

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Фізико-технічний інститут

«На правах рукопису»

УДК 544.452, 66.094.3

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

А. А. Халатов

(підпис)

(ініціали, прізвище)

Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали

(код і назва)

на тему: **Вплив стадійної подачі повітря при спалюванні метану на процес утворення оксидів азоту**

Виконав: студент 6 курсу, групи ФФ-62м

Чорний Андрій Петрович

(прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

Науковий керівник доцент, к.ф.-м.н. Пономаренко С. М.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Консультант п.н.с., к.т.н. Кобзар С. Г.

(назва розділу)

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Рецензент п.н.с., к.т.н. Борисов І. І.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент

(підпис)

Міністерство освіти і науки України
Національний Технічний Університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Фізико-технічний інститут
Кафедра фізики енергетичних систем

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)
Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

«ЗАТВЕРДЖЕНО»

Завідувач кафедри

<hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-bottom: 2px;"/>	<hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-bottom: 2px;"/>
(підпис)	Халатов. А. А.
« »	(ініціали, прізвище)
_____	_____ 2018 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту

Чорний Андрій Петрович

(прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

1. Тема дисертації: Вплив стадійної подачі повітря при спалюванні метану на процес утворення оксидів азоту,
науковий керівник дисертації _____ доцент, к.ф-м.н. Пономаренко С. М. _____,
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету « 07 » квітня 2018 р № 1058-с.

2. Термін подання студентом дисертації « 07 » травня 2018 р.
3. Об'єкт дослідження: Процеси теплообміну, гідродинаміки та кінетика горіння які впливають на процес горіння в модельній камері згоряння в закрученому потоці при стадійній подачі вторинного повітря.
4. Предмет дослідження: Фактори які впливають на процес утворення оксидів азоту при стадійній подачі повітря в закрученому потоці в модельній камері згоряння.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: Для циліндричної модельної камери згоряння змодельювати процес горіння при стадійній подачі вторинного повітря; Провести верифікацію програмного комплексу ANSYS CFX; Знайти геометрично вигідне положення отвору для подачі вторинного повітря; Знайти оптимальне значення відсотку повітря що йде на стадійне спалювання; Проаналізувати сумарні гідродинамічні втрати.
6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу: презентація.

7. Орієнтовний перелік публікацій: 1. Вплив стадійного спалювання метану на утворення оксидів азоту (при оптимальному положенні отвору). 2. Вплив стадійного спалювання метану на утворення оксидів азоту (при різних значеннях вторинного повітря).
8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання видав
1	п.н.с., к.т.н. Борисов І. І.		
2	п.н.с., к.т.н. Борисов І. І.		
3	п.н.с., к.т.н. Борисов І. І.		

9. Дата видачі завдання « 10 » жовтня 2016 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1.	Опрацювання літератури за темою		
2.	Написання літературного огляду		
3.	Моделювання стадійної подачі повітря		
4.	Знаходження геометрично вигідного положення		
5.	Написання другої частини дипломної роботи		
6.	Варіювання подачі вторинного повітря		
7.	Виступ на конференції		
8.	Написання основної частини дипломної роботи		
9.	Написання висновків		
10.	Подання роботи на рецензування		
11.	Підготовка доповіді та презентації		
12.	Подання роботи до захисту		

Студент

(підпис)

А. П. Чорний

(ініціали, прізвище)

Науковий керівник дисертації

(підпис)

С. М. Пономаренко

(ініціали, прізвище)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка дисертації за обсягом становить 81 сторінок, містить 10 таблиць та 20 рисунків. Використано 34 бібліографічних джерела.

В модельному реакторі для числа закрутки $S = 1,0$; , параметру $L = 0,3; 0,4; 0,5$; коефіцієнту надлишку повітря $\alpha = 1,05$ та $\alpha_{sec} = 10; 20; 30\%$ виконано дослідження впливу стадійної подачі повітря при спалюванні метану на процес утворення оксидів азоту.

Мета. Дослідити вплив стадійної подачі повітря в модельній камері згоряння в закрученому потоці на утворення оксидів азоту при горінні метану.

Завдання роботи. Для досягнення мети необхідно:

- а) Для циліндричної модельної камери згоряння змоделювати процес горіння при стадійній подачі вторинного повітря
- б) Провести верифікацію програмного комплексу ANSYS CFX
- в) Знайти геометрично вигідне положення отвору для подачі вторинного повітря
- г) Знайти оптимальне значення відсотку повітря що йде на стадійне спалювання
- д) Проаналізувати сумарні гідродинамічні втрати.

Об'єкт дослідження. Процеси теплообміну, гідродинаміки та кінетика горіння які впливають на процес горіння в модельній камері згоряння в закрученому потоці при стадійній подачі вторинного повітря.

Предмет дослідження. Фактори які впливають на процес утворення оксидів азоту при стадійній подачі повітря в закрученому потоці в модельній камері згоряння.

Методи дослідження. Для досягнення поставленої мети використано метод чисельного моделювання за допомогою CFD пакету ANSYS CFX. Коректність даних забезпечена:

а) Верифікацією програмного комплексу ANSYS CFX та порівняння з даними експерименту

б) коректним використанням програмного комплексу ANSYS CFX який має міжнародний сертифікат якості ISO 9001:2008

Наукова новизна отриманих результатів: Вперше показано вплив стадійної подачі повітря на гідродинамічні витрати пов'язані з подачею повітря в модельну камеру згоряння в закрученому потоці.

Практичне значення отриманих результатів. Виявлено що в діапазоні 0...30% подачі вторинного повітря та при положенні отвору для подачі вторинного повітря в оптимальному положенні для даної геометрії камери згоряння дозволяє знизити емісію оксидів азоту та зменшити гідродинамічні втрати на забезпечення процесу горіння. Отримані дані можуть бути використані для моделювання та впровадження камер згоряння які геометрично схожі на обрану модель.

Персональний вклад здобувача. Здобувачем було створено геометричні моделі та виконано чисельне моделювання впливу стадійної подачі вторинного повітря на процес горіння метану при різних конфігураціях подачі вторинного повітря.

Апробація результатів. Основні результати дослідження було обговорено и отримали схвалення на XV та XVI всеукраїнській науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота зроблена згідно з темою «Вплив стадійної подачі повітря при спалюванні метану на процес утворення оксидів азоту » відділу цільової підготовки НТУУ «КПІ» ім. Ігоря Сікорського.

Публікації:

Чорний А. П., Кобзар С. Г., Пономаренко С. М. Вплив закрутки потоку на утворення оксидів азоту // XIV Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. – 2016. – Т. 1. – С. 136.

Чорний А. П., Кобзар С. Г., Пономаренко С. М. Вплив стадійного спалювання метану на утворення оксидів азоту // XV Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. – 2017. – Т. 1. – С. 126.

Чорний А. П., Кобзар С. Г., Пономаренко С. М. Вплив стадійного спалювання метану на утворення оксидів азоту // XVI Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. – 2018. – Т. 1. – С. 106.

Метою роботи було дослідження впливу стадійної подачі повітря в модельній камері згоряння в закрученому потоці на утворення оксидів азоту при горінні метану. Було змодельовано процес горіння метану в циліндричній камері згоряння, верифіковано програмний комплекс ANSYS CFX, проведено чисельне моделювання стадійної подачі повітря, знайдено геометрично вигідне положення отвору для подачі вторинного повітря, знайдено оптимальне значення відсотку повітря що йде на стадійне спалювання та сформульовано наступні висновки:

а) Аналіз літератури показав, що процеси горіння надзвичайно складні та потребують складних моделей та наближень. Окремо було розглянуто процеси утворення оксидів азоту при горінні газоподібних палив.

б) Дослідження за допомогою пакету прикладних програм ANSYS CFX показало, що впливу стадійної подачі вторинного повітря при спалюванні метану в вихровому потоці на процес утворення оксидів азоту при оптимальному положенні отвору для подачі вторинного повітря та в заданому діапазоні зміни витрат вторинного повітря зменшує емісію оксидів азоту.

в) Організація стадійного спалювання в вихровому потоці призводить до зменшення сумарних гідравлічних втрат, що пов'язано зі зменшенням втрат на завихрення потоку первинного повітря.

Ключові слова: *оксиди азоту, закручення потоку, зменшення оксидів азоту, вплив закрутки, стадійне горіння метану.*

SUMMARY

Explanatory note of thesis contains 81 pages 10 tables and 20 figures with 34 names of bibliographic sources. The theme of this work is influence of staged air delivery on the nitrogen oxide generation process during methane combustion.

In the model reactor for the spin number $S = 1,0$; the parameter $L = 0,3; 0,4; 0,5$; the excess air coefficient $\alpha = 1,05$ and $\alpha_{sec} = 10; 20; 30\%$ the study of the influence of the staged air supply during the combustion of methane on the process of formation of nitrogen oxides.

Objective Investigation of the influence of the staged air supply in a model combustion chamber in a twisted flow on the formation of nitrogen oxides when combusted with methane.

Tasks. To achieve the goal, you need:

- a) For a cylindrical combustion model chamber, simulate the combustion process with a staged secondary air supply
- b) Verify the ANSYS CFX software package
- c) Find the geometrically advantageous position of the hole for the supply of secondary air
- d) Find the optimal value of the percentage of air going to the staged combustion
- e) Analyze total hydrodynamic losses.

Subject. The processes of heat exchange, hydrodynamics and combustion kinetics that affect the combustion process in a model combustion chamber in a twisted stream with a staged feed of secondary air.

Subject of research. Factors that influence the process of formation of nitrogen oxides in the staged air supply in a twisted flow in the model combustion chamber.

Research Methods. To achieve this goal, the numerical simulation method using the ANSYS CFX CFD package is used. The correctness of data is secured:

a) Verification of the ANSYS CFX software package and comparison with experiment data

b) Correct use of the ANSYS CFX software system which has an international ISO 9001: 2008 quality certificate

Scientific novelty of the results: For the first time, the effect of the staged air supply on hydrodynamic charges is shown with the supply of air to the model chamber of combustion in a twisted flow.

The practical value of the results. It was found that in the range of 0...30% the supply of secondary air and at the position of the opening for supplying secondary air in an optimum position for this geometry, the combustion chamber reduces the emission of nitrogen oxides and reduces the hydrodynamic losses to ensure the combustion process. The obtained data can be used for simulation and introduction of combustion chambers which are geometrically similar to the chosen model.

Personal contributor contribution. The geometric models were created by the competitor and the numerical modeling of the influence of the staged feed of the secondary air on the methane combustion process at different configurations of secondary air supply was performed.

Testing results. The main results of the study were discussed and approved at the XV and XVI All-Ukrainian scientific and practical conference of students, postgraduates and young scientists.

Work with scientific programs, plans, themes. The work was done according to the topic « The influence of the staged air supply during combustion of methane on the process of formation of nitrogen oxides » of the targeted training of NTUU « KPI » them. Igor Sikorsky

Publications: Chornyi A.P., Kobzar S.G., Ponomarenko S.M. Influence of twist of flow on nitrogen // XIV All-Ukrainian scientific and practical conference of students, and young scientists. - 2016. - T. 1. - P. 136.

Chornyi A.P., Kobzar S.G., Ponomarenko S.M. The Effect of Stage Combustion of Methane on the Formation of Nitrogen Oxides // XV All-Ukrainian Scientific and Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists. - 2017. - T. 1. - P. 126.

Chornyi A.P., Kobzar S.G., Ponomarenko S. M. The Effect of Stage Incineration methane on the formation of nitrogen oxides // XVI All-Ukrainian scientific and practical conference of students, and young scientists. - 2018. - T. 1. - P. 106.

This work was done in accordance with the the theme "Influence of staged air delivery on the nitrogen oxide generation process during methane combustion" targeted training department of NTU "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute" NAS of Ukraine.

The research gave us the following results:

a) Analysis of literature has shown that combustion processes are extremely complex and require complex models and approximations. Separately, the processes of formation of nitrogen oxides during combustion of gaseous fuels were considered.

b) An analysis of the ANSYS CFX application package showed that the influence of the staged feed of secondary air during the combustion of methane in the vortex flow on the formation of nitrogen oxides at the optimal position of the hole for the supply of secondary air and in a given range of changes in the cost of secondary air reduces the emission of nitrogen oxides.

c) The organization of staged combustion in a vortex stream leads to a decrease in total hydraulic losses, which is associated with a decrease in the loss of the vortex of the primary air stream.

Key words: *nitrogen oxides, swirl flow, reducing nitrogen oxides, the effect swirl, methane combustion process.*

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ	12
ВСТУП	13
РОЗДІЛ 1. Сучасний стан проблеми	15
1.1. Класифікація процесів горіння	15
1.2. Характеристики та механізми горіння	18
1.3. Експериментальні методи досліджень	20
1.3.1. Горіння газів	21
1.4. Теоретичні методи досліджень	23
1.5. Математичний опис	25
1.6. Висновки до розділу 1	27
РОЗДІЛ 2. ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ГОРІННЯ ТА УТВОРЕННЯ ОКСИДІВ АЗОТУ. ВЕРІФІКАЦІЯ ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ ANSYS CFX . ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ	28
2.1. Моделювання процесів горіння	28
2.1.1. Миттєві балансові рівняння	28
2.1.2. Осереднення Рейнольдса і Фавра	30
2.1.3. Осереднені по Фавру балансові рівняння	31
2.1.4. Моделювання турбулентної течії	33
2.1.5. Моделювання променистого теплообміну	34
2.1.6. Методи знаходження середньої швидкості хімічної реакції компоненти при моделюванні горіння газоподібного палива	37
2.2. Особливості моделювання утворення оксидів азоту	39
2.2.1. Механізм утворення термічного NO_x	41
2.2.2. Prompt NO_x механізм	43
2.2.3. Механізм утворення паливного NO_x	44

	11
2.3. Методи зниження оксидів азоту	48
2.4. Висновки до розділу 2	51
2.5. Постановка задачі	51
РОЗДІЛ 3. ВЕРІФІКАЦІЯ ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ ANSYS CFX	52
3.1. Верифікація програмного комплексу ANSYS CFX для розрахунку завихрених потоків.	52
3.1.1. Підхід до комп'ютерного моделювання	52
3.1.2. Механізми горіння.	52
3.1.3. Геометрична 3D-модель і розрахункові сітки.	54
3.1.4. Граничні умови та витрати	57
3.1.5. Верифікація моделей турбулентності	57
3.1.6. Верифікація моделей горіння	60
3.2. Висновки до розділу 3	62
РОЗДІЛ 4. Утворення оксидів азоту при стаціонарному спалюванні метану .	63
4.1. Безстаціонарне горіння	63
4.1.1. Розподіл швидкості	63
4.1.2. Розподіл температури	63
4.1.3. Досліджувані величини	64
4.1.4. Пошук геометрично вигідного положення.	64
4.2. Аналіз параметрів потоку при різних значеннях надлишку пові- тря	67
4.2.1. Температурні поля.	67
4.2.2. NO _x та CO	69
4.2.3. Витрати на стаціонарну подачу повітря	72
4.3. Висновки до розділу 4	72
ВИСНОВКИ.	75
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	76
ДОДАТОК А. Розрахунок похибок	80

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

Латинські символи:

c — теплоємність;

H — ентальпія;

k — кінетична енергія турбулентності;

M — молярна маса;

\dot{m}_k — середня швидкість реакції;

P — абсолютний тиск;

p — парціальний тиск;

R — універсальна газова постійна;

R_i — швидкість i -ї реакції;

T — абсолютна температура;

u, v, w — компоненти швидкості;

x, y, z — координатні осі;

$[X_i]$ — молярна концентрація;

Y_i — масова концентрація.

Грецькі символи:

α — коефіцієнт надлишку повітря;

λ — коефіцієнт теплопровідності, Вт/м·К;

μ — динамічна в'язкість, Н·с/м²;

ν — кінематичний коефіцієнт в'язкості, м²/с

ρ — густина, кг/м³.

σ — константа Стефана-Больцмана;

Скорочення:

WD1 — одностадійний механізм хімічної кінетики горіння метану;

WD2 — двостадійний механізм хімічної кінетики горіння метану;

WD3 — тристадійний механізм хімічної кінетики горіння метану.

ВСТУП

Процеси горіння рідких, твердих і газоподібних палив широко використовуються практично у всіх галузях сучасної техніки і технології.

Найбільш важливу роль процеси горіння грають в теплоенергетиці. Теплові електростанції використовують енергію горіння вугілля, горючих газів, і рідких вуглеводнів.

Процеси горіння використовуються для отримання рушійної сили різних транспортних засобів, починаючи від паровоза і аж до сучасних ракетних двигунів, автомобілів, літаків, суден і т.д. Важливим напрямком в науці про горіння є екологічні аспекти горіння, які отримали великий розвиток останнім часом. До них відносяться технологія спалювання побутових відходів, вивчення механізмів утворення екологічно шкідливих продуктів згоряння (оксиди азоту, сажа, сполуки хлору). Ці дослідження дозволяють знайти умови, при яких концентрація токсичних речовин у викидах мінімальна.

Мета та задачі. Мета роботи — дослідження впливу стадійної подачі повітря в модельній камері згоряння в закрученому потоці на утворення оксидів азоту при горінні метану. Для досягнення мети необхідно:

- а) Для циліндричної модельної камери згоряння змоделювати процес горіння при стадійній подачі вторинного повітря
- б) Провести верифікацію програмного комплексу ANSYS CFX
- в) Знайти геометрично вигідне положення отвору для подачі вторинного повітря
- г) Знайти оптимальне значення відсотку повітря що йде на стадійне спалювання

Об'єкт дослідження. Процеси теплообміну, гідродинаміки та кінетика горіння які впливають на процес горіння в в модельній камері згоряння в закрученому потоці при стадійній подачі вторинного повітря.

Предмет дослідження. Фактори які впливають на процес утворення оксидів азоту при стадійній подачі повітря в закрученому потоці в модельній камері згоряння.

Методи дослідження. Для досягнення поставленої мети використано метод чисельного моделювання за допомогою CFD пакету ANSYS CFX. Коректність даних забезпечена:

- а) Верифікацією програмного комплексу ANSYS CFX та порівняння з даними експерименту
- б) коректним використанням програмного комплексу ANSYS CFX який має міжнародний сертифікат якості ISO 9001:2008

Наукова новизна отриманих результатів: Вперше показано вплив стадійної подачі повітря на гідродинамічні витрати пов'язані з подачею повітря в модельну камеру згоряння в закрученому потоці.

Практичне значення отриманих результатів. Виявлено що в діапазоні 0...30% подачі вторинного повітря та при положенні отвору для подачі вторинного повітря в оптимальному положенні для даної геометрії камери згоряння дозволяє знизити емісію оксидів азоту та зменшити гідродинамічні втрати на забезпечення процесу горіння. Отримані дані можуть бути використані для моделювання та впровадження камер згоряння які геометрично схожі на обрану модель.

Персональний вклад здобувача. Здобувачем було створено геометричні моделі та виконано чисельне моделювання впливу стадійної подачі вторинного повітря на процес горіння метану при різних конфігураціях подачі вторинного повітря.

Апробація результатів. Основні результати дослідження було обговорено и отримали схвалення на XV та XVI всеукраїнській науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених.

РОЗДІЛ 1.

СУЧАСНИЙ СТАН ПРОБЛЕМИ

1.1. Класифікація процесів горіння

Процеси горіння класифікують по декількох ознаках: По агрегатному стані компонентів горючої суміші в зоні горіння. Як відомо, речовини можуть перебувати в трьох агрегатних станах: газоподібному, рідкому і твердому.

Залежно від того, в якому агрегатному стані знаходяться компоненти горючої суміші в зоні горіння, розрізняють два види або режиму горіння: гомогенне, якщо обидва компонента знаходяться в зоні горіння в однаковій фазі (однаковому агрегатному стані), і гетерогенне, якщо компоненти горючої суміші в зоні горіння знаходяться в різних агрегатних станах.

У більшості випадків горіння є гомогенним. Прикладом гетерогенного, горіння без полум'я, є горіння антрациту, коксу, а в умовах пожежі – твердого вуглецевого залишку, який виходить при розкладанні твердих горючих матеріалів, наприклад деревини. В цьому випадку всі летючі продукти піролізу вже вигоріли і горіння відбувається безпосередньо на поверхні матеріалу.

За способом утворення горючої суміші. Залежно від умов сумішоутворення, компонентів і співвідношення швидкості хімічної реакції горіння і швидкості сумішоутворення розрізняють два характерних режими горіння: кінетичне і дифузійне.

Визначальним у цьому випадку є те, яка з стадій в сумарній швидкості процесу горіння є границею: швидкість сумішоутворення або швидкість хімічного перетворення компонентів суміші в продукти горіння.

Повний час згоряння хімічно неоднорідної системи складається з часу, необхідного для виникнення фізичного контакту між горючою речовиною і киснем повітря, і часу самої хімічної реакції .

На пожежі в основному зустрічається горіння заздалегідь незмішаних газів. Горюча суміш виходить в самій зоні горіння. Компоненти реакції надходять в зону взаємодії з різних середовищ, кожна з яких містить лише один з реагуючих компонентів. У цій ситуації взаємодія можлива тільки внаслідок перенесення реагуючих компонентів за рахунок дифузії через кордон розділу обох середовищ.

Час фізичного процесу дифузії кисню до пального речовини незрівнянно більше часу, необхідного для протікання хімічної реакції горіння. В цьому випадку Якщо швидкість перенесення речовини менше швидкості реакції, то швидкість горіння визначається лише швидкістю масообміну (швидкістю дифузії кисню до пального речовини). У цьому випадку прийнято говорити, що реакція горіння протікає в дифузійній області, а саме горіння називається дифузійним. Якщо вже є готова суміш, яка складається з горючого газу і окислювача, то горіння класифікується як кінетичне.

Термін «кінетичне горіння» введений внаслідок того, що швидкість процесу горіння залежить, в основному, від швидкості протікання хімічної реакції між горючою речовиною і окислювачем, тобто від кінетики відповідної реакції горіння. У цьому випадку сумарна швидкість процесу горіння лімітується тільки швидкістю (кінетикою) хімічної реакції. Повний час згоряння хімічно однорідної системи приблизно дорівнює часу, яке витрачається на перебіг самої хімічної реакції.

Кінетичне горіння найбільш часто протікає на початковій стадії пожежі. Якщо згоряння такої газоповітряної суміші відбувається в закритому або обмеженому просторі, воно набуває характеру вибуху. Вибуховий характер спостерігається тоді, коли виділяється при згорянні суміші енергія не встигає відводитися за межі даного обсягу, при цьому тиск зростає, що часто призводить до руйнування конструкцій [25].

Після виникнення горіння фронт полум'я, або зона хімічної реакції, починає поширюватися по горючій суміші. Залежно від механізму поширення

горіння по горючій суміші розрізняють два характерних режиму горіння: дефлаграційне і детонаційне.

При відносно невеликих швидкостях (порівняно повільне поширення зони хімічних реакцій, зі швидкостями руху фронту полум'я по горючій суміші від 0,5 до 50 м/с) відбувається пошарове займання холодної газової суміші за рахунок її нагрівання від зони горіння. Це тепло і є причиною підтримки процесу горіння. Передача теплового імпульсу із зони горіння в холодну горючу суміш відбувається за рахунок процесу теплопровідності. Такий механізм називається дефлаграція [31].

Існує й інший механізм поширення горіння — за рахунок швидкого адиабатичного стиснення горючої суміші. Такий механізм горіння називається детонацією. Детонація може виникнути у вибуховій середовищі в разі її попереднього швидкого стиснення сильною ударною хвилею. Таку хвилю може створити зовнішній імпульс (наприклад згоряння вибухової речовини). Характерною особливістю ударного стиснення є сильне нагрівання газу (до 1500 – 1700 K).

Горюча суміш, нагріта сильною ударною хвилею до такої температури, спалахує. Мимовільне виникнення детонації в палаючому газі, можливо при достатній швидкості поширення горіння — більшою, ніж 500 м/с, в той час як нормальна швидкість поширення полум'я не перевищує 10 м/с. Важливою характеристикою гомогенного горіння є газодинамічний стан компонентів горючої суміші в зоні реакції, який залежить від інтенсивності надходження компонентів горючої суміші в зону реакції.

Якщо компоненти горючої суміші надходять в зону реакції повільно, по законам молекулярної або слабкою конвекційною дифузії, то процес горіння є ламінарним. При ламінарному режимі горіння швидкість і напрямок окремих частин газового потоку практично однакові.

Якщо потоки горючого газу і окислювача або готової горючої суміші надходять інтенсивно, то режим горіння буде турбулентним, тобто з інтенсивними завихреннями, переміщуванням продуктів горіння з вихідної сумішшю, відривом зони горіння від основного факела полум'я. Параметром, який характеризує газодинаміку горіння, є критерій Рейнольдса — Re . Так, у разі горіння суміші в трубі, якщо $Re < 2300$, то полум'я відноситься до ламінарного, якщо $2300 < Re < 10000$ — полум'я перехідний, при $Re > 10000$ — турбулентний [25].

1.2. Характеристики та механізми горіння

Розрізняють два механізми займання — тепловий та ланцюговий. Перший механізм пов'язаний з існуванням енергії активації відповідних реакцій. Загалом, складові частини газової суміші (палива з повітрям) реагують один з одним і при більш низьких температурах, в порівнянні з температурами що відповідають появі полум'я (тобто швидко протікаюча реакція, що супроводжується виділенням тепла і світла). Однак при низьких, взаємодіють тільки окремі молекули, тому теплота, що виділяється порівняно невелика і швидко розсіюється внаслідок теплопровідності, випромінювання тощо. При підвищенні температури в місці нагріву число активних молекул біля нього зростає, і виділення тепла в результаті їх взаємодії відповідно збільшується. При певних температурних умовах (відповідних температурам займання) поблизу місця нагріву створюється таке місце, коли за одиницю часу тепла виділяється більше, ніж розсіюється. Це призводить до нагрівання до температури займання сусідніх ділянок системи, від яких подібним же чином активація молекул поширюється на інші ділянки тощо.

Результатом є різке збільшення швидкості процесу у всьому реакційному просторі, що виявляється у виникненні полум'я. При ланцюговому механізмі, займання пояснюється тим, що хімічна енергія, що виділяється йде на утворення реакційноспроможних частинок (атомів і радикалів), а збільшення їх числа викликає самоприскорену реакцію. При цьому практично виміряти швидкість реакції не можна, так як вона змінюється (зростає) дуже швидко. При тепловому режимі, час займання швидкість реакції виміряти можна. Крім того, ланцюгове займання йде в основному при низьких температурах, і навіть мінусових, тоді як теплове-зазвичай при високих температурах.

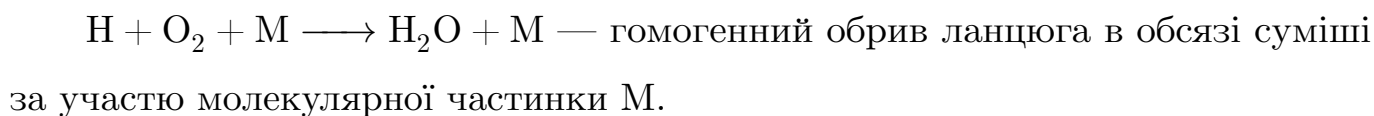
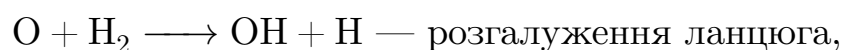
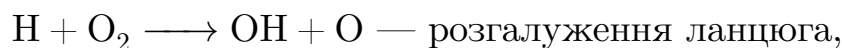
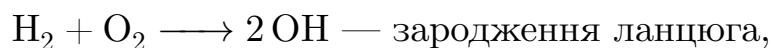
Займання переходить в горіння. Останнє характеризується тим, що підтримується саме собою, — нові порції палива загоряються без подачі додаткового тепла. Горіння в більшості випадків пояснюється ланцюговими реакціями.

Прискорити реакцію можна не тільки за рахунок підвищення температури при підігріву в ході екзотермічної реакції, а й в результаті особливого типу хімічних перетворень при горінні — ланцюгових розгалужених реакцій. Ці реакції відбуваються за рахунок особливих активних частинок — радикалів і вільних атомів, що мають вільні валентні зв'язки. При зіткненні цих частинок з вихідними молекулами або продуктами перетворення взаємодія між ними протікає при значно менших величинах енергії активації, ніж при молекулярних процесах.

Причому, в ході протікання ланцюгових реакцій особливого роду — розгалужених — швидкість реакції може бурхливо рости за рахунок того, що в результаті взаємодії активного центру з молекулою утворюється кілька активних центрів. Від додатково створених активних частинок починаються власні ланцюги перетворень, що призводить до ще більшого накопичення активних центрів і лавиноподібне наростання швидкості сумарного процесу. Однак, поряд з розгалуженням ланцюгового процесу відбуваються реакції, що ведуть до загибелі активних центрів або до обриву ланцюгів. Остаточний

результат залежить від співвідношення швидкостей реакцій розгалуження і обриву ланцюгів, що характеризується виразом:

Типовим прикладом розгалуженої ланцюгової реакції є окислення водню при горінні водню, що описується наступною схемою [25] :



1.3. Експериментальні методи досліджень

Створення і розвиток методів діагностики процесів горіння є одним із актуальних завдань наукових і прикладних досліджень. Для кожного конкретного виду горіння відповідно до початковим фазовим складом компонентів діагностичні методи розвивалися з метою вирішення певних наукових і практичних завдань використання процесів горіння.

Найбільшого поширення в практиці знайшли оптичні методи дослідження, що відповідають необхідності вивчення швидкоплинних процесів горіння. І це слід віднести фотографічних методів в різних варіантах (швидкісна і надшвидкісна фотографія), тіньові, інтерференційні, спектральні методи, методи вимірювання температури і іонізації в полум'ях (безконтактні та контактні).

1.3.1. Горіння газів

Зазвичай прийнято вважати горінням будь-яку швидко протікаючу хімічну реакцію, що супроводжується виділенням тепла і випромінювання. Характерною рисою процесу горіння є здатність до просторового поширення внаслідок передачі тепла і дифузії активних продуктів (нормальне поширення полум'я) [26].

Встановлення зв'язку швидкості розповсюдження полум'я зі швидкістю хімічної реакції і тепловими властивостями суміші представляє основну задачу теорії горіння. Методи, що використовуються для вимірювання нормальної швидкості поширення полум'я можна класифікувати наступним чином: метод пальника, метод плоского полум'я, метод мильної бульбашки, метод судини постійного об'єму, метод циліндричної труби. Існують три способи спостереження за полум'ям: спостереження за світною зоною полум'я, використання тіньового методу фіксації стрибка щільності при точковому джерелі світла, використання шлірен-фотографії полум'я.

Процеси, які відбуваються в турбулентному полум'я, дуже складні. В даний час в статистичній теорії турбулентності розроблені методи розрахунку течії для окремих часткових випадків і встановлено якісне відповідність з експериментальними спостереженнями. Експериментальні дослідження турбулентного горіння проводяться в двох напрямках: дослідження макро- і мікроструктури турбулентного факела з метою перевірки тієї чи іншої моделі горіння і дослідження сумарних характеристик, наприклад, швидкості і ширини зони горіння і вплив на ці характеристики різних факторів (параметрів турбулентності, тиску, температури) [26].

Експериментальні методи вимірювання характеристик поширення полум'я в турбулентному потоці діляться на три групи. Вони засновані на вимірюванні

локальних характеристик потоку за допомогою малогабаритних зондів пульсації швидкості, температури, щільності тощо. Основними методами в цій групі є наступні методи: термоанемометр, метод анемометра з тліючим розрядом. До другої групи належать методи, засновані на вивченні дифузії в турбулентних потоках.

До термохімічних характеристик горючої суміші відносяться її теплотворна здатність і теоретична температура горіння, тобто температура, що досягається при повному згорянні без тепловтрат. При температурах горіння вище 2000 K, коли стає істотною дисоціація продуктів горіння, розрахунок температури горіння проводиться за формулами статистичної термодинаміки методом послідовних наближень. Відповідні константи беруться з аналізу молекулярних спектрів. Реальна температура завжди нижче теоретичної. Вона визначається кількістю тепла, що виділяється при горінні, складом і кількістю продуктів горіння і кількістю тепла, що віддається в навколишнє середовище [29].

Успішне вимірювання температури полум'я при горінні визначається правильним вибором методу вимірювання. Завдання вибору методу є досить складною, оскільки доводиться шукати оптимальні рішення — з огляду на велику кількість суперечливих факторів. Основними факторами, що визначають вибір методу вимірювання, є область вимірювання температури, динаміка досліджуваного процесу, чутливість і точність вимірювання.

Методи вимірювання температури полум'я можна розділити на контактні і безконтактні. Широко використовується термоелектричний метод — розміщення термопари в досліджувану середу. Використовувані оптичні методи вимірювання температури (яскравістний, колірний, метод звернення спектральних ліній та ін.) мають високу чутливість та широкий діапазон вимірювання температур. Поєднання результатів отриманих методами швидкісної спектроскопії, з комп'ютерною обробкою даних про склад продуктів хімічних реакцій, температурі товщині зон реакції і з вимірюванням швидкості

поширення полум'я дозволяє вирішувати фізико-хімічні задачі теорії горіння газів [31].

1.4. Теоретичні методи досліджень

Теоретичні методи досліджень процесів горіння засновані на:

- а) Термодинаміці
- б) Механіці рідин і газів
- в) Теплопередачі та масообміну
- г) Хімічній кінетиці

Нижче приведена таблиця 1.1 зв'язку між рушійними силами за законами що їх описують.

Таблиця 1.1

Зв'язок між рушійними силами за законами що їх описують

Рушійні сили		Переносима величина		Відповідає закону
Гرادієнт концентрації	→	Частинки	→	Закон дифузії Фіка
Градієнт тиску	→	Імпульс	→	Закон в'язкості Ньютона
Градієнт температури	→	Енергія	→	Закон Фур'є

В системі з градієнтом концентрації речовини dC/dx в напрямку дифузний потік J дорівнює:

$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad (1.1)$$

У разі градієнта концентрації не тільки в напрямку , треба використовувати більш загальну формулу:

$$J = -DC \nabla \mu \quad (1.2)$$

В системі з градієнтом концентрацій речовини dC/dx в напрямку швидкості зміни концентрації речовини в даній точці, обумовлена дифузією, визначається:

$$\frac{dC}{dt} = D \frac{d^2C}{dx^2} \quad (1.3)$$

Просте рівняння, що описує сили в'язкості в ньютонівській рідині, багато в чому визначають її поведінку, засноване на зсувній течії:

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \quad (1.4)$$

де:

τ — дотичне напруження, яке викликається рідиною,

μ — динамічний коефіцієнт в'язкості,

$\frac{\partial u}{\partial y}$ — похідна швидкості в напрямку, перпендикулярному напрямку зсуву.

У сталому режимі щільність потоку енергії, що передається за допомогою теплопровідності, пропорційна градієнту температури:

$$\bar{q} = -\chi grad(T) \quad (1.5)$$

де \bar{q} — вектор щільності теплового потоку — кількість енергії, що проходить в одиницю часу через одиницю площі, перпендикулярної кожної осі, χ — коефіцієнт теплопровідності (питома теплопровідність), T — температура. Мінус в правій частині показує, що тепловий потік спрямований протилежно вектору $grad(T)$ (тобто в бік якнайшвидшого зменшення температури). Цей вираз відомий як закон теплопровідності Фур'є [32].

На підставі цих законів були отримані складні моделі і наближення процесів горіння.

1.5. Математичний опис

Для ламінарних і турбулентних режимів горіння набір характерних хімічних реакцій залишається однаковим. Хімічні реакції підкоряються однаковим законам, як в турбулентному, так і в ламінарному потоці, відмінність полягає в зміні фізичних властивостей течії, які впливають на горіння. Тому часто приділяють більшу увагу розрахунку структури турбулентного потоку, ніж самої кінетики процесу горіння при розрахунку горіння.

Процес горіння може бути спрощений і зведений до одного спільного рівняння процесу горіння і записаний, ґрунтуючись на стехіометричному балансі мас:

$$1 \text{ кг палива} + r \text{ кг окислювача} = (1 + r) \text{ кг продуктів} \quad (1.6)$$

При такому підході приймається, що реакція між паливом і киснем йде до кінця і всі компоненти перетворюються в продукти. Зазвичай горіння складніше ніж (1.6) і включає безліч проміжних реакцій. Для компонентів з низькою концентрацією, наприклад CO, H₂, радикали тощо, припущення про повне згоряння є невірним. Ці компоненти можуть бути правильно розраховані шляхом введення в розрахунок додаткових даних з хімічної кінетики.

Для системи з N_s компонентами та N_r реакціями загальний вираз реакції можна записати в наступному вигляді:

$$\sum_{k=1}^{N_s} \nu'_{kl} A_k \rightarrow \sum_{k=1}^{N_s} \nu''_{kl} A_k \quad (1.7)$$

де $k = 1 \dots, N_r$, ν'_{kl} и ν''_{kl} стехіометричні коефіцієнти для компоненти A_k (1.7)

Швидкість утворення компоненти k записується в такий спосіб

$$R_k = M_k \sum_{l=1}^{N_r} \left\{ (\nu''_{kl} - \nu'_{kl}) \cdot k_l \prod_{i=1}^{N_s} c_i^{\nu'_{il}} \right\} \quad (1.8)$$

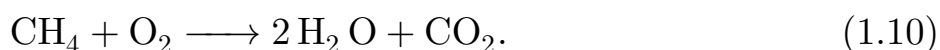
Коефіцієнт реакції k_l для реакції l знаходиться за законом Арреніуса:

$$k_l = k_l(T) = A_l T^{\beta_l} \exp\left(-\frac{E_{al}}{RT}\right) \quad (1.9)$$

Часові масштаби для різних елементарних реакцій відрізняються на кілька порядків. Деякі реакції протікають швидко, а деякі повільно. Тому розв'язок повного набору реакцій практично неможливий. На практиці доводиться обмежуватися певним набором реакцій, які включають найбільш важливі з точки зору кінцевої мети компоненти.

Так, наприклад горіння метану відбувається за участю 39 різних елементарних реакцій, але часто процес горіння спрощують і зводять до однієї або до двох узагальнених реакцій. Це робиться в припущенні, що реакції повністю завершуються і реагенти перетворюються в продукти [12].

Так, наприклад одностадійний механізм горіння метану буде представлений реакцією:

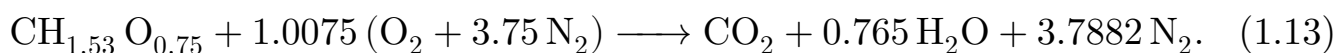


Двостадійний узагальнений механізм горіння, який часто використовується при моделюванні процесів горіння, так як виділяє CO окремим членом, що дає можливість прогнозувати емісію цієї речовини, виглядає наступним чином:





Подібні спрощення робляться при моделюванні інших вуглеводневих палив, таких як вугілля, біомаса. Виходячи з елементного аналізу палива, складається формула так званого сурогатного палива. Так наприклад солома в середньому містить по масі 6% Н, 47% О і 47% С. Ґрунтуючись на цих даних отримуємо загальну реакцію горіння соломи в повітрі [28]:



Для комплексного вирішення завдання горіння необхідно в математичний апарат включити гідродинамічну і теплову складові.

1.6. Висновки до розділу 1

Проведений огляд літератури показав, що процеси горіння складні та потребують складних математичних моделей та наближень. Процеси горіння газоподібних палив в залежності від режиму горіння, умов в середовищі, параметрів стехіометрії потребують ретельного дослідження при виборі параметрів при чисельному моделюванні процесів горіння.

РОЗДІЛ 2.

ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ГОРІННЯ ТА
УТВОРЕННЯ ОКСИДІВ АЗОТУ. ВЕРІФІКАЦІЯ ПРОГРАМНОГО
КОМПЛЕКСУ ANSYS CFX . ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

2.1. Моделювання процесів горіння

2.1.1. Миттєві балансові рівняння

Стандартний набір рівнянь для опису згоряння включає в себе класичні рівняння Нав'є-Стокса передачі компоненти реакції і рівняння переносу енергії. Згідно [2; 24; 33] миттєвий місцевих баланс рівнянь, які написані наступним чином:

Маси:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1)$$

Руху :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (2.2)$$

де τ_{ij} тензор в'язких напружень и F_i – масова сила. Компонент (N компонент при $k = 1, \dots, N$):

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_j^k}{\partial x_j} + \dot{m}_k \quad (2.3)$$

де J_j^k – молекулярний дифузний потік компоненти k и \dot{m}_k – швидкість реакції, обумовлена як масова витрата (або відтворення) k -ї компоненти в одиничному обсязі в одиницю часу.

Повна ентальпія $h_t = h + u_i u_i / 2$:

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h_t}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (J_j^h + u_i \tau_{ij}) + u_j F_j \quad (2.4)$$

де $u_i \tau_{ij}$ и $u_j F_j$ висловлюють зміну енергії, викликану відповідно в'язкими і масовими силами.

У разі моделювання горіння в гетерогенному середовищі додатково вирішуються рівняння руху і ентальпії для другого середовища. Основні підходи для розрахунку двофазних течій будуть розглянуті нижче.

Рівняння (2.1) – (2.4) замикаються виразами для молекулярних потоків компонент і в'язких сил. На практиці, всі рідини приймаються Ньютонівськими рідинами і тензор в'язких напружень записується згідно із законом Ньютона:

$$\tau_{ij} = \mu_l \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_l \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.5)$$

де μ_l молекулярна в'язкість, δ_{ij} — символ Кронекера.

Молекулярна дифузія компонент зазвичай описується законом Фіка, по відношенню до основної компоненти:

$$J_j^k = - \frac{\mu_l}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (2.6)$$

Sc_k - число Шмідта для компонент k , яке виражається в такий спосіб:

$$Sc_k = \frac{\mu_l}{\rho D_k} \quad (2.7)$$

D_k – молекулярна дифузія компоненти k по відношенню до основної компоненти.

Дифузія ентальпії описується відповідно закону Фур'є:

$$J_j^h = - \frac{\mu_l}{Pr} \left[\frac{\partial h}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \left(\frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right] \quad (2.8)$$

де число Прандтля

$$\text{Pr} = \left(\frac{\mu_l C_p}{\lambda} \right) \quad (2.9)$$

Для аналізу процесів горіння вводиться також число Льюїса Le_k компоненти k , яке порівнює теплову та масову дифузії:

$$Le_k = \left(\frac{Sc_k}{\text{Pr}} \right) = \left(\frac{\lambda}{\rho C_p D_k} \right) \quad (2.10)$$

У припущенні, що число Льюїса дорівнює 1, вираз (2.8) спрощується і рівняння для потоку маси і балансові рівняння стають формально ідентичними, якщо $\partial P / \partial t$, $u_i \tau_{ij}$ і $u_i F_j$ нехтувано малі (малі числа Маха) [11]. Це припущення зазвичай робиться для спрощення моделювання турбулентного горіння, особливо при попередньо перемішаному горінні.

2.1.2. Осереднення Рейнольдса і Фавра

Повний чисельне рішення миттєвих балансових рівнянь можливо тільки для дуже спрощених випадків [15], [20], в яких часові та просторові масштаби малі. Для вирішення цієї проблеми, проводиться усереднення миттєвих балансових рівнянь для опису тільки основного потоку

$$Q = \overline{Q} + Q' \overline{Q'} = 0 \quad (2.11)$$

Проводячи усереднення миттєвих балансових рівнянь отримуємо усередненні балансові рівняння для перенесення середньої величини \overline{Q} . Таке класичне усереднення Рейнольдса широко використовується для розрахунку не реагуючих потоків. В результаті усереднення Рейнольдса з'являються додаткові невідомі у вигляді кореляцій $\overline{u'Q'}$, які необхідно моделювати. При турбулентному горінні, виникають флуктуації щільності через виділення тепла

і усереднення Рейнольдса призводить до додаткових складнощів. Усереднення рівняння нерозривності призводить до

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i + \overline{\rho' u_i'}) = 0 \quad (2.12)$$

в якому з'являється кореляція $\overline{\rho' u_i'}$. Щоб уникнути явного моделювання такої кореляції, застосовують усереднення Фавра [1], для якого будь-яка величина розкладається як $Q = \tilde{Q} + Q''$:

$$\tilde{Q} = \frac{\overline{\rho Q}}{\bar{\rho}}; \quad Q'' = \overline{(Q - \tilde{Q})} = 0 \quad (2.13)$$

Усереднення по Фавру рівняння нерозривності має вигляд:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.14)$$

яке формально схоже на усереднення по Рейнольдсу рівняння нерозривності для течії з постійною щільністю. Цей результат справедливий і для інших рівнянь (руху, енергії, потоку маси)

2.1.3. Осереднені по Фавру балансові рівняння

Усереднення миттєвих балансових рівнянь дає такі вирази для рівнянь:

Маси:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.15)$$

Руху ($i = 1, 2, 3$):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} u_i'' u_j''}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{F}_i \quad (2.16)$$

Хімічних компонент (для N компонент, $k=1, \dots, N$):

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} u_j'' Y_k''}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{J}_j^k}{\partial x_j} + \bar{m}_k \quad (2.17)$$

Повна ентальпія \tilde{h}_t :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_t}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_t}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} u_j'' h_k''}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{J}_j^h + \overline{u_i \tau_{ij}} \right) + \overline{u_j F_j} \quad (2.18)$$

Основною метою моделювання турбулентного горіння є замикання рівнянь, тобто моделювання невідомих кореляцій:

Напруження Рейнольдса $u_j'' u_j''$. Для апроксимації напруг Рейнольдса застосовуються моделі турбулентності. Вирази для замикання можуть бути отримані безпосередньо з виведених балансових рівнянь для напружень Рейнольдса. Однак, більшість робіт по горінню ґрунтуються на моделях турбулентності, отриманих для потоків які не реагують, наприклад $k-\varepsilon$, переписаною в членах усереднення Фавра, при цьому вплив виділення тепла на напруги Рейнольдса зазвичай не враховується.

Потоки компонент реакцій $u_j'' Y_k''$ и температури $u_j'' T$. Зазвичай моделюються з використанням гіпотези про градієнті руху:

$$\bar{\rho} u_j'' T'' = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (2.19)$$

$$\bar{\rho} u_j'' Y_k'' = \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (2.20)$$

де μ_t турбулентна в'язкість, отримана з моделі турбулентності, Sc_{kt} число Шмідта для k -ї компоненти.

Однак, деякі теоретичні та експериментальні роботи показали, що дана гіпотеза може бути помилковою для деяких попередньо переміщених турбулентних пламен, в яких спостерігається рух потоків проти градієнта [16; 19].

Ламінарні дифузійні потоки $\overline{J_j^k}$, $\overline{J_j^h}$, ... зазвичай малі в порівнянні з турбулентними потоками, в припущенні досить великій мірі турбулентності (великі числа Рейнольдса).

Середня швидкість хімічної реакції компоненти $\overline{\dot{m}_k}$. Знаходження цієї невідомої, є основним завданням моделювання турбулентного горіння.

2.1.4. Моделювання турбулентної течії

Для моделювання турбулентної течії необхідно застосовувати моделі замикання для визначення напружень Рейнольдса. Перенесення турбулентності може бути змодельовано моделлю турбулентної в'язкості

$$\mu_t = \rho \nu_t = c_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (2.21)$$

тоді напруги Рейнольдса можна виразити таким чином:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = -\bar{\rho} \tilde{u}'_i \tilde{u}'_j = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij}. \quad (2.22)$$

Рівняння для енергії турбулентності і її дисипації записуються наступним чином:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k \bar{u}_i) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \rho P_k - \rho \varepsilon \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon \bar{u}_i) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \rho P_k - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon}{k} \rho \varepsilon, \end{aligned} \quad (2.23)$$

де

$$\rho P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.24)$$

Значення констант в рівняннях залежить від моделі турбулентності. Для стандартної $k - \varepsilon$ моделі турбулентності значення констант наступні $\sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 1.92, C_\mu = 0.09$ [4].

Проведений аналіз впливу моделі турбулентності на точність розрахунку процесу горіння вуглеводневих палив показав, що для систем з помірною

кривизною ліній струму найбільш раціонально застосовувати стандартну $k - \varepsilon$ модель турбулентності, а для систем з сильною кривизною ліній струму і наявністю рециркуляційних зон і закрутки потоку — RNG $k - \varepsilon$ модель турбулентності [8; 10] .

2.1.5. Моделювання променистого теплообміну

У топкових пристроях теплообмін випромінюванням грає важливу роль. Якщо не враховувати променистий теплообмін, то при проектуванні реальних пристроїв виникнуть труднощі з розрахунком локальних температур. Для організації процесу горіння з метою зменшення шкідливих викидів необхідно уникати високих $> 1300^\circ\text{C}$ локальних значень температури, так як вони призводять до утворення термічного NO_x . Однією з досить надійних моделей променистого теплообміну, є модель складових потоків. Основна ідея методу полягає в поданні кутових потоків таким чином, що ефект випромінювання розраховується за допомогою позитивних і негативних потоків випромінювання в кожному напрямку координатних осей, а саме:

I і J потоки випромінювання (в $\text{Вт}/\text{м}^2$) в позитивному і негативному напрямках осі y ;

K і L потоки випромінювання (в $\text{Вт}/\text{м}^2$) в позитивному і негативному напрямках осі z ;

M і N потоки випромінювання (в $\text{Вт}/\text{м}^2$) в позитивному і негативному напрямках осі .

Кожен з цих потоків може трактуватися як сумарне дифузійно-розподілене випромінювання, що проходить через нормальний до осі переріз. Диференціальні рівняння, що описують зміну шести потоків випромінювання виглядають наступним чином:

$$\frac{1}{y^j} \frac{dI \cdot y^j}{dy} = -(a + s) I + aE + s \cdot SUM + j \frac{J}{y} \dots \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{y^j} \frac{dJ \cdot y^j}{dy} = (a + s) J - aE - s \cdot SUM + j \frac{J}{y} \dots \quad (2.26)$$

$$\frac{dK}{dz} = -(a + s) K + aE + s \cdot SUM \dots \quad (2.27)$$

$$\frac{dL}{dz} = (a + s) L - aE - s \cdot SUM \dots \quad (2.28)$$

$$\frac{dM}{dz} = -(a + s) M + aE + s \cdot SUM \dots \quad (2.29)$$

$$\frac{dN}{dz} = (a + s) K - aE + s \cdot SUM \dots \quad (2.30)$$

де $j = 0$ для декартових координат, в полярних координатах $j = 1$ і $\frac{d}{dx} = \frac{1}{y} \frac{d}{d\varphi}$.

Член SUM в (2.25) – (2.30) позначає всі потоки в системі. Так для тривимірної системи:

$$SUM = (I + J + K + L + M + N) / 6 \quad (2.31)$$

В рівняннях (2.25) – (2.30):

a – коефіцієнт адсорбція;

s – коефіцієнт відбиття;

E – енергія випромінювання абсолютно чорного тіла $E = \sigma T^4$,

$\sigma = 5,6678 \times 10^{-8} \text{Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$ – константа Стефана-Больцмана.

Складові потоки випромінювання визначаються як:

$$R_y = (I + J) / 2; \quad R_z = (K + L) / 2; \quad R_x = (M + N) / 2 \quad (2.32)$$

Використовуючи визначення (2.42), а також шість потоків, введених в рівняннях (2.25) – (2.30), можна вивести наступні три звичайних диференціальних рівнянь другого порядку:

$$\frac{1}{y^j} \frac{d}{dy} \left[\frac{y^j}{a + s + \frac{j}{y}} \frac{dR_y}{dy} \right] = a (R_y - E) + s \frac{2R_y - R_x - R_z}{3} \quad (2.33)$$

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{a+s} \frac{dR_z}{dz} \right] = a(R_z - E) + s \frac{2R_z - R_y - R_z}{3} \quad (2.34)$$

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{a+s} \frac{dR_x}{dx} \right] = a(R_x - E) + s \frac{2R_x - R_y - R_z}{3} \quad (2.35)$$

Внесок променистого теплообміну в загальний теплообмін враховується додатковим джерельну членом в рівнянні енергії (2.14), що представляє собою дивергенцію вектора потоку променистого теплообміну Q_{ri} :

$$S = -\frac{dQ_{ri}}{dx_i} \quad (2.36)$$

де S об'ємне джерело енергії (Вт/м³), Q_{ri} (Вт/м²) складова вектора потоку променистого теплообміну в i -му напрямку. Після визначення складових потоку випромінювання по рівняннях (2.33) – (2.35) можна визначити сумарні потоки за трьома напрямками координат:

$$Q_{ry} = I - J = -\frac{2}{a+s+\frac{j}{y}} \frac{dR_y}{dy} \quad (2.37)$$

$$Q_{rz} = K - L = -\frac{2}{a+s} \frac{dR_z}{dz} \quad (2.38)$$

$$Q_{rx} = M - N = -\frac{2}{a+s} \frac{dR_x}{dx} \quad (2.39)$$

Враховуючи вираз (2.37) – (2.39), рівняння (2.36) можна переписати таким чином

$$S_{rad} = 2a \left[\sum_{i=1}^n R_i - nE \right] \quad (2.40)$$

Модель доповнюється необхідними граничними умовами.

При вирішенні завдань з хімічними реакціями, якими є завдання з горінням палива, необхідно враховувати залежність радіаційних властивостей середовища від складу продуктів згоряння. При розрахунку роботи топків котлів, на яких реалізуються методи зниження оксидів азоту, засновані на подачі в зону горіння трьох-атомних газів, так наприклад: подача водяної пари

або рециркуляція димових газів, змінюється значення локальної концентрації водяної пари і діоксиду вуглецю. Для адекватного розрахунку температурного стану досліджуваного об'єкта в цьому випадку необхідно застосовувати моделі для розрахунку радіаційних характеристик середовища, засновані на локальній концентрації трьох-атомних газів, таких як вода і діоксид вуглецю. Сильний вплив на радіаційні властивості продуктів згоряння, надають вуглеводні і їх радикали, які вносять значний вклад в радіаційні характеристики середовища в областях, де їх концентрація значна, як правило, це область, розташована близько зрізу пальника і має протяжність від 2 до 5 калібрів пальника. Наявність локальних зон, які відповідають умовам утворення сажі, призводить до утворення сажі, яка в свою чергу робить сильний вплив на радіаційні характеристики.

2.1.6. Методи знаходження середньої швидкості хімічної реакції компоненти при моделюванні горіння газоподібного палива

Як було сказано вище, моделювання середньої швидкості хімічної реакції компоненти $\overline{\dot{m}}_k$ є основною складністю при моделюванні процесів горіння. Першим вирішити цю проблему спробував Сполдінг [18], який припустив, що турбулентне перемішування є каскадним процесом від великих до дрібних масштабів і що невеликий масштаб, що зміщується до молекулярних ваг управляє хімічною реакцією. Ця модель була названа Моделлю Руйнування Вихорів (EBU). Модель передбачає, що горіння лімітується змішанням, а середня швидкість реакції визначається наступним виразом

$$\overline{\dot{m}}_k = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \cdot \rho \cdot \min \left\{ \bar{Y}_{fuel}, \frac{\bar{Y}_{ox}}{s} \right\} \quad (2.41)$$

де \bar{Y}_{fuel} , \bar{Y}_{ox} масова концентрація палива та окисника, C_{EBU} – константа моделі, s – стехіометрическое ставлення реакції паливо/окислювач. Дана

модель добре описує горіння попередньо перемішаної паливної суміші, і завищує розрахункову температуру близько твердих поверхонь.

Подальший розвиток моделі Сполдінга було зроблено Магнусеном [13], він запропонував ввести в модель вплив на швидкість реакції її продуктів:

$$\overline{m}_k = A \frac{\varepsilon}{k} \cdot \rho \cdot \min \left\{ \bar{Y}_{fuel}, \frac{\bar{Y}_{ox}}{s}, B \cdot \frac{1}{1+r} \bar{Y}_{prod} \right\}, \quad (2.42)$$

де A і B константи моделі, стандартні значення констант $A = 4$ і $B = 0.5$. Наявність третього члена в фігурних дужках дозволяє більш точно передбачити температуру близько стінок, але вимагає перерахунку частини палива в продукти згорання, для того щоб почати розрахунок. Для розрахунку попередньо не перемішаних і частково перемішаних процесу горіння застосовують гібридну схему. Середня швидкість хімічної реакції компоненти визначається як мінімальне, значення швидкості реакції певне за моделлю руйнування вихорів і закону Арреніуса:

$$R = -\min(R_{EBU}, R_{Ar}) \quad (2.43)$$

де $R_{Ar} = A \cdot T^b \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right) [Fuel]^c [Oxid]^d [Product]^e$.

Застосування даного підходу дозволяє частково враховувати вплив дифузії на процес горіння.

Модель руйнування вихорів була важливим кроком у розвитку моделей для попередньо перемішаного вихрового режиму спалювання. Для попередньо не перемішаного згорання, модель не зможе враховувати одночасне змішування палива і повітря в процесі горіння. Це обмеження може бути виражено як ймовірність знаходження стехіометричної суміші в положенні x . Для цього випадку вираз для середньої турбулентної швидкості реакції було отримано аналітично Білгером [3], який показав, що в межі швидкопротікаючих хімічних реакцій середня витрата палива може бути виражений як

$$\overline{m}_F = -\frac{1}{2} \bar{\rho} \frac{Y_{F,1}}{1 - Z_{st}} \tilde{\chi}_{st} \tilde{P}(Z|Z = Z_{st}). \quad (2.44)$$

де $Y_{F,1}$ масова частка палива в потоці палива, $\tilde{\chi}_{st}$ скалярна швидкість дисипації фракції Z , $\tilde{P}(Z|Z = Z_{st})$ - функція щільності ймовірності Z обумовленої в стехіометричній суміші.

Цей вираз вводить функцію щільності ймовірності (pdf) як важливе поняття в турбулентному режимі спалювання. Застосування імовірнісних методів дає хороші результати, в тому випадку якщо є експериментально отримана функція для використовуваного палива. Добре представлені в літературі pdf функції для метану. Складнощі виникають при моделюванні горіння летких або парів рідкого палива. Як правило, таких pdf функцій не існує, і перевагу слід віддавати моделі руйнування вихорів.

2.2. Особливості моделювання утворення оксидів азоту

Основними забруднюючими речовинами при спалюванні вуглеводневих палив в повітрі є оксиди азоту (NO , NO_2 и N_2O), які прийнято називати одним назвою NO_x , який можна уявити тільки одним оксидом азоту NO , з молекулярною масою $M_{\text{NO}} = 30$. Частка NO_2 и N_2O становить близько 5% від усіх утворених NO_x і нею як правило нехтують [27]. Основний внесок в утворення забруднюючих речовин дає NO , які утворюються за трьома різними схеми [33]:

- а) Термічний NO , що утворюється при реакції молекулярного азоту і кисню при високій температурі.
- б) Паливний NO , що утворюється з азоту палива.
- в) NO , що утворюється в результаті реакції молекулярного азоту і вуглеводневих радикалів у фронті полум'я (так званий Prompt механізм).

Так як концентрація оксидів азоту в продуктах згоряння мала в порівнянні з концентраціями основних компонентів горіння, то розрахунок емісії оксидів азоту проводиться на основі вирішення задачі горіння по розрахованим полях

температури та концентрації. Для моделювання термічного і Prompt механізмів утворення оксидів азоту необхідно вводити в розгляд рівняння концентрації:

$$\rho \frac{\partial Y_{\text{NO}}}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial Y_{\text{NO}}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_{\text{NO}}}{\partial x_i} \right) \quad (2.45)$$

де Y_{NO} — масова концентрація оксиду азоту.

В загальному вигляді джерельний член в рівнянні переносу NO можна записати в наступному вигляді:

$$S_{\text{NO}} = S_{\text{NO}} + S_{\text{promptNO}} + S_{\text{NO}}. \quad (2.46)$$

При спалюванні твердих, рідких і сумішевих палив важливу роль відіграє механізм паливного NO_x . Даний механізм складніший, ніж термічний і Prompt механізми і вимагає введення в розгляду додаткового концентраційного рівняння для азотовмісних вуглеводневих радикалів:

$$\rho \frac{\partial Y_{\text{HCN}}}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial Y_{\text{HCN}}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_{\text{HCN}}}{\partial x_i} \right) + S_{\text{HCN}}, \quad (2.47)$$

де Y_{HCN} — масова концентрація азотовмісних вуглеводневих радикалів.

Для задання джерельних членів в рівняннях (2.45) і (2.47) необхідно ввести вираз для хімічної кінетики утворення оксидів азоту характерних для кожного з перерахованих вище механізмів.

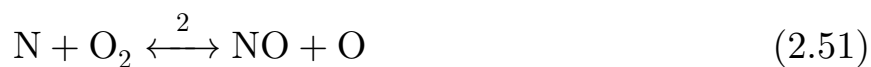
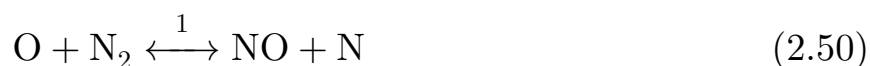
2.2.1. Механізм утворення термічного NO_x

Механізм утворення термічного NO був запропонований Зельдовичем [30], який враховує окислення азоту повітря при температурі вище 1800 K . Формування термічного NO сильно залежить від «пікової» температури полум'я і наявності кисню в зонах високої температури.

Після утворення атомарного кисню згідно з механізмом:



починається процес окислення атмосферного азоту відповідно до механізму термічного NO



На додаток до перших двох реакцій, які враховують утворення оксидів азоту при $\alpha > 0.85$, використовується реакція:



яка важлива при $\alpha < 0.85$ і може не прийматися до уваги при більш високих значеннях коефіцієнта надлишку повітря.

Константи реакцій для рівнянь (2.50)(2.51)(2.52), взяті з робіт [9] [10]:

$$k_1 = 1.8 \times 10^8 \exp\left(\frac{-38370}{T}\right) \quad (2.53)$$

$$k_{-1} = 3.8 \times 10^7 \exp\left(\frac{-425}{T}\right) \quad (2.54)$$

$$k_2 = 1.8 \times 10^4 \exp\left(\frac{-4680}{T}\right) \quad (2.55)$$

$$k_{-2} = 3.8 \times 10^3 \exp\left(\frac{-20820}{T}\right) \quad (2.56)$$

$$k_3 = 7.1 \times 10^7 \exp\left(\frac{-450}{T}\right) \quad (2.57)$$

$$k_{-3} = 1.7 \times 10^8 \exp\left(\frac{-24560}{T}\right) \quad (2.58)$$

де k_1, k_2, k_3 — константи прямих реакцій (2.50)(2.51)(2.52), відповідно, а $k_{-1}, k_{-2}, k_{-3}, k_{-3}$ константи зворотних реакцій. , Для коефіцієнта надлишку повітря $\alpha \geq 1.0$, то результуючий вираз для розрахунку утворення оксидів азоту з термічного механізму можна записати в наступному вигляді:

$$\frac{d[\text{NO}]_T}{dt} = \frac{2[\text{O}](k_1 k_2 [\text{O}_2][\text{N}_2] - k_{-1} k_{-2} [\text{NO}]^2)}{k_2 [\text{O}_2] + k_{-1} [\text{NO}]} \quad (2.59)$$

У рівнянні (2.59) концентрація компонентів виражена в моль·м⁻³. Концентрації O_2 и N_2 беруться з миттєвих значень розрахованих полів концентрації,

а концентрація радикала $[O]$ визначається виходячи з гіпотези про часткову рівновагу [21; 23]:

$$[O] = 36.64T^{1/2}[O_2]^{1/2}\exp\left(\frac{-27123}{T}\right) \quad (2.60)$$

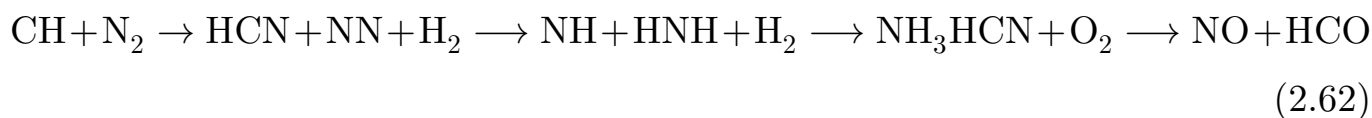
Таким чином, доданок, що визначає внесок в утворення оксидів азоту з термічного механізму в рівнянні (2.46) має наступний вигляд:

$$S_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]_T}{dt}. \quad (2.61)$$

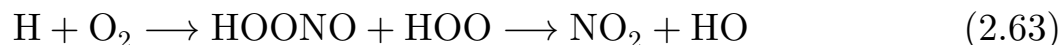
2.2.2. Prompt NO_x механізм

При низьких температурах ($T < 1800K$), утворення NO_x за термічним механізмом мале в порівнянні із загальною кількістю оксидів азоту. При цьому основний внесок в утворення NO_x вносять оксиди азоту, які утворюються за механізмом Prompt і з азоту палива (паливний NO_x). Утворення NO_x за механізмом Prompt відбувається в зонах, які містять незгорілі вуглеводні радикали, що характерно при рециркуляційних течіях безпосередньо в зоні горіння, коли частина продуктів згоряння потрапляє до зони горіння.

Згідно «швидкого» механізму утворення, паливо внаслідок піролізу утворює вуглеводневі радикали (наприклад, CH), котрі взаємодіють із азотом і окиснюються у полум'ї до NO_x та інших часток :



Частина утвореного «швидкого» NO згодом окиснюється до NO₂ під дією пероксидного радикалу:



Горіння вуглеводнів включає в себе безліч складних хімічних реакцій і проміжних продуктів горіння, розрахунок яких займає багато часу. У зв'язку з цим, багатьма дослідниками запропоновано розраховувати утворення 'prompt' NO_x по глобальній моделі [7].

$$\frac{d[\text{NO}]_{pr}}{dt} = 1.2 \times 10^7 [\text{N}_2][\text{O}_2] \exp\left(\frac{-27123}{T}\right) \quad (2.64)$$

Таким чином, доданок, що визначає внесок в утворення оксидів азоту по Prompt механізму в рівнянні (2.46) має наступний вигляд

$$S_{Prompt\text{NO}} = M_{\text{NO}} \frac{d[\text{NO}]_{pr}}{dt}. \quad (2.65)$$

2.2.3. Механізм утворення паливного NO_x

Механізм утворення паливного NO_x характеризує окислення азоту, що міститься в паливі. Залежно від проміжних реакцій радикалів і наявності кисню в зонах де відбуваються ці реакції, азот палива може перетворюватися як в NO_x так і в NO. Цей механізм також включає відновлення NO молекул до молекул азоту при наявності СН радикалів. Слід зазначити, що перетворення азоту палива в оксиди азоту сильно залежить і від локального стехіометричного значення. Існує принципова відмінність механізму утворення оксидів азоту з

азоту палива при спалюванні твердого палива та рідкого. З цієї точки зору необхідно розглядати кожен випадок окремо.

2.2.3.1. Рідке паливо

При випаровуванні краплі палива, азотовмісні сполуки потрапляють разом з парами в газову фазу. При подальшому нагріванні ці сполуки розкладаються на проміжні сполуки, такі як HCN, N, CN і NH, а потім можуть перетворитися в NO_x [7]. В цілому, механізм утворення паливного NO_x відбувається за схемою, представленою на рис. 2.1.

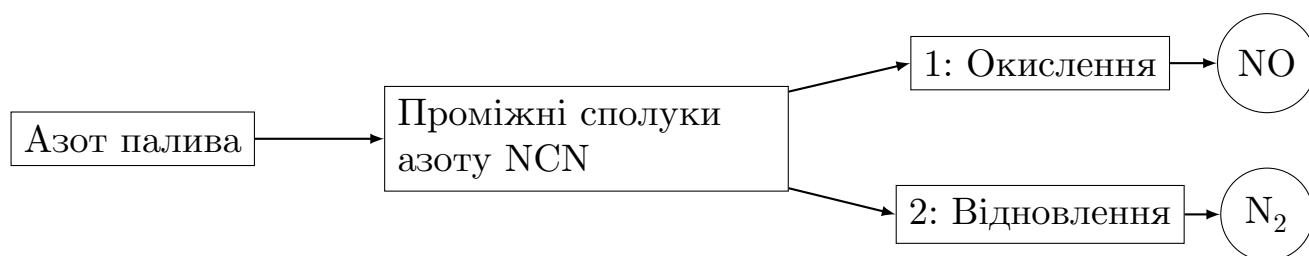


Рис. 2.1. Механізм утворення паливного NO_x при спалюванні рідкого палива

Для визначення локальної концентрації HCN необхідно вирішувати додаткове концентраційне рівняння (2.47). HCN, утворений з азоту палива, пропорційний кількості палива, яке перейшло в газову фазу в результаті випаровування крапель рідкого палива. Далі HCN бере участь в двох реакціях: реакція 1 — окислення з утворенням NO і реакція 2 — відновлення до N_2 . Середні швидкості реакцій розкладання HCN в реакціях 1 і 2 визначаються за співвідношеннями [7]:

$$R_1 = A_1 X_{\text{HCN}} X_{\text{O}_2}^a \exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right) \quad (2.66)$$

$$R_2 = A_2 X_{\text{HCN}} X_{\text{NO}} \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right) \quad (2.67)$$

де: R_1, R_2 — швидкість реакцій HCN (1/с); X — молярна частка; $a=1$; $A_1=3.5 \cdot 10^{10}$ (1/с); $A_2=3.0 \cdot 10^{12}$ (1/с); $E_1=67000$ кал/моль; $E_2=60000$ кал/моль

Оксиди азоту з азоту палива утворюються в першій реакції і руйнуються в другій. Джерельний член в рівнянні (2.46) буде мати вигляд:

$$S_{\text{NO}} = S_{\text{NO}-1} + S_{\text{NO}-2}, \quad (2.68)$$

де $S_{\text{NO}-1} = R_1 \frac{M_{\text{NO}} P}{RT}$, $S_{\text{NO}-2} = -R_2 \frac{M_{\text{NO}} P}{RT}$.

2.2.3.2. Тверде паливо

Механізм утворення NO з азоту твердого палива більш складний і складається з етапів, схематично представлених на рис.2.2. [17].

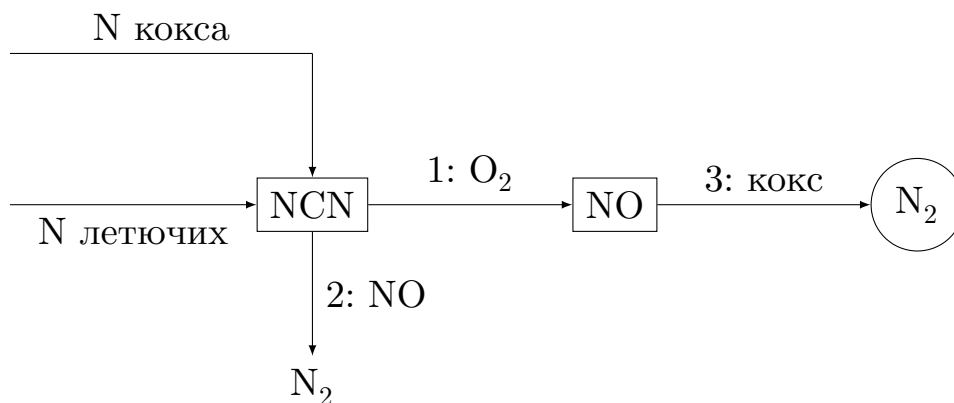
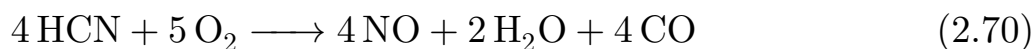


Рис. 2.2. Механізм утворення паливного NO_x при спалюванні твердого палива

$$\dot{m}_{\text{HCN}} = K_{\text{HCN}} \dot{m}_{\text{vol}}. \quad (2.69)$$

На другому етапі відбувається подальше окислення HCN до NO за такою реакцією:



а швидкість реакції обчислюється з виразу:

$$\frac{dy_{\text{NO}}}{dt} = K_1 y_{\text{O}_2}^a y_{\text{HCN}}, \quad (2.71)$$

де

$$K_1 = 10^{11} e^{-2.8 \times 10^6 / RT} \quad (2.72)$$

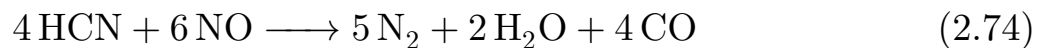
а — константа.

Паралельно з першим і другим етапами відбувається окислення до NO залишився в коксовому залишку після виходу летючих азоту в гетерогенній реакції з коефіцієнтом ефективності γ (який зазвичай приймають між 0.1 і 0.2)

$$\dot{m}_{\text{NO}} = -K_{\text{NO}} \gamma \dot{m}_{\text{char}}. \quad (2.73)$$

Крім окислювальних реакцій з утворенням оксиду азоту, NO може відновлюватися до N_2 в гомогенних і гетерогенних реакціях.

Гомогенна реакція:



де швидкість реакції знаходиться з виразу

$$\frac{dy_{\text{NO}}}{dt} = K_2 y_{\text{NO}} y_{\text{HCN}} \quad (2.75)$$

$$K_2 = 3.0 \times 10^{12} e^{-2.5 \times 10^6 / RT} \quad (2.76)$$

В гетерогенній реакції NO відновлюється на поверхні частинки. Швидкість реакції визначається за виразом [14]:

$$\frac{dy_{\text{NO}}}{dt} = K_3 P_{\text{NO}} \quad (2.77)$$

$$K_3 = A_E \psi 4.1 \cdot 10^{-4} e^{-1.5 \times 10^6 / RT} \quad (2.78)$$

де P_{NO} — парціальний тиск NO, — площа поверхні частинки, а ψ — множник враховує збільшення поверхні частинки через пористості і кривизни.

Джерельний член в рівнянні (2.46) відповідає за внесок в емісію паливного NO, обчислюється за виразом (2.68) з урахуванням виразів (2.71) (2.75), (2.77).

2.2.3.3. Сумішеві палива

Горіння вугілля, мазуту і природного газу дають високу температуру полум'я, що є причиною високого вмісту термічного NO_x . Для зниження NO_x в мазутних і газових печах охолоджені димові газу повертають назад в камеру згоряння або створюють закрутку полум'я для утворення рециркуляційної зони до якої залучаються продукти згоряння. Обидва способи спрямовані на зниження температури спалаху і зменшення надлишку повітря для зменшення утворення термічного NO_x . Використання паливних сумішей, наприклад вугілля і деревини, дозволяє знизити сумарну емісію оксидів азоту за рахунок зниження «піків» температури, що сприяє зменшенню утворення термічного оксиду азоту та зменшення утворення оксидів азоту по паливному механізму за рахунок зменшення сумарного вмісту азоту в паливі. Зменшення сумарного вмісту азоту в паливі досягається заміною частини вугілля на деревину, яка має в своєму складі незначний вміст азоту.

Моделювання утворення оксидів азоту при горінні сумішевих палив, здійснюється по залежностям, описаним в п. 2.1 — 2.3.

2.3. Методи зниження оксидів азоту

Для зниження оксидів азоту в процесах горіння найбільш поширеними є:

- Організація процесів горіння:

а) закрутка потоку — впливає на розширення течії, процеси перемішування і загасання швидкості в потоці, на розміри і форму, стійкість полум'я і інтенсивність горіння.

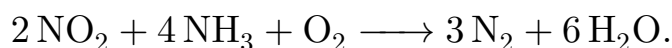
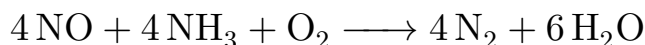
б) рециркуляція частини димових газів — частина відпрацьованих газів потрапляє в камеру згоряння як баласт, що викликає зниження максимальної температури горіння і, як наслідок, зменшення викидів оксидів азоту, що утворюються при високих температурах і є одними з найбільш токсичних речовин.

в) двостадійне спалювання — у даному випадку в первинну зону горіння подається повітря менше, ніж це теоретично необхідно для повного спалювання палива ($\alpha = 0,8 - 0,95$). У цій зоні відбувається неповне горіння палива з частковою його газифікацією при зниженій температурі і, отже, зниженому вмісту оксидів азоту. В вторинну зону подається чиста або збіднена паливом суміш для допалювання продуктів неповного спалювання. Процес горіння в заключної його стадії відбувається при більш низькій температурі.

г) reburning (трьох-стадійне спалювання) — у даному випадку в первинну зону зоні спалюється 70 — 85 % всього палива з надлишком повітря близьким до одиниці або нижче ($\alpha = 0,9 - 1$). У цій зоні відбувається неповне горіння палива з частковою його газифікацією при зниженій температурі і, отже, зниженому вмісту оксидів азоту. В вторинну зону подається подається решта палива (15 — 30 %) з надлишком повітря значно нижче одиниці ($\alpha \ll 1$). У третю зону подається решта повітря (15 — 25 %) з метою допалювання продуктів хімічного і механічного недопалу, утворених в попередніх зонах.

- Очищування продуктів згоряння.

а) Селективне некаталітичне відновлення – засноване на реакції відновлення оксидів NO_x амоніаком до азоту і води:



Реакції проходять на поверхні каталізатору за температури вище 232°C і в надлишку кисню. До найбільш поширених каталізаторів відносяться оксид V_2O_5 , нанесений на поверхню TiO_2 (ефективна температура $300 - 450^\circ\text{C}$), молекулярні цеоліти ($300 - 600^\circ\text{C}$), а також дорогоцінні метали ($200 - 300^\circ\text{C}$), які однак застосовуються досить рідко через велику ймовірність їхнього отруєння.

б) Неселективне каталітичне відновлення — проводиться за участі водню, вуглеводнів, монооксиду вуглецю в умовах недостатньої кількості кисню. У присутності каталізатора оксиди NO_x відновлюються до азоту і CO_2 . В якості каталізатору найчастіше застосовують суміш родію і платини, також використовуються матеріали на основі паладію. Температурний режим відновлення — $350 - 800^\circ\text{C}$, із найбільш ефективним проміжком $426 - 650^\circ\text{C}$. Зазвичай ступінь перетворення NO_x складає близько $80 - 95\%$. До основних проблем цього методу відносять отруєння каталізаторів домішками нафтопродуктами, як-от цинку та фосфору, і слабо регульовану систему контролю процесу.

Але очистка продуктів згоряння надзвичайно дорога, рециркуляція частини димових газів, двухстадійне спалювання, reburning (тристадійне спалювання) — потребують досить складної модифікації котла та/або конструювання котла спеціальної геометричної форми (на reburning потрібен дуже високий котел).

2.4. Висновки до розділу 2

Проведено аналіз методів зниження викиду оксидів азоту та моделювання процесів горіння. При спалюванні газоподібних сумішей можлива модернізація камер згоряння. Великий потенціал має стадійне спалювання газоподібних палив - можлива модернізація існуючих камер згоряння

2.5. Постановка задачі

Для визначення впливу стадійної подачі вторинного повітря при спалюванні метану в вихровому потоці на процес утворення оксидів азоту необхідно:

- а) Обрати програмний комплекс
- б) Обрати необхідну модель турбулентності для даної задачі
- в) Обрати необхідну модель горіння для даної задачі
- г) Проаналізувати дані та зробити висновки

РОЗДІЛ 3.

ВЕРІФІКАЦІЯ ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ ANSYS CFX

3.1. Верифікація програмного комплексу ANSYS CFX для розрахунку завихрених потоків

3.1.1. Підхід до комп'ютерного моделювання

Повні рівняння Нав'є-Стокса описують, як ламінарні, так і турбулентні потоки, не вимагаючи ніяких додаткових припущень. Однак, турбулентні течії при реальних числах Рейнольдса містять великий діапазон турбулентних і часових масштабів і зазвичай включають масштаби турбулентності набагато менші, ніж найменший сітковий об'єм, який зазвичай може бути отриманий при числовому аналізі. Пряме числове моделювання (DNS) таких потоків потребує значних комп'ютерних ресурсів. Для зменшення затрат машинного часу і отримання рішення достатньої точності, розроблені моделі турбулентності, які дозволяють врахувати вплив турбулентності на характеристики потоку і значно знизити вимоги до ресурсу комп'ютерної техніки. Для адекватного опису особливостей класу потоків, які досліджуються, необхідно проводити верифікацію турбулентних моделей і на її основі вибрати клас моделей турбулентності. Вибір «правильної» моделі турбулентності одна із основних задач, при використанні комерційних CFD пакетів.

3.1.2. Механізми горіння

Горіння вуглеводневих сумішей, зокрема метану в повітрі, є складним процесом, для пояснення закономірностей і визначення характеристик якого, необхідно враховувати кінетику багатьох стадій ланцюгових реакцій, що при

цьому протікають. Досліджуючи залежності швидкості полум'я в метаноповітряних сумішах від тиску, коефіцієнту надлишку окисника і температури палива, С. К. Westbrook та F. L. Dryer [22] запропонували простий метод визначення характеристик горіння, який полягає в підборі параметрів швидкості реакції в законі Арреніуса:

$$k = AT^n e^{-\frac{E}{RT}} [\text{Fuel}]^a [\text{Oxidizer}]^b \quad (3.1)$$

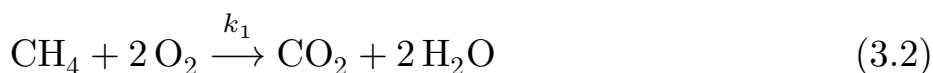
таким чином, щоб вони співпадали з експериментально визначеною швидкістю ламінарного полум'я суміші (далі, механізм хімічної кінетики WD, або метод WD).

Визначивши таким чином характеристики горіння (наприклад, швидкість поширення полум'я) при стехіометричному співвідношенні та атмосферному тиску, потім вже можна робити моделювання при інших значеннях коефіцієнта стехіометричності та тиску.

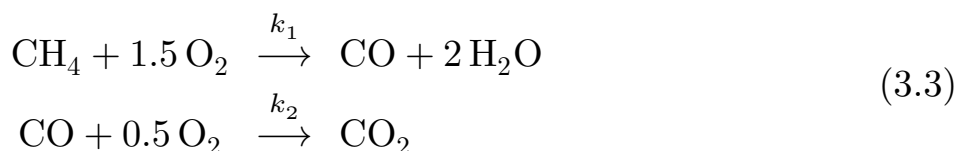
Як було показано авторами, такий підхід правильно відтворює експериментальні значення границь поширення полум'я та залежність швидкості поширення полум'я від тиску і коефіцієнта стехіометричності.

Механізм WD може бути використаний для опису характеристик горіння навіть у випадку використання простих механізмів реакції для будь-якого вуглеводневого палива. Для розрахунку параметрів горіння на основі механізму WD зазвичай використовуються три механізми горіння метану:

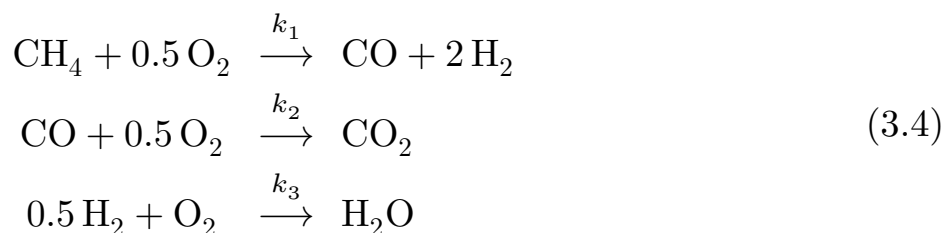
- 1) одноступеневий механізм горіння, який протікає згідно реакції



- 2) двоступеневий механізм горіння, який протікає згідно реакцій



3) триступеневий механізм горіння, який протікає згідно реакцій



Одноступеневий механізм (3.2) зазвичай використовується для попереднього аналізу об'єктів, що досліджуються.

Для дослідження за допомогою методу WD нами було обрано двоступеневий механізм горіння, який забезпечує достатню точність при задовільних витратах машинного часу. Параметри рівняння (3.1) для методу WD показані в таблиці 3.1.

У таблиці 3.1 представлені значення коефіцієнтів виразу закону Арреніуса(3.1) [22] які були використані при моделюванні.

Таблиця 3.1

Параметри рівняння (3.1) для методу WD [22]

Реакція	A	n	E_a , кДж/моль	Порядок реакції
$\text{CH}_4 + 1.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$	1.590×10^{13}	0	200.46	$[\text{CH}_4]^{0.7} [\text{O}_2]$
$\text{CO} + 0.5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	3.980×10^{14}	0	170.94	$[\text{CO}] [\text{O}_2]^{0.25} [\text{H}_2]$

3.1.3. Геометрична 3D-модель і розрахункові сітки

В якості об'єкту дослідження використовувався модельна камера згорання яка експериментально досліджувалась в роботах [5] [6]. Для порівняння лабораторними дослідженнями, було відібрано дані випробувань, проведених в Controlled Profile Reactor (CPR) Рис. 3.1 Одним з основних міркувань при проектуванні цього об'єкта було отримання даних, які можуть бути використані для перевірки комп'ютерної моделі, а також для вивчення явищ горіння. CPR

це 0,5 МВт, циліндричний реактор з внутрішнім діаметром 80 см і довжиною 240 см. Закрутка передається в потік вторинного повітря з використанням рухомого блоку генератора завихрення.

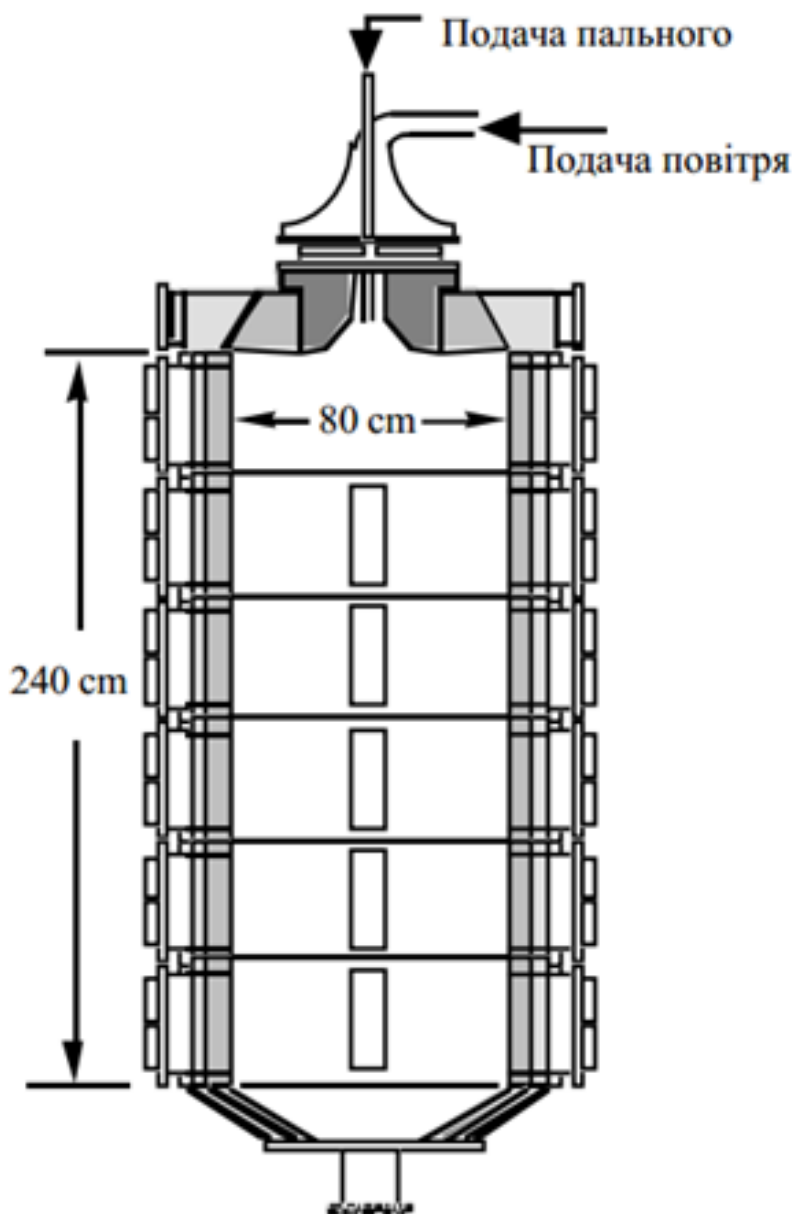


Рис. 3.1. Модель CPR

На Рис. 3.2 показана модель, що побудована в в ANSYS Design Manager на основі CPR.

Розрахункова сітка представлена на рисунку 3.3. Згущення зроблено в зоні дифузора, та біля стінок.

Параметри розрахункової сітки представлено в таблиці 3.2

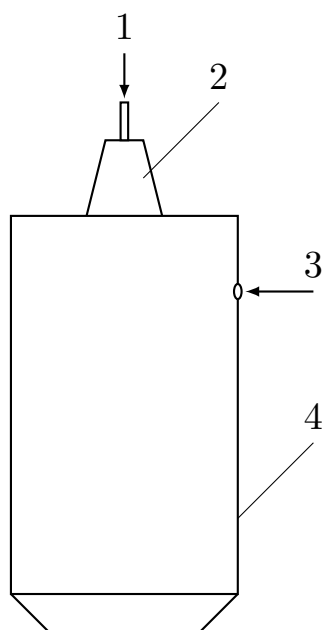


Рис. 3.2. Модель побудована в ANSYS Design Manager: 1 – подача горючої суміші, 2 – дифузор, 3 – подача вторинного повітря, 4 – стінка

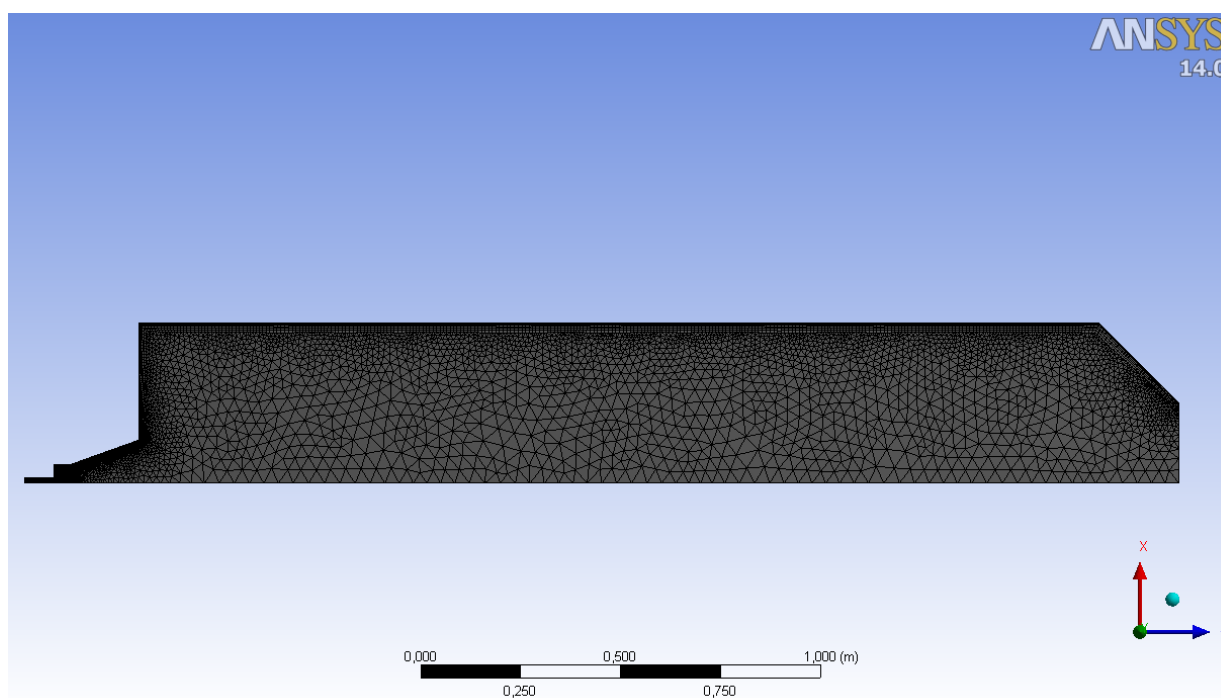


Рис. 3.3. Розрахункова сітка

Таблиця 3.2

Параметри розрахункової сітки

Кількість вузлів 317452

Кількість елементів 141312

Для верифікації CFD-розрахунків було вирішено використовувати групи моделей турбулентності, які найбільш часто використовуються для розрахунків подібного класу течій: $k-\varepsilon$, *rng* $k-\varepsilon$ і модель напружень Рейнольдса (RSM).

3.1.4. Граничні умови та витрати

Умови на стінці, граничні умови та витрати пального та повітря представлені в таблиці 4.1

Таблиця 3.3

Граничні умови та витрати газу та повітря

Параметр	Значення
Коефіцієнт надлишку повітря, α	1.05
Витрата природного газу, (кг/с)	0.0027
Витрата повітря, (кг/с)	0.0488
Температура повітря на вході, (К)	298
Температура на стінці, ($^{\circ}\text{C}$)	1000
Геометричне число закрутки S	1.5
Вхідна шв. первинної суміші, (м/с)	5
Вхідна шв. вторинного повітря, (м/с)	5

3.1.5. Верифікація моделей турбулентності

Проведено верифікацію програмного комплексу ANSYS CFX для розрізів $Z = 0,26; 1,26$; вздовж камери згорання, де Z — відстань від початку камери згорання до точки перерізу. На рис. 3.4 - 3.6 показані профілі швидкостей в одному розрізі для різних моделей турбулентності. Було обрано моделі які найбільш часто використовуються для розрахунків подібного класу течій: $k-\varepsilon$, *rng* $k-\varepsilon$ і модель напружень Рейнольдса(RSM).

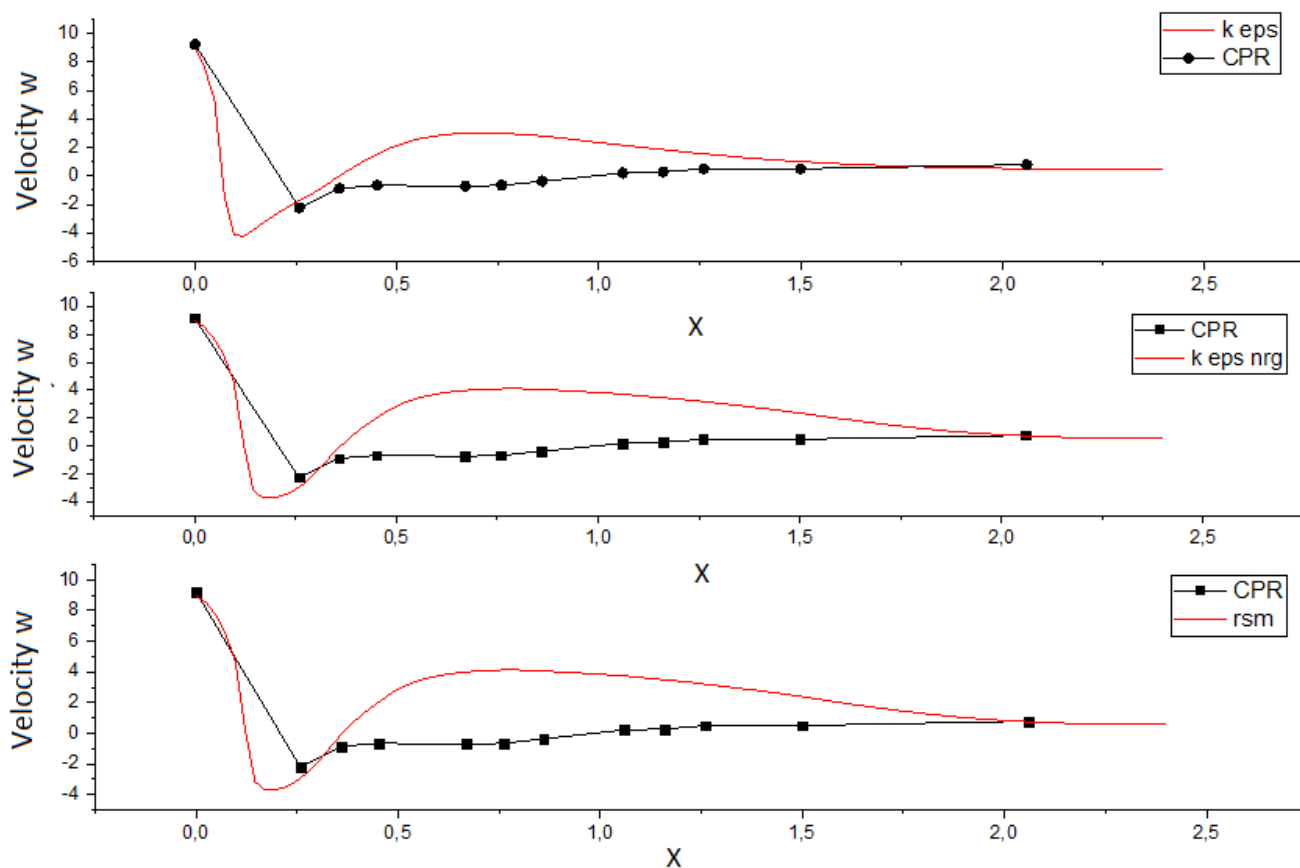


Рис. 3.4. Профіль аксіальної компоненти швидкості в здовж осі камери згорання

На рис. 3.4 зображено профіль аксіальної компоненти швидкості в здовж осі камери згорання. З рисунку випливає що, всі моделі турбулентності майже однаково описують течію вздовж осі камери згорання.

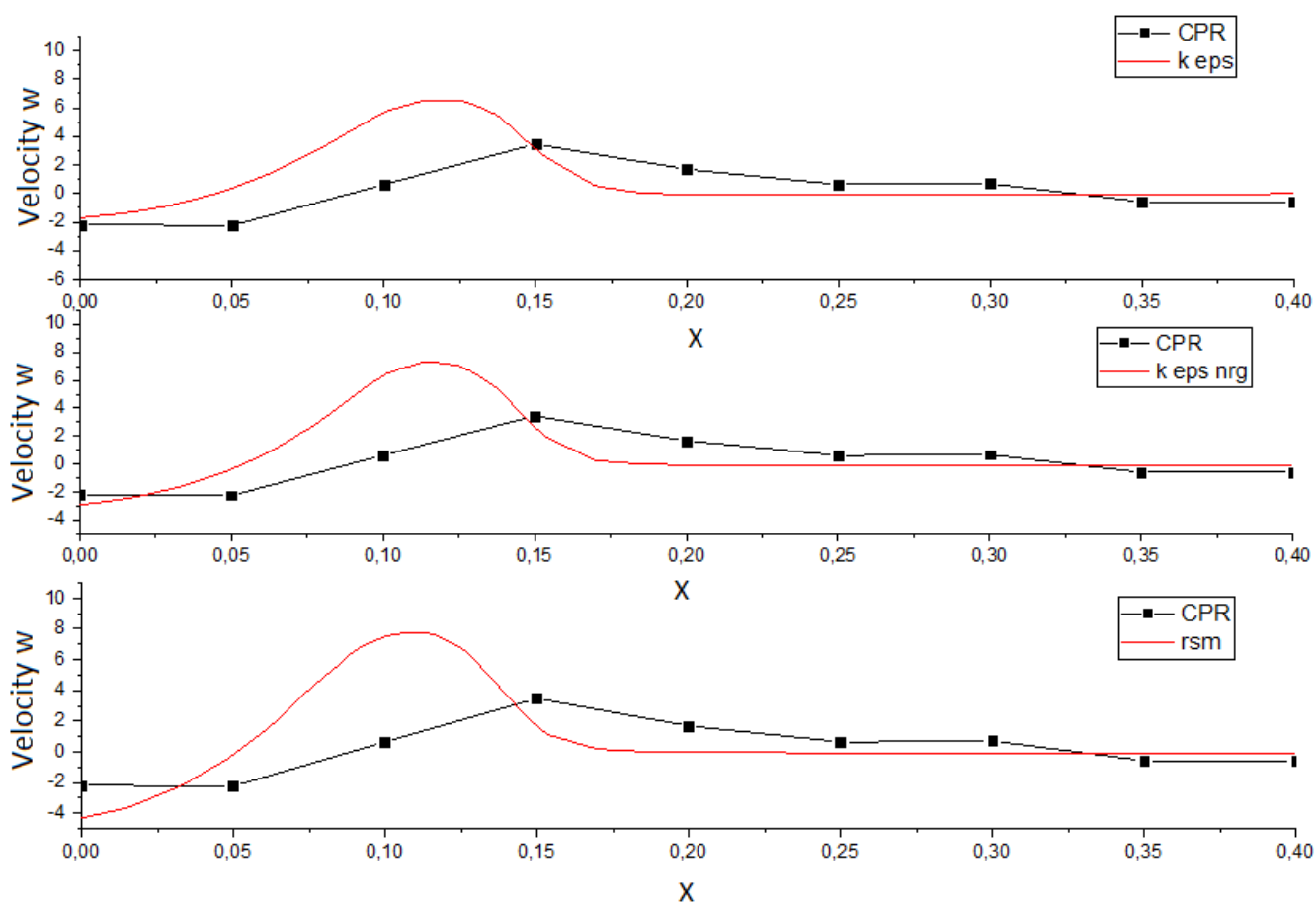


Рис. 3.5. Профіль аксіальної компоненти швидкості для розрізу $Z = 0,26$

Виходячи з даних рис. 3.5 можна зробити висновок, що $k-\epsilon$ найкраще описує аксіальну швидкість в розрізі $Z = 0,26$. Модель напружень Рейнольдса (RSM) описує її найгірше.

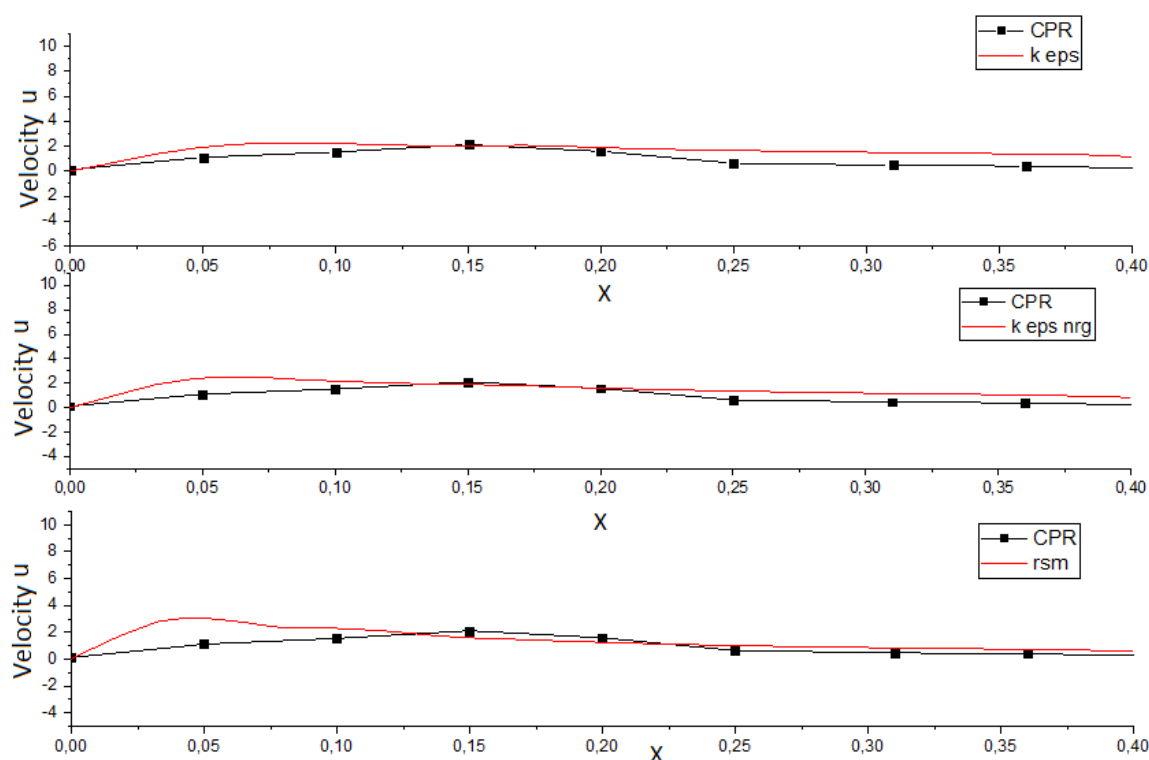


Рис. 3.6. Профіль радіальної компоненти швидкості для розрізу $Z = 1, 26$

Виходячи з даних рис. 3.6 можна стверджувати що, за даних умов $k - \epsilon$, $\text{rng } k - \epsilon$ моделі турбулентності описують радіальну швидкість найкраще.

Порівнявши дані що показані на рис. 3.4 - 3.6 із даними робіт [5] [6] було вирішено використовувати $k - \epsilon$ модель. Вона найбільш точно описує експеримент, тому моделювати процеси горіння будемо даною моделлю турбулентності.

3.1.6. Верифікація моделей горіння

В якості моделей горіння використаємо finite rate chemistry, eddy dissipation та finite rate chemistry + eddy dissipation, які представлені в пакеті ANSYS CFX. рис. 3.7 – 3.9 показані профілі температури в одному розрізі для різних моделей горіння.

На рис. 3.7 показано, що eddy dissipation модель погано описує процес горіння за даних умов.

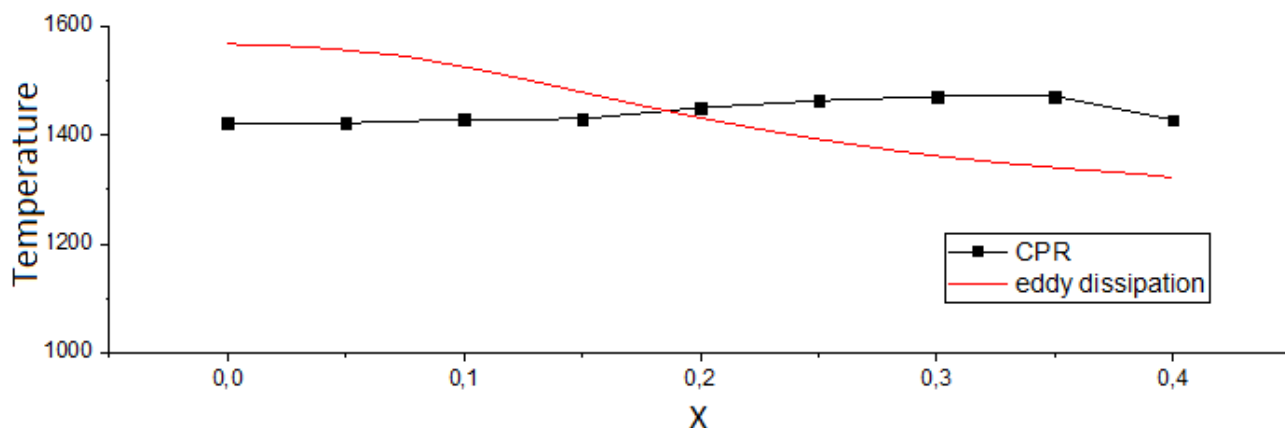


Рис. 3.7. Профіль температури eddy dissipation

На рис. 3.8 зображено, що finite rate chemistry модель погано описує процес горіння за даних умов.

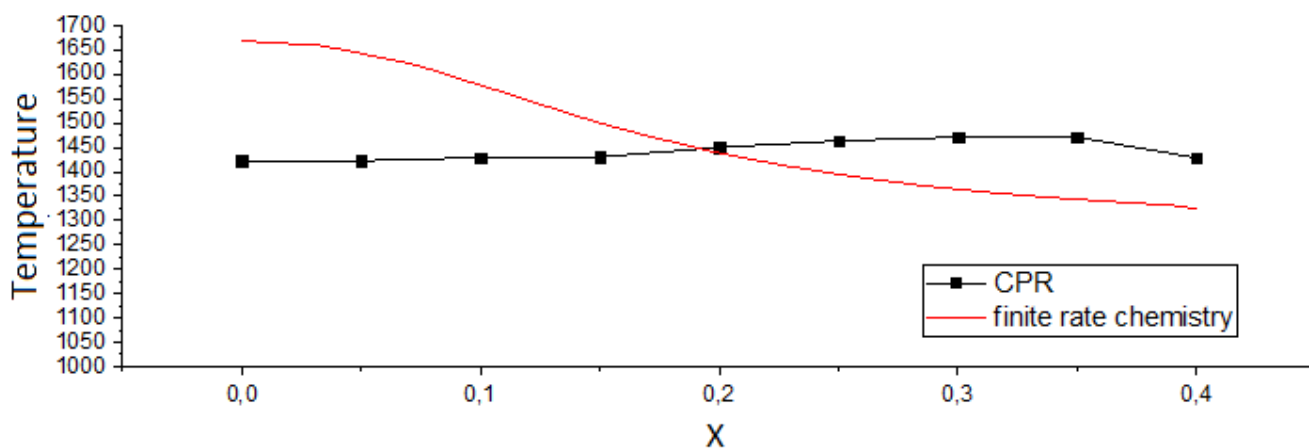


Рис. 3.8. Профіль температури finite rate chemistry

На рис. 3.9 показано, що finite rate chemistry + eddy dissipation модель найкраще з усіх описує процес горіння за даних умов.

На рис. 3.7 – 3.9 представлено профілі температури вздовж осі камери згорання різних моделей горіння. Виявлено що, finite rate chemistry + eddy dissipation модель горіння найкраще описує експеримент.

Обраний механізм горіння *WD2* гарно описує процес горіння метану в закрученому потоці.

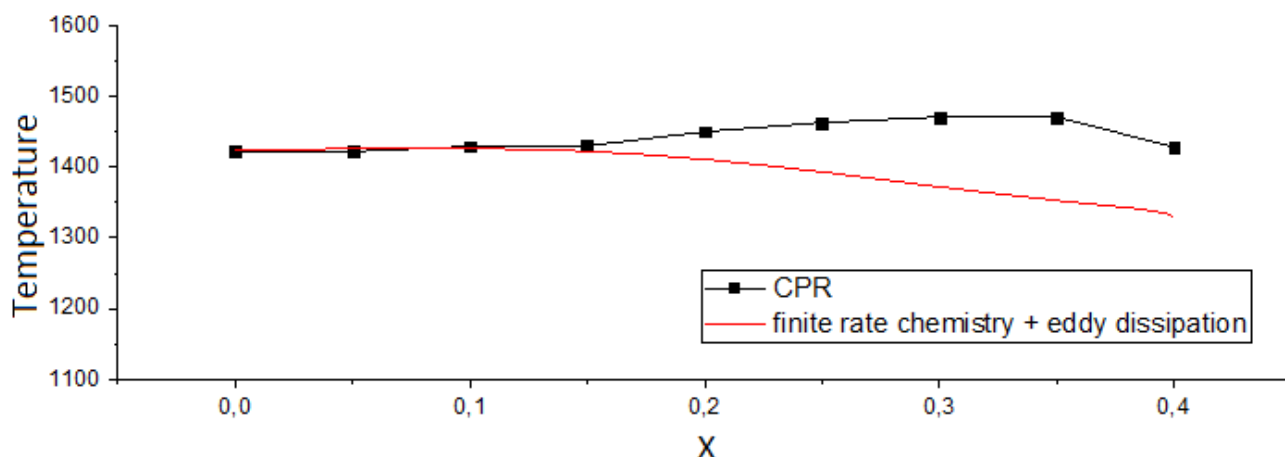


Рис. 3.9. Профіль температури finite rate chemistry + eddy dissipation

3.2. Висновки до розділу 3

Проведено верифікацію програмного комплексу ANSYS CFX на модельній камері згоряння яка показала можливість розрахунку основних характеристик потоку з хімічними реакціями з наступними похибками:

- 1) Температура — 10 %
- 2) Швидкість — 5%
- 3) NO_x — 30%

Результати верифікації показали що, для течії такого характеру найбільша точність досягається в $k - \varepsilon$ моделі турбулентності та finite rate chemistry + eddy dissipation моделі горіння з використанням механізму горіння $WD2$

РОЗДІЛ 4.

УТВОРЕННЯ ОКСИДІВ АЗОТУ ПРИ СТАДІЙНОМУ СПАЛЮВАННІ МЕТАНУ

4.1. Безстадійне горіння

Моделювання процесу горіння метану відбувалось за допомогою комплексу ANSYS CFX. Для порівняння результатів й подальшого аналізу результатів нижче приведено основні дані щодо процесу горіння метану в модельній камері згоряння без подачі вторинного повітря

4.1.1. Розподіл швидкості

Розподіл швидкості вздовж осі камери згорання що показано на рис. 4.1 наглядно демонструє що швидкість суттєво змінюється в факелі де проходить основний процес горіння.

4.1.2. Розподіл температури

На рис. 4.2 показано розподіл температури вздовж осі камери згорання.

На рис. 4.3 показано розподіл температури по камері згорання.

З рисунків видно що максимальне значення температури знаходить в області факелу.

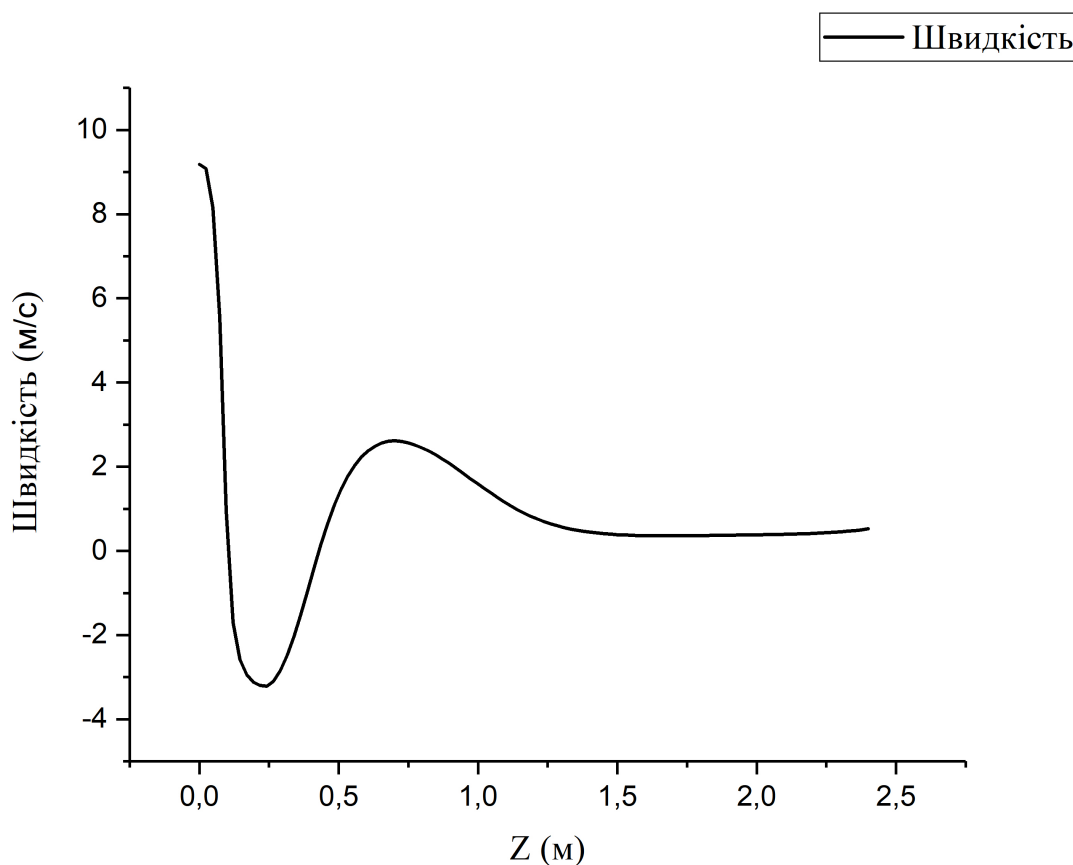


Рис. 4.1. Розподіл швидкості вздовж осі камери згоряння

Таблиця 4.1

Перелік значень параметрів для горіння без подачі вторинного повітря

$T, ^\circ C$	$CO, \text{‰}$	$NO_x, \text{‰}$	$CO_2, \text{‰}$	$O_2, \text{‰}$
1949	0.02586	0.05694	217.19	29.18

4.1.3. Досліджувані величини

Для порівняння й подальшого нормування в таблиці 4.1 наведені основні параметри по яких буде проведено порівняння.

4.1.4. Пошук геометрично вигідного положення

В процесі моделювання змінювалося положення отвору для подачі вторинного повітря, параметр L (рис. 4.4).

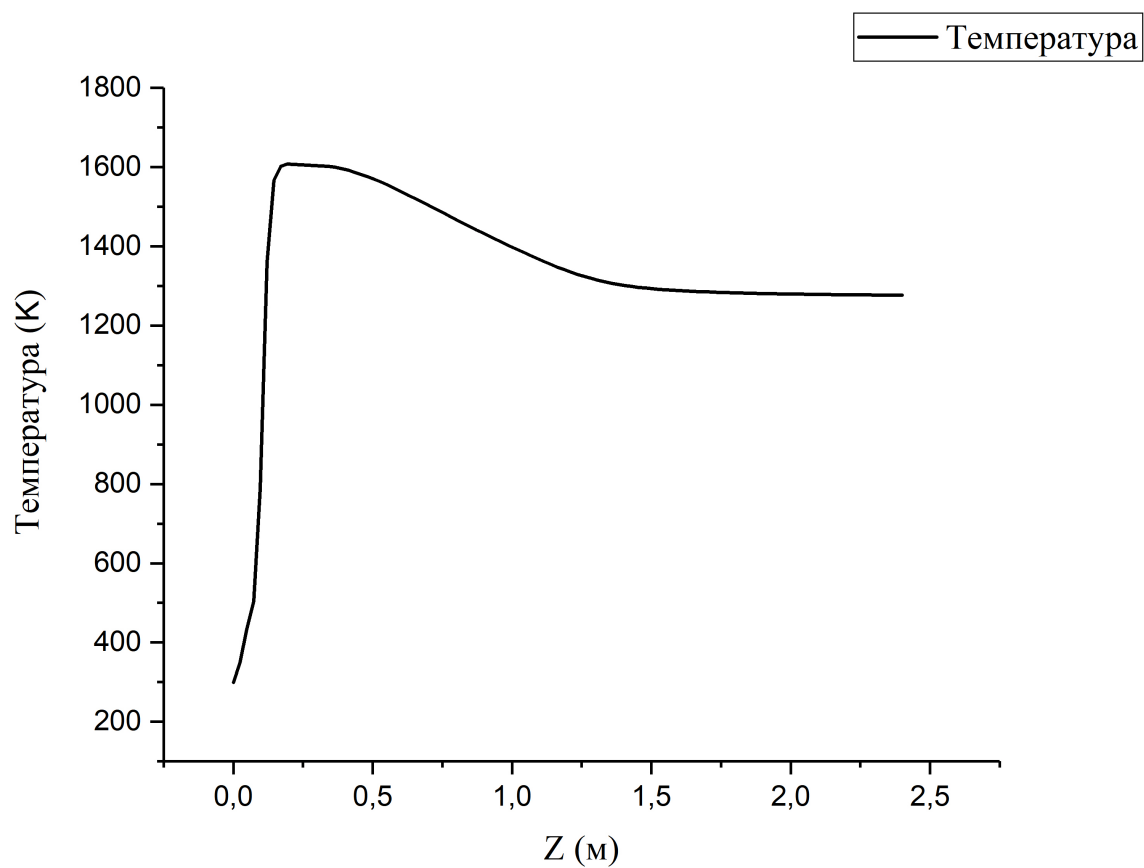


Рис. 4.2. Розподіл температури вздовж осі камери згоряння

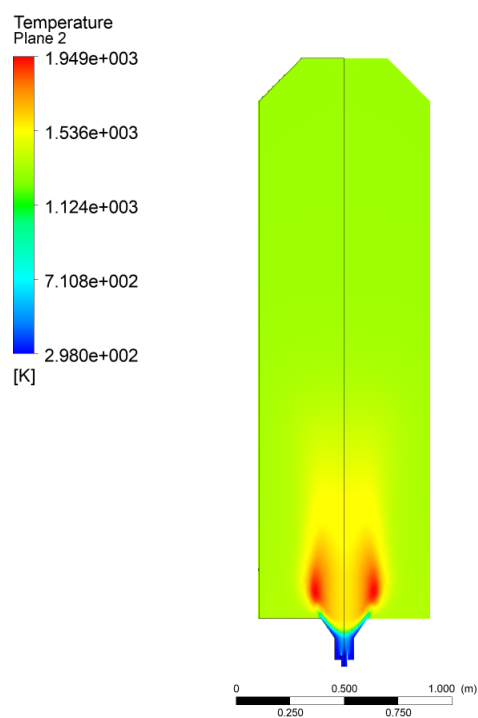


Рис. 4.3. Розподіл температури по камери згоряння

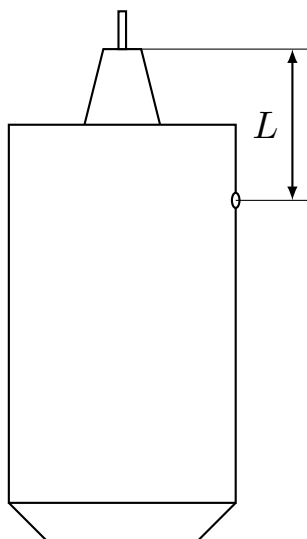


Рис. 4.4. Положення отвору для подачі основного повітря

Таблиця 4.2

Порівняння досліджуваних величин при різних значеннях параметру L

L	CO, ‰	NO _x , ‰
–	25,86	59,74
0,3	43,41	56,61
0,4	49,40	66,45
0,5	42,33	58,05

В таблиці 4.1 та на графіку 4.5 показані масові частки оксидів азоту та монооксиду вуглецю, останній результат хімічного недопалу, що свідчить про неповне згоряння палива. Дані графіку 4.5 пронормовані на результати безстадійного горіння.

Дані графіку та таблиці показують що при $L = 0.3$ на виході з камери згорання найменше значення оксидів азоту. Подальше варіювання параметру α_{sec} буде проводитися при даному параметрі.

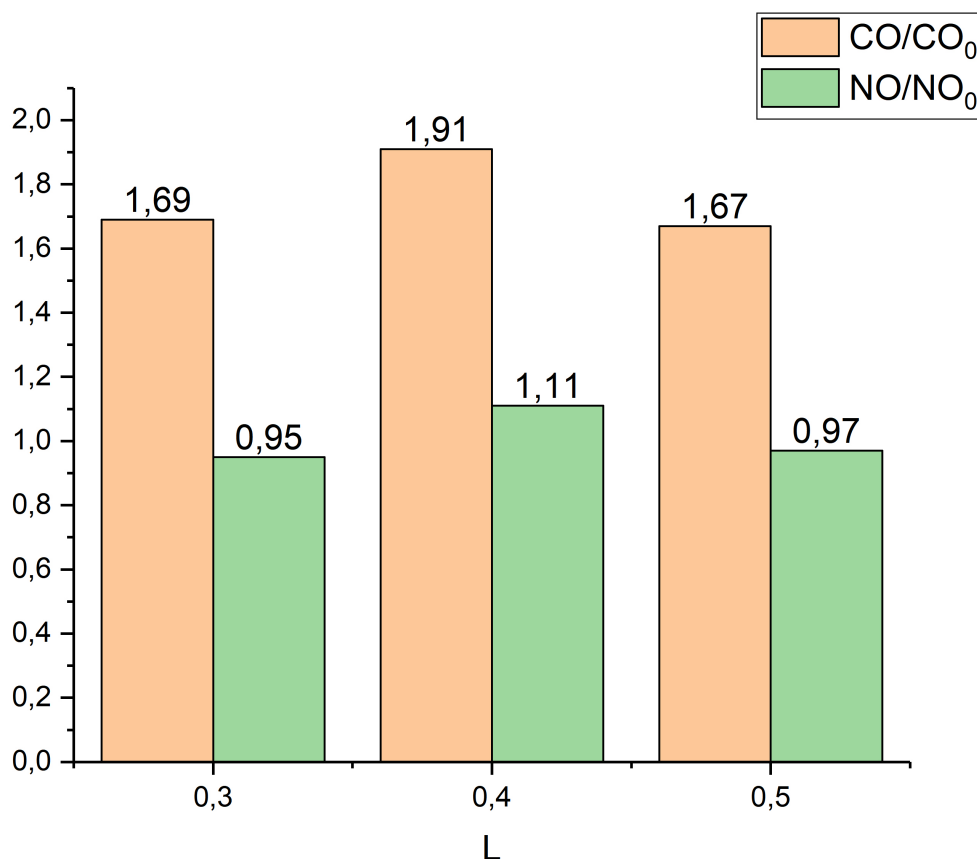


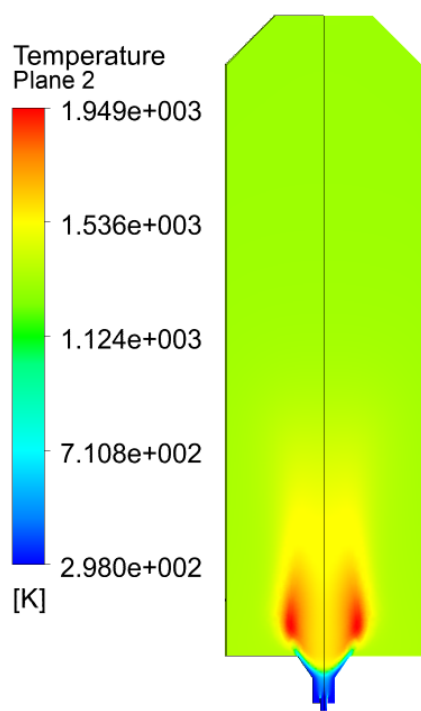
Рис. 4.5. Порівняння досліджуваних величин при різних значеннях параметру L .

4.2. Аналіз параметрів потоку при різних значеннях надлишку повітря

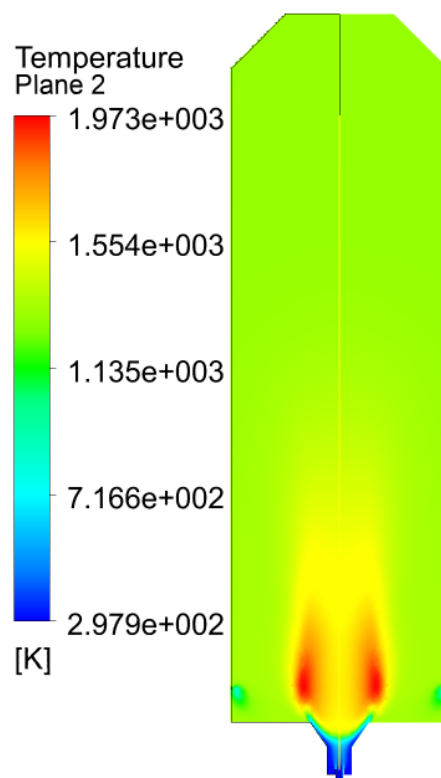
4.2.1. Температурні поля

На рис. 4.6 показано як коефіцієнт α_{sec} впливає на температурне поле в камері згоряння. Максимальне значення температури збільшилось, збільшує емісії оксидів азоту тепловим механізмом. Але зона з максимальною температурою зменшилась що в сумі знизило утворення оксидів азоту.

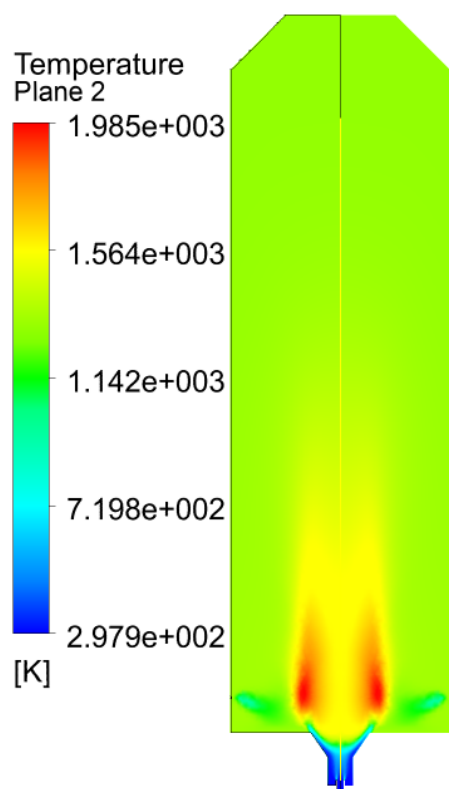
В таблиці 4.3 показано як коефіцієнт α_{sec} впливає на максимальну температуру в камері згоряння.



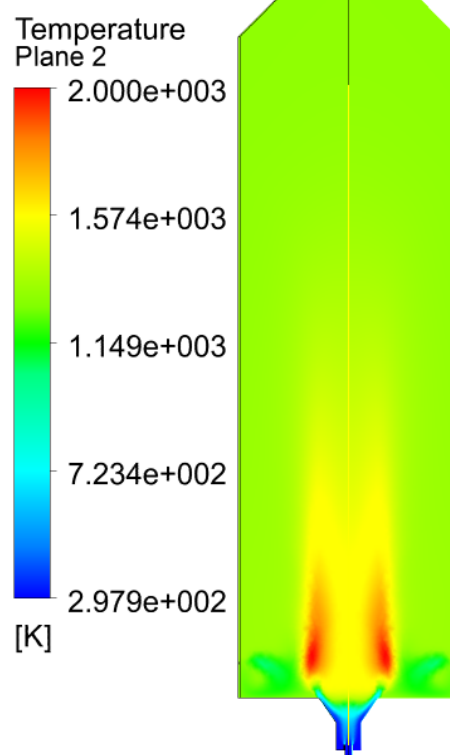
$$\alpha_{sec} = 0\%$$



$$\alpha_{sec} = 10\%$$



$$\alpha_{sec} = 20\%$$



$$\alpha_{sec} = 30\%$$

Рис. 4.6. Температурні поля при різних значеннях параметру α_{sec} .

Таблиця 4.3

Максимальна температура в камері згорання при різних значеннях α_{sec}

α_{sec}	0	0.1	0.2	0.3
T	1949	1973	1985	2000

4.2.2. NO_x та CO

В таблиці 4.4 наведені результати моделювання процесу горіння метану в модельній камері згорання при різних значеннях параметру α_{sec} та α_{burn} .

Таблиця 4.4

Порівняння концентрацій досліджуваних речовин при різних значеннях параметру α_{sec}

$\alpha_{burn}, \%$	100	90	80	70
$\alpha_{sec}, \%$	0	10	20	30
$[\text{NO}_x], 10^{-2} \text{‰}$	5.97	5.69	4.81	3.55
$[\text{CO}], 10^{-2} \text{‰}$	2.59	2.66	3.23	14.09

За даними таблиці 4.4 та побудованого графіку 4.7. Видно що зниження викидів оксидів азоту відбувається за рахунок хімічного недопалу палива, що негативно з економічної точки зору. Точний підбір параметрів горіння дозволять зменшити викиди оксидів азоту при оптимальному хімічному недопалі палива в камері згорання.

На рис. 4.8 показано як коефіцієнт α_{sec} впливає на течію в камері згорання.

В діапазоні 0 ... 20 % витрат вторинного повітря помітне зниження емісії оксидів азоту на 4,7%, при підвищенні процесу хімічного недопалу на 24,6%. Завихрений потік краще перемішує суміш, та створює зони рециркуляції. При значенні більше 20 % вторинне повітря не затримується в зоні рециркуляції, хімічний процес горіння відбувається при недостатній кількості окислювача.

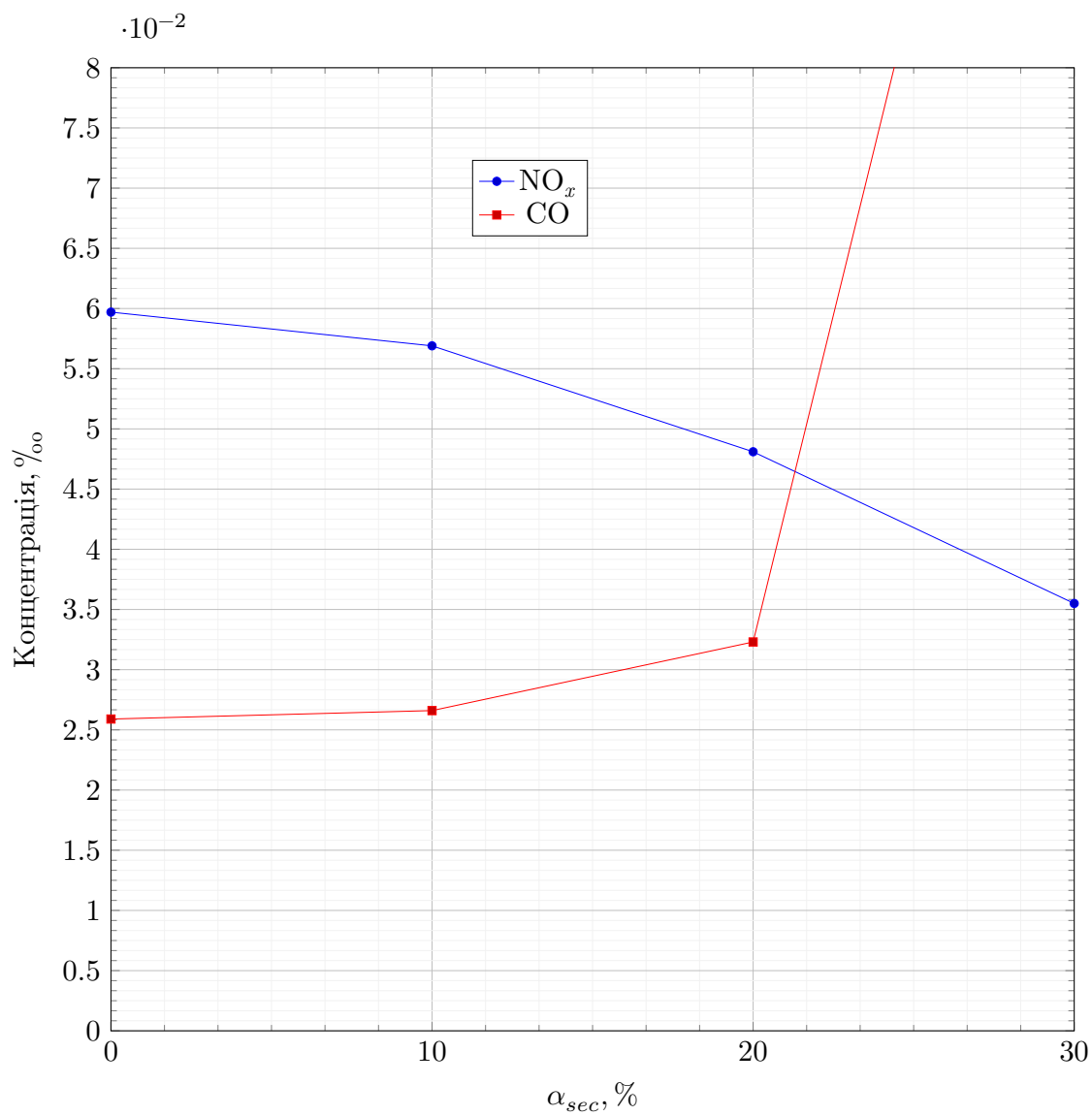
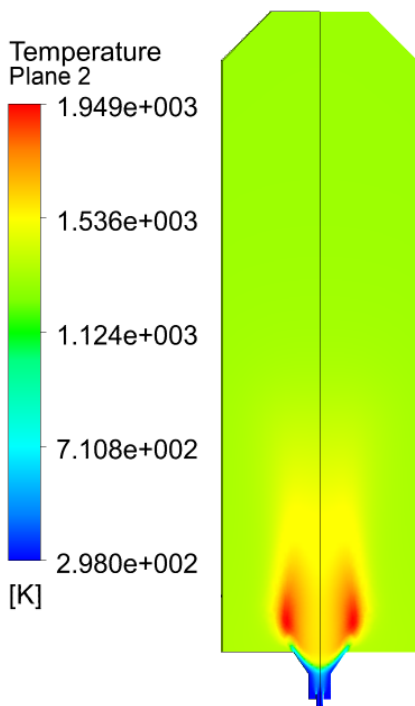
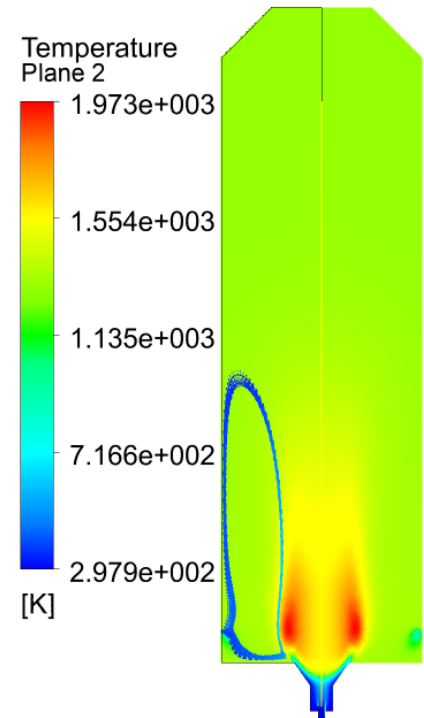


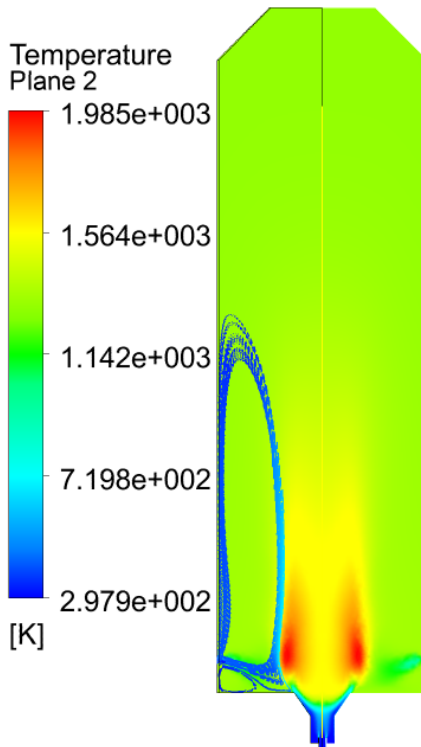
Рис. 4.7. Залежність концентрації CO та NO_x від α_{sec} .



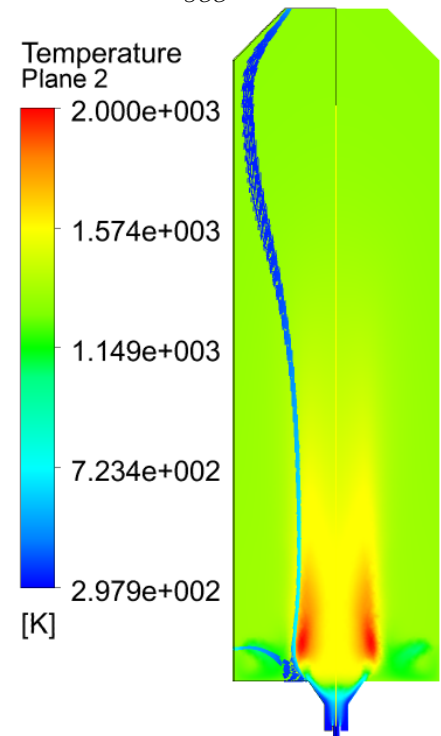
$$\alpha_{sec} = 0\%$$



$$\alpha_{sec} = 10\%$$



$$\alpha_{sec} = 20\%$$



$$\alpha_{sec} = 30\%$$

Рис. 4.8. Вплив на течію при різних значеннях параметру α_{sec} .

Таблиця 4.5

Витрати на подачу повітря в камеру згоряння

α_{sec}	0	0.1	0.2	0.3
E	1	0.793049	0.641517	0.554124

4.2.3. Витрати на стадійну подачу повітря

Для аналізу витрат с точки зору компресора візьмемо значення повного тиску при без стадійному спалюванні метану. E – показник витрат на подачу повітря в камеру згоряння. Порівняємо ці дані за рівнянням (4.1):

$$E = \frac{P_{prim} + P_{sec}}{P_0}. \quad (4.1)$$

Де P_0 – повний тиск при безстадійному спалюванні, P_{prim} тиск в основному отворі для подічі повітря та P_{sec} тиск у вторинному отворі для подачі повітря

За даними таблиці 4.5 та графіку 4.9 помітне зниження тиску після аксіального лопаткового завихрювача. За даними монографії[34] залежність тиску до завихрювача і після нього – лінійне, це означає що витрати на подачу повітря в камеру згоряння в цілому зменшились на 44.58%.

Зниження витрат повітря, що проходить через завихрювач, знижує втрати пов'язані з проходження повітрям через завихрювач, що в свою чергу може зменшити навантаження на компресор.

4.3. Висновки до розділу 4

Моделювання процесу горіння метану відбувалось за допомогою комплексу ANSYS CFX. В процесі дослідження результатів виявлено:

1) Проведене дослідження дозволило вибрати оптимальне місце розташування отвору для подачі вторинного повітря вибраної геометрії та навантаження дорівнює $L = 0.3$

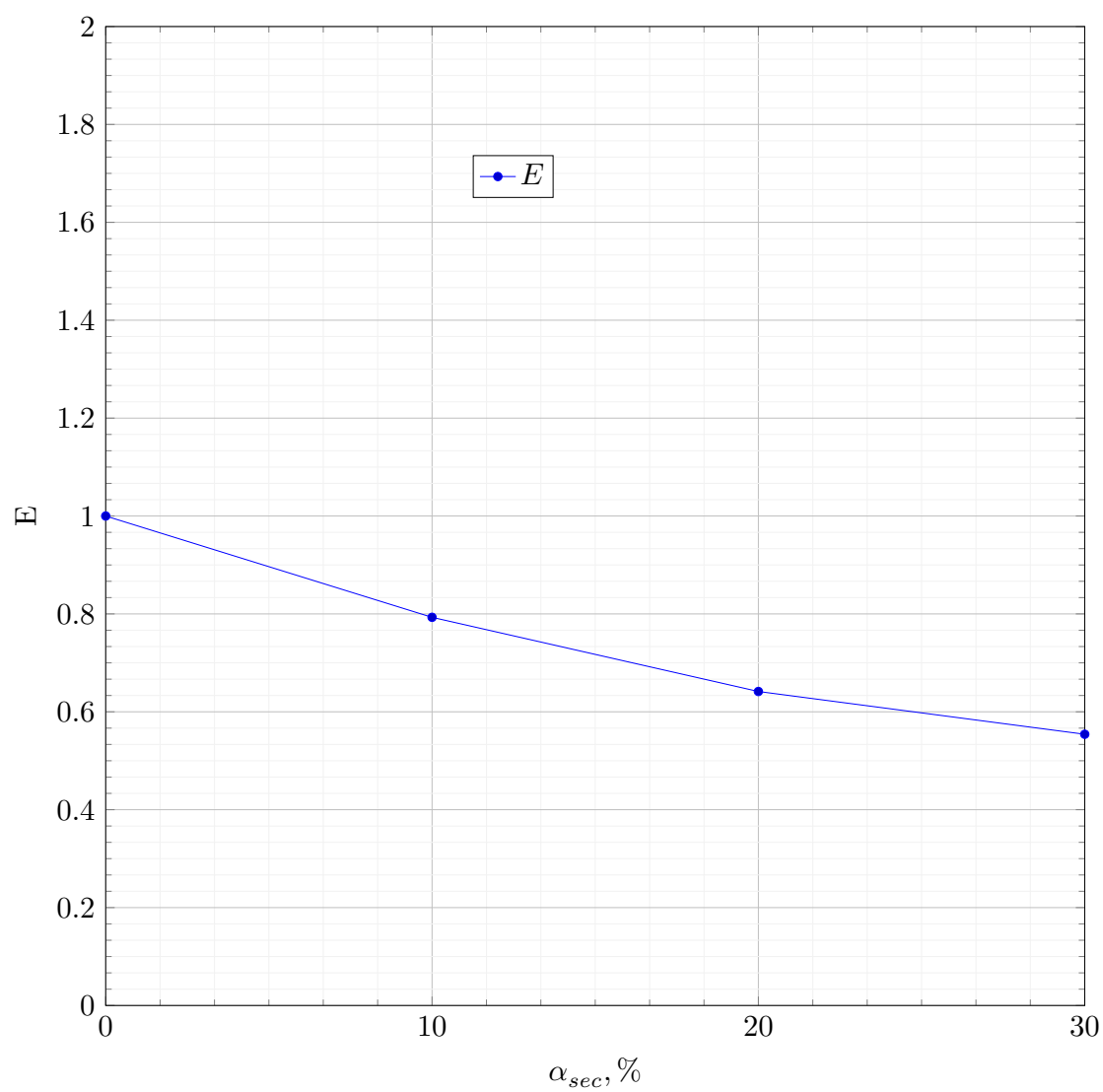


Рис. 4.9. Залежність E від α_{sec} .

2) В діапазоні зміни витрат вторинного повітря 0...30% отримано :

а) Більше 20% вторинного повітря призводить до суттєвого хімічного недопалу палива.

б) Менше 20% вторинного повітря призводить до зменшення емісії оксидів азоту на 4.7%, при підвищенні процесу хімічного недопалу на 24,6%

в) Організація стадійного спалювання в вихровому потоці призводить до зменшення сумарних гідравлічних втрат, що пов'язано зі зменшенням втрат на завихрення потоку первинного повітря.

ВИСНОВКИ

Метою роботи було дослідження впливу стадійної подачі повітря в модельній камері згоряння в закрученому потоці на утворення оксидів азоту при горінні метану. Було змодельовано процес горіння метану в циліндричній камері згоряння, верифіковано програмний комплекс ANSYS CFX, проведено чисельне моделювання стадійної подачі повітря, знайдено геометрично вигідне положення отвору для подачі вторинного повітря, знайдено оптимальне значення відсотку повітря що йде на стадійне спалювання та сформульовано наступні висновки:

а) Аналіз літератури показав, що процеси горіння надзвичайно складні та потребують складних моделей та наближень. Окремо було розглянуто процеси утворення оксидів азоту при горінні газоподібних палив.

б) Дослідження за допомогою пакету прикладних програм ANSYS CFX показало, що впливу стадійної подачі вторинного повітря при спалюванні метану в вихровому потоці на процес утворення оксидів азоту при оптимальному положенні отвору для подачі вторинного повітря та в заданому діапазоні зміни витрат вторинного повітря зменшує емісію оксидів азоту.

в) Організація стадійного спалювання в вихровому потоці призводить до зменшення сумарних гідравлічних втрат, що пов'язано зі зменшенням втрат на завихрення потоку первинного повітря.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. A. Favre. Statistical equations of turbulent gases // Problems of hydrodynamics and continuum mechanics. — 1969. — P. 231–266.
2. Barrère M., Prud'homme R. Équations fondamentales de l'aérothermochimie. — Masson, 1973. — ISBN 9782225360039.
3. Bilger R. W. The Structure of Diffusion Flames // Combustion Science and Technology. — 1976. — July. — Vol. 13, no. 1–6. — P. 155–170. — DOI: 10.1080/00102207608946733.
4. Bray K. N. C. Turbulent flows with premixed reactants. — 1980. — DOI: 10.1007/3540101926_10.
5. Comparison of Measurements and Predictions of Flame Structure and Thermal NO_x, in a Swirling, Natural Gas Diffusion Flame / R. D. Boardman [et al.] // Combustion Science and Technology. — 1993. — Sept. — Vol. 93, no. 9. — P. 193–210. — DOI: 10.1080/00102209308935289.
6. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models / A. M. Eaton [et al.] // Progress in Energy and Combustion Science. — 1999. — Aug. — Vol. 25, no. 4. — P. 387–436. — DOI: 10.1016/s0360-1285(99)00008-8.
7. De Soete G. G. Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen // 15th Symp. (Int.) on Combustion. — The Combustion Institute, 1975. — P. 1093–1102.
8. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique / V. Yakhot [et al.] // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. — 1992. — July. — Vol. 4, no. 7. — P. 1510–1520. — DOI: 10.1063/1.858424.

9. Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions / D. L. Baulch [et al.]. — 1973.
10. Hanson R. K., Salimian S. Survey of Rate Constants in H/N/O Systems // Combustion Chemistry. — 1984. — P. 361.
11. Kuo K. K.-y. Principles of Combustion (Wiley-Interscience Publication). — Wiley-Interscience, 1986. — ISBN 0-471-09852-3.
12. Law C. K. Combustion Physics. — 2006.
13. Magnussen B. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. — 1981. — Jan. — DOI: 10.2514/6.1981-42.
14. NO/Char Reactions at Pulverized Coal Flame Conditions. / J. M. Levy [et al.] // In 18th Symp. (Int'l.) on Combustion. — 1981.
15. Poinso T., Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion, Second Edition. — R.T. Edwards, Inc., 2005. — ISBN 1930217102.
16. Shepherd I. G., Moss J. B., Bray K. N. C. Turbulent transport in a confined premixed flame // Symposium (International) on Combustion. — 1982. — Jan. — Vol. 19, no. 1. — P. 423–431. — DOI: 10.1016/s0082-0784(82)80214-2.
17. Smoot L. D., Smith P. J. NO Pollutant Formation in a Turbulent Coal System // In Coal Combustion and Gasification. — Plenum, NY, 1985. — P. 373.
18. Spalding D. B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames // Symposium (International) on Combustion. — 1971. — Jan. — Vol. 13, no. 1. — P. 649–657. — DOI: 10.1016/s0082-0784(71)80067-x.

19. Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames / K. N. C. Bray [et al.] // Combustion Science and Technology. — 1981. — Jan. — Vol. 25, no. 3/4. — P. 127–140. — DOI: 10.1080/00102208108547512.
20. Vervisch L., Poinso T. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames // Annual Review of Fluid Mechanics. — 1998. — Jan. — Vol. 30, no. 1. — P. 655–691. — DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.655.
21. Warnatz J. NO_x formation in high temperature processes. — 1990.
22. Westbrook C. K., Dryer F. L. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames // Combustion Science and Technology. — 1981. — Dec. — Vol. 27, no. 1/2. — P. 31–43. — DOI: 10.1080/00102208108946970.
23. Williams A., Clarke A. G., Pourkashanian M. The mechanism of NO_x formation during combustion of coal // NO_x Generation and Control in Boiler and Furnace Plant Symposium. — 1988.
24. Williams F. A. Combustion Theory (Combustion science and engineering series). — Basic Books, 1985. — ISBN 0-8053-9801-5.
25. Білим П. А., Фесенко Г. В. Теорія горіння та вибуху. — Харків : Курс лекцій, 2012.
26. Жидецький В. Ц., Джигирей В. С., Мельников О. В. Основи охорони праці. — Львів.
27. Забруднення повітря. — URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Air_pollution.
28. Исследование технологий сжигания тюкованной соломы в топке водогрейного котла / М. Н. Жовмир [и др.] // Зерно. — 2008.
29. Карп И. Н., Сорока Б. С., Дашевский Л. Н. Продукты сгорания природного газа при высоких температурах // Техника. — 1967.

30. Математическая теория горения и взрыва / Я. Б. Зельдович [и др.]. — 1980. — С. 478.
31. Пономаренко С. М. Основи фізики горіння: навчальний посібник. — НТУУ «КПІ», 2016.
32. Природознавство. Енциклопедичний словник. Закон Фур'є.
33. Пугач Л. І. Енергетика та екологія. — Підручник. НГТУ, 2003.
34. Щукин В., Халатов А. Теплообмен, массообмен и гидродинамика закрученных потоков в осесимметричных каналах. — 1982.

ДОДАТОК А.

РОЗРАХУНОК ПОХИБОК

Таблиця А.1

Похибки числового моделювання

Тип похибок	Причина виникнення	Усунення/зниження
Обчислювальні похибки (похибки розв'язання диференціальних рівнянь, похибки дискредитації, похибки ітераційного процесу, похибки округлення)	Різниця між рішенням точних рівнянь і рішенням дискретних рівнянь, що вирішуються в програмі	Виконання розрахунків на кількох сітках (контроль збіжності в сітці). Контроль збіжності результатів розрахунку по локальних і інтегральним фізичним параметрам
Похибки моделювання	Неточність математичного опису фізичних процесів (наприклад турбулентності)	Виконання попередніх верифікаційних розрахунків
Похибки користувача	Не правильне використання програмного забезпечення, а саме недостатня компетентність користувача, неуважність	Проходження спеціалізованого навчання. Автоматизація процесу обробки результатів розрахунків. Виконання попередніх тестових розрахунків

Таблиця А.1

Похибки числового моделювання

Тип похибок	Причина виникнення	Усунення/зниження
Закладені неточності	Недостатність знань для проведення моделювання (наприклад, відсутність детальної інформації про граничні умови чи геометрію)	Віддалення меж розрахункової області від аналізованої ділянки
Похибки програмного забезпечення	Невідповідність документально заявленої процедури розрахунку і фактичної реалізації в програмному забезпеченні. Як правило це результат неправильного програмування	Використання ліцензійного сертифікованого програмного забезпечення, що добре себе зарекомендувало