

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

Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,  
КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, Алматы, \*e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ АЗОТИСТЫХ ВЕЩЕСТВ ПРИ ГОРЕНИИ УГОЛЬНОГО ТОПЛИВА**

Процесс горения угольного топлива сопровождается сложными физико-химическими процессами, которые следует учитывать при численном исследовании первоначально. При этом важную роль играет качество сжигаемого угольного топлива. От ранга угля зависит и выход летучих веществ, а также выход вредных продуктов сгорания, таких как оксиды углерода, оксиды азота и серы, и т.д. Образование оксида азота в пламени углеводородов происходит главным образом с помощью трех механизмов; тепловые NO (фиксация молекулярного азота атомами кислорода при высоких температурах), топливные NO (окисление азота, содержащегося в топливе во время сгорания), и быстрые NO (атака углеводородного радикала на молекулярный азот). Из этих трех механизмов топливные NO, безусловно, являются самым значительным источником NO в практических угольных пламенах. В настоящей работе с помощью кинетических схем формирования азотистых веществ был исследован процесс горения карагандинского угля в камере сгорания котла реального энергетического объекта. На основе полученных результатов и их верификаций был предложен наиболее приемлемый механизм образования  $\text{NO}_x$  для проведения численных расчетов по горению твердого топлива на любых тепловых электрических станциях, использующие высокозольный казахстанский уголь. Результаты таких исследований позволят разрабатывать технические и конструкционные предложения по оптимизации процессов горения.

**Ключевые слова:** аэродинамика потоков, горение топлива, кинетический механизм, моделирование,  $\text{NO}_x$ , оксиды азота, тепломассоперенос

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

Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi KazakhNU,  
Kazakhstan, Almaty, \*e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

### **Study of nitrogenous substances formation during combustion of coal**

The process of burning coal fuel accompanied by complex physical and chemical processes that should be considered in the numerical study are paramount. An importance has the quality of combusted coal fuel. Coal rank depends on volatile substances, and outlet of harmful combustion products like carbon oxides, nitrogen and sulfur oxides and others. Nitric oxide formation in hydrocarbon flames occurs primarily through three mechanisms; thermal NO (the fixation of molecular nitrogen by oxygen atoms produced at high temperatures), fuel NO (the oxidation of nitrogen contained in the fuel during combustion), and prompt NO (the attack of a hydrocarbon radical on molecular nitrogen). Of these three mechanisms, fuel NO is by far the most significant source of NO in practical coal flames. In the work with the help of kinetic schemes of formation of nitrogenous substances was investigated Karaganda coal combustion process in the combustion chamber of the real energy boiler. Based on these results and their verification it had been offered the most appropriate mechanism of  $\text{NO}_x$  formation for the base of numerical calculations at any thermal power stations that using high ash content Kazakh coal. The results of such research work may develop technical and constructional proposals for optimization of combustion processes.

**Key words:** aerodynamics of flow, fuel combustion, kinetic mechanism, modeling,  $\text{NO}_x$ , nitrous oxides, heat mass transfer

Асқарова Ә.С., Бөлегенова С.Ә., Бөлегенова С.Ә., Максимов В.Ю., Бекетаева М.Т.\*  
 Эксперименттік және теориялық физика ғылыми-зерттеу институты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ,  
 Қазақстан, Алматы, \*e-mail: Beketayeva.m@gmail.com

### Көмірдің жануы кезінде азоттекес заттардың түзілуін зерттеу

Шаң-көмірлі отынды жағу процесі күрделі физика-химиялық процестермен бірге жүреді және оларды сандық зерттеулерде міндетті түрде ескеру қажет. Бұл ретте жағылатын көмір отынының сапасы маңызды болып табылады. Көмір рангі ұшпа заттардың бөлінуі мен зиянды: көміртегі оксидтері, азот пен күкірт оксидтері тәріздес шығырлардың қаншалықты пайда болатындығына тікелей әсер етеді. Образование оксида азота в пламени углеводородов происходит главным образом с помощью трех механизмов; тепловые NO (фиксация молекулярного азота атомами кислорода при высоких температурах), топливные NO (окисление азота, содержащегося в топливе во время сгорания), и быстрые NO (атака углеводородного радикала на молекулярный азот). Из этих трех механизмов топливные NO, безусловно, являются самым значительным источником NO в практических угольных пламенах. Азоттекес заттардың түзілуіне қатысты кинетикалық сұлбалардың көмегімен ұсынылған жұмыста реалды энергетикалық объектінің жану камерасында қарағандылық көмірдің жану процесі зерттелді. Алынған зерттеу нәтижелері мен оларды верификациялау негізінде күлділігі жоғары қазақстандық көмірді жағатын кез-келген жылу электрлік станцияларда сандық экспериментті жүргізуде  $\text{NO}_x$  түзілуінің неғұрлым оңтайлы механизмі ұсынылды. Мұндай зерттеулердің нәтижелері жану процестерін оңтайландыруда техникалық және конструкциялық ұсыныстарды жобалауға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** ағындар аэродинамикасы, отын жануы, кинетикалық механизм, моделдеу,  $\text{NO}_x$ , азот тотықтары, жылу масса тасымалдану

### Введение

Горение пылеугольного топлива является сложным физико-химическим процессом, сопровождающимся выделением большого количества тепла и продуктов сгорания, где самыми вредными компонентами считаются азотосодержащие вещества. Во время цикла углефикации содержание азота в угле обычно составляет от 0,5–2%. Механизм горения угольного топлива проходит три этапа: нагрев и сушка, выход летучих веществ и сгорание коксового остатка (рисунок 1). При этом происходят интенсивные химические реакции с выделением продуктов сгорания с большими количествами энергии [1].

### Задача горения угольного топлива

Окислы азота в пылеугольном факеле производятся десятками видов и сотнями участвующими химическими реакциями по основным трем механизмам. Термические воздушные оксиды азота образуются при высоких температурах, выше  $1600^\circ\text{K}$  по механизму Зельдовича (15%), быстрые воздушные оксиды азота образуются во фронте горения при сравнительно низких температурах  $\sim 1000^\circ\text{K}$  (0,5%) и топливные оксиды азота (85%), которые все еще недоста-

точно изучены [2]. При нормировании выбросов в атмосферу и при их контроле представляют наибольший интерес изучение формирования окислов азота по топливному механизму.

При горении азота, органически связанного с топливом, должны учитываться все факторы, которые могут повлиять на протекание химических реакций между топливом и окислителем (кислород в составе воздуха). Такими факторами могут быть: размеры частиц, доля минеральной части в топливе (в частности зольность), избыток воздуха, чувствительность к малым температурным возмущениям в реакционной области и другие [3]. Исследования показали, что химическая кинетика для разного ранга углей при различных условиях вычисляются по различным кинетическим схемам [4].

В предложенной работе были проведены вычислительные эксперименты с использованием двух химических моделей формирования и деструкции окислов азота: De Soete и Mitchell-Tarbell. Для моделирования горения был выбран уголь Карагандинского бассейна, который характеризуется высокой степенью зольности (выше 35%). Его химический состав: C – 33.87%,  $\text{H}_2$  – 6.63%, S – 1.92%,  $\text{N}_2$  – 2.23%,  $\text{O}_2$  – 9.65%, W – 10.60%, A – 35.1%. Горение топлива была смоделирована для камеры сгорания реальной энергетической установки [5].

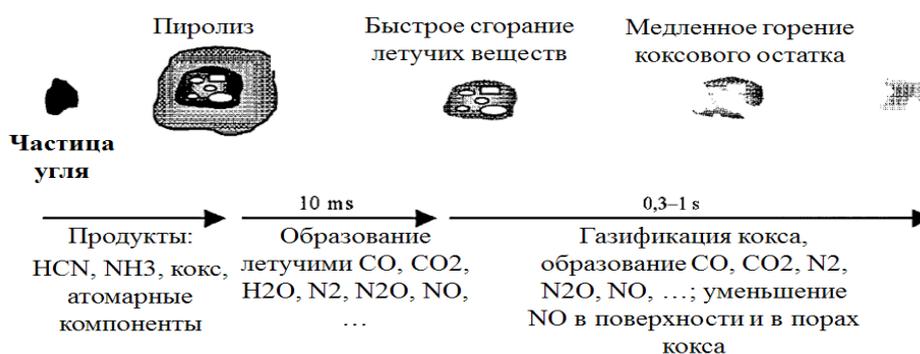


Рисунок 1 – Этапы горения угольной частицы

### Результаты численного моделирования

В результате исследований были получены расчетные данные по аэродинамике высокотемпературных потоков, температурные и концентрационные поля. Ниже представлены трехмерные рисунки движения потоков и температурные поля в объеме топочной камеры.

На рисунке 2 показаны траектории высоко-реагирующих потоков в объеме камеры сгорания. Максимальное значение вектора полной скорости, равное 15,4 м/с, имеются в области горелок, где подаются топливо-воздушные по-

токи противоточном направлении. В этой области температурные поля (рис.2б) реагирующих потоков напротив имеют малые значения (158°C). По высоте топки видно, что вектор полной скорости потоков имеет турбулентный характер в нижней части камеры и установившийся характер в верхней части, что связано с динамикой смешивания топлива и окислителя [6]. Однако, анализируя рисунок 2б, можно заметить, что температура в центральной области имеют максимальные значения (ядро факела – 1350°C), а к выходу температура потоков понижается до ~ 930°C.

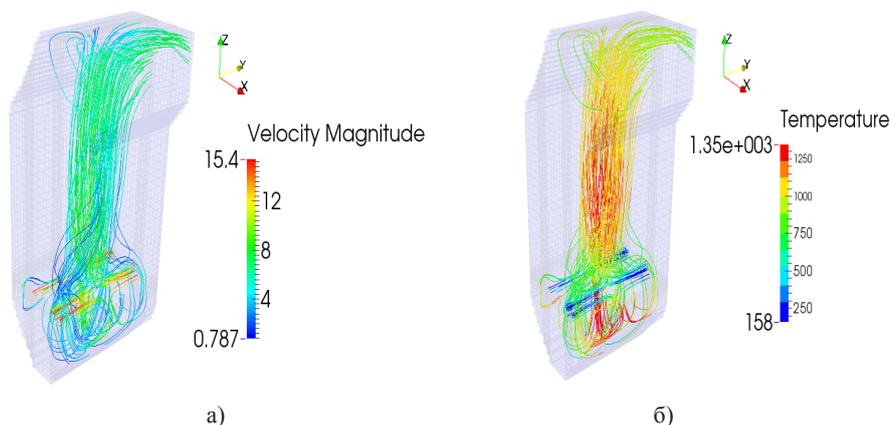


Рисунок 2 – Траектории реагирующих потоков в объеме котла  
а) вектор полной скорости; б) температура

Численное исследование процессов массопереноса концентрации  $NO_x$  основано на решении трехмерных уравнений конвективного тепло-массопереноса с учетом конвективного и радиационного теплообмена, химической кинетики и двухфазности среды [7-8]. Эти нелинейные

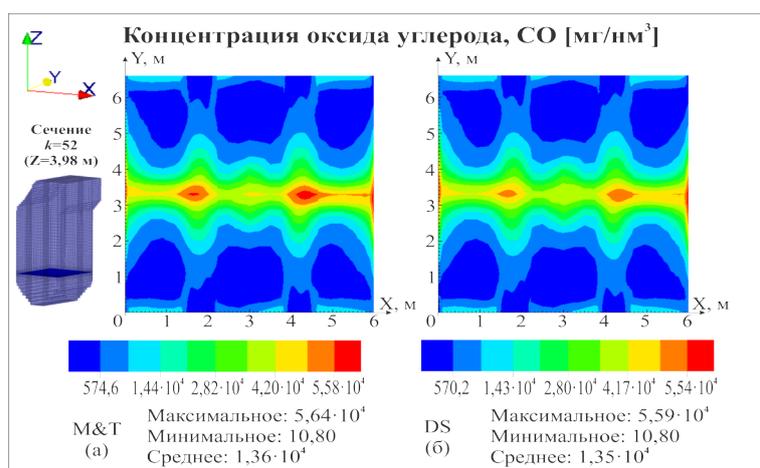
уравнения состоят из закона сохранения массы и импульса (уравнение Навье-Стокса), закона сохранения энергии и вещества [9-10].

Анализируя следующие рисунки 3а,б распределения концентрации монооксида углерода, можно отметить, что использование той или

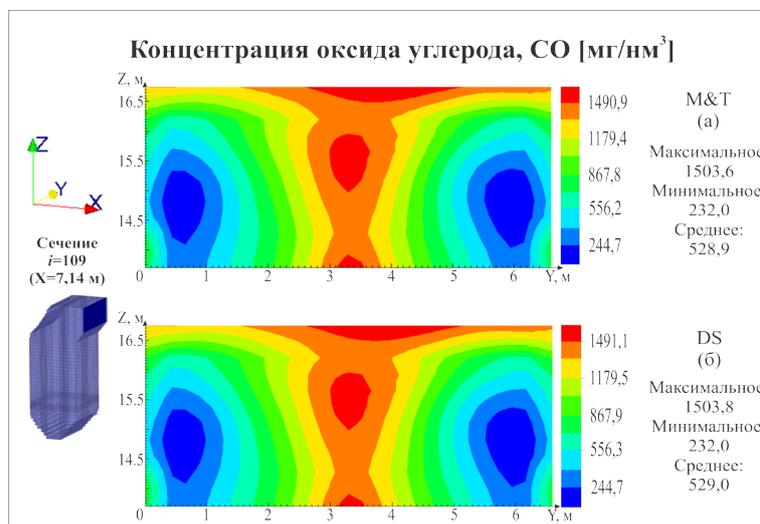
иной модели практически не влияет на их формирование. В сечении  $Z=3,98$  м (рисунок 3а), в области расположения пояса горелок среднее значение концентрации оксида углерода равно  $1,36 \times 10^4$  мг/м<sup>3</sup>, а на выходе из камеры сгорания (рисунок 3б) значение концентрации CO в среднем равно 529 мг/м<sup>3</sup>.

Далее показаны результаты 3Д моделирования процессов массопереноса при формировании оксидов азота по двум кинетическим моде-

лям. Выбор наиболее правильно описывающей модели процесса производства и подавления азотосодержащих веществ может быть актуальной при проведении численных исследований с целью получения наиболее реальных данных, которые могут использоваться при оценке характера процессов горения в существующих топочных устройствах, а также при разработках новых конструкторских и технологических решений для минимизаций вредных выбросов.



а



б

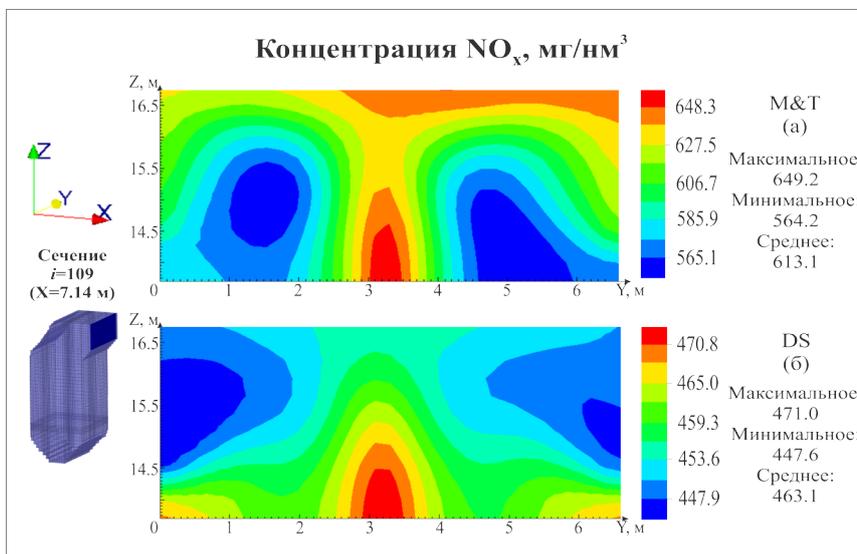
**Рисунок 3** – Трехмерные распределения концентрации оксидов углерода CO в камере сгорания котла по двум кинетическим схемам: Mitchell-Tarbell и De Soete

Анализируя рисунок 4 трехмерных полей концентраций оксидов азота  $NO_x$ , можно заметить, что на выходе из камеры сгорания концентрация оксидов азота  $NO_x$  для двух указанных моделей отличаются. Это обусловлено тем, что

кинетическая модель De Soete [11] производит численный расчет формирования  $NO_x$  по химической схеме, которая используется при сжигании высококачественных углей (высокая степень углефикации, малая доля зольности, сернисто-

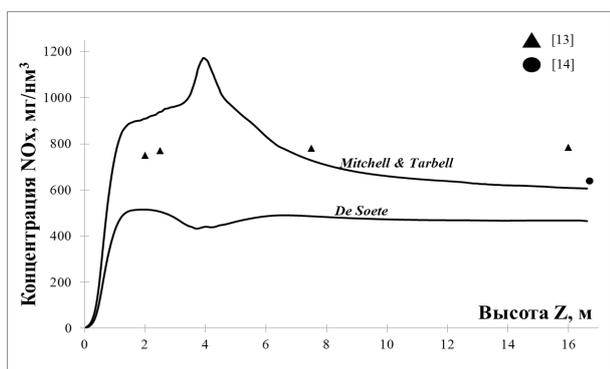
сти и влажности). А модель Mitchell-Tarbell [12] в основном предназначена для расчетов концентраций  $\text{NO}_x$  при горении низкокачественных

углей. Разность в средних значениях концентраций оксидов азота  $\text{NO}_x$  по указанным моделям составляет ~ 25%.



**Рисунок 4** – Распределение концентрации оксидов азота  $\text{NO}_x$  на выходе из топочной камеры котла по двум кинетическим моделям: Mitchell-Tarbell и De Soete

На рисунке 5 показаны кривые средних значений концентраций оксидов азота  $\text{NO}_x$  по моделям Mitchell-Tarbell и De Soete. Также здесь нанесены значения оксидов азота  $\text{NO}_x$ , полученные на ТЭЦ [13], а также значение предельно-допустимой концентрации для для углесжигающих тепловых электрических станций Республики Казахстан [14].



**Рисунок 5** – Распределения средних значений концентрации оксидов азота  $\text{NO}_x$  по высоте топки котла для двух моделей (Mitchell-Tarbell и De Soete) и ее верификация

Анализируя данные, можно заметить, что экспериментальные точки натурального эксперимента и значение ПДК ближе к значениям, которые были получены при использовании в численном расчете модели Mitchell-Tarbell.

### Заключение

Анализируя полученные результаты, можно утверждать, что процесс тепломассопереноса в химически реагирующих потоках зависит от аэродинамической картины и тепловых характеристик процесса горения. В заключение можно отметить, что использование при численных исследованиях кинетических моделей формирования концентрационных характеристик имеет значительное влияние на образование оксидов азота  $\text{NO}_x$ . На выходе из топочной камеры расчетное значение концентрации  $\text{NO}$  по модели Mitchell-Tarbell равно  $613 \text{ mg/m}^3$ , а по модели De Soete –  $463 \text{ mg/m}^3$ . Сравнения с известными данными [13-14] показало, что результаты численного расчета концентрационных полей  $\text{NO}_x$  по модели Mitchell-Tarbell более адекватно описывает реальный процесс массопереноса во время сжигания высокозольного казахстанского пылеугольного топлива.

### Литература

- 1 Askarova A., Bolegenova S., Maximov V., et al. 3-D Modeling of Heat and Mass Transfer during Combustion of Solid Fuel in BKZ-420-140-7C Combustion Chamber of Kazakhstan // *Journal of Applied Fluid Mechanics*. – 2016. – Vol. 9(2). – P.699-709.
- 2 Glarborg P., Jensen A., Johnsson J. Fuel nitrogen conversion in solid fuel fired systems // *Progress in Energy and Combustion Science*. – 2003. – Vol. 29(2). – P.89-113.
- 3 Pershing D.W., Wendt J.O.L. Pulverized coal combustion: the influence of flame temperature and coal composition on thermal and fuel NOx // *Int. Symposium on Combustion. The Combustion Institute*. – 1976. – Vol. 16. – P.389-404.
- 4 Smith P.J., Hill S.C., Smoot L.D. Theory for NO formation in turbulent coal flames // *19th Symposium (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute*. – 1982. – P.1263-1270.
- 5 Askarova A., Maximov V., Beketayeva M., Safarik P., et al. Numerical Modeling of Pulverized Coal Combustion at Thermal Power Plant Boilers // *Journal of thermal science*. – 2015. – Vol.24(3). – P.275-282.
- 6 Leithner R., Müller H. CFD studies for boilers. Second M.I.T. // *Conf. on Computational Fluid and Solid Mechanics. Cambridge*. – 2003. – P.172-187.
- 7 Полежаев В.И., Буне А.В. и др. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнения Навье-Стокса. – М.: Наука, 1982. – 272 с.
- 8 Варнац Ю., Маас У. Горение. Физические и химические аспекты. – М.: Физматлит, 2003. – 352 с.
- 9 Askarova A., Bolegenova S., Beketayeva M., et al. Computational method for investigation of solid fuel combustion in combustion chambers of a heat power plant // *High temperature*. – 2015. – Vol. 5(5). – P.751-757.
- 10 Müller H. Numerische Simulation von Feuerungen. CFD–Vorlesung, TU. Braunschweig: IWBT, 1997. – 8 p.
- 11 De Soete G. Overall reaction rates of NO and N<sub>2</sub> formation from fuel nitrogen // *15th Intern. symposium on combustion. Pittsburgh*. – 1975. – P.1093-1102.
- 12 Mitchell J., Tarbell J. A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion // *AICHE Journal*. – 1982. – Vol.28. – P.302-320.
- 13 Алияров Б.К., Алиярова М.Б. Сжигание казахстанских углей на ТЭС и на крупных котельных: опыт и перспективы. – Алматы, 2011. – 306 с.
- 14 RND 34.02.303-91 Отраслевая инструкция по нормированию внешних факторов в атмосфере для тепловых электротехнических и котельных. Астана, 2005. – 36 с.

### References

- 1 Askarova, S. Bolegenova, V. Maximov, et al., *Journal of Applied Fluid Mechanics* 9(2), 699-709, (2016).
- 2 P. Glarborg, A. Jensen and J. Johnsson, *Progress in Energy and Combustion Science* 29(2), 89-113, (2003).
- 3 D.W. Pershing and J.O.L. Wendt, *Proc. of the Stationary Source. Combustion Symposium (Pittsburgh, June, 1976)*, p.389-404.
- 4 P.J. Smith, S.C. Hill, and L.D. Smoot, *Proc. of 19th Symposium (International) on Combustion (Haifa, 8-13 August, 1982)*, p.1263-1270.
- 5 A. Askarova, V. Maximov, M. Beketayeva, P. Safarik, and et al., *Journal of thermal science* 24(3), 275-282, (2015).
- 6 R. Leithner and H. Müller, *Proc. of 2nd M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics (Cambridge, 17 – 20 June, 2003)*, p.172-187.
- 7 V.I. Polezhaev, A.V. Bune i dr., *Matematischeskoe modelirovanie konvektivnogo teplomassoobmena na osnove uravneniy Navie-Stoksa, (Moscow, 1987)*, 272 p. (in Russ.)
- 8 Yu. Varnaats and U. Maas, *Gorenie. Fizicheskie i khimicheskie aspekti, (Moscow, 2003)*, 352 p. (in Russ.)
- 9 A. Askarova, S. Bolegenova, M. Beketayeva, and et al., *High temperature* 5(5), 751-757, (2015).
- 10 H. Müller, *CFD. Vorlesung, (TU, 1997)*, 8 p.
- 11 G. De Soete, *Proc. of 15th international symposium on combustion, (Pittsburgh, August, 1975)*, p.1093-1102.
- 12 J. Mitchell and J. Tarbell, *AICHE Journal* 28, 302-320, (1982).
- 13 B.K. Aliarov and M.B. Aliarova, *Szhiganie kazhastanskih uglei na TEC i na krupnih kotelnih: opyt i perspektivi (Almaty, 2011)* 306 s. (in Russ.)
- 14 RND 34.02.303-91 *Otraslevaya instruksiya po normirovaniyu vrednykh vybrosov v atmosferu dlya teplovykh elektrostansiy i kotel'nykh, (Astana, 2005)*, 36 s. (in Russ.)