GYÖNGYÖSI MÁRTON
TDK DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
ENERGETIKAI GÉPEK ÉS RENDSZEREK TANSZÉK

TDK DOLGOZAT

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
ENERGETIKAI GÉPEK ÉS RENDSZEREK TANSZÉK

Gyöngyösi Márton

TDK dolgozat

Tüzelésmodellek értékelése ammónia esetén

Témavezető:
Füzesi Dániel
Doktorandusz

Budapest, 2021

Copyright © Gyöngyösi Márton, 2021

Tartalomjegyzék

Ábrajegyzék **vi**

Táblázatok listája **x**

Absztrakt **xi**

1. Bevezetés **1**
1.1. Ammónia szerepe az energetikában . . . 1
1.2. Ammónia tüzelésének modellezése . . . 4
1.3. Tüzelésmodellek . . . 10
1.3.1. C-egyenlet . . . 11
1.3.2. Extended Coherent Flame Model . . . 13
1.3.3. Részletes kémia . . . 14
1.3.4. Flamelet Generated Manifold Model . . . 15

2. A numerikus modell **18**
2.1. Anyagjellemzők . . . 18
2.2. Turbulencia modell . . . 18
2.3. Geometria . . . 19
2.4. Peremfeltételek . . . 21
2.4.1. Sztöchiometriai számítások . . . 21
2.4.2. Ki- és belépő peremfeltételek . . . 21
2.4.3. Fali peremfeltételek . . . 22
2.5. Hálók . . . 23
2.5.1. Előzetes modell hálója . . . 23
2.5.2. Teljes modell hálója . . . 25
2.6. Hálófüggetlenségi vizsgálat . . . 26
2.6.1. A keverőcső vizsgálata . . . 26
2.6.2. Az égéstér vizsgálata . . . 34
2.7. Időfüggetlenségi vizsgálat . . . 38

3. Eredmények **40**
3.1. Előzetes számítások . . . 40
3.1.1. Részlegesen előkevert modell . . . 41
3.2. Teljes modellre vonatkozó számítások eredményei . . . 46
3.2.1. C, ECFM . . . 46
3.2.2. EDCM . . . 49
3.2.3. FGM modell . . . 50
3.3. EDCM és FGM modellek stacionárius eredményeinek összehasonlítása . . . 52
3.4. EDCM és FGM modellek tranziens eredményeinek összehasonlítása . . . 56

3.5. Reakciómechanizmusok összehasonlítása 58

4. Modellvalidáció **62**
4.1. Lángalakok összehasonlítása 62
4.2. Adiabatikus lánghőmérséklet 64
4.3. Kibocsátás vizsgálata 66

5. Összefoglalás **67**

Hivatkozások **68**

Ábrák jegyzéke

1.1. Energiatermelésből származó CO_2 kibocsátás 1990-2021 között a világon. . 1
1.2. Az ammóniagazdaság kialakulásának szakaszai. 3
1.3. A kísérleti berendezés. 5
1.4. Ammónia égésének eredményei, felső sorban a hőmérséklet, középső sorban az NO, alsó sorban az NH_3 megjelenítve különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők függvényében. 5
1.5. A kísérleti berendezés; a) az előkeverés megvalósulása, b) az égéstér, c) a perdítőelem, d) az égő 3D sémája. 6
1.6. Az NH_3/levegő égésének átlagos áramlási sebességmezője. Balra: a PIV (Particle Imaging Velocimetry) mérés eredménye, jobbra: a LES eredménye. (ORZ a külső recirkulációs zóna, IRZ a belső recirkulációs zóna). . . . 6
1.7. Az NH_3/levegő és a CH_4/levegő lángszerkezetének összehasonlítása. Felső sorban a pillanatnyi, alsó sorban az átlagolt OH eloszlás. 7
1.8. Bal oldalon az átlagolt sebességmező, jobb oldalon a pillanatnyi hőmérséklet-mező. 8
1.9. Hőmérséklet-eloszlás Kelvinben: a) 0,81, b) 1,02, c) 1,14, d) 1,24 tüzelőanyagfelesleg-tényező esetén. 9
1.10. Kibocsátások összehasonlítása különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők esetén: bal felül NO, jobb felül CO_2, bal alul O_2, jobb alul CO. 9
1.11. NO_x kibocsátás vizsgálata különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők esetén. . 10

2.1. A kísérleti égő geometriája. 19
2.2. A perdítőelem (piros), a gáz fúvókák (sárga), a középső tüzelőanyag cső (szürke), és a porlasztó levegőfúvóka (kék). 20
2.3. A perdítőelem geometriája. 20
2.4. Az égő geometriája, kék színnel a belépő peremfeltételek felülete, piros színnel a kilépő peremfeltételek felülete színezve. 21
2.5. Az előzetes geometria hálójának oldalnézete. 24
2.6. Az előzetes geometria hálójának a belépő keresztmetszete. 24
2.7. Az elkészített térfogati háló, és a geometria főbb méretei. 25
2.8. A gázfuratok elhelyezkedése, mérete és felületi háló. 26
2.9. Vizsgált hálók, bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén. 27
2.10. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén. 27
2.11. OH eloszlás [kg/kg], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén. 27
2.12. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 28

2.13. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 29
2.14. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm. 29
2.15. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 30
2.16. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek. . . . 30
2.17. Vizsgált hálók, bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén. 31
2.18. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén. 31
2.19. OH eloszlás [kg/kg], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén. 31
2.20. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 32
2.21. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm. 32
2.22. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 33
2.23. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 33
2.24. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek. . . . 34
2.25. Vizsgált hálók, bal felső sorban a 300675 cellaszám, jobb felső sorban a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén. 35
2.26. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal felső sor a 300675 cellaszám, jobb felső sor a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén. 35
2.27. OH eloszlás [kg/kg], bal felső sor a 300675 cellaszám, jobb felső sor a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén. 35
2.28. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 36
2.29. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 37
2.30. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm. 37
2.31. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 38
2.32. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek. . . . 38

3.1. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve, égés nélküli esetben logaritmikus skálán ábrázolva. 42
3.2. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 42

3.3. OH eloszlás [kg/kg]. 43
3.4. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 43
3.5. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 44
3.6. OH eloszlás [kg/kg]. 44
3.7. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 44
3.8. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 45
3.9. OH eloszlás [kg/kg]. 45
3.10. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 46
3.11. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 47
3.12. OH eloszlás [kg/kg]. 47
3.13. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 47
3.14. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 48
3.15. OH eloszlás [kg/kg]. 48
3.16. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 48
3.17. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 49
3.18. OH eloszlás [kg/kg]. 50
3.19. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 50
3.20. Hőmérséklet-eloszlás [K]. 51
3.21. OH eloszlás [kg/kg]. 51
3.22. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva. 51
3.23. Hőmérséklet-eloszlás [K] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 52
3.24. OH eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 52
3.25. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén logaritmikus skálán ábrázolva. 53
3.26. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 53
3.27. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 54
3.28. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 54
3.29. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm. 55
3.30. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm. 55
3.31. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek. . . . 56
3.32. Hőmérséklet-eloszlás [K] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 57

3.33. OH eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 57
3.34. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén logaritmikus skálán ábrázolva. 57
3.35. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 57
3.36. NH_3 eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén. 58
3.37. Hőmérséklet-eloszlás [K] a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén. 59
3.38. OH eloszlás [kg/kg] a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén. 59
3.39. H_2 eloszlás [kg/kg] a Glarborg (felül) és az Okafor (alul) reakciómechanizmusok esetén. 59
3.40. Az NH_3 oxidációjának reakcióút diagramja a Glarborg mechanizmus esetén. 60
3.41. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén logaritmikus skálán ábrázolva. 60
3.42. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén. 60
3.43. Átlagolt sebességvektorok [m/s] a Glarborg reakciómechanizmus esetén. . . 61

4.1. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell hőmérséklet-eloszlása [K], jobb oldalon az irodalmi mérés lángképe. 63
4.2. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell OH eloszlása [kg/kg], jobb oldalon a kísérleti égés pillanatnyi OH-PLIF képe. 63
4.3. Bal oldalon az FGM modellen alapuló tüzelésmodell hőmérséklet-eloszlása [K], jobb oldalon az irodalmi mérés lángképe. 64
4.4. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell OH eloszlása [kg/kg], jobb oldalon a kísérleti égés pillanatnyi OH-PLIF képe. 64

Táblázatok jegyzéke

1.1. Ammónia modellezésére alkalmas reakciókinetikák. 4

2.1. Moláris tömege az egyes elemeknek. 21
2.2. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek. 29
2.3. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek. 34
2.4. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek. 38

3.1. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek. 55

4.1. A tüzelésmodellek, irodalmi forrás és analitikus számítás alapján meghatározott hőmérsékletek. 65

Absztrakt

A megújuló energiaforrások rendszerbe integrálása számos kihívás elé állítja napjaink mérnökét. Az időjárásfüggő termelők nem tudják kiegyenlíteni önmagukban az igényeket, valamint rendkívül nagymértékű szabályzási folyamatokat indukálnak. A megújulók részarányát mind a hazai, mind az Európai Unió célkitűzések alapján 2030-ra 40%-ra növelni tervezik. Továbbá az Europen Green Deal 2050 és a Nemzeti Energia Stratégia szintén a megújuló, alacsony károsanyag-kibocsátású, karbonsemleges energiatermelést tűzi ki célul.

Az e-fuel tüzelőanyagok túltermelés esetén a többlet villamos energia átalakításával hozhatók létre, mint például a hidrogén, egyes biodízelek, ammónia stb., melyekből karbon-semleges hő vagy villamos energia állítható elő igény szerint. Ezen tüzelőanyagok felhasználásával, előállításával és tárolásával kapcsolatban azonban számos kérdés merül még fel. Az ammónia hőerőgépekben történő felhasználását hozzávetőlegesen már 100 éve vizsgálják. Ennek oka, hogy a hidrogénnel ellentétben könnyebben szállítható és tárolható, valamint CO_2 kibocsátása zérus. Az ammónia gázturbinákban történő elégetésének módszertana azonban koránt sem kiforrott. Fő hátránya, hogy tiszta ammónia égése során keletkező NO_x mennyisége sokszorosa a szabályzásban előírtaknak. A stabilitási, valamint az NO_x kibocsátásának csökkentésére vonatkozó vizsgálatokat numerikus szimulációk támogathatják. A jelenlegi egydimenziót meghaladó ammóniatüzelés-szimulációk nagy részben részletes reakciókinetikai modelleket alkalmaznak, melyek esetenként 100 feletti reakciólépésből és anyagból épülnek fel, jelentősen növelve így a számítási kapacitást. A turbulens égés folyamata egyszerűsített modellekkel is figyelembe vehető, azonban ezek korlátozottan használhatók, mely korlátok nem ismertek sem specifikusan sem általánosan.

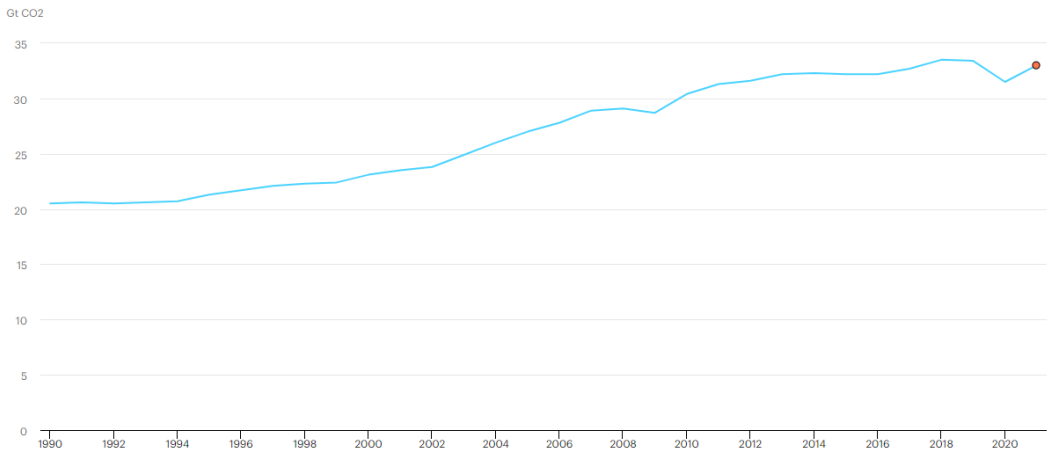
Dolgozatomban az irodalomban megtalálható tüzelésmodelleket hasonlítottam össze Ansys Fluent szoftverkörnyezetben, melyek alkalmasak lehetnek az ammónia tüzelésének széles tartományon történő leírására egy erősen perdületes, szegényen előkevert égő esetén. A vizsgálatokat 0,79-es perdületszámú égőben, 1,43-as légfelesleg tényező és 15 kW tüzelési teljesítmény mellett végeztem el. Az eredményeket irodalomi mérési adatokkal validáltam. A geometria térfogati hálóját polyhedron és hexahedron cellákkal írtam le, majd hálófüggetlenségi vizsgálatot készítettem a részletes kémiai reakciók, így a megfelelő reakcióléptékek figyelembe vételével. A részletes reakciókinetikát tartalmazó modellt termokémiai valószínűségi sűrűség függvény alapú modellekkel vetetettem össze, melyek egyszerűsítik a kémiai egyenleteket, így a számítási időtartam jelentős mértékben lerövidül. Az idő-átlagolt tranziens eredmények összehasonlítása alapján megállapítható, hogy a Flamelet Generated Manifold modell alkalmas szegényen előkevert ammónia perdületes égésének leírására.

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Ammónia szerepe az energetikában

A globális felmelegedéshez nagy mértékben járulnak hozzá az üvegházhatású gázok (ÜHG), melyek kibocsátása napjainkban is még jelentősen meghaladja a klímacélokban foglalt értékeket. Az emberi tevékenységből származó CO_2 kibocsátás több mint kétharmadát teszi ki a megnövekedett üvegházhatásnak. Ezen felül szénhidrogének, mint a metánkibocsátás is jelentős szerepet játszanak a globális felmelegedésben. A CO_2 kibocsátás az emberi fogyasztásnak (leginkább fosszilis tüzelőanyagok használatának) köszönhetően jelentős mértékben növekedett, olyannyira, hogy az átlaghőmérsékletet tovább emelte, és mint az 1.1 ábra mutatja, globális szinten nem csökkent 2021-re. A felmelegedés vezet a klímaváltozáshoz, ami elősegíti a jégsapkák olvadását, ezáltal növelve az óceánok vízszintjét, mindemellett hozzájárul az őshonos növényzet kipusztulásához, betegségek terjedéséhez és egészségünk romlásához. Az European Green Deal 2050 azonban a teljes zéró-ÜHG kibocsátást célozza meg, feltételezve ezzel karbonmentes tüzelőanyagok alkalmazását.



1.1. ábra. Energiatermelésből származó CO_2 kibocsátás 1990-2021 között a világon [1].

Az energiatermelés szempontjából a szél-, nap- és tengeri technológiák állnak a kutatás, fejlesztés és megvalósítás középpontjában. A megújuló energiaforrások nagy része karbonsemleges, ezért sok kutatásnak a témája. Mindazonáltal e nagy erőforrások kezelése kritikus fontosságú a jövedelmezőség javítása érdekében, miközben hosszú távon biztosítja a hálózatot nulla szén-dioxid-kibocsátású energiaellátását. Azonban ezen technológiák az időjárási viszonyoktól, a nehezen hozzáférhető helyektől és a szezonális időszakoktól

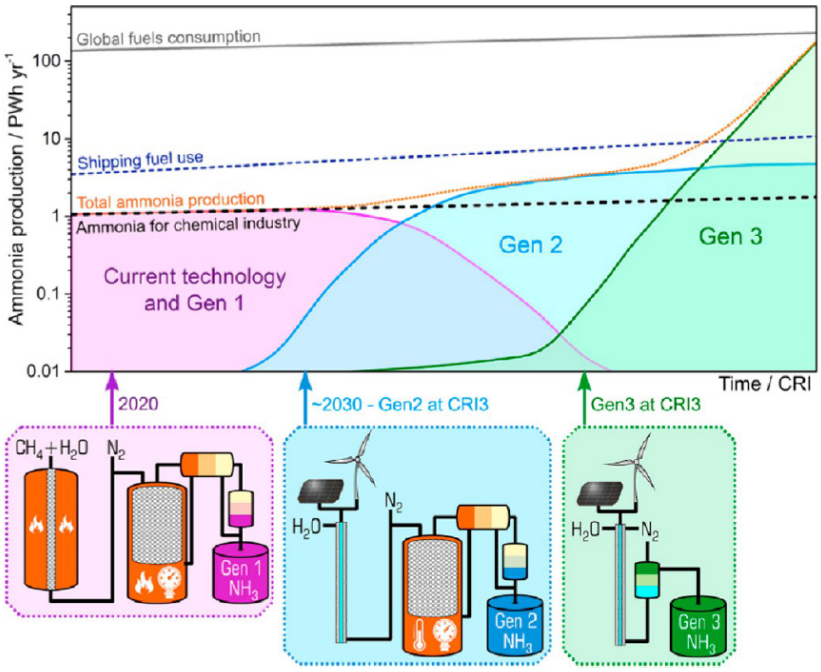
függően változnak. Ezeket a tényeket egyes régiók rendkívüli változékonyságával kombinálva, megfelelő energiagazdálkodási technikák, például energiatárolás alkalmazásával ki lehet küszöbölni, így lehetővé téve a túltermelésből adódó energia elosztását, amikor és ahol szükség van rá. Az energia tárolására többféle megoldás létezik. A koncepciók a nagy teljesítményű szupravezetőkön át, amelyek kisebb teljesítmények (<5 MW) tárolására képesek másodpercben mérhető időtávban, egészen a szivattyús tározós erőművekig, akkumulátortelepekig, és vegyi anyagok tárolásáig terjed, melyek gigawattnyi energiamennyiségek hónapokig való tárolására alkalmasak [2].

A mechanikai megoldásoktól eltérően azonban a vegyi tárolás egyedülálló tulajdonsággal rendelkezik: a rugalmasság. A vegyi anyagok könnyen mozgathatók, tárolhatók és forgalmazhatók, és sokuk piaca már évtizedek óta rendelkezésre áll. Az összes zéró szén-dioxid-kibocsátású energiaellátási lehetőség közül a kereskedelemben értékesítettek közül elsősorban a hidrogént, az ammóniát és a hidrazint tekintik potenciálisnak a jövőben [2]. Ezek az úgynevezett elektromos tüzelőanyagok (e-fuel), melyek az energiát kémiai úton tárolják, és többlet villamosenergia-termelés során állíthatóak elő. Előnyük, hogy karbonsemlegesen állítható elő hő vagy villamos energia felhasználásukkal. A Nemzeti Hidrogénstratégia a megújuló erőforrásokból előállított hidrogén felhasználását vizsgálja. A hidrazin számos problémát vet fel a toxicitásával és a reaktivitásával kapcsolatban, így körülményes üzemanyag, amelyet csak a repülőgépiparban használtak segédenergiaként vészhelyzetekben. A „hidrogéngazdaság” megteremtése azonban számos korláttal szembesül, amelyhez szükség van a berendezések és az infrastruktúra fejlesztésére. A hidrogén tárolásának az ára az ammóniáéval összehasonlítva 26-30-szoros [3]. A hidrogén további hátrányai a nagy diffúziós képessége, alacsony térfogati energiasűrűsége, széles gyúlékonysági spektruma, amik nem teszik gazdaságossá használatát, rámutatva más vegyi anyagok használatának fontosságára. A jelenlegi technológiákban történő alkalmazása egyelőre kérdéses.

Az ammóniát a közelmúltban a szerzők és a globális szervezetek zéró szén-dioxid-kibocsátású molekulaként mutatták be, amely képes biztosítani a megújuló energiaforrásokhoz szükséges energiatároló közeget. Nitrogén és hidrogén termékeként az ammónia egyszerű körülmények között tárolható (azaz -33 °C-on, légköri nyomáson, vagy 0,8-1 MPa-on, légköri hőmérsékleten hűtve), így sokoldalú, könnyen tárolható közeg. Ezenkívül a folyékony ammónia nagyobb térfogati hidrogénsűrűséggel rendelkezik, mint maga a folyékony hidrogén, azaz a folyékony hidrogén sűrűsége 20 K hőmérsékleten körülbelül 70 kg H_2/m^3, míg a folyékony ammóniáé 300 K és 1,0 MPa esetén 106 kg H_2/m^3 [4]. A molekula sokoldalúsága miatt kereskedelmi és globális szinten is elterjedt, világszerte évente 180 millió tonnát állítanak elő, így a világ második legkelendőbb vegyszere [5]. Ezen okból kifolyólag az infrastruktúra minden méretében (azaz nagy kikötők és elosztóvezetékek, forgalmazók és kis felhasználók) rendelkezésre áll az „ammóniagazdaság” azonnali megvalósításához a futurisztikus „hidrogéngazdaság” támogatása érdekében.

Ahhoz azonban, hogy elérjük ezt a pontot, és kielégítsük a zéró szén-dioxid-gazdaságot, a hidrogént és az ammóniát nagyon alacsony vagy nulla szén-dioxid-kibocsátással kell előállítani. MacFarlane et al. [6] szerint az átmenetnek háromféle technológia vagy „generáció” kifejlesztése alatt kell megtörténnie az 1.2 ábrán szemléltetve. Az első generáció „kék hidrogént” állít elő, amely biztosítja az ammónia gyártása során keletkező CO_2 megkötését és tárolását (azaz a hidrogén szállításának legegyszerűbb módja); a második generáció megújuló forrásokat alkalmaz a „zöld hidrogén” előállításához, következésképpen „zöld ammóniát” állít elő; és végül, a technológiák harmadik generációja elkerüli a hidrogén termelését, az ammóniát a N_2 elektrolitikus redukciójával állítja elő, így elkerülve a jól ismert Haber-Bosch eljárást, amely az ammónia kereskedelmi méretű előállításának módja.

A költségek jelentik a fő akadályt az első kettő generáció esetén, míg a technológiai megvalósíthatóság korlátozza a harmadik generáció kereskedelmi bevezetését. Ugyanakkor a világ ezen a fejlődési úton az halad „ammóniagazdaság” létrehozása felé.



1.2. ábra. Az ammóniagazdaság kialakulásának szakaszai [6].

Ezenkívül különféle gazdasági tanulmányok is megpróbáltak rámutatni az ammónia használhatóságára a megújuló energiák energiatároló közegeként. Banares-Alcantara et al. [7] nyereséges és megvalósítható forgatókönyvet írt le, amikor ammóniát használnak energiatároló közegként és műtrágyaként, míg Rouwenhorst et al. [8], Wang et al. [9], Bicer et al. [10] olyan új koncepciót mutattak be, ahol az ammónia fenntartható és gazdaságos szereplője a karbonmentes energiatermelésnek és szállításnak. Palys et al. [11] technológiai-gazdasági elemzést végeztek egy elszigetelt rendszeren amely csak megújuló energiaforrásokat használ.

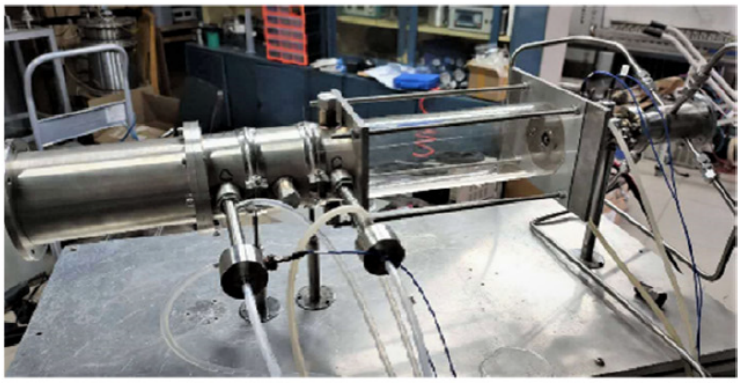
1.2. Ammónia tüzelésének modellezése

Az 1.1 alfejezetben részletezett ammónia jövőbeli energetikában betöltendő szerepe ihlette a dolgozatom témáját, az ammónia tüzelésének numerikus modellezését, mivel az ammóniából való energia kinyerésének főbb módja annak elégetése. Következésképpen, tüzelését stabilitási és kibocsátás szempontjából nagy mértékben befolyásoló tényezők a gyulladási késedelem, és a lamináris lángsebesség. Ezen paraméterek pontos leírására alkalmasak a reakciómechanizmusok, amelyeket tüzelések modellezése során alkalmazni lehet. A reakciómechanizmusokat jellemzően egyszerű egy dimenziót közelítő geometrián végzett mérések eredménye alapján hozzák létre, amelynek célja a lamináris lángterjedési sebesség és a gyulladási idő pontos leírása. Ebből kifolyólag maga a mechanizmus is egy 0D-s vagy 1D-s körülményt ír le. Azonban bonyolultabb geometria és tüzelés esetén (kazán vagy gázturbinaégő) az égés minden esetben legalább turbulens, mely megköveteli az egyes mechanizmusok átfogó vizsgálatát kiterjesztett körülmények alatt is. Az irodalomban fellelhető ammónia és ammóniakeverékek oxidációjának leírására alkalmas reakciókinetika az 1.1 táblázatban látható. A mechanizmusokat különböző légfelesleg és nyomás tartományokra adják meg, mivel e körülmények között állnak rendelkezésre a mérési adatok. A mechanizmusok felhasználhatók háromdimenziós aerodinamikai számításokhoz, azonban a tesztelésük minden esetben szükséges, ugyanis a turbulens lángterjedési sebesség és a gyulladási idő a komplexebb jelenség miatt eltérhet a valóságtól. Ebből kifolyólag a modellek validációja is szükséges.

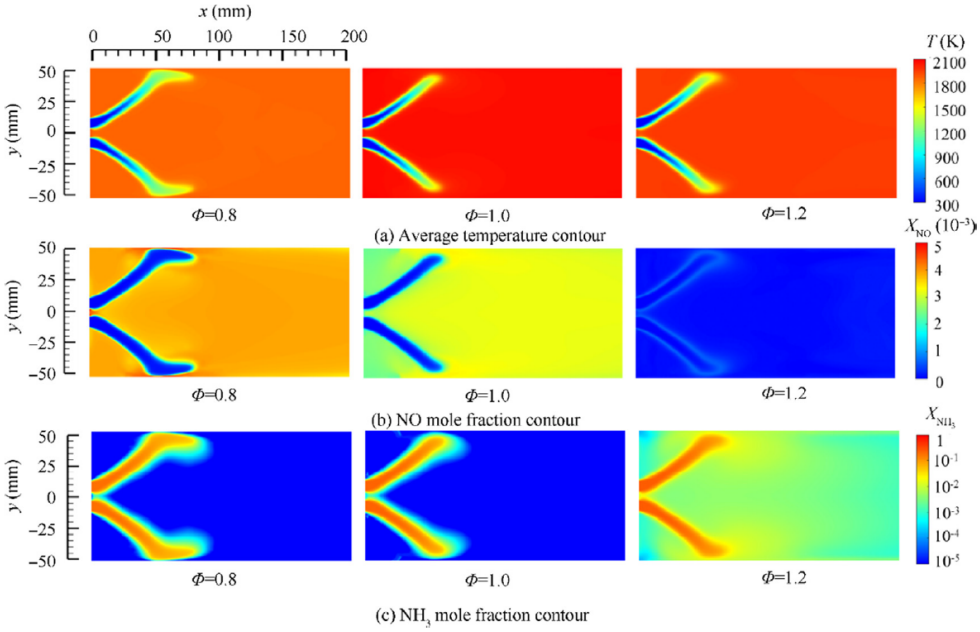
1.1. táblázat. Ammónia modellezésére alkalmas reakciókinetikák.

	Komponensek száma	Reakciók száma	Tüzelőanyag típusa
Glarborg [12]	32	220	NH_3-ra (redukált)
Li [13]	28	213	NH_3/H_2
Mei [14]	38	265	NH_3
Nakamura [15]	34	229	NH_3
Okafor [16]	42	130	NH_3/CH_4
Shrestha [17]	34	261	NH_3-ra (redukált)
Stagni [18]	31	203	NH_3
Xiao [19]	31	243	NH_3/CH_4
Jiang [20]	68	330	NH_3/CH_4

Ahogy az a hivatkozott forrásban [21] megtalálható, egy előkevert perdületes tüzelésű égőtérben végeztek számításokat, melynek geometriája az 1.3 ábrán látható. A számítások során a perdítőelem hatását a peremfeltételekben definiálták, annak geometriáját nem hozták létre, így csökkentve a számítás időigényét. Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) módszerrel írták le a tömeg, lendület, energia, és a komponensek egyenleteit. A turbulencia leírására a Re-Normalisation Group (RNG) k-ε módszert, míg a tüzelésre az eddy-dissipation-concept modellt (EDCM) alkalmazták, mely a teljes mechanizmust figyelembe veszi. Az itt használt mechanizmus az Okafor et al. [16] által létrehozott mechanizmus volt, amit redukáltak 19 komponensre és 63 reakcióra gyakorlatilag a szénhidrogén komponensek és reakciólépések eltávolításával. Ammónia és ammónia-hidrogén keverékére végeztek számításokat, az előbbi eredményei különböző tüzelőanyagfeleslegtényezők (a külföldi szakirodalomban equivalence ratio, egyébként a légfelesleg tényező reciproka) esetén az 1.4 ábrán látható.



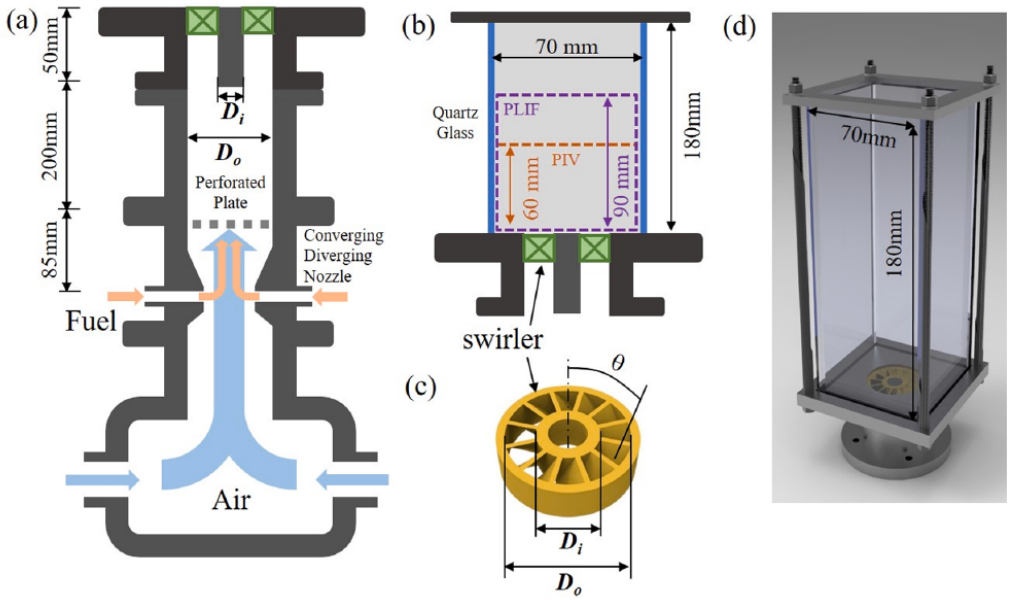
1.3. ábra. A kísérleti berendezés [21].



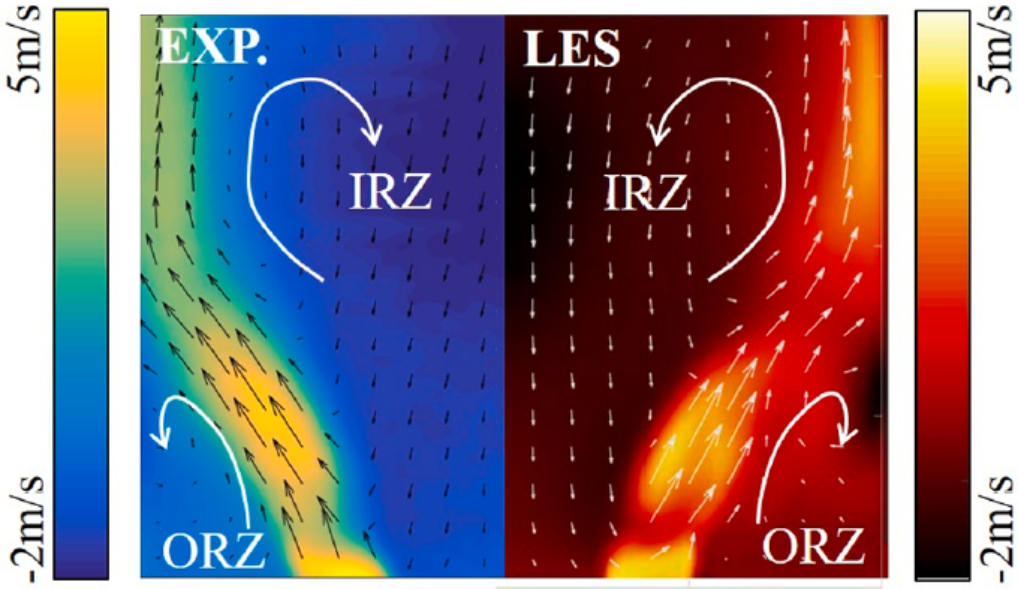
1.4. ábra. Ammónia égésének eredményei, felső sorban a hőmérséklet, középső sorban az NO, alsó sorban az NH_3 megjelenítve különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők függvényében [21].

Az 1.4 ábra alapján megállapítható, hogy a láng V alakot vett fel, amely helyesnek bizonyul perdületes tüzelés esetén [22], ellenben a kialakult hőmérsékletmezővel, ahol az égéstér belépő keresztmetszeténél található sarkokban a hőmérséklet megegyezik az égéstér végében kialakultéval. A füstgázhőmérséklet biztosan alacsonyabb kell legyen, mint a lánghőmérséklet. Jelen esetben úgy tűnik, mintha adiabatikusak lennének a falak.

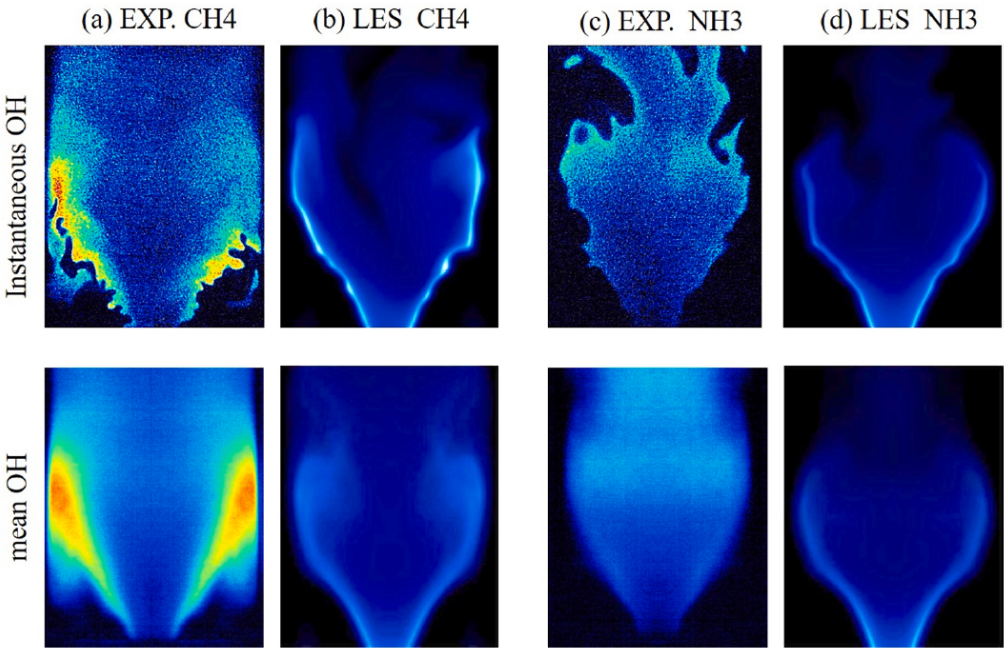
Ahogy az a hivatkozott forrásban [23] megtalálható, egy előkevert, perdítőelemet tartalmazó égőtér alapján elkészített hálón végeztek ammónia és metán tüzelési szimulációkat. Az égőtér geometriája az 1.5 ábrán látható. A turbulencia leírására a Large Eddy Simulation (LES) modellt, míg a tüzelésre a thickened flame modellt alkalmazták [24]. Xiao et al. [19] által létrehozott mechanizmust használták, amely NH_3/CH_4/levegő keverék leírására alkalmas 31 komponenssel és 243 reakcióval. Az egydimenziós, adiabatikus, nyújthatatlan lamináris lángokat az ANSYS Chemkin Pro-ban található PREMIX kóddal számították ki és kapcsolták össze megfelelő turbulens égés modellel.



1.5. ábra. A kísérleti berendezés; a) az előkeverés megvalósulása, b) az égéstér, c) a perdítőelem, d) az égő 3D sémája [23].



1.6. ábra. Az NH_3/levegő égésének átlagos áramlási sebességmezője. Balra: a PIV (Particle Imaging Velocimetry) mérés eredménye, jobbra: a LES eredménye. (ORZ a külső recirkulációs zóna, IRZ a belső recirkulációs zóna) [23].

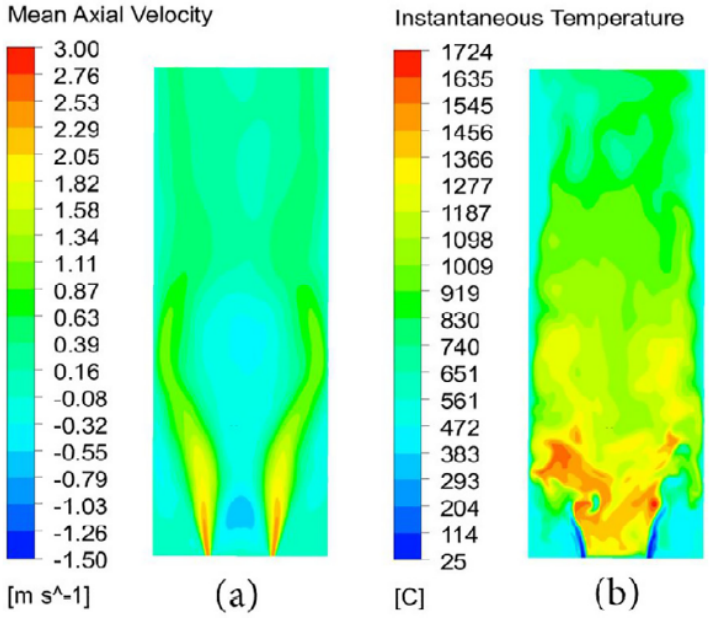


1.7. ábra. Az NH_3/levegő és a CH_4/levegő lángszerkezetének összehasonlítása. Felső sorban a pillanatnyi, alsó sorban az átlagolt OH eloszlás [23].

Az 1.6 és 1.7 ábrák alapján megállapítható, hogy a szimulációk eredményei nagy pontossággal közelítik a valóságot. Egy korábbi tanulmányban [25] ugyanezen kísérleti geometrián végeztek azonos számítási modellek használatával szimulációkat NH_3/CH_4 keverék kibocsátásának vizsgálata végett.

Ahogy az a hivatkozott forrásban [26] megtalálható, NH_3/H_2 keverék tüzelésekor keletkező légszennyező anyagok vizsgálatával, és az égés szimulációjával foglalkoztak. Az égő kombinálja a perdülettel rendelkező levegőáram és a kiszélesedő test hatását, hogy jobb keveredést és lángstabilitást érjen el. Az áramlás perdületessége úgy lett elérve, hogy a levegőt tangenciálisan vezetik be kis csöveken keresztül, míg a tüzelőanyag egy belső csövön át áramlik, majd radiálisan lép ki belőle, és keveredik a levegővel.

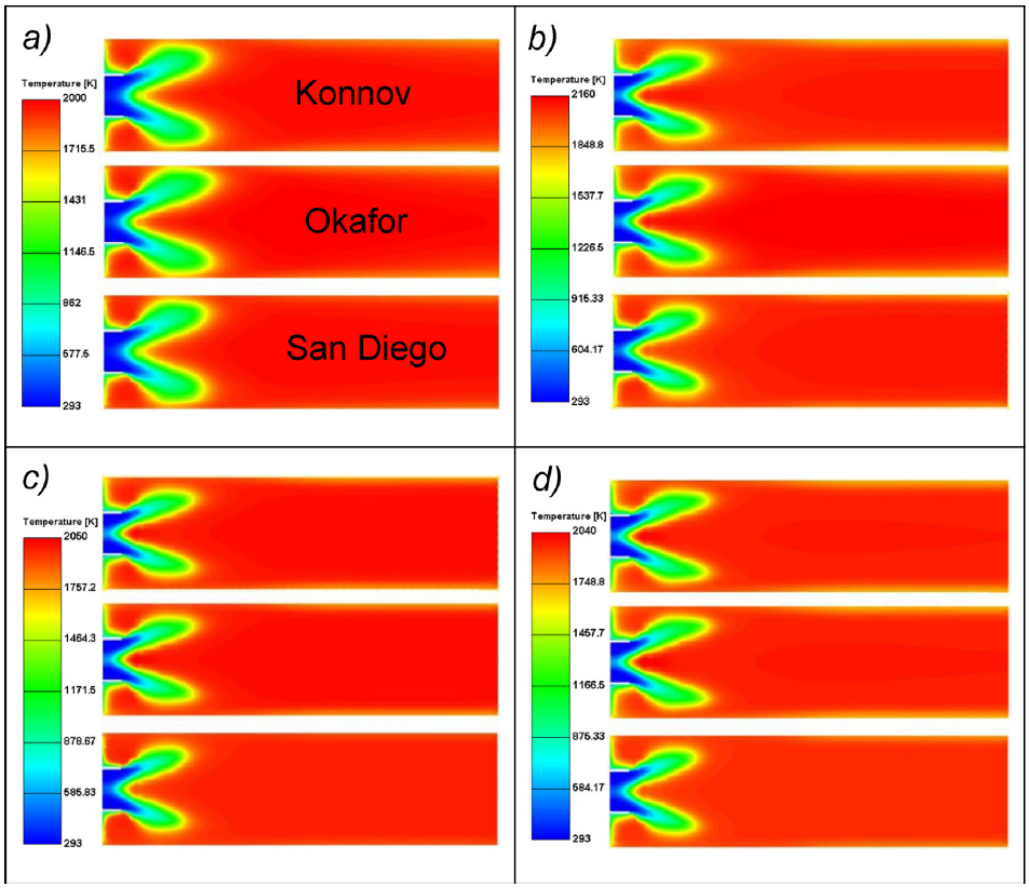
RANS módszerrel írták le a tömeg, lendület, energia, és a komponensek egyenleteit. A turbulencia leírására a k-ω SST módszert használták, amely stacionárius esetben használandó, ami nem elegendő a pontos szimulációhoz. Az alkalmazott tüzelésmodell a steady flamelet diffusion volt Glarborg et al. [27] reakciómechanizmusával használva, amely azt feltételezi, hogy a keverék nem előkevert, tehát jelen esetben ez sem pontos. A 90% ammóniát és 10% hidrogént tartalmazó tüzelés szimulációjának az eredménye az 1.8 ábrán látható.



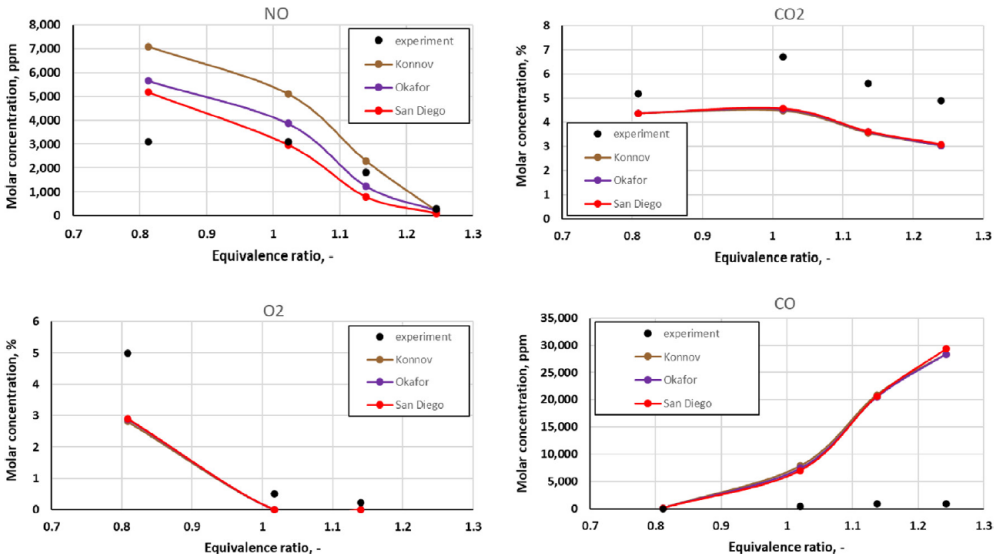
1.8. ábra. Bal oldalon az átlagolt sebességmező, jobb oldalon a pillanatnyi hőmérséklet-mező [26].

Az 1.8 ábrán láthatjuk a perdület hatását az áramlási képen, a láng alakja V alakhoz hasonló. A szimulációs eredményeket nem validálták. A validáció nehézségét okozza, hogy a perdület tangenciális levegő bevezetésével történt, és nem perdítőelemmel, továbbá a tüzelőanyag hidrogént is tartalmaz. Ezen két jelenség nagyban befolyásolja a kialakult láng alakját, annak hőmérsékletét.

Ahogy az a hivatkozott forrásban [28] megtalálható, AVL Fire-ben NH_3/CH_4 keverék tüzelését szimulálták. A turbulencia leírása a RANS egyenleteken alapul, ami azt feltételezi, hogy stacionárius számítást használtak, mely nem képes megfelelő pontossággal leírni a hőfelszabadulás helyét. A turbulens viszkozitást a k-ε modellel közelítették. Az égési folyamat modellezése a General Gas Phase Reactions (GGPR) keretrendszer használatával történt, amely kémiai reakciómechanizmuson alapul. A reakciómechanizmusban található komponensekre további transzport egyenleteket oldottak meg, míg az egyes egyenletek forrástagjait az Arrhenius-egyenlet alkalmazásával számították ki minden egyes reakcióra. A GGPR modell növeli az égési folyamat leírásának pontosságát, így növelve a számítási kapacitásigényt. Az NH_3/CH_4 keverék leírására három reakciókinetikát alkalmaztak, melyek Okafor et al. [16] 42 komponenst és 130 reakciót, Konnov et al. [13] 51 komponenst és 420 reakciólépést, San Diego et al. [20] 68 komponenst és 330 reakciót tartalmazó mechanizmusa volt, amely az 1.1 táblázatban Jiang névvel van feltüntetve. A számítások során 44 kW égési teljesítményt és 0,81-1,24 közötti tüzelőanyagfelesleg-tényezőt alkalmaztak. A szimulációkat a [29] irodalomban található geometria alapján elkészített hálón végezték. A számítási idő csökkentése érdekében a perdítőelemet a háló nem tartalmazta, annak hatását közelítő módszerrel oldották meg a peremfeltételeknél. A szimuláció eredményeit a [29]-ban található mérési eredményekkel hasonlították össze.



1.9. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K]: a) 0,81, b) 1,02, c) 1,14, d) 1,24 tüzelőanyagfelesleg-tényező esetén [28].

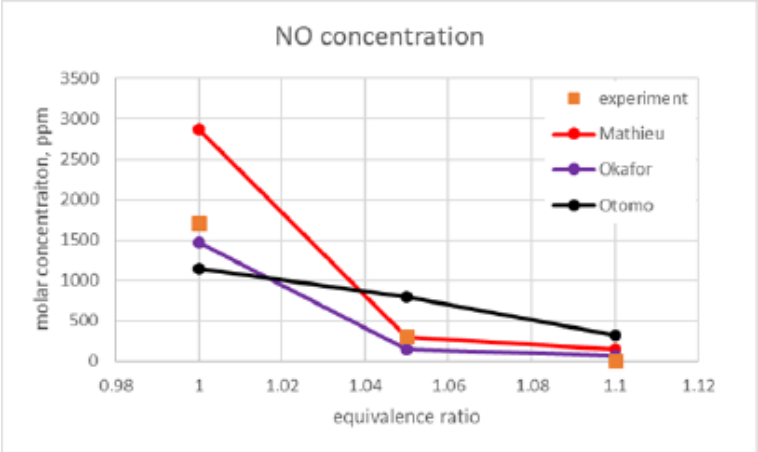


1.10. ábra. Kibocsátások összehasonlítása különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők esetén: bal felül NO, jobb felül CO_2, bal alul O_2, jobb alul CO [28].

Az 1.9 ábrán a kialakult hőmérsékletmező valósnak tűnik, annak kiértékeléséhez kísérleti eredményekre is szükség lenne. Az 1.10 ábra alapján megállapítható, hogy a NO koncentráció leírására a teljes kísérleti tartományon a San Diego mechanizmus a legalkalmasabb, míg a Konnov mechanizmus a legkevésbé. A legnagyobb eltérések 0,81-es

tüzelőanyagfelesleg-tényezőnél láthatók, ahol az összes modell többszörösen túlbecsli az NO koncentrációt a kísérlethez képest. A többi komponens számítására egyik mechanizmus sem alkalmas. A kísérleti eredményekkel való összehasonlítás után az Okafor és San Diego mechanizmus bizonyult a legígéretesebb mechanizmusoknak, különösen a NO kibocsátás tekintetében. A szimulációk eredményei azt mutatták, hogy a szén komponensek modellezése továbbra is probléma, mivel a vizsgált modellek egyike sem tudta reprodukálni a CO-kibocsátást, miután a tüzelőanyagfelesleg-tényező 0,81 alá csökkent.

Ahogy az a hivatkozott forrásban [30] megtalálható, három darab reakciómechanizmust hasonlítottak össze ammónia égését szimulálva egy előkevert perdületes égőben AVL Fire szoftverkörnyezetben. Három reakciómechanizmust redukált ammónia égésének szimulációjára da Rocha et al. [31], melyek Mathieu és Petersen reakciómechanizmusa 66 reakcióval és 22 komponenssel, Otomo reakciómechanizmusa 72 reakcióval és 24 komponenssel, Okafor reakciómechanizmusa 51 reakcióval és 21 komponenssel. A számítási kapacitás csökkentése érdekében a perdítőelem teljes geometriájának hálózása helyett megfelelő peremfeltételekkel közelítettük annak hatását. A turbulenciát a k-ε modellel írták le. Az égési folyamat modellezése a GGPR keretrendszer használatával történt, amely kémiai reakciómechanizmuson alapul. A NO_x kibocsátást legjobban az Okafor reakciómechanizmus közelítette, ahogy az az 1.11 ábrán látható.



1.11. ábra. NO_x kibocsátás vizsgálata különböző tüzelőanyagfelesleg-tényezők esetén [30].

1.3. Tüzelésmodellek [24]

Az ammónia tüzelésének modellezésére a Computational Fluid Dynamics (CFD) módszert választottam az Ansys Fluent szoftverkörnyezetben mivel alkalmas kapcsolt számítások elvégzésére. Az égés modellezésének a nehézsége, hogy az áramlástani és hőtani jellemzők mellett még figyelembe kell venni a kémiai reakciók jellemzőit is, a két fizikai folyamat közötti kapcsolatot pontosan kell leírni. Ezen okból kifolyólag az égés numerikus modellezése még nem egy kiforrott terület, a különböző tüzelőanyagok leírására más-más modellek lehetnek alkalmasak. Az áramlás és kémiai reakciók közötti kapcsolatot a Damköhler szám írja le (1.1) egyenlet alapján.

$$\mathrm{Da} = \frac{\text{áramlási időlépték}}{\text{kémiai időlépték}} \tag{1.1}$$

A termokémiai valószínűségsűrűség függvényen alapuló egyszerűsített égésmodellek, gyors reakciók, nagy Da számok esetén használhatók. Azonban robusztussága révén,

érdemes vizsgálni ammónia esetére is. Az ammónia égésére jellemző Damköhler szám 1 alatti [32], a Karlovitz szám reciproka. Ennek tudatában határoztam- és vizsgáltam meg a Fluent-be beépített égést leíró modellek közül azokat, amelyek az ammónia égésének leírására alkalmasak lehetnek, ezeket a továbbiakban részletezem.

1.3.1. C-egyenlet

Az egyszerűsített égésmodell, amit vizsgáltam, az a részlegesen előkevert modell (Partially Premixed Combustion), amely azt feltételezi, hogy a légfelesleg nem egységes eloszlású, tehát a lokális légfelesleg különbözik. Továbbá lehetséges több levegő bevezetés, hígítás levegővel. A részlegesen előkevert égés megoldására a kémiai egyensúly (Chemical Equilibrium) modellt alkalmaztam, amely a lángfront vastagságát nullához közelinek veszi fel, előtte el nem égett, mögötte pedig elégett keveréket feltételez. A számítás során a keverék idő- és helybeli paramétereit egy termokémiai valószínűségi sűrűségfüggvény (PDF-Probability Density Function) becsli. A modell egy transzport egyenletet old meg, mely során a reakció $\overline{c}$ folyamatváltozóját (Progress Variable) használja. $\overline{c} = 0$ jelöli a friss, $0 \leq \overline{c} \leq 1$ a lángon belüli részlegesen, $\overline{c} = 1$ pedig a lángot követő teljesen elégett keveréket [33]. A lángfront terjedését leíró egyenlet a következő:

$$\frac{\partial \rho \overline{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \rho \overline{c}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{C_p} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \overline{c} \right) + \rho S_c \tag{1.2}$$

ahol

$\overline{c}$: a reakció folyamatváltozója,

Sc_t: a turbulens Schmidt szám = 0,7,

S_c: a reakció előrehaladását leíró forrástag (s^{-1}),

k: a keverék lamináris hővezető képessége,

C_p: a keverék fajhője,

ρ: a keverék sűrűsége,

$\vec{v}$: sebességvektor,

μ_t: a turbulens dinamikai viszkozitás.

A kialakult lángnak az alakja nagyban függ az átlagos reakciósebesség értékétől, amely a turbulens lángsebesség függvénye. A turbulens lángsebesség leírására a Zimont modellt alkalmaztam, ahol az egyes anyagjellemzők a (3.2) egyenletben definiált keverék részarány alapján lettek meghatározva:

$$U_t = A(u')^{3/4} U_l^{1/2} \alpha^{-1/4} l_t^{1/4} \tag{1.3}$$

$$U_t = \mathrm{MAX} \left(U_l, Au' \left(\frac{\tau_t}{\tau_c} \right)^{1/4} \right) \tag{1.4}$$

ahol

A: modell konstans,

u': négyzetes középsebesség (m/s),

U_l: lamináris lángsebesség (m/s),

$\alpha = k/\rho c_p$: el nem égett keverék termikus diffúziós tényezője (m^2/s),

l_t: turbulens hosszlépték (m),

$\tau_t = l_t/u'$: turbulens időlépték (s),

$\tau_c = \alpha/U_l^2$: kémiai időlépték (s).

A turbulens időlépték az alábbi képlet alapján számítandó:

$$l_t = C_D \frac{(u')^3}{\varepsilon} \tag{1.5}$$

ahol ε a turbulens disszipáció mértéke.

A modell a lamináris lángon belüli kis méretű turbulens struktúrák egyensúlyi feltételezésen alapul, amelyből az a turbulens lángsebesség összefüggés következik, amely pusztán a nagy méretű turbulens paraméterektől függ. Az A alapértelmezett értéke 0,52. A C_D alapértelmezett értéke 0,37.

A modell akkor alkalmazható, ha az áramlás legkisebb turbulens örvényei (Kolmogorov örvények) kisebbek a lángvastagságnál, és behatolnak a lángzónába. Ezt nevezik a vékony reakciózónának az égési régión belül, és a Karlovitz (Ka) számmal számszerűsíthető, ahol Ka nagyobb mint egy. Ka az (1.6) egyenlet alapján számítandó.

$$\mathrm{Ka} = \frac{t_l}{t_\eta} = \frac{\nu_\eta^2}{U_l^2} \tag{1.6}$$

ahol

t_l: karakterisztikus láng időlépték,

t_η: legkisebb (Kolmogorov) turbulens időlépték,

$\nu_\eta = (\nu\varepsilon)^{1/4}$: Kolmogorov sebesség,

ν: kinematikai viszkozitás.

Az átlagos reakciósebességet az (1.7) egyenlet írja le.

$$\rho S_c = \rho_u U_t |\nabla \bar{c}| \tag{1.7}$$

ahol

ρ_u: az el nem égett keverék sűrűsége,

U_t: turbulens lángsebesség.

1.3.2. Extended Coherent Flame Model

A következő modell, amely részlegesen előkevert égés leírására alkalmas, az az Extended Coherent Flame Model (ECFM), gyakorlatilag az előző modell kibővítése. A reakció $\overline{c}$ folyamatváltozója mellett még egy transzportegyenletet old meg a láng felületének a sűrűségére (Σ), amely az átlagos reakciósebesség leírására alkalmas. A modell feltételezi, hogy a legkisebb turbulens hosszléptékek (Kolmogorov örvények) nagyobbak, mint a lamináris lángvastagság, így a turbulencia a láng felületének ráncolódását okozza, miközben a belső lamináris lángprofilt nem torzítja [34]. Az egyenlet, amelyből a lángfelület sűrűsége meghatározható, a következő:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}\Sigma) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{C_p} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \cdot \left(\frac{\Sigma}{\rho} \right) \right) + (P_1 + P_2 + P_3)\Sigma + P_4 - D \tag{1.8}$$

ahol

Σ: a lángfelület sűrűsége,

Sc_t: a turbulens Schmidt szám,

k: a keverék lamináris hővezető képessége,

C_p: a keverék fajhője,

ρ: a keverék sűrűsége,

$\vec{u}$: az áramlási sebesség vektora,

μ_t: a turbulens dinamikai viszkozitás,

P_1: korrekciós tényező a turbulens kölcsönhatások végett,

P_2: korrekciós tényező a láng tágulása végett,

P_3: korrekciós tényező az elégett gáz expanziója végett,

P_4: korrekciós tényező a normál terjedés végett,

D: a lángfelület disszipációja.

A P_1-P_4 korrekciós tényezők több empirikus tagot tartalmaznak, melyek adott elegyre lettek meghatározva mérésekkel.

1.3.3. Részletes kémia

Az Ansys Fluent szoftverkörnyezetben lehetőségünk van modellezni a kémiai anyagok keveredését és szállítását megmaradási egyenletek megoldásával, amelyek leírják a konvekciót, diffúziót, és a lokális tömegtörtet minden egyes komponensre. Egyszerre több kémiai reakció is figyelembe vehető, a reakciók az Euleri fázisként definiált térfogaton belül játszódnak le. A keveredés diffúzió egyenlete a következő:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \rho Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \tag{1.9}$$

ahol

Y_i: a lokális tömegtört,

i: a kémiai komponensek indexe,

R_i: a reakciósebesség,

S_i: egyéb forrás (diszperz, stb.),

J_i: a komponensek diffúziós fluxusa.

A reakciósebességet leíró egyenlet az alábbi:

$$\widehat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^{N} [\, C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{N} [\, C_{j,r}]^{\eta''_{j,r}} \right) \tag{1.10}$$

ahol

$\nu'_{i,r}$: sztöchiometriai együtthatója az i-ik reagensnek az r-ik reakcióban,

$\nu''_{i,r}$: sztöchiometriai együtthatója az i-ik terméknek az r-ik reakcióban,

$k_{f,r}$: előremenő sebességállandója az r-ik reakciónak,

$k_{b,r}$: visszamenő sebességállandója az r-ik reakciónak,

$C_{j,r}$: a j-ik komponens moláris koncentrációja az r-ik reakcióban (kmol/m^3),

$\eta'_{j,r}$: arányossági kitevője a j-ik reagensek az r-ik reakcióban,

$\eta''_{j,r}$: arányossági kitevője a j-ik terméknek az r-ik reakcióban,

Γ: a harmadik testek nettó hatása a reakciósebességre.

Az r-ik reakciónak az előremenő sebességállandója ($k_{f,r}$) az Arrhenius-egyenlettel lett meghatározva:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \tag{1.11}$$

ahol

A_r: pre-exponenciális tényező,

β_r: hőmérséklet tényező,

E_r: a reakció aktivációs energiája (J/kmol),

R: univerzális gázállandó (J/kmol K).

A használt reakciókinetikák tartalmazták a $\nu'_{i,r}$, $\nu''_{i,r}$, $\eta'_{j,r}$, $\eta''_{j,r}$, β_r, A_r, E_r értékeket, így definiálva a reakciósebességet.

Az Euleri fázisban szereplő komponensek száma N, a Fluent csak N-1 komponensre oldja meg az egyenleteket. Ennek oka, hogy a tömegtörtek összegének egy egységet kell kitennie, így az N-edik komponens tömegtörtje úgy van meghatározva, hogy az N-1 komponensig a tömegtörtek összegét ki kell kivonni egyből. A numerikus hiba csökkentésének céljából érdemes a legnagyobb tömegtörttel rendelkező komponenst megadni az N-ediknek. Jelen esetben ez az inert N_2, mivel az oxidálószer levegő.

Az eddy-dissipation-concept (EDC) modell az eddy-dissipation modell kiterjesztése, amely lehetővé teszi a részletes kémiai mechanizmusok figyelembe vételét a turbulens áramlásoknál. Erre azért volt szükség, mivel az ammónia égése lassú, és az Eddy Dissipation csak akkor alkalmazható, ha a konvektív áramlás a domináns, melyhez viszonyítva a kémiai reakciók gyorsan játszódnak le. Ez esetben a modell maximum két reakciólépést tud kezelni, ellentétben a teljes mechanizmust kezelő EDC modellel. Ezt az ammónia lamináris lángsebességével is alá lehet támasztani, amelynek értéke ötöde a metánéhoz képest [35]. A modell feltételezi, hogy a reakciók apró turbulens struktúrákban játszódnak le, amelyeket kis léptékeknek (fine scale) neveznek. A komponensek a részletes felbontáson belül reagálnak egymással az időléptéken belül. Az ANSYS Fluent esetében feltételezzük, hogy az égés a kis léptékeken belül úgy megy végbe, mint egy állandó nyomású reaktorban, a kezdeti értékeket a cellák aktuális komponens összetétele és hőmérséklete alapján megállapítva. A reakciók az időlépték alatt mennek végbe, amelyet az (1.10) egyenletben meghatározott reakciósebességek szabályoznak.

1.3.4. Flamelet Generated Manifold Model

Az előbbikben részletezett égésmodelleken felül, a munkám során a Flamelet Generated Manifold (FGM) modellt vizsgáltam meg [36]. A modell újdonságtartalma, hogy egyszerűsített transzportegyenletek megoldásával határozza meg a kémiai komponensek paramétereit, csakúgy mint a hőmérséklet, keverék részarány, a reakció előrehaladásának és a disszipációnak a mértéke. Az FGM modellnél a számítást a reakciók előrehaladása határozza meg, így a kémiai egyensúly nem mindig jön létre, így például olyan jelenségek, mint a lángkioltás is modellezhetők, ellentétben a C-egyenleten alapuló modellel. A modell flamelet keveréket hoz létre részletes mechanizmus 1D-ben történő megoldása során, melyekből a termokémiai valószínűségsűrűség függvények meghatározhatók. A turbulens lángsebesség a reakciósebességből adódik (1.15 egyenlet). A részlegesen előkevert (partially premixed) FGM modell transzportegyenleteket old meg az átlagos nem normalizált reakció előrehaladására (reaction progress) (1.13 egyenlet) és varianciájára (1.14 egyenlet), az átlagos keverék részaránya (mixture fraction) és annak varianciájára. A reakció előrehaladását az (1.12) egyenlet írja le, ahol Y_c a nem normalizált reakció folyamatvál-

tozója (reaction progress variable) és Y_c^{eq} az egyensúlyi állapot értéke. A dolgozatomban használt FGM modell felépítése három lépésből áll:

- Kiszámítja a jellemző egydimenziós flamelet-eket Chemkin formátumú reakciómechanizmus felhasználásával.
- Az egydimenziós flamelet megoldásokat transzformálja az FGM modellt vezérlő változók terébe és ez alapján történik a termokémiai valószínűségsűrűség függvények generálása.
- A termokémiai változókat lekéri az FGM táblázatokból a CFD szimuláció során az FGM modellt meghatározó változók függvényében.

$$c = \frac{\sum_k \alpha_k (Y_k - Y_k^u)}{\sum_k \alpha_k (Y_k^{eq} - Y_k^u)} = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}} \tag{1.12}$$

ahol

u: az el nem égett reagenst jelöli a lángnál,

Y_k: a k-adik komponens tömegtörtje,

eq: a kémiai egyensúlyt jelöli a lángnál,

α_k: konstans, amelynek értéke általában 0 reagensek, és 1 a képződött komponensek esetében.

$$\frac{\partial \rho \widetilde{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \rho \widetilde{Y}_c) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{C_p} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \widetilde{Y}_c \right) + \overline{S}_{Y_c} \tag{1.13}$$

ahol

k: a lamináris hővezető képesség,

C_p: a keverék fajhője.

$$\frac{\partial \rho \widetilde{Y}_c^{"2}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \rho \widetilde{Y}_c^{"2}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{k}{C_p} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \widetilde{Y}_c^{"2} \right) + c_\varphi \frac{\mu_t}{Sc_t} |\nabla \widetilde{Y}_c|^2 - \frac{\rho c_\varphi}{\tau_{turb}} \widetilde{Y}_c^{"2} \tag{1.14}$$

ahol c_φ=2. Az $\overline{S}_{Y_c}$ a reakció előrehaladásának forrástagja, melyet az (1.15) egyenlet ír le.

$$\overline{S}_{Y_c} = \overline{\rho} \iint S_{FR,Y_c}(c,f) P(c,f) dc df = \overline{S}_{FR} \tag{1.15}$$

ahol

P: a keverék részarányt és a (c) folyamatváltozót leíró PDF,

S_{FR}: a flamelet-eket leíró függvény a Fluent könyvtárából.

2. fejezet

A numerikus modell

2.1. Anyagjellemzők

Az anyagjellemzők jelentős mértékben befolyásolják a tüzelés paramétereit. Azonban több komponens esetén a keverék termodinamikából adódó keveréktörvények többlet memória-felhasználást eredményeznek. Ebből kifolyólag fontoltam meg a szükséges anyagjellemzők hőmérsékletfüggő avagy konstans kezelését. A sűrűséget minden esetben az ideális gáztörvény alapján írtam le. Az EDCM modellnél illesztett, hőmérsékletfüggő transzport jellemzőket alkalmaztam [37] alapján, amennyiben az adott volt a komponensekre. Míg az FGM modellnél az alábbiakat vettem figyelembe:

- A sűrűség leírására az ideális gáztörvényt alkalmaztam.
- A fajhő leírására a keveredési törvényt (mixing-law) alkalmaztam, amely az egyes komponensek tömeg szerint súlyozott fajhője alapján határozza meg a keverék fajhőjét a vizsgált geometria egészén. Az egyes komponensek fajhőjét pedig széles hőmérséklet tartományon polinomként írtam le.
- A hővezetési tényező értékét 0,0454 W/mK-nek vettem fel, mivel az EDCM modellel végzett számítások során ezen jellemző változása csekély volt.
- A viszkozitás értékét $1{,}72^{-5}$ kg/ms-nak vettem fel, mivel az EDCM modellel végzett számítások során ezen jellemző változása csekély volt.
- A sugárzás leírására a wsggm-domain-based (weighted-sum-of-gray-gases model (WSGGM)) függvényt használtam.

2.2. Turbulencia modell

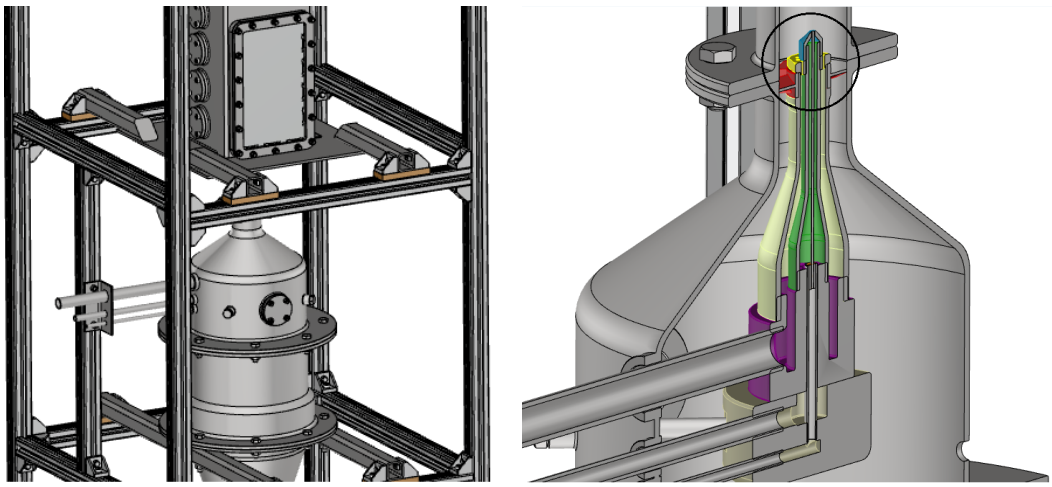
A számítások során kettő turbulencia modellt alkalmaztam:

- A k-ω SST modellt, amely egy kevert k-ε, k-ω modell. A modell alkalmazható fal közeli szabad áramlásokra, és a turbulens nyírófeszültség hatását figyelembe veszi a turbulens viszkozitás meghatározásakor. Továbbá szabad áramlásban k-ε jellegű, míg határréteg áramlásokban k-ω viselkedésre vált. Ebből kifolyólag stacionárius tüzelésszimulációk esetén alkalmaztam [24].
- A Reynolds Stress modell (RSM) egy 7 egyenletes RANS turbulencia modell, amely az izotróp örvény-viszkozitás elméletet elhagyva oldja meg a RANS egyenleteket transzport egyenletekkel, felhasználva a Reynolds feszültségeket és disszipációt.

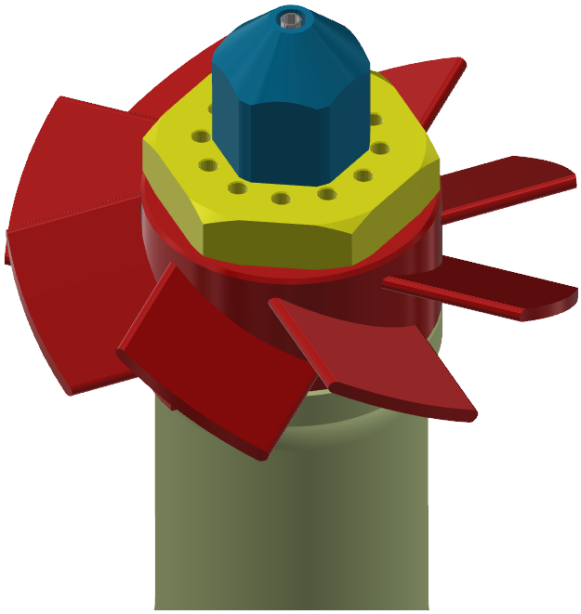
- Tranziens számításoknál a turbulencia leírására a Scale-Adaptive Simulation (SAS) modellt használtam, ami egy továbbfejlesztett Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes (URANS) formula, mely instabil áramlási körülmények között is lehetővé teszi a turbulens spektrum felbontását. Az URANS modell csak a nagyméretű tranziens struktúrákat határozza meg, míg a SAS modell dinamikusan alkalmazkodik a már felbontott térrészhez, és lehetővé teszi a turbulens spektrum kialakulását a még felbontatlan régiókban. A SAS modell a Kármán-féle hosszléptéket is figyelembe veszi a turbulens lépték egyenleténél. A Kármán-féle hosszlépték használatával a SAS modell képes dinamikusan igazodni a felbontott struktúrákhoz URANS szimuláció esetén, amely Large Eddy Simulation-szerű (LES) viselkedést eredményez az áramlási mező időfüggő régióiban [24]. Ezzel kiküszöbölhető a nagy számításigényű LES alkalmazása.

2.3. Geometria

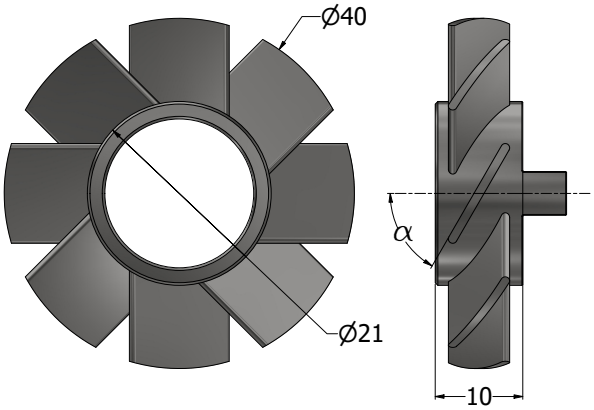
A dolgozat célja az ammónia égésének numerikus szimulációja egy kísérleti perdületes égő esetén. Az égő geometriája a 2.1 és 2.2 ábrákon látható. Az égő geometria megegyezik az Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék laboratóriumában megtalálható kísérleti tüzelőberendezéssel [38]. Az égő részei színjelzésekkel azonosíthatók: gázfúvókák-sárga, porlasztó fúvóka-kék, porlasztó levegőfúvóka-zöld, perdítőelem-piros. A porlasztó geometriáját ugyan tartalmazza a modell, de a számításokhoz jelen munkában nem használtam. Az alkalmazott perdítőelem geometriáját a 2.3 ábra mutatja, a méretek mm-ben értendők. Az α szög a perdítőelem szögét jelöli, amely 45° volt esetemben, mely erős perdületes áramlásnak felel meg [39]. Számításaim során a 3D-s geometriát nem egyszerűsítettem tovább, mivel az időben változó perdületes áramlás, hőfelszabadulás, valamint a leíró merev egyenletek ezt nem engedik meg. A geometriát a perdítőelem előtti szakasztól vettem figyelembe, mivel előtte egy homogén csőáramlás vehető figyelembe. Továbbá a gáz, csupán a megfelelő furatokon áramlik be. A hőfelszabadulás és az időben változó struktúrák megfelelő leírása érdekében, tranziens szimulációkat alkalmaztam. A numerikus hálót az Ansys Fluent hálózójában hoztam létre (Ansys Fluent Meshing). A számításokat első lépésben stacionárius esetre végeztem el, melyek kezdeti feltételei voltak a tranziens számításoknak [40].



2.1. ábra. A kísérleti égő geometriája.



2.2. ábra. A perdítőelem (piros), a gáz fúvókák (sárga), a középső tüzelőanyag cső (szürke), és a porlasztó levegőfúvóka (kék).



2.3. ábra. A perdítőelem geometriája.

2.4. Peremfeltételek

2.4.1. Sztöchiometriai számítások

A belépő peremfeltételek meghatározásához az ammónia égésére vonatkozó sztöchiometriai számítást végeztem el. Az égést leíró általános reakcióegyenlet a következő:

$$4 \text{ kmol } NH_3 + 3 \text{ kmol } O_2 + 11,29 \text{ kmol } N_2 = 13,29 \text{ kmol } N_2 + 6 \text{ kmol } H_2O \tag{2.1}$$

A sztöchiometriai számításban használt elemek moláris tömege a 2.1 táblázatban látható.

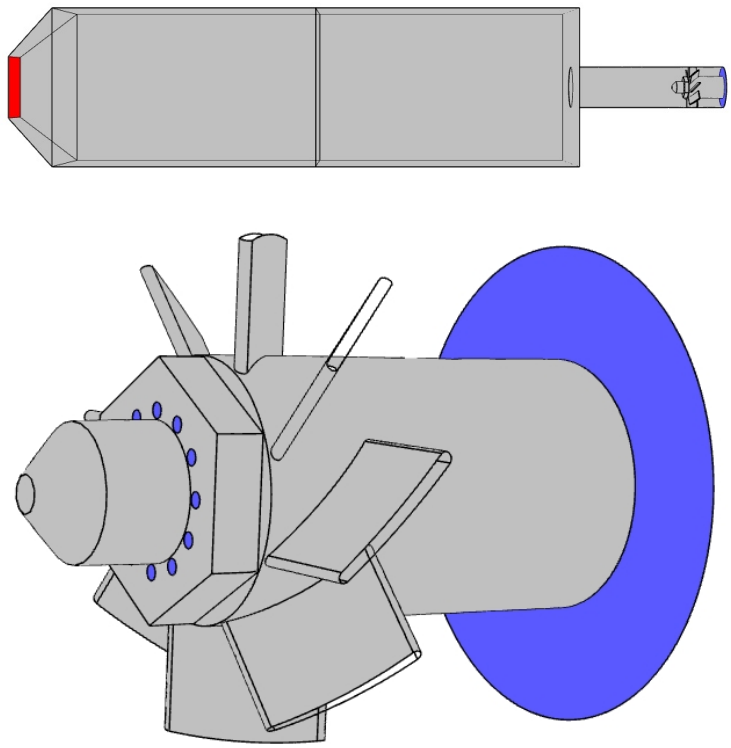
2.1. táblázat. Moláris tömege az egyes elemeknek.

H	O	N
kg/kmol	kg/kmol	kg/kmol
1	16	14

Ezen adatok alapján lett meghatározva az égéshez szükséges sztöchiometriai levegőigény, amely μ'_{Lo} = 6,06 kg/kg.

2.4.2. Ki- és belépő peremfeltételek

Belépő tömegáram peremfeltételeket használtam a levegő és tüzelőanyag felületeken, ahogy az a 2.4 ábrán látható.



2.4. ábra. Az égő geometriája, kék színnel a belépő peremfeltételek felülete, piros színnel a kilépő peremfeltételek felülete színezve.

Az egyik belépő peremfeltétel az ammónia tömegárama volt, amit 15 kW tüzelési teljesítmény mellett határoztam meg. A légfelesleg tényező értékét 1,43-nak vettem fel, melynek oka, hogy ugyanilyen légfelesleg tényező és perdítőelem mellett találtam irodalmi méréses adatokat validációhoz [41]. Az ammónia fűtőértéke (LHV - Lower Heating Value) a [35] irodalom alapján lett definiálva, értéke 18,6 MJ/kg. A tüzelési teljesítményt leíró egyenlet a következő:

$$\dot{Q}_{tüa} = \dot{m}_{tüa} \cdot LHV \tag{2.2}$$

Az egyenletet átrendezve megkapjuk az ammónia szükséges tömegáramát:

$$\dot{m}_{tüa} = \frac{\dot{Q}_{tüa}}{LHV} = \frac{15 \text{ kW}}{18,6 \text{ MJ/kg}} = 0,8065 \text{ g/s} \tag{2.3}$$

A légfelesleg tényező a ténylegesen bevezetett levegő mennyiségének aránya az égéshez szükséges elméleti mennyiséghez képest. A légfelesleg tényező, amely jelen esetben 1,43, és a sztöchiometriai égéshez szükséges levegőigény függvényében meghatároztam az égéshez szükséges levegő mennyiségét.

$$\mu'_L = \lambda \mu'_{Lo} = 1,43 \cdot 6,06 \ \frac{\text{kg}}{\text{kg}} = 8,66 \ \frac{\text{kg}}{\text{kg}} \tag{2.4}$$

Ez alapján az égéshez szükséges levegő tömegárama az alábbi:

$$\dot{m}_{lev} = \dot{m}_{tüa} \mu'_L = 0,8065 \ \frac{\text{g}}{\text{s}} \cdot 8,66 \ \frac{\text{kg}}{\text{kg}} = 6,98 \ \frac{\text{g}}{\text{s}} \tag{2.5}$$

A belépő levegőt 200 °C-ra előmelegítettként definiáltam, az ammóniát pedig szoba hőmérsékletűként (20 °C). A kilépő keresztmetszet nyomás kilépésként határoztam meg.

2.4.3. Fali peremfeltételek

A keverőcső és az égéstér falain harmadfajú peremfeltételt alkalmaztam. Mivel magát a falat nem szilárd testként modelleztem, csak a falvastagságot adtam meg, ami 2,5 mm a keverőcsőnél és 3 mm az égéstérnél, figyelembe véve a rozsdamentes acél hővezető képességét. Ennek oka a számítási idő minimalizálása, mivel az analitikai modellek kellően pontosak. A hőátadási tényezőt a Nusselt számból számítottam ki, amelyet függőleges hengeres felületre határoztam meg a keverőcső, függőleges síkfal felületére pedig az égéstér esetében, a körülöttük kialakuló áramlást természetesnek feltételezve [42]. Tehát a Nusselt szám a (2.6) egyenlet szerint egy függőleges síkfal esetén:

$$\text{Nu}_{\text{síkfal}} = (0,825 + 0,387[\text{Ra} \cdot f_1(\text{Pr})]^{1/6})^2, \tag{2.6}$$

Csőfal esetére pedig:

$$\text{Nu}_{\text{csőfal}} = \text{Nu}_{\text{síkfal}} + 0,97\frac{L}{D}, \tag{2.7}$$

ahol:

$$\text{Ra} = \frac{gL^3\beta(T_s - T_\infty)}{\nu \cdot a} \text{ a Rayleigh szám,} \tag{2.8}$$

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{a} \text{ a Prandtl szám,} \tag{2.9}$$

$$f_1(\mathrm{Pr}) = [1 + (0,492)^{9/16}]^{-16/9} \tag{2.10}$$

Továbbá:

T_s: a fal hőmérséklete, ami a keverőcsőnél 400 °C, az égéstérnél 900 °C értékekkel volt közelítve korábbi számítások alapján [43].

T_∞: a környezeti hőmérséklet 20 °C-nak feltételezve.

A levegő anyagát és termodinamikai tulajdonságait $(T_s + T_\infty)/2$ átlaghőmérséklet alapján határoztam meg. Továbbá az anyagjellemzőket a National Institute of Standards and Technology (NIST) adatbázisából gyűjtöttem össze [44].

L: keverőcső esetén annak a hossza, az égéstérnél annak a magassága.

D: keverőcső esetén annak átmérője, az égéstérnél az oldalak szélessége.

β: a térfogati hőtágulási együttható.

ν: az átlaghőmérsékleten vett kinematikai viszkozitása a levegőnek.

a: az átlaghőmérsékleten vett termikus diffúziós tényezője a levegőnek.

$$h = \frac{\mathrm{Nu}_{\text{csőfal}}\lambda}{L} \tag{2.11}$$

$$h = \frac{\mathrm{Nu}_{\text{síkfal}}\lambda}{L} \tag{2.12}$$

Így a (2.11) és (2.12) egyenletek szerint a hővezetési tényező a keverőcső falán 9,77 W/m^{2}K, és 8,39 W/m ^{2}K az égéstér falán.

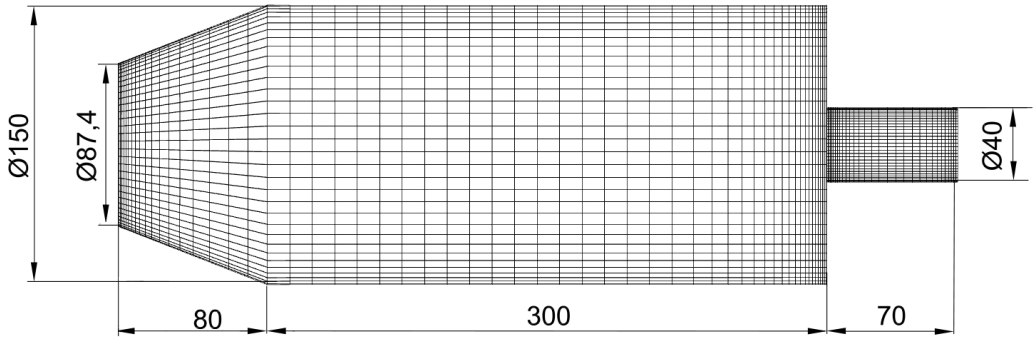
A hősugárzást a Discrete Ordinates (DO) sugárzási modellel vettem figyelembe [24]. A falak rozsdamentes acélból készültek, 0,5-ös emissziós tényezővel [45]. A külső emissziós tényezőt 1-re állítottam be, mivel a laboratóriumi berendezéseket környezeti tulajdonságokkal rendelkező levegő vette körül. A közeg hősugárzása figyelembe lett véve a háromatomos gázok (H_2O és CO_2) abszorpciós együtthatói domain alapú megközelítésén keresztül (weighted-sum-of-gray-gases model).

2.5. Hálók

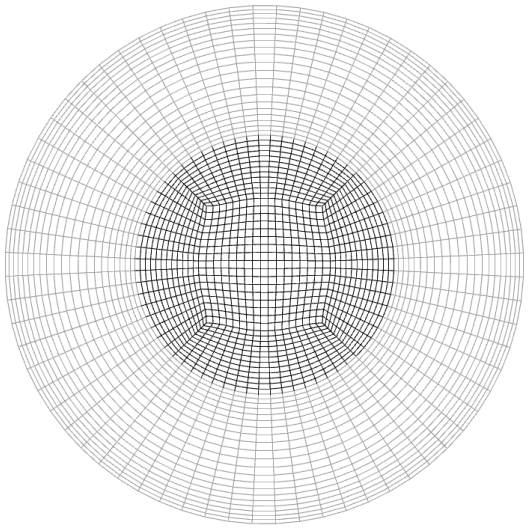
2.5.1. Előzetes modell hálója

Az előzetes számításoknál alkalmazott háló megegyezik a [40]-ben használtával. Az égéstér téglatest alakja hengeres testként lett létrehozva a háló könnyebb elkészítése érdekében. A modell egyszerűsítésére törekedtem, ennek okán vizsgáltam első lépésben a teljes geometriától eltérő hálót, mely nem tartalmazza a perdítőelemet, így a gázfuratokat sem. E helyett a teljes keverék van bevezetve a keverőcső keresztmetszetének megfelelő felületen. A hálót így sokkal kevesebb cellából is fel lehetett építeni, így a számítási időt jelentősen csökkentve, ezáltal gyorsan képet kapva az alkalmazott tüzelésmodellek alkalmazhatóságáról. A hálót az egyszerűsítettet számításokra használtam, melyeket a 3.1 alfejezetben

részletezek. Az elkészített háló a 2.5 és 2.6 ábrákon látható, a méretek mm-ben értendők.



2.5. ábra. Az előzetes geometria hálójának oldalnézete.

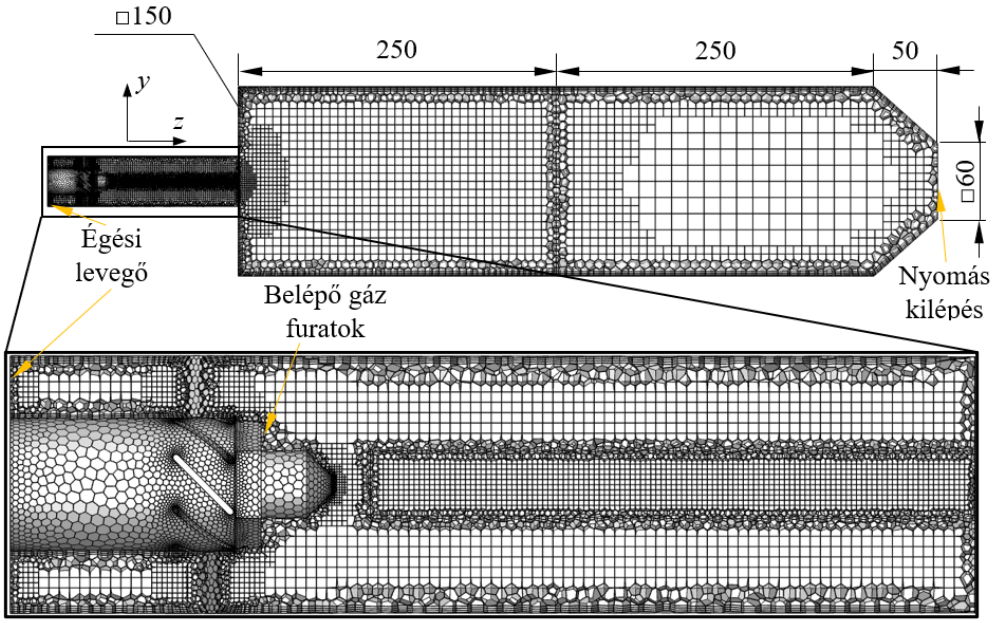


2.6. ábra. Az előzetes geometria hálójának a belépő keresztmetszete.

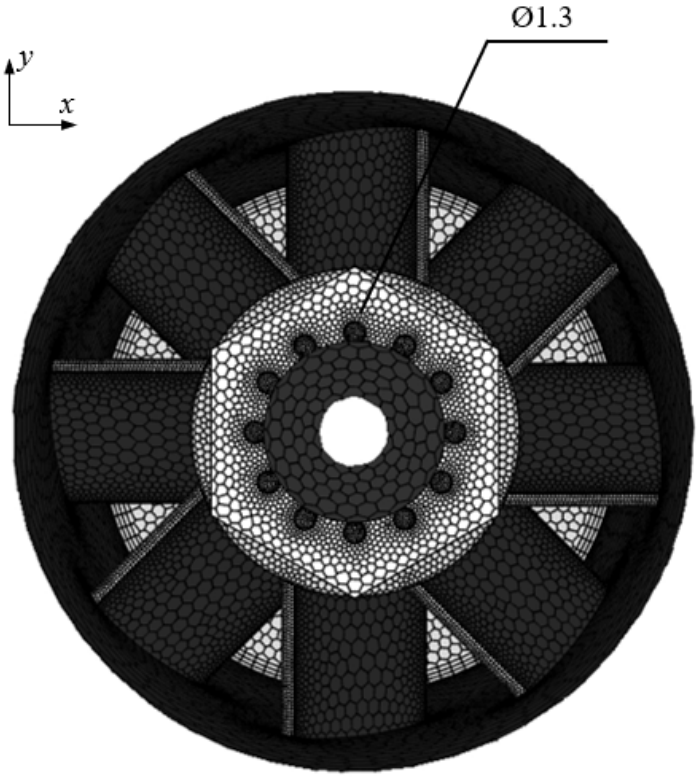
2.5.2. Teljes modell hálója

A teljes modell hálójának az elkészítésekor az égésteret nem egyszerűsítettem le hengeres alakra, hanem a 2.3 alfejezetben leírtával egyező volt, az égéstér téglatestként lett létrehozva. Továbbá 1,3-mm-es furatokon vezettem be a tüzelőanyagot, valamint a perdítőelemet szintén teljes geometriával vettem figyelembe. Tehát a 2.1 és 2.2 ábrákon szereplő valós geometriát vettem figyelembe csupán a letörések és lekerekítések egyszerűsítésével. Polyhedron és hexahedron cellákkal írtam le a geometriát, amely azért volt fontos, mert így a különböző méretű hexahedron cellák összekapcsolását és a bonyolultabb alakzatok leírását a Fluent polyhedron cellákkal oldja meg, amelyből kevesebbet kellett felhasználnom, mintha azt tetra elemekkel oldottam volna meg. Továbbá a belső áramlási tartomány jó-minőségű hexahedronokkal (kockákkal írható le). Ezen felül az Ansys ajánlja az előbbi említett hálózási módszert kifejezetten tüzelésszimulációjához [46]. A cellák számának minimalizálása azért fontos, mert így a számítási idő csökkenthető. A falak menti áramlás pontos leírásának az érdekében ott határréteg hálót hoztam létre. A keverőcső esetében 3 réteget definiálva 1,1-es növekedési rátával, az első réteg vastagságát 0,3 mm-nek felvéve. Az égéstér falánál 3 réteget definiáltam 1,2-es növekedési rátával, az első réteg vastagságát 1 mm-nek felvéve. A háló elkészítésénél még a perdítőelem lapátjainál volt szükség a modell pontosítására. A perdítőelem lapátjainak lapjára 2 mm-es cella méretet határoztam meg 1,2-es növekedési rátával, az élére pedig 0,25 mm-es cella méretet 1,2 növekedési rátával. Fontos kiemelni, hogy a fal mentén nem számítok nagy gradiensekre, így ez a felbontás [43] alapján is megfelelőnek bizonyul.

A háló készítésénél a geometriát úgy módosítottam, hogy a visszaáramlás mértékét minimalizáljam, így konvergáló kilépő keresztmetszetet határoztam meg. Az égéstér első 250 mm-ét követően a hálót ritkítottam. Ennek oka, hogy az égés az égéstér első felében játszódik le, amely nagyobb háló felbontást igényel, mint az égéstér második felében történő égéstermékek áramlásának leírásakor. Ezzel a számítási idő csökkenését értem el. Az elkészített háló a 2.7 és 2.8 ábrákon látható, a méretek mm-ben értendők.



2.7. ábra. Az elkészített térfogati háló, és a geometria főbb méretei.



2.8. ábra. A gázfuratok elhelyezkedése, mérete és felületi háló.

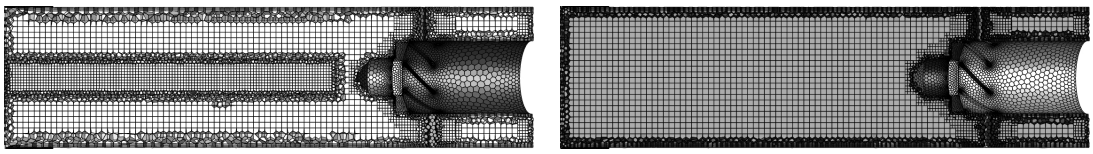
2.6. Hálófüggetlenségi vizsgálat

A vizsgálatot a teljes geometriára elkészített hálóra (2.5.2 alfejezet) végeztem el. A peremfeltételek, amiket használtam, az a 2.4 alfejezetben leírtakkal azonos. A tüzelés leírására az EDCM-et használtam Glarborg reakciókinetikájával [47], a turbulenciára pedig a k-ω SST modellt. A részletes reakciómodell használatának oka a hálófüggetlenségi vizsgálatkor az, hogy a reakció léptékek így megfelelően vannak figyelembe véve, ehhez igazodik a térbeli diszkretizáció. A vizsgálatok időben állandósult esetre értendők. A hálófüggetlenségi vizsgálat során a geometria azon részeit vizsgáltam, melyek a számításra szignifikáns hatással lehetnek. A vizsgálat során a cellák méretét növeltem és csökkentettem. A geometria vizsgált részei az alábbiak voltak: a perdítőelem kivételével a keverőcső egésze, annak a belsejében egy annál kisebb átmérőjű henger, majd az égőtér azon része, ahol az égés megvalósul (keverőcső végétől számított első 250 mm). A háló a 2.7 és 2.8 ábrákon láthatóak.

2.6.1. A keverőcső vizsgálata

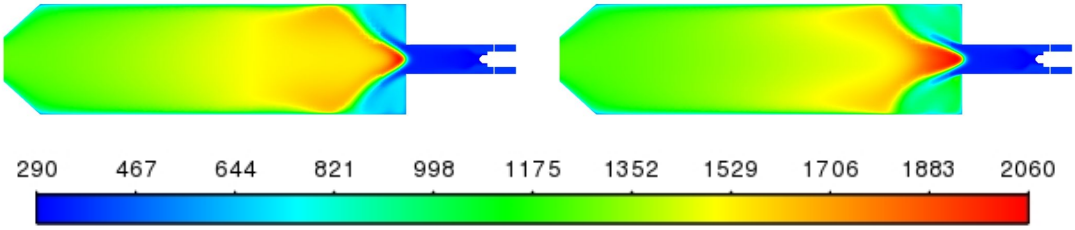
A hálófüggetlenségi vizsgálatot a keverőcső vizsgálatával kezdtem, mivel a komponensek keveredése itt játszódik le, és hatással lehet a kialakult lángalakra. Az eredmények kiértékelése során az YZ sík mentén ábrázoltam a mennyiségeket, ellenkező esetben feltüntettem a kiértékelés síkját. Először két esetet vizsgáltam meg:

- A keverőcsőben lévő henger mentén sűrített háló: 300675 cellaszámmal rendelkezik.
- A keverőcsőben lévő henger mentén nem sűrített háló: 327178 cellaszámmal rendelkezik.

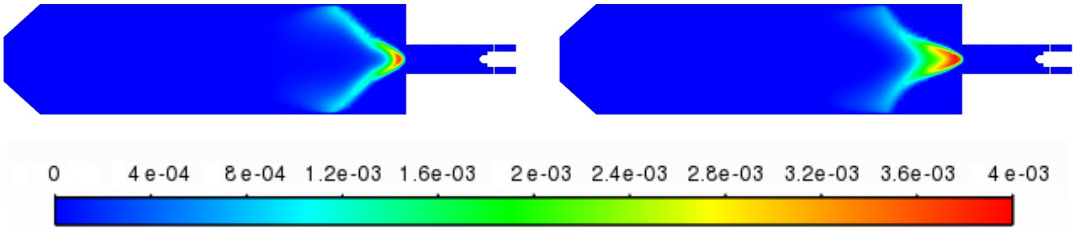


2.9. ábra. Vizsgált hálók, bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén.

A számítások során 1000 iteráció eredményét átlagoltam, mivel a részletes kémia megoldása során a megoldás oszcillálása nem hagyható figyelmen kívül. A kialakult hőmérséklet- és OH eloszlás a 2.10 és 2.11 ábrákon láthatóak.



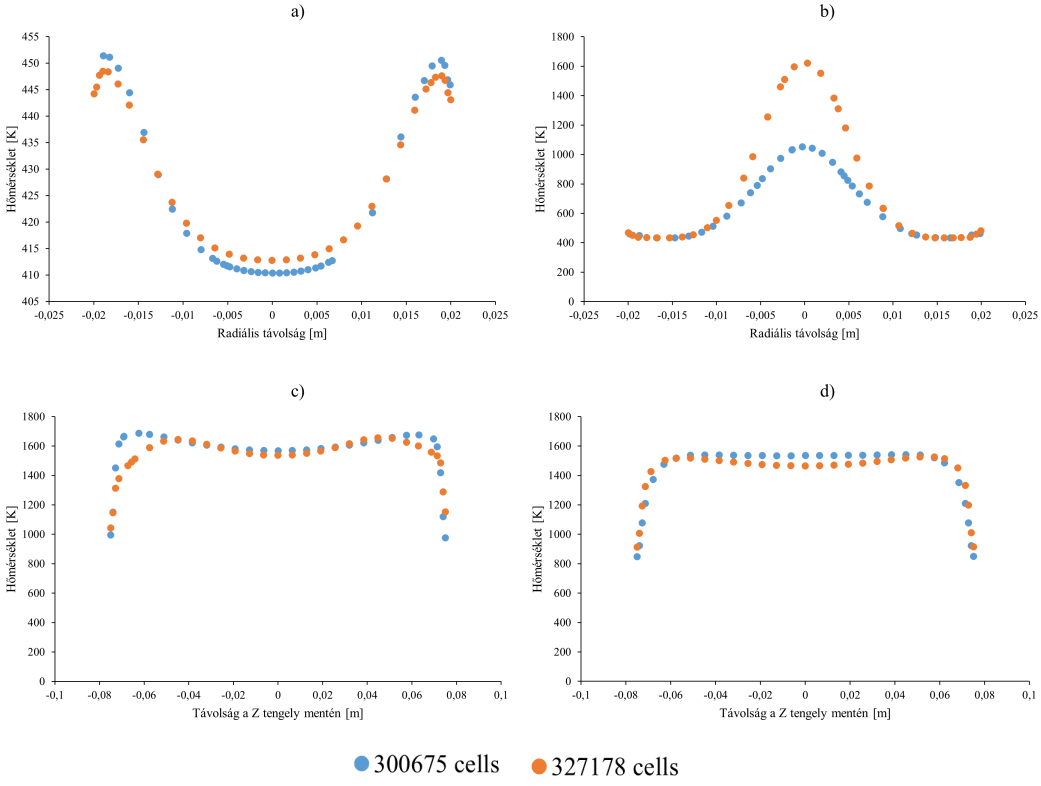
2.10. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén.



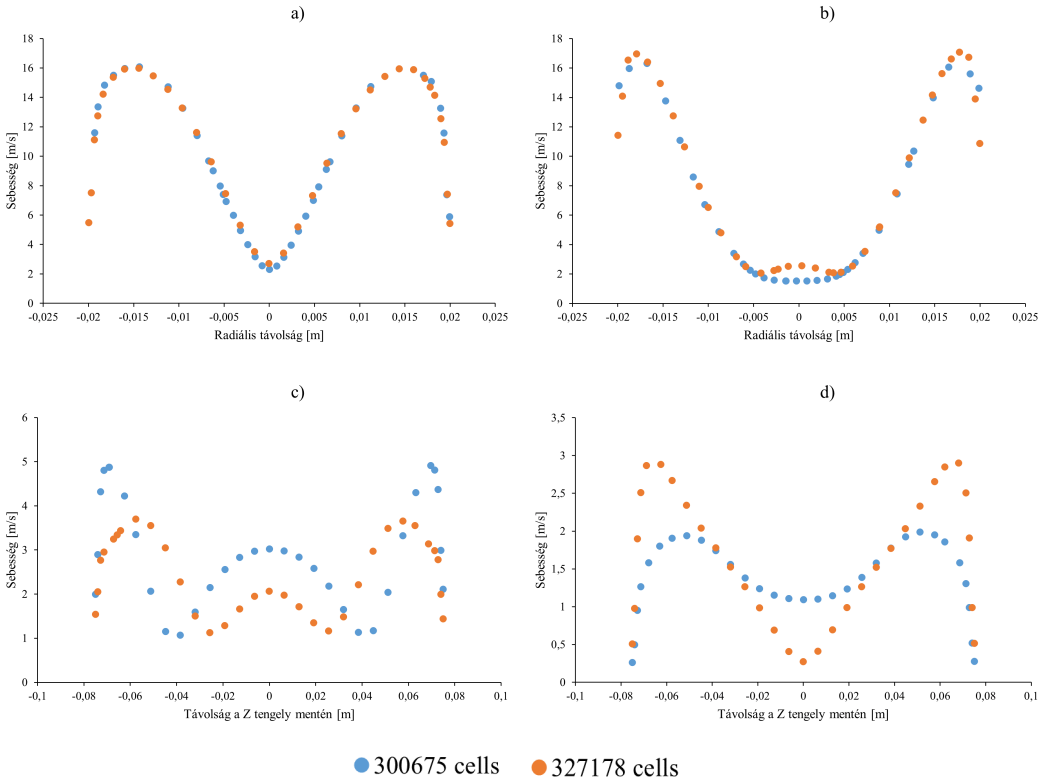
2.11. ábra. OH eloszlás [kg/kg], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 327178 cellaszám esetén.

A hőmérséklet- és az OH eloszlás alapján megállapítható, hogy a keverőcsőben lévő henger mentén sűrített hálónál a láng alakja V alakot vesz fel, míg a sűrítés nélküli esetben inkább M alakhoz közelít a láng alakja. A sarkokban kialakult hőmérséklet a sűrítést mellőző esetben valósabb. Az eltérés mértékének felmérése érdekében további vonal menti kiértékeléseket végeztem el.

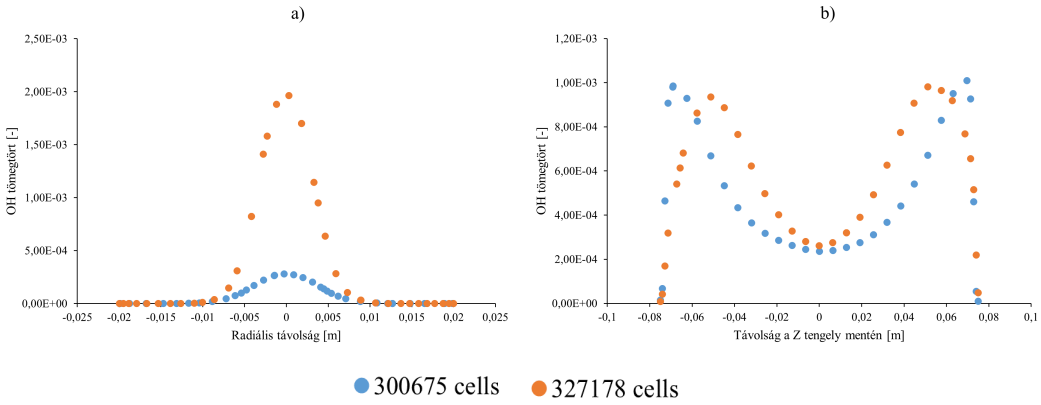
A 2.12 ábrán a vonal menti hőmérséklet-eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikáns eltérés a keverőcső kezdetétől vett 100 mm távolságban látható, ez abból adódik, hogy a gyulladás kezdőpontja a két esetben nem ugyanott található. A 2.13 ábrán a vonal menti sebességeloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szembetűnőbb eltérés a keverőcső kezdetétől vett 200 mm távolságtól kezdve látható, ez a különböző kialakult lángalakoknak köszönhető. A 2.14 ábrán a vonal menti OH eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől két távolságban. 100 mm távolságban a különbség a gyulladás kezdőpontjának eltéréséből fakad, míg 200 mm-nél az értékek nagysága körülbelül egyezik, az eltérő trend a különböző áramképekből adódik. A 2.15 ábrán a vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások láthatóak a két háló esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikánsabb eltérés 100 mm távolságtól kezdve tapasztalható, ami a sebességmezők eltéréséből adódik. A 2.2 táblázatban az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet és sebesség értékek láthatóak a két modell esetében. Nagyobb eltérés a hőmérséklet értékek között vannak, amely 59 K, és a sarkokban kialakult hőmérsékletmezők eltéréséből adódik. A 2.16 ábrán az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek láthatóak. Nagymértékű eltérés a keverőcső kezdetétől 130 mm és 180 mm-re van jelen, amely a gyulladás kezdőpontjának eltérésből és a sarkokban kialakult különböző hőmérsékletmező miatt van.



2.12. ábra. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



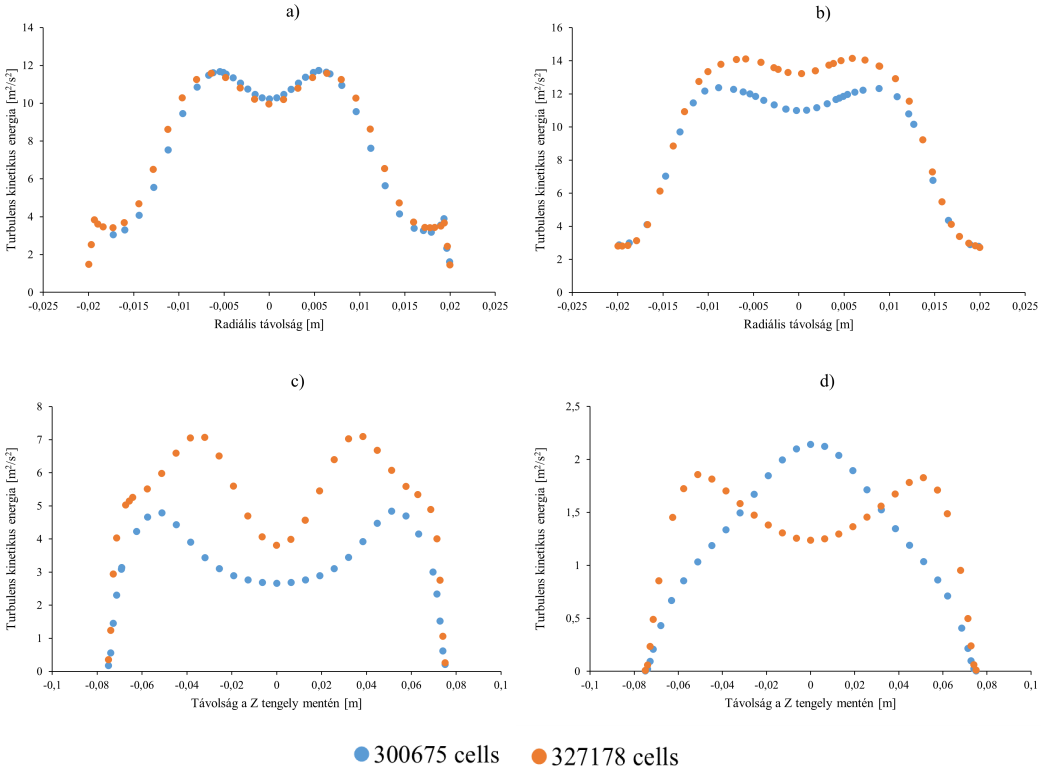
2.13. ábra. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



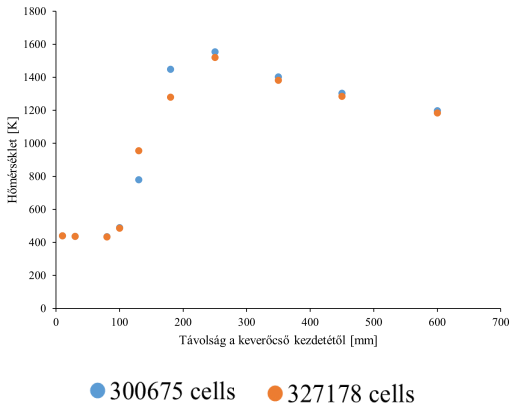
2.14. ábra. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm.

2.2. táblázat. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek.

Cellák száma	300675	327178
Hőmérséklet [K]	730,18	789,63
Sebesség [m/s]	10,76	10,35



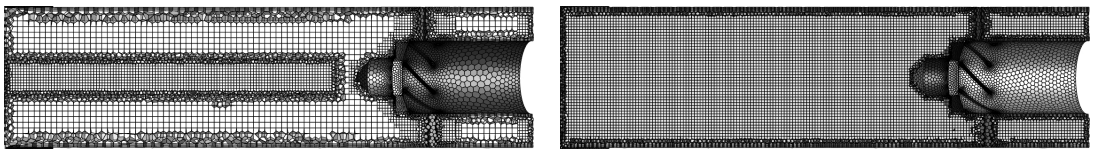
2.15. ábra. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



2.16. ábra. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek.

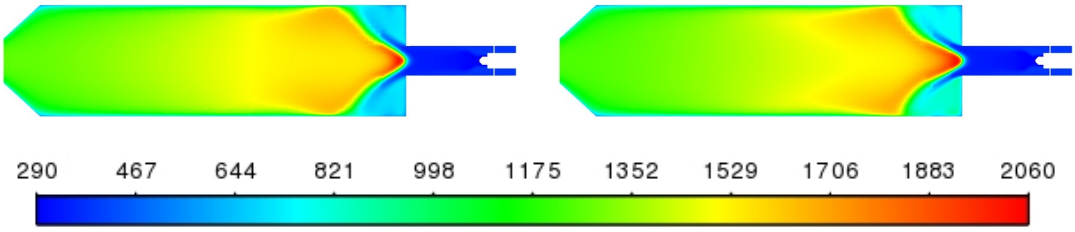
A 2.12 - 2.16 ábrák és 2.2 táblázat alapján is alátámasztható, hogy észrevehető az eltérés a két háló között. Az 1.7 ábrán az ammónia égési képeken a láng V alakot vesz fel. Az irodalomban fellelhető ugyanezen paraméterek mellett mért lángalakokat a henger menti sűrítés során adódott eredmények közelítik a leginkább. Ezek alapján a henger mentén való sűrítés szükséges, míg a fal irányába elegendő kevesebb cellát alkalmazni. A következő, amit megvizsgáltam, hogy a belső sűrítést kiterjesztettem a keverőcső egészére. Az alábbi eseteket vizsgáltam meg:

- A keverőcsőben lévő henger mentén sűrített háló: 300675 cellaszámmal rendelkezik.
- A keverőcső egészében sűrített háló: 559171 cellaszámmal rendelkezik.

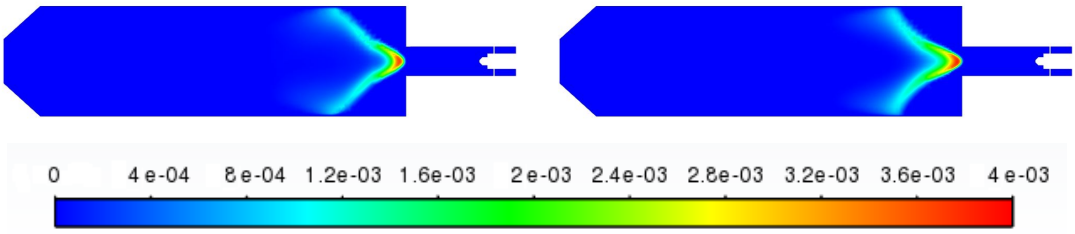


2.17. ábra. Vizsgált hálók, bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén.

A 2.18 ábrán a két modell hőmérséklet-eloszlása látható. Megállapítható, hogy a V alak mindkét esetben kialakult, azoknak alakja kis mértékben eltér. A 2.19 ábrán a két modell OH eloszlása látható. Az OH eloszlás jól korrelál a hőmérséklet-eloszlással, a V alak kivehető.



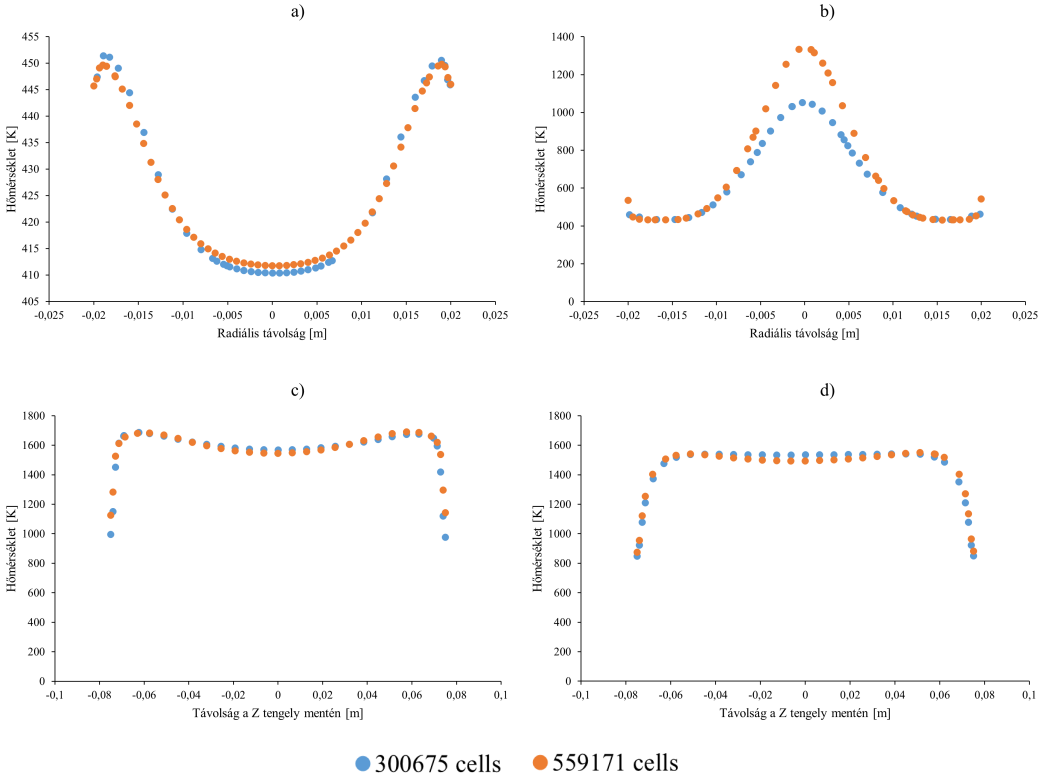
2.18. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén.



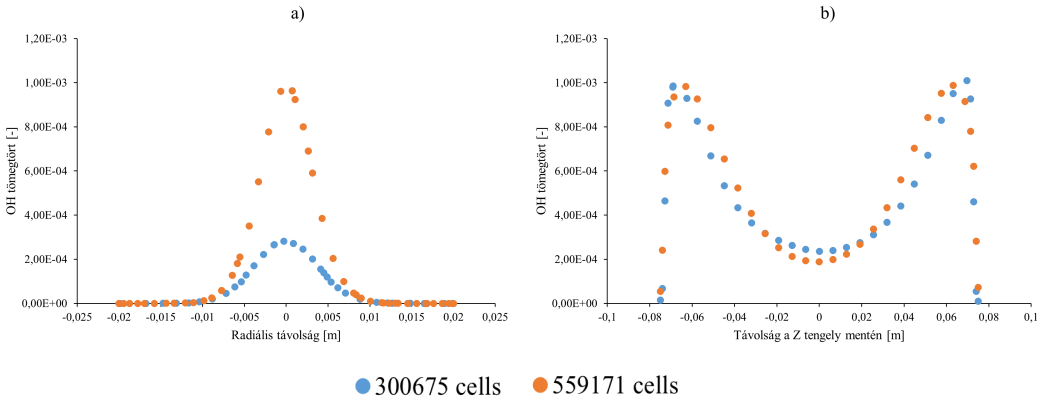
2.19. ábra. OH eloszlás [kg/kg], bal oldalon a 300675 cellaszám, jobb oldalon a 559171 cellaszám esetén.

A 2.20 ábrán a vonal menti hőmérséklet-eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikáns eltérés a keverőcső kezdetétől vett 100 mm távolságban látható, ez abból adódik, hogy a gyulladás kezdőpontja a két esetben nem ugyanott található. A 2.21 ábrán a vonal menti OH eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől két távolságban. 100 mm távolságban a különbség a gyulladás kezdőpontjának eltéréséből fakad, míg 200 mm-nél jól egyezik az OH eloszlás. A 2.22 ábrán a vonal menti sebességeloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szembetűnőbb eltérés a keverőcső kezdetétől vett 300 mm távolságban látható, amely már a lángfronton kívül esik, az eltérés a füstgáz áramképéhez köthető. A 2.23 ábrán a vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikánsabb eltérés 100 mm távolságtól kezdve tapasztalható, ami a kis mértékben különböző lángalakból és a füstgáz sebességmezejéből adódik. A 2.3 táblázatban az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet és sebesség értékek láthatóak a két modell esetében. Nagyobb különbség a hőmérséklet értékek között vannak, amely 51 K, ez a V alakú lángalakok kis mértékű eltéréséből adódik. A 2.24 ábrán az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt

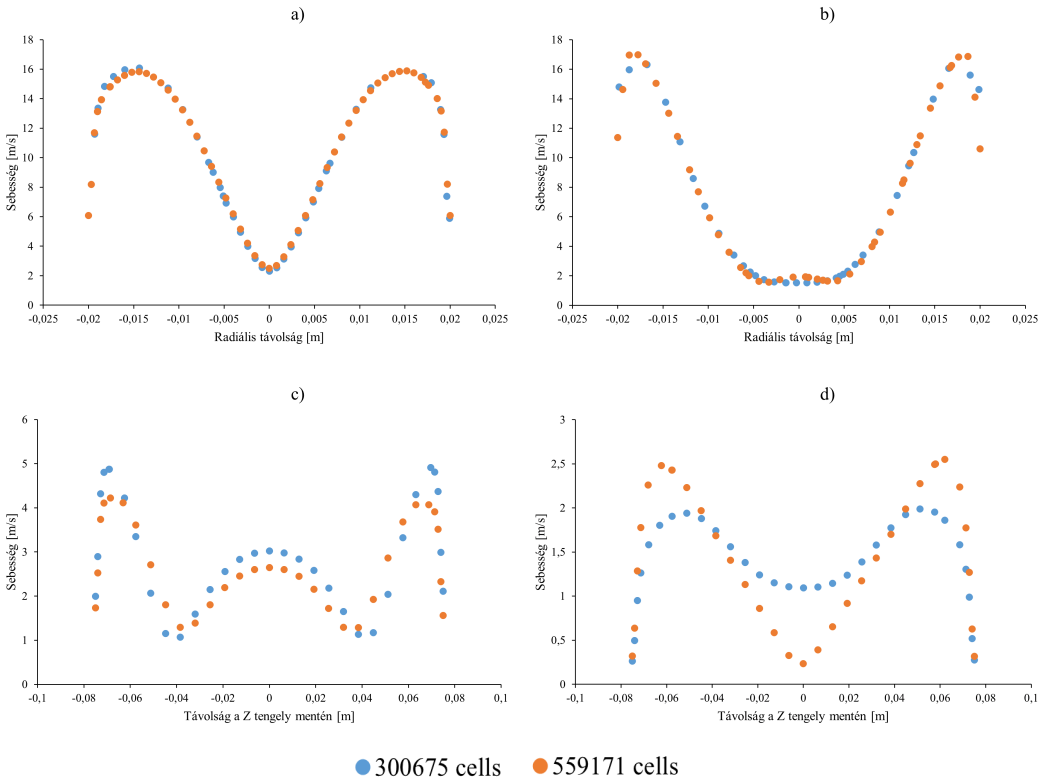
hőmérséklet értékek láthatóak, amelyek jól fedik egymást, egyedül a 130 mm távolságban található pontok között tapasztalható nagyobb eltérés, ami a gyulladás kezdőpontjának eltolódásából adódik.



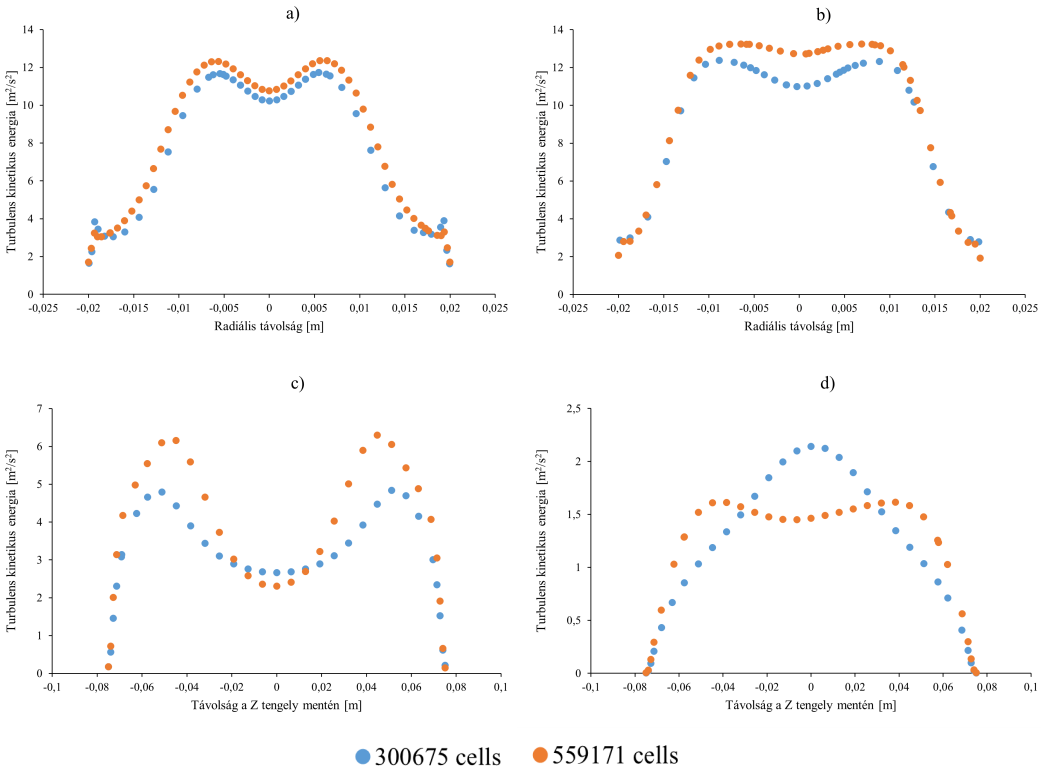
2.20. ábra. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



2.21. ábra. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm.



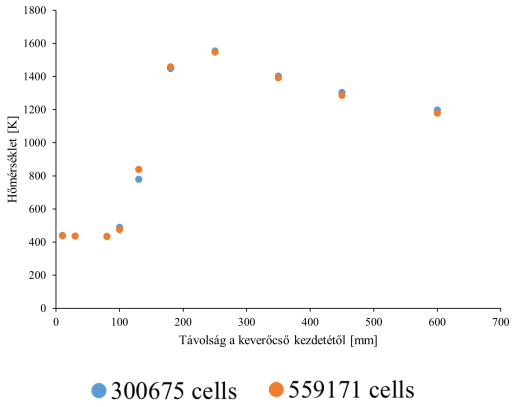
2.22. ábra. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



2.23. ábra. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.

2.3. táblázat. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek.

Cellák száma	300675	559171
Hőmérséklet [K]	730,18	780,93
Sebesség [m/s]	10,76	10,21



2.24. ábra. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek.

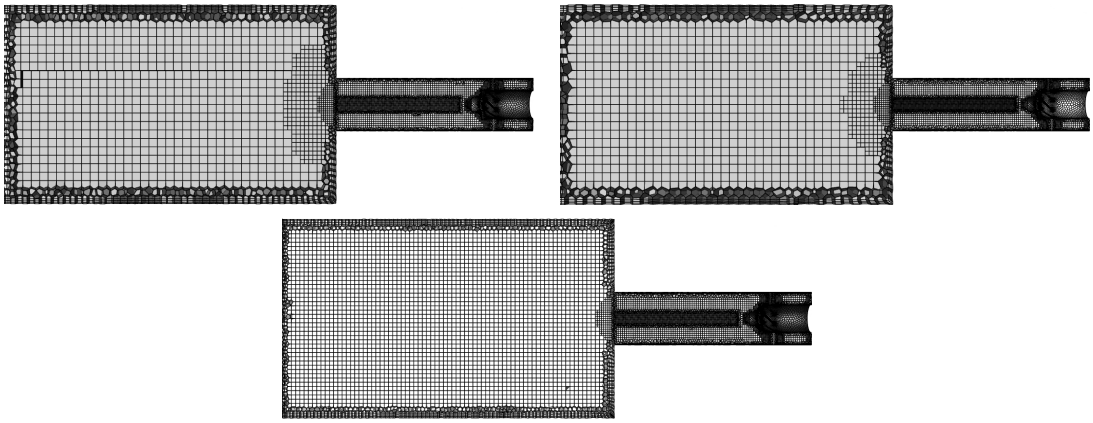
A 2.18 - 2.24 ábrák és 2.3 táblázat alapján is alátámasztható, hogy észrevehető az eltérés a két háló között, de nem jelentős. Az egyik nagyobb különbség 100 mm-nél látható az OH eloszlásnál, ami a gyulladás minimális eltolódása miatt van. A számítási idő minimalizálása, és a számítás kellő pontosságának megtartása érdekében az a következtetés vonható le, hogy a keverőcsőben lévő henger mentén elégséges a háló sűrítése, nem szükséges a keverőcső egészében sűrítenem a hálót.

2.6.2. Az égéstér vizsgálata

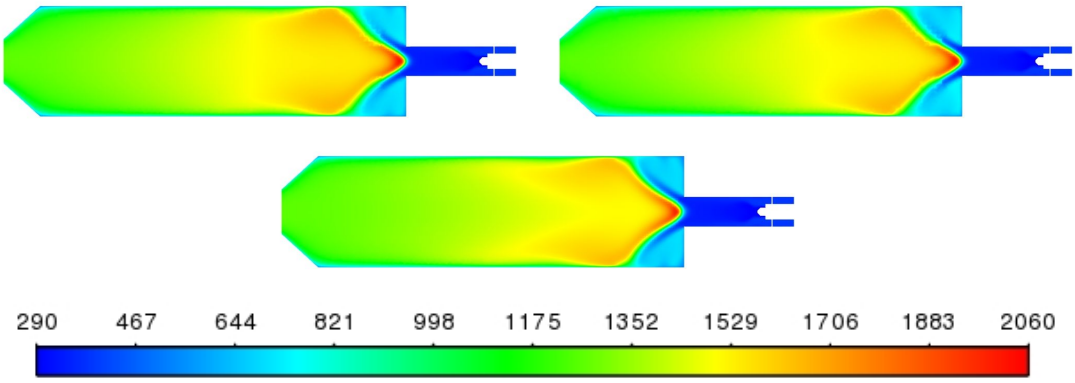
A geometriának a következő része, amit megvizsgáltam, az a keverőcsőhöz csatlakozó égéstér kezdete, ahogy az a 2.25 ábrán látható. Ennek fontossága abból adódik, hogy itt alakul ki az a jellemző lángkép, amely nagyban függhet a háló minőségétől. Ezt követően három hálót hasonlítottam össze:

- Az égéstérben nem sűrített háló: 300675 cellaszámmal rendelkezik.
- Az égéstérben ritkított háló: 264276 cellaszámmal rendelkezik.
- Az égéstérben sűrített háló: 500255 cellaszámmal rendelkezik.

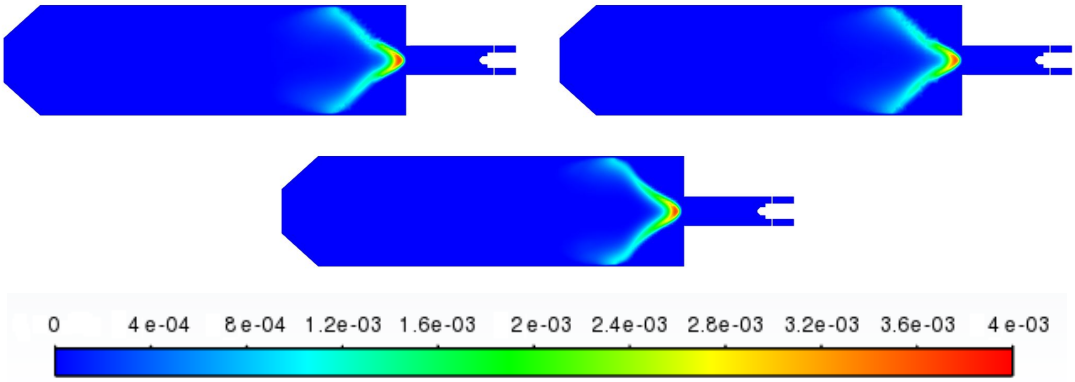
A 2.26 ábrán a három modell hőmérséklet-eloszlása látható. Megállapítható, hogy a V alak mindhárom esetben kialakult, azoknak alakja kis mértékben eltér. A 2.27 ábrán a három modell OH eloszlása látható. Az OH eloszlás jól korrelál a hőmérséklet-eloszlással, a V alak kivehető.



2.25. ábra. Vizsgált hálók, bal felső sorban a 300675 cellaszám, jobb felső sorban a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén.

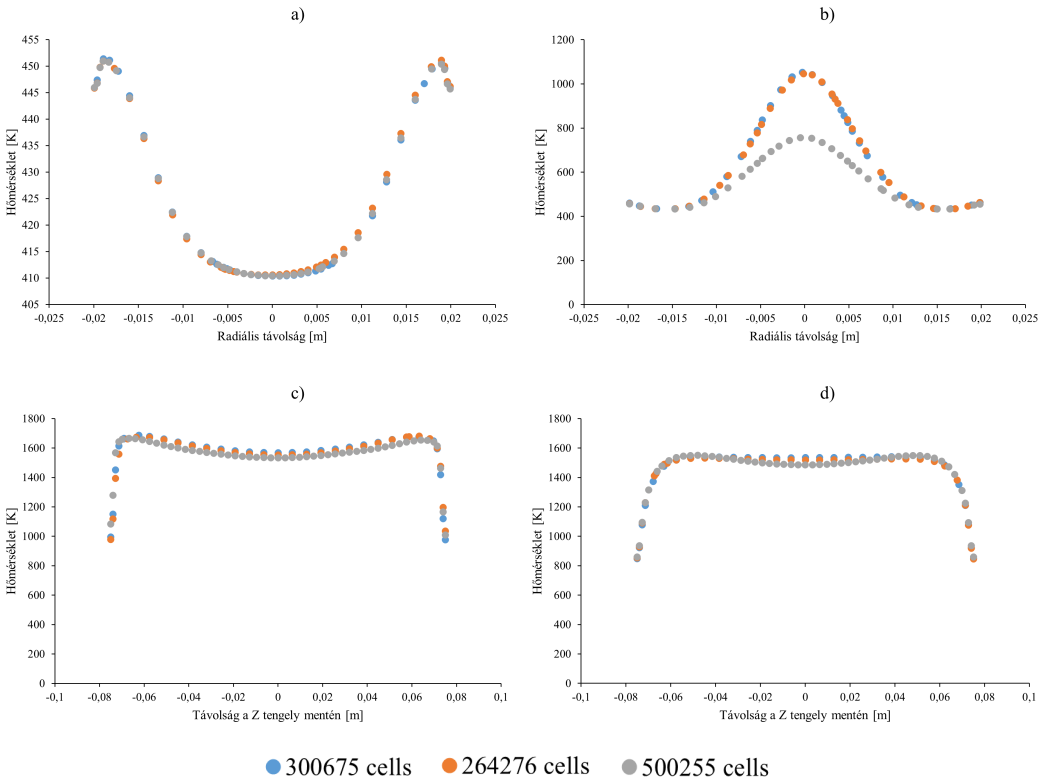


2.26. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K], bal felső sor a 300675 cellaszám, jobb felső sor a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén.

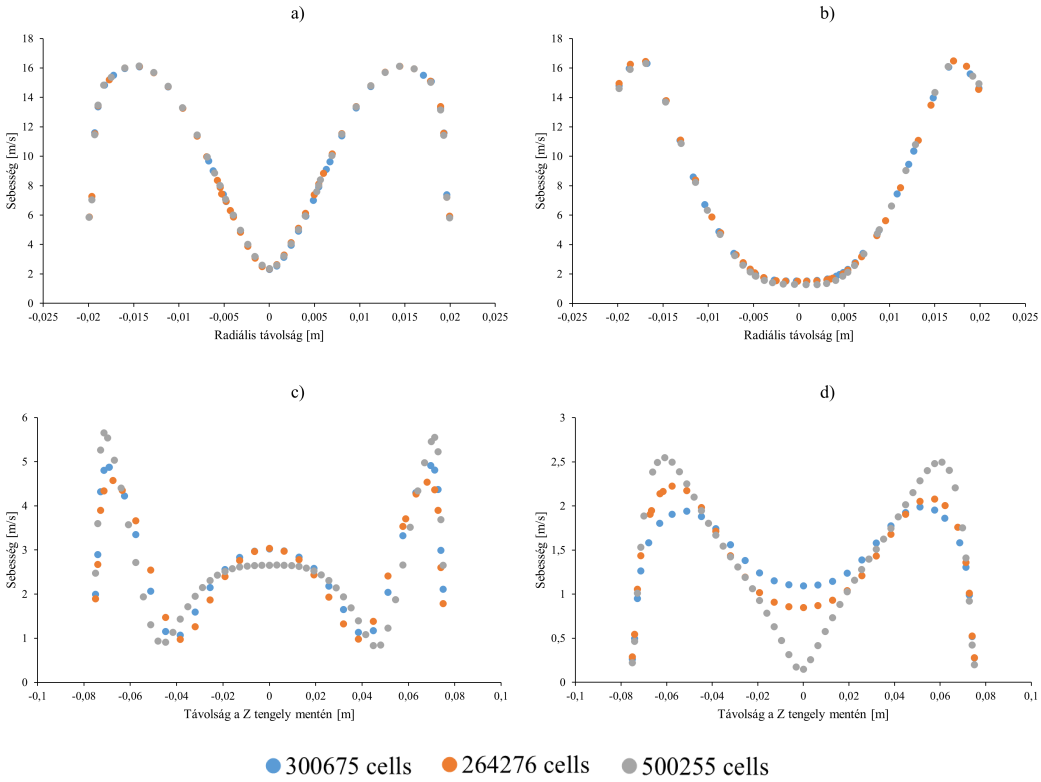


2.27. ábra. OH eloszlás [kg/kg], bal felső sor a 300675 cellaszám, jobb felső sor a 264276 cellaszám, alsó sorban a 500255 cellaszám esetén.

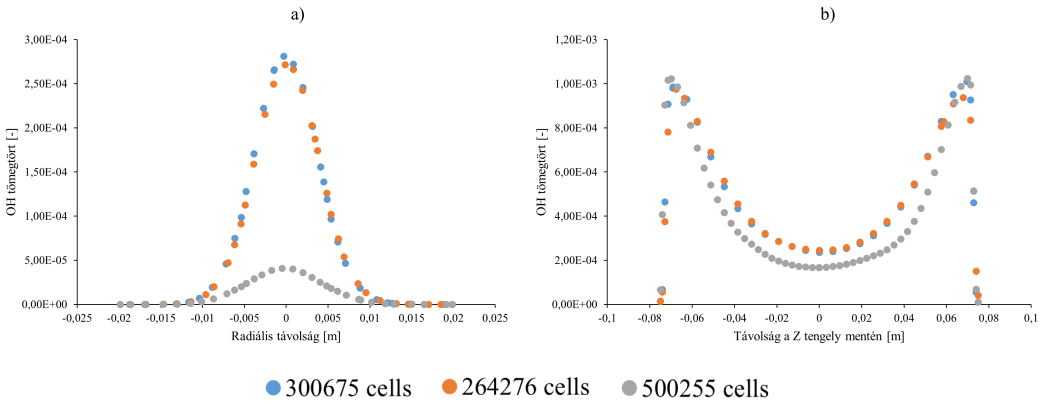
A 2.28 ábrán a vonal menti hőmérséklet-eloszlások láthatóak a három modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikáns eltérés a keverőcső kezdetétől vett 100 mm távolságban látható, ez abból adódik, hogy a gyulladás kezdőpontja eltér az égőtérben sűrített háló és a többi között. Az égőtérben nem sűrített és ritkított háló eredményei jól fedik egymást. A 2.29 ábrán a vonal menti sebességeloszlások láthatóak a három modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szembetűnőbb eltérés a keverőcső kezdetétől vett 200 mm távolságtól kezdve látható, amely a kis mértékben eltérő lángalakoknak köszönhető. A 2.30 ábrán a vonal menti OH eloszlások láthatóak a három modell esetén a keverőcső kezdetétől két távolságban. 100 mm távolságban a különbség a gyulladás kezdőpontjának eltéréséből fakad, itt az égőtérben sűrített háló tér el a nem sűrített, és ritkított hálótól, amelyek eredményei jól fedik egymást. 200 mm-nél jól egyezik az OH eloszlás mindhárom esetben. A 2.31 ábrán a vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások láthatóak a három modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikánsabb eltérés 200 mm távolságtól kezdve tapasztalható, amely a különböző sebességmezőkből adódik. A 2.4 táblázatban az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet és sebesség értékek láthatóak a három modell esetében. Az értékek jól közelítik egymást, az eltérés mértéke nem számottevő. A 2.32 ábrán az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek láthatóak, amelyek jól fedik egymást.



2.28. ábra. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.

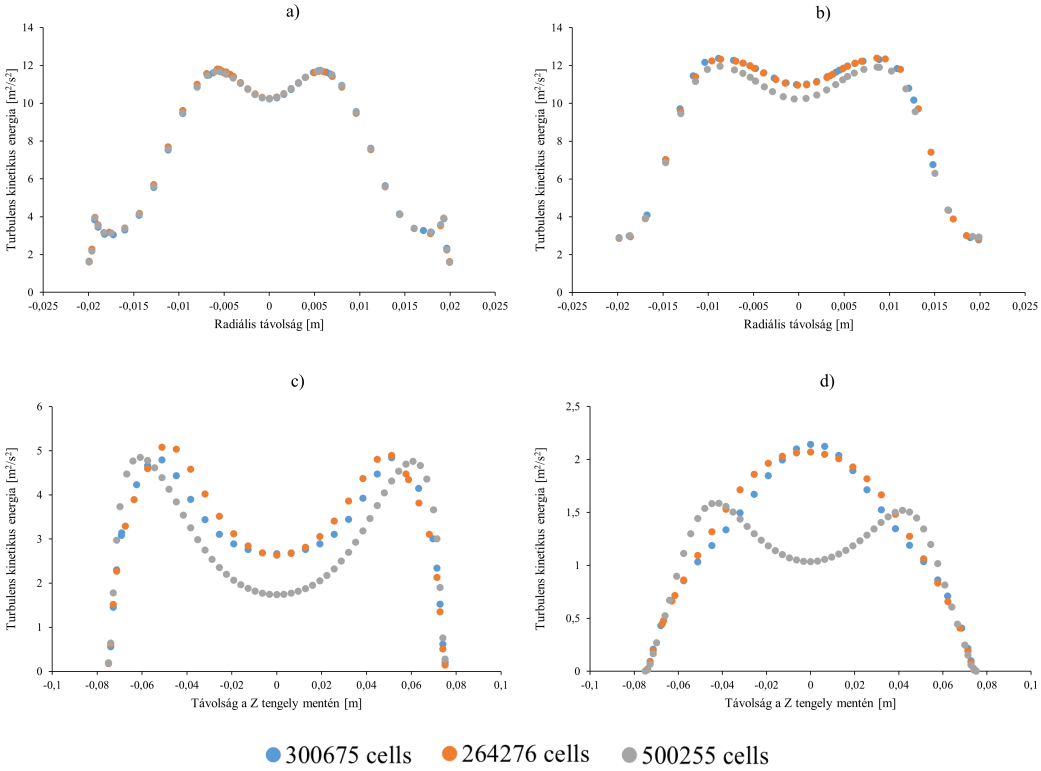


2.29. ábra. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



2.30. ábra. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm.

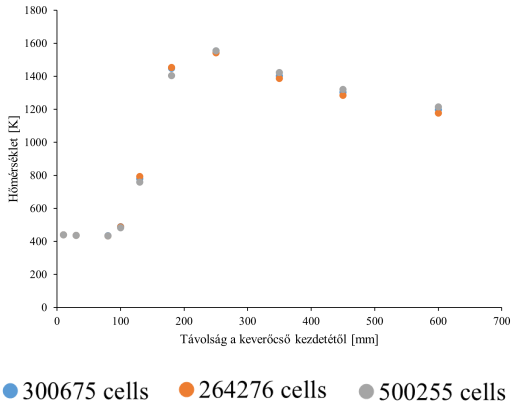
A 2.26 - 2.32 ábrák és 2.4 táblázat alapján is alátámasztható, hogy észrevehető az eltérés a három háló között, de nem jelentős. A gyulladás eltolódása a 2.30 ábrán látható. Az eredmények alapján megállapítható, hogy számomra a 264276 cellaszámú háló is megfelelő, mivel a számítás kellőképp pontos. Az égéstérnél a háló ritkítható, ezáltal a számítás sebessége nőni fog. A 2.26 - 2.32 ábrák alapján az átlagolt értékek minimális mértékben térnek el egymástól, így a legkisebb cellaszámú háló alkalmazható. Ezzel bezárólag a geometria összes kérdéses részét megvizsgáltam, a továbbiakban használandó hálót meghatároztam és számításaim során alkalmaztam. Ennél sűrűbb hálót [43] alapján nem vizsgáltam, mivel ott is elegendőnek bizonyult ez a nagyságrend hasonló léptékű reakciók leírására.



2.31. ábra. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.

2.4. táblázat. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek.

Cellák száma	300675	264276	500255
Hőmérséklet [K]	730,18	706,04	743,16
Sebesség [m/s]	10,76	10,93	10,68



2.32. ábra. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek.

2.7. Időfüggetlenségi vizsgálat

Az időlépést a Courant szám alapján határoztam meg, amely az időbeli diszkretizáció stabilitási kritériuma. A Courant szám (C_r) azt jelenti, hogy egy folyadékcsomag mennyi cellát tesz meg egy időlépés során, amint azt a (2.13) egyenlet leírja:

$$C_r = \frac{\overline{v}\Delta t}{\Delta x}, \tag{2.13}$$

ahol

$\overline{v}$: a közeg átlagos áramlási sebessége [m/s],

Δt: időlépés [s],

Δx: a cella élének hossza az áramlás irányában [m].

Így C_r az egyes cellákhoz tartozó mezőváltozókból származtatott mennyiség, tehát eloszlással rendelkezik. Az értéket egy alatt tartottam a stabilitás megtartása érdekében. Ily módon a szimuláció időlépését ehhez a folyamathoz kellett igazítani, így biztosítva a megfelelő időlépést. Az értéket a teljes számítási idő alatt és áramlási tartományban monitoroztam.

3. fejezet

Eredmények

A 3.1 alfejezetben az előzetes modell hálóján (2.5.1 alfejezet) végeztem számításokat a C-egyenleten alapuló és ECFM tüzelésmodellek használatával. A 3.2 alfejezetben C-egyenleten alapuló, ECFM, EDCM, FGM tüzelésmodellek numerikus számításának eredményeit vizsgáltam a teljes modell hálóján (2.5.2 alfejezet). A 3.3 és 3.4 alfejezetekben az EDCM és FGM modellek stacionárius és tranziens eredményeit hasonlítottam össze. Az FGM modell alkalmasabbnak bizonyult az ammónia égésének leírására, így a 3.5 alfejezetben ezen modellt a Glarborg [12] és Okafor [16] reakciómechanizmusokkal használtam, ezek tranziens eredményeit hasonlítottam össze.

3.1. Előzetes számítások

A jelenlegi ammóniatüzelés-szimulációk nagy részben LES szimulációk a részletes reakciókinetikai modellek figyelembevételével, melyek esetenként 100 feletti reakciólépésből és komponensből épülnek fel, a számítási időt jelentősen növelve. A turbulens égés leírására több egyszerűsített modell is rendelkezésre áll, azonban ezek nem képesek pontos eredménnyel szolgálni az összes tüzelőanyag esetében, a modellek használhatósága korlátozott, és nem specifikált általánosságban [48, 49]. Ezen okból kifolyólag több égési modellt vizsgáltam meg, és kerestem azt, amely a legnagyobb pontossággal tudja közelíteni az ammónia égését egy perdületes, szegényen előkevert égő esetén. Az előzetes számítások során a geometria nem tartalmazta a perdítőelemet, csak az utána következő részét a keverőcsőnek, és az égésteret annak érdekében, hogy egy minél inkább robusztus modellt hozzak létre, mellyel több paraméter vizsgálat elvégezhető kis számítógép-kapacitással. A használt háló a 2.5.1 alfejezetben definiált. A perdítőelem hatását a belépő tömegáram (2.4.2 alfejezet alapján) mellett megadott axiális és tangenciális sebességkomponensekkel helyettesítettem, melyek közti összefüggést a (3.1) egyenlet írja le.

$$\tan(\alpha) = \frac{v_t}{v_a}, \tag{3.1}$$

ahol

v_t: a sebesség tangenciális komponense,

v_a: a sebesség axiális komponense,

α: a sebesség tangenciális és axiális komponense által bezárt szög, melyet 45°-nak adtam meg.

3.1.1. Részlegesen előkevert modell

[50] alapján a C-egyenleten (1.3.1 alfejezet) alapuló modellek alkalmasabbnak bizonyultak a perdületes tüzelés szimulációjára, azonban a vizsgálatok propán égésére vonatkoztak, ahol a kémiai folyamatok nagyságrendekkel gyorsabban játszódnak le. Ebből kifolyólag a következtetések nem általánosíthatók. A PDF fájl generálása során ammóniát határoztam meg tüzelőanyagként, levegőt pedig oxidálószerként. A PDF tábla létrehozása során az ammónia lamináris lángsebességét a Fluent a metánéval közelítette, amelynek maximális értéke körülbelül ötszörös az ammóniáéhoz képest. Ezen okból kifolyólag az ammónia lamináris lángsebességét [14] alapján adtam meg a keverék részarány (mixture fraction) függvényében. A keverék részarány meghatározása:

$$f = \frac{\lambda}{\lambda + \frac{\dot{m}_{oxidálószer,sztöch}}{\dot{m}_{tüa}}} \tag{3.2}$$

ahol

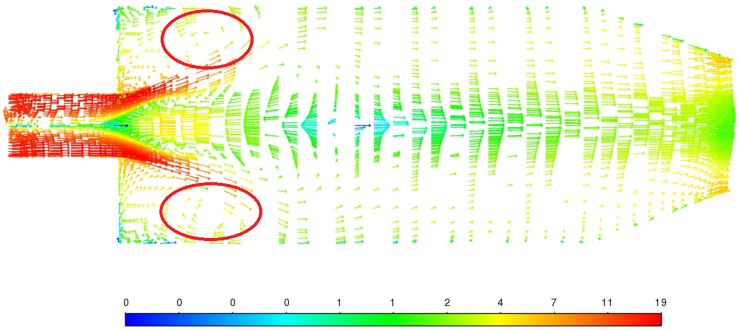
f: keverék részarány,

λ: a tüzelőanyag aránya a levegőhöz,

$\dot{m}_{oxidálószer,sztöch}$: a sztöchiometrikus égéshez szükséges levegő tömegárama,

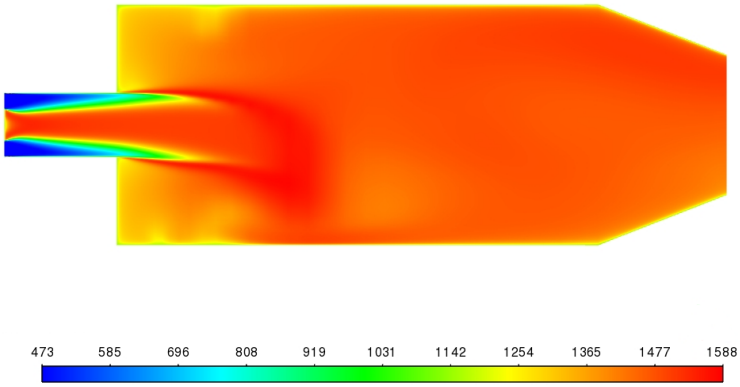
$\dot{m}_{tüa}$: a tüzelőanyag tömegárama.

A belépő tömegáram a keverőcső elején lett meghatározva, a 45°-os perdítőelem hatását úgy definiálva, hogy a sebesség axiális és tangenciális nagyságát 1 egységnek vettem, míg a radiálisat 0-nak (3.1) egyenlet alapján. Így a tökéletes keverék érkezik be perdületesen az égőtérbe a keverőcsőszakaszon keresztül. A turbulencia leírására a k-ω SST modellt választottam [40] alapján. Az eredmények kiértékelése során az YZ sík mentén ábrázoltam a mennyiségeket, ellenkező esetben feltüntettem a kiértékelés síkját. A C-egyenleten alapuló tüzelésmodell stacionárius számításának áramlási képe égés nélküli esetben a 3.1 ábrán látható. A [41] irodalomban belső és sarki recirkulációs zónák alakultak ki. Jelen esetben két külső recirkulációs zóna alakult ki, amelyeket az ábrán piros ellipszisekkel jelöltem. Ezt az eltérést leszámítva az áramlás V alakja kialakult, amely a kísérleti eredményekkel egyezik.

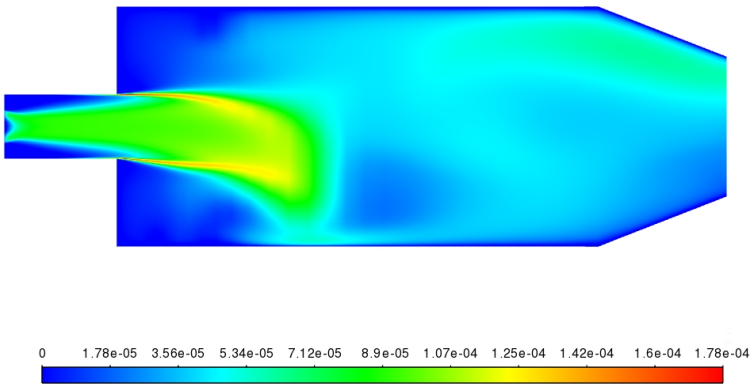


3.1. ábra. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve, égés nélküli esetben logaritmikus skálán ábrázolva.

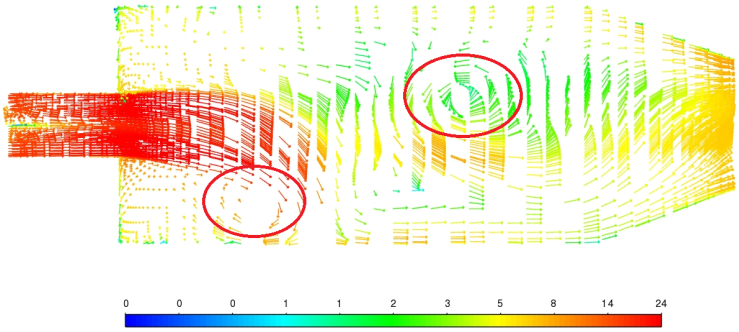
Ezt követően a stacionárius égést tartalmazó esetet vizsgáltam. A 3.2 ábrán az égés hőmérséklet-eloszlása látható. A maximális hőmérséklet 1588 K, amely elfogadható érték, mert [51] hivatkozás mérési eredményei alapján ugyanezen légfelesleg tényező mellett az adiabatikus lánghőmérséklet 1725 K-nek adódott. A hőmérsékletmező alapján levonható a következtetés, hogy a láng az égőtér egészét kitölti, és a keverőcsőben is visszanyúlik a belépő keresztmetszetig. A 3.3 ábrán az OH eloszlás látható. Ez jól korrelál a hőmérséklet-mezővel, a hőfelszabadulás a geometria egészén jelen van. A 3.4 ábrán a sebességvektorok láthatóak. A keverék az égőtérbe egybefüggően áramlik be, nem alakult ki a V alak, ahogy a [41] hivatkozásban található méréseknél. Két recirkulációs zóna alakult ki, ezeket piros ellipszisekkel jelöltem. Az egyik a beáramló keverék külső részén, a másik az égőtér második felében alakult ki.



3.2. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.3. ábra. OH eloszlás [kg/kg].

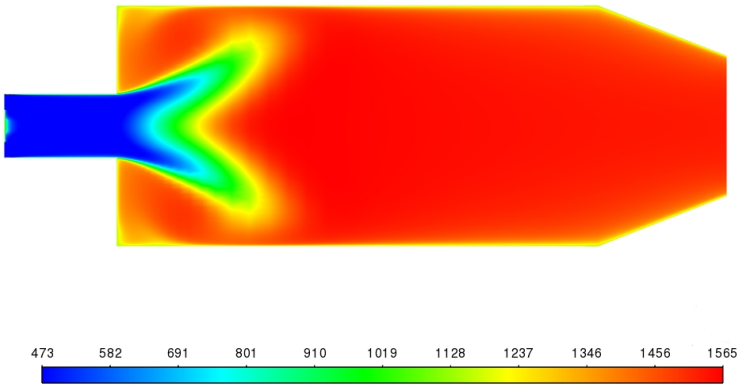


3.4. ábra. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

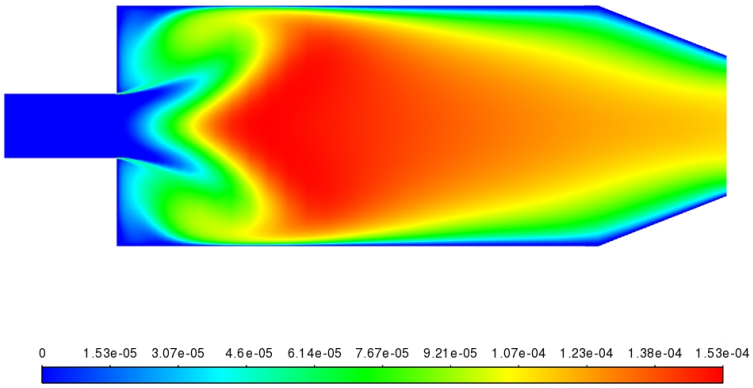
Ismerve a perdületes égés jellegét [52, 53], továbbá irodalomban fellelhető kísérleti tüzeléseket [54, 55], a lángalakok V alakot kell, hogy felvegyenek az erősen perdületes áramlásnak megfelelően ugyanezen paraméterek mellett. A 3.2 - 3.4 ábrák alapján látható, hogy a láng nem V alakot vesz fel, az égőtér egészét, és a keverőcső egy részét is kitölti. Ezen eredmények a modell pontatlanságára utalnak, aminek következtében további vizsgálatokat folytattam. A következőkben kettő lehetséges tényezőt vizsgáltam meg:

- Másik tüzelésmodell alkalmazása.
- A turbulencia modell megváltoztatásának hatása.

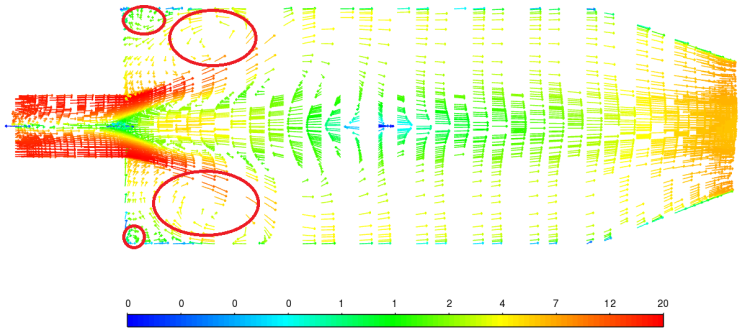
Először az előkeverési modell megoldásának módszerét változtattam meg C-egyenletről ECFM-re (1.3.2 alfejezet). A stacionárius számítás során kialakult hőmérséklet-eloszlás a 3.5 ábrán látható. Az ábra alapján a keverék V alakban áramlik be, a maximális hőmérséklet 1565 K. Ezen érték a [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel szemben elfogadható. Az égés az égőtér nagy részében játszódik le, a keverőcsőben égés nem alakult ki. A kialakult OH eloszlás a 3.6 ábrán látható. A hőmérséklet-eloszlással ellentétben itt M alakú láng azonosítható be, és mivel az OH eloszlás reprezentálja a hőfelszabadulást, így ez a ténylegesen kialakult lángalak [56]. Emellett megállapítható, hogy a hőfelszabadulás az égőtér nagy részében jelen van. A 3.7 ábrán a kialakult sebességvektorok láthatóak. Piros ellipszisekkel lett jelölve a két-két külső és sarki recirkulációs zóna. Ezen áramlási kép nem korrelál a [41] hivatkozásban található méréseknél kialakult belső és sarki recirkulációs zónákkal.



3.5. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



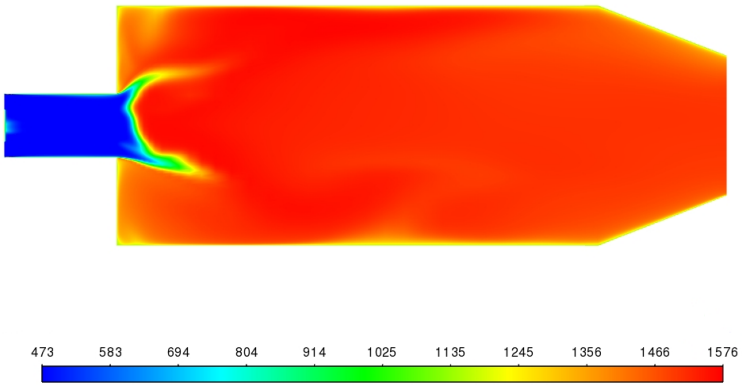
3.6. ábra. OH eloszlás [kg/kg].



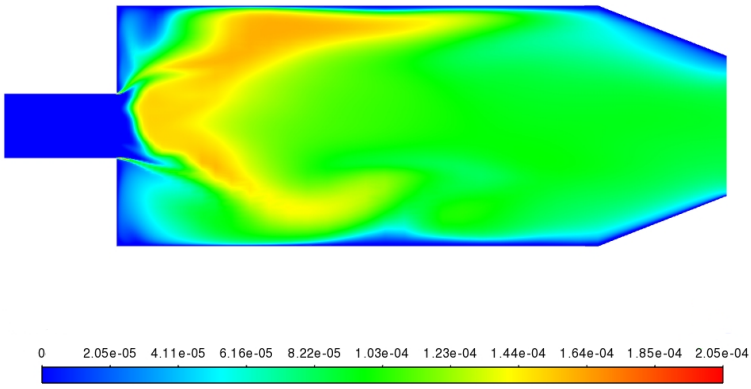
3.7. ábra. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

A 3.5 - 3.7 ábrák alapján megállapítható, hogy a láng alakja M alakot vesz fel, amely az irodalmi adatok alapján ezen peremfeltételek és perdületszám mellett nem helyes, hiszen a lángkép V alakot kellene felvegyen. Ezt követően a turbulencia modell megváltoztatása volt a következő lépés. A két egyenletes k-ω SST modell helyett a 7 egyenletes Reynolds Stress modellt (RSM) használtam. Az RSM turbulencia modell vizsgálatának az oka, hogy elméletben pontosabb a k-ω SST modellnél, több egyenletet old meg. Az előkeverési modell megoldására a C-egyenletet használtam.

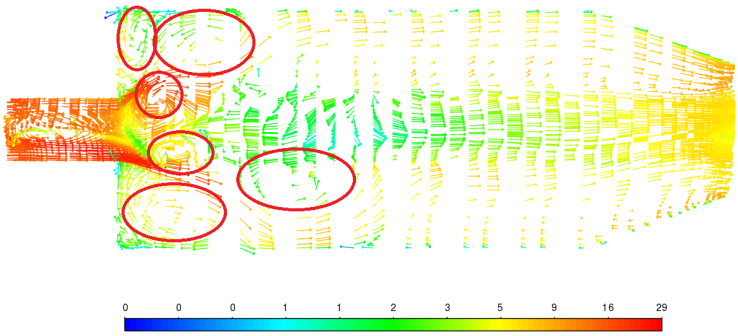
A stacionárius esetben kialakult hőmérséklet eloszlás a 3.8 ábrán látható. A maximális hőmérséklet 1576 K, amely [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel szemben elfogadható. A hőfelszabadulás az égőtér egészében jelen van, a hőmérsékletmező alapján a láng aszimmetrikus V-hez közelítő alakot vesz fel. A 3.9 ábrán látható az OH eloszlás, amely jól korrelál a hőmérséklet-eloszlással, az aszimmetrikus V-hez közelítő alak, és az égőtér egészében jelen lévő hőfelszabadulás beazonosítható. A 3.10 ábrán a kialakult sebességvektorok láthatóak. Piros ellipszisekkel jelöltem a kialakult recirkulációs zónákat. Ezek kettő belső, két külső, egy sarokban található, és egy a belső recirkulációs zónákat követő recirkulációs zóna. A [41] hivatkozásban található méréséken alapuló áramlási kép két-két belső és sarkokban található recirkulációs zónát tartalmaz, az áramlás szimmetrikus. Esetemben az áramlás erősen aszimmetrikus, és több recirkulációs zóna alakult ki.



3.8. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.9. ábra. OH eloszlás [kg/kg].



3.10. ábra. Sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

A 3.8 - 3.10 ábrák alapján megállapítható, hogy a RSM használata egy helytelen áramlási képet és lángalakot eredményez, így ezen turbulencia modell esetemben helytelen eredményhez vezet. Ezen felül a turbulencia modell megoldása során 7 egyenletet kellett megoldani a 2 egyenletes k-ω SST modellel szemben, ami a számítás időigényét növelte.

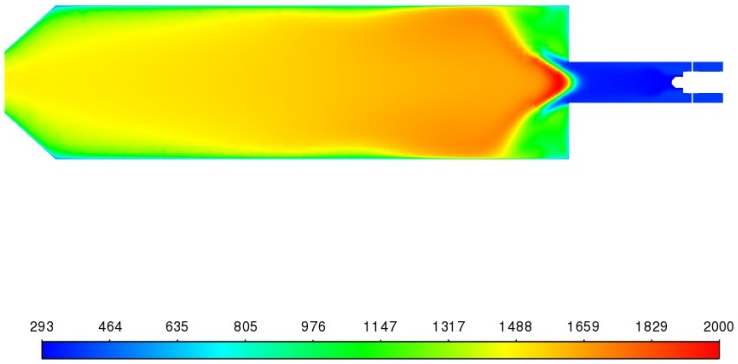
3.2. Teljes modellre vonatkozó számítások eredményei

Az ettől az alfejezettől bemutatott számítások és eredmények mind a 2.6 alfejezetben meghatározott teljes geometria hálójára érvényesek, a stacionárius számítások során a k-ω SST modellt használtam.

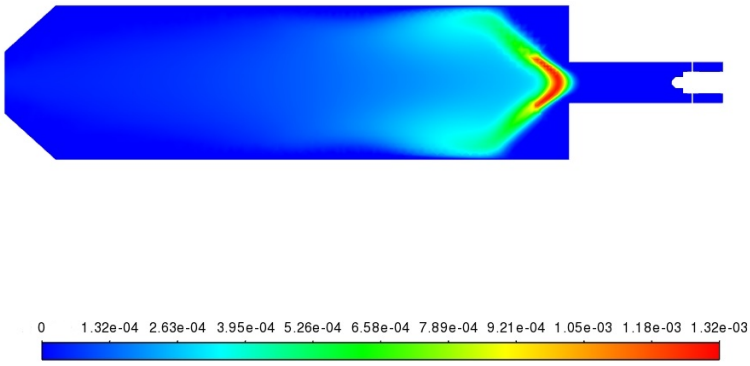
3.2.1. C, ECFM

A tüzelési modellek közül először a 1.3.1 alfejezetben részletezett C-egyenlet modelljét alkalmaztam. Az ammónia lamináris lángsebességét [14] alapján adtam meg a keverék részarány (mixture fraction) függvényében. A hősugárzást a számítások során nem vettem figyelembe, így a füstgázhőmérséklet valamennyivel alacsonyabb, mint a megjelenített. A fő hátránya a modellnek, hogy a tüzelőanyag N_2 tartalmából származó NO_x képződés nem modellezhető.

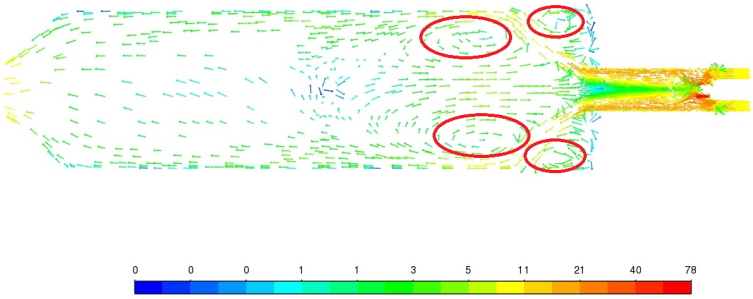
A C-egyenleten alapuló tüzelésmodell hőmérséklet-eloszlása a 3.11 ábrán látható. A hőmérsékletmező alapján a láng V alakot vesz fel, az égés az égőtér elejében zajlik le. A sarkokban kialakult hőmérsékletek valósnak tűnnek, mint ahogy az égőtér végében a lehűlő füstgáz. A maximális hőmérséklet 2000 K, ami túl nagy mértékű eltérést mutat a [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel szemben. A 3.12 ábrán az OH eloszlás látható, amely jól korrelál a hőmérséklet-eloszlás ábrájával. A hőfelszabadulás az égőtér első felében megy végbe, a gyulladás kezdőpontja a keverőcső legvégére tehető. A kialakult sebességvektorok a 3.13 ábrán láthatóak, azonosítható az áramlás V alakja, a recirkulációs zónákat piros ellipszisekkel jelöltem. A belső és sarkokban található recirkulációs zónák megegyeznek a [41] hivatkozásban található mérések során kialakultéval.



3.11. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.12. ábra. OH eloszlás [kg/kg].

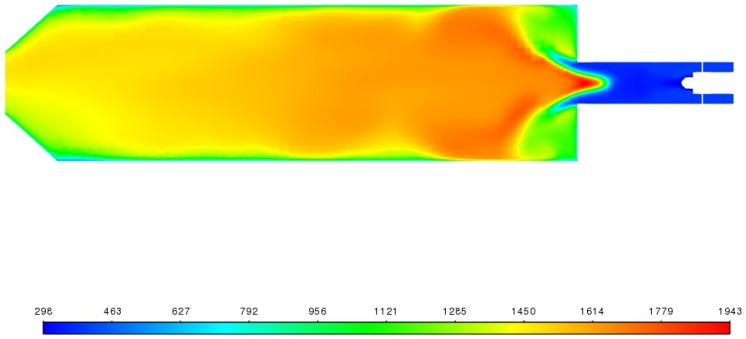


3.13. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

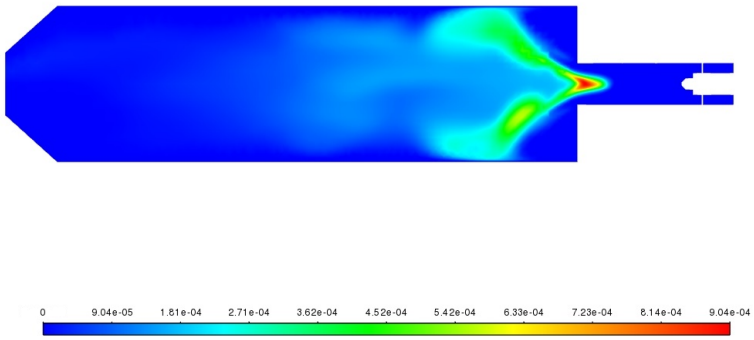
A 3.11 - 3.13 ábrák alapján megállapítható, hogy a [41] irodalomban található mérési eredményekhez hasonlóan itt is kialakult a láng V alakja, a külső és belső recirkulációs zónák, amelyek a számítás pontosságát validálják. A 3.2 ábrán az előzetes geometrián elvégzett számítás eredménye látható ugyanezen peremfeltételek mellett, így levonható a következtetés, hogy a perdítőelem hatásának helyettesítése peremfeltételek használatával helytelen megoldáshoz vezethet.

Ezt követően a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell tranziens idő-átlagolt számításának eredményeit vizsgáltam. A hőmérséklet-eloszlás a 3.14 ábrán látható. A hőmérsékletmező alapján beazonosítható a láng V alakja, és hogy az ammónia kis mértékben visszaég a keverőcsőben. A maximális hőmérséklet 1943 K, amely túlzott mértékben tér el a [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel szemben. Az égőtér végében a füstgáz, és a sarkokban kialakult hőmérsékletmező a maximális hőmérséklethez viszonyítva valósnak tűnnek. A

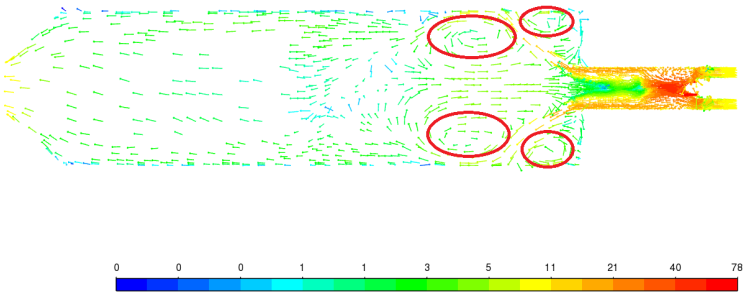
3.15 ábrán az OH eloszlás látható. A V alak beazonosítható, a hőfelszabadulás az égőtér elejében megy végbe, ezek jól korrelálnak a hőmérsékletmező képével. Az OH képződés a keverőcső végében a legintenzívebb, amely ellentmondásos a [41] hivatkozás mérési eredményeivel szemben. A kialakult sebességvektorok a 3.16 ábrán láthatóak. A perdületes tüzelést jellemző belső és sarkokban található recirkulációs zónák létrejöttek, ahogy [41] hivatkozásban is, ezeket piros ellipszisekkel jelöltem.



3.14. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.15. ábra. OH eloszlás [kg/kg].



3.16. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

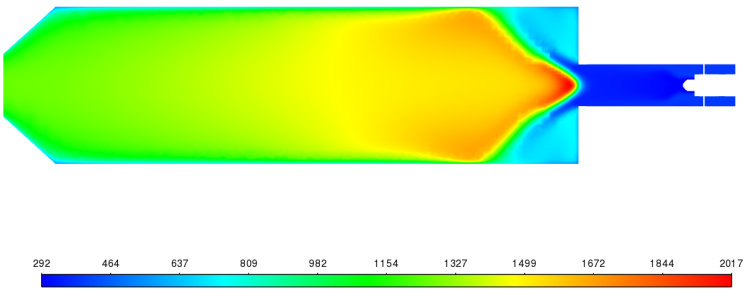
A 3.14 - 3.16 ábrák alapján a láng V alakot vesz fel, a külső és belső recirkulációs zónák kialakultak. A stacionárius esettel szemben itt a maximális hőmérséklet alacsonyabb volt, a gyulladás kezdőpontja a keverőcsőben alakult ki.

A következő eset, amit megvizsgáltam, az az ECFM (1.3.2 alfejezet) tüzelési modell vizsgálata volt. A szimuláció során a keveréket nem sikerült begyújtani, amely a modell alkalmatlanságát tükrözi ammónia égésének szimulációja során.

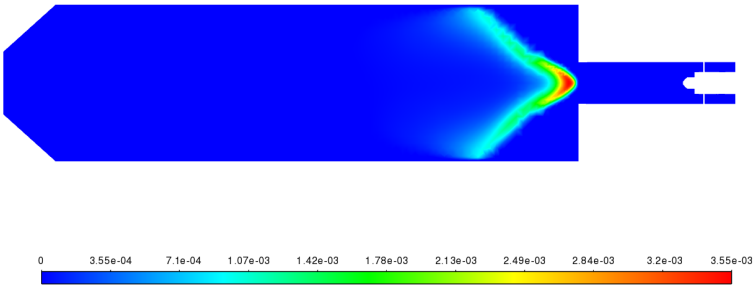
3.2.2. EDCM

A következő tüzelési modell, amit megvizsgáltam, az az EDCM volt, mely a 1.3.3 alfejezetben lett részletezve. A kémia leírására a Glarborg et al. [12] által készített reakciómechanizmust alkalmaztam. A [41] hivatkozás alapján ez felel meg leginkább a nyomás-és légfelesleg tartománynak, legszéleskörűbb. Valamint viszonylag kevés komponenst tartalmaz, mely a memória, míg a reakcióegyenletek a processzor szempontjából fontosak. Természetesen a komponensek és reakcióegyenletek külön-külön is terhelik a memóriát és processzort, csak más mértékben. Továbbá ELTE-s kutatókkal folytatott egyeztetés következményeként került alkalmazásra. A számítás során stacionárius esetet vizsgáltam, és annak eredményeit átlagoltam.

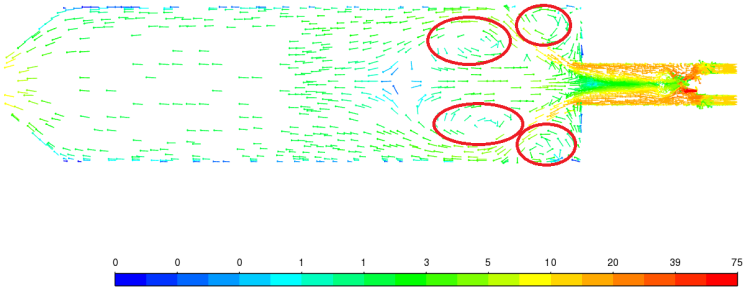
A kialakult hőmérséklet-eloszlás a 3.17 ábrán látható. A hőmérsékletmező alapján beazonosítható a láng V alakja, az a keverőcsőben nem ég vissza. Az égőtér végében a füstgáz hőmérséklete a valóságnak megfelelő mértékben csökkent le a gyulladás kezdőpontjától számítva. Az égőtér elejében található sarkokban ugyanezen geometrián végzett kísérletek során [40, 57] magasabb hőmérséklet értékek adódtak, ami a modell pontatlanságát tükrözi. A maximális hőmérséklet 2017 K, amely túlzott mértékben tér el a [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel szemben. A 3.18 ábrán az OH eloszlás látható, amely jól korrelál a hőmérsékletmező ábrájával. A hőfelszabadulás az égőtér elejében zajlik le, azonosítható a láng V alakja. A sebességvektorokat a 3.19 ábra szemlélteti. A belső és sarkokban található recirkulációs zónák létrejöttek, azokat piros ellipszisekkel jelöltem. A kialakult sebességmező a [41] hivatkozásban található mérési eredményekkel egyezik.



3.17. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.18. ábra. OH eloszlás [kg/kg].



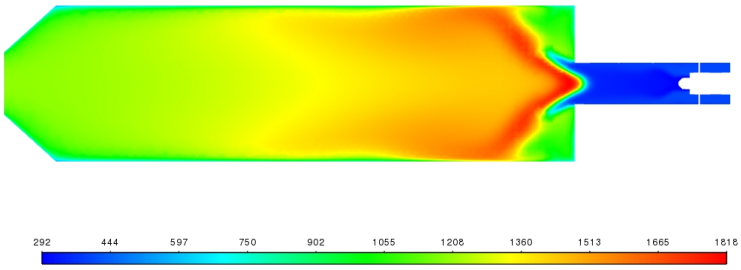
3.19. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

A 3.17 - 3.19 ábrák alapján megállapítható, hogy a láng V alakot vesz fel, ahogy a [41] irodalomban is. A külső és belső recirkulációs zónák is kialakultak, amik a számítás pontosságát igazolják. A 3.17 ábrán az égőtér keverőcsőhöz közelebbi sarkaiban a hőmérséklet átlagosan 760 K volt, amely alacsonyabb, mint ahogy az várható volt, az eredmény nem valós. Gyakorlatilag olyan, mintha lehűtenénk a közeget, azonban semmilyen hűtést nem végeztem, a falakra a környezeti levegő paramétereit adtam meg. Ugyanebben az égőben végzett gázszimulációk esetén ugyanekkora teljesítmény mellett is nagyobb hőmérséklet értékek adódtak a sarkokban [40, 57].

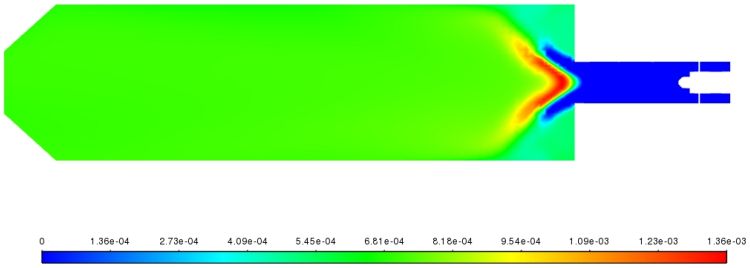
3.2.3. FGM modell

A következő tüzelést leíró modell, amit megvizsgáltam, az az FGM modell (1.3.4 alfejezet) volt. Ebben az esetben is Glarborg [12] reakciómechanizmusát alkalmaztam, amelyből létrehoztam a flamelet fájlt, majd a PDF táblát. A számítás során stacionárius esetet vizsgáltam, és annak eredményeit átlagoltam.

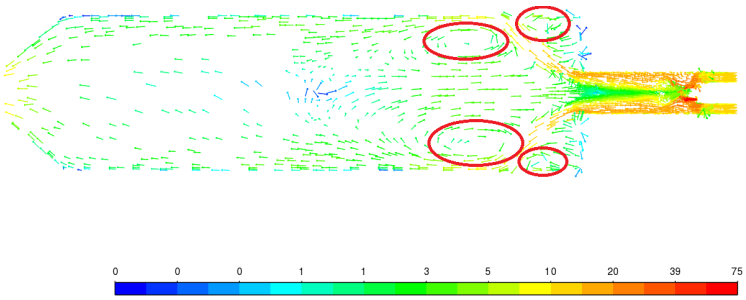
A kialakult hőmérséklet-eloszlás a 3.20 ábrán látható. Jól látszik a láng V alakja, a sarkokban található hőmérsékletmező és az égőteret elhagyó kilépő füstgáz hőmérséklete is valósnak tűnik. A gyulladás kezdőpontja a keverőcső végében van. A maximális hőmérséklet 1818 K, amely elfogadható egyezést mutat a [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel. A 3.21 ábrán az OH eloszlás látható, amely jól korrelál a hőmérsékletmezővel. Kivehető a láng V alakja, és a keverőcső végén található gyulladás kezdőpontja. Az OH képződés legintenzívebb szakaszát követően az OH képződésének a mértéke nem zérus, hanem körülbelül a maximális érték fele. A kialakult sebességvektorok a 3.22 ábrán láthatóak. A belső és sarkokban található recirkulációs zónák létrejöttek, azokat piros ellipszisekkel jelöltem. A kialakult sebességmező a [41] hivatkozásban található mérési eredményekkel egyezik.



3.20. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K].



3.21. ábra. OH eloszlás [kg/kg].



3.22. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve logaritmikus skálán ábrázolva.

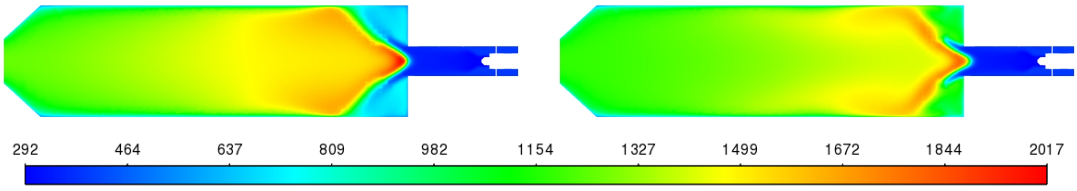
A 3.20 - 3.22 ábrák alapján megállapítható, hogy a láng V alakot vesz fel, amely a számítás helyességét támasztja alá. A 3.22 ábrán beazonosíthatóak a külső és belső örvények, az égőtér keverőcsőhöz közelebbi sarkaiban létrejött hőmérsékletmező is a modell pontosságát tükrözi.

3.3. EDCM és FGM modellek stacionárius eredményeinek összehasonlítása

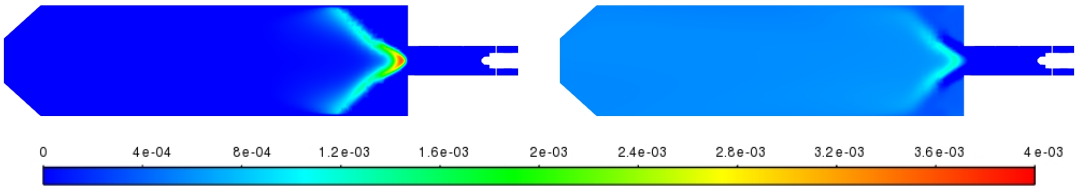
Az eddigi számítások alapján az EDCM és az FGM modellek közelítették a legjobban az irodalmakban található eredményeket [2, 25, 41]. Ebből kifolyólag ezen modellek stacionárius átlagolt eredményeit hasonlítottam össze Glarborg reakciómechanizmusát alkalmazva [12], hogy az alkalmasabb modellt meg tudjam állapítani. Így az alábbi eseteket vizsgáltam:

- species transport: EDCM modell.
- flamelet: FGM modell.

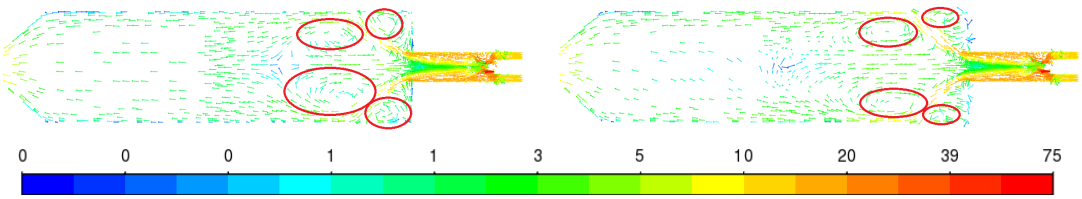
A két modellnek a hőmérséklet-eloszlása a 3.23 ábrán látható. A láng V alakja mindkét esetben jól kirajzolódik, a gyulladás kezdőpontja minimális mértékben tér el a két esetben. Az égőtér kezdeténél található sarkokban kialakult hőmérsékletmező magasabb értékeket vesz fel az FGM modellnél, amely valósabb eredmény az EDCM modellel szemben. A kilépő füstgáz mindkét esetben reális mértékben alacsonyabb hőmérsékletet vesz fel a maximális hőmérséklethez képest. A maximális hőmérséklet az FGM modell esetén 1818 K, míg az EDCM modell esetén 2017 K. A [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel összehasonlítva az FGM modell eredménye az elfogadhatóbb. Az OH eloszlás a 3.24 ábrán látható. A maximális érték az EDCM modell esetében nagyobb. Az égőtér végében az OH tömegtört zérus értéket vesz fel az EDCM modellnél, szemben az FGM modellel. A sebességvektorok a két modell esetén a 3.25 ábrán láthatóak. Mindkét esetben létrejöttek a belső és a sarkokban található recirkulációs zónák, ezeket piros ellipszisekkel jelöltem. A kialakult áramlási kép így egyezik mindkét modell esetén a [41] hivatkozásban található mérési eredményekkel. A 3.26 ábrán az áramlási vonalak láthatóak hőmérséklet szerint színezve a két modell esetében. A precesszáló örvénymagok beazonosíthatóak, az EDCM modellnél látható a különbség sarokban kialakult hőmérsékletmezőben az FGM modellel szemben.



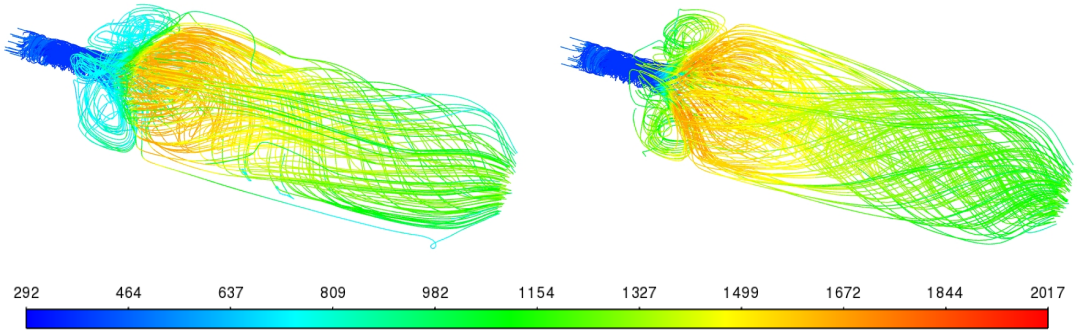
3.23. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.



3.24. ábra. OH eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.



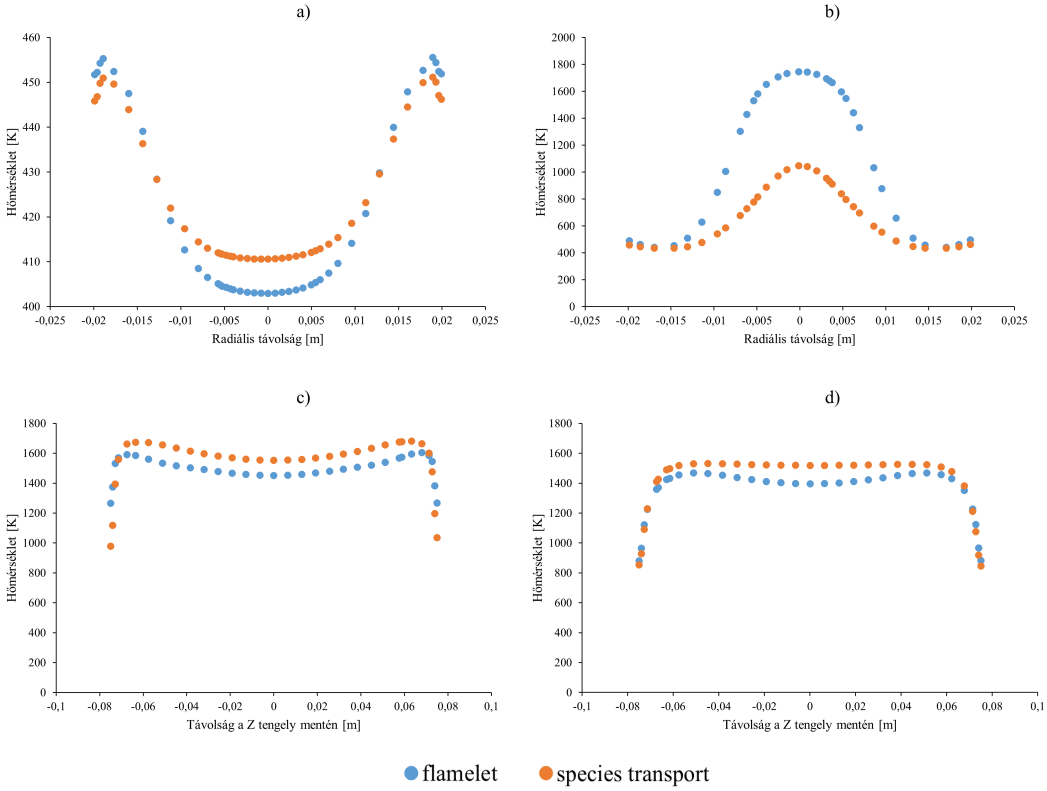
3.25. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén logaritmikus skálán ábrázolva.



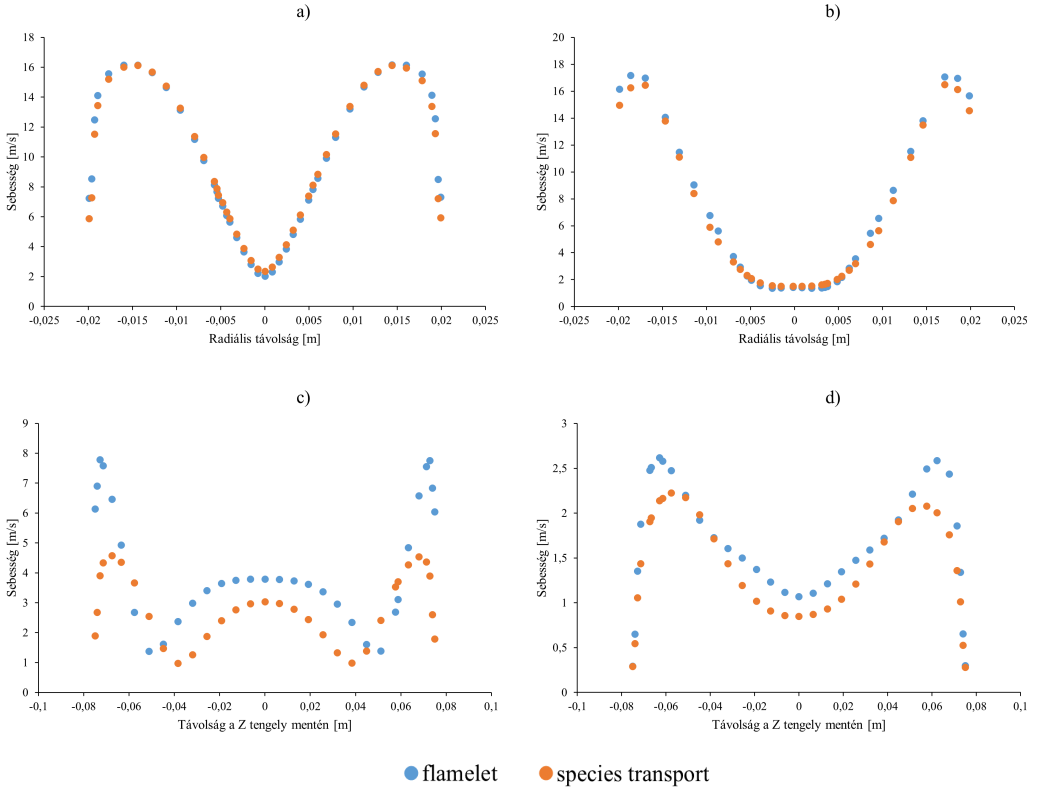
3.26. ábra. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.

A 3.23 - 3.26 ábrák alapján megállapítható, hogy a kialakult áramlási kép mindkét esetben nagyon közeli, szignifikánsabb eltérés a hőmérséklet maximális értékében, az égéstér keverőcsőhöz közelebbi sarkaiban kialakult hőmérséklet-eloszlás és az OH képződősének mértékében van jelen. Az eltérés mértékének felmérése céljából vonal menti kiértékeléseket végeztem.

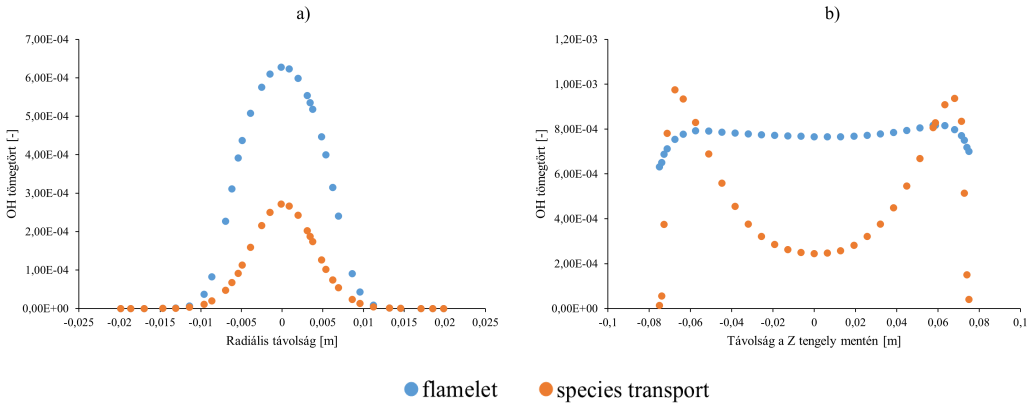
A 3.27 ábrán a vonal menti hőmérséklet-eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikáns eltérés a keverőcső kezdetétől vett 100 mm távolságban látható, ez abból adódik, hogy a gyulladás kezdőpontja a két esetben nem ugyanott található. A 3.28 ábrán a vonal menti sebességeloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szembetűnőbb eltérés a keverőcső kezdetétől vett 200 mm távolságban látható, az eloszlás trendje körülbelül egyezik, az eltérés az értékek mértékéből fakad. A recirkulációs zónák mindkét modell esetében kialakultak, de a recirkulációs zónákat követő sebességmező különbözik, ahogy az a 3.25 ábrán látható. A 3.29 ábrán a vonal menti OH eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől két távolságban. 100 mm távolságban az eltérés a gyulladás kezdőpontjának eltéréséből fakad. 200 mm-nél az eltérés az FGM és EDCM modellek komponens számítási módszerének különbségéből fakad. A 3.30 ábrán a vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások láthatóak a két modell esetén a keverőcső kezdetétől négy távolságban. Szignifikánsabb eltérés 200 mm és 300 mm távolságban tapasztalható, ami a sebességmezők eltéréséből adódik. A 3.1 táblázatban az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet és sebesség értékek láthatóak a két modell esetében. Szembetűnő különbség a hőmérséklet értékek között vannak, amely 83 K. Ez a hőmérséklet maximális értékének és a sarkokban kialakult hőmérsékletmezők eltéréséből adódik. A 3.31 ábrán az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek láthatóak. Nagymértékű eltérés a keverőcső kezdetétől 130 mm-re van jelen, amely a gyulladás kezdőpontjának eltérésből fakad.



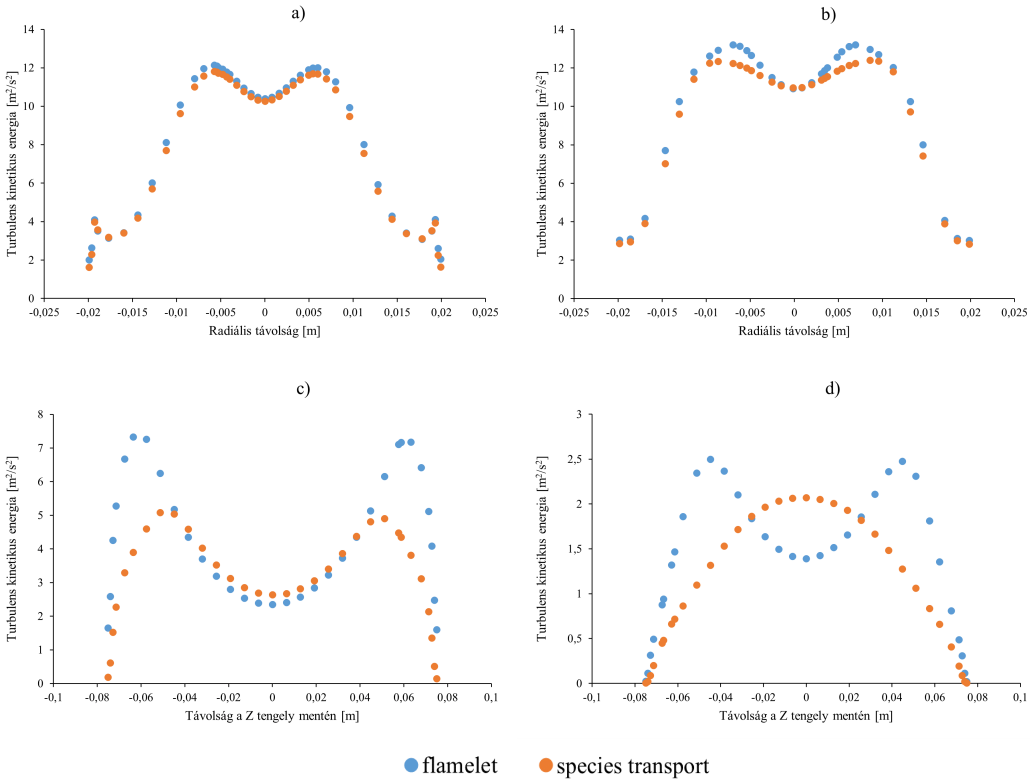
3.27. ábra. A vonal menti hőmérséklet-eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



3.28. ábra. A vonal menti sebességeloszlás az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.



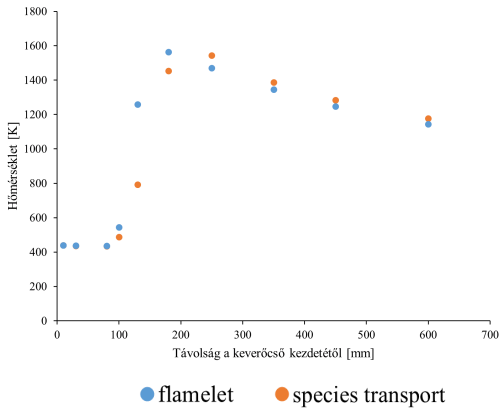
3.29. ábra. A vonal menti OH eloszlása az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 100 mm, b) 200 mm.



3.30. ábra. A vonal menti turbulens kinetikus energia eloszlások az XY sík mentén, a keverőcső kezdetétől sorra az alábbi távolságokban: a) 50 mm, b) 100 mm, c) 200 mm, d) 300 mm.

3.1. táblázat. Az YZ síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt mennyiségek.

Modell neve	flamelet	species transport
Hőmérséklet [K]	789,05	706,04
Sebesség [m/s]	10,50	10,93



3.31. ábra. Az XY síkon tömeg szerint súlyozott és átlagolt hőmérséklet értékek.

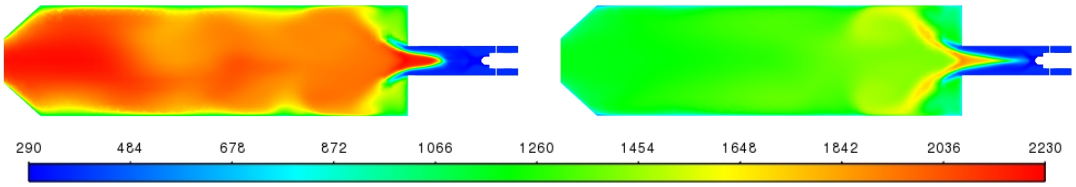
A 3.27 - 3.31 ábrák és 3.1 táblázat alapján is alátámasztható, hogy észrevehető az eltérés a modellek között, de annak mértéke nem jelentős. Az OH eloszlásának eltérése abból adódik, hogy ezen paramétert az EDCM nagyobb pontossággal számítja, mint az FGM modell. A stacionárius eredmények nem jó viszonyítási alap, mivel a tüzelés becslése e paraméterek mentén nem pontos időben állandósult számítás során. Ebből kifolyólag tranziens szimulációkat végeztem és hasonlítottam össze az eredményeket.

3.4. EDCM és FGM modellek tranziens eredményeinek összehasonlítása

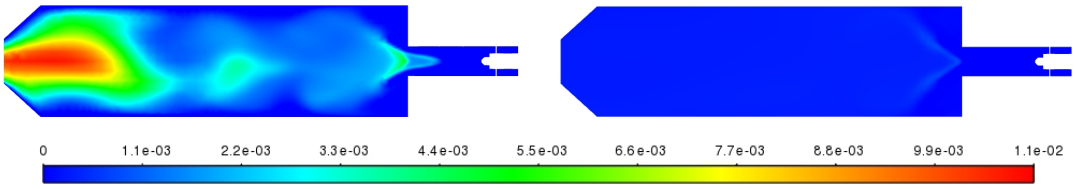
Ebben az alfejezetben a Glarborg mechanizmusra vonatkozó EDCM és FGM modellekből származó tranziens eredményeket hasonlítom össze. Az összehasonlítás alapja a tüzelés jellegét meghatározó paraméterek idő-átlagolt alakja. A 3.32 ábra a hőmérséklet-eloszlást mutatja a két modell esetén. Érdekes módon az EDCM modell esetén a keverőcső kilépésénél látható V alak után az égőtér felső szakaszában a gyulladási hőmérséklettel megegyező elosztott hőmérséklet mezőt látunk. Ezzel korrelál a 3.33 ábrán látható OH eloszlás, mely egyébként a hőfelszabadulást reprezentálja [56]. Ebből az is megállapítható, hogy a modell esetén a felső szakaszi hőfelszabadulás jóval intenzívebb. A szakirodalomban megtalálható, ugyanekkora jellemző perdületszámú hasomló geometriájú kísérleti berendezésnél, a méréseknél nem tapasztaltak ilyen jelenséget [41]. Ezzel ellentétben az FGM modellnél egy teljességében V alakú láng adódott, ahol ugyan a láng vége visszanyúlik a csőbe, a maximum hőmérséklet 330 K-nel alacsonyabb, és nem alakul ki gyulladás a felső szakaszban, tehát a lángfront után már csak alacsonyabb hőmérsékletű füstgáz található. Ez figyelhető meg a 3.33 ábrán is, ahol az OH eloszlás intenzitása alacsonyabb összehasonlítva az EDCM modellével, és a hőfelszabadulás a kísérleti eredményekkel egyezően [41] az égőtér elejére szorítódik. Tehát jól látható, hogy az FGM "valósabb" eredményt szolgáltat.

Az EDCM eltérésének okát érdemes vizsgálni. Ennek okán vizsgáltam a 3.36 ábrán az NH_3 eloszlást. Az NH_3 mindkét modellnél már az égőtér elején teljesen kiég, vagyis nem ez gyullad újra az EDCM-nél. A pontos okokat nem sikerült meghatároznom, a numerikus hiba az egyik reakciólépéshez köthető. További eltérések magyarázhatók az áramképpel. A 3.34 ábrán felvázolt sebességvektorokon megfigyelhetők a perdületes tüzelést jellemző belső és sarki recirkulációs zónák, míg a 3.35 ábra áramvonalain a precesszáló örvénymag is beazonosítható. Az FGM modellnél a belső recirkulációs zónákat követően kialakult egy következő recirkulációs zóna, és ezzel együtt visszaáramlás is, ami a kísérleti eredmé-

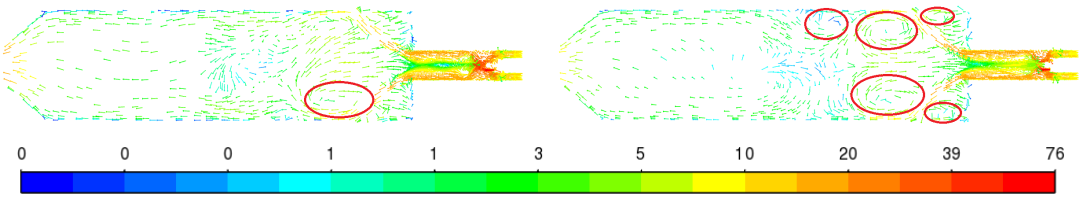
nyekkel ellentmondásos. Az EDCM modellnél az eloszlás kevésbé szimmetrikus, amely még nem ellentmondás, ugyanakkor további örvényzónák azonosíthatók, melyek már nem jellemzőek a jelenségre. Az eltérő zónák kialakulása a hőfelszabaduláshoz köthető.



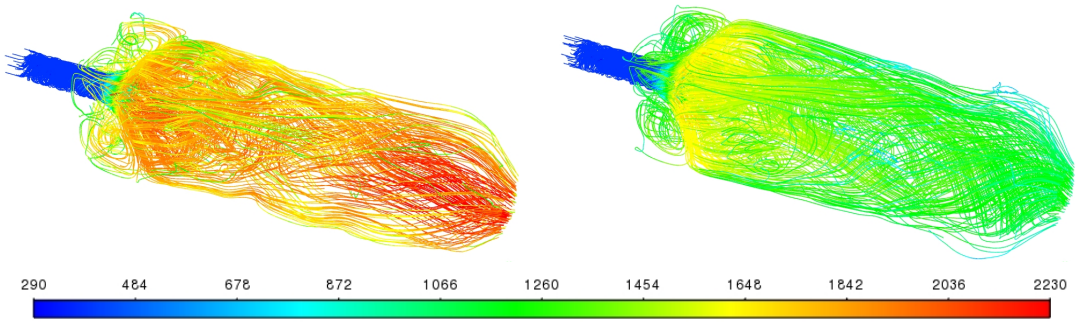
3.32. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.



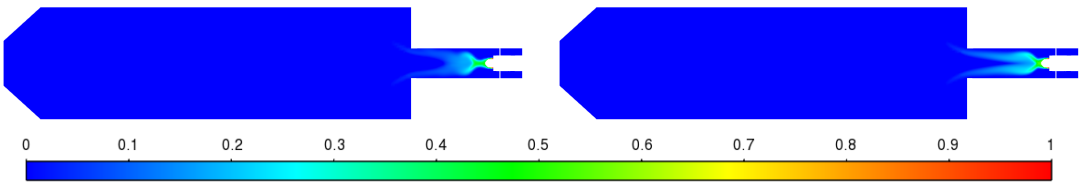
3.33. ábra. OH eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.



3.34. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén logaritmikus skálán ábrázolva.



3.35. ábra. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.



3.36. ábra. NH_3 eloszlás [kg/kg] az EDCM (balra) és az FGM (jobbra) modellek esetén.

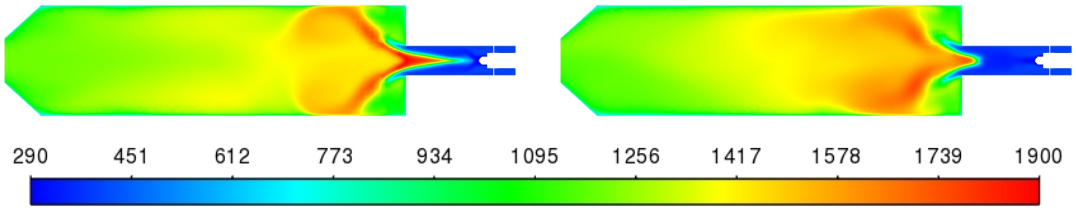
A 3.32 - 3.36 ábrák alapján megállapítható, hogy a számítások eredményei nagy mértékben különböznek egymástól. EDCM esetén a láng az égőtér egészét kitölti, az OH eloszlás nagyobbik része a geometria végén van, ami azt jelenti, hogy az égés ott játszódik le, amely helytelen. Az áramlási képet megvizsgálva az FGM modellnél létrejöttek a belső és sarki recirkulációs zónák, és a belső recirkulációs zónát követő recirkulációs zóna, amely visszaáramlást okozott, amely nem tükrözi a kísérleti eredményeket. Az EDCM modell esetén is létrejöttek örvényzónák, de azok nem jellemzőek a perdületes égésre. Ezen eredmények alapján arra a következtetésre jutottam, hogy az EDCM modell nem szolgáltat megfelelő eredményt. A kialakult áramlási mező okán további reakciómechanizmusok vizsgálatát láttam szükségesnek. Így vizsgáltam az Okafor reakciómechanizmust az EDCM modell segítségével, azonban a keveréket nem sikerült begyújtani, így ezen eredményeket nem is közlöm. Mindent egybevetve arra a következtetésre jutottam, hogy az FGM modell alkalmasabb az ammónia szegényen előkevert perdületes tüzelésének szimulációjára. Így a továbbiakban az FGM modellre fókuszálok, ahol 2 reakciómechanizmust hasonlítok össze.

3.5. Reakciómechanizmusok összehasonlítása

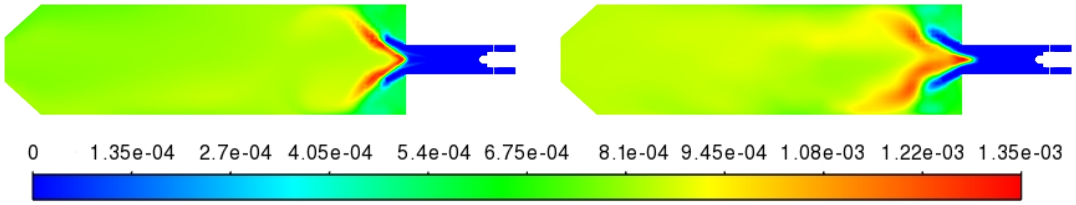
A 3.32 ábrán látható, hogy a magasabb hőmérsékleti értékek a keverőcsőben V alakot formáznak, amely nem megfelelő, így arra a következtetésre jutottam, hogy érdemes más reakciómechanizmussal is alkalmazni az FGM modellt. A továbbiakban Okafor [16] mechanizmusát hasonlítottam össze Glarborg [12] mechanizmusával. A tranziens idő-átlagolt számítások eredményeit vetettem össze.

A 3.37 ábrán a kialakult hőmérséklet-eloszlások láthatóak. A láng V alakja mindkét esetben kirajzolódik, azonban szignifikáns eltéréseket lehet észrevenni. A maximális hőmérséklet Glarborg mechanizmusa esetén 1896 K, míg Okafor mechanizmusa esetén 1756 K. A [51] hivatkozásban található ugyanezen légfelesleg tényező mellett megállapított 1725 K értékű adiabatikus lánghőmérséklettel összehasonlítva Okafor mechanizmusa "valósabb" eredményt nyújt. Ezen felül a Glarborg mechanizmus esetén a gyulladás kezdőpontja a keverőcső közepére, míg Okafor mechanizmusa esetén a keverőcső végére tehető, amely reálisabb eredmény esetemben. A hőmérsékletmezőt vizsgálva a lángfront vége visszahajlik a Glarborg mechanizmus esetében, míg az Okafor mechanizmus esetén a V alak eléri a falat és némileg felkenődik rá, de attól még halad tovább és V alak marad. Tehát az Okafor mechanizmus esetén nincs visszakanyarodás. Ezen eredmény a Glarborg mechanizmus helytelen sebességmezejét sugallja. A 3.38 ábra az OH eloszlást ábrázolja a két reakciómechanizmus esetén. Az Okafor mechanizmus esetén az OH eloszlás jól korrelál a kialakult hőmérsékletmezővel. A Glarborg reakciómechanizmus esetén az OH eloszlás alapján a gyulladás kezdőpontja a keverőcső végén értendő, míg a hőmérsékletmező alapján a keverőcső közepénél azonosítható. Az eltérés vizsgálata érdekében az egyes komponensek tömegtörtjét vizsgáltam a Glarborg mechanizmus esetén. A komponenseket megvizsgálva arra jutottam, hogy a keverőcsőben nagy mennyiségű H_2 van jelen. Így a

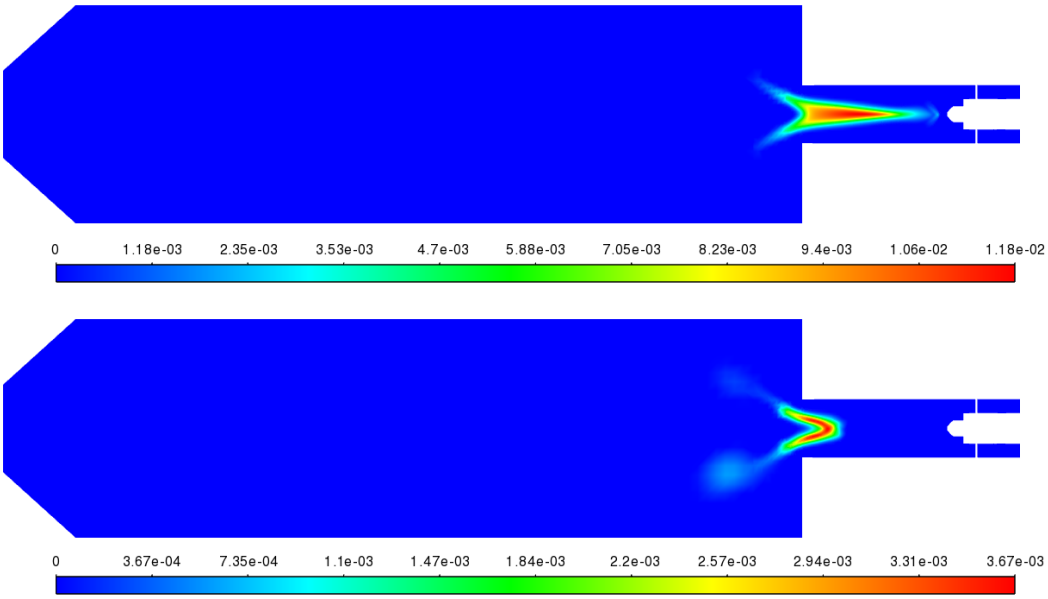
H_2 eloszlását vizsgáltam mindkét mechanizmus esetében, ahogy az a 3.39 ábrán látható. Az Okafor mechanizmus esetén látható, hogy a H_2 képződés kezdőpontja megegyezik az OH képződés kezdőpontjával. A 3.40 ábrán az ammónia oxidációjának reakcióútja látható a Glarborg mechanizmus esetén [12]. Ez alapján megállapítható, hogy az ammónia égésének első reakciója során OH, H és O képződik. Ez alátámasztja, hogy a geometria ugyanazon részén kell a H_2 és OH képződésnek megkezdődnie, ahogy ez helyesen meg is történt az Okafor mechanizmus esetén. A Glarborg mechanizmus esetén látható, hogy a H_2 képződés a keverőcső felénél kezdődik, míg az OH képződés a keverőcső végénél, amely a Glarborg mechanizmus pontatlanságát támasztja alá.



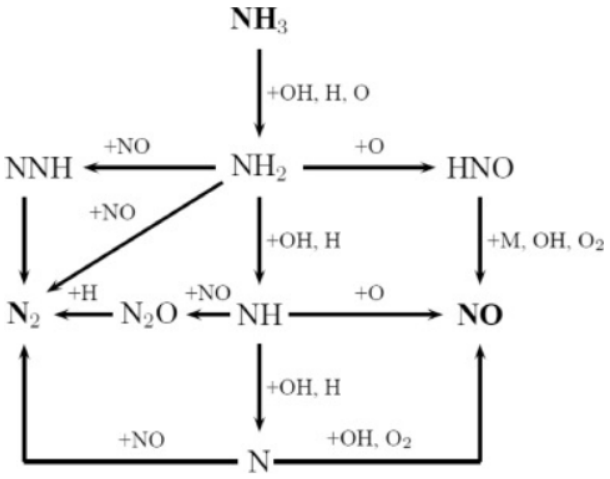
3.37. ábra. Hőmérséklet-eloszlás [K] a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén.



3.38. ábra. OH eloszlás [kg/kg] a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén.

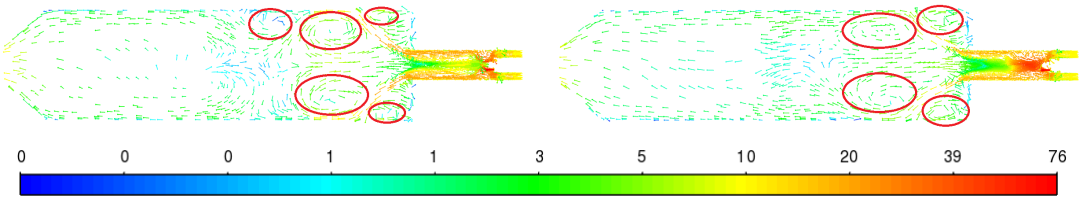


3.39. ábra. H_2 eloszlás [kg/kg] a Glarborg (felül) és az Okafor (alul) reakciómechanizmusok esetén.

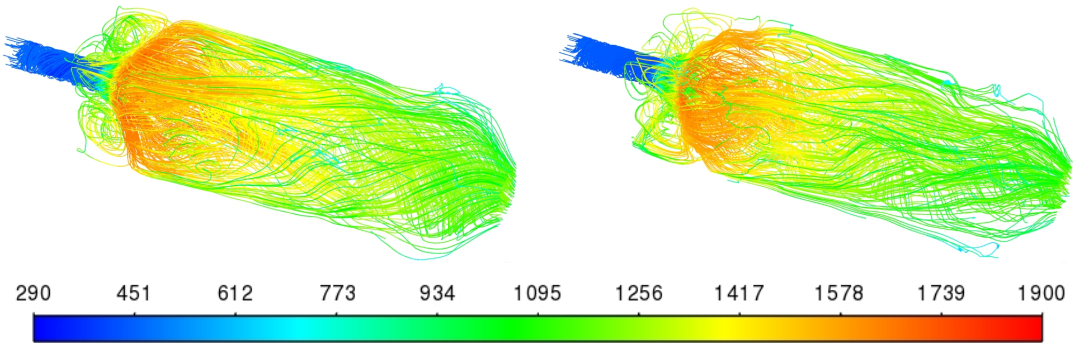


3.40. ábra. Az NH_3 oxidációjának reakcióút diagramja a Glarborg mechanizmus esetén [12].

A 3.41 ábrán a sebességvektorok láthatóak. A kialakult sebességmezőkön a recirkulációs zónákat piros ellipszisekkel jelöltem. Az Okafor mechanizmus esetén belső és sarki recirkulációs zónák jöttek létre, mint a [41] hivatkozásban található mérési eredményben. A Glarborg mechanizmus esetén a belső recirkulációs zónákat követően egy további örvényzóna jött létre, amely nem egyezik a validáció alapjául szolgáló hivatkozás eredményével. Ezen örvénymező okozhatja a lángfront végének visszahajlását a fal mellett. A 3.42 ábrán a kialakult áramvonalak láthatóak hőmérséklet szerint színezve, ezek alapján a precesszáló örvénymagok beazonosíthatóak.

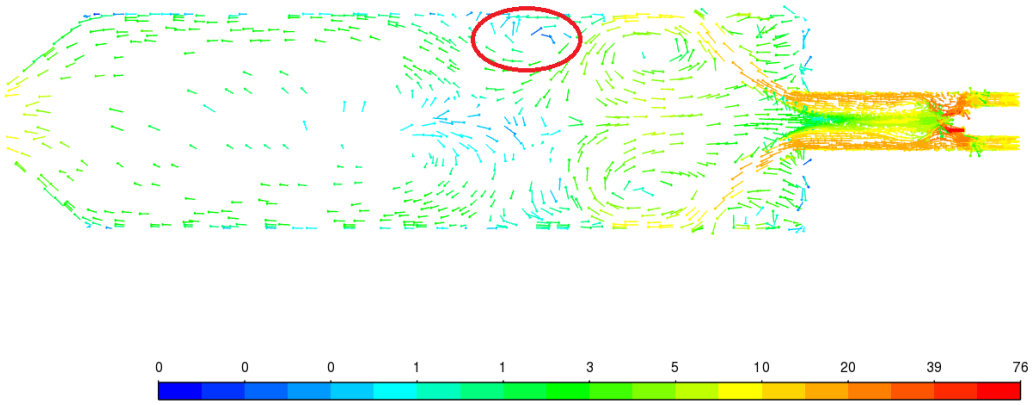


3.41. ábra. Átlagolt sebességvektorok a sebesség magnitúdó [m/s] szerint színezve a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén logaritmikus skálán ábrázolva.



3.42. ábra. Áramvonalak hőmérséklet szerint színezve a Glarborg (balra) és az Okafor (jobbra) reakciómechanizmusok esetén.

A 3.37 ábrán látható, hogy az Okafor mechanizmus esetén a láng kisebb mértékben nyúlik be a keverőcsőben, mint a Glarborg mechanizmus esetén. A Glarborg mechanizmus az oxidáció során a képződő komponenseket pontatlanul határozza meg, ahogy az a 3.38 és 3.39 ábrák alapján meg lett állapítva. A képződő H_2 és OH komponensek kezdőpontjának ugyanott kellene lennie mindkét mechanizmus esetében. A 3.41 ábrán észrevehető, hogy a külső és belső recirkulációs zónák mindkét reakciómechanizmus esetében létrejöttek, viszont a Glarborg mechanizmus esetén a belső recirkulációs zónát követően egy örvénymező is kialakult, amely hibásnak vélhető. Ez a 3.43 ábrán látható, ahol piros ellipszissel csak a helytelennek vélt örvénymező van jelölve. Ezek alapján levonható a következtetés, hogy Okafor reakciómechanizmusa pontosabb eredményt ad, mint Glarborg reakciómechanizmusa.



3.43. ábra. Átlagolt sebességvektorok [m/s] a Glarborg reakciómechanizmus esetén.

4. fejezet

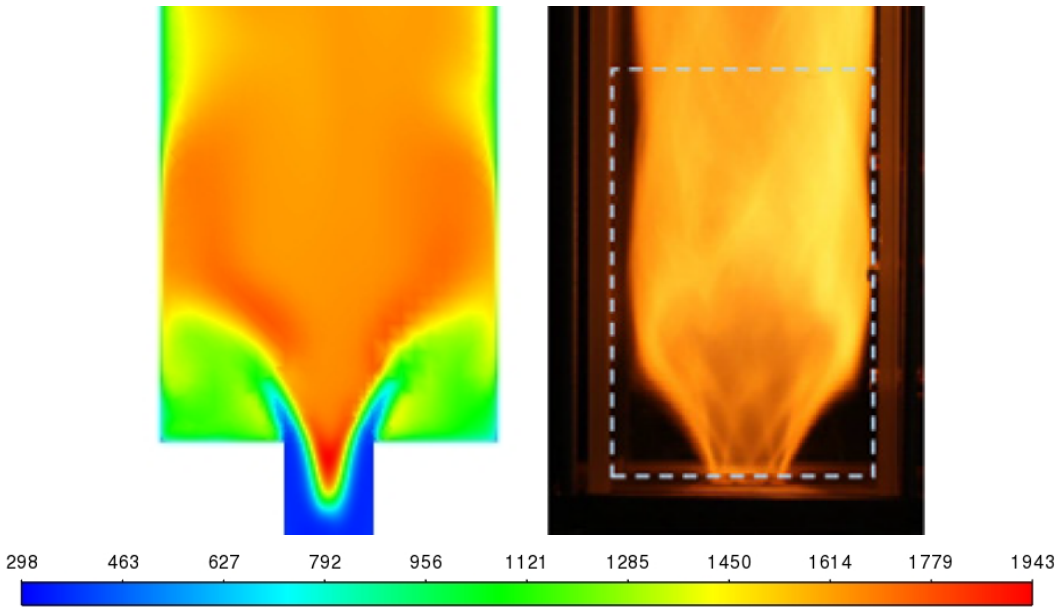
Modellvalidáció

A modelleket irodalomban megtalálható kísérleti eredményekkel validáltam. Az irodalmi elrendezéseknél olyat kerestem, ahol a perdületszám, a légfelesleg, tüzelési teljesítmény megegyezik az általam vizsgáltakkal, valamint a geometriai méretek hasonlók. Ezen felül az NO_x kibocsátást szintén irodalmi mérésekkel hasonlítottam össze. Az alábbi alfejezetekben tehát a modelljeim validációját részletezem, összehasonlítva a korábban megfelelőnek ítélt FGM Okafor és C-egyenlet eseteit.

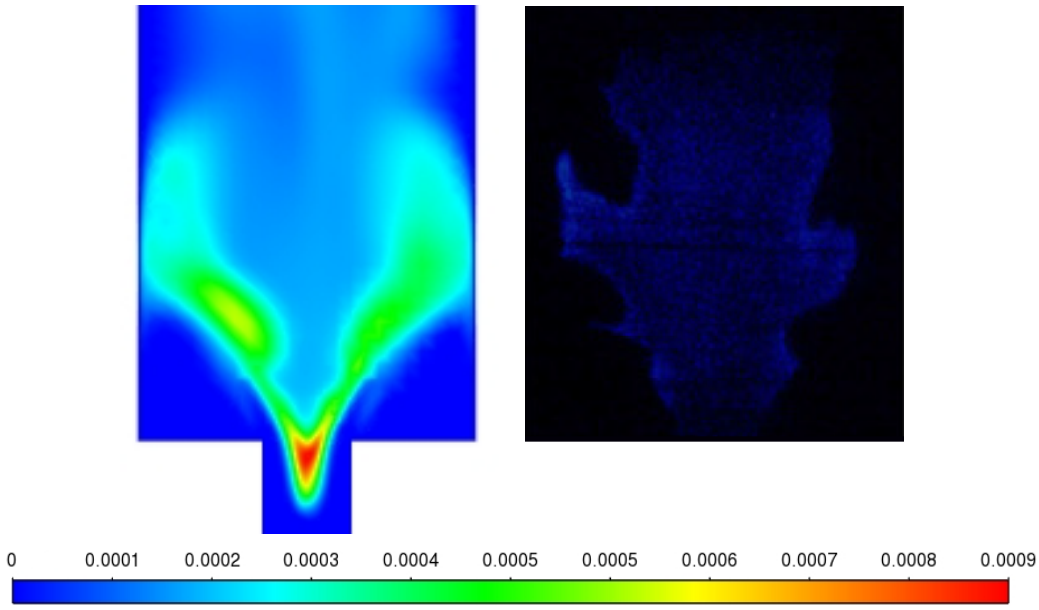
4.1. Lángalakok összehasonlítása

A tüzelésmodellek validálásának egy módja a szimulációs eredmények OH eloszlásának összehasonlítása mérési adatokkal [58]. Az OH eloszlást Planar Laser Induced Fluorescence (OH-PLIF) módszerrel rögzítették [41] hivatkozott forrásban, mely alapján a szimulációim validáltam. A vizsgált tüzelésmodellek közül a C-egyenleten alapuló, és az FGM Okafor modellek eredményei szolgáltatták a kísérletihez legközelebbi eredményt, így ezen modelleket validáltam és állapítottam meg, mely modell az elfogadhatóbb.

A 4.1 és 4.2 ábrákon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell OH- és hőmérséklet-eloszlása látható. Az irodalmi mérésképet összevetve a szimuláció eredményeként szolgáló hőmérséklet-eloszlás alapján levonható a következtetés, hogy a láng V alakját sikerült leírni. A mérésképen látható, hogy a sarkokba nem terjedt a láng, míg a hőmérsékletmező 1100 K körüli hőmérséklettel rendelkezik. Ennek magyarázata az oxidáció során felszabaduló hőmennyiségnek a terjedése. A számított OH eloszlást összehasonlítva a kísérleti mérés OH-PLIF képével megállapítható, hogy a láng V alakját helyesen sikerült a szimuláció során visszakapni. Az OH képződés a keverő cső végén a legintenzívebb a számítás eredményei alapján.

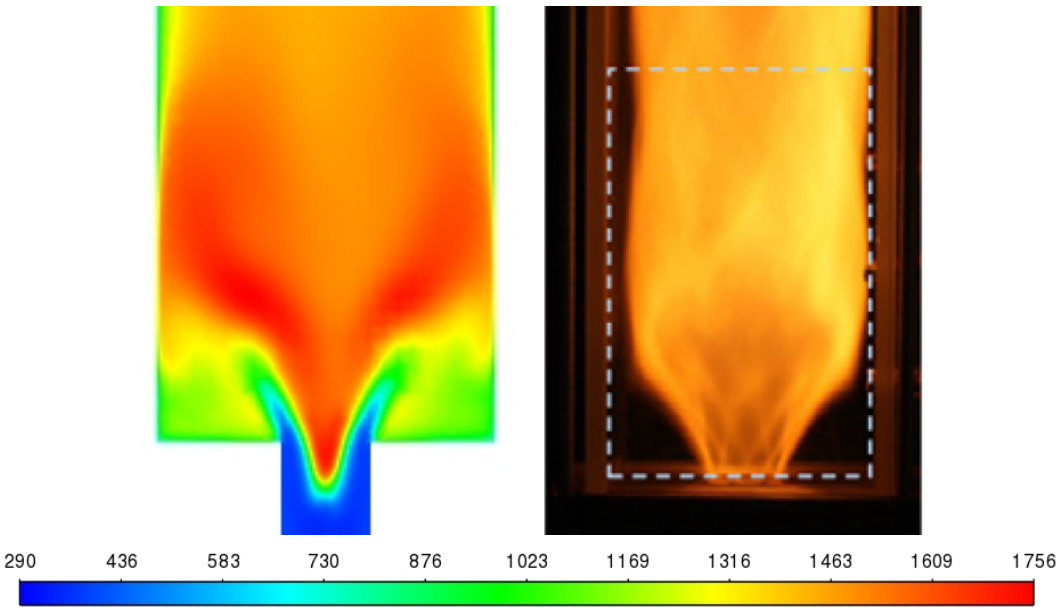


4.1. ábra. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell hőmérséklet-eloszlása [K], jobb oldalon az irodalmi mérés lángképe [41].

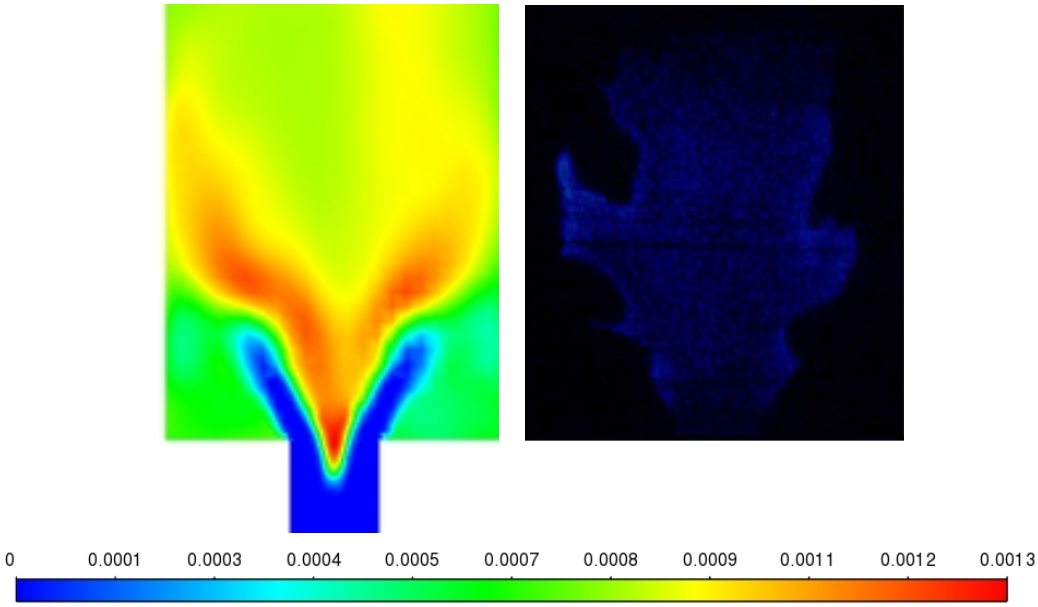


4.2. ábra. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell OH eloszlása [kg/kg], jobb oldalon a kísérleti égés pillanatnyi OH-PLIF képe [41].

A 4.3 és 4.4 ábrákon az FGM Okafor modellen alapuló tüzelésmodell OH- és-hőmérséklet eloszlása látható. A számítás során meghatározott hőmérsékletmező és az irodalmi méréskép alapján megállapítható, hogy mindkét esetben V alakot vett fel a láng, amely a modell pontosságát validálja. A szimuláció eredményei alapján kijelenthető, hogy a gyulladás kezdőpontja a keverőcső végére tehető. A sarkokban kialakult hőmérsékletmező a hőterjedésnek köszönhető, odáig nem terjedt a lángfront, ahogy a mérésképeken sem. Az OH eloszlás jól korrelál a számítás és az irodalmi mérés során létrejött hőmérséklet-eloszlással, azonosítható a láng V alakja. Az OH képződés intenzitása az égőtér elejében szétterjedve veszi fel a maximális értékét, nem koncentrálódik egy kis pontba, mint a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell eredményénél.



4.3. ábra. Bal oldalon az FGM modellen alapuló tüzelésmodell hőmérséklet-eloszlása [K], jobb oldalon az irodalmi mérés lángképe [41].



4.4. ábra. Bal oldalon a C-egyenleten alapuló tüzelésmodell OH eloszlása [kg/kg], jobb oldalon a kísérleti égés pillanatnyi OH-PLIF képe [41].

A 4.1 és 4.4 ábrák alapján megállapítható, hogy a numerikus számítás eredményei azonos lángalakot írnak le, mint a kísérleti eredmények. Az FGM modell esetében intenzívebb az OH képződés a tüzelőtérben, vagyis a hőfelszabadulás így nem csak a keverőcső végére tehető, ami már jól korrelál a képpel.

4.2. Adiabatikus lánghőmérséklet

A validáció során a következő mennyiség amit vizsgáltam, az az adiabatikus lánghőmérséklet volt. [51] hivatkozás mérései alapján az adiabatikus lánghőmérséklet 1725 K-nek vehető 0,7-es tüzelőanyagfelesleg-tényező mellett 1 bar nyomáson. Az adiabatikus láng-

hőmérséklet analitikusan is számítható a (4.1) egyenlet szerint.

$$t_{ad} = \frac{\dot{Q}_{fuel}}{(\dot{m}_{fg}) \cdot \overline{c}_{pfg}} + t_{ref} \tag{4.1}$$

ahol t_{ref}: a tüzelőanyag kezdeti hőmérséklete, 20°C,

$\dot{m}_{fg}$: a füstgáz tömegárama, ami a belépő levegő és tüzelőanyag tömegáramának az összege,

$\overline{c}_{pfg}$: pedig az átlagos füstgázfajhő. Ezen mennyiséget a számítás során kapott eredmény alapján határoztam meg úgy, hogy az égéstér kilépő felületén tömeg szerint átlagoltam a fajhőt.

Így az analitikusan számított adiabatikus lánghőmérséklet 1677 K-nek adódott. Az égőtér első felében a hőmérséklet tömeg szerint átlagolt térfogati integrálját vettem, ami az összehasonlítás alapjául szolgált. Így az egyes tüzelésmodellek által meghatározott maximális lánghőmérsékleteket és az átlagolt hőmérsékleteket vetettem össze az irodalmi és az analitikusan számolt értékekkel. Az átlagolt hőmérsékletek, az irodalmi és analitikusan számított értékekkel összehasonlítva a 4.1 táblázatban láthatók.

4.1. táblázat. A tüzelésmodellek, irodalmi forrás és analitikus számítás alapján meghatározott hőmérsékletek.

	Analitikus	Okafor FGM	C-egyenlet	[59]	Glarborg FGM
Maximális hőmérséklet [K]	1677	1756	1943	1725	1896
Átlagolt hőmérséklet [K]	-	1415	1503	-	1376

A 4.1 táblázat alapján megállapítható, hogy a maximális lánghőmérséklet értéke az Okafor reakciómechanizmuson alapuló FGM modellnél közelebb van az adiabatikus lánghőmérséklethez és az irodalmi értékhez, mint a többi esetben. A tömeg szerint átlagolt hőmérsékletek közül a C-egyenleten alapuló modellé lett a legmagasabb. Az Okafor reakciómechanizmusán alapuló számítás eredményénél magasabb lett az átlaghőmérséklet, mint a Glarborg reakciómechanizmusán alapuló modellé, annak ellenére, hogy ott magasabb volt a maximális hőmérséklet. Ennek oka, hogy a Glarborg mechanizmusnál az égés már a keverőcsőben megkezdődik, míg az Okafor mechanizmusnál az az égőtérben játszódik le. Az analitikusan számított értékhez képest több, mint 250 K-nel magasabb a maximális lánghőmérséklet a C-egyenleten alapuló modell esetében, ami a modell pontatlanságát tükrözi. A számítások során harmadfajú peremfeltételeket adtam meg a falakon, és a hőmérsékleti sugárzást, a lokális viszonyokat és a keveredést is figyelembe vettem így a maximális lánghőmérsékletnek különböznie kell az adiabatikus lánghőmérséklettől, de nem nagy mértékben.

4.3. Kibocsátás vizsgálata

A validáció következő vizsgált paramétere az NO_x kibocsátás értéke volt. A [60] és [55] hivatkozásokban szegényen előkevert perdületes ammónia égésének vizsgálták a kibocsátását. [60] hivatkozásban 1,11-es légfelesleg tényező mellett az égőtér sugárirányа mentén 1500-2000 ppm közötti NO_x kibocsátást mértek. A [55] hivatkozásban 1,11-es légfelesleg tényező mellett 1700 ppm körüli értéket, 1,25-ös légfelesleg tényező mellett pedig 1300 ppm körüli NO_x kibocsátás értéket mértek. Az Okafor reakciómechanizmusán alapuló

FGM modellnél pedig a kilépő felületen tömeg szerint átlagolt NO_x kibocsátás értéke 3128 ppm volt esetemben 1,43-as légfelesleg tényező mellett. Magas légfelesleg tényezők esetén, amit jelen dolgozatban is alkalmaztam, nehéz begyújtani az ammóniát, ezért is van kevés eredmény róla. [61] hivatkozás alapján a felső gyulladási határ 1,38-as légfelesleg tényezőnél van. Figyelembe véve, hogy az égőtér geometriák eltérőek voltak, és a tüzelési paraméterek sem egyeztek teljes mértékben, így az a következtetés vonható le, hogy az Okafor reakciómechanizmusán alapuló FGM modell nagyságrendileg biztosan helyes NO_x kibocsátás értéket szolgáltat.

A C-egyenleten alapuló tüzelésmodell nem alkalmas NO_x kibocsátás becslésére, mivel a PDF tábla létrehozásakor a modell a tüzelőanyag és oxidálószer alapján határozza meg az égést leíró komponenseket, amelyek száma csekély, utólagosan nem adhatóak komponensek a modellhez. Ezen kívül a C-egyenleten alapuló modellnél a maximális hőmérséklet magas volt, és az intenzív égés a keverőcső végére koncentrálódott. A [30] hivatkozásban egy egyszerűbb geometriájú égőben szimulálták az ammónia égését különböző reakciómechanizmusok alkalmazásával. A tanulmány eredménye az lett, hogy Okafor reakciómechanizmusát használva a részletes kémia modelljével az ammónia égése jól leírható. Dolgozatom eredményei alapján az a következtetés is levonható, hogy az FGM modell az Okafor reakciómechanizmus használatával is megoldás az ammónia oxidációjának modellezésére, amely jóval kisebb számítási kapacitásigényű, mint a részletes reakciómechanizmuson alapuló tüzelésmodell.

5. fejezet

Összefoglalás

Dolgozatomban ammónia tüzelésének numerikus szimulációjával foglalkoztam egy kísérleti perdületes égőben Ansys Fluent szoftverkörnyezetben. A Fluent beépített égésmodelljeit vizsgáltam, annak érdekében, hogy a leginkább alkalmas modellt felépítsem, mely majd használható lesz több paraméter vizsgálatára, akár hidrogén-ammónia, metán-ammónia keverékekhez. A cél ezen felül egy olyan robusztus modell felépítése volt, mellyel az eredmények jóval gyorsabban adódnak, összehasonlítva egy milliós cellaszámú sokkomponensű részletes mechanizmus esetén, és az eredményeken ez a robusztusság ne rontson. A modell peremfeltételeit [41] hivatkozásban megtalálható értékek alapján határoztam meg, ugyanezen hivatkozás volt a validáció alapja is. Tranziens számításokat végeztem, és az idő-átlagolt eredményeket hasonlítottam össze. Munkámmal a tüzeléstechnikai kutatócsoport kutatását támogattam.

A számítások során két hálót alkalmaztam, a teljes modell hálóját, mely tartalmazta a perdítőelemet, és az előzetes modell hálóját, amely nem. Utóbbinál a perdítőelem hatását a belépő keverék sebességkomponenseinek meghatározásával értem el. Ennek oka a modell egyszerűsítéséére való törekvés volt. Az előzetes modell hálójával kis számítási kapacitásigénnyel tudtam robusztus modellt alkotni az ammónia égésének leírására, míg a teljes modell hálójával nagyobb számítási kapacitást alkalmazva tudtam figyelembe venni a perdítőelemet. A számítások során négy tüzelésmodellt hasonlítottam össze:

- C-egyenleten alapuló modell, ahol a keverék idő- és helybeli paramétereit egy termokémiai valószínűségi sűrűségfüggvény (PDF) becsli.
- ECFM modell, amely az előző modell kibővítése azáltal, hogy még egy transzport-egyenletet old meg a láng felületének a sűrűségére.
- FGM modell, amely flamelet keveréket hoz létre részletes mechanizmus 1D-ben történő megoldása során, melyekből a termokémiai valószínűségsűrűség függvények meghatározhatók, melyek alkalmasak a keverék idő- és helybeli paramétereinek leírására.
- EDC modell, amely figyelembe veszi a részletes kémiai mechanizmusokat a turbulens áramlásoknál, és oldja meg a transzport egyenleteket minden egyes komponensre.

Az egyszerűsített modell nem adta vissza a valóságot, így az irodalmi méréseket megközelítő eredményt, ebből kifolyólag a tényleges geometriával folytattam a vizsgálatot. Az EDC modellt Glarborg [12] reakciómechanizmusával vizsgáltam, amely stacionárius esetben jól közelítette a kísérleti eredményeket, a tranziens számításnál a láng V alakja

létrejött, viszont az égőtér végében is égett, amely ellentmond a kísérleti eredményeknek. Az FGM modellnél Glarborg és Okafor [16] reakciómechanizmusát vizsgáltam. A reakciómechanizmusok közötti eltérés tranziens esetben volt jelentős. A Glarborg reakciómechanizmust használó esetben a keverék már a keverőcső felénél begyulladt, a belső recirkulációs zónákat követően egy extra örvénymező jött létre az irodalmi eredménnyel összevetve, és a maximális hőmérséklet értéke túlzott mértékben haladta meg az adiabatikus lánghőmérsékletet. Az Okafor reakciómechanizmust használó esetben a láng V alakja, a recirkulációs zónák létrejöttek, és a maximális hőmérséklet is közelítette az adiabatikus lánghőmérsékletet, így levonható a következtetés, hogy az Okafor reakciómechanizmus használata pontosabb eredményt ad FGM modell esetén, mint Glarborg-é. A C-egyenleten alapú modellnél a lamináris lángsebességet [14] alapján határoztam meg. A stacionárius és tranziens számítás során is a kísérletivel egyező lángalak jött létre a teljes modell hálóján ellentétben az előzetes modellel. Ezen okból levonható a következtetés, hogy a perdítőelem hatásának modellezése a belépő keverék sebességkomponenseinek meghatározásával helytelen eredményhez vezethet ammónia esetén.

A C-egyenleten alapuló és FGM tüzelésmodellek OH- és hőmérséklet-eloszlás képeit összevetettem a kísérletivel a modellek validációja céljából. A C-egyenleten alapuló modell esetén az OH képződés intenzíven csak a keverőcső végében, míg az FGM modell esetén a tüzelőtérben volt jelen. Az adiabatikus lánghőmérsékletet az FGM-en kívüli modellek jelentős mértékben meghaladták. Ezen kívül az NO_x képződés leírására a C-egyenleten alapuló modell nem alkalmas, míg az FGM modell kísérleti eredményekkel összvetve [55, 60] nagyságrendileg helyes eredményt adott. Levonható a következtetés, hogy az FGM modell az Okafor reakciómechanizmus használatával képes az ammónia égésének leírására. Az Okafor reakciómechanizmus az alsó gyulladási határon is jó eredményt ad [61]. Dolgozatom alapján az is megállapítható, hogy az FGM modell Okafor reakciómechanizmusával használva jól leírja az ammónia égését, amely egy kisebb számítási kapacitást igénylő modell a részletes kémiával szemben. A reakciómechanizmus képes NH_3/CH_4 és NH_3/H_2 keverékek égésének modellezésére is. Ennek fontossága, hogy az ammónia égése során felmerülő gyulladási, magas NO_x képződési, lángstabilitási problémák CH_4 és H_2 hozzáadásával javíthatóak [62].

Hivatkozások

[1] CO2 emissions – Global Energy Review 2021 – Analysis - IEA.

[2] A. Valera-Medina, F. Amer-Hatem, A. K. Azad, I. C. Dedoussi, M. de Joannon, R. X. Fernandes, P. Glarborg, H. Hashemi, X. He, S. Mashruk, J. McGowan, C. Mounaim-Rouselle, A. Ortiz-Prado, A. Ortiz-Valera, I. Rossetti, B. Shu, M. Yehia, H. Xiao, and M. Costa. Review on Ammonia as a Potential Fuel: From Synthesis to Economics. *Energy & Fuels*, 35(9):6964–7029, may 2021.

[3] Frances Bird, Alex Clarke, Paul Davies, and Elizabeth Surkovic. *Ammonia : fuel and energy store.* 2020.

[4] Petar Djinović and Ferdi Schüth. Chapter 12 - Energy Carriers Made from Hydrogen. In Patrick T Moseley and Jürgen Garche, editors, *Electrochemical Energy Storage for Renewable Sources and Grid Balancing*, pages 183–199. Elsevier, Amsterdam, 2015.

[5] Trevor Brown. Updating the Literature: Ammonia Consumes 43% of Global Hydrogen;. *Ammonia Energy Association: Brooklyn, NY*, 2020.

[6] Douglas R. MacFarlane, Pavel V. Cherepanov, Jaecheol Choi, Bryan H.R. Suryanto, Rebecca Y. Hodgetts, Jacinta M. Bakker, Federico M. Ferrero Vallana, and Alexandr N. Simonov. A Roadmap to the Ammonia Economy. *Joule*, 4(6):1186–1205, 2020.

[7] M.; Banares-Alcantara, R.; Dericks, G., III; Fiaschetti and S. Grunewald, P.; Lopez, J. M.; Tsang, E.; Yang, A.; Ye, L.; Zhao. Analysis of Islanded Ammonia-Based Energy Storage Systems. page 1150, 2015.

[8] Kevin H.R. Rouwenhorst, Aloijsius G.J. Van der Ham, Guido Mul, and Sascha R.A. Kersten. Islanded ammonia power systems: Technology review & conceptual process design. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114(April 2019), 2019.

[9] Ganzhou Wang, Alexander Mitsos, and Wolfgang Marquardt. Conceptual design of ammonia-based energy storage system: System design and time-invariant performance. *AIChE Journal*, 63(5):1620–1637, 2017.

[10] Yusuf Bicer and Ibrahim Dincer. Life cycle assessment of ammonia utilization in city transportation and power generation. *Journal of Cleaner Production*, 170:1594–1601, 2018.

[11] Matthew J. Palys and Prodromos Daoutidis. Using hydrogen and ammonia for renewable energy storage: A geographically comprehensive techno-economic study. *Computers and Chemical Engineering*, 136:106785, 2020.

[12] Peter Glarborg, James A. Miller, Branko Ruscic, and Stephen J. Klippenstein. Modeling nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 67:31–68, jul 2018.

[13] Rui Li, Alexander A. Konnov, Guoqiang He, Fei Qin, and Duo Zhang. Chemical mechanism development and reduction for combustion of NH3/H2/CH4 mixtures. *Fuel*, 257(August):116059, 2019.

[14] Bowen Mei, Xiaoyuan Zhang, Siyuan Ma, Mingli Cui, Hanwen Guo, Zhihao Cao, and Yuyang Li. Experimental and kinetic modeling investigation on the laminar flame propagation of ammonia under oxygen enrichment and elevated pressure conditions. *Combustion and Flame*, 210:236–246, dec 2019.

[15] Hisashi Nakamura, Susumu Hasegawa, and Takuya Tezuka. Kinetic modeling of ammonia/air weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile. *Combustion and Flame*, 185:16–27, 2017.

[16] Ekenechukwu Chijioke Okafor, Yuji Naito, Sophie Colson, Akinori Ichikawa, Taku Kudo, Akihiro Hayakawa, and Hideaki Kobayashi. Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism. *Combustion and Flame*, 204:162–175, 2019.

[17] Gani Issayev, Binod R. Giri, Ayman M. Elbaz, Krishna P. Shrestha, Fabian Mauss, William L. Roberts, and Aamir Farooq. Combustion behavior of ammonia blended with diethyl ether. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1):499–506, 2021.

[18] A. Bertolino, M. Fürst, A. Stagni, A. Frassoldati, M. Pelucchi, C. Cavallotti, T. Faravelli, and A. Parente. An evolutionary, data-driven approach for mechanism optimization: theory and application to ammonia combustion. *Combustion and Flame*, 229:111366, 2021.

[19] Hua Xiao, Micheal Howard, Agustin Valera-Medina, Stephen Dooley, and Philip J. Bowen. Study on Reduced Chemical Mechanisms of Ammonia/Methane Combustion under Gas Turbine Conditions. *Energy and Fuels*, 30(10):8701–8710, 2016.

[20] Yuanjie Jiang, Andrea Gruber, Kalyanasundaram Seshadri, and Forman Williams. An updated short chemical-kinetic nitrogen mechanism for carbon-free combustion applications. *International Journal of Energy Research*, 44(2):795–810, 2020.

[21] Yuze SUN, Tao CAI, Mohammad SHAHSAVARI, Dakun SUN, Xiaofeng SUN, Dan ZHAO, and Bing WANG. RANS simulations on combustion and emission characteristics of a premixed NH3/H2 swirling flame with reduced chemical kinetic modeltable 1. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2021.

[22] Ying Huang and Vigor Yang. Dynamics and stability of lean-premixed swirl-stabilized combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(4):293–364, 2009.

[23] Xutao Wei, Meng Zhang, Zhenhua An, Jinhua Wang, Zuohua Huang, and Houzhang Tan. Large eddy simulation on flame topologies and the blow-off characteristics of ammonia/air flame in a model gas turbine combustor. *Fuel*, 298(February):120846, 2021.

[24] Fluent Thoery Guide. Ansys Fluent Theory Guide. *ANSYS Inc., USA*, 15317(November):724–746, 2013.

[25] Meng Zhang, Zhenhua An, Liang Wang, Xutao Wei, Bieerlan Jianayihan, Jinhua Wang, Zuohua Huang, and Houzhang Tan. The regulation effect of methane and hydrogen on the emission characteristics of ammonia/air combustion in a model combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(40):21013–21025, jun 2021.

[26] Miguel C. Franco, Rodolfo C. Rocha, Mário Costa, and Mohamed Yehia. Characteristics of NH3/H2/air flames in a combustor fired by a swirl and bluff-body stabilized burner. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4):5129–5138, 2021.

[27] Peter Glarborg, Maria U Alzueta, Kim Dam-Johansen, and James A Miller. Kinetic Modeling of Hydrocarbon/Nitric Oxide Interactions in a Flow Reactor. *Combustion and Flame*, 115(1):1–27, 1998.

[28] Hrvoje Mikulčić, Jakov Baleta, Xuebin Wang, Jin Wang, Fengsheng Qi, and Fan Wang. Numerical simulation of ammonia/methane/air combustion using reduced chemical kinetics models. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(45):23548–23563, 2021.

[29] Agustin Valera-Medina, Richard Marsh, Jon Runyon, Daniel Pugh, Paul Beasley, Timothy Hughes, and Phil Bowen. Ammonia–methane combustion in tangential swirl burners for gas turbine power generation. *Applied Energy*, 185:1362–1371, 2017.

[30] Jakov Baleta, Jin Wang, and Fan Wang. Comparison of reduced chemical kinetics models of ammonia combustion in the experimental burner. (x):1–11.

[31] Rodolfo Cavaliere da Rocha, Mário Costa, and Xue-Song Bai. Chemical kinetic modelling of ammonia/hydrogen/air ignition, premixed flame propagation and NO emission. *Fuel*, 246:24–33, 2019.

[32] Charles Lhuillier, Pierre Brequigny, Francesco Contino, and Christine Mounaïm-Rousselle. Experimental investigation on ammonia combustion behavior in a spark-ignition engine by means of laminar and turbulent expanding flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4):6671–6678, 2021.

[33] Kenneth K. Kuo and Ragini Acharya. *Fundamentals of Turbulent Multi-Phase Combustion*. 2012.

[34] Ansys Drive Canonsburg. ANSYS Fluent User ' s Guide. (January), 2021.

[35] Hideaki Kobayashi, Akihiro Hayakawa, K.D. Kunkuma A. Somarathne, and Ekenechukwu C. Okafor. Science and technology of ammonia combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(1):109–133, 2019.

[36] J A van Oijen, A Donini, R J M Bastiaans, J H M ten Thije Boonkkamp, and L P H de Goey. State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 57:30–74, 2016.

[37] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Mille, and M. E. Coltrin. A Software Package for the Evaluation of Gas-Phase, Multicomponent Transport Properties. *Design*, (September):1–51, 2000.

[38] Viktor Józsa, Gyöngyvér Hidegh, Attila Kun-Balog, Jo-Han Ng, and Cheng Tung Chong. Ultra-low emission combustion of diesel-coconut biodiesel fuels by a mixture temperature-controlled combustion mode. *Energy Conversion and Management*, 214:112908, 2020.

[39] Beér JM and Chigier NA. *Combustion aerodynamics*. Robert E. Krieger Publishing Company, London, 1972.

[40] Daniel Fuzesi and Viktor Jozsa. Numerical analysis of biogas combustion in a lean premixed swirl burner. In *2019 7th International Youth Conference on Energy (IYCE)*, pages 1–6. IEEE, jul 2019.

[41] Meng Zhang, Xutao Wei, Jinhua Wang, Zuohua Huang, and Houzhang Tan. The blow-off and transient characteristics of co-firing ammonia/methane fuels in a swirl combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4):5181–5190, 2021.

[42] Bernhard Weigand and Nimai-Kumar Mitra. M9 Convective Heat Transfer at High Velocities. In *VDI Heat Atlas*, pages 1363–1374. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.

[43] D Füzesi, D Csemány, C T Chong, and V Józsa. Numerical modeling of waste cooking oil biodiesel combustion in a turbulent swirl burner. pages 2–7.

[44] EW Lemmon, MO McLinden, and DG Friend. Thermophysical Properties of Fluid Systems, NIST Standard Reference Database Number 69 n.d. In *NIST Chemistry WebBook*. 1997.

[45] LumaSense Technologies. *Table of emissivity of various surfaces*. Mikron Instrument Company, Inc., Schaffhausen, 2003.

[46] ANSYS. 5 Best Practices for Gas Turbine Combustion Meshing Using Ansys Fluent. pages 1–6, 2020.

[47] Yu Song, Hamid Hashemi, Jakob Munkholt Christensen, Chun Zou, Paul Marshall, and Peter Glarborg. Ammonia oxidation at high pressure and intermediate temperatures. *Fuel*, 181:358–365, oct 2016.

[48] Xu Wen, Hanhui Jin, Oliver T. Stein, Jianren Fan, and Kun Luo. Large Eddy Simulation of piloted pulverized coal combustion using the velocity-scalar joint filtered density function model. *Fuel*, 158:494–502, 2015.

[49] Guillaume Lecocq, Stéphane Richard, Olivier Colin, and Luc Vervisch. Hybrid presumed pdf and flame surface density approaches for Large-Eddy Simulation of premixed turbulent combustion: Part 1: Formalism and simulation of a quasi-steady burner. *Combustion and Flame*, 158(6):1201–1214, 2011.

[50] K. Zhang, A. Ghobadian, and J. M. Nouri. Comparative study of non-premixed and partially-premixed combustion simulations in a realistic Tay model combustor. *Applied Thermal Engineering*, 110:910–920, 2017.

[51] C. Duynslaegher, H. Jeanmart, and J. Vandooren. Ammonia combustion at elevated pressure and temperature conditions. *Fuel*, 89(11):3540–3545, 2010.

[52] Wojciech Jerzak and Monika Kuźnia. Experimental study of impact of swirl number as well as oxygen and carbon dioxide content in natural gas combustion air on flame flashback and blow-off. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 29:46–54, 2016.

[53] Mohsen Amiri and Alireza Shirneshan. Effects of air swirl on the combustion and emissions characteristics of a cylindrical furnace fueled with diesel-biodiesel-n-butanol and diesel-biodiesel-methanol blends. *Fuel*, 268(February):117295, 2020.

[54] Abdulrahman A. Khateeb, Thibault F. Guiberti, Guoqing Wang, Wesley R. Boyette, Mourad Younes, Aqil Jamal, and William L. Roberts. Stability limits and NO emissions of premixed swirl ammonia-air flames enriched with hydrogen or methane at elevated pressures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(21):11969–11981, 2021.

[55] Akihiro Hayakawa, Yoshiyuki Arakawa, Rentaro Mimoto, K. D.Kunkuma A. Somarathne, Taku Kudo, and Hideaki Kobayashi. Experimental investigation of stabilization and emission characteristics of ammonia/air premixed flames in a swirl combustor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(19):14010–14018, 2017.

[56] C S Panoutsos, Y Hardalupas, and A.M.K.P. M K P Taylor. Numerical evaluation of equivalence ratio measurement using OH* and CH* chemiluminescence in premixed and non-premixed methane-air flames. *Combustion and Flame*, 156(2):273–291, 2009.

[57] Füzesi Dániel and Józsa Viktor. Perdületes égő üzemének modellezése 45-os és 60-os perdítőelemek esetén. *Energiagazdálkodás*, 2019. (60.(ISSN 0021-0757):2–7., 2019.

[58] D Alviso, J C Rolon, P Scouflaire, and N Darabiha. Experimental and numerical studies of biodiesel combustion mechanisms using a laminar counterflow spray premixed flame. *Fuel*, 153:154–165, 2015.

[59] Shixing Wang, Zhihua Wang, Ayman M Elbaz, Xinlu Han, Yong He, Mário Costa, Alexander A Konnov, and William L Roberts. Experimental study and kinetic analysis of the laminar burning velocity of NH3/syngas/air, NH3/CO/air and NH3/H2/air premixed flames at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 221:270–287, 2020.

[60] Ekenechukwu C. Okafor, Masaaki Tsukamoto, Akihiro Hayakawa, Kunkuma A. Somarathne, Taku Kudo, Taku Tsujimura, and Hideaki Kobayashi. Influence of wall heat loss on the emission characteristics of premixed ammonia-air swirling flames interacting with the combustor wall. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(4):5139–5146, 2021.

[61] F J Verkamp, M C Hardin, and J R Williams. Ammonia combustion properties and performance in gas-turbine burners. *Symposium (International) on Combustion*, 11(1):985–992, 1967.

[62] Wai Siong Chai, Yulei Bao, Pengfei Jin, Guang Tang, and Lei Zhou. A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 147(January):111254, 2021.