

## МОДЕЛЮВАННЯ ВИКИДІВ САЖІ ТА ОКСИДІВ АЗОТУ ДИЗЕЛЬНОГО БІОПАЛИВА У ПРОГРАМНОМУ СЕРЕДОВИЩІ FLUENT

Для забезпечення стійкого розвитку транспорту необхідно зменшити шкідливі викиди від його використання. Найбільше забруднення атмосфери спричиняють автомобілі, що працюють на дизельному паливі. Це не тільки оксиди азоту, що приводять до захворювання серця, та викиди сажі, що містять у своєму складі канцерогени, а також і викиди вуглекислого газу, збільшення яких спричиняє глобальне потепління на планеті. Використання електромобілів не вирішує цієї проблеми, оскільки електричний струм часто виробляється з тих же “брудних” джерел енергії, до того ж існують проблеми з акумуляторами автомобілів. Дороговизна електромобілів, а також можливі проблеми з роботою електричної мережі міст у випадку використання великої кількості електромобілів не приведуть до великого відсотку такого транспорту в Україні у найближчому майбутньому. Зараз у всьому світі розвивається напрямок, коли електричний струм виробляється на борту автомобіля за допомогою паливних елементів. У випадку, коли паливні елементи споживають водень, автомобіль виділяє тільки воду і тепло. В Україні для виробництва паливних елементів (цирконієва кераміка) використовують цирконієвий пісок. За запасами цирконію Україна посідає третє місце у світі і перше у Європі. Використання цирконієвих паливних елементів для транспорту, в яких можна використовувати широких діапазон палив, можна вважати перспективним напрямком для України в недалекому майбутньому.

Одночасно з розвитком автомобілів на паливних елементах потрібно шукати заміну дизельного палива іншими видами палив, які б могли вироблятися з відходів виробництва або неістивних матеріалів. Такі замітники дизельного палива, як біодизель (дизельне біопаливо), відновлювальне паливо, синтетичне паливо мають свої недоліки. Наприклад, біодизельне паливо (дизельне біопаливо) хоча і не містить канцерогенних молекул у своєму складі і має менші викиди сажі у порівнянні з дизельним паливом, але часто утворює більше оксидів азоту. Моделювання викидів азоту і викидів сажі для альтернативних палив можна виконувати у програмному середовищі Fluent Ansys.

**Моделювання викидів оксидів азоту.** Оксиди азоту в полум'ї в основному утворюються за допомогою трьох механізмів: термічного, швидкого і формування закису азоту. Термічний механізм базується на розширеному механізмі Зельдовича. В програмному забезпеченні ANSYS FLUENT, вихід NO розраховується за допомогою наступного рівняння:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{f1}[O][N_2] + k_{f2}[N][O_2] + k_{f3}[N][OH] - k_{r1}[NO][N] - k_{r2}[NO][O] - k_{r3}[NO][H]. \quad (1)$$

Нижче наведені вирази для коефіцієнтів швидкості для рівняння (1), що використовуються в програмному середовищі FLUENT:

$$\begin{aligned} kf1 &= 1.8 \times 10^8 e^{-38370/T} & kr1 &= 3.8 \times 10^7 e^{-425/T} \\ kf2 &= 1.8 \times 10^4 T e^{-4680/T} & kr2 &= 3.81 \times 10^3 T e^{-20820/T} \\ kf3 &= 7.1 \times 10^7 e^{-450/T} & kr3 &= 1.7 \times 10^8 e^{-24560/T} \end{aligned}$$

Рівняння для коефіцієнтів швидкості можна описати формулою типа Ареніуса зі значенням коефіцієнта  $B$ , що дорівнює 0, або 1:

$$k = AT^B \exp(-E_a/(R_0T)), \quad (2)$$

де  $E$  – енергія активації;  $R_0$  – газова постійна;  $T$  – температура, К;  $A$  – постійна.

Значення коефіцієнтів  $A$  та  $B$  показані у таблиці 1.

Таблиця 1.

Реакція	Пряма реакція			Обернена реакція		
	$A$	$B$	$E/R_0$	$A$	$B$	$E/R_0$
$N_2+O \leftrightarrow NO+N$	1.8E +8	0	38370	3.8E +7	0	425
$N+O_2 \leftrightarrow NO+O$	1.8E +4	1	4680	3.81E +3	1	20820
$N+OH \leftrightarrow NO+H$	7.1E +7	0	450	1.7E +8	0	24560

Швидкість утворення оксидів азоту є істотною лише при високих температурах (більше 1800 К), тому що фіксація азоту вимагає розриву міцного потрійного N<sub>2</sub> зв'язку (енергія дисоціації 941 кДж/гмоль). Коли є достатня кількість кисню, як у паливному (слабкому) полум'ї, швидкість споживання вільних атомів азоту стає рівною швидкості їх утворення, і тому може бути встановлений квазістатичний стан. За рівноважного стану викиди оксидів азоту можна описати рівнянням:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{f1}[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{r1}k_{f2}[NO]^2}{k_{f1}[N_2]k_{f2}[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{f1}[NO]}{k_{f2}[O_2] + k_{f3}[OH]}\right)}$$

Рівноважну концентрацію О-атома можна отримати з виразу:

$$[O] = 3.97 \times 10^5 T^{-1/2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T}, \text{ (гмоль/м}^3\text{)} \quad \text{де } T \text{ в К.}$$

При згорянні біодизельного палива, також як і дизельного, можливі шість механізмів утворення оксидів азоту: термічний (Зельдовича), швидкий, механізм N<sub>2</sub>O, паливний механізм та механізмом NNH. Домінуючими механізмами утворення NO<sub>x</sub> при згорянні біодизеля є термічні та швидкі реакції.

**Моделювання викидів сажі.** Рівень сажі під час згорання дизельного палива контролюється змішуванням повітря з паливом, а також хімічною кінетикою. Базові дослідження показують, що сажа формується, коли локальна багата паливна суміш у фазі випаровування знаходиться під дією високої температури. Вважається, що швидкість формування сажі дуже чутлива до локальної історії коефіцієнту надміру повітря (еквівалентного відношення) і температури, яку має кожна складова частина впорскувального палива, що приймає участь в процесі згорання. Задача дуже нелінійна: невеличке збільшення у швидкості змішування дає велике зниження у викидах сажі. Програмне середовище FLUENT містить дві емпіричні моделі для прогнозування утворення сажі в системах згорання:

- проста одноступінчаста модель, в якому FLUENT прогнозує швидкість утворення сажі на основі простої емпіричної формули;
- двоетапна модель, в якому FLUENT передбачає формування частинок ядер, з утворенням сажі на ядрах.

За допомогою одноступінчастої моделі в програмі FLUENT вирішується транспортне рівняння для масової фракції:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_{soot}) + \nabla(\rho \vec{v} Y_{soot}) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{\sigma_{soot}} \right) \nabla Y_{soot} + \mathcal{R}_{soot}$$

де  $Y_{soot}$  — масова доля сажі;  $\sigma_{soot}$  — турбулентне число Прандтля (turbulent Prandtl number);

$\mathcal{R}_{soot}$  — швидкість генерації сажі (кг/м<sup>3</sup>-с).

Швидкість генерації сажі залежить від швидкості формування сажі та швидкості згорання сажі:

$$\mathcal{R}_{soot} = \mathcal{R}_{soot,form} - \mathcal{R}_{soot,comb}$$

Швидкість утворення сажі розраховується за допомогою простого емпіричного виразу:

$$\mathcal{R}_{soot,form} = C_s \rho_{fuel} \phi^* \exp(-E/(RT))$$

де  $\rho_{fuel}$  — густина палива.

**Висновки.** В програмному середовищі ANSYS FLUENT можна моделювати викиди оксидів азоту та викиди сажі для дизельного біопалива та інших альтернативних палив.