مجموعه مقالات هفتمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران
۲۵ و ۲۴بهمن ۱۳۹۶، ایران، تهران، دانشگاه صنعتی شریف
FCCI-2018-1063

مدل‌سازی شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل محفظه و تخمین میزان آلاینده‌ها در موتورهای توربین گاز

محمدعلی سرودی
دپارتمان محفظه، شرکت توربوتک، گروه OTC
m.soroudi@turbotec-co.com

سارا منتظری نژاد
دپارتمان محفظه، شرکت توربوتک، گروه OTC
s.montazerinejad@turbotec-co.com

احسان ملاحسن زاده
دپارتمان محفظه، شرکت توربوتک، گروه OTC
e.hassanzadeh@turbotec-co.com

چکیده

روش شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل محفظه و نحوه کاربرد آن برای محاسبه میزان آلاینده‌های ناشی از احتراق در موتورهای توربین گاز معرفی شده است. بدین منظور الگوریتم روش معرفی گردیده و موضوع مکانیزم‌های شیمیایی موجود برای تخمین آلاینده‌ها بررسی شده است. سپس مساله نمونه مناسبی برای تخمین آلاینده‌ها و پیاده‌سازی الگوریتم انتخاب و معرفی گردیده و هندسه، شرایط کاری و نتایج شبیه‌سازی عددی جریان واکنشی آن ارایه شده است. خروجی‌های مدل‌سازی آلاینده‌ها با استفاده از روش شبکه رآکتور در این محفظه اعتبارسنجی گردیده و در نهایت روش مزبور برای تخمین آلاینده‌های یک توربین گاز صنعتی به کار گرفته شده است. نتایج این مطالعه نشان داده که می‌توان با استفاده از رویکرد شبکه رآکتور، مقادیر آلاینده‌های NO_X را با دقت مناسب تخمین زد. به بیان دقیق‌تر، کاربرد مناسب این رویکرد در یک توربین گاز صنعتی، امکان تخمین آلاینده‌های NO_X را با دقت نسبی بهتر از ۵٪ فراهم نموده است. با این وجود و به دلایل تشریح شده در این نوشتار، رویکرد شبکه رآکتور برای تخمین میزان آلاینده‌های کربن مونوکسید در کاربردهای توربین گاز مناسب نبوده و برای این منظور استفاده از روش حل مستقیم CFD با استفاده بهینه از مکانیزم‌های شیمیایی کلی توصیه می‌گردد.

کلمات کلیدی: توربین گاز، آلاینده‌های احتراق، مونو اکسید کربن، اکسیدهای نیتروژن، روش شبکه رآکتور

مقدمه

اگرچه در سال‌های اخیر حوزه شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)[1] همگام با رشد روزافزون الگوریتم‌ها و ماشین‌های محاسباتی به دستاوردهای قابل توجهی دست یافته است، اما همچنان شبیه‌سازی عددی احتراق با چالش‌های جدی روبرو است.

یکی از ریشه‌های اصلی این چالش‌ها را باید ناشی از حضور احتراق آشفته و همچنین پیچیدگی‌های سینتیک شیمیایی احتراق دانست. از سوی دیگر تعامل این دو پدیده، به همراه همگیری پدیده‌های فیزیکی دیگر از قبیل جریان‌های چندفازی و تشعشع حرارتی موجب شده تا حوزه احتراق آشفته به یکی از مسائل حل نشده فیزیک کلاسیک تبدیل گردد.

از سوی دیگر، به منظور تخمین گونه‌های میانی با دقت مناسب در یک میدان جریان واکنشی، لازم است تا محاسبات CFD به همراه توصیفی کامل از سینتیک شیمیایی صورت پذیرد. با این وجود، در نظر گرفتن مکانیزم واکنش پیچیده سوخت‌های کاربردی با ده‌ها تا صدها گونه شیمیایی و صدها تا چند هزار واکنش شیمیایی (حتی برای ترکیبات جانشین[2] نسبتا ساده این سوخت‌ها) در کدهای احتراق آشفته سه‌بعدی در ابعاد و هندسه واقعی محفظه‌های کاربردی از نظر زمان و حجم محاسبات کاملا غیرعملی است. پیچیدگی محاسبات پدیده‌های شیمیایی از یک سو مربوط به سایز بزرگ مکانیزم‌های شیمیایی (و لذا تعداد بالای معادلات دیفرانسیل حاکم بر مساله) و از سوی دیگر مربوط به گستره وسیع مقیاس‌های زمانی این پدیده‌ها و اصطلاحا سخت[3] بودن معادلات دیفرانسیل مربوطه و لذا نیاز به استفاده از گام‌های زمانی کوچک و تکنیک‌های غالبا زمان‌بر ویژه حل معادلات سخت، می‌باشد.

برای مقابله با این معضل در متون علمی دو رویکرد اساسی پیشنهاد شده که عبارتند از: (الف) توصیف دقیق میدان جریان به همراه توصیف ساده‌ای از پدیده‌های شیمیایی از قبیل مکانیزم‌های کاهیده[4] و یا واکنش(های) کلی[5] یا اسکلتی[6] [۱] و (ب) استفاده از توصیف دقیق پدیده‌های شیمیایی (با استفاده از مکانیزم‌های کامل[7]) به همراه توصیفی ساده از میدان جریان. هر گاه هدف از مطالعه، بررسی آلاینده‌های احتراق یا سایر پدیده‌های شیمیایی تحت کنترل سینتیک شیمیایی کامل باشد، عموما راهکار دوم ارجحیت خواهد داشت زیرا پدیده‌های شیمیایی را با دقتی بالاتر مدل‌سازی می‌نماید[8]. اغلب مطالعات انجام شده در رویکرد دوم، در قالب روش شبکه رآکتورهای شیمیایی (ایده‌آل) معادل محفظه[9] یا ECRN صورت گرفته‌اند که در آن شبکه رآکتورهای معادل محفظه از حل CFD استخراج می‌گردد.

---

[1] Computational fluid dynamics

[2] Surrogate
[3] Stiff
[4] Reduced mechanism
[5] Global reaction
[6] Skeletal mechanism
[7] Detailed mechanism
[8] البته باید توجه داشت که اگر میزان همگیری پدیده‌های شیمیایی و فیزیکی قابل توجه باشد، استفاده از این رویکرد خطای زیادی در محاسبات وارد خواهد نمود [۱].
[9] Equivalent chemical reactor network (ECRN) also known as ERN or CRN

مبانی روش ECRN اولین بار در سال ۱۹۹۳ میلادی پیشنهاد گردید[۲]. با این وجود اولین مطالعات بنیادی سینتیک شیمیایی احتراق در رآکتورهای ایده‌آل در داخل کشور که به نوعی شالوده اصلی روش ECRN به شمار می‌رود، با یک فاصله حدودا ده ساله از مطالعات مرجع [۲] انجام و گزارش شده است [۱]. به نظر می‌رسد که دسترسی نامناسب به ابزار نوین مدل‌سازی سینتیکی احتراق خصوصا در کاربردهای توربین گاز را باید یکی از موانع اصلی رشد پژوهش‌های کاربردی و توسعه ابزار طراحی در این حوزه به شمار آورد. به هر حال روش شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل محفظه احتراق توربین گاز (یا محفظه‌های مشابه) با استفاده از ابزار نرم‌افزاری متفاوت در بسیاری از مطالعات مشابه مورد استفاده قرار گرفته است [۳-۱۲].

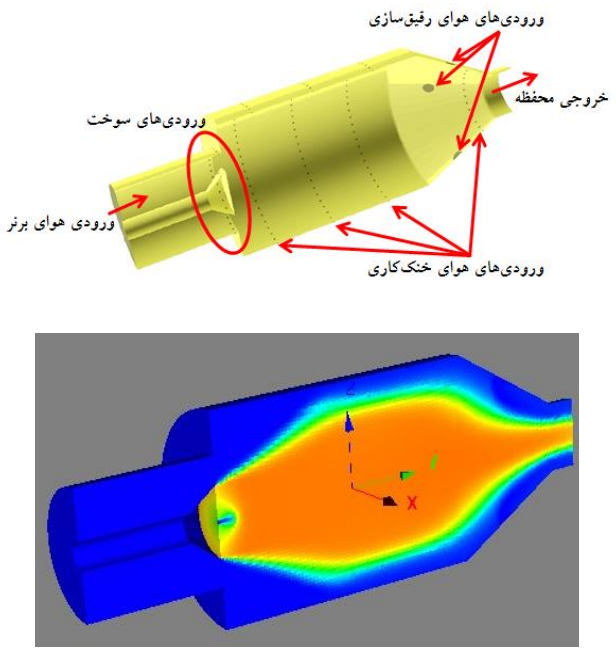
مروری بر عمده‌ترین دستاوردهای احتراق محاسباتی در حدود نیم قرن اخیر در مرجع [۱۳] ارایه گردیده است. در این مرجع بیان شده که یکی از برجسته‌ترین دستاوردها در میان تمام تلاش‌های انجام شده در حوزه مدل‌سازی احتراق در بیش از نیم قرن اخیر، معرفی خانواده نرم‌افزارهای CHEMKIN در سال ۱۹۸۰ میلادی توسط آزمایشگاه‌های ملی سندیا[۱۰] در ایالات متحده بوده است. این نرم‌افزار امروزه بدون شک به ابزار استاندارد احتراق محاسباتی در صنایع مختلف تبدیل گردیده است. از سال ۱۹۹۷ میلادی این نرم‌افزار متعلق به شرکت Reaction Design® بوده[۱۱] و در حال حاضر ویرایش پیشرفته این نرم‌افزار موسوم به CHEMKIN-PRO توسط این شرکت توسعه یافته و به فروش می‌رسد. نرم‌افزار ENERGICO از دیگر محصولات نوآورانه این شرکت می‌باشد که برای شبیه‌سازی دقیق پدیده‌های شیمیایی در سیستم‌های احتراق پیوسته (از قبیل توربین‌های گاز، بویلرها، کوره‌ها و غیره) با استفاده از تحلیل خودکار شبکه رآکتور توسعه یافته است. در این نوشتار، مدل‌سازی‌های ECRN با استفاده از بسته‌های نرم‌افزاری CHEMKIN-PRO و ENERGICO انجام شده است. همچنین شبیه‌سازی‌های CFD نیز با استفاده از نرم‌افزار FLUENT صورت پذیرفته است.

معرفی الگوریتم پیشنهادی

در این قسمت الگوریتم مورد استفاده برای تخمین آلاینده‌ها با استفاده از نرم‌افزار ENERGICO تشریح شده است. بدین منظور از یک محفظه احتراق مدل (به طول ۴۰ و قطر ۱۵ سانتی‌متر) برای انجام محاسبات استفاده گردیده که دارای مولفه‌های ژنریک محفظه از قبیل برنر با تزریق چندمرحله‌ای سوخت (متان) و همچنین ورودی‌های هوای خنک‌کاری چند ردیفی و جت‌های هوای رقیق‌سازی در انتهای محفظه می‌باشد. در شکل ۱ نمایی از این محفظه مدل ارایه گردیده است که به صورت ویژه برای توسعه الگوریتم محاسبه آلاینده‌ها با استفاده از نرم‌افزار ENERGICO طراحی شده است.

به عنوان گام اول در تولید شبکه رآکتور و تخمین میزان آلاینده‌ها با استفاده از رویکرد مورد بحث، ابتدا لازم است تا حل میدان جریان واکنشی محفظه با دقت کافی در توزیع دما (محل شعله) با استفاده از مدل‌های احتراق و آشفتگی مناسب و شرایط مرزی دقیق صورت پذیرد. پس از دستیابی به یک حل همگرای مناسب از میدان جریان واکنشی، فایل CGNS نتایج حل عددی شامل اطلاعات شبکه محاسباتی، و داده‌های دما و فشار استاتیک، دانسیته، مولفه‌های سرعت، کسر جرمی تمامی گونه‌های شیمیایی، و انرژی و نرخ اضمحلال آشفته به فرمت cell centered ذخیره می‌شود.

پس از تولید فایل CGNS و خواندن آن به عنوان فایل ورودی در نرم‌افزار ENERGICO و تعریف شرایط مرزی و ورودی‌ها، نوبت به تعریف فیلترهای مناسب برای تقسیم‌بندی میدان جریان می‌رسد. متغیرهای اصلی میدان جریان که بر توزیع مقادیر NO_X و CO تاثیرگذارند، عبارتند از غلظت سوخت و اکسیژن، دما، و زمان اقامت. در این بین نسبت سوخت به هوا و دما مهمترین اثر را در تعیین رفتار شیمیایی سیستم دارند و عموما باید تعریف فیلترها را از این متغیرها شروع نمود. منظور از تعریف فیلتر، تعریف متغیری است که بر مبنای تغییرات آن، میدان جریان محفظه به نواحی مختلف تقسیم می‌گردد.



شکل ۱ - محفظه احتراق مدل طراحی شده برای توسعه الگوریتم محاسبه آلاینده‌ها با استفاده از نرم‌افزار ENERGICO (بالا) و توزیع دمای محاسبه شده با ابزار CFD در این محفظه احتراق (پایین)

هدف از تعریف فیلترهای سوخت و هوا (یا متغیرهای مشابه از قبیل نسبت هم‌ارزی[۱۲] یا کسر مخلوط[۱۳]) به ترتیب عبارتست از تقسیم محفظه به دو

[10] Sandia National Laboratories

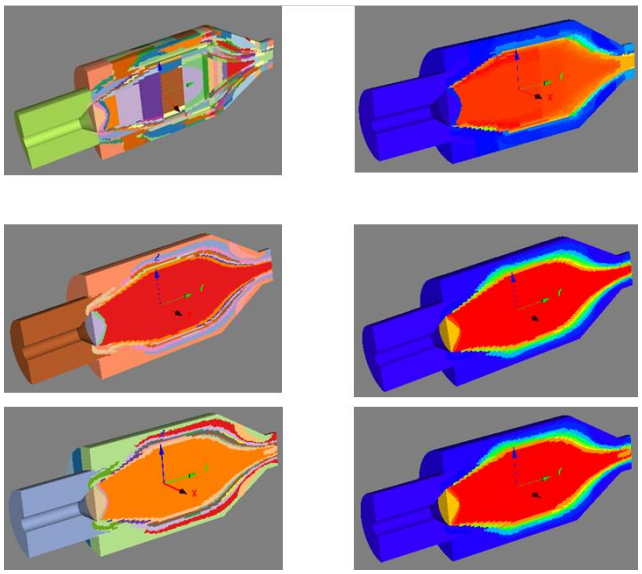
[11] این شرکت از سال ۲۰۱۴ زیرمجموعه شرکت ANSYS بوده و کلیه ابزار محاسباتی توسعه یافته در این شرکت نیز از سال ۲۰۱۶ به صورت پیش‌فرض در ویرایش‌های 17.2 به بعد نرم‌افزار ANSYS موجود می‌باشد.

[12] Equivalence ratio

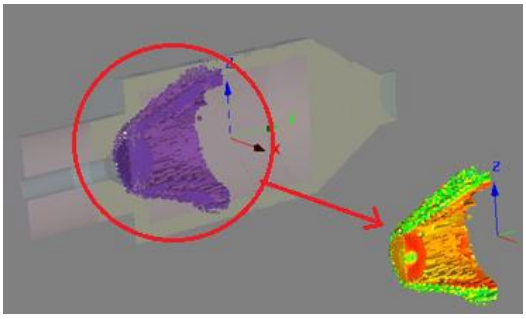
[13] Mixture fraction

ناحیه مجزای پیش‌احتراق و مابقی محفظه، و همچنین معین نمودن ورودی‌های هوای محفظه به صورت نواحی مجزا. همچنین اغلب برای تسخیر نواحی بازچرخش در میدان جریان و لحاظ نمودن توزیع زمان اقامت لازم است تا از فیلتر سرعت محوری و مقیاس زمان اختلاط اسکالر استفاده شود. هدف از تعریف فیلتر دما به عنوان مهمترین فیلتر پروسه تولید شبکه معادل، تعیین نواحی با دمای نسبتا مشابه با دقت مناسب است. دقت شبکه وابسته به نحوه تقسیم‌بندی فیلتر بوده و کیفیت آن باید از طریق مقایسه فیلترهای مختلف مقایسه شود. کوچک کردن فواصل تغییرات به معنی تسخیر نواحی کوچک دمابالا است که تاثیر زیادی روی میزان اکسیدهای نیتروژن دارند. یکی دیگر از فیلترهایی که تعریف آن تاثیر زیادی بر تخمین بهتر اکسیداسیون مونو اکسید کربن و مقادیر این آلاینده دارد، فیلتر موقعیت محوری است که اغلب مورد استفاده قرار می‌گیرد. البته می‌توان از فیلترهای جایگزین نیز استفاده نمود. به عنوان مثال فیلترهای کسر مخلوط یا نسبت هم‌ارزی اطلاعات ارزشمندی در مورد میدان جریان برای تعیین ساختار شبکه معادل به شمار می‌روند. همچنین می‌توان از متغیر پیشرفت[۱۴] واکنش به عنوان جانشینی برای فیلتر دما استفاده نمود [۶]. عموما وقتی فیلتر دما به حد کافی ریز است، افزودن فیلترهای اضافی تاثیر قابل توجهی در نتایج حل ندارد و این بدان معنی است که مهمترین پارامتر در تدوین شبکه رآکتور، متغیر دما می‌باشد. باید توجه داشت که نظر به متفاوت بودن مکانیزم‌های تولید آلاینده‌های مختلف، ممکن است استفاده از الگوریتم بهینه برای تخمین یک آلاینده منجر به بدتر شدن تخمین‌های آلاینده دیگر شود. بدیهی است که در فیلتر نهایی باید تمام آلاینده‌ها به صورت همزمان مورد توجه قرار گیرند.

برای تولید شبکه رآکتور معادل محفظه مدل شکل ۱، روش‌های مختلفی مورد استفاده قرار گرفته است. نظر به اهمیت ناحیه‌بندی مناسب حجم رآکتور برای تخمین دقیق آلاینده‌ها، این تقسیم‌بندی باید به نحوی صورت گیرد که تغییرات دما و ترکیب شیمیایی در هر ناحیه حداقل ممکن باشد. چون شیمی احتراق به شدت وابسته به دما است، لذا دمای استاتیک برای تسخیر دقیق ناحیه شعله و نیز برای جدا کردن مسیرهای واکنش متفاوت که ممکن است در محدوده‌های دمایی مختلف رخ دهند، کلیدی است. به عنوان مثال مکانیزم تشکیل اکسیدهای نیتروژن حرارتی[۱۵] شدیدا وابسته به دما است و همچنین مدل‌سازی مناسب نواحی نسبتا سرد نزدیک دیواره برای تخمین دقیق مونو اکسید کربن ضروری می‌باشد. غلظت گونه‌ها برای مجزا کردن نواحی فعالیت یا عدم فعالیت شیمیایی مورد استفاده قرار می‌گیرد. گونه‌هایی که در جریان‌های ورودی به صورت مجزا ارایه می‌گردند، می‌توانند به بهترین نحو جهت جدا ساختن نواحی ورودی از مابقی حجم رآکتور مورد استفاده قرار گیرند و بدین نحو مواد واکنشی ورودی‌های مختلف قبل از موعد مخلوط نخواهند شد. بنابراین فیلتر کسر جرمی سوخت و هوا (یا فیلترهای معادل آن) برای مدل‌سازی مناسب اختلاط، کلیدی می‌باشد. خصوصا کسر جرمی اکسیژن برای جداسازی ورودی‌های هوا که در این نواحی واکنش شیمیایی وجود ندارد مورد استفاده قرار می‌گیرد. متغیر سرعت در تعریف شبکه رآکتور معادل ضروری است زیرا تعریف‌کننده زمان اقامت محلی جریان می‌باشد و پارامتر مزبور نیز مستقیما سینتیک شیمیایی را تحت تاثیر قرار می‌دهد. با استفاده از فیلتر سرعت می‌توان نواحی بازچرخش درون رآکتور را شناسایی نمود. جدا کردن نواحی بازچرخش جریان اصلی این امکان را فراهم می‌سازد که بتوان مکانیزم پایدارسازی شعله را در ساختار شبکه رآکتور به صورت مجزا بررسی نمود. برای تقسیم فضای محفظه مدل شکل ۱ از الگوریتم‌های مختلف استفاده شده است که نمونه‌ای از نتایج مربوط به روش‌های مختلف فیلتر کردن در شکل ۲ ارایه گردیده است.



شکل ۲ - شبکه رآکتور تولید شده با استفاده از نرم‌افزار ENERGICO برای برنر مدل (چپ) به همراه توزیع دمای پیش‌بینی‌شده با استفاده از هر شبکه (راست) برای شبکه‌های مختلف دارای ۲۰۷ (بالا)، ۲۹ (وسط) و ۳۵ ناحیه (پایین)



شکل ۳ - جبهه شعله و توزیع عدد دامکلر در جبهه شعله برای برنر مدل

مقایسه توزیع دمای پیش‌بینی شده با نتایج حل CFD، یکی از مهمترین گام‌ها در ارزیابی دقت شبکه تولیدشده می‌باشد. تاثیر الگوریتم تولید

[14] Progress variable
[15] Thermal NO_X

شبکه و تعداد رآکتورها بر توزیع دما با مقایسه نتایج شکل ۲ با نتایج شکل ۱ قابل مشاهده است. لازم به ذکر است که صرفا افزودن تعداد رآکتورها به معنی دستیابی به حل دقیق‌تر نبوده و در این راستا باید به توپولوژی میدان جریان و ساختار میدان احتراق توجه نمود. به عنوان مثال همانگونه که در شکل ۲ قابل مشاهده است، افزودن تعداد رآکتورها موجب شده تا پایه شعله در جوار جسم مانع خاموش شود در حالی که این ناحیه دمای نسبتا بالایی دارد (ر.ک. شکل ۱). در نهایت لازم به ذکر است که می‌توان با استفاده از نرم‌افزار ENERGICO محل شعله و توزیع عدد دامکلر[16] بر روی آن را نیز مشاهده نمود. نتایج این محاسبات برای برنر مدل مورد مطالعه در شکل ۳ ارایه گردیده است. همانگونه که در این شکل به وضوح قابل مشاهده است، تزریق سوخت پایلوت به صورت عمود بر دیواره انتهای جسم مانع شعله‌نگه‌دار موجب تقویت شعله و بهبود پایداری در این ناحیه شده است.

پس از معرفی اولیه کلیات الگوریتم مورد استفاده و ملاحظات مربوط به آن، در قسمت‌های آتی مقاله، الگوریتم مشابهی برای مساله نمونه که حاوی نتایج تجربی برای ارزیابی دقیق خروجی‌های مدل‌سازی می‌باشد، مورد استفاده قرار خواهد گرفت. پس از اعتبارسنجی نتایج در چنین مسائلی می‌توان از ابزار و الگوریتم مزبور برای تخمین میزان آلاینده‌های ناشی از احتراق در موتورهای توربین گاز استفاده نمود.

مکانیزم سینتیک شیمیایی

موضوع سینتیک شیمیایی احتراق و ملاحظات آن به همراه جزئیات مدل‌سازی احتراق با استفاده از سینتیک شیمیایی کامل به تفصیل در مرجع [۱] ارایه شده است. کلیه محاسبات مربوط به این گزارش با استفاده از دو مکانیزم شیمیایی معتبر، موسوم به GRI3.0 و $C2_NO_X$، به انجام رسیده است.

مکانیزم شیمیایی GRI3.0 مشتمل بر ۵۳ گونه شیمیایی[17] و ۳۲۵ واکنش بنیادی[18] بوده (GRI3.0: 53×325) و مکانیزم $C2_NO_X$ شامل ۹۹ گونه شیمیایی و ۶۹۳ واکنش بنیادی می‌باشد ($C2_NO_X$: 99×693). مکانیزم $C2_NO_X$ اخیرا توسط شرکت Reaction Design® توسعه داده شده است. با این حال مکانیزم GRI3.0 همچنان پرکاربردترین مکانیزم سینتیک شیمیایی برای مدل‌سازی احتراق گاز طبیعی می‌باشد. یکی از مشکلات استفاده از مکانیزم GRI3.0 برای مدل‌سازی محفظه‌های احتراق توربین گاز DLE[19]، عدم حضور برخی مسیرهای واکنش دمای پایین تا متوسطی است که منجر به تشکیل NO_X می‌شوند. همچنین در این مکانیزم وابستگی فشار عوامل موثر بر تشکیل NO_X نیز از دقت کافی برخوردار نمی‌باشد. بنابراین، این مکانیزم که در ابتدا برای مدل‌سازی احتراق گاز طبیعی در برنرهای متعارف توسعه داده شده، برای مدل‌سازی احتراق در توربین‌های گاز DLE تا حدودی ناکارآمد خواهد بود. در مکانیزم $C2_NO_X$ هر دوی این مشکلات حل شده و نتایج بهتری استخراج گردیده است. گونه‌های شیمیایی حاضر در این مکانیزم‌ها در شکل ۴ ارایه شده و مورد مقایسه قرار گرفته است.

[16] Damkohler
[17] Species
[18] Elementary reaction
[19] Dry low emission

H	H2	O	O2	OH	H2O	N2	CO	HCO	CO2	CH3
C2H6	C2H4	C2H5	CH2	CH	C2H	C2H2	C2H3	CH3OH	CH2OH	CH2CO
SC2H4OH	CH3CO	CH2CHO	CH3CHO	C2H5O	CH3O2	C2H5O2	CH3O2H	C2H5O2H	C2H3O1-2	CH3CO2
C2H4O1-2	C2H4O2H	O2C2H4OH	CH3CO3	CH3CO3H	HO2CHO	O2CHO	OCHO	CH2(S)	HOCH2O	HCNN
HOCHO	CH3OCO	HCOCJ*O	CJ*C*O	HCOHCO	DHCO2J	C*OCJOH	C	H2CC	HCCOH	C2O
NH	NH2	NH3	NNH	NO	NO2	HNO	CN	HCN	H2CN	HCNO
HOCN	HNCO	NCO	N2O	HNC	HON	HONO	H2NO	NCCN	N	HCCO
NCN	HCNH	HNOH	NO3	HONO2	CH3NO	CH3NO2	CH3ONO2	CH3ONO	C2H5OH	PC2H4OH
HNO2	CH2NO2	C2H5NO2	C2H5ONO	C2H5ONO2	C2H3NO2	CH4	HO2	H2O2	CH2O	CH3O
				AR	C3H7	C3H8				

شکل ۴ – گونه‌های شیمیایی انحصاری مکانیزم‌های C2_NOx (بدون رنگ) و GRI3.0 (سبز) به همراه گونه‌های شیمیایی مشترک بین هر دو مکانیزم (نارنجی)

تخمین آلاینده‌ها در مساله نمونه

قبل از استفاده از رویکرد شبکه رآکتورهای معادل جهت تخمین آلاینده‌ها در شرایط کاری واقعی موتورهای توربین گاز، لازم است تا ابتدا این روش در برنرهای آزمایشگاهی اعتبارسنجی شود. بدین منظور باید از برنرهایی استفاده نمود که اولا اطلاعات کافی در مورد هندسه و شرایط مرزی آنها موجود بوده و ثانیا اطلاعات مربوط به میدان جریان و خصوصا توزیع آلاینده‌ها نیز در مورد آنها در دسترس باشد. در این بخش موضوع تخمین آلاینده‌ها در یک مساله نمونه مناسب ارایه شده است. بدین منظور ابتدا هندسه و شرایط کاری این مساله توضیح داده شده و در ادامه جزئیات و نتایج شبیه‌سازی CFD محفظه مزبور ارایه گردیده است. در نهایت روند تخمین آلاینده‌ها در این محفظه تشریح شده و نتایج محاسبات، حساسیت‌سنجی و اعتبارسنجی شده‌اند.

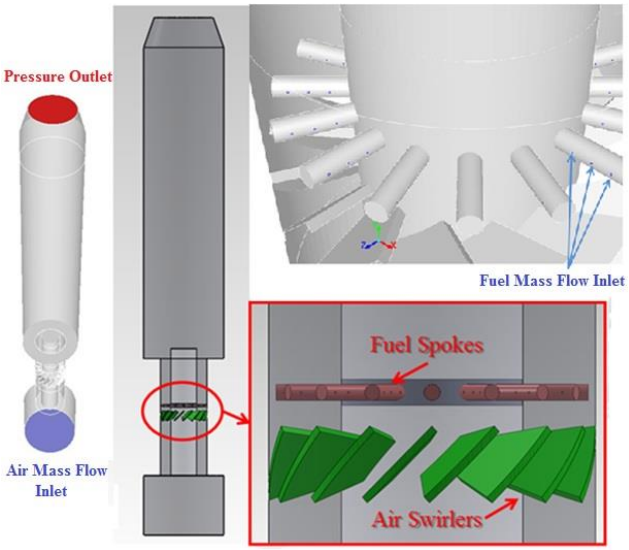
با مرور مراجع مختلف، برنرهای آزمایشگاهی گوناگونی برای صحه‌گذاری نتایج شناسایی گردیده که شامل برنرهایی با احتراق پیش‌آمیخته[20] (PM)، پیش‌آمیخته جزئی[21] (PPM) و غیر پیش‌آمیخته[22] (NPM) مورد بررسی قرار گرفته است. در انتخاب مساله نمونه، اولویت با برنری بوده که اطلاعات مربوط به آلاینده‌های NO_X و CO برای آن موجود بوده و همچنین اطلاعات مربوط به هندسه و شرایط مرزی و نیز مشخصات میدان جریان به شکلی مطلوب در دسترس باشند. همچنین نوع شعله پیش‌آمیخته جزئی ارجحیت داشته (به دلیل حضور آن در اغلب توربین‌های گاز DLE امروزی) و شرایط کاری فشار بالا و استفاده از سوخت مشابه نیز یک اولویت بوده است. وجود نتایج CFD نیز مسیر شبیه‌سازی عددی را تسهیل خواهد نمود. با در نظر گرفتن تمام ملاحظات، برنر DOE-HAT [۱۴] به عنوان مساله نمونه منتخب در این مطالعه مورد توجه قرار گرفته است.

محفظه نامبرده در طی همکاری مشترک بین آزمایشگاه ملی تکنولوژی انرژی آمریکا[23]، وزارت انرژی آمریکا[24] و نیز مرکز تحقیقات شرکت UTC[25] توسعه داده شده است. همانگونه که در شکل ۵ ارایه شده است، محفظه مزبور دارای ورودی هوای مجهز به چرخاننده است که هوا با عبور از میان پره‌های

[20] Premixed
[21] Partially-premixed
[22] Non-premixed
[23] National Energy Technology Laboratory
[24] Department of Energy
[25] United Technologies Corporation

چرخاننده دارای مولفه‌های محوری، شعاعی و مماسی می‌شود. تجهیزات دیگر این محفظه شامل، برنر، لوله اصلی سوخت و انژکتورهای سوخت می‌باشد. طول محفظه ۵۰۰ میلی‌متر، قطر داخلی محفظه ۱۰۶ میلی‌متر، و اقطار داخلی و خارجی چرخاننده به ترتیب برابر ۳۵ و ۶۲/۸ میلی‌متر می‌باشد.

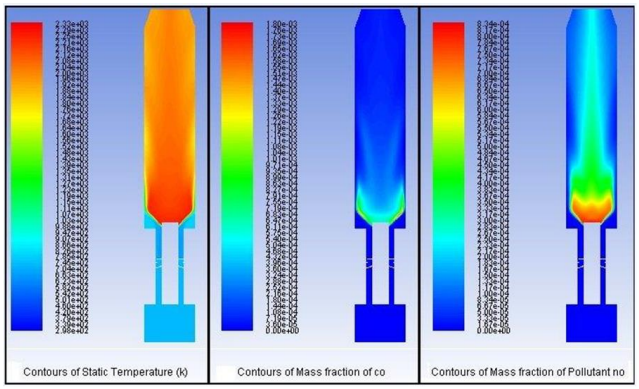
در شرایط کاری مورد مطالعه، دبی هوا و سوخت ورودی (متان) به ترتیب معادل ۰/۹۶ و ۰/۰۳۲۴ کیلوگرم بر ثانیه (نسبت هم‌ارزی ۰/۵۸) بوده و دما و فشار ورودی به ترتیب ۷۳۴ کلوین و ۱۳/۶ اتمسفر می‌باشد. همانطور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، سوخت تزریق شده از میان سوراخ‌های انژکتورهای سوخت که آرایش هندسی آنها دور جسم مرکزی و به صورت شعاعی می‌باشد، خارج شده و با جریان هوای ورودی به محفظه مخلوط می‌شود.



شکل ۵ – نمایی از محفظه احتراق DOE-HAT و جزئیات هندسی، شرایط مرزی ورودی هوا و خروجی محصولات احتراق به همراه جزئیات هندسه انژکتورهای سوخت و شرایط مرزی ورودی سوخت

به طور کلی سیستم انژکتور محفظه احتراق DOE-HAT مشابه انژکتورهای سوخت محفظه احتراق توربین گاز پیش‌آمیخته (جزئی) رقیق‌سوز توربین‌های گاز صنعتی متعارف می‌باشد که دارای ۱۶ پره چرخاننده منحنی شکل محوری (با زاویه چرخش ۴۵ درجه و سطح جریان موثر ۱۲/۹ سانتی‌متر مربع) و نیز ۱۶ میله انژکتور سوخت می‌باشد. هریک از میله‌های انژکتور سوخت خود شامل ۶ سوراخ بوده که در موقعیت ۱۸۰ درجه نسبت به هم قرار گرفته‌اند (هر دو زوج در یک موقعیت شعاعی یکسان). قطر داخلی و خارجی نازل سوخت به ترتیب برابر ۱/۳۸ و ۲/۴۸ اینچ می‌باشد. جریان مخلوط سوخت و هوا به درون محفظه استوانه‌ای با پوشش نسوز به قطر ۴/۲۵ اینچ وارد می‌شود. در این دستگاه آزمایش، پروب سه سوراخه جهت اندازه‌گیری آلاینده‌های CO و NO_X در فاصله ۱۵ اینچی پایین‌دست نازل مورد استفاده قرار گرفته است.

پس از تولید هندسه، شبکه‌ای با حدود۲،۸۰۰،۰۰۰ المان تولید شده است. معادلات جریان، گونه‌ها، انرژی و آشفتگی به صورت همزمان با استفاده از نرم‌افزار تجاری FLUENT حل شده‌اند. برای گسسته‌سازی جملات تمامی معادلات به غیر از فشار از تقریب مرتبه دوم پیشرو و برای کوپل کردن جملات فشار و سرعت از الگوریتم SIMPLE استفاده شده است. همچنین حل معادله فشار با استفاده از روش استاندارد انجام گردیده است. در مدل‌سازی انجام شده از معادلات RANS و مدل توربولانسی Realizable k-ε استفاده شده است. این مدل از دقت بالایی در جریان‌های برخوردی و چرخشی برخوردار است. برای مدل‌سازی احتراق مساله نمونه مورد نظر، از روش فلیملت[۲۶] پایا و مکانیزم شیمیایی DRM19 (DRM19: 19×84) جهت پیش‌بینی متغیرهای واکنشی میانگین[۲۷] استفاده شده است. در شکل ۶ نمونه‌ای از نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی‌های عددی در صفحه میانی محفظه احتراق شامل کانتورهای توزیع دما، توزیع کسر جرمی CO و توزیع آلاینده NO_X نشان داده شده است. محاسبات آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن با استفاده از قابلیت‌های پس‌پردازش نرم‌افزار FLUENT صورت گرفته است.



شکل ۶ – کانتورهای توزیع دما، توزیع کسر جرمی CO و NO_X حاصل از شبیه‌سازی عددی محفظه احتراق DOE-HAT

پس از تدوین حل همگرای CFD و تولید فایل CGNS ورودی نرم‌افزار ENERGICO، نوبت به تولید شبکه رآکتور معادل محفظه DOE-HAT و محاسبه آلاینده‌های آن می‌رسد. بدین منظور بیش از ۳۰ روش (یا الگوریتم) برای تولید شبکه معادل جهت تخمین میزان آلاینده‌ها در این محفظه مورد آزمون قرار گرفته که بهترین نتایج مربوط به تخمین آلاینده‌ها در جدول ۱ ارایه شده است. همچنین در این جدول نتایج تجربی مربوطه نیز ارایه گردیده است.

علاوه بر این، نتایج عددی محاسبه آلاینده‌های مزبور با رویکرد RANS با استفاده از نرم‌افزار FLUENT که مربوط به این مطالعه می‌باشد نیز در این

[26] Flamelet

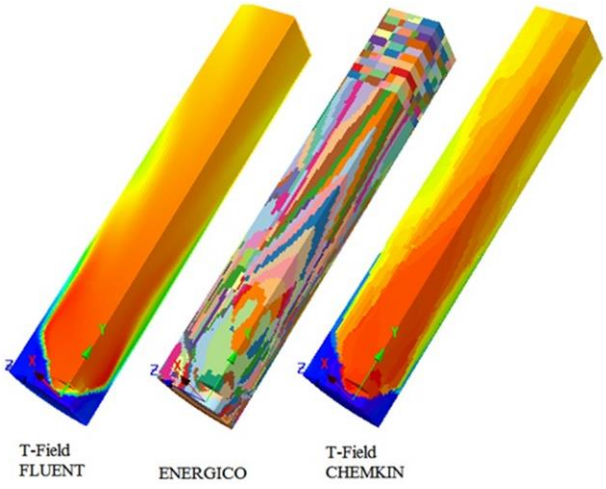
[۲۷] همانگونه که اشاره گردید، هدف از حل CFD، تولید اطلاعات ورودی در قالب یک فایل CGNS برای محاسبات ECRN می‌باشد. این حل CFD را می‌توان بسته به نوع مساله با استفاده از مدل‌های احتراق آشفته و مکانیزم‌های شیمیایی مختلف تولید نمود.

جدول ارایه شده است. با توجه به اطلاعات جدول مزبور می‌توان دریافت که مقادیر تخمینی NO_X و CO محاسبه شده با استفاده از نرم‌افزار تجاری FLUENT در این حالت به ترتیب حدود ۵۰۰٪ و ۱۱۰٪ خطا داشته‌اند.

نتایج جدول ۱ نشانگر آن است که رویکرد پیشنهادی دقت بسیار بالایی در تخمین میزان آلاینده‌ها دارد. این نتایج در دو ستون مجزا برای دقیق‌ترین حالت برای هر آلاینده و همچنین برای حالت بهینه (حالت مربوط به حداقل میانگین خطا برای هر دو آلاینده NO_X و CO و همچنین دمای بیشینه) ارایه شده است. همانگونه که اشاره گردید، جهت انتخاب الگوریتم بهینه برای مدل‌سازی آلاینده‌ها، مطالعات پارامتریک جامعی انجام گردیده و حساسیت عوامل مختلف به دقت واکاوی شده است. نمونه‌ای از نتایج شبکه بهینه نیز در شکل ۷ ارایه گردیده است.

جدول ۱ – مقایسه مقادیر عددی و تجربی آلاینده‌های NO_X و CO در محفظه احتراق DOE-HAT

کمیت	مقادیر تجربی	مقادیر عددی		
		FLUENT	ENERGICO (دقیق‌ترین)[۲۸]	ENERGICO (بهینه)
T_{max} (K)	-	۲۲۴۵	۲۲۲۹ (۴۰ رآکتور)	۲۱۸۵ (۴۶ رآکتور)
NO_X (ppmvd@15%O_2)	۲۱/۲	۱۲۷/۹	۲۱/۱ (۲۰۲ رآکتور)	۲۲/۰ (۴۶ رآکتور)
CO (ppmvd@15%O_2)	۲۲/۶	۴۷/۰	۲۲/۸ (۲۰۸ رآکتور)	۲۴/۳ (۴۶ رآکتور)



شکل ۷ – مقایسه کانتورهای توزیع دمای حل CFD و نتایج ECRN به همراه نحوه تقسیم‌بندی فضای محفظه (ربع هندسه برای ناحیه احتراق) در محفظه احتراق DOE-HAT

لازم به ذکر است که در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده، از رآکتورهای کاملا آمیخته (PSR)[۲۹] و رآکتورهای پلاگ (PFR) [۳۰] برای مدل‌سازی محفظه استفاده گردیده است. همچنین حداقل حجم هر رآکتور همواره معادل ۰/۱٪ حجم محفظه انتخاب گردیده و تمام رآکتورها بی‌دررو فرض شده و معادله انرژی برای تک‌تک این رآکتورها به صورت مستقل حل شده است. در فیلتر بهینه انتخاب شده برای مساله نمونه، در بهترین شرایط (حداقل خطای نسبی میانگین برای هر دو آلاینده NO_X و CO و نیز دما) حداکثر خطای نسبی برای NO_X و CO و دما به ترتیب کمتر از حدود ۴٪، ۸٪ و ۳٪ قابل حصول بوده است. این فیلتر نهایی دارای ۴۶ ناحیه مجزا بوده و زمان اجرای آن نسبتا کوتاه و برای مطالعات پارامتریک بسیار مناسب بوده است.

تخمین آلاینده‌ها در محفظه احتراق توربین گاز

پس از تایید اعتبار نتایج در مساله نمونه، الگوریتم مورد بحث برای تخمین میزان آلاینده‌های یک محفظه احتراق توربین گاز صنعتی مورد استفاده قرار گرفته است. محفظه احتراق توربین گاز مزبور از نوع حلقوی بوده و دارای ۱۸ عدد برنر DLE می‌باشد. برنر مورد استفاده در این مطالعه نیز از نوع EV بوده است. جزئیات نحوه شبیه‌سازی عددی این محفظه احتراق با استفاده از سوخت‌های گازی (گاز طبیعی) و مایع (دیزل) قبلا در مراجع [۱۵] و [۱۶] ارایه شده است و در این نوشتار تنها به ارایه خلاصه روش‌های مدل‌سازی CFD بسنده می‌شود.

اندازه سلول‌های شبکه محاسباتی در داخل برنر معادل با اندازه قطر انژکتور انتخاب شده و همچنین از خروجی برنر تا انتهای سپر حرارتی شامل لایه‌های برشی و ناحیه بازچرخش درون آن با سایز معادل دو برابر قطر انژکتور شبکه‌بندی شده است. علاوه بر این، شبکه‌بندی سوراخ‌های تزریق سوخت به نحوی صورت گرفته است که در قطر سوراخ بین ۵ تا ۹ سلول قرار گیرد.

مدل آشفتگی بکار رفته در حل منتخب از نوع مدل Realizable k-ε بوده و ثوابت به کار رفته در این مدل و نیز مقادیر اعداد اشمیت[۳۱] و پرانتل[۳۲]، همان پیش‌فرض نرم‌افزار در نظر گرفته شده‌اند. در مورد مدل آشفتگی نزدیک دیواره نیز مدل EWT مدل منتخب در شبیه‌سازی‌های نهایی بوده است. در شبیه‌سازی RANS جریان واکنشی محفظه، مدل احتراقی FR/ED به کار گرفته شده است. در این مدل ضرایب A و B، به ترتیب معادل ۴/۰ و ۰/۵ فرض شده است. واکنش شیمیایی به کار رفته در حل منتخب، واکنش شیمیایی ارایه شده در مرجع [۱۷] بوده است. خواص ترمودینامیکی و انتقالی به صورت میانگین مخلوط و تابعی از دما اعمال شده و حل فشارمبنا با روش SIMPLE مورد استفاده قرار گرفته است. گسسته‌سازی مکانی متغیرها نیز در مدل

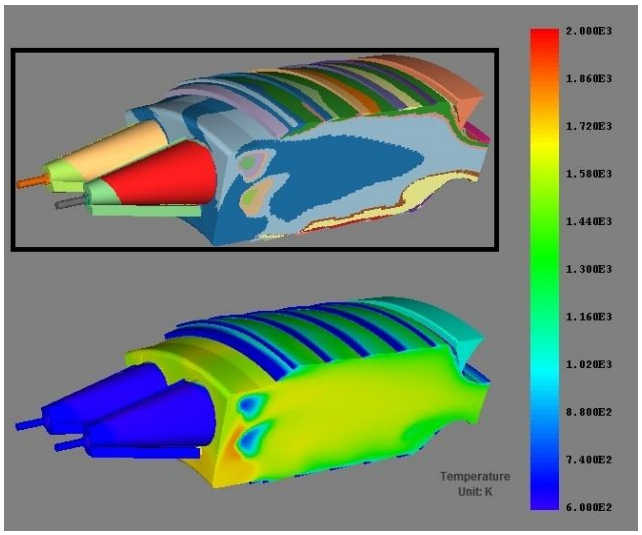
[۲۸] برای تعیین دقیق‌ترین مقادیر، خروجی روش ECRN با اطلاعات تجربی مقایسه شده است؛ تنها در مورد دمای بیشینه به دلیل عدم دسترسی به اطلاعات تجربی، نتایج روش ECRN با نتایج حل CFD مقایسه شده است.

[29] Perfectly stirred reactor
[30] Plug flow reactor
[31] Schmidt
[32] Prandtl

آشفتگی RANS، به غیر از فشار که برای گسسته‌سازی آن از روش مرتبه دوم استفاده شده است، به صورت QUICK می‌باشد. کلیه شبیه‌سازی‌ها نیز با استفاده از نرم‌افزار FLUENT صورت گرفته است. نمایی از نحوه تقسیم‌بندی حجم محفظه (شامل ۴۳ رآکتور) به همراه توزیع دما در مقطع دو برنری محفظه مزبور در شکل ۸ ارایه شده است.

نتایج تخمین آلاینده‌های NO_X مربوط به این محفظه با استفاده از الگوریتم پیشنهادی تطابق مطلوبی با اطلاعات تجربی داشته است. به بیان دقیق‌تر، میزان آلاینده‌های اکسیدهای نیتروژن تخمینی از طریق رویکرد ECRN معادل ۲۲/۱ $ppmvd@15\%O_2$ بوده و مقدار اختلاف با داده‌های تجربی کمتر از ۵٪ بوده است. این میزان دقت برای محفظه‌های DLE کاملا قابل قبول است.

از سوی دیگر مقادیر CO تخمینی با این روش، بسته به نوع الگوریتم تولید شبکه مورد استفاده، به نتایج بسیار متفاوتی منتهی شده است (از مقادیر کمتر از ۲۰ $ppmvd@15\%O_2$ تا بیش از ۲۰،۰۰۰ $ppmvd@15\%O_2$).



شکل ۸ – نحوه تقسیم بندی حجم محفظه به نواحی مختلف (بالا) به همراه توزیع دما در مقطع دو برنری محفظه (پایین)

مشکلات مربوط به محاسبه مقادیر آلاینده کربن مونوکسید با استفاده از روش ECRN و عدم قطعیت این رویکرد در محاسبه CO در مراجع [۴]، [۷] و [۱۴] نیز مورد تایید قرار گرفته است.

چالش‌زا بودن تخمین میزان کربن مونوکسید در مقایسه با اکسیدهای نیتروژن اساسا به دلیل تفاوت در شیمی واکنش‌های مربوط به تشکیل و مصرف این دو خانواده از آلاینده‌ها می‌باشد.

در موتورهای توربین گاز (حتی در موتورهای هوایی با نواحی احتراق غنی‌سوز و دمابالا) به دلیل زمان اقامت اندک محفظه، تنها مقادیر اندکی NO_X تولید شده و غلظت این آلاینده به مقدار قابل توجهی کمتر از مقادیر مربوط به حالت تعادل می‌باشد. از سوی دیگر، اکسیدهای نیتروژن در صورت تشکیل، مصرف نمی‌شوند.

در مقابل تمام سوخت‌های هیدروکربنی در حین پروسه احتراق مقادیر قابل توجهی CO تولید می‌نمایند و تقریبا تمام این آلاینده نیز به CO_2 تبدیل می‌شود. به بیان دقیق‌تر، برای آن که بتوان مقادیر متعارف کمتر از ۱٪ (حجمی یا مولی) کربن مونوکسید در خروجی محفظه را تخمین زد، باید بتوان با دقت بالا بیش از ۹۹٪ فرآیند اکسیداسیون CO را مدل‌سازی نمود. از سوی دیگر تعداد واکنش‌های درگیر در حین پروسه تولید CO بسیار بیشتر از واکنش‌های مربوط به NO_X بوده و شبکه واکنش‌های مرتبط با این آلاینده نیز بسیار پیچیده‌تر می‌باشد.

با این وجود نتایج مطالعات اخیر نشان داده است که مهمترین عامل عدم توفیق رویکرد ECRN در تخمین CO، عدم قابلیت این روش در مدل‌سازی مناسب تعامل شیمی و آشفتگی است [۴]. مطالعات این مرجع نشان داده است که دقیق‌ترین روش مهندسی جهت تخمین CO در کاربردهای صنعتی، استفاده از حل مستقیم CFD با واکنش‌های کلی بهینه شده جهت تخمین CO می‌باشد.

قابلیت این رویکرد در تخمین دقیق میزان کربن مونوکسید تولیدی محفظه احتراق توربین گاز مورد نظر، اخیرا در مرجع [۱۸] به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته است.

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله الگوریتم تخمین میزان آلاینده‌ها با استفاده از روش شبکه رآکتورهای شیمیایی معادل معرفی و ارزیابی گردید.

بدین منظور ابتدا کلیات الگوریتم ECRN معرفی شده و موضوع سینتیک شیمیایی و مکانیزم‌های بهینه موجود برای تخمین آلاینده‌ها بررسی گردید. در ادامه مساله نمونه مناسبی برای تخمین آلاینده‌ها و پیاده‌سازی الگوریتم انتخاب و معرفی شد و هندسه و شرایط کاری این محفظه ارایه گردید. سپس نتایج شبیه‌سازی عددی جریان واکنشی و به دنبال آن خروجی‌های مدل‌سازی آلاینده‌ها با استفاده از روش ECRN در این محفظه تشریح شد و نتایج مربوطه حساسیت‌سنجی و صحه‌گذاری گردید. در نهایت از این الگوریتم جهت تخمین آلاینده‌ها در یک محفظه احتراق توربین گاز صنعتی استفاده شد.

در کلیه مراحل این مطالعه، مجموعه نرم‌افزارهای ENERGICO و CHEMKIN-PRO به عنوان ابزار تحلیل آلاینده‌های احتراق مورد استفاده قرار گرفت و ورودی‌های CFD مورد نیاز با استفاده از نرم‌افزار FLUENT تولید گردید.

نتایج این مطالعه نشان داد که می‌توان با استفاده از رویکرد ECRN، مقادیر آلاینده‌های NO_X را با دقت بسیار بالا تخمین زد. به بیان دقیق‌تر، کاربرد مناسب این رویکرد در یک توربین گاز صنعتی، امکان تخمین آلاینده‌های NO_X را با دقت نسبی بهتر از ۵٪ فراهم نمود.

با این وجود و به دلایل تشریح شده در قسمت قبل، رویکرد ECRN برای تخمین میزان آلاینده‌های کربن مونوکسید در کاربردهای توربین گاز مناسب نبوده و برای این منظور استفاده از روش حل مستقیم CFD با استفاده بهینه از مکانیزم‌های شیمیایی کلی (مشابه رویکرد مرجع [۴] یا [۱۸]) توصیه می‌گردد.

مراجع

1- Soroudi, M.A., Using Simplified Chemical Kinetics in Natural Gas Combustion Modeling, MSc Thesis, Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran, 2004 (in Persian).

2- Ehrhardt, K.R., Development of a Hybrid Model for the Prediction of Nitric Oxides Emissions of Furnaces, Energy Laboratry, Massachussets Institute of Technology, 1993.

3- Drennan, S.A., Chou, C-P., Shelburn, A.F., Hodgson, D.W., Wang, C., Naik, C.V., Meeks, E., and Karim, H., "Flow Field Derived Equivalent Reactor Networks for Accurate Chemistry Simulation in Gas Turbine Combustors," ASME Paper GT2009-59861, 2009.

4- Xu, F., Nori, V., and Basani, J., "CO Prediction for Aircraft Gas Turbine Combustors," ASME Paper GT2013-94282, 2013.

5- Monaghan, R.F.D., Tahir, R., Bourque, G., Gordon, R.L., Cuoci, A., Faravelli, T., Frassoldati, A., and Curran, H.J., "Detailed Emissions Prediction for a Turbulent Swirling Nonpremixed Flame," Energy & Fuels, Vol. **28**, pp. 1470-1488, 2014.

6- Fichet, V., Kanniche, M., Plion, P., and Gicquel, O., "A Reactor Network Model for Predicting NOx Emissions in Gas Turbines," Fuel, Vol. **89**, pp. 2202-2210, 2010.

7- Park, J., Nguyen, T.H., Joung, D., Huh, K.Y., and Lee, M.C., "Prediction of NOx and CO Emissions from an Industrial Lean-Premixed Gas Turbine Combustor Using a Chemical Reactor Network Model," Energy & Fuels, Vol. **27**, pp. 1643-1651, 2013.

8- Novosselov, I.V., Malte, P.C., Yuan, S., Srinivasan, R., and Lee, J.C.Y., "Chemical Reactor Network Application to Emissions Prediction for Industrial DLE Gas Turbine," ASME Paper GT2006-90282, 2006.

9- Lebedev, A.B., Secundov, A.N., Starik, A.M., Titova, N.S., and Schepin, A.M., "Modeling Study of Gas-Turbine Combustor Emission," Proceedings of the Combustion Institute, Vol. **32**, pp. 2941-2947, 2009.

10- Russo, C., Mori, G., Anisimov, V.V., and Parente, J., "Micro Gas Turbine Combustor Emissions Evaluation Using the Chemical Reactor Modeling Approach," ASME Paper GT2007-27687, 2007.

11- Biagioli, F., and Guthe, F., "Effect of Pressure and Fuel-Air Unmixedness on NOx Emissions from Industrial Gas Turbine Burners," Combustion and Flame, pp. 274-288, Vol. **151**, 2007.

12- Burdet, A., Lachaux, T., de la Cruz Garcia, M., and Winkler, D., "Combustion under Flue Gas Recirculation Conditions in a Gas Turbine Lean Premix Burner," ASME Paper GT2010-23396, 2010.

13- Westbrook, C.K., Mizobuchi, Y., Poinsot, T.J., Smith, P.J., and Warnatz, J., "Computational Combustion," Proceedings of the Combustion Institute, pp. 125-157, Vol. **30**, 2005.

14- Bhargava, A, Kendrick, D.W, Colket, M.B, Sowa, W.A, Casleton, K.H, and Maloney, D.J., "Pressure Effect on NOx and CO Emissions in Industrial Gas Turbines," ASME Paper 2000-GT-97, 2000.

15- Soroudi, M.A., Yazdani, M., Rasooli, N., and Khaledi, H., "Numerical Simulation of Reacting Flow in IGT25 Gas Turbine Combustor, Part I: Natural Gas Combustion," 3rd National Gas Turbine Conference, Iran University of Science and Technology, 2014 (in Persian).

16- Rasooli, N., Soroudi, M.A., Barzanoni, Y., Hadi Bafekr, S., and Mollahasanzadeh, E., "Numerical Simulation of Reacting Flow in IGT25 Gas Turbine Combustor, Part I: Diesel Spray Combustion," 3rd National Gas Turbine Conference, Iran University of Science and Technology, 2014 (in Persian).

17- Polifke, W., Geng, W., and Dobbeling, K., "Optimization of Rate Coefficients for Simplified Reaction Mechanisms with Genetic Algorithms," Combustion and Flame, pp. 113-119, Vol. **35**, 1998.

18- Shahsavari, M., Soroudi, M.A., Yazdani, M., Montazerinejad, S., and Bagheri, Y., "CO Pollutant Prediction of a Stationary Gas Turbine Combustor Using Finite Rate Eddy Dissipation Combustion Model," Fuel and Combustion, Accepted, 2017 (in Persian).