

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА В ПЫЛЕУГОЛЬНЫХ ТОПКАХ ПРИ СЖИГАНИИ ОРГАНИЧЕСКОГО ТОПЛИВА

Н.В. Визгавлюст

Томский политехнический университет

E-mail: vizgavljust@tpu.ru

Выполнено тестирование различных кинетических схем образования оксидов азота, используемых при численном моделировании топочной среды применительно к сжиганию угольной пыли на основе одномерных и трехмерных математических моделей аэродинамики, горения и теплообмена.

Ключевые слова:

Паровой котел, математическое моделирование, кинетическая схема, оксиды азота, распределение температур.

Key words:

Steam boiler, mathematical modeling, kinetic scheme, nitrogen oxides, the temperature distribution.

Одной из наиболее актуальных проблем современности является защита атмосферного воздуха, необходимость которой инициирована несовершенной хозяйственной деятельностью человека. Несмотря на то, что на долю природных источников загрязнения воздуха приходится свыше 50 % соединений серы, 93 % оксидов азота, все же наибольшую опасность создают искусственные антропогенные источники загрязнения воздуха, в первую очередь, связанные с процессами сжигания топлива. К основным, постоянно действующим источникам загрязнения воздушного бассейна относятся угольные тепловые электростанции и промышленные топливосжигающие установки, поставляющие в атмосферу в больших количествах кроме оксидов серы и оксидов азота (NO и NO₂), твердые частицы (зола, пыль, сажа), а также оксиды углерода, альдегиды, органические кислоты [1]. Поэтому прогнозирование образования вредных веществ при сжигании натурального топлива в котлоагрегатах тепловых электростанций остается одной из актуальных задач для энергетики. Получение сведений, необходимых для оценки проводящих мероприятий по реконструкции или тестированию наладочных работ путем промышленных испытаний или физического моделирования процессов, имеет существенные ограничения из-за большой трудоемкости и высокой стоимости. В такой ситуации одним из выходов является применение методов математического моделирования, в частности, моделей образования оксидов азота.

Для проведения параметрических расчетов с целью анализа образования оксидов азота при сжигании пылеугольного топлива в топках котельных агрегатов целесообразно использовать сокращенные кинетические схемы, обеспечивающие предсказание концентраций NO_x в камере сгорания с требуемой точностью и отличающихся небольшими требованиями к вычислительным ресурсам компьютера. Кроме кинетической схемы модель генерации оксидов азота при факельном сжигании угольной пыли должна быть обеспечена информацией о протекании процессов выхода

и горения летучих веществ топлива, догорания коксового остатка, учитывать неизотермичность, турбулентную диффузию и перенос компонентов топочной среды. Этим требованиям удовлетворяют несколько моделей [2–5], принятых к рассмотрению в данной работе.

Математическая модель, разработанная Дж.В. Митчеллом и Дж.М. Тэрбеллом (назовем ее модель I) [2], удобна в использовании, т. к. включает только 13 реакций (сюда входят реакции догорания коксового остатка и выхода и горения летучих) и соответствует современному представлению о химических процессах, ведущих к образованию оксидов азота при сжигании пылеугольного топлива [1, 6]. Реакции учитывают пиролиз угля, гомогенное горение углеводородов, гетерогенное горение кокса, образование топливных и термических NO_x. Кинетическая схема образования оксидов азота описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho C_{\text{HCN}} u_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_i}{Sc_i} \frac{\partial C_{\text{HCN}}}{\partial x_i} \right) + J_1 - J_3 + \frac{M_{\text{HCN}}}{M_{\text{NO}}} J_6, \\ \frac{\partial \rho C_{\text{NH}_3} u_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_i}{Sc_i} \frac{\partial C_{\text{NH}_3}}{\partial x_i} \right) + J_1 - J_3 + \frac{M_{\text{NH}_3}}{M_{\text{HCN}}} J_3, \\ \frac{\partial \rho C_{\text{NO}} u_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_i}{Sc_i} \frac{\partial C_{\text{NO}}}{\partial x_i} \right) + \\ &+ J_2 + \frac{M_{\text{NO}}}{M_{\text{NH}_3}} J_4 - \frac{M_{\text{NO}}}{M_{\text{NH}_3}} J_5 + J_8 - J_6 - J_7, \end{aligned}$$

где C_{NH_3} – массовая концентрация NH₃; C_{HCN} – массовая концентрация цианидов HCN; C_{NO} – массовая концентрация оксидов азота NO; M_{HCN} , M_{NO} , M_{NH_3} – молекулярные веса компонентов; J_1 – скорость химической реакции образования HCN при термическом разложении топлива и выхода летучих; J_2 – скорость реакции горения кокса; J_3 , J_4 , J_5 , J_6 – скорости химических реакций, сопровождающих образование оксидов азота; J_7 – скорость гетерогенной реакции конверсии оксидов азота в результате их взаимодействия с углеродом топли-

ва; J_8 – скорость образования термических оксидов; μ_i , Sc_i – турбулентная вязкость и число Шмидта; u_i – компонента вектора скорости.

В модели, разработанной И.Н. Гусевым, Л.И. Зайчиком и Н.Ю. Кудрявцевым (модель II) [3], предполагается, что все топливные оксиды азота образуются из азота, перешедшего вместе с летучими в газовую фазу, а ролью связанного азота в коксовом остатке пренебрегают. Образование топливных NO рассчитывается в предположении, что во время выхода и горения летучих происходит разложение азотсодержащих компонентов топлива до активного атомарного азота N или цианида водорода HCN. Далее считается, что процесс протекает по двум ветвям: окисление азота до оксида азота и образование молекулярного азота вследствие рекомбинации атомарного азота $2N \rightarrow N_2$ или в результате восстановления окиси азота. Расчетная схема генерации оксидов азота, основанная на упрощенных брутто-реакциях, выглядит следующим образом [3]:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{N_2}}{dt} &= 0,53 \cdot 10^8 \exp\left(-\frac{1000}{T_g}\right) \frac{C_N}{T_g}, \\ \frac{dC_{N\tau}}{dt} &= \left(\frac{1}{2} + \frac{\arctg(22,2V^p - 4,7)}{\pi}\right) \times \\ &\quad \times 1500 \exp\left(-\frac{4500}{T_p}\right) (C_{N_0} - C_{N\tau}), \\ \frac{dC_{NO}}{dt} &= 0,175 \cdot 10^{14} \exp\left(-\frac{3000}{T_g}\right) C_N \left(\frac{r_{O_2}}{T_g}\right)^2 + \\ &\quad + 7,75 \left(-\frac{67790}{T_g}\right) \cdot 0,79 \left(\frac{r_{O_2}}{T_g}\right)^{1/2}, \end{aligned}$$

где C_N , C_{N_2} , C_{N_0} – массовые концентрации в газовой фазе топливных азотсодержащих веществ в виде атомарного азота (обобщенное название для NH_3 , HCN), молекулярного азота и оксида азота; $C_{N\tau_0}$, C_{N_0} – полные текущая и конечная массовые концентрации выходящих из топлива азотсодержащих веществ; r_{O_2} – объемная концентрация кислорода; V^p – содержание летучих в топливе; T_g , T_p – температуры газа и частиц топлива.

Модель И.К. Гуо и С.К. Чана (модель III) [4] представляет собой многожидкостную модель турбулентного двухфазного течения и горения распыленного угля. Двухжидкостная модель для турбулентных реагирующих двухфазных течений с горящими распыленными угольными частицами была разработана путем добавки модифицированной « $k-\varepsilon$ » модели, обобщенной модели выхода летучих и горения кокса. Уравнения горения как для газофазных, так и для твердых частиц записываются на основе эйлерового подхода и решаются численным методом конечных разностей. Модель учитывает два механизма образования NO_x : термический (по схеме Зельдовича) и топливный (описывается

сокращенной кинетической схемой [1], в которой в явном виде рассматриваются цианиды, NO и NO_2).

Уравнения модели III:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_j C_{HCN})}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_i}{Sc_i} \frac{\partial C_{HCN}}{\partial x_j} \right) + W_{HCN}, \\ \frac{\partial(\rho u_j C_{NO})}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_m}{Sc_i} \frac{\partial C_{NO}}{\partial x_j} \right) + W_{NO}, \\ W_{HCN} &= (W_0 - W_1 - W_2) M_{HCN}, \\ W_{NO} &= (W_1 - W_2 - W_3) M_{NO} + W_4, \end{aligned}$$

где C – массовые концентрации; W_0 – скорость генерации цианидов во время выходы летучих; W_1 – скорость генерации оксидов азота из цианидов HCN в окислительной среде; W_2 – скорость деструкции оксидов азота за счет их взаимодействия с цианидами с образованием молекулярного азота; W_3 – скорость деструкции оксидов азота за счет их взаимодействия с углеродом топливных частиц; W_4 – скорость образования «термических» оксидов азота.

Модель, предложенная М. Ксю, М.Г. Карвало (модель IV) [5], основывается на расширении механизма Де Соэте [7] и опирается на решение уравнений переноса для NO_x и его предвестников (HCN и NH_3). Предполагается, что вместе с летучими выходит до 90 % HCN. Так же учитывается образование термических NO, генерация и поглощение NO_x при горении углерода угля. Допускается, что азот в топливной частице однородно распределен между коксом и летучими. Кинетическая скорость реакции дожигания представляет скорость суммарной реакции между легкими углеводородами и NO_x . Модель выхода летучих представляет полный процесс их генерации в результате протекания двух конкурирующих реакций первого порядка. Уравнения модели IV имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_j C_{NH_3})}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_m}{Sc_i} \frac{\partial C_{NH_3}}{\partial x_j} \right) + S_{0,NH_3}; \\ \frac{\partial(\rho u_j C_{HCN})}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_m}{Sc_i} \frac{\partial C_{HCN}}{\partial x_j} \right) + S_{0,HCN}; \\ \frac{\partial(\rho u_j C_{NO})}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_m}{Sc_i} \frac{\partial C_{NO}}{\partial x_j} \right) + \\ &\quad + S_{1,NO} + S_{2,NO} - S_{3,NO} - S_{4,NO} - S_{5,NO} + S_{6,NO}, \end{aligned}$$

где S_{0,NH_3} , $S_{0,HCN}$ – скорость генерации аминов и цианидов в процессе выхода летучих веществ; $S_{1,NO}$ – скорость образования NO в результате сжигания цианидов; $S_{2,NO}$ – скорость образования NO в результате сжигания аминов; $S_{3,NO}$ – скорость деструкции NO в результате взаимодействия с цианидами с образованием молекулярного азота; $S_{4,NO}$ – скорость деструкции NO в результате взаи-

модействия с аминами с образованием молекулярного азота; $S_{3,NO}$ – скорость деструкции NO в результате их взаимодействия с углеродом кокса; $S_{6,NO}$ – скорость образования NO из топливного азота при горении коксового остатка.

В данной работе рассматривается образование оксидов азота как с помощью одномерных, так и трехмерных газодинамических моделей расчетов аэродинамики, горения и теплообмена в топочных устройствах.

Для входных границ используются однородные распределения для всех характеристик. На выходных границах ставятся мягкие граничные условия, при чем положение выходных границ в этом случае должно быть достаточно удалено от зон возможной рециркуляции потока. В качестве граничных условий на стенках канала использовались условия прилипания для скорости, граничные условия первого рода для температуры газа, равенство нулю производной по нормали для параметров дисперсной фазы и концентраций компонентов газа, а также метод пристеночных функций для определения трения на стенках газового канала, конвективной составляющей теплового потока, значений энергии турбулентности и скорости ее диссипации в пределах области [8].

Исследование образования «топливных» оксидов азота при горении пыли кузнецких углей марки 2СС проводилось при совместном анализе одномерных математических моделей I, II с данными экспериментального исследования [9]. При сравнении изучалось влияние значений температуры и содержания кислорода в газах на уровень концентрации NO_x (рис. 1).

На рис. 1, а, показаны расчетные кривые и опытные точки эксперимента [9], представляющие зависимость концентрации оксидов азота от концентрации молекулярного кислорода в одномерном потоке. Видно, что уменьшение концентрации кислорода в несущем потоке приводит к резкому снижению образования NO_x и уменьшению конечного выхода оксидов азота. На рис. 1, б,

показаны расчетные кривые и опытные точки эксперимента [9], представляющие зависимость концентрации оксидов азота от температуры двухфазной смеси. Из рис. 1 видно, что уменьшение температуры потока аэросмеси приводит к снижению образования NO_x , причем при низких температурах оксиды азота генерируются в основном из азота топлива. Представленные на рис. 1 кривые имеют S-образный вид, что является характерным для многих кинетических процессов.

Как из расчетных, так и из экспериментальных данных (рис. 1) следует, что основное образование оксидов азота происходит при выходе летучих из угля. При очень низких температурах (менее 900 К) летучие не воспламеняются, и топливные оксиды азота почти не образуются.

Таким образом, проведенное сравнение показывает удовлетворительное соответствие рассмотренных кинетических схем при описании образования оксидов азота при сжигании пылевидного топлива. Однако модель I по сравнению с моделью II дает более полную информацию о процессе образования NO_x , поскольку представляет возможность рассчитывать локальные концентрации аминов и цианидов в камере сгорания.

Исследование образования оксидов азота при горении угольной пыли в промышленных камерах сгорания проводилось применительно к топке парового котла БКЗ-220–100ЖШ при использовании трехмерных моделей I–IV. Расчеты распределения концентрации оксидов азота выполнялись с использованием аэротермодинамических и температурных полей, полученных с помощью пакета FIRE 3D [10].

На рис. 2 представлен типичный для всех моделей (I–IV) характер распределения концентрации NO_x в вертикальном сечении топki, проходящем между прямооточными горелками. Область максимальных значений температур (до 1900 К) находится в противоположной от горелок части топочной камеры. На выходе из топki температура имеет значение 1250 К.

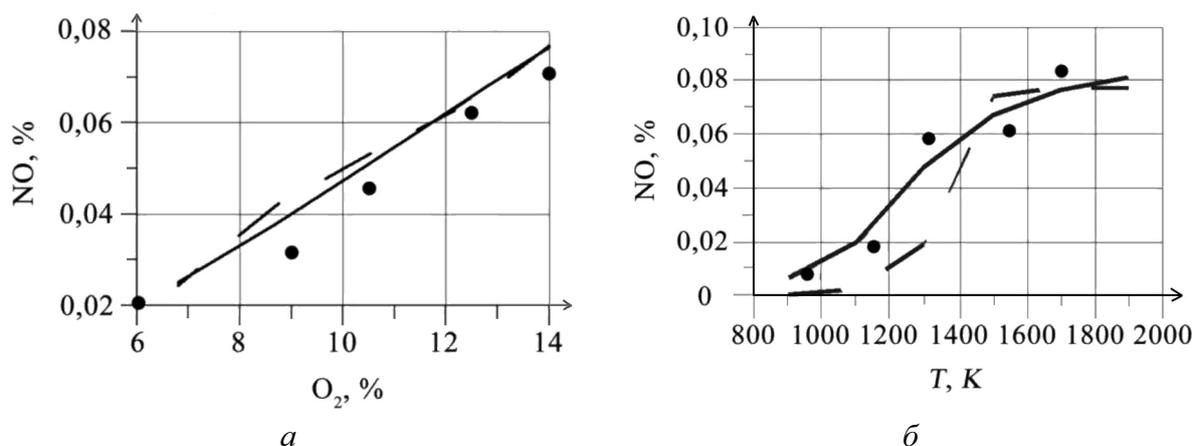


Рис. 1. Зависимость концентрации образования NO от: а) концентрации молекулярного кислорода; б) начальной температуры потока, - - - модель I, — - модель II, • - измерения [9]

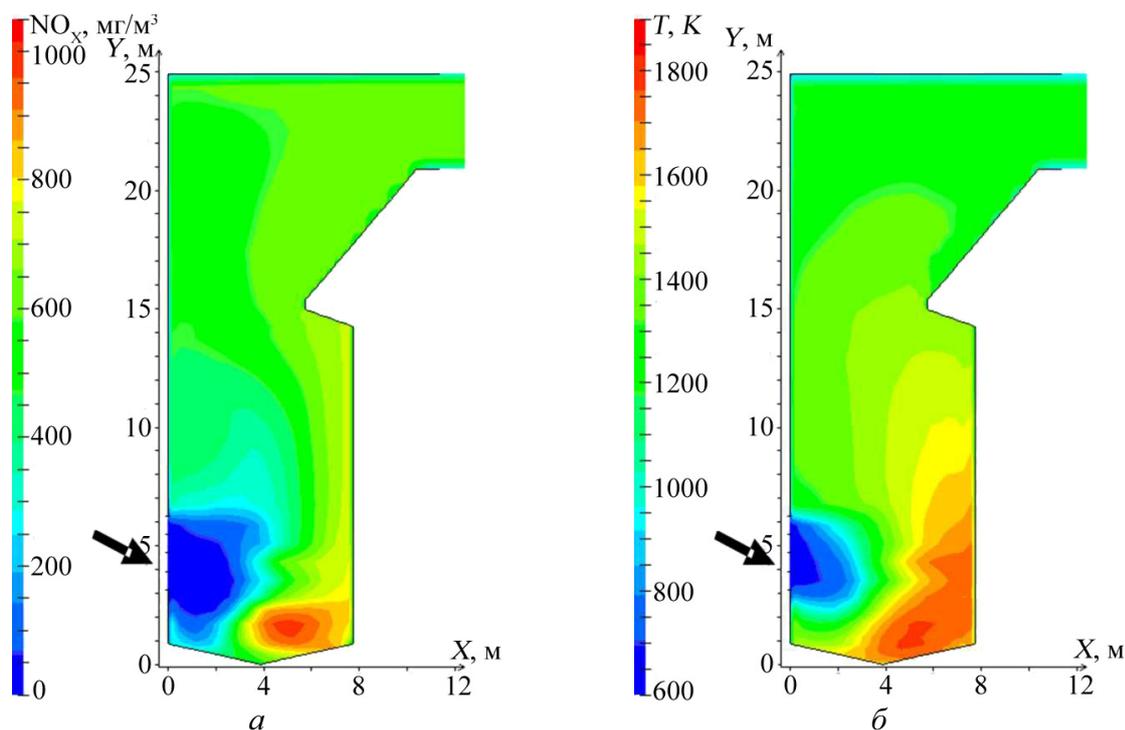


Рис. 2. Распределение в вертикальном сечении топки котла БКЗ-220–100ЖШ при избытке воздуха 1,2: а) массовые концентрации NO_x ; б) температуры. Стрелка указывает положение горелок и направление подачи аэросмеси

На рис. 3 показано полученное численно распределение значений осредненных в горизонтальных сечениях концентраций оксидов азота по высоте топочной камеры. Как видно из рис. 3, максимальное количество оксидов азота NO_x образуется в верхней и нижней части зоны активного горения, характеризующейся повышенными значениями температуры двухфазного потока. На участке от 10 до 25 м по высоте топки, где горение уже завершено, концентрация NO_x меняется слабо.

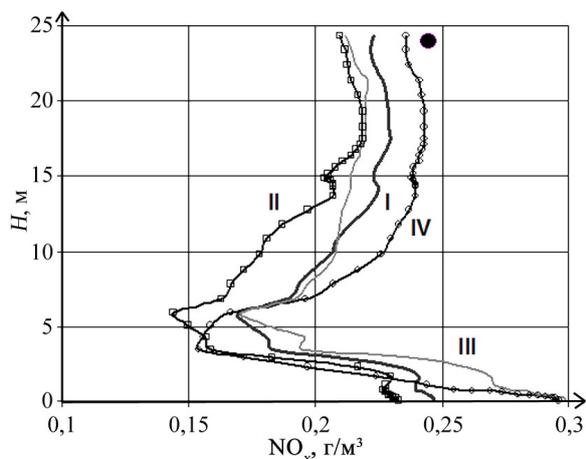


Рис. 3. Образование оксидов азота по высоте топки H при избытке воздуха 1,2, • – расчет по нормативному методу [3]

Результаты расчетов по моделям (I–IV) образования топливных NO , вполне удовлетворительно

согласуются как между собой, так и с расчетными данными по [3].

Для дальнейшего исследования и прогнозирования образования оксидов азота при горении угольной пыли в топках котлов в работе отдается предпочтение модели I, т. к. модель II не учитывает образование «термических» NO ; III – не удобна в использовании из-за значительных затрат времени для проведения вычислений и программирования (большее число рассматриваемых реакций образования NO_x); IV – учитывает образование как термических, так и топливных оксидов азота, но рассматривает процесс горения только при идеальных условиях теплообмена и аэродинамики.

Исследование образования оксидов азота при горении угольной пыли в топке котла ПК-39, сжигающей каменный экибастузский уголь, выполнено с помощью модели I.

На рис. 4 представлено распределение средней в горизонтальных сечениях концентрации оксидов азота, кислорода и температуры факела по высоте топочной камеры.

Как видно из рис. 4, распределение характеристик по высоте топочной камеры, указывает, что процессы горения топлива завершаются на высоте 15 м. Процесс образования оксидов азота идет в сравнительно не большой зоне, расположенной выше уровня горелочного пояса. Из-за относительного низкого уровня температур в топочной камере NO_x образуются из азота топлива, при дальнейшем повышении температуры увеличится доля «термических» NO_x . На выходе из топочной камеры наблю-

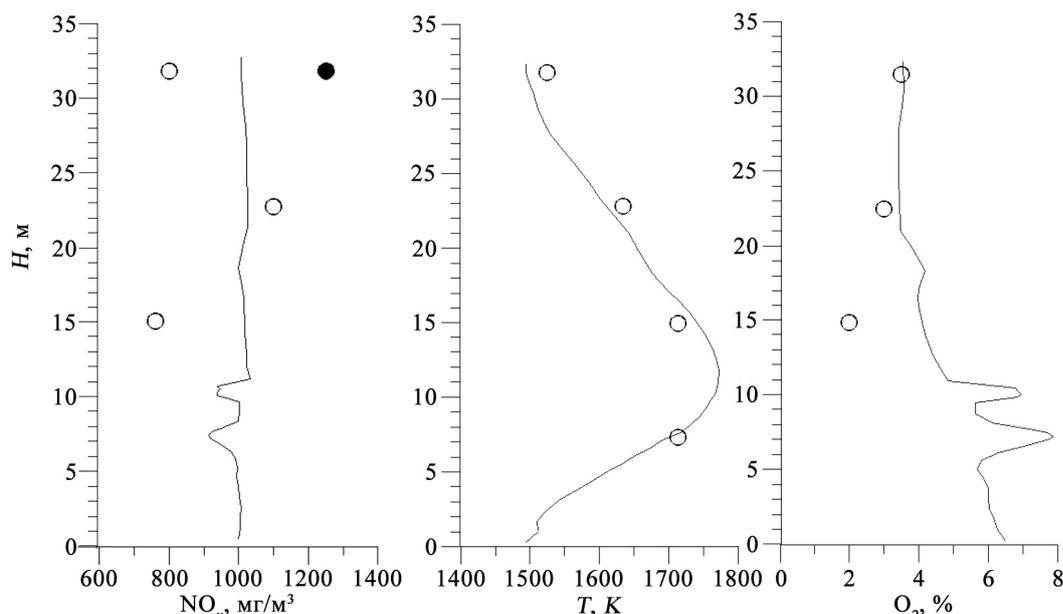


Рис. 4. Распределение концентрации оксидов азота, температуры факела и средней в горизонтальных сечениях концентрации кислорода по высоте топочной камеры котла ПК-39-2 Ермаковской ГРЭС: \circ – данные измерений для котла ПК-39-2 [11]; \bullet – Федеральные нормы ПДВ для котлов с твердым шлакоудалением, $\text{мг}/\text{м}^3$ [1]; — – расчет на основе модели I

даются концентрации NO_x , не превышающие Федеральные нормы предельно допустимых выбросов [1].

Результаты тестирования разработанных моделей и метода решения как для одномерных, так и для трехмерных расчетов пылеугольных топок котлов БКЗ-220–100 (жидкое шлакоудаление, назаровский уголь) и ПК-39 (твердое шлакоудаление, экибастузский уголь) показали хорошее соответствие расчетов с данными измерений и оценок по методике расчета [3].

Кинетическая схема Митчелла–Тербелла (модель I) [2] была создана для расчета концентрации

NO_x в точке или в одномерном потоке. В данной работе эта модель была впервые распространена для трехмерных топочных потоков с учетом зависимости конвективно-диффузионного переноса NO_x и других химических компонентов кинетической схемы от конвекции и турбулентной диффузии [12].

Применение разработанной модели образования NO при горении угля по модели I [2] позволит оптимизировать процесс сжигания пылевидного топлива в котлоагрегатах тепловых электрических станций для повышения эффективности выгорания топлива и уменьшения выбросов NO_x .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Котлер В.Р. Оксиды азота в дымовых газах котлов – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 144 с.
2. Mitchell J.W., Tarbell J.M. A kinetic model of nitric oxide formation during coal combustion // American Institute of Chemical Engineers Journal. – 1982. – V. 28. – № 2. – P. 302–310.
3. Гусев И.Н., Зайчик Л.И., Кудрявцев Н.Ю. Моделирование образования оксидов азота в топочных камерах // Теплоэнергетика. – 1993. – № 1. – С. 32–36.
4. Guo Y.C., Chan C.K. A multi-fluid model for simulating turbulent gas-particle flow and pulverized coal combustion // Fuel. – 2000. – № 79. – P. 1467–1476.
5. Xu M., Azevedo J.L.T., Carvalho M.G. Modeling of the combustion process and NO_x emission in a utility boiler // Fuel. – 2000. – № 79. – P. 1611–1619.
6. Безгрешнов А.Н., Липов Ю.М., Шлейфер Б.М. Расчет паровых котлов. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 240 с.
7. De Soete G.G. Overall Reaction Rates of NO and N, Formation From Fuel Nitrogen // Proc. XV Intern. Symp. on Combustion. – Pittsburgh: Combustion Institute, 1975. – P. 1093–1102.
8. Старченко А.В. Математическое моделирование образование оксидов азота при горении пылеугольного топлива // Физика горения и взрыва. – 1998. – Т. 34. – № 6. – С. 3–13.
9. Титов С.П., Бабий В.И., Барбараш В.М. Исследование образования NO_x при горении пыли каменных углей // Теплоэнергетика. – 1980. – № 3. – С. 64–67.
10. Заворин А.С., Красильников С.В., Старченко А.В. Программный комплекс для расчета и визуализации трехмерных реагирующих турбулентных течений в топках котлов // Проблемы использования канско-ачинских углей на электростанциях: Матер. Всеросс. научно-практ. конф. – Красноярск: СибВТИ, 2000. – С. 369–371.
11. Визгавлюст Н.В., Старченко А.В. Расчет образования оксидов азота при сжигании пылеугольного топлива в топочной камере котла ПК-39-2 Ермаковской ГРЭС // Современные техника и технологии: Труды XIV Межд. научно-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых в 3-х томах. – Томск: Изд-во ТПУ, 2008. – С. 345–348.
12. Старченко А.В., Иванова Н.В. Моделирование образования оксидов азота в процессах сжигания пылевидного топлива // Ползуновский вестник. – 2004. – № 1. – Т. 1. – С. 163–167.

Поступила 13.09.2010 г.