

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 2, Number 306 (2016), 29–34

UDC 001.891.5:536.46:662.6

NUMERICAL MODELING OF FORMATION AND DESTRUCTION OF NO_x BY TWO KINETIC MECHANISMS DURING COMBUSTION OF FOSSIL FUEL IN THE FURNACE OF CHP

A.S. Askarova, S.A. Bolegenova, S.A. Bolegenova, Maximov V.Yu., Beketayeva M.T.

Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan

E-mail: Beketayeva.m@gmail.com

Key words: NO_x concentration, environmental impact, numerical modelling, kinetic mechanism, combustion chamber

Abstract. Thermal power plants, causing the emission of harmful substances such as sulfur and nitrogen oxides in the operation are a major source of adverse impact on the environment. In this paper, using modern methods of 3D computer modeling using two global schemes of formation and destruction of harmful nitrogen compounds NO_x mass transfer processes have been studied in a real industrial furnace boiler BKZ-75. On the basis of these results and their verification it was offered the most appropriate mechanism for NO_x formation during numerical calculation of Kazakh coal combustion.

УДК 001.891.5:536.46:662.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ И РАЗЛОЖЕНИЯ NO_x ПО ДВУМ КИНЕТИЧЕСКИМ МЕХАНИЗМАМ ПРИ ГОРЕНИИ УГОЛЬНОГО ТОПЛИВА В ТОПОЧНОЙ КАМЕРЕ ТЭЦ

А.С. Аскарова, С.А. Болегенова, С.А. Болегенова, В.Ю. Максимов, М.Т. Бекетаева

Казахский национальный университет имени аль-Фараби

Ключевые слова: концентрация NO_x, влияние на окружающую среду, численное моделирование, кинетический механизм, топочная камера.

Аннотация. Тепловые электрические станции, обуславливая выбросы вредных веществ как окислы серы и азота при эксплуатации, являются одним из основных источников вредного воздействия на

окружающую среду. В настоящей работе с помощью современных методов 3D компьютерного моделирования с применением двух глобальных схем формирования и деструкции вредных азотосодержащих веществ NO_x были исследованы процессы массопереноса в реальной топочной камере промышленного котла БКЗ-75. На основе полученных результатов и их верификаций был предложен наиболее приемлемый механизм образования NO_x для проведения численных расчетов при сжигании казахстанского угля.

По результатам мирового энергетического обзора предполагается, что глобальные потребности в энергии будут только расти в течение ближайших десятилетий, при этом твердые ископаемые виды топлива будут продолжать доминировать в качестве сырья для энергетической промышленности. Использование в теплоэнергетической отрасли низкосортных топлив приводит к отрицательным последствиям, в связи с чем остаются актуальными вопросы интенсивного развития и разработки различных методов и технологий для повышения эффективности сжигания топлива [1-5].

Обеспечение экологической безопасности окружающей среды, в основе которого лежит попытка минимизировать антропогенное воздействие ТЭС на атмосферу, требует всестороннего изучения технологических процессов при эксплуатации энергетических установок. В настоящее время глубокое изучение таких сложных нелинейных процессов как горение топлива, имеющих место в топочных камерах ТЭС почти невозможно без применения вычислительных методов, так как проведение натуральных экспериментов непосредственно на ТЭЦ нуждается в финансовых и временных затратах.

Применение компьютерных технологий эффективно, когда одновременно прорабатываются несколько конструкторских решений и определяется стратегия модернизации котла или топочной камеры. Точность и адекватность ожидаемых результатов обеспечиваются правильной постановкой физико-математической и химической моделей сгорания топлива [6-9]. Для постановки правильной химической модели задачи о горении топлива и формировании окислов азота в данной работе были рассмотрены два кинетических механизма, которые наиболее широко применяются в ряде стран: модель De Soete [10] и модель Mitchell-Tarbell [11].

Выбор адекватно описывающей модели процесса производства и подавления азотосодержащих компонентов может быть полезной при проведении численных исследований с целью получения наиболее реальных данных, которые могут использоваться при оценке характера процессов горения в новых конструкторских разработках и при оптимизации сжигания пылеугольного топлива.

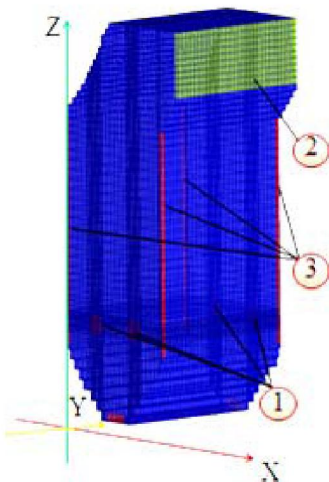


Рисунок 1 – Общий вид котла БКЗ-75 Шахтинской ТЭЦ и его дискретизация на контрольные объемы:

1-горелки, 2-область выходного сечения камеры, 3-присосы
X-ширина топки, Y-глубина топки, Z-высота топочной камеры

В предложенной работе для исследования формирования и деструкции азотистых соединений NO_x использовалась топочная камера котла БКЗ-75 (Шахтинская ТЭЦ), в котором в качестве угольного топлива сжигается карагандинский уголь, имеющий состав: С – 33.87%, H_2 – 6.63%, S –

1.92%, N_2 – 2.23%, O_2 – 9.65%, W – 10.60%, A – 35.1%, Q – 34162 кДж/кг, R_{90} – 20%. На рисунке 1 представлена дискретизация топочной камеры котла БКЗ-75 для проведения вычислительных экспериментов. Топочная камера имеет конечно-разностную сетку, которая состоит из 126 496 контрольных объемов.

Численное исследование процессов массопереноса концентрации NO_x основано на решении трехмерных уравнений конвективного теплопереноса с учетом конвективного и радиационного теплообмена, химической кинетики и двухфазности среды. Эти нелинейные уравнения состоят из закона сохранения массы и импульса (уравнение Навье-Стокса), закона сохранения энергии и вещества [12-15].

Для формирования окислов азота NO_x в качестве ключевой реакции кинетическая схема по модели De Soete использует механизм, где 90% оксидов азота NO формируются через синильную кислоту HCN , также модель учитывает влияние атомарного азота N .

Первая схема формирования оксидов азота NO по модели De Soete базируется на синильную кислоту HCN :

$$\frac{dY_{NO}}{dt} = 1 \cdot 10^{10} Y_{HCN}^4 Y_{O_2}^b \exp(-33700/T) \quad (1)$$

$$\frac{dY_{N_2}}{dt} = 3 \cdot 10^{12} Y_{HCN} Y_{NO}^b \exp(-30100/T)$$

Вторая схема формирования оксидов азота NO учитывает аммиак NH_3 :

$$\frac{dY_{NO}}{dt} = 4 \cdot 10^6 Y_{NH_3} Y_{O_2}^b \exp(-16100/T) \quad (2)$$

$$\frac{dY_{N_2}}{dt} = 1.8 \cdot 10^8 Y_{NH_3} Y_{NO}^b \exp(-13600/T)$$

В модели Mitchell-Tarbell образование оксидов азота NO происходит при окислении азота связанного с топливом. Кинетическая схема учитывает реакции первичного пиролиза, гомогенного горения углеводородистых соединений, гетерогенного горения кокса и образование термических и топливных азотистых соединений. Конечными азотными центрами в модели считаются подсистемы CN (HCN , CN и др.).

Модель Mitchell-Tarbell предлагает первую стадию реакции в преобразовании синильной кислоты HCN в аммиак NH_3 :

$$\frac{dY_{HCN}}{dt} = -1.94 \cdot 10^{15} Y_{HCN} Y_{O_2} \exp(-39500/T) \quad (3)$$

А образовавшийся аммиак NH_3 формирует и разрушает оксид азота NO в двух параллельных реакциях:

$$\frac{dY_{NO}}{dt} = \frac{3.48 \cdot 10^{20} Y_{NH_3} Y_{O_2} \exp(-50325/T)}{1 + 6.90 \cdot 10^{-6} \exp(21140/T)} \quad (4)$$

$$\frac{dY_{NH_3}}{dt} = -6.22 \cdot 10^{14} Y_{NH_3} Y_{NO} \exp(-27680/T)$$

Также в модели Mitchell-Tarbell учитывается рециркуляция оксидов азота NO назад в синильную кислоту HCN при взаимодействии с углеводородами:

$$\frac{dY_{NO}}{dt} = -1.0 \cdot 10^4 Y_{NO} Y_{CxHy} \quad (5)$$

Ниже представлены результаты вычислительных экспериментов по формированию и деструкции оксидов азота NO_x по двум моделям формирования NO_x модель Mitchell-Tarbell (MT) и модель De Soete (DS).

На рисунках 2-3 представлены трехмерные поля концентраций оксидов азота NO_x , из анализа которых можно сказать, что распределения концентраций NO_x для двух указанных моделей отличаются. Это обусловлено тем, что в модели De Soete расчет формирования NO_x производится в основном по идеализированной кинетической схеме химических реакций при горении высококачественных углей, в то время как в модели Mitchell-Tarbell кинетическая схема основывается на химических реакциях в нескольких этапах включающие в себя первичный

пиролиз, горение летучих компонентов и углеводородов CH_4 и горение коксового остатка, которые учитываются при горении низкокачественных углей.

На рисунке 3 показаны трехмерные распределения концентрации оксидов азота NO_x на выходе из топочной камеры по двум моделям формирования и деструкции NO_x . Понижение концентрации оксидов азота обусловлено слабыми химическими взаимодействиями. Разность в средних значениях концентраций оксидов азота NO_x по указанным моделям составляет ~25%.

На рисунке 4 представлена верификация средних значений концентраций оксидов азота NO_x по моделям Mitchell-Tarbell и De Soete со значениями концентраций оксидов азота NO_x , полученными непосредственно на ТЭЦ [16], а также со значением ПДК [17] для углесжигающих ТЭС. Анализируя данные, можно заметить, что экспериментальные точки и значение ПДК (640 мг/м^3) ближе к значениям, которые были получены при использовании модели Mitchell-Tarbell, в то время как для второго случая (модель De Soete) значения явно занижены.

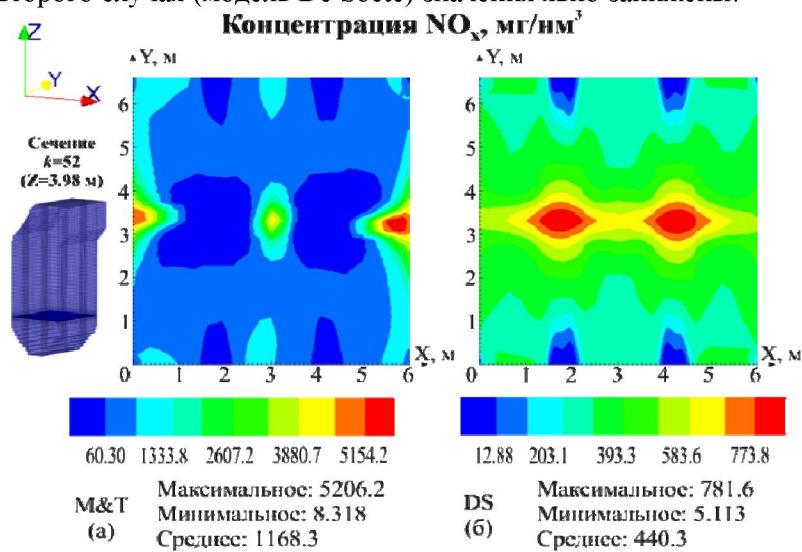


Рисунок 2 – Распределение концентрации оксидов азота NO_x в области расположения горелочных устройств топочной камеры котла БКЗ-75

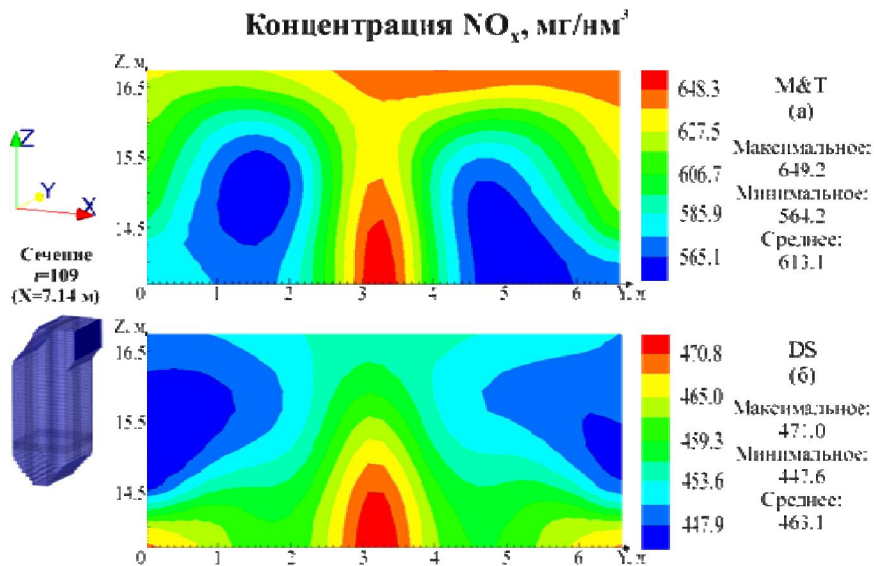


Рисунок 3 – Распределение концентрации оксидов азота NO_x на выходе из топочной камеры котла БКЗ-75

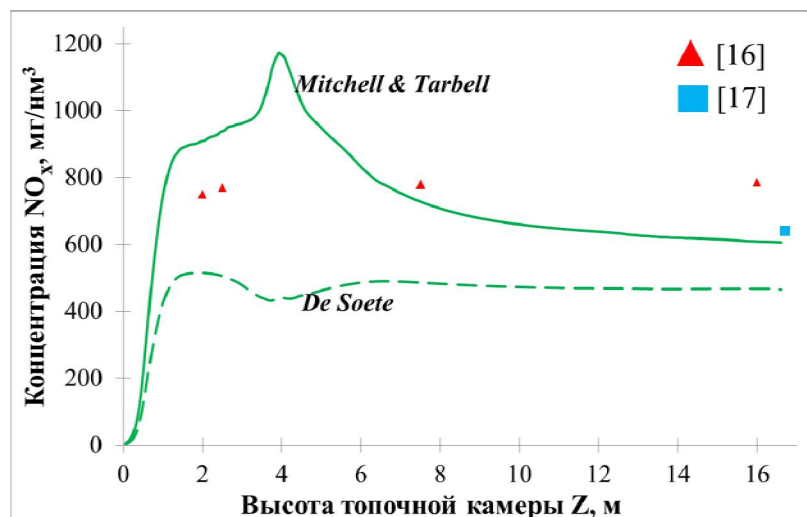


Рисунок 4 – Распределения средних значений концентрации оксидов азота NO_x по высоте топки котла БКЗ-75 для двух моделей и ее верификация

Таким образом, при проведении вычислительных экспериментов по сжиганию казахстанских углей высокой зольности (30-50%) можно говорить об адекватности результатов при использовании модели Mitchell-Tarbell. Однако можно отметить, что для получения в кратчайший срок данных о процессах массообмена азотистых веществ пригодна модель De Soete, ее применение может значительно ускорить численный расчет, уменьшить вычислительные и временные ресурсы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Askarova A.S., Messerle V.E., Ustimenko A.B. etc. Numerical Simulation of Pulverized Coal Combustion in a Power Boiler Furnace // High Temperature. 2015. V. 53. № 3. P. 445.
- [2] Messerle V.E., Ustimenko A.B., Maximov Yu.V. etc. Numerical Simulation of the Coal Combustion Process Initiated by a Plasma Source // Journal of Thermophysics and Aeromechanics. 2014. V. 21. Iss. 6. P. 747.
- [3] Belosevic S., Tomanovic I., Beljanski V. Numerical prediction of processes for clean and efficient combustion of pulverized coal in power plants // Applied thermal engineering. 2015. T. 74. P. 102.
- [4] Safarik P., Maximov V., Beketayeva M.T. et al. Numerical Modeling of Pulverized Coal Combustion at Thermal Power Plant Boilers // Journal of Thermal Science. 2015. V. 24. Iss. 3. P. 275.
- [5] Кавтарадзе П.З., Сергеев С.С. Новый альтернативный (частично-гомогенный) процесс сгорания как способ снижения концентраций оксидов азота и сажи в продуктах сгорания дизеля // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 2. С. 294.
- [6] Askarova A.S., Karpenko E.I., Messerle V.E. et al. Plasma enhancement of combustion of solid fuels // Journal of High Energy Chemistry, 2006. V. 40. Iss. 2. P.111.
- [7] Lavrishcheva Ye.I., Karpenko E.I., Ustimenko A.B. etc. Plasma-supported coal combustion in boiler furnace // IEEE Transactions on Plasma Science, 2007. V. 35. Iss. 6. P.1607.
- [8] Ustimenko A.B., Askarova A.S., Messerle V.E., Nagibin A. Pulverized coal torch combustion in a furnace with plasma-coal system // Journal of Thermophysics and Aeromechanics, 2010. V. 7. Iss. 3. P. 435.
- [9] Bolegenova S.A., Beketayeva M.T., Gabitova Z. etc. Computational Method for Investigation of Solid Fuel Combustion in Combustion Chambers of a Heat Power Plant // High Temperature. 2015. V. 53. № 5. P. 751.
- [10] De Soete G.G. Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen // 15th international symposium on combustion. – Pittsburgh, 1975. P. 1093.
- [11] Mitchell J.W., Tarbell J.M. A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion // AIChE Journal. 1982. V. 28. P. 302.
- [12] Müller H. Numerische simulation von Feuerungen. CFD-Vorlesung. TU. – Braunschweig: IWBT, 1997. 812 s.
- [13] Pauker W. Creating data sets for Florean using the tool PREPROZ. TU. – Braunschweig: IWBT, 1997. 324 s.
- [14] Roache P.J. Computational fluid dynamics. – Albuquerque: Hermosa Press, 1985. 283 p.
- [15] Leithner R. Numerical Simulation. Computational Fluid Dynamics CFD: Course of Lecture. – Braunschweig, 2006. 52 p.
- [16] Алияров Б.К., Алиярова М.Б. Сжигание казахстанских углей на ТЭС и на крупных котельных: опыт и перспективы. – Алматы, 2011. 306 с.
- [17] РНД 34.02.303-91 Отраслевая инструкция по нормированию вредных выбросов в атмосферу для тепловых электростанций и котельных. – Астана, 2005. 36 с.

REFERENCES

- [1] Askarova A.S., Messerle V.E., Ustimenko A.B. etc. Numerical Simulation of Pulverized Coal Combustion in a Power Boiler Furnace. *High Temperature*, **2015**, 53(3), 445-452 (in Eng.).
- [2] Messerle V.E., Ustimenko A.B., Maximov Yu.V. etc. Numerical Simulation of the Coal Combustion Process Initiated by a Plasma Source. *Journal of Thermophysics and Aeromechanics*, **2014**, 21(6), 747-754 (in Eng.).
- [3] Belosevic S., Tomanovic I., Beljanski V. Numerical prediction of processes for clean and efficient combustion of pulverized coal in power plants. *Applied thermal engineering*, **2015**, 74, 102-110 (in Eng.).
- [4] Safarik P., Maximov V., Beketayeva M.T. et al. Numerical Modeling of Pulverized Coal Combustion at Thermal Power Plant Boilers. *Journal of Thermal Science*, **2015**, 24(3), 275-282 (in Eng.).
- [5] Кавтарадзе Р.З., Сергеев С.С. Новый альтернативный (частично-гомогенный) процесс сгорания как способ снижения концентраций оксидов азота и сажи в продуктах сгорания дизеля. *Теплофизика высоких температур*, **2014**, 52(2), 282-296 (in Russ.).
- [6] Askarova A.S., Karpenko E.I., Messerle V.E. et al. Plasma enhancement of combustion of solid fuels. *Journal of High Energy Chemistry*, **2006**, 40(2), 111-118 (in Eng.).
- [7] Lavrishcheva Ye.I., Karpenko E.I., Ustimenko A.B. etc. Plasma-supported coal combustion in boiler furnace. *IEEE Transactions on Plasma Science*, **2007**, 35(6), 1607-1616 (in Eng.).
- [8] Ustimenko A.B., Askarova A.S., Messerle V.E., Nagibin A. Pulverized coal torch combustion in a furnace with plasma-coal system. *Journal of Thermophysics and Aeromechanics*, **2010**, 7(3), 435-444 (in Eng.).
- [9] Bolegenova S.A., Beketayeva M.T., Gabitova Z. etc. Computational Method for Investigation of Solid Fuel Combustion in Combustion Chambers of a Heat Power Plant. *High Temperature*, **2015**, 53(5), 751-757 (in Eng.).
- [10] De Soete G.G. Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen. 15th international symposium on combustion. Pittsburgh, **1975**, 1093-1102 (in Eng.).
- [11] Mitchell J.W., Tarbell J.M. A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion. *AIChE Journal*, **1982**, (28), 302-320 (in Eng.).
- [12] Müller H. Numerische simulation von Feuerungen. CFD-Vorlesung. TU. Braunschweig: IWBT, **1997**. 812 s. (in Ger.).
- [13] Pauker W. Creating data sets for Florean using the tool PREPROZ. TU. Braunschweig: IWBT, **1997**. 324 s. (in Ger.).
- [14] Roache P.J. Computational fluid dynamics. Albuquerque: Hermosa Press, **1985**. 283 p. (in Eng.).
- [15] Leithner R. Numerical Simulation. Computational Fluid Dynamics CFD: Course of Lecture. Braunschweig, **2006**. 52 p. (in Eng.).
- [16] Aliarov B.K., Aliarova M.B. Szhiganie kazhstanskikh uglei na TEC i na krupnih kotelnih: opit i perspektivi. Алматы, **2011**. 306 с. (in Kaz.).
- [17] RND 34.02.303-91 Otraselevaya instruktsiya po normirovaniyu vrednykh vybrosov v atmosferu dlya teplovykh elektrostantsiy i kotel'nykh. Астана, **2005**. 36 с. (in Kaz.).

ЖЭС ЖАНУ КАМЕРАСЫНДА КӨМІРДІҢ ЖАНУЫ КЕЗІНДЕ NO_x ТҮЗІЛУІ МЕН ЖОЙЫЛУЫН ЕКІ КИНЕТИКАЛЫҚ МЕХАНИЗМ БОЙЫНША САНДЫҚ МОДЕЛДЕУ

Ә.С. Асқарова, С.Ә. Бөлегенова, С.Ә. Бөлегенова, В.Ю. Максимов, М.Т. Бекетаева

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті

Түйін сөздер: NO_x концентрациясы, қоршаған ортаға әсері, сандық моделдеу, кинетикалық механизм, жану камерасы.

Аннотация. Жылу электр станциялары қолданыс кезінде күкірт пен азот тотықтарының шығырларын бөле отырып қоршаған ортаға зиянды әсер етуші көздердің негізгілерінің бірі болып саналады. Ұсынылған жұмыста замануи 3D компьютерлік моделдеудің көмегімен зиянды азот тотықтарының NO_x түзілуі мен жойылуының екі глобалды мехнизмін пайдалана отырып, реалды өндірістік БҚЗ-75 қазандығының жану камерасында орын алатын массаалмасу процестері зерттелді. Алынған нәтижелер мен олардың верификациялануына сүйене отырып, қазақстандық көмірдің жануы бойынша сандық есептеулер жүргізу кезіндегі NO_x концентрацияларының түзілуінің ең дұрыс механизмі ұсынылды.

Поступила 15.03.2016 г.