

УДК: 66.011:662.76

КОБЗАРЬ С.Г., ХАЛАТОВ А.А.

*Институт технической теплофизики НАН Украины*

## АПРОБАЦИЯ УПРОЩЕННОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА ГОРЕНИЯ И ФОРМИРОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА ПРИ СЖИГАНИИ ЖИДКОГО ТОПЛИВА

Запропоновано спрощену модель горіння та утворення оксидів азоту при спалюванні рідкого палива у циліндричній камері згорання. Порівняння експериментальних і розрахункових даних, отриманих за допомогою комерційного пакету програм PHOENICS 3.6, показало задовільне узгодження результатів. Досліджено вплив коефіцієнту надлишку повітря на утворення оксидів азоту.

Предложена упрощенная модель горения и образования оксидов азота при сжигании жидкого топлива в цилиндрической камере сгорания. Сравнение экспериментальных и расчетных данных, полученных с помощью коммерческого пакета программ PHOENICS 3.6, показало удовлетворительное согласование результатов. Исследовано влияние коэффициента избытка воздуха на образование оксидов азота.

The simplified theoretical model of a liquid fuel burning and nitrogen oxides formation in the cylindrical combustion chamber is suggested. The good agreement between experiments and calculations obtained by means of CFD package PHOENICS 3.6 was obtained. The influence an air-fuel ratio on the nitrogen oxides formation was investigated.

$k$  – кинетическая энергия турбулентности;

$L$  – длина камеры сгорания;

$P$  – абсолютное давление;

$r$  – радиус камеры сгорания;

$R$  – универсальная газовая постоянная;

$T$  – абсолютная температура;

$x, y, z$  – цилиндрические координаты;

$u, v, w$  – тангенциальная, радиальная и осевая компоненты скорости;

$Y_i$  – массовая концентрация компонента;

$[Y_i]$  – молярная концентрация компонента;

$\alpha$  – коэффициент избытка воздуха;

$\varepsilon$  – энергия диссипации;

$\rho$  – плотность.

**Индексы**

rg – prompt;

term – термический;

top – топливный.

В настоящее время основным топливом в теплоэнергетике являются органические природные ископаемые: природный газ, уголь и мазут. В последнее время наметились трудности с обеспечением Украины природным газом – основным видом топлива на ТЭЦ и в котельных, расположенных в крупных городах. Рост цены на газ и ограничение объемов его потребления требует использования резервного топлива, которым может служить жидкое топлива, например, мазут.

Сжигание жидкого топлива приводит к увеличению формирования оксидов азота по сравнению с природным газом, так как такое топливо содержит азот. Модернизация существующего оборудования требует проведения дополнительных натурных экспериментов, которые стоят до-

статочно дорого. Большую помощь в проведении предмодернизационного анализа оказывает многопараметрическое моделирование процессов горения с помощью CFD пакетов, таких как Phoenics, Fluent, CFX, StarCD и др. В настоящее время существует достаточно много математических моделей процесса горения жидкого топлива и формирования оксидов азота. Использование детальных механизмов горения, которые включают от 25 до 200 реакций, приводит к большим затратам компьютерного времени и их целесообразно использовать только на заключительной стадии проектирования. На этапе предварительных и оценочных расчетов целесообразно применять упрощенные, но достаточно точные модели горения и образования оксидов азота.

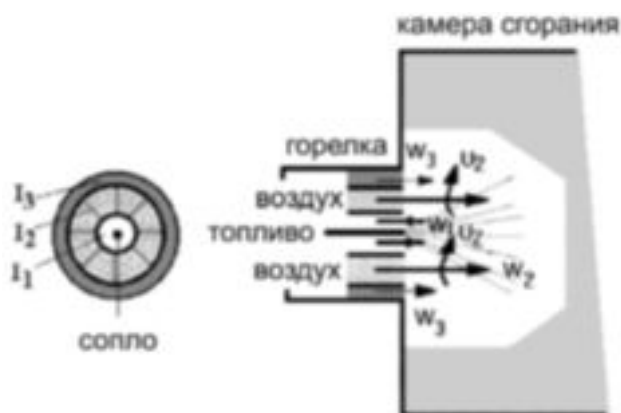


Рис. 1. Горелка и схема подачи воздуха и топлива в камеру сгорания.

Целью данной работы является апробация упрощенного механизма горения жидкого топлива и расчет эмиссии оксидов азота в атмосферу с помощью пакета прикладных программ *Phoenix v3.6*.

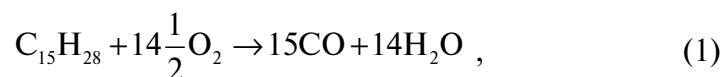
Объектом исследования была цилиндрическая камера сгорания с боковым выходом продуктов сгорания и горелкой, расположенной на оси камеры. Размеры камеры были следующие: длина  $L = 4,2$  м, внутренний радиус  $r = 0,8$  м. Схематическое изображение подачи воздуха и топлива показано на рис.1. Угол распыла топлива составляет  $60^\circ$ , а диаметр капель изменяется в диапазоне от 50 до 100 мкм. Воздух подается через три коаксиальных цилиндрических подвода  $I_1, I_2, I_3$ , причем поток в среднем входе имеет тангенциальную составляющую скорости  $u_2$ , т.е. является закрученным. Траектории движения капель топлива и их испарение моделировались подпрограммой *Gentra* – опция испаряющаяся капля [1]. Всего использовалось десять точек ввода капель. Для тестирования модели были использо-

ваны результаты экспериментов [2]. Модель камеры сгорания, построенная в препроцессоре *Phoenix v3.6*, представлена на рис. 2.

Для расчета полей скорости, концентрации и теплообмена решали осредненные уравнения движения Рейнольдса и уравнение энтальпии. Для замыкания гидродинамических уравнений использовали *RNG k-ε* модель турбулентности, которая показывает наилучшие результаты при расчете течений с криволинейными линиями тока и с закруткой потока. Радиационный теплообмен моделировался при помощи встроенной в пакет *Phoenix* модели *Radiosity* [3]. Степень черноты стенки принимали равной 0,9.

Жидкое топливо состоит из целого ряда компонентов (табл. 1). Используя углеродно-водородный баланс исходного топлива, жидкое топливо было представлено в виде единственной компоненты  $C_{15}H_{28}$ , ее теплофизические свойства представлены в табл. 2.

Горение жидкого топлива моделировали в предположении, что горят только пары топлива. Модель предполагает, что на первом этапе, после испарения, происходит горение паров жидкого топлива с образованием CO и воды (уравнение 1), а на втором этапе идет дожигание CO до  $CO_2$  (уравнение 2).



Для нахождения средней скорости реакции (1) использовалась модель разрушения вихрей (EBU) [4]:

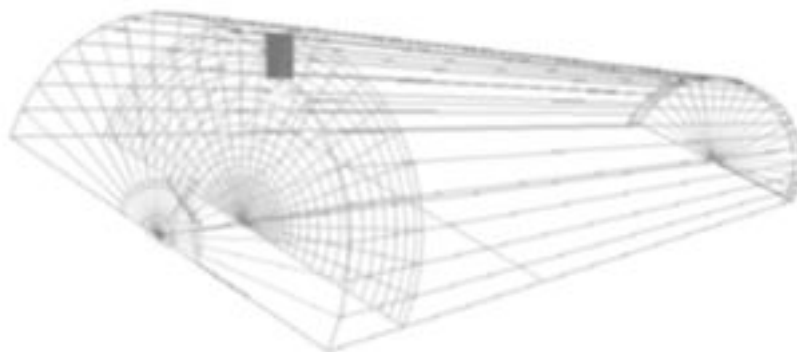


Рис. 2. Модель камеры сгорания, построенная в препроцессоре *Phoenix v3.6*.

Табл. 1. Состав топлива

Компоненты	% массы
Углерод	86,10
Водород	13,20
Сера	0,700
Азот	0,00918

$$R_{C_{15}H_{28}} = -C_{EBU} \cdot \min\left(C_{15}H_{28}; \frac{O_2}{2,231}\right) \cdot \rho \frac{\varepsilon}{k} \text{ [кг/м}^3\text{с]}, \quad (3)$$

где константа модели  $C_{EBU} = 1,0$ .

Средняя скорость реакции (2) принималась минимальной, определенной по модели EBU и закона Аррениуса [3]:

$$R_{CO} = -\min(R_{EBU}, R_{Ar}), \quad (4)$$

где

$$R_{Ar} = 5,4 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{15000}{T}\right) \times$$

$$\times [CO][O_2]^{0,25}[H_2O]^{0,5} \text{ [кмоль/м}^3\text{·с]} \text{ [5].}$$

Моделирование процесса формирования оксидов азота было проведено с учетом всех трех основных механизмов образования – термического, Prompt и топливного. Предполагалось, что совокупность оксидов азота  $NO_x$  можно представить только одним оксидом азота NO, с молекулярной массой  $M_{NO} = 30$ . В общем виде источниковый член в уравнении переноса NO можно записать следующим образом:

$$S_{NO} = S_{termNO} + S_{prNO} + S_{monNO}. \quad (5)$$

### **Механизм образования термического $NO_x$**

Механизм образования термического  $NO_x$  был предложен Зельдовичем [6], который учитывает окисление азота воздуха при температуре выше 1800К. Формирование термического  $NO_x$  сильно зависит от “пиковой” температуры пламени и наличия кислорода в зонах с высокой температурой.

После образования атомарного кислорода согласно механизму



начинается процесс окисления атмосферного азота в соответствии с механизмом термического NO



В дополнение к первым двум реакциям, которые учитывают образование оксидов азота при  $\alpha > 0,85$ , используется реакция



которая важна при  $\alpha < 0,85$  и может не приниматься во внимание при более высоких значениях коэффициента избытка воздуха.

Константы реакций для уравнений (8–10) были взяты из работы [7]:

$$k_1 = 1,8 \times 10^8 \exp\left(\frac{-38370}{T}\right), \quad (11)$$

$$k_{-1} = 3,8 \times 10^7 \exp\left(\frac{-425}{T}\right), \quad (12)$$

$$k_2 = 1,8 \times 10^4 T \exp\left(\frac{-4680}{T}\right), \quad (13)$$

$$k_{-2} = 3,8 \times 10^3 T \exp\left(\frac{-20820}{T}\right), \quad (14)$$

$$k_3 = 7,1 \times 10^7 \exp\left(\frac{-450}{T}\right), \quad (15)$$

$$k_{-3} = 1,7 \times 10^8 \exp\left(\frac{-24560}{T}\right), \quad (16)$$

где  $k_1, k_2, k_3$  – константы прямых реакций (8)–(10) соответственно, а  $k_{-1}, k_{-2}, k_{-3}$  – константы обратных реакций.

Табл. 2. Теплофизические свойства топлива

Скрытая теплота испарения, Дж кг <sup>-1</sup>	3,63 · 10 <sup>-05</sup>
Температура испарения, К	363
Точка кипения, К	463
Коэффициент диффузии, м <sup>2</sup> с <sup>-1</sup>	6,1 · 10 <sup>-06</sup>
Давление паров, Па	8,2 · 10 <sup>+04</sup>

Так как расчеты проводились при  $\alpha \geq 1,0$ , то результирующее выражение для расчета образования оксидов азота по термическому механизму можно записать в следующем виде:

$$\frac{d[\text{NO}]_T}{dt} = \frac{2[\text{O}]\{k_1 k_2 [\text{O}_2][\text{N}_2] - k_{-1} k_{-2} [\text{NO}]^2\}}{k_2 [\text{O}_2] + k_{-1} [\text{NO}]} \quad (17)$$

В уравнении (17) концентрация компонентов выражена в моль · м<sup>-3</sup>. Концентрации O<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> берутся из мгновенных значений рассчитанных полей концентрации, а концентрация радикала [O] определялась исходя из гипотезы о частичном равновесии по выражению [8, 9]

$$[\text{O}] = 36,64 T^{1/2} [\text{O}_2]^{1/2} \exp\left(\frac{-27123}{T}\right) \quad (18)$$

Таким образом, слагаемое, определяющее вклад в образование оксидов азота по термическому механизму в уравнении (5), имеет следующий вид:

$$S_{\text{термNO}} = M_{\text{NO}} \frac{d[\text{NO}]_T}{dt} \cdot$$

### Prompt NO<sub>x</sub> механизм

При низких температурах ( $T < 1800\text{K}$ ) образование NO<sub>x</sub> по термическому механизму мало по сравнению с общим количеством оксидов азота. При этом основной вклад в образование NO<sub>x</sub> вносят оксиды азота, которые образуются по механизму Prompt и из азота топлива (топливный NO<sub>x</sub>). Образование NO<sub>x</sub> по механизму Prompt происходит в зонах, содержащих несгоревшие углеводородные радикалы, что характерно при рециркуляционных течениях непосредственно в зоне горения, когда часть продуктов сгорания попадает в зону горения.

Горение углеводородов включает в себя множество комплексных реакций и промежуточных продуктов горения, расчет которых занимает много компьютерного времени. В связи с этим многими исследователями предложено рассчитывать образование Prompt NO<sub>x</sub> по глобальной модели. В исследовании использовалась зависимость, предложенная в [10]

$$\frac{d[\text{NO}]_{\text{pr}}}{dt} = 1,2 \times 10^7 [\text{N}_2][\text{O}_2] [\text{C}_{15}\text{H}_{28}] \exp\left(\frac{-60000}{RT}\right) \quad (19)$$

Таким образом, слагаемое, определяющее вклад в образование оксидов азота по Prompt механизму в уравнении (5), имеет вид

$$S_{\text{prNO}} = M_{\text{NO}} \frac{d[\text{NO}]_{\text{pr}}}{dt} \cdot$$

### Механизм образования топливного NO<sub>x</sub>

Механизм образования топливного NO<sub>x</sub> описывает окисление азота, содержащегося в топливе. В зависимости от промежуточных реакций радикалов и наличия кислорода в зонах, где происходят эти реакции, азот топлива может преобразовываться как в N<sub>2</sub>, так и в NO. Этот механизм также включает восстановление NO молекул до молекул азота при наличии СН радикалов. Следует отметить, что преобразование азота топлива в оксиды азота сильно зависит и от локального стехиометрического значения.

При испарении капли топлива азотсодержащие соединения попадают вместе с парами в газовую фазу. При дальнейшем нагреве эти соединения разлагаются на промежуточные соединения

HCN, N, CN и NH, а затем они могут преобразоваться в NO<sub>x</sub> [10]. Механизм образования топливного NO<sub>x</sub> происходит по схеме 1.

Для определения локальной концентрации HCN решалось дополнительное концентрационное уравнение. HCN, образованный из азота топлива, пропорционален количеству топлива, перешедшего в газовую фазу в результате испарения капель жидкого топлива. Дальше HCN участвует в двух реакциях: реакция 1 – окисление с образованием NO и реакция 2 – восстановление до N<sub>2</sub>. Средние скорости реакций разложения HCN в реакциях 1 и 2 определялись по соотношениям [10]:

$$R_1 = A_1 X_{HCN} X_{O_2}^a \exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right), \quad (20)$$

$$R_2 = A_2 X_{HCN} X_{NO} \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right). \quad (21)$$

где:  $R_1, R_2$  – скорость реакций HCN (1/с);  $X$  – мольная доля;  $a = 1$ ;  $A_1 = 3,5 \cdot 10^{10}$  (1/с);  $A_2 = 3,0 \cdot 10^{12}$  (1/с);  $E_1 = 67000$  кал/моль;  $E_2 = 60000$  кал/моль.

Оксиды азота из азота топлива образуются в первой реакции и разрушаются во второй. Источниковый член в уравнении (5) имеет вид

$$S_{монNO} = S_{NO-1} + S_{NO-2},$$

$$\text{где } S_{NO-1} = R_1 \frac{M_{NO} P}{RT}, \quad S_{NO-2} = -R_2 \frac{M_{NO} P}{RT}.$$

### Результаты апробации упрощенной модели расчета горения и формирования оксидов азота

Были проведены два варианта расчетов для установки мощностью 750 кВт, коэффициент избытка воздуха составлял  $\alpha = 1,0$  и  $1,2$ . Для  $\alpha = 1,2$  значения скорости на срезе горелки задавались следующими (см. рис. 1): вход  $I_1 - w_1 = 18,83$  м/с, вход  $I_2 - w_2 = 2,56$  м/с,  $u_2 = 5,3$  м/с, вход  $I_3 - w_3 = 18,83$  м/с. Температура стенки принималась такой же, как и в экспериментах [2]  $T = 1273$  К. Результаты расчетов при  $\alpha = 1,2$  сравнивались с результатами экспериментов [2]. На рис. 3 и 4 представлено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными по распределению температуры и концентрации оксидов азота в двух поперечных сечениях цилиндрической камеры сгорания. Из рис. 3 видно, что получено хорошее согласование результатов математического моделирования и экспериментальных данных. В сечении  $z/L = 0,0714$  математическая модель “улавливает” пик температуры. Далее по потоку при  $z/L = 0,214$  экспериментальный профиль температуры становится почти равномерным, однако модель демонстрирует небольшой пик температуры.

Сравнение результатов расчетных и экспериментальных данных позволяет говорить об адекватности применяемой модели образования оксидов азота. Из рис. 4 видно, что в обоих сечениях моделирование дает качественное и ко-

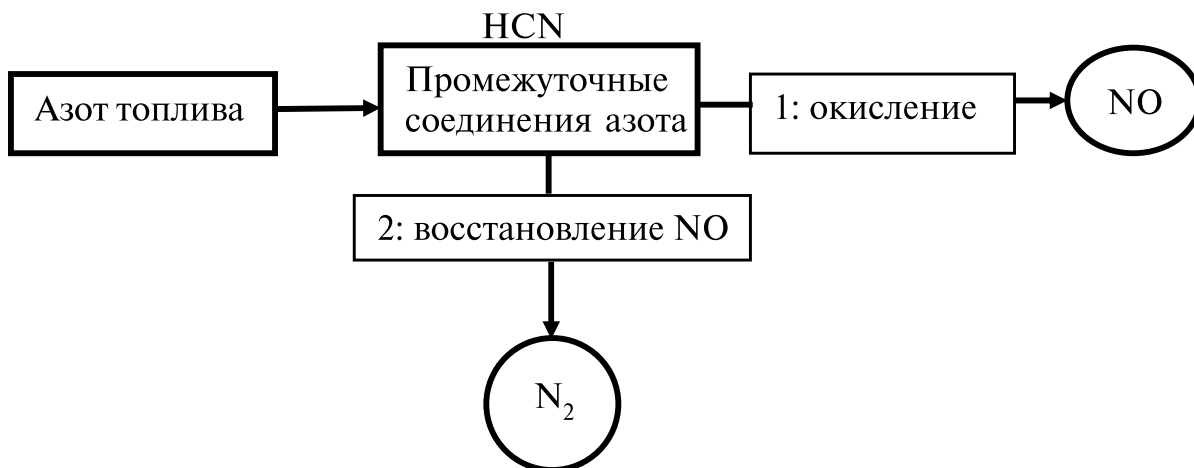


Схема 1.

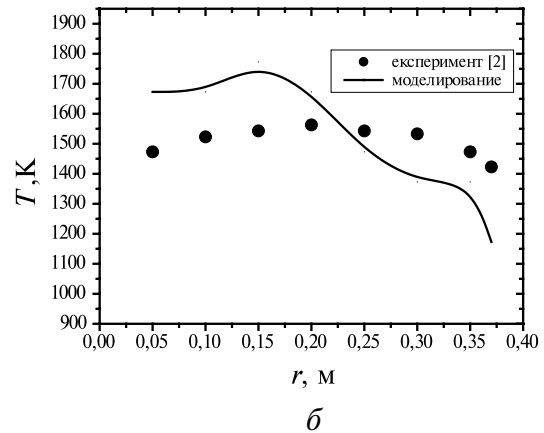
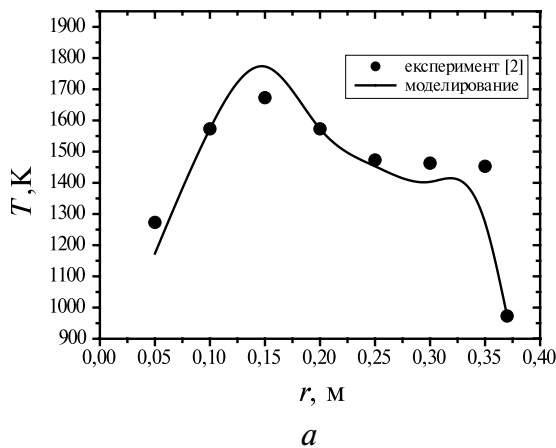


Рис. 3. Распределение температуры в поперечном сечении цилиндрической камеры сгорания: а)  $z/L = 0,0714$ ; б)  $z/L = 0,214$ .

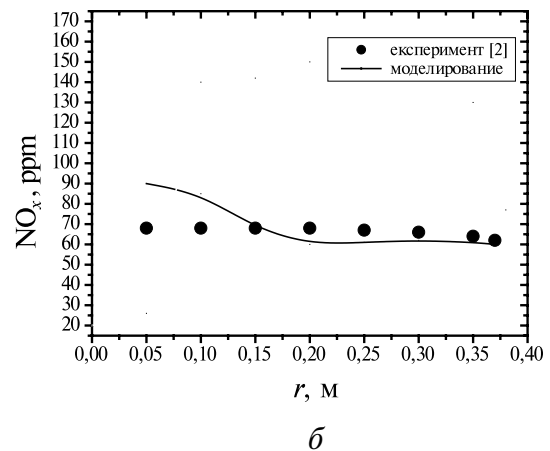
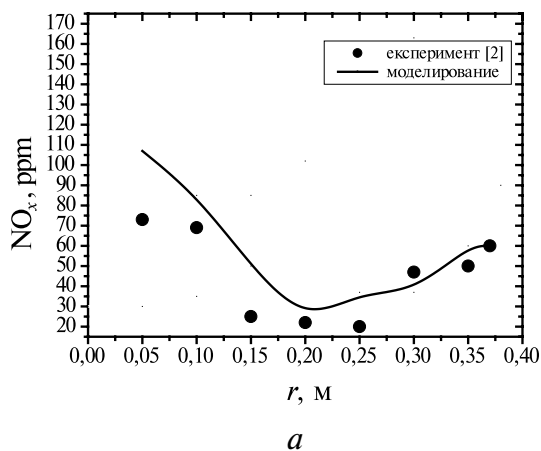


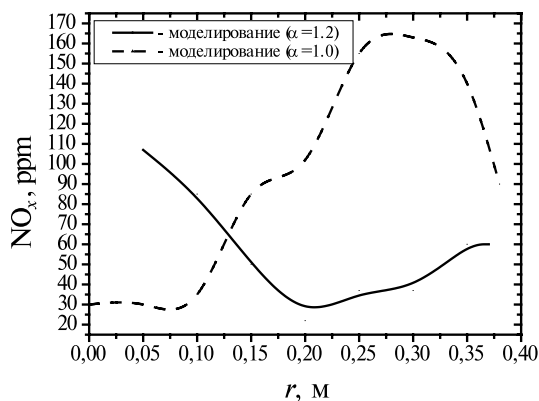
Рис. 4. Концентрация оксидов азота  $NO_x$  в поперечном сечении цилиндрической камеры сгорания: а)  $z/L = 0,0714$ ; б)  $z/L = 0,214$ .

личественное согласование с результатами экспериментов. Максимум концентрации  $NO_x$  (рис. 4 а) в области  $r = 0,05$ , объясняется высокой концентрацией кислорода в струе из центрального входа горелки, который в этом сечении еще не перемешался с продуктами сгорания. Минимум на этой кривой также связан с концентрацией кислорода, который практически отсутствует при  $r = 0,2$ . В сечении  $z/L = 0,214$  профиль концентрации оксидов азота достаточно равномерный (рис. 4 б), что связано с равномерным профилем температуры (рис. 3 б).

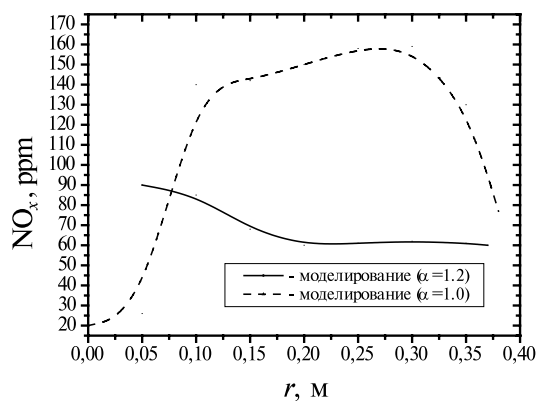
Хорошее согласование результатов расчетов с экспериментальными данными позволяет считать, что упрощенный механизм горения жидкого топлива позволяет адекватно описывать про-

цесс горения и образования оксидов азота в цилиндрической камере сгорания.

Для выявления влияния работы камеры сгорания на нерасчетных режимах были проведены расчеты для условий  $\alpha = 1$ . На рис.5 представлено влияние коэффициента избытка воздуха на образование оксидов азота. Как видно из графиков, при  $\alpha = 1$  распределение концентрации  $NO_x$  имеет качественно другой характер и при  $r > 0,75...0,4$  м существенно выше, чем при  $\alpha = 1,2$ . Такой результат объясняется образованием возвратных течений (рис. 6). Профиль осевой скорости представляет собой комбинацию осевого и закрученного потоков. В центре камеры сгорания (до  $r = 0,075$  м) преобладает струйное осевое течение из входа  $I_1$ , далее по радиусу



а



б

Рис. 5. Влияние коэффициента избытка воздуха на концентрацию  $NO_x$  в поперечном сечении цилиндрической камеры сгорания: а)  $z/L=0,0714$ ; б)  $z/L=0,214$ .

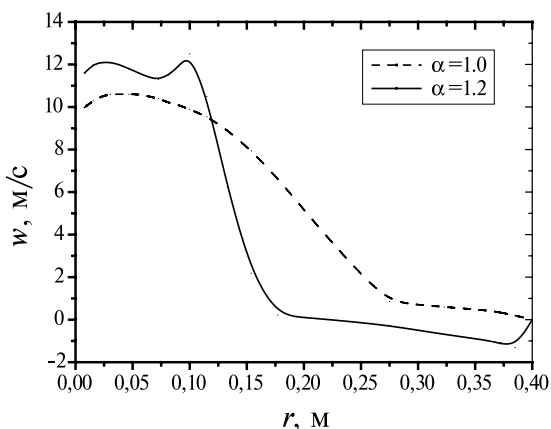


Рис. 6. Распределение осевой скорости в поперечном сечении цилиндрической камеры сгорания ( $z/L=0,0714$ ).

на профиль осевой скорости начинает влиять закрученный поток. При  $\alpha = 1,2$  в периферийной области камеры сгорания осевая скорость меняет свой знак ( $r = 0,25$ м) и тем самым обеспечивает перенос продуктов сгорания к корню факела, снижая концентрацию кислорода в зоне высоких температур. В результате снижается уровень формирования оксидов азота.

### Выводы

1. Предложенный упрощенный механизм горения позволяет адекватно описывать процесс горения жидкого топлива и образования оксидов азота в цилиндрической камере сгорания. Наилучшее согласование расчетных и эксперимен-

тальных результатов наблюдается в сечении близком к срезу горелки.

2. Уменьшение коэффициента избытка воздуха для данной камеры сгорания и горелки (отклонение от рабочего режима) приводит к снижению рециркуляционных течений и, как следствие, к увеличению концентрации оксидов азота.

### ЛИТЕРАТУРА

1. *The GENTRA User Guide*. CHAM, London – 2002.
2. *Ilbas M.* Studies of ultra low  $NO_x$  burners. Phd thesis. University of Wales. College of Cardiff, UK. 1996.
3. *PHOENICS Reference Guide Version 3.6*. CHAM, London – 2004.
4. *D.B. Spalding.* Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. In 13th Symp. (Int.) on Combustion, p. 649-657, Pittsburgh, 1971. The Combustion Institute, Pittsburgh.
5. *F.L. Dryer* “The Phenomenology of modeling combustion chemistry”, p. 121-241, Fossil Fuel Combustion, Ed. W.Bartok & A.F.Sarofim, John Wiley & Sons, 1990.
6. *Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М.* Математическая теория горения и взрыва.-М.: Наука, 1980.-478с.
7. *Baulch D.L., Drysdall D.D., Horne, D.G., and Lloyd, A.C.* 1973. “Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions”. Butterworth.
8. *Williams A., Clarke A.G. and Pourkashanian M.* The mechanism of  $NO_x$  formation during combus-

tion of coal, NO<sub>x</sub> Generation and Control in Boiler and Furnace Plant Symposium, 8th September, Portsmouth, 1988.

9. Warnatz J. NO<sub>x</sub> formation in high temperature processes/ University of Stuttgart, Germany 1990.

10. De Soete G.G. 'Overall reaction rates of NO and N<sub>2</sub> formation from fuel nitrogen', 15th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute – 1975, pp. 1093-1102.

Получено 15.03.2006 г.

УДК 532.529: 662.62

РОХМАН Б. Б.

*Институт угольных энерготехнологий НАН и Минтопэнерго Украины*

## О НЕКОТОРЫХ МЕТОДАХ ТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ В ЦИРКУЛИРУЮЩЕМ КИПЯЩЕМ СЛОЕ

Пропонуються спосіб термодетактного піролізу вугілля і конструкція топкн, призначена для спалювання твердого палива в циркулюючому киплячому шарі. Розраховані геометричні та фізичні параметри зони піролізу, розташованої поблизу стінки області надшарового простору. Показано, що при подачі вугілля через частину площі поперечного перерізу кільцевої зони відбувається руйнування кластерів, що інтенсифікує процес горіння (газифікації) в ядрі потоку.

Предлагаются способ термодетактного пиролиза угля и конструкция топкн, предназначенная для сжигания твердого топлива в циркулирующем кипящем слое. Рассчитаны геометрические и физические параметры зоны пиролиза, расположенной в пристеночной области надслоевого пространства. Показано, что при подаче угля через часть площади поперечного сечения кольцевой зоны происходит разрушение кластеров, что интенсифицирует процесс горения (газификации) в ядре потока.

We offer a method of coal thermal contact pyrolysis and a design of furnace for burning firm fuel in a circulating fluidized bed. Geometrical and physical parameters of a pyrolysis zone located in the wall area of freebed are calculated. It is shown, that at submission of coal through a part of the area of cross-section of a ring zone, there occurs destruction of clusters that intensifies process of burning (gasification) in the core of a stream.

Ar, Re, Nu, Pr — критерии Архимеда, Рейнольдса, Нуссельта, Прандтля;

$A_d, V_d$  — доли золы и летучих в твердом топливе (на сухую массу);

A, B, V, I — IX — варианты расчета;

$A_{O_2}$  — скорость выгорания окислителя;

$a$  — степень черноты;

$B$  — расход твердой фазы;

$C$  — концентрация;

$c$  — теплоемкость;

$D$  — диаметр;

$E$  — энергия активации;

$\vec{F}$  — вектор силы тяжести;

$f$  — сечение;

$G$  — расход газа;

$g$  — ускорение свободного падения;

$H$  — высота;

$k$  — константа скорости реакции;

$k_0$  — предэкспоненциальный множитель;

$m$  — масса;

$P$  — давление газа;

$R$  — универсальная газовая постоянная;

$t$  — температура;

$u, w$  — составляющие вектора скорости;

$V_{daf}$  — доля летучих веществ в пересчете на сухую беззольную (горючую) массу;

$x, z$  — радиальная и аксиальная координаты;

$\alpha$  — коэффициент теплообмена;

$\beta$  — истинная объемная концентрация частиц;

$\gamma, \gamma^0$  — постоянные спада экспоненты;

$\delta$  — диаметр частицы;

$\theta$  — угол;