

SYMULACJA NUMERYCZNA PROCESU REBURNINGU  
Z ODDZIAŁYWANIEM PULSACJI  
WYKONANA ZA POMOCĄ PROGRAMU FLUENT

LECH SZECÓWKA<sup>1</sup>, TOMASZ GOLEC<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Politechnika Częstochowska, Katedra Pieców Przemysłowych i Ochrony Środowiska,  
Al. Armii Krajowej 19, 42-200 Częstochowa

<sup>2</sup>Instytut Energetyki, ul. Augustówka 5, 02-981 Warszawa

Keywords: reburning, NO<sub>x</sub> reduction, pressure pulsation, FLUENT.

NUMERICAL SIMULATION OF REBURNING PROCESS  
WITH AN INFLUENCE OF PULSATION BASED  
ON THE FLUENT PROGRAMME

Model for simulation of reburning process was built using FLUENT computer code. The work was performed in two steps. At the beginning simplified chemical reaction scheme without reburning was applied in order to describe character of the process in the reactor. In the second step nine chemical reactions describing reburning process were selected. In both cases pressure fluctuations in reaction region were generated causing process intensification. Despite of the assumed simplification, good agreement of simulation and experimental results was acquired. Obtained spatial flow patterns, propagation of reactants and rates of chemical reaction allow for rational and effective modifications of the investigated process.

Streszczenie

Opracowano model symulacyjny reburningu, używając programu FLUENT. Pracę wykonano w dwóch etapach. Na wstępie zastosowano uproszczony schemat reakcji chemicznych (bez mechanizmu reburningu), koncentrując się na charakterze zachodzących zjawisk. W drugim etapie wyselekcjonowano dziewięć reakcji chemicznych charakteryzujących proces reburningu. W obu przypadkach generowano w strefie reakcji pulsacje ciśnieniowe powodujące intensyfikację procesu. Mimo przyjętych założeń upraszczających uzyskano dużą zgodność wyników obliczeniowych z eksperymentalnymi. Otrzymane przestrzenne obrazy zjawisk przepływowych, rozprzestrzeniania się reagentów i szybkości reakcji pozwalają w racjonalny i skuteczny sposób modyfikować badany proces.

## WPROWADZENIE

Obliczenia numeryczne wykonano dla procesów zachodzących na stanowisku badawczym [3, 4] podczas badań reburningu z oddziaływaniem pulsacji.

Postawiono następujące cele:

- opracowanie modelu symulacyjnego pozwalającego badać zależność skuteczności reburningu od parametrów procesu,
- uzyskanie obrazu przepływu i reagowania paliwa reburningowego w warunkach eksperymentu,
- przeprowadzenie obliczeń dynamicznych w celu określenia wpływu zaburzeń pulsacyjnych na zwiększenie intensywności mieszania w strefie reburningu.

Dodatkowym celem obliczeń dynamicznych było sprawdzenie potencjalnych ograniczeń wynikających ze zbyt długiego czasu obliczeń.

## OBLICZENIA CIEPLNO-PRZEPLYWOWE BEZ UWZGLĘDNIENIA PROCESU REDUKCJI NO<sub>x</sub>

Zastosowano uproszczony schemat reakcji chemicznych (bez mechanizmu reburningu) i skupiono się na określeniu charakteru zjawisk zachodzących na stanowisku.

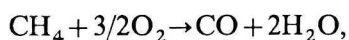
Symulacja numeryczna programem FLUENT 4.31 obejmowała trójwymiarowe obliczenia ciepłno-przepływowe. W obliczeniach uwzględniono:

- bilans trzech składowych pędu i masy (korekcja ciśnienia),
- turbulencję przepływu – model RNG-k-ε,
- bilans entalpii,
- bilans składników chemicznych CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>,
- dwuetapową reakcję chemiczną spalania metanu,
- radiacyjną wymianę ciepła – model DTRM z uwzględnieniem emisji CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O.

Przeprowadzono symulację dla jednego wariantu pracy stanowiska bez pulsacji ciśnienia oraz dla tych samych warunków przy obecności pulsacji o częstotliwości 10 Hz dla dwóch różnych rozmiarów siatek numerycznych.

Obszar obliczeniowy obejmował środkowy element stanowiska [4] wraz z doprowadzeniem paliwa reburningowego i końcówką pulsatora. Modelowaniem objęto jedynie prosty odcinek rurki pulsacyjnej (bez zagięcia i przejścia przez ścianę komory badawczej), wydłużając go do 0,3 m w celu zapewnienia porównywalnej objętości układu obliczeniowego z eksperymentem. Wykorzystano ponadto symetrię układu względem pionowej płaszczyzny przechodzącej przez oś komory, co pozwoliło zmniejszyć dwukrotnie rozmiary siatki numerycznej.

Wprowadzany do strefy reburningu metan reaguje z pozostałym w spalanych tlenem (0,5%) do CO według reakcji:



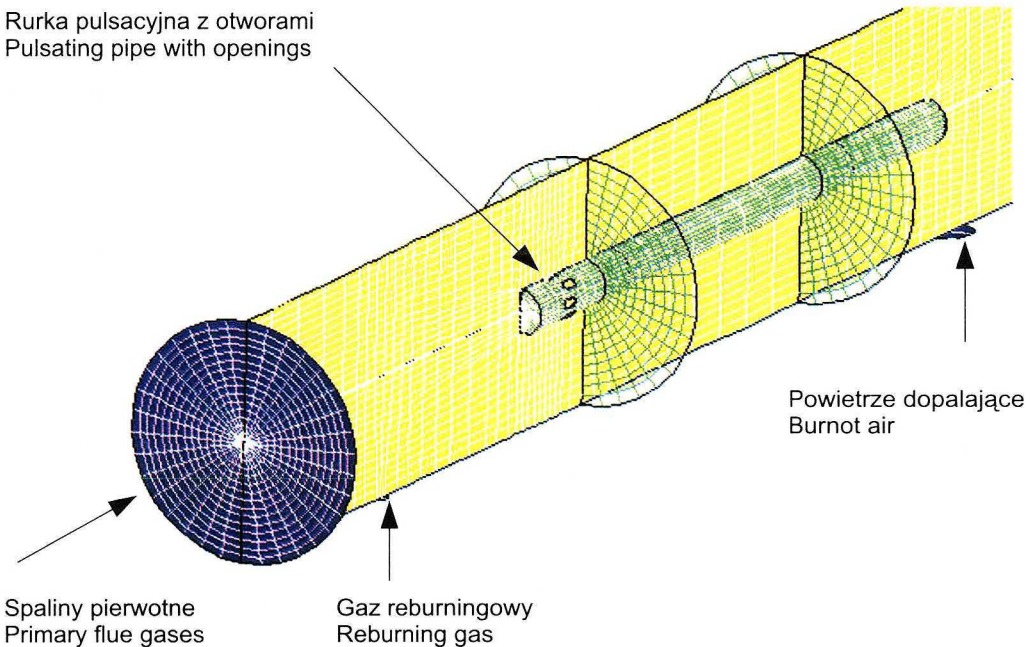
następnie zaś pozostały tlenek węgla utlenia się w obecności tlenu do  $\text{CO}_2$



Ten uproszczony mechanizm pozwala na opracowanie modelu reagowania metanu w atmosferze o ograniczonej zawartości tlenu, jakkolwiek na obecnym etapie pracy nie uwzględniono szeregu reakcji pośrednich z udziałem wolnych rodników odpowiedzialnych za redukcję tlenków azotu w strefie reburningu.

Przebieg reakcji w fazie gazowej obliczany jest według modelu Magnussena, w którym równolegle uwzględniana jest szybkość reakcji wynikająca z kinetyki chemicznej (wg równania Arrheniusa) oraz szybkość mieszania turbulentnego składników. W rozpatrywanym przypadku wobec bardzo szybkiej kinetyki reakcji spalania, znacznie szybszej od mieszania reagentów, czynnikiem limitującym szybkość reakcji jest szybkość mieszania reagentów.

Dla celów obliczeniowych opracowano siatkę numeryczną, którą pokazano na rysunku 1. W celu dokładnego odwzorowania geometrii układu, siatkę zagęszczono w rejonie otworów rurki pulsacyjnej oraz wlotu paliwa reburningowego. Rejony te pokrywają się z miejscami, gdzie spodziewane są największe gradienty zmiennych obliczeniowych. Dla potrzeb testów (głównie skrócenie czasu obliczeń dynamicznych) opracowano również mniej dokładną siatkę numeryczną.



Rys. 1. Fragment obszaru obliczeniowego z elementami siatki numerycznej  
Part of calculation area with numerical net elements

## WARUNKI BRZEGOWE

Na ścianach komory i rurki pulsacyjnej przyjęto warunek brzegowy typu „wall” uwzględniający tarcie płynu i przejmowanie ciepła na drodze konwekcji, dyfuzji i radiacji. Przyjęto stałą temperaturę ścianek równą  $1000^{\circ}\text{C}$  dla ściany zewnętrznej i  $1150^{\circ}\text{C}$  dla ścianek pulsatora (zbliżoną do średniej temperatury spalin) oraz emisyjność równą 0,6.

Na wlotach do komory (wlot główny spalin pierwotnych, paliwa reburningowego, powietrza dopalającego i wlot do rurki pulsacyjnej) zadano równomierny rozkład prędkości, koncentracji składników gazowych i temperatury. Na wylocie komory zadano warunek typu „outlet” co odpowiada zerowym gradientom zmiennych w kierunku normalnym do wylotu, dla których jest liczone równanie bilansowe (tzn. ciśnienie, prędkość, gęstość, lepkość, stężenie składników spalin pierwotnych...).

Pulsacje w przepływie wprowadzono w postaci zmiennej w czasie prędkości na wlocie do rurki pulsacyjnej. Dla uproszczenia, skład gazu na tym wlocie przyjęto taki sam jak na wlocie do komory. Ponieważ przyjęta w modelu objętość rurki pulsacyjnej jest mniejsza od zakładanej objętości pulsatora, pod koniec każdej pulsacji przez otworki pulsatora będzie wydychany gaz o założonym składzie.

Dane wejściowe do obliczeń opracowano na podstawie wybranego pomiaru wykonanego na stanowisku badawczym [4].

1. W palniku głównym spalano  $0,000528 \text{ m}^3/\text{s}$  gazu ziemnego o składzie:  $\text{CH}_4 = 96,7\%$ ;  $\text{C}_2\text{H}_6 = 0,6\%$ ;  $\text{N}_2 = 2,5\%$ ;  $\text{O}_2 = 0,1\%$ ;  $\text{CO}_2 = 0,1\%$ ; z nadmiarem powietrza  $\lambda = 1,02$ , wynikającym ze stężenia tlenu w spalinach. Liczba Reynoldsa wypływającej mieszanki palnej wynosiła 5800.

2. Skład spalin pierwotnych:  $\text{CO}_2 = 9,404\%$ ;  $\text{O}_2 = 0,500\%$ ;  $\text{H}_2\text{O} = 18,807\%$ ;  $\text{CO} = 1,000\%$ ;  $\text{NO}_x = 0,055\%$ .

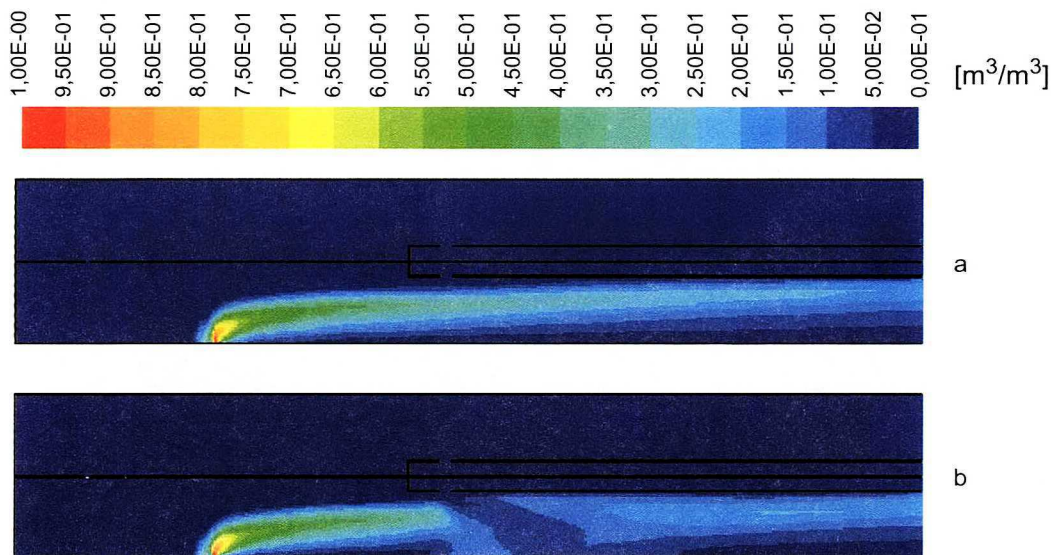
3. Temperatura spalin na wlocie do strefy reburningu wynosiła  $1220^{\circ}\text{C}$ , prędkość spalin –  $2,71 \text{ m/s}$ .

4. Wydatek gazu reburningowego (gazu ziemnego o składzie j.w.) wyniósł  $0,000103 \text{ m}^3/\text{s}$ , prędkość gazu  $3,65 \text{ m/s}$ , jego temperatura  $25^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{Re} = 12000$ .

#### ANALIZA I DYSKUSJA OBLICZONYCH PARAMETRÓW PROCESU BEZ WPROWADZANYCH PULSACJI CIŚNIENIOWYCH

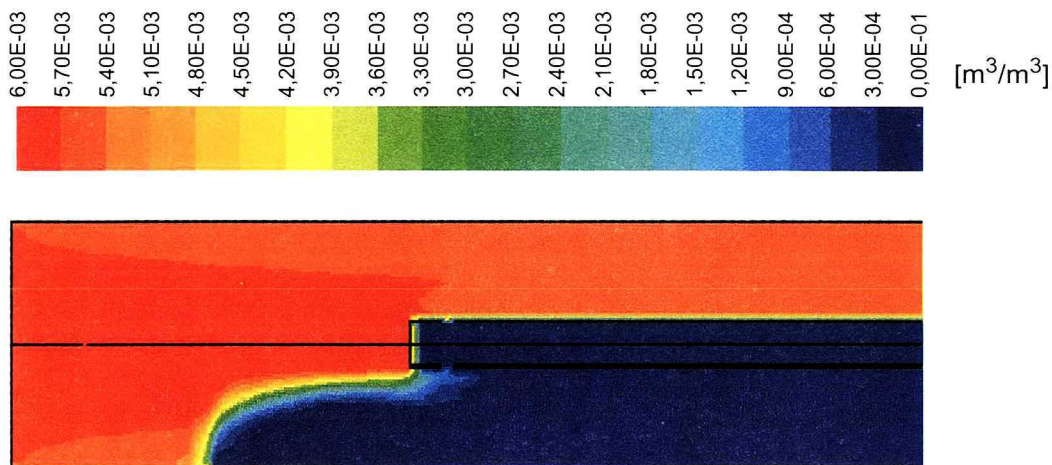
Wyniki symulacji opracowano graficznie w postaci rozkładu obliczonych wielkości w przekrojach komory badawczej.

Obliczony rozkład koncentracji metanu w płaszczyźnie symetrii komory pokazano na rysunku 2a. Metan porywany jest przez główny strumień gazów spalinowych i penetruje tylko do osi komory, przy czym ze względu na małą średnicę przewodu doprowadzającego, struga metanu jest wąska i zlokalizowana w pobliżu płaszczyzny symetrii komory badawczej. Słabe mieszanie metanu ze spalinami spowodowane jest stosunkowo niską burzliwością jego przepływu ( $\text{Re} = 12000$ ).



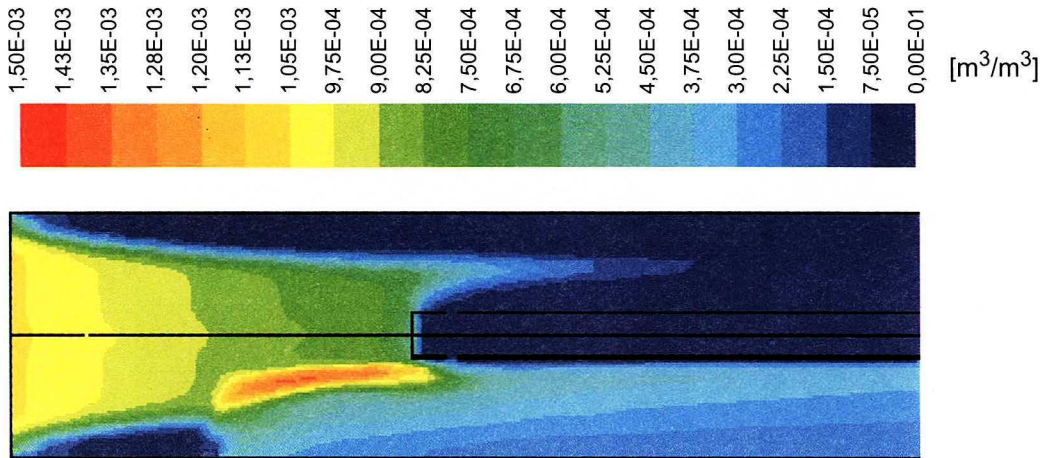
Rys. 2. Stężenie objętościowe  $[m^3/m^3]$  metanu: a – bez pulsacji, b – z pulsacjami  
 Volume concentration  $[m^3/m^3]$  methane: a – without pulsation, b – with pulsation

W dolnej części komory metan reaguje z obecnym w spalinach tlenem, zmniejszając jego koncentrację do zera, podczas gdy w górnej części komory nie widać wpływu dodawania paliwa reburningowego i koncentracja tlenu pozostaje taka sama, jak na wlocie do obszaru obliczeniowego (Rys. 3). W wyniku tego, jako jeden z pośrednich produktów reakcji, powstaje również CO



Rys. 3. Stężenie objętościowe tlenu  $[m^3/m^3]$  bez pulsacji  
 Volume concentration of oxygen  $[m^3/m^3]$  without pulsation

(Rys. 4). Natomiast większość metanu i tlenu węgla spala się po dodaniu powietrza dopalającego w intensywnej reakcji, poza obszarem rozpatrywanym w modelu.



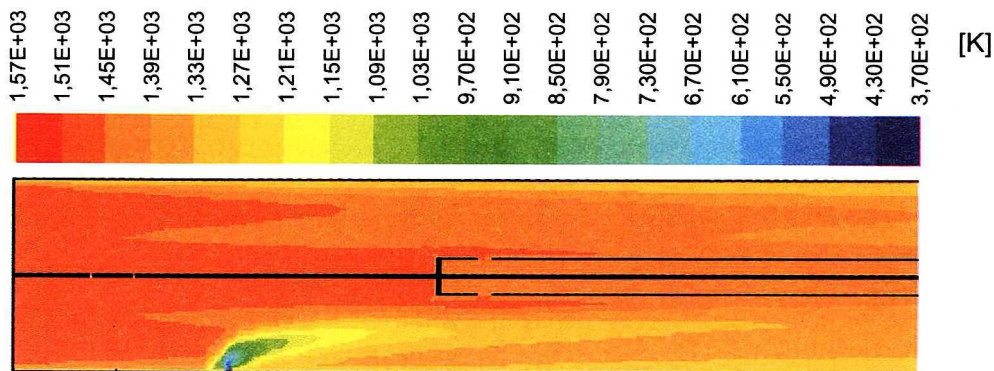
Rys. 4. Stężenie objętościowe tlenu węgla  $[m^3/m^3]$  bez pulsacji  
Volume concentration of carbon monoxide  $[m^3/m^3]$  without pulsation

Z opisanego przebiegu reagowania metanu w sposób pośredni można wnioskować o możliwym przebiegu redukcji NO w strefie reburningu. Stopień redukcji NO zależy w pierwszym przybliżeniu od stopnia wymieszania metanu z gazami spalinowymi, zakładając, że wolne rodniki będą występować tam, gdzie obecnie obserwowany jest metan. W modelowanych warunkach eksperymentu bez wprowadzania pulsacji wymieszanie to jest bardzo słabe.

Również rozkład temperatur w rozpatrywanym przepływie bardziej zależy od przebiegu mieszania paliwa reburningowego i powietrza dopalającego ze spalinami, niż od efektu cieplnego reakcji chemicznej. W pobliżu wlotu metanu intensywność reakcji jest zbyt mała, aby spowodować wyraźny wzrost temperatury, zaś w strefie dopalania stosunkowo duża ilość zimnego powietrza skutecznie niweluje efekt cieplny reakcji.

Poziom obliczonych temperatur odpowiada wartościom zmierzonym na stanowisku, trudno jest jednak przeprowadzić dokładne porównanie, ze względu na nieco odmienną geometrię układu obliczeniowego (dłuższa rurka pulsacyjna), a także duże przestrzenne niejednorodności temperatury w obliczonym przepływie.

W świetle wyników obliczeń, spadek temperatury w dolnej części komory przedstawiony na rysunku 5 jest wynikiem mieszania zimnego gazu reburningowego ze spalinami pierwotnymi. W obliczeniach nie uzyskano stopniowego spadku temperatury wzdłuż komory (jaki występuje w obiekcie rzeczywistym), co jest spowodowane stałą, założoną z góry temperaturą ściany komory.



Rys. 5. Rozkład temperatury gazu w komorze [K]  
Distribution of gas temperature in chamber [K]

#### OBLICZENIA PARAMETRÓW PROCESU PO WPROWADZENIU PULSACJI CIŚNIENIOWYCH

W celu zintensyfikowania mieszania w strefie reburningu wprowadzono pulsacje. Przy obliczeniach z uwzględnieniem pulsacji przyjęto te same dane wejściowe, jak dla obliczeń bez pulsacji. Dodatkowo wprowadzono zależny od czasu warunek brzegowy na wlocie rurki pulsacyjnej. Przyjęto, że w czasie jednej pulsacji przez wlot musi przepływać ilość gazu odpowiadająca założonej zmianie objętości urządzenia membranowego wytwarzającego pulsacje, tj. około  $218 \text{ cm}^3$ .

Warunek ten zadano w postaci zmiennej w czasie prędkości, która zmieniała się sinusoidalnie z częstotliwością 10 Hz i amplitudą 20 m/s. Wartość amplitudy wynikała z założenia, że w czasie jednego półokresu przez wlot musi przepłynąć zadana objętość gazu. Przebieg procesu polega na kolejnych cyklach zasysania i wydmuchiwanie zassanych gazów przez rurkę pulsacyjną.

Czas potrzebny na dotarcie do strefy dopalania zaburzeń generowanych przez pulsator wynika ze średniej prędkości przepływu w komorze spalania (2,7 m/s) i wynosi około 0,12 s, co odpowiada 1,2 okresu pulsacji. Można przyjąć, że po 2 okresach rozkład koncentracji składników gazowych na wlocie ze strefy reburningu będzie się zmieniał w czasie w powtarzalny sposób zgodny z częstotliwością pulsacji.

Intensyfikacja mieszania metanu ze spalinami następuje w fazie wydmuchiwania zassanych uprzednio gazów. Strumienie wypływające z otworków pulsatora penetrują aż do ścian komory badawczej. W połowie odległości pomiędzy otworami a ścianą prędkość wypływających strug wynosi jeszcze około 10 m/s. Powoduje to wyrównanie koncentracji metanu w pobliżu otworków wylotowych rurki pulsatora.

Rysunek 2b pokazuje rozkład koncentracji metanu w fazie, kiedy spaliny są wydmuchiwanie przez otwory pulsatora. Widać na nich kolejne strefy lepszego

i gorszego wymieszania metanu w kierunku przepływu odpowiadające fazom zasysania i wydmuchiwania gazu.

Porównując rysunki 2a i 2b można zaobserwować, że następuje wyrównanie koncentracji metanu w dolnej części komory, ale zachodzi ono nadal tylko w wąskim pasie zbliżonym do płaszczyzny symetrii komory.

### OBLICZENIA PROCESU REBURNINGU Z UWZGLĘDNIENIEM REDUKCJI NO<sub>x</sub>

Przedmiotem symulacji był przebieg wybranych reakcji chemicznych (reburning) odpowiedzialnych za redukcję NO w spalinach w warunkach niedoboru tlenu. W obliczeniach uwzględniono większą ilość (w porównaniu z etapem I) składników gazowych i reakcji chemicznych, dołączając te, które są odpowiedzialne za redukcję NO. Pozostałe dane wejściowe do obliczeń były takie same jak w etapie I, to znaczy, że odpowiadają danym dla wytypowanego pomiaru i częstości pulsacji 10 Hz. Zgodnie z tymi danymi na wlocie do obszaru obliczeniowego założono stałą koncentrację NO, równą 550 ppm.

Program FLUENT jest wyposażony w postprocesor NO do obliczania procesów powstawania/redukcji NO w przepływach ze spalaniem. Postprocesor uwzględnia NO termiczne, paliwowe, szybkie (prompt), a także wpływ turbulencji (funkcja PDF), nie obejmuje jednak procesu generacji wolnych rodników i redukcji NO podczas spalania paliw węglowodorowych w warunkach niedoboru tlenu. FLUENT dopuszcza dwie możliwości modelowania reburningu:

1. Zdefiniowanie wprost składników gazowych (w tym wolnych rodników) oraz reakcji chemicznych, w których biorą udział, a następnie rozwiązanie równań bilansu tych składników zawierających człony źródłowe w postaci równania Arrheniusa na szybkość reakcji. Silnym ograniczeniem przy takim modelowaniu procesu reburningu jest maksymalna liczba reakcji chemicznych (10 reakcji) w fazie gazowej dopuszczana przez program FLUENT.

2. Uproszczenie układu rozważanych reakcji chemicznych z wykorzystaniem stałych równowagi chemicznej, tak aby wyeliminować związki pośrednie i wolne rodniki i bilansować jedynie podstawowe, łatwo mierzalne składniki gazowe (CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, NO, HCN...) [4]. Jednak wówczas postać członów źródłowych ulega znacznej komplikacji i wymagane jest opracowanie procedury użytkownika (User Defined Subroutine) w języku Fortran i skompilowanie jej z programem FLUENT.

Ze względu na łatwiejszą implementację wybrano podejście 1. Ograniczenie liczby reakcji do 10 sprawia, że uzyskane wyniki należy traktować jako jakościowe.

### DOBÓR REAKCJI CHEMICZNYCH

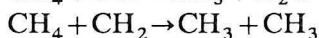
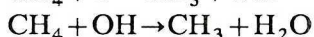
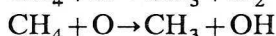
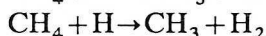
Reakcje chemiczne związków azotowych zachodzące podczas spalania węglowodorów z niedoborem tlenu dobrano na podstawie [1, 2, 5]. Redukcja tlenku azotu w procesie reburningu zachodzi poprzez reakcje między rodnikami



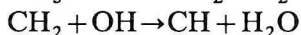
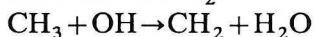
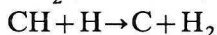
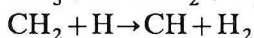
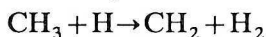
$\text{CH}_i$  i  $\text{NH}_i$ . W wyniku częściowego utlenienia paliwa węglowodorowego powstają rodniki  $\text{CH}_i$ , które reagują z  $\text{NO}$  do  $\text{HCN}$  i  $\text{HNCO}$ . Po tych reakcjach początkowych następuje konsumpcja rodników  $\text{HCN}$  i  $\text{HNCO}$ , z których powstają  $\text{NH}$  i  $\text{NH}_2$  powodujące dalszą redukcję  $\text{NO}$ . Ważną ścieżką reakcji jest również reakcja  $\text{CH}$  z  $\text{N}_2$ . W jej wyniku powstają  $\text{HCN}$  i  $\text{N}$ , przy czym rodniki  $\text{N}$  mogą się również przyczyniać do redukcji  $\text{NO}$ . Taka sekwencja reakcji jest uprzywilejowana przy nadmiarze paliwa, podczas gdy przy nadmiarze tlenu konkurencyjne reakcje utleniania zmniejszają skuteczność reburningu.

W celu opracowania modelu procesu reburningu wyodrębniono następujące grupy reakcji:

#### I. Rozkład metanu [2]

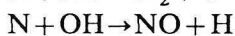
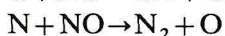
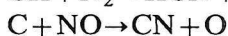
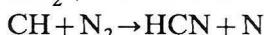
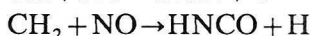
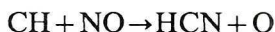


#### II. Powstawanie rodników $\text{CH}_i$

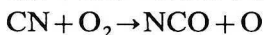
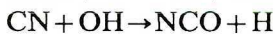
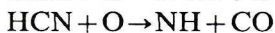
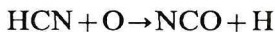


#### III. Reakcje związków azotowych

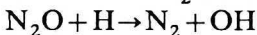
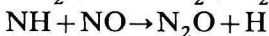
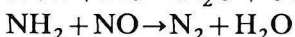
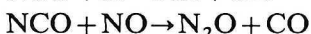
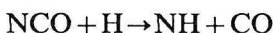
##### III A



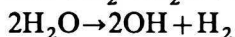
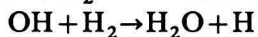
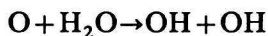
##### III B



##### III C



IV. Koncentracje rodników O, OH, i H wynikają z reakcji równowagowych [4]:



zanik rodników OH



Według [5] reakcje grupy II decydują o powstaniu rodników  $\text{CH}_3$ , a reakcje grupy III A są wiodącymi reakcjami przy redukcji NO. Reakcje grupy III B odpowiadają za rozkład HCN i CN, zaś reakcje grupy III C opisują dalszy rozkład związków azotowych. Grupa IV obejmuje ważniejsze reakcje powstawania niezbędnych w modelu rodników H i OH. Wszystkie wybrane reakcje wraz ze stałymi kinetycznymi zestawiono w tabeli 1.

Przez ++ oraz + oznaczono reakcje uznane w [5] za wiodące (Tab. 1). Tłustym drukiem zapisano reakcje ostatecznie użyte w obliczeniach. Wybrany zestaw reakcji nie obejmuje obszaru bogatego w tlen po dodaniu powietrza dopalającego. Ze względu na ograniczenie liczby reakcji możliwych do jednoczesnego użycia w programie FLUENT przyjęto następujący tok postępowania:

1. Na wstępie wymodelowano przepływ stacjonarny gazu (bez zaburzeń) w stanowisku badawczym z reakcjami zaznaczonymi w kolumnie A (Tab. 1). Celem tej części obliczeń była ocena rozkładu koncentracji rodników O, H i OH w warunkach eksperymentu. Uzyskane w wyniku symulacji maksymalne koncentracje rodników O i OH były o rząd wielkości i więcej mniejsze niż koncentracje rodników H i  $\text{CH}_3$ , przy czym również szybkość reakcji 6 i 8 była o rząd większa niż reakcji 7 i 9.

2. Na podstawie wyników obliczeń wstępnych do dalszej analizy wybrano 9 reakcji zaznaczonych w kolumnie B (Tab. 1). Zrezygnowano całkowicie z reakcji grupy IV oraz reakcji grupy II, w których biorą udział rodniki OH. Zrezygnowano również z reakcji, w których biorą udział C i CN. Wybrane reakcje opisują redukcję NO w obszarze ubogim w tlen i nie obejmują dalszych reakcji związków azotowych. Pozostawiono bardzo uproszczony dwureakcyjny model reagowania metanu z tlenem.

Składniki chemiczne w procedurze obliczeniowej:

1. Podstawowy model spalania metanu – bilans składników liczony razem z przepływem i wymianą ciepła; 6 składników:  $\text{CH}_4$ , CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2$ .

2. Składniki potrzebne do redukcji NO; 9 składników:  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ , CH,  $\text{H}_2$ , H, OH, O, HCN, HCNO.

W celu zobrazowania procesów zachodzących w komorze badawczej wybrane wyniki obliczeń przedstawiono na rysunkach 6 i 7.

Tabela 1. Zestaw reakcji chemicznych rozważanych w modelu  
 Specification of chemical reactions discussed in the model

$$K = kT^n \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) - \text{jednostki/units: mol, cm}^3, \text{s, K, cal/mol, cm}^3/\text{mol}$$

Reakcje wiodące wg lit. Principal reactions according to the references	Substraty Substrates		Produkty Products		$k$ [cm <sup>3</sup> /mol]	$n$	$E$ [cal/mol]	A	B
	CH <sub>4</sub>	3O <sub>2</sub>	CO	2H <sub>2</sub> O	1,0E12		23889		1
	CO	0,5O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>		1,0E12		23889		2
	O	H <sub>2</sub> O	OH	OH	1,5E10	1,14	72200	1	
	OH	OH	O	H <sub>2</sub> O	6E8	1,3	0	2	
	OH	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H	1,2E9	1,3	3630	3	
	H <sub>2</sub> O	H	OH	H <sub>2</sub>	4,6E8	1,6	77700	4	
	H	OH	H <sub>2</sub> O		7,5E23	-2,6	0,0	10	
	CH <sub>4</sub>	M	CH <sub>3</sub>	H	1,0E17	0,0	88000	5	3
	CH <sub>4</sub>	H	CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub>	2,2E4	3,0	8750		
	CH <sub>4</sub>	O	CH <sub>3</sub>	OH	1,2E7	2,08	7630		
	CH <sub>4</sub>	OH	CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	3,5E3	3,08	2000		
	CH <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	1,3E13	0,0	9500		
+	CH <sub>3</sub>	H	CH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	9,0E13	0,0	15100	6	4
++	CH <sub>3</sub>	OH	CH <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	1,5E13	0,0	5000	7	
++	CH <sub>2</sub>	H	CH	H <sub>2</sub>	7,3E17	-1,56	0	8	5
++	CH <sub>2</sub>	OH	CH	H <sub>2</sub> O	4,5E13	0,0	12000	9	
++	CH	H	C	H <sub>2</sub>	1,5E14	0,0	0		
++	CH <sub>2</sub>	NO	HCNO	CH	1,4E12	0,0	0		7
++	CH	NO	HCN	O	1,1E14	0,0	0		6
++	C	NO	CN	O	6,6E13	0,0	0		
++	CH	N <sub>2</sub>	HCN	N	1,9E11	0,0	13600		8
++	N	NO	N <sub>2</sub>	O	3,3E12	0,3	0		9
++	N	OH	NO	H	3,8E13	0,0	0		
+	HCN	O	NCO	H	1,4E4	2,64	4980		
+	HCN	O	NH	CO	3,5E3	2,64	4980		
+	CN	OH	NCO	H	6,0E13	0,0	0,0		
+	CN	O <sub>2</sub>	NCO	O	5,6E12	0,0	0,0		
	NCO	H	NH	CO	5,0E13	0,0	0,0		
	NCO	NO	N <sub>2</sub> O	CO	0,0E13	0,0	-390		
	NH <sub>2</sub>	NO	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	3,8E15	-1,25	0,0		
	NH	NO	N <sub>2</sub> O	H	4,3E14	-0,5	0,0		
	N <sub>2</sub> O	H	N <sub>2</sub>	OH	7,6E13	0,0	15200		

## OBLICZENIA PRZY USTALONYM PRZEPLYWIE GAZÓW (BEZ PULSACJI)

Struga metanu układa się wzdłuż przepływu w dolnej części komory badawczej i nie miesza się z pozostałą częścią przepływu (Rys. 6a). Wzdłuż strugi następuje rozkład metanu i powstawanie rodników. Maksymalne koncentracje  $\text{CH}_2$  (Rys. 6c) występują dopiero ok. 0,3 m od wlotu  $\text{CH}_4$  przy prawym końcu rurki pulsatora. Maksymalne prędkości redukcji stężenia NO występują na brzegach strugi, w wyniku wszystkich trzech reakcji 6, 7, i 9 (Tab. 1, kolumna B), przy czym najszybciej i w największym obszarze NO reaguje z  $\text{CH}_2$  (Rys. 6e i 7). Rysunek 8a pokazuje obliczony rozkład NO w kolejnych przekrojach poprzecznych wzdłuż komory badawczej, gdzie NO jest redukowane do wartości minimalnej.

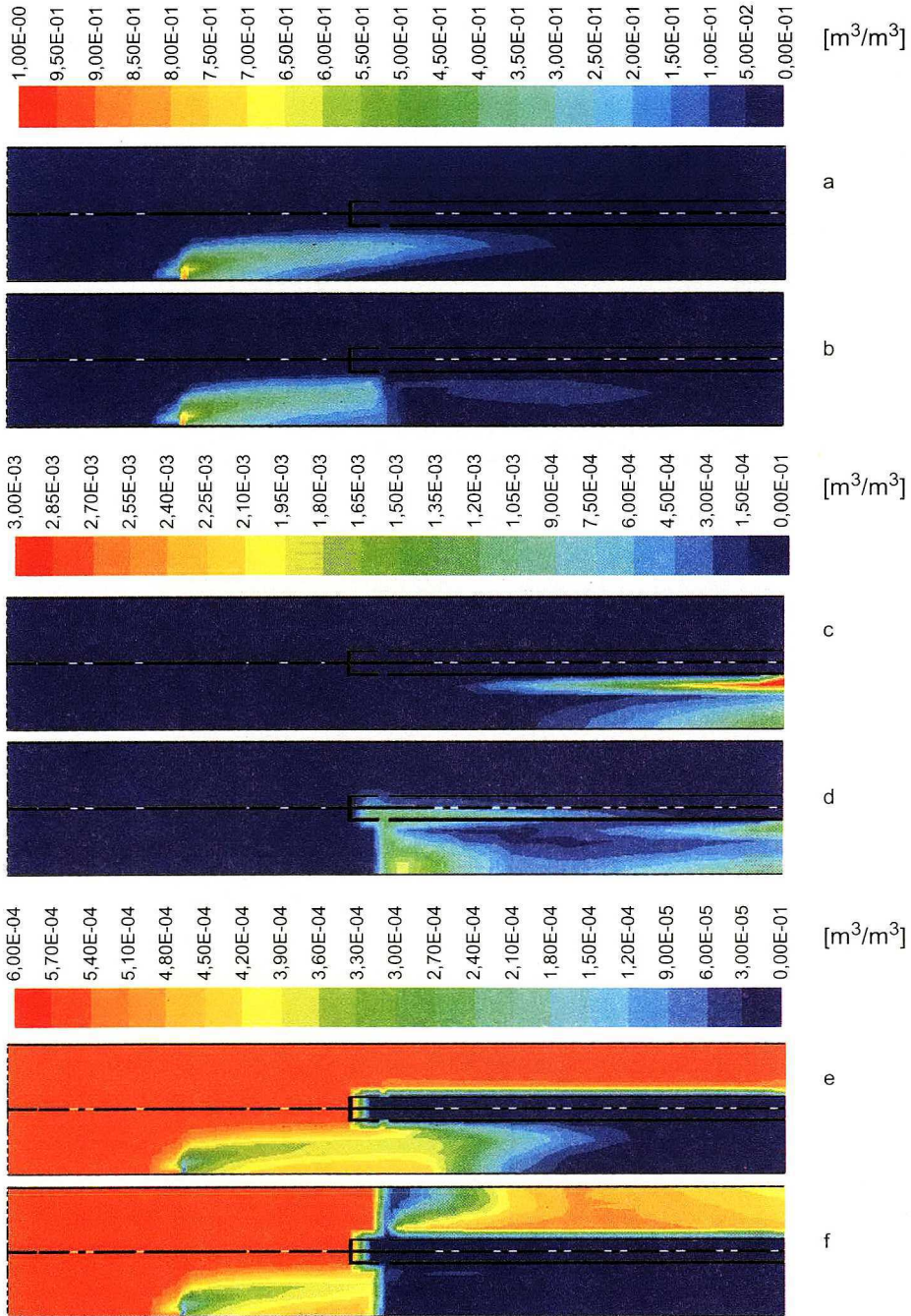
## OBLICZENIA DLA PRZEPLYWU GAZÓW ZABURZONYCH PULSACJAMI

Z porównania obrazów zjawisk dla przepływów ustalonych oraz z oddziaływaniem pulsacji widać wyraźnie, że intensywność zachodzących reakcji jest znacznie większa w przepływie z pulsacjami. Intensyfikacja mieszania i reakcji składników gazowych wskutek zaburzenia (w fazie wydmuchu strumienia gazu z otworów pulsatora – (Rys. 6b) powoduje, że w rejonie wprowadzania gazu pojawiają się rodniki  $\text{CH}_2$  i  $\text{CH}$ , które nie występowały w tym rejonie przy braku pulsacji (Rys. 6d). Szybkość powstawania rodników  $\text{CH}_i$  oraz H w dolnej części komory jest znacznie większa, co wywołuje wzrost szybkości reakcji redukcji NO (Rys. 6f i 7). W dolnej połowie komory następuje praktycznie całkowita redukcja NO. W fazie zasysania pulsator prawie nie oddziałuje na przebieg reakcji. Obszar redukcji NO odsunął się wzdłuż przepływu (komory) i kontynuowane są reakcje z utworzonymi wcześniej rodnikami.

Zasysanie rodników do rurki pulsatora, a następnie wydmuchiwanie ich także do górnej części komory badawczej, powoduje redukcję NO również w górnej części komory (Rys. 8b). Efekt ten nie był widoczny w poprzednim etapie pracy, kiedy analizowano tylko procesy mieszania i prostego spalania metanu bez reakcji reburningu.

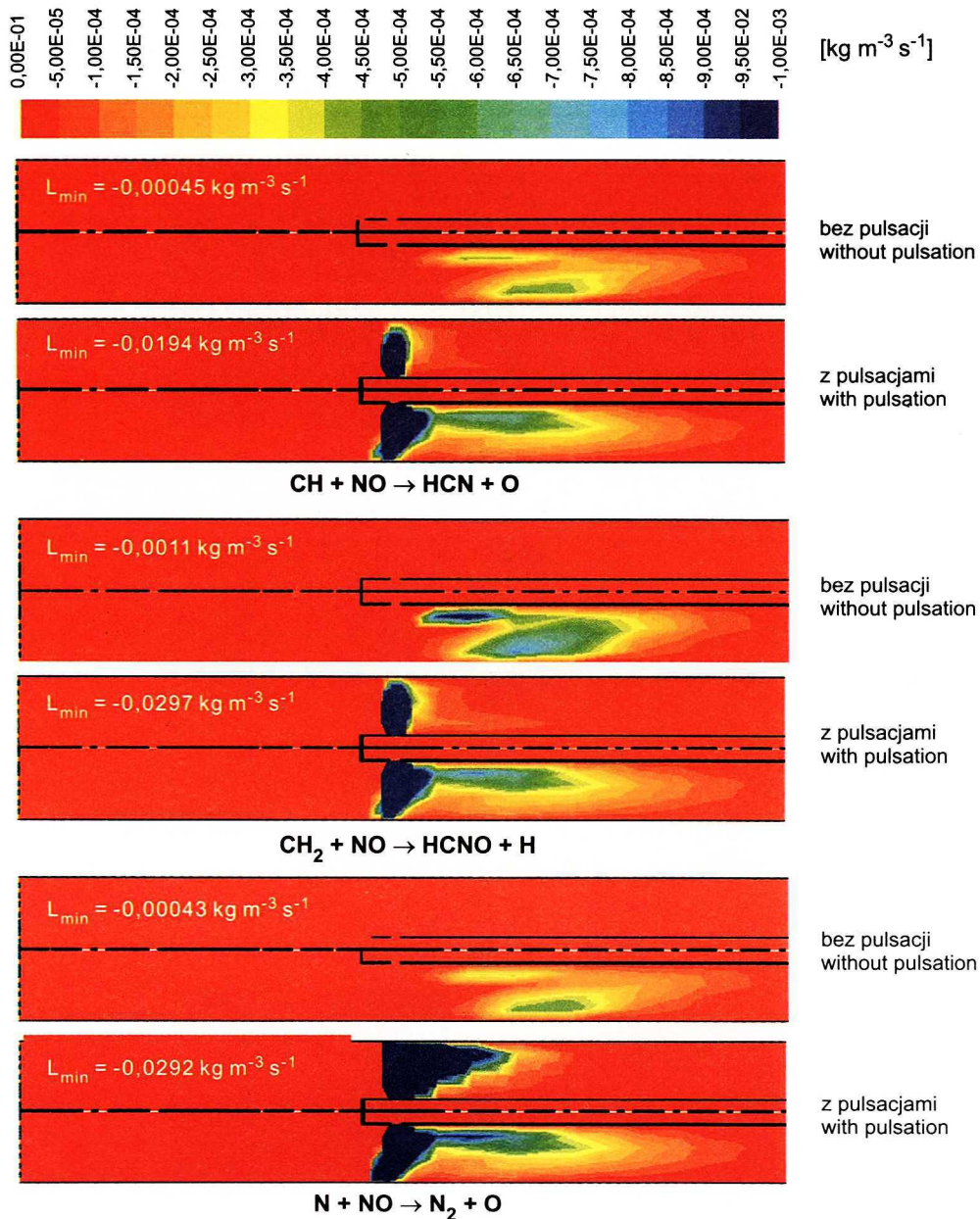
Średnia koncentracja NO na wlocie do obszaru obliczeniowego wynosiła 550 ppm. Skuteczność reburningu w obszarze objętym testowanym modelem oceniano na podstawie średniej masowej koncentracji NO w przekroju poprzecznym komory w odległości 46 cm (koniec rurki pulsatora) od wlotu  $\text{CH}_4$ , co przy średniej prędkości na wlocie do komory 2,7 m/s daje czas przebywania 0,17 s. Dla wariantu bez pulsacji średnia obliczona koncentracja NO w przekroju kontrolnym była:  $\text{NO}_{\text{sr}} = 419$  ppm, co daje 23,8% redukcji (w eksperymencie uzyskano 22,7%).

Dla wariantu z pulsacjami o częstotliwości 10 Hz średnia koncentracja NO w przekroju kontrolnym zmieniała się w czasie. W tabeli 2 zamieszczono obliczone wartości, poczynając od fazy ssania. Koncentracja NO uśredniona



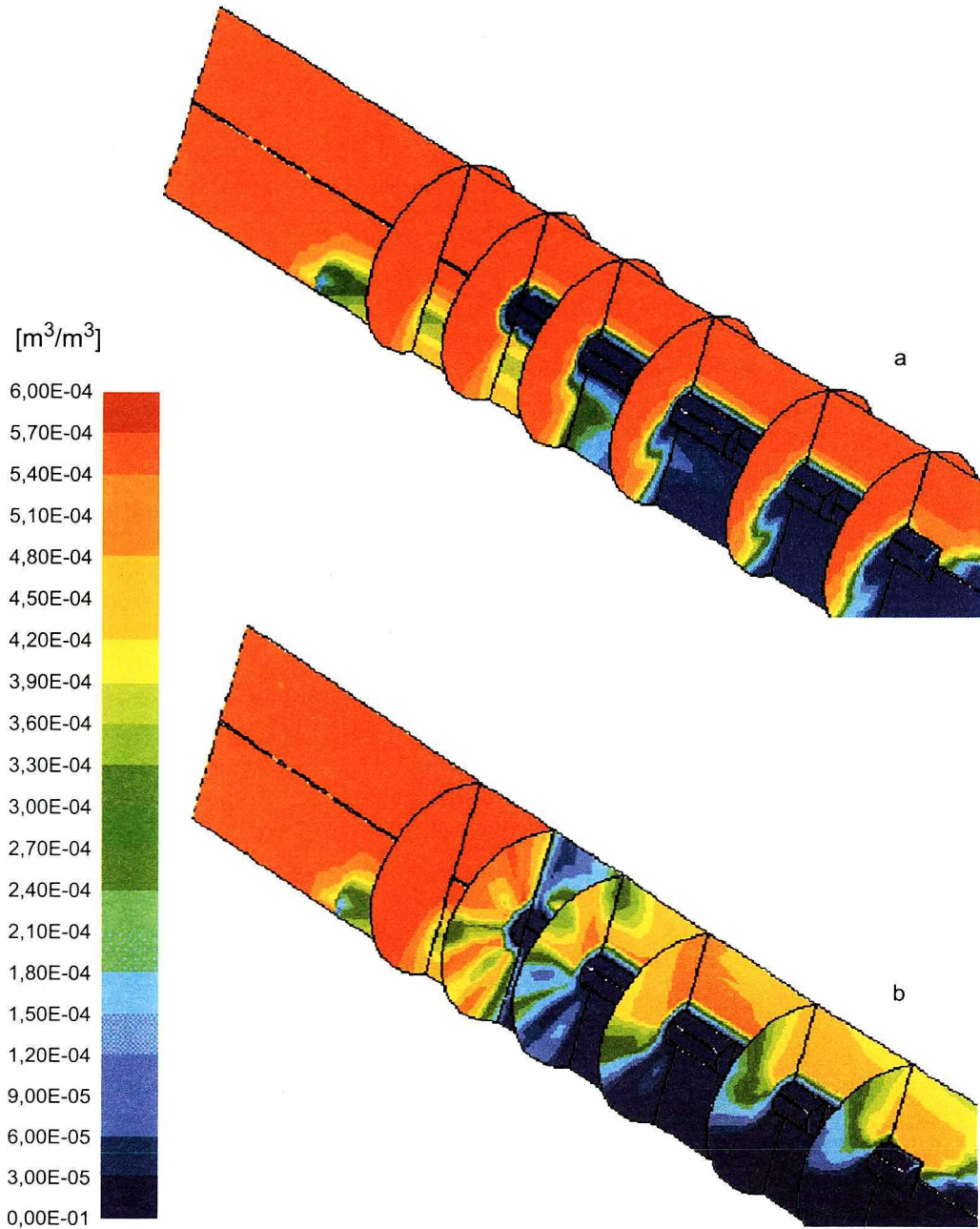
Rys. 6. Porównanie stężeń objętościowych  $[m^3/m^3]$ : a, b –  $CH_4$ ; c, d –  $CH_2$ ; e, f –  $NO$  bez pulsacji i z pulsacjami

Comparison of volume concentrations  $[m^3/m^3]$ : a, b –  $CH_4$ ; c, d –  $CH_2$ ; e, f –  $NO$  with & without pulsation



Rys. 7. Porównanie szybkości ubywania NO w trzech reakcjach uwzględnionych w symulacji numerycznej. Kolor czarny oznacza szybkość ubywania NO większą niż  $10^{-3} \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Na rysunkach podano maksymalne uzyskane szybkości redukcji NO. W przypadku reburningu pulsacyjnego są one ponad 30 razy większe niż bez pulsacji

Comparison of NO velocity decrease in three reactions having been taken in consideration in numerical simulation. The black colour equals NO velocity decrease higher than  $10^{-3} \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Figures show maximal obtain NO velocity reduction values. In the case of pulsation reburning there are above 30 times higher than without pulsation



Rys. 8. Porównanie stężeń objętościowych NO [ $\text{m}^3/\text{m}^3$ ] dla dwóch wariantów:  
 a – bez pulsacji, b – z pulsacjami  
 Comparison of volume concentration NO [ $\text{m}^3/\text{m}^3$ ] for two variants:  
 a – without pulsation, b – with pulsation

Tabela 2. Wartości średnie NO w okresach  
Average NO values in the consecutive moments

$t$ [ms]	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
NO [ppm]	266,5	234,8	206,8	185,1	170,2	161,6	158,7	160,1	163,9	169,1
$t$ [ms]	55	60	65	70	75	80	85	90	95	100
NO [ppm]	175,2	181,7	188,9	196,3	203,2	208,9	212,7	213,5	210,6	203,9

dla jednego okresu wynosi:  $NO_{sr} = 198$  ppm, co daje 64% redukcji. Wartość ta znacznie przewyższa uzyskaną w eksperymencie wynoszącą 27,4%. Uzyskana w obliczeniach wartość jest wynikiem przyjętych założeń, a mianowicie:

- ograniczonej liczby reakcji uwzględnionych w obliczeniach,
- przyjęcia zbyt dużej prędkości gazów wydmuchiwanym z pulsatora.

W eksperymencie prędkość wydmuchiwanym gazów była niższa, co z kolei wpłynęło na zmniejszenie głębokości penetracji gazu reburningowego do przepływającego strumienia spalin. Wskutek tego intensywność mieszania reagentów była znacznie niższa, co w znacznym stopniu zmniejszyło efekt pulsacyjnego oddziaływania zaburzeń w obszarze reakcji. Natomiast obliczenia pokazały, że wzrost energii zaburzenia (amplitudy pulsacji prędkości) może znacznie intensyfikować proces reburningu.

Mimo tych różnic model symulacyjny redukcji tlenków azotu w procesie reburningu, opracowany za pomocą programu FLUENT, potwierdził wpływ pulsacji na:

- intensyfikację mieszania składników gazowych,
- zmianę pola przestrzennego rozkładu rodników węglowodorowych,
- intensyfikację redukcji NO,
- wzrost stopnia redukcji NO,

a więc wszystkie główne tendencje uzyskane w badaniach eksperymentalnych.

Obliczenia wykonano w Instytucie Energetyki w Warszawie.

## PODSUMOWANIE

Symulacja numeryczna pokazuje przebieg reagowania metanu podawanego jako paliwo reburningowe do gazów spalinowych. W warunkach eksperymentu o przebiegu reakcji chemicznych decyduje mieszanie paliwa reburningowego z gazami spalinowymi w komorze przez strumienie gazu wypływające z dysz pulsatora.

Ze względu na punktowe doprowadzenie paliwa reburningowego, wspomniany wyżej proces zachodzi tylko w wąskim obszarze w dolnej części komory spalania i tym samym jest mało efektywny. Uzyskane wyniki pozwalają na zaproponowanie układu reburningu pulsacyjnego o znacznie większej efektywności. Dotyczy to zwłaszcza geometrii układu, np. usytuowania pulsatora oraz rozwiązania dysz pulsatora i paliwa reburningowego.



Wobec stosunkowo długiego czasu obliczeń dynamicznych nie wydaje się celowe stosowanie symulacji numerycznej do wielowariantowych obliczeń reburningu pulsacyjnego. Bardzo użyteczne są natomiast uzyskane w trakcie obliczeń informacje na temat przestrzennych rozkładów składników gazowych, dynamiki przepływu i mieszania oraz przebiegu reakcji chemicznych.

## LITERATURA

- [1] Blasiak W., L. Tao: *Prediction of  $NO_x$  Abatement in Reburning Configuration Using a Simplified Kinetic Model*, Report of Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, Proj. 12010, Jun.1993.
- [2] Levy J.M., B.R. Taylor, J.P. Longwell, A.F. Sarofim:  *$C_1$  and  $C_2$  Chemistry in Rich Mixture Ethylene/Air Flames*, Nineteenth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1982, 167–179.
- [3] Szecówka L., T. Golec, K. Remiszewski: *Numerical Simulation of  $NO_x$  Reduction in Pulsatory reburning conditions*, XVI-th ICDERS, Cracow 1997.
- [4] Szecówka L.: *Intensyfikacja redukcji  $NO_x$  metodą reburningu z oddziaływaniem pulsacji*, Archiwum Ochrony Środowiska, **2**, 33–43 (2000).
- [5] Wendt J.O.L., J.B. Merib: *Nitrogen Oxide Abatement by Distributed Fuel Addition*. Report for U.S. Department of Energy, Contract DE-AC22-87pc79850, Sept. 1991.

Wpłynęło: 16 czerwca 2000, zaakceptowano do druku 17 stycznia 2001.