

УДК 662.769

DOI <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2024.4/39>**Шахбазов І.О.**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**Сірий О.А.**Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ГОРІННЯ ВОДНЕВМІСНОГО ПАЛИВА В ПРЯМОТОЧНОМУ ПАЛЬНИКУ КРУГЛОГО ПЕРЕТИНУ

У представленій роботі наведено результати дослідження процесу горіння газоподібного водневмісного палива – аміаку за допомогою математичного моделювання. З метою досягнення низьковуглецевого розвитку держави та посилення енергетичної безпеки, передбачається використання безвуглецевого палива на основі водню. Відомо, що з часів промислової революції спалювання було основним методом перетворення енергії для людської діяльності, включаючи виробництво електроенергії та транспорт. На сьогоднішній день ці сектори продовжують значною мірою покладатися на вуглеводневе паливо. Як наслідок, найбільший абсолютний приріст викидів вуглекислого газу у 2022 році був від виробництва електричної та теплової енергії. Таким чином, утворення значної частини викидів CO_2 , що є головним винуватцем глобального потепління, підриваючи боротьбу зі зміною клімату, змушує рухатись у напрямку декарбонізації. Необхідність декарбонізації враховується програмними документами, у тому числі державними стратегіями, які не лише застерігають, а й забороняють надмірне утворення забруднюючих речовин та стимулюють популяризацію безвуглецевих технологій в енергетичних секторах. Для досягнення майбутніх цілей вуглецево-нейтральної системи необхідний інноваційний розвиток технологій спалювання палива. Однією з найбільш ефективних технологій горіння, яка дозволить використовувати паливо різної калорійності та зменшити викиди парникових газів, є струменево-нішева технологія, розроблена в Київському політехнічному інституті. Проведено дослідження процесів гідродинаміки і сумішоутворення аміаку і повітря у пальнику циліндричної форми з перпендикулярним введенням палива у потік окисника. За результатами математичного моделювання проаналізовано розподіл температур, швидкості та концентрацій, які свідчать про потенціал аміачного палива. Отримані параметри відповідають 10 кВт теплової потужності. Однак використання аміаку при спалюванні не позбавлене проблем, включаючи низьку швидкість полум'я, вузькі межі займистості, схильність до утворення NO_x . Таким чином, подальше впровадження аміаку в якості палива в енергетиці та промисловості потребує проведення комплексних досліджень робочого процесу горіння.

Ключові слова: безвуглецеве паливо, водневмісне паливо, аміак, декарбонізація, моделювання, пальниковий пристрій, вуглекислий газ, екологія, гідродинаміка, сумішоутворення.

Постановка проблеми. З часів промислової революції спалювання було основним методом перетворення енергії для людської діяльності, включаючи виробництво електроенергії та транспорт. На сьогоднішній день ці сектори продовжують значною мірою покладатися на вуглеводневе паливо [1]. Таким чином, значна частина викидів вуглекислого газу (CO_2) виробляється через ці сектори, що є головним винуватцем глобального потепління, підриваючи боротьбу зі зміною клімату.

Найбільший абсолютний приріст викидів CO_2 у 2022 році був від виробництва електричної та теплової енергії [2]. При збільшенні глобального попиту на електроенергію на 2,7%, викиди в енер-

гетичному секторі зросли на 1,8% (або 261 Мт), досягнувши історичного максимуму в 14,6 Гт.

У подоланні назрілої проблеми та виконанні екологічних зобов'язань ключовим рушієм видається декарбонізація.

Декарбонізація промислового й енергетичного сектору призводить до поступового скорочення споживання вуглецю та його заміни іншими видами. Програмним документом, який враховує необхідність декарбонізації, є нова Енергетична стратегія України на період до 2050 року [3], згідно якої енергетичний сектор має бути максимально наближений до кліматичної нейтральності.

Майбутнє безвуглецевого виробництва електроенергії залежить головним чином від вико-

ристання відновлюваних, низьковуглецевих або безвуглецевих видів палива, які можуть задовольнити потребу в енергії, мінімізуючи вплив на навколишнє середовище.

Аналіз останніх публікацій досліджень і публікацій. Аміаку (NH_3) приділяється все більша увага як одному з найпривабливіших енергоносіїв через його безвуглецеву природу та створену надійну інфраструктуру для його зберігання і розподілу.

Останніми роками використання аміаку включає його безпосереднє використання в якості палива [4–8].

Аміак має здатність горіти і, оскільки молекула NH_3 не містить вуглецю, горить без утворення CO_2 , таким чином відновлюючи інтерес до аміаку як палива. Це можна побачити зі стрімкого збільшення наукових публікацій, пов'язаних із спалюванням аміаку, після оглядової статті Kobayashi та ін. [4].

Зокрема, описується дорожня карта до економіки на основі аміаку в працях Natalia Morlanés та ін. [5], де технології аміаку розглядаються з акцентом на поточні обмеження та останні досягнення. Douglas MacFarlane та ін. [6] передбачають виробництво відновлюваного аміаку в масштабах, які є значними з точки зору глобального використання викопного палива.

N. Iki та ін. [7] створили газотурбінну установку потужністю 41,8 кВт, використовуючи аміак у якості основного палива. Після дослідно-конструкторських і ремонтних робіт постачання аміаку, вони провели демонстраційне випробування виробництва електроенергії з використанням аміачного палива. Основними цілями ефективності було збереження сумісності з існуючою системою виробництва електроенергії та мінімізація викидів оксидів азоту (NO_x).

Компанія Mitsubishi Power оголосила про розробку аміачної газової турбіни потужністю 40 МВт у березні 2021 року та хоче вивести її на комерційне виробництво у 2025 році після проходження робочих процесів горіння та відповідних випробувань [8].

Вагомий внесок у сфері розвитку пального пристроїв здійснено вітчизняними вченими [9], зокрема розробка і впровадження у промисловому масштабі струменево-нішевої технології спалювання. Результати промислового впровадження технології дозволили накопичити значний обсяг технічної інформації та дали можливість попередньої екологічної оцінки при модернізації газоспалювального обладнання.

Водночас інновації в галузі перетворення енергії просуваються швидше, ніж у минулому, і для підтримки цих технологій необхідні суттєві науково-дослідні роботи. Через відмінності у властивостях горіння аміаку відносно вуглеводню, можуть знадобитися певні модифікації. Незважаючи на численні переваги, аміак має кілька бар'єрів і прогалин у дослідженнях, які потребують вирішення, перш ніж його використовувати в пристроях для спалювання.

Постановка завдання. Завданням даної роботи є дослідження процесу горіння газоподібного аміаку за допомогою математичного моделювання з метою передбачення можливості використання аміаку як безвуглецевого палива на основі водню та досягнення низьковуглецевого розвитку держави.

Виклад основного матеріалу. Методи і матеріали дослідження. Об'єктом дослідження є закономірності процесів сумішоутворення і гідродинаміки газоподібного аміаку і повітря в пальному пристрої циліндричної форми, в центрі якого розташовано трубку подачі палива з отворами на бічній стінці.

У роботі прийняті наступні передумови. Сталість профілю швидкості повітря на вході в канал і газоподібного аміаку в газоподавальних отворах. Сталість інтенсивності турбулентності на вхідній ділянці каналу. В загальному постановка задачі виконана у тривимірному просторі за стаціонарних умов проходження процесу.

Модель горіння описано переносом речовин з підключенням об'ємних реакцій. Нижче зведено рівняння турбулентної стисливої течії. Збереження маси, імпульсу та енергії описано в рівняннях (1), (2) і (3) відповідно, які можна знайти в [10].

Збереження маси за рівнянням нерозривності:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

де ρ – густина рідини, t – час, $\bar{u} = f(u, v, w)^T$ – швидкість безперервної фази газової суміші.

Збереження імпульсу розглядається через рівняння Нав'є-Стокса:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{u} \cdot \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \tau \quad (2)$$

де p – статичний тиск, τ – тензор напружень.

Рівняння енергії через питому ентальпію:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{u} h) = \nabla \left(k_{eff} \frac{\nabla h}{c_p} \right) + \nabla \bar{J}_h \quad (3)$$

де h – питома ентальпія, $k_{eff} = \lambda$ – теплопровідність газу, c_p – питома теплоємність при постійному тиску, \bar{J}_h – дифузійний потік ентальпії.

Також розглянуто модель ідеального газу для стисливої течії:

$$\rho = \frac{p}{\frac{R}{M} T} \quad (4)$$

де R – універсальна газова стала, $\frac{1}{M} = \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}$ – середня молярна маса суміші, T – температура.

Використовуючи нескладну геометрію пальника, створено розрахункову сітку, що схематично показано на рис. 1. Загальна довжина каналу складає 1,02 м. Для подачі палива передбачено 8 отворів діаметром 3 мм. Згідно з аналізом чутливості сітки, кінцевий розмір сітки становив 212 021 комірок.

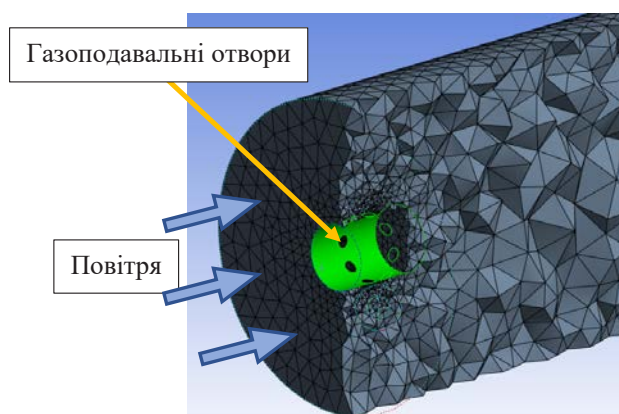


Рис. 1. Розрахункова сітка пальника

Задача розв'язувалася чисельно за допомогою CFD моделювання. Моделювання виконано на основі рівнянь Нав'є-Стокса усереднених за Рейнольдсом (Reynolds-averaged Navier-Stokes) з моделлю турбулентності k-ε Realizable.

Для одночасного врахування турбулентного змішування і швидкості хімічних реакцій використовується модель Finite Rate/Eddy Dissipation, яка поєднує у собі скінченну швидкість (Finite Rate) та вихрове розсіювання (Eddy Dissipation), що дозволяє краще контролювати споживання реагентів. Чиста швидкість реакції приймається як найменша з цих двох швидкостей.

Розв'язувач на основі тиску використовувався зі схемою інтерполяції Coupled для зв'язаного алгоритму швидкість–тиск і просторовою дискретизацією другого порядку.

На відміну від розділеного алгоритму, зв'язаний алгоритм на основі тиску розв'язує пов'язану систему рівнянь, що складається з рівнянь імпульсу та рівняння нерозривності на основі тиску.

Оскільки рівняння імпульсу і нерозривності розв'язуються тісно пов'язаними способами, швидкість збіжності розв'язку покращується порівняно з розділеним алгоритмом. Однак вимоги до пам'яті обчислювальної техніки збіль-

шуються в 1,5–2 рази, оскільки в пам'яті розрахунку повинна зберігатися дискретна система всіх рівнянь імпульсу і нерозривності на основі тиску під час вирішення полів швидкості і тиску (а не лише одне рівняння, як у випадку із розділеним алгоритмом) [10].

Результати моделювання. На рис. 2, 3, 4 показано відповідно розподіл температури та швидкості під час окиснення аміаку в осьовому перерізі каналу, а також в семи поперечних перетинах каналу: перший перетин проходить через центр отворів подачі палива ($x=10\text{мм}$), останній – на місці вихлопу каналу ($x=1020\text{мм}$), інші розміщено на відстанях $x=120, 220, 420, 620, 820\text{мм}$.

Введення газоподібного аміаку здійснюється перпендикулярно набігаючому потоку повітря, який зносить струмені палива. На початку струмені палива утворюють восьмипроменеву зірку, а з середини каналу розподіл продуктів згоряння більш-менш рівномірний (рис. 2б). Зона високих температур спостерігається на відстані 0,2–0,3 м від торця трубки пальника і становить близько 2000К.

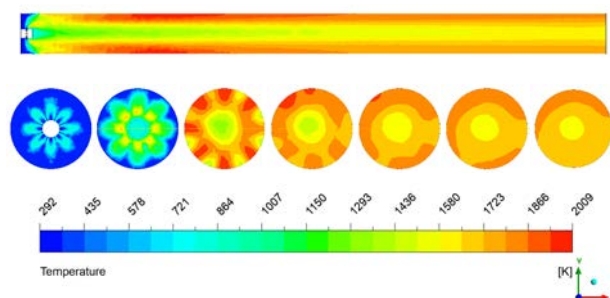


Рис. 2. Розподіл температури продуктів згоряння в осьовому (а) і поперечних (б) перетинах каналу при $u_{\text{нов}}=1 \text{ м/с}$, $\alpha=1,4$

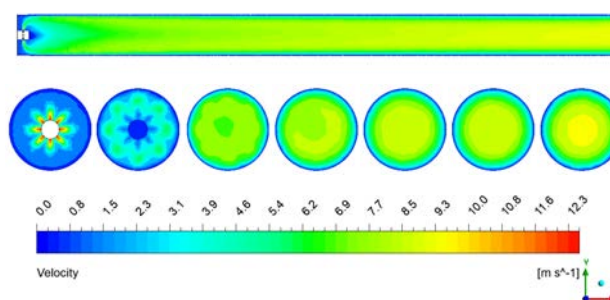


Рис. 3. Розподіл швидкості потоку в осьовому (а) і поперечних (б) перетинах каналу при $u_{\text{нов}}=1 \text{ м/с}$, $\alpha=1,4$

Створена математична модель була попередньо перевірена шляхом спалювання метану з повітрям, результати узгоджуються з відповідними роботами [11].

Особливість представленої конструкції циліндричного пальника має у собі наявність зони

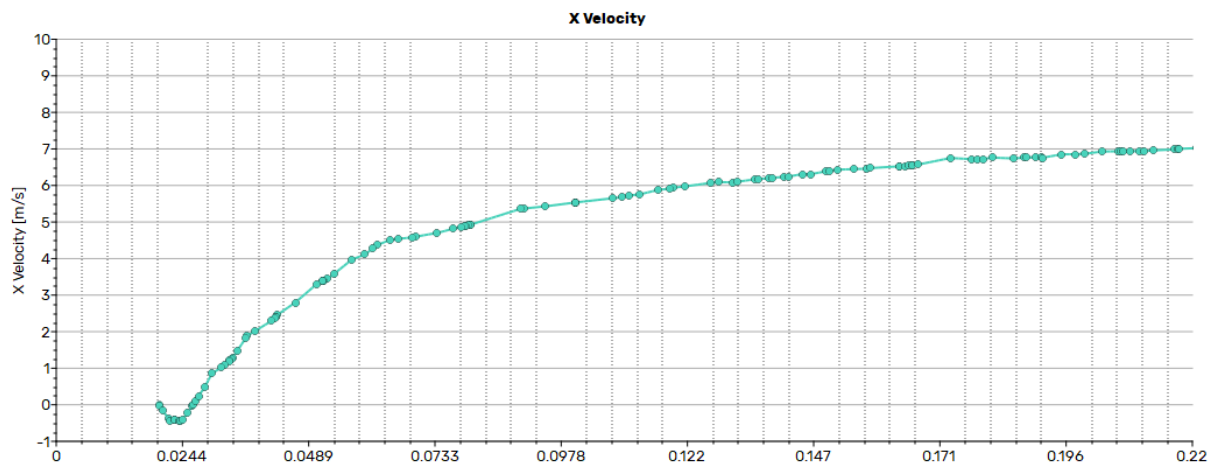


Рис. 4. Проекція швидкості потоку вздовж осі сліду за трубою подачі палива при $u_{\text{пов}}=1$ м/с, $\alpha=1,4$

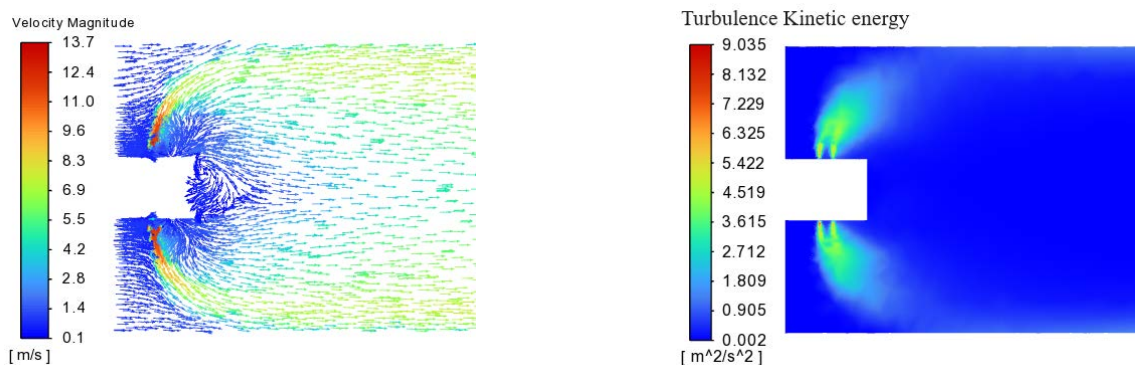


Рис. 5. Розподіл векторів швидкості потоку (а) і кінетична енергія турбулентності (б) в осьовому перетині каналу при $u_{\text{пов}}=1$ м/с, $\alpha=1,4$

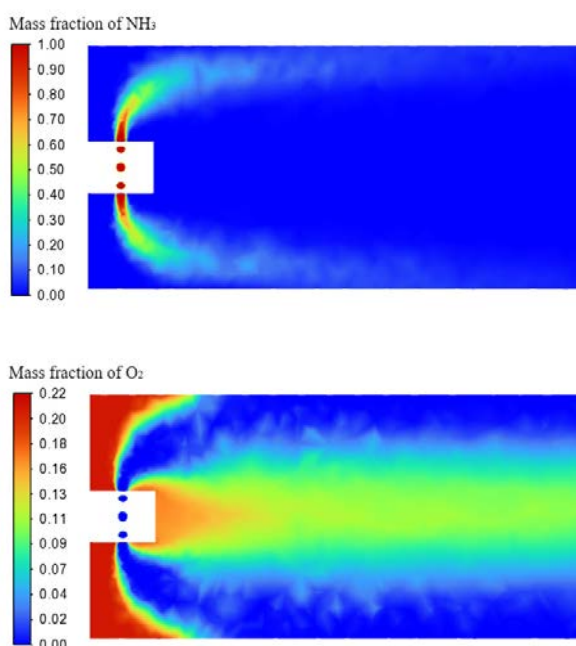


Рис. 6. Розподіл концентрацій газоподібного аміаку (а) і кисню (б) в осьовому перетині каналу при $u_{\text{пов}}=1$ м/с, $\alpha=1,4$

зворотних токів, за аналогією роботи [11]. Цю зону можна спостерігати на епюрі розподілу швидкості потоку в осьовому перетині каналу (рис. 3а), на графіку залежності осьової швидкості потоку від координати вздовж осі каналу (рис. 4; $x=0,02-0,025$ м), а також на векторній діаграмі (рис. 5а).

На рис. 5 показано вектори швидкості потоку і поле турбулентності в межах початкової ділянки каналу. В цих же межах представлено споживання реагентів внаслідок хімічної реакції у вигляді концентрацій газоподібного аміаку і кисню, що показано на рис. 6.

Стехіометричне відношення окисника до палива для аміаку становить 3,8 за об'ємом (або 6,1 за масою), що у 2,5 рази менше порівняно з метаном. При цьому концентрація аміаку у паливно-повітряній суміші близько 21%, тоді як метан – 9,5% за даних стехіометричних умов.

Процес горіння аміаку залежить не лише від теплофізичних характеристик палива, а й також від геометричних характеристик пальника. Варто

значити, що наявна у даному дослідженні зона зворотних потоків є невелика та може бути збільшена при збільшенні діаметру трубки подачі палива. Цю особливість доцільно використовувати для попереднього підігріву газоподібного палива, оскільки супроводжується теплообміном від більш гарячих газів через торцеву стінку трубки до свіжого палива.

Крім того, для поступового переходу від традиційного газоподібного палива до безвуглецевого водневмісного – аміачного палива, викликає інтерес впровадження двопаливного пальникового пристрою. Представлена модель може бути модифікована наступним чином: додається ще одна трубка більшого діаметру ніж перша ($d_1=15\text{мм}$) для подачі другого газоподібного палива. Однак це питання потребує окремого вирішення внаслідок значної варіації як діаметрів трубок, так і розташування отворів подачі палива.

Висновки. Теплові електростанції, включаючи вугільні електростанції та газові турбіни, є великим джерелом викидів CO_2 , і ефект скорочення викидів вуглецю може бути максимізований, якщо в системах спалювання використовується аміак.

Щоб сприяти декарбонізації енергетичного сектора, використання аміаку як палива безпосередньо, або змішаного з іншими видами палива, може мати значні переваги. Завдяки високій об'ємній щільності енергії (порівняно з воднем) і добре налагодженій виробничій і транспорт-

ній інфраструктурі аміак є привабливим стійким енергоносієм. Однак використання аміаку при спалюванні не позбавлене проблем, включаючи низьку швидкість полум'я, вузькі межі займистості, схильність до утворення NO_x .

Зважаючи на окреслені проблеми, наявних досягнень недостатньо та потрібні розробки, які пом'якшують перешкоди для ефективного та успішного прямого спалювання аміаку. Механізми чистого або спільного з іншими видами палива згоряння аміаку мають бути детально з'ясовані з точки зору хімічної кінетики.

За результатами дослідження спалювання чистого газоподібного аміаку з повітрям визначено параметри сумішоутворення для даної конструкції пальника, які відповідають 10 кВт теплової потужності. При коефіцієнті надлишку повітря 1,4 швидкість палива і окисника становить 1 і 12,5 м/с відповідно. При цьому концентрація аміаку експоненційно спадає від 0,6 до $1,4 \cdot 10^{-18}$ кг/кг вздовж усього каналу по ходу газів.

У фундаментальних дослідженнях слабка займистість аміачно-повітряного полум'я може бути посилена шляхом додавання більш реакційноздатних палив, попереднім нагріванням вхідних газів і підвищенням концентрації кисню. Досліджується конструкція пальника дозволяє організувати наведені методи посилення займання аміачно-повітряної суміші за незначних модифікацій.

Список літератури:

1. Data and statistics – IEA. Режим доступу: <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-browser/?country=WORLD&fuel=Energy%20supply>.
2. CO_2 Emissions in 2022 – Analysis – IEA. Режим доступу: <https://www.iea.org/reports/co2-emissions-in-2022>.
3. Про схвалення Енергетичної стратегії України на період до 2050 року. Розпорядження Кабінету Міністрів України від 21.04.2023 № 373-р. <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/373-2023-p#Text>.
4. Science and technology of ammonia combustion / Н. Kobayashi та ін. Proceedings of the Combustion Institute. 2019. Т. 37, № 1. С. 109–133. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.09.029>.
5. A technological roadmap to the ammonia energy economy: Current state and missing technologies / N. Morlanés та ін. Chemical Engineering Journal. 2020. С. 127310. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127310>.
6. A Roadmap to the Ammonia Economy / D. R. MacFarlane та ін. Joule. 2020. Т. 4, № 6. С. 1186–1205. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2020.04.004>.
7. Micro gas turbine firing ammonia / N. Iki та ін. In Proceedings of the 12th Annual NH_3 Fuel Conference, м. Chicago, IL, 20–23 вер. 2015 р.
8. Mitsubishi Power Commences Development of World's First Ammonia-fired 40MW Class Gas Turbine System – Targets to Expand Lineup of Carbon-free Power Generation Options, with Commercialization around 2025. Mitsubishi Power. <https://power.mhi.com/news/20210301.html>.
9. Abdulin M. Z., Siryi O. A., Kobylanska O. O. Energy-ecological assessment of the boiler equipment modernized with the jet-niche technology. Journal of Mechanical Engineering. 2022. Т. 25, № 3. С. 46–55. <https://doi.org/10.15407/pmach2022.03.046>.
10. Inc. ANSYS. Ansys Fluent Theory Guide. <https://ansyshelp.ansys.com>.
11. Тимощенко О. Б. Розроблення теплофізичних засад спалювання газу в мікрофакельних пальникових пристроях малої потужності: автореф. дис. канд. техн. наук: 05.14.06. Київ, 2020. 174 с.

Shakhbazov I.O., Siryi O.A. MATHEMATICAL MODELING OF THE HYDROGEN-CONTAINING FUEL COMBUSTION PROCESS IN A DIRECT FLOW BURNER WITH ROUND SECTION

The presented work demonstrates the results of the study of the gaseous hydrogen-containing fuel – ammonia combustion process using mathematical modeling. In order to achieve low-carbon development of the state and increase energy security, the use of carbon-free fuel based on hydrogen is assumed, which is caused by the following prerequisite. It is known that since the Industrial Revolution, combustion has been the primary method of energy conversion for human activities, including power generation and transportation. Today, these sectors continue to rely heavily on hydrocarbon fuels. As a result, the largest absolute increase in carbon dioxide emissions in 2022 was from electricity and heat production. Thus, the formation of a significant part of CO₂ emissions, which is the main culprit of global warming, undermining the fight against climate change, forces to move in the direction of decarbonization. The need for decarbonization is taken into account by program documents, including government strategies, which not only warn but also prohibit the excessive formation of pollutants and stimulate the promotion of carbon-free technologies in energy sectors. The innovative development of fuel combustion technologies is necessary to achieve the future goals of a carbon-neutral system. On the way to creating a combustion technology that will allow the use of fuel with different caloric content and reduce greenhouse gas emissions, it was decided to use a burner based on a jet stabilizer developed in the NTUU "Igor Sikorsky KPI". A study of the hydrodynamics processes and the ammonia-air mixture formation in a cylindrical burner with a perpendicular injection of fuel and oxidizer was carried out. The simulation results are recorded in the form of temperatures, speeds and concentrations distributions, which indicate the potential of ammonia fuel. The obtained parameters correspond to 10 kW of thermal power. However, the use of ammonia in combustion is not without problems, including low flame speed, narrow flammability limits, and propensity for NO_x formation. Therefore, the further introduction of ammonia as a fuel in energy and industry requires comprehensive studies of the combustion working process.

Key words: carbon-free fuel, hydrogen-containing fuel, ammonia, decarbonization, simulation, burner device, carbon dioxide, ecology, hydrodynamics, mixture formation.