

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta strojní



MORAVEC Zdeněk

Numerická simulace spalování a vývoje NO_x

(Numerical simulation of combustion and NO_x formation)

Liberec 1999

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta strojní

Katedra: energetických zařízení

Školní rok: 1997/98

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

pro: Zdeňka Moravce

obor: 23-17-8 Konstrukce strojů a zařízení

zaměření: Tepelná technika

Vedoucí katedry Vám ve smyslu zákona č. 172/1990 Sb. o vysokých školách určuje tuto diplomovou práci.

Název tématu: Numerická simulace spalování a vývoje NO_x

Zásady pro vypracování:

1. Formulujte spalovací modely popisující fyzikální chování spalování, proudění, přestup tepla a vývoj NO_x .
2. Uvažujte vstřikovací systémy použité v NEL peci.
3. Proved'te numerickou simulaci rychlostních a teplotních polí pro vnější a vnitřní vstřikovací systém
4. Proved'te numerickou analýzu a ověření výsledků simulace NO_x modelu pro vnitřní a vnější mód.

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Univerzitní knihovna
Voroněžská 1329, Liberec 1
PSC 461 17

KEZ/TT

58 s., 41 s. příl.

1/19/99 S

Tato diplomová práce je překladem anglické verze, která byla vypracována na Glasgow University, Scotland.

The present thesis is the translation of the English version delivered at Glasgow University, Scotland.



UNIVERSITY
of
GLASGOW



**TECHNICKÁ UNIVERZITA
V LIBERCI**

Department of Mechanical Engineering

Fakulta strojní

ANOTACE

Téma: Numerická simulace spalování a vývoje NO_x

Tato diplomová práce vytváří orientační směrnici pro vhodnou volbu spalovacích modelů v závislosti na vstřikovacím uspořádání hořáku a dále s pravděpodobnostních hustotových funkcí pro simulaci tvorby NO_x .

V diplomové práci jsou provedeny numerické simulace spalování a vývoje NO_x v polo-průmyslovém kotli NEL o výkonu 400kW, který spaluje zemní plyn. Predikce tří rychlostních profilů, teploty, koncentrací produktů spalování spolu s přenosem tepla a hmotnostními zlomky NO_x jsou vypočteny pro dva hořákové systémy, to jest vnější a vnitřní vstřikovací mód. Jako výpočtového nástroje je použito programového balíku CFX-F3D, release 4.1. Pro simulace spalování je použito Mixed-is-Burnt a Eddy Break-up spalovacích modelů při vstupujícím vzduchu o vířivostním čísle 0,9. Predikce jsou srovnány s experimentálními hodnotami, které byly poskytnuty National Engineering Laboratory, Scotland. Pro výpočty byla použita pracovní stanice SUN, Sparc-station 4.

ANNOTATION

Theme: Numerical simulation of combustion and NO_x formation

This thesis creates an orientation directive for a suitable option of combustion models depending on an injection arrangement of the burner and probability density functions for NO_x formation.

In the present thesis, predictions of combustion and NO_x formation are modelled in a semi-industrial NEL furnace, which is a natural gas fired furnace with a power of 400 kW. Predictions of three velocity components: temperature, main species concentrations and heat transfer together with mass fraction of NO_x are carried out in two burner arrangements, that is the peripheral and internal injection mode. The Computational Fluid Dynamics package CFX-F3D is used as a computational tool. Both the Mixed-is-Burnt and the Eddy Break-up combustion models are calculated for the swirl number 0.90. Predictions are compared with the experimental data obtained in the National Engineering Laboratory furnace in Scotland. SUN, Sparc-station 4 was used to run all computations.

Prohlášení

Jsem si vědom, že tato diplomová práce je majetkem Technické univerzity, že s ní sám bez svolení Technické univerzity nemohu disponovat, a že může být zapůjčena nebo objednána (kopie) za účelem využití jejího obsahu.

Beru také na vědomí, že po pěti letech si mohu diplomovou práci vyžádat v Univerzitní knihovně TU v Liberci, kde je uložena.

Jméno a příjmení: Zdeněk Moravec

Adresa: Na vrchu 199
281 03 Chotutice

Místopřísežné prohlášení

Místopřísežně prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V Liberci dne

14.12.1998

.....
Zdeněk Moravec

Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval Dr. S.A. Beltaguimu za odborné vedení diplomové práce na Glasgow University a vedoucímu diplomové práce Prof. Ing. Jiřímu Kratochvílovi, CSc. za cenné připomínky, náměty a podporu, bez níž by vypracování této diplomové práce nebylo možné. Dále bych chtěl poděkovat Doc. Ing. Jiřímu Ungrovi, CSc. za ochotnou práci konzultanta.

Obsah

Přehled hlavních označení.....	3
1. Úvod	5
1.1 Spalování a vývoj NO_x	6
1.2 Cíl diplomové práce	7
1.3 Stručný obsah kapitol	8
2. Spalování zemního plynu.....	9
2.1 Mechanismy spalování zemního plynu	9
2.1.1 Globální reakční mechanismus	9
2.1.2 Quasi-globální reakční mechanismus	10
2.1.3 Detailní reakční mechanismus	11
2.2 Složení zemního plynu	13
3. Modelování spalovacích procesů.....	15
3.1 Režimy spalování	15
3.2 Mixed-is-Burnt spalovací model	17
3.3 Eddy Break-up spalovací model	18
4. Vývoj oxidů dusíku.....	20
4.1 Mechanismy vývoje NO_x	20
4.1.1 Thermal NO_x formační mechanismus	20
4.1.2 Prompt NO_x formační mechanismus	22
4.1.3 Fuel NO_x formační mechanismus	24
4.2 NO_x produkční model v CFX-F3D	24
4.3 Redukce emisí NO_x	25
4.3.1 Redukce kontrolou spalovacího procesu	25
4.3.2 Destrukce NO_x v sekundární spalovací zóně	26
4.3.3 Úprava kouřových plynů	26
5. Prezentace NEL kotle.....	28
5.1 Prezentace NEL kotle	28
5.2 Experimentální data	30
6. Zadání modelu v CFD-F3D.....	31
6.1 Struktura softwaru	31
6.2 Generování sítě	32
6.3 Okrajové podmínky	33
6.4 Nastavení fyzikálních modelů	35
6.4.1 Modelování turbulence	35
6.4.2 Modelování radiace	35

7. Ověření výsledků simulace spalovacích modelů.....	36
7.1 Vnější vstřikovací mód	37
7.1.1 Proudová pole	37
7.1.2 Profily spalovacích polí	40
7.1.3 Profily pro přenos tepla	43
7.2 Vnitřní vstřikovací mód	44
7.2.1 Proudová pole	44
7.2.2 Profily spalovacích polí	47
7.2.3 Profily pro přenos tepla	49
8. Ověření výsledků simulace NO_x modelu	51
8.1 Vnější vstřikovací mód	52
8.2 Vnitřní vstřikovací mód	53
9. Závěry.....	54
Seznam použité literatury.....	57

Appendixy

A. Příkazový soubor (Command file).....	60
B. Základní rovnice v mechanice tekutin.....	66
B.1 Rovnice kontinuity	66
B.2 Zákon zachování hybnosti	68
B.3 Zákon zachování energie	72
C. Numerické metody v mechanice tekutin.....	73
C1. Metoda konečných diferencí	73
C2. Linearizace Navier-Stokesových rovnic	77
D. Modelování turbulence	78
D1. Turbulentní model k-ε	78
E. Matematické modely spalování	80
E1. Spalovací modely pro plynná paliva	80
E2. Mixed-is-Burnt spalovací model	81
E3. Eddy Break-up spalovací model	82
F. NO_x produkční model.....	84
G. Sítě CFX-F3D modelů.....	85
H. Grafické výsledky.....	86

Přehled hlavních označení

Označení	Jednotka	Veličina
a	$[m\ s^{-2}]$	zrychlení
A_{CH}	$[-]$	rychlostní konstanta chemické indukce
c_p	$[J\ kg^{-1}\ K^{-1}]$	měrná tepelná kapacita při konstantním tlaku
C_R	$[-]$	korekční faktor pro EBU spalovací model
C_A	$[-]$	konstanta ve zdrojovém členu transportní rovnice EBU modelu
C_{g1}, C_{g2}	$[-]$	hodnoty modelových konstant MIB modelu
D	$[m^2\ s^{-1}]$	součinitel molekulární difúze
Die	$Die=0,001$	hodnota Damkohlerova čísla vznícení
E	$[J]$	aktivační energie
F	$[-]$	hlavní zlomek směsi
f	$[-]$	směšovací poměr
G	$[-]$	odchylka od střední hodnoty hlavního zlomku směsi
h	$[J\ kg^{-1}]$	měrná entalpie
j	$[-]$	stechiometrický poměr
k	$[J\ kg^{-1}]$	turbulentní kinetická energie
m	$[-]$	hmotnostní zlomek
M_{lim}	$[-]$	minimální funkce limitačního faktoru produktů
p	$[Pa]$	tlak
R	$[J\ kg^{-1}\ K^{-1}]$	plynová konstanta
R_{NO}	$[kg\ s^{-1}]$	rychlost tvorby oxidů dusíku
T	$[K]$	absolutní teplota
t	$[s]$	čas
S	$[-]$	vířivostní číslo
x, y, z	$[m]$	směry os kartézského koordinačního systému
u, v, w	$[m\ s^{-1}]$	složky rychlostí v kartézském koordinačním systému
Da	$[-]$	Damkohlerovo číslo
Le	$[-]$	Lewisovo číslo
Pr	$[-]$	Prandtlovo číslo
Sc	$[-]$	Schmidtovo číslo
ρ	$[kg\ m^{-3}]$	hustota
λ	$[W\ m^{-1}\ s^{-1}]$	součinitel tepelné vodivosti
ε	$[J\ kg^{-1}]$	disipace turbulentní kinetické energie
θ	$[^\circ]$	úhel natočení lopatky vírníku
μ	$[Pa\ s]$	dynamická viskozita
μ_T	$[Pa\ s]$	turbulentní viskozita

Kapitola 1

Úvod

Tato práce se zabývá numerickými simulacemi spalování zemního plynu v NEL peci (The National Engineering Laboratory) a vývojem oxidů dusíku.

Studium spalovacích procesů se stává, vzhledem ke snižujícím se zdrojům energetických zásob a plynutí energií, důležitým tématem v mnohých průmyslových aplikacích. Tyto skutečnosti spolu se zvyšujícím se znečištěním životního prostředí volají po hlubším porozumění spalovacích procesů. Tato zpráva zkoumá již existující spalovací modely, které jsou součástí softwaru CFD-F3D a srovnává nasimulované výsledky s experimentálně naměřenými hodnotami. Spalování, proudění, přestup tepla a vývoj NO_x jsou simulovány použitím dvou spalovacích modelů, to jest Mixed-is-Burnt modelu Kenta a Bilgera z roku 1976 a Eddy Break-up modelu Spaldinga z roku 1970. Dnes se otevírá rozsáhlé pole pro nová matematická řešení, zvláště v oblasti numerických metod v mechanice tekutin (Computational Fluid Dynamics, CFD). Ale dříve, než budeme moci použít numerické metody v praxi, musíme je studovat a jejich výsledky porovnávat s experimenty. Zmíněné modely jsou aplikovány na dva palivové vstřikovací systémy použité v NEL peci. Použité hořáky jsou s vnějším a vnitřním vstřikováním. Vstřikování paliva je pro jednodušší kontrolu spalování běžnou praxí v průmyslu, což snižuje i možnost detonací, jak je tomu u před-mixovaných směsí.

Druhá část práce se zabývá tvorbou NO_x. Lidské aktivity daly vzniknout novým, speciálním chemikáliím a chemickým sloučeninám, které působí na vodní zdroje, atmosféru a půdu. Spalováním fosilních paliv se do přírodního prostředí vypouští hlavně oxidy dusíku a síry, které se přes následnou chemickou reakci objevují ve formě kyselých dešťů. Kyselé deště působí jako zdroj znečištění převážně v Evropě a Severní Americe. Ničí lesní prostory, zásoby podzemních vod a působí na zemědělskou výrobu. Následkem je vymírání velkých lesních ploch. Situace je v některých oblastech kritická, nepočítaje jiné nebezpečné efekty spadající do emisí. Metan a oxidy dusíku jsou navíc přirozeně se vyskytující plyny, které způsobují skleníkový efekt. Každoročně se jejich objem zvyšuje o 0,3% u metanu a jedno procento u oxidů dusíku (17, str. 47). Tyto plyny ovšem nepůsobí jen na klimatické podmínky na zemi, ale také přímo na zdraví člověka. NO_x spolu s dalšími znečišťujícími plyny podporuje vznik formací smogu. Uvedme, že v Londýně v prosinci 1952 smog způsobil úmrtí 4000 lidí, převážně ze staré a velmi mladé části populace, a zdvojnásobil výskyt respiračních onemocnění (17, str. 47).

V průběhu poslední dekády se stále zvyšuje tlak na regulace emisí. Lidstvo si více uvědomuje důležitost čistého a zdravého prostředí. Současně regulační předpisy určují maximální hodnoty emisí znečišťujících látek, zvláště v oblasti průmyslu, kde dochází k nejvyššímu množství uniků těchto látek. V dnešní době se stále více pozornosti věnuje emisím oxidů dusíku, označení NO_x, což indikuje skupinu NO a NO₂ (5, str. 1).

Tyto skutečnosti ukazují na potřebu omezení hladin vývoje emisí. Dovolené maximální hodnoty emisí znečišťujících látek ze spalovacích zařízení jsou rok od roku přísnější. Během vývoje emisních předpisů se také lišil přístup k problematice. První předpisy specifikovaly procentuální redukci emisních hladin. Tento typ norem se změnil v důsledku reálných technických možností. Dnes regulační předpisy specifikují maximální hodnoty hladin emisí. Tyto předpisy jsou dostatečně přísné, abychom zachovali zdravé životní prostředí, a jsou dodržovány ve většině hospodářsky rozvinutých zemích.

V minulosti se pozornost soustřeďovala především na spalování fosilních paliv, jako je uhlí a olej. Spalováním těchto paliv dochází k produkci kouře, oxidů síry a dusíku a jiných znečišťujících látek. Toto byla oblast největšího vývoje znečišťujících látek. Plynná paliva se považovala za zdravý, prostředí neohrožující zdroj energie. Emise oxidů síry se staly hlavním polem vědeckého výzkumu a regulací. V současnosti se nicméně stále více diskutuje vliv ostatních znečišťujících látek, zvláště NO_x, vzhledem k jeho vývoji během spalování fosilních paliv.

Tato zpráva pojednává o spalování zemního plynu, procesu, který se vyskytuje jak v domácnostech tak v mnohých průmyslových aplikacích. K nejjednodušším patří malá zařízení k vaření nebo kotle pro ústřední vytápění. Na druhé straně tohoto výčtu leží vysokovýkonné kotle elektráren a spalovacích turbín. Typickým příkladem společnosti využívající spalování zemního plynu na plynové turbíně je Transgas, s.p.

1.1 Spalování a vývoj NO_x

Spalování je exotermická reakce, která zahrnuje fyzikální procesy, jako je difúze chemických látek, přenos tepla a hmoty. Po uvolnění chemické energie paliva dochází také k mnoha dalším procesům, například emisi světla, zvýšenému proudění plynů a vývoji znečišťujících látek. Vezmeme-li v úvahu nejjednodušší spalovací model, spalování vzniká v okamžiku, kdy smíšený oxydant s palivem vstoupí v plynném stavu do dostatečně přehřáté spalovací komory. Dojde k rychlému spuštění exotermické reakce. Rovnovážný stav reakce je dosažen, jestliže dochází k dostatečnému přenosu tepla do stěn spalovací komory.

Poznamenejme, že při spalování dochází k reakci mezi dvěma základními komponenty, oxydantem a palivem. Ve většině aplikací se používá jako oxydantu vzduchu, který obsahuje 22% kyslíku spolu s malým procentem oxidu uhličitého a jiných plynů. Tato zpráva používá rovněž kombinace vzduchu s palivem.

Volný dusík obsažený ve vzduchu přispívá k vývoji oxidů dusíku nejvíce při spalování plyných paliv, jak je vysvětleno níže. Je nutno vzít v potaz, že odstranění dusíku ze vzduchu je pro běžné aplikace nemožné. K tvorbě oxidů dusíku přispívá i dusík vázaný v palivu. V zemním plynu je obsažen v zanedbatelném množství. Skutečnými zdroji toho druhu jsou jen pevná a kapalná paliva. Je tedy nutné porozumět mechanismům vývoje oxidů dusíku. Znalost těchto mechanismů ovlivňuje kontrolu spalovacího procesu a následně redukuje emise oxidů dusíku.

1.2 Cíl diplomové práce

V současné praxi se začínají prosazovat nové metody k získání hodnot pro navrhované parametry průmyslových zařízení. Všeobecně se až do dnešní doby používaly grafy a tabulky, které obsahovaly implantovaná data. Proudění, spalování a jiné fyzikální procesy se také zkoumaly převážně využitím malých nebo plných modelů. Ale i dnes se některé návrhy neobejdou bez experimentálně zjištěných dat. Současná praxe tíhne k využívání výsledků založených na kombinaci empirických a experimentálních metod. Rychlý vývoj počítačové techniky v poslední dekádě otevřel široké pole pro budoucí designové techniky. Velký krok kupředu udělal i vývoj numerických metod. Computational Fluid Dynamics (CFD) mění přístup od fundamentální přírodní analýzy k analýze v mezích diskretních výpočtových domén.

Cílem diplomové práce je analyzovat proudění, spalování a vývoj NO_x pro dva vstřikovací módy v NEL kotli. Výsledky simulací jednotlivých spalovacích modelů ověří, jak realistické a spolehlivé tyto modely jsou v rámci programu CFX-F3D. Tato znalost může přispět k vývoji spalovacích CFD modelů a vytyčit cestu k návrhům spalovacích zařízení. Cílem diplomové práce je

porovnat a ověřit výsledky simulace spalovacích modelů instalovaných v programovém balíku CFX-F3D pro vnější a vnitřní vstřikovací palivový systém a simulovat proudění, spalování, přestup tepla a vývoj NO_x pro vířivostní číslo (swirl number) 0,9; výsledky simulace porovnat s experimentálními hodnotami naměřenými v National Engineering Laboratory.

National Engineering Laboratory dodala experimentální data průběhů proudění, spalování a vývoje NO_x . Oba hořáky, pro vnější a vnitřní vstřikování paliva, se zkoumaly pro výkon 400kW. Kotel je situován v NEL, East Kilbride, Scotland.

1.3 Stručný obsah kapitol

V následujících kapitolách je představen popis a diskutováno srovnání mezi spalovacími modely a konfiguracemi modelu pro vývoj NO_x .

- *Kapitola 2* (Spalování zemního plynu) diskutuje spalovací mechanismy zemního plynu spolu s chemickým rozбором použitého zemního plynu.
- *Kapitola 3* (Modelování spalovacích procesů) diskutuje spalovací režimy a představuje spalovací modely implantované v CFX-F3D programovém balíčku.
- *Kapitola 4* (Vývoj oxidů dusíku) popisuje reakční mechanismy pro thermal a prompt NO_x modely, NO_x model v CFX-F3D a redukci vývoje NO_x .
- *Kapitola 5* (Presentace NEL kotle) představuje NEL kotel společně s popisem palivových vstřikovacích systémů a získání experimentálních dat.
- *Kapitola 6* (Zadání modelu v CFX-F3D) popisuje zadání modelu v programu CFX-F3D, to jest generování sítě, zadání okrajových podmínek a fyzikálních modelů.
- *Kapitola 7* (Ověření spalovacích modelů) porovnává nasimulované výsledky proudění, spalování a přestupu tepla s experimentálními hodnotami, diskutuje výsledky jednotlivých spalovacích modelů.
- *Kapitola 8* (Ověření NO_x modelu) srovnává výsledky simulace vývoje NO_x s experimentálními hodnotami pro beta a double delta pravděpodobnostní hustotové funkce, pdf.
- *Kapitola 9* (Závěry) diskutuje výsledky a vyvozuje závěry diplomové práce.

Apendixy nabízejí detailnější matematické pozadí použitých modelů a modelovaných sítí spolu s grafickými výsledky, které jsou prezentovány na konci zprávy.

Kapitola 2

Spalování zemního plynu

2.1 Mechanismy spalování zemního plynu

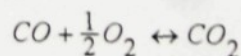
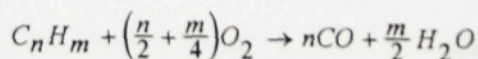
Hlavním tématem této kapitoly je spalování zemního plynu. Kinetika chemických reakcí je diskutována pro globální a quasi-globální reakční mechanismy, částečně i pro detailní mechanismus. Cílem je porozumět kinetice spalovacího procesu, přestože software CFX-F3D používá pro modelování spalovacích procesů vlastní postupy řešení. Ty nicméně vycházejí z těchto teoreticko-empirických poznatků.

Zemní plyn se skládá přibližně z 95% metanu. Přesné chemické složení zemního plynu použitého v NEL kotli je předloženo na konci této kapitoly. Detailní popis spalování zemního plynu je velmi komplexní a zahrnuje následné oxidace mnohých molekul jako je CO a H₂. Globální mechanismus naproti tomu zjednodušuje reakce na oxidaci, kde palivo oxiduje na CO₂ a H₂O. Tento případ zahrnuje jeden až dva reakční kroky, jak je popsáno níže.

V našem případě musí reakční mechanismy pro rozklad paliva vzít v úvahu i mechanismy vývoje NO_x. Takový model musí sledovat systematickou redukci detailního mechanismu spalování zemního plynu. Predikce teploty, produktů, kinematiky a emisí NO_x jsou předurčeny použitým spalovacím modelem. Fluktuace teploty a koncentrací chemických frakcí mají zásadní dopad na vlastní spalovací proces. V první fázi spalování je pro následující odstavce zahrnut pouze mechanismus metan-vzduch, a to vzhledem ke složení a stávající praxi. Proto jsou stručně popsány základy spalování metanu.

2.1.1 Globální reakční mechanismus

Reakci uhlovodíkového paliva na výsledné molekuly CO₂ a H₂O lze zapsat



Rychlost tohoto mechanismu závisí na mnoha faktorech, jako je teplota T, tlak p a ekvivalentní poměr (equivalence ratio). Některé kinematické konstanty pro různé podmínky jsou udány v tabulce 2.1 (4, str.92). Předpokladem reakčního mechanismu je homogenní směs a rychlost spalování paliva je vyjádřena následující rovnicí

$$\frac{d[fuel]}{dt} = k_f \cdot T^n \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot [CH_4]^a \cdot [O_2]^b \cdot [H_2O]^c \cdot [CO]^d$$

Poznamenejme, že Arheniova rovnice a experimentální data se mohou zcela lišit v rámci stejných podmínek. Je to způsobeno faktem, že stupeň interakce mezi chemickým procesem a turbulencí kolísá s použitým reaktorem.

kinetické rychlostní konstanty								
palivo	log k _f	n	E	a	b	c	d	pozn.
CH ₄	8,778	0	57	-0,4	1,4	0	0	[1]
CH ₄	9,114	0	48,4	-0,3	1,3	0	0	[2]
CH ₄	6,919	0	30	-0,3	1,3	0	0	[2]
CH ₄	9,447	0	48,4	-0,3	1,3	0	0	[2]
CH ₄	7,176	0	30	-0,3	1,3	0	0	[2]
CO	11,079	0	16	0	0,3	0,5	1	[3]
CO	12,255	0	28,3	0	0,25	0,5	1	[4]
CO	11,114	0	30	0	0,5	0,5	1	[5]

Tab. 2.1 Kinetické rychlostní konstanty (4, Boersma, 1993)

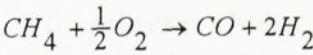
Reference a experimentální podmínky zanesené v tabulce 2.1

[1] Nemeth & Sawyer, 1969	T>1200 K
[2] Westbrook & Dryer, 1981	stanovené na základě detailních výpočtů plamene a korigované podle Coffee, 1985
[3] Hottel a spol., 1965	1280<T<1535 K; p= 1 atm.
[4] Lavrov a spol., 1968	1063<T<1593 K; p= 1 atm.
[5] Howard a spol., 1973	1030<T<1230 K; p= 1 atm.

Koncentrace radikálů potřebné pro simulaci vývoje NO_x nejsou, nicméně, určeny tímto základním spalovacím mechanismem. Vypočtené hodnoty teplot jsou vyšší díky produktům, které se objevují během nedokonalého spalování. Další nevýhodou je, že predikce rychlostí spalování jsou fixovány na velmi malý rozsah teplot. Je zde tedy silná potřeba detailnějšího mechanismu, který by řešil spalovací proces a formaci NO_x. Z tohoto důvodu bude stručně popsán quasi-globální a detailní reakční mechanismus.

2.1.2 Quasi-globální reakční mechanismus

Tento reakční mechanismus poskytuje zdokonalený popis. Hlavním předpokladem u tohoto mechanismu je, že palivo a kyslík reagují velmi rychle. Dochází k formaci CO a H₂ molekul. Warnatz (4) v roce 1981 komentuje, že dekompozice paliva na CO a H₂ je mnohem rychlejší než oxidace CO. Chemická reakce pro metan je



kde je rychlost reakce popsána Arheniovou rovnicí

$$\frac{d[fuel]}{dt} = k_f \cdot T^n \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot p^a \cdot [CH_4]^a \cdot [O_2]^b$$

Některé z kinetických konstant jsou uvedeny v tabulce 2.2. Tyto hodnoty jsou získány pomocí experimentálních dat.

kinetické rychlostní konstanty QUASI-GLOBÁLNÍ MECHANISMUS							
palivo	10 log k _f	n	E	a	b	alfa	zdroj
CH ₄	8,742	0	24,2	0,5	1	-0,825	[1]
CH ₄	9,602	0	48,4	-0,3	1,3	0	[2]
CH ₄	7,362	0	30	-0,3	1,3	0	[2]

Tab. 2.2 Experimentálně zjištěné konstanty pro quasi-globální model
(jednotky: kCal, mol, K, cm, s)

Quasi-globální reakční mechanismus již prediktuje koncentrace radikálů nutných pro thermal model vývoje NO_x. Hodnoty mohou být nepřesné v oblastech, kde zůstává nespálené palivo a jiné uhlovodíky. Radikály O, H a OH zde reagují s molekulami uhlovodíků mnohem rychleji než s CO a H₂. Quasi-globální reakční model nicméně dává nižší koncentrace CO ve srovnání s detailním spalovacím modelem a je nutné poznamenat, že teplota je velmi citlivá na koncentrace CO. Prediktovaná teplota bude chybná, jestliže koncentrace CO neodpovídá realitě. Tato skutečnost souvisí i s termálním vývojem oxidů dusíku. Výše uvedené tabulkové hodnoty se také mohou lišit s použitým spalovacím prostorem.

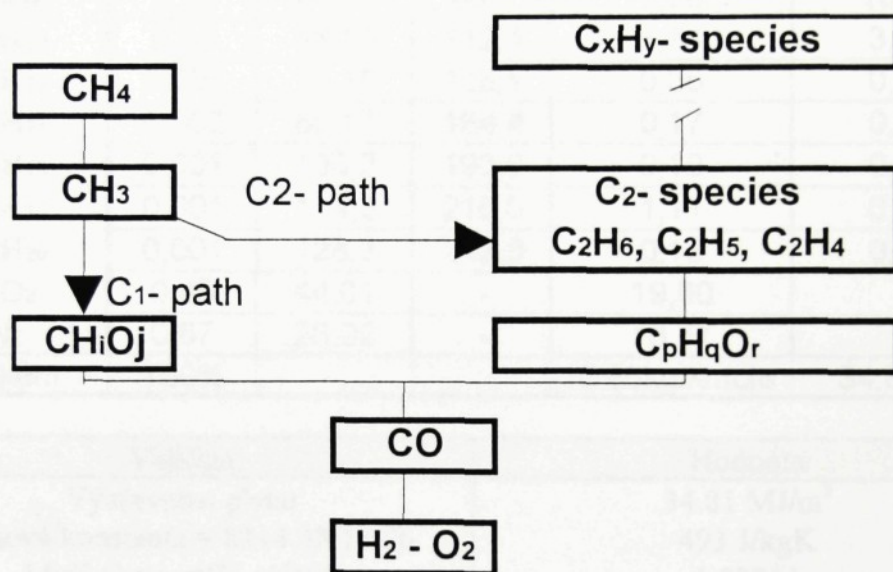
2.1.3 Detailní reakční mechanismus

Detailní reakční mechanismus je pro uhlovodíková paliva velmi komplexní a zahrnuje obrovské množství reakcí. Tyto reakce jsou spolu s formací NO_x předmětem výzkumu mnohých vědců, jmenujme například Millera a Kee, Glarborga a Warnatse. Model je charakterizován hierarchickou strukturou. Tato struktura se pro obecnou molekulu C_xH_y především skládá z fragmentace prvotního paliva na zlomky radikálů, viz obr. 2.3. Tyto radikály jsou obvykle palivy sami o sobě a reagují s oxydantem primárně na H₂O a CO₂. Tyto dvě molekuly jsou dominantními produkty spalování. CO a H₂ jsou také důležitými produkty pozorovanými během oxidace uhlovodíků.

Jak již bylo zmíněno, zemní plyn se skládá především z metanu. Hierarchická struktura ukazuje, že metan konvertuje na CH₃, který může oxidovat na CH₂O, CHO a CO. Metan může také sledovat cestu oxidace přes etan. Warnatz (4) v roce 1983 prohlašuje, že rekombinace CH₃ na C₂H₆ je velmi důležitá, protože při stochiometrickém spalování CH₄ se vzduchem tato

rekce pokrývá 30% z přeměny CH_3 . Při spalování s bohatým obsahem paliva se tento poměr zvyšuje až na 80%. C_2H_2 se vytváří spolu s částečnou rekombinací na C_2H_3 a C_2H_4 .

Detailní reakční mechanismus stále prochází výzkumem a experimenty. Například Warnatzův mechanismus z roku 1991 se skládá z 102 reakcí pro vývoj NO_x a 170 reakcí pro oxidaci uhlovodíků obsahující pouze druhy s jedním nebo žádným atomem uhlíku. Mechanismus Clarborga, Millera a Kee popisuje vývoj NO_x pomocí 154. reakcí a oxidaci jedno-uhlíkových molekul uhlovodíků 142. reakcemi (4, str.99). Plný popis tohoto mechanismu není nicméně znám, zvláště termodynamická data pro některé radikály těchto reakcí. Proto se detailní reakční mechanismus systematicky redukuje a zjednodušuje pro specifické případy.



Obr 2.3 Hierarchická struktura a obecné vztahy mezi oxidačními mechanismy pro jednoduchá uhlovodíková paliva.

Na obrázku 2.3, C_1 -cesta je částí (C_1+C_2) -uhlovodíkového mechanismu a skládá se pouze z molekul s jedním nebo žádným atomem uhlíku. (C_1+C_2) naznačuje, že se reakci zúčastňují molekuly s dvěma a méně atomy uhlíku.

Jak bylo zmíněno výše, existuje blízká vazba mezi formováním NO_x a použitým spalovacím mechanismem. Základy formování oxidů dusíku, to je thermal, prompt a fuel mechanismy, jsou diskutovány níže.

2.2 Složení zemního plynu

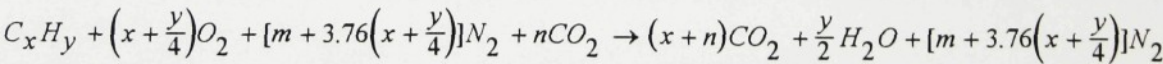
Čtyři sta kilowatový kotel situovaný v NEL spaluje zemní plyn následného složení. Poznamenejme, že přesné složení zemního plynu bylo analyzováno v NEL, Scotland.

uhlovodík	%	molární hmotnost	výhřevná hodnota	MWt (%.MV)	CVt (%.CV)
C ₁ H ₄	94,81	16,04	34,0	1520,75	3223,54
C ₂ H ₆	3,82	30,07	60,5	114,87	231,11
C ₃ H ₈	0,21	44,11	86,4	9,26	18,14
C ₄ H ₁₀	0,03	58,13	112,4	1,74	3,75
C ₅ H ₁₂	0,005	72,15	138,1	0,36	0,69
C ₆ H ₁₄	0,002	86,17	164,4	0,17	0,33
C ₇ H ₁₆	0,001	100,2	190,0	0,10	0,19
C ₈ H ₁₈	0,001	114,2	216,0	1,11	0,22
C ₉ H ₂₀	0,001	128,3	242,0	0,13	0,24
CO ₂	0,45	44,01	-	19,80	-
N ₂	0,67	28,02	-	18,77	-
Celkem	100%			16.86kg/kmole	34.81MJ

Veličina	Hodnota
Výhřevnost plynu	34.81 MJ/m ³
Plynová konstanta = 8314.33/16.86	493 J/kgK
Molů C = sum(%.x)/100	1.03261
Molů H ₂ = sum(%.y/2)100	2.021
Stoichiometrický poměr =	9.725 objemově
(1.0326+2.021).4.76 ^a	16.710 hmotnostně

kde x a y odpovídají indexům v molekule uhlovodíku C_xH_y. Hodnota 4.76 udává reciprokou hodnotu objemového podílu kyslíku ve vzduchu, to jest 1/0,21.

Spalování lze určit z globální spalovací reakce ve formě



kde n, m a y jsou molární hodnoty CO₂, N₂ paliva a C. Jejich součet je spolu s y roven molům H₂. Složení produktů je poté (v molech na moly zemního plynu).

$$\begin{array}{lll} CO_2 & = x + n & = 1.037 \\ H_2 & = y/2 & = 2.021 \\ N_2 & = 3.76(x + y/2) & = 7.689 \\ \Sigma_{total} & = CO_2 + H_2O + N_2 & = 10.747 \end{array}$$

a hmotnostní zlomky CO₂, H₂O a N₂ jsou

$$m_{CO_2} = \frac{CO_2}{\Sigma_{total}} \frac{M_{CO_2}}{M_{product}} = 0.1534 \left[\frac{kg CO_2}{kg product} \right]$$

$$m_{H_2O} = \frac{H_2O}{\Sigma_{total}} \frac{M_{H_2O}}{M_{product}} = 0.1224 \left[\frac{kg H_2O}{kg product} \right]$$

$$m_{N_2} = \frac{N_2}{\Sigma_{total}} \frac{M_{N_2}}{M_{product}} = 0.7242 \left[\frac{kg N_2}{kg product} \right]$$

kde

$$M_{CO_2} = 44.01 \text{ kg CO}_2/\text{kmol CO}_2$$

$$M_{H_2O} = 18.02 \text{ kg H}_2\text{O}/\text{kmol H}_2\text{O}$$

$$M_{N_2} = 28.01 \text{ kg N}_2/\text{kmol N}_2$$

a

$$M_{product} = \frac{CO_2}{\Sigma_{total}} M_{CO_2} + \frac{H_2O}{\Sigma_{total}} M_{H_2O} + \frac{N_2}{\Sigma_{total}} M_{N_2} = 27.67 \left[\frac{kg product}{kmol product} \right]$$

3.1 Reakce spalování

Problemy modely jsou většinou na tři části: 1. definice reakcí, 2. řešení pro definované podmínky, 3. výpočet výsledků. Vzhledem k tomu, že reakce spalování jsou velmi složitou a mnohastrannou, je nutné použít vhodné modely, které umožní simulaci a výpočet výsledků.

Kapitola 3

Modelování spalovacích procesů

Jedním ze základních cílů této zprávy je srovnat dostupné spalovací modely v CFX-F3D. Chemické reakce mezi palivem a oxydantem uvolňují během spalovacího procesu energii. Jak je popsáno v kapitole 2, skutečné chemické reakce probíhají desítkami chemických cest i pro nejjednodušší uhlovodíková paliva. Byly vyvinuty různé spalovací modely, které se pokoušejí popsat fyzikální chování složek, rozložení hustotních a teplotních polí.

V CFX-F3D jsou nicméně vzaty v úvahu zjednodušené spalovací modely, které pracují na základě tří-složkového mechanismu, to jest s oxydantem, palivem a produktem. Zjednodušené modely a experimenty prokázaly dostatečnou shodu ve výsledcích. Reakční model použitý v CFX-F3D je tedy (detaily jsou diskutovány v apendixu E).



CFX-F3D programový balíček nabízí dva spalovací modely aplikovatelné pro náš případ, Mixed-is-Burnt model Kenta a Bilgera z roku 1976 a Eddy Break-up model Spaldinga z roku 1970. Tyto dva spalovací modely byly vyvinuty pro popis turbulentních plamenů, oba použitelné pro spalování plyných paliv. Eddy Break-up model nabízí možnost nastavení členů v Arrheniově rovnici a model pro vývoj sazí, který nicméně není použit v této práci. Mixed-is-Burnt model lze použít pro simulaci spalování uhlí a oleje. Doktorandská práce Bashira Eldmedhema na Glasgow University využívá právě spalovací model pro olej při simulaci procesů v NEL. Mixed-is-Burnt model je nejčastěji využíván pro simulaci difúzních plamenů v kotlích, založený na okamžité reakci mezi palivem a oxydantem, viz níže. Pravděpodobnostní hustotová funkce fluktuací směšovacího zlomku je zadána k výpočtu hmotnostních zlomků. NO_x produkční model je implantovaný v rámci Mixed-is-Burnt modelu. Model pro vývoj oxidů dusíku je nový nástroj programu CFX-F3D. Na druhou stranu, Eddy Break-Up model využívá transportní rovnice, kde hmotnostní zlomky paliva slouží k výpočtu ostatních hmotnostních zlomků. Oba modely, Mixed-is-Burnt a Eddy Break-up, jsou podrobně popsány v následujících odstavcích. V příkazovém souboru (command file) jsou specifikovány pod příkazem >>OPTIONS a parametry modelu pod >>COMBUSTION PARAMETERS, více detailů v apendixu A.

3.1 Režimy spalování

Použité modely jsou vztaženy na typ plamene. Dva důležité režimy spalování jsou definovány Damkohlerovým číslem, které kvantifikuje vztah mezi chemickými a turbulentními měřítky času, tedy τ_{ch} a τ_t .

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_{CH}}$$

kde $\tau_{CH} = \delta_1/S_1$ a $\tau_t = L/u'$, kde je měřítko délky L vztaženo na 'intenzitu turbulence' (reprezentovanou druhou odmocninou turbulentní rychlosti, u') a laminární šířka plamene δ_1 na rychlost laminárního spalování S_1 . Rychlost laminárního spalování, S_1 , vyjadřuje rychlost propagace rovinného plamene do nespáleného plynu při podmínkách laminárního proudění, což je základní parametr popisující složení palivo-oxydant při specifické teplotě a tlaku. Laminární šířka plamene, δ_1 , představuje hloubku reakční zóny, ve které se uvolňuje převážná část tepla. Integrální měřítko délky, L , je průměrná velikost objemu plynu, který se dostává do rotace vlivem velikosti turbulentní rychlosti (12, str.62). Hranice mezi dvěma skupinami plamenů je vyznačena Damkohlerovým číslem $Da = 1$. Tyto dvě skupiny se dělí:

Premixed flames ($Da < 1$): před-mixované plamenné spalování; turbulence je rychlejší ve srovnání s rychlostí chemické reakce. Vzhledem k disipaci turbulentních eddies je vyvoláno prudké míšení reaktantů. K míšení paliva a oxydantu dochází v těchto turbulentních buňkách (eddies), nicméně velikost jejich koncentrací a teploty nedovolují vznik okamžité spalovací reakce. Rychlost reakce je kontrolována kineticky.

Diffusion flames ($Da > 1$): difúzní plamenné spalování; chemické reakce se šíří rychleji než turbulence, míšení reaktantů probíhá pomalu a reakce probíhá jakmile dojde k jejich koexistenci, kinetický efekt není vzat v úvahu. Reakce je kontrolována difúzí.

Spalovací model Kenta a Spaldinga je vyvinut pro oba výše popsané případy Damkohlerova čísla (Eddy Break-up model). Druhý spalovací model je použitelný pouze pro difúzní plameny (Mixed-is-Burnt model). Tato práce se zabývá oběma případy.

Existují práce zabývající se stacionární injekcí plyných paliv. Nicméně předešlý výzkum v NEL se zabýval především před-mixovanými plameny. Palivo a oxydant vstupovaly do pece v před-mixovaném stavu, takže pro výpočet nebyl používán Mixed-is-Burnt model, jmenujme práci Bronnuma a Rasmussena (5). Pokus o predikci injekčního spalování, laboratorní papír Bronnum, Rasmussen a Beltagui (6), nicméně také využíval spalovacího modelu Eddy Break-up. Vzhledem k těmto skutečnostem je tato práce krokem kupředu a snaží se zkoumat použitelnost spalovacích modelů a jejich konfigurací. Mód injekčního spalování je ovšem obtížné matematicky postihnout (6).

Turbulentní difúzní spalování je v CFX-F3D reprezentováno Mixed-is-Burnt modelem a jednou z konfigurací Eddy Break-Up modelu. Jedna z nejjednodušších teorií turbulentního difúzního spalování je popsána v tomto odstavci. Některé teorie turbulentního difúzního spalování berou výšku plamene jako nejlépe měřitelnou vlastnost. Výška plamene byla pozorována a následně srovnávána s vlastnostmi plynů. Jost (14) popisuje nejjednodušší model. Průměrný čtvereční posun x^2 je dán Einsteinovou difúzní rovnicí:

$$x^2 = 2Dt$$

kde předpokládáme, že se výška plamene rovná poloměru trubky r , to je, pro průměrnou hloubku penetrace $x^2 = r^2$. Čas t je vypočten z výšky y a rychlosti plynu u (vzata jako konstantní), poté tedy

$$y = \frac{ur^2}{2D}$$

a pro rychlost objemového toku V , který je roven $u\pi r^2$,

$$y = \frac{V}{2\pi D}$$

kde D je molekulární difúzivita. Popsané vnější chování turbulentních difúzních plamenů lze transformovat na vnitřní chování po záměně molekulární difúzivity D difúzními eddies. Eddy difúzivita je násobkem měřítka turbulence L a rychlosti fluktuálních členů. Ale matematický popis se ukazuje být velmi složitý. Při vysokých teplotách se reakce objevují v široké škále poměrů paliva k oxydantu a nepřesné výsledky jsou získány díky předpokladům při spalování v před-definované reakční zóně. Tato zóna je definována jako oblast se stochiometrickým poměrem paliva a oxydantu. Mimoto se difúzní parametr mění s teplotou a složením směsi.

Turbulentní difúzní plameny byly studovány mnohými vědci, jako je Roper a Smith, predikce a pozorování velikostí plamenů pro několik typů hořáků (bylo dosaženo dobré shody mezi zmiňovanou teorií Justa a experimenty). Užitečný report je také vypracován Elghobashim (10, str.141), který řeší šest transportních rovnic s Gausovou pravděpodobnostní funkcí (pdf) pro osově symetrickou spalovací komoru. Z dalších prací zmiňme doktorandskou práci Boersmy (4, str.59). V další fázi této kapitoly jsou diskutovány Eddy Break-up a Mixed-is-Burnt spalovací modely.

3.2 Mixed-is-Burnt spalovací model

Mixed-is-Burnt model jako část nabídky programového balíčku CFX-F3D vyžaduje dva oddělené vstupující proudy oxydantu a paliva do spalovací komory. Protože reaktanty nemohou zůstat pohromadě, model je vhodný pouze pro difúzní plameny. Jedním z předpokladů tohoto modelu je rovnost difúzivit složek a tepla (4, str.59). Tento předpoklad je charakterizován Lewisovým číslem $Le = 1$. Lewisovo číslo je definováno jako poměr Schmidtova a Prandtlova čísla a popisuje intenzitu přenosu tepla a intenzitu přenosu hmoty, proto Le je blízký jedné pro většinu systémů a spalitelných plynů.

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p D}$$

kde je Schmidtovo číslo definováno jako poměr přenosu hybnosti a hmoty. $Sc = \nu/D$ (D popisuje molekulární difúzivitu, ν viskozitu). Mixed-is-Burnt spalovací model je použitelný k modelování difúzních plamenů a mechanismus vývoje NO_x je novým implantovaným modelem. Mixed-is Burnt model tedy nemůže řešit před-mixované vstřikování paliva jako Eddy-Break-up spalovací model. V našem případě dochází ke vstřiku samostatného proudu

paliva a oxydant vstupuje do pece odděleně ve vnitřní zóně hořáku, což je řešitelné tímto spalovacím modelem. Pro řešení vnitřního vstřikování bylo nutné přistoupit k zjednodušením, aby mohl být model aplikován.

Mixed-is-Burnt model je možné spustit s jedním ze tří základních nastavení pravděpodobnostních funkcí, které jsou naprogramovány v řešiči.

- *single delta function*; CFX-F3D řeší spalování pro jeden spalovací skalár, to jest střední směšovací zlomek, a používá tři hmotnostních zlomků k řešení množiny algebraických rovnic, neřeší diferenciální rovnice.
- *double delta function*; CFX-F3D řeší spalování pro dva spalovací skaláry, to jest střední směšovací zlomek a výchylku směšovacího zlomku. Jako v předešlém případě je řešena množina algebraických rovnic.
- *beta function*; stejně jako u double delta funkce, CFX-F3D řeší spalování dvou spalovacích skalárů, to je střední směšovací zlomek a výchylky směšovacího zlomku; je řešena množina algebraických rovnic; liší se typem pravděpodobnostní funkce.

Za jediný zbytek spalovacího procesu je považován dusík. Všechno palivo a kyslík během spalovacího procesu shoří. Musí být specifikovány jednotlivé složky paliva a množství kyslíku v oxydantu. Hmotnostní zlomky jsou vloženy pro palivo a oxydant v příkazovém souboru (command file) pod combustion model setting submenu. Tyto hmotnostní zlomky jsou rozdílné od hmotnostních zlomků prezentovaných ve zbytku diplomové práce; je popsáno složení směsi paliv nebo směsi oxydantu, místo specifikace směsi paliva, oxydantu a produktu na objemovou nebo hmotnostní jednotku (jejíž suma je rovna jedné). Ostatní veličiny musí být zadány v command file pod >>COMBUSTION PARAMETERS. Tyto veličiny jsou předmětem diskuse v kapitole 6. Combustion scalar3 reprezentuje hladinu vývoje NO_x . Matematický přístup je popsán v appendixu E.

3.3 Eddy Break-up spalovací model

V CFX-F3D jsou k dispozici různé konfigurace Eddy Break-up (EBU) modelu. Model byl vyvinut Spaldingem v roce 1970. Uživatel si může vybrat a zkoumat některé konfigurace, z nichž jmenujme základní konfigurace finite rate chemistry a standard chemistry, vysvětleno níže. Různé volby nastavení modelu vedou k rozdílným výsledkům simulace.

EBU model bere v úvahu homogenní směšování reaktantů v buňkách o malém měřítku (fine scale eddies). Je zde předpoklad, že disipace eddies je úměrná poměru mezi intenzitou disipace turbulentní kinetické energie ε a turbulentní kinetické energie κ . Takže model je více méně spojen s k- ε turbulentním modelem, ačkoliv je turbulentní model specifikován samostatně. CFX-F3D řeší transportní rovnici hlavního zlomku směsi, F, a hmotnostního zlomku paliva. Jsou také řešeny jeden spalovací skalár a další dva zlomky směsi.

Fluktuace teploty nejsou, nicméně, uvažovány při vyčíslení kinetických rychlostních konstant (kinetic rate constant), takže dochází k nepřesným predikcím NO_x (4). Avšak predikce vývoje NO_x nejsou v tomto reportu vypracovány pro EBU model, více diskutováno v kapitole 8. Jsou k dispozici tři základní konfigurace EBU modelu:

- *Viscous mixing* je standardní model přednastavený jako default, kde je rychlost spalování funkcí turbulentního Reynoldsova čísla; poznamenejme, že konfigurace viskózního směšování byla s úspěchem používána pro finite rate chemistry v případě vnějšího vstřikovacího módu.
- *Collision mixing*; rychlost spalování nezávisí explicitně na turbulentním Reynoldsově čísle; poznamenejme, že konfigurace kolizního směšování byla úspěšně použita pro před-mixované plameny.
- *Include Product Term*; konfigurace způsobuje citlivost spalování na hmotnostním zlomku produktů spalování; produkt je limitujícím faktorem a konfigurace je vhodnější pro modifikace částečně před-mixovaných plamenů (5).

Standardní EBU nicméně předpokládá nekonečně rychlé chemické reakce s viskózním směšováním. Jinak musí být pro chemické reakce probíhající s konečnou rychlostí specifikovány parametry Arrheniovy rovnice. Všechny tyto konfigurace byly předmětem zkoumání pro oba módy vstřikování. Více detailů a matematický přístup jsou obsaženy v appendixu E.

Kapitola 4

Vývoj oxidů dusíku

4.1 Mechanismy vývoje NO_x

Je důležité porozumět a vyvinout proces formace NO_x, který může být vyjádřen chemickou i fyzikální cestou. Tyto procesy jsou základem v rozvoji technik minimalizace vývoje emisí NO_x. Existují tři kategorie vývoje NO_x.

1/ Thermal NO_x

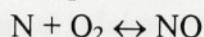
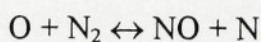
2/ Prompt NO_x

3/ Fuel NO_x

Thermal a Prompt NO_x formační mechanismy jsou vhodné pro spalování zemního plynu.

4.1.1 Thermal NO_x formační mechanismus

Tento koncept je založen na vývoji NO_x z volné molekuly dusíku obsažené ve vzduchu. Slovo thermal je odvozeno z faktu, že se NO_x vytváří když N₂ prochází skrze zónu vysokých teplot. Tato zóna je v "post-flame" oblasti, tedy v těsném závěsu za plamenem. Thermal NO_x je proto hlavním mechanismem vývoje oxidů dusíku při spalování bez-dusičnatých plynných paliv, jako je propan, H₂ nebo zemní plyn. Reakční mechanismus byl navržen Zeldovichem v roce 1947.



a později rozšířen Bowmanem v roce 1975 o rovnici



Všechny tři rovnice se nazývají Rozšířený Zeldovichův mechanismus. V první reakci, O radikál reaguje s molekulou N₂. Výsledkem reakce je molekula NO a jeden radikál N. Druhá reakce Zeldovichova mechanismu popisuje reakci radikálu N s molekulou kyslíku O₂, kde vzniká molekula NO a radikál O. Reakce nicméně obvykle hraje zanedbatelnou roli v celém procesu a pro směsi bohaté na palivo a vysoké koncentrace OH, hlavním zdrojem vývoje NO_x je spíše třetí než druhá reakce. Je také užitečné zmínit rovnováhu mezi radikály O a molekulami kyslíku O₂.

Zeldovichovi rozšířené reakce jsou ve srovnání s hlavním spalovacím mechanismem pomalé. Pro nastartování thermal NO_x je nutná vysoká aktivační energie. K významnému vývoji thermal NO_x dochází pro plameny nad 1500K, tedy právě v oblastech za koncem zóny plamene. Tento fakt byl dokázán mnohými vědci, jako je Enleman a spol. (11), který experimentoval s H₂, CO a propanovými plameny.

Aktivace první Zeldovichovy rovnice vyžaduje vysoké množství energie, takže se předpokládá, že je spalovací proces dokončen před začátkem vývoje thermal NO_x. Co se týká druhé reakce, oxidace radikálů N vyžaduje jen malou aktivační energii. Radikály N se spotřebovávají stejně rychle, jako vznikají. Jak je NO_x generován v post-zóně plamene, rezidentní čas se při dostatečně vysoké teplotě zkracuje. Požadovaná rovnovážná hodnota není dosažena v důsledku krátkých rezidentních časů. Tyto předpoklady spolu s předpokládanými rovnovážnými koncentracemi radikálů O, H a OH dávají rovnici ve tvaru:

$$\frac{d[NO]_{th}}{dt} = 2k_1^+ [N_2] [O]$$

kde je rychlostní koeficient popsán modifikovanou Arrheniovou rovnicí:

$$k = AT^b \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$$

kde AT^b představuje frekvenci kolizí, T je teplota [K], R je univerzální plynová konstanta a E je aktivační energie. Report Dr. S.A. Beltaguiho (2) zmiňuje tuto rovnici v následujícím přibližném výrazu:

$$\frac{d[NO]_{th}}{dt} = k_2(T)_{eq}^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) [O_2]_{eq}^{\frac{1}{2}} [N_2]_{eq}$$

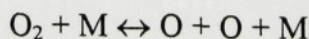
výše zmíněné konstanty lze získat dvěma základními způsoby

- 1/ přímými měřeními, tedy skrze experimentální data
- 2/ matematickými simulacemi nastavenými podle experimentů

Rychlostní koeficient je doporučován ve tvaru

$$k_1 = 1.82 \times 10^{14} \exp\left[-\frac{38370}{T}\right]$$

Rychlost vývoje NO_x je také funkcí přesnosti výpočtu koncentrací radikálu O. Koncentrace radikálu O se obecně získává vývojem disociace molekuly O₂, tedy koncentrace radikálu O je dána následující rovnicí



kde M je třetí člen, kterým může být větší počet různých chemických druhů. Predikce nižší intenzity vývoje NO_x je nicméně rozpoznána v počátečních fázích plamene. Je to zvláště způsobeno špatným míšením a predikce jsou všeobecně přesnější, kde je směšování zlepšeno. Popis rovnovážné koncentrace [O] je poté vyjádřen:

$$[O]_{eq} = \left\{ \frac{K_0}{(RT)^{1/2}} \right\} [O_2]_{eq}^{1/2}$$

kde rovnovážná konstanta

$$K_0 = 3.6 \times 10^3 \exp\left(-\frac{31090}{T}\right)^{1/2}$$

a vývoj thermal NO_x tedy je:

$$\frac{d[NO]_{th}}{dt} = 1.44 \times 10^{17} T^{-1/2} \exp\left(-\frac{69460}{T}\right) [O_2]^{1/2} [N_2] \quad \text{mole/cm}^3\text{s}$$

Výsledkem výzkumu jsou tři faktory, které ovlivňují vývoj NO_x

- 1/ Teplota plamene: je hlavním faktorem; významné přispění thermal NO_x se objevuje nad 1500K a má s teplotou exponenciálně rostoucí charakter.
- 2/ Koncentrace kyslíku v post-zóně plamene je druhým faktorem, který byl již diskutován.
- 3/ Rezidentní čas plynů v oblasti vysokých teplot.

Všechny tyto výsledky platí za předpokladu dokonale míšeného reaktoru, kde při stechiometrickém spalování nebo spalování s bohatou směsí paliva nedochází k vývoji NO_x. Je to vzhledem k faktu, že se během spalování spotřebují všechny molekuly O₂ a není žádný volný kyslík pro vývoj thermal NO_x. V praxi nicméně neexistuje dokonale míšený reaktor. Naopak, nejvyšší hladiny NO_x se generují v blízkosti směsi se stechiometrickým poměrem. Je to způsobeno nejvyšší dosaženou teplotou při tomto složení. Poznamenejme, že vliv tlaku není předmětem diskuse, ale všeobecně je přijímán zákon $p^{1/2}$ (4, str. 31).

4.1.2 Prompt NO_x mechanismus

Bylo zjištěno, že thermal NO_x mechanismus nepopisuje vysoké hodnoty vývoje NO_x v počátečních fázích plamene. Naměřené hodnoty neodpovídaly prediktovaným pomocí thermal NO_x. Fenimore v roce 1971 simuloval vývoj NO_x v bohatých směsích uhlovodíkových plamenů. Popsal, že v prvních fázích plamene fragmenty uhlovodíků útočí na dvouatomový dusík. Jako výsledek těchto reakcí dojde k vytvoření atomového dusíku, kyanidů a aminů, které jsou později oxidovány na oxidy dusíku. Fenimoreho reakce jsou příkladem těchto procesů



CH, CH₂, C₂, C₂H, C jsou zodpovědné za prompt NO_x, zvláště CH a CH₂. Prompt NO_x popisuje vývoj v prvních fázích spalovacího procesu, který není nicméně tak podstatný ve srovnání s thermal NO_x, zvláště pro chudé směsi H₂ a CO plamenů. Bylo také zjištěno, že prompt NO_x není citlivý na teplotu a že není možné oddělit prompt NO_x od kinetiky uhlovodíků.

Pro stechiometrické a chudé směsi paliva je spalovací proces rychlý, takže jsou molekuly paliva, jako je CH, přítomny v nízkých koncentracích. Reakce CH + N₂ je zanedbatelná. Jiná situace nastává pro bohaté směsi. Koncentrace uhlovodíkových molekul je mnohem vyšší a prompt mechanismus je zdrojem důležitého podílu na vývoji NO_x.

Prompt NO_x není v první řadě sestaven z rovnic spalování. Mechanismus uhlovodíkových reakcí určují spolu s kinetikou prompt mechanismu intenzitu vývoje prompt NO_x. Naneštěstí neexistuje dostatek informací týkající se meziproductů radikálů paliva a prompt NO_x je vyjádřen pomocí proměnných, které jsou kompatibilní se spalovacím modelem. Byly vytvořeny některé předpoklady pro formulaci prompt NO_x. Tyto předpoklady jsou

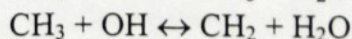
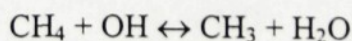
1/ CH je považován za jediný radikál, který se zúčastňuje při mechanismu prompt NO_x.



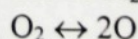
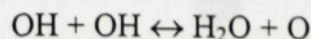
2/ vývoj HCN je úměrný vývoji prompt NO_x, tedy

$$\frac{d[\text{NO}]_{pr}}{dt} = \frac{d[\text{HCN}]}{dt} = [\text{CH}][\text{N}_2]^k$$

3/ palivo je metan a CH se formuje následující cestou



4/ a tyto dvě reakce jsou v částečné rovnováze



Je obtížné určit rychlostní koeficienty pro každou probíhající reakci, proto je zavedena globální kinetická rovnice. Je založena na chemickém mechanismu a experimentální práci De Soeta v roce 1975 (9). Rovnice je ve tvaru:

$$\frac{d[NO]_{pr}}{dt} = f \cdot K_{pr} \cdot [O_2]^a [N_2]^b [Fuel] \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$$

kde

$K_{pr} = 1.2 \times 10^7$, $a = 0$ to 1 , $E = 0.25$ MJ

f - je korekční faktor vyjadřující efekt ekvivalentního poměru paliva a typu paliva.

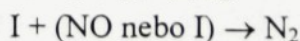
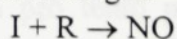
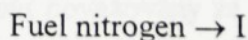
$$f = 4.75 + C_1 n - C_2 \Phi + C_3 \Phi^2 - C_4 \Phi^3$$

C_1, C_2, C_3, C_4 jsou konstanty, Φ ekvivalentní poměr.

Nakonec je také důležité zmínit fakt, že prompt NO_x zahrnuje okolo 5% z celkového vývoje NO_x pro plynná paliva. Prompt NO_x je nicméně vyšší pro kapalná a pevná paliva. Redukce vývoje prompt NO_x lze dosáhnout zmenšením rezidentního času v reakční zóně plamene a používáním chudých směsí.

4.1.3 Fuel NO_x mechanismus

Fuel NO_x je zde zmiňovaný, i když se tento model nepoužívá pro plynná paliva. Tento mechanismus je hlavním zdrojem znečištění oxidy dusíku z kapalných a plynných paliv. Ve fuel NO_x mechanismu je NO_x generován z dusíkatých sloučenin obsažených v palivu. Chemický reakční mechanismus je velmi komplexní a obecný koncept zahrnuje teorii pyrolýzy dusíku obsaženého v palivu a jeho reakcí, zatímco dochází ke vzniku molekul obsahujících dusík, například HCN, NH_j, kde $j=0,1$. Tyto látky jsou pro jednoduchost označeny velkým písmenem I, molekula obsahující kyslík R. Základní chemické reakce jsou tedy



Intenzita vývoje NO_x závisí na typu používaného paliva a na ekvivalentním poměru paliva. Tang a spol. (20) report prohlašuje, že maximální hodnoty se vyskytují pro chudé směsi. Ekvivalentní poměr je v rozmezí od 0.6 do 1.0. Intenzita vývoje fuel NO_x je zanedbatelná pro bohaté směsi (2).

4.2 NO_x produkční model v CFX-F3D

NO_x model přiřazený k CFX-F3D počítá hmotnostní zlomky NO_x, které vznikají během spalovacího procesu. Thermal NO_x je nicméně jediným modelem používaným v rámci programu pro spalování plynných paliv. Model lze také použít pouze se spalovacím modelem

Mixed-is-Burnt, kde je možné řešit vývoj NO_x pro spalování plynů, oleje a uhlí. CFX-F3D balíček také řeší produkci HCN pro spalování uhlí a oleje. Tato zpráva pojednává pouze o spalování plynů.

Model pro vývoj NO_x běží jako oddělená jednotka a neovlivňuje hlavní spalovací proces. Řešené transportní rovnice vývoje NO_x jsou založeny na předešlé diskusi (viz další detaily v apendixu F). Model se zadává pomocí klíčového slova NOX MODEL pod příkazem OPTIONS command. V našem případě se nemění standardní nastavení modelu, i když je zde možnost specifikování rychlostních konstant, aktivační teploty a jiných proměnných. Tyto hodnoty jsou v programu přednastavené jako default values.

Hodnoty vývoje NO_x jsou zkoumány pro dvě pravděpodobnostní hustotové funkce, to jest double delta a beta pdf. Tyto funkce určují chování spalovacího procesu v Mixed-is-Burnt modelu a následně tak ovlivňují intenzitu vývoje NO_x . Turbulentní model k- ϵ je použit pro všechna nastavení výpočtů.

4.3 Redukce emisí NO_x

Některé z principů kontroly NO_x byly prodiskutovány v předešlé části. Pro jednotlivé modely vývoje NO_x byly načrtnuty základní postupy redukce. Tyto techniky budou plněji popsány v těchto odstavcích. Obecné principy vedoucí k redukcí emisí NO_x se rozdělují do tří kategorií.

1. Redukce kontrolou spalovacího procesu
2. Destrukce NO_x v druhé fázi spalování
3. Úprava kouřových plynů

4.3.1 Redukce kontrolou spalovacího procesu

Tato spalovací technika patří mezi nejrozšířenější a je považována za hlavní zdroj redukce NO_x . Kontrola spalovacího procesu je neefektivnějším polem z eliminací znečištění oxidy dusíku. Palivové vstřikovací systémy mohou být považovány za kontrolovatelné. Mnoho výzkumných pracovníků zkouší nalézt nejlepší cestu pro tento proces a některé základní techniky jsou zařazeny níže.

A/ Snižování maximální teploty plamene

Tato metoda je široce používaná, zejména pro thermal NO_x . Mechanismus vývoje thermal NO_x je velmi citlivý na teplotu, takže snižování nejvyšší teploty podstatně jeho ovlivňuje tvorbu. Týká se to především plynných paliv, jako je zemní plyn, H_2 atd. Nižší teplota je dosažitelná několika níže zmíněnými postupy.

a/ ne-stechiometrické spalování zahrnující proces postupného spalování (staged combustion process)

b/ redukce přehřevu skalárů spalování, to je před-mixovaného paliva se vzduchem

d/ vysokým přestupem tepla v zóně hořáků; tedy snižováním teploty, čehož je dosaženo zvýšeným odvodem tepla

e/ re-cirkulací plyných spalin do zóny hořáků, dobré výsledky jsou dosaženy, kde jsou spaliny před re-cirkulací ochlazovány. Používají se také jiné inertní nebo nespalitelné látky, například CO_2 , N_2 , pára atd.

f/ vstřikování vodních proudů do primární zóny spalování nebo zóny vrcholové teploty (peak temperature zone).

B/ Homogenní spalování

Bylo popsáno, že nejvyšší hladiny vývoje NO_x se vytvářejí v blízkosti stechiometrických směsí. Tento paradox je způsoben špatným směřováním paliva s oxydantem. Další technikou je tedy zdokonalení směřování. Kolísání mezi chudými a bohatými směsmi se ztratí a teploty spadají do úzkého rozsahu variací. Na druhou stranu je významně omezena kontrola spalování.

C/ Snižování koncentrací kyslíku

Tento proces je znám jako kontrola dodávky paliva a kyslíku. Zředěné směsi je také dosaženo recirkulací spálených plynů.

D/ Redukce rezidentního času

Posledním procesem, který je zahrnutý v kontrole spalování, je redukce rezidentního času v zóně nejvyšších teplot. Plyny stráví v oblasti vysokých teplot kratší časový úsek.

Zóna primární teploty, ekvivalentní poměr, stupeň homogenity spalování a rezidentní čas v primární zóně, jsou hlavními znaky působícími na intenzitu vývoje NO_x . Používání těchto technik je kompromisním řešením, protože jsou současně ovlivněny i jiné aspekty procesu, zvláště samotný spalovací proces.

4.3.2 Destrukce NO_x v sekundární spalovací zóně

Destrukce oxidů dusíku je další možný zdroj snižování emisí. Palivo neobsahující dusík je spalováno v místech, kde již proudí spálené horké plyny. Nedostatek molekul kyslíku způsobuje, že vstřikované palivo reaguje s molekulami NO . Ty se následně redukují na molekulu dusíku N_2 .

4.3.3 Úprava kouřových plynů

Dostupnou technikou je i úprava kouřových plynů. Tyto metody jsou katalytické nebo ne-katalytické povahy. Redukující sloučeniny, jako je amoniak, močovina nebo ozón, jsou

vstříkovány do kouřových plynů. Je tak dosaženo destrukce molekul NO . Muzio a spol. (18) poukazují na 78% snížení NO_x při 1240K a poměru spálených plynů $\text{NH}_3/\text{NO} = 1,1$.

Lefebre popisuje čtyři metody snižování emisí NO_x (16).

- změna geometrie spalovací komory
- metoda postupného spalování (staged combustion), kde spalovací proces probíhá v určitém počtu oddělených kroků; optimalizace distribuce paliva
- spalování chudé směsi prosycené párou
- katalytické spalování, oxidace paliva úspěšně probíhá při teplotách pod hranici vznícení (lean flammability limit) paliva

Základní přístup, nicméně, spočívá v udržování teploty ve spalovací zóně v úzkém rozsahu. Tento princip je platný pro všechny výše zmíněné techniky.



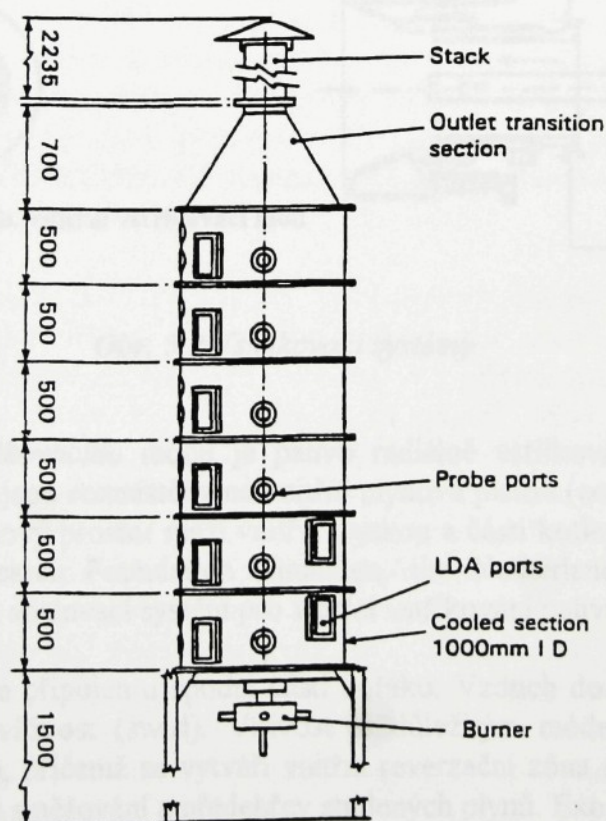
Kapitola 5

Prezentace NEL kotle

NEL kotel bude představen v této kapitole. Kotel je situován v National Engineering Laboratory v East Kilbride, Scotland. Následující odstavce přinášejí základní popis kotle a diskusi o použitých experimentálních datech.

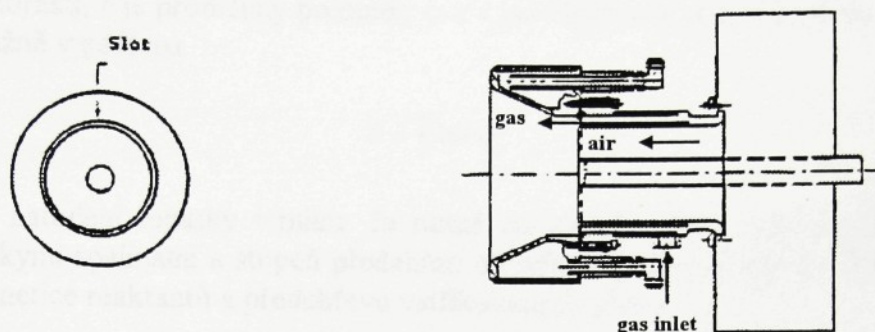
5.1 Prezentace NEL kotle

NEL kotel je polo-průmyslový, vodou chlazený kotel s válcovou spalovací komorou o průměru 1m a výškou 3m, viz obr. 5.1. Kotel běží na jmenovitém výkonu 400kW s přebytkem vzduchu 5%. Šest oddělených sekcí poskytuje možnost měření distribucí tepla. Oba systémy, pro vnější a vnitřní vstřikovávání, jsou diskutovány níže.

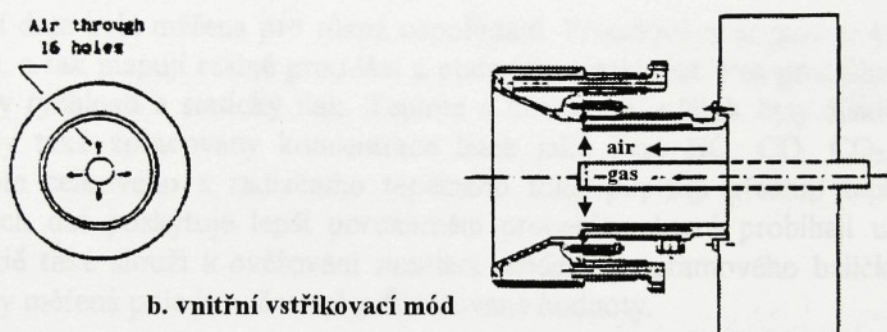


Obr. 5.1 NEL kotel

V případě *vnějšího vstřikování* se hořákový systém skládá ze dvou částí. Vnitřní část zajišťuje dodávku vzduchu a skrze vnější komponent se vstřikuje proud paliva (obr. 5.2a). Vzduch postupuje skrze centrální vzduchovou trysku s dodaným stupněm vířivosti (pre-set swirl). Zemní plyn je axiálně vstřikován skrze vnější trysku do proudu vzduchu. Tato prstencová štěrbina je široká 2.5mm.



a. vnější vstřikovací mód



b. vnitřní vstřikovací mód

Obr. 5.2 Vstřikovací systémy

V případě *vnitřního vstřikovacího* módu je palivo radiálně vstřikováno skrze 16 vysokorychlostních trysek, které jsou rozmístěny na vnitřní plynové pistoli (central gas gun). Vzduch se pohybuje skrze prstencový prostor mezi vnitřní tryskou a částí kotle, tzv. quarl (obr. 5.2b). International Flame Research Foundation (Ijmuiden, the Netherlands), fond na podporu výzkumu spalování, dodal spalovací systém pro vnitřní vstřikování paliva.

Vířník (swirl generator) je připojen u spodní části hořáku. Vzduch dosahuje na pohybující se části vířníku potřebnou vířivost (swirl). Vířivost je důležitým módem pro funkci kotle a podporuje stabilní plamen, přičemž se vytváří vnitřní reverzační zóna (Central Reverse Zone, CRZ). CRZ zajišťuje lepší směšování a předejde studených plynů. Experimenty ukazují, že lze stabilního plamene dosáhnout s vnitřní reverzační zónou, která se nachází v blízkosti hořáku. CRZ vzniká pomocí dvou obecných technik, to je zvířením proudu nebo radiálním vstřikováním proudu vzduchu z vnitřní trysky přes hlavní proud. Tato zpráva se zabývá se zvířeným proudem vzniklým ve vířníku. Směšování paliva se vzduchem se zlepšuje se zvyšujícím se vířivostním číslem. Vířivostní číslo je definováno rovnicí

$$S = \frac{W}{G \cdot R} = \frac{\int 2\pi r^2 \rho u^2 w dr}{R \int 2\pi r \rho u^2 dr}$$

kde W představuje axiální tok vířivosti tangenciální hybnosti, G je axiální tok axiální hybnosti, R je poloměr hořáku, r je proměnný poloměr, u a v jsou rychlosti a ρ je hustota. Tato rovnice může být přibližně vyjádřena

$$S = \frac{2}{3} \tan \Theta$$

kde Θ je úhel natočení lopatky vírniku. Je nutné zmínit, že plyny v blízkosti hořáku jsou přehřáté horkými spaliny a stupeň přehřátí ovlivňuje spalovací proces. Spalování závisí na chemické kinetice reaktantů a přehřevu vstříkovaných plynů.

5.2 Experimentální data

Experimentální data byla měřena pro různá uspořádání. Proudová pole jsou pokryta pro řadu axiálních rovin, a tak mapují reálné proudění a podmínky spalování. Pro proudění byly měřeny tři komponenty rychlosti a statický tlak. Teplota a koncentrace látek byly získány pro popis spalování. Byly také zpracovány koncentrace látek jako jsou HC, CO, CO₂, O₂ a NO_x. Distribuční pole celkového a radiačního tepelného toku popisují přestup tepla. Zobrazení experimentálních dat poskytuje lepší porozumění procesům, které probíhají uvnitř kotle a v našem případě také slouží k ověřování simulací modelů programového balíčku CFX-F3D. Aerodynamicky měřená pole jsou časově průměrované hodnoty.

Pro měření byly použity různé techniky a sondy, které jsou stručně popsány níže. Měření byly prováděny ve 13ti rovinách podél kotle. Blízko hořáku, kde probíhají hlavní změny, byly zvoleny menší vzdálenosti mezi jednotlivými rovinami. Pro měření distribucí teplot byl použit sakční pyrometr (suction pyrometer) (7). Sonda má průměr hlavy 15mm se zapojenými termočlánky typu S. Měřicí přesnost sondy je 99%, proto nebylo nutné provádět korekce naměřených hodnot. Časově vážené složky rychlosti spolu se statickým tlakem byly měřeny pitotovou trubicí s kulovou hlavou, s průměrem hlavy 8mm a pěti měřicími vstupy. Pitotova trubice byla před měřením nakalibrována Kenbarem (15). Měření koncentrací látek bylo provedeno kulovou, vodou chlazenou sondou z nerezové oceli, popsanou Kenbarem a Beltaguim. Vzorky postupovaly skrze odlučovač vody, kondenzátor a chemický dehydrátor pro analýzu CO, CO₂ a O₂. Infračervený analyzátor byl použit pro měření CO, CO₂ a paramagnetický analyzátor pro O₂. Pro analýzu NO_x a HC byly použity chemiluminescentní a plameno-ionizační analyzátor. Měření jsou kompletně zpracovány Kenbarem a spol. (15) v roce 1993.

Kapitola 6

Zadání modelu v CFX-F3D

Zadání modelu, to jest generování sítě, nastavení okrajových podmínek a fyzikálních modelů, je předmětem diskuse této kapitoly.

6.1 Struktura softwaru

Software CFX-F3D pro modelování proudění poskytuje uživateli možnost řešení predikcí laminárního a turbulentního proudění, a přestupu tepla. V této diplomové práci byla použita verze 4.1, která rozšiřuje geometrickou kapacitu kódu o multi-blokové, nebo blokově-strukturované sítě, kde jsou jednotlivé bloky k sobě přilepeny a tak vytvářejí konečnou síť. V tomto případě je blokově-strukturovaná síť použita jako rozvinutý nástroj, viz oddíl níže. Computational Fluid Dynamics programs (programy pro výpočet dynamiky proudění) se skládají z řady na sebe navazujících modulů:

- the Pre-processing Modules, or Geometry and Grid Generators (preprocesory, generátory geometrie a sítí)
- the Interactive Frontend (uživatelské prostředí)
- the Frontend Module of CFX-F3D (modul uživatelského rozhraní v CFX-F3D)
- the Solution Module of CFX-F3D (řešič)
- the Post-processing, or Graphics, Modules (postprocesor, grafické výstupy atd.)

To znamená, že se v první fázi procesu vytváří geometrie spolu s generací sítí. Přenos sítě do kódu pro proudění poté zahrnuje výběr modelů (například spalovacího nebo turbulentního modelu), zadání podmínek proudění (například počátečních podmínek) a volbu metody řešení. Dále dochází k početnímu řešení problému a následované vizualizací výsledků. Data z postprocesoru, tj. výsledky simulace, jsou prezentovány v kapitole 7 a 8, a v appendixu H.

Jedním z hlavních zlepšení numerického přístupu v CFX-F3D je, že koordinační systém a síť konečných diferencí jsou zcela rozdílné entity (entirely distinct entities). To znamená, že jsou přenášena jednotlivá zobrazení mezi fyzikální a výpočtovou sítí, přičemž výpočtový prostor sítě je charakteru rovnoměrně rozložených buněk.

6.2 Generování sítě

Topologie multi-blokových sítí je nástroj, který je použit pro tvorbu geometrického souboru (geometry file). Pro osově symetrickou geometrii je modelována a řešena jen jedna polovina kotle. Tento předpoklad je podepřen výsledky měření. Problém je řešen jako rovinný, tedy s jednou výpočtovou buňkou ve směru rotace. Tento fakt je vzatý v úvahu pro generování sítě a budování příkazového souboru (command file). Ve směru rotace, je na plochách v příkazovém souboru zadána periodická okrajová podmínka. Pro osu rotace byla zvolena symetrická okrajová podmínka (symmetry patch). Symetrická okrajová podmínka je jediná, která byla navolena při tvorbě geometrického modelu v preprocesoru (mesh build menu). Všechny ostatní okrajové podmínky byly zadány v příkazovém souboru (command file) pod >>MODEL TOPOLOGY.

Důležitý znak při generování sítě pro NEL kotel leží v transformaci kartézského koordinačního systému na válcový koordinační systém. Při generování sítě modelů došlo k problémům v důsledku nedostatečných informací v manuálu. Manuál a referenční příklady je nutno CFD laboratorní službou více propracovat, uživatelsky zpříjemnit. Fyzikálně-prostorová síť je vytvořena v kartézském koordinačním systému, kde z-komponent je zadán jako vzdálenost budoucí transformované úhlové souřadnice, tedy v radiánech. Příkaz CYLINDRICAL COORDINATES je poté volán v příkazovém souboru pod menu >>OPTIONS. Kartézský koordinační systém je poté automaticky transformován na válcový. Konečná podoba geometrické sítě v postprocesoru je válcová, zatímco v preprocesoru je zadána výpočtová síť kartézského souřadného systému.

Síť je vytvořena jako strukturálně multi-bloková. Pravidelný vzor buněk poskytuje výhodu uchovávání dat v maticových polích. Numerické řešení proudění je v případě metody konečných diferencí také jednodušší než pro metodu konečných prvků. V některých nepodstatných místech nicméně zůstává vysoká koncentrace buněk, například v koncové části pece. Tento fakt neovlivňuje přesnost řešení, ale zvětšuje objem zpracovaných dat a prodlužuje výpočtový čas. Je použito *hybridní diferenční schéma*, které je kombinací central (středěné) a upwind (soproudé) diferenčních schémat (differencing schemes). Středěné diferenční schéma je stručně popsáno v apendixu C.

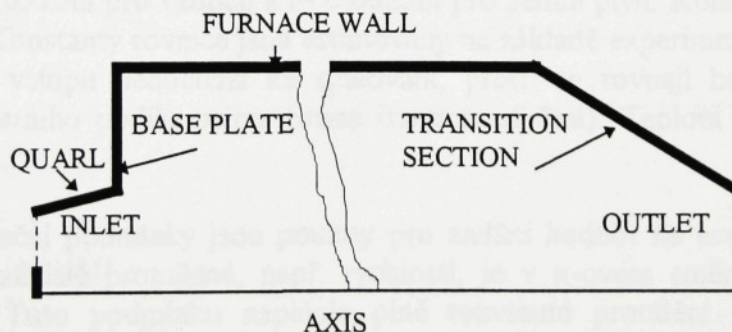
V případě *vnějšího vstřikovacího módu* je síť v místě vstřiku paliva do kotle generována podstatně jemnější, expandující na konci quarlu na stejnou vzdálenost Δy mezi uzly buněk jako v případě vstupujícího vzduchu. Pro vstřik paliva je zadáno pět a vzduch sedmáct uzlů, zatímco se celá rovina vstupu skládá z třiceti tří uzlů. Zbývající část vstupu zahrnuje stěny vstřikovacího zařízení hořáku. Síť je také generována takovým způsobem, aby byly pokryty velké gradienty proudění a spalovacích procesů. V blízkosti hořáku, kde byly očekávány hlavní změny sledovaných veličin spolu s centrální reverzační zónou, je síť jemnější. Síť postupně expanduje ve směru x a y, zvláště na konci válcové části kotle.

Stejný postup ve vytváření sítě je zvolen i pro *vnitřní vstřikovací mód*. Síť je hrubší a 19 uzlů pokývá vstupní rovinu, prvních sedm uzlů stěnu centrálního vstřikovacího systému a následně dva uzly reprezentují vstřikování paliva. Zbývající uzly jsou přiřazeny vstupujícímu vzduchu, kde rychlostní profil odpovídá vířivostnímu číslu 0,90.

Počet buněk je v případě vnějšího vstřikování 9954 a pro vnitřní vstřikování 5950. Tyto počty buněk jsou dostačující pro dosažení přesného a konvergujícího řešení. Výpočtový čas je relativně dlouhý. 4000 iterací je dosaženo za osm hodin (CPU) pro vnější a čtyři hodiny pro vnitřní mód. Jak již bylo zmíněno, sítě jsou jemnější a tak prakticky nedochází ke zkreslení řešení vlivem generované sítě, ačkoliv je chyba řešení (truncation error) závislá také na generované síti. Pro srovnání, Bronnum a Rasmussen report (5) řeší podobný geometrický problém použitím jiného typu sítě o 3027. buňkách a toto řešení konverguje. Jejich síť byla více hrubá vzhledem k rozmístěným blokům a nepravoúhlé expandující síti. Takové řešení šetří výpočtový čas, ale je mnohem náročnější na zpracování vypočtených dat. Obě generované sítě jsou prezentovány v appendixu G.

6.3 Okrajové podmínky

K řešení systému matematických rovnic pro proudění a spalování musí být zadány okrajové podmínky. Okrajové podmínky specifikují doménu řešení, v tomto případě prostor NEL kotle, a jsou zadány na vstupu (inlet), na výstupu (outlet), na ose symetrie a na stěnách kotle. Obrázek 6.1 schematicky zobrazuje uspořádání domény. Okrajové podmínky jsou označeny ve shodě s příkazovým souborem.



Obr. 6.1 Hranice pro okrajové podmínky NEL kotle

Pro všechny okrajové podmínky jsou nutná reálná experimentální data odpovídající realitě studovaného problému. Hodnoty funkčně závislých proměnných jsou specifikovány přímo na vstupu takzvanými Dirichletovými podmínkami. Pro palivo a vzduch jsou zadány tři komponenty rychlostí. Distribuce rychlostních profilů vstupujícího vzduchu byly naměřeny v NEL a přeneseny na řešenou geometrii. Celkový hmotnostní tok na vstupu vzduchu je 0.14 kg.s^{-1} , což zajišťuje dodávku 5% přebytku vzduchu. Hmotnostní průtok paliva je 0.008 kg.s^{-1} , odpovídající výkonu 400kW.

Pro *vnější vstřikovací mód* je palivo vstřikováno skrze prstencovou šterbinu o axiální rychlosti $14\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Komponent axiální rychlosti je jedinou složkou rychlostního pole, která je zadána na vstupu paliva. Pro *vnitřní vstřikovací mód*, je palivo radiálně vstřikováno ze středové trysky do zvířeného vzduchu, ale do spalovacího prostoru již vstupuje v před-mixovaném stavu. Naměřena byla směs paliva se vzduchem a z toho důvodu předešlé práce použily před-mixovaných vstupních podmínek. Výsledky před-mixovaného vstupu paliva se vzduchem jsou zde také řešeny, aby mohla být porovnána realita uzpůsobeného vstřikování. Pro dosažení nenulového hmotnostního toku skrze vstup musí být složka rychlosti kolmá na hranici domény nenulová (8). Proto byl po konzultacích s Dr Beltaguim proud paliva estimován v těsné blízkosti centrální trysky a axiálním směrem tak, aby přibližně odpovídal naměřeným hodnotám. Tento návrh byl nutný vzhledem k faktu, že Mixed-is-Burnt model pracuje pouze s oddělenými proudy paliva a vzduchu. Proud vzduchu odpovídá v obou případech vířivostnímu číslu 0.9.

Turbulentní kinetická energie a disipace turbulentní kinetické energie jsou na začátku každého výpočtu okamžitě vypočteny programem CFX-F3D. Výpočet těchto parametrů je nastaven společně se složkami rychlostí v příkazovém souboru. Vzorce vyjadřující tyto veličiny jsou následující

$$k = 0.0323(u^2 + v^2 + w^2)$$

$$\varepsilon = \frac{0.1643 k^{1.5}}{C_{\mu} l}$$

kde l je charakteristická délka proudu. Je vzata jako poloměr prstence, tedy v případě vnějšího vstřikování je $l = 0,0375\text{m}$ pro vzduch a $l = 0,0025\text{m}$ pro zemní plyn. Konstanta C je nastavena na hodnotu 0.09. Konstanty rovnice jsou estimovány na základě experimentů s podobnými poli proudění (5). Na vstupu nedochází ke spalování, proto se rovnají hodnoty podílu směsi hodnotám hmotnostního podílu paliva (mass fraction of fuel). Teplota vzduchu a paliva je nastavena na 293K.

Neumanovy počáteční podmínky jsou použity pro zadání hodnot na hranici výstupu, to jest derivace funkčně závislé proměnné, např. rychlosti, je v x -ovém směru (kolmo na rovinu výstupu) nulová. Tuto podmínku naplňuje plně rozvinuté proudění. Hranice domény je v příkazovém souboru nastavena jako „mass flow boundary“ (okrajová podmínka hmotnostního toku).

Proudění je považováno za viskózní a na stěnách kotle je předpokládána nulová rychlost. Tato podmínka souhlasí s teorií mezních vrstev. Na stěnách existují různá teplotní pole. Oblast okrajových podmínek pro stěny je rozdělena do čtyř hlavních částí s konstantní teplotou: quarl, base plate (základová deska), furnace (kotel) a transition section (přechodná sekce). Teploty jsou založeny na dodaných experimentálních datech. Je zřejmé, že teploty nejsou v těchto oblastech konstantní, nicméně se jen lehce liší pro navržené oblasti. Předpoklad konstantních teplotních polí na stěnách v tomto případě podstatně neovlivňuje průběh přestupu tepla v kotli. Teplota na quarl je zadána 373K, baseplate 515K, furnace 339K a trans 573K. Reflektivita fyzikálního povrchu pro radiální část řešení je nastavena na hodnotu 0.8.

Zadání počátečních podmínek v kódu CFX-F3D je detailněji popsáno v appendixu A.

6.4 Nastavení fyzikálních modelů

Fyzikální modely jsou nastaveny v příkazovém souboru, více informací viz apendix A. Zadání turbulentního modelu a radiace je stručně popsáno v tomto oddíle.

6.4.1 Modelování turbulence

Turbulentní plameny jsou určeny systémem nelineárních parciálních diferenciálních rovnic, které pokrývají řešení zákona zachování hmoty, hybnosti, rovnice koncentrací apod. Tyto rovnice nicméně obsahují flukтуаční členy, proto se objevují problémy s jejich řešením. Exaktní řešení Navier-Stokesových rovnic lze uplatnit na velmi jemném rozlišení sítí. Aby bylo dosaženo řešení, síť by potřebovala kolem 10^6 uzlových bodů na jeden kubický centimetr prostoru. Řešení takového problému není možné uskutečnit pomocí současných počítačů. Proto jsou Navier-Stokesovy rovnice linearizovány. Po procesu časového zprůměrování (time-averaging process) je v těchto rovnicích více neznámých než samotných rovnic. Množina rovnic je proto uzavřena rovnicemi turbulentního modelu, který je aplikován na malé buňky (eddies). Neznámé aproximované flukтуаční členy jsou tak reprezentovány termíny známých časových průměrů veličin.

V této práci je použitý turbulentní model k- ϵ . K- ϵ model je založen na viskózních eddies, vztahu mezi turbulentní kinetickou energií a její disipací. Model je široce používán, osvědčil se v mnohých případech (práce na NEL kotli), přestože se u tohoto modelu objevují problémy s predikcemi vířivého proudění. K- ϵ model nicméně vykazuje uspokojivé výsledky predikcí proudění a je v této práci používán pro všechny nastavení spalovacích modelů. Pouze jediný turbulentní model je používán z důvodů srovnatelnosti spalovacích modelů. Model je blíže představen v apendixu D.

6.4.2 Modelování radiace

Tepelný tok radiací musí být v této práci spočítán, protože představuje přibližně deset krát vyšší podíl přenosu tepla do stěn než konvekci (viz predikce, tato práce). Radiace je jedním s podstatných faktorů pro predikce distribucí teplot. Nový produkt CFX-F3D umožňuje vytváření radiačních souborů (radiation file). Radiační soubor byl nicméně generován použitím souborů, které již byly vytvořeny během předešlého vývoje (5), to je z log, build a primitive souborů. V primitive file (základní soubor), jsou definovány základní povrchy, například válce a kužele. Build file (stavební soubor) kombinuje základní povrchy a vytváří zóny, které plně popisují radiační geometrii. Fyzikální popis je také zasazen v build file. Log file (kmenový soubor) obsahuje základ generované sítě, takže je možné později provést změny sítě.

Kapitola 7

Ověření výsledků simulace spalovacích modelů

Standardní (standard) nastavení a nastavení konečně rychlých chemických reakcí s konfigurací viskózního směšování (finite rate chemistry with the viscous mixing configuration) EBU modelu byly spuštěny a porovnány spolu s MIB modelem pro *vnější vstřikovací mód*. V případě *vnitřního vstřikovacího módu* byl proveden výzkum konečně rychlých chemických reakcí (finite rate chemistry) EBU modelu a MIB modelu. Je třeba zmínit, že u tohoto módu jsou vzhledem k aproximovanému řešení výsledky ověřeny simulací před-mixovaného spalování (pre-mixed flame combustion). Všechny případy jsou řešeny pro k - ε turbulentní model a vířivostní číslo 0,90.

Poznamenejme také, že prezentované výsledky teplotních polí jsou relativními hodnotami. Adiabatická teplota je spočítána z množství přebytku vzduchu (5%) a dává normalizovanou hodnotu 1927K. Všechny výpočty běžely na 4000 iterací a dosáhly konvergentního řešení. Konvergence byla kontrolována ověřováním reziduálů ve výstupním souboru (output file). Aby bylo dosaženo konvergentního řešení, musely být v příkazovém souboru nastaveny relaxační faktory (under relaxation factors). Pro všechny složky rychlosti, turbulentní kinetickou energii a disipaci turbulentní kinetické energie, byly tyto faktory nastaveny na konstantní hodnotu 0,3. Výsledné reziduály hmotnostního toku byly pod $1.5\text{E-}3$ pro všechny případy, což je méně než 1 % celkového hmotnostního toku na vstupu do pece.

Predikce jsou získány pro tři rychlostní složky, teplotu a hmotnostní podíl produktu. Nasimulované hodnoty těchto veličin jsou srovnány s experimentálními daty. Tyto veličiny jsou dostačující pro popis polí proudění a spalování. CFX-F3D programový balíček také řeší ostatní hmotnostní zlomky pro oxydant, palivo, entalpii a distribuci tlaků. Radiační a celkové tepelné toky jsou obdrženy podél stěny kotle.

Profily rychlostí jsou zkoumány v rozmezí prvních 1045mm kotle, kde dochází k zajímavému vývoji proudových polí. Profily teplot a hmotnostních podílů produktu jsou prediktovány podél celé délce kotle, tedy pro pole spalování (combustion patterns). Pro každý případ je posouzeno devět měřících rovin kotle.

Collision mixing (směšování kolizí) pod finite rate chemistry EBU modelu selhalo již s nastartováním procesu spalování. Rovněž neuspěly pokusy zavést do příkazového souboru počáteční odhad (initial guess) s počáteční teplotou (1500K) nebo počátečním složením paliva, oxydantu a produktu v prostorách pece. V některých případech spalování nastartovalo, ale nakonec se zhroutilo. Selhalo také nastavení vysokých pod-relaxačních faktorů (under relaxation factors) pro entalpii, jejíž reziduály nedosahovaly konvergence, náhle stoupaly až způsobily zastavení výpočtového procesu. Také konfigurace *Include Product Term* nenastartovala spalování.

7.1 Vnější vstřikovací mód

Výsledky nastavení konečně rychlých chemických reakcí s konfigurací viskózního směšování EBU modelu (finite rate chemistry of the EBU model with viscous mixing configuration) jsou prezentovány v tomto oddíle. Výsledky zbývajících konfigurací jsou zařazeny v appendixu H.

7.1.1 Proudová pole (Flow patterns)

Proudová pole jsou popsána třemi časově zprůměrovanými rychlostními profily. Cílem popisu kinetiky proudění je získání dobré shody v predikci vnitřní reverzační zóny (central reverse zone, CRZ) a rychlostních profilů. Pro dosažení stability plamene je také nutné dosažení minimální vířivosti. Limitující hodnota stability byla stanovena Kenbarem na 0,80 (15, kap. 4). Stejný autor popisuje, že se plamen stává více stabilním s rostoucím vířivostním číslem.

Axiální rychlostní profily

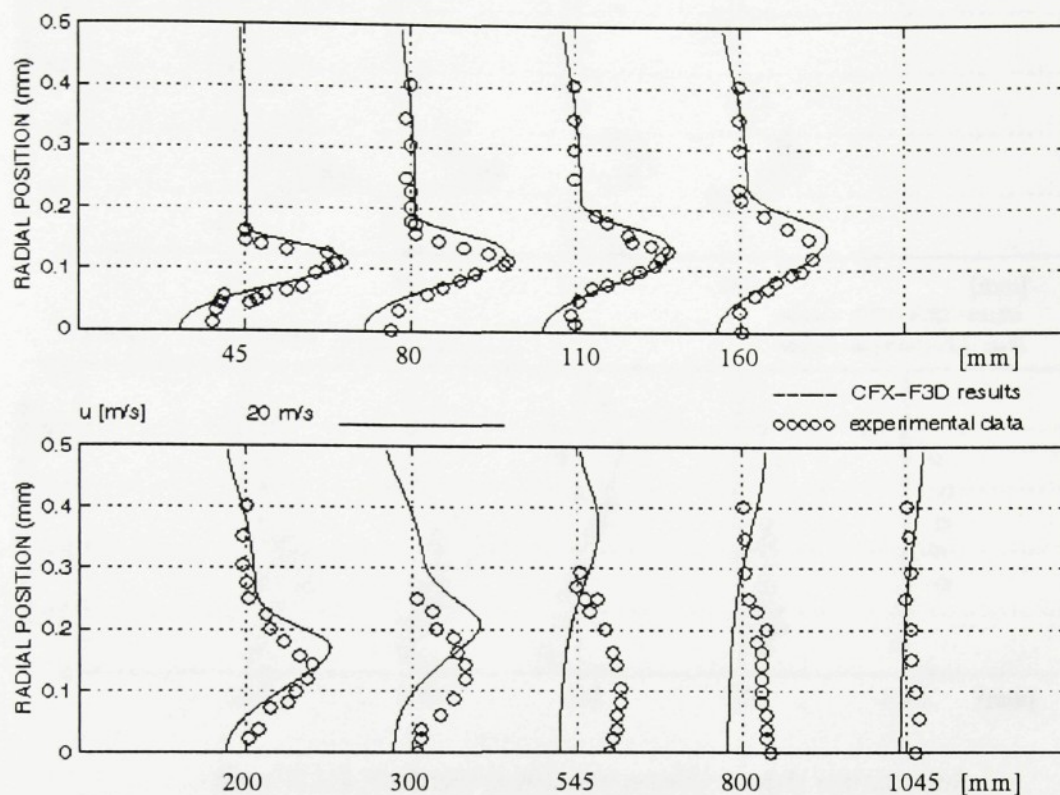
Profily jsou predikovány a měřeny pro devět rovin v rozmezí prvních 1,045m kotle. Nejvýznamnější vývoj axiálních rychlostí se vyskytuje v této oblasti. Rychlosti jsou vynášeny v měřítku a s použitím jednotek ISO (m/s). Poloha každé roviny je popsána na grafu. CRZ je změřena v blízkosti hořáku, obklopena dopředným proudem ve tvaru prstence. Změřená rychlostní pole také indikují slabou vnější reverzační zónu (external reverse zone, ERZ), která se pohybuje podél stěn kotle.

Finite rate chemistry EBU modelu s konfigurací viskózního směšování (Finite EBU) dává dobrou shodu CRZ s měřením v blízkosti hořáku, přestože je tato zóna nad-prediktována. CRZ končí na rovině 1045mm, zatímco naměřená CRZ dosahuje axiální délky 0.2m. ERZ predikce dosahuje dobré shody, silnější mezi rovinami 0.2m a 0.3 m, a slabší v blízkosti základové desky (base-plate). Simulace vrcholových hodnot (peak values) se shodují s experimentálními daty. Peakycy nicméně postupují diagonálně přes komoru, zatímco naměřené hodnoty vykazují více horizontální průběh. Prediktovaná pole jsou vynesena v grafu 7.1.1.

Standard EBU modelová konfigurace přináší podobné výsledky jako MIB model, včetně CRZ. Dopředné rychlosti jsou méně předimenzované než predikce MIB. Výsledky simulace vykazují prudký pokles axiální rychlosti v posledních rovinách a objevuje se zde slabé reverzní proudění v rovině 1045mm. Pozice vrcholových hodnot je lehce uzavřenější k ose kotle než pro MIB model a na poslední měřené rovině dochází k náhlé expanzi vrcholů směrem k podélné stěně.

Mixed-is-Burnt spalovací model (MIB) simulace nevykazuje CRZ. V blízkosti osy jsou predikovány pouze dopředné rychlosti. Vrcholy rychlostí jsou nadprediktovány o přibližně 5m/s podél celé komory a přimknutější k ose rotace více než jak vykazují experimentální profily. Šířka profilu je přibližně stejná jako pro měřený profil. Propagace hlavního vrcholu je

horizontální. ERZ ukazuje slabé zpětné proudění v blízkosti základové desky a silnější zpětné proudění v oblasti rovin 0.8m a 1.045m.



Graf 7.1.1 Axiální rychlostní profily, vnější vstřikování
Finite EBU model

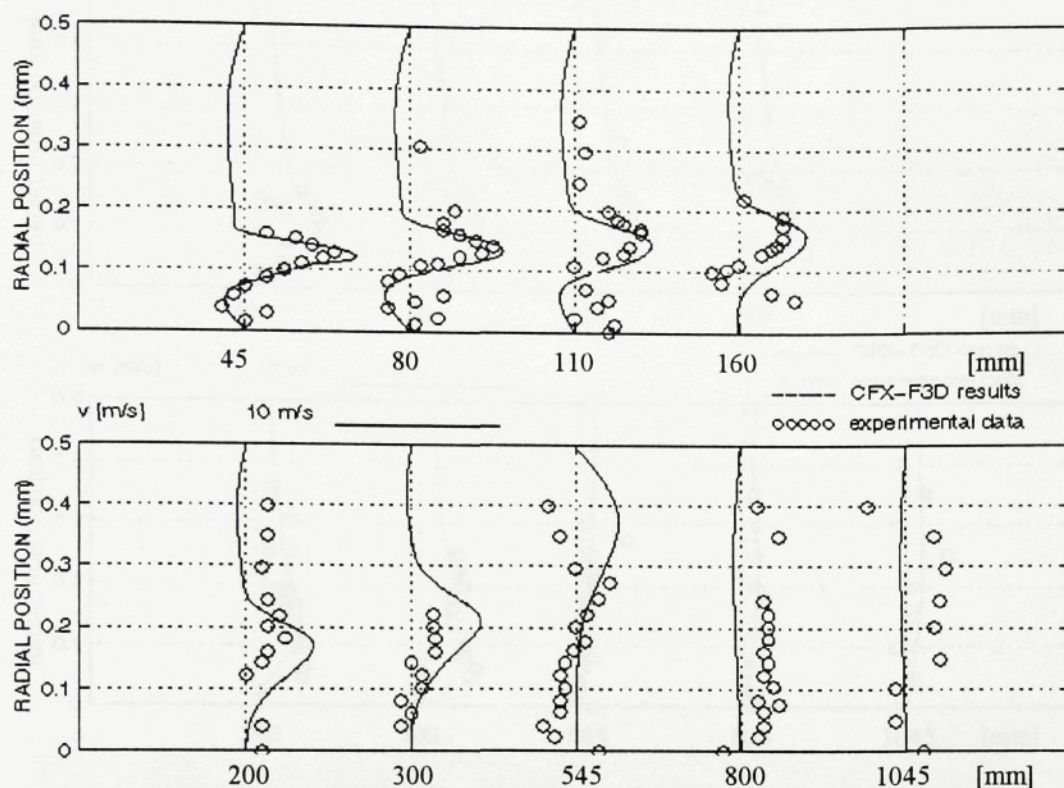
Finite EBU model dává nejlepší shodu s realitou, přestože CRZ je dlouhá a prediktovaný hlavní proud expanduje po směru proudění, zatímco si naměřené hodnoty zachovávají horizontální směr prostupu spalovací komorou.

Radiační rychlostní profily

Finite EBU model: predikce v blízkosti hořáku těsně sledují experimentální hodnoty. Rychlostní pole začíná expandovat mezi rovinami 0.3m a 0.545m dokud radiální složka rychlosti nezmizí. V posledních rovinách tedy pozorujeme rozdíly s měřeními, viz graf 7.1.2.

Standard EBU model: nasimulované hodnoty jsou podprediktované a vrcholy radiálních rychlostí jsou blíže k ose rotace. Hlavní proud poté expanduje pomaleji než v případě finite EBU a v posledních rovinách je dosaženo dobré shody.

MIB model vykazuje podobný vývoj jako standard EBU. Výsledky jsou nicméně lehce přesnější, tedy prediktované hodnoty a tvary rychlostního pole lépe následují experimentální data.



Graf 7.1.2 Radiální rychlostní profily, vnější vstřikování
Finite EBU model

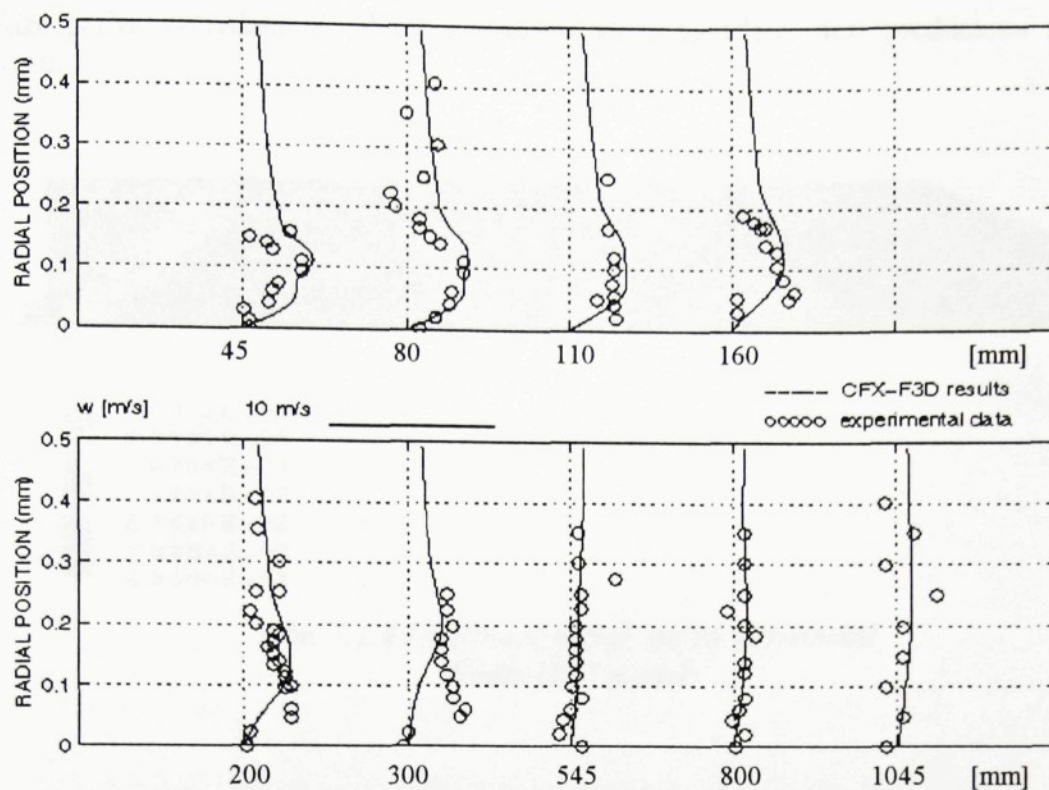
Tangenciální rychlostní profily

Ve všech případech nasimulované výsledky vykazují přibližný Rankinův vír (Rankine vortex), kde střední část distribucí rychlostí rotuje jako kompaktní těleso, zatímco vnější a vnitřní části rotují jako volný vír (free vortex). Predikce tangenciálních rychlostí jsou nicméně spojeny s axiálními rychlostmi, což ovlivňuje výsledky rozložení tangenciálních rychlostí.

Finite EBU: hodnoty a rychlostní pole tangenciálních rychlostí jsou ve všech rovinách predikovány se dostatečnou přesností, viz graf 7.1.3.

Standard EBU dává hodnoty tangenciálních rychlostních profilů přibližně tři krát nadpredikované a vrcholy rychlostí jsou v blízkosti hořáku posunuty více ke středu kotle. V rovině 800mm lze pozorovat prudký pokles rychlostí.

MIB model: výsledky simulace rychlostí jsou blízko hořáku přibližně dva krát větší než měřené hodnoty. V rovině 800mm začínají sledovat experimentální data. MIB model dává lepší výsledky než Standard EBU.



*Graf 7.1.3 Tangenciální rychlostní profily, vnější vstřikování
Finite EBU model*

7.1.2 Profily spalovacích polí (Combustion patterns)

Profily spalovacích polí jsou určeny distribucí teplot a rozložením koncentrací složek spalování, to jest profily produktu. Výzkum ukazuje, že profily spalovacích polí podstatnou měrou závisí na použitém spalovacím modelu. Distribuce teplot a produktu jsou předloženy pro Finite EBU model v grafech 7.1.4 a 7.1.5.

Teplotní profily

Teplotní profily pokrývají axiální vzdálenost 2,3m. Teploty jsou zobrazeny bezrozměrné, v poměru k hodnotě adiabatické teploty plamene (1927 K).

Pro všechny testované modely se rozvíjí plamen prstencového tvaru, který se stáčí k vnitřní stěně komory. CRZ podporuje cirkulaci horkých plynů produktů ve střední části za hořákem. Od roviny 1045mm je spalovací proces z velké části ukončen a teploty klesají díky přenosu tepla do stěn kotle. Plně vyvinutá zóna proudění se nalézá v oblasti rovnoměrného rozložení teplot a koncentrací produktu. Po srovnání predikcí s experimentálními hodnotami je nalezena dobrá shoda na konci a v okrajových částech spalovací komory. Vrcholy hodnot teplot leží na horizontálních rovinách, kde se střetává proud paliva se vzduchem, tedy v oblasti třecích ploch

a difúze paliva s oxydantem. Navíc je zjištěna těsná závislost mezi predikcemi proudění a spalování.



Obr. 7.1.4 Distribuce teplot, vnější vstřikování
Finite EBU model

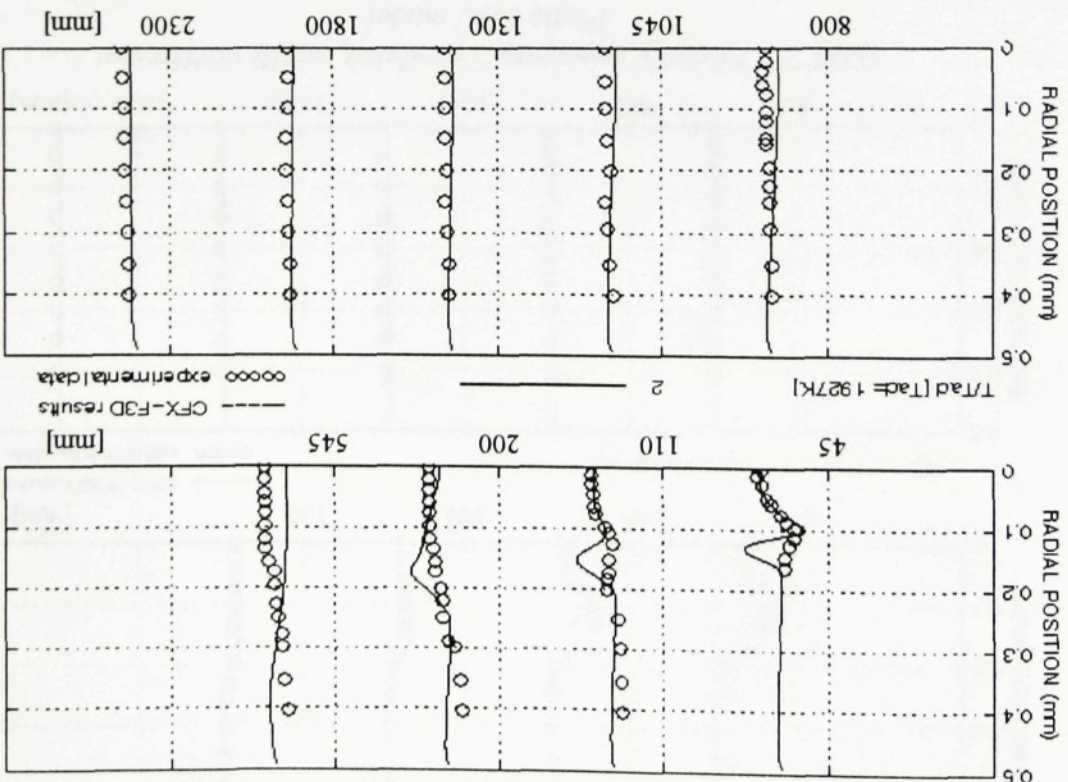


Obr. 7.1.5 Distribuce produktů, vnější vstřikování
Finite EBU model

Finite EBU je jediným spalovacím modelem, který dává přijatelné výsledky v blízkosti hořáku. Spalování probíhá právě v oblasti těsně za hořákem, kde distribuce teplot těsně sledují experimentální hodnoty, zvláště v prvních dvou rovinách 45mm a 110mm. Nadprediktované vrcholy teplot se nicméně objevují v místech, kde vstřikovaný proud paliva vstupuje do spalovací komory. Tyto vrcholy mizí od roviny 200 mm ve směru proudu. Lehká odchylka predikcí je zjištěna v rovině 545 mm.

Standard EBU dává dobré výsledky ve vnější a koncové části kotle. Ve střední části kotle, těsně za hořákem, ovšem téměř neprobíhá spalovací proces. Tato skutečnost je spojena s predikcemi axiálních rychlostí, kde nebyla simulována CRZ. Vrcholové hodnoty rychlostí nejsou nadprediktované jako v případě *Finite EBU*.

MTB model vykazuje podobné výsledky simulace jako *Standard EBU*. V případě distribuci teplot dává *MTB model* ležce horší výsledky než *Standard EBU*. Ve střední oblasti za hořákem nedochází ke spalování, zatímco měření dokazují rozložení vysokých teplotních polí.



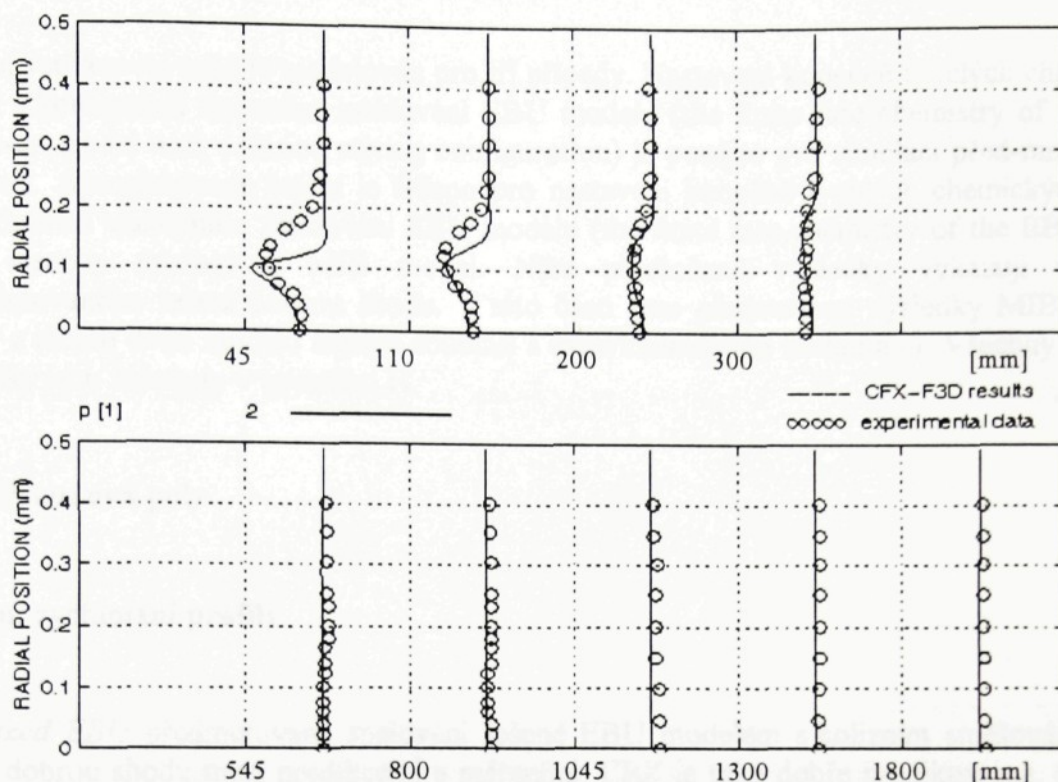
Graf 7.1.6 Teplotní profily, vnější vstřikování
Finite EBU model

Profil produktů

Hmotnostní podíl rozložení produktů indikuje vývoj spalovacího procesu ve spalovací komoře. *Finite EBU*: predikce sledují experimentální data ve všech rovinách, ležce nadprediktované ve střední části rovin 45mm a 110mm. Výsledky simulace jsou spojeny s teplotními poli, jak je zmíněno výše.

Standard EBU: v centrální části za hořákem nevykazuje spalovací proces. Výsledky ve vnější a koncové části komory jsou podobné výsledkům *Finite EBU* modelu.

MTB model nabízí podobné výsledky jako *Standard EBU*, ale je důležité zmínit, že dochází ke kompletnějšímu spalování.



Graf 7.1.7 Profily koncentrací produktů, vnější vstřikování
Finite EBU model

7.1.3 Profily pro přenos tepla

Distribuce přenosu tepla je prezentována podél celkové délky stěny pece pro radiační a celkový tepelný tok. Výsledky jsou zahrnuty v apendixu H. Je nutno poznamenat, že neexistují dostupná experimentální data pro vnější vstřikovací mód. Radiační a konvektivní tok jsou srovnány pro zkoumané spalovací modely. Poznamenejme, že radiační a konvektivní tepelný tok mají podobný průběh podél stěny pece.

Finite EBU simuluje vyšší tepelný tok v blízkosti hořáku, přibližně dvakrát vyšší než v případě *Standard* a *MIB* modelů.

Standard EBU dává podobné výsledky jako *MIB* model, maximální hodnoty je dosaženo ve vzdálenosti 1 m od hořáku.

MIB model demonstruje nejnižší hodnoty přestupu tepla z uvedených modelů. Výsledky jsou nicméně velmi blízké predikcím *Standard EBU* modelu.

7.2 Vnitřní vstřikovací mód

Vnitřní vstřikovací mód je modelován pro tři případy. Nastavení konečně rychlých chemických reakcí s konfigurací kolizního směšování EBU modelu (the finite rate chemistry of the Eddy Break-up model with collision mixing configuration) je použito pro simulaci před-mixovaných plamenů. Aproximované řešení je řešeno pro nastavení konečně rychlých chemických reakcí s konfigurací viskózního směšování EBU modelu (the finite rate chemistry of the EBU model with viscous mixing) a MIB model. Níže předložené výsledky vykazují v případě aproximovaného řešení dobrou shodu. V této části jsou představeny výsledky MIB modelu, neboť z těchto dvou modelů nejlépe souhlasí s experimentálními hodnotami. Všechny zbývající výsledky jsou zahrnuty v apendixu H.

7.2.1 Proudová pole

Axiální rychlostní profily

Premixed EBU předmixované spalování řešené EBU modelem s kolizním směšováním dává velmi dobrou shodu mezi predikcemi a měřeními. CRZ je také dobře prediktována. Odchyly od reality jsou simulovány na konci kotle, kde dochází k větší propagaci axiálních rychlostí.

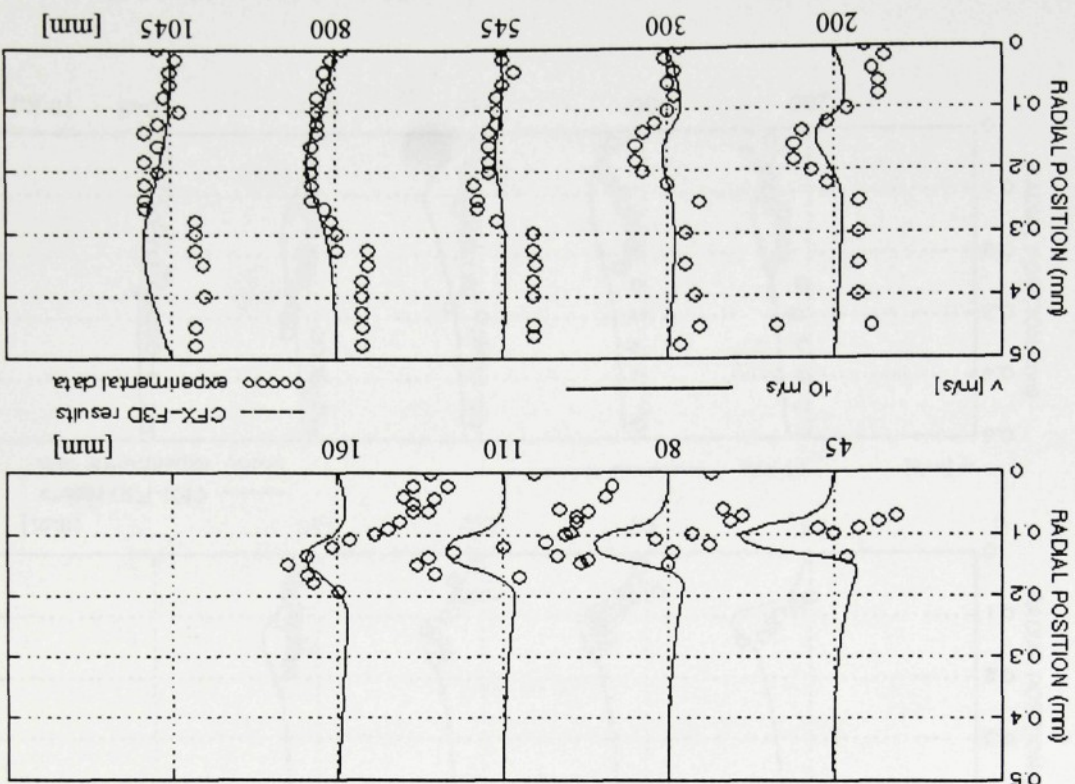
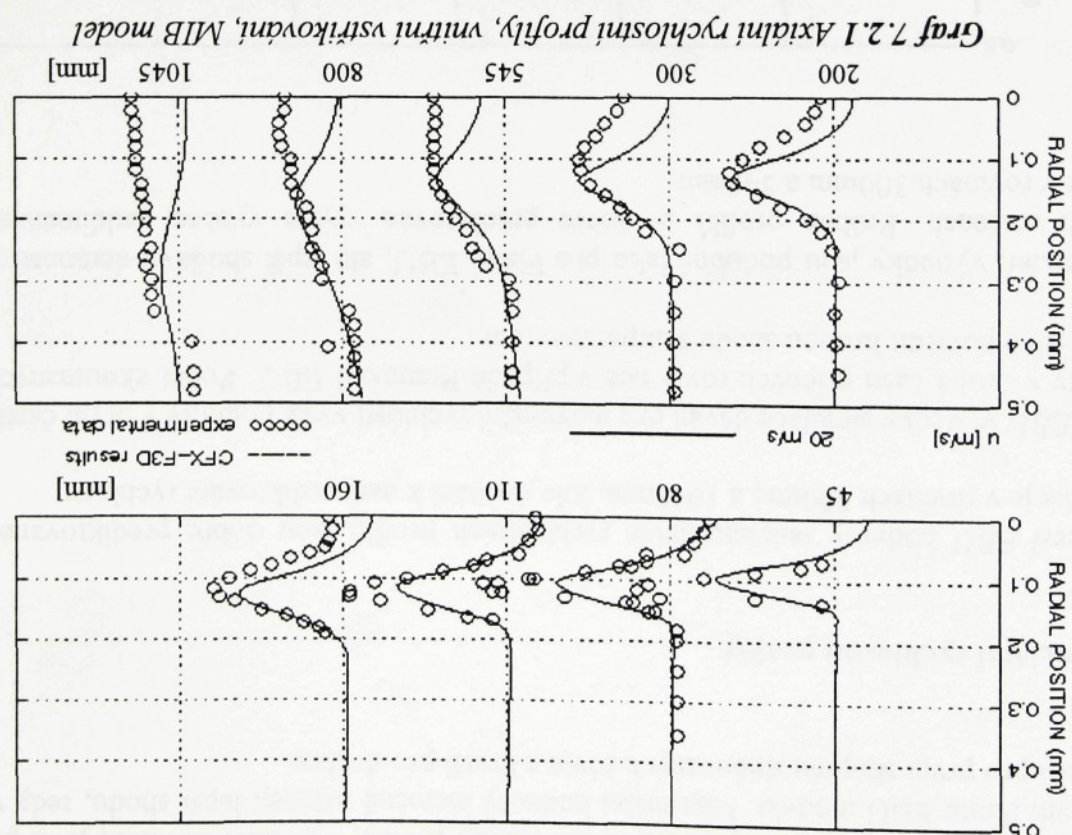
Finite rate chemistry EBU modelu s konfigurací viskózního směšování (Finite EBU) demonstruje dobrou shodu na prvních rovinách. CRZ je nadprediktována ve své délce a maximální hodnoty rychlostí jsou lehce podprediktovány. Nesouhlas mezi predikcemi a experimentálními daty je pozorován u posledních ze sledovaných rovin, kde je simulována slabá reverzační zóna proudění.

MIB model dává podobné výsledky jako Finite EBU model. Maximální hodnoty a CRZ nicméně vykazují lepší shodu s realitou než Finite EBU, tedy CRZ je méně nadprediktována a vrcholy rychlostí jsou blíže naměřeným hodnotám, graf 7.2.1.

Radiální rychlostní profily

Premixed EBU: pro tento model profily zhruba sledují experiment. Velikosti rychlostí jsou podprediktované.

Finite EBU dává lepší výsledky než Premixed EBU. Kladné maximální hodnoty velikostí dosahují naměřených hodnot. Slabé negativní vnější proudění odpovídá naměřené ERZ.



Graf 7.2.2 Radialní rychlostní profily, vnitřní vsřikování, MIB model

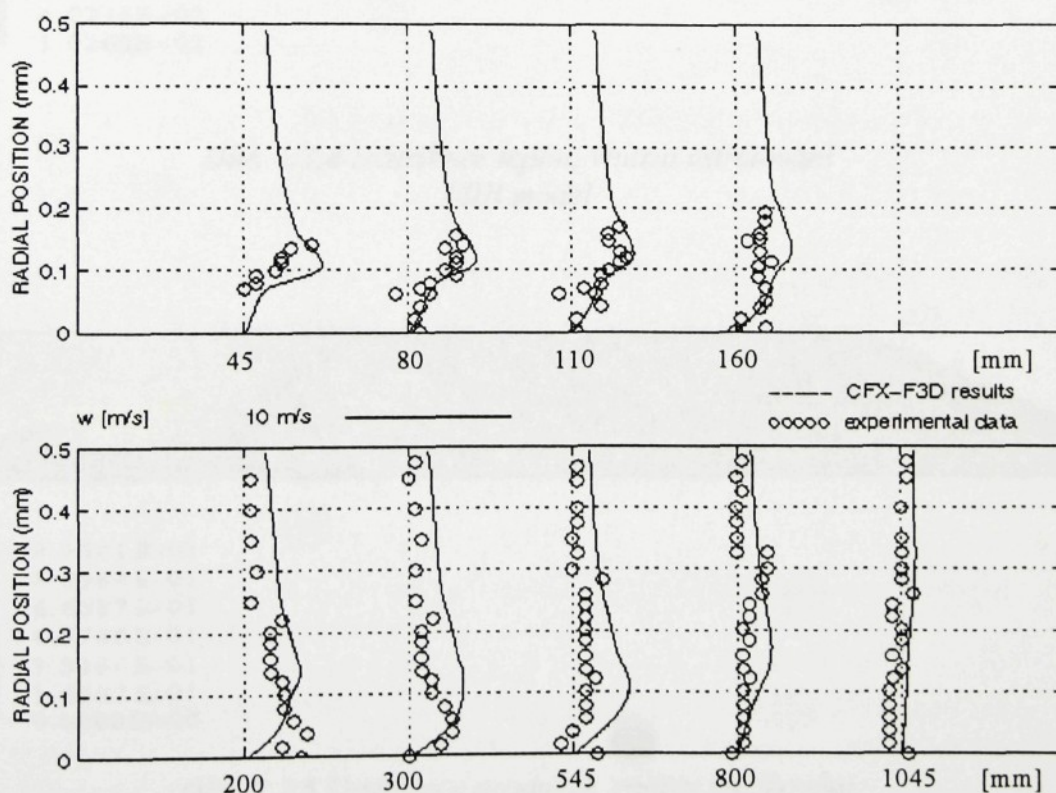
MIB model: predikce radiální rychlosti hrubě sledují profily, výsledné simulace jsou podobné predikcím Finite EBU modelu. Maximální hodnoty nicméně nabízejí lepší shodu, tedy vrcholy jsou delší pro první skupinu sledovaných rovin a kratší pro druhou.

Tangenciální rychlostní profily

Premixed EBU hodnoty tangenciálních rychlostních profilů jsou dobře prediktované, lehká odchylka je v rovinách 800mm a 1045mm, kde dochází k nadprediktování rychlosti.

Finite EBU výsledky simulace dávají pro maximální rychlosti vyšší hodnoty v první části a nižší hodnoty v druhé části příčných rovin než v případě Premixed EBU. Podél zkoumaných rovin lze nicméně potvrdit hrubou shodu s experimentem.

MIB model: výsledky jsou podobné jako pro Finite EBU, ale lepší shoda je demonstrována v prvních rovinách. Průběh profilů je dobře prediktován vyjma vysoce naddimenzovaných hodnot v rovinách 300mm a 545mm.

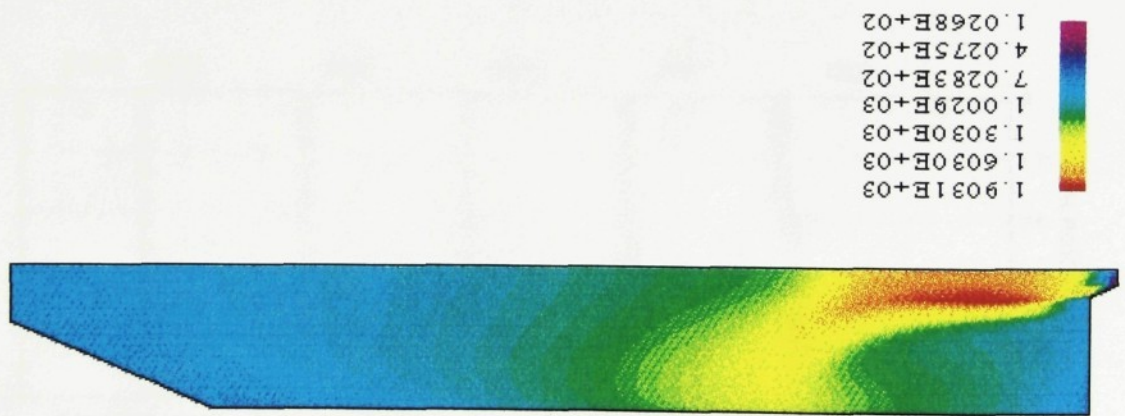


Graf 7.2.3 Tangenciální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
MIB model

7.2.2 Profily spalovacích polí (Combustion patterns)

Teplotní profily

Teplotní profily demonstrují dobrou shodu mezi predikcemi a experimentálními daty pro všechny spalovací modely. Predikce teplot jsou částečně řízeny distribucemi radiálních složek rychlosti, to jest směřováním.



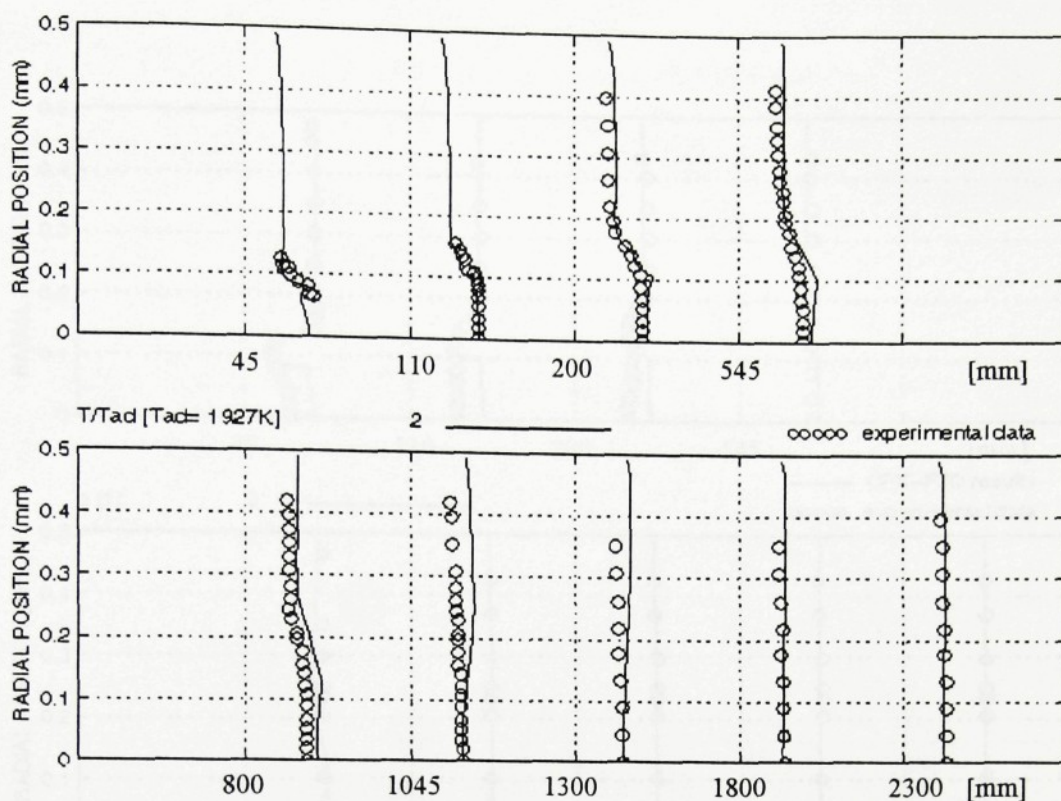
Obr. 7.2.4 Distribuce teplot, vnitřní vsířkování
MIB model



Obr. 7.2.5 Distribuce produktů, vnitřní vsířkování
MIB model

Premixed EBU vykazuje nadprediktování teplot v zóně blízko osy symetrie.

Finite EBU: teplotní profily jsou v blízkosti hořáku mírně nadprediktované, dobrá shoda je pozorovatelná s hodnotami po směru proudu.



Graf 7.2.6 Teplotní profily, vnitřní vstřikování
MIB model

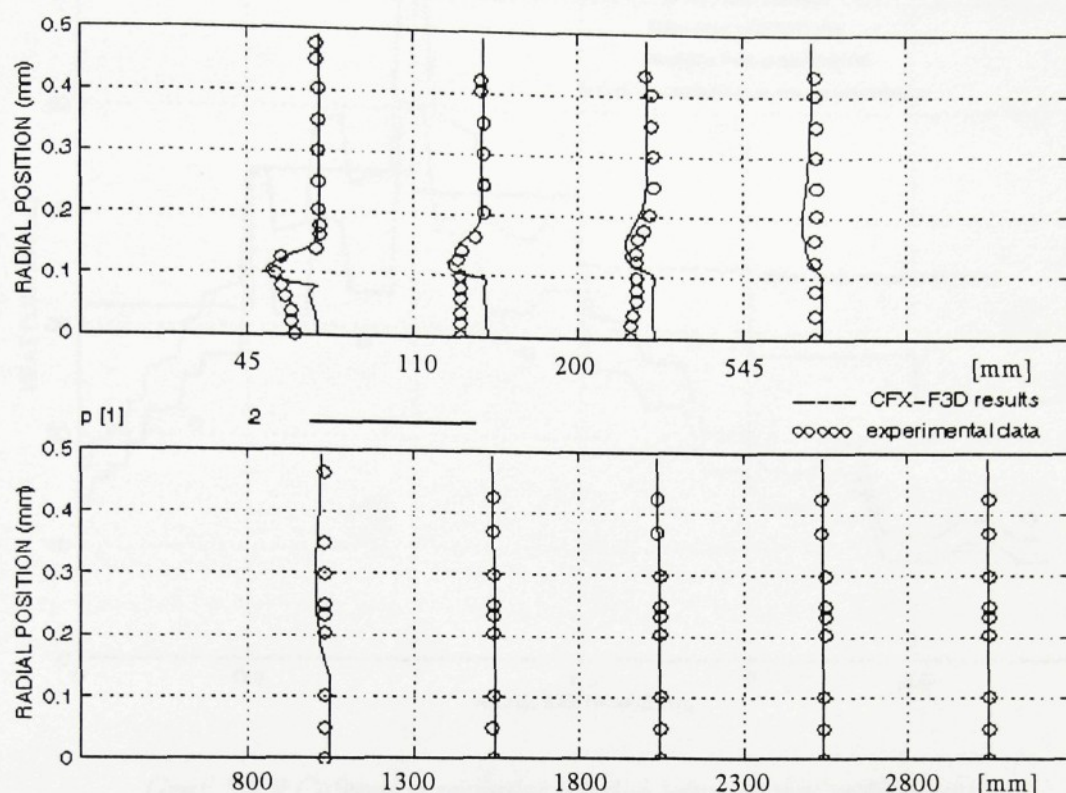
MIB model demonstruje nejlepší výsledky z prezentovaných spalovacích modelů. Mírné nadprediktování je nicméně nalezeno mezi rovinami 160mm a 200mm ve střední části, a pro 300mm ve vnější zóně spalovací komory.

Profily produktů

Premixed EBU vykazuje dobrou shodu podél celé délky podélné stěny kotle. Profily produktů jsou podprediktované v zóně osy rotace.

Finite EBU: prediktované profily produktů jsou podobné predikcím *Premixed EBU* modelu. Spalování pro všechny EBU modely ovšem není zcela dokončeno, na konci kotle zůstává nespálená část reaktantů.

MIB model výsledky simulace mají podobné chování jako EBU modely, ale na konci spalovací komory je spalovací proces dokončen.



Graf 7.2.7 Profily koncentrací produktů, vnitřní vstřikování
MIB model

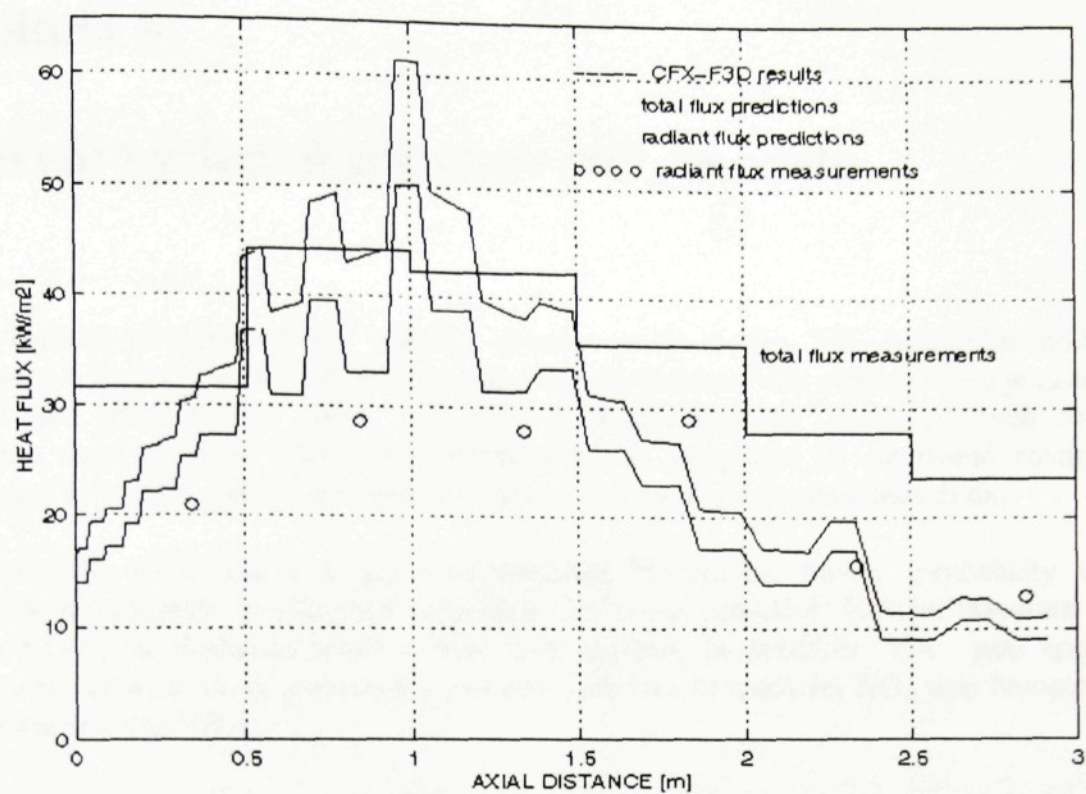
Profily pro přenos tepla

Profily polí tepelných toků hrubě sledují měřený tvar. Pro oba modely, Finite EBU a MIB, jsou tepelné toky podprediktované v druhé části kotle. Konvektivní tok tepla je celkově podprediktovaný. Poznamenejme, že pro celkový a radiální tok je distribuce přenosu tepla graficky vynesena podél celkové délky podélné stěny kotle.

Premixed EBU: celkový a radiální tok jsou mírně podprediktované, konvektivní tok je v dobré shodě s experimentem.

Finite EBU vykazuje vyšší tepelné toky přenesené do stěn pece, maximální hodnoty jsou nadprediktované.

MIB model dává v první polovině kotle nižší přenesené tepelné toky ve srovnání s Finite EBU modelem.



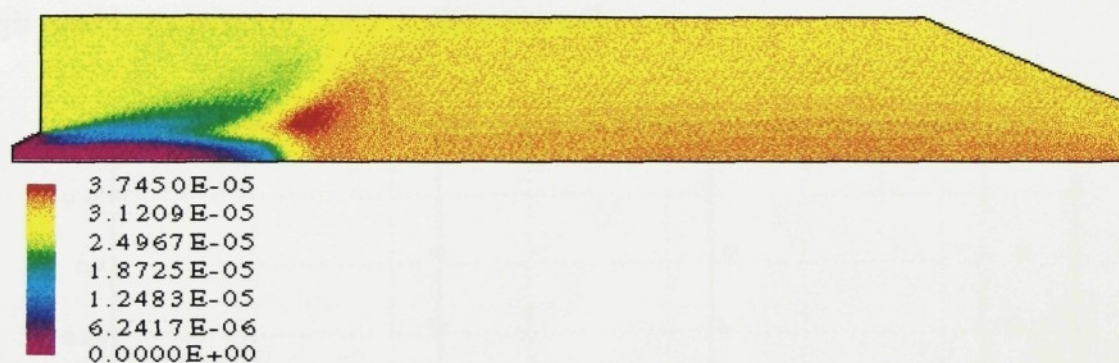
*Graf 7.2.8 Celkové a radiační tepelné toky, vnitřní vstřikování
MIB model*

Kapitola 8

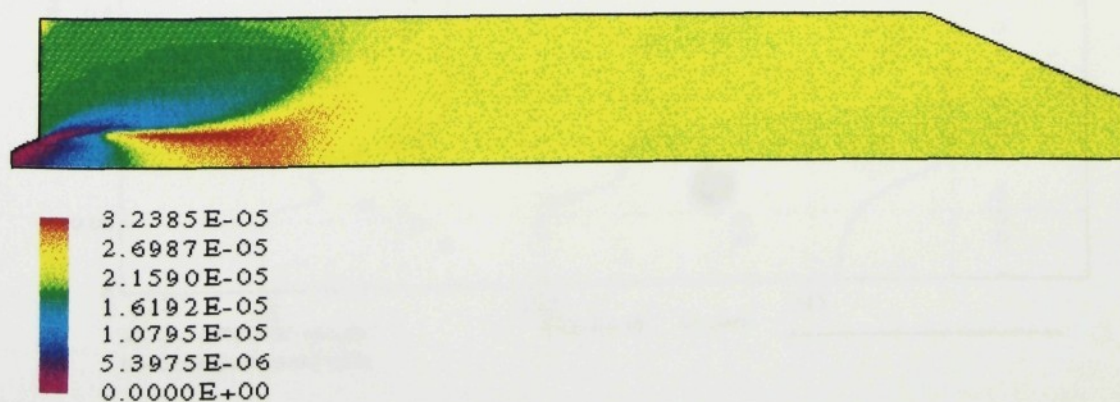
Ověření výsledků simulace NO_x modelu

V této kapitole jsou představeny výsledky simulace oxidů dusíku. NO_x produkční model řeší pro plynná paliva vývoj thermal NO_x (viz kapitola 4). Prompt NO_x mechanismus je zanedbán. Profily jsou prediktovány podél celé délce spalovací komory. Devět příčných rovin je situováno mezi prvními 2.8m kotle. Poznamenejme, že pouze tři sledované roviny jsou ověřovány pro vnější vstřikovací mód vzhledem k nedostatku experimentálních dat.

Predikce jsou těsně spjaty s pravděpodobnostní hustotovou funkcí (probability density function), turbulentním modelem a predikcemi zpětného proudění. Řídícím faktorem hladin vývoje NO_x jsou fluktuace teplot a bylo také zjištěno, že predikce NO_x jsou spojeny s predikcemi hlavních členů spalovacího procesu. Jednotky koncentrací NO_x jsou hmotnostními koncentracemi [kg NO_x].



Obr 8.1 Distribuce vývoje NO_x , vnější vstřikování, MIB model, beta function



Obr. 8.2 Distribuce vývoje NO_x , vnitřní vstřikování, MIB model, double delta function

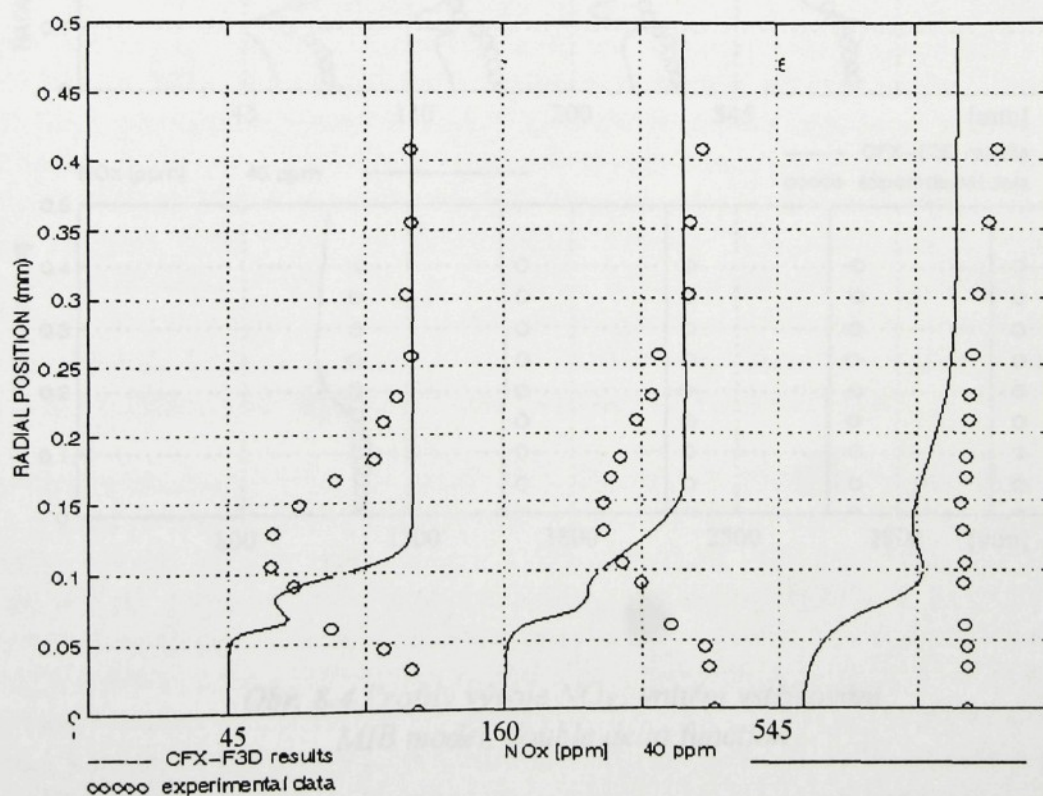
Beta pravděpodobnostní hustotová funkce (probability density functions, dále pdf) vykazuje lepší výsledky pro vnější vstřikovací mód a double delta pro vnitřní vstřikovací mód. Obecně lze říci, že hladiny formace double delta funkce jsou vyšší než pro beta pdf. Jejich výsledky jsou presentovány v tomto oddíle. Celkové shrnutí je poté předloženo v kapitole 9 a všechny zbývající výsledky jsou zařazeny v apendixu H.

8.1 Vnější vstřikovací mód

Předložené výsledky jsou předmětem diskuse pro dvě pravděpodobnostní hustotové funkce, to jest beta a double delta pdf. Predikce jsou ověřeny ve třech příčných rovinách.

Beta function vykazuje dobrou shodu s experimentálními daty ve vnější zóně spalovací komory, mírně podprediktované v rovině 545mm. Ve střední části kotle dochází k neshodě mezi predikcemi a měřeními. V místech, kde experiment udává vysoké hladiny koncentrací, téměř nedochází k formaci oxidů dusíku.

Double delta function dává podobný tvar profilů jako beta pdf. Maximální hodnoty koncentrací NO_x se objevují jako výsledek maximálních hodnot teplotních polí. V blízkosti osy rotace nicméně dochází k lepší shodě s experimentálními hodnotami než v případě beta pdf. Ve vnější zóně kotle je vývoj oxidů dusíku nadprediktován.



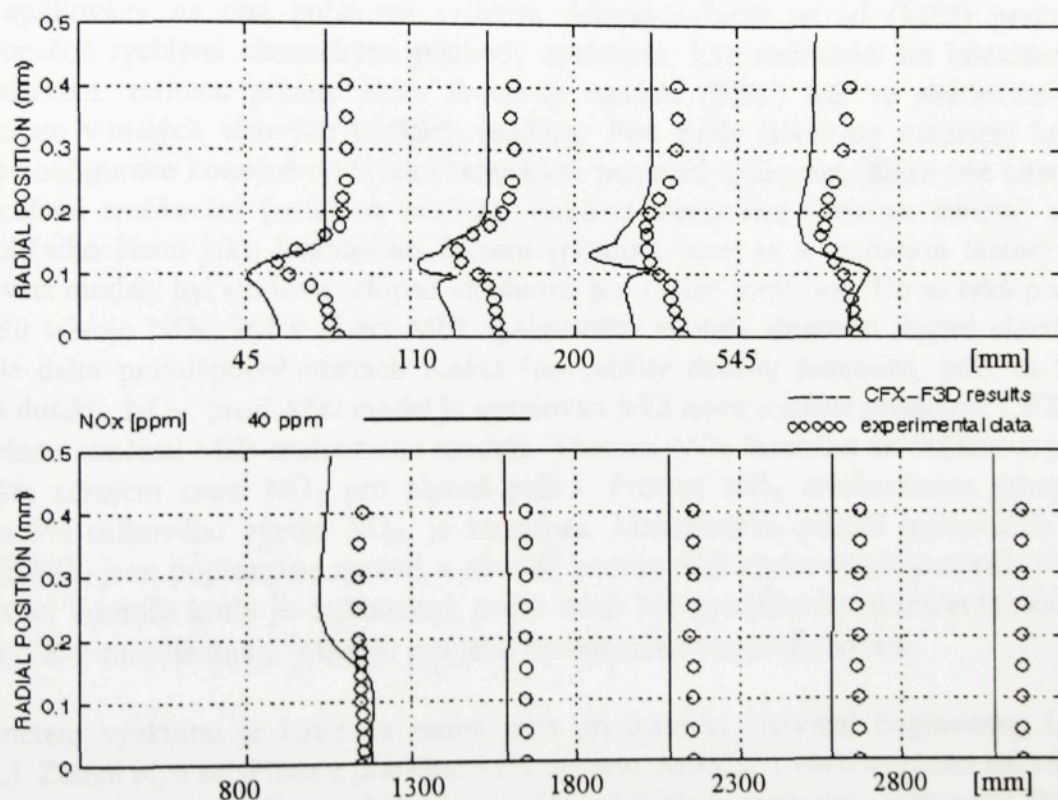
Graf 8.3 Profily vývoje NO_x , vnější vstřikování, MIB model, beta function

8.3 Vnitřní vstřikovací mód

Hladiny vývoje NO_x jsou predikovány pro beta a double delta pdf. Vzhledem k dobré shodě profilů proudových a spalovacích polí pro MIB model, prediktované hladiny NO_x lze vzít jako vztažné hodnoty k realismu simulací formačního modelu NO_x .

Beta function: výsledky hrubě sledují měřený tvar profilu. Hodnoty vývoje NO_x jsou ovšem přibližně dva krát nadprediktované.

Double delta function: predikce hrubě sledují tvar formačních polí NO_x a prediktované hodnoty jsou blíže experimentu než v případě beta pdf. Predikce se stávají v průřezu kotle konstantními později než v případě měření.



Obr. 8.4 Profily vývoje NO_x , vnitřní vstřikování
MIB model, double delta function

Kapitola 9

Závěry

Cílem této diplomové práce bylo porovnat a ověřit stávající spalovací modely v komerčním programovém balíčku CFX-F3D, verze 4.1 (Computational Fluid Dynamics Package CFX-F3D, release 4.1). Výpočty byly provedeny na pracovní stanici SUN, Sparc-station 4. Předmětem výzkumu byly dva palivové vstřikovací módy hořáku, vnější a vnitřní systém, kde do spalovací komory vstupovaly dva oddělené proudy paliva a vzduchu. Pro každý případ byly predikovány hodnoty profilů polí proudění, spalování, přenosu tepla a hmotnostních podílů vývoje NO_x .

Eddy Break-up spalovací model Spaldinga a Mixed-is-Burnt spalovací model Kenta a Bilgera byly aplikovány na oba hořákové systémy. *Mixed-is-Burnt model* (MIB) pracuje pouze s nekonečně rychlými chemickými pochody spalování, kde nedochází ke koexistenci paliva s oxydantem, zatímco přístup *Eddy Break-up modelu* (EBU) leží ve směšování paliva se vzduchem v malých vírových buňkách (eddies). Pod Eddy Break-up modelem lze nastavit různé konfigurace konečně rychlých chemických pochodů spalování (finite rate chemistry), to jest kolizní směšování (collision mixing), viskózní směšování (viscous mixing) a zahrnutí produkčního členu jako limitujícího faktoru (product term as a limitation factor). Pro tyto spalovací modely byl studován stupeň vhodnosti pro reálné problémy. Co se týká produkčního modelu vývoje NO_x , byl v rámci MIB spalovacího modelu sledován dopad chování beta a double delta pravděpodobnostních funkcí (probability density functions, pdf) na formování oxidů dusíku. NO_x produkční model je instalován jako nová součást programu CFX-F3D a je volitelnou součástí MIB spalovacího modelu. Thermal NO_x formační mechanismus je nicméně jediným zdrojem emisí NO_x pro plynná paliva. Prompt NO_x mechanismus, který pokrývá kolem 5% celkového vývoje NO_x , je zanedbán. Matematické pozadí spalovacích modelů a vývoje NO_x jsou popsány ve zprávě, z důvodů porozumění sledovaných procesů. Proudění ve spalovací komoře kotle je turbulentní, proto musí být specifikován turbulentní model. Bylo použito K- ϵ turbulentního modelu pro jeho osvědčenost a známé chování.

Předmětem výzkumu je kotel na zemní plyn při instituci National Engineering Laboratory (NEL). Zemní plyn se skládá z přibližně 95% metanu. Množství vstřikovaného paliva odpovídá tepelnému výkonu 400kW, spalovanému s 5% přebytkem vzduchu. Vířivostní číslo proudu vzduchu je 0,90. Experimentální data jsou dodána Dr. Beltaguim pro tři složky rychlosti pro profily proudových polí, teploty a produktu spalování pro profily polí spalování, přenosu tepla podél celé délky kotle a hmotnostních zlomků NO_x . S výjimkou hladin vývoje NO_x pro vnější vstřikování, jsou pro všechny případy sledovány průběhy veličin v devíti příčných rovinách spalovací komory. Tyto roviny jsou rozmístěny tak, aby pokryly velké gradienty příslušných veličin.

Byly studovány různé konfigurace spalovacích modelů. Některé konfigurace EBU modelu nicméně nenastartovaly spalovací proces. Poznamenejme, že konfigurace kolizního směšování

a zahrnutí produkčního členu jako limitujícího faktoru ve zdrojovém členu rovnice nejsou vhodné pro spalovací systémy s odděleným vstřikováním paliva. Pokusy získat přijatelné výsledky selhaly. MIB model a dvě konfigurace EBU modelu, to jest konfigurace standardní a viskózní směšování, úspěšně nastartovaly spalovací proces. Tyto tři nastavení jsou proto zkoumány. Zmiňme, že EBU model s kolizním směšováním je vhodný pro před-mixované plameny. V následujících oddílech jsou diskutovány výsledky numerické simulace.

Vnější vstřikovací mód

V predikcích vnějšího vstřikování byl učiněn krok vpřed. Předešlý výzkum (Bronnum, paper) nevykazoval shodu s měřeními v oblasti centrální reverzační zóny a nedocházelo ke spalování ve centrální oblasti těsně za hořákem. V této práci jsou podobné výsledky simulace dosaženy při použití MIB a Standard EBU modelů. Pro EBU model s viskózním směšováním (Finite EBU) je dosaženo přijatelných výsledků mezi predikcemi a experimentálními daty. Profily polí teplot a produktu se prakticky shodují s měřeními. Nadprediktované maximální hodnoty teploty se nicméně objevují v horizontální rovině, kde vstřikované palivo vstupuje do spalovací komory. Co se týká proudění, výsledky simulace dávají vyvinutou centrální reverzační zónu. V důsledku toho dochází k cirkulaci horkých produktů spalování a předešlého vstřikovaných proudů plynů. Distribuce radiálních rychlostí dávají dobrou shodu s měřením, přestože u posledních sledovaných rovin dochází k jejich prudké expanzi. Lze také vysledovat souvislost mezi průběhy axiálních a radiálních rychlostí. Tangenciální složky rychlostí se shodují s experimentálními daty.

Poznamenejme, že Mixed-is-Burnt model demonstruje v posledních rovinách po směru proudu lepší shodu s měřením. Tyto roviny nejsou nicméně zajímavé vzhledem k malým gradientům sledovaných veličin a již skončenému spalovacímu procesu v této oblasti. MIB model prediktuje obecně kompletnější spalování, to jest vysoké procento produktů spalování na výstupu z pece, což je způsobeno jeho matematickým základem.

Výsledky simulace pro přenos tepla ukazují pro Finite EBU vyšší intenzitu tepelného toku do stěny kotle v prvních 0.5m od hořáku. Maximální hodnoty přenosu tepla pro Standard EBU a MIB model jsou predikovány ve vzdálenosti 1m od hořáku.

Vnitřní vstřikovací mód

Vnitřní vstřikovací mód byl po konzultaci s Dr Beltaguim aproximován axiálním proudem paliva vstřikovaného v blízkosti centrální trysky. Vstřikované palivo odpovídá výkonu 400kW a na tuto aproximaci lze na aplikovat naměřené hodnoty. Byly použity MIB a Finite EBU (viscous mixing) modely spolu s Premixed EBU, předmixované plamenné spalování s konfigurací kolizního směšování (premixed flame with collision mixing configuration) pro jejich srovnání. Všechny spalovací modely prediktovaly uspokojivé výsledky. MIB spalovací model nicméně demonstroval lehce lepší výsledky než Standard EBU model. Centrální

reverzační zóna je nadprediktována ve své délce a rovněž dochází k neshodě v místě sekundárního zpětného proudění. Veličiny spalování jsou v dobré shodě s měřeními.

Predikce přenosu tepla hrubě sledují experimentální data pro všechny modely. Před-mixované plamenné spalování ovšem dává podprediktované hodnoty. Na druhou stranu, konvektivní přenos tepla je podprediktován pro Finite EBU a MIB modely

Vývoj NO_x

NO_x produkční model je novým doplňkem programu CFX-F3D a předešlá práce zabývající se predikcemi oxidů dusíku používala fortranové subrutiny. Výsledky simulace prokázaly, že NO_x model demonstruje dobré výsledky pro beta pdf pro vnější vstřikování a double delta pdf pro vnitřní vstřikování. Double delta pdf obecně prediktuje vyšší úroveň vývoje emisí NO_x . Double delta pdf také dává dobré výsledky pro simulace, kde predikce profilů rychlostních a spalovacích polí vykazovaly dobrou shodu s experimentálními hodnotami. Double delta pdf je tedy doporučena pro budoucí práci, a to i vzhledem k celkovému trendu podprediktování hladin vývoje oxidů dusíku.

Shrnutí

Cílem diplomové práce byl průzkum chování numerických simulací spalovacích modelů na reálných vstřikovacích systémech. Správná volba strategie řešení předurčuje správnost získaných predikcí. Řešení vnějšího vstřikování paliva je složitějším problémem, kde slabší proud paliva expanduje do spalovacího prostoru. Přesto se podařilo dosáhnout dobré shody pro konečně rychlé chemické pochody spalování Eddy Break-up modelu s konfigurací viskózního směšování. Ukázalo se, že řešení vnitřního vstřikování paliva je snadněji řešitelný problém, kde je proud paliva obklopen proudícím vzduchem. Pro tento typ vstřikování jsou použitelné oba spalovací modely. V tomto specifickém případě poskytla mírně přesnější výsledky simulace Mixed-is-Burnt modelu. Vývoj emisí NO_x je řešen s Mixed-is-Burnt spalovacím modelem, kde je pro výpočet doporučena double delta pravděpodobnostní hustotová funkce.

Na závěr bych rád poznamenal, že před námi leží široké pole v budoucím ověřování spalovacích modelů a jejich neustálý vývoj. Numerické metody v mechanice tekutin a spalovacích procesech budou důležitou součástí budoucích návrhů kotlů a jiných průmyslových aplikací.

Seznam použité literatury

- [1] *Anderson, D.A.*: Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1984
- [2] *Beltagui, S.A., Kenbar, A.M.A., Maccallum, N.R.L.*: NO_x Generation and Control in Confined Swirling Flames, Review and parametric study, Glasgow University, paper HTFS RS 827, NEL/HTFS 123
- [3] *Bertin, J., Smith, M.*: Aerodynamics for Engineers, Englewood Cliffs, NJ 07632, 1989
- [4] *Boersma, J.M.*: Modelling of NO_x Emission from Natural Gas Fired Gas Turbine combustors, PhD thesis, University of Twente, The Netherlands, 1993
- [5] *Bronnum, A.S., Rasmussen, A.R.*: Prediction of NO_x Formation, Aalborg University, Institute of technology, M.Sc. work, 1994
- [6] *Bronnum, A.S., Rasmussen, I.R., Beltagui, S.A.*: Modelling of Furnace Flow, Combustion and Heat Transfer, using CFDS-FLOW3D, Glasgow University, paper HTFS RS 951
- [7] *Chedaille, J. and Braud, Y.*: Measurements in Flames, Edward Arnold publishers, London, 1972
- [8] *Computational Fluid Dynamics Services*: Flow Solver User Guide, CFX-F3D version 4.1, Harwell Laboratory, Oxfordshire OX11 0RA, United Kingdom, 1995
- [9] *De Soete, G.*: 15th Internat. Symp. on Combustion, pp 1093-1099, 1975
- [10] *Elghobashi, S.*: Studies in the Prediction of Turbulent Diffusion Flames, report paper in Studies in Convection, Academic press INC., Whits table Litho Ltd., Kent, 1977
- [11] *Engleman, V.S. et al*: 14th Internat. Symp. on Combustion, pp 755-765, 1973
- [12] *Griffits, J.F. and Barnard, J.A.*: Flame and Combustion, Blackie Academic & Professional, Chapman & Hall, Glasgow, 1992
- [13] *Hirsch, C.*: Numerical Computation of Internal and External Flows, John Wiley & Sons, 1988

- [14] *Jost, W.*: Explosion and Combustion Processes, Mc. Graw Hill, New York, USA, 1946
- [15] *Kenbar, A.M.A., Beltagui S.A., Maccallum, N.R.L.*: Peripheral Fuel Injection Burner in the NEL Furnace, Glasgow University, report HTFS RS 878, NEL/HTFS 144
- [16] *Lefebvre, A.H.*: Flame Radiation in Gas Turbine Combustion Chambers, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 27, No. 9, pp 1493-1510, 1984
- [17] *Mc Laren, D.J.*: Planet under Stress, Oxford University Press, 1991
- [18] *Muzio, L.J., Anand, J.K. and Teixeira, D.*: paper, 16. Internat. Symp. on Combustion, pp 199-208, 1976
- [19] *Roper, F.G, Smith, C. and Cunningham, A.C.*: Combustion Flame, The combustion Institute, Pittsburgh, PA, USA, 1977
- [20] *Tang, S., Churcil, S.W. and Lior, N.*: 18th Internat. Symp. on Combustion, pp 73-80, 1981
- [21] *Warnatz, J.*: Hydrocarbon Oxidation at High Temperature, Ber. Bunsenges. Phys. Chem., vol. 87, pp. 1008-1022, 1984

Appendix A

Primary Solution (Command File)

Primary solution is performed using the command file. The command file is a text file that contains the input data for the model. The command file is created using the command file editor. The command file editor is a graphical user interface that allows you to enter the input data for the model. The command file editor is located in the main menu of the software.

Command file editor

Primary Solution (Command File) Appendix

1. TOTAL INTERIOR WORK SPACE (M³)
2. TOTAL REAL WORK SPACE (M³)
3. MAXIMUM NUMBER OF BLOCKS (20)
4. MAXIMUM NUMBER OF PARTIES (20)
5. MAXIMUM NUMBER OF INTER-BLOCK BOUNDARIES (20)

OPTIONS (value)

Typ. int. coordination system: cylindrical model with constant porosity. OPTIONS
Kilovolt shows potential energy profile from atmosphere

CYLINDRICAL COORDINATES
AXIS INCLUDED
MAX FRACTION BURNED
STEADY STATE
RECTANGULAR GRID

Is hybrid model specified as uniform model. Kilovolt shows per Edge Breakup & Marston-Burn model (see 3)

EDGE BREAKUP & MARSTON-BURN
MINIMUM BURN CONCENTRATION

Is pro Mixed-ii burn model to reduce or dependence on mixture fraction (pdf) & chemical species NO₂ production model

DOUBLE DELTA FUNCTION
BETA FUNCTION
NOX MODEL

Is specified as turbulent, compressible provided a turbulent process type

HEAT TRANSFER
TURBULENT FLOW

Apendix A

Příkazový soubor (Command file)

Příkazový soubor je představen v tomto apendixu pro dva případy spalovacích modelů. Fyzikální problém a data řešení jsou v příkazovém souboru nastavena pomocí klíčových slov (keywords) a příkazů (commands). Příkazy jsou indikovány pomocí značení >>.

>>SET LIMITS (nastav meze)

Příkaz, SET LIMITS, specifikuje velikost řešeného problému.

```
TOTAL INTEGER WORK SPACE 2000000
TOTAL REAL WORK SPACE 5000000
MAXIMUM NUMBER OF BLOCKS 20
MAXIMUM NUMBER OF PATCHES 200
MAXIMUM NUMBER OF INTER BLOCK BOUNDARIES 200
```

>>OPTIONS (volby)

Typ sítě, koordinačního systému a fyzikálních modelů jsou nastaveny pod příkazem OPTIONS. Klíčová slova popisující řešený problém jsou následující

```
CYLINDRICAL COORDINATES
AXIS INCLUDED
MASS FRACTION EQUATIONS 3
STEADY STATE
RECTANGULAR GRID
```

Je nezbytně nutné specifikovat spalovací model. Klíčová slova pro Eddy Break-up a Mixed-is-Burnt model jsou

```
EDDY BREAK UP COMBUSTION MODEL
MIXED IS BURNT COMBUSTION MODEL
```

a pro Mixed-is-Burnt model se zadává pravděpodobnostní hustotní funkce (pdf) s možností spuštění NO_x produkčního modelu

```
DOUBLE DELTA FUNCTION
BETA FUNCTION
NOX MODEL
```

Je specifikováno turbulentní, kompresibilní proudění a zahnutý přenos tepla.

```
HEAT TRANSFER
TURBULENT FLOW
```


COMPRESSIBLE FLOW

>>MODEL TOPOLOGY (topologie modelu)

Pomocí následujícího příkazu a klíčového slova je načten geometrický soubor (geometry file)

```
>>INPUT TOPOLOGY
  READ GEOMETRY FILE
```

Bloky (blocks) a hranice geometrického modelu (patches) mohou být vytvořeny v této sekci. Symetrické hranice (symmetry patch) a bloky jsou nicméně definovány v generátoru geometrického modelu (meshbuild) a zahrnuty v geometrickém souboru. Periodické hranice (periodic patches) jsou nadefinovány pro každý blok v tangenciálním směru

```
>>CREATE PATCH
  PATCH NAME 'PERIODIC'
  PATCH TYPE 'PERIODIC'
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'
  HIGH K
  LOW K
```

Hranice stěn jsou definovány pro oblasti s konstantní teplotou, to jest quarl, baseplate, furnace, a transition section

```
>>CREATE PATCH
  PATCH NAME 'QUARL'
  PATCH TYPE 'WALL'
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-2'
  HIGH J
```

Podobně jsou nastaveny okrajové podmínky pro vstup (Dirichletovy podmínky) a výstup (mass flow boundary)

```
>>CREATE PATCH
  PATCH NAME 'AIR11'
  PATCH TYPE 'INLET'
  BLOCK NAME 'BLOCK-NUMBER-1'
  LOW I
  PATCH LOCATION 1 1 11 11 1 1
```

>>MODEL DATA (hodnoty pro model)

Fyzikální modely a vlastnosti proudícího média jsou nastaveny pod příkazem >>MODEL DATA. Jsou specifikovány dynamická viskozita a tepelná difúzivita spalování. Tepelná difúzivita je poměr schopnosti vedení kapalinou k její tepelné kapacitě, což je pro vzduch 2.571E-5.

```
>>PHYSICAL PROPERTIES
  >>FLUID PARAMETERS
    VISCOSITY 1.82E-5
  >>HEAT TRANSFER PARAMETERS
```


COMBUSTION THERMAL DIFFUSIVITY 2.571E-5

Následuje zadání spalovacího modelu. Eddy Break-up model je specifikován příkazem

```
>>COMBUSTION PARAMETERS  
>>EDDY BREAK UP  
>>COMBUSTION CONSTANTS
```

Výhřevnost paliva, molekulární hmotnost a stechiometrický poměr spalování následují

```
HEAT OF FUEL 49446E3  
MOLECULAR WEIGHT OF FUEL 16.86  
STOICHIOMETRIC RATIO 16.7
```

Musí být také zadáno měrné teplo paliva. Vzhledem k vysokému podílu metanu v palivu (95%) jsou použity koeficienty pro měrné teplo metanu. Vzorec pro měrné teplo je

$$C_p = A_1 + A_2T + A_3T^2 + A_4T^3$$

který je v příkazovém souboru zadán pomocí klíčového slova

```
SPECIFIC HEAT COEFFICIENTS OF FUEL 1200. 3.25 0.75E-3 -7.05E-7
```

Hmotnostní zlomek hořlaviny v palivu je nastaven na hodnotu 1.0 vzhledem k zanedbatelnému množství nestlačitelných komponentů paliva.

```
>>MASS FRACTION OF FUEL  
FUEL 1.0
```

a hmotnostní podíl kyslíku v oxydantu je pro vzduch

```
>>MASS FRACTION OF OXIDANT  
OXYGEN 0.22
```

Reakce spalování jsou diskutovány v kapitole 2 (složení zemního plynu). Hmotnostní podíl oxidu uhličitého a vody v produktu dává

```
>>MASS FRACTIONS OF PRODUCTS  
CARBON DIOXIDE 0.1534  
WATER 0.1224
```

Výše zmíněné příkazy a klíčová slova jsou dostačující pro nastavení Standard EBU modelu. Pro konečně rychlé chemické pochody spalování EBU modelu musí být specifikovány limity vznícení (ignition) a zhášení (extinction). Konfigurace modelu viskózního směšování je zadána:

```
>>MODEL CONFIGURATION  
VISCOUS MIXING
```

Parametry Arrheniovy rovnice pro konečně rychlé chemické pochody spalování jsou ponechány jako default vyjma rychlostní konstanty (rate constant) a aktivační teploty (activation temperature). Tyto veličiny byly nastaveny pro spalování zemního plynu podle zkušeností z předešlého výzkumu Bronnuma a Beltaguiho (1994).

>>ARRHENIUS RATE PARAMETERS

RATE CONSTANT	1.1E-10
ACTIVATION TEMPERATURE	2.013E4
FUEL DENSITY EXPONENT	0.33
OXYGEN DENSITY EXPONENT	-1.03
DAMKOLHER NUMBER	0.001

Mixed-is-Burnt spalovací model je definován pod příkazem >>COMBUSTION PARAMETERS

>>COMBUSTION PARAMETERS

>>MIXED IS BURNT

Výhřevnost paliva a dvě modelové konstanty, které jsou zahrnuty při řešení odchylky zlomku směsi, jsou specifikovány klíčovým slovem

HEAT OF FUEL 49446E3
CG1 2.22
CG2 2.0

Hmotnostní zlomky paliva a oxydantu jsou zadány:

>>MASS FRACTIONS OF FUEL

METHANE 0.9481
ETHANE 0.0382
PROPANE 0.0021
BUTANE 0.0
CARBON MONOXIDE 0.0
CARBON DIOXIDE 0.0045

>>MASS FRACTION OF OXIDANT

OXYGEN 0.22

MIB model předpokládá nekonečně rychlé reakce, proto neexistuje možnost zadání parametrů Arheniovy rovnice.

Turbulentní model je nastaven následujícím příkazem.

>>TURBULENCE PARAMETERS

>>TURBULENCE MODEL
TURBULENCE MODEL 'K-EPSILON'

a příkaz >>RADIATION volá programový modul CFX-RADIATION, který propočítává radiaci po pravidelných intervalech

>>RADIATION

ITERATION FREQUENCY OF RADIATION CALL 20
UNDER RELAXATION FACTOR 0.05

>>SOLVER DATA (data pro řešič)

Maximální počet iterací a maximální reziduál hmotnostního toku jsou specifikovány jako kritéria pro zastavení iteračního procesu. Iterační proces byl vždy zastaven horní mezí počtu iterací než reziduály hmotnosti. Maximální počet iterací je zvolen tak, aby bylo dosaženo konvergentního řešení. Referenční bod tlaku, to jest bod atmosférického tlaku, je zadán na vstupu do spalovací komory. Kontrolní monitorovací bod (output monitor point) je umístěn v místě velkých gradientů sledovaných veličin.

>>PROGRAM CONTROL

```
MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 4000
PRESSURE REFERENCE POINT BLOCK 'BLOCK-NUMBER-1'
PRESSURE REFERENCE POINT 1 14 1
OUTPUT MONITOR BLOCK 'BLOCK-NUMBER-2'
OUTPUT MONITOR POINT 7 1 1
MASS SOURCE TOLERANCE 1E-8
```

Relaxační faktory (under-relaxation factors) jsou nastaveny, aby bylo dosaženo konvergentního řešení pro veličiny, jejichž reziduály mají tendenci k divergenci. Hodnota 0.3 je nastavena podle referenčních příkladů v manuálu programu.

>>UNDER RELAXATION FACTORS

```
U VELOCITY 0.3
V VELOCITY 0.3
W VELOCITY 0.3
K 0.3
EPSILON 0.3
```

>>CREATE GRID (vytvoř síť)

Geometrický soubor sítě (grid file) je načten do příkazového souboru

>>INPUT GRID

```
READ GRID FILE
```

>>MODEL BOUNDARY CONDITIONS (okrajové podmínky modelu)

Okrajové podmínky jsou zadány pro každou buňku na vstupu. K a ϵ jsou okamžitě vypočteny z hodnot rychlostí. Na stěnách kotle a trysek hořáku jsou nastaveny odpovídající teploty.

>>SET VARIABLES

```
PATCH NAME 'AIR10'
#CALC
UIN = 16.4;
VIN = 0.5;
WIN = 4.75;
KIN = 0.0323*(UIN*UIN+VIN*VIN+WIN*WIN);
EPSIN=0.1643*KIN**1.5/(0.09*0.032);
#ENDCALC
U VELOCITY #UIN
V VELOCITY #VIN
```


W VELOCITY #WIN
K #KIN
EPSILON #EPSIN
TEMPERATURE 293.

V případě EBU modelu jsou pro palivo zahrnuty hmotnostní zlomek a skalár spalování (combustion scalar)

MASS FRACTION1 0.0
COMBUSTION SCALAR1 0.0

zatímco v Mixed-is-Burnt modelu jsou specifikovány klíčová slova

COMBUSTION SCALAR1 0.0
COMBUSTION SCALAR2 0.0

Okrajové podmínky jsou také zadány na stěnách.

>>WALL BOUNDARY CONDITIONS
PATCH NAME 'FURNACE'
TEMPERATURE 339.

>>STOP

Apendix B

Základní rovnice v mechanice tekutin

Plný popis chování tekutin je jedním z hlavních cílů v mechanice tekutin. Přesné predikce sil působících na těleso a reálný průběh profilů proudění lze obdržet z plného systému Navier-Stokesových rovnic. Současná matematika není nicméně schopná řešit tyto rovnice analyticky, proto se pro jejich řešení používají přibližné matematické techniky, viz apendix C. V této kapitole jsou předloženy zákony popisující pohyb a chování tekutin. Existují tři zákony popisující chování tekutiny.

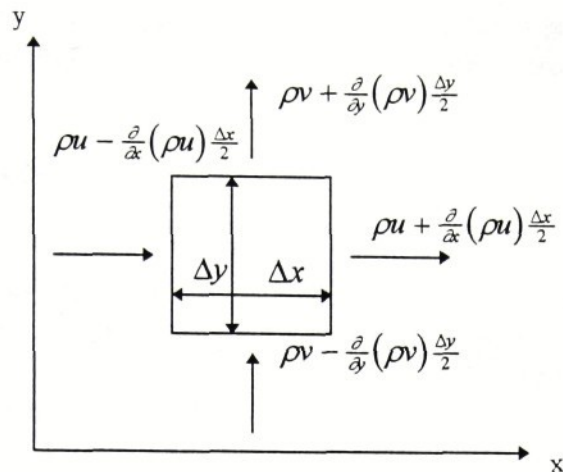
1. Zákon zachování hmoty, to jest rovnice kontinuity
2. Zákon zachování hybnosti, to jest druhý Newtonův pohybový zákon
3. Zákon zachování energie, to jest první zákon termodynamiky

Modelování spalovacích procesů v NEL kotli je řešeno pro viskózní stlačitelné proudění. Proto rovnice zahrnuté v této kapitole obsahují viskózní členy a členy s proměnnou hustotou.

B.1 Rovnice kontinuity

Zákon zachování hmoty je jedním ze základních přírodních zákonů. Popis rovnic tohoto zákona bude aplikován na malý objemový element. Předpokládejme, že skrze element dochází k volnému pohybu kapaliny a jeho hloubka ve směru osy z je rovna jednotce. Pro zjednodušení je zaveden kartézský koordinační systém, to jest směry x , y , z , a pohybující se kapalina prochází skrze definovaný kontrolní objem v rovině xy . Rychlosti jsou označeny u , v pro směry x , y . Velikost hmotnostního průtoku skrze hranice elementu se rovná součinu hustoty, rychlosti kolmé na povrch a plochy povrchu. Užitím Taylorova rozvoje prvního řádu lze vyjádřit hmotnostní tok skrze jednotlivé stěny elementu.

$$\left[\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{\Delta x}{2} \right] \Delta y + \left[\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{\Delta y}{2} \right] \Delta x - \left[\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{\Delta x}{2} \right] \Delta y - \left[\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{\Delta y}{2} \right] \Delta x$$



Obr. B.1 hmotnostní průtok skrze objemový element

Takto vyjádřená rovnováha proudící hmoty se musí rovnat negativní změně hmotnosti podle času

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y$$

a po zahrnutí těchto členů do jedné rovnice dostaneme následující vztah

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0$$

který po zahrnutí směru z dává pro trojrozměrné problémy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0$$

ve vektorové formě lze rovnici zapsat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

kde $\vec{V}$ reprezentuje vektor rychlosti. Pro relativně nízké rychlosti nicméně dochází k malým výkyvům tlaku, proto lze hustotu považovat za konstantní. Rovnice kontinuity je poté zjednodušena na tvar

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

zapsána ve vektorové podobě

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0$$

Uvedme na závěr, že je rychlost jako funkce polohy výsledkem analýzy, pokud jsou na řešení aplikovány okrajové podmínky. Nyní bude předmětem diskuse zákon zachování hybnosti.

B.2 Zákon zachování hybnosti

Rovnice pro zákon zachování hybnosti lze získat aplikováním druhého Newtonova zákona. Při pohybu média prostorem může docházet k změnám jeho tvaru a objemového toku, zatímco hmotnostní průtok zůstává konstantní. Částice je tudíž zrychlována nebo zpomalována a podle druhého Newtonova zákona je síla působící na částici

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{V}}{dt}$$

kde je vektor rychlosti $\vec{V}$ vyjádřen jako funkce polohy x, y, z a času t . Výše zmíněnou totální derivaci rychlosti lze při sledování částice v pohybu rozepsat

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t}$$

ale

$$\frac{dx}{dt} = u \quad \frac{dy}{dt} = v \quad \frac{dz}{dt} = w$$

tudíž

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} u + \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} v + \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} w + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t}$$

nebo

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V}$$

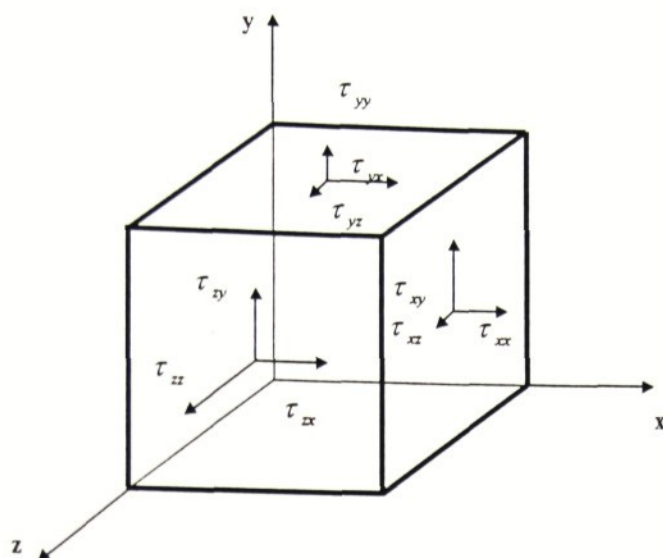
totální lokální konvektivní

Pro stacionární proudění se lokální parciální derivace rychlosti rovná nule.

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = 0$$

při aplikování druhého Newtonova zákona jsou bilancovány působící síly. Jsou zde zastoupeny tři druhy sil, které působí na objemový element: vnější síly působící přímo na hmotu elementu, tlakové síly působící na povrch elementu a síly vlivem viskozity média. Obr. B2 znázorňuje třecí síly působící na element. Poznamenejme, že

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} \quad \tau_{zx} = \tau_{xz}$$



Obr. B.2 Distribuce normálových a tangenciálních napětí na elementu média

Napětí se mění s pozicí a nutí element k akceleraci. Pro popis rovnováhy sil na element je pro zjednodušení vzato do úvahy proudění ve dvou dimenzích (2D). Tyto síly jsou načrtnuty na obr. B.3 a výsledná síla působící ve směru x je poté:

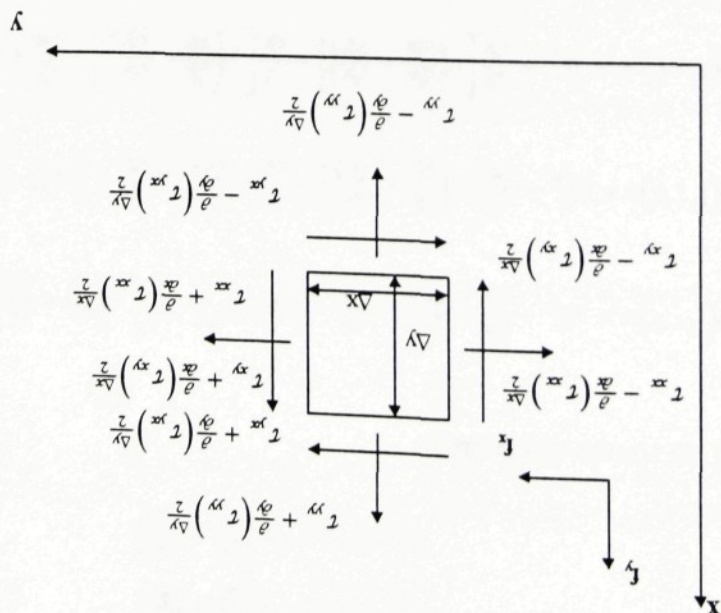
$$\rho f_x \Delta x \Delta y + \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{xx}) \Delta x \Delta y + \frac{\partial}{\partial y}(\tau_{yx}) \Delta y \Delta x$$

kde f_x je síla na jednotku hmotnosti ve směru osy x. Jestliže vezmeme v úvahu souřadnici z:

$$F_x = \rho f_x \Delta x \Delta y \Delta z + \frac{\partial}{\partial x}(\tau_{xx}) \Delta x \Delta y \Delta z + \frac{\partial}{\partial y}(\tau_{yx}) \Delta y \Delta x \Delta z + \frac{\partial}{\partial z}(\tau_{zx}) \Delta z \Delta y \Delta x$$

což se podle druhého Newtonova zákona rovná

$$ma_x = \rho \Delta x \Delta y \Delta z \frac{du}{dt} = \rho \Delta x \Delta y \Delta z \left[\frac{\partial u}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)u \right]$$



Obr. B.3 Napětí působící na dvou-rozměrný element tekutiny

a tedy

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} = \rho f_x + \frac{\partial}{\partial x} t_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} t_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} t_{zx}$$

z čehož pro směr y a z vyplývá

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} = \rho f_y + \frac{\partial}{\partial x} t_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} t_{yy} + \frac{\partial}{\partial z} t_{zy}$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} = \rho f_z + \frac{\partial}{\partial x} t_{xz} + \frac{\partial}{\partial y} t_{yz} + \frac{\partial}{\partial z} t_{zz}$$

Nyní je nezbytné spojit tato napětí s pohybem média. Proces zahrnuje viskozitu a navržení některých předpokladů:

- Je vzata v úvahu Newtonská kapalina
- vztahy mezi napětími a rychlostí deformace musí být nezávislé na transformaci
- Napětí se při nulovém rychlostním gradientu kapaliny redukují na hydrostatický tlak p.

Jednotlivé složky napětí jsou poté vyjádřeny

$$\begin{aligned} t_{xx} &= -p - \frac{\zeta}{2} \mu \Delta \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial}{\partial x} t_{xx} \\ t_{yy} &= -p - \frac{\zeta}{2} \mu \Delta \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial}{\partial y} t_{yy} \\ t_{zz} &= -p - \frac{\zeta}{2} \mu \Delta \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial}{\partial z} t_{zz} \\ t_{xy} &= \mu \left(\frac{\partial}{\partial x} t_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} t_{xy} \right) \end{aligned}$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

A po substituci do rovnic dostáváme

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) u = \rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right]$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) v = \rho f_y + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\mu \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right]$$

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) w = \rho f_z + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(2\mu \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{v} \right)$$

Tyto rovnice jsou známy jako Navier-Stokesovy rovnice kde je viskozita μ funkcí polohy. Toto je platné pro kompresibilní viskózní proudění, kde lze implantovat závislost viskozity na teplotě.

Navier-Stokesovy rovnice se skládají z šesti neznámých (u , v , w , p , ρ , μ). Po zahrnutí hustoty a viskozity jako funkcí teploty a tlaku, zůstává pět proměnných (u , v , w , p , T). K dispozici jsou nicméně pouze čtyři rovnice: rovnice kontinuity a tři rovnice pro zákon zachování hybnosti. Proto je nutné zahrnout energetickou rovnici.

B.3 Zákon zachování energie

Odvození energetické rovnice v její plné formě je velmi komplexní problém. Z tohoto důvodu je zde předložena její závěrečná interpretace. Energetická rovnice je tedy

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U H) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = \frac{\partial p}{\partial t}$$

kde H je celková entalpie, jenž zapsaná pro termodynamickou entalpii h dává

$$H = h + \frac{1}{2} U^2$$

kde $U=(u,v,w)$ je rychlost kapaliny, ρ je hustota kapaliny, p je tlak, T reprezentuje teplotu a t je čas. Divergence vektoru je $\nabla \cdot U = \frac{\partial u^i}{\partial x^i}$ a v Kartézském souřadném systému

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho U^i H - \lambda \frac{\partial T}{\partial x^i}) = \frac{\partial p}{\partial t}$$

Množinu parciálních diferenciálních rovnic (rovnice kontinuity, hybnosti a energetickou rovnici) lze také podle manuálu CFX-F3D uzavřít stavovou rovnicí

$$\rho = \rho(T, p)$$

a rovnicí vyjadřující entalpii jako funkci teploty a tlaku.

$$h = h(T, p)$$

Appendix C

Numerické metody v mechanice tekutin (Computational Fluid Dynamics, CFD)

V předešlé kapitole byly zmíněny a popsány rovnice popisující pohyb tekutiny. Tyto parciální diferenciální rovnice je velmi těžké řešit v běžné inženýrské praxi. Pro mnohé aplikace se používají relativně jednoduché rovnice, které slouží k získání základních návrhových parametrů. Široce používanými prostředky jsou grafy a tabulky, které zahrnují experimentální data. Pro jiné aplikace, jako je simulace proudění, se provádějí experimenty na modelech, které mohou být v měřítku nebo o plně velikosti. Všechny tyto přístupy generují požadovaná data jen o určité míře přesnosti. Díky rostoucímu výkonu počítačů a pracovních stanic v poslední dekádě se objevují i nové přístupy k řešení zmíněných technických problémů.

Numerické metody v mechanice tekutin (Computational Fluid Dynamics, CFD) začínají být aplikovány ve stále větším měřítku. CFD má přístup fundamentálně analyzy fyzikálních výpočtů na aritmetiku a doměny kontinua na diskretní oblasti. Matematická teorie pro numerická řešení nelineárních parciálních diferenciálních rovnic je stále vyvíjena. Specifickým cílem numerických simulací pro proudění je řešení plného systému Navier-Stokesových rovnic. Rozdíl je v komplexitě požadovaného řešení pro každý individuální případ a použitím diferenciální schématu. Bertin (3) poukazuje na tento fakt rozdělením aproximací na následující kategorie: (I) lineární neviskózní, (II) nelineární neviskózní, (III) Reynoldssem zprůměrované Navier-Stokesovi (Reynolds averaged Navier-Stokes), a (IV) plně Navier-Stokesovi. Při plně komplexitě Navier-Stokesových rovnic, aproximace pokrývají přímé řešení simulace turbulentních buněk (eddies). V CFX-F3D jsou nicméně užity Reynoldssem zprůměrované Navier-Stokesovy rovnice. Tyto rovnice jsou uzavřeny turbulentním modelem k-ε.

V této kapitole bude diskutována Metoda konečných diferencí (Finite Difference Method, FDM). Tato metoda může být úspěšně aplikována na široký rozsah úloh v dynamice proudění a je metodou zakódovanou v CFX-F3D.

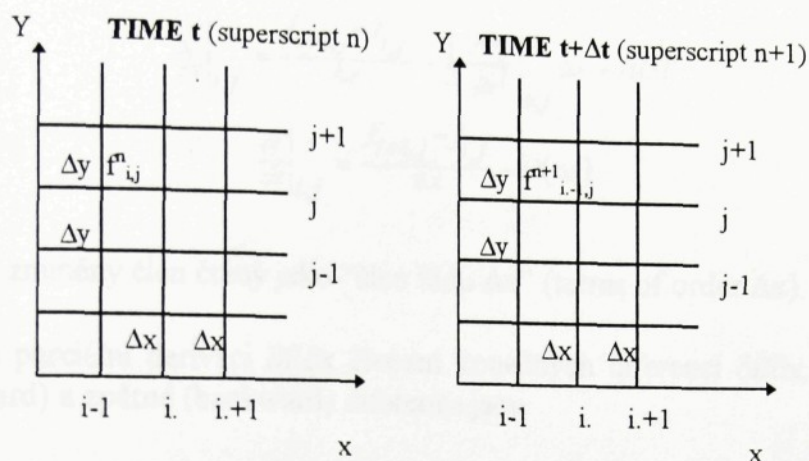
CI. Metoda konečných diferencí

Metoda konečných diferencí je založena na definici derivací a vlastnostech Taylorových řad. Rovnice pro metodu konečných diferencí jsou pravděpodobně nejjednodušší používanou metodou, zvláště na rovnoměrných sítích. Úzly generované sítě musí být umístěny na průsečících čar. Základní myšlenka pro metodu konečných diferencí je jednoduchá a byla prvně vyvinuta Eulem v roce 1768 (13, str.167). Systém aproximací je od základu vyvinut z definice derivace.

$$u_x = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

Rozvojem Taylorovy řady pro u_x dostaneme

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \cdot u_x(x) + \frac{\Delta x^2}{2} u_{xx} + \dots$$



Obr. C.1 Náznorné označení použitých indexů

tedy

$$\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} = u_x(x) + \frac{\Delta x}{2} u_{xx} + \dots$$

a

$$\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} = u_x(x) + O(\Delta x)$$

kde $O(\Delta x)$ je chyba (truncation error), která se blíží nule.

Nyní budou aplikovány formulace konečných diferencí na diferenciální rovnice. Obecná funkce f je funkcí polohy ve dvou rozměrném kartézském souřadném systému (x, y) a času (t) , to jest $f(x, y, t)$. Vzdálenosti uzlů v síti jsou označeny Δx , Δy ve směrech x a y (viz obr. C1).

$f_{i,j}^n$ představuje $f(x, y, t)$

$f_{i-1,j}^{n+1}$ představuje $f(x - \Delta x, y, t + \Delta t)$

Poté pro Taylorovy řady v $f_{i+1,j}$ dostáváme

$$f_{i+1,j} = f_{i,j} + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} (x_{i+1,j} - x_{i,j}) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} (x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + \dots$$

$$f_{i+1,j} = f_{i,j} + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x^2 + HOT$$

kde HOT je zkratka pro členy vyššího řádu (higher order terms).
Dosazením do parciálních derivací

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x + HOT$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} - O(\Delta x)$$

kde $O(\Delta x)$ je již zmíněný člen čtený jako "člen řádu Δx " (terms of order Δx).

Nyní nahradíme parciální derivaci $\partial f / \partial x$ členem konečných diferencí $\delta f / \delta x$. Poté aproximace dopředné (forward) a zpětné (backward) difference jsou

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x}$$

a mají chybu řádu Δx (truncation error of order Δx), to jest aproximace prvního řádu. Aproximace centované difference je rovna rozdílu těchto rozvojų.

$$f_{i+1,j} = f_{i,j} + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{i,j} \Delta x^3 + \frac{1}{24} \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_{i,j} \Delta x^4 + O(\Delta x^5)$$

$$f_{i-1,j} = f_{i,j} - \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x^2 - \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{i,j} \Delta x^3 + \frac{1}{24} \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_{i,j} \Delta x^4 - O(\Delta x^5)$$

Rozdíl výše zmíněných rovnic dává

$$f_{i+1,j} - f_{i-1,j} = 2 \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} \Delta x + \frac{1}{3} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{i,j} \Delta x^3 + HOT$$

a po přeskupení členů rovnice

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{i,j} \Delta x^2 + HOT$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

centrovaná diference $\delta f / \delta x$ poté nabývá formy

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x}$$

a odvození analogických výrazů pro derivace podle y a t je nasnadě, například pro $\delta f / \delta t$

$$\left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{i,j}^n = \frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^{n-1}}{2\Delta t}$$

poté centrální diferenci $\delta^2 f / \delta x^2$ dostaneme z

$$f_{i+1,j} + f_{i-1,j} = 2f_{i,j} + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} \Delta x^2 + \frac{1}{12} \left. \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \right|_{i,j} \Delta x^4 + HOT$$

a výraz pro $\delta^2 f / \delta x^2$ je

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

což lze zapsat

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

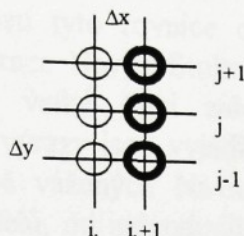
Tento výraz reprezentuje aproximaci druhého řádu. Jiné aproximace vyšších řádů a techniky řešení jsou popsány v odborné literatuře, například (13, str. 167- 200) nebo (1).

Existuje mnoho různých přístupů pro numerická řešení, zmiňme explicitní a implicitní metody řešení nebo souprouté diferenciální schéma. Techniky, které rozvíjejí různé přístupy řešení schémat metody konečných diferencí, musí vzít v úvahu kritéria stability. Některá ze schémat konečných diferencí jsou nestabilní a prověření těchto technik z pohledu stability řešení je nezbytné pro správné řešení. V následujícím oddíle je uveden příklad linearizace Navier-Stokesových rovnic.

C2. Linearizace Navier-Stokesových rovnic

Příklad linearizace Navier-Stokesových rovnic je prezentován pro stacionární, nekompresibilní, rovinné proudění laminární mezní vrstvou. Hybnost ve směru osy x je

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = \rho_e u_e \frac{du_e}{dx} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$



Obr. C.2 Vzor sítě uzlů pro Navier- Stokesovy rovnice

Vzor uvažované sítě pro tento případ je zobrazen na obr. C.2. Dolní index je pro známé hodnoty i a pro hledané hodnoty $i+1$. Horní hodnoty proudu v uzlech sítě jsou výchozími daty pro výpočet dolních hodnot. Toto řešení je stabilní a je používáno pro linearizaci diferenciálních rovnic. Jedna z možných aproximací konečných diferencí dává

$$\begin{aligned} \rho u_{i,j} \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \rho v_{i,j} \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{2\Delta y} \\ = \rho_e u_e \frac{du_e}{dx} + \mu \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i+1,j} + u_{i+1,j-1}}{(\Delta y)^2} \end{aligned}$$

kde $\rho_e u_e (du_e / dx)$ je vtaženo k počátečním podmínkám na hraně mezní vrstvy, kde jsou hodnoty proudění známy. Přepsáním této rovnice získáme

$$\begin{aligned} u_{i+1,j-1} \left[\frac{\mu}{(\Delta y)^2} + \frac{\rho v_{i,j}}{2(\Delta y)} \right] + u_{i+1,j} \left[-\frac{\rho u_{i,j}}{\Delta x} - \frac{2\mu}{(\Delta y)^2} \right] \\ + u_{i+1,j+1} \left[\frac{\mu}{(\Delta y)^2} - \frac{\rho v_{i,j}}{2(\Delta y)} \right] = \left[-\frac{\rho (u_{i,j})^2}{\Delta x} - \rho_e u_e \frac{du_e}{dx} \right] \end{aligned}$$

což lze zapsat ve tvaru

$$a_{i,j} u_{i+1,j-1} + b_{i,j} u_{i+1,j} + c_{i,j} u_{i+1,j+1} = d_{i,j}$$

Apendix D

Modelování turbulence

D.1 Turbulentní modely

Množina Reynoldsem zprůměrovaných Navier-Stokesových rovnic nelze být použita bez přídavných informací. Ve skutečnosti tyto rovnice obsahují člen Reynoldsových napětí a turbulentní difúze tepla. Proto aplikace Navier-Stokesových rovnic vyžaduje přidání dosud neznámých vztahů, které jsou z velké části založeny na kombinaci teoretických a experimentálních dat. Tyto přidané výrazy jsou vyjádřeny pomocí tak zvaných turbulentních modelů a uzavírají množinu časově vážených Navier-Stokesových rovnic. Bylo vyvinuto mnoho více či méně úspěšných modelů, od jednoduchých algebraických po velmi komplexní. CFX-F3D programový balíček dovoluje použít šest různých turbulentních modelů.

- 1/ k-ε model
- 2/ k-ε model pro nízká Reynoldsova čísla (low Reynolds number k-ε model)
- 3/ RNG k-ε model
- 4/ Algebraický model Reynoldsových napětí (algebraic Reynolds stress model)
- 5/ Diferenciální model Reynoldsových napětí (differential Reynolds stress model)
- 6/ Reynoldsovův diferenciální model toku (differential Reynolds flux model)

Všechny tyto modely jsou dostupné pro řešení nestlačitelného a stlačitelného proudění. Pro většinu z nich ovšem neznáme chování, konstanty ani rámec použitelnosti. Proto je v této diplomové práci použitý ověřený model k-ε. Použitý model musí být specifikovaný v příkazovém souboru.

D.2. Turbulentní model k-ε

K-ε model popisuje některé základní vlastnosti turbulence, jako je turbulentní kinetická energie k a disipace turbulentní kinetické energie ε . Původě byl uveden jedno-rovnicový model pro turbulentní kinetickou energii k . Po ověřování s experimentálními daty ovšem nevykazoval dostatečnou přesnost. Proto byla přidána rovnice pro disipaci turbulentní kinetické energie. Tyto dvou-rovnicové modely dávaly nejlepší výsledky.

Jsou zde diskutovány základní výrazy pro k-ε turbulentní model. Prandtl-Kolmogorův výraz udává

$$\nu_T = C_\nu k^{\frac{1}{2}} L$$

kde $k^{1/2}$ a L představují turbulentní měřítka rychlosti a délky. Turbulentní disipace ε je poté vyjádřena

$$\varepsilon = C_\varepsilon \frac{k^2}{L}$$

a Prandtl-Kolmogorův vztah

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} = \frac{\mu_T}{\rho}$$

Obecnou formou pro tyto výrazy je transportní rovnice. Proto je nasnadě možnost vyjádření členů rovnice turbulentní kinetické energie. Tyto členy jsou modelovány a dávají rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho}k\tilde{\mathbf{v}}) = \bar{\nabla} \cdot (\mu_k \bar{\nabla}k) + \left(\bar{\tau}^R \cdot \bar{\nabla} \right) \cdot \tilde{\mathbf{v}} - \bar{\rho}\varepsilon + Q_k$$

První člen na pravé straně rovnice je difúzní člen, druhý reprezentuje generování turbulentní energie. Tento vývoj turbulentní kinetické energie je způsoben prací hlavního proudu proti Reynoldsovým napětím $\bar{\tau}^R$. Třetí člen představuje disipaci. Rovnice pro disipaci ε je ve tvaru:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho}\varepsilon\tilde{\mathbf{v}}) = \bar{\nabla} \cdot (\mu_\varepsilon \bar{\nabla}\varepsilon) + C_{\varepsilon 1} P \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} f_2 + Q_\varepsilon$$

kde P je produkční člen rovnice turbulentní kinetické energie. Členy Q_ε a Q_k jsou přídavnými členy pro specifické situace proudění. Oba členy se ovšem rovnají nule pro standardní k - ε model, to jest $Q_\varepsilon = Q_k = 0$. Difúzivity výpočtových buněk (eddy diffusivities) μ_k , μ_ε jsou definovány jako

$$\mu_k = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \quad \text{a} \quad \mu_\varepsilon = \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon}$$

a jsou spojeny s rovnicemi pro turbulentní kinetickou energii a její disipaci. Pět konstant, které se objevují ve výše zmíněných rovnicích, to jest σ_k , σ_ε , C_μ , a C_ε , jsou určeny pomocí experimentálních dat. Typické hodnoty těchto konstant, používané pro mnohé případy, jsou

$$\begin{array}{lll} \sigma_k = 1 & \sigma_\varepsilon = 1.3 & C_\mu = 0.09 \\ C_{\varepsilon 1} = 1.45 - 1.55 & C_{\varepsilon 2} = 1.92 - 2.00 & f_2 = 1 \end{array}$$

Existuje i rozdílný přístup pro řešení proudění podél stěn. K a ε jsou fixovány na bodě vně viskózní mezní vrstvy a jejich hodnoty jsou vztaženy k logaritmickému zákonu stěny. Tento přístup je znám jako turbulentní proudění podél hladkých pevných stěn.

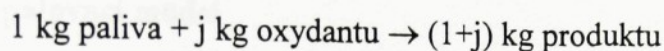
Tento dvou-rovnicový model lze aplikovat na nejrozumnější typy a komplexitu proudění, dokonce na trojrozměrné případy. Tato zpráva se zabývá dvourozměrným prouděním.

Apendix E

Matematické modely spalování

E1. Spalovací modely pro plynná paliva

CFX-F3D programový balíček řeší spalovací efekt pro rovnice určující stlačitelné proudění. Členy pro variace hustoty jsou proto počítány pomocí výrazů směšování paliva s oxydantem. Pro řešení modelu rychlých chemických reakcí se předpokládá okamžitá reakce mezi palivem a oxydantem, přičemž dochází ke vzniku produktu. V tomto případě se palivo a oxydant setkávají v jednom bodě. Palivo a oxydant reagují ve stálém poměru j , to jest stechiometrickém poměru, vyplývajícím ze zákona zachování hmoty:



a směšovací poměr f je vyjádřen rovnicí:

$$f = \frac{\chi - \chi_O}{\chi_F - \chi_O}$$

$$\chi = m_F - \frac{m_O}{j}$$

kde m představuje hmotnostní zlomek; dolní index F a O jsou vztaženy k palivu (fuel) a oxydantu. Pro oxydant a palivo, χ_O a χ_F jsou dány vztahy $\chi_O = -\frac{1}{j}$ a $\chi_F = 1$. Střední hodnota (mean) F směšovacího poměru f je použita jako proměnná v transportní rovnici (conservative transport equation)

$$\frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j F) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} F \right) = 0$$

kde ρ představuje hustotu proudícího média, u_j je střední rychlost proudícího média (mean fluid velocity), μ a μ_T jsou molekulární a turbulentní viskozita. σ_L a σ_T jsou ekvivalentní Prandtlůva čísla. Pro stacionární problém, rovnice ztrácí člen závislý na čase.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j F) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} F \right) = 0$$

Stechiometrická hodnota směšovacího poměru f , F_{ST} , je dosažena pro $\chi = 0$. Proto

$$F_{ST} = \frac{1}{1+j}$$

Určení teploty nebo entalpie je dalším klíčovým faktorem ve spalování. Tyto veličiny jsou řešeny z rovnice:

$$H(z) = \int_{T_{ref}}^T C_P(T) dT + H_F m_F$$

kde H_F představuje reakční teplo paliva, C_P je měrné teplo určené pro hmotnostní zlomek. Hustota média se počítá ze stavového zákona ideálního plynu

$$p = \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}}{W_{\alpha}} \rho R T$$

kde W_{α} je molekulární váha paliva (molecular weight of the fuel)

E2. Mixed-is-Burnt spalovací model

Matematický přístup pro Mixed-is-Burnt model vyplývá z předpokladu nekoexistence paliva se vzduchem. Pro $f > F_{ST}$, směs se skládá z následujících hmotnostních zlomků

$$m_F = \frac{f - F_{ST}}{1 - F_{ST}}, m_O = 0, m_P = 1 - m_F$$

a pro $f < F_{ST}$

$$m_F = 0, m_O = 1 - \frac{f}{F_{ST}}, m_P = 1 - m_O$$

Nyní nastupují pravděpodobnostní hustotová funkce (probability density functions). Pravděpodobnostní hustotová funkce je spojena se střední hodnotou a výchylkou směšovacího poměru. MIB model umožňuje použití double delta a beta pdf. Tvar double delta funkce je následující

$$p(f) = A \delta(f - F_+) + B \delta(f - F_-)$$

s

$$F_+ = F + \alpha, F_- = F - \alpha$$

a beta funkce

$$p(f) = C f^{(a-1)} (1-f)^{(b-1)}$$

Střední hodnotu, F , a výchylky od střední hodnoty, G , směšovacího poměru určují konstanty A, B, α, a, b pro pravděpodobnostní funkce. Střední hodnoty hmotnostních funkcí jsou určeny pomocí vztahů

$$m_F = \int_0^1 \max\left(\frac{f-F_{ST}}{1-F_{ST}}, 0\right) p(f) df$$

$$m_O = \int_0^1 \max\left(1 - \frac{f}{F_{ST}}, 0\right) p(f) df$$

a střední hodnota hmotnostního podílu produktů

$$m_P = 1 - m_F - m_O$$

Do výpočtů s double delta nebo beta pdf je zahrnutá výchylka od směšovacího poměru. G je řešena z parciální diferenciální rovnice ve tvaru

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U G) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \nabla G \right) = C_{g1} \mu_T (\nabla F)^2 - C_{g2} \rho \frac{\varepsilon}{k} G$$

kde jsou hodnoty modelových konstant C_{g1} a C_{g2} nastaveny v příkazovém souboru, viz appendix A; k a ε jsou turbulentní kinetická energie a její disipace.

E3. Eddy Break-up spalovací model

EBU spalovací model řeší parciální diferenciální rovnici pro hmotnostní zlomek směsi paliva ve tvaru

$$\frac{\partial \rho m_F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j m_F) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} m_F \right) = -\rho \frac{\varepsilon}{k} C_R C_A M_{\text{lim}}$$

Pravá strana rovnice vyjadřuje zdroj, respektive rychlost zániku paliva. K představuje turbulentní kinetickou energii a ε disipaci turbulentní kinetické energie. Proto je turbulence jedním z řídicích faktorů.

V CFD-F3D, korekční faktor C_R je modelován pro dva základní případy, viskózního a kolizního směšování (viscous and collision mixing). Viskózní směšování je řízeno turbulentním Reynoldsovým číslem a vyjádřeno pomocí

$$C_R = 23.6 \left(\frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Kolizní směšování je nastaveno na konstantní hodnotu korekčního faktoru.

$$C_R = 4.0$$

Apendix F

NO_x produkční model

NO_x produkční model může být spuštěn spolu s Mixed-is-Burnt spalovacím modelem. Transportní rovnice je řešená pro hmotnostní zlomky NO_x . HCN hmotnostní zlomky lze prediktovat pro spalování uhlí nebo oleje.

Hmotnostní zlomky znečišťujících látek jsou řešeny jako pasivní skaláry spalování, což je podmíněno jejich malým příspěvkem k celkové hustotě a měrnému teplu směsi. Tento fakt je výsledkem malých hmotnostních zlomků znečišťujících látek ve srovnání s hlavními hmotnostními zlomky spalování. Pro spalování plynů je modelován pouze thermal NO_x model. Prompt NO_x mechanismus je pro plynná paliva zanedbán. Příspěvní prompt NO_x je kolem 5% celkového vývoje NO_x . Poznamenejme, že v CFX-F3D jsou pro spalování uhlí a oleje modelovány tři další rovnice prompt mechanismu. Transportní rovnice vývoje NO_x je v CFX-F3D modelována následovně

$$\frac{\partial m_{\text{NO}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U m_{\text{NO}}) - \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \nabla m_{\text{NO}} \right) = \rho R_{\text{NO}}$$

kde m_{NO} je hmotnostní zlomek NO a R_{NO} vyjadřuje rychlost reakce oxidů dusíku. Hodnoty fluktuací teploty a hmotnostních zlomků jsou okamžitou proměnou pro výpočet rychlosti reakce. Okamžité hodnoty R_{NO} jsou integrovány přes přednastavenou pravděpodobnostní funkci. Rychlost reakce NO je pro plynná paliva vyjádřena vztahem

$$R_{\text{NO}} = A X_{\text{N}_2} X_{\text{O}_2}^\beta \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \frac{W_{\text{NO}}}{W_{\text{MEAN}}} T^\alpha$$

kde X a W jsou molární zlomky a molekulární hmotnosti zúčastněných chemických látek. Dolní index MEAN je vztažen k celé směsi. T představuje teplotu, E je aktivační energie A, α , β spolu s E jsou konstanty reakčního modelu. Fluktuace hmotnostních zlomků NO_x lze vyjádřit

$$m'_{\text{NO}} = m_{\text{NO}} \frac{f}{F}$$

a fluktuační entalpie

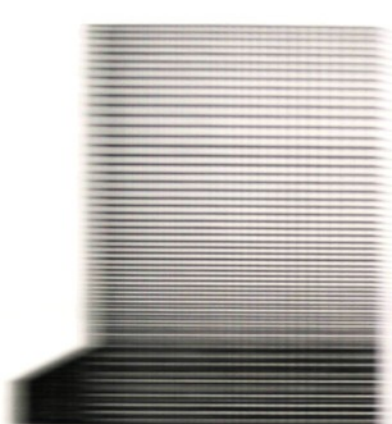
$$h = H + (f - F)H_F$$

Fluktuační teplota je vypočítána z fluktuační entalpie a fluktuační hodnoty hmotnostního zlomku paliva, a je následně zahrnuta při vývoji NO_x .

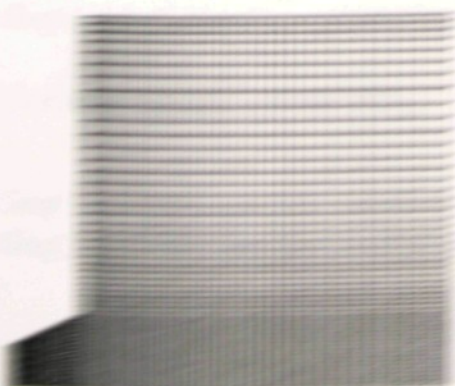
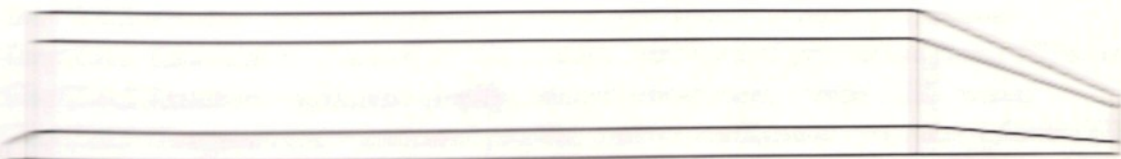
Appendix G

Serie CFN-F3D modeli

Seri puz vintni vsihrkavaci modeli



Seri puz vintni vsihrkavaci modeli



Apendix H

Grafické výsledky

1. Výsledky pro vnější vstřikovací mód

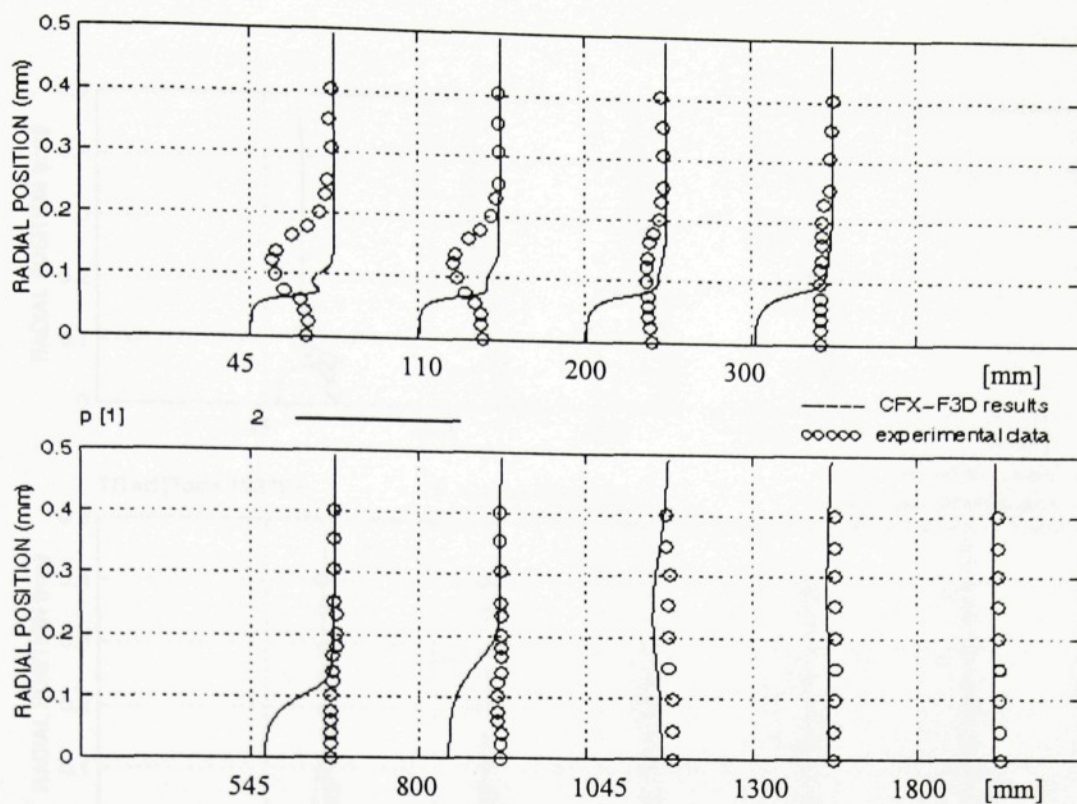
- Graf 1.1.1* Profily koncentrací produktů, vnější vstřikování, Standard EBU model
- Graf 1.1.2* Profily koncentrací produktů, vnější vstřikování, MIB model
- Graf 1.2.1* Teplotní profily, vnější vstřikování, Standard EBU model
- Graf 1.2.2* Teplotní profily, vnější vstřikování, MIB model
- Graf 1.3.1* Axiální rychlostní profily, vnější vstřikování, Standard EBU model
- Graf 1.3.2* Axiální rychlostní profily, vnější vstřikování, MIB model
- Graf 1.4.1* Radiální rychlostní profily, vnější vstřikování, Standard EBU model
- Graf 1.4.2* Radiální rychlostní profily, vnější vstřikování, MIB model
- Graf 1.5.1* Tangenciální rychlostní profily, vnější vstřikování, Standard EBU model
- Graf 1.5.2* Tangenciální rychlostní profily, vnější vstřikování, MIB model
- Graf 1.6.1* Radiační tepelné toky, vnější vstřikování
- Graf 1.6.2* Konvektivní tepelné toky, vnější vstřikování

2. Výsledky pro vnitřní vstřikovací mód

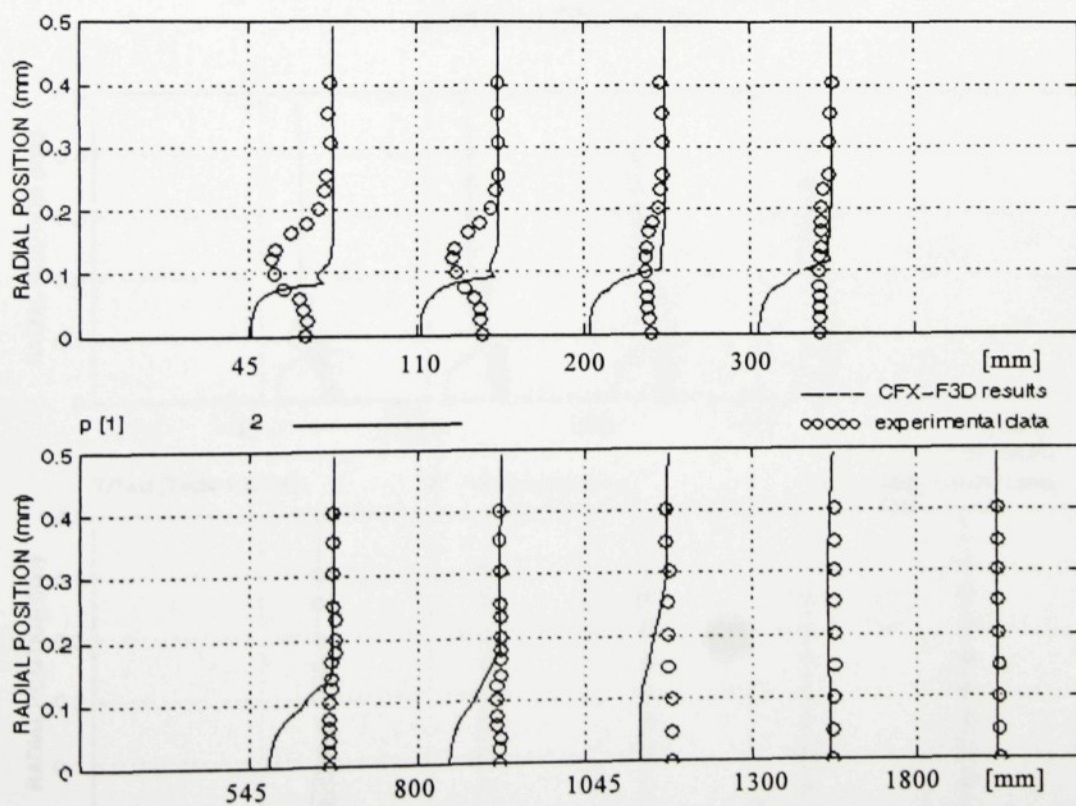
- Graf 2.1.1* Profily koncentrací produktů, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame, EBU
- Graf 2.1.2* Profily koncentrací produktů, vnitřní vstřikování, Finite EBU model
- Graf 2.2.1* Teplotní profily, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame (EBU model)
- Graf 2.2.2* Teplotní profily, vnitřní vstřikování, Finite EBU model
- Graf 2.3.1* Axiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame (EBU model)
- Graf 2.3.2* Axiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, Finite EBU model
- Graf 2.4.1* Radiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame (EBU model)
- Graf 2.4.2* Radiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, Finite EBU model
- Graf 2.5.1* Tangenciální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame (EBU model)
- Graf 2.5.2* Tangenciální rychlostní profily, vnitřní vstřikování, Finite EBU model
- Graf 2.6.1* Celkové a radiační tepelné toky, vnitřní vstřikování, pre-mixed flame, EBU
- Graf 2.6.2* Celkové a radiační tepelné toky, vnitřní vstřikování, Finite EBU model

Výsledky hladin vývoje NO_x

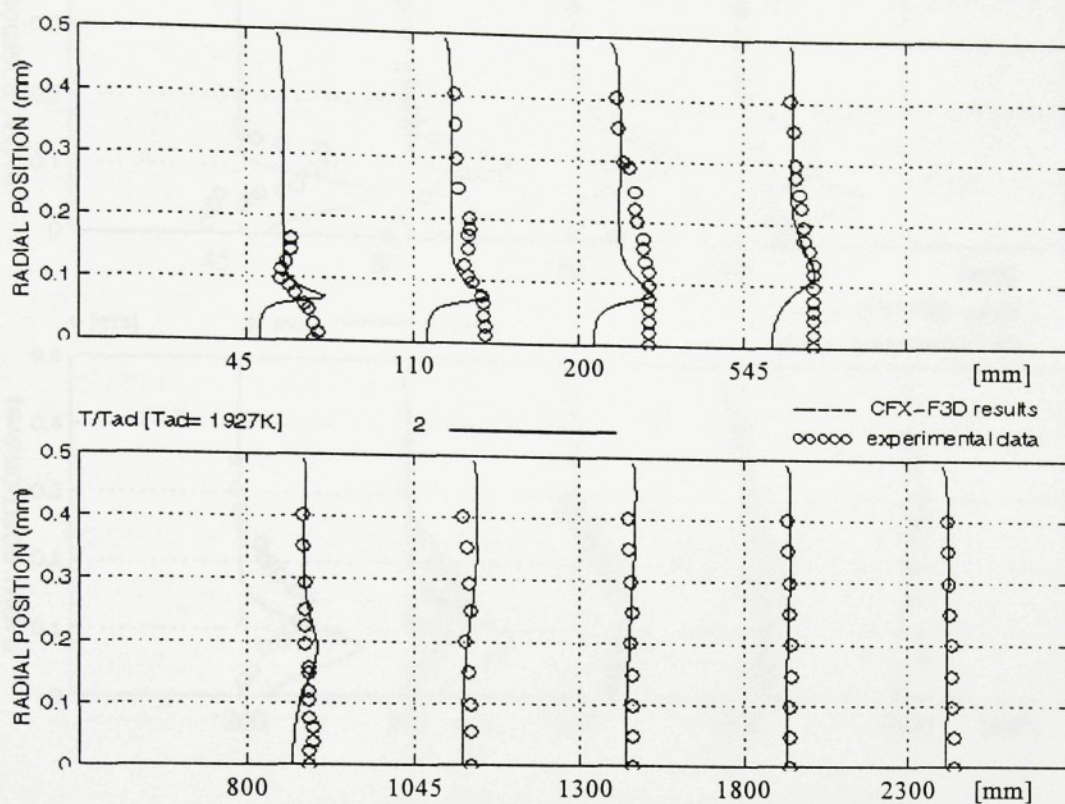
- Graf 3.1.1* NO_x profily, vnější vstřikování, Double Delta Function
- Graf 3.2.2* NO_x profily, vnitřní vstřikování, Beta Function



Graf 1.1.1 Profily koncentrací produktů, vnější vstřikování
Standard EBU model



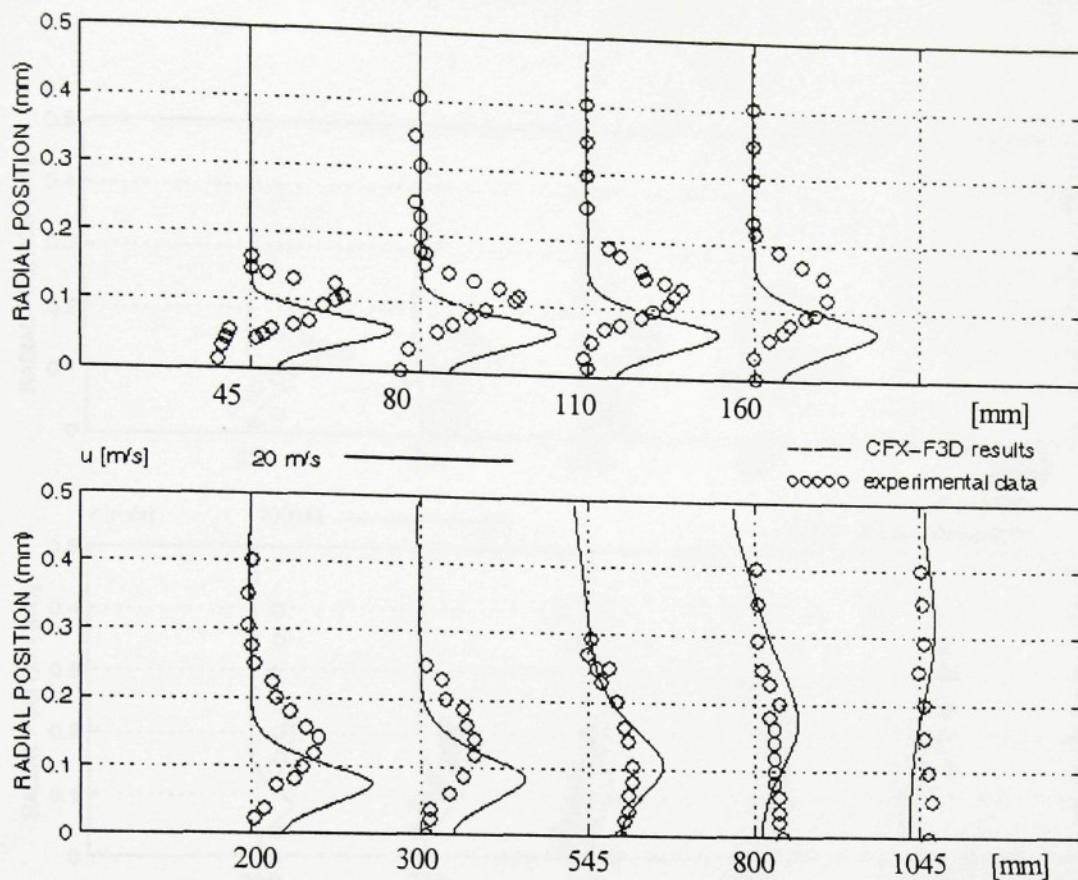
Graf 1.1.2 Profily koncentrací produktů, vnější vstřikování,
MIB model



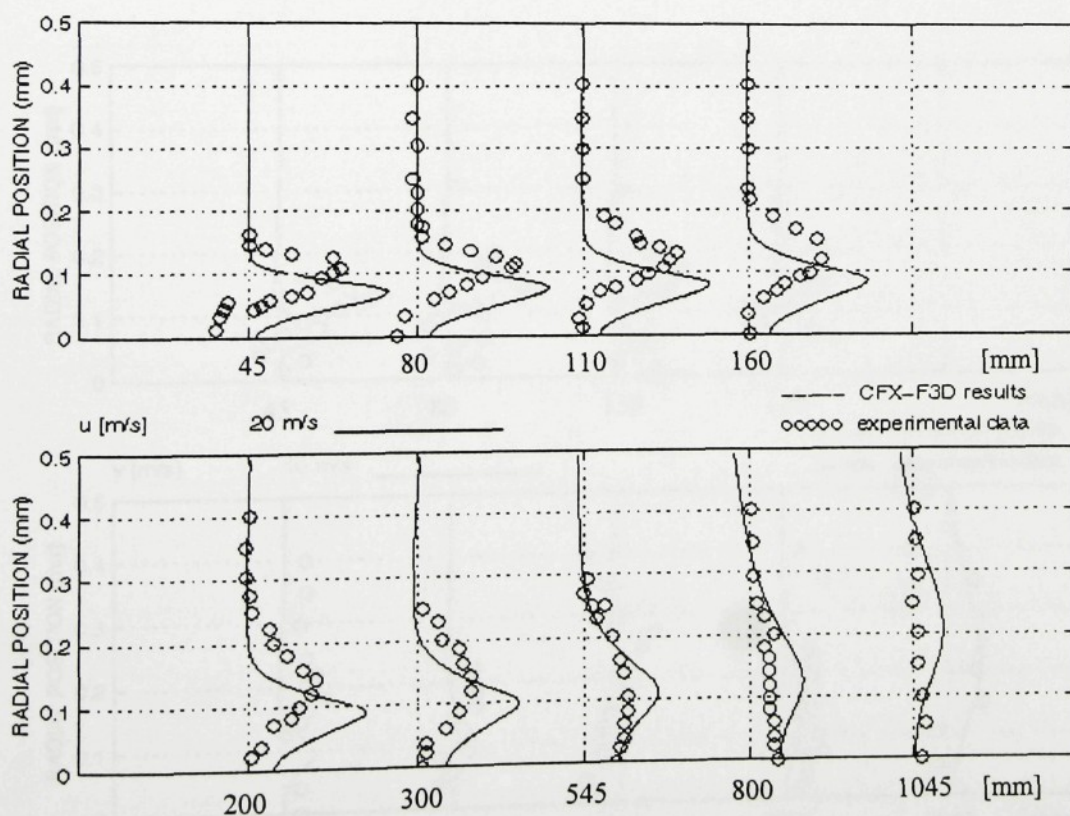
Graf 1.2.1 Teplotní profily, vnější vstřikování
Standard EBU model



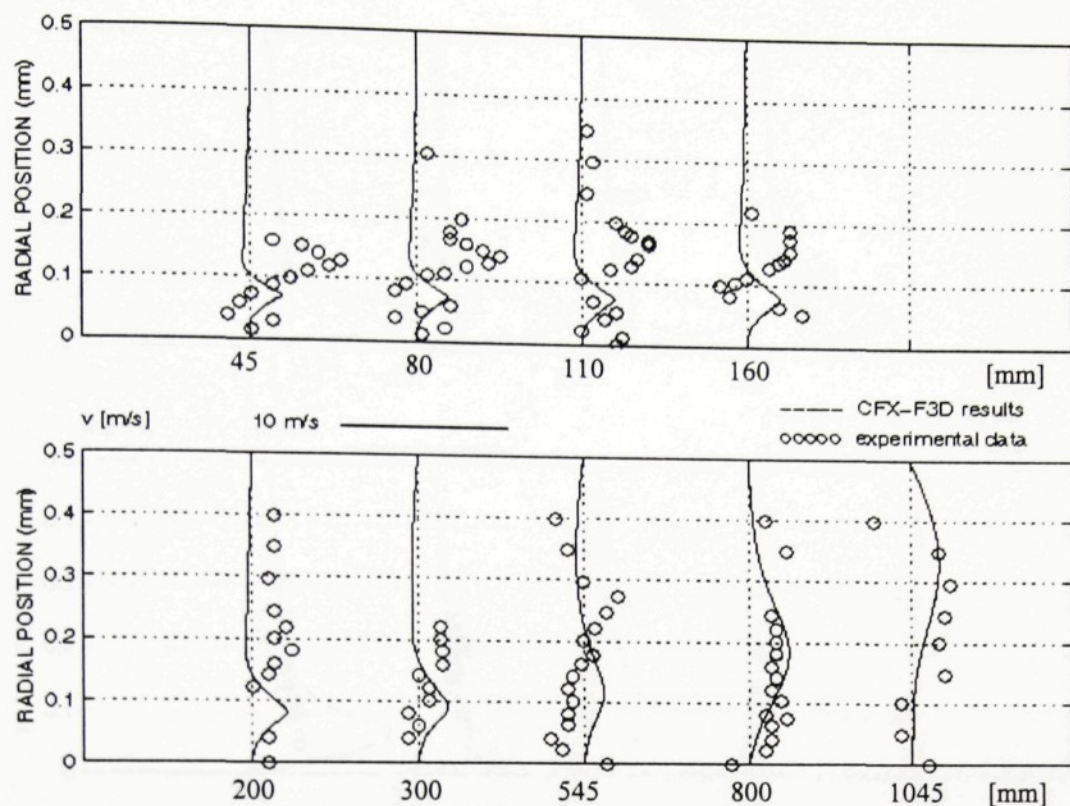
Graf 1.2.2 Teplotní profily, vnější vstřikování
MIB model



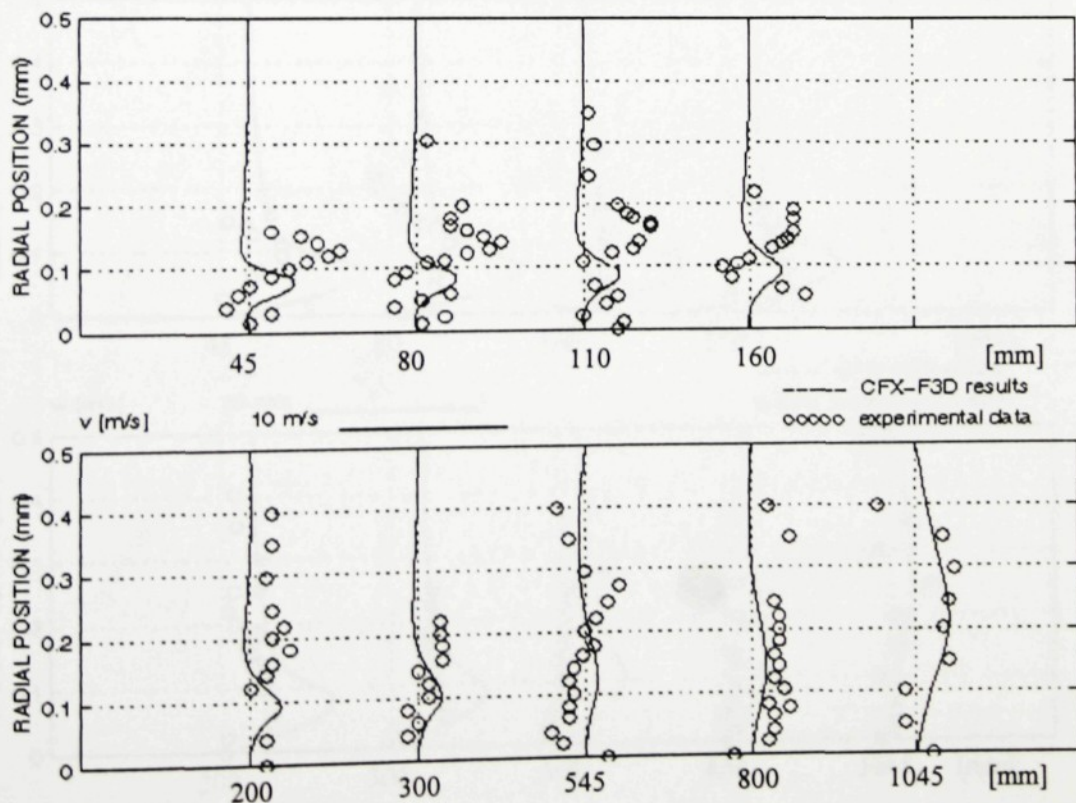
Graf 1.3.1 Axiální rychlostní profily, vnější vstřikování
Standard EBU model



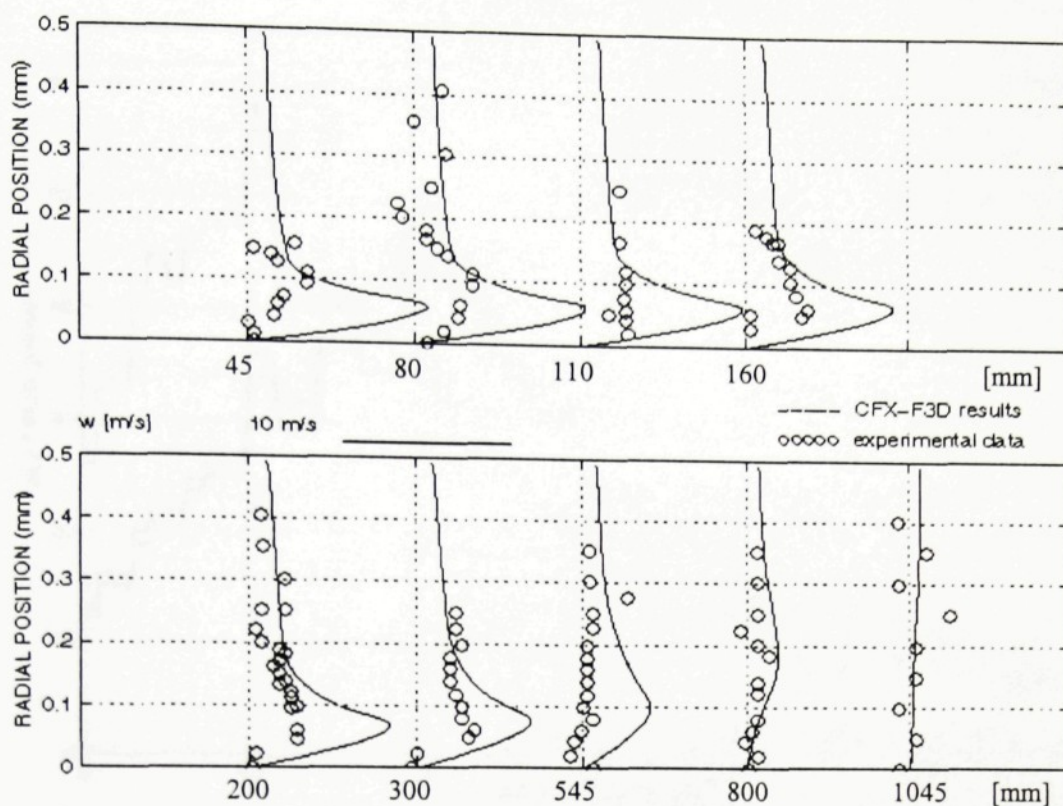
Graf 1.3.2 Axiální rychlostní profily, vnější vstřikování
MIB model



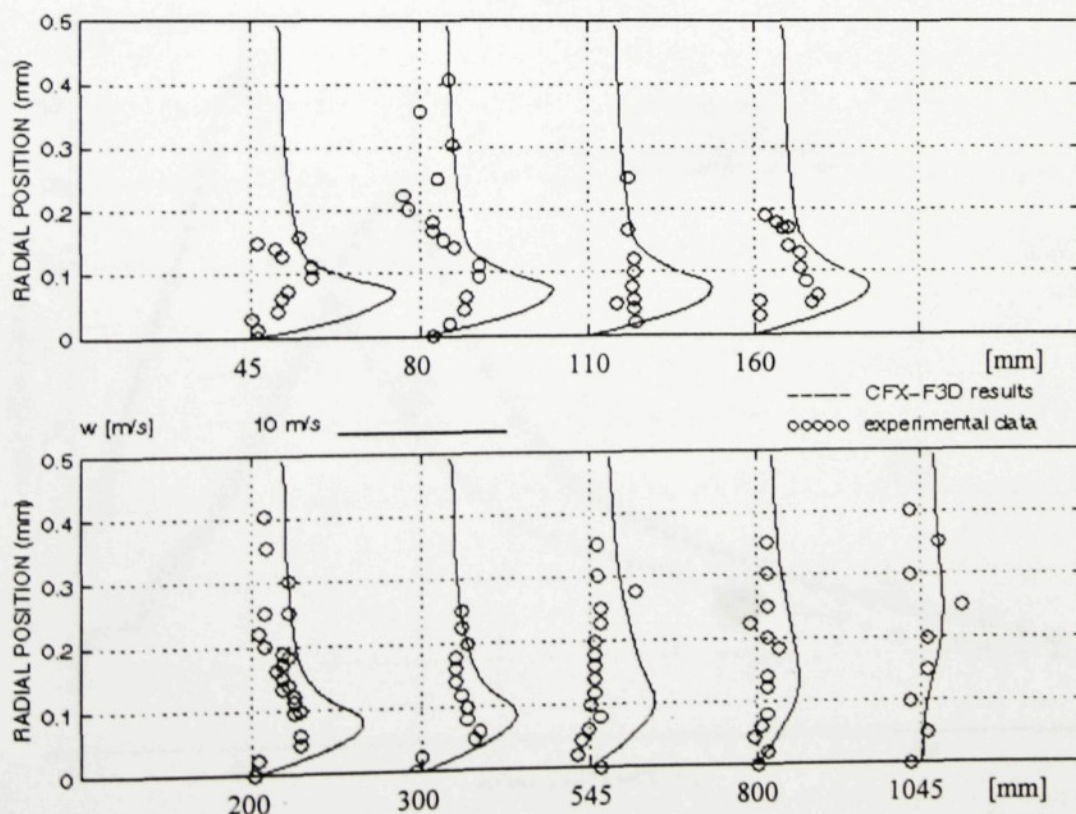
Graf 1.4.1 Radiální rychlostní profily, vnější vstřikování
Standard EBU model



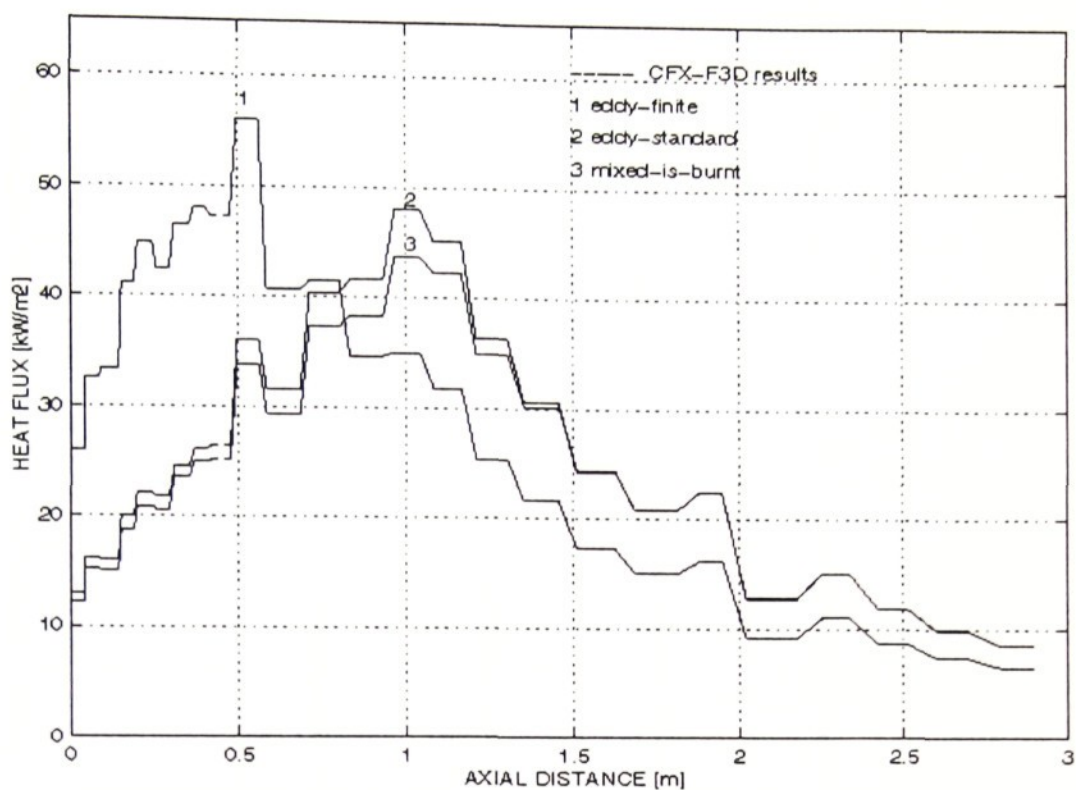
Graf 1.4.2 Radiální rychlostní profily, vnější vstřikování
MIB model



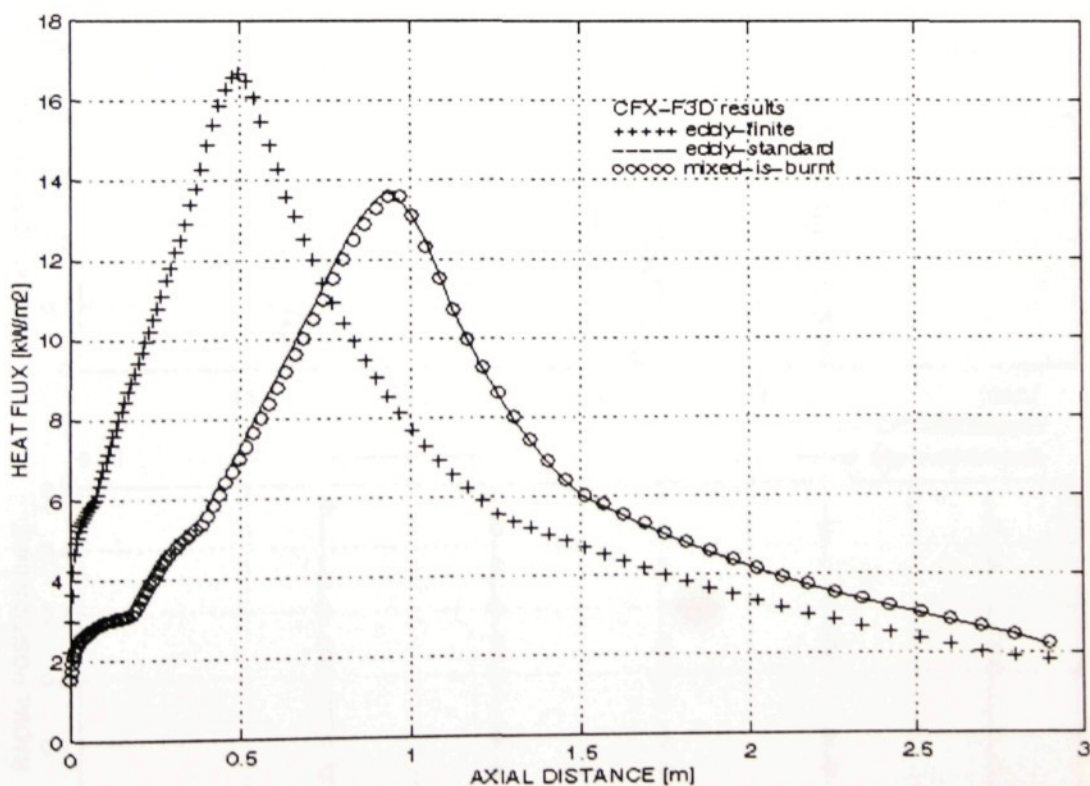
Graf 1.5.1 Tangenciální rychlostní profily, vnější vstřikování
Standard EBU model



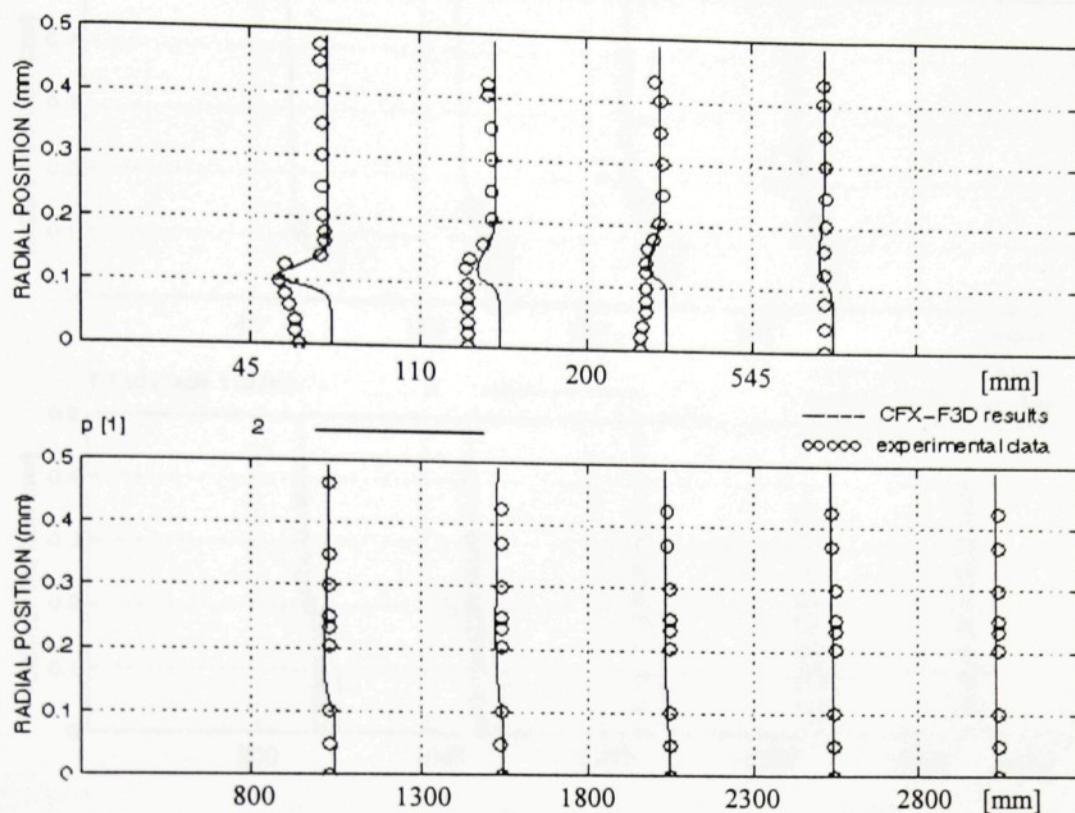
Graf 1.5.2 Tangenciální rychlostní profily, vnější vstřikování
MIB model



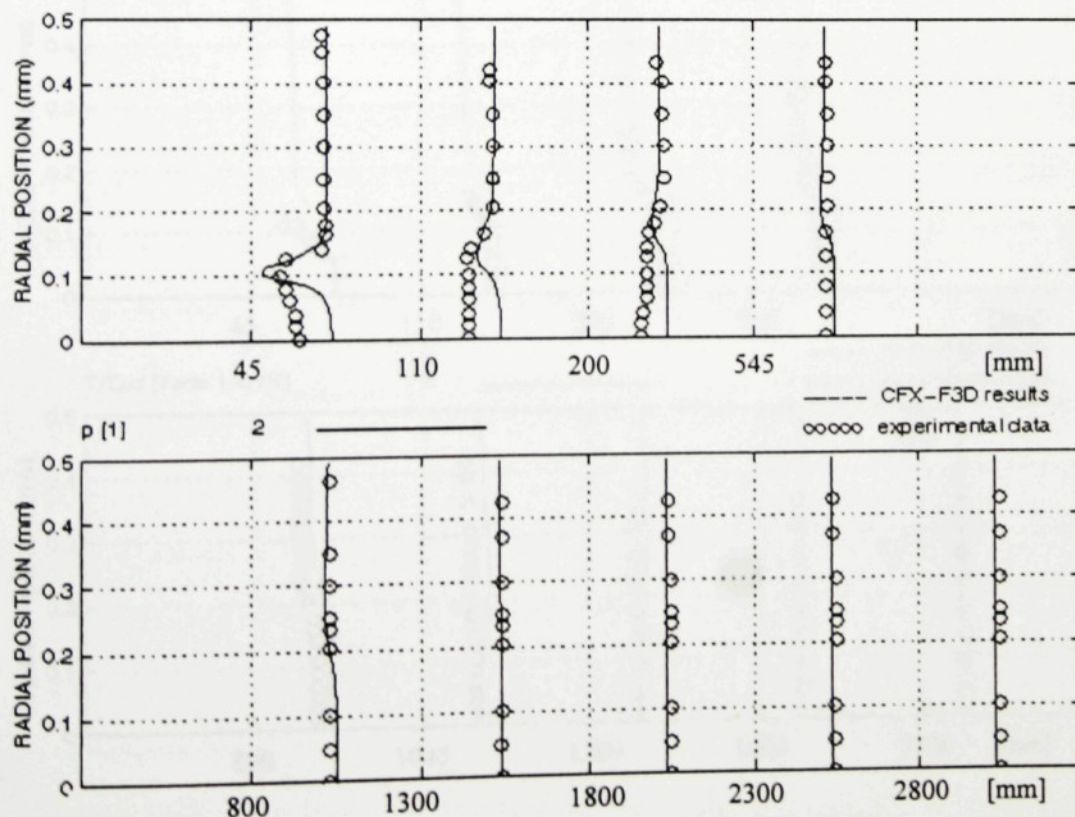
Graf 1.6.1 Radiční tepelné toky
vnější vstřikování



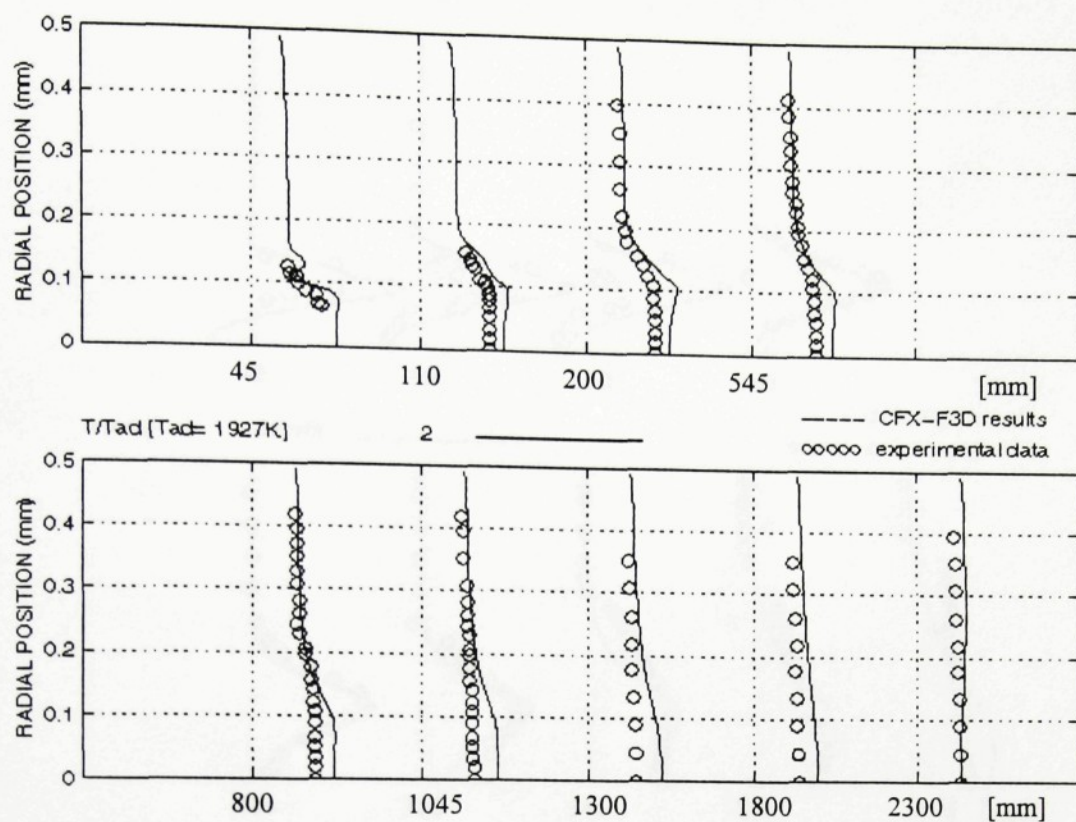
Graf 1.6.2 Konvektivní tepelné toky
vnější vstřikování



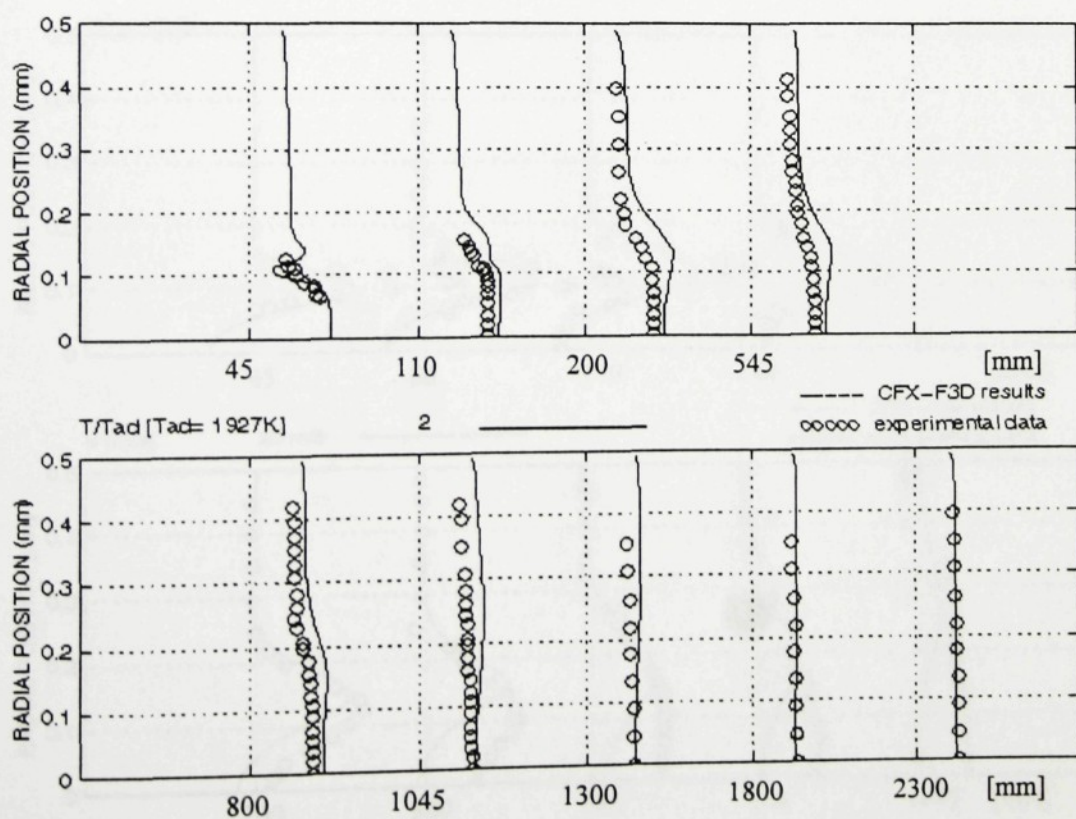
Graf 2.1.1 Profily koncentrací produktů, vnitřní vstřikování
pre-mixed flame, EBU



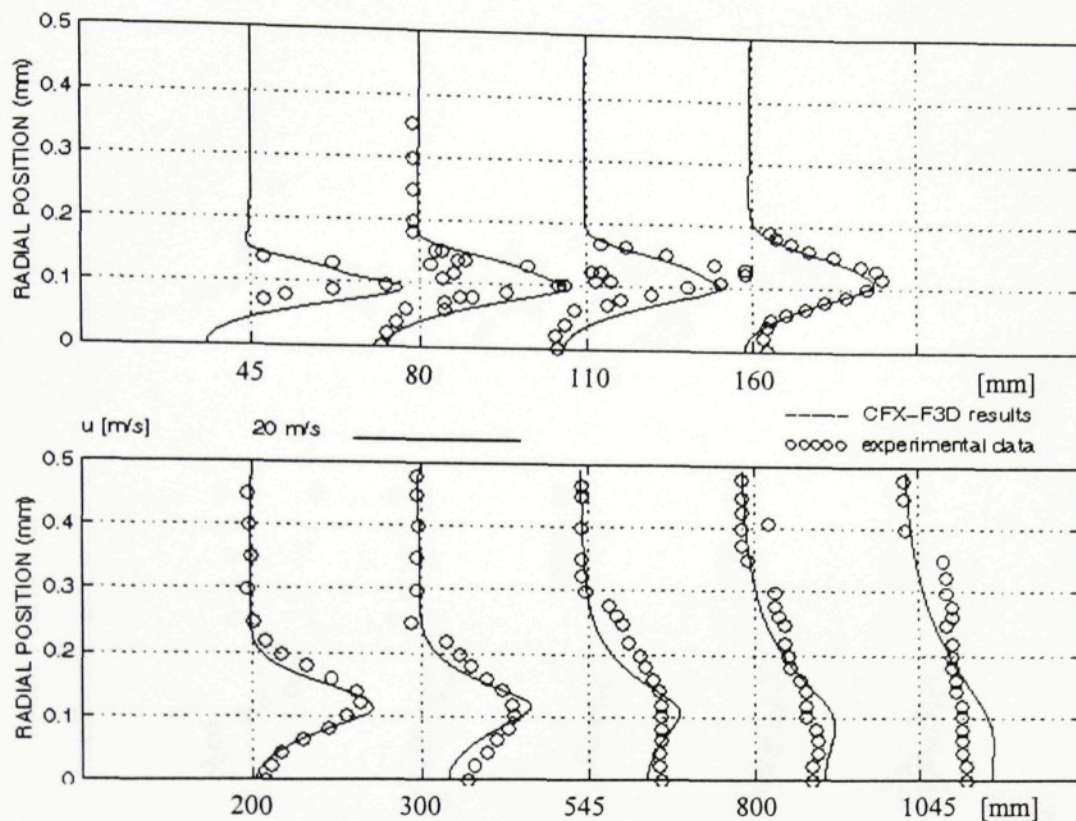
Graf 2.1.2 Profily koncentrací produktů, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



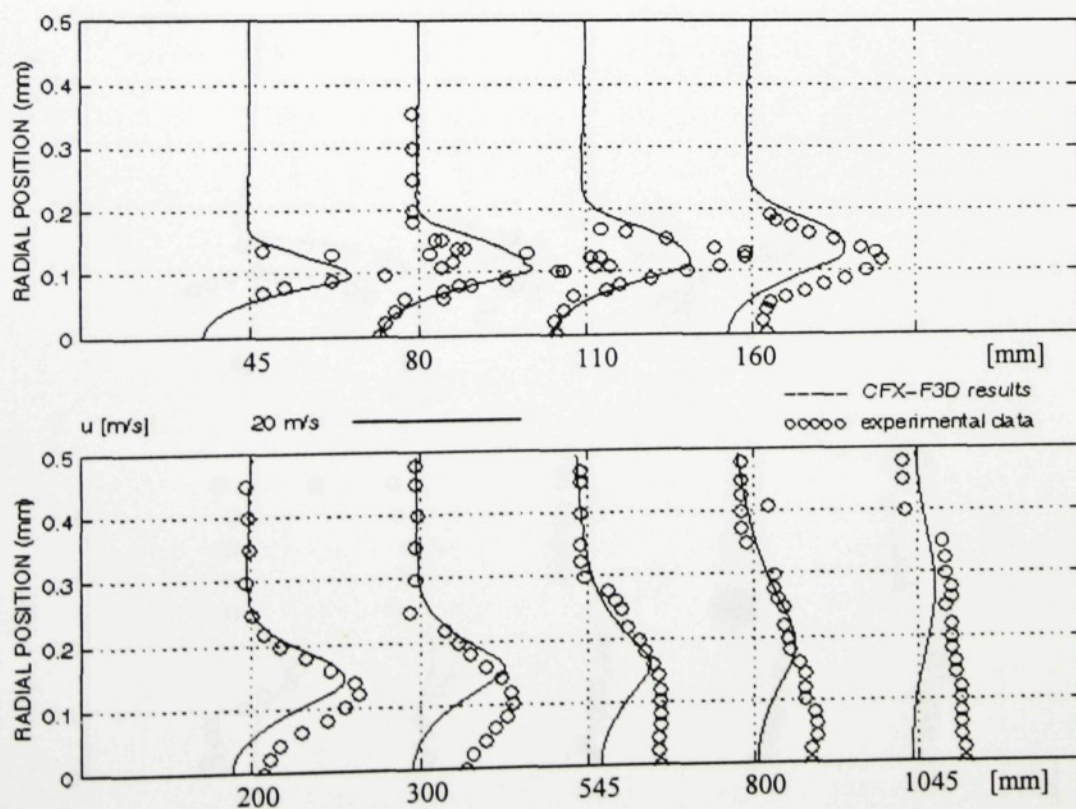
Graf 2.2.1 Teplotní profily , vnitřní vstřikování
pre-mixed flame (EBU model)



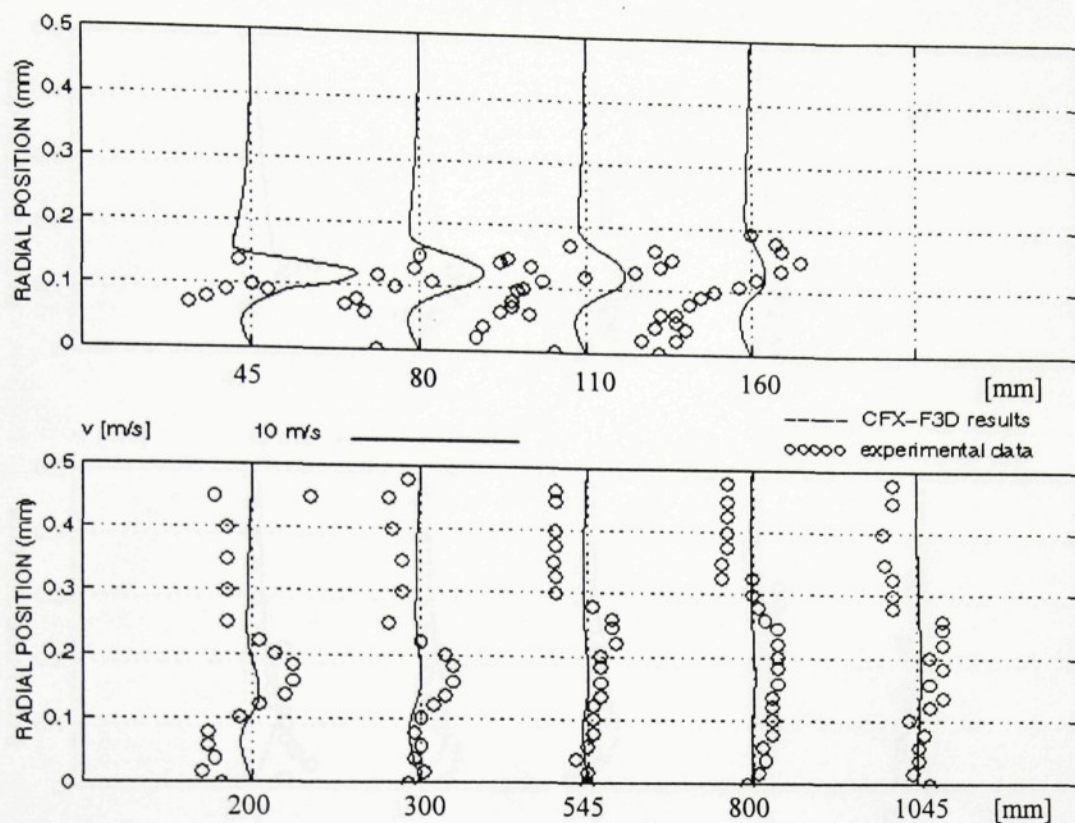
Graf 2.2.2 Teplotní profily, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



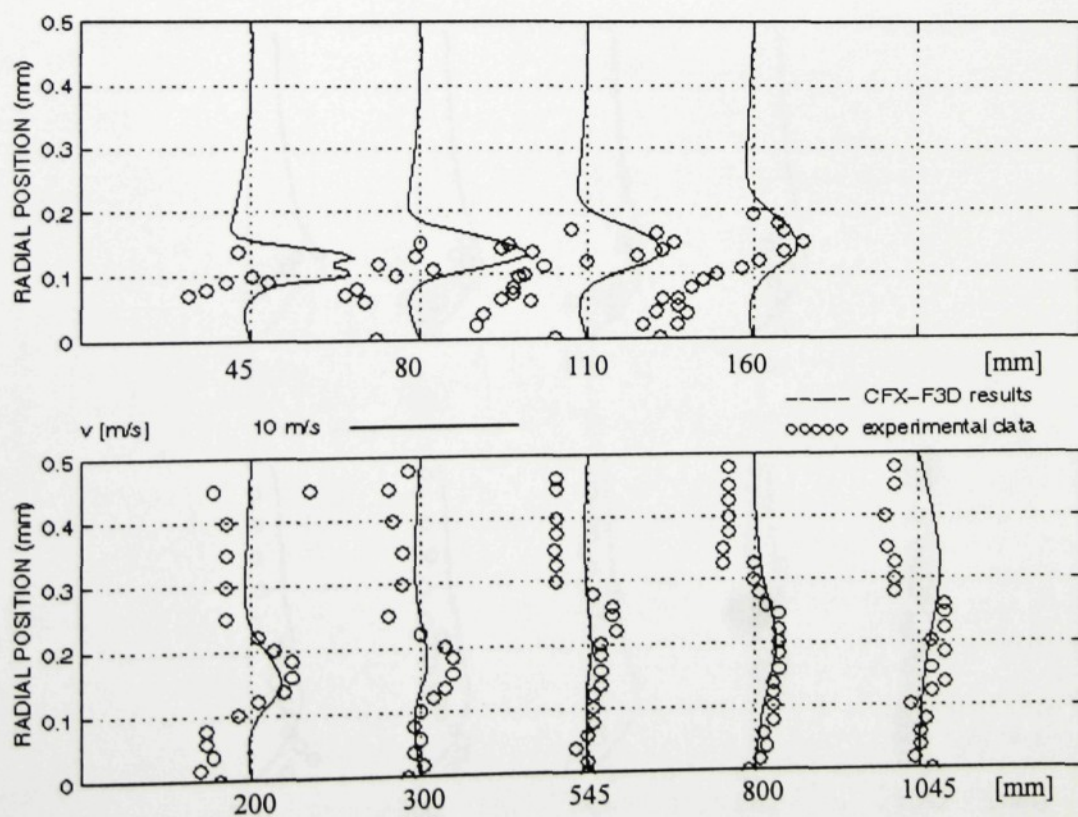
Graf 2.3.1 Axiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
pre-mixed flame (EBU model)



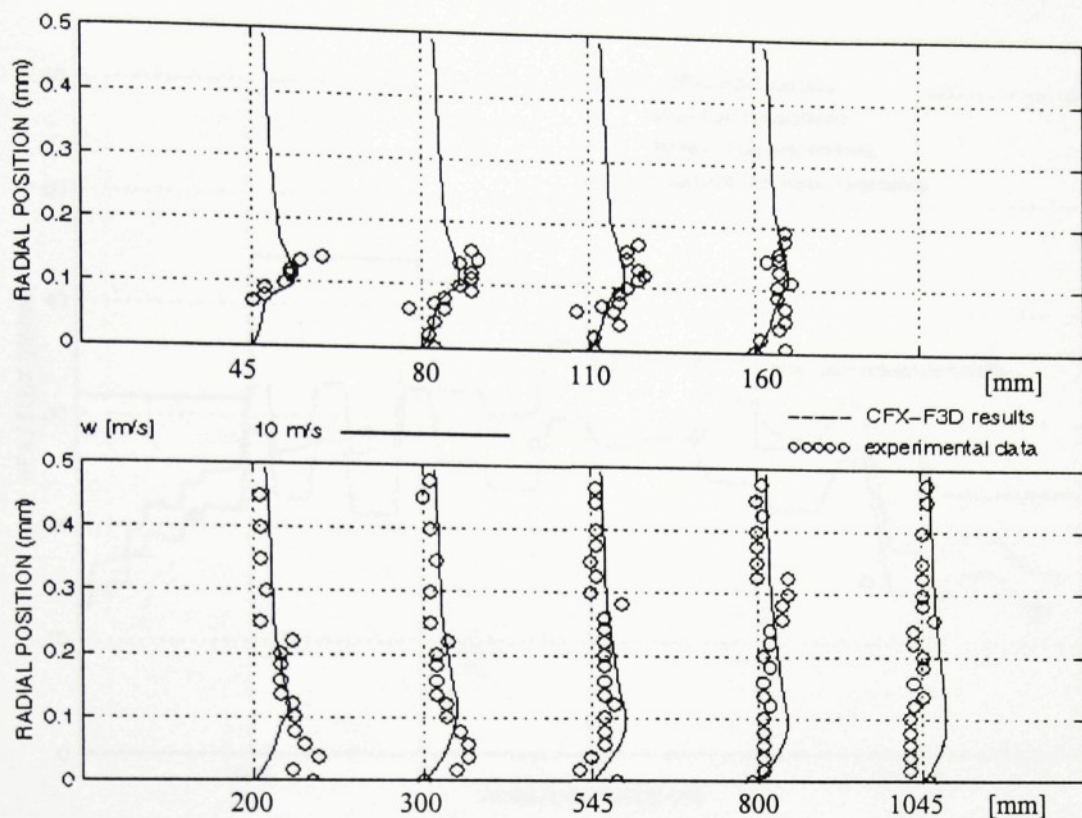
Graf 2.3.2 Axiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



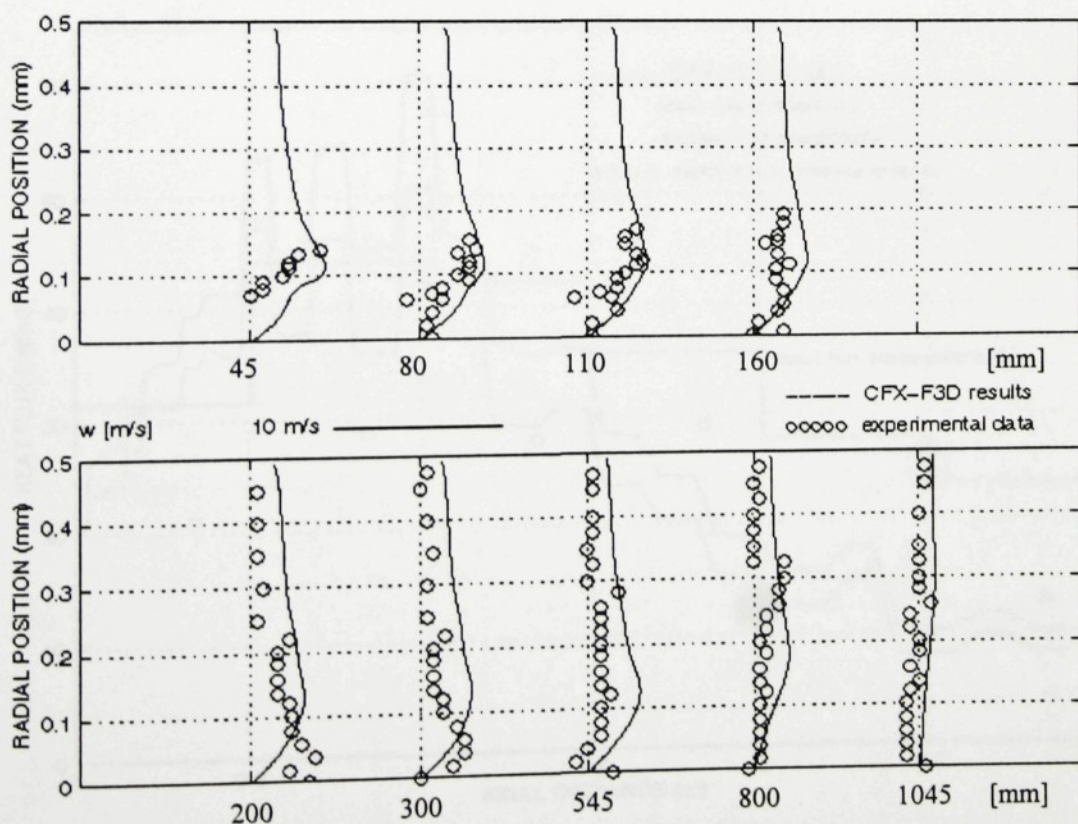
Graf 2.4.1 Radiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
pre-mixed flame (EBU model)



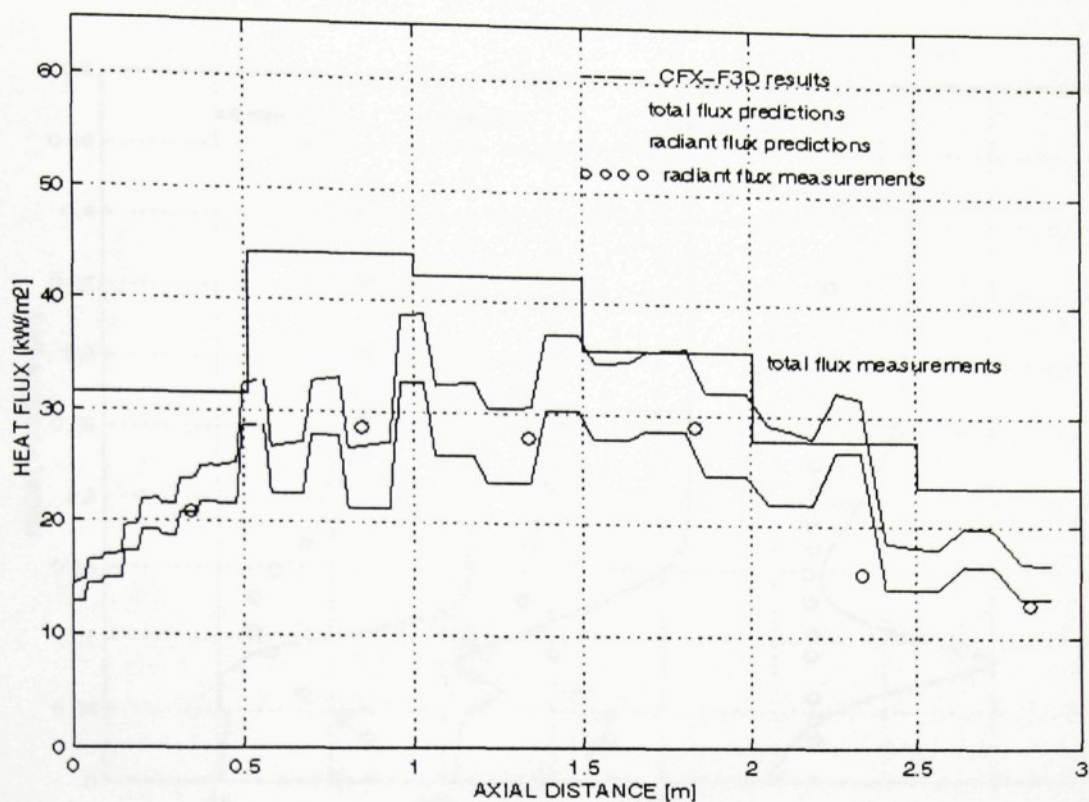
Graf 2.4.2 Radiální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



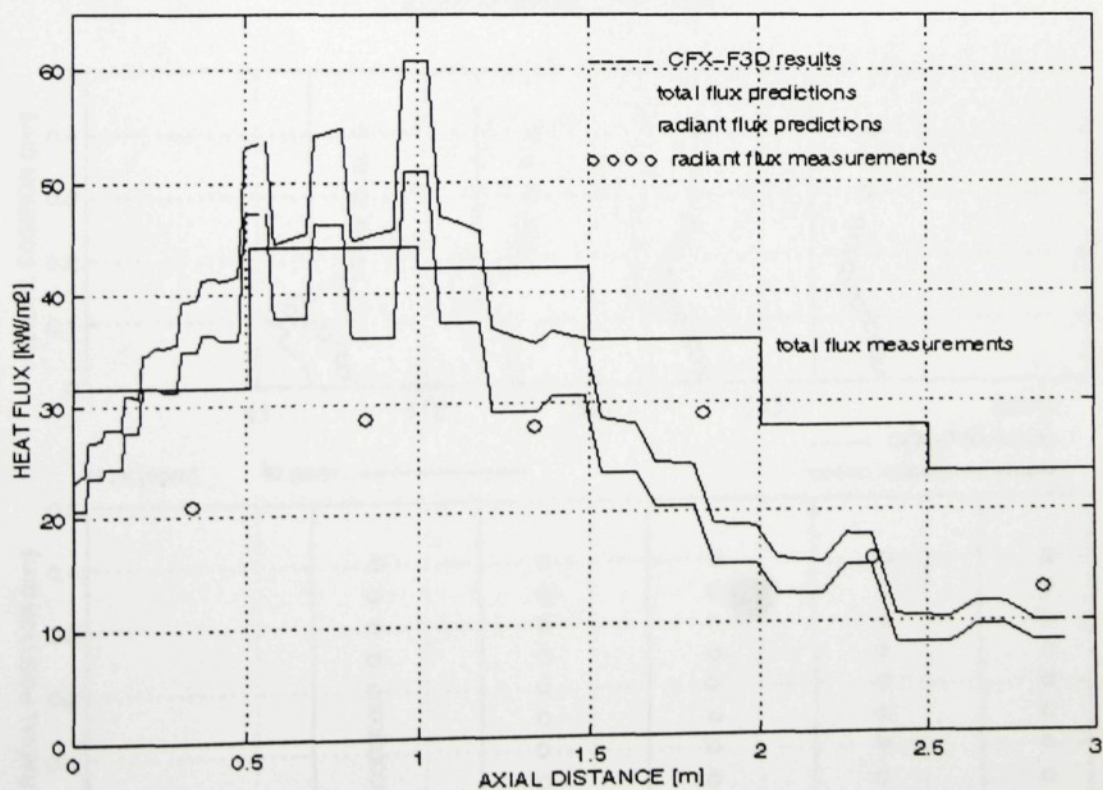
Graf 2.5.1 Tangenciální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
pre-mixed flame (EBU model)



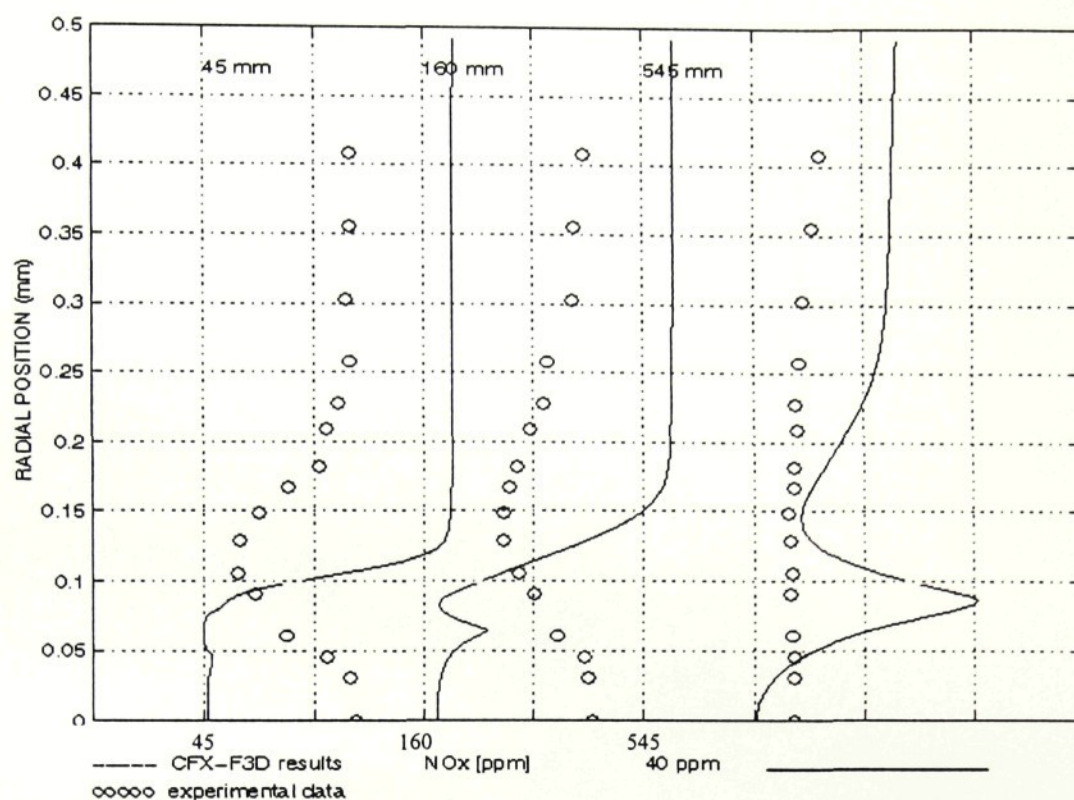
Graf 2.5.2 Tangenciální rychlostní profily, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



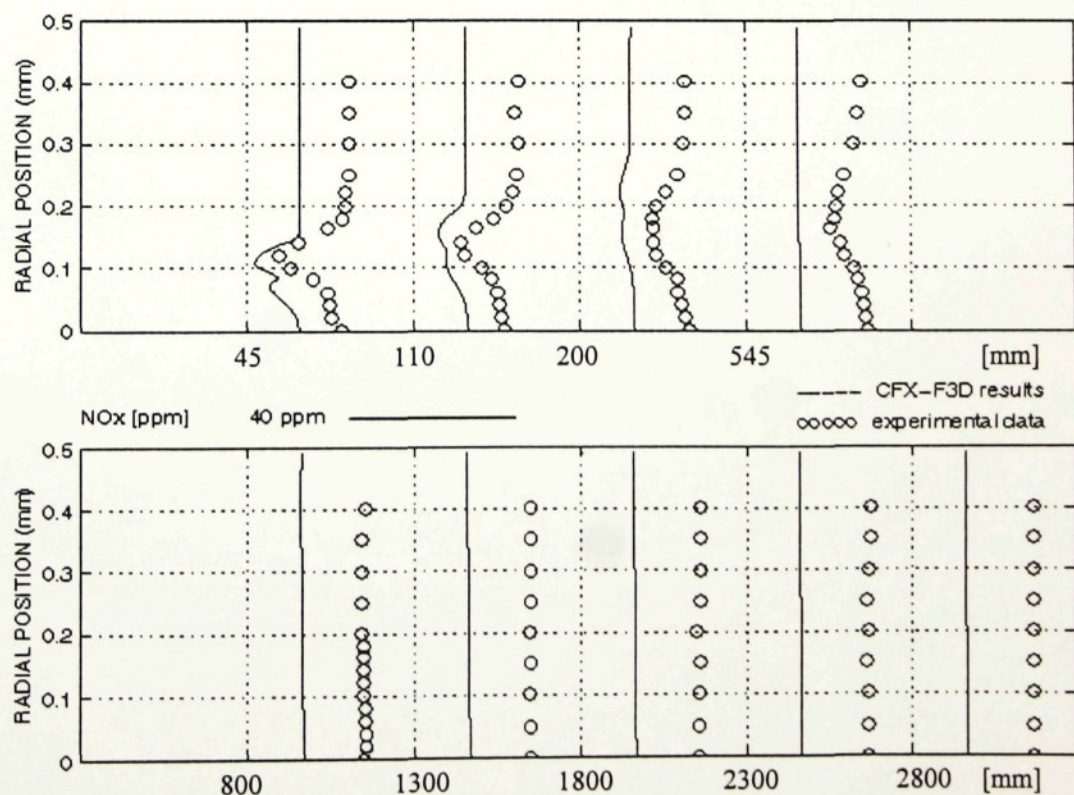
Graf 2.6.1 Celkové a radiační tepelné toky, vnitřní vstřikování
pre-mixed flame, EBU



Graf 2.6.2 Celkové a radiační tepelné toky, vnitřní vstřikování
Finite EBU model



Graf 3.1.1 NO_x profily, vnější vstřikování
Double Delta Function



Graf 3.1.2 NO_x profily, vnější vstřikování
Beta Function