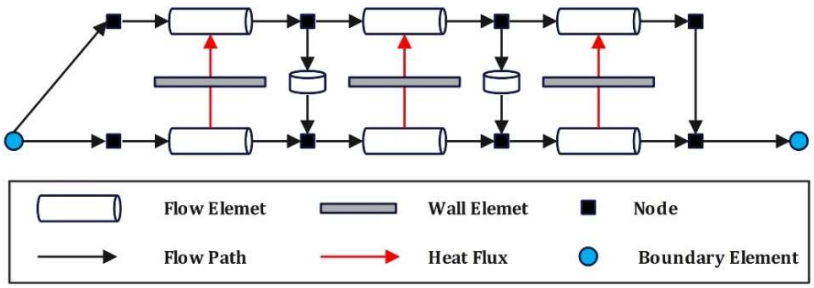

Figure 1- Air Flow Network Method

شکل ۱- روش شبکه جریان هوا

در تحلیل محفظه‌ی احتراق توربین گازی، سوراخ‌های اولیه، ثانویه و رقیق‌سازی به‌عنوان المان‌های گذرگاه در نظر گرفته می‌شوند که با ضرایب دبی یا افت فشار مدل‌سازی می‌شوند [۸]. مجراهای ورودی و خروجی، حلقه‌ها و نواحی با سطح مقطع متغیر نیز به‌صورت المان‌های مجرایی تعریف می‌شوند [۹]. هر نوع المان، بسته به ماهیت فیزیکی خود، دارای روابط تجربی و داده‌های هندسی ویژه است. حل شبکه جریان هوا بر پایه‌ی معادلات بقای جرم، تکانه و انرژی انجام می‌شود [۶]. معادله‌ی پیوستگی در تمام گره‌ها اعمال می‌شود تا مجموع جریان‌های ورودی و خروجی در هر نقطه برابر باشد، در حالی‌که معادله‌ی تکانه در المان‌ها ارتباط میان افت فشار و دبی جرمی را تعیین می‌کند [۸]. از مهم‌ترین مزایای این روش، سرعت بالای محاسبات نسبت به شبیه‌سازی سه‌بعدی CFD است [۹]، که امکان تحلیل سریع رفتار توزیع جریان هوا، بررسی اثر طراحی سوراخ‌ها و ارزیابی تغییرات شرایط مرزی را فراهم می‌سازد.

استفاده از این روش‌ها همچنان مورد توجه است. کنکاشور و همکاران از این روش برای تحلیل یک محفظه احتراق حلقوی [۱۰] و یک محفظه احتراق استوانه‌ای [۱۱] استفاده کردند. احمدی و همکاران نیز به کمک این روش به بررسی توزیع هوا در یک محفظه احتراق حلقوی پرداختند [۱۲].

روش شبکه رآکتورهای شیمیایی[1] یکی از رویکردهای معتبر و در عین‌حال کم‌هزینه‌تر نسبت به شبیه‌سازی کامل دینامیک سیالات محاسباتی برای مدل‌سازی فرآیندهای احتراق در محفظه‌های احتراق توربین گازی است. ایده اصلی این روش بر تبدیل هندسه پیچیده محفظه به مجموعه‌ای از رآکتورهای شیمیایی بنا شده است؛ به گونه‌ای که هر ناحیه از محفظه – با فرض تغییرات ناچیز خواص فیزیکی و شیمیایی – با یک رآکتور کاملا آمیخته، رآکتور جریان پیستونی و یا ترکیبی از آن‌ها مدل‌سازی شود. انتخاب نوع رآکتور و چگونگی اتصال آن‌ها به یکدیگر بر اساس ساختار میدان جریان واقعی و یا نتایج تحلیل صورت می‌گیرد [۱۳]. شکل ۲ نمونه‌ای از شبکه رآکتورهای شیمیایی را نشان می‌دهد.

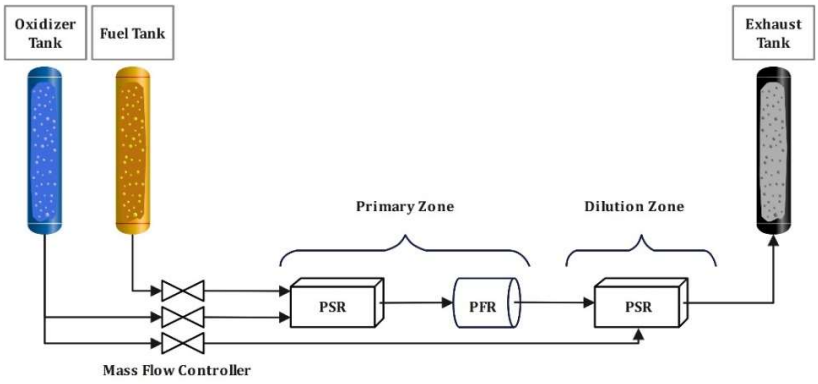

Figure 2 –An example of a chemical reactor network

شکل ۲- نمونه ای از شبکه رآکتورهای شیمیایی

در کاربردهای محفظه احتراق، شبکه رآکتورهای شیمیایی این امکان را فراهم می‌کند که نواحی عملکردی کلیدی نظیر ناحیه اولیه (با نسبت هم‌ارزی بالا و واکنش سریع)، ناحیه میانی (برای تکمیل سوختن و کاهش آلاینده‌ها) و ناحیه رقیق‌سازی (برای یکنواخت‌سازی دما و کاهش آلاینده‌ها در خروجی) به‌صورت مجزا و در عین حال پیوسته شبیه‌سازی شوند. این ساختار اجازه می‌دهد اثر مشخصه‌هایی چون نسبت هم‌ارزی محلی، زمان ماند، کارایی احتراق در ناحیه اولیه و میزان اختلاط بر تشکیل و انتشار آلاینده‌ها مانند NO_x، CO و UHC به‌طور مستقیم تحلیل شود [۱۴]. مزیت کلیدی شبکه رآکتورهای شیمیایی در این است که می‌توان با هزینه محاسباتی بسیار کم، تصویری قابل اعتماد از گرادیان دما، ترکیب گازها و مسیرهای شیمیایی به دست آورد؛ هرچند دقت آن به شدت به کیفیت تقسیم‌بندی هندسی، صحت داده‌های ورودی (مانند نرخ جریان ورودی) و انتخاب صحیح مکانیزم سینتیکی وابسته است. در پژوهش‌های اخیر نیز نه تنها از این روش برای بررسی شرایط محفظه احتراق نظیر خاموشی شعله [۱۵] و موارد دیگر پرداخته شده بلکه از ترکیب این روش با دینامیک سیالات محاسباتی برای تحلیل اثر سوخت‌ها بر آلایندگی [۱۶، ۱۷]، بهینه سازی محفظه احتراق [۱۸] و اثر استفاده از سوخت‌های پاک بر شرایط خروجی محفظه احتراق [۱۹] نیز استفاده شده است.

رآکتور کاملاً آمیخته حالتی ایده‌آل را توصیف می‌کند که در آن، به‌واسطه‌ی اختلاط کامل و سریع، تمامی بخش‌های رآکتور از نظر دما، فشار و ترکیب شیمیایی یکنواخت‌اند. رآکتورهای کاملاً آمیخته در حالت پایا، رویکردی ساده و کارآمد برای درک فرآیندهای احتراق در سامانه‌های با جریان پیوسته ارائه می‌دهند [۲۰].

[1] Chemical Reactor Network (CRN)

در این پژوهش، یک کد عددی یک‌بعدی پاسخ سریع توسعه داده شده است که با دریافت مستقیم هندسه و شرایط ورودی، توزیع جریان هوا و پارامترهای ترمودینامیکی متناظر را در حلقه و سوراخ‌ها محاسبه می‌کند و سپس این اطلاعات به‌صورت خودکار وارد بخش احتراق می‌شود، جایی که فرایند احتراق با استفاده از برنامه CANTERA و از طریق یک شبکه رآکتورهای شیمیایی دقیق حل می‌شود. نوآوری اصلی این چارچوب در یکپارچه‌سازی مدل جریان یک‌بعدی با شبیه‌سازی سینتیک شیمیایی است، به‌گونه‌ای که امکان پیش‌بینی هم‌زمان محصولات احتراق، تشکیل آلاینده‌ها و توزیع دما فراهم می‌شود، درحالی‌که کل فرایند محاسباتی با حفظ دقت مهندسی مناسب، در زمانی کمتر از یک دقیقه انجام می‌گیرد. استفاده از سرعت محاسباتی بالا در کنار دقت قابل‌قبول، این کد را به ابزاری مناسب جهت تحلیل محفظه احتراق تبدیل می‌کند.

روش‌شناسی و روابط حاکم

به‌منظور ساده‌سازی مدل و دستیابی به نتایج پایدار، جریان محفظه احتراق به‌صورت پایا، تراکم‌ناپذیر و شبه یک‌بعدی فرض شده و نوسانات زمانی، جریان بازگشتی و مؤلفه‌های شعاعی نادیده گرفته شده‌اند. هندسه تنها به حالت‌های استوانه‌ای و حلقوی محدود بوده و جریان یکنواخت در نواحی مختلف فرض شده است. اعتبار نتایج به بازه مشخصی از داده‌های ورودی محدود است. ساختار برنامه شامل دو بخش تحلیل آیرودینامیک و احتراق است که روند آن‌ها در شکل ۳ ارائه شده است.

پیکربندی کلی برنامه تحلیل آیرودینامیک

هدف اصلی این برنامه، دستیابی به پاسخ سریع و نزدیک به واقعیت جهت تحلیل هندسه‌های مختلف محفظه احتراق است. این کد با اتکا بر روابط تجربی و تحلیلی توسعه‌یافته و به کاربر اجازه می‌دهد تا پارامترهای کلیدی نظیر توزیع نرخ جرمی سوراخ‌ها، عدد ماخ و فشار استاتیک در حلقه‌ها، و نرخ جرمی عبوری از چرخاننده را محاسبه و تحلیل نماید. کدنویسی به‌صورت ماژولار در سه بخش انجام شده است:

- هندسه و شرایط ورودی: دریافت ابعاد اولیه محفظه و ترسیم هندسه.
- محاسبات سوراخ‌ها و حلقه‌ها: تخمین جریان هوای عبوری و تعیین توزیع نرخ جرمی بادقت بالا.
- محاسبات چرخاننده: به‌روزرسانی نرخ جرمی و بررسی همگرایی فشار و جرم عبوری.

در صورت تأمین معیارهای همگرایی، داده‌های آیرودینامیکی برای ورود به مرحله تحلیل احتراق ارسال می‌شوند؛ در غیر این صورت، روند محاسبات تا رسیدن به جواب پایدار تکرار خواهد شد.

پیکربندی کلی برنامه مدل‌سازی شبکه رآکتورها

این بخش فرایند احتراق را باتکیه‌بر نتایج آیرودینامیکی بررسی می‌کند تا تأثیر توزیع جریان بر واکنش‌های شیمیایی مشخص شود. برنامه شامل دو زیرسامانه است:

- گسسته‌سازی میدان حل: تقسیم دامنه محفظه به اجزای کوچک‌تر، تعیین حجم و تعداد رآکتورها، و تخصیص دبی جرمی هوا و سوخت به هر بخش.
- حل معادلات احتراق: استفاده از نرم‌افزار CANTERA [۲۳] برای حل واکنش‌ها بر اساس داده‌های ورودی شامل نوع و توزیع سوخت، دمای اولیه، ضریب انتقال حرارت، شرایط مرزی و مکانیزم شیمیایی.

در نهایت، خروجی‌های برنامه شامل محصولات احتراق و توزیع دما محاسبه و ترسیم می‌شوند.

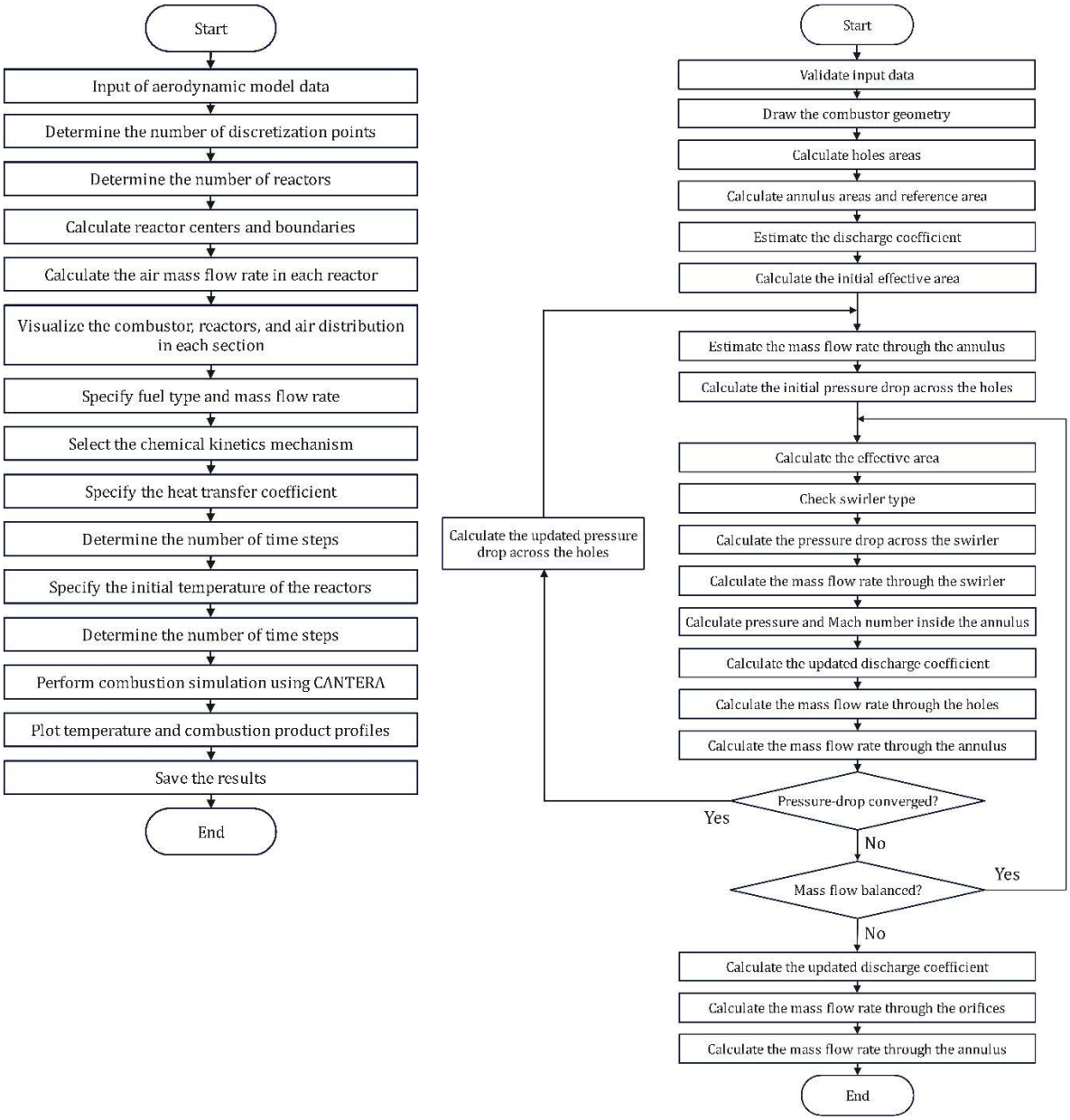

Figure 3- Overall Workflow Configuration: Right) Aerodynamic Analysis Left) Chemical Reactor Network Modeling
شکل ۳- روندما پیکربندی کلی: سمت راست) برنامه تحلیل آیرودینامیک سمت چپ) برنامه مدلسازی شبکه رآکتورها

همان‌طور که توضیح داده شد برنامه در مرحله اول تحلیل آیرودینامیک و سپس تحلیل احتراق صورت می‌گیرد. همچنین برخی روابط تکمیلی نیز اشاره خواهند شد. در ادامه هر کدام از این روابط به‌صورت جداگانه توضیح داده خواهند شد.

روابط بخش آیرودینامیک

پس از آن که داده‌ها توسط کاربر وارد شد در گام اول مساحت هر سوراخ محاسبه می‌شود:

$$A_{\text{hole}} = \frac{\pi D_{\text{holes}}^2}{4} \quad (۱)$$

ازآنجایی‌که هر ردیف شامل چندین سوراخ مشابه است پس سطح مقطع مؤثر عبارت است از:

$$A_{\text{total ,holes}} = \sum_{1}^{n} \frac{\pi D_{\text{holes}}^2}{4} \quad (۲)$$

که در رابطه بالا n، تعداد سوراخ‌های موجود در هر ردیف است. سطح مقطع عبوری جریان برای چرخاننده‌های محوری این رابطه به‌صورت زیر نوشته می‌شود[۲۱]:

$$A_{\text{sw}} = \left(\frac{\pi}{4}\right)(D_{sw}^2 - D_{\text{hub}}^2) - 0.5 n_v t_v (D_{sw} - D_{\text{hub}}) \quad (۳)$$

و برای چرخاننده‌های شعاعی نیز به‌صورت رابطه زیر نوشته می‌شود[۲۱]:

$$A_{sw} = n_v s_v w_v C_D \quad (۴)$$

برای محفظه احتراق حلقوی، سطح مقطع مرجع (درون دیواره) از رابطه (۵):

$$A_{\text{ref}} = \frac{1}{4}\pi(D_{\text{outer liner}}^2 - D_{\text{inner liner}}^2) \quad (۵)$$

و برای محفظه استوانه‌ای از رابطه (۶):

$$A_{\text{ref}} = \frac{1}{4}\pi(D_{\text{ref}}^2) \quad (۶)$$

استفاده می‌شود. همچنین مساحت حلقه‌ها برای محفظه حلقوی از رابطه (۷) و برای محفظه احتراق استوانه ای از رابطه (۸) به دست می‌آید:

$$A_{\text{ref}} = \frac{1}{4}\pi\left[\left(D_{\text{Outer casing}}^2 - D_{\text{outer liner}}^2\right) + \left(D_{\text{inner liner}}^2 - D_{\text{inner casing}}^2\right)\right] \quad (۷)$$

$$A_{\text{ref}} = \frac{1}{4}\pi\left(D_{\text{casing}}^2 - D_{\text{liner}}^2\right) \quad (۸)$$

پس از آنکه مساحت بخش چرخاننده به دست آمد می‌توان نرخ جرمی عبوری را به کمک رابطه (۹) بیان نمود[۲۱]:

$$m_{Sw} = \sqrt{\frac{2\rho_3 \Delta P_{sw}}{K_{sw}\left[\left(\frac{\sec}{A_{sw}}\right)^2 - \left(\frac{1}{A_L^2}\right)\right]}} \quad (۹)$$

همچنین میزان نرخ جرمی عبوری از هر سوراخ عبارت است از:

$$\dot{m} = C_d A\sqrt{2\rho\Delta P} \quad (۱۰)$$

که در رابطه بالا ΔP همان اختلاف فشار سکون و فشار استاتیک در دو طرف سوراخ $(P - p)$ است. نرخ جرمی عبوری از تمام حلقه‌ها با میزان دبی جرمی عبوری کل برابر است. پس می‌توان نوشت:

$$\dot{m}_{\text{total}} = \sum_{1}^{i} \dot{m}_i \quad (۱۱)$$

با قراردادن رابطه (۱۰) در (۱۱) و با فرض جریان تراکم ناپذیر یکسان بودن افت فشار دو سر تمامی سوراخ‌ها، رابطه (۱۲) به دست می‌آید:

$$(C_d A)_{\text{total}} = \sum_{1}^{i} (C_d A)_i \quad (۱۲)$$

که به مقدار $(C_dA)_{\text{total}}$ مساحت موثر(A_{eff}) می‌گویند. با در دست داشتن این میزان می‌توان افت فشار را نیز به‌صورت رابطه (۱۳) محاسبه نمود:

$$\Delta P_{\text{total}} = \left(\frac{\dot{m}_{\text{total}}}{A_{\text{eff}}}\right)^2 \frac{1}{2\rho_{\text{total}}} \quad (۱۳)$$

در ادامه کد پس از آنکه محاسبات را برای همه سوراخ‌ها انجام داد، میزان دبی عبوری از هر حلقه را به‌صورت دقیق با مجموع نرخ جرمی عبوری از تمام سوراخ‌ها به دست می‌آورد. به‌عبارت‌دیگر:

$$\dot{m}_{\text{Annulus}} = \sum \dot{m}_{\text{hole}} \quad (۱۴)$$

پس از این قسمت کد وارد بخش محاسبات ضریب تخلیه می‌شود. به‌طورکلی فشار دینامیکی به‌صورت رابطه (۱۵) تعریف می‌شود:

$$P_{\text{Dyn}} = \frac{1}{2}\rho u^2 \quad (۱۵)$$

با در دست‌داشتن نرخ جرمی عبوری از سوراخ و همچنین نرخ جرمی عبوری در پایین‌دست سوراخ، دو پارامتر مهم μ و α به‌صورت رابطه (۱۶) و رابطه(۱۷) تعریف می‌شود [۲۲]:

$$\alpha = \frac{P_{\text{Dyn},1'}}{P_{\text{Dyn,hole}}} \quad (۱۶)$$

$$\mu = \frac{\dot{m}_{\text{hole}}}{\dot{m}_{1'}} \quad (۱۷)$$

با در دست‌داشتن این مقادیر می‌توان از طریق رابطه (۱۸) ضریب افت فشار (K) را محاسبه نمود[۲۲]:

$$K = 1 + 0.64\left(2\mu^2 + \sqrt{4\mu^4 + 1.56\mu^2(4\alpha - \alpha^2)}\right) \quad (۱۸)$$

نمودارهای مختلفی برای محاسبه ضریب تخلیه سوراخ ترسیم شده‌اند؛ اما یکی از رایج‌ترین نمودارهای ضریب تخلیه سوراخ بر حسب پارامتر دینامیکی جریان توسط کداح [۲۲] مورد بررسی قرار گرفته است. این نمودار که برای سوراخ‌های قاشقی و ساده قابل استفاده است در شکل ۴ نمایش داده شده است.

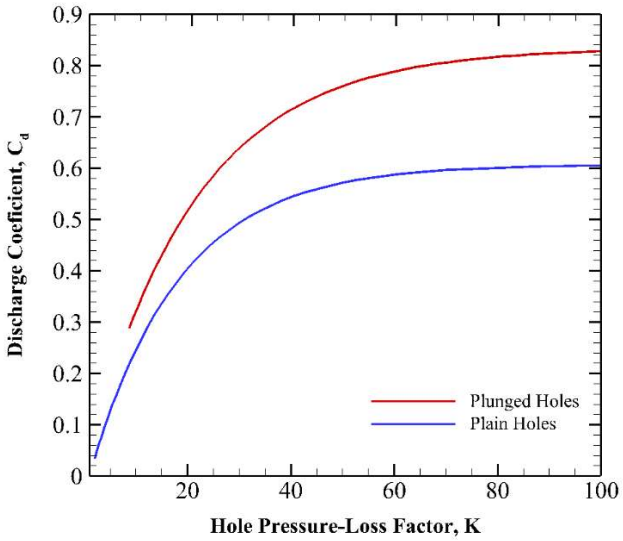

Figure 4- Discharge coefficient of the hole versus the pressure loss coefficient of the hole

شکل ۴- ضریب تخلیه سوراخ نسبت به عدد افت فشار سوراخ

پس از آنکه ضریب تخلیه مشخص شد، کد مجدد از ابتدا شروع به حل کل دامنه محفظه احتراق می‌نماید. به‌این‌ترتیب مقادیر جدید پارامترهای ترمودینامیکی و سیالاتی محاسبه می‌شود. این کد تا زمانی ادامه می‌یابد که به‌شرط همگرایی ارضا شود. شرط همگرایی تابعی از دو مشخصه مقدار نرخ جرمی باقی‌مانده و افت فشار دو سر سوراخ است. به‌عبارت‌دیگر می‌توان نوشت:

$$\dot{m}_{\text{total}} - (\dot{m}_{an}) < \text{Mass flow rate tollerence} \quad (۱۹)$$

$$\Delta P_{\text{itteration}} - \Delta P_{\text{itteration}-1} < \text{Tollerence} \quad (۲۰)$$

معادلات بخش احتراق

این رآکتور یک سیستم صفر بعدی است که در آن فرض می‌شود فرایند اختلاط بهطور کامل و لحظه‌ای انجام می‌شود، به‌گونه‌ای که تمام نقاط حجم کنترل از نظر دما، فشار و ترکیب شیمیایی یکنواخت هستند و هیچ گرادیان مکانی در این پارامترها وجود ندارد. در رآکتور کاملاً آمیخته، احتراق در حجمی با اختلاط کامل رخ می‌دهد و زمان اختلاط نسبت به زمان واکنش بسیار کوتاه است. معمولاً، معادلات حاکم بر رآکتور کاملاً آمیخته شامل موازنه جرم و انرژی برای هرگونه شیمیایی و قوانین ترمودینامیکی بوده و عموماً با استفاده از نرم‌افزارهایی مانند CANTERA حل می‌شوند. مهم‌ترین رابطه‌ای که در فرایند احتراق باید به آن توجه داشت زمان ماند است به‌صورت رابطه (۲۱):

$$\tau_{\text{Residence}} = \frac{\rho_{\text{mix}} V}{\dot{m}} \quad (۲۱)$$

تعریف می‌شود، بیانگر میانگین مدت زمانی است که مخلوط سوخت و اکسیدکننده در ناحیه واکنش حضور دارد تا فرایند احتراق کامل یا بخش عمده‌ای از آن انجام شود. پس از زمان ماند، معادله بقای گونه در یک رآکتور به‌صورت زیر تعریف می‌شود[۲۳]:

$$\frac{dm_{i,cv}}{dt} = \dot{m}_i''' V + \dot{m}_{i,\text{in}} - \dot{m}_{i,\text{out}} \quad (۲۲)$$

این معادله بیان می‌دارد، نرخ تغییرات یک‌گونه در رآکتور به سه پارامتر نرخ ورودی، نرخ خروجی و نرخ تولید آن گونه وابسته است. نرخ حجمی تولید یا تخریب یک‌گونه را می‌توان به‌صورت رابطه (۲۳) نوشت[۲۳]:

$$\dot{m}_i''' = \dot{\omega}_i M W_i \quad (۲۳)$$

همچنین جریان جرمی یک‌گونه در حجم کنترل به‌صورت رابطه (۲۴) تعریف میشود:

$$\dot{m}_{i,in} = \dot{m} Y_{i,in} \quad (۲۴)$$

در معادله بالا درصورتی‌که N گونه شرکت‌کننده در احتراق وجود داشته باشد، باید N بار این معادلات حل شوند. علاوه بر معادله گونه‌ها یک معادله دما نیز وجود دارد که باید حل شود. در نتیجه تعداد مجهولات N+1 است. برای رفع این مشکل از معادله بقای انرژی استفاده می‌شود[۲۴]:

$$\frac{dU}{dt} = -p\left(\frac{dV}{dt}\right) + \dot{Q} + \sum_{1}^{N} \dot{m}_{in} h_{in} - \sum_{1}^{N} \dot{m}_{\text{out}} h_{\text{out}} \quad (۲۵)$$

اگر معادله آنتالپی به‌صورت $H = U + pV$ نوشته شده و از آن مشتق گرفته شود رابطه(۲۷) نوشته می‌شود[۲۴]:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dU}{dt} + p\left(\frac{dV}{dt}\right) + V\left(\frac{dp}{dt}\right) \quad (۲۶)$$

با جاگذاری رابطه (۲۷) در رابطه (۲۶) و با فرض پایابودن فشار می‌توان برای تمامی گونه‌های شرکت کننده نوشت:

$$\frac{dH}{dt} = \dot{Q} + \sum_{1}^{N} \dot{m}_{in} h_{in} - \sum_{1}^{N} \dot{m}_{\text{out}} h_{\text{out}} \quad (۲۷)$$

استفاده از این نوع رآکتور در شرایطی که توربولانس جریان بالاست مناسب است. در محفظه احتراق در نواحی اولیه و ثانویه توربولانس جریان بالا بوده و اختلاط کامل رخ می‌دهد. در ناحیه رقیق‌سازی نیز باتوجه‌به پایین‌بودن عدد دامکوهلر، این رآکتور پاسخ مناسبی ارائه می‌دهد. دو تعریف مهم در مورد برنامه وجود دارد که تفاوت زمان شبیه‌سازی و زمان اجرای کد را مشخص می‌نماید. مدت‌زمان شبیه‌سازی به مدت‌زمان به زمانی گفته می‌شود که مسئله تحت بررسی و شبیه‌سازی قرار می‌گیرد. به‌عبارت‌دیگر مدت زمانی است که کاربر به کد اجازه پیشروی می‌دهد. برای این پژوهش زمان شبیه‌سازی را به‌عنوان ضریب از زمان ماند در نظر گرفته شده است:

$$t_{\text{simulation}} = \text{Simulation Factor} \times \tau_{\text{residence}} \quad (۲۸)$$

مدت‌زمان اجرای کد به مدت زمانی گفته می‌شود تا تمام خروجی‌های مدنظر کد نمایان شود. در این پژوهش برای یافتن خطا، از رابطه خطا نسبی استفاده شده است که به‌صورت رابطه (۴۷-۳) نوشته می‌شود که Z می‌تواند هر مشخصه مورد مطالعه باشد:

$$\%\text{Error} = \frac{|Z_{\text{ref}} - Z_{\text{calculated}}|}{Z_{\text{ref}}} \times 100\% \quad (۲۹)$$

هندسه مورد بررسی

هندسه موردنظر یک محفظه احتراق استوانه‌ای توربینی آزمایشگاهی است. مقطع این محفظه و ابعاد آن که در شکل ۵ ترسیم شده است؛ دارای طول ابعاد ۲۱۰ میلی‌متر و قطر آن ۶۷ میلی‌متر است. تعداد ۶ سوراخ در ناحیه اولیه و تعداد ۱۲ سوراخ در ناحیه رقیق‌سازی وجود دارد که به ترتیب ۵۰ و ۱۳۰ میلی‌متر از چرخاننده فاصله دارند. قطر تمامی سوراخ‌ها برابر با ۱۰ میلی‌متر است. در این محفظه، چرخاننده از نوع مجوری ۶ پره بوده و دارای قطر خارجی ۴۰ میلی‌متر و قطر داخلی ۳۰ میلی‌متر است. قطر پوسته نیز ۳۰۰ میلی‌متر در نظر گرفته شده است.

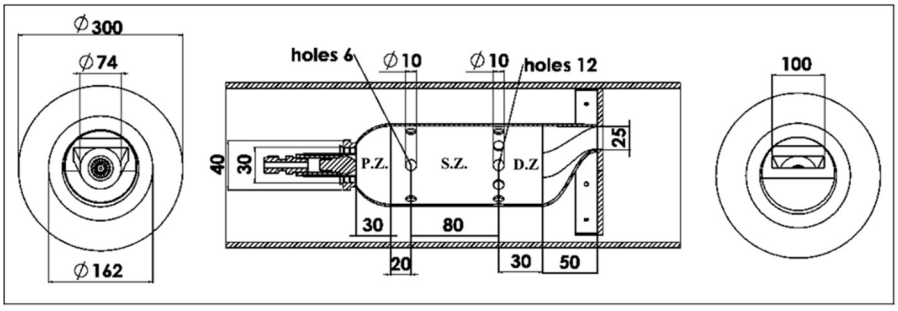

Figure 5 -Cross-sectional view of the combustor and its dimensions [14]

شکل ۵- مقطع برش‌خورده محفظه احتراق و ابعاد آن [۱۴]

پس از آن که داده‌های هندسی دیواره محفظه احتراق و سوراخ و چرخاننده آن به کد داده شد، نمای سه‌بعدی مطابق شکل ۶ در نرم افزار MATLAB رسم شده است.

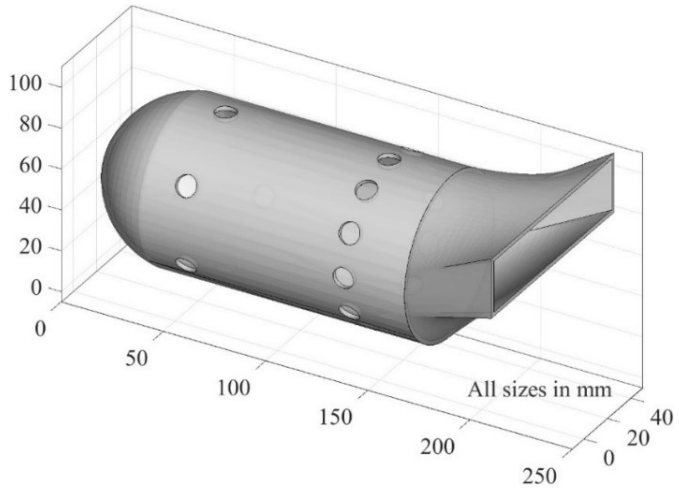

Figure 6- Isometric view of the combustor in MATLAB

شکل ۶- نمای ایزومتریک محفظه احتراق در برنامه MATLAB

اعتبارسنجی

به‌منظور اطمینان از صحت عملکرد کد توسعه‌یافته یک‌بعدی، فرایند اعتبارسنجی در دو بخش مجزا شامل بخش آیرودینامیکی و بخش احتراقی انجام شده است. در این بخش، ابتدا داده‌های تجربی و شبیه‌سازی مراجع جهت مقایسه انتخاب شده و سپس پاسخ‌های عددی کد با نتایج مراجع مورد تطبیق قرار گرفته است.

اعتبارسنجی بخش آیرودینامیک

در این بخش از داده‌های مرجع [۱۱] استفاده شده است. ابعاد و اندازه این محفظه احتراق مشابه است. در این بررسی چهار نرخ جرمی ورودی به محفظه احتراق در نظر گرفته است که در جدول ۱ آورده شده است:

جدول ۱- شرایط ورودی هوا به محفظه احتراق [۱۱]

Table 1- Combustor Inlet Conditions [11]

	Unit	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4
Inlet mass low rate	kg/s	0.36	0.44	0.51	0.55
Inlet Temperature	K	317	317	317	317
Inlet Pressure	kPa	101.325	101.328	101.326	101.326

اعتبارسنجی در این بخش برای توزیع جرمی هوا سوراخ و چرخاننده‌ها در شکل ۷ آورده شده است. همچنین محاسبات خطا به دست آمده که در جدول ۲ بیان شده است، نشان می‌دهد بیشترین خطا برای حالت ۳ است که برای چرخاننده، سوراخ‌های ناحیه اول و سوراخ‌های ناحیه رقیق‌سازی به ترتیب ۱۰/۴۷، ۴/۹۶ و ۱۰/۴ درصد محاسبه شده است.

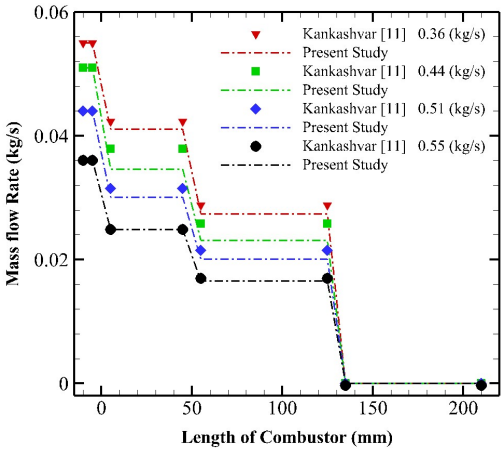

Figure 7- Air distribution in the combustor and comparison with Kankashvar Data. [11]

شکل ۷- توزیع هوای محفظه احتراق و مقایسه آن با داده‌های کنکاشور [۱۱]

جدول ۲- مقایسه خطا به دست آمده با نتایج شبیه سازی و آزمایش انجام شده توسط کنکاشور [۱۱]

Table 2- Comparison of the obtained error with the simulation and experimental results of Kankashvar [11]

All units are kg/s		Swirler	Primary holes	Dilution holes	The percentage of inlet air to each section.		
					Swirler	Primary holes	Dilution hole
Case 1	Kankashvar [11]	0.011	0.0079	0.0173	33.78	21.85	43.78
	This Study	0.011	0.0083	0.0166	30.64	23.12	46.24
	% Error	0%	5.06%	4.05%			
Case 2	Kankashvar [11]	0.0125	0.100	0.0215	31.85	22.58	45.25
	This Study	0.0139	0.100	0.0201	31.59	22.73	45.68
	% Error	6.51%	0%	6.5%			
Case 3	Kankashvar [11]	0.0131	0.0121	0.0258	28.16	22.62	47.34
	This Study	0.0164	0.0115	0.0231	32.16	22.55	45.29
	% Error	10.47%	4.96%	10.4%			
Case 4	Kankashvar [11]	0.0127	0.0135	0.0288	25.52	24.62	49.34
	This Study	0.0139	0.0137	0.0274	25.27	24.91	49.82
	% Error	4.9%	1.5%	4.8%			

اعتبارسنجی و حساسیت‌سنجی بخش احتراق

جهت اعتبارسنجی از داده‌های آزمایشگاهی مرجع [۱۴] استفاده شده است. جدول ۳ نقاط کاری و میانگین دمای خروجی محفظه احتراق را با سوخت متان نشان می‌دهد. در این پژوهش، برای بررسی اعتبارسنجی و حساسیت‌سنجی بخش احتراق و صرفاً از نقطه کاری ۱ استفاده شده است.

جدول ۳- نقاط کاری بررسی شده توسط نوذری و همکاران [۱۴]

Table 3- Operating points investigated by Nozari et al. [14]

Operating Point	Air flow rate (kg/s)	Fuel flow rate (kg/s)	Equivalence ratio (φ)	Outlet Temperature (K)	
				Experiment	Simulation
1	100	20	0.13	920	920
2	70	18	0.16	1059	1094
3	50	14	0.18	1165	1075
4	70	22	0.20	1079	1157

در این بخش برای بررسی احتراق به‌طور معمول از تعداد ۱۰ رآکتور برای مدل‌سازی محفظه احتراق استفاده شده است. شکل ۸ الگوی چینش رآکتورها در محفظه احتراق مورد بررسی را نشان می‌دهد.

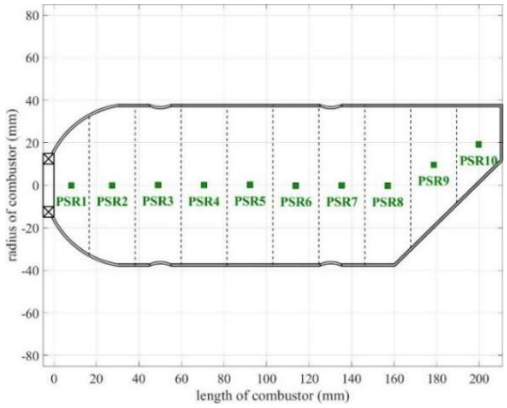

Figure 8- Configuration of the reactor network inside the combustor modeled in MATLAB

شکل ۸- الگوی چینش رآکتورها در محفظه احتراق مورد بررسی در برنامه MATLAB

واکنش انجام شده در محفظه احتراق تابعی از دو پارامتر زمان ماند و همچنین زمان انجام واکنش است. برای آن که شرایط شبیه‌سازی درون محفظه احتراق با شرایط ایجاد شده در حالت آزمایشگاهی تطابق داشته باشد لازم است تا زمان شبیه‌سازی به‌گونه‌ای تنظیم شود که بیشترین نزدیکی را باحالت واقعی داشته باشد. برای بررسی این موضوع، محفظه احتراق به ۱۰ رآکتور با شرایط اولیه یکسان تقسیم شده است و سپس به کمک مکانیزم GRI.3 حل احتراق صورت‌گرفته است. سپس زمان شبیه‌سازی هر رآکتور مطابق جدول ۴ تنظیم شده است.

جدول ۴- زمان شبیه‌سازی در حالات مختلف

Table 4- Simulation time in diffrent conditions

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6
Simulation time (τ_m)	1 τ_m	10 τ_m	15 τ_m	20 τ_m	50 τ_m	100 τ_m
Simulation time (s)	0.0101	0.1010	0.1513	0.2521	0.5042	1.0084

تأثیر زمان حل را می‌توان از دو بعد تأثیر بر دقت حل و تأثیر بر زمان حل کد بررسی کرد. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی نشان می‌دهد از آن جایی که رآکتورهای در نظر گرفته شده از نظر ابعاد و حجم برابر هستند، در نتیجه با افزایش زمان حل معادلات احتراق در هر رآکتور، مجموع زمان شبیه‌سازی، افزایش می‌یابد به‌طوری‌که زمان شبیه‌سازی کل محفظه از ۱۰ میلی‌ثانیه به ۱ ثانیه افزایش می‌یابد. برای مقایسه بیشتر شکل ۹ ترسیم شده است.

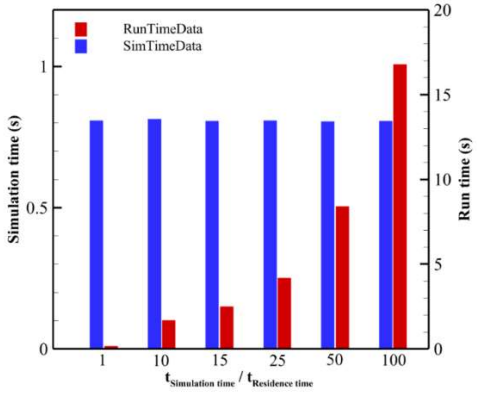

Figure 9- Comparison of the effect of solver time step on simulation duration and code execution time

شکل ۹- مقایسه اثر زمان حل بر مدت زمان شبیه‌سازی و مدت زمان اجرای کد

همچنین دقت نتایج حاصل از زمان شبیه‌سازی در نمودار شکل ۱۰ نشان داده شده است. با مقایسه این مقادیر مشخص می‌شود حالت ۳ کمترین میزان خطا نسبت به حالات دیگر را دارد.

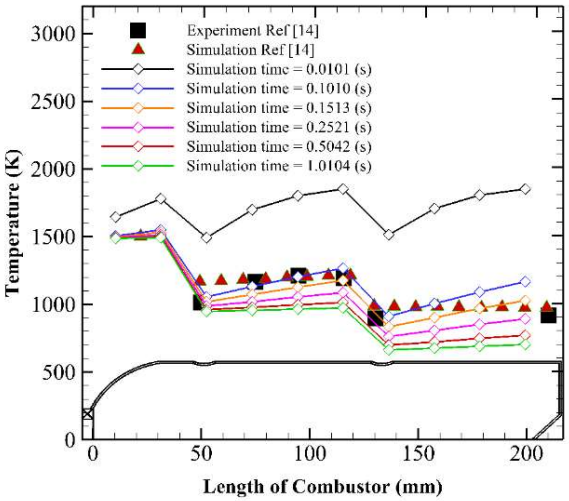

Figure 10- Comparison of the effect of solver time step on combustor temperature distribution and its validation against experimental results

شکل ۱۰- مقایسه اثر زمان حل بر توزیع دمای محفظه احتراق و مقایسه آن با نتایج تجربی

میزان درصد خطای نسبی هر یک از حالات در جدول ۵ نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده در حالت ۳ بیشترین خطای به دست آمده مربوط به خروجی محفظه احتراق و ۱۱/۸۸ درصد است. میانگین خطا کلی برای تمام نقاط در این حالت تقریباً ۶/۵ درصد است که دقت قابل قبولی را نشان می‌دهد. در نتیجه برای دستیابی به حل دقیق‌تر در تمام شبیه‌سازی‌ها زمان شبیه‌سازی مطابق حالت ۳ برای هر رآکتور تنظیم می‌شود.

جدول ۵- مقایسه و اعتبارسنجی حالات مختلف با داده‌های تجربی نوذری و همکاران[۱۴]

Table 5- Comparison and validation of different cases against Nozari et al Experimental Data[14]

	Unit	Point 1	Point 2	Point3	Point4	Point5	Point6
Nozari et al. Experiment data [14]	*K*	1013.74	1165.14	1211.45	1195.2	897.96	919.33
Case 1	*K*	1492.3	1697	1798.7	1849.3	1511.4	1852
Error	%	47.20	45.64	48.47	54.69	68.31	101.34
Case 2	*K*	1052.1	1130.4	1201.1	1265.1	909.8	1164
Error	%	3.78	2.98	0.85	5.82	1.31	26.84
Case 3	*K*	1015.7	1071.9	1124.4	1173.3	832.2	1028.6
Error	%	0.19	8	7.18	1.85	7.32	11.88
Case 4	*K*	984.2	1021.1	1054.5	1087.5	759.5	893.7
Error	%	2.78	15.41	9.02	12.95	12.44	2.91
Case 5	*K*	959.1	977.9	996.3	1014.4	694.4	772
Error	%	5.38	16.07	17.75	15.14	22.33	16.02
Case 6	*K*	945.9	955.6	965.2	974.6	663.3	703.0
Error	%	6.6	17.98	20.32	18.47	26.09	25.53

همچنین محصولات احتراق که در جدول ۶ آورده شده است، نشان می‌دهد که حل انجام شده در حالت ۳، از نظر تحلیل آلایندگی و محصولات احتراق دقت قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۱۴] دارد.

جدول ۶- محصولات احتراق و مقایسه آن با نتایج آزمایش مرجع [۱۴]

Table 6- Comparison of combustion products with the experimental results of Ref. [14]

Product mass Fractions	NO_x(ppm)	CO_2
Experiment Ref [14]	7	-
Case 3	7.68	0.032
%Error	9.71%	-

نتایج حساسیت‌سنجی

به‌منظور ارزیابی اثر پارامترهای کنترلی عددی بر نتایج مدل شبکه رآکتورهای شیمیایی (CRN)، تحلیل حساسیت انجام شد. این بررسی شامل تأثیر دمای اولیه رآکتور، تعداد رآکتورهای شبکه و نیز تعداد گام زمانی حل بود. برای هر مشخصه، سایر شرایط ثابت نگه داشته شده و تنها متغیر موردنظر تغییر یافت تا میزان تغییرات در مقادیر پیش‌بینی‌شده آلاینده‌ها و دمای خروجی بررسی شود. نتایج در ادامه آورده شده است. همچنین شرایط ورودی مسئله مطابق نقطه‌کاری ۱ جدول ۳ تعیین شده است.

اثر تعداد رآکتورها

در این قسمت طول محفظه احتراق را به ۱۰ الی ۵۰ قسمت تقسیم شده است. درنتیجه رآکتورهای ایجاد شده از نظر طول، حجم و شرایط اولیه با یکدیگر برابر هستند. با افزایش تعداد رآکتورهای موجود می‌توان در نقاط بیشتری توزیع دما را مشاهده نمود. همان‌گونه که در شکل ۱۱ مشاهده می‌شود هرچند با افزایش تعداد رآکتور، شرایط واقع‌بینانه‌تری ارائه می‌شود اما در صورت مقایسه نتایج با یکدیگر مشاهده می‌شود در دقت حل نه تنها تاثیر چندانی ندارد بلکه با کوچک شدن بیش از حد حجم هر رآکتور باعث خطا در شبیه سازی و خاموشی شعله شده است. علت این موضوع را می‌توان ناشی از آن دانست که با ثابت بودن نرخ جرمی ورودی به هر رآکتور، با کوچک شدن آن، گازهای ورودی به سرعت خارج می‌شوند و همین امر باعث افزایش خطا در شبیه‌سازی می شود.

بدیهی است با افزایش تعداد رآکتورها، محفظه احتراق به قسمت‌های بیشتری تقسیم می‌شود، حجم رآکتورها کوچک‌تر گشته و از آن جایی که زمان ماند محصولات احتراق کمتر می‌شود در نتیجه لازم است تا شبیه‌سازی به مدت‌زمان بیشتری صورت پذیرد. نتایج شکل ۱۲ نشان می‌دهد مدت زمان حل کد با افزایش تعداد رآکتورها افزایش یافته است. باتوجه به نتایج به‌دست‌آمده از این بخش، تعداد ۱۰ رآکتور برای شبیه‌سازی و بررسی سایر نتایج مورد استفاده قرار گرفته است.

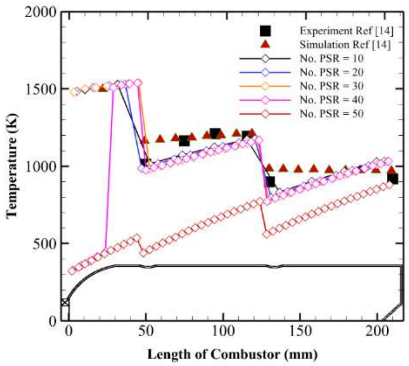

Figure 11- Comparison of the effect of the number of reactors on combustor temperature distribution and its validation against experimental results

شکل ۱۱- مقایسه اثر تعداد رآکتورها بر توزیع دمای محفظه احتراق و مقایسه آن با نتایج تجربی

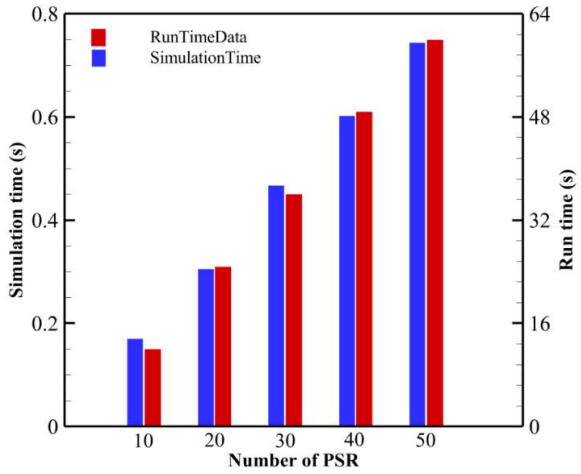

Figure 12– Comparison of the effect of the number of reactors on simulation duration and code execution time

شکل ۱۲- مقایسه اثر تعداد رآکتورها بر مدت زمان شبیه‌سازی و مدت زمان اجرای کد

تأثیر دمای اولیه

برای بررسی تأثیر دمای اولیه بر عملکرد محفظه احتراق، مقادیر ۱۵۰۰ تا ۲۳۰۰ کلوین مورد ارزیابی قرار گرفتند. دماهای بالاتر از این محدوده از نظر تئوری قابل بررسی هستند، اما دستیابی فیزیکی به آن‌ها در شرایط احتراق متان–هوا واقعی نیست. نتایج شکل ۱۳ نشان داد که در دمای ۱۵۰۰ کلوین به‌دلیل پایین بودن انرژی اولیه، احتراقی رخ نمی‌دهد، در حالی‌که از ۱۷۰۰ کلوین به بعد واکنش احتراق آغاز می‌شود، هرچند افزایش بیشتر دما تأثیر محسوسی بر دقت نتایج و توزیع دمای خروجی ندارد.

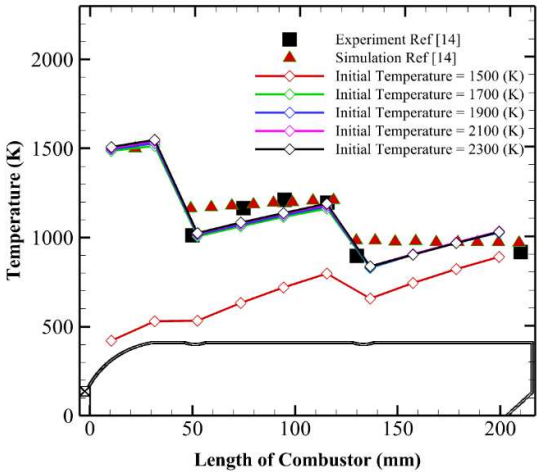

Figure 13- Comparison of the effect of initial temperature on combustor temperature distribution and its validation against experimental results

شکل ۱۳- مقایسه اثر دمای اولیه بر توزیع دمای محفظه احتراق و مقایسه آن با نتایج تجربی

در نمودار شکل ۱۴ زمان شبیه سازی و زمان حل مسئله مقایسه شده است. نتایج نشان می‌دهد که زمان حل در تمام حالات تقریباً یکسان بوده اما هر چه دمای اولیه رآکتور بالاتر باشد، کد برای همگرایی نیاز به مدت زمان بیشتری خواهد داشت.

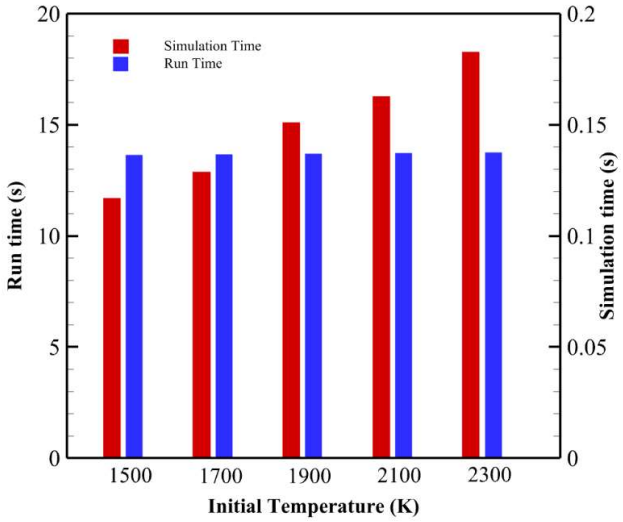

Figure 14- Comparison of the effect of initial temperature on simulation duration and code execution time

شکل ۱۴- مقایسه اثر دمای اولیه بر مدت زمان شبیه‌سازی و مدت زمان اجرای کد

اثر گسسته‌سازی زمانی

برای بررسی اثر این موضوع، دامنه حل به ترتیب به ۱۰۰، ۵۰۰، ۱۰۰۰، ۵۰۰۰، ۱۰۰۰۰، ۱۵۰۰۰ و ۲۰۰۰۰ گام زمانی تقسیم شده است و مدت زمان حل در شکل ۱۵ مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان می‌دهد، زمان اجرا کد با افزایش تعداد گام زمانی بیشتر می‌شود.

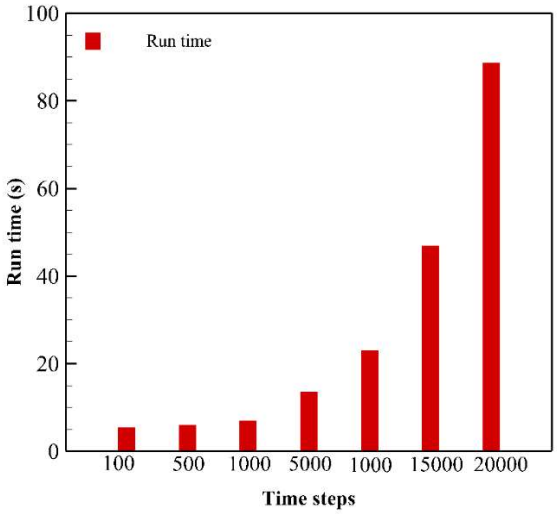

Figure 15 -Comparison of the effect of discretization on code execution time distribution

شکل ۱۵- مقایسه اثر گسسته‌سازی بر توزیع زمان اجرای کد

نتایج دقت حل در شکل ۱۶ آورده شده است. نتایج نشان می‌دهد علی‌رغم اینکه تعداد گام‌های بیشتر شده، تأثیر چندانی در حل مشاهده نمی‌شود. در نتیجه گام زمانی کمتر مناسب‌تر خواهد بود.

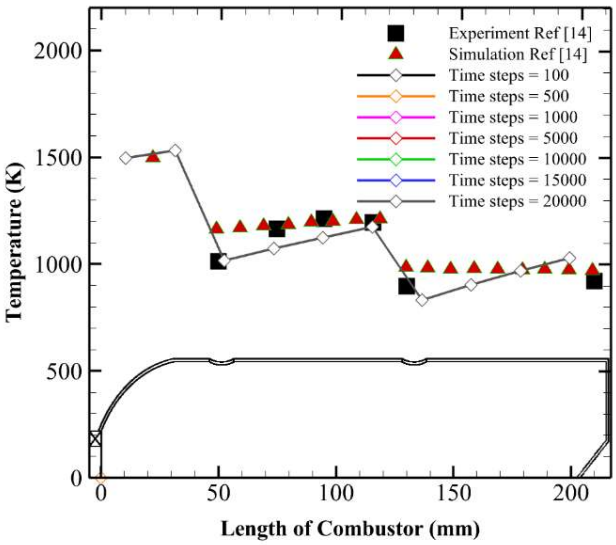

Figure 16 –Comparison of the effect of temporal discretization on combustor temperature distribution and its validation against experimental results

شکل ۱۶– مقایسه اثر گسسته‌سازی زمانی بر توزیع دمای محفظه احتراق و مقایسه آن با نتایج تجربی

نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک کد پاسخ سریع مورد بررسی قرار گرفت. در ابتدا هندسه محفظه احتراق به کد داده شد و پس از تنظیم شرایط ورودی، توزیع جرمی هوا برای هر بخش مشخص گشت. در بخش آیرودینامیک موارد زیر استنتاج شدند:

- نتایج از توزیع جرمی هوا با مرجع نشان داد که خطای حل در کمینه حالت خود صفر درصد و در بیشینه حالت از ۱۱ درصد بیشتر نخواهد بود. این خطای ایجادشده برای بخش چرخاننده است که به علت پیچیدگی‌های جریان در این قطعه، بیشترین خطا را نشان می‌دهد.

در بخش احتراق نیز نتایج زیر مورد بحث قرار گرفتند:

- با درنظرگرفتن زمان شبیه‌سازی متفاوت و بررسی آن مشخص شد که با شبیه‌سازی ۱۵ برابر زمان ماند، نتایج قابل‌قبولی استخراج می‌شود؛ به‌طوری‌که بیشینه خطا به‌دست‌آمده برای دما، در نقطه خروجی محفظه بوده که آن هم از ۱۰ درصد تجاوز نمی‌نماید و همچنین میزان میانگین خطا در این حالت برای تمامی نقاط داخل محفظه احتراق نسبت به داده‌های آزمایشگاهی مرجع در حدود ۶/۵ درصد گزارش می‌شود. از آنجایی‌که برخی واکنش‌ها نیازمند زمان بیشتری برای تکمیل فرایند هستند، افزایش زمان شبیه‌سازی منجر به حل پایاتری می‌شود که در نتیجه آن صحت نتایج در حالت ۱۵ برابر زمان‌ماند بهتر از سایر حالات است.
- پس از آن، حساسیت‌سنجی بر روی مشخصه‌های کنترلی صورت گرفت که نشان داد افزایش تعداد رآکتورها تأثیری در دقت نداشته، اما زمان اجرای کد را افزایش می‌دهد. همچنین کوچک‌شدن فضای هر رآکتور باعث می‌شود تا شعله خاموش شود. باتوجه به ثابت‌بودن نرخ جرمی ورودی به هر رآکتور، به علت کوچک بودن حجم، سرعت ورود و خروج محصولات احتراق به صورتی که است که فرایندهای احتراق به‌درستی شبیه‌سازی نشده و شعله خاموش می‌شود.
- تأثیر دمای اولیه به صورتی است که با تخمین دمای پایین‌تر از ۱۵۰۰ کلوین، عملا واکنش‌های احتراقی صورت نمی‌گیرد، زیرا شروع فرایند احتراق در برنامه Cantera با رسیدن به دمای خود اشتعالی است، اما با افزایش دما از ۱۵۰۰ به ۲۳۰۰

کلوین، فرایند احتراق انجام می‌شود، اما نتایج محسوسی در دقت مشاهده نمی‌شود؛ زیرا پس از پایا شدن شرایط حل، نتایج مشابه خواهند شد. همچنین این تغییر بر زمان اجرای کد نیز بی‌تأثیر است.

- در مورد گام زمانی نیز، افزایش گام زمانی در این شبیه‌سازی بر دقت حل تأثیری ندارد. درحالی‌که زمان اجرای کد را به‌شدت بالا می‌برد. از آنجایی که مسئله به حالت پایا رسیده و همچنین پیچیدگی‌های محاسباتی رآکتور کاملاً آمیخته کم است در نتیجه افزایش گام زمانی صرفاً باعث افزایش زمان اجرای کد می‌شود بدون اینکه بر دقت حل مؤثر باشد.

فهرست علائم

علائم اصلی

ضریب تخلیه	C_D	نسبت ظرفیت گرمایی ویژه (c_p/c_v)	γ
نرخ تولید/مصرف گرما (kJ/s)	$\dot{Q}$	زاویه پره‌ها	θ
نرخ جرمی (kg/s)	$\dot{m}$	نسبت نرخ جرمی عبوری سوراخ به حلقه	μ
سرعت تولید/مصرف گونه	$\dot{\omega}$	عدد پی	π
اختلاف فشار (kPa)	ΔP	چگالی (kg/m^3)	ρ
مساحت (m^2)	A	زمان ماند (s)	τ
قطر (m)	D	**زیرنویس‌ها**	
ضریب اصطکاک	F	ورودی به محفظه احتراق	3
ضریب افت فشار	K	دینامیکی	Dyn
جرم مولی (kg/mol)	MW	موثر	eff
فشار سکون (kPa)	P	سوراخ	h
ثابت جهانی گازها $(kJ/kmol.K)$	R	هسته مرکزی چرخاننده	hub
عدد رینولدز	Re	شمارنده	i
دما (K)	T	ورودی	in
حجم (m^3)	V	دیواره داخلی	$inner, liner$
کسر جرمی	Y	دیواره	$liner$
آنتالپی ویژه (kJ/kg)	h	خروجی	out
تعداد پره‌ها	n	پوسته خارجی	$outer, casing$
فشار استاتیک (kPa)	p	پوسته داخلی	$outer, casing$
فاصله بین پره‌ها (m)	s	دیواره خارجی	$outer, liner$
زمان (s)	t	مرجع	ref
سرعت سیال (m/s)	u	چرخاننده	sw
عرض پره‌ها (m)	w	پره	v
علائم یونانی		سطح داخلی دیواره	w
نسبت فشار دینامیکی سوراخ به حلقه	α		

منابع

[1] A. Azimi, M.EidiAttarZade, S.Tabejamaat, A.Oni, S.Zahab, MM.BalZade, B.Kankashvar, M.Aghayari, "Designing a Gas Turbine Combustor Test Rig and Testing a Sample Combustor at Atmospheric Conditions," *Fuel and Combustion,* vol. 10, no. 1, pp. 87–104, 2017.

[2] B. Maxwell, R. Mével, and J. Melguizo-Gavilanes, "Spherically expanding flame simulations using Cantera coupled to an unsteady Lagrangian formulation," *International Journal of Hydrogen Energy,* vol. 51, pp. 948–960, 2024.

[3] J. L. Schurr, A. Bhattacharya, A. A. Konnov, and O. Kaario, "Super adiabatic combustion of H2/Air and H2/N2O mixtures," *Combustion and Flame,* vol. 263, p. 113397, 2024.
[4] D. A. Sullivan and P. A. Mas, "A Critical Review of NOx Correlations for Gas Turbine Combustors," in *ASME 1975 Winter Annual Meeting: GT Papers*, 1975.
[5] A. H. Lefebvre, "Fuel effects on gas turbine combustion-liner temperature, pattern factor, and pollutant emissions," *Journal of Aircraft,* vol. 21, no. 11, pp. 887–898, 1984.
[6] P. J. Stuttaford and P. A. Rubini, "Preliminary Gas Turbine Combustor Design Using a Network Approach," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power,* vol. 119, no. 3, pp. 546–552, 1997.
[7] S. Maidhof, "A Flow Network Combustor Model Applying Reduced Mechanisms," in *ASME Turbo Expo 2012: Turbine Technical Conference and Exposition*, vol. Volume 2: Combustion, Fuels and Emissions, Parts A and B, pp. 329–340, 2012.
[8] J. J. Gouws, R. M. Morris, and J. A. Visser, "Modelling of a gas turbine combustor using a network solver," *South African Journal of Science,* vol. 102, no. 11, pp. 533–536, 2006.
[9] B. du Toit and S. Theron, "Rapid Preliminary Combustor Design Using a Flow Network Approach," in *ASME Turbo Expo 2016: Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, 2016.
[10] B. Kankashvar, S. Tabe-Jamaat, S. B. Ajlleh, and M. Eidi Attarzadeh, "Analysis of air distribution in a Sample combustor using numerical and analytical methods," presented at the Proceedings of the 16th International Conference of the Iranian Aerospace Society, 2017.
[11] B. Kankashvar, "Experimental and numerical study of operating parameters in a gas turbine combustor," M.S. thesis, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran, 2018.
[12] A. Ahmadi Tonekaboni and M. Eidi Attarzadeh, "Analytical Modeling of Airflow Partitioning in a Gas Turbine Combustion Chamber," *Journal of Technology in Aerospace Engineering,* pp. 1–10, 2025.
[13] A. Goulart, L. Pizzuti, and R. Altafim, "Numerical Characterization of Biogas Combustion with Laminar Flame Velocity and Ignition Delay Time in Conditions Analogous to Gas Turbine Combustors," Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, 2023.
[14] M. Nozari, M. Eidiattarzade, S. Tabejamaat, and B. Kankashvar, "Emission and performance of a micro gas turbine combustor fueled with ammonia-natural gas," *International Journal of Engine Research,* vol. 23, no. 6, pp. 1012–1026, 2022.
[15] A. Kaluri, P. Malte, and I. Novosselov, "Real-time prediction of lean blowout using chemical reactor network," *Fuel,* vol. 234, pp. 797–808, 2018.
[16] S. Chaturvedi, R. Santhosh, S. Mashruk, R. Yadav, and A. Valera-Medina, "Prediction of NOx emissions and pathways in premixed ammonia-hydrogen-air combustion using CFD-CRN methodology," *Journal of the Energy Institute,* vol. 111, p. 101406, 2023.
[17] C. Romano, M.Cerutti, G.Babazzi, L.Miris, R.Lamioni, C.Galletti, L.Mazzotta, D.Borello, "Ammonia blends for gas-turbines: Preliminary test and CFD-CRN modelling," *Proceedings of the Combustion Institute,* vol. 40, no. 1, p. 105494, 2024.
[18] H. Khodayari, F. Ommi, and Z. Saboohi, "Multi-objective optimization of a lean premixed laboratory combustor through CFD-CRN approach," *Thermal Science and Engineering Progress,* vol. 25, p. 101014, 2024.
[19] A. Pappa, L. Bricteux, and W. De Paepe, "A strategy based on hybrid 0D Chemical Reactor Networks and 1D Flame predictions for flashback prevention in an original H2 fueled micro Gas Turbine combustor without any redesign," *International Journal of Hydrogen Energy,* vol. 111, pp. 264–277, 2025.
[20] Y. Wu and T. Lu, "A direct method for calculating turning points of perfectly stirred reactors," *Combustion and Flame,* vol. 211, pp. 374–376, 2020.
[21] A. H. Lefebvre and D. R. Ballal, *Gas Turbine Combustion: Alternative Fuels and Emissions, Third Edition*. CRC Press, 2010.
[22] K. S. M. I. Kaddah, "Discharge coefficient and jet deflection studies for combustor liner air-entry holes," Thesis or dissertation, Cranfield University, 1964.
[23] S. Turns and D. C. Haworth, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill Education, 2020.
[24] D. G. Goodwin, H. K. Moffat, I. Schoegl, R. L. Speth, and B. W. Weber, "Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes," *Zenodo,* 2022.