

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЙВАНИЯ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ВОЗДУХА В РЕЗУЛЬТАТЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ОТ ТЕПЛОВОЙ ЭЛЕКТРОСТАНЦИИ

ИСАХОВ А.А.^{1,2}, АЛИМБЕК А.К.²

¹Казахский Национальный университет им. аль-Фараби, 050000, Алматы, Казахстан

²Казахстанско-Британский технический университет, 050000, Алматы, Казахстан

Аннотация. В данной статье представлены результаты, полученные путем численного моделирования распространения загрязняющих веществ, образующихся при сжигании топлива на электрической теплоэлектростанции, и их химическая реакция в атмосфере. На примере реальной теплоэлектростанции (Экибастузская ГРЭС-1) была смоделирована дисперсия NO и продукт NO₂ при химической реакции с кислородом. Примечательной особенностью данной теплоэлектростанции является то, что разница между дымоходами позволяет изучить влияние высоты источника на дисперсию загрязнения. Для описания этого процесса использовались уравнения Навье – Стокса, состоящие из уравнения неразрывности и движения. Для проверки математической модели и численного алгоритма численно решались тестовые задачи. Целью данной работы было изучение уровня концентрации загрязнения на разных расстояниях от источника. В результате были определены массовые доли концентрации и продукта. Согласно полученным данным, с увеличением расстояния от источника концентрация загрязнения распространяется более широко под влиянием диффузии. Чем дальше расстояние от трубы, тем ниже концентрация вещества. В результате численного исследования полученные данные могут быть использованы для дальнейших исследований проблем, связанных с распространением загрязняющих веществ в атмосфере для реальных атмосферных условий, также могут позволить в будущем спрогнозировать оптимальное расстояние от жилых районов для строительства ТЭС, при котором концентрация выбросов будет оставаться на безопасном уровне.

Ключевые слова: химическая реакция, рассеивание загрязнителей воздуха, тепловая электростанция, струя в поперечном потоке, осреднение Навье – Стокса по Рейнольдсу (RANS)

ЖЫЛУ ЭЛЕКТР СТАНЦИЯСЫНАН ХИМИЯЛЫҚ РЕАКЦИЯ НӘТИЖЕСІНДЕ ПАЙДА БОЛАТЫН АУА ЛАСТАУШЫЛАРЫНЫҢ ТАРАЛУЫН САНДЫҚ ЗЕРТТЕУ

ИСАХОВ А.А.^{1,2}, АЛИМБЕК А.К.²

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті, 050000, Алматы, Қазақстан

²Қазақстан-Британ техникалық университеті, 050000, Алматы, Қазақстан

Аңдатпа. Жылу электр станцияларында отынды жағу кезінде пайда болатын ластаушы заттардың таралуын және олардың атмосферадағы химиялық реакциясын сандық модельдеу арқылы алынған нәтижелер келтірілген. Нақты жылу электр станциясының (Екібастұз МАЭС-1) мысалында NO дисперсиясы мен оттегімен химиялық реакция кезінде пайда болатын NO₂ өнімі модельденді. Бұл жылу электр станциясының бір ерекшелігі – мұржалар арасындағы айырмашылық биіктіктің ластану дисперсиясына әсерін зерттеуге мүмкіндік береді. Осы процесті сипаттау үшін үзіліссіздік және қозғалыс теңдеулерінен тұратын Навье – Стокс теңдеуі қолданылды. Математикалық модель мен сандық алгоритмді тексеру үшін тесттік есеп сандық шешілді. Жұмыстың мақсаты әртүрлі қашықтықта ластану концентрациясының деңгейін зерттеу болды. Нәтижесінде концентрация мен өнім концентрациялары анықталды. Алынған мәліметтерге сәйкес, ластаушы көзінің жоғарылауымен ластану концентрациясы диффузияның әсерінен кеңірек таралады. Құбырдан қашықтық неғұрлым

алыс болса, ластаушы концентрациясы соғұрлым төмен. Сандық зерттеу нәтижесінде алынған мәліметтер нақты атмосфералық жағдайлар үшін атмосфераға ластаушы заттардың таралуына байланысты проблемаларды одан әрі зерттеу үшін пайдаланылуы мүмкін, сонымен қатар болашақта шығарындылардың шоғырлануы қауіпсіз деңгейде болатын ЖЭС салу үшін тұрғын аудандардан оңтайлы қашықтықты болжауға мұрындық болады.

Түйінді сөздер: Химиялық реакция, ауа ластаушыларының таралуы, жылу электр станциясы, көлденең ағын, Рейнольдс бойынша Навье-Стокс орташалануы (RANS).

NUMERICAL STUDY OF THE DISPERSION OF AIR POLLUTANTS AS A RESULT OF CHEMICAL REACTIONS IN A THERMAL POWER PLANT

ISSAKHOV A.A.^{1,2}, ALIMBEK A.K.²

¹Al-Farabi Kazakh National university, 050000, Almaty, Kazakhstan

²Kazakh-British technical university, 050000, Almaty, Kazakhstan

Abstract. This article presents the results obtained by numerical modeling of the spread of pollutants formed during the combustion of fuel at an electric thermal power plant and their chemical reaction in the atmosphere. On the example of a real thermal power plant (Ekibastuz SDPP-1), the dispersion of NO and the product of NO₂ was modeled during a chemical reaction with oxygen. A notable feature of this thermal power plant is that the difference between the chimneys makes it possible to study the influence of the height of the source on the dispersion of pollution. To describe this process, the Navier - Stokes equations were used, consisting of the equation of continuity and motion. To check the mathematical model and the numerical algorithm, test problems were solved numerically. The aim of this work was to study the level of pollution concentration at different distances from the source. As a result, the mass fractions of concentration and product were determined. According to the data obtained, with increasing distance from the source, the concentration of pollution spreads more widely under the influence of diffusion. The further the distance from the pipe, the lower the concentration of the substance. As a result of a numerical study, the data obtained can be used for further studies of the problems associated with the spread of pollutants into the atmosphere for real atmospheric conditions, and can also allow in the future to predict the optimal distance from residential areas for the construction of thermal power plants, at which the concentration of emissions will remain at a safe level.

Key words: Chemical reaction; air pollutant dispersion; thermal power plant; jet in crossflow; Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS)

Введение

Атмосферный воздух - жизненно важный компонент окружающей среды. Постоянное негативное воздействие на атмосферу и неудовлетворительное решение вопросов, связанных с ее оздоровлением, негативно сказываются на здоровье населения. Загрязнение воздуха создается в результате деятельности промышленных предприятий, электростанций, автомобилей, которые выбрасывают в атмосферу сотни тонн вредных веществ. В воздушном бассейне постоянно происходят фотохимические процессы, приводящие к появлению новых соединений, иногда более вредных, чем исходные. Тепловые электростанции - один из основных источников

загрязнения окружающей среды. Тепловые электростанции производят электроэнергию (до 75% от общего мирового производства электроэнергии) и тепловую энергию. При горении основная часть топлива превращается в отходы, которые попадают в окружающую среду в виде газообразных и твердых продуктов сгорания. При сжигании топлива расходуется большое количество кислорода, а выделяется значительное количество продуктов сгорания. Загрязнители воздуха можно разделить на два класса. К первому классу относятся первичные загрязнители воздуха [1], которые выбрасываются в атмосферу непосредственно из источников выбросов (обычно в результате сжигания топлива) и в

основном состоят из оксидов азота (NO_x) - в основном NO , летучих органических соединений (VOCs), углерода, монооксида (CO) и компонентов твердых частиц [2]. Второй класс — это вторичные загрязнители воздуха, которые образуются в атмосфере, в то время как первичные загрязнители воздуха подвергаются физическим и химическим реакциям [3]. Химические реакции приводят к разбавлению реагентов и образованию вторичных загрязнителей, которые зависят от концентрации загрязняющих веществ, температуры и химической кинетики [4,5]. Одним из важных вторичных загрязнителей воздуха является озон (O_3), который образуется в результате химических реакций, включая, главным образом, окисление ЛОС и NO_x в присутствии солнечного света. Реактивные промежуточные соединения (гидроксильный радикал (OH) и гидропероксильный радикал (HO_2)) регулируют цикл химического разложения, превращая NO в NO_x и, следовательно, образование O_3 [6]. В работах [7,8,9] были численно исследованы механизмы образования NO в химическом составе, который включал 45 видов и 142 реакции. Чтобы смоделировать такие задачи реального размера, необходимо решить тестовую задачу. Данной тестовой задачей была проверена точность численного алгоритма. Полученные данные сравнивали со значениями эксперимента. Удовлетворительно получено согласие с данными измерений. Значения показали более близкое согласие со значениями измерений, чем значения моделирования других авторов.

Математическая модель

CFD-моделирование таких процессов основано на уравнениях Навье – Стокса, состоящее из уравнения неразрывности и движения [10-13].

- Уравнение неразрывности:

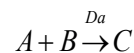
$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

- Уравнение движения:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] - \rho g_i \quad (2)$$

- Химическая реакция:

Вещество В, выходящее из трубы, вступает в реакцию с веществом А основного течения, в результате образуется вещество С.



Вещества подобраны таким образом, что число Дамкёлера равно 1.

- Уравнение для концентрации:

Для расчета переноса концентрации были использованы уравнения для компонентов Y_A и Y_B .

$$\rho \left(\frac{\partial Y_A}{\partial t} + u \frac{\partial Y_A}{\partial x} + v \frac{\partial Y_A}{\partial y} + w \frac{\partial Y_A}{\partial z} \right) = \rho \Gamma_A \left(\frac{\partial^2 Y_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y_A}{\partial z^2} \right) + \omega_A \quad (3)$$

$$\omega_A = -Da Y_A Y_B$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y_B}{\partial t} + u \frac{\partial Y_B}{\partial x} + v \frac{\partial Y_B}{\partial y} + w \frac{\partial Y_B}{\partial z} \right) = \rho \Gamma_A \left(\frac{\partial^2 Y_B}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y_B}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y_B}{\partial z^2} \right) + \omega_B \quad (4)$$

$$\omega_B = \omega_A$$

Y_C вычисляется согласно закону Дальтона:

$$Y_C = 1 - Y_A - Y_B \quad (5)$$

Система уравнений записана в декартовой системе координат $x_i (i=1, 2, 3)$, в физическом пространстве; три компоненты скорости u, v, w - давление; μ - динамическая вязкость, $\nu = \mu / \rho$ - кинематическая вязкость, ρ - плотность, Γ - диффузионный коэффициент, t - безразмерное время.

Для численного решения системы уравнений (1)-(2) используется численный алгоритм SIMPLE (полуявный метод для уравнений, связанных давлением), представленный Патанкар и Сполдинг [13].

Тестовая задача для компонентов поля скорости и концентрации

В этом разделе обсуждается следующая тестовая задача. Подробное описание этой тестовой задачи и эксперимента дано в [14,15]. В работе [14] были рассмотрены различные соотношения струи к поперечному потоку R (0,5, 1,0 и 1,5). При $R=0.5$ считалось, что скорость струи составляла 5.5 м/с, скорость поперечного потока – 11 м/с. В качестве материала был выбран воздух. Диаметр струи составлял $D=12,7$ мм. Число Рейнольдса определяется следующим образом:

$$Re = \frac{\rho V_{jet} D}{\mu} = 4700.$$

Для описания начального профиля скорости поперечного потока в пограничном слое использовался 1/7 степенной закон ветра

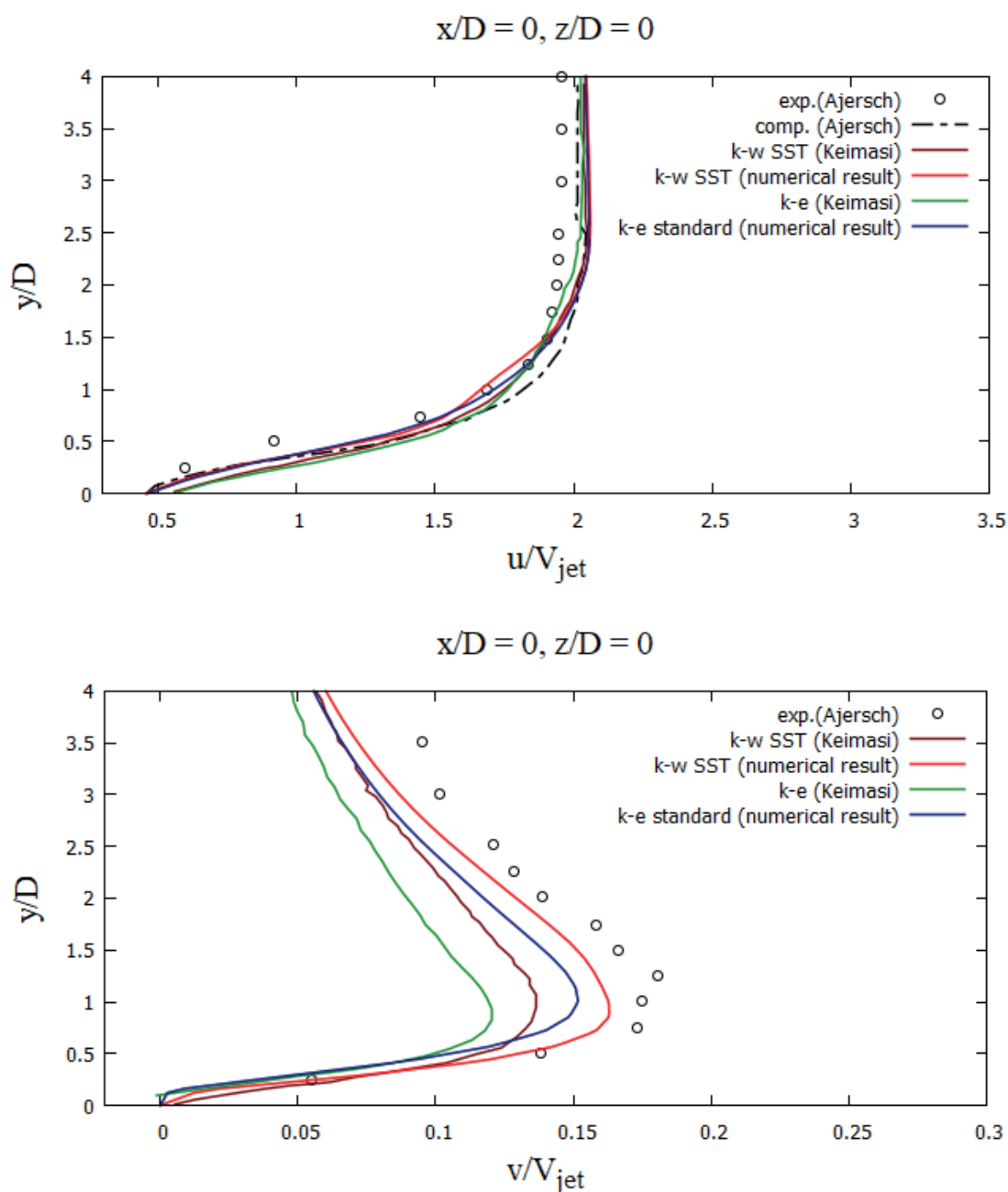
$$\frac{u}{u_r} = \left(\frac{z}{z_r} \right)^\alpha$$

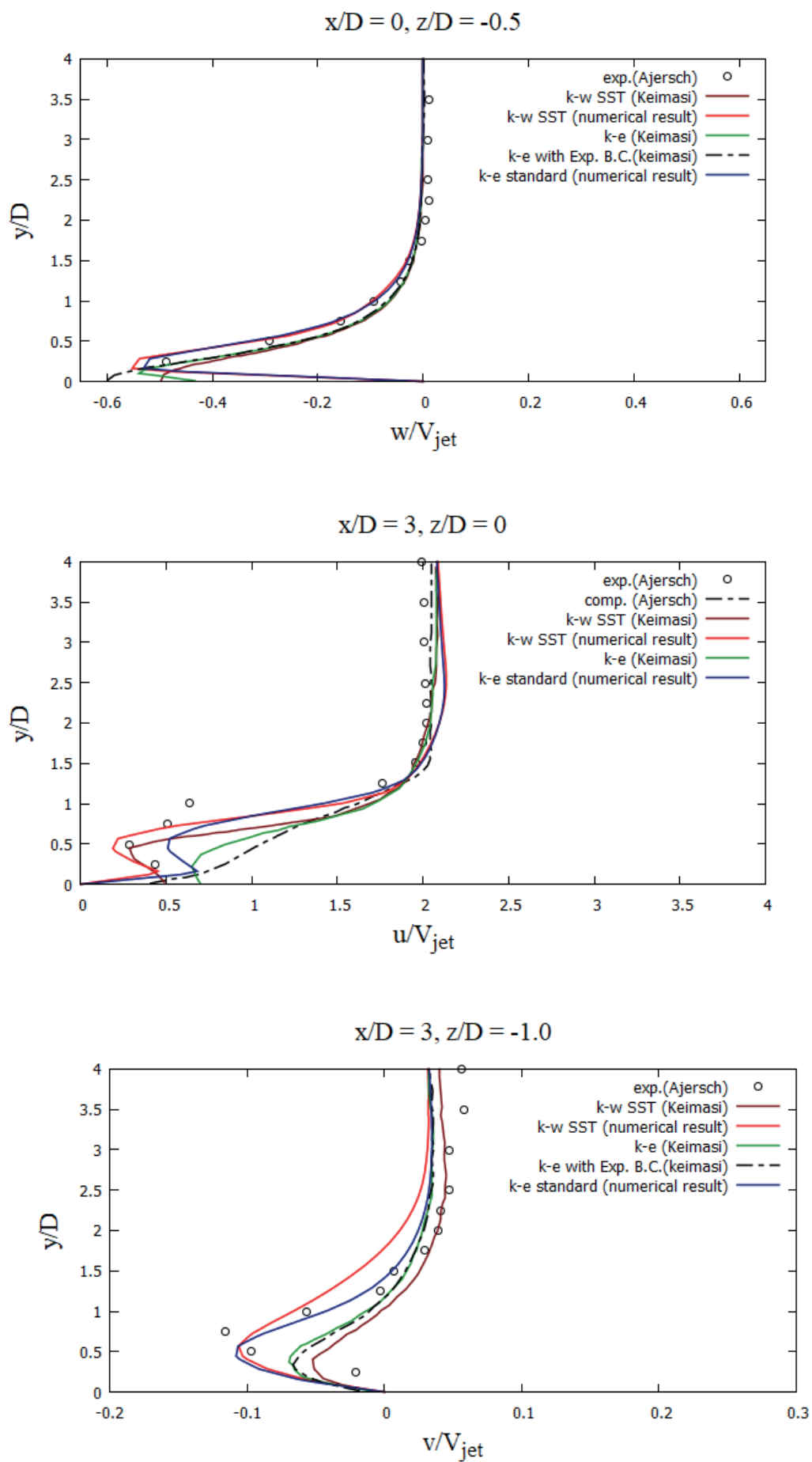
На высоте более $2D$ скорость по оси X была задана стационарно, равная 11 м/с. Для вертикального канала была установлена стационарная скорость по оси Y , равная 5.5 м/с.

Здесь u - скорость ветра на высоте z , а z_r - известная скорость ветра на эталонной высоте z_r . α - полученный эмпирически коэф-

фициент, который изменяется в зависимости от стабильности атмосферы. Здесь $\alpha=1/7$ для условий нейтральной устойчивости. Такие значения скорости были заданы с целью повторения эксперимента, проделанного в работе [14].

На рисунке 1 показаны сравнения численных результатов данного исследования с вычислительными решениями [14] и экспериментальными данными [15]. Как видно в результатах, оптимальной моделью оказалась k-w SST. Для задачи в реальных размерах мы будем использовать модель k-w SST.





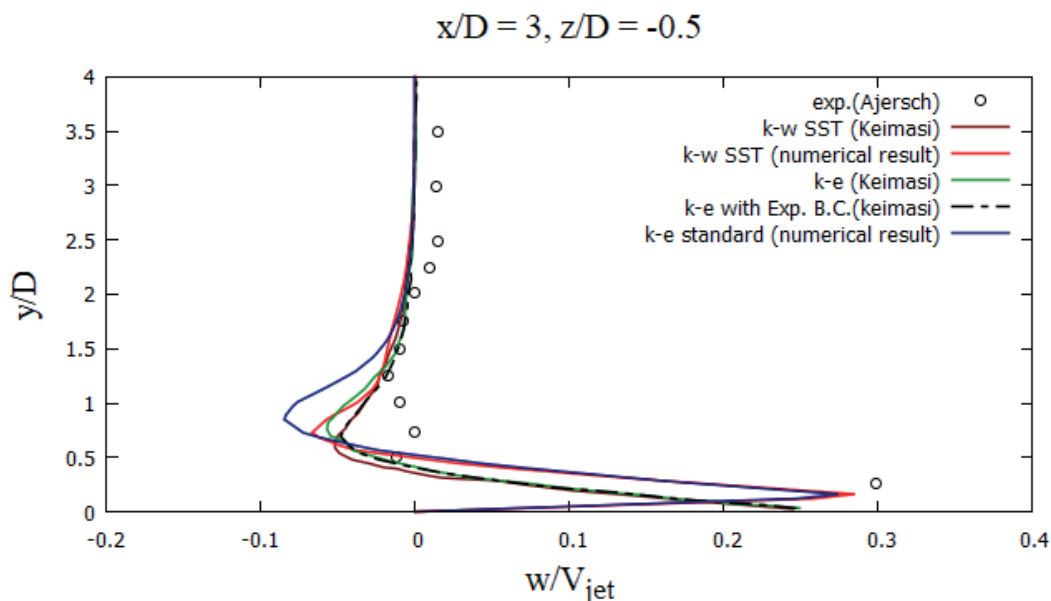


Рис. 12 – Сравнение профилей для скоростей u, v, w в указанных точках

Реальная задача

В данной работе была рассмотрена реальная модель распределения загрязняющих веществ от Экибастузской ГРЭС-1. Вычислительная область представляет собой трехмерную коробку с трубой внутри нее. На этой ТЭС загрязнение выделяется из двух дымоходов (300 и 330 м). Расстояние между дымоходами составляет 200 м. Диаметры дымоходных отверстий – 10 м. В качестве загрязняющего вещества от ТЭС выбрасываются в большом количестве газы NO , NO_2 , CO и др. Эти загрязнители в атмосфере вступают в реакцию с кислородом и водяным паром. В данной работе рассматривается реакция: $2\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}_2$. Как говорилось ранее, полученный продукт более вредный, чем исходный. Вычислительная сетка была сгущена в области траектории движения загрязнения, в которой произошло сгущение области, где расположены строения (сетка до 20 м), а затем сгущение к зданиям (сетка до 5 м) и к трубам (сетка до 2 м). Она состоит из 218 915 узлов и 1 244 098 элементов.

Для описания начального профиля скорости поперечного потока в пограничном слое использовался $1/7$ степенной закон ветра, как в работе [14]. Отношение скорости струи к скорости поперечного потока $R=0.5$. Ско-

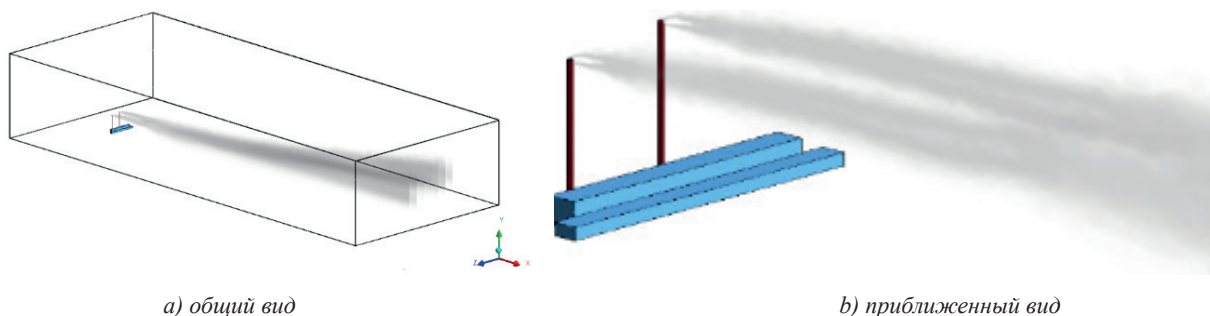
рость струи составляла 1.5 м/с, скорость поперечного потока – 3 м/с.

Численные результаты

Моделирование выполнялись в физических размерах. Число Дамкелера равно 1. На рисунке 2 показано распределение концентрации загрязнения, которое визуализируется с использованием опции Volume Rendering. Визуально с увеличением расстояния от источника наблюдается эффект диффузии.

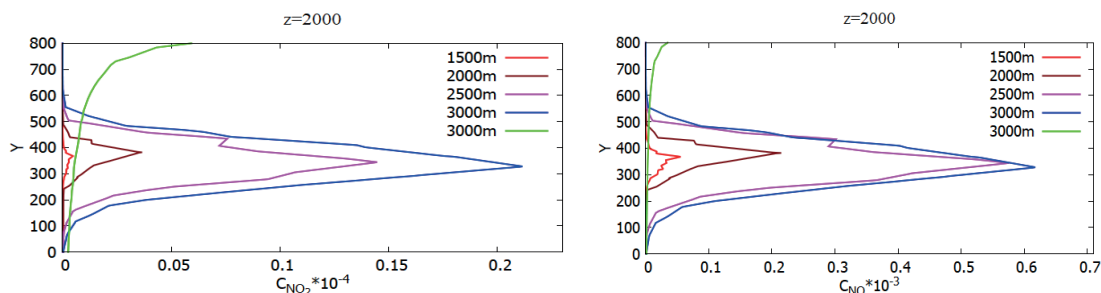
Сравнение массовой доли NO из двух труб (300 м и 330 м) на разных расстояниях (скорость ветра 3 м/с): 1000, 1500, 2500, 3000 и 10 000 м от начала координат. Как видно на графике, массовая доля для дымовой трубы высотой 330 м выше по сравнению с дымовой трубой 300 м. Отсюда можно сделать вывод, что высота дымовых труб существенно влияет на распределение загрязнений. Строительство более высоких дымоходов больше подходит для экологической безопасности.

Сравнение массовой доли продукта реакции NO_2 из двух труб (300 м и 330 м) на разных расстояниях (скорость ветра – 3 м/с): 1000, 1500, 2500, 3000 и 10 000 м от начала координат. Рисунок 3 показывает, что загрязняющее вещество не сразу перемешивается. Перемешивание начинается от 500 м от источника.



а) общий вид

б) приближенный вид

 Рис. 26 – Визуализация распространения концентрации NO_2 и NO

 Рис. 39 – Сравнение профилей массовых долей NO , NO_2 в точках: 1500, 2000, 2500, 3000, 10000, $z=2000$

Заключение

В данной статье представлены результаты численного моделирования распространения загрязняющих веществ, образующихся при сгорании топлива на тепловой электростанции, и их химической реакции в атмосфере. Модель и алгоритм решения были проверены с помощью тестовой задачи. При обзоре темы были использованы реальные данные Экибастузской ГРЭС-1 и промоделирован процесс её работы. Примечательной особенностью данной теплоэлектростанции является то, что разница между дымоходами позволяет изучить влияние высоты источника на дисперсию загрязнения. Целью исследования было изучение динамики распространения выбросов и их соединение с кислородом в воздухе. На примере реальной теплоэлектростанции была смоделирована дисперсия NO и продукт NO_2 при химической реакции с кислородом. Модель использует уравнение Навье-Стокса для моделирования распространения загрязняющих веществ в атмосфере. Из численных результатов видно, что высота дымоходов существенно влияет на распределение газов. При анализе было обнаружено, что необходимо смоделировать процесс расположения источника распространения вредных приме-

сей тепловой электростанции в атмосферу таким образом, чтобы минимизировать загрязнение атмосферы. Строительство более высоких дымоходов для тепловой электростанции больше подходит для экологической безопасности.

Следует отметить, что в этой работе существуют некоторые ограничения. Основным ограничением является размер вычислительной сетки. Ресурсы компьютера ограничены в размере вычислительной сетки, в то время как мелкая сетка необходима для точного моделирования. Кроме того, дальнейшее увеличение компьютерных ресурсов будет сопровождаться требованиями ученых к увеличению разрешения сетки и включению дополнительных физических параметров, которые приведут к реальным проблемам. Вторым ограничением данной работы является сложность проведения анализа экспериментальных исследований по распространению химических соединений в атмосфере от деятельности тепловых электростанций (факторы окружающей среды, форма, размеры). Эти исследования полезны для тех, кто интересуется распределением химических соединений в атмосфере от деятельности тепловых электростанций.

REFERENCES

1. H. Mayer, Air pollution in cities. *Atmospheric Environment*, 1999, vol. 33(24-25), pp. 4029-4037.
2. R.E. Dunmore, J.R. Hopkins, R.T. Lidster, J.D. Lee, M.J. Evans, A.R. Rickard, A.C. Lewis, J.F. Hamilton, Diesel-related hydrocarbons can dominate gas phase reactive carbon in megacities. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2015, vol. 15, pp. 9983-9996.
3. M.Z. Jacobson, *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Cambridge University Press, New York, 2005, vol. 306, pp. 111-144.
4. Z. Wu, & Liu, C.-H. Budget analysis for reactive plume transport over idealised urban areas. *Geoscience Letters*, 2018, vol. 19 (2018), pp. 5(1).
5. B. Fiorina, D. Veynante, S. Candel. Modeling combustion chemistry in Large-Eddy Simulation of turbulent flames. *Flow Turbulence Combust*, 2014, vol. 94 (2015), pp. 3-42.
6. W.J. Bloss, Atmospheric chemical processes of importance in cities. In: R.M. Harrison, R.E. Hester, (Eds.) *Air Quality in Urban Environments*, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2009, vol. 28, pp. 42-64.
7. V. Muñoz, C. Casado, S. Suárez, B. Sánchez, & J. Marugán, Photocatalytic NO_x removal: Rigorous kinetic modelling and ISO standard reactor simulation. *Catalysis Today*, 2018, vol 326, pp. 82-93.
8. Z. Li, H. Xu, W. Yang, M. Xu, & F. Zhao, Numerical investigation and thermodynamic analysis of syngas production through chemical looping gasification using biomass as fuel. *Fuel*, 2019, vol. 246.
9. B. Li, B. Shi, X. Zhao, K. Ma, D. Xie, D. Zhao, et al., Oxy-fuel combustion of methane in a swirl tubular flame burner under various oxygen contents: operation limits and combustion instability. *Exp Therm Fluid Sci*, 2018, vol. 90, pp. 115–124.
10. J.H. Ferziger and M. Peric. *Computational methods for fluid dynamics* 3rd ed. Springer, London, 2013, pp. 426.
11. T.J. Chung. *Computational fluid dynamics*, Cambridge: Cambridge University Press, 2002, pp.1012.
12. A. Issakhov. Modeling of synthetic turbulence generation in boundary layer by using Zonal RANS/LES method. *Int J Nonlinear Sci Num Simulat*, 2014, vol. 15, pp.115–120.
13. S.V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor & Francis, 1980.
14. R.M. Keimasi, M. Tacibi-Rahni, Numerical Simulation of Jets in a Crossflow Using Different Turbulence Model. *AIAA Journal*, 2001, vol. 39(12), pp. 2268-2277.
15. P. Ajersch, J. M. Zhou, S. Ketler, M. Salcudean, and I. S. Gartshore, Multiple Jets in a Cross flow: Detailed Measurements and Numerical Simulations. *International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exposition*, ASME Paper 95-GT-9, Houston, TX, 1995, pp. 1–16.

Information about authors:

1. Alibek Issakhov – PhD, Head of the Department of Mathematical and Computer Modeling, Al-Farabi Kazakh National University

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-1937-8615>

Email: Alibek.issakhov@gmail.com

2. Aidana Alimbek – Master of technical sciences, tutor of the Scientific and Educational Center of Mathematics and Cybernetics, Kazakh-British Technical University, st. Tole bi 59

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-1048-784X>

Email: a.alimbek@kbtu.kz