

Populärvetenskaplig sammanfattning

I dagens energikrävande värld kommer 85% av all tillgänglig energi från kol, olja och gas, oräknat alkoholer, vätgas, biomassa och bibränslen [1]. Att förbränna ett bränsle för att utvinna energi är således en grundbult i det moderna samhället, och kommer så vara ett bra tag framöver. För att minimera de negativa effekterna från förbränningen, minska bränsleförbrukningen och för att kunna utveckla bättre att utvinna energi ur olika bränsle måste exakta simuleringsmetoder utvecklas och användas. Arbetet som denna avhandling bygger på handlar om att utveckla nya beräkningsmodeller som beskriver bränslespecifika egenskaper vid förbränning, så kallade reaktionsmekanismer, och använda dessa modeller i tredimensionella CFD-simuleringar (Computational Fluid Dynamics). CFD-simuleringarna kan, tillsammans med välutvecklade reaktionsmekanismer, noggrant modellera ett förbränningsförlopp och dess fysikaliska egenskaper.

De reaktionsmekanismer som tidigare använts i CFD har varit alltför förenklade, ofta med grova felpredikteringar av specifika förbränningsparametrar. Resultatet av detta medför att en CFD-simulering kan misslyckas med att prediktera nyckelparametrar i förbränningsprocessen och därmed göra stora delar av simuleringen oanvändbar. För att undvika detta krävs ofta mer exakta reaktionsmekanismer, som dock fortfarande måste vara beräkningsmässigt tillräckligt billiga för att kunna användas i tredimensionella simuleringar. Den utvecklingsmetodik som presenteras i denna avhandling syftar till ta fram kemiskt mer kompletta reaktionsmekanismer specifikt ämnade för att användas i CFD-simuleringar. Metodiken grundar sig på att dela upp kemin i olika kategorier baserat på den specifika kemins innehåll. Varje kategori kommer sedan att ha en individuell kemisk komplexitet beroende på dess vikt för den övergripande förbränningsprocessen. Genom att kombinera flera kategorier kan en komplett reaktionmekanism byggas från grunden, där endast de ämnen och reaktioner som är nödvändiga för den tilltänkta modelleringen används. På så sätt nås en kompromiss mellan storlek, som påverkar beräkningskostnad, och prediktionsförmåga. Samtliga reaktionsmekanismer som presenteras i denna avhan-

dling modellerar någon kolväte-luftblandning även om utvecklingsmetodiken i sig inte är begränsad till denna typ av bränslen.

De nyutvecklade reaktionsmekanismerna används sedan i CFD-simuleringar i alltifrån enklare labbrännare till flamhållare och annulära förbränningskammare i gasturbiner. I flera av studierna görs även jämförelser mellan de nyutvecklade reaktionsmekanismerna mot både enklare och mer komplexa reaktionsmekanismer från litteraturen. Flamposition, komposition av nedbrytnings- och slutprodukter, antändningstid, flamhastighet, interaktion mellan flammor, temperaturfördelning och tryckfördelning är alla exempel på flamparametrar som blir bättre predikterade när de mer nya reaktionsmekanismerna används. Det ökade antalet ämnen i modelleringen som kommer med de komplexa reaktionsmekanismerna möjliggör även jämförelser mot fler typer av experimentella data, vilket i sig hjälper till att koppla ihop experimentell verksamhet med simuleringar.

Abstract

Combustion, present in a vast majority of energy and material production as well as in transportation, represents a foundation of our modern society. To improve and optimize the applications relying on combustion demand a high level of knowledge, and an ability to simulate the combustion process. To do so three-dimensional Computational Fluid Dynamic (CFD) combustion simulations can be used, where a reaction mechanism is used for describing the chemical process. The aim of this thesis is to develop more accurate and compact reaction mechanisms using a new development technique, and to implement these reaction mechanisms into CFD simulations. Because of the high computational cost associated with using reaction mechanisms the new development technique aim at creating reaction mechanisms that balances predictability and computational cost as efficiently as possible. Previous cheaper, simpler reaction mechanisms are often unable to capture key flame parameters, hence compromising the final CFD simulation results. The new, more chemically correct reaction mechanisms presented in this thesis enables the modelling of a wider array of flame parameters, without demanding a too high computational cost.

The development technique builds on the idea of dividing the chemistry into sections, or blocks. The chemical complexity of each individual block depends on its importance to the overall combustion process. By individualizing the chemistry of each block only the most important species and reactions can be included, optimizing the size and predictability. By combining several blocks a complete reaction mechanism can then be produced.

With the use of the newly developed improved reaction mechanisms in combustion CFD flame parameters such as flame position, decomposition and final products, ignition time, burning velocity, flame-flame interaction and temperature and pressure distributions can all be improved compared to if simpler reaction mechanisms are used.

Bibliography

- [1] British Petroleum. BP statistical review of world energy 2019. <https://www.bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/statistical-review/bp-stats-review-2019-full-report.pdf>, 2019.