

پیش‌بینی آلاینده CO در یک محفظه احتراق توربین گاز به کمک مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال گردابه

محمد شهسواری^{۱*}، محمدعلی سرودی^۲، موسی یزدانی^۳، سارا منتظری نژاد^۴ و یوسف باقری^۵

- ۱- دکترای مهندسی هوافضا، گروه محفظه احتراق، شرکت توربوتک، تهران، m.shahsavari@turbotec-co.com
- ۲- کارشناس ارشد مهندسی هوافضا، گروه محفظه احتراق، شرکت توربوتک، تهران، m.soroudi@turbotec-co.com
- ۳- کارشناس ارشد مهندسی هوافضا، گروه محفظه احتراق، شرکت توربوتک، تهران، m.yazdani@turbotec-co.com
- ۴- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، گروه محفظه احتراق، شرکت توربوتک، تهران، s.montazerinejad@turbotec-co.com
- ۵- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، گروه محفظه احتراق، شرکت توربوتک، تهران، y.bagheri@turbotec-co.com

* نویسنده مخاطب

تاریخ دریافت: ۹۶/۳/۲۹، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۶/۷/۱۷، پذیرش: ۹۶/۷/۱۹

چکیده: هدف اصلی مقاله حاضر پیش‌بینی آلاینده CO در یک محفظه احتراق توربین گاز زمینی ۲۵ مگاواتی است. محفظه احتراق این توربین گاز متشکل از ۱۸ مشعل EV نسل دوم است. برای نیل به این هدف، در مقاله حاضر، از مدل دو معادله $k - \epsilon$ برای مدل‌سازی میدان جریان آشفته استفاده شده است. همچنین، میدان احتراقی آشفته با استفاده از مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال ادی به کمک یک واکنش کلی دومرحله‌ای شبیه‌سازی شده است. با توجه به تحقیقات اولیه، واکنش شیمیایی کلی دومرحله‌ای توانایی پیش‌بینی آلاینده CO را ندارد. برای رفع این نقص، در مطالعه حاضر، واکنش شیمیایی به‌گونه‌ای بهینه شده است تا بتواند آلاینده CO را در محفظه احتراق به‌خوبی پیش‌بینی کند. بهینه‌سازی‌های مذکور بر روی توان متغیر دما در نرخ واکنش‌ها انجام شده است. نتایج این بهینه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که واکنش شیمیایی بهینه‌سازی شده می‌تواند آلاینده CO را با دقت مناسب در شرایط کاری مختلف توربین گاز مزبور پیش‌بینی کند. بررسی‌های حاضر نشان می‌دهد که تغییرات ایجادشده در واکنش دومرحله‌ای تأثیری در محل پایداری و شکل شعله در داخل محفظه ندارد و تنها اثر آن تصحیح پیش‌بینی آلاینده CO است.

کلیدواژگان: آلاینده CO، مدل آشفته $k - \epsilon$ ، مدل احتراق نرخ محدود اضمحلال ادی، مشعل EV نسل دوم

مقدمه

امروزه، پیش‌بینی تولید آلاینده‌ها به یکی از مهم‌ترین زمینه‌های تحقیقاتی در زمینه توربین‌های گازی تبدیل شده است [۱، ۲]. قوانین زیست‌محیطی سخت‌گیرانه در زمینه تولید آلاینده‌هایی همچون مونوکسید کربن و اکسیدهای نیتروژن باعث شده که تولیدکنندگان توربین‌های گازی تولید آلاینده‌ها را در چرخه‌های طراحی و بهینه‌سازی خود به‌عنوان یک پارامتر اصلی لحاظ کنند. تخمین آلاینده‌های یک توربین گاز در مراحل مختلف طراحی و بهینه‌سازی یا باید با استفاده از آزمون‌های تجربی انجام شود و یا از شبیه‌سازی عددی کمک گرفته شود. استفاده از روش‌های تجربی، به‌ویژه در مراحل اولیه طراحی، بسیار هزینه‌بر و گاهی غیرممکن است. به همین دلیل، وجود یک ابزار ساده و مطمئن در این بخش می‌تواند کمک بسزایی در تسریع فرایند طراحی کند. این مهم یکی از زمینه‌های مورد توجه توربین سازهای مختلف در سراسر دنیاست [۳]. برای نیل به این هدف، به‌طور کلی برای پیش‌بینی آلاینده‌ها، می‌توان از یکی از سه روش تحلیلی، فیزیک مبنا و روش‌های عددی استفاده کرد.

در روش‌های تحلیلی، یک رابطه برای تولید آلاینده براساس پارامترهای عملیاتی محفظه استخراج می‌شود. سپس، با استفاده از روش‌های تجربی، ثابت‌هایی در این رابطه لحاظ می‌شود که بتواند با تقریب مناسبی آلاینده حاصل از احتراق محفظه را پیش‌بینی کند [۴]. رابطه به‌دست‌آمده از این روش تنها برای یک محفظه احتراق خاص قابل استفاده است. با تغییرات کلی محفظه، این رابطه دیگر به‌هیچ‌عنوان دقت لازم در پیش‌بینی CO را نخواهد داشت. برای استفاده از این رابطه در یک محفظه احتراق دیگر، حداقل باید تمام ثابت‌های این رابطه به‌روزرسانی شود. بنابراین، اگرچه استفاده از این روش‌ها هنوز برای تولیدکنندگان توربین‌های گازی به‌عنوان یک ابزار ساده مورد توجه است، اما در بخش‌های تحقیق و توسعه این تولیدکنندگان گسترش این روش‌ها تقریباً منسوخ شده است.

دیگر روش مفید برای پیش‌بینی آلاینده‌ها روش‌های فیزیک میناست. در این روش‌ها، میدان جریان به‌صورت منفک از میدان واکنش‌های شیمیایی حل می‌شود [۵-۷]. برای این منظور، ابتدا میدان جریان احتراقی با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی حل می‌شود. سپس، با استفاده از نتایج به‌دست‌آمده، محفظه احتراق به نواحی مختلفی تقسیم می‌شود. این تقسیم‌بندی براساس گرادیان‌های سرعت، دما، اختلاط و کسر جرمی عناصر انجام می‌شود. در مرحله بعد، برای هر یک از قسمت‌های محفظه یک راکتور شیمیایی مناسب در نظر گرفته می‌شود. حال، با اتصال این راکتورها به یکدیگر، یک شبکه راکتور شیمیایی شکل می‌گیرد که با حل آن می‌توان تولید آلاینده‌های محفظه احتراق را محاسبه کرد [۸-۱۰]. تحقیقات پیشین نشان می‌دهد که روش فیزیک مینا روش مناسبی برای پیش‌بینی آلاینده اکسیدهای نیتروژن است [۱۱-۱۴]. اما این روش دقت مناسبی در پیش‌بینی آلاینده CO حتی در محفظه‌های بسیار ساده را ندارد. به‌طور مثال، نتایج تحقیقات باهارگاوا و همکاران نشان می‌دهد که روش‌های فیزیک مینا تولید آلاینده CO را سه برابر بزرگ‌تر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند [۱۳]. از پژوهش‌های دیگر در این زمینه می‌توان به تحقیقات آلیار [۱۵]، الکادی [۱۶]، گوک [۹]، گوکولاکریشنا [۱۷] و پارک [۵] اشاره کرد که همگی نشان می‌دهد که روش‌های فیزیک مینا توانایی پیش‌بینی آلاینده CO را ندارد. دلیل اصلی عدم توانایی این روش‌ها در پیش‌بینی CO این است که واکنش شیمیایی و پارامترهای بسیاری، همچون میزان اختلاط مواد اولیه، فشار و دمای محیط، نسبت هم-ارزی، سازوکار^۱ پایدارسازی شعله، کیفیت اسپری سوخت و غیره، در تولید و مصرف CO دخالت دارند. روش‌های فیزیک مینا توانایی شناسایی دقیق تمامی این پدیده‌ها را ندارد [۱۸].

روش دیگر برای پیش‌بینی آلاینده CO استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی است. مشکل اصلی این روش هزینه محاسباتی بالای شبیه‌سازی‌های احتراق آشفته است. به‌طور کلی، مدل‌های مورد استفاده برای شبیه‌سازی احتراق آشفته را می‌توان به چهار دسته تقسیم‌بندی کرد: روش‌های مبتنی بر فلیمت‌ها^۲، روش‌های نرخ محدود شیمیایی^۳، روش‌های پی‌دی‌اف^۴ و روش‌های مبتنی بر روابط مومنت‌های شرطی^۵ [۱۹]. در میان این روش‌ها، دو روش اول برای کاربردهای صنعتی عملیاتی‌ترند. در روش‌های مبتنی بر فلیمت‌ها، واکنش‌های شیمیایی کامل با استفاده از پارامترهای خاصی طبقه‌بندی می‌شوند. سپس، با استخراج این پارامترهای خاص در شبیه‌سازی‌ها، واکنش‌های شیمیایی از فلیمت‌های ساخته‌شده استخراج می‌شود. بنابراین، در این روش‌ها اگرچه واکنش‌های شیمیایی کامل در نظر گرفته می‌شوند، اما هیچ معادله انتقالی برای آن‌ها در طول شبیه‌سازی حل نمی‌شود. در روش‌های نرخ محدود شیمیایی، معادله بقای عناصر مستقیماً برای هر یک از عناصر حل می‌شود. به‌عبارت دیگر، در روش نرخ محدود شیمیایی، به‌ازای هر عنصر، باید یک‌بار معادله بقا حل شود. این امر باعث می‌شود که هزینه محاسبات این مدل‌ها بسیار بالا باشد. بنابراین، معمولاً از واکنش‌های کلی با تعداد گام‌های اندک به‌جای واکنش‌های کامل در این نوع روش‌ها استفاده می‌شود. در روش‌های پی‌دی‌اف، ابتدا یک یا چند خصوصیت از میدان احتراقی مانند کسر مخلوط^۶ در

1. Mechanism
2. Flamelet Base Model
3. Finite Rate Chemistry (FRC) Model
4. Probability Density Function (PDF) Model
5. Conditional Moment Closure (CMC) Model
6. Mixture Fraction

سلول‌های محاسباتی محاسبه می‌شود. سپس پارامترهای دیگری، مانند کسر جرمی عناصر، دما و چگالی، با استفاده از توابع پی‌دی‌اف موجود و بر مبنای کسر مخلوط عناصر محاسبه می‌شود [۱۹]. بنابراین، توسعه توابع پی‌دی‌اف در این روش بسیار حائز اهمیت است. این روش‌ها معمولاً برای جریان‌های محترقه‌ای که تأثیرات جابه‌جایی جریان در آن‌ها غالب است کارایی خوبی دارد. در روش‌های مبتنی بر روابط مومنت‌های شرطی، اثرات واکنش‌های شیمیایی با استفاده از میانگین‌گیری‌های شرطی محاسبه می‌شود [۲۰]؛ به این صورت که مومنت‌های مختلف کمیت‌های شیمیایی با استفاده از مومنت‌های پایین آن‌ها محاسبه می‌شود.

جونگ و هوه تأثیر مدل‌های احتراقی مختلف از جمله مدل فلیملت آرام، مدل پی‌دی‌اف و مدل نرخ محدود شیمیایی را در پیش‌بینی آلایندگی‌های مشعل سیدنی SMI بررسی کردند [۲۱]. نتایج این تحقیقات نشان داد که روش مبتنی بر فلیملت‌های آرام بهترین عملکرد را در پیش‌بینی آلایندگی دارد. حداکثر مقدار خطای این روش ۵۰ درصد گزارش شده است. این نتایج نشان داد که روش‌های پی‌دی‌اف و اضمحلال ادی به ترتیب مقدار آلایندگی CO را بیشتر و کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کنند. از دیگر تحقیقات عددی در حوزه آلایندگی‌ها می‌توان به مطالعات کتلهون به کمک روش شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و روش فلیملت FGM^۱ اشاره کرد [۲۲]. هدف از این تحقیقات ارزیابی توانایی روش مذکور در پیش‌بینی آلایندگی CO مشعل سیدنی بوده است. نتایج این بررسی‌ها نشان داد که روش فلیملت FGM مقدار تولید CO را در این مشعل ساده بیش از مقدار تجربی پیش‌بینی می‌کند. به‌طور کلی، روش‌های فلیملت توانایی ذاتی برای پیش‌بینی تولید آلایندگی‌هایی که به‌صورت آهسته تولید می‌شوند را ندارند [۲۳، ۲۲، ۱۸]. بنابراین، بخش قابل‌توجهی از تحقیقات پیشین سعی بر استفاده از روش‌های نرخ محدود شیمیایی داشته‌اند. به‌طور مثال، ژو و همکاران، با استفاده از مدل اضمحلال ادی و واکنش کاهش‌یافته دو و چهارمرحله‌ای متان، تولید آلایندگی CO چند محفظه احتراق مختلف را بررسی کردند. در این مطالعه، به‌منظور پیش‌بینی آلایندگی CO، ضرایب واکنش‌های شیمیایی بهینه‌سازی شده‌اند [۱۸].

در مطالعه حاضر، هدف استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی برای پیش‌بینی آلایندگی CO محفظه احتراق توربین IGT25^۲ است. برای این منظور، از روش شبیه‌سازی $k - \epsilon$ و مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال گردابه استفاده شده است. همچنین، از یک واکنش کلی دومرحله‌ای برای شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. از آنجا که واکنش شیمیایی کلی توانایی پیش‌بینی آلایندگی CO را ندارد، در این مطالعه، این واکنش شیمیایی به‌وسیله الگوریتم خاصی بهینه‌سازی شده است. از آنجا که توربین IGT25 نمونه بومی توربین SGT-600 شرکت زیمنس است، در این مقاله، از داده‌های تجربی توربین SGT-600 موجود در مراجع، برای اعتبارسنجی روش پیش‌بینی آلایندگی CO در خروجی محفظه IGT25، استفاده شده است. در ادامه مقاله و در بخش بعدی، روش عددی و همچنین هندسه مورد بررسی و شرایط مرزی آورده می‌شود. سپس، در بخش سوم این مقاله، ابتدا نتایج کلی میدان جریان حاکم بر محفظه و سپس نتایج عددی پیش‌بینی آلایندگی CO ارائه خواهد شد.

روش عددی

در مطالعه حاضر، برای شبیه‌سازی میدان جریان از معادلات ناویر-استوکس میانگین‌گیری‌شده رینولدز^۳ استفاده شده است. در این معادلات، به‌منظور مدل‌سازی عبارت تنش‌های رینولدز از روش کی اپسیلون تحقق‌پذیر^۴ استفاده شده است. این مدل دقت بسیار خوبی در پیش‌بینی رفتار جریان‌های همراه با پیچش، لایه مرزی، گردابه‌های فشار مخالف، جدایش و نواحی بازگردشی دارد. مطالعات مانگیا بر روی یک جریان پیچشی در داخل یک محفظه احتراق نشان می‌دهد که روش فوق از تمامی روش‌های هم‌خانواده دومعادله‌ای دقت بیشتری در پیش‌بینی ابعاد و محل ناحیه بازگردشی در مقایسه با نتایج تجربی دارد [۲۳].

1. Flamelet Generated Manifolds
2. Iranian 25MW Gas Turbine
3. Reynolds Averaged Navier Stokes
4. K-ε (Realizable)

در مطالعه حاضر، از معادلات میانگین‌گیری چگالی^۱، که به روش فایور^۲ معروف است، استفاده شده است [۱۹]. در این روش، هر کمیت $\bar{\phi}$ به صورت $\bar{\phi} = \bar{\rho}\bar{\phi}/\bar{\rho}$ میانگین‌گیری چگالی می‌شود. در این رابطه، علامت "-" نشان‌دهنده میانگین‌گیری چگالی و علامت "+" نشان‌دهنده میانگین‌گیری رینولدز است. در این روش، همچنین، هر کمیت برابر است با $\bar{\phi} = \bar{\phi} + \phi''$. طبق این میانگین‌گیری معادلات به صورت زیر است:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (۱)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (۲)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{Y}_k \bar{u}_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_{k,j} \bar{Y}_k - \bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}_k) + \bar{\omega}_k \quad \text{for } k = 1, N \quad (۳)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{h} \bar{u}_j) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \bar{h}'' \bar{u}_j \right) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \bar{\omega}_T \quad (۴)$$

که در این روابط، ρ چگالی، u سرعت، p فشار، τ تانسور تنش، Y_k کسر جرمی عنصر k ، $\bar{\omega}_k$ نرخ واکنش در معادله عناصر، h آنتالپی، λ ضریب نفوذ حرارتی، T دما و $\bar{\omega}_T$ نرخ واکنش در معادله آنتالپی است. همچنین، عبارت $\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j$ تنش‌های رینولدز، $\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}_k$ شار عناصر، $\bar{\rho} \bar{h}'' \bar{u}_j$ شار آنتالپی و $\bar{u}_{k,j} \bar{Y}_k$ شار نفوذ آرام است. در معادلات بالا، علاوه بر سرعت‌ها، فشار، آنتالپی و کسر جرمی عناصر، عبارت‌های نرخ واکنش در معادله عناصر و آنتالپی، تنش‌های رینولدز، شار عناصر، شار آنتالپی، شار نفوذ آرام و عبارت $\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}$ مجهول‌اند. البته، عبارت $\bar{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}$ نیز مجهول است، اما در اکثر شبیه‌سازی‌های عددی از این عبارت صرف‌نظر می‌شود. بنابراین، تعداد مجهولات $7N+22$ است، در حالی که تعداد معادلات $5+N$ است. لذا، سیستم معادلات بسته نیست. برای بسته‌شدن سیستم معادلات بالا، باید عبارت‌های نرخ واکنش در معادله عناصر و آنتالپی، تنش‌های رینولدز، شار عناصر، شار آنتالپی، شار نفوذ آرام و عبارت $\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}$ مدل‌سازی شوند. شارهای عناصر و آنتالپی معمولاً به صورت زیر مدل‌سازی می‌شوند [۱۹].

$$\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{Y}_k'' = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j} \quad (۵)$$

$$\bar{\rho} \bar{h}'' \bar{u}_j = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j} \quad (۶)$$

این تقریب‌ها به ترتیب $3N$ و 3 مجهول از سیستم معادلات بالا می‌کاهد. برای مدل‌سازی عبارت نفوذ آرام نیز از تقریب زیر استفاده می‌شود [۱۹].

$$\bar{u}_{k,j} \bar{Y}_k = -\rho D_k \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j} \approx \bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j} \quad (۷)$$

در این معادله، مقدار میانگین نفوذ مولکولی در میان تمامی عناصر حاضر در سیستم معادلات است. این تقریب نیز به نوبه خود $3N$ مجهول از سیستم معادلات بالا می‌کاهد. عبارت $\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}$ نیز معمولاً به صورت زیر تقریب زده می‌شود [۱۹].

$$\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \quad (۸)$$

این تقریب هم 3 مجهول از سیستم معادلات را از بین می‌برد. بنابراین، تا اینجا $6N+6$ مجهول از مجهولات سیستم معادلات، با تقریب وابسته به کمیت‌های اصلی، کاسته شدند. عبارت اصلی سیستم معادلات بالا، که نیاز به مدل‌سازی جدی دارد، عبارت تنش‌های رینولدز است. در اکثر مدل‌های مبتنی بر میانگین‌گیری رینولدز، این عبارت با استفاده از فرض بویزنس^۳ به صورت زیر به تانسور تنش و انرژی آشفتگی مربوط می‌شود [۱۹].

$$\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j'' = -\mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} k \quad (۹)$$

1. Density-weighted
2. Favre
3. Boussinesq

در این رابطه، δ_{ij} تابع کرونگر و μ_t گرانروی دینامیکی آشفته‌گی است. در مطالعه حاضر، از مدل کی اپسیلون تحقق‌پذیر برای ارزیابی این گرانروی استفاده شده است. در این مدل، گرانروی دینامیکی آشفته‌گی به صورت تابعی از انرژی جنبشی آشفته‌گی k و نرخ اضمحلال ε به صورت زیر معرفی می‌شود [۱۹].

$$\mu_t = \frac{\bar{\rho} k^2}{\varepsilon} \quad (10)$$

$$4.04 + \left[\sqrt{6} \cos \left[\frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\frac{\sqrt{6} S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{(S_{ij} S_{ij})^{3/2}} \right) \right] \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{S_{ij} S_{ij} + (\bar{\Omega}_{ij})^2} \right]$$

در این معادله، S_{ij} تانسور نرخ کرنش و $\bar{\Omega}_{ij}$ تانسور نرخ چرخش میانگین است. واضح است که در معادله بالا لازم است معادلات انتقالی برای انرژی جنبشی آشفته‌گی و نرخ اضمحلال ادی نوشته شود تا مقدار آن‌ها در دامنه حل مشخص شود. این معادلات انتقال به صورت زیر است.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] - \bar{\rho} \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \varepsilon \left[\text{Max} \left\{ 0.43, \frac{\sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}}{\sqrt{2 S_{ij} S_{ij} + 5 \frac{\varepsilon}{k}}} \right\} \right] - \frac{1.9 \bar{\rho} \varepsilon^2}{k + \sqrt{\frac{\mu_t}{\rho}}} \quad (12)$$

در این معادلات، عبارت $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$ همان تنش‌های رینولدز است که مقدار آن از فرض بوزینس به دست می‌آید. بنابراین، با استفاده از سه معادله اخیر سه مجهول μ_t ، k و ε قابل ارزیابی است. با این کار، می‌توان عبارت تنش‌های رینولدز را نیز به تانسور تنش مرتبط ساخت. این روند نیز ۹ مجهول مرتبط با تنش‌های رینولدز را از سیستم معادلات بقا حذف می‌کند [۱۹]. در مطالعه حاضر، برای مدل‌سازی دو عبارت مجهول نرخ واکنش از مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال گردابه استفاده شده است. البته، عبارت $\bar{\omega}_T$ به صورت زیر به نرخ واکنش در معادله عناصر مربوط می‌شود.

$$\bar{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \bar{\omega}_k \quad (13)$$

در مدل احتراقی اضمحلال ادی، نرخ واکنش به وسیله حرکات جریان آشفته کنترل می‌شود. به عبارت دیگر، واکنش شیمیایی به صورت مجموعه‌ای از گازهای سوخته و نسوخته دیده می‌شود که به وسیله گردابه‌های جریان آشفته حمل می‌شوند و احتراق آن‌ها وابسته به انرژی اختلاط در میدان جریان آشفته است. در این مدل نرخ واکنش عنصر i به صورت زیر معرفی می‌شود [۱۹].

$$\bar{\omega}_k = \vartheta'_k M W_k A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_p Y_p}{\sum_j \vartheta_j M W_j} \quad (14)$$

در این رابطه، ϑ'_k ضریب استوکیومتریک واکنش رفت عنصر k ، $M W_k$ جرم مولکولی عنصر k ، A و B ضرایب، $\sum_p Y_p$ جمع کسر جرمی تمامی محصولات احتراق و ϑ_j ضریب استوکیومتریک واکنش برگشت عنصر j است. این مدل برای جریان‌های با اعداد رینولدز و دامکالر^۱ بالا مناسب است. در مطالعه حاضر، واکنش شیمیایی دو مرحله‌ای پولیفک^۲ برای محاسبات اولیه حاضر استفاده شده است [۲۴].



نرخ واکنش در این دو واکنش عبارت است از:

$$\omega_1 = A_1 e^{-E_1/RT} \left[\frac{\rho Y_{CH_4}}{M W_{CH_4}} \right]^{0.2} \left[\frac{\rho Y_{O_2}}{M W_{O_2}} \right]^{1.3} \quad (17)$$

$$\omega_2 = A_2 e^{-E_2/RT} \left[\frac{\rho Y_{CO}}{M W_{CO}} \right]^{1.5} \left[\frac{\rho Y_{O_2}}{M W_{O_2}} \right]^{0.25} \quad (18)$$

در این روابط:

$$A_1 = 4.56e + 11 \quad , \quad E_1 = 2.03e + 8 \left(\frac{J}{kgmol} \right) \quad (19)$$

1. Damkohler
2. Polifke

$$A_2 = 3.16e + 12 \quad , \quad E_2 = 1.67e + 8 \left(\frac{J}{kgmol} \right) \quad (20)$$

در مقاله حاضر، برای گسسته‌سازی معادلات حاکم، از روش مرتبه دوم استفاده شده است. همچنین، کوپلینگ فشار سرعت به کمک روش سیمپل^۱ انجام شده است.

هندسه مورد بررسی

محفظه احتراق موتور IGT25 از ۱۸ مشعل EV^۲ نسل دوم، که به صورت حلقوی در کنار یکدیگر قرار گرفته، تشکیل شده است. در مطالعه حاضر، برای کاهش هزینه محاسباتی، یک بخش ۲۰ درجه‌ای از هندسه کلی، که حاوی یک مشعل است، به کمک نرم‌افزار فلونت (نسخه ۱۶) شبیه‌سازی شده است. شکل ۱ هندسه مورد استفاده در مطالعه حاضر را نشان می‌دهد. طول کلی محفظه حاضر بدون منتشرکننده^۳ و همچنین قطر آن به ترتیب ۰/۷ و ۰/۲ متر است. همچنین، مبدأ مختصات در مسئله حاضر در خروجی از مشعل در ابتدای محفظه در نظر گرفته شده است.

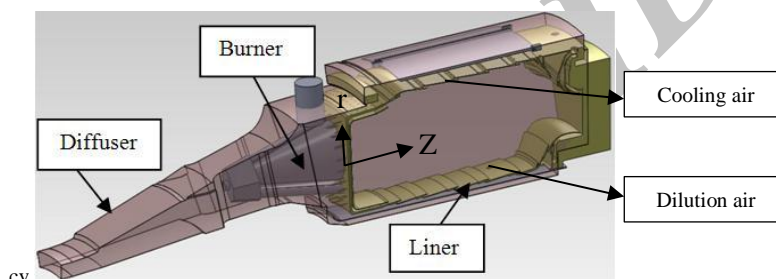


Figure 1- Schematic view of the computational domain
شکل ۱- طرحواره هندسه مورد مطالعه

شکل ۲ نمای مشعل EV را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل، در این مشعل، دو سری شیار وجود دارد (که البته یکی از آن‌ها در تصویر زیر مشخص است) که از آن‌ها هوا به داخل مشعل وارد می‌شود (شکل ۲-a). در پایین دست این شیارها، از طریق ۶۰ سوراخ ریز (۳۰ سوراخ در هر شیار)، سوخت اصلی مشعل تزریق می‌شود. بخش پایلوت مشعل در ابتدای آن قرار دارد که در شکل ۲-c نشان داده شده است. در این بخش، از ۶ سوراخ مربعی و ۶ سوراخ دایروی سوخت پایلوت و از اطراف ۶ سوراخ دایروی در قالب ورودی‌های دایروی، هوای پایلوت به ناحیه مرکزی مشعل تزریق می‌شود. در بارهای جزئی توربین، بیشتر سوخت از مسیر پایلوت مشعل وارد می‌شود. با افزایش دمای شعله و به سبب الزام کاهش آلایندگی NOx در بارهای بالای توربین، سهم توزیع سوخت از مسیر پایلوت کمتر شده و بیشینه سوخت از سوراخ‌های اصلی مشعل توزیع می‌شود. بدین ترتیب، با افزایش بار توربین، نسبت سوخت پایلوت به سوخت کل (PFR)^۴ کاهش می‌یابد. برای درک بهتر، نحوه توزیع سوخت از مسیرهای پایلوت و اصلی در شکل ۳ ترسیم شده است.

به طور کلی، حدود ۸۰ درصد از دبی هوای محفظه احتراق از ۲ شیار مشعل وارد می‌شود که به خاطر شکل خاص آن‌ها به عنوان چرخاننده^۵ عمل می‌کند و حدوداً ۲۰ درصد از هوای محفظه صرف خنک‌کاری‌ها و رقیق‌سازی می‌شود. ذکر این نکته لازم است که به سبب احتراق رقیق‌سوز در محفظه احتراق DLE، هوای رقیق‌سازی بسیار کم است. تصویر ارائه شده در شکل ۴

1. SIMPLE
2. EnVironmental (EV) burner
3. Diffuser
4. Pilot Fuel Ratio
5. Swirler

هندس و موقعیت مجاری ورود هوا برای خنک‌کاری و رقیق‌سازی را به‌خوبی نمایش می‌دهد. شایان ذکر است که ضخامت جداره محفظه احتراق ۲ میلی‌متر است. شرایط مرزی مسئله حاضر به‌همراه شرایط کاری محفظه در جدول ۱ نشان داده شده است.

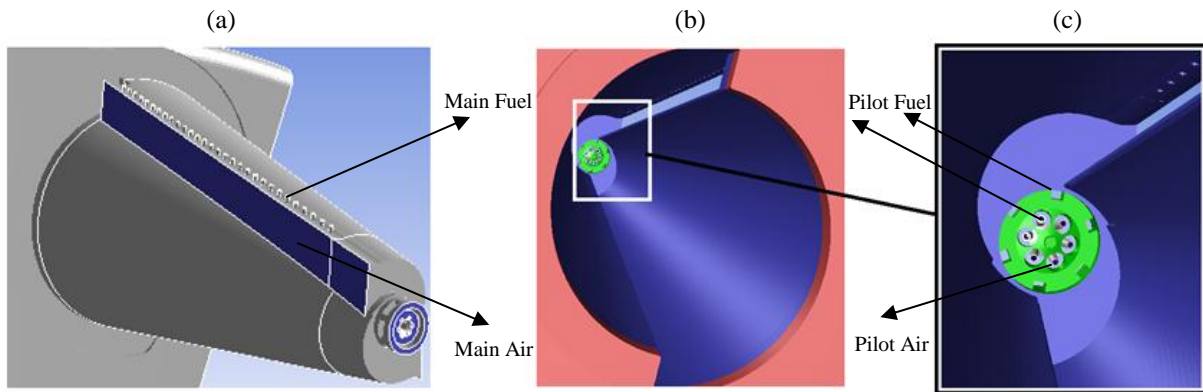


Figure 2- Schematic view of (a) EV burner, (b) inside view of the burner, and (c) pilot part of the burner
 شکل ۲- طرحواره (a) مشعل EV، (b) نمای داخل مشعل و (c) بخش پیلوت مشعل

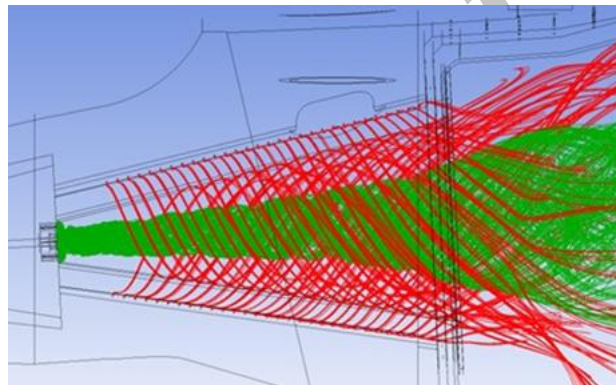


Figure 3- Fuel path lines (green: pilot and red: main fuel path lines)
 شکل ۳- مسیرهای سوخت در مشعل (سبز: مسیر تزریق سوخت پیلوت و قرمز: مسیر تزریق سوخت اصلی)

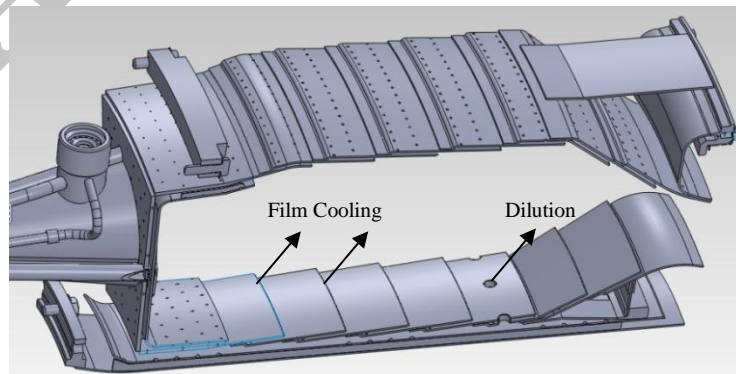


Figure 4- Combustor specifications
 شکل ۴- مشخصات محفظه احتراق

Table 1- Operating and boundary conditions

جدول ۱- شرایط کاری و مرزی

Total air mass flow rate (kg/s)	4.4
Burner air mass flow rate	3.3
Total Fuel mass flow rate	0.08
Pilot fuel mass flow rate (kg/s)	0.014
Main fuel mass flow rate	0.069
Inlet air temperature (K)	700
Inlet fuel temperature (K)	300
Combustor pressure (bar)	13.5
Combustor pressure loss (%)	6%
Inlet air velocity at burner slots (m/s)	80
Turbine inlet temperature (K)	1500

برای شبکه‌بندی هندسه حاضر، از $3/4$ میلیون شبکه محاسباتی ترکیبی مثلثی و مربعی استفاده شده است. شبکه‌بندی در نزدیکی دیواره‌ها، ورودی‌های هوای خنک‌کاری و هوای رقیق‌سازی، مجاری ورودی هوا و سوخت، محل شعله و لایه‌های برشی ریز شده است. به‌منظور شبیه‌سازی دقیق لایه مرزی، در نزدیکی دیواره‌ها شبکه از 10 لایه با نرخ رشد $1/2$ تشکیل شده است. شکل ۵ قطعی از شبکه محاسباتی مورد استفاده را نشان می‌دهد. همان‌طور که این شکل نشان می‌دهد، در اکثر نقاط محفظه از شبکه محاسباتی سازمان‌یافته استفاده شده است. این در حالی است که در مشعل به‌دلیل وجود پیچیدگی‌های هندسی از شبکه‌بندی بی‌سازمان استفاده شده است. این شبکه بی‌سازمان در ابتدای ورود به محفظه به‌خوبی با شبکه سازمان‌یافته محفظه، همگون‌سازی شده تا کشیدگی سلول‌های محاسباتی حداقل شود. همچنین، شبکه محاسباتی در ورودی‌های سوخت به‌نحوی انتخاب شده است که در هر سوراخ ورودی سوخت 12 گره محاسباتی قرار گیرد. اندازه متوسط المان‌های انتخاب‌شده در کل دامنه حل 3 میلی‌متر است. به‌منظور ارزیابی استقلال شبکه، محاسبات برای شبکه‌ها با تعداد $2/4$ ، $5/7$ و $8/8$ میلیون شبکه نیز انجام شده است. شکل ۶ توزیع شعاعی سرعت محوری بی‌بعدشده با یک سرعت مبنا ($U_0=10\text{m/s}$) در محفظه احتراق مورد بررسی در شرایط حداکثر توان و برای شبکه‌های مختلف در مقطع بالادست شعله در داخل مشعل (در فاصله 22 میلی‌متری از خروجی مشعل) را نشان می‌دهد. با توجه به این نتایج، شبکه با $3/4$ میلیون شبکه محاسباتی برای مطالعات حاضر کافی است.

شرط مرزی ورودی به دامنه حل دبی ورودی به منتشرکننده است که از حل چرخه‌ای توربین به‌دست آمده است. این هوا در پایین‌دست طبق حل عددی بین مشعل، مجاری خنک‌کاری و همچنین رقیق‌سازی تقسیم می‌شود. دیگر شرط مرزی ورودی به هندسه مورد بررسی دبی سوخت است. سوخت از طریق دو مسیر پایلوت و اصلی به مشعل تزریق می‌شود. نسبت دبی سوخت پایلوت به سوخت اصلی در بارهای مختلف طبق الگوریتم خاصی تغییر می‌کند. سطح آشفته‌گی جریان‌های ورودی به محفظه 10 درصد فرض شده است. شرط مرزی خروجی هندسه مورد بررسی نیز، فشار در نظر گرفته شده است. این فشار با توجه به حل چرخه‌ای توربین تنظیم شده است.

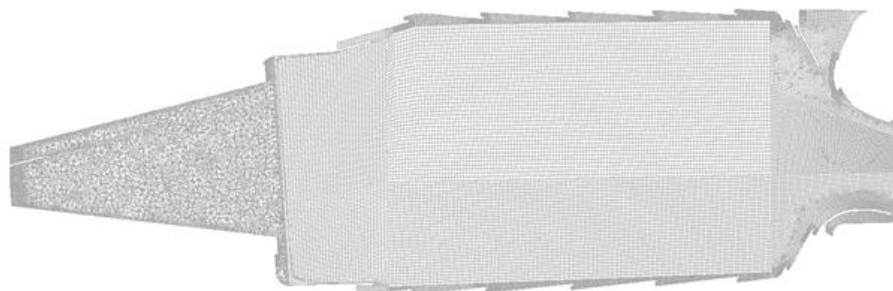


Figure 5- Computational mesh

شکل ۵- شبکه محاسباتی

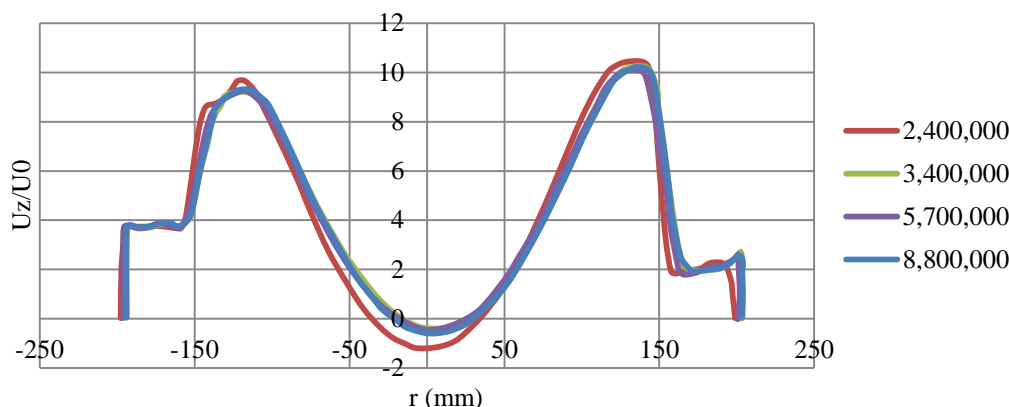


Figure 7- Grid sensitivity analysis on radial distribution of the axial velocity upstream of the flame front

شکل ۶ - تحلیل حساسیت شبکه محاسباتی در قالب توزیع سرعت در بالادست شعله در شبکه‌های مختلف

نتایج

در این قسمت، ابتدا کلیاتی از میدان جریان و شعله در محفظه احتراق توربین IGT25 آورده می‌شود. سپس، در ادامه، نتایج حل عددی برای آلاینده CO ارائه خواهد شد. همان‌طور که در ادامه بررسی می‌شود، برای پیش‌بینی آلاینده CO از واکنش شیمیایی دومرحله‌ای پولیفک استفاده شده است. هرچند، همان‌طور که در ادامه آورده می‌شود، این واکنش شیمیایی توانایی پیش‌بینی CO را ندارد. به همین منظور، واکنش شیمیایی پولیفک باهدف پیش‌بینی CO بهینه‌سازی خواهد شد. برای اعتبارسنجی این نتایج، از داده‌های تجربی موجود برای موتور استفاده شده است.

میدان جریان محفظه احتراق توربین IGT25

شکل ۷ توزیع سرعت محوری و شکل شعله را در محفظه احتراق حاضر نشان می‌دهد. خطوط سیاه نشان داده شده در شکل مرزهای سرعت محوری صفر در جریان را نشان می‌دهد. از این خطوط برای نشان دادن نواحی بازگردشی استفاده شده است. با توجه به این شکل، مشخص است که یک ناحیه بازگردشی قوی در قسمت مرکزی محفظه وجود دارد. این ناحیه بازگردشی را ناحیه بازگردشی مرکزی (CRZ) می‌نامیم. با توجه به نتایج، نواحی بازگردشی دیگری در گوشه‌های محفظه ملاحظه می‌شود که به آن‌ها ناحیه بازگردشی خارجی (ORZ) می‌گویند. از طرف دیگر، توزیع دما در این شکل نشان می‌دهد که شعله دارای شکلی کاسه‌ای است که در میانه ناحیه بازگردشی پایدار شده است. شعله، همچنین، در نواحی کناری محفظه به کمک نواحی بازگردشی خارجی پایدار می‌شود.

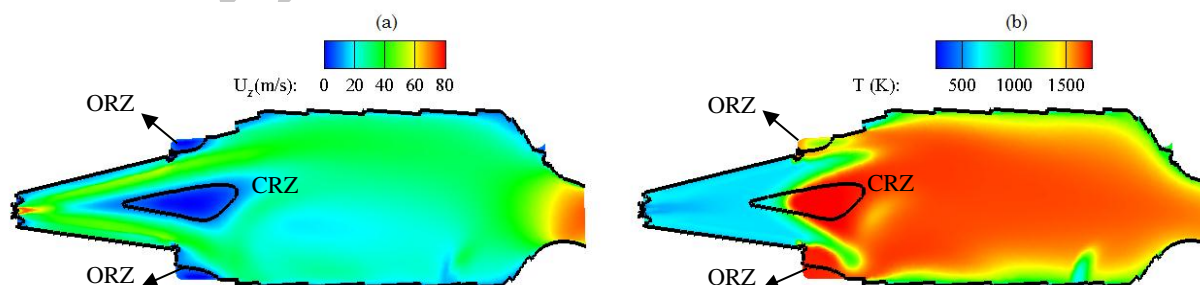


Figure 7- Spatial distribution of (a) axial velocity and (b) temperature at full load condition

شکل ۷ - توزیع محلی (a) سرعت محوری و (b) دما در شرایط حداکثر توان

1. Central Recirculation Zone
2. Outer Recirculation Zone

در مسئله حاضر، دلیل بروز ناحیه بازگردشی داخلی به صورت زیر خلاصه شده است. در محفظه مورد مطالعه، بخش اعظمی از جریان سوخت و هوا از شیارهایی که در بدنه مشعل تعبیه شده‌اند به داخل مشعل تزریق می‌شوند. همچنین، بخش اندکی از سوخت و هوا از قسمت پایلوت به داخل مشعل و محفظه تزریق می‌شود. شکل ۸ خطوط مسیر تزریق شده از قسمت‌های اصلی و پایلوت مشعل را نشان می‌دهد.

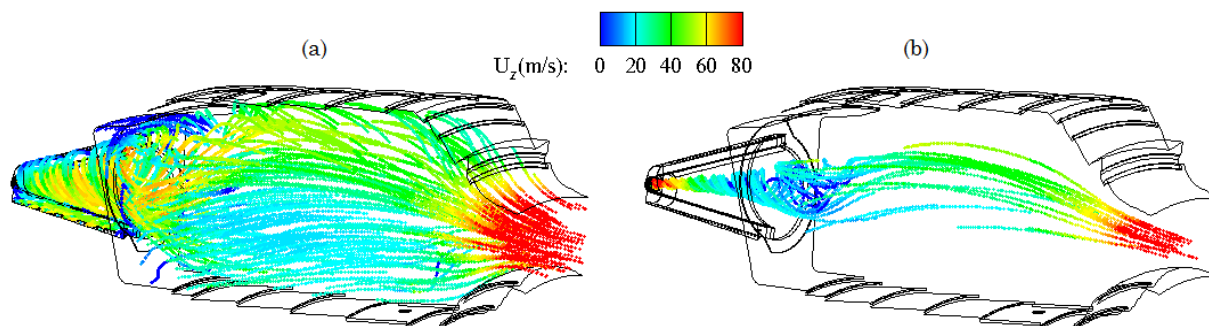


Figure 8- Flow pathlines injected from (a) the main and (b) pilot parts of the burner, colored by the axial velocity
 شکل ۸- خطوط مسیر جریان تزریقی: (a) از قسمت اصلی و (b) از قسمت پایلوت مشعل، رنگ شده به کمک سرعت محوری

همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، تزریق هوا و سوخت اصلی در این مشعل در راستای مماسی انجام می‌شود. به عبارت دیگر، جریان تزریقی تکانه محوری کمی در راستای محور اصلی محفظه (Z) دارد، اما وجود سوخت و هوای پایلوت باعث می‌شود که جریان مذکور به سمت خروجی مشعل کشیده شود. با حرکت این جریان به سمت خروجی مشعل و به دلیل وجود نیروهای گریز از مرکز ایجاد شده در اثر حرکت پیچشی، یک گرادیان فشار شعاعی قوی در مشعل ایجاد می‌شود که به نوبه خود در پایین دست باعث ایجاد یک گرادیان فشار محوری می‌شود. این گرادیان فشار محوری موجب کاهش سرعت محوری جریان می‌شود. این کاهش سرعت تا جایی ادامه می‌یابد که سرعت محوری در نقطه‌ای در محفظه صفر شود. با ساکن شدن موضعی جریان در محفظه، جریان از این نقطه شروع به بازگردش به سمت مشعل می‌کند. این جریان بازگردشی تا جایی ادامه می‌یابد که سرعت جریان محوری منفی با سرعت محوری جریان تزریقی از قسمت پایلوت مشعل برابر شود. این نقطه، نقطه سکون دوم جریان است. لذا، وجود این دو نقطه سکون باعث می‌شود تا جریان گرم پایین دست مرتباً به سمت بالادست شعله بازگردش کند. این امر موجب پیش گرم کردن و در نهایت مشتعل کردن سوخت و هوای تازه مشعل می‌شود. در حقیقت، وجود این پدیده پایدارکننده شعله در این نوع از مشعل‌هاست. این بررسی‌ها نشان می‌دهد که سازوکار پایداری شعله در محفظه احتراق حاضر به وسیله بازچرخش جریان در نواحی بازگردشی است.

همان‌طور که شکل ۷ نشان می‌دهد، درست در پایین دست شعله، یک ناحیه با دمای پایین وجود دارد. این ناحیه در اثر حرکت پیچشی (در جهت پادساعت گرد) جریان خروجی از مشعل به وجود می‌آید. برای تشریح بهتر این پدیده، شکل ۹ توزیع سرعت محوری، سرعت مماسی و دما در صفحات مختلف عرضی در محفظه و مشعل مورد مطالعه را نشان می‌دهد. شکل ۹-a نشان می‌دهد که جهت پیشش جریان در جهت پادساعت گرد است. از طرفی، شروط مرزی اطراف این محفظه دوره‌ای^۱ فرض شده است. بنابراین، جریان از مرزهای سمت چپ و راست با یکدیگر تبادل می‌شود. این امر باعث می‌شود که جریان سرد پرسرعت قسمت فوقانی و سمت راست به قسمت چپ و نهایتاً قسمت مرکزی محفظه حاضر منتقل شود (شکل ۹-b و c). استفاده از شرط مرزی دوره‌ای برای محفظه حاضر با توجه به تقارن هندسه در جهت مماسی کاملاً معتبر است.

1. Periodic

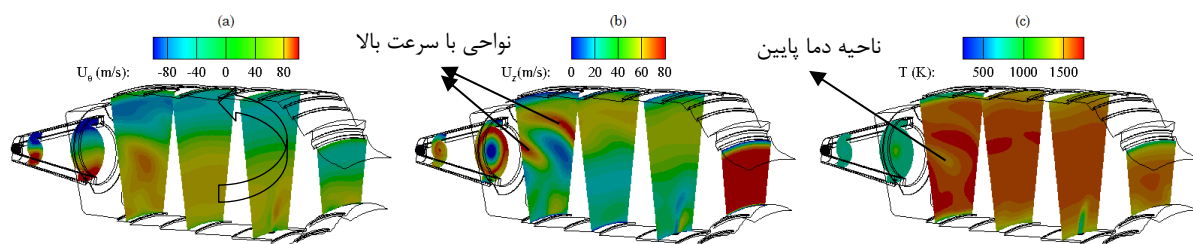


Figure 9- Spatial distribution of (a) tangential velocity, (b) axial velocity and (c) temperature at various planes of the computational domain

شکل ۹- توزیع محلی (a) سرعت مماسی، (b) سرعت محوری و (c) دما در مقاطع مختلف دامنه حل

پیش بینی آلاینده CO

در این قسمت، ابتدا به منظور بررسی عملکرد واکنش‌های شیمیایی کلی^۱، همانند واکنش شیمیایی پولیفک (معادلات ۱۵ و ۱۶)، محفظه احتراق به صورت یک راکتور کاملاً آمیخته^۲ در نظر گرفته شده است. سازوکار GRI3.0 نیز به عنوان سازوکار مرجع و دقیق در این تحلیل‌ها استفاده شده است. به منظور مقایسه بهتر سازوکارهای کاهش یافته با سازوکار GRI3.0، از چند سازوکار کاهش یافته دیگر از جمله واکنش‌های شیمیایی کلی جونز-لیندستد [۲۵]، دربر-وستبروک [۲۶] و دربر-گلسمن [۲۷] نیز در این تحلیل استفاده شده است. تمامی شرایط راکتور انتخابی (حجم، دما، دبی، فشار و غیره) متناظر با شرایط حاکم بر محفظه احتراق مورد بررسی است. شکل ۱۰ توزیع دما و کسر جرمی آلاینده CO (در حضور ۱۵ درصد اکسیژن) در سازوکارهای مختلف ذکر شده و همچنین سازوکار GRI3.0 در خروجی راکتور کاملاً آمیخته را نشان می‌دهد. مقایسه نتایج حاصل از واکنش‌های شیمیایی کلی و سازوکار GRI نشان می‌دهد که سازوکارهای کاهش یافته می‌توانند دما را برای مخلوط‌های سوخت و هوا با نسبت هم‌ارزی $0.42 < \phi < 0.5$ با دقت قابل قبولی پیش‌بینی کنند. در میان این سازوکارها، سازوکار جونز-لیندستد خطای بسیار بالایی در پیش‌بینی دما دارد. اما، از طرف دیگر، نتایج نشان می‌دهد که همه سازوکارهای اشاره شده آلاینده CO را با خطای بسیار بالایی تخمین می‌زنند. دلیل این امر آن است که در این واکنش‌ها، (همانند معادلات ۱۵ و ۱۶) ابتدا در واکنش اول CO تولید می‌شود، سپس، در واکنش دوم این آلاینده تماماً به CO₂ تبدیل می‌شود.

به منظور رفع این نقص، در مطالعه حاضر، واکنش شیمیایی پولیفک به نحوی بهینه‌سازی شده است که بتواند آلاینده CO را به خوبی پیش‌بینی کند. برای این کار، ابتدا یک عبارت وابسته به دما (T^β) در نرخ واکنش (واکنش ۱۶) ضرب می‌شود. سپس، با استفاده از الگوریتم شکل ۱۱، توان عبارت دمایی، یعنی β ، برای واکنش پولیفک بهینه‌سازی می‌شود. به طور مثال، برای محفظه حاضر، این ضریب برای شرایط مختلف توربین از جمله حداکثر توان، بار ۶۵ درصد و بار ۵۰ درصد به ترتیب ۰/۴۴، ۰/۵ و ۰/۹۱- است. شکل ۱۲ توزیع محلی نسبت هم‌ارزی و محل شعله را در محفظه احتراق حاضر نشان می‌دهد. به منظور نشان دادن محل شعله، از نرخ واکنش‌های شیمیایی (۱۰ درصد نرخ واکنش حداکثر) استفاده شده است [۲۸]. همان‌طور که نتایج نشان می‌دهد، اگرچه در بررسی‌های حاضر PFR بین صفر و یک است، نسبت هم‌ارزی بالادست شعله در تمامی نواحی شعله تقریباً ثابت است. بنابراین، می‌توان از یک ضریب β برای تمامی نواحی شعله استفاده کرد.

برای این منظور، در هر نسبت هم‌ارزی، ابتدا شرایط اولیه راکتور کاملاً آمیخته انتخاب شده، سپس، این راکتور با استفاده از واکنش شیمیایی GRI3.0 حل شده و مقدار کسر مولی آلاینده CO در حضور ۱۵ درصد اکسیژن در خروجی از راکتور اندازه‌گیری می‌شود. حال، یک مقدار اولیه برای پارامتر β در نظر گرفته می‌شود و کسر مولی آلاینده CO در حضور ۱۵ درصد اکسیژن با استفاده از واکنش شیمیایی تغییر داده شده پولیفک در خروجی راکتور مربوطه محاسبه می‌شود. اگر اختلاف CO

1. Global
2. Perfectly Stirred Reactor (PSR)

واکنش شیمیایی تغییر داده شده و واکنش شیمیایی GRI3.0 کمتر از ۰/۱ درصد بود، بهینه‌سازی به پایان می‌رسد. در غیر این صورت، مقدار β به‌روزرسانی شده و دوباره مراحل قبل تکرار می‌شود.

شکل ۱۳ تغییرات دما و آلاینده CO برحسب نسبت هم‌ارزی را برای واکنش شیمیایی ترفیع داده‌شده و واکنش شیمیایی GRI3.0 نشان می‌دهد. به‌منظور مقایسه بهتر، واکنش‌های شیمیایی پولیفک، جونز-لیندستد، دریر-وستبروک و دریر-گلسمن نیز در این شکل آورده شده است. با مقایسه نتایج واکنش‌های شیمیایی مختلف با واکنش شیمیایی GRI3.0، مشخص است که واکنش شیمیایی ترفیع داده‌شده به‌خوبی مقدار CO را پیش‌بینی می‌کند. این واکنش شیمیایی، همچنین، مقدار دما را بسیار بهتر از واکنش‌های شیمیایی دیگر پیش‌بینی می‌کند.

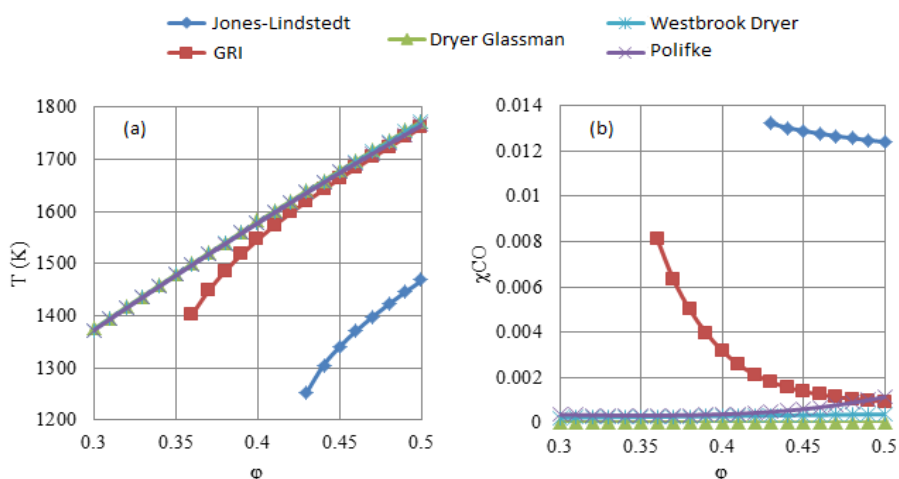


Figure 10- Variation of (a) temperature and (b) CO emission (in the presence of 15% O₂) as functions of equivalence ratio for different global mechanisms

شکل ۱۰ - تغییرات (a) دما و (b) آلاینده CO (در حضور ۱۵٪ اکسیژن) برحسب نسبت هم‌ارزی برای واکنش‌های شیمیایی کلی مختلف

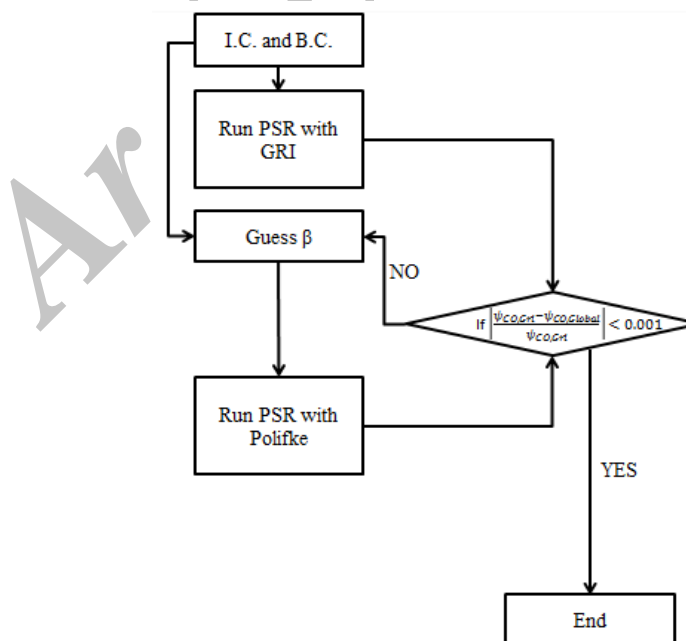


Figure 11- Utilized algorithm for modifying the global mechanism to capture CO emission
شکل ۱۱- الگوریتم استفاده‌شده برای ترفیع واکنش شیمیایی کلی جهت پیش‌بینی آلاینده CO

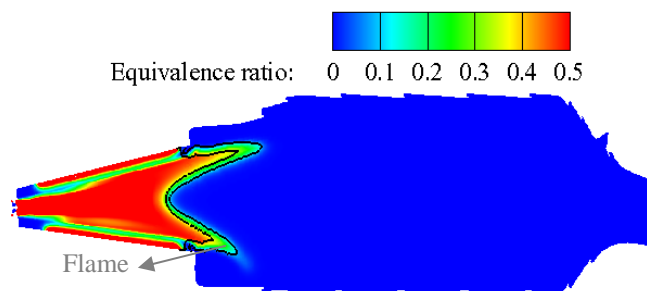


Figure 12- Spatial distribution of equivalence ratio and flame position (lines)
 شکل ۱۲- توزیع محلی نسبت هم‌ارزی و محل شعله (خطوط)

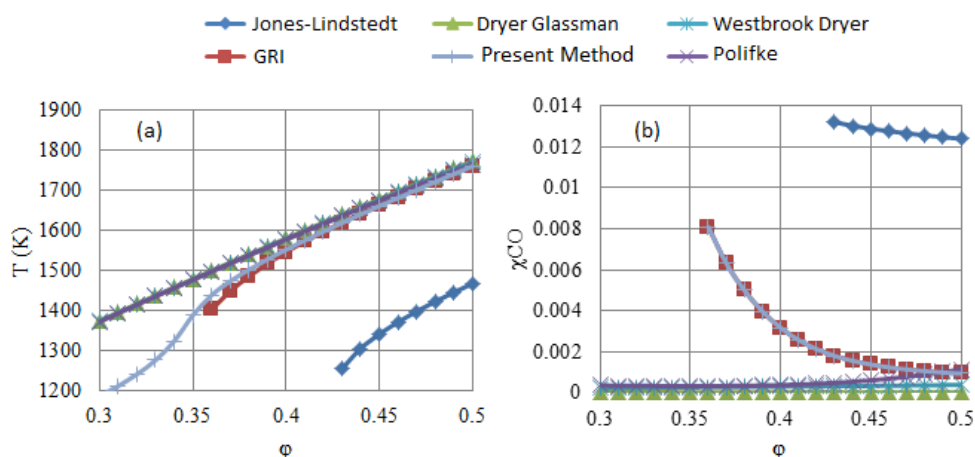


Figure 13- Variation of (a) temperature and (b) CO emission (in the presence of 15% O₂) as functions of equivalence ratio for different global mechanisms and present modified mechanism
 شکل ۱۳- تغییرات (a) دما و (b) آلاینده CO (در حضور ۱۵٪ اکسیژن) برحسب نسبت هم‌ارزی برای واکنش‌های شیمیایی کلی مختلف و واکنش شیمیایی ترفیع داده‌شده

شکل ۱۴ توزیع آلاینده CO و محل شعله در شرایط استفاده از واکنش شیمیایی اصلی پولیفک و واکنش شیمیایی ترفیع داده‌شده در این مقاله را نشان می‌دهد. برای نشان دادن محل شعله در این شکل‌ها، از خطوط هم‌تراز نرخ واکنش (معادل ۱ درصد حداکثر نرخ واکنش) استفاده شده است. با توجه به این شکل، مشخص است که واکنش شیمیایی تصحیح‌شده در مطالعه حاضر، مقدار CO را بیش از واکنش شیمیایی پولیفک پیش‌بینی می‌کند. البته تغییر واکنش شیمیایی استفاده‌شده تغییر محسوسی در شکل ناحیه کاسه‌ای شعله ایجاد نمی‌کند، هرچند باعث بالارفتن نرخ واکنش در نواحی با جریان بازگردشی در کناره‌های محفظه می‌شود. با توجه به نتایج، مشخص است که آلاینده CO در ناحیه شعله ایجاد شده و سپس، با توجه به واکنش دوم در واکنش شیمیایی پولیفک، در پایین‌دست شعله به سرعت به CO₂ تبدیل می‌شود. نتایج، همچنین، نشان می‌دهد که در بالادست شعله کسر مولی آلاینده CO صفر نیست. دلیل وجود این CO در ناحیه بالادست شعله بازگردش جریان از پایین‌دست است که باعث می‌شود مقداری از CO تشکیل شده در شعله به ناحیه بالادست آن منتقل شود.

همان‌طور که پیش‌تر گفته شد، توربین IGT25 نمونه بومی توربین SGT-600 شرکت زیمنس است. لذا، در این قسمت، برای اعتبارسنجی نتایج حل‌های عددی از داده‌های تجربی موتور SGT-600 استفاده شده است. در شکل ۱۵ مقادیر شبیه‌سازی‌های عددی حاضر به کمک واکنش شیمیایی دومرحله‌ای پولیفک و واکنش شیمیایی ترفیع داده‌شده حاضر برحسب نتایج تجربی رسم شده است. در این شکل، مقادیر آلاینده در توان‌های مختلف توربین با یکدیگر مقایسه شده است. ذکر این

نکته لازم است که در توان‌های ۶۵ درصد و ۵۰ درصد در پیچه کنارگذر^۱ محفظه باز است. تمامی نتایج عددی و همچنین مقادیر عددی، با استفاده از یک عدد واحد، بی‌بعدسازی شده است. در این شکل، محور عمودی نشان‌دهنده شبیه‌سازی‌های حاضر و محور افقی نمایانگر داده‌های تجربی است. از آنجا که مقادیر آلاینده CO حاصل از شبیه‌سازی‌ها برحسب نتایج تجربی متناظر رسم شده است، طبیعی است هرچقدر نقاط این نمودار به خط $y=x$ مشخص شده در شکل زیر نزدیک‌تر باشد، شبیه‌سازی‌ها با نتایج تجربی همخوانی بیشتری خواهند داشت.

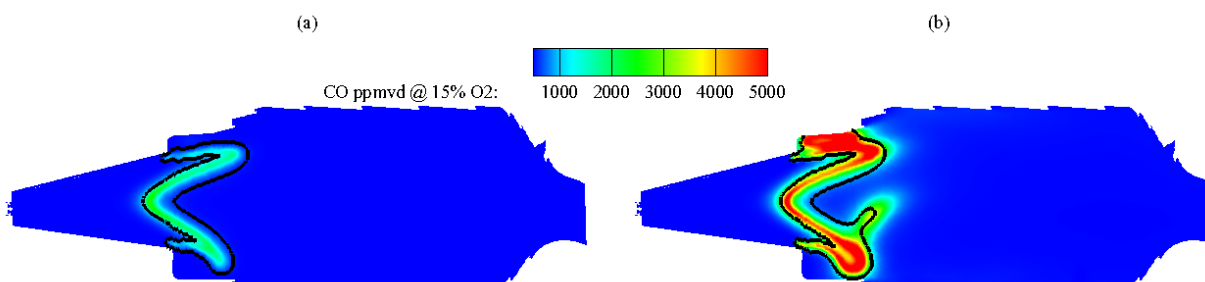


Figure 14- Spatial distribution of CO mole fraction (in the presence of 15% O₂) and iso-line of reaction rate (1% of maximum reaction rate) at full load operating condition for simulations with (a) Polifke mechanism and (b) the present modified mechanism
 شکل ۱۴- توزیع محلی کسر مولی CO و خطوط هم‌تراز نرخ واکنش (۱٪ حداکثر نرخ واکنش) استخراج‌شده از شبیه‌سازی‌ها به کمک (a) واکنش شیمیایی پولیفک و (b) واکنش شیمیایی ترفیح داده‌شده حاضر در شرایط حداکثر توان موتور

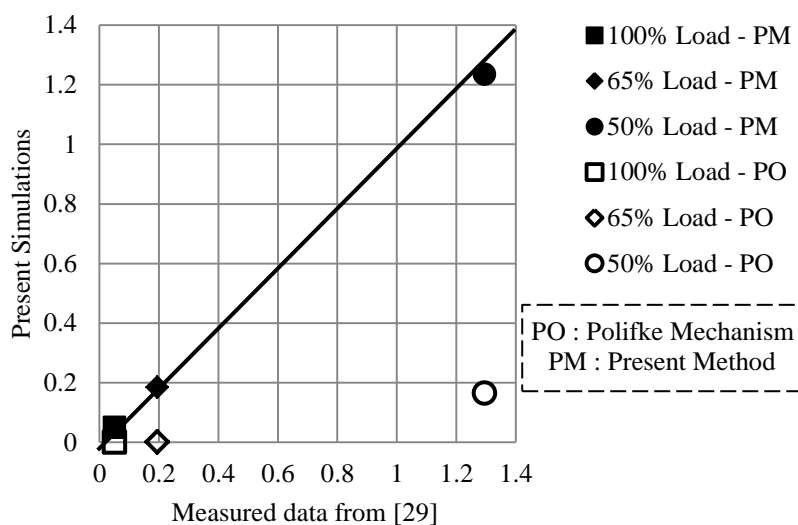


Figure 15- Comparison of the predicted CO emission using the present simulations with the experimental data at various operating conditions

شکل ۱۵- مقایسه آلاینده پیش‌بینی شده CO به کمک شبیه‌سازی‌های عددی با داده‌های تجربی توربین در شرایط کاری مختلف

با توجه به این نتایج، مشخص است که واکنش شیمیایی دومرحله‌ای پولیفک مقدار CO خروجی از محفظه را بسیار کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند. این واکنش شیمیایی به ترتیب مقدار CO در شرایط حداکثر توان، بار ۶۵ درصد و بار ۵۰ درصد را ۶، ۶ و ۴ مرتبه کمتر از مقدار تجربی پیش‌بینی می‌کند. اما، از طرف دیگر، ایجاد تغییرات حاضر در واکنش شیمیایی پولیفک باعث شده است تا مقدار تولید CO در این سه شرایط، یعنی حداکثر توان، بار ۶۵ درصد و بار ۵۰ درصد، با خطایی

1. Bypass

کمتراز ۱۰ درصد نسبت به نتایج تجربی پیش‌بینی شود. نتایج، همچنین، نشان می‌دهد که با کاهش دور توربین (که متناظر با کاهش توان توربین است)، تولید آلاینده CO به شدت افزایش می‌یابد. به‌طور مثال، در شرایط بار ۵۰ درصد توان، نسبت به شرایط حداکثر توان، تولید آلاینده CO ۲۵ برابر شده است.

به‌منظور بررسی اثر مکانیزم شیمیایی و همچنین بار توربین بر مشخصات شعله، توزیع دما در صفحه مرکزی محفظه در شرایط کاری مختلف محفظه با استفاده از مکانیزم پولیفک و مکانیزم ترفیع داده‌شده حاضر در شکل ۱۶ نشان داده شده است. با توجه به این نتایج، می‌توان ملاحظه کرد که شکل شعله همواره به‌صورت کاسه‌ای شکل است. کاهش بار توربین از ۱۰۰ درصد به ۵۰ درصد باعث می‌شود که شعله در راستای شعاعی نامتقارن شود. به‌عبارت دیگر، با کاهش بار توربین، قسمت بالای شعله کمی ضعیف‌تر می‌شود. طبیعتاً، با کاهش بار توربین دما در محفظه احتراق کاهش می‌یابد. نتایج، همچنین، نشان می‌دهد که با کاهش بار توربین شعله کمی به پایین دست منتقل می‌شود. بررسی نتایج در مکانیزم‌های مختلف نشان می‌دهد که استفاده از مکانیزم ترفیع داده‌شده حاضر به‌جای مکانیزم پولیفک باعث تغییر خاصی در نحوه پایداری شعله و یا محل پایداری آن نمی‌شود. بنابراین، می‌توان گفت که اصلی‌ترین اثر مکانیزم ترفیع داده‌شده تصحیح پیش‌بینی تولید آلاینده CO است و بر مشخصات اصلی شعله تأثیری ندارد.

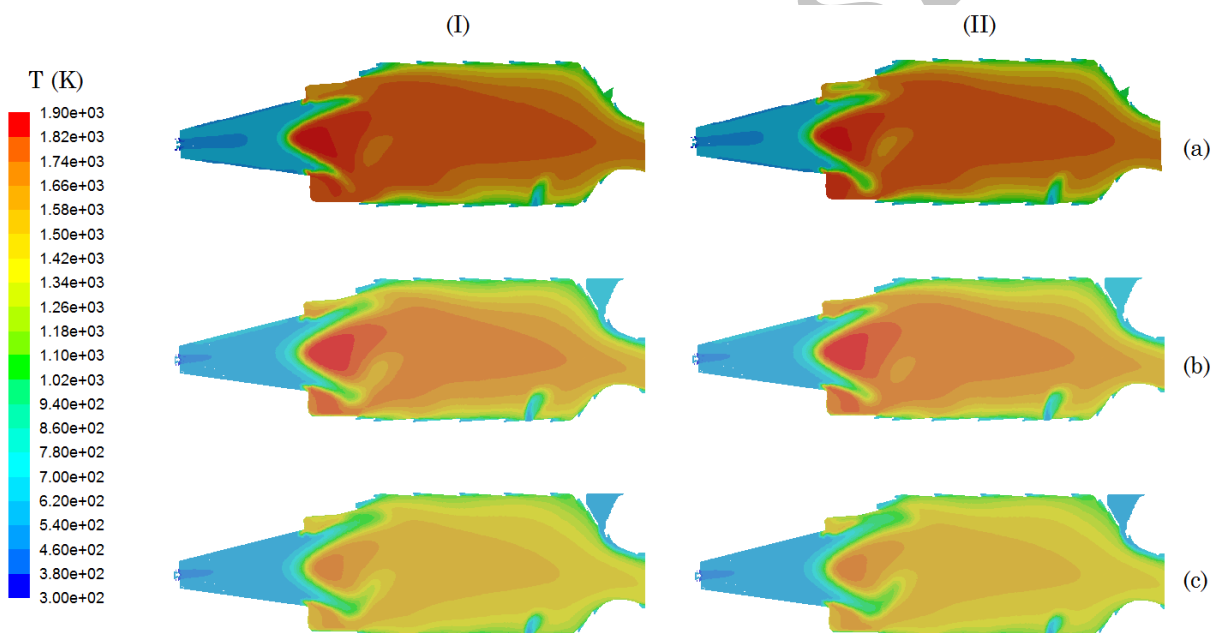


Figure 16- Spatial distribution of temperature at (a) 100%, (b) 65% and (c) 50% loads using (I) Polifke and (II) present mechanisms
 شکل ۱۶- توزیع محلی دما در بارهای (a) ۱۰۰ درصد، (b) ۶۵ درصد و (c) ۵۰ درصد به کمک مکانیزم‌های (I) پولیفک و (II) حاضر

نتیجه‌گیری

در مطالعه حاضر، هدف اولیه شبیه‌سازی میدان جریان در محفظه احتراق توربین گاز IGT25 بوده است. محفظه احتراق این توربین گاز زمینی ۲۵ مگاواتی متشکل از ۱۸ مشعل EV نسل دوم است. پس از این تحقیقات اولیه، هدف اصلی مطالعه حاضر، پیش‌بینی آلاینده مونوکسید کربن در محفظه احتراق مذکور است. برای این منظور، در مقاله حاضر، از مدل جریان آشفته دومعادله‌ای $k - \epsilon$ و مدل احتراقی نرخ محدود اضمحلال ادی به کمک یک واکنش کاهش‌یافته دومرحله‌ای استفاده شده است. بررسی‌های اولیه نشان می‌دهد که مدل‌های احتراقی نرخ محدود به‌همراه واکنش شیمیایی کلی توانایی پیش‌بینی آلاینده CO

را ندارد. برای رفع این نقص، در مطالعه حاضر، واکنش شیمیایی کلی بهینه شده تا بتواند آلاینده CO را در محفظه احتراق به خوبی پیش‌بینی کرد. نتایج شبیه‌سازی‌ها به کمک این واکنش شیمیایی بهینه نشان می‌دهد که این واکنش شیمیایی می‌تواند به خوبی آلاینده CO را در محفظه احتراق موتور IGT25 پیش‌بینی کند.

منابع

1. T. C. Liewwen and V. Yang, *Gas Turbine Emissions*, Cambridge University Press, New York, 2013.
2. P. Jansohn, *Modern Gas Turbine Systems: High Efficiency, Low Emission, Fuel Flexible Power Generation*, Woodhead Publishing Limited, Sawston, 2013.
3. A. H. Epstein, "Aircraft Engines' Needs from Combustion Science and Engineering," *Combustion and Flame*, 159, 2012, pp. 1791-1792.
4. A. B. Lebedev, A. N. Secundov, A. M. Starik, N. S. Titova, and A. M. Schepin, "Modeling Study of Gas-turbine Combustor Emission", *Proceedings of Combustion Institute*, 32, 2009, pp. 2941-2947.
5. J. Park, T. H. Nguyen, D. Joung, K. Y. Huh, and M. Ch. Lee, "Prediction of NOx and CO Emissions from an Industrial Lean-Premixed Gas Turbine Combustor Using a Chemical Reactor Network Model," *Energy Fuels*, 27, 2013, pp. 1643-1651.
6. V. Fichet, M. Kanniche, P. Pilon, and O. Gicquel, "A Reactor Model for Predicting NOx Emissions in Gas Turbines," *Fuel*, 89, 2010, pp. 2202-2210.
7. R. F. D. Monaghan, R. Tahir, G. Bourque, R. L. Gordon, A. Cuoci, T. Faravelli, A. Frassoldati, and H. J. Curran, "Detailed Emissions Prediction for a Turbulent Swirling Non-premixed Flame," *Energy Fuels*, 28, 2014, pp. 1470-1488.
8. E. M. M. Orbegoso, C. D. Romeiro, S. B. Freire, and L. F. F. da Silva, "Emissions and Thermodynamic Performance Simulation of an Industrial Gas Turbine," *Journal of Propulsion and Power*, 27, 2011, pp. 78-93.
9. S. Goke, M. Furi, G. Bourque, B. Bobusch, K. Gockeler, O. Kruger, S. Schimek, S. Terhaar, and C.O. Paschereit, "Influence of Stream Dilution on the Combustion of Natural Gas and Hydrogen in Premixed and Rich-quench-lean Combustors," *Fuel Process Technology*, 107, 2013, pp. 14-22.
10. S. A. Drennan, C. Chou, A. F. Shelburn, D. W. Hodgson, C. Wang, C. V. Naik, E. Meeks, and H. Karim, "Flow Field Driven Equivalent Reactor Networks for Accurate Chemistry Simulation in Gas Turbine Combustors," *ASME Paper* 2009-59861, Orlando, USA, 2009.
11. F. Biagioli and F. Guthe, "Effect of Pressure and Fuel-air Unmixedness on NOx Emissions from Industrial Gas Turbine Burners," *Combustion and Flame*, 151, 2007, pp. 274-288.
12. V. D. Vasil'ev, L. A. Bulysova, and A. L. Berne, "Effect of the Air-fuel Mixing on the NOx Yield in a Low-emission Gas-turbine Plant Combustor," *Thermal Engineering*, 63, 2016, pp. 246-252.
13. A. Bhargava, D. W. Kendrick, M. B. Colket, W. A. Sowa, K. H. Casleton, and D. J. Maloney, "Pressure Effect on NOx and CO Emissions in Industrial Gas Turbines," *ASME Paper* 2000-GT-0097, Munich, Germany, 2000.
14. M. A. Soroudi, S. Montazerinejad, M. Shahsavari, E. Mollahasanzadeh, M. Yazdani, and Y. Bagheri, "Modeling of Pollutant Emissions in an Industrial Gas Turbine Combustor," *8th European Combustion Meeting*, Dubrovnik, (Accepted), 2017.
15. D. L. Allaire, I. A. Waitz, and K. E. Wilcox, "A Comparison of Two Methods for Predicting Emissions from Aircraft Gas Turbine Combustors," *ASME Paper* GT2007-28346, Montreal, Canada, 2007.
16. A. M. Elkady, J. Herbon, D. M. Kalitan, G. Leonard, R. Akula, H. Karim, and M. Hadley, "Gas Turbine Emission Characteristics in Perfectly Premixed Combustion," *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power*, 134, No. 061501, 2012, pp. 1-7.
17. P. Gokulakrishnan, C. C. Fuller, R. G. Joklik, and M. S. Klassen, "Chemical Kinetics Modeling of Ignition and Emissions from Natural Gas and LNG Fueled Gas Turbines," *ASME Paper* GT2012-69902, Copenhagen, Denmark, 2012.
18. F. Xu, V. Nori, and J. Basani, "CO Prediction for Aircraft Gas Turbine Combustors," *ASME Paper* GT2013-94282, Texas, USA, 2013.
19. T. Poinso and D. Veynante, "Theoretical and Numerical Combustion," 3rd Ed., R.T. Edwards, Flouertown, 2012.
20. A. Y. Klimenko and R. W. Bilger, "Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 25, 1999, pp. 595-687.
21. D. Joung and K. Y. Huh, "3D RANS Simulation of Turbulent Flow and Combustion in a 5MW Reverse-flow Type Gas turbine Combustor," *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power*, 132, No. 111504, 2010, pp. 1-9.
22. A. Ketelheun, K. Aschmoneit, and J. Janicka, "CO Prediction in LES of Turbulent Flames with Additional Modeling of the Chemical Source Term," *ASME Paper* GT2012-69001, Copenhagen, Denmark, 2012.
23. H. C. Mongia, "Recent Progress in Comprehensive Modeling of Gas Turbine Combustor," *46th AIAA Aerospace Science Meeting and Exhibit*, Nevada, No. 1445, pp. 1-33, 2008.
24. W. Polifke, W. Dobbeling, T. Sattelmayer, D. G. Nicol, "A NOx Prediction Scheme for Lean-premixed Gas Turbine Based on Detailed Chemical Kinetics," *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power*, 118, 1996, pp. 775-776.

25. W. P. Jones and R. P. Lindstedt, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion," *Combustion and Flame*, 73, 1988, pp. 233-249.
26. Ch. K. Westbrook and F. L. Dryer, "Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, 1984, pp. 1-57.
27. F. L. Dryer and I. Glassman, "High-temperature Oxidation of CO and CH₄," *Proceeding of Combustion Institute*, 14, 1973, pp. 987-1003.
28. M. Shahsavari, M. Farshchi, and M. H. Arabnejad, "Large Eddy Simulations of Unconfined Non-reacting and Reacting Turbulent Low Swirl Jets," *Flow Turbulence and Combustion*, 98, 2017, pp. 817-840.
29. M. Blomstedt, V. Navrotsky, and O. Lindman, *Field Experience from SGT-600 2ND Generation of Low Emission Combustion Chamber*, Siemens Industrial Turbomachinery AB report, SE-61283, 2007.

English Abstract

Predicting CO emission in a stationary gas turbine combustor using finite rate eddy dissipation combustion model

Mohammad Shahsavari¹, Mohammad Ali Soroudi², Moosa Yazdani³, Sara Montazerinejad⁴ and Yousef Bagheri⁵

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

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

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

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

5- Mechanical Engineering, Combustion Chamber Department, Middle East Turbo Compressor Tech. Co (Turbotec), Tehran, y.bagheri@turbotec-co.com

(Received: 2017.06.19, Received in revised form: 2017.10.09, Accepted: 2017.10.11)

The main objective of the present paper is to predict CO emission in a stationary gas turbine combustor comprising 18 EV burners. To such aim, $k - \epsilon$ turbulent model along with finite rate Eddy dissipation combustion model and a global two-step kinetic mechanism are used to simulate the reacting flow field in the combustor. Primary investigations show that the global two-step mechanism underestimates CO concentration at the combustor outlet by several orders of magnitude. Therefore, the global mechanism is tuned to better capture CO emission. To such aim, temperature exponent of the Arrhenius form of reaction rate is tuned as a function of equivalence ratio. Investigations show that the tuned global mechanism using the present methodology accurately predicts CO emission in the stationary gas turbine at various operating conditions. The obtained results show that modifications of the global mechanism have no effect on the overall flame shape and flame lift-off distance.

Keywords: CO Pollutant, $k - \epsilon$ Model, Finite Rate Eddy Dissipation Combustion Model, EV burner