

CFD model SNCR technologie – využití numerických modelů při návrhu

Tomáš BLEJCHAŘ, Jiří PECHÁČEK, Rostislav MALÝ, Jiří TOMČALA

Klíčová slova: CFD model, SNCR, emise NO_x, močovina.

Annotation

The paper deals with numerical simulation of SNCR technology. Experimental measurement was used to definition of boundary conditions and as solver the commercial CFD code CFX was used. The results of simulations were compared with process measuring and trial test of SNCR. Drop of NO_x emission by SNCR technology was evaluated as a main result of this study.

Anotace

Článek je zaměřen na numerické modelování procesu redukce emisí NO_x prostřednictvím spalování SNCR technologie. Okrajové podmínky simulací byly definovány pomocí experimentálního měření a pro řešení byl použit komerční program CFX. Výsledky simulací byly porovnány s provozním měřením a nástřikovým testem SNCR. Vyhodnocení spočívalo v ohodnocení poklesu emisí NO_x při provozu SNCR.

1. Úvod

Na základě budoucích platných legislativních limitů pro emise oxidů dusíku NO_x je v současnosti naléhavá otázka jejich snižování. Existují dvě základní možnosti snižování emisí 1) Primární opatření 2) Sekundární opatření. Primární opatření spočívá zamezení vzniku NO_x během procesu hoření. Jedná se např. o nízkoemisní hořáky. Primární opatření byla vyvinuta k redukci tvorby NO_x v kotli, zatímco sekundární opatření jsou koncovými technikami snižování emisí NO_x. Sekundární opatření tedy spočívá v chemickém odstranění NO_x ze spalín. Všechny sekundární metody jsou založeny na reakci iontů NH₂⁻ s NO za vzniku molekulárního dusíku N₂ a vody H₂O. Existuje několik modifikací této základní metody. My se zde budeme zabývat technologií s obchodním názvem NO_xOut, která snižuje emise NO_x prostřednictvím selektivní nekatalytické redukce SNCR (Select Non-Catalytic Reduction), a spočívá ve vstřikování roztoku močoviny (NH₂)₂CO do teplotního okna 850-1050°C.

Samotná úloha se zabývá matematickým modelováním spalování uhlí v kotli za účelem stanovení teplotních polí, která jsou důležitá pro stanovení teplotního okna pro vstřikování roztoku močoviny. Dále byla detailně modelována horní část kotle, kde byly navrženy místa pro vstřikování močoviny a ověření návrhu umístění vstřikovacích míst v kotli.

2. Matematický model proudění skutečné tekutiny

Základní rovnice popisující laminární i turbulentní režim proudění tekutin představují aplikaci základních fyzikálních zákonů. Při popisu proudění je použit zákon zachování hybnosti, zákon hmoty, a energie. Zákon zachování hmoty reprezentuje rovnice kontinuity, zákon zachování hybnosti reprezentují Navier-Stokesovy rovnice a zákon zachování

KOTLE A ENERGETICKÁ ZAŘÍZENÍ 2009

16.3. - 18.3. 2009, Brno, hotel Voroněž I.

energie rovnice pro statickou entalpii. V případě nestacionárního nestlačitelného neizotermního proudění mají následující tvar [1], [2], [3]:

Rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot v_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (2.1)$$

Rovnice Navier-Stokesova

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \cdot v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot v_i \cdot v_j)}{\partial x_j} = \\ = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\eta \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \rho \cdot \delta_{i3} \cdot g + \rho \cdot f_c \cdot \varepsilon_{ij3} \cdot v_j + \rho \cdot f_i \end{aligned} \quad (2.2)$$

Rovnice energie

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho h_0] + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j \rho h_0] = \frac{\partial p}{\partial t} + \rho u_j f_j + \frac{\partial(\tau_{ji} u_j)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right)_i, \quad (2.3)$$

kde: v jsou složky rychlosti, p je tlak, x souřadnice, η je dynamická viskozita, ρ je hustota a h_0 je celkové entalpie.

Pro simulaci byl použit, vzhledem velikosti Re-čísla, klasický model dvourovnicový model $k-\varepsilon$.

3. Turbulentní model $k-\varepsilon$

Turbulentní proudění se vyznačuje náhodným charakterem, ale je statisticky stabilní. Pomocí časového středování lze okamžitou místní hodnotu turbulentních veličin vyjádřit jako superpozici místní střední hodnoty a fluktuace $u = \bar{u} + u'$. Proudění vazké nestlačitelné tekutiny v prostoru popisují Navier-Stokesovy rovnice spolu s rovnicí kontinuity, které mají po časovém středování tento výsledný tvar:

Rovnice kontinuity pro středované veličiny [1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (3.1)$$

Reynoldsovy rovnice [1]:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \rho \delta_{i3} g + \rho f_c \varepsilon_{ij3} \bar{u}_j + \rho f_i \quad (3.2)$$

kde u_i jsou složky vektoru rychlosti, p je tlak, ρ je hustota tekutiny a f_i označuje složky vnější objemové síly. Základní problém výpočtu turbulentního proudění spočívá v přítomnosti Reynoldsova napětí $-\rho \overline{u_i' u_j'}$ v rovnicích popisujících střední pohyb kapaliny, takže systém rovnic není uzavřen. K jednoduššímu vyjádření těchto napětí v rovnici se používají tzv. modely turbulence, které společně s pohybovými rovnicemi tvoří řešitelný systém rovnic.

Základem nejrozšířenějších modelů turbulence je popis lokálního stavu turbulence pomocí rychlostního a délkového měřítka. V tomto případě byl pro výpočet použit dvourovnicový standardní $k - \varepsilon$ model, ten určuje turbulentní viskozitu pomocí dvou

transportních rovnic pro turbulentní kinetickou energii k a rychlost disipace ε . Model využívá Boussinesqovy hypotézy o vírové viskozitě a vztahuje η_t ke k , ε a C_η

$$\eta_t \approx l \cdot \bar{v} = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (3.3)$$

Pro rychlostní měřítko turbulentního pohybu je odvozena z Navier-Stokesových rovnic transportní rovnice pro turbulentní kinetickou energii k ve tvaru [2]:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\eta_t}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \eta_t \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_l} + \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_j} - g_j \frac{\eta_t}{\rho \sigma_h} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - \rho \varepsilon, \quad (3.4)$$

kde σ_k a c_D jsou empirické konstanty.

Délkové měřítko l charakterizující turbulentní pohyb je určeno pomocí druhé transportní rovnice vyjadřující rychlost disipace ε [2]:

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \rho c_{1\varepsilon} \left(\eta_t \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_l} + \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_j} - c_{3\varepsilon} g_j \frac{\eta_t}{\rho \sigma_h} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) - \rho c_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (3.5)$$

kde $C_{1\varepsilon}=1,44$, $C_{2\varepsilon}=1,92$, $C_{3\varepsilon}=1$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ jsou konstanty určené empiricky a

$\sigma_h = \frac{\eta_t}{\lambda_t} c_p$ je Prandtlovo turbulentní číslo.

4. Multifázový model

Je zjednodušený vícefázový model, který lze použít k modelování homogenního vícefázového proudění s velmi silnou vazbou a fázemi pohybujícími se stejnou rychlostí. Model směsi může modelovat n-fází (tekutina nebo částice) řešením momentové, rovnice kontinuity a rovnice energie pro směsi, rovnice objemového zlomku pro jednotlivé fáze. Materiálové vlastnosti jsou dány zákonem směsi, jednotlivé materiálové vlastnosti se definují na základě jednotlivých složek směsi a jejich hmotnostních zlomků.

$$\begin{aligned} \rho_m &= \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \\ \mu_m &= \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k \\ \lambda_m &= \sum_{k=1}^n \alpha_k \lambda_k \\ c_{p_m} &= \sum_{k=1}^n \alpha_k c_{p_k} \end{aligned} \quad (4.1)$$

V základních rovnicích turbulentního modelu, tedy v rovnici kontinuity (3.1), rovnicích Reynoldsových (3.2), rovnici pro turbulentní kinetickou energii (3.4) a rychlost disipace (3.5) se dosazují materiálové vlastnosti dle zákona směsi. Dále je nutné definovat rovnici pro sumu hmotnostních zlomků která pouze definuje základní předpoklad, že součet

hmotnostních zlomků jednotlivých složek směsi je roven jedné.

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 \quad (4.2)$$

V modelu se musí dále řešit transportní rovnice pro jednotlivé hmotnostní zlomky respektive fáze. Těchto rovnic je nutné definovat $n-1$, protože dle rovnice (4.2) je počítáno $n-1$ rovnic a poslední hmotnostní zlomek je doplněk do 1.

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \bar{u}_j \alpha_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial (\rho D_k)}{\partial x_j} \frac{\partial^2 (\alpha_k)}{\partial x_j^2} + S_m \quad (4.3)$$

Kde D_k , je kinematická difuzivita složky k S_m je zdrojový člen dán mezifázovým transportem hmoty.

5. Zahrnutí chemických reakcí do CFD simulací

Chemické reakce jsou založeny na Arrheniově rovnici, která popisuje rychlost chemických reakcí.

Arrheniova rovnice

$$k = A * e^{\frac{-E}{RT}} * T^\beta, \quad (5.1)$$

kde: A je rychlostní součinitel, E je aktivační energie reakce, T je absolutní teplota, R univerzální plynová konstanta, n je řád reakce a β je teplotní součinitel.

Předchozí rovnice nepopisuje samotnou chemickou reakci ale definuje rychlostní součinitel. Samotná chemická reakce je definována prostřednictvím materiálů, které do reakce vstupují (reaktanty) a materiálů, které z reakce vystupují (produkty). Hmotnostní resp. objemové podíly jednotlivých složek v chemické reakci jsou dány prostřednictvím stechiometrických poměrů, které je nutné definovat u každé chemické reakce.

V modelu spalování uhlí jsou použity následující chemické reakce:

Uvolňování prchavé hořlaviny: Spalitelné uhlí \rightarrow Prchavá hořlavina + Tuhý zbytek

Uvolňování HCN: Spalitelné uhlí \rightarrow Prchavá hořlavina + Tuhý zbytek + HCN

Hoření prchavé hořlaviny: Prchavá hořlavina + $O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$

Hoření tuhého zbytku: Tuhý zbytek + $O_2 \rightarrow CO_2 + HCN$

Tvorba palivových NO_x : HCN + $O_2 \rightarrow HCO + NO$

Destrukce palivových NO_x : HCN + NO \rightarrow HCO + N_2

Hoření HCO: $4HCO + 3O_2 \rightarrow 4CO_2 + 2H_2O$

Tvorba rychlých NO_x : Prchavá hořlavina + $O_2 + N_2 \rightarrow NO$

Rozklad (spalování) NO_x : Prchavá hořlavina + NO $\rightarrow CO_2 + H_2O + N_2$

Produkce termických NO_x : $N_2 + O_2 \rightarrow 2NO$

Odpařování vlhkosti z částic uhlí: H_2O (kapalina) $\rightarrow H_2O$ (pára)

Model SNCR je založen na identické filozofii, ale v tomto případě se jedná o odpařování tekuté látky z povrchu kapiček.

V modelu SNCR jsou použity následující chemické reakce:

Termický rozklad vodného roztoku močoviny: $(NH_2)_2CO + H_2O \rightarrow 2NH_3 + CO_2$

Redukce NO bez přítomnosti O_2 v rozmezí teplot 850-1050°C: $4NH_3 + 6NO \rightarrow 5N_2 + 6H_2O$

Redukce NO za přítomnosti O₂ v rozmezí teplot 850-1050°C: $4\text{NH}_3 + 4\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow 4\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O}$

Oxidace NH₃ nad teplotou 1050°C: $4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2 \rightarrow 4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O}$

Odpařování vody z kapičky: H₂O (kapalina) → H₂O (pára)

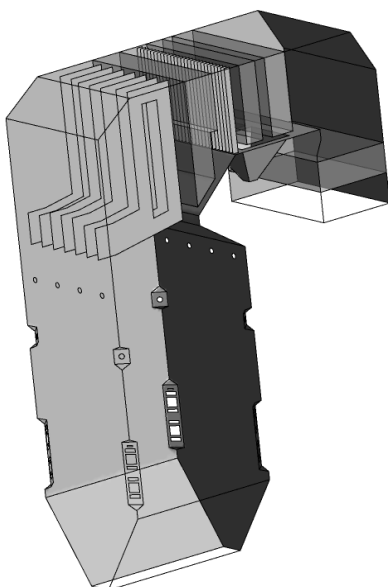
Všechny chemické reakce jsou na sobě nezávislé, a probíhají až při dosažení určité aktivační energie (dodání tepla). V modelu je tedy možné sledovat hmotnostní koncentrace všech reagujících plynných látek, tedy: O₂, N₂, CO₂, NH₃, NO H₂O. Dále je možné sledovat průběh odpařování, tj. zmenšování částice a její trajektorii.

6. Popis kotle

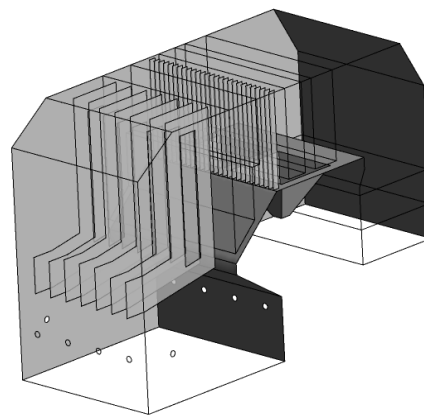
Na základě předané výkresové dokumentace byl v modulu *DesignModeler* vytvořen parametrický model kotle. Spalovací komora je tvořena čtyřmi stěnami výparníku, které jsou membránového provedení. Spalovací komora je zavěšena na stropě nosné konstrukce kotle a dilatuje směrem dolů. Kotel je vybaven čtyřmi práškovými šterbinovými hořáky, které jsou umístěny v rozích spalovací komory nad podlažím + 8,0 m a jsou tangenciálně nasměrovány na pomyslnou kružnici uprostřed spalovací komory o průměru 900 mm. Do vzduchových dyšen každého hořáku je přiváděn horký spalovací vzduch (382°C), který se dá seřídit vhodným nastavením klapek ovládaných buďto ručně, nebo automatickou regulací. Do každého hořáku je přiváděn uhelný prášek práškovody ze dvou tlukadlových mlýnů.

7. Řešené úlohy

Vzhledem ke složitosti úlohy byl proveden výpočet ve dvou krocích. Nejprve byl zpracován model spalování v celé spalovací komoře až k teplosměnným plochám druhého tahu viz Obr 1, a to pro jmenovitý výkon 60, 80, 100%. Následně byl zpracován model SNCR technologie pouze v horní části kotle v okolí šotových přehříváků viz obr.1. Model technologie byl zpracován pro výkon 80, 100 % a dvě varianty rozmístění trysek pro každý výkon.



Geometrie kotle pro model spalování



Geometrie pro model SNCR technologie

Obr 1.: Zobrazení výpočtové oblasti
KOTLE A ENERGETICKÁ ZAŘÍZENÍ 2009
16.3. - 18.3. 2009, Brno, hotel Voroněž I.

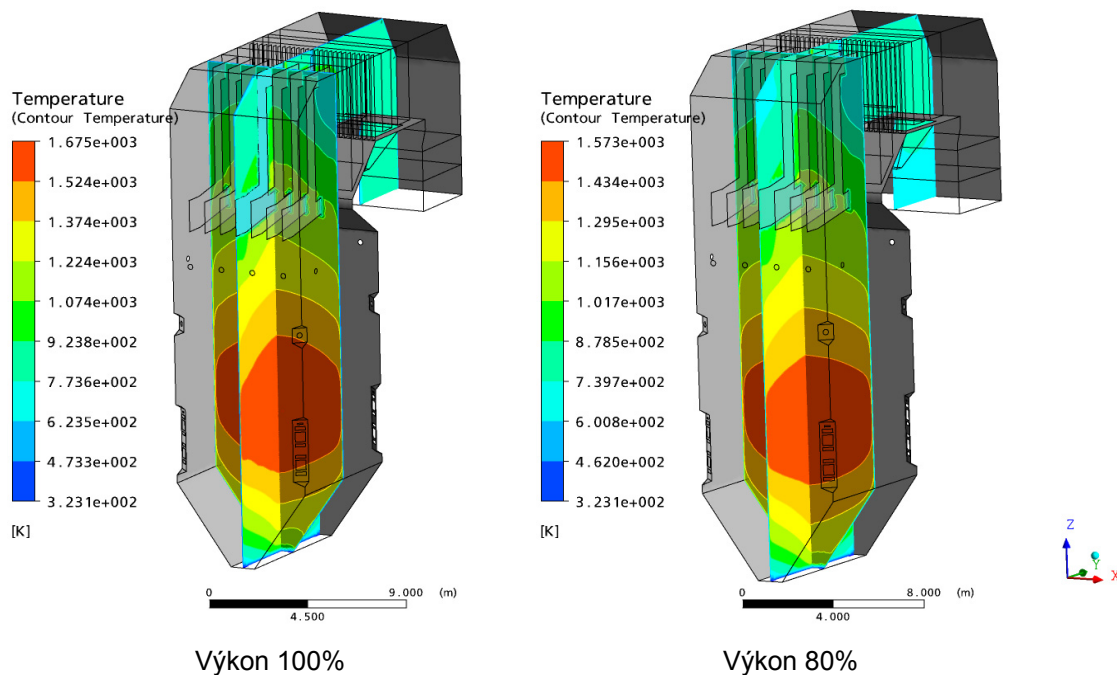
8. Okrajové podmínky

Veškeré nastavení bylo provedeno na základě provedeného fyzikálního měření, a nebo na základě předaných provozních informací, které byly zaznamenány ze systému během měření. Analyzováno bylo také uhlí, a to kvůli chemickému složení, které musí být nutně definováno v matematickém modelu.

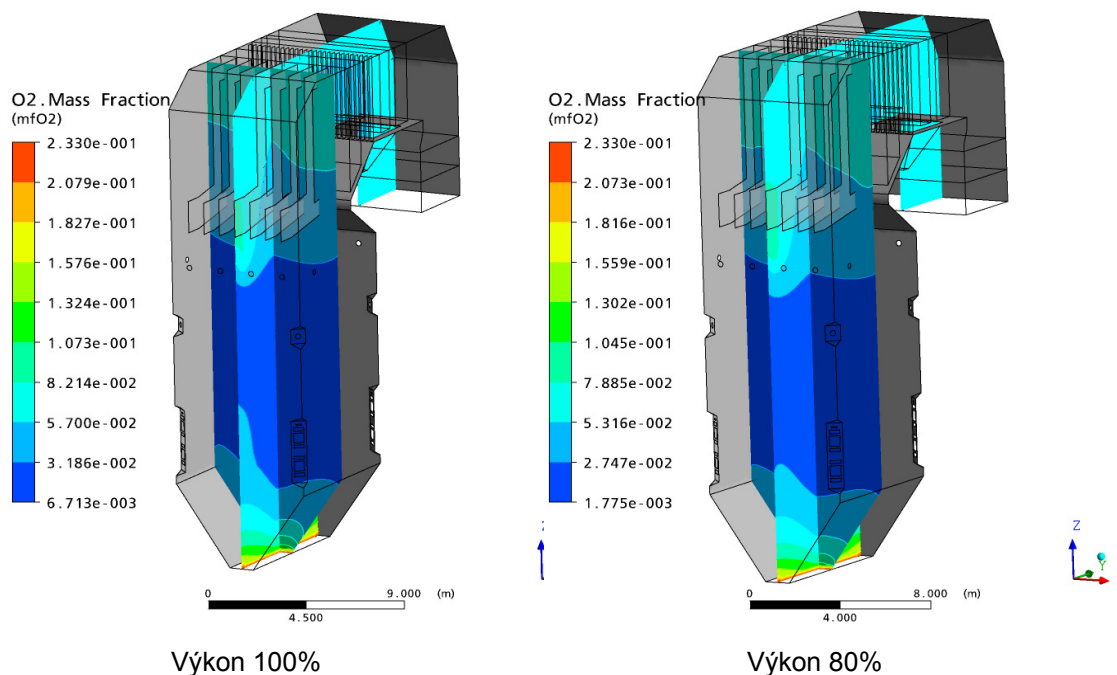
Výsledky tohoto modelu spalování sloužily jako zdroj informací pro detailní model SNCR technologie. Ve vodorovné rovině + 16,8 m byl zapsán profil rychlosti, teploty a koncentrace CO_2 , NO_x , H_2O , O_2 . Tento profil (pro každý výkon) byl načten do detailního modelu SNCR na vstupu. Tím se odstraní část spalovací komory, v níž není vstřikovávána močovina a není nutné tuto část spalovací komory řešit.

9. Výsledky

V prvním kroku byl sestaven matematický model pro celý kotel. V modelu bylo zahrnuto spalování uhlí a produkce NO_x . Model byl odladěn pro výkon 100%, kde chyba tvorby NO_x byla minimální. Pro výkon 80 a 60 % byl proveden výpočet se stejným nastavením, změněny byly pouze toky paliva a vzduchu dle jednotlivých výkonů. Výsledkem těchto výpočtů je vyobrazení teplotního, rychlostního pole a pole koncentrací CO_2 , NO , O_2 , viz. Obr. 2. a obr. 3.



Obr. 2. Teplotní pole v kotli při výkonu 100%



Obr 3. Koncentrace O₂ v kotli při výkonu 100%

Výsledky CFD modelu byly srovnávány s výsledky měření a na základě tohoto srovnání byla vypočtena relativní chyba. Srovnání je provedeno ve výškové hladině +16,8m. Výsledná chyba dosahuje max. cca 10 % viz Tabulka 1 a vzhledem z relativní nejistotě některých parametrů lze považovat výpočet za dostatečně přesný.

Tabulka 1: Srovnání výsledku CFD modelu s výsledky měření

Výkon	Výkon	CFD model	Měření	Relativní chyba [%]
NO [mg.m _N ⁻³]	100	325	327	-0.61
	80	305	280	+8.92
	60	479	538	+10.96
Průměrná teplota [°C] + 16,7 m	100	920,67	1086,11	-15.23%
	80	804,87	1002,44	-19,70%
	60	719.06	934,44	-23,04%

Výsledky tohoto modelu pak sloužily jako vstupní data pro detailní model v okolí nosu a šotových přehříváku, kde byly navrženy otvory pro vstřikování močoviny. Detailní model byl zpracován obdobným způsobem jako model celého kotle. Pouze byla odstraněna oblast kotle pod výškovou úroveň + 15 m. Do modelu byla také zahrnuta korekce teploty. Teplota byla korigována pro jednotlivé výkony na základě provedeného měření, tak aby na výškové úrovni + 16,8 m byla průměrná teplota měřená a průměrná teplota v modelu téměř shodná. Chyba se pohybovala v rozmezí ±1%. Tento model tedy mnohem lépe řeší teplotní pole.

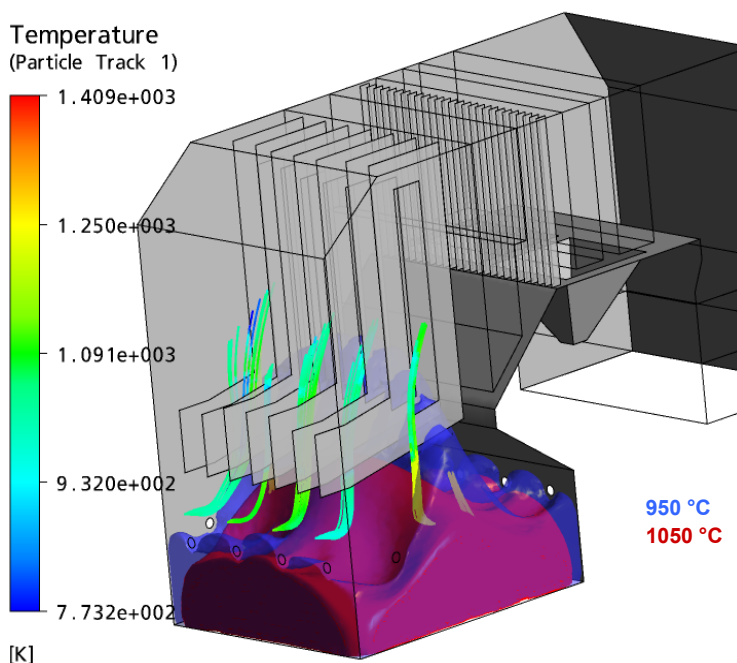
Umístění trysek bylo navrženo na základě provedeného měření, a při návrhu se také vycházelo z výsledků CFD modelu. Trysky jsou navrženy na základě měření tak, aby co nejlépe zasahovaly do teplotního okna 850-1050°C, současně byl tento návrh také potvrzen

výsledky CFD modelu. Umístění trysek není zcela optimální. Je to dáno především konstrukcí kotle a omezeními, která jsou na straně šotového přehříváku a ústí dýz terciálního horního vzduchu. Vzhledem k posunu teplotního okna 850-1050°C byly navrženy prostupy ve dvou výškových úrovních. Močovina tedy bude vstříkována spalovací komory na měření teploty ve spalovací komoře. Výsledky modelu SNCR jsou přehledně seřazeny v Tabulka 2.

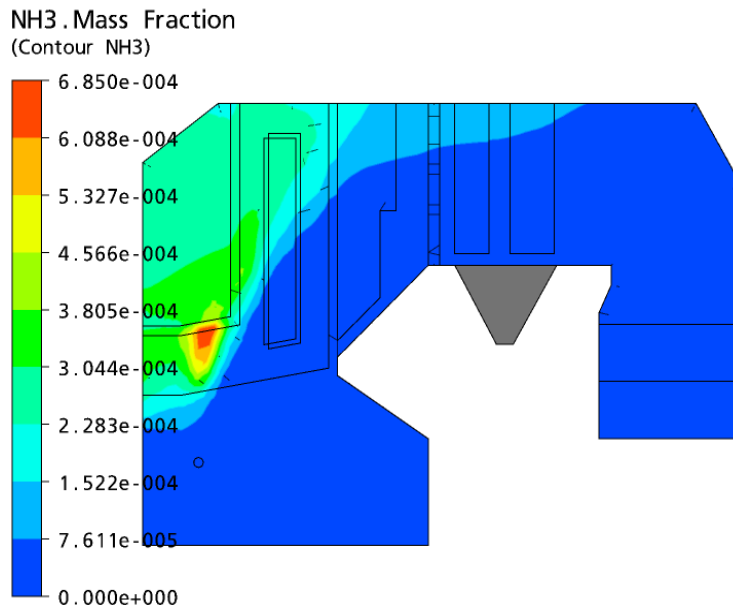
Tabulka 2: Odhad účinnosti SNCR technologie

Výkon	Varianta	Koncentrace NO _x bez SNCR	Koncentrace NO _x s SNCR	Účinnost snížení NO _x	Skluz NH ₃
		[mg.m _N ⁻³], 6% O ₂ , t=0°C		%	[mg.m _N ⁻³], 6% O ₂ , t=0°C
100%	1	325	143	56	8.8
	2	325	210	35	75
80%	1	305	122	60	12
	2	305	106	65	95

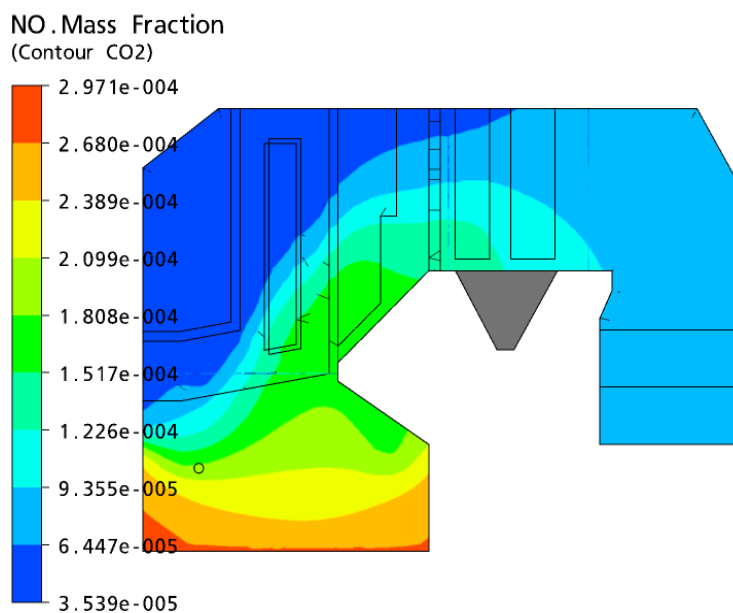
Z výsledků je zřejmé výrazné snížení koncentrace NO_x dochází ve všech případech. Další důležitým srovnávacím kritériem je skluz NH₃. Jedná se o čpavek, který nestihl reagovat s NO a dostal se mimo teplotní okno. Z výsledků tedy vyplývá následující závěr: u varianty č2 pro výkon 100% je močovina vstříkována do nevhodného místa. U varianty č2 pro výkon 80% je vstříkováno příliš mnoho močoviny, to je dáno zejména nízkou koncentrací NO a vysokým skluzem NH₃.



Obr 4.: Zobrazení teplotního okna, a trajektorií vstříkovaných kapiček močoviny, výkon 100%



Obr 5.: Zobrazení koncentračního pole NH₃ výkon 100%



Obr 6. Zobrazení koncentračního pole NO, výkon 100%

10. Závěr

Cílem této práce bylo zpracování CFD modelu kotle, který by popisoval s dostatečnou přesností spalovací procesy, a byl tak použitelný pro další následné výpočetní úlohy. Hlavním výsledkem této úlohy byla tedy analýza teplotního pole a ověřením návrhu umístění trysek pro vstřikování močoviny. Vytvořený model spalování a SNCR technologie lze považovat za dostatečně přesný, jelikož se jednalo u SNCR technologie o první výpočet, bude nutné tento model dále verifikovat na zcela odlišných případech, a pak bude možné považovat tento model za univerzálně platný.

KOTLE A ENERGETICKÁ ZAŘÍZENÍ 2009
16.3. - 18.3. 2009, Brno, hotel Voroněž I.

Tab. 1. Porovnání výsledků CFD modelu s výsledku experimentu

Varianta		Bez SNCR	s SNCR	Účinnost snížení NO _x	Skluz NH ₃
		Koncentrace NO [mg.m N ⁻³], 6% O ₂ , t=0°C		%	[mg.m N ⁻³], 6% O ₂ , t=0°C
Spodní patro Výkon 100%	CFD	325	143	56	9
	Test	376	136	63	neměřen
Spodní patro Výkon 80%	CFD	305	122	60	12
	Test	324	136	58	neměřen
Horní patro Výkon 80%	CFD	305	106	62	95
	Test	338	125	63	neměřen

Literatura

- [1] Kozubková, M., Drábková, S.: Numerické modelování proudění. [Online]. c2003. Ostrava: VŠB – TUO, 116 s, poslední revize 6.1.2005, [cit. 2006-08-14]. Dostupné z: <URL: <http://www.338.vsb.cz/seznam.htm>>.
- [2] Ansys Inc. CFX 11.0 – ANSYS CFX, Release 11.0:
- [3] Janalík, J., Štáva, P.: Mechanika tekutin. [Online]. c2002. Ostrava: VŠB – TUO, 126 s, poslední revize 10.8.2006 [cit. 2006-08-14]. Dostupné z: <URL: <http://www.338.vsb.cz/seznam.htm>>.

Autoři:

Ing., Ph.D, Tomáš, BLEJCHAŘ, VŠB-TU OSTRAVA, tomas.blejchar@vsb.cz
 Bc., Jiří, PECHÁČEK, ORGREZ a.s., jiri.pechacek@orgrez.cz
 Ing., Rostislav, MALÝ, ORGREZ a.s., rostislav.maly@orgrez.cz
 Ing., Jiří, TOMČALA, ORGREZ a.s., jiri.tomcala@orgrez.cz

Kontaktní adresa autora (autorů)

Jméno:	Rostislav Malý
Firma:	Orgrez, a.s.
Adresa pro korespondenci:	Počáteční 19, 710 00 Ostrava
E-mail:	rostislav.maly@orgrez.cz
Fax:	+420 596 220 322
Telefon:	+420 596 220 315