



Serhiy I. Serbin
Сербін Сергій
Іванович



Bohdan M. Lychko
Личко Богдан
Михайлович



Anatolii B. Kolesnykov
Колесников
Анатолій
Борисович

УДК 621.45.034

EVALUATION OF DETAILED KINETIC MECHANISMS FOR AMMONIA COMBUSTION IN PREDICTING GAS TURBINE COMBUSTION CHAMBER PERFORMANCE

**АНАЛІЗ МОЖЛИВОСТЕЙ ВИКОРИСТАННЯ
ДЕТАЛЬНИХ КІНЕТИЧНИХ МЕХАНІЗМІВ
ГОРІННЯ АММІАКУ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ
ХАРАКТЕРИСТИК КАМЕРИ ЗГОРЯННЯ ГТД**

DOI [https://doi.org/10.15589/smi2025.1\(20\).03](https://doi.org/10.15589/smi2025.1(20).03)

Serhiy I. Serbin

Сербін Сергій Іванович,
докт. техн. наук, проф.
serhiy.serbin@nuos.edu.ua
ORCID: 0000-0002-3423-2681

Bohdan M. Lychko

Личко Богдан Михайлович,
канд. техн. наук, доц.
bogdan.lychko@gmail.com
ORCID: 0000-0003-3943-9689

Anatolii B. Kolesnykov

Колесников Анатолій Борисович,
аспірант
tolyamongol74@gmail.com
ORCID: 0009-0009-6697-3597

Admiral Makarov National University of Shipbuilding, Mykolaiv
Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова,
м. Миколаїв

Abstract. The study focuses on exploring the potential use of ammonia as a fuel in decarbonized hybrid energy systems incorporating gas turbine engines with zero carbon emissions. The objective is to predict the emission characteristics of a gas turbine engine combustion chamber operating on ammonia by employing detailed kinetic mechanisms of its combustion. The research object is the operating processes in the combustion chamber of a gas turbine engine fueled by gaseous ammonia. For accurate prediction of combustion chamber characteristics operating on ammonia, an approach was applied wherein the gas turbine engine's combustion chamber is modeled as a set of chemical reactors describing the key physicochemical transformations in various parts of the combustion liner. A combustion chamber model was developed for operation on gaseous ammonia, where individual reactors simulate the primary zone, where the main chemical reactions of the fuel occur, and the zone of secondary air mixing with the main gas stream after the reactions. The mathematical model is based on solving a system of mass and energy conservation equations for chemically reacting media. As kinetic schemes for ammonia combustion in the combustion chamber of a high-performance gas turbine engine, four mechanisms of high-temperature ammonia oxidation were used, comprising 71 to 286 chemical reactions. New data were obtained on the processes of flame propagation in the high-performance combustion chamber of a gas turbine engine, as well as on the temperature distributions and concentrations of stable components at the outlet of the burning device using various chemical mechanisms. Calculations of the combustion

chamber's operating process were performed for a pressure of 2.0 MPa and an air excess ratio variation from 2.36 to 3.55. The dependencies of toxic emissions on ammonia flow through the combustion chamber were demonstrated. The results of this work can be applied in the practical development of combustion chambers for gas turbine engines in decarbonized hybrid energy systems.

Key words: gas turbine engine; combustion chamber; decarbonization; ammonia; emission of toxic components.

Анотація. Роботу спрямовано на дослідження можливостей використання аміаку в якості палива в декарбонізованих гібридних енергетичних систем, що містять газотурбінні двигуни, з нульовими викидами вуглецю. Метою є прогнозування емісійних характеристик камери згоряння газотурбінного двигуна, що працює на аміаку, з використанням детальних кінетичних механізмів його горіння. В якості об'єкта дослідження вибрано робочі процеси в камері згоряння газотурбінного двигуна, що працює на газоподібному аміаку. Для точного прогнозування характеристик камери згоряння, що працює на аміаку, застосовано підхід, у межах якого камера згоряння газотурбінного двигуна розглядається як набір хімічних реакторів, які описують основні фізико-хімічні перетворення в різних частинах жарової труби. Розроблено модель камери згоряння, що працює на газоподібному аміаку, в якій окремі реактори відповідають за моделювання первинної зони, де проходять основні хімічні реакції пального, і зони змішування вторинного повітря з основним потоком газів після реакції. Основною математичною моделлю є розв'язання системи рівнянь збереження маси та енергії для хімічно реагуючого середовища. В якості кінетичних схем горіння газоподібного аміаку в камері згоряння високофорсованого газотурбінного двигуна використано чотири механізми високотемпературного окиснення аміаку, які містять у собі від 71 до 286 хімічних реакцій. Отримано нові дані про процеси поширення полум'я аміаку в високофорсованій камері згоряння газотурбінного двигуна, розподіли температури та концентрацій стабільних компонентів на виході паливоспалюючого пристрою при використанні різних хімічних механізмів. Розрахунки робочого процесу камери згоряння проведено для тиску 2,0 МПа та варіюванні коефіцієнта надлишку повітря від 2,36 до 3,55. Показано залежності емісії токсичних компонентів від витрати аміаку через камеру згоряння. Результати роботи можуть бути використані при практичній розробці камер згоряння газотурбінних двигунів для декарбонізованих гібридних енергетичних систем.

Ключові слова: газотурбінний двигун; камера згоряння; декарбонізація; аміак; емісія токсичних компонентів.

References

- [1] Boerner, K. K. (2019). Industrial ammonia production emits more CO₂ than any other chemical-making reaction. Chemists want to change that. *Chemical & Engineering News*, vol. 97, no. 24.
- [2] Tornatore, C., Marchitto, L., Sabia, P., & Joannon, M.D. (2022). Ammonia as Green Fuel in Internal Combustion Engines: State-of-the-Art and Future Perspectives. *Front. Mech. Eng., Sec. Engine and Automotive Engineering*, vol. 8.
- [3] Ito, S., Uchida, M., Suda, T., Fujimori, T. (2020). Development of ammonia gas turbine co-generation technology. *IHI Engineering Review*, vol. 53, no. 1, pp. 1–6.
- [4] Lee, H., & Lee, M. (2021). Recent advances in ammonia combustion technology in thermal power generation system for carbon emission reduction. *Energies*, vol. 14, no. 18, 5604.
- [5] Barelli, L., Bidini, G., & Cinti, G. (2022). Operation of a Solid Oxide Fuel Cell Based Power System with Ammonia as a Fuel: Experimental Test and System Design. *Energies*, vol. 13, no. 6173, pp. 1–19.
- [6] Lee, J., Choi, Y., & Choi, J. (2022). Techno-Economic Analysis of NH₃ Fuel Supply and Onboard Re-Liquefaction System for an NH₃-Fueled Ocean-Going Large Container Ship. *J. Mar. Sci. Eng.*, vol., no. 1500, pp.1–22.
- [7] Kim, J., & Kim, D.E. (2023). Energy, Exergy, and Economic (3E) Analysis of SOFC-GT-ORC Hybrid Systems for Ammonia-Fueled Ships. *J. Mar. Sci. Eng.*, vol. 11, no. 2126, pp. 1–22.
- [8] Dhawale, D., Biswas, S., Kaura, G., & Giddey, S. (2023). Challenges and advancement in direct ammonia solid oxide fuel cells: a review. *Inorg. Chem. Front.*, vol. 10, pp. 6176–6192.

- [9] Pawling, R., Bucknall, R., & Greig, A. (2022) Considerations For Future Fuels in Naval Vessels. *Institute of Marine Engineering Science and Technology*, 2022-09-07, <https://doi.org/10.24868/10676>.
- [10] Rocha, R. C., Costa, M., & Bai, X. S. (2021). Combustion and emission characteristics of ammonia under conditions relevant to modern gas turbines. *Combust. Sci. Technol.*, vol. 193, no. 14, pp. 1–20.
- [11] Jójka, J., & Ślefarski, J. (2021). Emission Characteristics for Swirl Methane–Air Premixed Flames with Ammonia addition. *Energies*, vol. 14, no. 662, pp. 1–19.
- [12] Ito, S., Uchida, M., Suda, T., & Fujimori, T. (2020). Development of ammonia gas turbine co-generation technology. *IHI Engineering Review*, vol. 53, no. 1, pp. 1–6.
- [13] Stagni, A., Cavallotti, C., Arunthanayothin, S., Song, Y., Herbinet, O., Battin-Leclerc, F., & Faravelli, T. (2020). An experimental, theoretical and kinetic-modeling study of the gas-phase oxidation of ammonia. *React. Chem. Eng.*, vol. 5, pp. 696–711.
- [14] Mitsubishi Power, Mitsubishi Power commences development of world's first ammonia-fired 40MW class gas turbine system.
- [15] Romanovsky, G. F., Serbin, S. I., & Patlaychuk, V. M. (2005). Suchasni hazoturbinni ahrehaty. Navchalnyy posibnyk. Mykolayiv: NUS, 344 p.
- [16] Kee, R. J., Rupley, F. M., & Miller, J. A. (1989). Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics. *Sandia Report SAND89-8009B*, 127 p.
- [17] Lutz, A. E., Kee, R. J., & Miller, J. A. (1987). SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis. *Sandia Report SAND87-8248*, 32 p.
- [18] Serbin, S. I., & Kolesnykov, A. B. (2023). Mozhlyvosti efektyvnoho spaliuvannya amiaku v kameri zgoriannia hazoturbinnoho dvyhuna z turbinoiu pere rozshyrennia. *Zbirnyk naukovykh prats Natsionalnoho universytetu korablebuduvannya imeni admiral Makarova*. vol. 1 (490), pp. 96–102.
- [19] Xiao, H., Valera-Medina, A., & Bowen, P. J. (2017). Modeling Combustion of Ammonia/Hydrogen Fuel Blends under Gas Turbine Conditions. *Energy and Fuels*, vol. 31, no. 8, pp. 8631–8642.
- [20] Stagni, A., Arunthanayothin, S., Dehue, M., Herbinet, O., Battin-Leclerc, F., Br'equigny, P., Mounaïm-Rousselle, C., & Faravelli, T. (2023). Low- and intermediate-temperature ammonia/hydrogen oxidation in a flow reactor: Experiments and a wide-range kinetic modeling. *Chemical Engineering Journal*, vol. 471, no. 144577, pp. 1–15.
- [21] Li, Y., Jin, Z., Wang, Z., Tan, H., Jia, Z., Cui, B., Zhou, S., & Bai, F. (2023). Evaluation, Reduction, and Validation of a New Skeletal Mechanism for the Cofiring of NH_3 and CH_4 . *ACS Omega*, vol. 8, pp. 47113–47122.
- [22] Yu, Z., Li, Z., Zhao, J., & Shi, L. (2023). Development of Ammonia Reaction Kinetic Mechanism under Engine-Relevant Conditions. *Energy & Fuels*, vol. 38, no. 1, pp. 1–28.
- [23] Chemkin Theory Manual. 2016. Available: https://personal.ems.psu.edu/~radovic/ChemKin_Theory_PaSR.pdf.

Постановка задачі. При зростаючих потребах в екологічно чистих джерелах енергії використання аміаку в гібридних декарбонізованих енергетичних системах з ГТД стає все більш актуальним. В 2020 р. Європейський Союз затвердив зелений договір, ухваливши план досягнення практично нульових викидів парникових газів.

Для переходу теплових двигунів на безвуглецеві палива, такі як водень і аміак, впроваджується широкий спектр заходів. Використання водню демонструє значний потенціал, але стикається з низкою технічних, економічних і експлуатаційних труднощів:

1. Широкий діапазон горючості водню та низька енергія його займання можуть призводити до передчасного займання в камері згоряння. Це потребує спеціального вдосконалення конструкції, зокрема зміни форми камери згоряння та систем впорскування.

2. Для зберігання водню необхідні специфічні умови: або високий тиск (до 700 бар), або температура рідкого стану ($-253\text{ }^{\circ}\text{C}$), що ускладнює його використання.

3. Контакт водню з матеріалами може спричиняти їх деградацію через водневу крихкість.

4. Щільність енергії водню у стислому вигляді є відносно низькою порівняно з традиційними вуглеводневими паливами, що створює додаткові виклики.

5. Ефективність двигунів на водні може бути знижена через труднощі з управлінням процесами згоряння та теплові втрати.

6. Хоча водень не продукує діоксид вуглецю CO_2 , висока температура згоряння сприяє утворенню оксидів азоту NO_x . Для їх зниження потрібні спеціальні системи або технології знешкодження.

7. Висока вибухонебезпечність водню потребує особливих заходів безпеки при роботі з ним.

8. Висока вартість виробництва, транспортування та зберігання водню обмежує його економічну привабливість.

9. Відсутність розгалуженої інфраструктури для заправки воднем у багатьох регіонах стримує його широке впровадження.

На відміну від водню, аміак має низку переваг [1–4]:

1. Існує розвинена світова інфраструктура для транспортування, зберігання та обробки аміаку, що спрощує його інтеграцію як палива.

2. Хоча аміак має нижчу питому енергію (11,5 МДж/кг) порівняно з воднем (120 МДж/кг), його рідкий стан за стандартних умов забезпечує вищу об'ємну енергоємність.

3. Рідкий аміак може зберігатися при порівняно низькому тиску (8,6 бар при 20 °C) або температурі –33 °C, що робить його зручнішим у поводженні, ніж водень.

4. Аміак придатний як для прямого згоряння у двигунах, так і для використання у паливних елементах після розкладу на азот і водень.

5. Правильне управління процесами згоряння дозволяє значно зменшити викиди оксидів азоту та виключити утворення сажі.

6. Аміак може вироблятися з використанням відновлюваної енергії через електроліз водню та реакцію з азотом із повітря.

7. Завдяки простоті транспортування та високій енергоємності аміак є перспективним паливом для судноплавства.

8. Аміак менш вибухонебезпечний порівняно з воднем через його вищу температуру займання (651 °C проти 585 °C).

Таким чином, аміак є перспективним паливом для теплових двигунів, в тому числі суднових, завдяки його екологічності, доступності та зручності зберігання. Однак його впровадження в енергетичних системах з газотурбінними двигунами пов'язано з низкою технічних та експлуатаційних проблем, такими як низька теплотворна спроможність, мала швидкість поширення полум'я, необхідність додаткових стабілізуючих пристроїв при горінні в повітряному середовищі, токсичність аміаку та його схильність до утворення оксидів азоту.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Аміак може бути використаний як ефективний носій перед генерацією електроенергії та згорянням, наприклад, в енергетичних системах з паливними елементами і газотурбінною установкою (ГТУ). Твердооксидні паливні елементи (ТОПЕ), за міжнародною термінологією Solid Oxide Fuel Cell (SOFC), мають досить широкий діапазон застосувань: від портативних джерел струму до автономних стаціонарних електростанцій.

У дослідженні [5] запропоновано конструкцію системи SOFC, що працює на аміаку. Досягнуто електричну ефективність системи 52,1 %. У роботі [6] запропоновано інтегровану конструкцію системи подачі палива NH_3 з повторним зрідженням при 40 °C і тиску 80 бар для океанського судна. Відмітимо, що таке технічне рішення знаходиться тільки на стадії розробки. Для знаходження термодинамічних характеристик системи SOFC-GT, що використовує аміачне паливо, в [7] проведено її моделювання. В роботі [8] розглянуто технологічні проблеми, пов'язані з SOFC, а також останні досягнення в сучасних технологіях і нові анодні матеріали для цих систем.

Подібні системи розглядаються перспективними і для військового флоту. Зокрема, в роботі [9] проведено дослідження комбінованої системи Combined Fuel Cell And Gas Turbine (COFCAG), що використовує аміак, для типової конструкції фрегата водотон-

нажністю 4467 тонн. Навіть при використанні дорогого обладнання можна отримати значний ефект в зменшенні водотоннажності. Це приводить до зменшення опору і поліпшення маневреності корабля при заданих його технічних характеристиках.

Для подолання негативних факторів, пов'язаних з низькою швидкістю поширення полум'я аміаку, необхідні додаткові міри, пов'язані з покращенням якості сумішоутворення [10]. Проблеми низької займистості аміаку також можуть бути вирішені за допомогою введення спеціальних добавок, таких як водень і метан [11], хоча це може, у свою чергу, зменшити основні переваги горіння аміаку. В роботі [12] проведено дослідження, що описує результати спільного спалювання аміаку з природним газом, що відбувалося зі зменшенням викидів вуглекислого газу, але не вирішило і цілому проблему декарбонізації. Зазначимо, що вже розроблено різні механізми реакцій окиснення та горіння аміаку в повітрі [13], проте їх подальше вивчення та покращення є безумовно необхідним і планується в даному проєкті. Особливо інтенсивні дослідження в цій області проводяться в Японії. В 2021 році Mitsubishi Power оголосила, що працює над газовою турбіною потужністю 40 МВт, яка розробляється для роботи виключно на аміаку [14].

Відокремлення невирішених раніше частин загальної проблеми. Проведений аналіз останніх досліджень та напрямків використання аміаку в якості палива в гібридних енергетичних системах з газотурбінними двигунами показав, що існують невирішені питання, які виникають з його фізико-хімічних властивостей. На основі запропонованих нами технічних рішень планується вирішити проблему повного вигорання аміаку в високофорсованих камерах згорання ГТД.

Основними положеннями, на вирішення яких буде спрямована майбутня робота в цьому напрямку є обґрунтування ефективності використання аміаку в якості палива в гібридних енергетичних системах на базі ГТД виробництва України, а також інтенсифікація процесів спалювання аміаку, в тому числі за рахунок впливу низькотемпературної повітряної плазми.

Метою роботи є прогнозування емісійних характеристик камери згорання газотурбінного двигуна, що працює на аміаку, з використанням детальних кінетичних механізмів його горіння.

В якості **об'єкта дослідження** вибрано робочі процеси в камері згорання газотурбінного двигуна, що працює на газоподібному аміаку. **Предмет дослідження** – закономірності вигорання аміаку в камері згорання газотурбінного двигуна при використанні різних кінетичних механізмів.

Виклад основного матеріалу. На першому етапі робіт з переведення вітчизняних газотурбінних двигунів, що працюють на вуглеводневих паливах, на перспективне безвуглецеве – аміак, необхідно виконати дослідження, пов'язані з можливістю забезпечення стійкого горіння аміаку в високофорсованих камерах і отримати попередній прогноз з викидів токсичних компонентів і температурі продуктів. В якості паливоспалюючого пристрою вибрано традиційну схему дифузійної камери згорання, що може працювати у базових варіантах на рідкому чи газоподібному вуглеводневому паливі.

У конструкції камери згорання судового газотурбінного двигуна, описаної в [15], передбачено підвіску 1, силовий корпус 7, дифузор 8, кожух камери згорання 5, а також шістнадцять жарових труб 6, які розташовані у кільцевому просторі між внутрішнім і зовнішнім кожухами з незначним підйомом головної частини. До складу також входять шістнадцять форсунок 4, що встановлюються на бобишках, які знаходяться навпроти кожної жарової труби на корпусі компресора високого тиску 3, паливні колектори 2 для першого та другого каналів, трубки для подачі палива й запалювачі (рис. 1).

Для роботи на аміаку пропонується зберегти масову витрату повітря через компресорну частину двигуна, а витрату аміаку через камеру згорання знаходити з урахуванням відповідного стехіометричного співвідношення $= 6,0466$, що значно менше значення для вуглеводневих палив $= 14,7-16,5$.

Для прогнозування емісійних характеристик камери згорання ГТД, що працює на

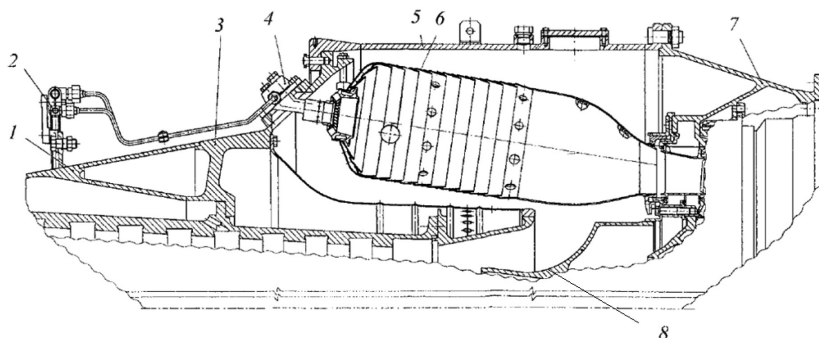


Рис. 1. Конструктивна схема камери згоряння [15]

аміаку, будемо використовувати підхід [16, 17], згідно з яким камера розглядається як сукупність різних хімічних реакторів. Для гомогенного реактора (ГР), або реактора з ідеальним змішуванням, характерна повна однорідність усіх параметрів, що описують процес, по всьому об'єму реактора. У проточному реакторі (ПР), також відомому як реактор ідеального витіснення, реагенти рухаються подібно до твердого поршня, утворюючи по довжині реактора розподіл концентрацій, температури та інших характеристик, що визначається кінетичним механізмом і супутніми фізичними явищами. В адіабатичному змішувачі (АЗ) процеси зводяться до змішування компонентів без реалізації хімічних реакцій.

На рис. 2 представлено розроблену модель реактора для камери згоряння, яка працює на аміаку. Реактори використовуються для моделювання первинної зони камери згоряння, зони розбавлення та процесів змішування вторинного повітря, що подається у відповідні області.

Гомогенні реактори ГР1-ГР3 моделюють процеси часткового окиснення і горіння аміаку в ділянках завихрювання, фронтового пристрою та первинної зони (зони горіння) жарової труби. Продукти ГР1 та ГР2 направляються в гомогенний реактор ГР3 первинної зони, де відбуваються основні реакції хімічного реагування аміаку з повітрям, що подається через перший ряд радіальних отворів в жаровій трубі. Далі продукти реакцій спрямовуються до адіабатного змішувачу АЗ, де в умовах відсутності підведення або відведення теплоти має місце їх змішування зі вторинним повітрям, що подається через другий ряд радіальних отворів в жаровій трубі. Проточний реактор ПР моделює фізико-хімічні процеси у зоні змішування (розбавлення) жарової труби.

Детальний математичний опис всіх типів реакторів розробленої моделі камери згоряння приведено в [18].

Процеси, що відбуваються в гомогенних реакторах [16], описуються за допомогою рівнянь збереження маси та енергії

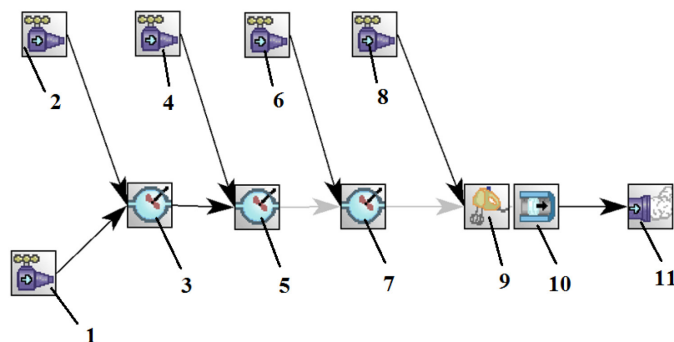


Рис. 2. Реакторна модель камери згоряння газотурбінного двигуна, що працює на аміаку: 1 – підведення аміаку; 2 – підведення повітря через завихрювач; 3 – ГР1 зони завихрювання; 4 – підведення повітря через фронтовий пристрій; 5 – ГР2 фронтового пристрою; 6 – підведення первинного повітря; 7 – ГР3 первинної зони; 8 – підведення вторинного повітря; 9 – АЗ; 10 – ПР зони змішування; 11 – вихід камери згоряння

для хімічно реагуючої системи. Такі реактори можуть мати різні геометричні форми та конфігурації входних і вихідних каналів, які забезпечують ефективне перемішування компонентів. Температура та склад продуктів реакції всередині реактора і на його виході залишаються однаковими, а масова витрата газової суміші через реактор залишається сталою.

Розрахунки процесів в адіабатичних змішувачах виконуються за припущення про ідеальну теплоізоляцію.

Моделювання хімічних реакцій у проточних реакторах [17] полягає в аналізі змін стану однорідної хімічно реагуючої газової суміші, яка має задані початкові концентрації компонентів і температуру, у межах закритої системи протягом визначеного часу перебування.

Алгоритм розв'язання системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описує процеси в камері згоряння газотурбінного двигуна, який працює на аміаку, для покращення ітераційної збіжності потребує завдання рівноважного стану хімічно реагуючої системи як початкового наближення. Рівноважний стан компонентів розраховується шляхом мінімізації функції вільної енергії Гіббса при фіксованій температурі [16, 17].

В даній роботі досліджено характер протікання робочого процесу в камері згоряння з використанням чотирьох детальних хімічних механізмів горіння аміаку: схема 1, запропонована Хіао [19], яка містить 71 реакцію з 23 компонентами; схема 2, запропонована Stagni [20], яка містить 203 реакції з 31 компонентом; схема 3, запропонована Li [21], яка містить 160 реакцій з 27 компонентами та схема 4, запропонована Yu [22], яка містить 286 реакцій з 34 компонентами.

Обговорення результатів. Для аналізу протікання робочого процесу в високофорсованій камері згоряння газотурбінного двигуна, що працює на газоподібному аміаку, проведено відповідні розрахунки горіння палива в повітряному середовищі. Розрахунки проводились з використанням теорії гомогенних та проточних реакторів з ви-

користанням обчислювального комплексу ANSYS Chemkin [23].

Початкові дані до розрахунків (на одну жарову трубу): витрата аміаку на номінальному режимі 0,255 кг/с, температура палива 313 К, витрата повітря 4,291 (5,1) кг/с без відборів (з відборами повітря на охолодження лопаткових апаратів турбін), температура повітря 748 К, тиск повітря 2,0 МПа, середній діаметр жарової труби 0,165 м, довжина 0,52 м.

Залежності мольних часток стабільних продуктів O_2 , H_2O та N_2 (а), оксидів азоту NO , N_2O , NO_2 (б) та температури газів (в) на виході камери для чотирьох розглянутих кінетичних схем, а також їх середні значення показані на рис. 3.

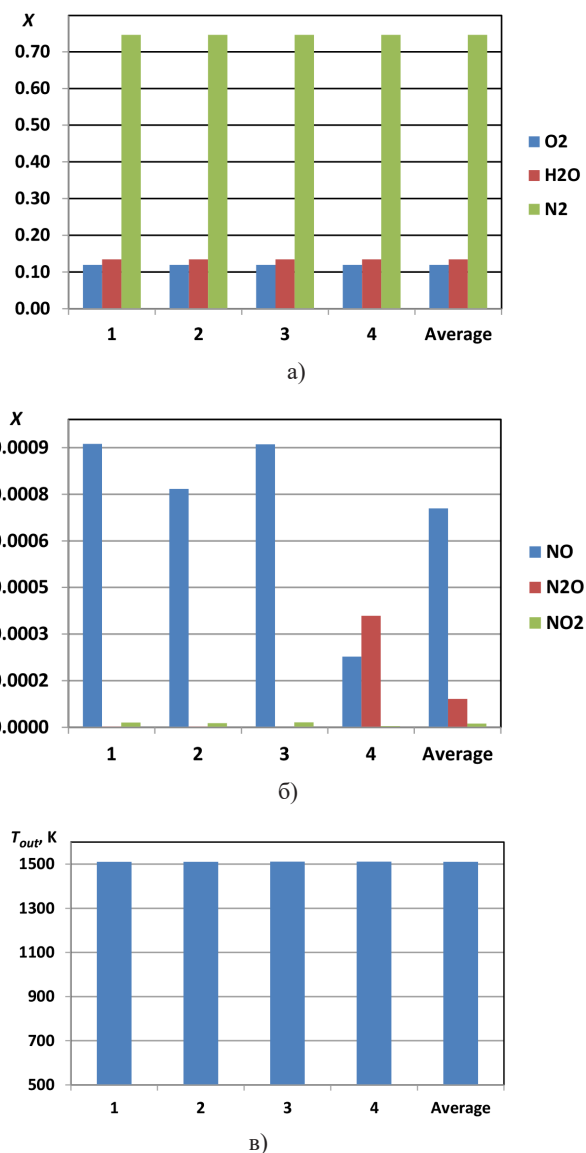


Рис. 3. Залежності мольних часток O_2 , H_2O та N_2 (а), оксидів азоту NO , N_2O , NO_2 (б) та температури продуктів (в) на виході камери для чотирьох кінетичних схем 1–4

Видно, що значення концентрацій стабільних продуктів і температури газів на виході камери згоряння практично не залежать від кінетичної схеми. Основні відмінності характерні для емісійних характеристик, пов'язаних з викидами оксидів азоту. Схема 4 дає необґрунтовані високі для фізичних експериментів значення концентрації закиси азоту N_2O і занижені значення концентрації моноокси азоту NO .

Для виявлення закономірностей вигорання аміаку і утворення токсичних компонентів в камері згоряння ГТД проведено ряд розрахунків при варіюванні витратою аміаку від 0.2 до 0.3 кг/с (на одну жарову трубу), що відповідає зміні сумарного коефіцієнту надлишку повітря в камері 3,55–2,36. Витрата повітря через камеру згоряння не змінювалась.

На рис. 4 приведено мольні частки NO , N_2O , NO_2 та NO_x на виході камери згоряння в залежності від коефіцієнту надлишку повітря для чотирьох розглянутих кінетичних схем. Відмітимо, що ppmvd 15 % O_2 – це одиниця вимірювання концентрації газів, виражена в мільйонних частках об'єму, з урахуванням того, що вимірювання проводиться на сухій основі (без урахування вмісту води в газовій суміші), скориговане на фіксовану об'ємну концентрацію кисню 15 %.

Видно, що для всіх розглянутих кінетичних схем характерні мінімальні значення емісії оксидів азоту NO_x при сумарному коефіцієнті надлишку повітря рівному 2,78, що відповідає середній температурі газів перед турбіною високого тиску 1511 К.

Кінетична схема 3 дає найбільш широкий діапазон стабільної роботи камери згоряння за коефіцієнтом надлишку повітря (без погасання полум'я), що важливо для майбутніх детальних розрахунків аеродинамічної структури потоку і вигорання аміаку в камері згоряння з використанням тривимірних CFD моделей. Тому її пропонується використовувати в наступних дослідженнях.

Залежності мольних часток O_2 , H_2O , N_2 , оксидів азоту NO , NO_x та температури продуктів на виході камери від витрати аміаку для кінетичної схеми 3 показано на рис. 5.

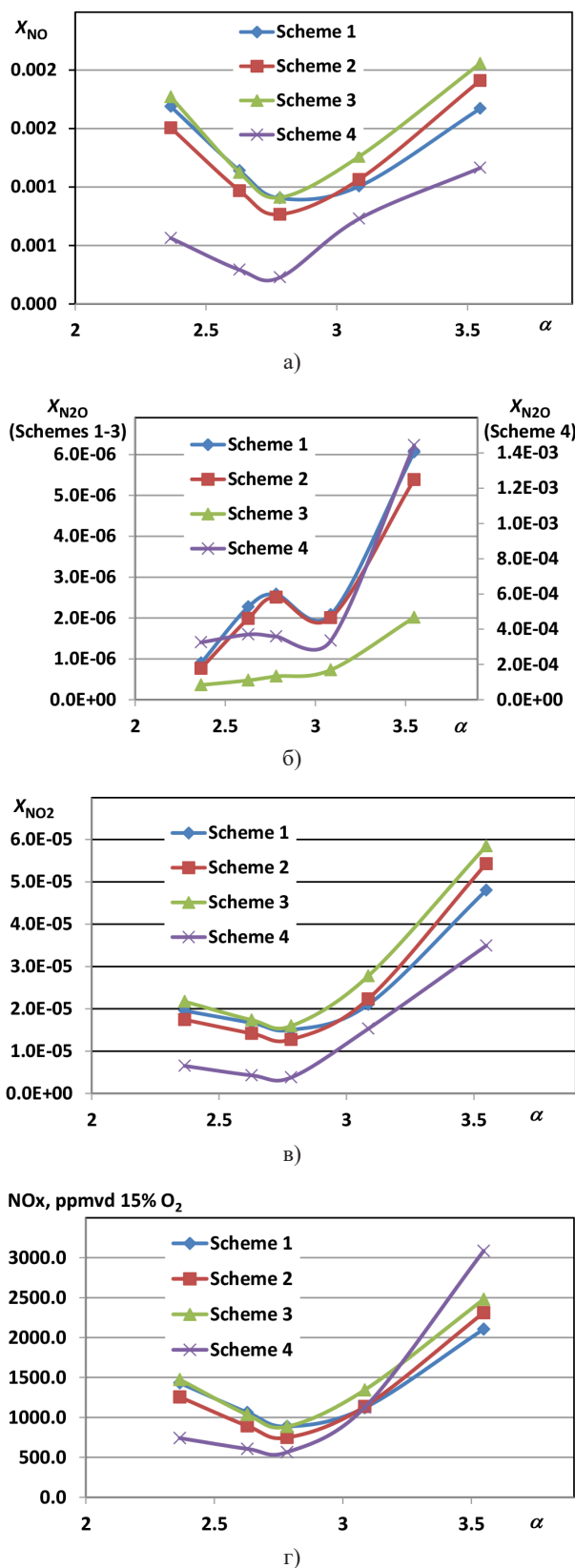


Рис. 4. Мольні частки NO (а), N_2O (б), NO_2 (в) та NO_x (г) на виході камери в залежності від коефіцієнту надлишку повітря для чотирьох кінетичних схем 1–4

При збільшенні витрати газоподібного аміаку має місце постійне зростання середньої температури газів на виході камери згоряння, але емісія оксидів азоту спочатку

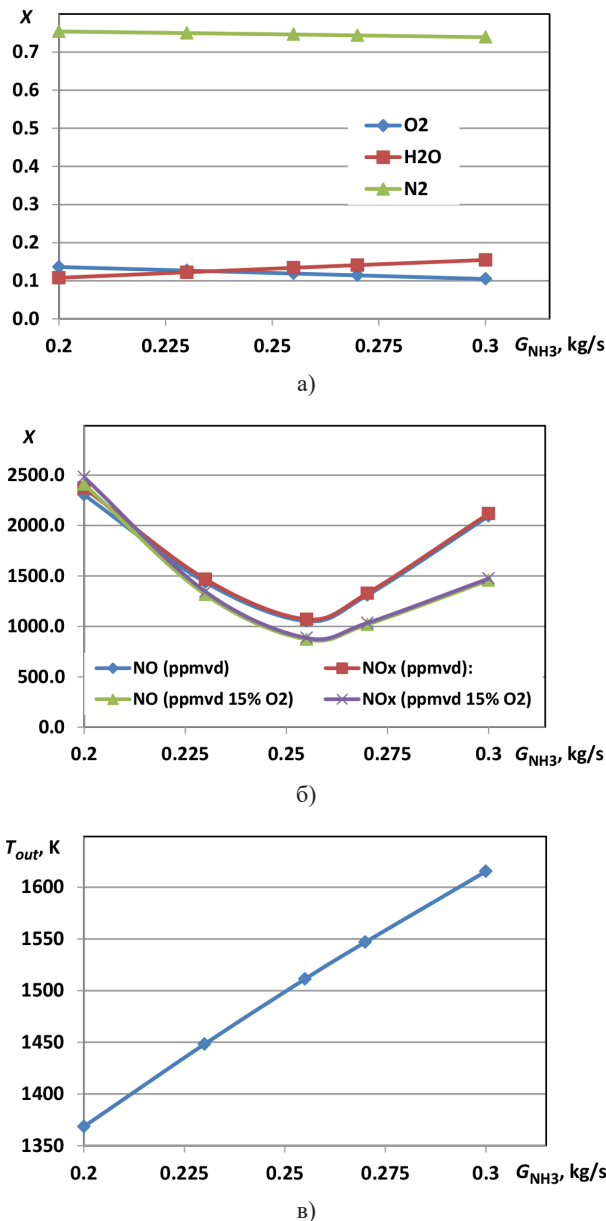


Рис. 5. Залежності мольних часток O_2 , H_2O та N_2 (а), оксидів азоту NO , N_2O , NO_2 (б) та температури продуктів (в) на виході камери від витрати аміаку для кінетичної схеми 3

спадає, досягає мінімуму при температурі 1511 K, а потім збільшується. Відмітимо, що навіть на цьому (розрахунковому) режимі роботи камери згоряння концентрація $NO_x = 885,4$ ppmvd 15 % O_2 , що значно пе-

ревищує рівень токсичності газотурбінних двигунів, що працюють на вуглеводневих паливах. Потрібні подальші дослідження, пов'язані з оптимізацією робочого процесу в камері згоряння, передусім з перерозподілом повітря за перерізами жарової труби, з метою зменшення викидів оксидів азоту в подібних високофорсованих камерах згоряння зі ступінчастим підведенням повітря.

Висновки:

1. Використано реакторну модель високофорсованої камери згоряння газотурбінного двигуна, що працює на газоподібному аміаку, в якій відповідні реактори моделюють основні локальні зони камери. Модель ґрунтується на рівняннях збереження маси і енергії для хімічно реагуючої системи.

2. Для прогнозування екологічних характеристик високофорсованої камери згоряння газотурбінного двигуна використано чотири детальних механізму горіння аміаку, що містить у собі від 71 до 286 хімічних реакцій.

3. Розглянуто вплив режимних параметрів камери згоряння на розподіл температури та концентрацій хімічно реагуючих компонентів в об'ємі паливоспалюючого пристрою при тиску 2,0 МПа, зміні коефіцієнта надлишку повітря від 2,36 до 3,55.

4. Мінімальні значення емісії оксидів азоту NO_x мають місце при сумарному коефіцієнті надлишку повітря в камері рівному 2,78, що відповідає середній температурі газів перед турбіною 1511 K.

5. Концентрації оксидів азоту на виході камери згоряння значно перевищують рівень токсичності газотурбінних двигунів, що працюють на вуглеводневих паливах.

6. Потрібні подальші дослідження, пов'язані з перерозподілом кількості повітря за перерізами жарової труби, з метою зменшення викидів оксидів азоту.

Список літератури

- [1] Boerner K.K. Industrial ammonia production emits more CO_2 than any other chemical-making reaction. Chemists want to change that. *Chemical & Engineering News*, 2019, vol. 97, no. 24.
- [2] Tornatore C., Marchitto L., Sabia P., Joannon M.D. Ammonia as Green Fuel in Internal Combustion Engines: State-of-the-Art and Future Perspectives. *Front. Mech. Eng., Sec. Engine and Automotive Engineering*, 2022, vol. 8.
- [3] Ito S., Uchida M., Suda T., Fujimori T. Development of ammonia gas turbine co-generation technology. *IHI Engineering Review*, 2020, vol. 53, no. 1, pp. 1–6.

- [4] Lee H., Lee M. Recent advances in ammonia combustion technology in thermal power generation system for carbon emission reduction. *Energies*, 2021, vol. 14, no. 18, 5604.
- [5] Barelli L., Bidini G., Cinti G. Operation of a Solid Oxide Fuel Cell Based Power System with Ammonia as a Fuel: Experimental Test and System Design. *Energies*, 2022, vol. 13, no. 6173, pp. 1–19.
- [6] Lee J., Choi Y., Choi J. Techno-Economic Analysis of NH₃ Fuel Supply and Onboard Re-Liquefaction System for an NH₃-Fueled Ocean-Going Large Container Ship. *J. Mar. Sci. Eng.*, 2022, vol., no. 1500, pp. 1–22.
- [7] Kim J., Kim D.E. Energy, Exergy, and Economic (3E) Analysis of SOFC-GT-ORC Hybrid Systems for Ammonia-Fueled Ships. *J. Mar. Sci. Eng.*, 2023, vol. 11, no. 2126, pp. 1–22.
- [8] Dhawale D., Biswas S., Kaura G., Giddey S. Challenges and advancement in direct ammonia solid oxide fuel cells: a review. *Inorg. Chem. Front.*, 2023, vol. 10, pp. 6176–6192.
- [9] Pawling R., Bucknall R., Greig A. Considerations For Future Fuels in Naval Vessels. *Institute of Marine Engineering Science and Technology*, 2022-09-07, <https://doi.org/10.24868/10676>
- [10] Rocha R.C., Costa M., Bai X.S. Combustion and emission characteristics of ammonia under conditions relevant to modern gas turbines. *Combust. Sci. Technol.*, 2021, vol. 193, no. 14, pp. 1–20.
- [11] Jójka J., Ślefarski J. Emission Characteristics for Swirl Methane–Air Premixed Flames with Ammonia addition. *Energies*, 2021, vol. 14, no. 662, pp. 1–19.
- [12] Ito S., Uchida M., Suda T., Fujimori T. Development of ammonia gas turbine co-generation technology. *IHI Engineering Review*, 2020, vol. 53, no. 1, pp. 1–6.
- [13] Stagni A., Cavallotti C., Arunthanayothin S., Song, Y., Herbinet, O., Battin-Leclerc F., Faravelli T. An experimental, theoretical and kinetic-modeling study of the gas-phase oxidation of ammonia. *React. Chem. Eng.*, 2020, vol. 5, pp. 696–711.
- [14] Mitsubishi Power, Mitsubishi Power commences development of world's first ammonia-fired 40MW class gas turbine system.
- [15] Романовський Г.Ф., Сербін С.І., Патлайчук В.М. Сучасні газотурбінні агрегати. Навчальний посібник. Миколаїв : НУК, 2005. 344 с.
- [16] Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A. Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics. *Sandia Report SAND89-8009B*, 1989, 127 p.
- [17] Lutz A.E., Kee R.J., Miller J.A. SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis. *Sandia Report SAND87-8248*, 1987, 32 p.
- [18] Сербін С.І., Колесников А.Б. Можливості ефективного спалювання аміаку в камері згоряння газотурбінного двигуна з турбіною пере розширення. *Збірник наукових праць Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова*. 2023. № 1 (490), с. 96–102.
- [19] Xiao H., Valera-Medina A., Bowen P.J. Modeling Combustion of Ammonia/Hydrogen Fuel Blends under Gas Turbine Conditions. *Energy and Fuels*, 2017, vol. 31, no. 8, pp. 8631–8642.
- [20] Stagni A., Arunthanayothin S., Dehue M., Herbinet O., Battin-Leclerc F., Bréquigny P., Mounaïm-Rousselle C., Faravelli T. Low- and intermediate-temperature ammonia/hydrogen oxidation in a flow reactor: Experiments and a wide-range kinetic modeling. *Chemical Engineering Journal*, 2023, vol. 471, no. 144577, pp. 1–15.
- [21] Li Y., Jin Z., Wang Z., Tan H., Jia Z., Cui B., Zhou S., Bai F. Evaluation, Reduction, and Validation of a New Skeletal Mechanism for the Cofiring of NH₃ and CH₄. *ACS Omega*, 2023, vol. 8, pp. 47113–47122.
- [22] Yu Z., Li Z., Zhao J., Shi L. Development of Ammonia Reaction Kinetic Mechanism under Engine-Relevant Conditions. *Energy & Fuels*, 2023, vol. 38, no. 1, pp. 1–28.
- [23] Chemkin Theory Manual. 2016. Available: https://personal.ems.psu.edu/~radovic/ChemKin_Theory_PaSR.pdf