

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА В ПРОЦЕССАХ СЖИГАНИЯ ПЫЛЕВИДНОГО ТОПЛИВА

Н.В. Иванова, А.В. Старченко

Одной из наиболее важных проблем, возникающих при организации процесса сжигания топлива, является сокращение образования токсичных веществ, в частности, оксидов азота. Усиление требований контроля загрязнения атмосферного воздуха требует нового подхода к проектированию топочных устройств и камер сгорания, различных энергетических установок. В настоящее время для этих целей все чаще применяется численное моделирование, что позволяет не только получить количественные оценки токсических выбросов, но и разработать рекомендации по их сокращению.

В данной работе рассматривается четыре модели образования оксидов азота при горении азотсодержащих топлив. Модели [1,2] являются упрощенными кинетическими моделями расчета образования NO_x, основанные на обобщенных химических реакциях. Такие упрощенные схемы разрабатываются для проведения практических оценок содержания NO_x. Модели [3,4] более полно оценивают процессы, происходящие при горении топлива, влияющие на образование оксидов азота.

В модели Гусева, Зайчика и Кудрявцева [1] предполагается, что все топливные оксиды азота образуются из азота, перешедшего вместе с летучими в газовую фазу, а ролью связанного азота в коксовом остатке пренебрегают.

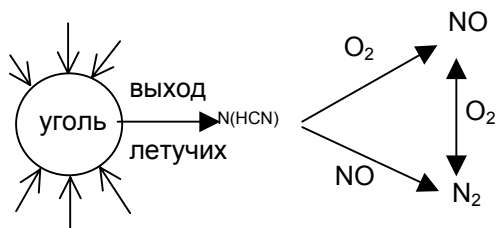


Рис.1. Механизм образования оксидов азота по модели [1]

Образование топливных NO рассчитывается в предположение, 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 $N(HCN)+O_2 \rightarrow NO$ и образование молекулярного азота вследствие рекомбинации атомарного азота $2N \rightarrow N_2$. В модели учитывается образование термических NO. Механизм образования оксидов азота приведен на рис. 1. Расчетная схема генерации оксидов азота, основанная на упрощенных брутто-реакциях, выглядит следующим образом:

$$\frac{dC_{N_2}}{dt} = 0.53 \cdot 10^8 \exp\left(-\frac{1000}{T_g}\right) \frac{C_N}{T_g}$$

$$\frac{dC_{N_i}}{dt} = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\arctg(22.2V^p - 4.7)}{\pi} \right\} 1500 \exp\left(-\frac{4500}{T_p}\right) \times (C_{N_0} - C_{N_i})$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = 0.175 \cdot 10^{14} \exp\left(-\frac{3000}{T_g}\right) C_N \left(\frac{r_{O_2}}{T_g}\right)^2 + 7.75 \exp\left(-\frac{67790}{T_g}\right) \times 0.79 \left(\frac{r_{O_2}}{T_g}\right)^{1/2},$$

$$C_N = C_{N\tau} - C_{N_2} - \frac{M_N}{M_{NO}} C_{NO},$$

$$C_{N_0} = \frac{1}{L \cdot \alpha t} \cdot \gamma \cdot N^p,$$

$$\gamma = \frac{0.4861 \cdot V^p + 3545 \cdot \exp(-10308/T_g)}{1 + 3545 \cdot \exp(-10308/T_g)},$$

где $\frac{df}{dt} \equiv \frac{\partial(\rho u_i f)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial f}{\partial x_i} \right);$

U_j – компонента вектора скорости;
 μ_T, Sc_T – турбулентная вязкость и число Шмидта;

C_N, C_{N_2}, C_{NO} – массовые концентрации в газовой фазе топливных азотсодержащих веществ в виде атомарного (обобщенного название для NH₃, HCN), молекулярного и оксида азота;

$C_{N\tau}, C_{NO}$ – полная 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;

M_i – молекулярные веса компонентов.

И.К. Гуо и С.К. Чан [2] создали многожидкостную модель для моделирования турбулентного двухфазного течения и горения распыленного угля. Двухжидкостная модель для турбулентных реагирующих двухфазных течений с горящими распыленными угольными частицами была разработана путем добавки модифицированной $K - \epsilon$ модели, обобщенной модели выхода летучих и горения кокса. Уравнения горения как для газофазных, так и для твердых частиц записываются на основе Эйлерового подхода, и эти уравнения решаются численным методом конечных разностей.

Модель учитывает два механизма образования NO_x : термические – по механизму Зельдовича и топливные - описываются глобальным механизмом [2], которые в явном виде рассматривают цианиды NO и NO_2 . Механизм образования NO изображен на рис.2.

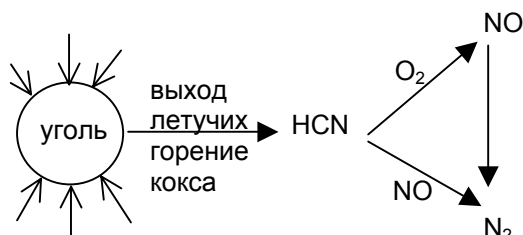


Рис.2. Схема образования оксидов азота по модели [2]

$$\frac{dC_{HCN}}{dt} = -W_{HCN},$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = -W_{NO},$$

где $W_{HCN} = (W_0 - W_1 - W_2)M_{HCN},$

$$W_{NO} = (W_1 - W_2 - W_3)M_{NO} + W_4,$$

$$W_0 = F_{vap} + F_{cox},$$

$$W_1 = \rho \cdot (1 \times 10^{11}) \frac{C_{HCN} \cdot M_M}{M_{HCN}} \left(\frac{C_{O_2} \cdot M_M}{M_{O_2}} \right)^b \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{67.0 \text{ kcal}}{RT}\right) \times (1 + F_1),$$

$$W_2 = \rho \cdot (3 \times 10^{11}) \frac{C_{HCN} \cdot M_M}{M_{HCN}} \frac{C_{NO} \cdot M_M}{M_M} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{60.0 \text{ kcal}}{RT}\right) (1 + F_2),$$

$$W_3 = 4.18 \times 10 SP_{NO} \exp\left(-\frac{34.7 \text{ kcal}}{RT}\right),$$

$$W_4 = 8.39 \times 10^1 \rho^{1.5} T^{-0.5} C_{N_2} C_{O_2}^{0.5},$$

где S – относительная поверхность угольных частиц,

P_{NO} – парциальное давление NO ,

F_1, F_2, F_3 – функции, учитывающие турбулентный характер протекания реакции,

F_{cox}, F_{vap} – скорости горения кокса и летучих веществ.

Модель образования NO при сжигании угольной пыли разработана Дж. В. Митчеллом и Дж. М. Тэрбеллом [3] на основе кинетического механизма, включающего 12 суммарных химических реакций. Модель описывает сложную конверсию содержащих в угле азотных соединений в NO во время горения.

Наиболее важные суммарные химические реакции, которые участвуют в образовании NO_x при сжигании угля, показаны на рис. 3. Реакции учитывают пиролиз угля, гомогенное горение кокса, образование топливных и термических NO_x . Образование оксидов азота по модели [3] описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{dC_{HCN}}{dt} = J_1 - J_3 + \frac{M_{HCN}}{M_{NO}} J_6;$$

$$\frac{dC_{NH_3}}{dt} = -J_4 - J_5 + \frac{M_{NH_3}}{M_{HCN}} J_3;$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = J_2 + \frac{M_{NO}}{M_{NH_3}} J_4 - \frac{M_{NO}}{M_{NH_3}} J_5 + J_8 - J_6 - J_7;$$

где $C_{NH_3}, C_{HCN}, C_{NO}$ – массовые концентрации соответственно NH_3, HCN, NO ,

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, образования вредных оксидов азота,

J_7 – скорость гетерогенной реакции конверсии оксидов азота в результате их взаимодействия с углеродом;

J_8 – скорость образования термических оксидов.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА В ПРОЦЕССАХ СЖИГАНИЯ ПЫЛЕВИДНОГО ТОПЛИВА

Модель образования NO_x при горении угля, предложенная М. Ксю, М.Г. Карвалло [4], основывается на расширении механизма Де Соэте [5] схематически изображенного на рис. 4. Модель опирается на решение уравнений переноса для NO и его предвестников (HCN и NH_3). Допускается, что из летучих образуется 90% HCN (массовая доля $\alpha=0,9$). Учитывается образование термических NO_x , генерация и поглощение NO_x при горении углерода угля.

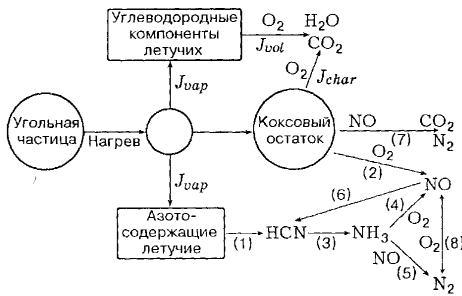


Рис. 3. Модель [3] образования NO при сжигании угольной пыли

Допускается, что азот в угле однородно распределен между коксом и летучими. Для реакции дожига NO_x кинетическая скорость, предложенная Чаном [2], используется наряду с моделью распада вихрей. Полученная кинетическая скорость представляет скорость глобальной реакции между легкими углеородами и NO_x .

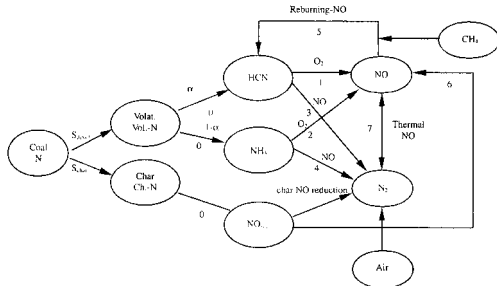


Рис. 4. Модель [4] образования NO при сжигании угольной пыли

Уравнения модели [4]:

$$\frac{dC_{NH_3}}{dt} = S_{0,NH_3} + \left(-S_{2,NO} - S_{4,NO} \right) \times \frac{M_{NH_3}}{M_{NO}}$$

$$\frac{dC_{HCN}}{dt} = S_{0,HCN} + \left(-S_{1,NO} - S_{3,NO} + S_{5,NO} \right) \times \frac{M_{HCN}}{M_{NO}}$$

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = S_{1,NO} + S_{2,NO} - S_{3,NO} - S_{4,NO} - S_{5,NO} + S_{6,NO} + S_{7,NO}$$

где $S_{O,HCN} = 2\alpha f_N F_{vap} (M_{HCN} / M_{N_2})$

$$S_{1,NO} = \rho \cdot 3.5 \cdot 10^{10} X_{HCN} X_{O_2}^b \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{2.805 \cdot 10^8}{RT}\right) \frac{M_{NO}}{M_{gas}}$$

$$S_{2,NO} = \rho \cdot 4.0 \cdot 10^6 X_{NH_3} X_{O_2}^b \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{1.340 \cdot 10^8}{RT}\right) \frac{M_{NO}}{M_{gas}}$$

$$S_{3,NO} = \rho \cdot 3.0 \cdot 10^{12} X_{HCN} X_{NO} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{2.512 \cdot 10^8}{RT}\right) \frac{M_{NO}}{M_{gas}}$$

$$S_{4,NO} = \rho \cdot 1.8 \cdot 10^8 X_{NH_3} X_{NO} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{1.131 \cdot 10^8}{RT}\right) \frac{M_{NO}}{M_{gas}}$$

$$S_{5,NO} = \rho \cdot 2.76 \cdot 10^6 X_{HCN} X_{NO} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{0.7872 \cdot 10^8}{RT}\right) \frac{M_{NO}}{M_{gas}}$$

$$X_{HC} = X_{CH_4} - X_{O_2} / SR_{CH_4}$$

$$S_{6,NO} = S_{Dif,NO} (X_{NO} - X_{NO_{SUP}}) = S_{OP,NO} -$$

$$- S_{OR,NO} X_{NO_{SUP}}$$

где C - массовая концентрация,

X - молярная концентрация,

α - массовая доля HCN в летучих,

$S_{OR,NO}$ - масса кокса,

SR_{CH_4} - стехиометрический коэффициент,

f_N - массовая доля азота в сухом угле,

R - универсальная газовая постоянная,

$S_{Dif,NO}$ - скорость диффузии NO к поверхности угольной частицы.

$S_{OR,NO}$ - кинетическая скорость реакции $2NO + C \rightarrow N_2 + CO_2$.

Предложенные численные модели генерации NOx применялись для действующего котла БКЗ – 220 – 100ЖШ. На рис. 5 показано полученное численное распределение значений концентраций оксидов азота.

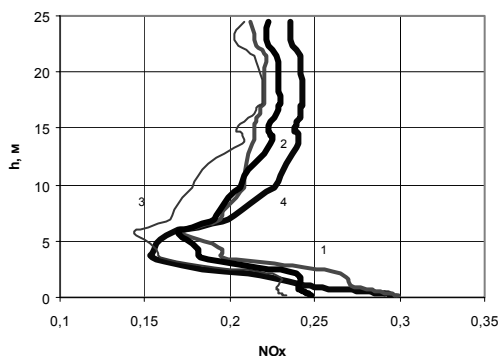


Рис.5. Образование оксидов азота по высоте топки при избытке воздуха 1,2: 1 – модель [1], 2 – модель [1], 3 – модель [3], 4 – модель [4]

Как видно из рис. 5, максимальное количество оксидов азота NO образуется в верхней части зоны активного горения, характеризующейся повышенными значениями температуры двухфазного потока. На участке от 10м до 25м по высоте топки, где горение уже завершено, концентрация NO не изменяется.

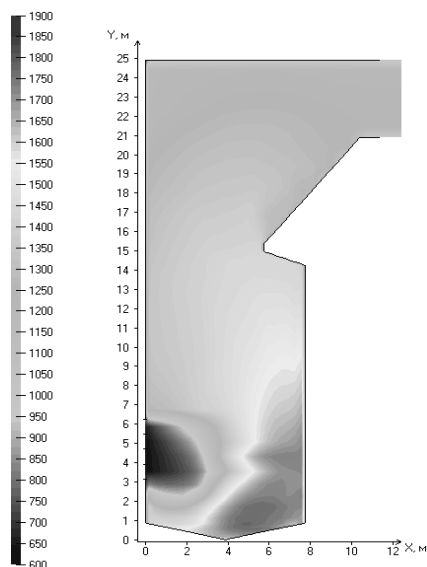


Рис.6. Распределение поля температур в топке котла БКЗ – 220 – 100ЖШ при избытке воздуха 1,2

Результаты выполненных по предложенным моделям расчетов образования топливных NO вполне удовлетворительно согласуются как между собой, так и с эксперимен-

тами. Из рис.6 видно, что область максимальных значений температур находится в противоположной от горелок части топочной камеры. На выходе из топки температура имеет значение 1050 °С. На рис.7 показаны концентрации оксидов азота в сечении топочной камеры. Видно, что процесс образования оксидов интенсивно идет в сравнительно небольшой зоне. По своему положению эта зона практически совпадает с зоной максимальных температур (рис.6).

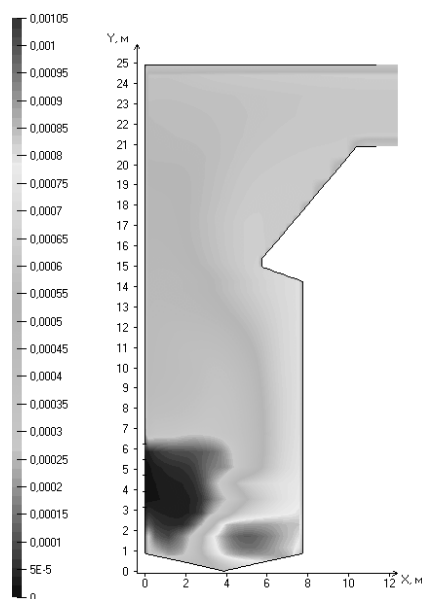


Рис.7. Образование оксидов азота по сечению топки котла БКЗ – 220 – 100ЖШ при избытке воздуха 1,2

ВЫВОДЫ

1. Для анализа интенсивности образования NO в пылеугольных топках котлов проведено сравнение некоторых наиболее популярных моделей.
2. Применение выбранных подходов к исследованию выхода NO показало, что модели дают близкие результаты; точность их прогноза в значительной степени зависит от правильного представления доли азота топлива, выходящего вместе с летучими или при горении коксового остатка.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев И.Н., Зайчик Л.И., Кудрявцев Н.Ю. Моделирование образования оксидов азота в топочных камерах // Теплоэнергетика. 1993. №1. С. 32-36.
2. Guo Y.C., Chan C.K. A multi-fluid for simulating turbulent gas-particle flow and pulverized coal combustion // Fuel. 2000. №79. P.1467-1476.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА
В ПРОЦЕССАХ СЖИГАНИЯ ПЫЛЕВИДНОГО ТОПЛИВА

3. Mitchell J.W., Tarbell J.M. A kinetic model of nitric oxide formation during coal combustion // AIChE Journal. 1982. Vol.28.№2. P.302-31.

4. 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. С. 1611-1619.

5. De Soete G.G. Fifteenth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1975.P.1093-102.

6. Титов С.П., Бабий В.И., Барбараш В.М. Исследование образования NO_x при горении пыли каменных углей // Теплоэнергетика. 1980. № 3. С.64-67.