

УДК 519.63

ПРИМЕНЕНИЕ УЛУЧШЕННОЙ МОДЕЛИ СИСТЕМЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ЭМИССИИ ОКСИДОВ АЗОТА ПРИ ГОРЕНИИ БЕДНОЙ СМЕСИ В ГАЗОТУРБИННОЙ КАМЕРЕ СГОРАНИЯ

T. H. Nguyen

Хошиминский университет сельского хозяйства и лесоводства, Хошимин, Вьетнам, nt.hao@hcmuaf.edu.vn

С использованием методов вычислительной гидродинамики была улучшена 24-элементная модель системы химических реакторов (СХР) для предсказания эмиссии оксидов азота в газотурбинной камере сгорания при горении бедной смеси. Вычисленная по этой модели эмиссия оксидов азота хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными в Корейском научном институте электрической энергии. Новая модель СХР способна учитывать сложные механизмы химических реакций. Благодаря малому времени расчета, данная модель может использоваться для анализа систем сгорания и быть интегрирована в процесс конструирования газотурбинных камер сгорания.

Ключевые слова: горение, вычислительная гидродинамика, система химических реакторов, газотурбинная камера сгорания с предварительным смешением, эмиссия оксидов азота.

DOI 10.15372/FGV20190303

ВВЕДЕНИЕ

В последние несколько десятилетий достигнут существенный прогресс в изучении процессов сгорания в газовых турбинах, разработаны детальные химические механизмы, проведены измерения и расчет скорости протекающих реакций. Однако задача предсказания деталей процесса горения в сложном поле потока, где необходимо рассматривать как гидродинамику, так и химию из первых принципов, до сих пор не решена. Задача вычислительной гидродинамики (CFD) способна сама по себе загрузить самые быстрые компьютеры, и добавление детальной химии делает ее решение невозможным. В настоящей работе рассматривается ряд концепций, принципиальных для понимания процессов сгорания.

Элементарные стадии в процессах сгорания имеют большое значение для получения информации об эмиссии загрязняющих веществ.

В ходе сгорания образуются такие загрязняющие вещества, как несгоревшее или частично сгоревшее топливо, оксиды азота (NO и

NO₂), оксид углерода (CO), оксиды серы (SO₂ и SO₃) и твердые вещества в различной форме. Среди них особенно вредны оксиды азота NO_x, поскольку разрушают озоновый слой в стратосфере и вызывают кислотные дожди. При сжигании топлива, не содержащего атомов азота, оксиды азота образуются из атмосферного азота по термическому механизму (или механизму Зельдовича) [1], быстрому механизму сгорания (или механизму Фенимора) [2] и механизму с участием N₂O [3]. Имеются свидетельства существования еще одного пути — с участием N₂H [4–6]. Термический механизм доминирует при высокотемпературном горении в широком диапазоне соотношений топливо/воздух, в то время как быстрый механизм особенно важен при горении смесей, обогащенных топливом. Механизм с участием N₂O, как оказалось, распространен в процессах горения очень бедных смесей при низких температурах [7]. В недавних исследованиях были показаны относительные вклады этих трех механизмов при предварительном смешении [8, 9] и в диффузионном пламени [10].

Различные комбинации реакторов идеального смешения и реакторов идеального вытеснения часто используют для моделирования сложных систем сгорания. Упрощенные моде-

ли системы химических реакторов (СХР) для определения скоростей образования NO_x при сгорании обедненных, предварительно перемешанных смесей предложены в работах [11, 12]. Параметры, влияющие на образование NO_x при сгорании таких смесей, обсуждаются в [13]. Модели СХР также применяются для оценки образования загрязняющих веществ. В [14, 15] для этого предложена простая схема из двух или трех идеальных реакторов. В [16] схема развита до четырех идеальных реакторов для изучения механизма образования NO при горении бедных смесей CH_4 в газовой турбине. В [17, 18] построена численная модель, включающая в себя восемь идеальных реакторов.

В данной работе модель СХР разработана для предсказания эмиссии NO_x в газотурбинной камере сгорания, работающей на обедненной смеси в условиях реальной геометрии газотурбинной камеры сгорания с заданной нагрузкой. Прогнозируемая эмиссия NO_x хорошо согласуется с экспериментальными данными, погрешность составляет менее 1.20 %. CFD-модель позволяет получить полезную информацию о полях потоков и температур внутри камеры сгорания, которую трудно установить в эксперименте, однако этот метод не включает в себя детального описания механизмов химических реакций. Методы CFD не всегда способны точно предсказывать количество выделяемых загрязняющих веществ. Поэтому была использована гибридная модель для предсказания эмиссии NO_x при сжигании смеси CH_4 с воздухом. Эмиссия NO_x находится по модели СХР, базирующейся на информации, полученной методом CFD.

В рассматриваемой модели СХР используются граничные и рабочие условия, типичные для работы камер сгорания газовых турбин. Детальный химический механизм (53 частицы и 325 химических реакций) представлен в программе GRI-Mech 3.0 в UW-коде химических реакторов.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ГИДРОДИНАМИКИ

Предсказание методом CFD структуры потока, включает в себя определение формы пламени, параметров на входе воздуха и газа из основной зоны рециркуляции в пламя. Эти параметры обрабатывали, меняя распределение

потоков между соответствующими элементами схемы. При анализе использовали трехстадийную EBU-модель, которая была получена путем интерпретации результатов расчетов характеристик пламени. Температуру использовали для разделения зон пламени, которые при моделировании представляли как систему реакторов.

Модельная система состоит из камеры сгорания, инжекторов основного топлива и топлива пилотного пламени. Основные рабочие и конструктивные параметры модельной камеры сгорания близки к параметрам типичной промышленной газотурбинной камеры сгорания. Профили средней скорости впрыска определяли с использованием коэффициента закрутки вихря и неравномерности крутки в инжекторе смеси. Систему СХР моделировали от входа с учетом существования проскока пламени, так как на входе в газотурбинную камеру сгорания проводился анализ смеси CH_4 — воздух.

Программа Star-CCM имеет широкие возможности для моделирования турбулентных потоков. Модели можно разделить на четыре категории: модели вихревой вязкости ($k-\varepsilon$, $k-\omega$, $k-\varepsilon-f_\mu$, $k-\varepsilon-v^2-f \dots$), модели напряжений Рейнольдса, модели крупных вихрей и модели разделенного вихря. В нашей работе поток рассматривается как турбулентный сжимаемый газ, компоненты которого химически реагируют между собой. Поэтому для описания процессов в условиях теплоизоляции стенки камеры сгорания использовали $k-\varepsilon$ -модель турбулентности. Однако в Star-CCM эти эффекты моделируются так же, как в стандартной $k-\varepsilon$ -модели. Кинетическая энергия турбулентности и скорость диссипации турбулентности определяли путем решения соответствующих модельных транспортных уравнений. Расчеты методами CFD с использованием подходящей модели турбулентности позволяют получить полезную информацию о полях потоков и температур в камере сгорания, которые трудно определить экспериментально.

Для расчета реакционного пространства, концентраций различных частиц, участвующих в химической реакции, плотности, вязкости и температуры используются модели горения. В настоящей работе в случае сжигания CH_4 применяли реакционную модель функционала плотности с предполагаемой вероятностью для пламени перемешанной смеси. В этой модели принимаются адиабатические условия

Экспериментальные условия камеры сгорания

Параметры	Нормальные условия ($T_0 = 289 \text{ K}$)			
	1.0N	0.8N	0.6N	Холостая нагрузка
Расход воздуха, кг/с	0.08697	0.08912	0.09144	0.09842
Воздух для сжигания, м ³ /ч	266.93	275.56	284.83	317.37
Полное давление воздуха за компрессором, МПа	0.1	0.1	0.1	0.1
Общий расход топлива, л/мин	174.85	155.76	136.62	77.89
Расход топлива через пилотный инжектор, л/мин	68.8	77.88	82.5	77.89
Расход основного топлива, л/мин	106.05	77.88	54.12	0
Общий коэффициент избытка топлива	0.422	0.367	0.314	0.166

и мгновенное установление локального химического равновесия; несколько параметров, таких как средние доли компонентов смеси, отслеживаются на сетке. Средние концентрации частиц, температура и плотность получаются в виде функций средних параметрических переменных после осреднения вокруг предполагаемого распределения вероятности, которое, как считается, описывает турбулентные флуктуации.

Экспериментальные параметры соответствуют условиям сгорания. Температура окружающей среды равна 298 К, температура за компрессором — 650 К. Давление и параметры сгорания взяты при максимальной нагрузке (1.0N) и минимальной (холостой) нагрузке [1].

В настоящей работе рассчитывалось, как соотношение метан/воздух в инжекторе с неравномерными параметрами влияет на положение пламени и уровень выбросов. Смеси метана и воздуха в основном и пилотном инжекторах различны. При холостой нагрузке коэффициент избытка топлива в пилотном инжекторе $\phi < 0.7$, при этом наименьшее значение составляет $\phi = 0.166$. Суммарный коэффициент избытка топлива $\phi = 0.422$ при нагрузке 1.0N, $\phi = 0.367$ при нагрузке 0.8N и $\phi = 0.314$ при нагрузке 0.6N. Более детально условия эксперимента приведены в таблице.

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. Она включает в себя воздушный компрессор, нагреватель воздуха, сжатый природный газ, камеру сгорания и систему выхлопа. Измерительное оборудование состоит из камеры с интенсифицированной ПЗС-матрицей и контроллера обработки изображения.

Конфигурация модели газотурбинной ка-

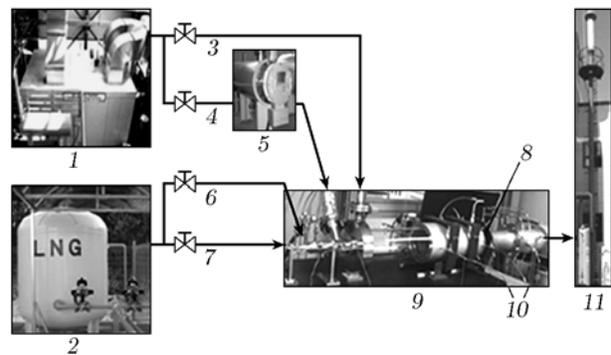


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 — компрессор воздуха, 2 — сжатый природный газ, 3 — воздух для охлаждения, 4 — воздух для сжигания, 5 — нагреватель воздуха, 6 — основное топливо, 7 — топливо предварительного впрыска, 8 — место отбора проб газа, 9 — камера сгорания, 10 — разбрызгивание воды, 11 — колонна



Рис. 2. Расчетная сетка для гидродинамической модели газотурбинной камеры сгорания

меры сгорания показана на рис. 2.

Результаты расчетов температуры поверхности пламени, скорости и эмиссии NO_x при $\phi = 0.7$ приведены на рис. 3, 4. На рис. 5 по-

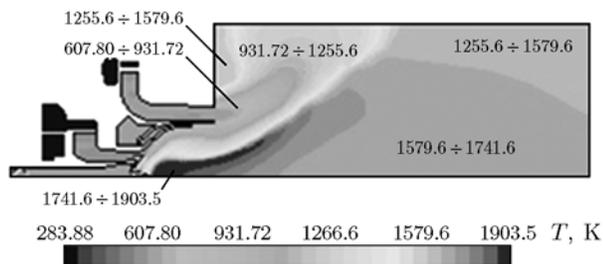
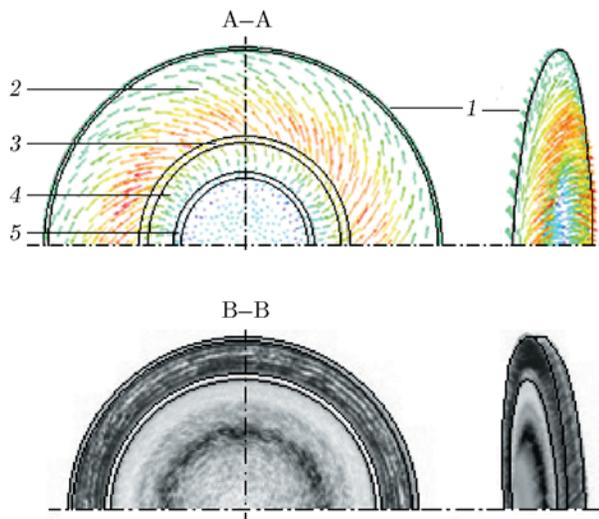
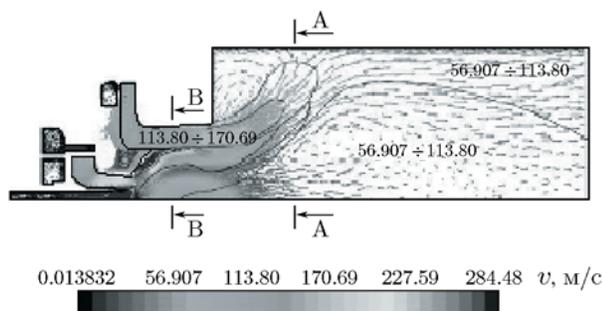


Рис. 3. Температура поверхности пламени

Рис. 4. Скорости и массовые доли эмиссии NO_x на выходах инжекторов:

1 — основное пламя, 1 %, 2 — зона после основного пламени, 99 %; 3 — основное пламя предварительного впрыска, 10 %, 4 — зона после пилотного пламени, 80 %, 5 — рециркуляция пилотного пламени, 10 %

казаны предсказанные методом CFD зоны пламени в СХР. В сечении А-А (см. рис. 4) модельной камеры сгорания очень небольшое количество газа из основного пламени входит в зону рециркуляции основного потока — 1 %. Это количество может измениться при другом устройстве камеры сгорания. В сечении В-В

(см. рис. 4) 10 % газа из основной части пилотного пламени возвращается на рециркуляцию в основное пламя и 10 % — в зону рециркуляции пилотного пламени. Предполагается, что соотношение топливо/воздух в инжекторе предварительного впрыска равномерно и нет радиальных или круговых вариаций в смеси топлива с воздухом. Основной поток предварительного впрыска смешивается с газом из зоны рециркуляции основного пламени и зоны рециркуляции пилотного пламени. Зону после пламени потребовалось разбить на два потока на основании температуры и коэффициента избытка топлива — центральная зона и основная зона. При CFD-моделировании камеры сгорания обнаружено, что 30 % газа из зоны после пламени возвращается на рециркуляцию в основную зону предварительного впрыска. Типичные охлаждаемые сзади газотурбинные камеры сгорания также имеют зону разбавления, где используемый для разбавления воздух вводится в зону после пламени, чтобы снизить температуру газа до его поступления в турбину. Простая СХР не учитывает дополнительного разбавления, поэтому для этой цели можно использовать последний элемент — реактор идеального вытеснения.

КОНФИГУРАЦИЯ МОДЕЛИ СИСТЕМЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Схема модели СХР разработана на основе рис. 5. Зона рециркуляции состоит из реакторов идеального смешения (PSR). Согласно результатам, представленным на рис. 6, температура пламени претерпевала разрыв. Разделение пламени при входе использовали для того, чтобы определить информацию о потоке, основанную на результатах, представленных на рис. 4. Схема 24-элементной СХР построена в настоящей работе на основе пред-

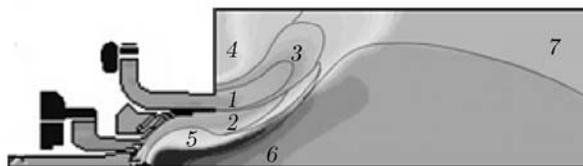


Рис. 5. Зоны пламени в СХР:

1 — основной инжектор, 2 — пилотный инжектор, 3 — зона основного пламени, 4 — зона рециркуляции основного пламени, 5 — зона пилотного пламени, 6 — зона рециркуляции пилотного пламени, 7 — зона после основного пламени

сказанных методом CFD результатов (рис. 6, *a*) и использовалась для оценки эмиссии NO_x на основе программы CHEMKIN (рис. 6, *b*). Предполагается, что перемешивание в PSR происходит на молекулярном уровне, мгновенно по сравнению со временем реакции; сгорание протекает равномерно по всему реактору. В реакторе идеального вытеснения (PFR) предполагается, что поток движется как поршень и химическая реакция протекает в одном направлении, причем перемешивание в продольном направлении полностью отсутствует. В элементе Mix входящие потоки равномерно перемешиваются без протекания химической реакции. Элемент Mix 1 соответствует зоне входной смеси конической формы, в которой зажигание смеси еще не происходит. Зону пламени, зону рециркуляции основного пламени и зону непосредственно после пламени моделировали с использованием реакторов идеального смешения PSR, в то время как зоны после пламени моделировали с помощью реакторов идеального вытеснения PFR.

В настоящей работе в случае реакции первого порядка время контакта τ можно непосредственно выразить как функцию температуры T в реакционной зоне [19]:

$$\tau A_* = \frac{T - T_0}{T^{1-n}(T_{ad} - T)^n \exp(-E/(RT))}, \quad (1)$$

где

$$A_* = \frac{M_{fuel}}{Y_{fuel,0}\rho_*} \left(\frac{Y_{fuel,0}\rho_*}{M_{fuel}} \right)^{n_{fuel}} \left(\frac{Y_{ox,0}\rho_*}{M_{ox}} \right)^{n_{ox}}, \quad (2)$$

T_0 — начальная температура, T_{ad} — адиабатическая температура, R — универсальная газовая постоянная, M — масса, ρ — плотность, Y — молярная доля компонента в смеси.

Как показано на рис. 6, зона основного пламени включает в себя основное пламя, зону, непосредственно прилегающую к пламени, и зону после пламени, зона пилотного пламени — зону непосредственно около пилотного инжектора, зону рециркуляции пилотного пламени и зону после пилотного пламени. Зона рециркуляции основного пламени состоит из потока основного воздуха на входе в камеру сгорания, центральная зона рециркуляции — из газового потока смешиваемых горячих продуктов. Зона после пламени состоит из зон выгорания CO, как показано на рис. 5.

В схеме разделения потоков (см. рис. 6) внешний поток воздуха включает в себя 53 % воздуха ввиду его большей продольной скорости и большей площади, связанной с большим соотношением топливо/воздух, в то время как внутренний поток включает в себя всего 16 % потока воздуха. Из рис. 6 видно, что при линейном расположении инжекторов самое низкое соотношение $\text{CH}_4/\text{воздух}$ наблюдается во внешнем потоке, а самое высокое — во внутреннем потоке.

Пилотное пламя разделено на два потока, характеризующихся своей массовой скоростью и своим соотношением $\text{CH}_4/\text{воздух}$. Каждый участок пламени моделировали с помощью серии реакторов идеального смешения PSR. В каждом из них топливо зажигается благодаря засасыванию горячего воздуха из Mix. Впрыск 2 (центральный поток), который проникает в зону рециркуляции, включает в себя 90 % общего потока смеси пилотного пламени, впрыск 1 (внешний поток) — 10 % потока пилотного пламени.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Распределение молярной доли NO_x при $T_0 = 298$ К приведено на рис. 7, *a*. Самая высокая молярная доля NO_x наблюдается при холостой нагрузке, при нагрузке 0.6N эмиссия NO_x ниже, чем при холостой, а при нагрузках 0.8N и 1.0N выбросы близки к нулю. В случаях нагрузок 0.8N и 1.0N температура пламени достаточно высока, чтобы вызвать термическое образование NO_x (см. рис. 5), так что молярная доля NO_x низка. Самая низкая молярная доля NO_x наблюдается при нагрузке 0.8N.

Молярная доля NO_x при холодных условиях ($T_0 = 273$ К) приведена на рис. 7, *b*. Самая высокая эмиссия NO_x наблюдается при нагрузке 0.6N, при нагрузке 0.8N она ниже, а при $N = 1.0$ достигает минимума. Различия в молярных долях NO_x по сравнению с нормальными условиями ($T_0 = 298$ К) показывают лучшие результаты.

Молярная доля NO_x при горячих условиях ($T_0 = 313$ К) приведена на рис. 7, *в*. Самая высокая молярная доля образования NO_x наблюдается при холостой нагрузке, при нагрузках 0.6N и 0.8N она меньше. При нагрузках 0.6N и 0.8N результаты эксперимента и моделирования СХР совпадают.

Хотя температура пилотного пламени и концентрации частиц в нем высоки, данные

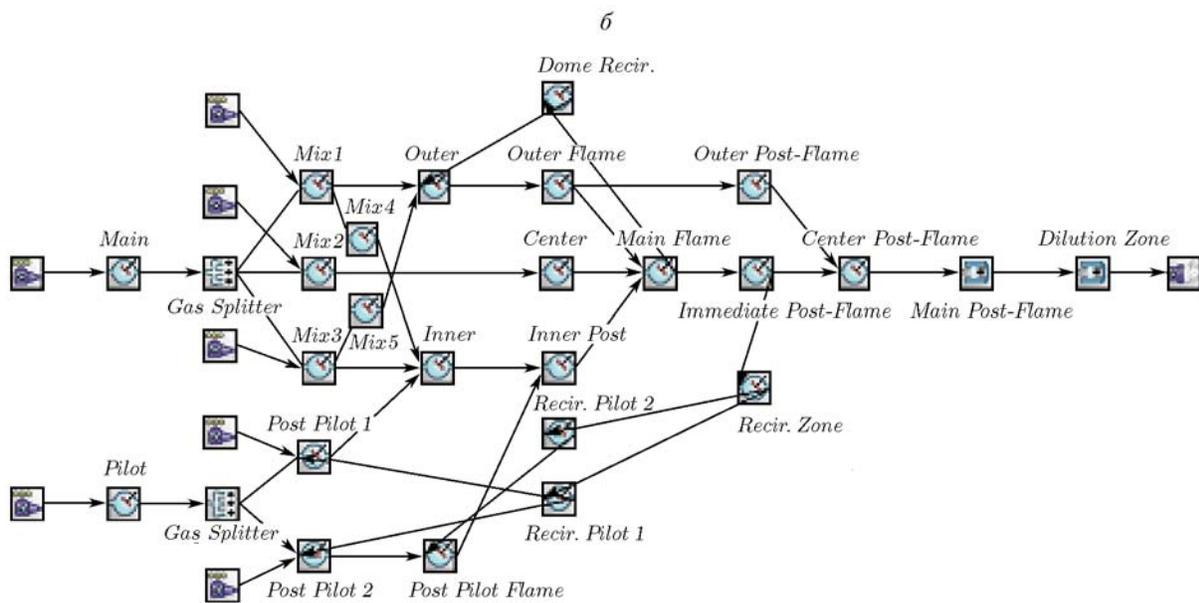
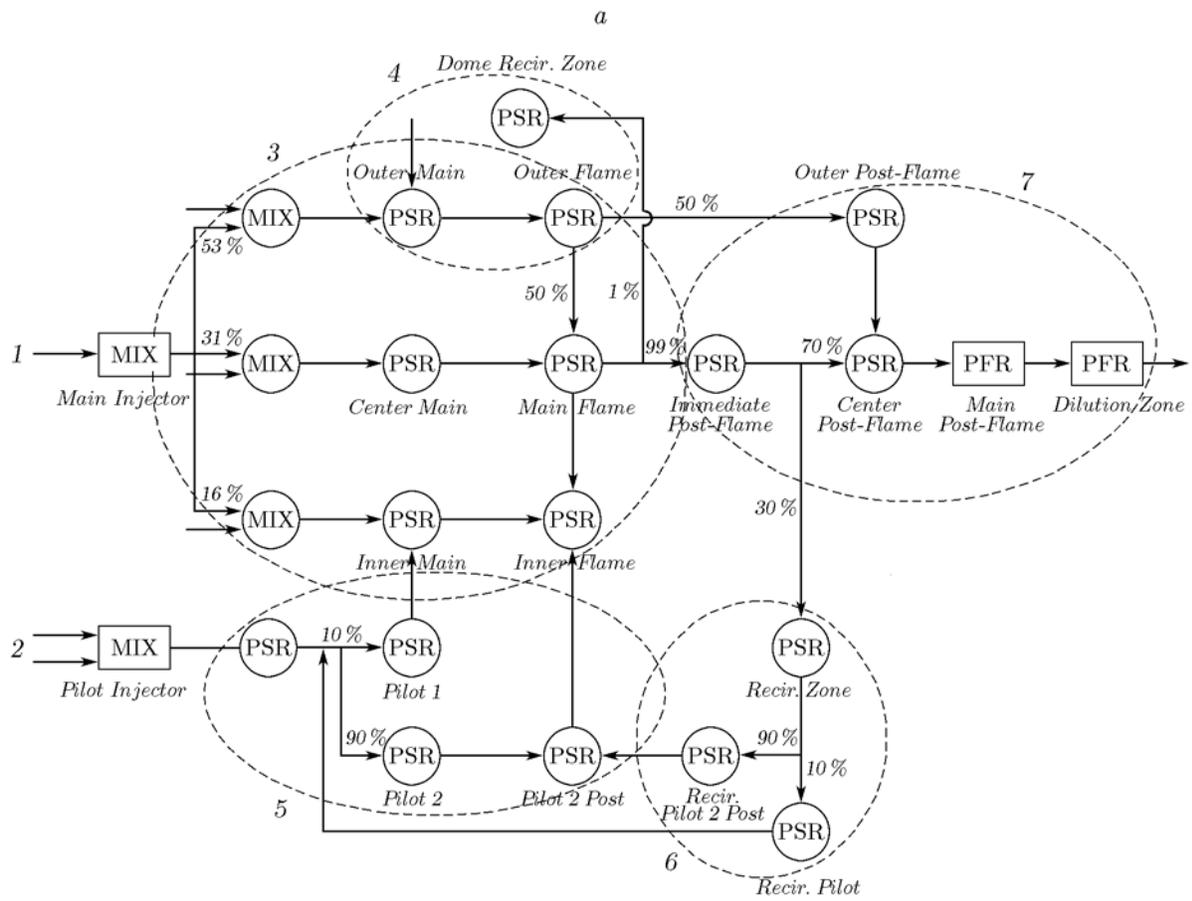


Рис. 6. Схема 24-элементной модели СХР (а) и ее применения для оценки выделения NO_x на основе расчетов в программе CHEMKIN (б):

1 — основной инжектор, 2 — пилотный инжектор, 3 — зона основного пламени, 4 — зона рециркуляции основного пламени, 5 — зона пилотного пламени, 6 — зона рециркуляции пилотного пламени, 7 — зона после основного пламени; обозначения: PSR — реактор идеального смешения, PFR — реакторов идеального вытеснения, Zone — зона рециркуляции основного пламени, Fuel — топливо, Air — воздух, Outer Main — внешний основной, Outer Flame — внешнее пламя, Outer Post-Flame — внешний после пламени, Main Injector — основной инжектор, Center Main — центральный основной, Main Flame — основное пламя, Immediate Post-Flame — непосредственно после пламени, Center Post-Flame — центральный после пламени, Main Post-Flame — после основного пламени, Dilution Zone — зона разбавления, Inner Main — внутренний основной, Inner Flame — внутреннее пламя, Inner Post — внутренний после пламени, Pilot Injector — инжектор предварительного впрыска, Pilot1, Pilot2 — соответственно предварительный впрыск 1, 2, Pilot Post Flame — после пламени предварительного впрыска, Recir. Zone — зона рециркуляции, Pilot2 Post — после предварительного впрыска 2, Recir. Pilot2 Post — рециркуляция после предварительного впрыска 2, Recir. Pilot — рециркуляция после предварительного впрыска, Gas Splitter — газоразделитель

рис. 7 показывают присутствие NO_x . В случае образования NO_x в газотурбинной камере сгорания с неоднородными параметрами на входе применяли модифицированную СХР для пред-

сказания эмиссии NO_x , полученные значения оказались ближе к экспериментальным значениям, чем в случае камеры сгорания с однородными параметрами на входе, особенно вблизи нагрузки холостого хода.

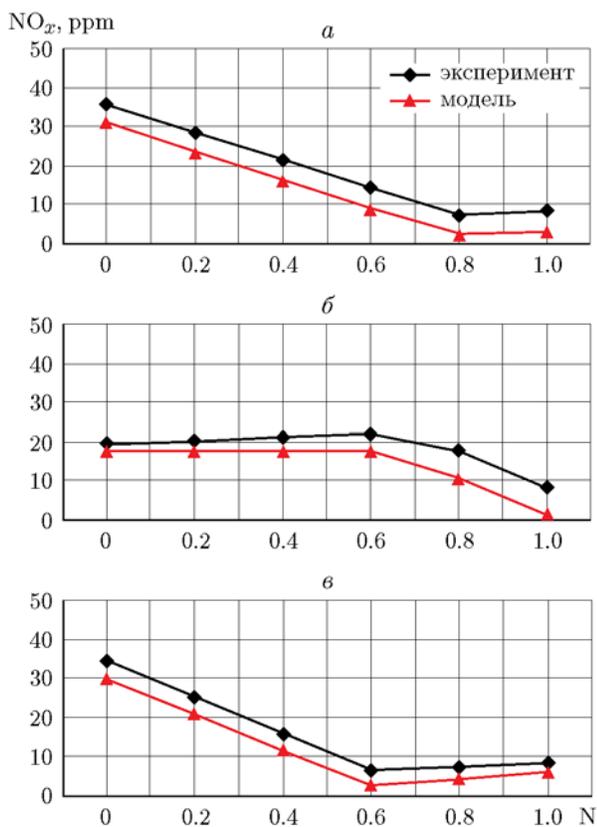


Рис. 7. Распределение молярной доли NO_x при неравномерности температуры в камере сгорания, работающей при нормальных условиях (а), в холодных условиях (б) и в горячих условиях (в)

ВЫВОДЫ

Улучшенный механизм СХР был применен к CFD-модели газотурбинной камеры сгорания для получения информации о полях потоков, температур и концентраций частиц. Исходя из информации о поле потоков определены зоны сгорания. Эти зоны моделировали как систему химических реакторов. Методология развития СХР определялась на основе согласия между моделями СХР и CFD.

Новая модель СХР на базе 24-элементной модели реакторов разработана с использованием результатов CFD для газотурбинной камеры сгорания с соотношением топливо/воздух, соответствующим нулевой нагрузке, а также нагрузкам 0.6N, 0.8N и 1.0N. Эмиссия NO_x , предсказанная для газотурбинной камеры сгорания с неравномерными параметрами на входе, ближе к экспериментальным данным, особенно в случае самого низкого коэффициента избытка топлива.

В модифицированной 24-элементной модели СХР механизм окисления метана с образованием NO_x был обновлен и проверен с использованием CFD-модели, получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Модель химических реакторов из 24 элементов может быть использована для предсказания эмиссии NO_x в газотурбинной промышленной камере сгорания, а также для анали-

за систем сгорания. Модель удобно интегрировать в конструирование газотурбинной камеры сгорания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Садовников П. Я., Франк-Каменецкий Д. А. Окисление азота при горении. — М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1947.
2. Fenimore C. P. Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames // Proc. Symp. Combust. — 1971. — V. 13. — P. 373.
3. Melte P. C., Pratt D. T. Measurement of atomic oxygen and nitrogen oxides in jet stirred combustion // Proc. Symp. Combust. — 1974. — V. 15. — P. 1061–1070.
4. Bozzelli J. W., Dean A. M. O + NNH: A possible new route for NO_x formation in flames // Int. J. Chem. Kinet. — 1995. — V. 27. — P. 1097–1109.
5. Harrington J. E. Evidence for a new NO production mechanism in flames // Proc. Symp. Combust. — 1996. — V. 26. — P. 2133–2138.
6. Hayhurst A. N., Hutchinson E. M. Evidence for a new way of producing NO via NNH in fuel-rich flames at atmospheric pressure // Combust. Flame. — 1998. — V. 114. — P. 274–279.
7. Drake M. C., Blint R. J. Calculations of NO_x formation pathways in propagating laminar, high pressure premixed CH₄/air flames // Combust. Sci. Technol. — 1991. — V. 75. — P. 261–285.
8. Drake M. C., Blint R. J. Relative importance of nitric oxide formation mechanism in laminar opposed-flow diffusion flames // Combust. Flame. — 1991. — V. 83. — P. 185–203.
9. Nishioka M., Nakagawa S., Ishikawa Y., Takeno T. NO emission characteristics of methane-air double flame // Combust. Flame. — 1994. — V. 98. — P. 127–138.
10. Miller J. A., Bowman C. T. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion // Prog. Energy Combust. Sci. — 1989. — V. 15. — P. 287–338.
11. Nicol D. G., Malte P. C., Steele R. C. Simplified models for NO_x production rates in lean-premixed combustion // ASME Paper No. 94-GT-432. — 1994.
12. Nicol D. G., Steele R. C., Marinov N. M., Malte P. C. The importance of the nitrous oxide pathway to NO_x in lean-premixed combustion // J. Eng. Gas Turbines and Power. — 1995. — V. 117. — P. 100–111.
13. Steel R. C., Tarrett A. C., Malte P. C., Tonouchi J. H., Nicol D. G. Variables affecting NO_x formation in lean-premixed combustion // J. Eng. Gas Turbine and Power. — 1997. — V. 119. — P. 102–107.
14. Rubin P. M., Pratt D. T. Zone combustion model development and use: Application to emissions control // ASME Paper No. 91-JPGC-FACT-25. — 1991.
15. Rutar T., Malte P. C. NO_x formation in high-pressure jet-stirred reactors with significance to lean-premixed combustion turbines // J. Eng. Gas Turbines and Power. — 2002. — V. 124. — P. 776–783.
16. Nicol D. G. Development of a five-step global methane oxidation-NO formation mechanism for lean-premixed gas turbine combustion // J. Eng. Gas Turbines and Power. — 1999. — V. 121. — P. 272–280.
17. Нгуен Т. Х. Зонное моделирование горения для прогнозирования эмиссии оксидов азота в промышленной камере сгорания // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 4. — С. 43–47.
18. Rumble J. R. Handbook of Chemistry and Physics. — 98th Ed. — Cleveland, OH: CRC Press, 2017.
19. Snegirev A. Yu. Perfectly stirred reactor model to evaluate extinction of diffusion flame // Combust. Flame. — 2015. — V. 162. — P. 2622–2631.

Поступила в редакцию 26.03.2018.

После доработки 14.05.2018.

Принята к публикации 12.09.2018.