# ОЦЕНКА КОНЦЕНТРАЦИИ ОКСИДОВ АЗОТА НА ВЫХОДЕ ИЗ КАМЕРЫ СГОРАНИЯ МОДЕЛЬНОЙ ГАЗОВОЙ ТУРБИНЫ

Ю.А. Каграманов<sup>1</sup>, В.Г. Тупоногов<sup>2</sup>, А.Ф. Рыжков<sup>2</sup>, У.В. Жижина<sup>2</sup>, В.В. Назарова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ООО «ПЛМ Урал», г. Екатеринбург, Россия, <sup>2</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

> В настоящей работе был применен новый метод оценки концентраций оксидов азота при горении синтез-газа в камере сгорания газовой турбины. Метод позволил связать полный детальный механизм массива параллельных реакций Grimech 3.0 с уравнениями компьютерной гидродинамики (уравнения движения, тепломассообмена, турбулентности и молекулярной диффузии для потока идеального газа). Представлены диаграммы селективности процесса образования оксидов азота по константам скоростей реакций, включающего одиннадцать ключевых реакций, для бедной и богатой топливом смесей. Проведены верификационные расчеты на модельной камере сгорания газовой турбины в интервале значений коэффициента избытка топлива 0,5–2. Новая методика была применена при определении выбросов оксида азота и максимальной температуры стенки пламенной трубы промышленной камеры сгорания. Наилучшие результаты по выбросам оксидов азота показал состав газа GE. Самыми проблемными газами являются синтез газа Polk Power и Texaco (кислородный процесс). При сжигании низкокалорийных газов в зоне подсоса первичного воздуха наблюдается зона рециркуляции, за счет высокого теплонапряжения в этой области максимальная температура стенки составляет около 500 °C.

Ключевые слова: газовая турбина, оксиды азота, ANSYS Fluent, CHEMKIN.

### Введение

Технологии парогазовых циклов с внутрицикловой газификацией твердого топлива по мнению многих специалистов [1, 2] могут составить конкуренцию традиционным системам генерации электроэнергии и активно развиваются в последнее время. Особенностью парогазовой установки является наличие газовой турбины. Одной из проблем при проектировании газовой турбины является оценка выбросов оксидов азота. На сегодняшний день не существует единой методики расчета выбросов ввиду сложности процесса образования оксидов, зависящего как от параметров потока (скорость, температура, концентрации компонентов, вихри), так и от химического механизма, который еще до конца не изучен.

Существуют различные методики описания процесса как экспериментальные, так и расчетные. В работе [3] производились исследования процесса горения топлива в камере сгорания модельной турбины оптическими методами, в ходе которых были определены поточные зоны и зоны рециркуляции. На базе проведенных опытов проводилась верификация ряда вычислительных методов. В [4] для описания турбулентности использовалась модель LES. В работе отмечалась нестационарность термодинамики и колебательная природа процесса образования оксидов азота. Аналогичная модель использовалась в работах [5, 6]. Во всех приведенных выше расчетах применялся достаточно упрощенный химический механизм, состоящий из 16 реакций, всего лишь три из которых относились к оксидам азота, вследствие чего в моделях отслеживались только монооксид азота и синильная кислота.

В рассматриваемом процессе могут реализовываться 11 реакций образования оксидов азота [7] по трем известным механизмам: термический механизм образования монооксида азота (механизм Зельдовича), реакции 1–3, N<sub>2</sub>O-механизм, реакции 4–6 и NO<sub>2</sub>-механизм образования радикалов, реакции 7–11. Для реакций в табл. 1 приведены параметры уравнения Аррениуса: предэкспоненциальный множитель –  $k_0$ , энергии активации – E.

В работе [7] были изучены механизмы горения метана в богатой и бедной топливом смеси, которые можно представить в виде диаграмм селективности реакций (рис. 1, 2). В бедной смеси (см. рис. 1) азот преобразуется в монооксид азота по двум основным путям: напрямую и через синильную кислоту. Первый путь является более вероятным, константа скорости реакции более чем в два раза превышает константу скорости реакции второго пути. В ходе первого пути возможно выделение ионов азота, которые при взаимодействии с имидогеном (NH) и кислородом приводит к появлению монооксида азота. Еще одним сильным (сравнимым по скорости с первым путем) процессом можно назвать появление монооксида азота из двуокиси азота. Двуокись азота в свою очередь получается только лишь в ходе обратного процесса, который менее интенсивен.

N⁰	Реакция	$k_0$ , моль/(см <sup>3</sup> с)	<i>k</i> <sub>0</sub> , моль/(см <sup>3</sup> с) <i>Е</i> , Дж/моль		
1	$O + N_2 = NO + N$	4,5487e + 10	35991,4	[8]	
2	$N + O_2 = NO + O$	6e + 9	6300		
3	N + OH = NO + H	6e + 11	8000	[9]	
4	$N_2O + O = 2NO$	1e + 14	28 000		
5	$N_2O + H = NH + NO$	3,87e + 14	18 880		
6	$N_2O + CO = NCO + NO$	1,9e + 17	740		
7	$NO_2 + OH = HO_2 + NO$	2,11e + 12	-480	[10]	
8	$NO_2 + M = O + M + NO$	1e + 20	0	[10]	
9	$NO_2 + O = O_2 + NO$	3,9e + 12	-240		
10	$NO_2 + H = OH + NO$	1,32e + 14	360		
11	$NO_2 + CN = NCO + NO$	1e - 10	-171	[11]	

Ключевые реакции процесса образования оксидов азота [7]

Таблица 1

#### N2 · k, моль/(см<sup>3</sup>с)\*10<sup>7</sup> HOCN HCN >10 5-10 HCNO 2-5 NCO 0,6-5 NO2 HNCO <0,6 NO NH2 NH N N HNO

Рис. 1. Диаграмма селективности процесса в бедной смеси, φ = 0,9 [7]



Рис. 2. Диаграмма селективностей процесса в богатой смеси,  $\phi$  = 1,3 [7]

В богатой смеси (см. рис. 2) остается только один путь – через синильную кислоту, значительно менее интенсивный, чем в бедной. В механизме преобладают в основном промежуточные реакции преобразования нитроксила в монооксид углерода и обратно. Из рис. 1, 2 видно, что в бедной смеси ключевыми продуктами реакций являются монооксид углерода и синильная кислота, что согласуется с предположениями [6]. Но при коэффициенте избытка топлива  $\phi > 1,3$  (величина, обратная коэффициенту избытка воздуха) доминирующими продуктами становятся NO, HNO и радикалы: HOCN, HCNO, HNCO.

В данной работе представлена новая методика расчета процессов образования оксидов азота в камере сгорания газовой турбины. Методика состоит из связанных между собой расчетов гидродинамики газового потока в камере сгорания и химических реакций по приведенным селективным схемам. Расчеты выполнены в программных пакетах компании CHEMKIN, Energico и Reaction Design, недавно появившихся в составе ANSYS [12], которые позволяют представлять процесс образования оксидов азота в более детальном виде при значительной экономии расчетного ресурса и способны спрогнозировать зависимость изменения продуктов сгорания от режима сжигания топлива. Разработанная методика применена к расчету модельной камеры сгорания газовой турбины, работающей на угольном синтез-газе

#### Постановка задачи и методика расчета

Схема модельной камеры показана на рис. 3 [13]. Первичный воздух подается через нижнюю решетку с завихрителями через отверстие d = 24 мм, а топливо – через 12 отверстий с d = 1,5 мм. Вторичный воздух подается в четыре секции, в каждой из которых имеется 12 отверстий с d = 13 мм.

Объемная модель камеры была выстроена в соответствии с известными чертежами изделия [13]. Расчетная область была разбита на 492 тыс. полиэдрических элемента (рис. 4).

Изначально сетка состояла из ~ 900 тыс. тетраэдальных расчетных элементов. Благодаря функции ANSYSFluent объединения тетраэдальных элементов в более крупные полиэдрические количество элементов было снижено до 492 тыс., что сказалось на скорости расчета. Поверочный расчет производился по схеме, представленной на рис. 5.

Сначала рассчитывались гидродинамические характеристики потока, затем при помощи программы конвертера Energico данные из процессора переносились в химический решатель CHEMKIN.

Расчет гидродинамики осуществлялся в программе ANSYS Fluent. Рассматривался поток идеального газа. Решались уравнения неразрывности, движения, турбулентности, энергии, молекулярной диффузии. Для описания турбулентности применялась модель k-epsilon. В связи с тем, что поток закручивался, использовалась RNG-модель



Рис. 3. Модельная камера сгорания [13]

Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». 2020. Т. 20, № 3. С. 17–25

## Теплоэнергетика



Рис. 4. Преобразование тетраэдальной (а) сетки в полиэдрическую (б)



Рис. 5. Схема расчета

с включенной функцией закрученного потока (swirl dominated flow). Решение производилось в псевдо-нестационарной постановке. Дополнительно подключалась модель радиации (дискретных ординат).

В программе Energico по данным потока при помощи встроенных алгоритмов объем разбивался на массив реакторов изобарных либо изохорных. Тип реактора определялся в зависимости от свойств рассматриваемой зоны: поточная либо зона рециркуляции.

В ходе последнего третьего этапа, в программе CHEMKIN рассчитывался массив параллельных реакций в соответствии с полным механизмом горения метана Grimech 3.0.

Были проведены расчеты при коэффициентах избытка топлива  $\varphi$ , равных 0,5; 1; 1,5; 2. Темпера-

тура продуктов сгорания на выходе из камеры равнялась 1450 °С. Расход топлива составлял 0,01 кг/с. Состав топлива:  $H_2: CO: H_2O: CO_2: N_2 = 0,26: 0,56: 0,06: 0,03: 0,09$  («модельный синтез-газ» кислородной газификации угля [14]).

#### Результаты

Верификация модели расчета выбросов оксида азота на выходе из пламенной трубы камеры сгорания проводилась на основе сравнения со стендом модельной камеры сгорания, описанным в [13]. Результаты расчета показали отличие от экспериментальных данных на 2,5–10 % (рис. 6). Максимальное расхождение результатов СНЕМКІN и опытных данных при коэффициенте избытка топлива  $\varphi = 1$  уменьшилось на 20 % по сравнению с расчетными данными CFX [14]



Рис. 6. Сравнение методик оценки выбросов азота

По верифицированной модели были выполнены расчеты выбросов оксидов азота и монооксида углерода в камере сгорания турбины ГТ-100-750 КСВД. В качестве топливного газа были использованы угольные синтез-газы различного состава и типа газификации (табл. 2) и природный газ.

Наилучшие результаты по выбросам оксидов

азота показал состав газа GE (рис. 7). Самыми проблемными газами являются синтез-газы Polk Power и Texaco (кислородный процесс). Близкими к GE являются синтез-газы, полученные в ходе KRW и Texaco воздушной газификации. Выбросы монооксида углерода оказались максимальными при сжигании природного газа, в то время как

Таблица	2
---------	---

Процесс газификации	H <sub>2</sub>	СО	H <sub>2</sub> O	CO <sub>2</sub>	$H_2S$	Источник
Polk Power	26,9	35,9	18,1	12,3	0,8	[11]
GE	15	8	30	11	2,5	
KRW	10	15	5	15	2,5	[12]
Texaco air	12	13	25	4	0,5	[15]
Texaco oxygen	31,5	42	12	14	0,5	

Состав угольных синтез-газов, об. %





Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». 2020. Т. 20, № 3. С. 17–25 сжигание синтез-газа Texaco (воздушный процесс) показало минимальное значение этого параметра.

Несмотря на значительно более высокую низшую теплоту сгорания природного газа, максимальные температуры стенок, как в случае сжигания природного газа, так и в случае синтез-газов, имеют близкие значения (рис. 8).

Это связано с неравномерностью распределения поля температур по длине камеры. При сжигании природного газа пламя вытянутое, наибольшие температуры достигаются в зоне сужения потоков и подсоса вторичного воздуха.

При сжигании синтез газов Polk Power и Техасо (кислородный процесс) наибольшая теплонапряженность факела наблюдается в зоне смешения (первая ступень сгорания) (рис. 9), при этом температуры в этой зоне превышают те, что были при сжигании природного газа. В процессе сжига-



Рис. 8. Зависимости максимальной температуры стенки камеры сгорания и низшей теплоты сгорания газа от типа газа



Рис. 9. Поля температур в камере сгорания при сжигании синтез-газов: a – Polk Power; б – GE; в – KRW; г – Техасо; д – Техасо О2



Рис. 10. Зависимости концентрации выбросов и температуры стенки от температуры топлива: а – оксид азота; б – двуокись азота; в – монооксид углерода; г – максимальная температура стенки



Рис. 11. Зависимости концентрации выбросов и температуры стенки от температуры воздуха: а – оксид азота; б – двуокись азота; в – монооксид углерода; г – максимальная температура стенки

ния синтез-газов GE и Texaco (воздушный процесс) факел значительно меньше, но возникает ярко выраженная зона рециркуляции (выделена овальным контуром на рис. 9в). Экзотермические процессы, протекающие в этой зоне, повышают максимальную температуру стенки до 500 °C. При сжигании синтез газов Polk Power и Texaco (кислородный процесс) наибольшая теплонапряженность факела наблюдается в зоне смешения (первая ступень сгорания), при этом температуры в этой зоне превышают те, что были при сжигании природного газа.

Варьирование температуры топлива слабо влияет на выбросы оксидов азота и монооксида углерода, при этом наблюдается нелинейная зависимость изменения максимальной температуры стенки (рис. 10). При температуре топлива, близкой к 500 °С, достигается максимальная температура стенки.

С увеличением температуры воздушного дутья монотонно возрастает максимальная температура стенок, а выбросы оксидов азота и монооксида углерода сокращаются на полпорядка (рис. 11).

#### Заключение

В работе была протестирована новая методика расчета параллельных гомогенных реакций образования оксидов азота в камере сгорания газовой турбины при совместном применении ANSYS Fluent и CHEMKIN-Pro. Результаты расчетов показали, что при неизменной скорости расчета точность возросла на 20 % по сравнению с расчетами в CFX.

Применение методики для расчета процессов сжигания природного газа и четырех типов угольного синтез-газа в камере сгорания промышленной газовой турбины показало зависимость распределения температуры стенки по длине камеры и концентраций образующихся оксидов азота и монооксида углерода от состава топливного газа.

Изменение температуры топлива слабо влияет на концентрации выбросов оксидов азота и монооксида углерода, при этом температура стенки имеет экстремальную зависимость с максимумом при температуре топлива около 500 °C.

Увеличение температуры воздушного дутья приводит к возрастанию максимальной температуры стенок камеры, а выбросы оксидов азота и монооксида углерода значительно сокращаются.

### Литература/References

1. Giuffrida A., Romano M.C. Lozza G. Thermodynamic Analysis of Air-Blown Gasification for IGCC Applications. *Applied Energy*, 2011, vol. 88, pp. 3949–3958. DOI: 10.1016/j.apenergy.2011.04.009

2. Ryzhkov A. Technological solutions for an advanced IGCC plant. *Fuel*, 2018, vol. 214, pp. 63–72. DOI: 10.1016/j.fuel.2017.10.099

3. Stopper U. PIV, 2D-LIF and 1D-Raman measurements of flow field, composition and temperature in premixed gas turbine flames. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2010, vol. 34, pp. 396–403. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2009.10.012

4. Xia Y. Simulating Flame Response to Acoustic Excitation for an Industrial Gas Turbine Combustor. 24<sup>th</sup> International Congress on Sound and Vibration, 23–27 July, 2017, London.

5. Fedina E. Assessment of Finite Rate Chemistry Large Eddy Simulation Combustion Models. *Flow Turbul. Combust*, 2017, vol. 99. DOI: 10.1007/s10494-017-9823-0

6. Bulat G. NO and CO formation in an industrial gas-turbine combustion chamber using LES with the Eulerian sub-grid PDF method. *Combustion and Flame*, 2014. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.12.028

7. Eun-Seong Cho. Numerical Evaluation of NOx Mechanisms in Methane-Air Counter Flow Premixed Flames. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2009, vol. 23, pp. 659–666. DOI: 10.1007/s12206-008-1222-y

8. Bose D., Candlert G.V. Kinetics of the N2 + O  $\rightarrow$  NO + N Reaction Under Thermodynamic Nonequilibrium. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 1996, vol. 10, no. 1, p. 148. DOI: 10.2514/3.765

9. Waldman C.H., Wilson R.P., Jr., and K.L Maloney. Kinetic Mechanism of methane/air combustion with pollutant formation. *EPA-650/2-74-045*, June 1994, pp. 23–24.

10. Grimech 3.0. Available at: http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html (accessed 01.06.2020).

11. Park J., Hershberger J.F. Kinetics and product branching ratios of the CN + NO2 reaction. *The Journal of Chemical Physics*, 1993, vol. 99, 3488. DOI: 10.1063/1.466171

12. Webinar Recording: ANSYS Chemkin Pro and Energico. Reaction Design Product Overview. Available at: https://www.youtube.com/watch?v=ee\_uY5cHG2U&t=1293s (accessed 01.06.2020).

13. Hasegawa T. Gas Turbine Combustion Technology Reducing Both Fuel-NOx and Thermal-NOx Emissions for Oxygen-Blown IGCC WithHot/Dry Synthetic Gas Cleanup. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2007, vol. 129, pp. 358–369. DOI: 10.1115/1.2432896

14. Filippov P. Validation of the thermal NOx emissions model from a gas fuel combustor under atmospheric pressure. *Journal of Physics: Conference Series*, 2017, vol. 899, pp. 1–5. DOI: 10.1088/1742-6596/899/9/092005

15. Howe G. et al. RTI Warm Syngas Cleanup Operational Testing at Tampa Electric Company's Polk 1 IGCC Site: Final Scientific: Technical. Pittsburgh, PA, 2018. 197 p.

16. Woods M.C. Reaction kinetics and simulation models for novel high-temperature desulfurization sorbents. Research Triangle Inst., Research Triangle Park, NC; Louisiana State Univ., Baton Rouge, USA, 1989, no. DOE/MC/24160-2671.

Каграманов Юрий Александрович, инженер, ООО «ПЛМ Урал», г. Екатеринбург; KagramanovYA@ yandex.ru.

**Тупоногов Владимир Геннадиевич**, д-р техн. наук, доцент, профессор кафедры «Теплоэнергетика и теплотехника», Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург; v.g.tuponogov@urfu.ru.

**Рыжков Александр Филиппович**, д-р техн. наук, профессор, профессор кафедры «Тепловые электрические станции», Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург; a.f.ryzhkov@urfu.ru.

Жижина Ульяна Владимировна, студент, кафедра «Теплоэнергетика и теплотехника», Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург; uly-zhh@mail.ru.

Назарова Виктория Владимировна, магистрант, кафедра «Тепловые электрические станции», Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург; vika\_n@inbox.ru.

Поступила в редакцию 7 июня 2020 г.

DOI: 10.14529/power200302

## EVALUATING THE CONCENTRATION OF NITROGEN OXIDES AT THE MODEL GAS TURBINE COMBUSTION CHAMBER OUTLET

Yu.A. Kagramanov<sup>1</sup>, KagramanovYA@yandex.ru, V.G. Tuponogov<sup>2</sup>, v.g.tuponogov@urfu.ru, A.F. Ryzhkov<sup>2</sup>, a.f.ryzhkov@urfu.ru, U.V. Zhizhina<sup>2</sup>, uly-zhh@mail.ru, V.V. Nazarova<sup>2</sup>, vika\_n@inbox.ru

<sup>1</sup> PLM Ural LLC, Ekaterinburg, Russian Federation, <sup>2</sup> Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russian Federation

The study applies a new technique for evaluating the NOx concentration when burning syngas in the gas turbine combustion chamber. The technique allows correlating the complete detailed mechanism of the Grimech 3.0 array of parallel reactions with the computer hydrodynamics equations (motion, heat and mass transfer, turbulence, and molecular diffusion equations for an ideal gas flow). Selectivity diagrams of the NOx formation process including eleven key reactions are built based on the specific reaction rates for lean and rich fuel mixtures. Verification calculations have been performed based on a model gas turbine combustion chamber within a fuel-air equivalence ratio of 0.5–2. The new technique has been applied for determining the NOx emissions and the maximum temperature of the industrial combustion chamber fire tube wall. The GE gas composition showed the best NOx emission result. The most problematic is Polk Power and Texaco syngas (oxygen process). When burning LCV gases in the primary air suction area, a recirculation zone is observed; due to the high heat release in this area, the maximum wall temperature is about 500 °C.

Keywords: gas turbine, nitrogen oxides, ANSYS Fluent, CHEMKIN.

Received 7 June 2020

### ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Оценка концентрации оксидов азота на выходе из камеры сгорания модельной газовой турбины / Ю.А. Каграманов, В.Г. Тупоногов, А.Ф. Рыжков и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». – 2020. – Т. 20, № 3. – С. 17–25. DOI: 10.14529/power200302

#### FOR CITATION

Kagramanov Yu.A., Tuponogov V.G., Ryzhkov A.F., Zhizhina U.V., Nazarova V.V. Evaluating the Concentration of Nitrogen Oxides at the Model Gas Turbine Combustion Chamber Outlet. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Power Engineering*, 2020, vol. 20, no. 3, pp. 17–25. (in Russ.) DOI: 10.14529/power200302