

——— Tudományos Diákköri Dolgozat ———

BORSÓ JANKA

**Laboratóriumi kerozinégetési kísérletek
számítógépes szimulációja**

Témavezető:
Turányi Tamás egyetemi tanár



——— Eötvös Loránd Tudományegyetem ———
——— Természettudományi Kar ——
—— Budapest, 2021 ——

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm Dr. Józsa Viktornak, a BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék docensének, hogy megosztotta velem a kutatócsoportja mérési adatait és az általuk használt laboratóriumi berendezés részletes leírását, valamint hogy mindig készen állt konzultációra. Köszönettel tartozom a Reakciókinetika Laboratórium minden munkatársának, hogy lehetővé tették számomra a munkát, különösképpen Papp Máténak, aki nagyon sokat segített a felmerülő technikai problémák megoldásában. Munkámat az NKFIH (OTKA) K 132109 számú pályázata segítette.

Tartalom

1. Bevezetés	4
2. A keverék- és hőmérsékletszabályozott (KHSz) égetőberendezés	5
2.1. A KHSz-konceptió lényege	5
2.2. KHSz-égés szimulációja jólkevertreaktor-modellel	6
2.3. A KHSz-berendezésben mért adatok.....	8
3. A szimulációk leírása	10
3.1. A JP-8 kerozin	10
3.2. Az OpenSMOKE++ program.....	10
3.3. A HyChem-típusú mechanizmusok elve	11
3.4. A Glarborg-féle NO _x modell.....	12
4. Számítási eredmények	13
4.1. A mérés körülményei és a szimulációs paraméterek meghatározása	13
4.1.1. A bemenő gázelegy hőmérséklete.....	13
4.1.2. A térfogat, tartózkodási idő és tömegáram kapcsolatának vizsgálata.....	15
4.2. További mérési beállítások.....	19
4.3. Szimulációk hővesztességes égéstér feltételezésével	21
4.4. A mérési alapbeállítás szimulálása változtatott körülményekkel	24
4.4.1. Az ekvivalenciaarány változtatásának hatása	25
4.4.2. A tartózkodási idő változtatásának hatása	28
4.4.3. Számítások különböző izoterm hőmérsékletű PSR reaktorról.....	31
4.4.4. A tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet együttes változtatása.....	34
4.5. A füstgáz-koncentrációk függése a reaktor nyomásától.....	36
4.6. Számítás a feltételezett mérési körülményeknél.....	39
5. Összefoglalás.....	43
Irodalomjegyzék.....	44

1. Bevezetés

A korunk legnagyobb és legösszetettebb kihívása a környezetvédelem. A probléma többfelől közelíthető meg; az éghajlatváltozás, a környezetszennyezés, a biodiverzitás csökkenése mind összefügg egymással. A fenntarthatóság felé törekvés egyik módja, hogy fejlesztjük a jelenleg használt energiatermelési módjainkat.

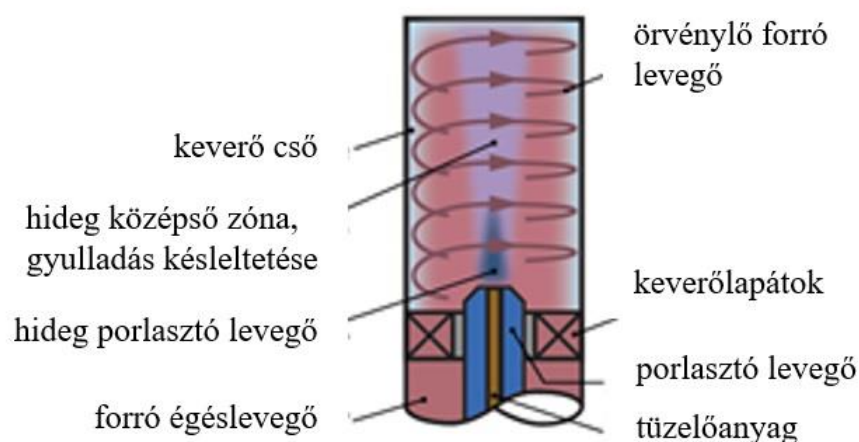
Kémiai szemszögből a környezetvédelem egyik legfontosabb feladata, hogy a károsanyag-kibocsátást csökkentsük. Az egyik legjelentősebb légszennyezők a nitrogén-oxidok. A légkörben legnagyobb mennyiségben a nitrogén-monoxid fordul elő, de a nitrogén-dioxid és a dinitrogén-oxid is ebbe csoportba tartozó szennyező. Ezeket együttesen NO_x-nak nevezzük. A légkörben természetes módon is keletkezik NO_x, például villámláskor. Ez azonban nem mérhető össze azzal a mennyiséggel, ami az emberi tevékenység miatt kerül a levegőbe. A legnagyobb NO_x-forrás az ipari és háztartási tüzelés, de hasonlóan jelentős a közlekedés, illetve bizonyos vegyipari ágazatok.

Fontos olyan égetési technológiák kidolgozása, amellyel csökkenteni lehet a NO_x kibocsátást. Erre nagyon ígéretes a BME-n laboratóriumi körülmények között megvalósított, a keverék- és hőmérsékletszabályozott (KHSz) égetési elven alapuló laboratóriumi égetőberendezés. A BME-n egy sorozat kísérletet hajtottak végre, amelyben JP-8 szabványú kerozint használtak. A dolgozatomban azt vizsgáltam meg, hogy milyen mértékben lehet reprodukálni a mérési adatokat olyan szimulációkkal, amelyekben térben homogén jólkevert reaktor modelljét használtam és egy modern, részletes reakciómechanizmust, amely leírja a JP-8 kerozin égését és a NO_x keletkezését az égések során.

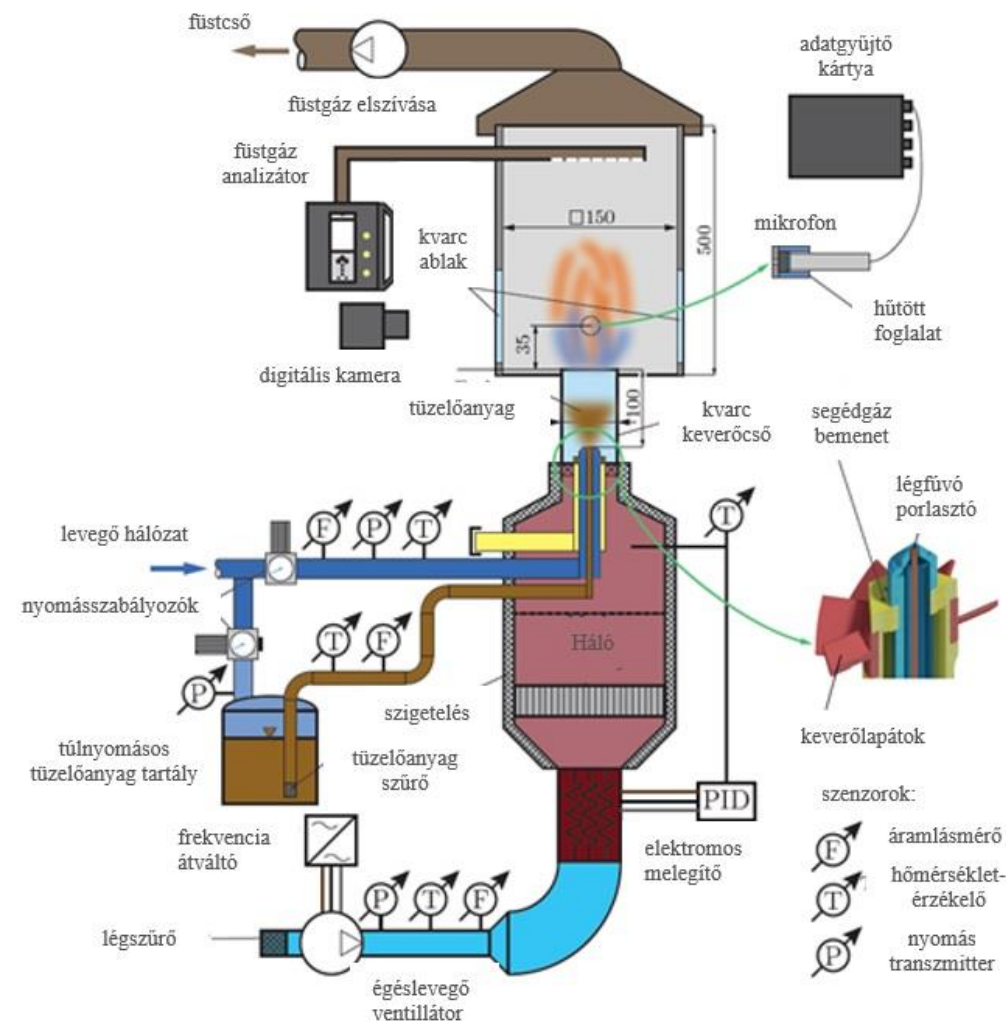
2. A keverék- és hőmérsékletszabályozott (KHSz) égetőberendezés

2.1. A KHSz-kon koncepció lényege

Inhomogén hőmérsékletmező az égőberendezésekben a homogén esethez képest számottevően nagyobb NO_x kibocsátást okoz azonos átlaghőmérséklet esetén, azonban tüzelőanyag–levegő elegy ideálisan homogén égését elsősorban gyakorlati okok miatt nem lehet megvalósítani [1]. Közel homogén, úgynevezett térfogati égés ismert a szakirodalomban. Ilyet például MILD (Moderate or Intense Low-oxygen Dilution) égővel lehet elérni. Ennek jellemzői, hogy az oxidáló gázáramot a gyulladási hőmérséklet fölé melegítik, és tüzelőanyagban szegény ekvivalenciaarányt alkalmaznak [2,3]. Ez a megoldás azonban több gyakorlati alkalmazás, például a gázturbinák esetében nem alkalmazható, mivel e technológia szerint a füstgáz recirkulációja szükséges az oxidálószer oxigénkoncentrációjának csökkentéséhez, ami a kívánt alacsonyabb térfogati hőfejlődéshez szükséges. Egy másfajta megközelítés a térben homogén égés elérésére a BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékén a Józsa Viktor és csoportja által megvalósított keverék- és hőmérsékletszabályozott (KHSz) égetési elv [4]. Ennek lényege, hogy a tüzelőanyag-áram közvetlen környezetében hideg levegőt juttatnak be az égéstérbe, így jelentősen késleltetve a gyulladást. Ez a levegő végzi a porlasztást folyékony tüzelőanyagok esetén, ahogy azt az 1. ábra mutatja. A megépített tüzelőberendezés a 2. ábrán látható.



1. ábra. Az égőfej sematikus rajza [4].



2. ábra. A tűzelőberendezés vázlata [5].

2.2. KHSz-égés szimulációja jólkevertreaktor-moddal

Az alábbi mérési paraméterek egy olyan beállításhoz tartoznak, amelynél a térfogati égést jól és stabilan meg tudták valósítani. A tüzelési teljesítmény 13,35 kW, ami a JP-8 kerozin kb. 43 MJ/kg fűtőértékének megfelelően 0,31 g/s tüzelőanyag-áramot jelent. A tüzelőanyag–levegő ekvivalenciaarány $\varphi = 0,571$ volt, aminek következtében 9 % volt a füstgáz oxigénkoncentrációja. Ez 28 kg/h összes légáramot jelentett, és ebből a porlasztólevegő árama 2,72 kg/h volt. A tüzelés atmoszférikus körülmények mellett ment végbe, és az égőtéren belül

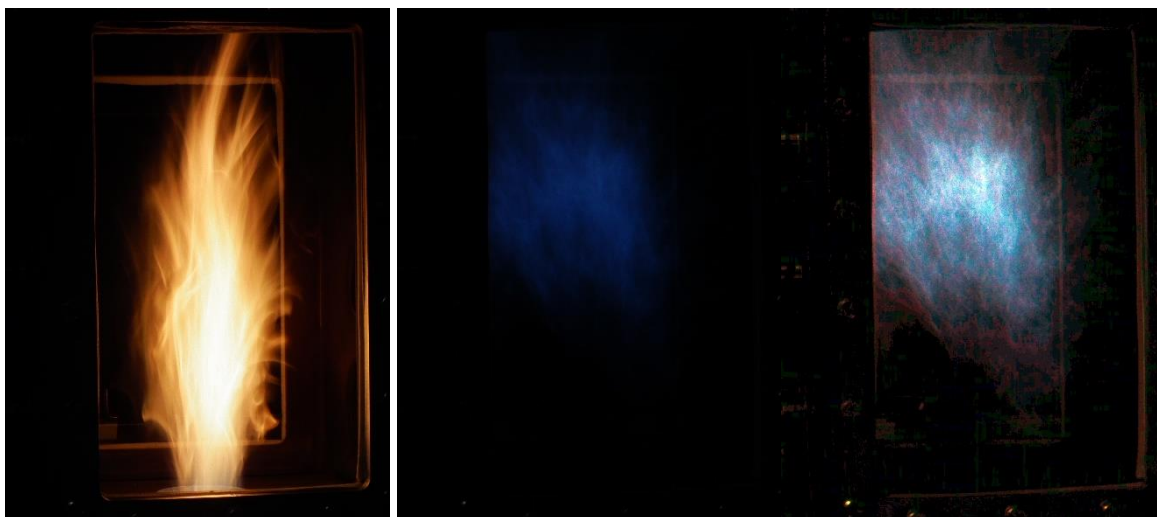
nem volt lényeges nyomáskülönbség. A mérési paramétereket az 1. táblázatban foglaltam össze. A reaktor két részre osztható:

Az 1. reaktorrész a keverőcső. Jellemzője a 177 °C (450 K) átlaghőmérséklet, a körülbelül 10 ms tartózkodási idő, ami a keverőcső jellemzőiből számítható (100 mm hossz, 40 mm átmérő, ~10 m/s átlagsebesség). A belépő porlasztólevegő hőmérséklete –23 °C (250 K). A hideg porlasztólevegőt úgy állítják elő, hogy a laboratórium 22 °C (295 K) hőmérsékletű levegőjének nyomását 1,75 barra növelik, majd laborhőmérsékletre hűtés után a levegő nyomását 1 bar nyomásra csökkentik. A tüzelőanyag kb. 70 °C-on (343 K) lép be. Az égéslevegő hőmérséklete 200 °C (473 K). A tüzelőanyag-cseppek teljes elpárolgásához 2,25 ms tartózkodási idő kell JP-8 kerozin alkalmazása esetén.

A 2. reaktorrész az égőtér. Józsa Viktor és munkatársai feltételezik, hogy az égőtérben az égés jó közelítéssel térben homogén, emiatt az égőtér jólkevert reaktornak (Perfectly Stirred Reactor, PSR) tekinthető. Ennek a feltételezésnek megfelelően végeztem PSR szimulációkat. Az égőtér sarkaiban kialakuló örvények segíthetik a gyulladást, a forró füstgázt recirkuláltatva. A térben homogén égés feltételezését a BME-csoportban végzett számítógépes áramlásdinamikai számítások is alátámasztják. A terveik között szerepel a pontos áramláskép kísérleti meghatározása is Particle Image Velocimetry (PIV) méréssel.

tüzelési teljesítmény	13,35 kW
JP-8 kerozin fűtőértéke	43 MJ/kg
ekvivalenciaarány	0,571
tüzelőanyag tömegárama	1,116 kg/h
teljes légáram	28 kg/h
füstgáz oxigénkoncentráció	9 %
égőtér nyomása	1 atm

1. táblázat. Stabil térfogati égést mutató mérési paraméterek összefoglalása.



3. ábra: Balra: egyenes láng; középen: térfogati égés azonos fényképezőgép beállításokkal a kemilumineszcens emisszió jobb összehasonlítása érdekében; jobbra: a középső kép automata képkorrekcióval, ami elsősorban a CH^* gyök pillanatnyi eloszlásának a jobb megjelenését segíti [4]

2.3. A KHSz-berendezésben mért adatok

A mérések és a számítási eredmények összehasonlítása a CH^* gyökök mért kemilumineszcenciáján, illetve az égőtérből távozó gázok összetételének mérésén alapulhat. Az előbbi összehasonlítás méréstechnikai szempontból nehezen megoldható. A CH^* gyökök fénykibocsátása a láng kék színét okozza, azonban ez a fény igen gyenge, és az elvégzett spektrofotométeres mérések jel/zaj aránya kicsi volt.

Az égéstérből távozó gázáramban a CO és NO koncentrációját Testo350 füstgáz analizátorral mérték. A mérések bizonytalanságát az 2. táblázat foglalja össze, melyet kalibrálógázok segítségével állapítottak meg, valamint minden esetben 15% referencia oxigénszintre számoltak át.

ekvivalenciaarány / φ	0,86	0,80 ¹	0,76	0,67	0,57
NO _x [ppm]	0,669	0,719	0,753	0,861	1,000
CO [ppm]	1,00	1,08	1,13	1,29	1,50
O ₂ [V/V%]	0,067	0,072	0,075	0,086	0,100

2. táblázat. A füstgáz-analízis bizonytalansága 15% O₂ mellett [4].

¹ A $\varphi = 0,80$ ekvivalenciaarányhoz tartozó bizonytalanságértékeket a $\varphi = 0,76$ és $\varphi = 0,86$ ekvivalenciaarányokhoz tartozó értékek alapján lineáris interpolációval számoltam.

Józsa Viktor kutatócsoportja a kísérlet körülményeit változtatva más beállításoknál is képes volt közel térben homogén égést, tehát térfogati égést elérni. Jelenleg az égőtér atmoszférikus nyomását nem lehet megváltoztatni, de változtatható az előmelegítési hőmérsékletet, a légáramok nagysága, és a tüzelési teljesítmény. Távlati terveik között szerepel az égőtér nyomásának növelése is.

3. A szimulációk leírása

3.1. A JP-8 kerozin

A JP-8 (Jet Propulsion 8) egy kerozin alapú repülőgép-üzemanyag. Összetétele nagyon hasonló az iparban használt Jet-A1 üzemanyaghoz, de a JP-8-hoz egyéb korróziógátló és fagyálló adalékanyagokat is kevernek. A JP-8-at először 1978-ban használták NATO repülőgépekben. Az USA légierő 1990. óta alkalmazza [6] a repülőgépek mellett számos egyéb katonai járműben is, amely nagyban megkönnyíti a műveleti logisztikai feladatokat. A JP-8 előnye, hogy biztonságosabb, mint a korábban használt JP-4, mivel gyulladáspontja lényegesen magasabb [7,8]. Összetételét tekintve legnagyobb részben (65 V%) 10-14-es szénatomszámú alifás szénhidrogének alkotják, de 18 V%-ban aromás vegyületeket is tartalmaz (benzol, toluol, xilol, indén, naftalin).

Az új üzemanyag kifejlesztésénél az egészségügyi szempontokat is figyelembe vették, így kevesebb mérgező anyagot tartalmaz. Csökkentették az üzemanyagnak a karcinogén hatású benzol és neurotoxikus hatású *n*-hexán tartalmát. Egy 2001-es, hat USA légierő-bázison végzett kutatás kimutatta, hogy a JP-8 kerozinnal dolgozók nem szorulnak gyakrabban orvosi ellátásra, mint akik nincsenek kitéve JP-8-nak [9].

Egyéb adalékanyagok hozzáadásával bizonyos tulajdonságait tovább lehet javítani, így a JP-8-nak több változatát is használják. 1994-ben kezdték el alkalmazni például a JP-8+100 kerozint, amelynek termikus stabilitása jóval nagyobb (56 °C-kal magasabb) mint az eredeti JP-8-nak.

3.2. Az OpenSMOKE++ program

Az OpenSMOKE++ egy program égések szimulációjára részletes reakciókinetikai mechanizmusok alapján [10]. A program C++ nyelven íródott; és egyik fő előnye az, hogy a felhasználó könnyen bővítheti és testre szabhatja anélkül, hogy a program alapjain változtatni kelljen. Az OpenSMOKE++ különböző ideális kémiai reaktorok szimulációjára alkalmas, mint például a csőreaktor, a lökeshullámcső és a jólkevert reaktor. A nagy méretű reakciómechanizmusokkal leírt reakciók szimulációja nagyon időigényes lehet, az

OpenSMOKE++ viszont fejlett numerikus módszerek alkalmazásával csökkenti a számítógépes szükségletet a számítások pontosságának feláldozása nélkül [11].

A programba öt modul van beépítve, amelyek neve Kinetic preprocessor, Ideal reactors, Laminar flames, Laminar flamelets és Graphical Post-Processor [12]. A Kinetic preprocessor képes értelmezni a CHEMKIN-mechanizmusformátumot. Ez a modul a szimulációhoz megadott kinetikai és termodinamikai paramétereket egy XML fájlba alakítja, majd az Ideal reactors modul elvégzi a számítást. A végén a program az eredményeket egy szövegfájlban összefoglalja, de azt XML fájlként is kiadja, hogy az eredmények további feldolgozása egyszerűbb legyen.

3.3. A HyChem-típusú mechanizmusok elve

Nagy szénatomszámú tüzelőanyagok magas hőmérsékletű égésének részletes, elemi reakciókat tartalmazó reakciómechanizmusa jellemzően több ezer anyagfajtát és több tízezer reakciólépést tartalmaz. Ilyen nagy reakciómechanizmusokat nem lehet térben kettő- vagy háromdimenziós számítógépes áramlásdinamikai (CFD, Computational Fluid Dynamics) szimulációkban alkalmazni, mert túlságosan nagy számítógép-kapacitás lenne szükséges. Ennek a problémának a megoldására dolgozták ki a HyChem (Hybrid Chemistry) típusú reakciómechanizmusok elvét [13,14]. A megközelítés kémiai alapja, hogy nagy szénatomszámú tüzelőanyagok magas hőmérsékletű oxidációja során a tüzelőanyag pirolízise sokkal gyorsabb, mint a pirolízis termékeként kapott kisebb méretű szénhidrogének oxidációja [15]. A pirolízis termékeként kapott kisebb szénatomszámú anyagok aránya változik az egyes tüzelőanyagok esetén. A HyChem-típusú mechanizmusokban egyetlen összevont (lumped) reakciólépésben írják le a nagy tüzelőanyagmolekulák szétesését C1-C4 molekulákra, majd részletes elemi reakciókkal írják le ezeknek a C1-C4 molekuláknak az oxidációját [16]. A HyChem-típusú reakciómechanizmusok emiatt viszonylag kicsik és alkalmazásukhoz égések számítógépes modellezésében nem szükséges nagy számítási teljesítmény.

3.4. A Glarborg-féle NO_x modell

A JP-8 kerozin HyChem mechanizmusában nincsenek nitrogén-oxidokkal kapcsolatos reakciók, de a szimulációim egyik célja volt mért NO koncentrációk reprodukálása. Ezért egy kombinált mechanizmust használtam, amiben a NO_x kémia a Glarborg mechanizmusból [17–19] származik. A nitrogéntartalmú vegyületek keletkezésének reakciókinetikája az égések során még mindig nem jól ismert, annak ellenére, hogy az elmúlt évtizedekben fontos kutatási terület volt. A Glarborg-mechanizmus a NO_x keletkezésénél a thermal és prompt NO mechanizmust veszi figyelembe, valamint az NNH-n és N₂O-n keresztüli képződést és a NO újraégetést [20]. A Glarborg-mechanizmusban a termodinamikai adatokat az Aktív Termokémiai Táblázatok (ATcT) módszerével határozták meg [21]. Ennek a módszernek az a lényege, hogy a rendelkezésre álló kísérletileg meghatározott és elméleti úton számított termokémiai adatok alapján felállít és megold egy termokémiai hálózatot. Ezzel a módszerrel nagyon pontosan lehet például képződési- és reakcióentalpiát, szabadentalpiát és kötési energiát meghatározni stabil és nagy reaktivitású kémiai anyagokra is [22–24].

A reakciókat a NO_x kémiát is tartalmazó A2 (Jet-A) [25] és az A1 (JP-8) [26] mechanizmusok egyesítésével kaptam, amelyeket a Stanford Egyetem egyik kutatócsoportjának, Hai Wang professzor laborjának honlapjáról töltöttem le. A JP-8 mechanizmusa önmagában 119 anyagfajtát és 841 reakciót tartalmaz. A NO_x kémiával egyesített mechanizmusban 201 anyagfajta és 1589 reakció szerepel. A termodinamikai adatok külön, ugyanezen a honlapon találhatóak [27].

4. Számítási eredmények

4.1. A mérés körülményei és a szimulációs paraméterek meghatározása

A megadott mérési körülmények és a berendezés adatai alapján kigyűjtöttem azokat a paramétereket, amelyek szükségesek az OpenSMOKE++ szimulációk elvégzéséhez. Ezeket a szimulációs paramétereket az OpenSMOKE++ program PSR reaktormodellje kulcsszavainak a formátuma szerint adom meg:

Type: NonIsothermal-ConstantPressure

Pressure: 101325 Pa

Residence time: 0.01 s

Volume: 0.01125 m³

Initial mixture:

Mole fractions: N2 0.79; O2 0.21

Temperature: 473 K

Mass flow rate: 25.35 kg/h

Inlet mixture:

Oxidizer:

Temperature: 250 K

Mole fractions: N2 0.79; O2 0.21

Mass flow rate: 2.72 kg/h

Fuel:

Temperature: 343 K

Mass flow rate: 1.11 kg/h

Total inlet mass flow rate: 3.83 kg/h

Mole fractions: JP-8 0.071712; N2 0.753117; O2 0.175171

Temperature: 251.1069 K

4.1.1. A bemenő gázelegy hőmérséklete

Az OpenSMOKE++ programban csak egy bemenő gázáramot lehet megadni, ezért az üzemanyag, a porlasztólevegő és az égéslevegő keveredés utáni hőmérsékletét és összetételét előre ki kellett számítanom. Ehhez először kiszámítottam a komponensek entalpiatartalmát a móltörtjüknek megfelelően a kiindulási hőmérsékletükön, majd ebből az elegy moláris entalpiáját, és az elegy moláris entalpiájából pedig az elegy hőmérsékletét. Az így kapott hőmérsékletet behelyettesítettem a kiindulási hőmérséklet helyére, és a lépéseket addig

ismételtem, amíg nem tapasztaltam nagy változást az elegy hőmérsékletében. A számítás menete röviden összefoglalva egyenletekkel:

$$H_{\text{JP-8}} = c_{p_{\text{JP-8},T_1}} \cdot T_1 \cdot n_{\text{JP-8}}$$

$$H_{\text{O}_2} = c_{p_{\text{O}_2},T_2} \cdot T_2 \cdot n_{\text{O}_2}$$

$$H_{\text{N}_2} = c_{p_{\text{N}_2},T_2} \cdot T_2 \cdot n_{\text{N}_2}$$

$$c_{p_{\text{elegy},T_x}} = \frac{c_{p_{\text{JP-8},T_x}} \cdot n_{\text{JP-8}} + c_{p_{\text{O}_2},T_x} \cdot n_{\text{O}_2} + c_{p_{\text{N}_2},T_x} \cdot n_{\text{N}_2}}{n_{\text{JP-8}} + n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2}}$$

$$H_{\text{elegy}} = \frac{H_{\text{JP-8}} + H_{\text{O}_2} + H_{\text{N}_2}}{n_{\text{JP-8}} + n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2}}$$

$$T_x = \frac{H_{\text{JP-8}} + H_{\text{O}_2} + H_{\text{N}_2}}{c_{p_{\text{elegy},T_x}}}$$

	M [g/mol]	móltört	tömegáram [kg/h]	móláram [mol/h]	T^0 [K]	c_p^0 [J/(mol·K)]
JP-8	151,9	0,07171	1,11	7,307	343	3,564
O ₂	32	0,1752	0,5712	17,85	250	29,19
N ₂	28	0,7531	2,149	76,74	250	29,11

3. táblázat. A gázelegy hőmérsékletének kiszámításához felhasznált adatok

A hőkapacitások kiszámításához felhasznált egyenletek:

Nitrogén [28]:

$$c_p = 28.98641 + 1.853978 \cdot \frac{T}{1000 \text{ K}} - 9.647459 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^2 + 16.63537 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^3 + 0.000117 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^{-2}$$

Oxigén [29]:

$$c_p = 31.32234 - 20.23531 \cdot \frac{T}{1000 \text{ K}} + 57.86644 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^2 - 36.50624 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^3 - 0.007374 \cdot \left(\frac{T}{1000 \text{ K}}\right)^{-2}$$

JP-8 [26,30]:

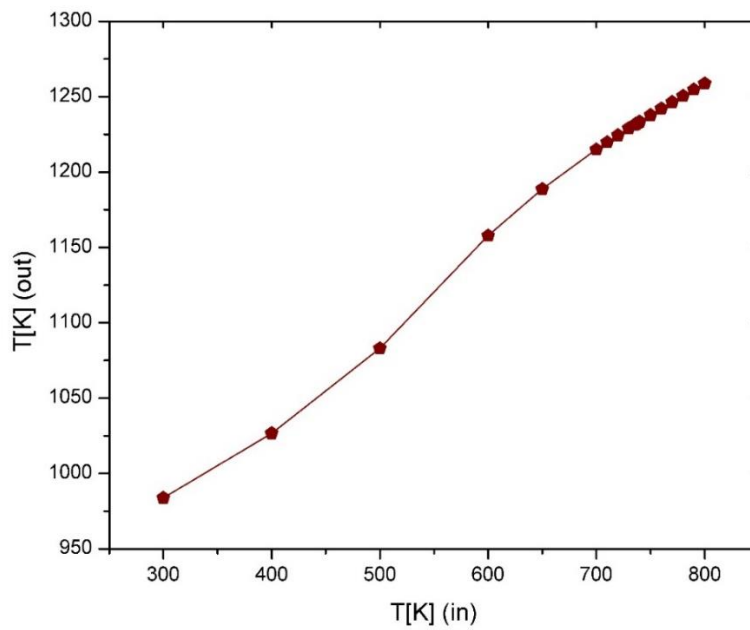
$$c_p = 2.193 + 3.996 \cdot 10^{-3} \cdot (T - 363.15)$$

4.1.2. A térfogat, tartózkodási idő és tömegáram kapcsolatának vizsgálata

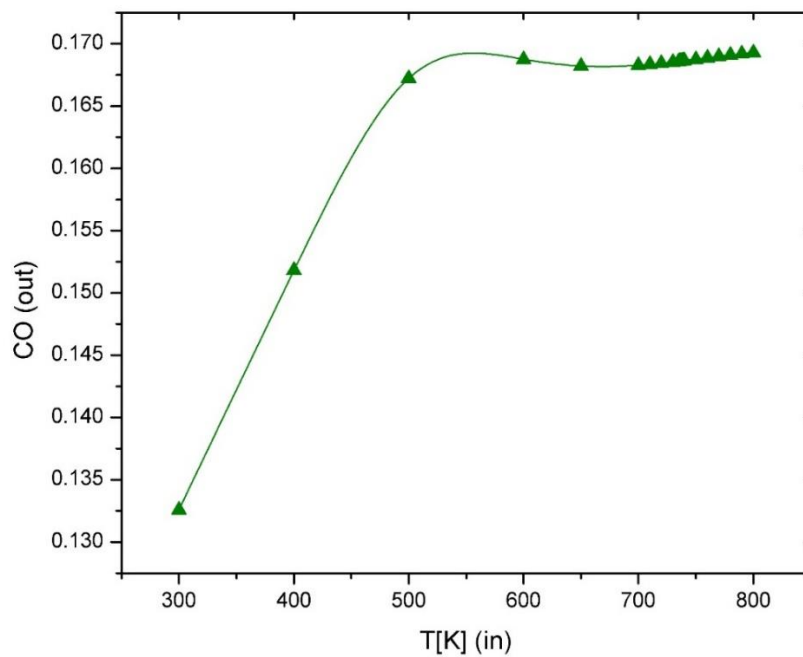
A mérések alapbeállításához megadott adatok tartalmazták a térfogatot ($V=0,01125 \text{ m}^3$), a tömegáramot ($X=3,83 \text{ kg/h}$) és a becsült tartózkodási időt ($\tau=0,1 \text{ s}$) is, noha a beáramló anyagok kémiai összetételének ismeretében ezek közül bármelyik a másik kettőből kiszámítható. Az OpenSMOKE++ programban bemenő adatként mindhárom megadható, de ezek közül egyszerre csak kettőt fogad el.

Az első számítás során a bemenő paraméterek között a térfogatot és a tömegáramot adtam meg, és a program a tartózkodási időt $\tau = 2,6 \text{ s}$ -nak számította. Ez azt jelenti, hogy az alapadatként megadott három mennyiség nem volt összhangban egymással. Ez a $\tau = 2,6 \text{ s}$ tartózkodási idő túlságosan hosszúnak tűnik.

Az első számítás szerint ilyen paraméterek esetén a szobahőmérsékletű bemenő gázelegy is meggyulladt. A 4. ábrán látható a reaktor számított hőmérséklete a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében, az 5. ábrán pedig a kimenő füstgázok számított CO móltörtje a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében. Az irreálisan hosszú tartózkodási idő következménye, hogy számítás szerint már a szobahőmérsékletű bemenő elegy is meggyullad, amit a kísérleteknél nem tapasztaltak.

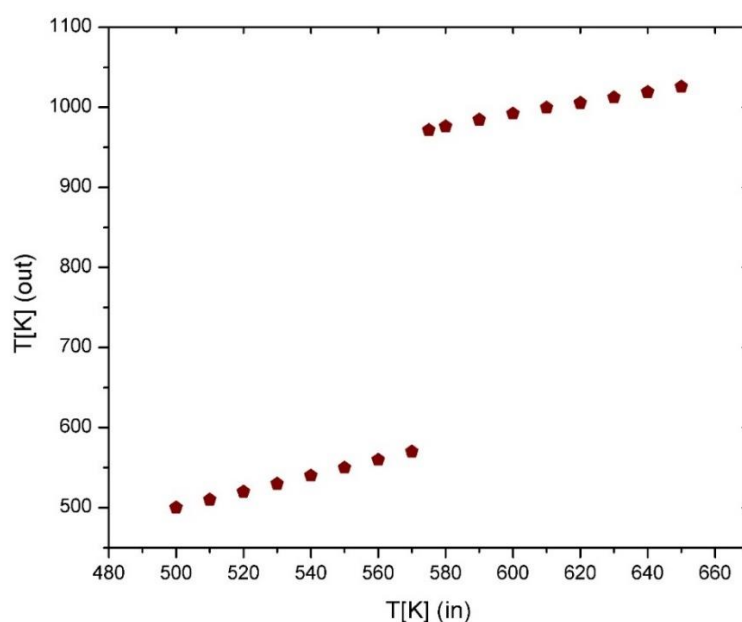


4. ábra. A kimenő gázelegy hőmérséklete a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a térfogat és a tömegáram alapján számítva.

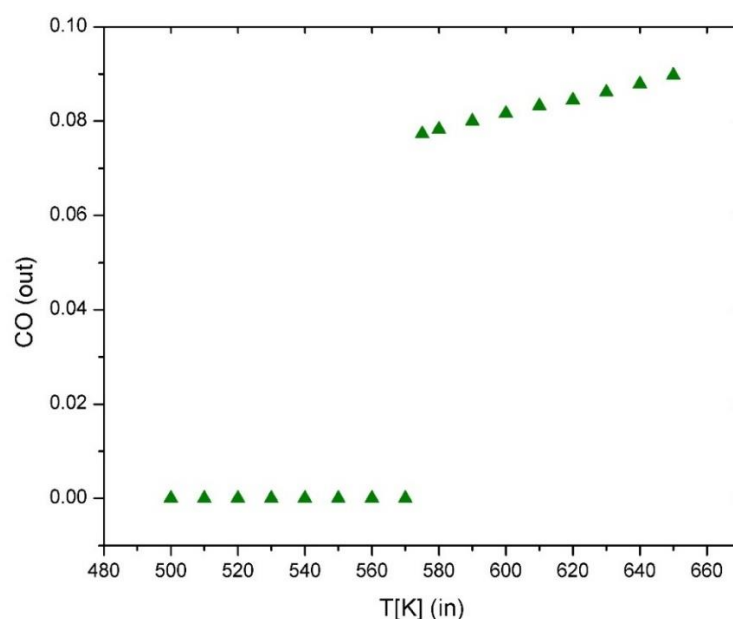


5. ábra. A kimenő gázelegyben a CO móltörtje a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a térfogat és a tömegáram alapján számítva.

A második számításnál a térfogatot ($V=0,01125 \text{ m}^3$) és tartózkodási időt adtam meg ($\tau=0,1 \text{ s}$). A számítás eredménye szerint a reakcióelegy 575 K körül gyullad meg és a hőmérsékletnövekedés 400 K , ami a kísérleti eredményeknek megfelelő. A 6. és 7. ábrán a kimenő hőmérsékletet és szénmonoxid móltörtjét ábrázoltam a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében.

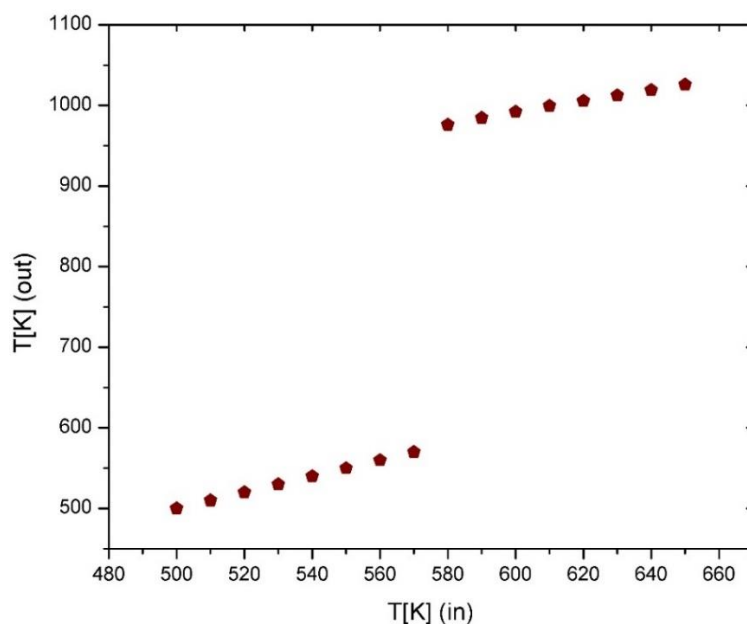


6. ábra. A kimenő gázelegy hőmérséklete a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a térfogat és a tartózkodási idő alapján számítva.

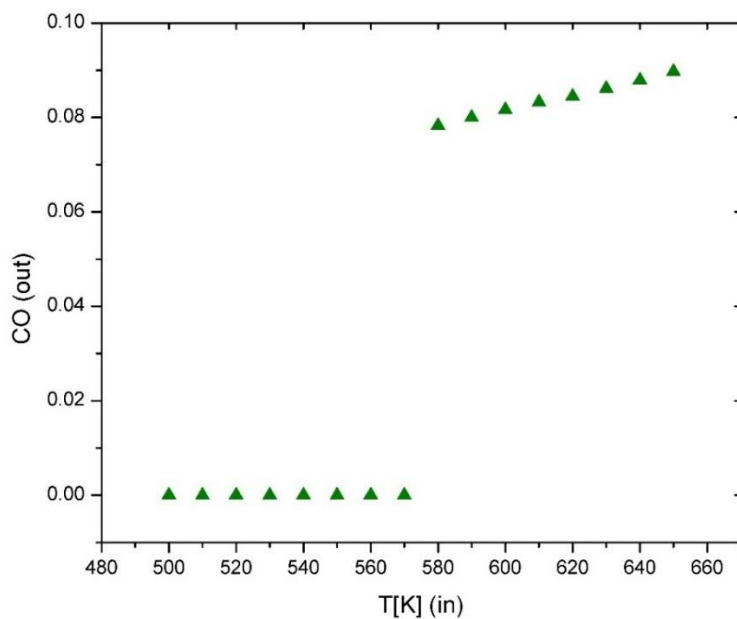


7. ábra. A kimenő gázelegyben a CO móltörtje a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a térfogat és a tartózkodási idő alapján számítva.

A harmadik számításnál a tömegáramot ($X=3,83$ kg/h) és a tartózkodási időt ($\tau=0,1$ s) adtam meg és így végeztem el a számításokat. Az eredmények azt mutatják, hogy a reakcióelegy 570 K és 580 K között gyulladt be. Ez megegyezik a térfogat és a tartózkodási idő alapján számítottakkal.



8. ábra. A kimenő gázelegy hőmérséklete a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a tartózkodási idő és a tömegáram alapján számítva



9. ábra. A kimenő gázelegyben a CO móltörtje a bemenő gázelegy hőmérsékletének függvényében a tartózkodási idő és a tömegáram alapján számítva.

A három számítás alapján levonható az a következtetés, hogy a tartózkodási idő a legfontosabb a három megadott paraméter közül. A modellben jólkevert reaktort és homogén égést feltételezünk, de egy téglatest alakú égőtérben ez nehezen valósul meg. A 3. ábrán a reaktorról készült képeken is látszódik, hogy az égés ugyan homogén, de nem terjed ki egészen az égőtér sarkaiig. A gáz áramlásának és az égés sebességének figyelembevételével meg lehetne határozni a pontos térfogatot, de ez lényegesen bonyolítaná a modellt. Ezért a további számítások során a tartózkodási idővel és a tömegárammal fogok számolni, és a térfogatot hagyom ki a bemenő paraméterek közül.

4.2. További mérési beállítások

A következő számításokat a további, mérési körülményekre vonatkozó adatok alapján végeztem el. 10 különböző körülménnyel végezték a méréseket, az ekvivalenciaarány minden esetben 0,8 volt, az égéslevegőt 150 °C-ra illetve 200 °C-ra melegítették elő, és a porlasztólevegő nyomását 1,3 és 1,9 bar között változtatták. Ezekben az esetekben térfogati égést kaptak. Ha az égéslevegőt tovább melegítették (250-350 °C-ra), akkor a gázelegy egyenes lánggal égett.

A cél az, hogy a reaktor egyes beállításain a mérési eredményeket OpenSMOKE++ szimulációkkal is alá tudjam támasztani. A szimulációk körülményei a következők voltak az OpenSMOKE++ kulcsszavainak megfelelően:

Initial mixture:

Mole fractions: N2 0.79; O2 0.21;

Temperature: 2000 K;

Pressure: 101325 Pa;

Inlet mixture:

Pressure: 101325 Pa;

Equivalence Ratio: 0.8;

Fuel moles: JP-8 1;

Oxidizer moles: O2 21 N2 79;

Temperature: 394,580 K - 455,012 K;

A 4. táblázat tartalmazza a különböző mérési beállítások körülményeit, a 5. táblázat pedig az egyes beállításokhoz tartozó koncentrációmérési eredményeket.

mérés sorszáma	porlasztólevegő nyomása [bar]	égéslevegő hőmérséklete [°C]	bemenő gázelegy hőmérséklete [K]	összes bemenő tömegáram [kg/s]
1	1,30	150	409,4	0,005897
2	1,45	150	405,3	
3	1,60	150	401,8	
4	1,75	150	397,9	
5	1,90	150	394,6	
6	1,30	200	455,0	
7	1,45	200	450,1	
8	1,60	200	445,7	
9	1,75	200	441,3	
10	1,90	200	437,6	

4. táblázat. A tíz különböző mérési beállítás körülményei

Mérés száma	NO móltört (mért)	CO móltört (mért)	O ₂ móltört (mért)
1	1,38E-05	- ²	0,04
2	1,12E-05	- ²	0,04
3	7,60E-06	1,84E-05	0,04
4	7,60E-06	1,72E-05	0,04
5	8,00E-06	3,76E-05	0,04
6	- ³	- ²	0,04
7	9,40E-06	2,03E-05	0,04
8	8,90E-06	1,29E-05	0,04
9	8,75E-06	6,47E-06	0,04
10	8,05E-06	7,97E-05	0,04

5. táblázat. A különböző beállításokhoz tartozó mérési eredmények

Az egyes körülményekhez tartozó számított O₂, NO, NO₂ és CO kimenő móltörtet, illetve füstgázhőmérsékleteket az 6. táblázatban adom meg. Ezeknél a szimulációknál adiabatikus, hővesztesség nélküli reaktort tételeztem fel. Látható, hogy hővesztesség nélküli reaktor feltételezésével a számított füstgázkoncentrációk nagyon messze vannak a mért értékektől.

² A CO koncentrációt mérő műszer kimutatási határa 0,50 ppm, tehát $5,0 \times 10^{-7}$ móltört.

³ A NO koncentrációt mérő műszer kimutatási határa 0,05 ppm, tehát $5,0 \times 10^{-8}$ móltört.

Sorszám	O ₂ móltört	NO móltört	NO ₂ móltört	CO móltört	T [K]
1	4,01E-02	8,46E-04	3,40E-07	3,31E-03	2108,4
2	4,01E-02	8,27E-04	3,31E-07	3,28E-03	2105,7
3	4,01E-02	8,10E-04	3,24E-07	3,25E-03	2103,4
4	4,01E-02	7,93E-04	3,16E-07	3,23E-03	2100,8
5	4,01E-02	7,77E-04	3,10E-07	3,21E-03	2098,6
6	4,01E-02	8,46E-04	3,40E-07	3,31E-03	2108,4
7	4,01E-02	1,06E-03	4,37E-07	3,61E-03	2135,2
8	4,01E-02	1,04E-03	4,25E-07	3,58E-03	2132,3
9	4,01E-02	1,01E-03	4,14E-07	3,54E-03	2129,5
10	4,01E-02	9,93E-04	4,05E-07	3,52E-03	2127,0

6. táblázat. A 10 mérési beállításhoz tartozó számított eredmények

4.3. Szimulációk hővesztességes égéstér feltételezésével

A reakció a valóságban nem adiabatikus körülmények között megy végbe, ezért figyelembe kell venni a fellépő hőátadást is a számítások során. A hővesztesség számításához az OpenSMOKE++-ban meg kell adni a hőátadási felületet (tehát a reaktor felületét), a hőátadási tényezőt, és a külső hőmérsékletet. Józsa Viktor becslése alapján kb. 15% a hővesztesség, tehát az égéshő 85%-a fűti az égésteret. Az OpenSMOKE++ 23% hővesztességet számított, ami jól egyezik Józsa Viktor becslésével. Az OpenSMOKE++ számításokhoz szükséges paramétereket a 7. táblázatban foglaltam össze.

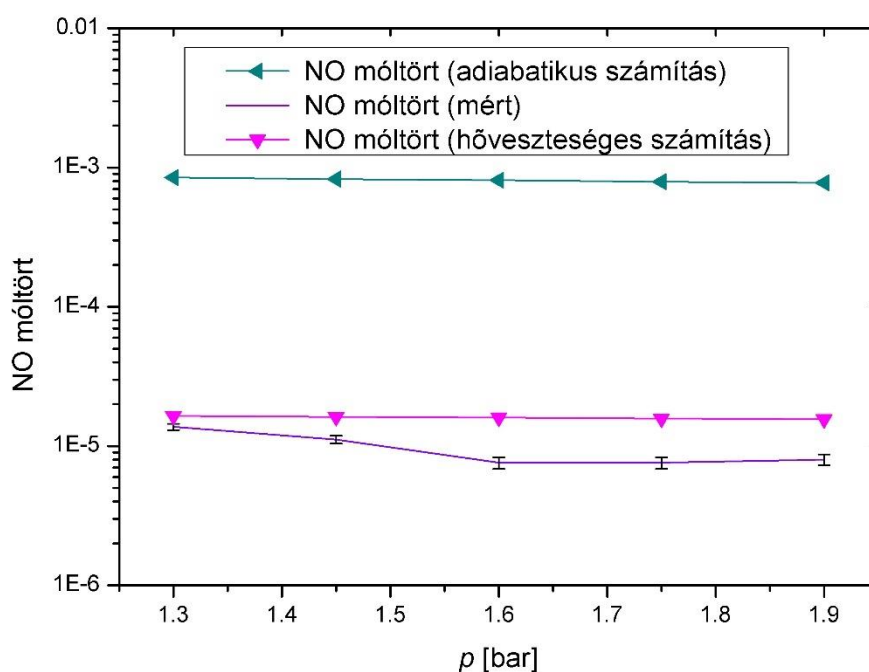
hőátadási felület	0,3225 m ²
hőátadási együttható	11,5 W/m ² /K
külső hőmérséklet	490,5 K

7. táblázat. A hővesztesség számításához szükséges paraméterek

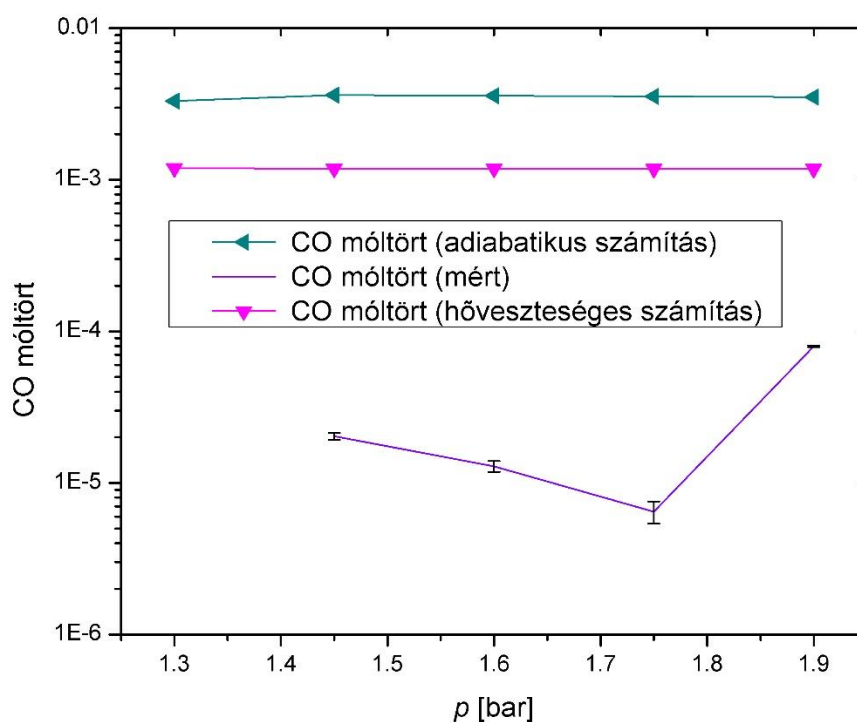
A szimulációkat először a megadott 10 mérési körülményre végeztem el. A hőátadást is figyelembe véve a mérési adatokhoz sokkal közelebbi eredményeket kaptam. A szimulációval kapott kimenő móltörtöket és füstgáz-hőmérsékleteket a 8. táblázatban foglaltam össze.

Sorszám	O ₂ móltört	NO móltört	NO ₂ móltört	CO móltört	T [K]
1.	4,01E-02	1,65E-05	1,49E-08	1,15E-03	1625,5
2.	4,01E-02	1,62E-05	1,49E-08	1,15E-03	1623,3
3.	4,01E-02	1,60E-05	1,49E-08	1,15E-03	1621,5
4.	4,01E-02	1,58E-05	1,48E-08	1,15E-03	1619,4
5.	4,01E-02	1,56E-05	1,48E-08	1,14E-03	1617,6
6.	4,01E-02	1,95E-05	1,52E-08	1,19E-03	1649,7
7.	4,01E-02	1,91E-05	1,52E-08	1,19E-03	1647,0
8.	4,01E-02	1,88E-05	1,52E-08	1,19E-03	1644,7
9.	4,01E-02	1,85E-05	1,51E-08	1,18E-03	1642,4
10.	4,01E-02	1,83E-05	1,51E-08	1,18E-03	1640,4

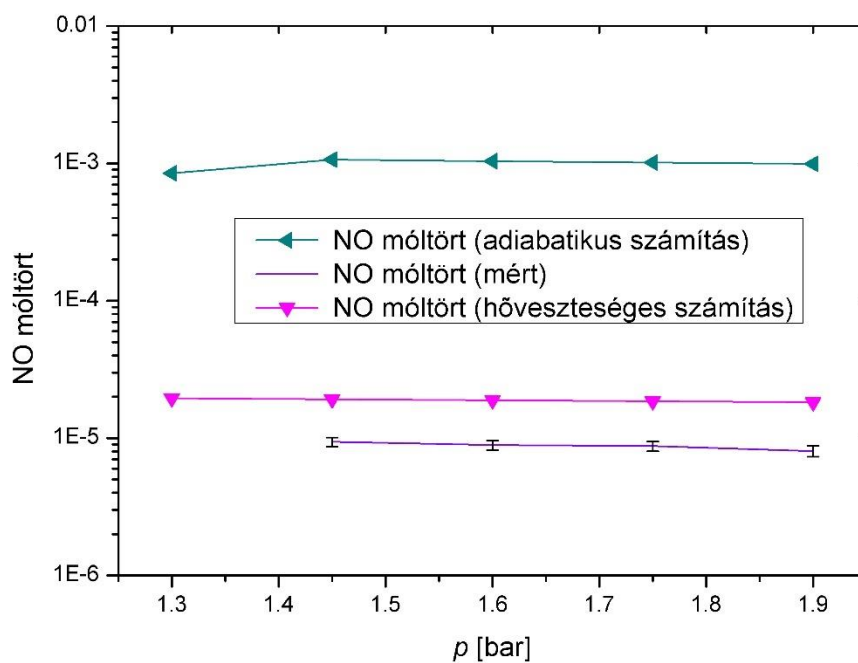
8. táblázat. A hőátadást is figyelembe vevő szimulációk eredménye



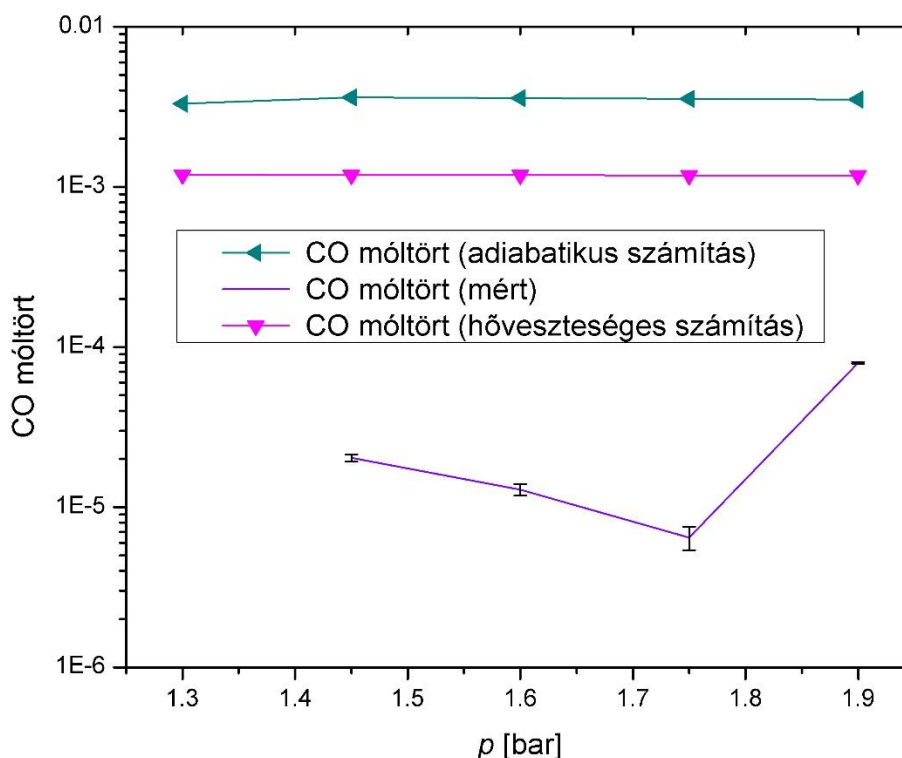
10. ábra. A 150 °C-ra előmelegített égéslevegővel mért, hővesztéssel és hővesztés nélkül számított kimenő NO móltörtek összehasonlítása a porlasztólevegő nyomásának függvényében.



11. ábra. A 150 °C-ra előmelegített égéslevegővel mért, hővesztességgel és hővesztesség nélkül számított kimenő CO móltörtek összehasonítása a porlasztólevegő nyomásának függvényében.



12. ábra. A 200 °C-ra előmelegített égéslevegővel mért, hővesztességgel és hővesztesség nélkül számított kimenő NO móltörtek összehasonítása.



13. ábra. A 200 °C-ra előmelegített égéslevegővel mért, hővesztéssel és hővesztés nélkül számított kimenő CO móltörtek összehasonlítása.

A 10-13. ábrákon a számított és a mért eredményeket ábrázoltam; a kimenő móltörteket a porlasztólevegő nyomásának függvényében, külön-külön a 150 °C-ra és a 200 °C-ra előmelegített égéslevegőre. Jól látszódik, hogy a hővesztéssel is figyelembe vevő szimulációk sokkal közelebbi értéket adnak a mérési eredményekhez. A nitrogén-monoxid móltörtje egy nagyságrendbe esik a hővesztéssel számított és a mért esetben. A CO móltörtje méréstől való eltérésére a következő alfejezetben próbálok megoldást keresni.

4.4. A mérési alapbeállítás szimulálása változtatott körülményekkel

A 10-13. ábrákon a koncentrációkat logaritmikus skálán adtam meg, így szemléletesen látszódik, hogy a mért és a számított eredmények között két nagyságrend körüli az eltérés a szén-monoxid koncentráció esetében. Az eltérés sokkal nagyobb, mint a CO koncentráció esetleges mérési pontatlansága (ld. az ábrákon megadott hibahatárokat). A szénhidrogénégési mechanizmusokkal általában nagy pontossággal (pl. 10%-on belül) lehet a keletkező CO

menyiségét számítani, tehát a jelentős eltérés oka nem lehet a használt reakciómechanizmus pontatlansága. Feltételezem, hogy az eltérés oka, hogy egyes laboratóriumi mérési körülményeket nem megfelelő módon vettem figyelembe a szimulációk során. A következő szimulációk célja hogy felmérje, hogy mely mérési körülményeket lehetne úgy megválasztani, hogy a szimuláció reprodukálja a mért CO koncentrációkat.

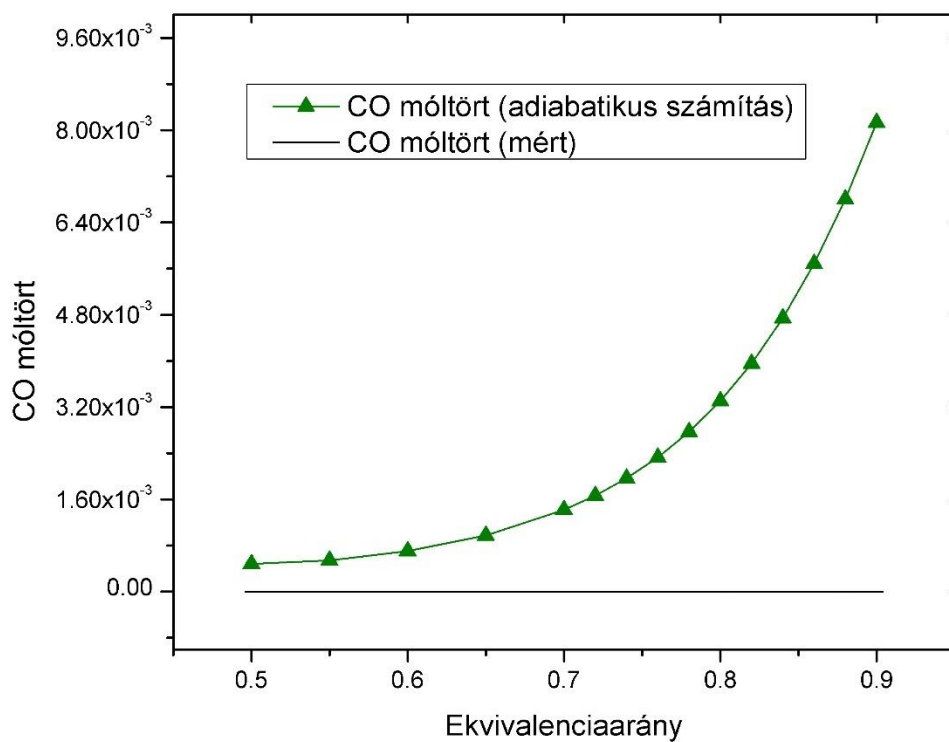
A következő számítások során az 1. mérési beállítást vettem alapul és a körülményeket kis lépésekben, szisztematikusan változtattam. A mérési adatok és mérési paraméterek között vannak kevésbé bizonytalanok (például az ekvivalenciaarány, és a mért CO és NO móltörtek) és vannak nagyon bizonytalanok (például a tartózkodási idő és a reaktor pontos hőmérséklete). A paraméterek változtatásával olyan mérési paraméterkészletet keresek, amely csak kis mértékben tér el az eddig feltételezett paraméterektől, de alkalmazásával sokkal jobb az elméleti számított és a mért adatok egyezése.

4.4.1. Az ekvivalenciaarány változtatásának hatása

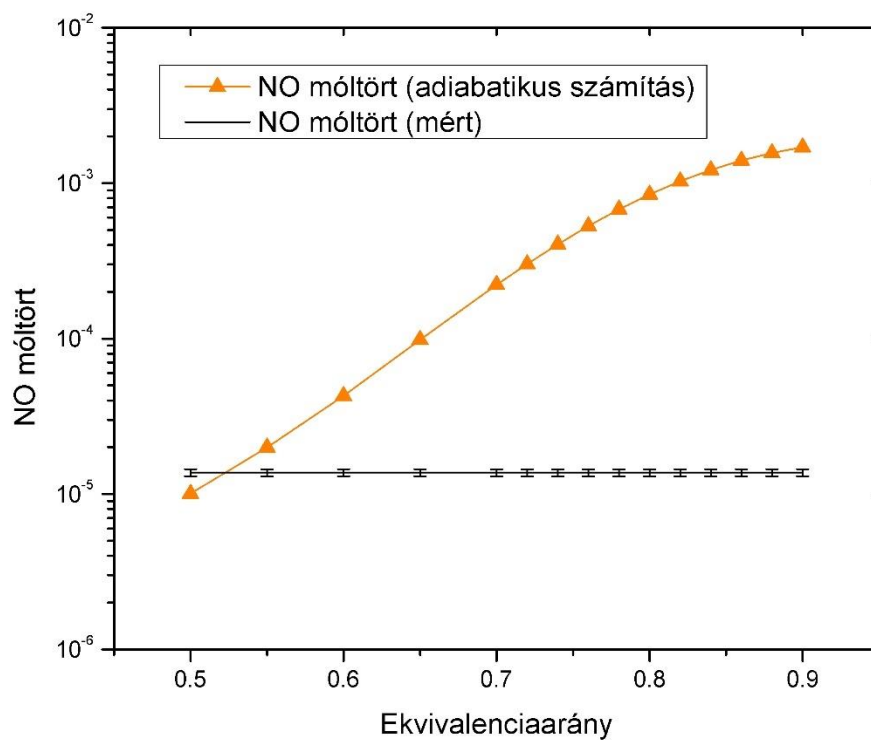
Először az ekvivalenciaarányt változtattam $\varphi = 0,5$ és $0,9$ között. A 6. táblázatban összefoglalt eredmények alapján látható, hogy kisebb ekvivalencia arányoknál a füstgázban számított NO móltört hasonló a mért eredményekhez, és a CO móltört is csak egy nagyságrenddel tér el. Az oxigén móltört viszont sokkal nagyobb, mint a mért $0,04$, ezért ezek a körülmények biztosan nem felelnek meg a reaktornak. Az ekvivalenciaarány változtatásának vizsgálata kevésbé fontos, mert a mérés körülményeinél kis bizonytalansággal ismert, hogy az ekvivalenciaarány $\varphi=0,80$.

φ	T [K] (kimenő)	O ₂	NO	NO ₂	CO
0,50	1590,3	1,01E-01	1,00E-05	2,41E-08	4,80E-04
0,55	1686,8	9,08E-02	2,00E-05	2,42E-08	5,46E-04
0,60	1779,7	8,04E-02	4,28E-05	3,17E-08	7,02E-04
0,65	1868,9	7,01E-02	9,81E-05	5,46E-08	9,76E-04
0,70	1954,1	5,99E-02	2,22E-04	1,07E-07	1,42E-03
0,72	1986,8	5,59E-02	3,02E-04	1,40E-07	1,67E-03
0,74	2018,7	5,19E-02	4,04E-04	1,81E-07	1,97E-03
0,76	2049,7	4,79E-02	5,29E-04	2,29E-07	2,33E-03
0,78	2079,7	4,40E-02	6,78E-04	2,83E-07	2,77E-03
0,80	2108,4	4,01E-02	8,46E-04	3,40E-07	3,31E-03
0,82	2136,0	3,63E-02	1,03E-03	3,95E-07	3,96E-03
0,84	2162,2	3,26E-02	1,22E-03	4,44E-07	4,74E-03
0,86	2186,8	2,90E-02	1,40E-03	4,82E-07	5,68E-03
0,88	2209,9	2,55E-02	1,57E-03	5,05E-07	6,81E-03
0,90	2231,3	2,22E-02	1,70E-03	5,11E-07	8,13E-03

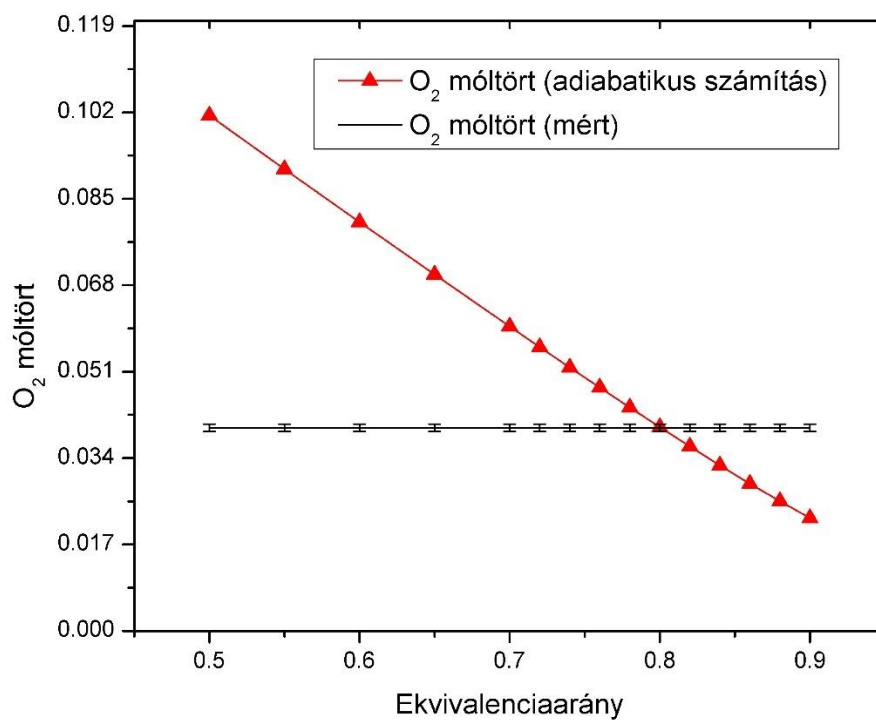
9. táblázat. Az 1. mérési beállításnál, változtatott ekvivalenciaarányal számított eredmények.



14. ábra. A kimenő CO móltört az ekvivalenciaarány függvényében az 1. mérési beállításnál. A mérésnél alkalmazott az ekvivalenciaarány $\varphi=0,80$.



15. ábra. A kimenő NO móltört az ekvivalenciaarány függvényében az 1. mérési beállításnál. A mérésnél alkalmazott az ekvivalenciaarány $\phi=0,80$.



16. ábra. A kimenő O₂ móltört az ekvivalenciaarány függvényében az 1. mérési beállításnál. A mérésnél alkalmazott az ekvivalenciaarány $\phi=0,80$.

4.4.2. A tartózkodási idő változtatásának hatása

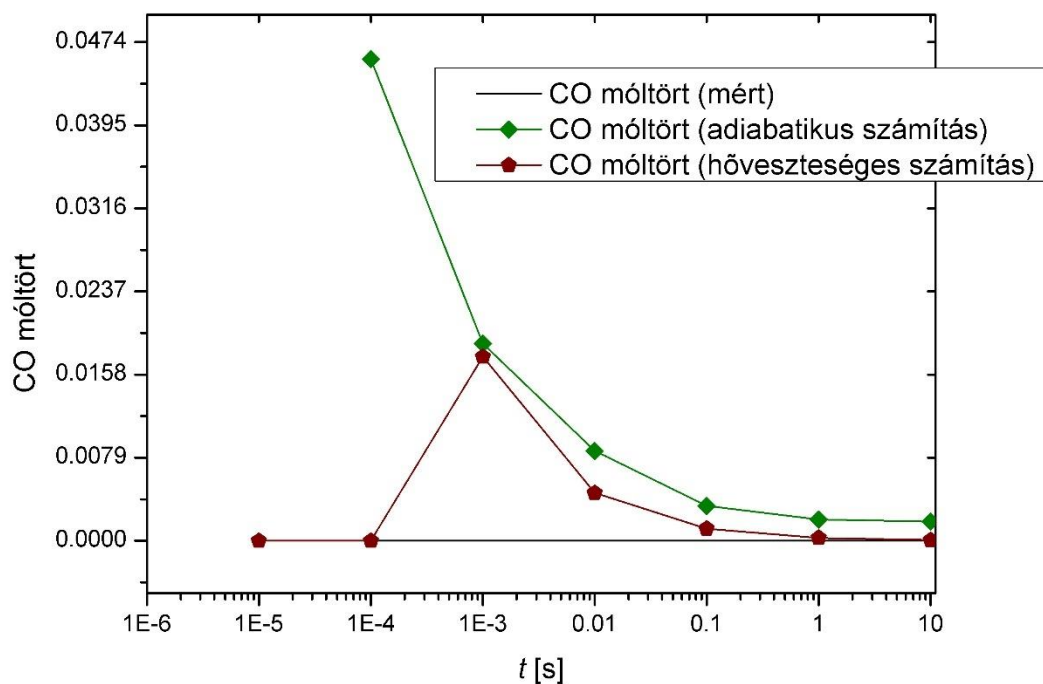
A következő számítási sorozatban a tartózkodási időt változtattam. Először adiabatikus körülménynél, majd a hőveszteséget is figyelembe véve végeztem számításokat.

τ [s]	T [K]	O ₂	NO	NO ₂	CO
1,00E-05	nincs égés				
1,00E-04	1657,4	6,58E-02	1,85E-05	4,09E-09	4,579E-02
1,00E-03	1911,1	4,75E-02	8,40E-05	9,61E-09	1,875E-02
1,00E-02	2045,4	4,25E-02	2,68E-04	4,88E-08	8,55E-03
1,00E-01	2108,4	4,01E-02	8,46E-04	3,40E-07	331E-03
1,00E-00	2121,0	3,89E-02	2,37E-03	1,37E-06	2,01E-03
1,00E+01	2119,8	3,80E-02	3,96E-03	2,41E-06	1,83E-03

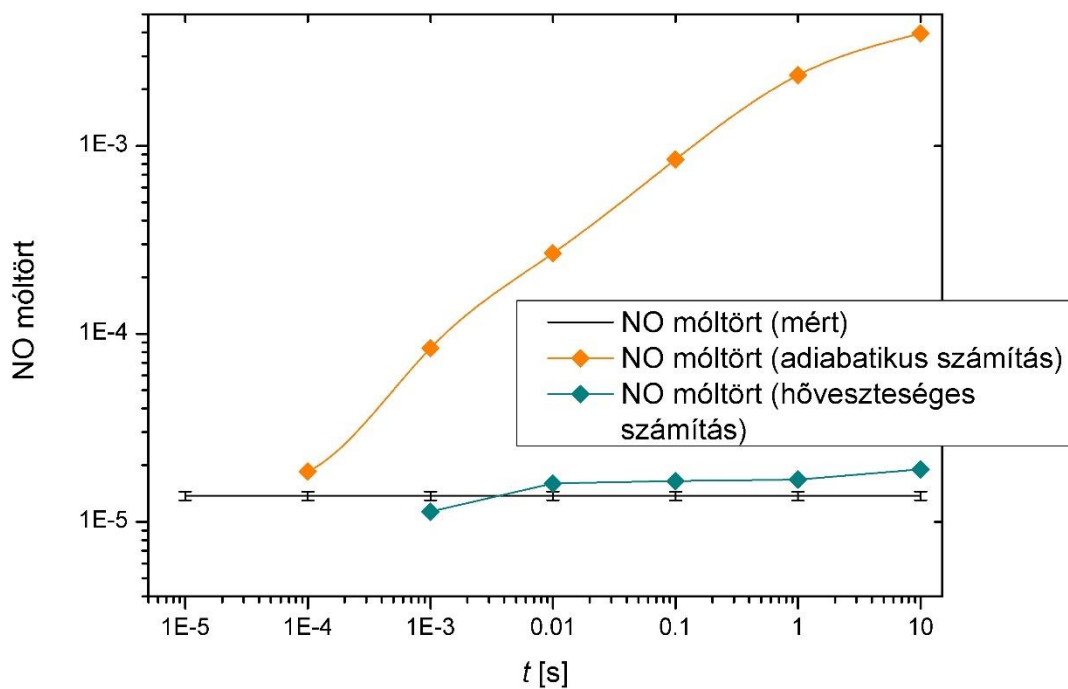
10. táblázat. Az 1. mérési beállítás változtatott tartózkodási idővel számított eredményei, adiabatikus rendszerben.

τ [s]	T [K]	O ₂	NO	NO ₂	CO
1,00E-05	nincs égés				
1,00E-04	nincs égés				
1,00E-03	1507,05	4,91E-02	1,13E-05	4,73E-09	1,75E-02
1,00E-02	1597,6	4,17E-02	1,60E-05	8,28E-09	4,54E-03
1,00E-01	1625,46	4,01E-02	1,65E-05	1,49E-08	1,15E-03
1,00E-00	1633,59	3,98E-02	1,68E-05	2,16E-08	2,70E-04
1,00E+01	1635,9	3,97E-02	1,90E-05	2,58E-08	6,50E-05

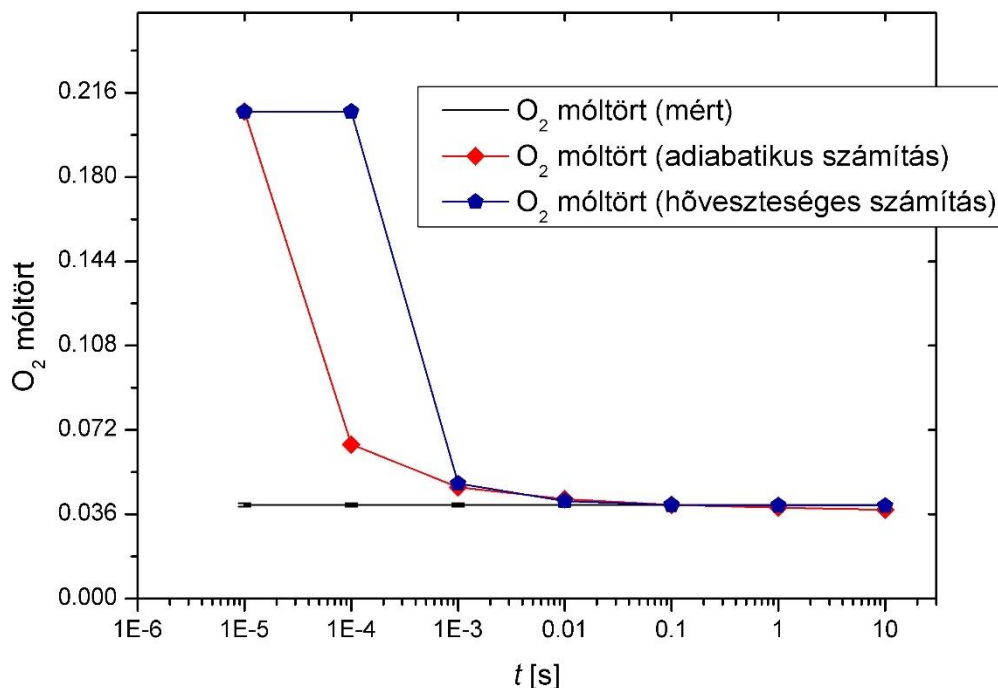
11. táblázat. Az 1. mérési beállítás változtatott tartózkodási idővel, a hőveszteséget is figyelembe véve.



17. ábra. A kimenő CO mólört a tartózkodási idő függvényében az 1. mérési beállításra hővesztéssel és hővesztés nélkül.



18. ábra. A kimenő NO mólört a tartózkodási idő függvényében az 1. mérési beállításra hővesztéssel és hővesztés nélkül.



19. ábra. A kimenő O₂ móltört a tartózkodási idő függvényében az 1. mérési beállításra hővesztéssel és hővesztés nélkül.

Ezek az eredmények nagyon érdekesek a CO móltörtje szempontjából. A 17. ábrán jól látszik, hogy a hővesztés figyelembe vétele nélkül kapott eredményekben a CO móltört csökken a tartózkodási idő növelésével, de 0,1 másodperc után a görbe ellaposodik, és nem éri el a 10^{-5} nagyságrendű mérési eredményeket. Ezzel szemben a hővesztést figyelembe vevő számítások eredményeként kapott CO móltört ugyanolyan meredekséggel csökken 0,1 s után is, és 10 s tartózkodási időnél a mérési adatok nagyságrendjébe kerül. A koncentráció csökkenésének oka, hogy nagyobb tartózkodási időknél a CO tovább tud oxidálódni, ezt mutatja a csökkenő kimenő oxigén móltört is.

A NO móltört adiabatus körülmények között növekszik a tartózkodási idő növekedésével, de a hővesztést is figyelembe véve 10 másodpercnél is 10^{-5} nagyságrendben marad.

Ez azt jelenti, hogy 10 s tartózkodási időnél a reaktornak egy olyan állapota van, amely nagyságrendileg megfelel a mérési adatoknak. Ez azonban azt feltételezi, hogy a valódi tartózkodási idő százszorosa a becsültnek. A számítások alapján valószínű, hogy a τ alá van becsülve, de a modell pontosításához a többi paraméter változtatása is szükséges.

4.4.3. Számítások különböző izoterm hőmérsékletű PSR reaktorral

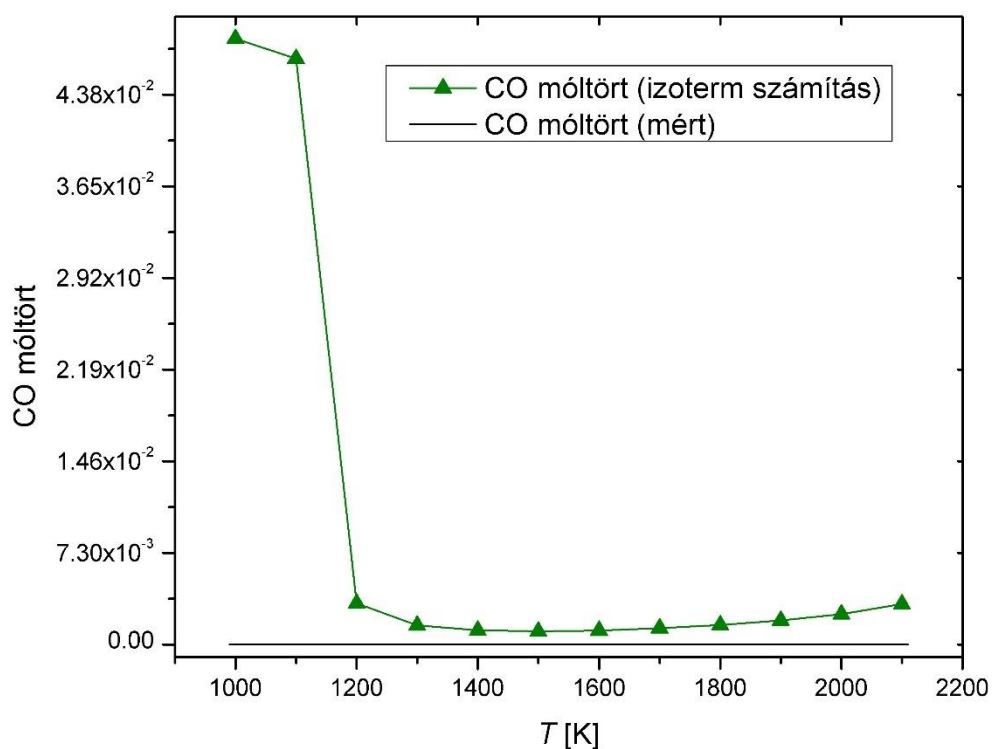
Az előző szimulációkban adiabatikus, illetve hővesztességet feltételező reaktorral számoltam. A hővesztesség számításához szükséges hőátadási együttható és külső hőmérséklet bizonytalan paraméterek. Józsa Viktor becslései és az OpenSMOKE++ hővesztéses eredményei nem teljesen egyeztek meg, ezért ebben az alfejezetben a reaktor hőmérsékletének változtatásának hatását vizsgálom a kimenő koncentrációkra. Az OpenSMOKE++ hővesztesség-számítása alapján a reaktor hőmérséklete mintegy 1625K.

A hővesztési együttható és külső hőmérséklet szisztematikus változtatása helyett az adiabatikus égési hőmérsékletnél alacsonyabb izoterm hőmérsékletű reaktort feltételezek, és az izoterm hőmérsékletet változtatom. Ez a becslés nem egyezik pontosan a hővesztesség kiszámításával, de a koncentrációváltozások trendjeiből a hővesztesség változásának hatására lehet következtetni.

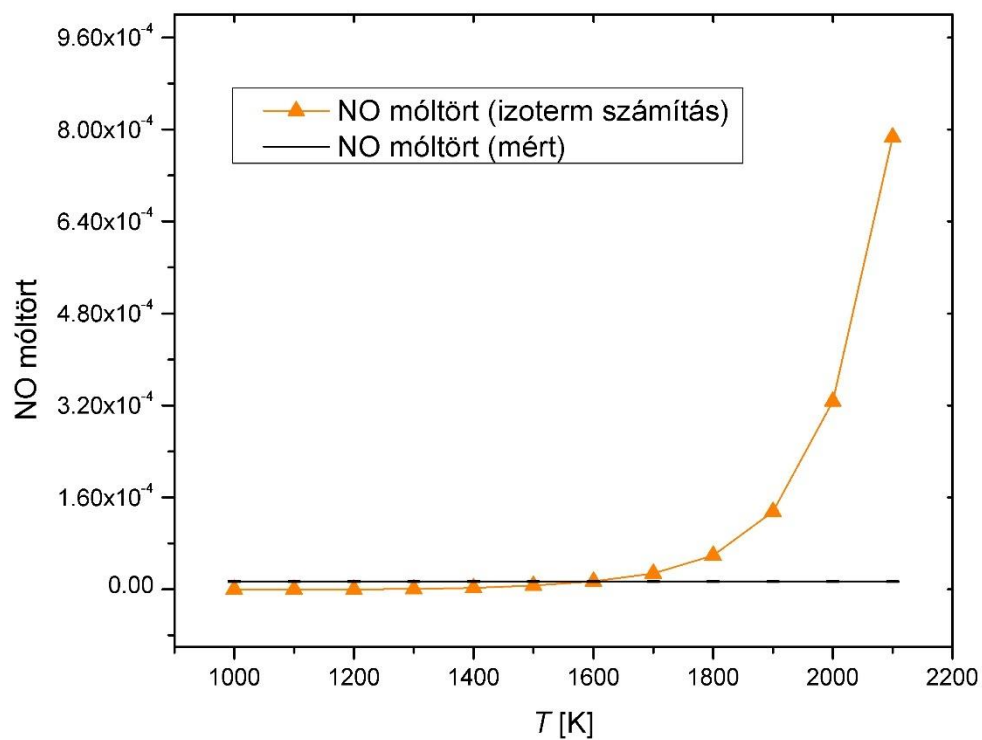
A reaktor hőmérsékletét az adiabatikus modellből számított égési hőmérséklettől csökkentettem 100 K lépcsőkben 1000 K hőmérsékletre, amely már jelentős hővesztességnek felel meg. A kapott eredményeket a 12. táblázatban foglaltam össze.

T [K]	O_2	NO	NO_2	CO	CO_2
2100	4,01E-02	7,87E-04	3,14E-07	3,22E-03	1,02E-01
2000	4,01E-02	3,27E-04	1,19E-07	2,43E-03	1,03E-01
1900	4,01E-02	1,36E-04	4,79E-08	1,92E-03	1,04E-01
1800	4,01E-02	5,89E-05	2,38E-08	1,56E-03	1,04E-01
1700	4,01E-02	2,77E-05	1,65E-08	1,29E-03	1,05E-01
1600	4,01E-02	1,38E-05	1,46E-08	1,12E-03	1,05E-01
1500	4,02E-02	6,57E-06	1,29E-08	1,05E-03	1,05E-01
1400	4,03E-02	2,71E-06	9,26E-09	1,13E-03	1,05E-01
1300	4,07E-02	8,64E-07	5,28E-09	1,54E-03	1,04E-01
1200	4,19E-02	1,71E-07	2,51E-09	3,28E-03	1,02E-01
1100	7,61E-02	5,98E-10	1,33E-10	4,67E-02	4,81E-02
1000	1,30E-01	3,26E-12	3,61E-12	4,83E-02	9,03E-03

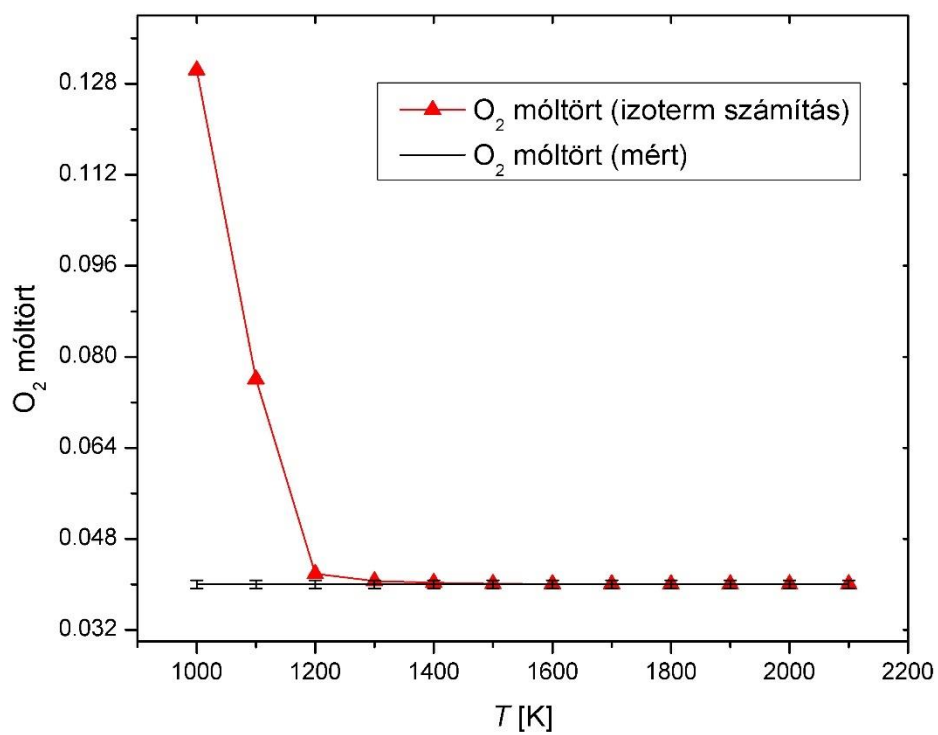
12. táblázat. Az 1. beállítás paramétereivel végzett számítások, különböző izoterm hőmérsékletű jólkevert reaktor feltételezésével.



20. ábra. A kimenő CO móltört az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében.



21. ábra. A kimenő NO móltört az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében.



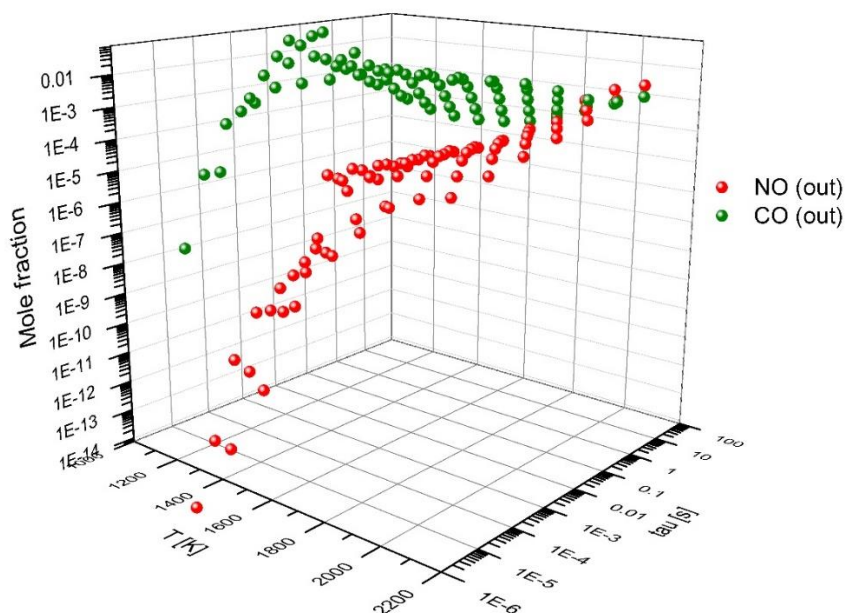
22. ábra. A kimenő O₂ móltört az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében.

A 20. ábrán látszódik, hogy a CO móltört 1600 K körül a legalacsonyabb, ez a hőmérséklet a hőveszteséget figyelembe vevő füstgáz hőmérsékletéhez hasonló. 1000-1300 K-ig csak kis mértékben következik be égés, ezért alacsony a NO és magas az O₂ koncentráció. A füstgáz oxigénkoncentrációja 1300 K-nél 4%-ra csökken, ami a mért koncentrációnak felel meg. Ezen a hőmérsékleten a számított NO koncentráció még a mértnél is alacsonyabb, 10⁻⁷ nagyságrendben van.

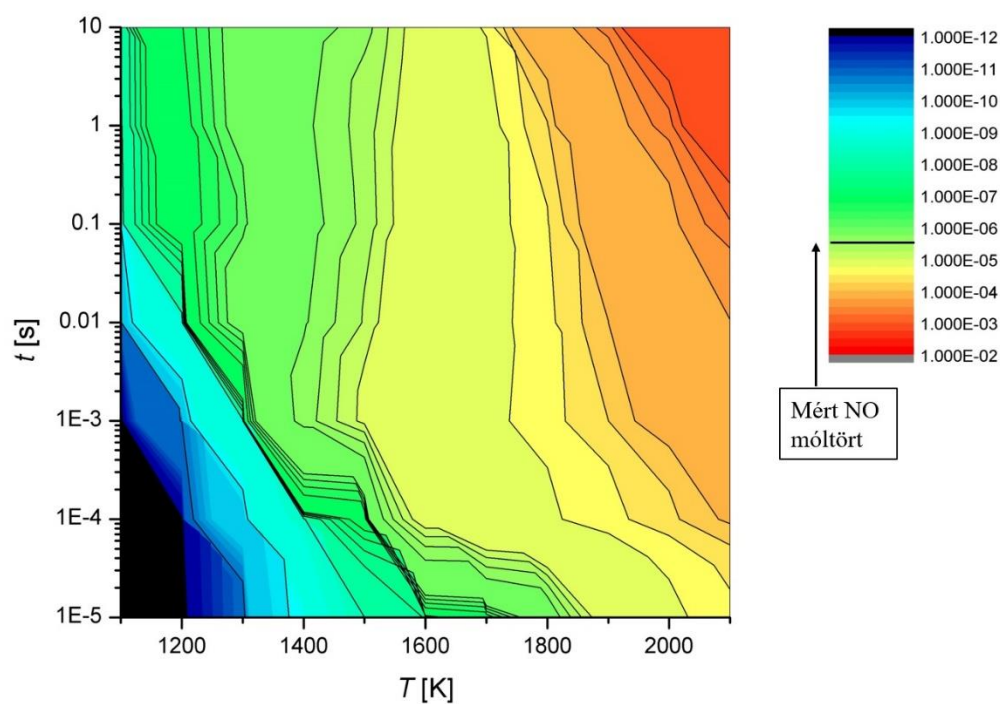
Az eredmények alapján feltételezhető, hogy a reaktor hőmérséklete 1400 és 1800 K között van, mert ebben a tartományban van a CO és NO koncentráció a legközelebb a mérési eredményekhez.

4.4.4. A tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet együttes változtatása

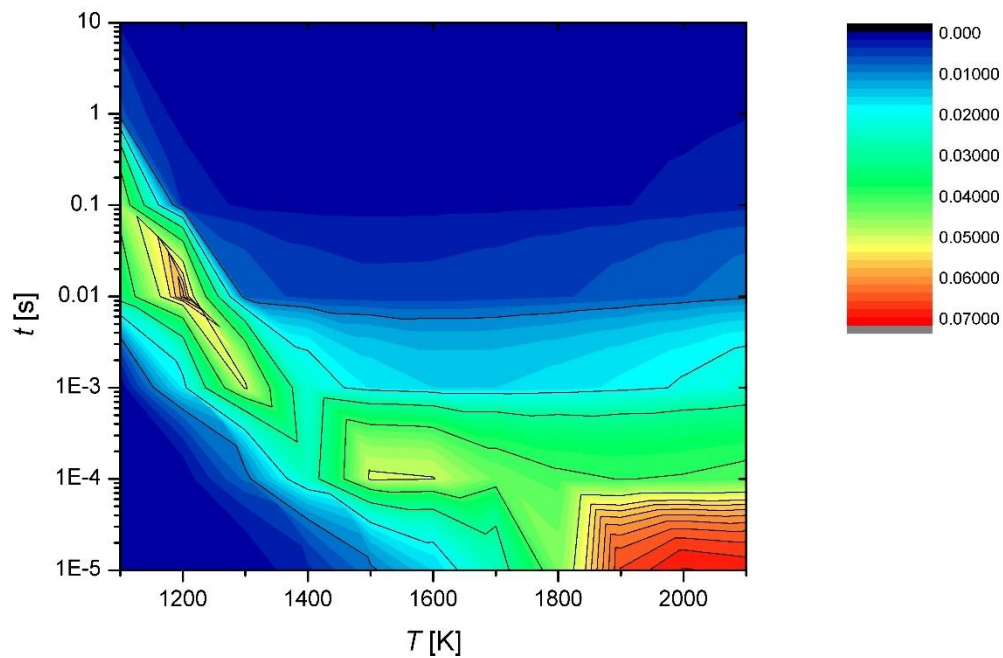
A következő számítássorozatban a tartózkodási időt és az izoterm reaktorhőmérsékletet egyszerre változtattam. Az eredményeket 3D grafikonon és szintvonalas térképen is ábrázoltam. A 24. és 25. ábrát összehasonlítva látható, hogy a NO móltörtje akkor a legmagasabb, ha az izoterm hőmérséklet és a tartózkodási idő is magas, ezzel szemben a CO móltörtje nagy tartózkodási időknél alacsonyabb.



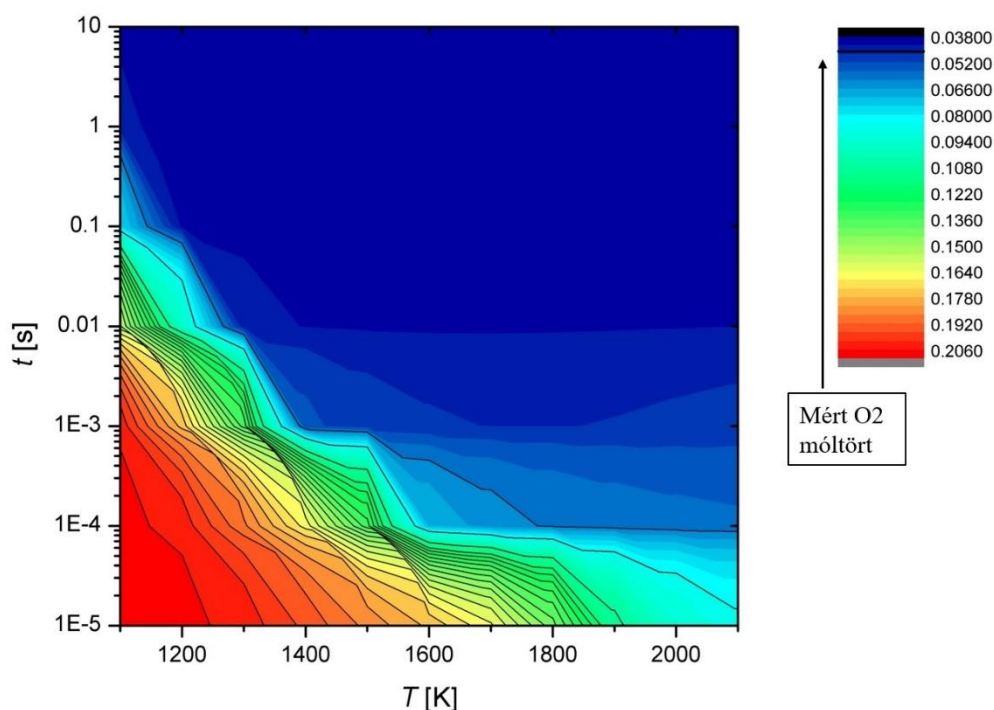
23. ábra. A kimenő gázelegy NO és CO móltörtje a tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében.



24. ábra. A kimenő gázelegy NO móltörtje a tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében szintvonalas térképen.



25. ábra. A kimenő gázelegy CO móltörtje a tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében szintvonalas térképen az 1. mérési beállítás szerint.

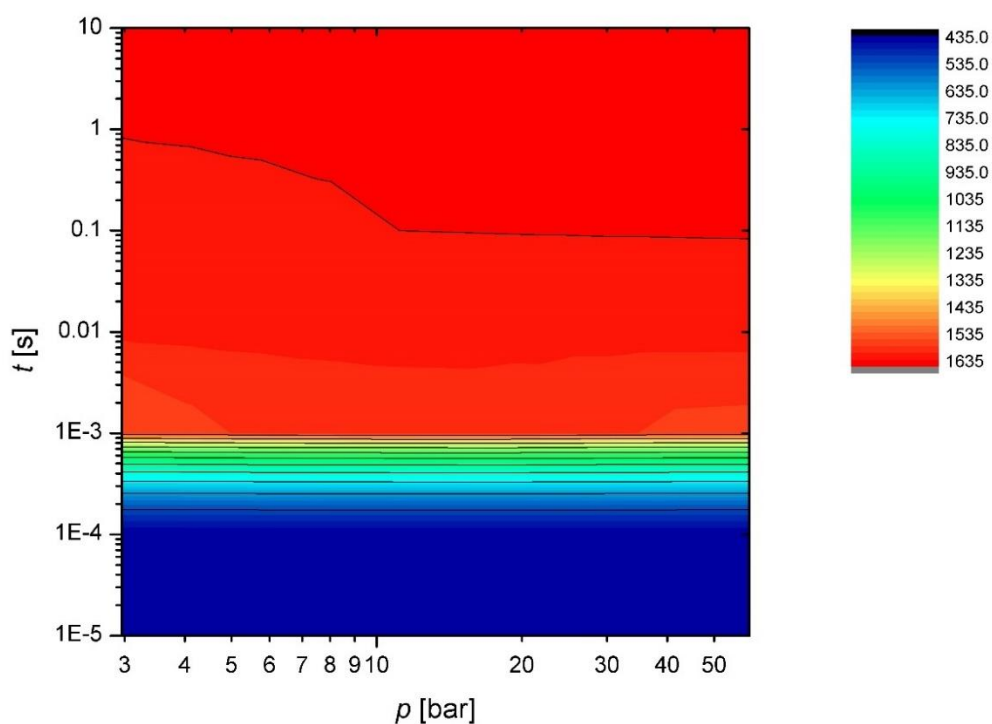


26. ábra. A kimenő gázelegy O_2 móltörtje a tartózkodási idő és az izoterm reaktorhőmérséklet függvényében szintvonalas térképen az 1. mérési beállítás szerint.

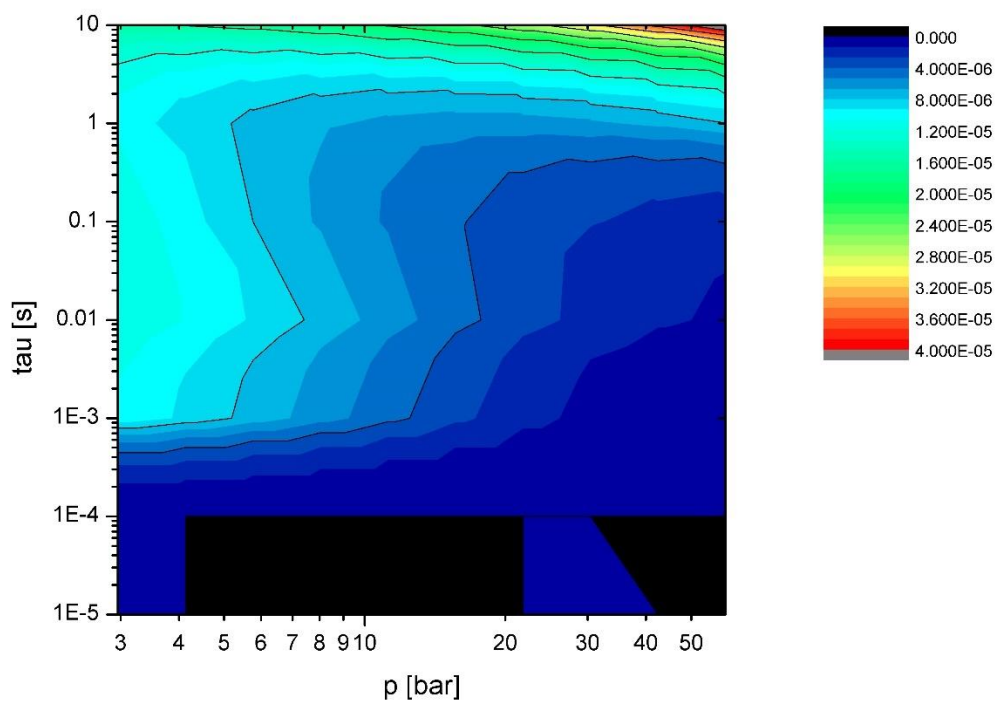
4.5. A füstgáz-koncentrációk függése a reaktor nyomásától

Ebben a fejezetben a reaktor nyomása változtatásának hatását vizsgálom a füstgáz összetételére. Jelenleg a laboratóriumi reaktor nyomását nem lehet változtatni, de a BME-csoport távlati tervei között szerepel a berendezés olyan módosítása, amely már lehetővé teszi a nyomás növelését is. A folyamat vizsgálatának a légköritől eltérő nyomáson nagy a gyakorlati jelentősége, hiszen 3 bar nyomású mikro-gázturbinákat alkalmaznak kórházakban áramkimaradás esetén, és nagy sugárhajtóművek indító hajtóműveiként is. Az ipari gázturbinák 10 bar körüli nyomáson működnek. A repülőgép-sugárhajtóművek működnek a legnagyobb nyomáson, akár 60 bar-on is. A JP-8 kerozin elsősorban repülőgép üzemanyag, de ipari gázturbinák tüzelőanyaga is lehet.

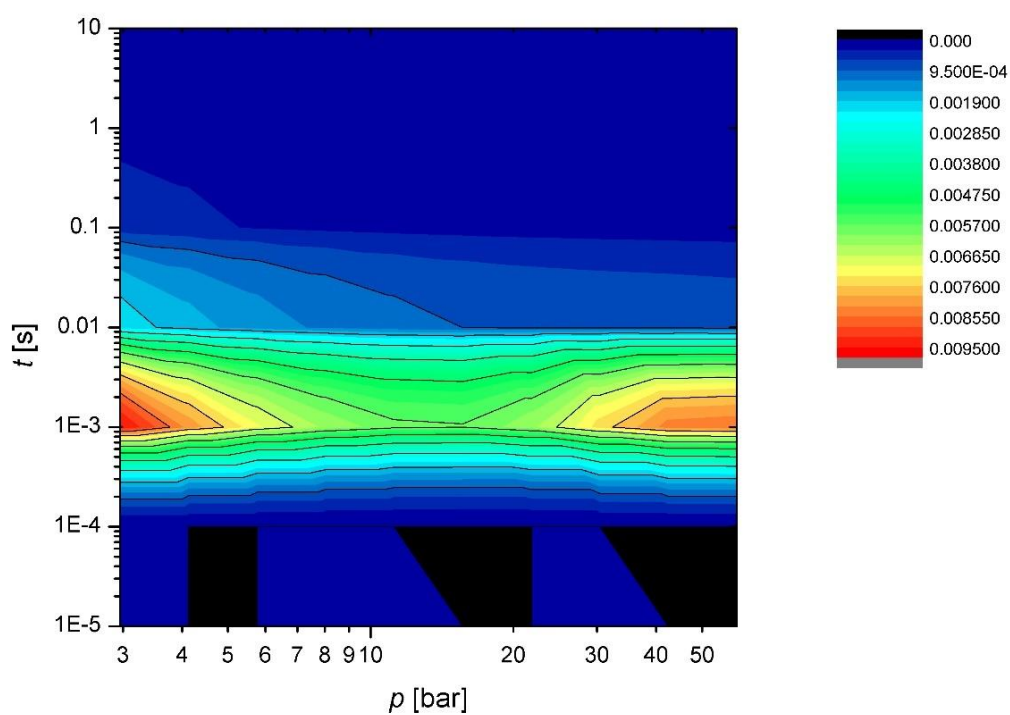
A 4.4.2. alfejezetben számítottak alapján a tartózkodási idő nagy hatással van első sorban a kimenő CO , de a kimenő NO koncentrációra is, ezért a nyomással együtt a tartózkodási időt is változtattam. A számítások során figyelembe vettem a hőveszteséget és az 1. mérési beállítás paramétereit adtam meg. A számítási eredményeket a 27.-30. ábrákon ábrázoltam.



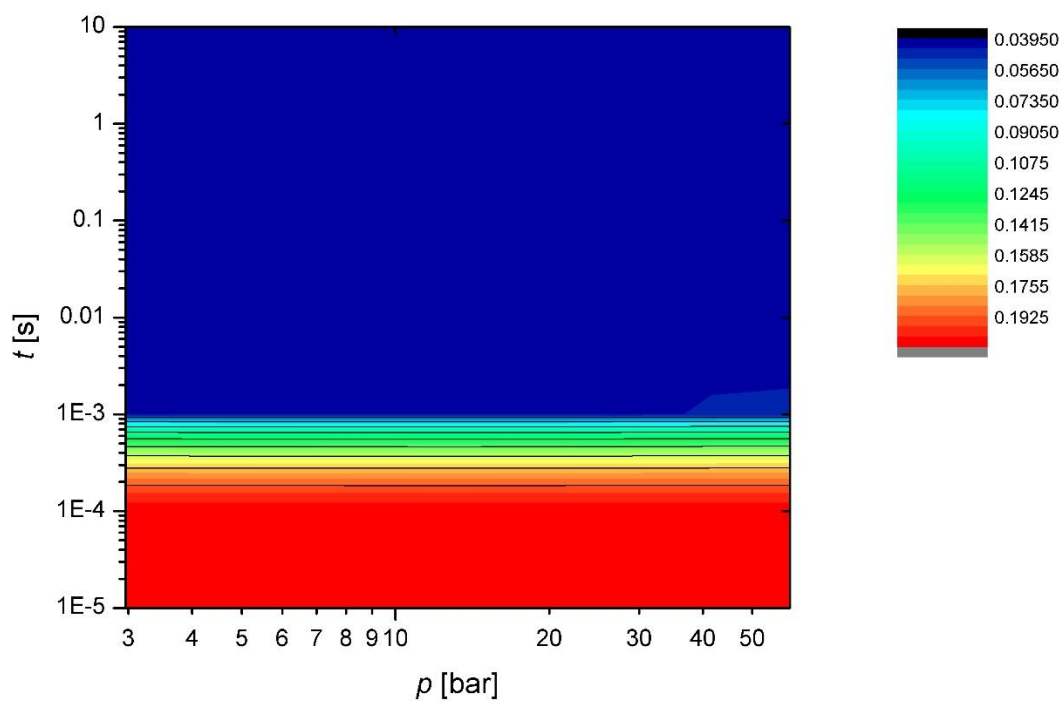
27. ábra. A füstgázhőmérséklet a reaktor nyomása és a tartózkodási idő függvényében.



28. ábra. A füstgáz NO móltörtje a reaktor nyomása és a tartózkodási idő függvényében.



29. ábra. A füstgáz CO móltörtje a reaktor nyomása és a tartózkodási idő függvényében.



30. ábra. A füstgáz O₂ móltörtje a reaktor nyomása és a tartózkodási idő függvényében.

A nyomást 3 és 60 bar között változtattam 10 lépcsőben, logaritmus skálán közel ekvidisztans módon. A 27. ábrán jól látszódik, hogy a reaktorban az égéshez legalább 1 ms tartózkodási idő szükséges. 0,1 és 1 ms között csak néhány reakció megy végbe, ezt mutatja a CO koncentrációja is a 29. ábrán. 0,1 ms-nál kevesebb tartózkodási idő alatt nem következik be égés. A füstgáz hőmérsékletének változásából az is megállapítható, hogy a reaktor hőmérséklete nem függ a nyomástól.

A 28. ábrán megfigyelhető a nitrogén-monoxid móltörtjének nyomásfüggése. Egy adott tartózkodási idő mellett a 3 és a 60 bar-hoz tartozó móltörtek akár egy nagyságrenddel is eltérnek egymástól.

A szén-monoxid móltörtjét mutató 29. ábra alapján megállapítható, hogy a CO koncentrációnak nincs nagy nyomásfüggése. 10 ms tartózkodási időnél figyelhető meg egyedül számottevő koncentrációváltozás nyomás hatására. A korábban megállapítottak szerint itt is csökken a CO móltörtje a tartózkodási idő növekedésével

4.6. Számítás a feltételezett mérési körülményeknél

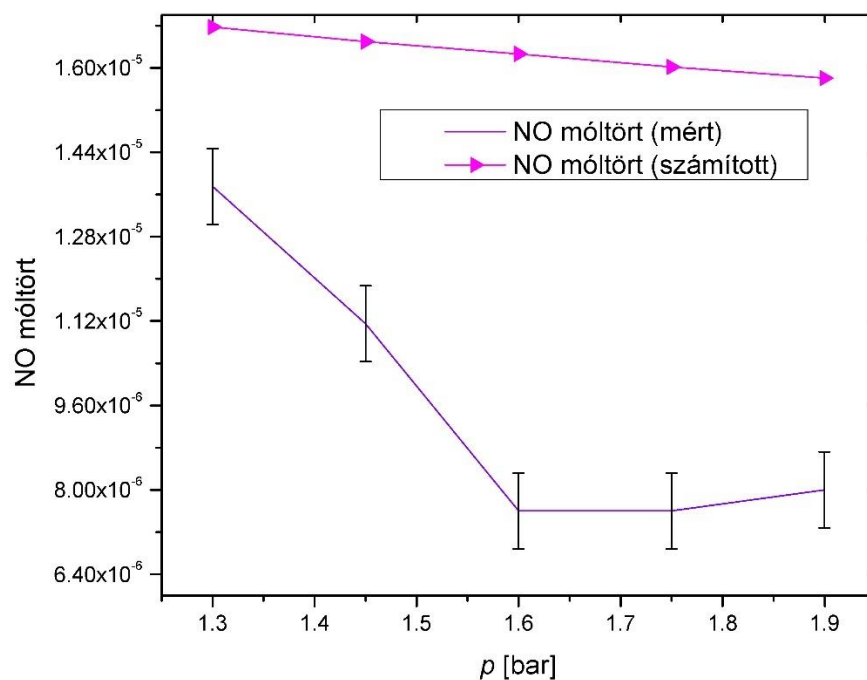
A 4.3. fejezetben leírtak tanulsága, hogy az OpenSMOKE++ reálisan számítja a reaktor hővesztességét és emiatt érdemes a hővesztességes reaktormodellt használni. A 4.4. fejezetben a szimulációk körülményeit vizsgáltam, hogy a mérési eredményekhez közeli számított eredményeket kaphassak. A 4.4.1. alfejezetben megállapítottam, hogy kisebb ekvivalenciaarányoknál alacsonyabb a CO és NO kibocsátás, de itt a füstgáz oxigénkoncentrációja magasabb, mint a mért 4 V/V%. Az ekvivalenciaarány amúgy is egy kis bizonytalansággal meghatározható paramétere volt a mérésnek, ezért a kalibrált körülményű számításokban is $\varphi = 0,8$ -at adtam meg.

A 4.4.2. alfejezetben a tartózkodási idő változtatását vizsgáltam. Itt azt figyeltem meg, hogy a tartózkodási idő növelésével a szén-monoxid móltörtje csökken, a nitrogén-monoxid móltörtje nő. Az oxigénkoncentráció 0,1 másodpercnél pontosan 4 V/V%, de 1 és 10 s tartózkodási időnél sem következik be jelentős változás. A NO koncentráció növekedése 0,1 és 10 s között 25 ppm, ezalatt a CO koncentráció 1000 ppm-mel csökken. Ebből megállapítható, hogy a feltételezett 0,1 s tartózkodási idő sokkal rövidebb, mint a valódi. A szimulációs eredmények alapján logikus lenne 10 másodperc, vagy annál is hosszabb τ -t feltételezni, mivel akkor a legalacsonyabb a kibocsátás, azonban ezzel nem vennénk figyelembe a reaktor fizikai

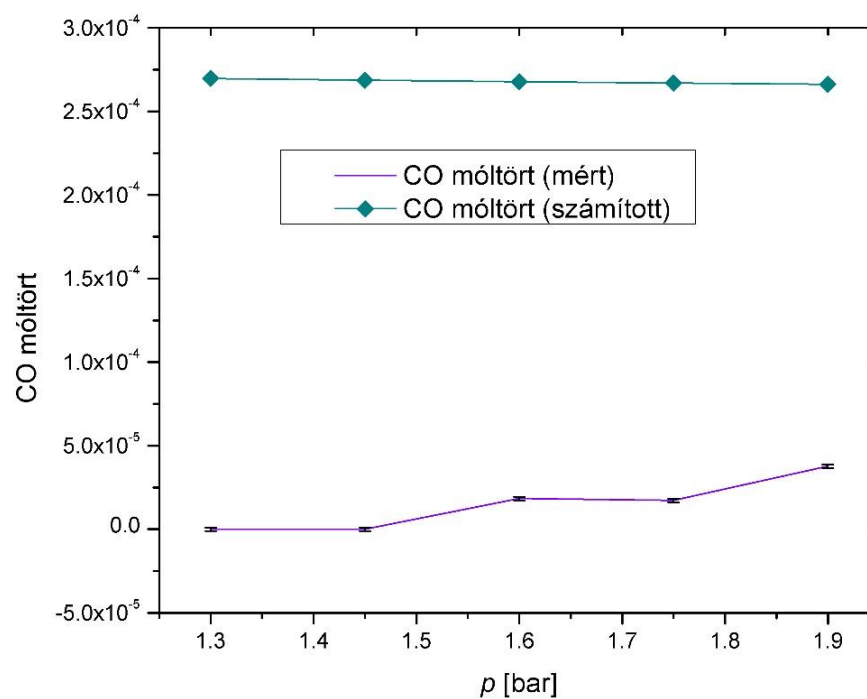
körülményeit. Az égőtérbe 21 kg/h tömegárammal folyamatosan vezették be a reakcióelegyet, ezért irreális lenne azt feltételezni, hogy a tartózkodási idő 10 s, vagy annál több. Ezen megfontolások alapján a kalibrált körülményű számolásokban $\tau = 1$ s-t adtam meg. Ez összhangban van azzal, hogy a bemenő tömegáramból és a reaktor térfogatából $\tau = 2,6$ s tartózkodási idő számítható (l. 4.1.2. szakasz), azonban a reaktor hasznos térfogata valójában valószínűleg kisebb, mint a névleges, méretéből számítható térfogata.

Mérés sorszáma	T [K]	O ₂ móltört	NO móltört	NO ₂ móltört	CO móltört
1	1633,59	3,98E-02	1,68E-05	2,16E-08	2,70E-04
2	1631,41	3,98E-02	1,65E-05	2,15E-08	2,69E-04
3	1629,54	3,98E-02	1,63E-05	2,15E-08	2,68E-04
4	1627,47	3,98E-02	1,60E-05	2,15E-08	2,67E-04
5	1625,68	3,98E-02	1,58E-05	2,15E-08	2,66E-04
6	1658,07	3,98E-02	2,03E-05	2,24E-08	2,82E-04
7	1655,42	3,98E-02	1,99E-05	2,23E-08	2,80E-04
8	1653,04	3,98E-02	1,95E-05	2,22E-08	2,79E-04
9	1650,69	3,98E-02	1,92E-05	2,21E-08	2,78E-04
10	1648,68	3,98E-02	1,89E-05	2,20E-08	2,77E-04

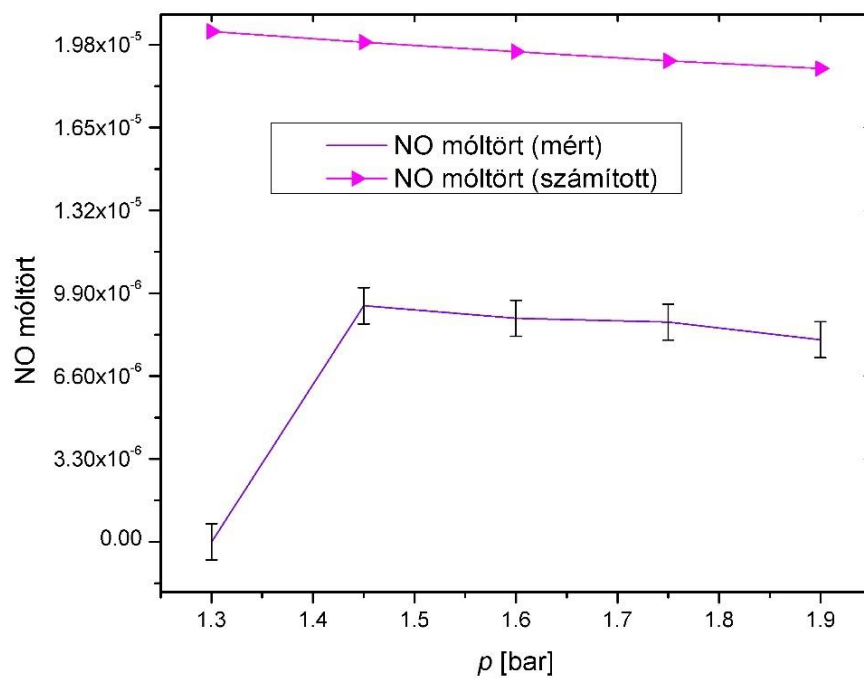
13. táblázat. A feltételezett mérési körülményeknél végzett számítások eredményei a 10 mérési beállításra.



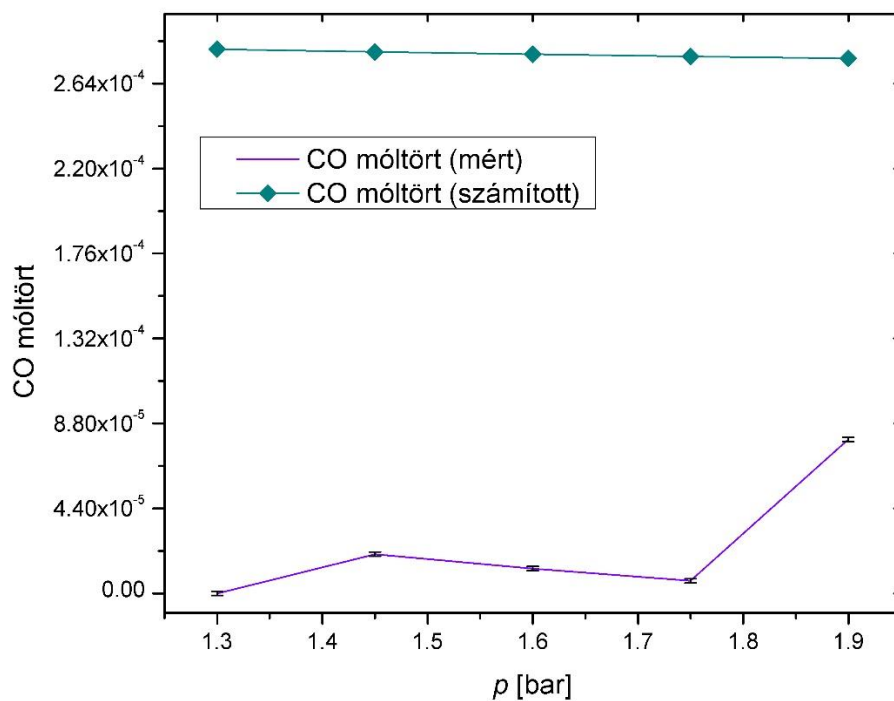
31. ábra A füstgáz NO móltörtje a porlasztólevegő nyomásának függvényében a feltételezett mérési körülményeknél végzett számításokból, 150°C-ra előmelegített égéslevegővel.



32. ábra A füstgáz CO móltörtje a porlasztólevegő nyomásának függvényében a feltételezett mérési körülményeknél végzett számításokból, 150°C-ra előmelegített égéslevegővel.



33. ábra A füstgáz NO móltörtje a porlasztólevegő nyomásának függvényében a feltételezett mérési körülményeknél végzett számításokból, 200°C-ra előmelegített égéslevegővel.



34. ábra A füstgáz CO móltörtje a porlasztólevegő nyomásának függvényében a feltételezett mérési körülményeknél végzett számításokból, 200°C-ra előmelegített égéslevegővel.

5. Összefoglalás

A dolgozatomban a JP-8 kerozin égésével foglalkoztam. Környezetvédelmi szempontból nagyon fontos jó hatásfokú és alacsony szennyezőkibocsátású égetőberendezések fejlesztése. A Józsa Viktor és kutatócsoportja (BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék) által kifejlesztett keverék- és hőmérsékletszabályozott (KHSZ) égőberendezés ilyennek bizonyult a mérési adataik alapján. A munkám célja az volt, hogy szimulációkkal alátámasszuk a mérési eredményeket, és jobban megismerjük a koncepcióban rejlő lehetőségeket.

A szimulációkhoz az OpenSMOKE++ programot használtam. A számítások alapja a JP-8 kerozin égését a HyChem megközelítéssel leíró részletes reakciómechanizmus volt. A nitrogén-monoxid kibocsátásának számításához az alkalmazott mechanizmus tartalmazta a Glarborg-féle NO_x-részmechanizmust is. Az egyesített mechanizmus 201 anyagfajtát és 1589 reakciólépést tartalmaz.

Első számításaimból kiderült, hogy a jólkevert-reaktor (PSR) modell alkalmazható ennek az égetőberendezésnek a leírására, azonban az égetőberendezésnek nem a teljes térfogatában megy végbe a homogén oxidáció. Ezután olyan mérési körülmények szimulációját végeztem, ahol térfogati égést sikerült elérni. Adiabatikus (hővesztesség nélküli) égetőberendezés feltételezésével nem tudtam visszakapni a mért füstgáz-koncentrációkat, de a hővesztéseget is figyelembe véve sokkal realisabb füstgáz-összetételt számítottam. A számítási és mérési eredmények továbbra is eltértek egymástól a szén-monoxid koncentráció esetén, ezért az szisztematikusan megvizsgáltam az égetőberendezés egyes paramétereinek megváltoztatásának hatását. A tartózkodási idő változtatása bizonyult a leghatásosabbnak, így sikerült a mért koncentrációkhoz hasonló számított értékeket kapnom.

Az égetőberendezés gyakorlati alkalmazhatóságának jobb megértéséért további szimulációkat végeztem. Először izoterm körülmények között vizsgáltam a kimenő CO és NO móltörtöket a hőmérséklet változásának függvényében, majd az égetőberendezés nyomása változtatásának hatását vizsgáltam a reaktor hőmérsékletére és a füstgáz összetételére. Ez utóbbi különösen fontos lehet, ha a KHSZ-elvet ipari és repülőgép-gázturbinákban akarják alkalmazni.

- [1] A.K. Gupta, Gas turbine combustion: Prospects and challenges, *Energy Conversion and Management*. 38 (1997) 1311–1318. [https://doi.org/10.1016/S0196-8904\(96\)00160-4](https://doi.org/10.1016/S0196-8904(96)00160-4).
- [2] A. Cavaliere, M. de Joannon, Mild Combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*. 30 (2004) 329–366. <https://doi.org/10.1016/J.PECS.2004.02.003>.
- [3] C. Galletti, A. Parente, L. Tognotti, Numerical and experimental investigation of a mild combustion burner, *Combustion and Flame*. 151 (2007) 649–664. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.07.016>.
- [4] V. Józsa, Mixture temperature-controlled combustion: A revolutionary concept for ultra-low NOX emission, *Fuel*. 291 (2021) 120200. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120200>.
- [5] V. Józsa, G. Hidegh, A. Kun-Balog, J.-H. Ng, C.T. Chong, Ultra-low emission combustion of diesel-coconut biodiesel fuels by a mixture temperature-controlled combustion mode, *Energy Conversion and Management*. 214 (2020) 112908. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.112908>.
- [6] Permissible Exposure Levels for Selected Military Fuel Vapors, National Academies Press, Washington, D.C., 1996. <https://doi.org/10.17226/9133>.
- [7] D. Cerinski, M. Vujanović, Z. Petranović, J. Baleta, N. Samec, M. Hriberšek, Numerical analysis of fuel injection configuration on nitrogen oxides formation in a jet engine combustion chamber, *Energy Conversion and Management*. 220 (2020) 112862. <https://doi.org/10.1016/J.ENCONMAN.2020.112862>.
- [8] T. Kathrotia, P. Oßwald, J. Zinsmeister, T. Methling, M. Köhler, Combustion kinetics of alternative jet fuels, Part-III: Fuel modeling and surrogate strategy, *Fuel*. 302 (2021) 120737. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.120737>.
- [9] Wikipedia, JP-8. <https://en.wikipedia.org/wiki/JP-8> (accessed November 6, 2021).
- [10] A. Cuoci, A. Frassoldati, T. Faravelli, E. Ranzi, OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms, *Computer Physics Communications*. 192 (2015) 237–264. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.02.014>.
- [11] A. Stagni, A. Cuoci, A. Frassoldati, T. Faravelli, E. Ranzi, Lumping and Reduction of Detailed Kinetic Schemes: an Effective Coupling, *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 53 (2014) 9004–9016. <https://doi.org/10.1021/ie403272f>.
- [12] OpenSMOKE++. <https://www.opensmokepp.polimi.it/> (accessed November 6, 2021).
- [13] C. Saggese, K. Wan, R. Xu, Y. Tao, C.T. Bowman, J.W. Park, T. Lu, H. Wang, A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry – V. NOx formation from a typical Jet A, *Combustion and Flame*. 212 (2020) 270–278. <https://doi.org/10.1016/J.COMBUSTFLAME.2019.10.038>.

- [14] H. Wang, R. Xu, K. Wang, C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, K. Brezinsky, F.N. Egolfopoulos, A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry - I. Evidence from experiments, and thermodynamic, chemical kinetic and statistical considerations, *Combustion and Flame*. 193 (2018) 502–519. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.03.019>.
- [15] R. Xu, K. Wang, S. Banerjee, J. Shao, T. Parise, Y. Zhu, S. Wang, A. Movaghar, D.J. Lee, R. Zhao, X. Han, Y. Gao, T. Lu, K. Brezinsky, F.N. Egolfopoulos, D.F. Davidson, R.K. Hanson, C.T. Bowman, H. Wang, A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry – II. Reaction kinetic models of jet and rocket fuels, *Combustion and Flame*. 193 (2018) 520-537. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.03.021>.
- [16] G. Goldin, Z. Ren, Y. Gao, T. Lu, H. Wang, R. Xu, HEEDS Optimized HyChem Mechanisms, in: Volume 4B: Combustion, Fuels and Emissions, American Society of Mechanical Engineers, 2017. <https://doi.org/10.1115/GT2017-64407>.
- [17] P. Glarborg, J.A. Miller, B. Ruscic, S.J. Klippenstein, Modeling nitrogen chemistry in combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*. 67 (2018) 31–68. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.01.002>.
- [18] S.C. Hill, L.D. Smoot, Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems, *Progress in Energy and Combustion Science*. 26 (2000) 417–458. [https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(00\)00011-3](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(00)00011-3).
- [19] C.T. Bowman, Control of combustion-generated nitrogen oxide emissions: Technology driven by regulation, Symposium (International) on Combustion. 24 (1992) 859–878. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80104-9](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80104-9).
- [20] J.A. Miller, C.T. Bowman, Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*. 15 (1989) 287–338. [https://doi.org/10.1016/0360-1285\(89\)90017-8](https://doi.org/10.1016/0360-1285(89)90017-8).
- [21] Active Thermochemical Tables, Argonne National Laboratory. <https://atct.anl.gov/> (accessed November 6, 2021).
- [22] A. Burcat, B. Ruscic, Chemistry, Third millenium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion (with update from active thermochemical tables)., Argonne, IL, 2005. <https://doi.org/10.2172/925269>.
- [23] B. Ruscic, R.E. Pinzon, M.L. Morton, G. von Laszewski, S.J. Bittner, S.G. Nijsure, K.A. Amin, M. Minkoff, A.F. Wagner, Introduction to Active Thermochemical Tables: Several “Key” Enthalpies of Formation Revisited, *The Journal of Physical Chemistry A*. 108 (2004) 9979–9997. <https://doi.org/10.1021/jp047912y>.
- [24] B. Ruscic, R.E. Pinzon, G. von Laszewski, D. Kodeboyina, A. Burcat, D. Leahy, D. Montoy, A.F. Wagner, Active Thermochemical Tables: thermochemistry for the 21st century, *Journal of Physics: Conference Series*. 16 (2005) 561–570. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/16/1/078>.
- [25] HyChem model for Jet A POSF10325 (A2) with NOx. <https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/HyChem/download/A2NOx.txt> (accessed November 6, 2021).

- [26] A1 (JP-8) POSF10264.
https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/HyChem/fuels/A1_spec.html.
- [27] Thermodynamics.
<https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/HyChem/download/therm.txt> (accessed November 6, 2021).
- [28] Nitrogen NIST Chemistry WebBook.
<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7727379&Type=JANAFG&Plot=on#JANAFG> (accessed November 6, 2021).
- [29] Oxygen NIST Chemistry WebBook.
<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7782447&Mask=1&Type=JANAFG&Table=on#JANAFG> (accessed November 6, 2021).
- [30] T.J. Bruno, M. Huber, A. Laesecke, E. Lemmon, M. McLinden, S.L. Outcalt, R. Perkins, B.L. Smith, J.A. Widegren, Thermodynamic, Transport, and Chemical Properties of “Reference” JP-8, Physical and Chemical Properties Division National Institute of Standards and Technology, 2010.