УДК 621.43.056

## В.Е. КОСТЮК<sup>1</sup>, И.Ф. КРАВЧЕНКО<sup>2</sup>, В.Н. ГУСЕВ<sup>2</sup>, А.А. КОНОПЛЕНКО<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина <sup>2</sup>ГП «Ивченко-Прогресс», Запорожье, Украина

# ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВЫБРОСОВ ОКСИДОВ АЗОТА МОДЕЛЬНОЙ КАМЕРОЙ СГОРАНИЯ, ОСНАЩЕННОЙ УСТРОЙСТВОМ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ ТОПЛИВНОГО ГАЗА С ВОЗДУХОМ

Разработана математическая модель химически реагирующего течения, включающая два кинетических механизма формирования оксидов азота. Предложенная численная модель верифицирована на задаче о диффузионном горении струи водорода в спутном потоке воздуха и идентифицирована по результатам испытаний модельной камеры сгорания, оснащенной устройством предварительного смешения. Получена подробная информация об образовании NO в пламени по термическому и «быстрому» механизмам и о влиянии смешения топлива (метана) и воздуха на выбросы оксидов азота модельной камеры сгорания. Численная модель пригодна для прогнозирования влияния качества предварительного смешения топливовоздушной смеси на выбросы оксидов азота.

**Ключевые слова**: камера сгорания, оксиды азота, гомогенное сжигание, качество смешения, математическое моделирование, верификация, идентификация

#### Введение

Большинство стационарных ГТУ работает на газообразном топливе. В настоящее время это, как правило, природный газ, состоящий в основном из метана. Перспективным является применение в ГТУ, работающих в составе энерготехнологических комплексов, синтез-газа — смеси углеводородов, монооксида углерода и водорода. В более далекой перспективе планируется использовать в качестве топлива ГТУ чистый водород. Во всех случаях при горении в результате окисления азота, содержащегося в атмосферном воздухе, образуются оксиды азота NO<sub>x</sub> (NO, NO<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>O) — наиболее токсичные и экологически вредные соединения.

В настоящее время разработано несколько экологичных технологий сжигания топливного газа, наиболее перспективной из которых считается технология сжигания бедной, заранее перемешанной гомогенной топливовоздушной смеси (ТВС) [1, 2].

Камера сгорания (КС), реализующая такую технологию представляет собой комбинацию устройства предварительного смешения топливного газа с воздухом (УПС) и зоны горения приготовленной горючей смеси. Обычно УПС конструктивно входит в состав фронтового устройства КС. Поэтому наряду с основным требованием обеспечения низких выбросов  $NO_x$  за счет рационального обеднения и гомогенизации ТВС, к нему предъявляется комплекс дополнительных требований: умеренное гидравлическое сопротивление, наличие условий

для надежного воспламенения ТВС и стабилизации ее горения за пределами устройства без возникновения термоакустических колебаний, отсутствие условий для проскока пламени внутрь устройства и стабилизации его там, самовоспламенения ТВС и др. В результате аэродинамическая и концентрационная структура потока на выходе из УПС очень специфична и существенно влияет на процессы в зоне горения: химические реакции, сложный теплообмен, диффузию, турбулентное перемешивание топливовоздушных и газовых потоков.

Очевидно, что наработка  $NO_x$  происходит в зоне горения ТВС. В.Р. Кузнецов [3] показал, что кроме химической кинетики окисления азота, выбросы  $NO_x$  определяются процессом смешения и влиянием смешения на условия протекания химических реакций. Поэтому для надежного прогнозирования выбросов  $NO_x$  необходимо подробное знание соответствующих кинетических механизмов, аэродинамической и концентрационной структуры химически реагирующего течения.

В последнее время, в связи с развитием методов вычислительной аэрогидродинамики, появилась возможность численного решения подобных задач [4-6]. Анализ достигнутых авторами результатов показывает, что в силу ряда теоретических и методических проблем априорное прогнозирование выбросов  $NO_x$  системами горения с приемлемой для практики точностью остается невозможным. Для обеспечения необходимой точности таких расчетов требуется тщательная верификация и идентифика-

ция численных моделей по экспериментальным данным.

Цель настоящей работы состоит в разработке численной модели прогнозирования выбросов NO<sub>x</sub>, ее верификации на тестовой задаче и идентификации по данным испытаний модельной КС, оснащенной УПС разработки ГП «Ивченко-Прогресс».

#### 1. Механизмы образования NO<sub>x</sub>

Принято полагать, что совокупность оксидов азота NO<sub>х</sub> можно представить только одним оксидом азота NO, имея в виду, что он менее устойчив и в конечном итоге доокисляется до NO<sub>2</sub>.

Как правило, большая часть NO при горении бедных ТВС образуется по цепному механизму Я.Б. Зельдовича [7]:

$$O_2 \leftrightarrow 2O;$$
 (1)

$$O_2 \leftrightarrow 2O; \tag{1}$$

$$O + N_2 \leftrightarrow N + NO; \tag{2}$$

$$N + O_2 \leftrightarrow O + NO.$$
 (3)

Реакции окисления топлива в воздухе при избытке последнего играют незначительную роль в образовании NO, просто нагревая смесь. Цепные реакции образования NO начинаются с высвобождения атомов кислорода в результате термической диссоциации молекул кислорода, не израсходованных при горении вследствие избытка воздуха. Появляющиеся затем атомы азота реагируют с молекулярным кислородом и образуют NO. Равновесная термическая диссоциация при температурах, характерных для КС современных ГТУ, не достигается, поэтому единственным источником атомарного азота служит реакция (2). Из-за сильной тройной связи в молекуле  $N_2$  реакция (2) имеет очень высокую энергию активации  $E_a \approx 38200$  кДж, и поэтому является достаточно быстрой только при высоких температурах Т > 1800 К. В связи с этим данный механизм образования NO получил название «термического». Поскольку скорость реакции (2) достаточно низкая, это лимитирующая стадия процесса термического образования NO.

Таким образом, ключевым параметром процесса горения, ответственным за наработку NO<sub>x</sub>, является коэффициент избытка воздуха α – максимальный выход оксидов азота наблюдается в ТВС околостехиометрического состава, где температура максимальна и имеется свободный кислород. Поэтому технология сжигания топлива, которая снижает максимальные температуры (например, за счет обеднения и гомогенизации ТВС), будет снижать и выход NO.

Механизм «быстрого» образования NO включает наряду с реакцией (3) реакции [8]:

$$CH + N_2 \leftrightarrow HCN + N;$$
 (4)

$$HCN + OH \leftrightarrow CN + H_2O;$$
 (5)

$$CN + O_2 \leftrightarrow NO + CO.$$
 (6)

При низких температурах ( $T_{nn}$  < 1800 K) образование NO по термическому механизму мало по сравнению с общим количеством оксидов азота. При этом основной вклад в образование вносят «быстрые» оксиды азота. Их образование происходит в зонах, содержащих углеводородные радикалы.

### 2. Математическая модель химически реагирующего течения

Математическая модель химически реагирующего течения, сформирована на основе осредненных по Рейнольдсу стационарных уравнений Навье-Стокса в пренебрежении гравитацией, сжимаемостью, объемной вязкостью и термодиффузией, и включает уравнения неразрывности, сохранения количества движения, сохранения энергии и переноса химических компонентов смеси вида:

$$\nabla(\vec{\mathbf{v}}) = 0 \; ; \tag{7}$$

$$\nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = \nabla p + \nabla \cdot (\tau); \tag{8}$$

$$\nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = -\nabla \cdot \vec{J}_{q} + S_{h}; \qquad (9)$$

$$\nabla \cdot (\vec{v} \rho Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i, \qquad (10)$$

где  $\rho$  – плотность;  $\vec{v}$  – скорость; p – статическое давление; т – тензор давлений; Е – полная энергия;  $\vec{J}_{q}$  – плотность теплового потока;  $S_{h}$  – источниковый член, описывающий тепловыделение в результате химических реакций; Y<sub>i</sub> - концентрация i-го компонента смеси;  $\vec{J}_i$  – плотность диффузионного потока іго компонента смеси; R<sub>i</sub> - скорость образования i-го компонента в результате химических реакций.

Уравнения (7) - (10) замыкаются законами Ньютона для тензора давлений, Фурье для теплового потока, Фика для потока массы, Клайперона-Менделеева для термодинамического состояния смеси газов, уравнениями стандартной модели турбулентности k-є Лаундера-Сполдинга [9] и модели турбулентного горения Магнуссена-Хертагера [10].

Система дифференциальных уравнений с частными производными (ДУЧП) (7) – (10) и модели турбулентности дополнялась соответствующими конкретной задаче граничными условиями. Для описания течения в пристеночной области использовались функции стенки. Численное интегрирование ДУЧП осуществлялось методом контрольного объема с использованием схемы аппроксимации конвективных членов «против потока» второго порядка точности.

Подмодель формирования оксидов азота представляет собой уравнение массового переноса (12), записанное для NO:

$$\nabla \cdot (\vec{v} \rho Y_{NO}) = -\nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{NO}) + R_{NO}, \quad (11)$$

где D – коэффициент диффузии.

Влияние времени пребывания реагентов в реакционном объеме на образование NO учтено в конвективном члене данного уравнения, записанного в Эйлеровой системе отсчета. В общем виде источниковый член  $R_{\rm NO}$  можно записать следующим образом:

$$R_{NO} = M_{NO} \left( \frac{d[NO]_t}{dt} + \frac{d[NO]_p}{dt} \right), \tag{12}$$

где  $M_{NO} = 30$  – молекулярная масса NO;  $\frac{d[NO]_t}{dt}$ ,

 $\frac{d[NO]_p}{dt}$  — скорости образования термического и «быстрого» NO соответственно, определяемые по формулам:

$$\frac{d[NO]_{t}}{dt} = \frac{2[O]\{k_{1}k_{2}[O][N_{2}] - k_{-1}k_{-2}[NO]^{2}\}}{k_{2}[O_{2}]k_{-1}[NO]}; (13)$$

$$\frac{d[NO]_p}{dt} = f \cdot k_p [O_2]^a [N_2] [CH_4] e^{-E_a/RT}, \quad (14)$$

где [NO], [N<sub>2</sub>], [O<sub>2</sub>], [O], [CH<sub>4</sub>] – концентрации соответствующих компонентов кинетической схемы;  $k_1$ ,  $k_2$ , – константы скорости прямых реакций (1) и (2);  $k_{-1}$ ,  $k_{-2}$  – константы скорости обратных реакций (1) и (2);  $k_p$  – константа скорости прямой реакции (3); f – эмпирический коэффициент.

Концентрации  $[N_2]$ ,  $[O_2]$ ,  $[CH_4]$  брались из рассчитанных полей концентраций, а концентрация [O] определялась, исходя из гипотезы о частичном термодинамическом равновесии [12]:

$$[O] = AT^{1/2}[O_2]^{1/2}e^{-E_a/RT},$$
 (15)

где А – эмпирический коэффициент.

#### 3. Верификация математической модели

Для верификации разработанной математической модели была решена задача о диффузионном горении струи водорода в спутном потоке воздуха, для которой имеются подробные экспериментальные данные [11].

Измерения производились в границах видимого пламени  $L_{\text{виз}}$  (рис. 1) в точках, расположенных на оси симметрии на расстояниях от среза горелки  $x/L_{\text{виз}}=1/8,\ 1/4,\ 3/8,\ 1/2,\ 5/8,\ 3/4,\ 1.$  Режим течения соответствовал числу Рейнольдса Re=10000. При проведении эксперимента выполнялось около 800 замеров мгновенных значений температуры и концентрации NO в каждой точке высокоточным лазерным методом с их последующей статистической обработкой.

Численное моделирование выполнялось в двухмерной осесимметричной постановке на неравномерной расчетной сетке, включавшей 12310 прямоугольных ячеек. Полагалось, что горение водоро-

да в воздухе описывается одноступенчатой необратимой суммарной химической реакцией

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O.$$
 (15)

Было выполнено три расчета: исходный — без учета диссоциации  $H_2O$  и коррекции концентрации атомарного кислорода (A=36,64), с коррекцией теплоемкостей для учета диссоциации, но без коррекции концентрации атомарного кислорода (A=36,64) и, наконец, с коррекцией теплоемкостей и концентрации атомарного кислорода (A=11).

Результаты исходного расчета показаны на рис. 2 - 6. Сравнение с фотографией пламени (рис. 1) показывает, что численная модель хорошо описывает форму факела (рис. 2) и правдоподобно предсказывает распределение концентрации топлива (рис. 3), окислителя (рис. 4) и оксидов азота, образующихся по термическому механизму (рис. 5). В частности, максимум скорости образования оксидов азота приходится на зону, находящуюся несколько ниже по течению от зоны максимальных температур (рис. 6). Это обусловлено тем, что для образования оксидов азота кроме высокой температуры необходим также свободный кислород. Последний практически отсутствует в зоне максимальной температуры, занятой продуктами сгорания. Однако ниже по течению кислород переносится к приосевой области из периферии вследствие турбулентной диффузии.

Результаты расчетов в контрольных точках в сравнении с мгновенными и осредненными по ансамблю экспериментальными данными показаны на рис. 7. Из рисунков видно, что все модели завышают максимальную температуру газа (от 0,5 до 30%) и особенно максимальную концентрацию NO (от 20 % до нескольких раз). Лучшие результаты получены с коррекцией теплоемкостей и концентрации атомарного кислорода.

#### 4. Расчет выбросов NO<sub>х</sub> модельной КС

Целью расчетного исследования было получение подробной информации об образовании NO в пламени по термическому и «быстрому» механизмам и о влиянии качества смешения топлива (метана) и воздуха на выбросы оксидов азота модельной КС, оснащенной УПС разработки ГП «Ивченко-Прогресс» (рис. 8).

Численное моделирование выполнялось в двухмерной осесимметричной постановке на неравномерной расчетной сетке, включавшей 34847 четырехугольных элементов. Полагалось, что горение метана в воздухе описывается одноступенчатой необратимой суммарной химической реакцией

$$CH_4 + 3O_2 \rightarrow 4H_2O + CO_2.$$
 (15)



Рис. 1. Фотография пламени



Рис. 2. Температура газа: минимальная – 294 К (белый), максимальная – 2480 К (черный)



Рис. 3. Массовая доля  $H_2$ : минимальная – 0 (белый), максимальная – 1,0 (черный)

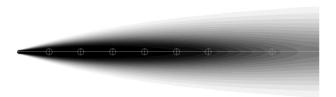


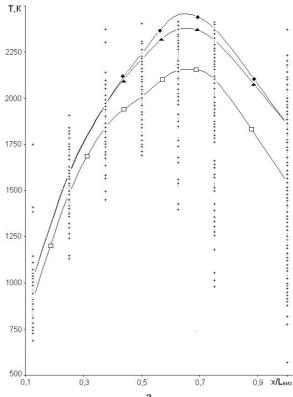
Рис. 4. Массовая доля  $O_2$ : минимальная – 0 (черный), максимальная – 0,232 (белый)



Рис. 5. Массовая доля NO: минимальная – 0 (белый), максимальная –  $1,59\cdot10^{-3}$  (черный)



Рис. 6. Скорость образования NO: минимальная -0 (белый), максимальная -1,16 кмоль/(м<sup>3</sup>·c) (черный)



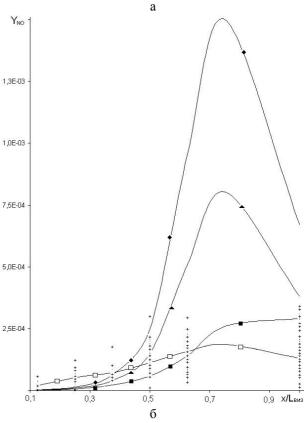


Рис. 7. Температура газа (а) и массовая доля NO (б) в контрольных точках, расположенных на оси симметрии на различных расстояниях от среза горелки: ◆ – исходный расчет; ▲ – расчет с коррекцией теплоемкостей; ■ – расчет с коррекцией теплоемкостей и концентрации атомарного кислорода; +, □ – эксперимент [11]

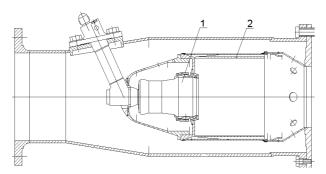


Рис. 8. Модельная КС на испытательном стенде: 1 – УПС; 2 – жаровая труба

Были выполнены шесть расчетов (табл. 1) для пяти различных режимов с гомогенным сжиганием топлива, различавшихся коэффициентами избытка воздуха по основному  $\alpha_2$  и дежурному  $\alpha_1$  контурам и долей топлива  $g_{\tau 1}$ , подаваемого в дежурный контур, а также для одного режима «1а» с чисто диффузионным сжиганием топлива (в качестве предельной оценки влияния минимального качества смешения).

Результаты расчетов для режимов «1» и «1а» представлены на рис. 9 и 10. Сравнение показывает, что максимальные температура пламени и концентрация оксидов азота при чисто диффузионном сжигании топлива значительно выше, чем при гомогенном.

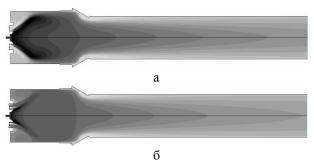


Рис. 9. Температура газа при диффузионном (а) и гомогенном (б) сжигании метана в модельной КС: минимальная – 393 К (белый), максимальная – 2520 К (черный)

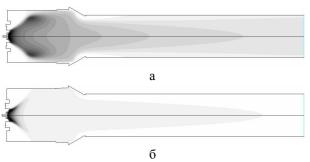


Рис. 10. Массовая доля термических NO при диффузионном (а) и гомогенном (б) сжигании метана в модельной КС: минимальная – 0 (белый), максимальная –  $4,7\cdot10^{-3}$  (черный)

Таблица 1 Режимные параметры

№ режима	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$g_{{\scriptscriptstyle \mathrm{T}}1}$
1	0,26	2,22	0,0777
1a	0,26	2,22	0,0777
2	0,43	1,65	0,0352
3	0,60	2,11	0,0329
4	0,19	1,66	0,0767
5	0,24	2,17	0,0799

Расчеты подтвердили известный факт, что обеднение и гомогенизация ТВС в КС ГТД приводит к сокращению выбросов NO. При A=77 численные результаты хорошо согласуются с данными измерений: относительное завышение расчетом температуры газа на выходе из измерительного участка составило 1,5-4,3%, концентрации NO – от 13 до 22%. Расчетные оценки концентрации «быстрого» NO на всех режимах пренебрежимо малы по сравнению с термическим, поэтому для модельной КС КС, оснащенной УПС разработки ГП «Ивченко-Прогресс», ею можно пренебречь.

#### Заключение

Разработана математическая модель химически реагирующего течения, включающая два кинетических механизма формирования оксидов азота. Модель успешно верифицирована на задаче о диффузионном горении струи водорода в спутном потоке воздуха и идентифицирована по результатам испытаний модельной КС, оснащенной УПС разработки ГП «Ивченко-Прогресс». Расчеты подтвердили известный факт, что обеднение и гомогенизация ТВС в КС ГТД приводит к сокращению выбросов NO, и показали, что концентрации «быстрого» NO пренебрежимо малы по сравнению с термическим. Численная модель пригодна для прогнозирования влияния качества предварительного смешения ТВС на выбросы оксидов азота.

#### Литература

- 1. Постников А.М. Снижение оксидов азота в выхлопных газах ГТУ / А.М. Постников; под ред. Е.А. Гриценко. Самара: Самарский научный центр PAH, 2002.  $286\ c$ .
- 2. Проблема и пути создания малотоксичных камер сгорания для перспективных стационарных  $\Gamma TY / A.\Gamma$ . Тумановский, М.Н. Гутник, В.Д. Васильев, Л.В. Булысова, М.М. Гутник // Теплоэнергетика. 2006.-N 27-C.22-29.
- 3. Кузнецов В.Р. Образование окислов азота в камерах сгорания ГТД / В.Р. Кузнецов // Тр. ЦИАМ. М.: ЦИАМ, 1983. № 1086. С. 8-18.
- 4. Сербин С.И. Исследование механизмов образования оксидов азота в камере сгорания газотур-

бинной установки «Водолей» / С.И. Сербин, А.Б. Мостипаненко // Авиационно-космическая техника и технология. — 2006. —  $\mathbb{N}^{\circ}$  (33). —  $\mathbb{C}$ . 93-97.

- 5. Кобзарь С.Г. Апробация упрощенной модели расчета горения и формирования оксидов азота при сжигании жидкого топлива / С.Г. Кобзарь, А.А. Халатов // Пром. теплотехника. 2006. Т. 28,  $N_2$  3. С. 62-69.
- 6. Study on  $NO_x$  Formation in  $CH_4$  / B. Jiang, H. Liang, G.Huang, X. Li // Air Jet Combustion. Chinese J. Eng. -2006. -Vol. 14, No. 6. -P. 723-728.
- 7. Зельдович Я.Б. Окисление азота при горении / Я.Б. Зельдович, П.А. Солодовников, Д.А. Франк-Каменецкий. М.: АН СССР, 1947. 27 с.
- 8. Fenimore C.P. Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames / C.P. Fenimore // Proc. 13th Symp. (Int.) Combustion: The Combustion Institute. Pittsburg, 1971. P. 373-376.
  - 9. Launder B.E. The Numerical Computation of

Turbulent Flows / B.E. Launder, D.B. Spalding // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 1974. – P. 10-17.

- 10. Magnussen B.F. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion / B.F. Magnussen, B.H. Hjertager // Proc. 16th Int. Symp. on Combustion. 1976. P. 747-775.
- 11. Barlow R.S. Simultaneous measurements of Major Species, OH and NO in Nonpremixed H2 and H2/He Jet Flames / R.S. Barlow, C.D. Carter // Sandia Report. Proceedings of the International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames. 2003. P. 21-23.
- 12. Варнатц Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл; под ред. П.А. Власова. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2003. 352 с.

Поступила в редакцию 30.05.2009

**Рецензент:** д-р техн. наук, проф., проф. кафедры Д.Ф. Симбирский, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина.

# ПРОГНОЗУВАННЯ ВИКИДІВ ОКСИДІВ АЗОТУ МОДЕЛЬНОЇ КАМЕРИ ЗГОРЯННЯ, ЩО ОСНАЩЕНА ПРИСТРОЄМ ПОПЕРЕДНЬОГО ЗМІШУВАННЯ ПАЛИВНОГО ГАЗУ З ПОВІТРЯМ

#### В. Є. Костюк, І.Ф. Кравченко, В.М. Гусєв, А.А. Конопленко

Розроблено математичну модель хімічно реагуючої течії, що містить два кінетичних механізми формування оксидів азоту. Запропонована числова модель верифікована на задачі про дифузійне горіння струменю водню в супутньому струмені повітря та ідентифікована за результатами випробувань модельної камери згоряння, що оснащена пристроєм попереднього змішування. Отримано детальну інформацію про утворення NO в полум'ї за термічним і «швидким» механізмами та про вплив змішування палива (метану) з повітрям на викиди оксидів азоту модельною камерою згоряння. Числова модель придатна для прогнозування впливу якості попереднього змішування паливноповітряної суміші на викиди оксидів азоту.

**Ключові слова**: камера згоряння, оксиди азоту, гомогенне спалювання, якість змішування, математичне моделювання, верифікація, ідентифікація.

# EXPERIMENT-CALCULATED RESEARCH OF THE FUEL/AIR PREMIXER FOR LOW-EMISSION GAS TURBINE COMBUSTORS

#### V. Ye. Kostyuk, I.F. Kravchenko, V.N. Gusev, A.A. Konoplenko

Methodology of the experiment-calculated research of the fuel/air premixer for low-emission gas turbine combustors by mixing performance and flow resistance criteria is developed using CFD methods. Proposed numerical model of the flow and mass transfer is verified on the problems, which objects possess physical community with the research object. Premixer experimental research methodology is described. Developed methodology has shown its efficiency. It is reasonable to use it during designing and refinement cycle of the similar products.

**Key words:** gas turbine, nitride oxide, premixer, mixing performance, flow resistance, mathematical simulation, experiment.

**Костюк Владимир Евгеньевич** – канд. техн. наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: aedlab@ic.kharkov.ua.

**Кравченко Игорь Федорович** – канд. техн. наук, первый заместитель руководителя предприятия – главный конструктор, ГП «Ивченко-Прогресс», Запорожье, Украина, e-mail: i.kravchenko@ivchenko-progress.com.

**Гусев Владимир Николаевич** – начальник отдела, ГП «Ивченко-Прогресс», Запорожье, Украина, e-mail: 03503@ivchenko-progress.com.

**Конопленко Анатолий Александрович** – аспирант, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: aedlab@ic.kharkov.ua.