

УДК 621.181:519.876.5

АНАЛИЗ ПОДХОДОВ К ЧИСЛЕННОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ГОРЕНИЯ ПЫЛЕУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА В ТУРБУЛЕНТНОМ ПОТОКЕ

Пронин Александр Константинович^{1,2},
pronix@tpu.ru

Гиль Андрей Владимирович¹,
andgil@tpu.ru

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

² Тюменский государственный университет,
Россия, 625003, г. Тюмень, ул. Володарского, 6.

Актуальность исследования обусловлена необходимостью точного воспроизведения математическими моделями экспериментальных измерений, так как численное моделирование широко применяется как для разработки новых технологий сжигания твердого топлива, так и для модернизации существующих котельных агрегатов. А как известно, предсказанные численным моделированием параметры пылеугольного факела напрямую зависят от того, как моделируется химия горения в турбулентном потоке.

Цель: исследование точности воспроизведения экспериментальных измерений для четырех подходов к численному моделированию воспламенения и выгорания горючих компонентов пылеугольного топлива в турбулентном потоке.

Объекты: температуры, концентрации газовых компонентов (CO_2 , O_2 , CO и NO_x), аксиальные и тангенциальные компоненты скорости внутри топки IFRF 2,4 MWt.

Методы: сравнение экспериментально измеренных параметров пылеугольного факела и предсказанных численным моделированием. Численное моделирование выполнялось с использованием программного пакета ANSYS FLUENT. Горение угольной пыли в топке смоделировано как двухфазная турбулентная система течений, состоящая из газовой и дискретной фаз.

Результаты. Проведено численное моделирование горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке четырьмя разными подходами: моделями равновесной химии с одной и двумя переменными смешения; моделью «обрыва вихря» и её комбинацией с кинетической моделью горения. Сравнительным анализом результатов моделирования с экспериментальными измеренными параметрами пылеугольного факела установлено, что все исследованные подходы к моделированию горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке демонстрируют довольно хорошее совпадение с экспериментальными данными. Модель «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения имеет преимущество в точности, а модель равновесной химии с одной переменной смешения имеет преимущество в скорости сходимости решения.

Ключевые слова:

Пылевидный уголь, горение, численное моделирование, вихревая горелка, модель «обрыва вихря», химическая кинетика, модель равновесной химии, переменная смешения.

Введение

В настоящее время порядка 37 % мировой электроэнергии вырабатывается за счет сжигания пылеугольного топлива [1]. Общественные организации и ученые во всем мире уделяют большое внимание выбросам загрязняющих веществ от сжигания угля, а также выбросам CO_2 . Поэтому повышение эффективности и экологичности сжигания пылеугольного топлива является актуальной задачей.

В последние десятилетия численное моделирование широко применяется как для разработки новых технологий сжигания твердого топлива, так и для модернизации существующих котельных агрегатов. Сжигание твердого топлива в турбулентном потоке включает сложное взаимодействие физических и химических явлений, для моделирования которых разработано множество подходов. Можно выделить две группы подходов: модели равновесной химии и модели переноса компонентов [2, 3].

В моделях равновесной химии концентрации газовых компонентов определяются из переменной смешения с использованием предположения о химическом равновесии. С помощью таких моделей в расчет

могут быть включены эффекты промежуточных реакций и реакций диссоциации.

В практике моделирования горения пылеугольного топлива применяются следующие две разновидности моделей равновесной химии.

1. Модель с одной переменной смешения [4, 5], где состав топлива представляется укрупненно, как смесь летучих веществ и коксового остатка. Достоинство этого подхода – самая быстрая сходимость решения среди всех других подходов, так как для определения концентраций всех компонентов решается всего два уравнения: средней переменной смешения и её дисперсии.
2. Модель с двумя переменными смешения [6, 7], где летучие вещества и коксовый остаток представляются как отдельные топливные потоки. Этот подход требует значительно больших вычислительных затрат, однако дает более точный результат, чем подход с одной переменной смешения.

В моделях переноса компонентов для каждого компонента решается отдельное уравнение переноса, в котором учитываются конвекция, диффузия и источники от химических реакций. С помощью таких

моделей в расчет могут быть включены несколько одновременных химических реакций как в газовом объеме, так и на поверхностях частиц дискретной фазы. В газовой фазе химические реакции могут быть учтены по одностадийному (реагенты → продукт) или двухстадийному (реагенты → промежуточный продукт → продукт) глобальному механизму. Из-за большого количества уравнений переноса компонентов эти модели требуют больше вычислительных затрат, чем модели равновесной химии.

В практике моделирования горения пылеугольного топлива наиболее часто применяются следующие две разновидности моделей переноса компонентов.

1. Модель «обрыва вихря» [8, 9], где химические реакции в газовом объеме предполагаются мгновенными, как только произошло смешение топлива и окислителя. В этой модели никак не учитывается химическая кинетика, из-за чего эта модель склонна к завышению температур.
2. Комбинация кинетической модели горения с моделью «обрыва вихря» [10–13], где скорость химических реакций считается наименьшей из рассчитанных по кинетическим уравнениям реакций и модели «обрыва вихря». Таким образом, этот подход естественным образом применяет химическую кинетику при более низких температурах и использует турбулентное перемешивание за пределами определенной критической температуры. Также этот подход позволяет дополнительно

учесть реакции углерода с CO_2 и H_2O на поверхности частиц дискретной фазы, однако требует наибольших вычислительных затрат среди всех перечисленных подходов из-за решения большого количества уравнений.

Одно из главных требований, предъявляемых к математическим моделям, это точность воспроизведения экспериментальных измерений. А как известно, предсказанные численным моделированием температуры, концентрации газовых компонентов и выбросы загрязняющих веществ напрямую зависят от того, как моделируется химия горения в турбулентном потоке [7].

Обоснованному выбору подхода к численному моделированию химии горения в турбулентном потоке способствует сравнительный анализ параметров пылеугольного факела: измеренных в эксперименте и предсказанных моделью.

Условия эксперимента и описание граничных условий

Для сравнительного анализа использованы экспериментальные данные международного фонда исследований пламени (IFRF) [14] по горению вихревого пылеугольного факела в топке мощностью 2,4 МВт (рис. 1, 2). Этот объект часто используется для тестирования математических моделей [14–16]. Интерес к этому эксперименту обусловлен наличием всесторонних экспериментальных данных по топочному объему и близости горелки по масштабу к промышленным образцам.

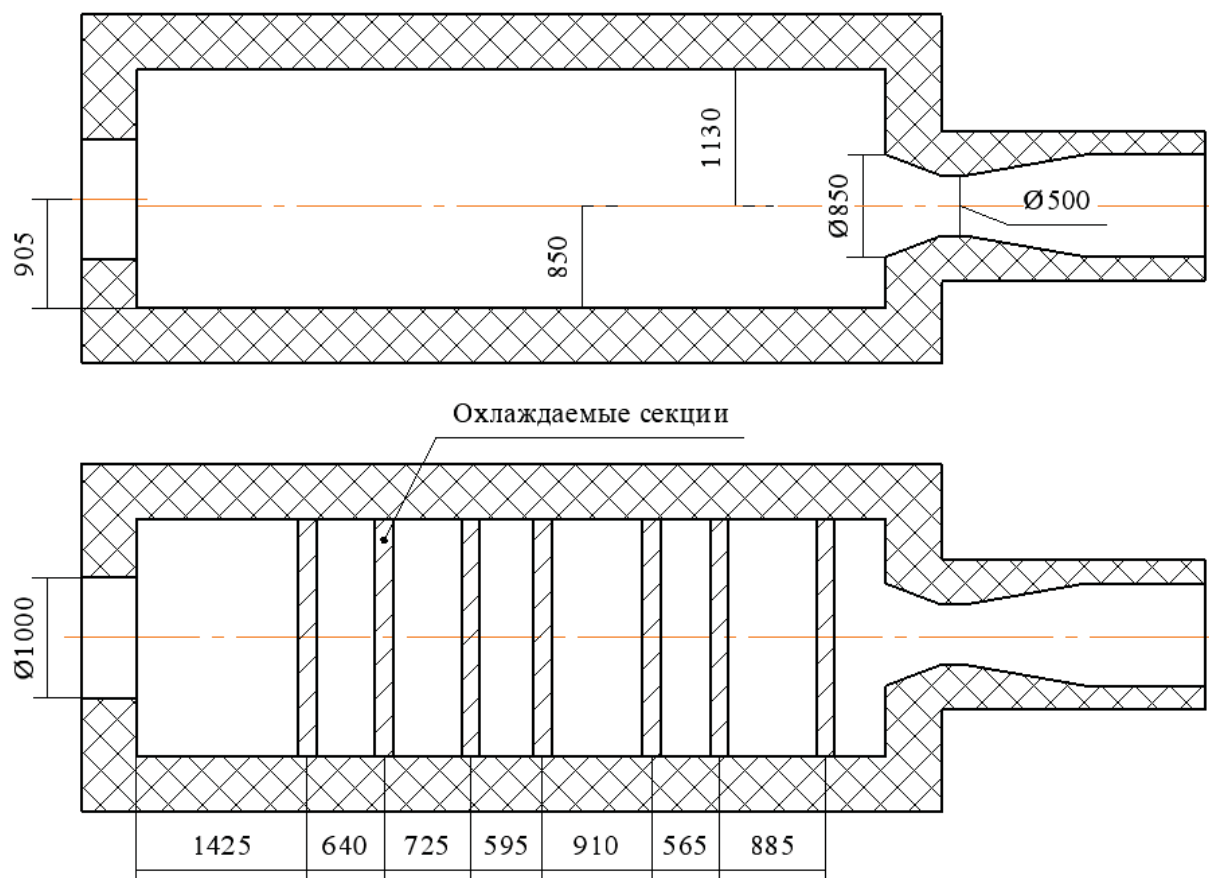


Рис. 1. Топка IFRF 2,4 МВт (размеры в мм)

Fig. 1. Furnace IFRF 2,4 MW (dimensions in mm)

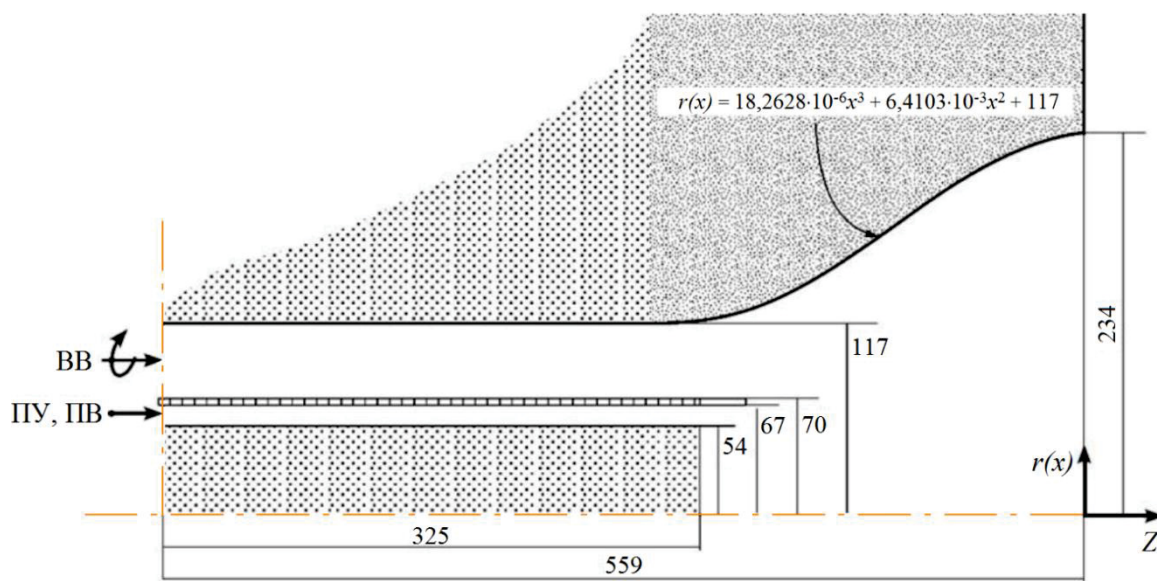


Рис. 2. Горелка топки IFRF 2,4 МВт. ВВ – вторичный воздух, ПВ – первичный воздух, ПУ – пылевидный уголь (размеры – в мм)

Fig. 2. Burner of furnace IFRF 2,4 MW. ВВ – secondary air, ПВ – primary air, ПУ – pulverized coal (dimensions are in mm)

Уголь в эксперименте поступал в топку сухим, его теплотехнические характеристики и характеристики входных потоков горелки представлены в табл. 1, 2 [14].

Таблица 1. Теплотехнические характеристики топлива
 Table 1. Fuel thermotechnical characteristics

Технический состав (мас. %, для сухого состояния) Proximate analysis (wt. %, dry)	
Летучие вещества/Volatile matter	37,4
Связанный углерод/Fixed carbon	54,3
Зола/Ash	8,3
Химический состав (мас. %, для сухого беззольного состояния) Ultimate analysis (wt. %, dry ash free)	
Углерод/Carbon	80,36
Водород/Hydrogen	5,08
Азот/Nitrogen	1,45
Сера/Sulphur	0,94
Кислород/Oxygen	12,17
Нижшая теплота сгорания, МДж/кг/Low heating value, MJ/kg	32,32
Плотность, кг/м ³ /Density, kg/m ³	1000
Теплоемкость, Дж/(кг К)/Specific heat, J/(kg K)	1100

Расчетная геометрия представляет собой одну четвертую часть топки IFRF и представлена на рис. 3 с указанием сечений, которые соответствуют местам проведения измерений в эксперименте. Измерения аксиальной и тангенциальной компонент скорости в эксперименте были выполнены вдоль радиуса топки на трех расстояниях от амбразуры горелки (Z=0,25 м; Z=0,5 м и Z=0,85 м). А измерения температур и концентраций газовых компонентов были выполнены вдоль радиуса топки на пяти расстоя-

ниях от амбразуры горелки (Z=0,25 м; Z=0,5 м; Z=0,85 м; Z=1,25 м и Z=1,95 м) и вдоль оси топки.

Таблица 2. Характеристики входных потоков горелки
 Table 2. Burner inlet characteristics

Пылевидный уголь/Pulverized coal	
Расход, кг/с/Mass flow rate, kg/s	0,073
Распределение частиц по размерам Particle size distribution	Розина–Раммлера Rosin–Rammler
Средний диаметр, мкм/Mean diameter, μm	45
Минимальный диаметр, мкм Minimum diameter, μm	1
Максимальный диаметр, мкм Maximum diameter, μm	300
Индекс однородности/Spread parameter	1,36
Первичный воздух/Primary air	
Средняя осевая скорость, м/с Mean axial velocity, m/s	23,02
Интенсивность турбулентности, % Turbulent intensity, %	10
Гидравлический диаметр, мм Hydraulic diameter, mm	13
Температура/Temperature, K	343,15
Вторичный воздух/Secondary air	
Средняя осевая скорость, м/с Mean axial velocity, m/s	43,83
Средняя тангенциальная скорость, м/с Mean tangential velocity, m/s	49,42
Интенсивность турбулентности, % Turbulent intensity, %	20
Гидравлический диаметр, мм Hydraulic diameter, mm	47
Температура/Temperature, K	573,15

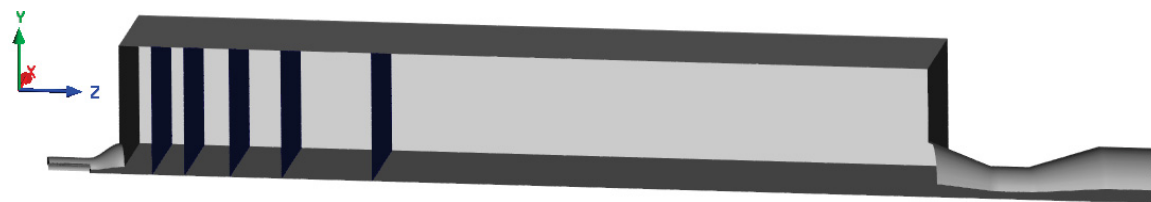


Рис. 3. Геометрическая модель топки IFRF
 Fig. 3. Geometrical model of the furnace IFRF

Тепловые граничные условия на границах модели заданы как температура (рис. 4) и степень черноты

[14]. Степень черноты на поверхностях, ограничивающих горелку, принята 0,6, а на остальных – 0,5.

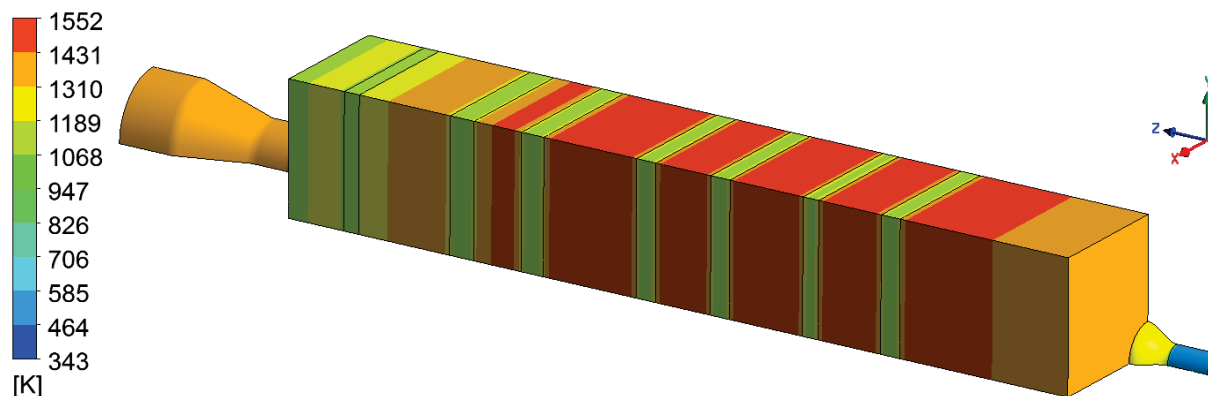


Рис. 4. Температура на границах модели

Fig. 4. Temperature at model boundaries

Описание математической модели

Построение конечно-элементной сетки является важным этапом для получения точных результатов моделирования. В проведенных численных расчетах была использована сетка с $\approx 5 \times 10^4$ элементов, так как дальнейшее измельчение сетки до $\approx 1 \times 10^5$ элементов не привело к видимому изменению результатов численного моделирования.

Численное моделирование выполнялось с использованием программного пакета ANSYS FLUENT. Горение угольной пыли в топке смоделировано как двухфазная турбулентная система течений, состоящая из газовой и дискретной фаз. Для газовой фазы определение осредненных во времени уравнений сохранения массы (1), движения (2) и энергии (3) выполнено Эйлеровым подходом с учетом межфазного взаимодействия:

$$\nabla(\rho v) = S_m, \quad (1)$$

$$\nabla(\rho v v) = -\nabla P + \nabla \tau + S_v, \quad (2)$$

$$\nabla(\rho v h) = \nabla(k_{eff} \nabla T_g - \sum_i h_i J_i) + S_h + S_{hr} + S_{hcr}. \quad (3)$$

Здесь ρ – плотность [кг/м³]; v – скорость [м/с]; h – энтальпия [Дж/кг]; k_{eff} – эффективный коэффициент теплоотдачи [Вт/(м·К)]; T_g – температура газа [К]; P – давление [Па]; τ – тензор напряжения [Па]; S_m – изменение массы за счет межфазного взаимодействия [кг/(м³·с)]; S_h – изменение энтальпии за счет межфазного взаимодействия [Вт/м³]; S_{hcr} – изменение энтальпии за счет химических реакций [Вт/м³]; S_{hr} – изменение энтальпии за счет радиационного теплообмена [Вт/м³]; S_v – изменение момента за счет межфазного взаимодействия [Н/м³]; J_i – диффузионный поток i -го компонента [кг/м²·с].

Замыкание турбулентности в осредненных по Рейнольдсу уравнениях Навье–Стокса выполнено с использованием реализуемой k-ε модели [17]. Среди многочисленного семейства двухпараметрических моделей турбулентности выбор был сделан в пользу

реализуемой, так как применение этой модели позволяет наиболее точно воспроизводить физико-химические процессы в потоках, включающих сильную кривизну линий тока, вихри и вращение, при минимальной затрате расчетных ресурсов [18]. Для моделирования теплообмена в пристеночной области использовалось приближение Менгера–Лехнера.

Радиационный теплообмен смоделирован методом дискретных ординат [19] для серой двухфазной двухтемпературной среды. Коэффициент поглощения газовой среды вычислен по модели суммы серых газов. Коэффициент рассеяния излучения частицами принят 0,6 [20].

Для дискретной фазы траектории частиц получены с помощью модели случайного блуждания частиц [21] Лагранжевым подходом с учетом времени жизни случайных вихрей по уравнению (4):

$$m_p \frac{dv_p}{dt} = F_d + F_g, \quad (4)$$

где m_p – масса частицы [кг]; F_d – сила сопротивления среды [Н]; F_g – сила гравитации [Н].

Горение частиц дискретной фазы в модели реализовано как следующие последовательные стадии: инертный нагрев, выход летучих веществ и горение коксового остатка. Стадия испарения влаги отсутствует, так как топливо было предварительно высушено. Температура частиц дискретной фазы получена с учетом тепла химических реакций, конвективного и радиационного теплообмена с газовой фазой по уравнению (5):

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = \alpha_{conv} A_p (T_g - T_p) + \epsilon_p \sigma A_p (\theta_r^4 - T_p^4) + \frac{dm_p}{dt} H, \quad (5)$$

где c_p – теплоемкость частицы [Дж/(кг·К)]; α_{conv} – конвективный коэффициент теплоотдачи [Вт/(м²·К)]; A_p – площадь частицы [м²]; ϵ_p – степень черноты частицы (принята 0,85 [11]); σ – постоянная Стефана–Больцмана [Дж/К]; H – тепловой эффект (воспринятая

частицей доля теплоты реакции горения углерода) [Дж/кг]; θ_r – радиационная температура [K].

Выход летучих веществ из частиц дискретной фазы смоделирован одностадийным приближением, где скорость выхода летучих веществ определяется по уравнению типа Аррениуса [22]. Кинетические константы для модели представлены в табл. 3.

Скорость поверхностной реакции окисления углерода коксового остатка вычислена с использованием диффузионно-кинетической модели [23, 24] по уравнению (6):

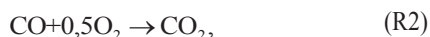
$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{k_d k_c}{k_d + k_c}, \quad (6)$$

где p_{ox} – парциальное давление окислителя [Па]; k_d – коэффициент скорости диффузии кислорода к поверхности частицы [кг/(м²·с·Па)]; k_c – константа скорости химической реакции [кг/(м²·с·Па)]. Кинетические константы для модели представлены в табл. 3.

Модели переноса компонентов

Состав летучих представлен в виде псевдокомпонента $CH_xO_yN_z$, где x , y и z посчитаны по теплотехническим характеристикам топлив.

Горение летучих в газовой фазе смоделировано двухстадийным приближением:



где $b_{1,2,3,4}$ – стехиометрические коэффициенты.

Горение углерода коксового остатка смоделировано одностадийным приближением: $C + O_2 \rightarrow CO_2$.

Скорость горения газовых компонентов определена:

- по модели «обрыва вихря» [25], где учитывается скорость турбулентного перемешивания горючего и окислителя;
- модели «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения (7), где учитываются концентрации горючего и окислителя, реакционная способность горючего, скорость турбулентного перемешивания горючего и окислителя.

$$R_{vol} = \min(R_{KIN}, R_{EBU}). \quad (7)$$

Здесь R_{vol} – скорость реакции горения летучих [кмоль/(м³·с)]; R_{KIN} – скорость реакции по кинетической модели [кмоль/(м³·с)]; R_{EBU} – скорость реакции по модели «обрыва вихря» [кмоль/(м³·с)].

Скорость реакции по кинетической модели вычислена с использованием уравнения (8):

$$R_{KIN} = AT_g^\beta \exp(-E / RT_g) \prod_{i=1}^N [c_i]^{n_i}, \quad (8)$$

где A – пред-экспоненциальный множитель [м³/(кмоль·с)]; β – температурный показатель; E – энергия активации [Дж/кмоль]; R – универсальная газовая постоянная [Дж/(кмоль·K)]; c_i – молярная концентрация i -го компонента [кмоль/м³]; n_i – порядок реакции по i -му компоненту. Кинетические константы для модели представлены в табл. 3.

Таблица 3. Кинетические константы для моделей горения угля

Table 3. Kinetic constants for coal combustion models

Реакция Reaction	A	β	E , Дж/кмоль E , J/kmol	Порядок реакции Rate exponent	Литература Reference
Выход летучих Devolatilization	$3,12 \times 10^5 \text{ c}^{-1}$ $3,12 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$	–	$7,4 \times 10^7$	–	[5]
Окисление кокса Char oxidation	$4,3 \times 10^{-3}$ кг/(м ² ·с·Па) $4,3 \times 10^{-3}$ kg/(m ² ·s·Pa)	–	$8,37 \times 10^7$	–	[5]
R1	$2,33 \times 10^{11}$ м ³ /(кмоль·с·K ^{0,5}) $2,33 \times 10^{11}$ м ³ /(kmol·s·K ^{0,5})	0,5	$1,67 \times 10^8$	$[CH_xO_yN_z][O_2]$	[26]
R2	$1,3 \times 10^{11}$ м ³ /(кмоль·с) $1,3 \times 10^{11}$ м ³ /(kmol·s)	0	$1,26 \times 10^8$	$[CO][O_2]^{0,5}[H_2O]^{0,5}$	[26]

Модели равновесной химии

Скорость горения летучих веществ предполагается мгновенной. Состав продуктов сгорания определен по справочным таблицам из переменной смешения и температуры с использованием предположения о химическом равновесии. Взаимодействие турбулентности и химии описано с помощью функции плотности вероятности (PDF – probability density function) предполагаемой формы [27, 28].

Концентрации газовых компонентов в потоке определены:

- по модели с одной переменной смешения, где состав топлива представляется укрупненно, как смесь летучих веществ и коксового остатка;
- модели с двумя переменными смешения, где летучие вещества и коксовый остаток представляются как отдельные топливные потоки.

Модель образования и восстановления NO_x

Концентрации NO_x в потоке определены методом постпроцессинга. Учтены тепловой [29] и топливный механизмы образования оксидов азота [30]. Во время выхода летучих веществ из частицы угля часть азота топлива остается в коксовом остатке (40 % [31]) и затем окисляется до NO_x. Другая часть азота топлива выходит вместе с летучими веществами в виде HCN и NH₃, которые затем образуют NO_x либо N₂. Принято, что 99 % азота летучих веществ выходит из угля в виде HCN [32]. Также учтен механизм восстановления NO_x на поверхности коксового остатка [33], где удельная площадь поверхности принята равной $2,5 \times 10^4$ м²/кг.

Результаты исследования

Результаты численного моделирования (аксиальные и тангенциальные компоненты скорости, температуры, концентрации газовых компонентов) представлены для четырех подходов к моделированию горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке:

- модель «обрыва вихря» (EDM – eddy dissipation model);
- комбинация кинетической модели горения с моделью «обрыва вихря» (FRC/EDM – finite-rate chemistry/eddy dissipation model);
- модель равновесной химии с одной переменной смешения (Single MF – single mixture fraction);
- модель равновесной химии с двумя переменными смешения (Two MF – two mixture fraction).

Поле скоростей

На рис. 5 представлены предсказанные численным моделированием и измеренные в эксперименте аксиальные и тангенциальные скорости в разных сечениях топки. Из данного сравнения видно, что все четыре подхода к моделированию турбулентного горения дают почти идентичные результаты, которые качественно хорошо совпадают с экспериментальными.

Наибольшие качественные различия наблюдаются в зоне рециркуляции газов на оси горелки. Толщина зоны рециркуляции предсказана довольно хорошо, а длина больше, чем измеренная. Однако в работе [14] предсказанная длина зоны рециркуляции, наоборот, меньше измеренной в эксперименте. Данные различия в результатах моделирования могут быть обусловлены использованием разных моделей выхода летучих веществ из угля, так как различные модели выделения летучих веществ создают различные формы пламени, что влияет на длину и форму зоны рециркуляции [16].

Количественные расхождения предсказанных и измеренных значений скоростей можно объяснить тем, что в эксперименте измерялась скорость не газовой фазы, а дискретных частиц. Погрешность измерения таким методом может быть довольно значительной.

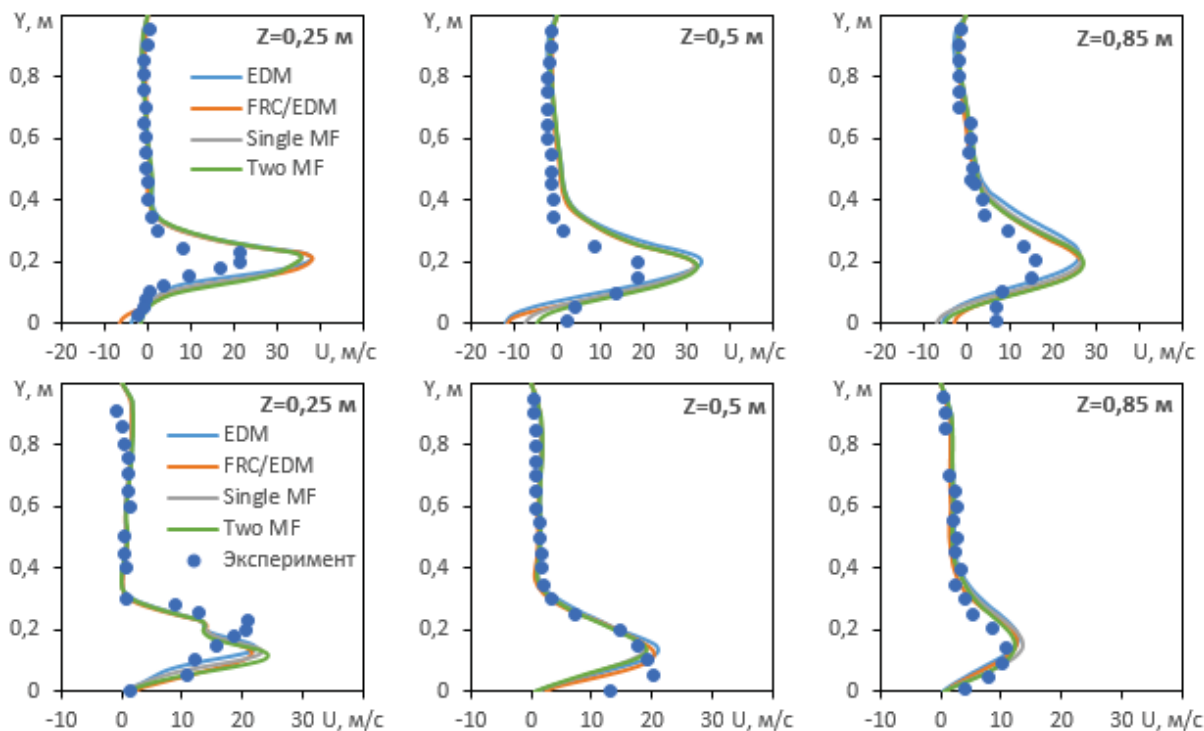


Рис. 5. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения аксиальных скоростей – сверху, тангенциальных – снизу

Fig. 5. Predicted (lines) and experimental (dots) values of axial velocities – from above, tangential – from below

Поле температур

Из сравнения предсказанных и измеренных температур (рис. 6) видно, что за исключением сечения $Z=0,25$ м наилучшее качественное и количественное совпадение получено подходом FRC/EDM (отклонения не более 80 °C). В сечении топки $Z=0,25$ м наблюдается большое несоответствие измеренных и предсказанных температур, независимо от подхода к моделированию. Авторы работы [14] это объясняют нестабильностью пылеугольного факела в данном сечении топки, вследствие чего в эксперименте фактически измерялась температура, усредненная по некоторому радиусу.

Концентрации CO_2 и O_2

Наилучшее качественное и количественное совпадение рассчитанных и измеренных концентраций CO_2 и O_2 получено подходом FRC/EDM (рис. 7, 8).

Концентрации CO

Сравнение рассчитанных и измеренных концентраций CO (рис. 9) показывает, что за исключением сечения $Z=0,25$ м наилучшее качественное и количественное совпадение получено подходами, предполагающими химическое равновесие в реагирующей среде: Single MF и Two MF.

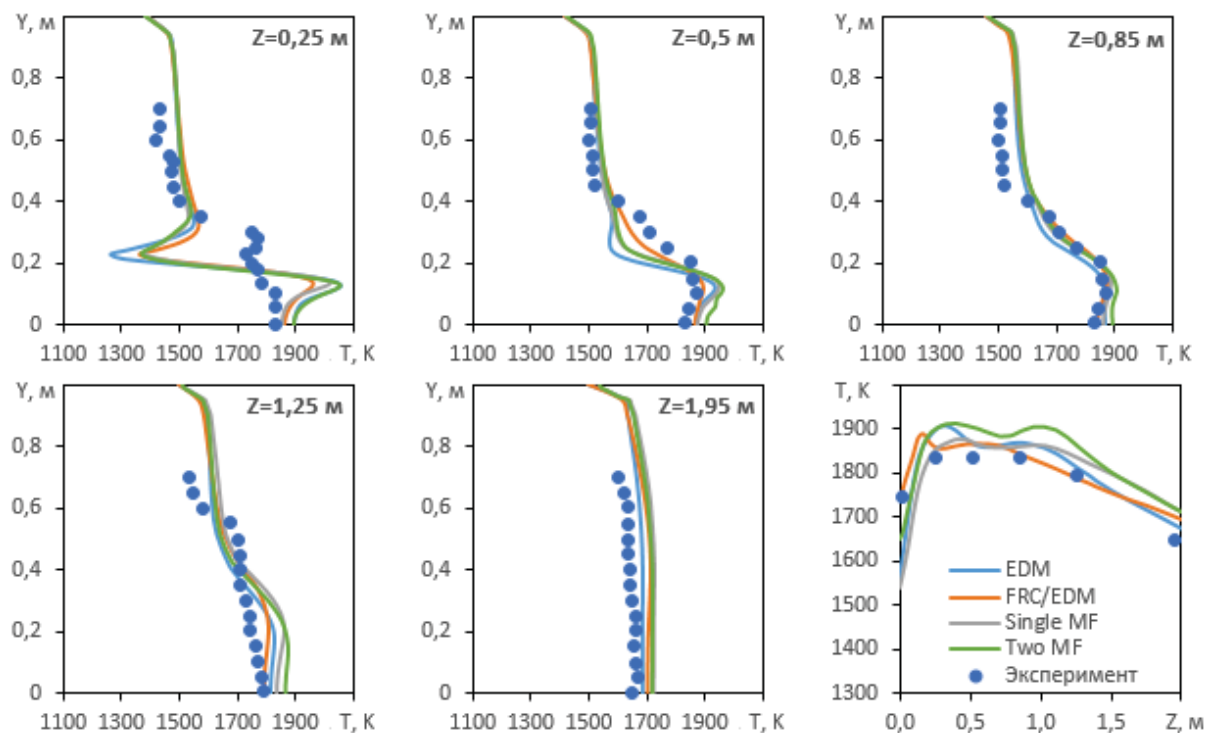


Рис. 6. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения температур
 Fig. 6. Predicted (lines) and experimental (dots) temperature values

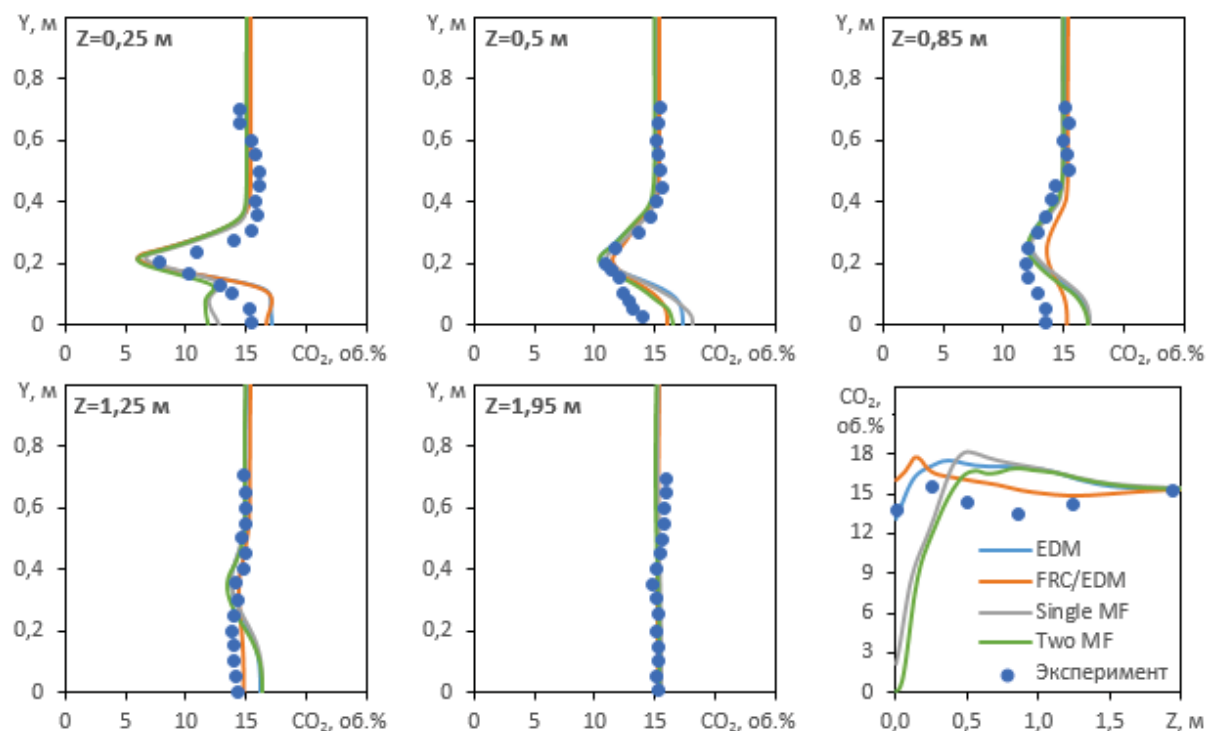


Рис. 7. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения концентрации CO_2 в сухих газах
 Fig. 7. Predicted (lines) and experimental (dots) CO_2 concentrations in dry gases

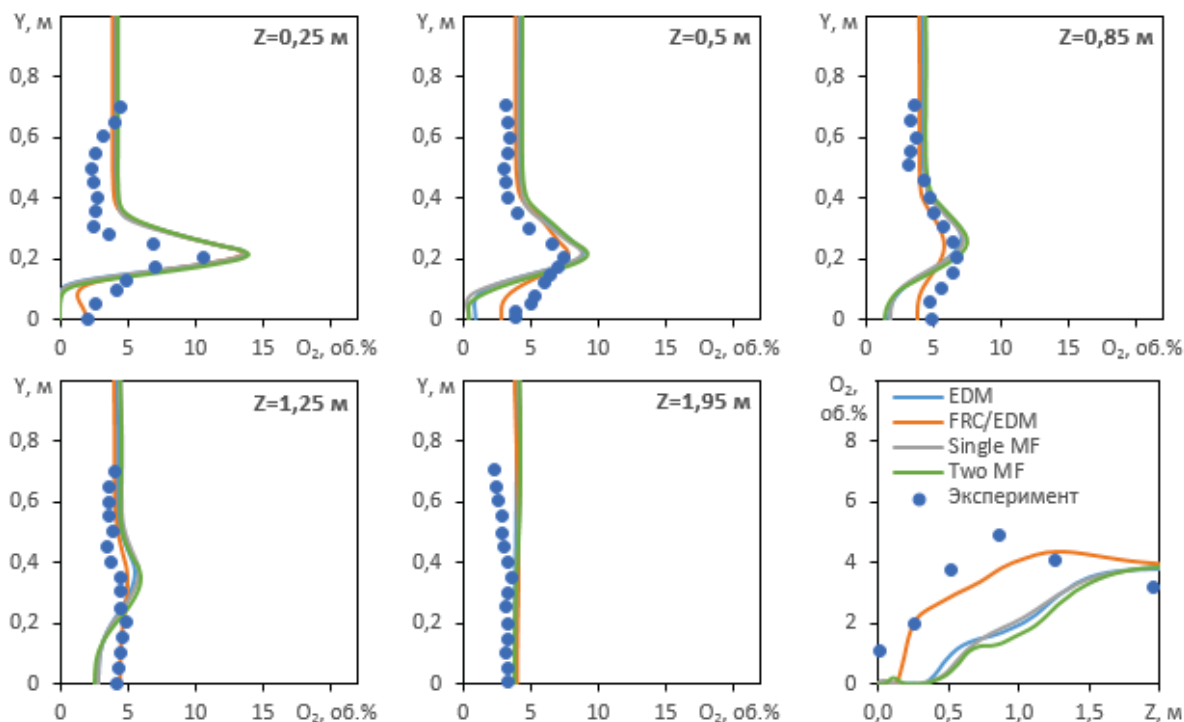
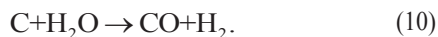


Рис. 8. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения концентрации O_2 в сухих газах
 Fig. 8. Predicted (lines) and experimental (dots) O_2 concentrations in dry gases

В этих моделях учитывается взаимодействие газовых компонентов с углеродом коксового остатка, а в проведенных расчетах подходами EDM и FRC/EDM предполагается, что единственным продуктом горения углерода является CO_2 . CO в этих моделях образуется только как продукт горения летучих веществ угля, поэтому концентрация CO в потоке быстро падает и в сечении $Z=1,25$ м исчезает полностью. Для устранения такого нефизичного исчезновения CO в потоке можно, например, задать единственным продуктом горения углерода CO , который затем догорает в газовой фазе до CO_2 . Но при таком допущении, вероятно, предсказанные расчетом концентрации CO будут выше измеренных. Однако для модели FRC/EDM есть ещё один вариант улучшить совпадение предсказанных концентраций CO с измеренными в эксперименте. Имеется возможность дополнить модель реакциями газификации коксового остатка, такими как (9) и (10).



В сечении топки $Z=0,25$ м концентрации CO в ядре горения, предсказанные моделями Single MF и Two MF, значительно превышают измеренные в эксперименте. Вероятно, это связано с тем, что в этой зоне химическое равновесие в реагирующей среде не достигается.

Концентрации NO_x

Сравнение предсказанных и измеренных концентраций NO_x (рис. 10) показывает, что наилучшее качественное совпадение в ядре горения получено подходом FRC/EDM.

Что касается количественного совпадения предсказанных и измеренных концентраций NO_x , то все четыре подхода к моделированию турбулентного горения дают схожие результаты, которые превышают измеренные в эксперименте на 10÷20 %. Возможно, это связано с недостаточностью удельной площади поверхности коксового остатка, принятой в модели восстановления NO_x , что занижает скорость восстановления NO_x на поверхности коксового остатка. Также на результат расчета концентраций NO_x в потоке значительное влияние может оказывать принятая в расчете модель выхода из угля летучих веществ [34]. Для определения влияния этого фактора на результаты расчета требуется отдельное исследование.

Выводы

Проведено численное моделирование горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке четырьмя разными подходами: моделями равновесной химии с одной и двумя переменными смешения; моделью «обрыва вихря» и её комбинацией с кинетической моделью горения. Сравнительным анализом результатов моделирования с экспериментально измеренными параметрами пылеугольного факела установлено следующее.

1. Применение разных подходов к моделированию горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке мало влияет на предсказанное поле скоростей. На его вид большее влияние оказывают другие модельные факторы, например, модель выхода летучих веществ из угля.
2. Лучшее совпадение поля температур, концентраций O_2 и CO_2 получено моделью «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения.

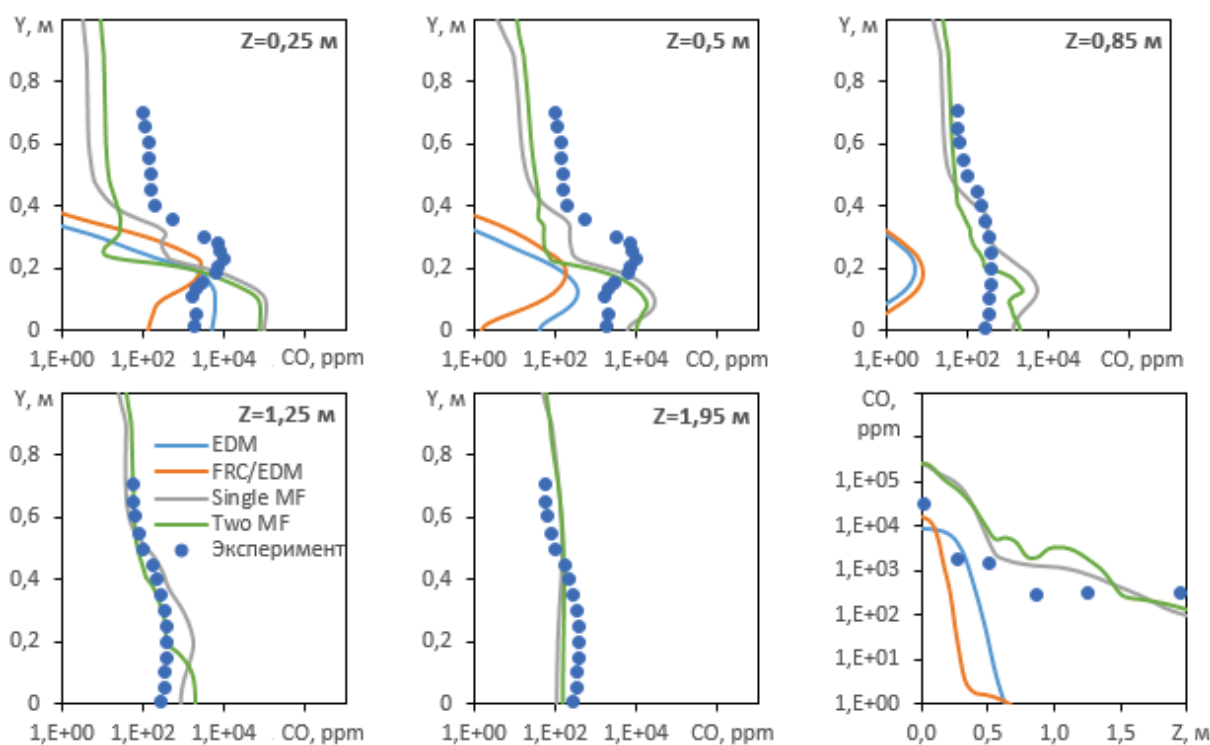


Рис. 9. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения концентрации CO в сухих газах

Fig. 9. Predicted (lines) and experimental (dots) CO concentrations in dry gases

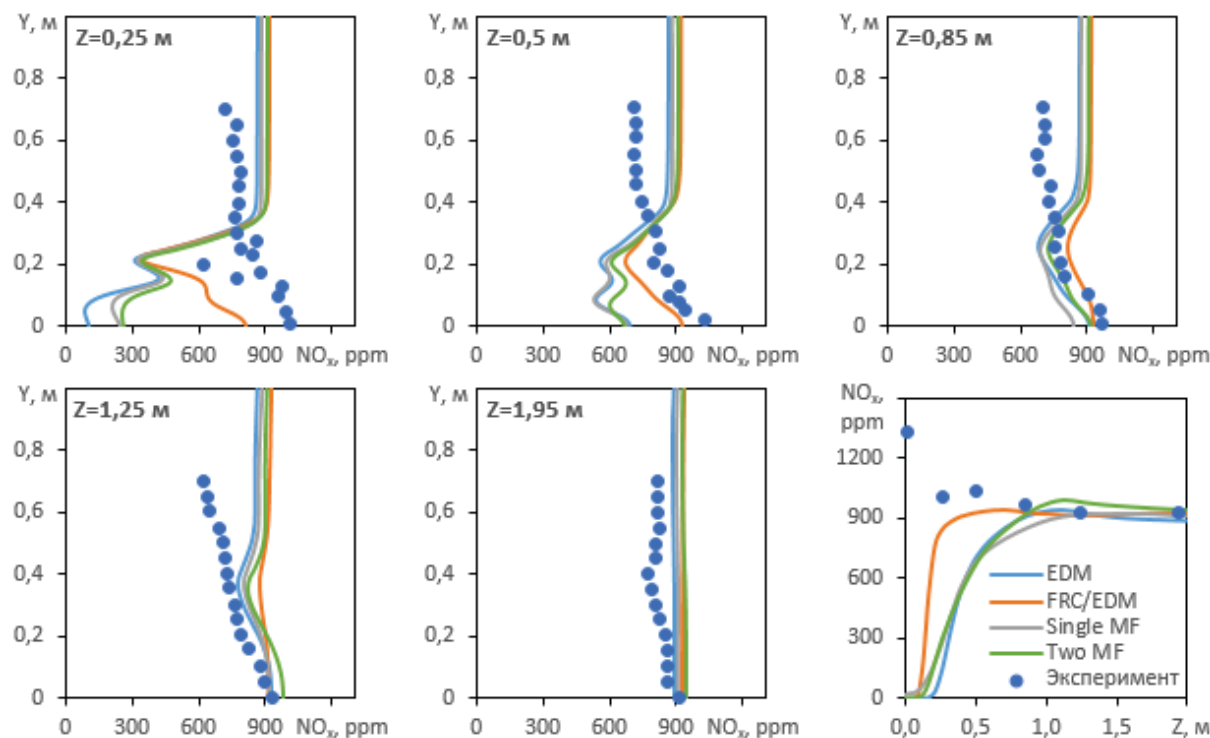


Рис. 10. Предсказанные (линии) и экспериментальные (точки) значения концентрации NO_x в сухих газах

Fig. 10. Predicted (lines) and experimental (dots) NO_x concentrations in dry gases

3. Лучшее совпадение концентрации CO получено моделями равновесной химии. Однако для модели «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения имеется возможность улучшить совпадение, путем добавления в модель реакций газификации коксового остатка.
4. Лучшее качественное совпадение концентрации NO_x в ядре горения получено моделью «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения. На количественные расхождения, по-видимому, большее влияние оказывают другие модельные факторы, такие как модель выхода ле-

тухих веществ из угля и принята в расчете площадь поверхности коксового остатка.

В целом все исследованные подходы к моделированию горения пылеугольного топлива в турбулентном потоке демонстрируют довольно хорошее совпадение с экспериментальными данными. Модель «обрыва вихря» в комбинации с кинетической моделью горения имеет преимущество в точности, а модель равновесной химии с одной переменной смешения имеет преимущество в скорости сходимости решения,

так как для определения концентраций всех компонентов решается минимальное количество уравнений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госзадания № FEWZ-2021-0014 (Научно-технические основы и прикладные решения комплексной энерготехнологической переработки биомассы для обеспечения экологически чистых технологий в энергетике и металлургии).

Работа выполнена в рамках программы развития Тюменского государственного университета (программа стратегического академического лидерства «Приоритет-2030»).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. IEA online data services. Renewables information // IEA. URL: <https://www.iea.org/fuels-and-technologies/electricity> (дата обращения 9.06.2022).
2. Advanced modeling approaches for CFD simulations of coal combustion and gasification / C. Hasse, P. Debiagi, X. Wen, K. Hildebrandt, M. Vascellari, T. Faravelli // Progress in Energy and Combustion Science. – 2021. – V. 86. – 100938.
3. Mularski J., Pawlak-Kruczek H., Modlinski N. A review of recent studies of the CFD modelling of coal gasification in entrained flow gasifier, covering devolatilization, gas-phase reactions, surface reactions, models and kinetics // Fuel. – 2020. – V. 271. – 117620.
4. Dewangan S.K., Naik M.P.K., Deshmukh V. Parametric study of the non-premixed coal combustion in furnace for heat transfer and emission characteristics // Journal of Thermal Engineering. – 2020. – V. 6. – № 6. – P. 323–353.
5. A computational fluid dynamics based study of the combustion characteristics of coal blends in pulverised coal-fired furnace / C. Sheng, B. Moghtaderi, R. Gupta, T.F. Wall // Fuel. – 2004. – V. 83. – № 11. – P. 1543–1552.
6. PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. P. 2: Application / M. Stöllinger, B. Naud, D. Roekaerts, N. Beishuizen, S. Heinz // Combustion and Flame. – 2013. – V. 160. – № 2. – P. 396–410.
7. Flores D.V., Fletcher T.H. Use of two mixture fractions to treat coal combustion products in turbulent pulverized-coal flames // Combustion science and technology. – 2000. – V. 150. – № 1. – P. 1–26.
8. An investigation into the use of CFD to model the co-firing of *Jatropha curcas* seed cake with coal / B.N. Madanayake, S. Gan, C. Eastwick, H.K. Ng // International Journal of Green Energy. – 2018. – V. 15. – № 11. – P. 605–621.
9. Zhuo Y., Shen Y. Three-dimensional transient modelling of coal and coke co-combustion in the dynamic raceway of ironmaking blast furnaces // Applied energy. – 2020. – V. 261. – 114456.
10. Chernetskii M., Vershinina K., Strizhak P. Computational modeling of the combustion of coal water slurries containing petrochemicals // Fuel. – 2018. – V. 220. – P. 109–119.
11. Numerical modeling and experimental investigation on the use of brown coal and its beneficiated semicoke for coal blending combustion in a 600 MW utility furnace / J. Zhang, Q. Wang, Y. Wei, L. Zhang // Energy and Fuels. – 2015. – V. 29. – № 2. – P. 1196–1209.
12. Численное исследование влияния избытка первичного воздуха на процессы горения в топочной камере энергетического котла с многоканальными вихревыми горелками / А.В. Гиль, А.С. Заворин, О.М. Кокшарев, Е.С. Воронцова // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2020. – Т. 331. – № 9. – С. 18–27.
13. Mularski J., Modlinski N. Impact of chemistry-turbulence interaction modeling approach on the CFD simulations of entrained flow coal gasification // Energies. – 2020. – V. 13. – № 23. – 6467.
14. Peters A.A.F., Weber R. Mathematical modeling of a 2.4 MW swirling pulverized coal flame // Combustion Science and Technology. – 1997. – V. 122. – № 1–6. – P. 131–182.
15. Кузнецов В.А. Математическое моделирование процессов тепло- и массообмена для перспективных технологий энергетического использования угольного топлива: дис. ... канд. техн. наук. – Красноярск, 2018. – 125 с.
16. Eastwick C.N., Pickering S.J., Aroussi A. Comparisons of two commercial computational fluid dynamics codes in modelling pulverised coal combustion for a 2.5 MW burner // Applied Mathematical Modelling. – 1999. – V. 23. – № 6. – P. 437–446.
17. A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows / T.-H. Shih, W.W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, J. Zhu // Computers and Fluids. – 1995. – V. 24. – № 3. – P. 227–238.
18. FLUENT Theory Guide, Version 17.2. – Canonsburg, PA, ANSYS, Inc., 2016. – 812 p.
19. Raithby G.D., Chui E.H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media // Journal of Heat Transfer. – 1990. – V. 112. – № 2. – P. 415–423.
20. Ranade V.V., Gupta D.F. Computational modeling of pulverized coal fired boilers. – Boca Raton: CRC Press, 2014. – 288 p.
21. Gosman A.D., Ioannides E. Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors // Journal of energy. – 1983. – V. 7. – № 6. – P. 482–490.
22. Badzioch S., Hawksley P.G.W. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles // Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development. – 1970. – V. 9. – № 4. – P. 521–530.
23. Field M.A. Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1 200°K and 2 000°K // Combustion and Flame. – 1969. – V. 13. – № 3. – P. 237–252.
24. Baum M.M., Street P.J. Predicting the combustion behaviour of coal particles // Combustion Science and Technology. – 1971. – V. 3. – № 5. – P. 231–243.
25. Magnussen B.F., Hjertager B.H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion // Symposium (International) on Combustion. – 1977. – V. 16. – № 1. – P. 719–729.
26. A kinetic model for the prediction of NO emissions from staged combustion of pulverized coal / D. Försch, F. Kluger, U. Schnell, H. Spliethoff, K.R.G. Hein // Symposium (International) on Combustion. – 1998. – V. 27. – № 2. – P. 3037–3044.
27. Jones W.P., Whitelaw J.H. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review // Combustion and Flame. – 1982. – V. 48. – № C. – P. 1–26.
28. Sivathanu Y.R., Faeth G.M. Generalized state relationships for scalar properties in nonpremixed hydrocarbon/air flames // Combustion and Flame. – 1990. – V. 82. – № 2. – P. 211–230.
29. Зельдович Я.Б., Садовников П.Я., Франк-Каменский Д.А. Окисление азота при горении. – М.: Изд-во АН СССР, 1947. – 148 с.
30. De Soete G.G. Overall reaction rates of NO and N2 formation from fuel nitrogen // Symposium (International) on Combustion. – 1975. – V. 15. – № 1. – P. 1093–1102.
31. Haas J., Tamura M., Weber R. Characterisation of coal blends for pulverised fuel combustion // Fuel. – 2001. – V. 80. – № 9. – P. 1317–1323.
32. The NO and N2O formation mechanism during devolatilization and char combustion under fluidized-bed conditions / F. Winter, C. Wartha, G. Löffler, H. Hofbauer // Symposium (International) on Combustion. – 1996. – V. 26. – № 2. – P. 3325–3334.
33. NO/char reactions at pulverized coal flame conditions / J.M. Levy, L.K. Chan, A.F. Sarofim, J.M. Beér // Symposium (International) on Combustion. – 1981. – V. 18. – № 1. – P. 111–120.
34. Diez L.I., Cortés C., Pallarés J. Numerical investigation of NOx emissions from a tangentially-fired utility boiler under conventional and overfire air operation // Fuel. – 2008. – V. 87. – № 7. – P. 1259–1269.

Поступила 20.06.2022 г.
Прошла рецензирование 11.10.2022 г.

Информация об авторах

Пронин А.К., аспирант Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета; инженер-исследователь Тюменского государственного университета.

Гиль А.В., кандидат технических наук, доцент научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

UDC 621.181:519.876.5

ANALYSIS OF APPROACHES TO NUMERICAL MODELING OF PULVERIZED COAL FUEL COMBUSTION IN A TURBULENT FLOW

Alexander K. Pronin^{1,2},
pronix@tpu.ru

Andrey V. Gil¹,
andgil@tpu.ru

¹ National Research Tomsk Polytechnic University,
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

² University of Tyumen,
6, Volodarsky street, Tyumen, 625003, Russia.

The relevance of the research is caused by the need for accurate reproduction of experimental measurements by mathematical models, since numerical simulation is widely used both for the development of new technologies for the combustion of solid fuels and for the modernization of existing boiler units. And as it is known, the parameters of a pulverized coal flame predicted by numerical simulation directly depend on the way the combustion chemistry in a turbulent flow is modeled.

The main aim of the research is to study the accuracy of reproduction of experimental measurements for four approaches to the numerical simulation of ignition and burnout of combustible components of pulverized coal fuel in a turbulent flow.

Objects: temperatures, concentrations of gas components (CO₂, O₂, CO and NO_x), axial and tangential velocity components inside the IFRF 2.4 MW furnace.

Methods: comparison of experimentally measured parameters of a pulverized coal flame and those predicted by numerical simulation. Numerical simulation was performed using the ANSYS FLUENT software package. The combustion of coal dust in the furnace is modeled as a two-phase turbulent flow system consisting of gas and discrete phases.

Results. Numerical modeling of the combustion of pulverized coal in a turbulent flow has been carried out using four different approaches: equilibrium chemistry models with one and two mixture fractions; model of «eddy dissipation» and its combination with the kinetic model of combustion. A comparative analysis of the simulation results with the experimentally measured parameters of a pulverized coal flame established that all the studied approaches to modeling the pulverized coal combustion in a turbulent flow demonstrate a fairly good agreement with the experimental data. The «eddy dissipation» model in combination with the combustion kinetic model has the advantage in accuracy, and the equilibrium chemistry model with one mixture fraction has the advantage in the time of solution convergence.

Key words:

Pulverized coal, combustion, numerical modeling, swirl burner, eddy dissipation model, chemical kinetics, chemical equilibrium model, mixture fraction.

The study was supported by the State assignment no. FEWZ-2021-0014 (Scientific and technical foundations and applied solutions for integrated energy and thermal processing of biomass to ensure environmentally friendly technologies in energy industry and metallurgy).

The work was carried out as part of academic leadership program of the University of Tyumen (strategic academic leadership program «Priority-2030»).

REFERENCES

1. IEA Online Data Services. Renewables Information. Available at: <https://www.iea.org/fuels-and-technologies/electricity> (accessed 9 June 2022).
2. Hasse C., Debiagi P., Wen X., Hildebrandt K., Vascellari M., Faravelli T. Advanced modeling approaches for CFD simulations of coal combustion and gasification. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2021, vol. 86, 100938.
3. Mularski J., Pawlak-Kruczek H., Modlinski N. A review of recent studies of the CFD modelling of coal gasification in entrained flow gasifier, covering devolatilization, gas-phase reactions, surface reactions, models and kinetics. *Fuel*, 2020, vol. 271, 117620.
4. Dewangan S.K., Naik M.P.K., Deshmukh V. Parametric study of the non-premixed coal combustion in furnace for heat transfer and emission characteristics. *Journal of Thermal Engineering*, 2020, vol. 6, no. 6, pp. 323–353.
5. Sheng C., Moghtaderi B., Gupta R., Wall T.F. A computational fluid dynamics based study of the combustion characteristics of coal blends in pulverised coal-fired furnace. *Fuel*, 2004, vol. 83, no. 11, pp. 1543–1552.
6. Stöllinger M., Naud B., Roekaerts D., Beishuizen N., Heinz S. PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. P. 2: Application. *Combustion and Flame*, 2013, vol. 160, no. 2, pp. 396–410.
7. Flores D.V., Fletcher T.H. Use of two mixture fractions to treat coal combustion products in turbulent pulverized-coal flames. *Combustion science and technology*, 2000, vol. 150, no. 1, pp. 1–26.
8. Madanayake B.N., Gan S., Eastwick C., Ng H.K. An investigation into the use of CFD to model the co-firing of *Jatropha curcas* seed cake with coal. *International Journal of Green Energy*, 2018, vol. 15, no. 11, pp. 605–621.
9. Zhuo Y., Shen Y. Three-dimensional transient modelling of coal and coke co-combustion in the dynamic raceway of ironmaking blast furnaces. *Applied energy*, 2020, vol. 261, 114456.
10. Chernetskiy M., Vershinina K., Strizhak P. Computational modeling of the combustion of coal water slurries containing petrochemicals. *Fuel*, 2018, vol. 220, pp. 109–119.
11. Zhang J., Wang Q., Wei Y., Zhang L. Numerical modeling and experimental investigation on the use of brown coal and its beneficiated semicoke for coal blending combustion in a 600 MW utility furnace. *Energy and Fuels*, 2015, vol. 29, no. 2, pp. 1196–1209.
12. Gil A.V., Zavorin A.S., Koksharev O.M., Vorontsova E.S. Numerical study of effect of primary air excess on combustion in a furnace chamber of a utility boiler with multi-channel swirl burners.

- Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2020, vol. 331, no. 9, pp. 18–27.
13. Mularski J., Modlinski N. Impact of chemistry-turbulence interaction modeling approach on the CFD simulations of entrained flow coal gasification. *Energies*, 2020, vol. 13, no. 23, 6467.
 14. Peters A.A.F., Weber R. Mathematical modeling of a 2.4 MW swirling pulverized coal flame. *Combustion Science and Technology*, 1997, vol. 122, no. 1–6, pp. 131–182.
 15. Kuznetsov V.A. *Matematicheskoe modelirovanie protsessov teplo-i massoobmena dlya perspektivnykh tekhnologiy energeticheskogo ispolzovaniya ugolnogo topliva*. Diss. Kand. nauk [Mathematical modeling of heat and mass transfer processes for promising technologies for the energy use of coal fuel. Cand. Diss.]. Krasnoyarsk, 2018. 125 p.
 16. Eastwick C.N., Pickering S.J., Aroussi A. Comparisons of two commercial computational fluid dynamics codes in modelling pulverised coal combustion for a 2.5 MW burner. *Applied Mathematical Modelling*, 1999, vol. 23, no. 6, pp. 437–446.
 17. Shih T.H., Liou W.W., Shabbir A., Yang Z., Zhu J. A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers and Fluids*, 1995, vol. 24, no. 3, pp. 227–238.
 18. *FLUENT Theory Guide, Version 17.2*. Canonsburg, PA, ANSYS, Inc., 2016. 812 p.
 19. Raithby G.D., Chui E.H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer*, 1990, vol. 112, no. 2, pp. 415–423.
 20. Ranade V.V., Gupta D.F. *Computational Modeling of Pulverized Coal Fired Boilers*. Boca Raton, CRC Press, 2014. 288 p.
 21. Gosman A.D., Ioannides E. Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors. *Journal of energy*, 1983, vol. 7, no. 6, pp. 482–490.
 22. Badzioch S., Hawksley P.G.W. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 1970, vol. 9, no. 4, pp. 521–530.
 23. Field M.A. Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1 200°K and 2 000°K. *Combustion and Flame*, 1969, vol. 13, no. 3, pp. 237–252.
 24. Baum M.M., Street P.J. Predicting the combustion behaviour of coal particles. *Combustion Science and Technology*, 1971, vol. 3, no. 5, pp. 231–243.
 25. Magnussen B.F., Hjertager B.H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 1977, vol. 16, no. 1, pp. 719–729.
 26. Förtsch D., Kluger F., Schnell U., Spliethoff H., Hein K.R.G. A kinetic model for the prediction of NO emissions from staged combustion of pulverized coal. *Symposium (International) on Combustion*, 1998, vol. 27, no. 2, pp. 3037–3044.
 27. Jones W.P., Whitelaw J.H. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review. *Combustion and Flame*, 1982, vol. 48, no. C, pp. 1–26.
 28. Sivathanu Y.R., Faeth G.M. Generalized state relationships for scalar properties in nonpremixed hydrocarbon/air flames. *Combustion and Flame*, 1990, vol. 82, no. 2, pp. 211–230.
 29. Zeldovich Ya.B., Sadovnikov P.Ya., Frank-Kamensky D.A. *Okislenie azota pri gorenii* [Nitrogen oxidation during combustion]. Moscow, AN SSSR Publ., 1947. 148 p.
 30. De Soete G.G. Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen. *Symposium (International) on Combustion*, 1975, vol. 15, no. 1, pp. 1093–1102.
 31. Haas J., Tamura M., Weber R. Characterisation of coal blends for pulverised fuel combustion. *Fuel*, 2001, vol. 80, no. 9, pp. 1317–1323.
 32. Winter F., Wartha C., Löffler G., Hofbauer H. The NO and N₂O formation mechanism during devolatilization and char combustion under fluidized-bed conditions. *Symposium (International) on Combustion*, 1996, vol. 26, no. 2, pp. 3325–3334.
 33. Levy J.M., Chan L.K., Sarofim A.F., Beér J.M. NO/char reactions at pulverized coal flame conditions. *Symposium (International) on Combustion*, 1981, vol. 18, no. 1, pp. 111–120.
 34. Díez L.I., Cortés C., Pallarés J. Numerical investigation of NO_x emissions from a tangentially-fired utility boiler under conventional and overfire air operation. *Fuel*, 2008, vol. 87, no. 7, pp. 1259–1269.

Received: 20 June 2022.
Reviewed: 11 October 2022.

Information about the authors

Alexander K. Pronin, postgraduate student, National Research Tomsk Polytechnic University; research engineer, University of Tyumen.

Andrey V. Gil, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.