



Obliczenia numeryczne spalania paliw gazowych

Wojciech Pospolita

*Politechnika Wroclawska, Wydział Mechaniczno-Energetyczny
Zakład Mechaniki i Systemów Energetycznych
E-mail: wojciech.pospolita@pwr.edu.pl*

REKOMENDACJA: *prof. dr hab. inż. Krzysztof Jesionek*

STRESZCZENIE

Modelowanie numeryczne procesów spalania jest wymagającym zagadnieniem naukowym oraz inżynierskim ze względu na złożoność procesu. Jednakże konieczność ciągłego rozwoju energetyki w kierunku nisko emisyjnych technologii spalania powoduje, że modelowaniu tych procesów poświęca się coraz więcej uwagi. Wynika to m.in. z faktu, że zastosowanie metod numerycznych pozwala na uzyskanie znacznych oszczędności przy projektowaniu instalacji spalania paliw przez wyeliminowanie konieczności budowy kosztownych prototypów. Modelowanie numeryczne umożliwia także na wcześniejsze dokładne określenie zachowania układu przy zmianie paliwa. W artykule zaprezentowano zastosowanie modelu spalania dyfuzyjnego oraz najważniejsze równania, które go opisują. W drugiej części artykułu przedstawiono własne wyniki prac, w których wykorzystano komercyjny kod numeryczny Ansys Fluent 16.0 do modelowania procesu spalania mieszaniny gazu w hipotetycznej komorze spalania.

SŁOWA KLUCZOWE: *paliwa gazowe, obliczenia numeryczne, spalanie*

1. WPROWADZENIE

Spalanie paliw gazowych w celach energetycznych jest technologią, której rozwój pokrywa się z polityką ochrony środowiska. Proces ten charakteryzuje się bowiem wyższą sprawnością oraz mniejszą emisją zanieczyszczeń niż w przypadku konwencjonalnych elektrowni węglowych. Wpisuje się także w możliwość zwiększenia udziału energetyki rozproszonej w strukturze wytwarzania energii. Jest to możliwe w wyniku wykorzystania technologii spalania biogazu, gazu wysypiskowego lub gazu odpadowego z procesów przemysłowych. Jednakże w celu zaprojektowania optymalnej pod

względem sprawności instalacji, każdorazowo wymagane są czasochłonne i kompleksowe obliczenia. Dzięki rosnącej mocy obliczeniowej komputerów oraz stale udoskonalanym kodom numerycznym, większość tej pracy może zostać wykonana poprzez obliczenia numeryczne. Umożliwiają one badanie zjawisk fizycznych, których obserwacja w warunkach rzeczywistych wymagałaby drogiej i skomplikowanej aparatury lub byłaby niebezpieczna, jak w przypadku badań w warunkach wysokiego ciśnienia i temperatury. Metody te pozwalają również uchwycić procesy, których bezpośredni pomiar jest technicznie niewykonalny jak np. pola temperatur i prędkości wewnątrz komory spalania. W artykule przedstawiono przykład zastosowania komercyjnego kodu numerycznego Ansys Fluent 16.0 do symulowania reakcji spalania mieszaniny gazów. Uzyskane wyniki porównano z właściwościami gazów podawanymi w literaturze.

2. MODEL NUMERYCZNY SPALANIA GAZU

Spalaniem nazywamy szybko przebiegającą reakcję chemiczną, podczas której cząstki palne reagują z tlenem, czemu towarzyszy wydzielanie się ciepła oraz znaczny wzrost temperatury. Spalanie jest reakcją łańcuchową gdyż przejście reagentów od stanu początkowego do końcowego odbywa się wieloetapowo. Na skutek rozpadu cząstki palnej, powstałe produkty mogą łączyć się z reagentami początkowymi, jak i między sobą, podtrzymując przebieg reakcji. W przypadku modelowania reakcji spalania, istotny jest właściwy dobór modelu matematycznego. Znaczna część modeli znajduje bowiem swoje zastosowanie wyłącznie dla jednego typu spalania (dyfuzyjne, kinetyczne, dyfuzyjno-kinetyczne) oraz dla wybranego rodzaju paliwa [1].

2.1. Model Fluent Non-premixed Combustion

Zjawisko opisywane modelem Fluent Non-premixed Combustion odpowiada spalaniu dyfuzyjnemu, czyli takiemu w którym paliwo i powietrze łączy się dopiero w komorze spalania. Spotykane jest ono w bardzo szerokim spektrum urządzeń, od palników Bunsena po silniki Diesla. W trakcie prowadzenia obliczeń numerycznych tego procesu ważne jest określenie lokalnego stężenia palnych i niepalnych składników, zwyczajowo oznaczanego przez f i opisywanego równaniem:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (1)$$

gdzie: Z_i to stężenie masowe składnika i , $Z_{i,ox}$ utleniacza, a $Z_{i,fuel}$ paliwa. Wielkość ta wyrażona jest stosunkiem mas atomowych. Uwzględnia on pojedyncze atomy, jak i całe cząsteczki. Dzięki występowaniu turbulencji, która intensyfikuje mieszanie się składników, równanie określające lokalną koncentrację składnika (i) przyjmuje formę:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} f_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla f_i) \quad (2)$$

gdzie: \vec{v} jest wektorem prędkości, ρ – gęstością mieszaniny, D_i – współczynnikiem dyfuzji.

Oprócz znajomości lokalnej koncentracji składnika mieszanki, w celu rozwiązania postawionego zagadnienia istotne jest jednoznaczne wyznaczenie ciśnienia (p), temperatury (T), gęstości (ρ) oraz prędkości (\vec{v}) w przestrzeni obliczeniowej. Prędkość przepływu mieszanki obliczana jest z jednowymiarowego równania zachowania masy dla

ruchu ustalonego [3]:

$$\rho \vec{v} = \text{const} \quad (3)$$

W trakcie przebiegających w komorze spalania procesów chemicznych generowane są nowe związki (oznaczane indeksem i), które wpływają na lokalne zmiany w warunkach przepływowych. Zależność opisująca tę część zagadnienia to:

$$\rho \frac{\partial f_i}{\partial t} = D_i \rho \frac{\partial f_i}{\partial z} - \rho \vec{v} \frac{\partial f_i}{\partial z} + r_i \quad (4)$$

gdzie: \vec{v} – prędkość fazy gazowej, D_i – współczynnikiem dyfuzji, r_i – współczynnik szybkości przebiegu reakcji.

Temperaturę obliczono za pomocą równania określającego zasadę zachowania energii, dodatkowo rozszerzonego o część odpowiedzialną za reakcje chemiczne. W pracy [4] przedstawiono je następująco:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_i h_i r_i - (\rho v c_p + \sum_i j_i c_{pi}) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (5)$$

gdzie: λ – przewodność cieplna, c_p – ciepło właściwe.

Gęstość jest obliczona z równania stanu gazu:

$$\frac{p}{\rho} = RT \quad (6)$$

gdzie: T – temperatura mieszaniny, R – uniwersalna stała gazowa.

2.2. Wodór jako paliwo

Jednym z gazów palnych, które zostały wykorzystane w przeprowadzonej symulacji, był wodór. Do pozytywnych stron użycia wodoru jako paliwa w procesach energetycznych należy jego wysoka wartość opałowa, o rząd wielkości większa od innych paliw gazowych, oraz najwyższy stosunek energii do masy. Kolejną zaletę stanowi fakt, że produktem spalania wodoru jest para wodna, co skutkuje brakiem emisji zanieczyszczeń, zwłaszcza dwutlenku węgla [5]. Ze względu na fakt zawartość azotu w powietrzu i wysoką temperaturę spalania, produktem spalania są również NO_x , jednak poziom ich emisji jest znacznie niższy w porównaniu do tradycyjnych źródeł wytwarzania energii. Należy także mieć na uwadze, że wodór jest jednym z najbardziej rozpowszechnionych pierwiastków w przyrodzie, zatem jego zasoby są praktycznie niewyczerpalne. Do wad stosowania wodoru w celach energetycznych należy przede wszystkim jego wybuchowość oraz trudności w magazynowaniu. Niska energia zapłonu, wysoka energia wybuchu i szeroki zakres palności sprawiają, że wykorzystanie wodoru wiąże się z dużym ryzykiem eksplozji. Inicjacja wybuchu może nastąpić samoczynnie, np. w trakcie przetłaczania gazu, ze względu na jego niską przewodność elektryczną, która sprzyja kumulowaniu się ładunków elektrostatycznych. Wodór charakteryzuje się także wysoką prędkością spalania, o rząd wielkości wyższą od paliw węglowodorowych. Prędkość spalania rozumiana jest jako szybkość propagacji płomienia w mieszaninie palnej. Charakterystyka prędkości spalania wodoru w zależności od jego udziału w mieszaninie wykazuje, że nawet niewielka zmiana składu mieszaniny palnej spowoduje duże zmiany w procesie spalania. Przejawiać się to może spalaniem wybuchowym, które jest zjawiskiem negatywnym mogącym uszkodzić komorę spalania [6].

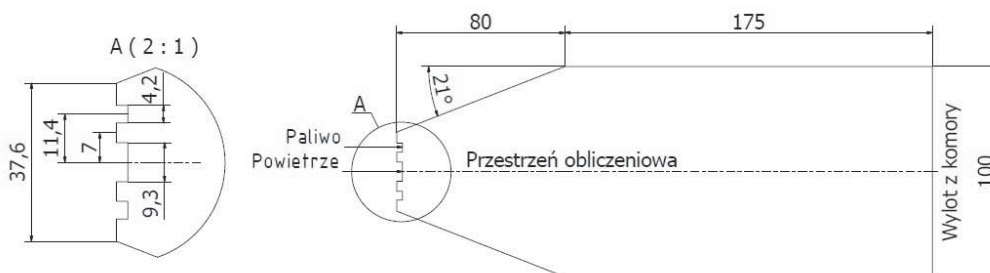
3. OBLICZENIA NUMERYCZNE SPALANIA MIESZANINY GAZÓW

Obliczenia prowadzono w formie symulacji numerycznej spalania mieszaniny metanu i wodoru w hipotetycznej, dwuwymiarowej komorze spalania. Skład mieszaniny zmieniano w ten sposób, że udział masowy wodoru w paliwie wynosił odpowiednio 0%, 25%, 50%, 75% i 100%. Skład mieszaniny został wybrany ze względu na duże różnice we właściwościach spalania obu gazów. Wodór charakteryzuje się najwyższą prędkością spalania spośród gazów [7] oraz dwukrotnie większym od metanu zapotrzebowaniem powietrza do spalania. Dzięki temu zwiększanie jego udziału w mieszance spowoduje widoczne efekty. Strumień powietrza był utrzymywany na stałym poziomie. Wybrane właściwości metanu i wodoru przedstawiono w tabeli 1.

Tabela 1: Wybrane właściwości wodoru i metanu [8]

Gaz	Prędkość spalania, m/s	Teoret. zapotrzeb. powietrza, kg/kg	Temper. spalania, K
Wodór	3,25	34,6	2235
Metan	0,448	17,2	2043

Sposób doprowadzania paliwa wykorzystany w obliczanym przypadku miał za zadanie symulować zjawisko spalania dyfuzyjnego. Schemat komory spalania wraz z wymiarami oraz umiejscowieniem warunków brzegowych został ukazany na rysunku 1.

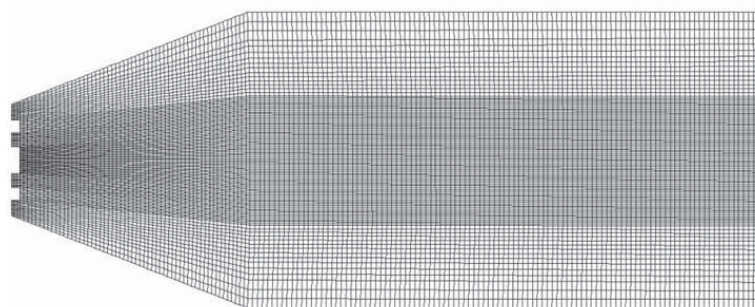


Rys. 1: Geometria komory spalania. Wymiary podano w mm

Bazując na opracowanej geometrii przygotowano strukturalną siatkę numeryczną. Siatka została dodatkowo zagęszczona w osi komory, gdyż występują tam zwykle największe gradienty prędkości oraz temperatury. Ostatecznie siatka numeryczna zawierała 187 000 elementów. Strukturę siatki przedstawiono na rys. 2. Istotną kwestią w przypadku obliczeń numerycznych jest dobór odpowiednich warunków brzegowych. Strumień powietrza oraz paliwa określony został prędkością na krawędziach wlotowych. Wylot z komory reprezentowany jest warunkiem Pressure–Outlet z określoną wartością ciśnienia, odpowiadającą ciśnieniu atmosferycznemu. Zestawienie warunków brzegowych zaprezentowano w tabeli 2.

Tabela 2: Zadane warunki brzegowe

Nazwa	Wartość	Jednostka
Inlet Air	0,5	m/s
Inlet Fuel	0,45	m/s
Outlet	101325,0	Pa

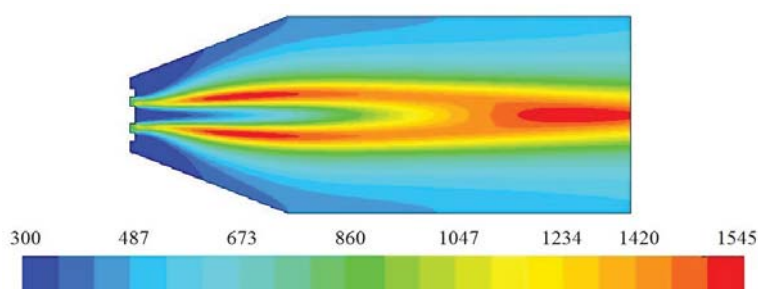


Rys. 2: Siatka numeryczna wykorzystana przy obliczeniach

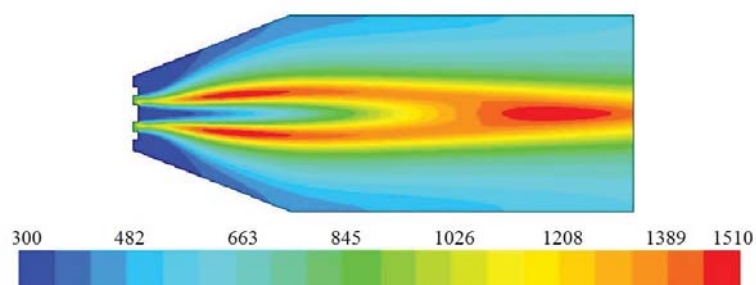
W celu skrócenia czasu obliczeń wprowadzono pewne uproszczenia. Do najważniejszych należy brak uwzględnienia zjawiska radiacji oraz strat ciepła do ścianek komory spalania.

4. WYNIKI

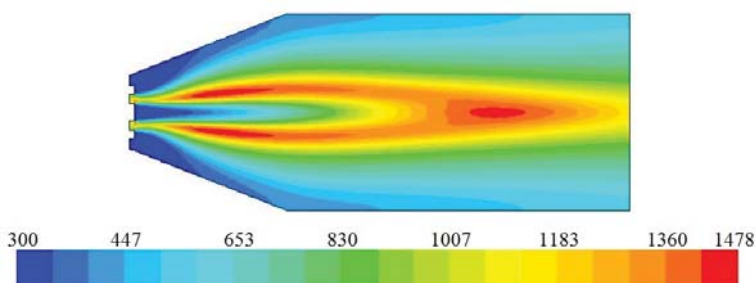
Przeprowadzone obliczenia numeryczne pozwoliły na uzyskanie rozkładu temperatury spalania dla analizowanych składów mieszanki paliwowo-powietrznej. Zgodnie z literaturą [9] najwyższa temperatura w komorze spalania występuje na granicy dyfuzji między powietrzem a paliwem. Jest to strefa bezpośredniego tworzenia i spalania się mieszanki. Przedstawiony kształt komory oraz sposób podania paliwa i powietrza nie wywołał w żadnym przypadku powstania stref recyrkulacji. Przejawia się to wyraźnym gradientem temperatury w obrębie wlotu powietrza i paliwa. Zwiększenie zawartości wodoru w paliwie znacząco skraca długość płomienia, rys. 3 i 7. Wynika to m.in. z faktu szybszego spalania się wodoru niż metanu oraz niedostatecznej ilości powietrza podawanego do spalania, a ta była utrzymywana na stałym poziomie. Wzrost zawartości wodoru powoduje też uzyskanie miejscowo najwyższej temperatury rys. 7, co stanowi konsekwencję wysokiej temperatury spalania wodoru. Jednakże w całej komorze spalania, średnia temperatura jest niższa wraz ze wzrostem zawartości wodoru. Gaz ten wymaga bowiem większej niż metan ilości powietrza do spalania.



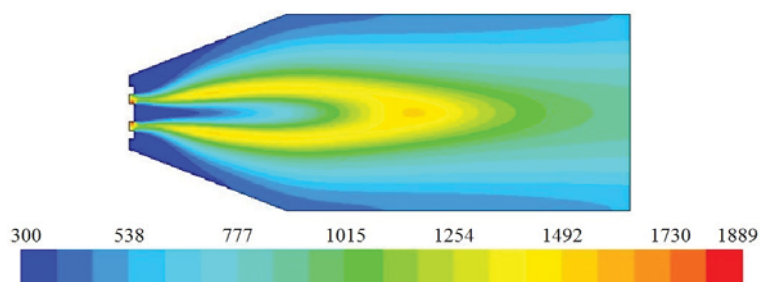
Rys. 3: Rozkład temperatury w komorze spalania dla 100% metanu.
Wartość podana w K



Rys. 4: Rozkład temperatury w komorze spalania dla 25% udziału wodoru w paliwie. Wartość temperatury podano w K

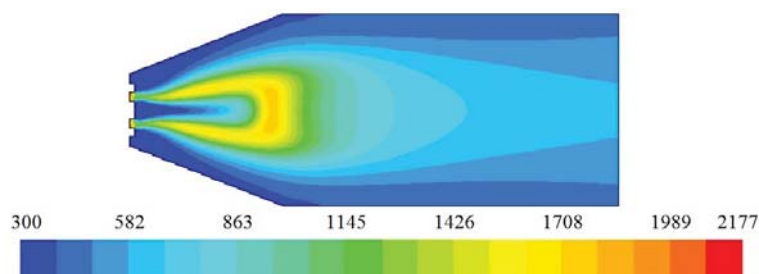


Rys. 5: Rozkład temperatury w komorze spalania dla 50% udziału wodoru w paliwie. Wartość temperatury podano w K

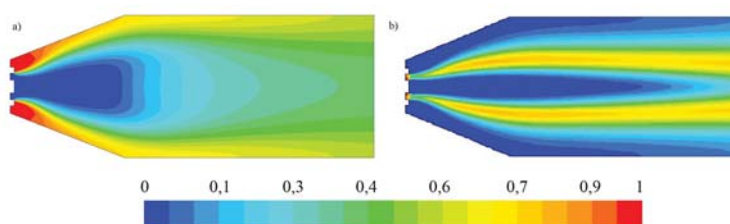


Rys. 6: Rozkład temperatury w komorze spalania dla 75% udziału wodoru w paliwie. Wartość temperatury podano w K

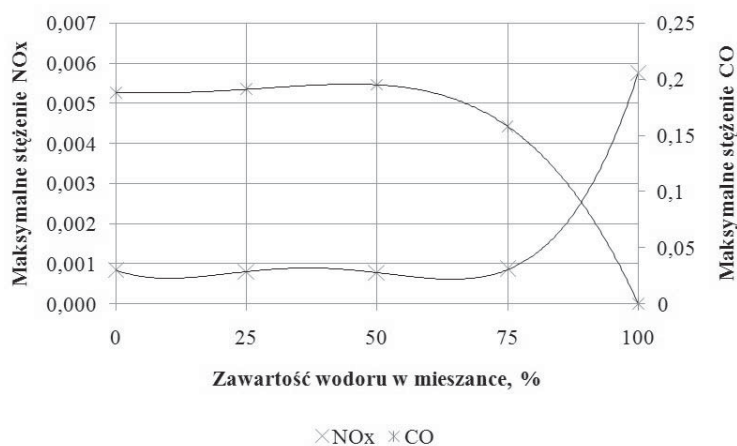
Zawartość niespalonego wodoru w obszarze wylotowym oznacza, że spalanie zachodziło w warunkach niestechiometrycznych. Część dostarczanego paliwa nie ulega spalaniu i wypływa z komory bez udziału w reakcji (rys. 8). Wzrost zawartości wodoru spowodował także nagłe zwiększenie emisji termicznych NO_x , w tym nagły skok tej wartości powyżej 1500 K, co odpowiada mechanizmowi Zeldowicza (rys. 9). Spadek emisji CO jest związany ze spadkiem zawartości metanu jako źródła węgla w mieszance. Otrzymane charakterystyki odpowiadają wynikom badań podanym w [10].



Rys. 7: Rozkład temperatury w komorze spalania dla 100% wodoru w paliwie. Wartość podana w K



Rys. 8: Udział masowy H_2 dla a) 100% wodoru, b) 100% metanu



Rys. 9: Stężenie NO_x i CO w zależności od zawartości wodoru w mieszance palnej

5. PODSUMOWANIE

Metody numeryczne stanowią dynamicznie rozwijającą się dziedzinę nauki. Wiąże się to ze wzrostem mocy obliczeniowej komputerów oraz korzyściami ekonomicznymi w postaci obniżenia kosztów wdrożenia nowych rozwiązań konstrukcyjnych przez przemysł. Istotnym obszarem zastosowania tych metod jest modelowanie numeryczne spalania gazu. Właściwy dobór modelu spalania oraz warunków brzegowych umożliwia uzyskanie wstępnych wyników pozwalających na późniejsze optymalne zaprojektowanie palników lub komór spalania. Potwierdzają to otrzymane rezultaty, które zgodne są z literaturą oraz krytyczną analizą inżynierską. Skład wybranej mieszanki palnej wyka-

zał także, że spalanie wodoru emituje mniej zanieczyszczeń do atmosfery niż spalanie paliw węglowodorowych. Oznacza to, że spalanie wodoru może stanowić alternatywę dla tych paliw w sektorze energetycznym.

LITERATURA

- [1] Poinot T., Veynate D., *Theoretical and Numerical Combustion, Second Edition*, Edwards, Philadelphia 2005.
- [2] *Ansys Fluent 16.0 Theory Guide*.
- [3] Bicsák A., Hornyák A., Veress A., *Numerical Simulation of Combustion Processes in a Gas Turbine*, AIP Conference Proceedings, **1493**(1), 140–148, 2012.
- [4] Obiegło A., Gass J., Poulidakos D., *Comparative Study of Modeling a Hydrogen Nonpremixed Turbulent Flame*, Combustion and Flame, **122**, 176–194, 2000.
- [5] Surygała J., *Wodór jako paliwo*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 2008.
- [6] Gieras M., *Komory spalania silników turbinowych. Organizacja procesu spalania*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2010.
- [7] Szkarowski A., *Spalanie gazów. Teoria, praktyka, ekologia*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 2014.
- [8] Kordylewski W., *Spalanie i paliwa*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2008.
- [9] Glassman I., Yetter R.A., *Combustion. Fourth edition*, Elsevier Inc. Londyn 2008.
- [10] Shih H.-Yi., Chi-Rong Liu., *A computational study on the combustion of hydrogen/methane blended fuels for a micro gas turbines*, Hydrogen Energy, **39**, 15103–15115, 2014.