

Biblid: 0350-2953 (2017) 43(3): 111-120
UDK: 620; 62.6; 697;

Originalni naučni rad
Original scientific paper

MODELIRANJE PROCESA U EKSPERIMENTALNOJ KOMORI ZA DENITRIFIKACIJU PRODUKATA SAGOREVANJA BIOMASE

MODELING OF THE PROCESS IN THE EXPERIMENTAL CHAMBER FOR DENITRIFICATION OF BIOMASE COMBUSTION PRODUCTS

Stevan Nemoda¹, Milica Mladenović¹,

Ana Marinković¹, Milijana Paprika¹, Goran Živković¹

¹Institut za nuklearne nauke Vinča, Laboratorija za termotehniku i energetiku,
Univerzitet u Beogradu, Mihaila Petrovića Alasa 12-14, 11351 Beograd
e-mail: snemoda@vinca.rs

SAŽETAK

Poznavanje i kontrolisanje emisije azotnih oksida (NO_x) prilikom sagorevanja biomase je neophorno radi uspotavljanja korektnih zakonskih normi u pogledu granične emisije i za razvoj što kvalitetnijih tehnologija za sagorevanje ove vrste goriva. U tom cilju u radu je dat opis eksperimentalne aparature, koja ima za cilj da ispita efikasan način za redukciju NO_x -a u dimnim gasovima upotrebo sekundarnih mera denitrifikacije. Pre pristupanja obimnijim eksperimentalnim istraživanjima primene denitrifikacionih postupaka, veoma je korisno i od značaja da se obave proračuni i početne numeričke simulacije procesa koji treba da se detaljno eksperimentalno ispituju. Ovde se u prvom redu analiziraju reakcije selektivne nekalitičke redukcije azot-monoksidu (NO) primenom amonijaka (NH_3) kao reagensa. U radu je dat prikaz zavisnosti brzina reakcija redukcije i oksidacije od odnosa koncentracija NO i kiseonika kod procesa denitrifikacije amonijakom, pri uslovima produkata sagorevanja biomase. U okviru pripreme detaljnih eksperimenata pristupilo se i sveobuhvatnom CFD modeliranju složenih procesa industrijske denitrifikacije, pri čemu je obavljena sveobuhvatna analiza procesa, koja uključuje simulaciju strujanja, mešanja komponenti i praćenje lokalnih hemijskih reakcija sa uzimanjem u obzir efekata turbulencije na globalnu hemijsku kinetiku.

Ključne reči: biomasa, sagorevanje, emisija azotnih oksida, denitrifikacija, hemijska kinetika.

1. UVOD

Pri sagorevanju biomase oksidacija azota vezanog u gorivu je dominantan mehanizam formiranja NO_x . Termički i promptni NO_x je zanemarljiv zbog relativno niske temperature sagorevanja uslovljene niskom temperaturom topljenja pepela biomase.

Hemijska kinetika procesa oksi-redukcije u okviru denitrifikacije uz prisustvo amonijaka se može analizirati primenom modela (Brouwer et al. 1996), koji je zasnovan na reakciji redukcije NO uz prisustvo amonijaka i reakciji oksidacija NH_3 kiseonikom, pri čemu se generiše NO. Prema ovom modelu hemijsko kinetička ravnoteža sistema reakcija

je pomerena ka reakciji redukcije na temperaturama 850–950°C i u prisustvu koncentracija kiseonika koje su manje od 8 Vol.%. U radu se takođe razmatra uticaj ugljovodoničnih radikala na procese oksi-redukcije u okviru denitrifikacije, koji se može analizirati primenom modela (Bowman, 1991). Predloženi model denitrifikacije usled prisustva ugljovodoničnih radikala se bazira na praćenju reakcija NO sa CH, CH₂ i CH₃, čije se prisustvo može očekivati u dimnim gasovima prilikom sagorevanja biomase u realnim postrojenjima.

Stehiometrijski i kinetički proračuni procesa denitrifikacije dimnih gasova su potrebni u okviru baznih istraživanja i okvirlnih analiza. Međutim, pre izvođenja detaljnih eksperimenata poželjno je obaviti sveobuhvatnu analizu procesa, koja uključuje simulaciju strujanja, mešanja komponenti, praćenje lokalnih hemijskih reakcija sa uzimanjem u obzir efekata turbulencije na globalnu hemijsku kinetiku. Zbog toga se pristupilo i sveobuhvatnom CFD modeliranju složenih procesa industrijske denitrifikacije. Predloženi postupak proračuna se bazira na rešavanju dvodimensijskih parcijalnih diferencijalnih jednačina količine kretanja, energije, kinetičke energije turbulencije, disipacije energije turbulencije i transporta hemijskih komponenata uz definisanje njihovih izvornih članova usled hemijskih reakcija.

2. MATERIJAL I METOD RADA

Pre pristupanja obimnijim eksperimentalnim istraživanjima primene denitrifikacionih postupaka, veoma je korisno i od značaja da se obave proračuni i početne numeričke simulacije procesa koji treba da se detaljno eksperimentalno ispituju. Ovde će se u prvom redu analizirati reakcije selektivne nekalitičke redukcije azot-monoksida (NO) primenom amonijaka (NH₃) kao reagensa.

2.1. Hemijsko kinetički modeli redukcije NO primenom amonijaka

Uprošćeni modeli redukcije NO primenom amonijaka se mogu predstaviti sledećim stehiometrijskim hemijskim izrazima, u skladu sa radom (Brouwer et al. 1996):

Model 1



Pri čemu se brzine reakcija redukcije NO i oksidacije NH₃ mogu izraziti respektivno na sledeći način:

$$R_r = k_r C_{no} C_{nh3} C_{o2}^{0.25} \quad (3)$$

$$R_{ox} = k_{ox} C_{nh3} C_{o2}^{1.25} \quad (4)$$

Gde je k_i konstanta reakcije i , a C_k molska koncentracija komponente k .

Model 2



Pri čemu se brzine reakcija redukcije NO i oksidacije NH₃ mogu izraziti respektivno na sledeći način:

$$R_r = k_r C_{no} C_{nh3} \quad (7)$$

$$R_{ox} = k_{ox} C_{nh3} C_{o2} \quad (8)$$

Konstante brzina reakcije k_r i k_{ox} ($\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$) za oba modela imaju iste vrednosti i zavisnost od temperature, pa se mogu odrediti primenom sledećih oblika Arenijusovog izraza:

$$k_r = 424T^{5.3}e^{-E_r/(RT)} \quad k_{ox} = 0.35T^{5.65}e^{-E_{ox}/(RT)} \quad (9)$$

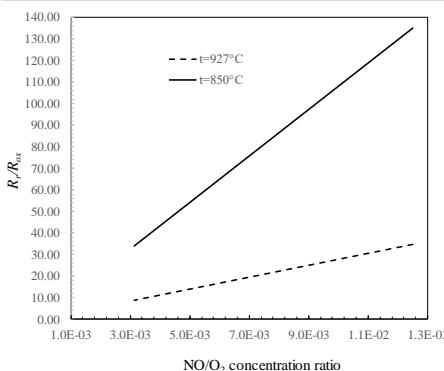
gde se energije aktivacije redukcije NO i oksidacije NH_3 imaju sledeće vrednosti, respektivno: $E_r=349937.06 \text{ J/mol}$ i $E_{ox}=524487.005 \text{ J/mol}$.

Kako se iz izraza (3, 4, 7 i 8) može videti odnos brzina reakcije destrukcije NO, redukcijom sa NH_3 i stvaranja NO, usled oksidacije NH_3 ima istu zavisnost kod oba modela:

$$\frac{R_r}{R_{ox}} = \frac{k_r}{k_{ox}} \frac{C_{no}}{C_{o2}} \quad (10)$$

Odnos brzina reakcija redukcije NO i oksidacije NH_3 (generisanja NO), prema predloženim modelima zavisi od odnosa odgovarajućih konstanti brzina reakcije i odnosa koncentracija NO i kiseonika. Odатле proizilazi da se uklanjanje NO razmatranom metodom efikasnije odvija u sredinama sa manjim sadržajem kiseonika.

Na Slici 1. su prikazani dijagrami zavisnosti brzina reakcija redukcije i oksidacije od odnosa koncentracija NO i kiseonika kod procesa denitrifikacije amonijakom, pri uslovima produkata sagorevanja biomase. Kako se iz priloženih dijagrama vidi, vrednosti odnosa R_r/R_{ox} imaju intenzivniji rast sa porastom odnosa koncentracija NO i kiseonika, pri nešto nižim temperaturama dimnih gasova (850°C).



Sl. 1. Zavisnost odnosa redukcionie i oksidacione brzine reakcije od odnosa NO i O₂

Fig. 1. Dependence of the reduction to oxidation reaction rate ratio of NO and O₂

2.2. Numerička simulacija denitrifikacije dimnih gasova amonijakom

Stehiometrijski i kinetički proračuni procesa denitrifikacije dimnih gasova su potrebni u okviru baznih istraživanja i okvirnih analiza. Međutim, pre izvođenja detaljnijih eksperimenata poželjno je obaviti sveobuhvatnu analizu procesa, koja uključuje simulaciju strujanja, mešanja komponenti, praćenje lokalnih hemijskih reakcija sa uzimanjem u obzir efekata turbulencije na globalnu hemijsku kinetiku. Zbog toga se pristupilo i sveobuhvatnom CFD modeliranju složenih procesa industrijske denitrifikacije.

Predloženi postupak proračuna se bazira na rešavanju dvodimenzijskih parcijalnih diferencijalnih jednačina količine kretanja, energije, kinetičke energije turbulencije, disipacije energije turbulencije i transporta hemijskih komponenata uz definisanje njihovih izvornih članova usled hemijskih reakcija. Razmatrane su jednačine za laminarno i turbulentno, neizotерmsко, stacionarno strujanje smeše nenjutnovskih, idelanih gasova (Patankar, 1980). Osnovne jednačine modela, date u tenzorskoj notaciji, su:

Jednačina kontinuiteta

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0 \quad (11)$$

Prenos količine kretanja u i pravcu

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu_{eff} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right) \quad (12)$$

gde su: $\mu_t = C_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon}$ i $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$ turbulentna i efektivna viskoznost, respektivno.

Energetska jednačina

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j h) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = \sum_{k=1}^{N_s} R_k H_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{k=1}^{N_s} \rho D_k h_k \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + Q_R \quad (13)$$

Jednačina konzervacije komponenata

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j Y_k) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) = R_k \quad (14)$$

2.3. Model sagorevanja

Termofizičke i hemijske karakteristike višekomponentnih gasova dobijeni su iz baze podataka termodinamičkih karakteristika CHEMKIN II (Kee et al. 1992). Proizvodnja i konverzija komponente k usled hemijskih reakcija ulaze kao izvorni član R_k u transportnim jednačinama hemijskih komponenata. Uzimajući u obzir da se pretpostavljuju samo laminarni procesi sagorevanja, R_k može biti definisan na sledeći način:

$$R_k = M_k \sum_{l=1}^{N_R} (v''_{kl} - v'_{kl}) k_l \cdot \left(\prod_{\text{educts}} c^{v'_{kl}} - \frac{1}{K_c} \prod_{\text{products}} c^{v''_{kl}} \right) \quad (15)$$

gde je N_R broj reakcija l . Za svaku od hemijskih reakcija l mora se zadovoljavati ravnoteža atomske vrste A_k :

$$\sum_{k=1}^{N_s} v'_{kl} A_k = \sum_{k=1}^{N_s} v''_{kl} A_k \quad (16)$$

Konstante brzina reakcija k_l se određuju primenom Arrheniusovog izraza:

$$k_l = k_l^0 T^a \exp\left(-\frac{E_l}{RT}\right) \quad (17)$$

R_k iz jednačine (15) je izvorni član u jednačini održanja hemijskih komponenti (14), pri čemu je primjenjen tzv. model sagorevanja sa konačnim brzinama hemijskih reakcija. Za uticaj turbulencije na hemijsku kinetiku koristi se model interakcije turbulencije i hemijske kinetike, zasnovan na modelu (Magnussen and Hjertager, 1976) koji se naziva model disipacije vrtloga (EBU).

Brzina konverzije komponente i prema modelu disipacije vrtloga se može odrediti na osnovu sledećih izraza:

$$R_i = C_R \frac{\varepsilon}{k} \rho Y_i \quad Y_i = \min \left\{ Y_i, Y_k / s_{t,k} \right\} \quad s_{t,k} = \frac{\nu_k M_k}{\nu_i M_i} \quad (18)$$

gde je Y_i maseni udio komponente i , $s_{t,k}$ stehiometrijski koeficijent, indeks k se odnosi na ostale reaktante. Prema predloženom modelu rezultantna brzina reakcije konverzije/generisanja hemijskih komponenata je određena manjom od brzina definisanih izrazima (15) i (18).

3. REZULTATI ISTRAŽIVANJA SA DISKUSIJOM

3.1. Numerička procedura i granični uslovi

Parcijalne diferencijalne jednačine konzervacije (11-14) su nelinearne i međusobno spregnute. Numeričko rešavanje jednačina modela izvršeno je metodom kontrolnih zapremina (Patankar and Spalding, 1972), uključujući kolokacioni raspored numeričke mreže za jednačine promene količine kretanja, hibridnu numeričku šemu sa kombinacijom uzvodne i centralne razlike i SIMPLE algoritam rešavanja jednačina (Patankar and Spalding, 1972). Stabilizacija procesa iteracije se vrši podrelaksacijom. Postupak proračuna i numerički metod su detaljnije opisani u radu (Patankar, 1980).

Za eliptičke jednačine oblika (11-14), potrebno je da se zadaju uslovi na svim granicama razmatranog prostora, tj. na ulazima, izlazima i na čvrstim zidovima. Na ulazima se zadaju željeni granični uslovi strujanja. Na izlaznom poprečnom preseku su gradijenti svih veličina jednak nuli. Na zidovima se zadaje logaritamski profil brzina i odgovarajuće zakonitosti frikcionih napona.

3.2. Analiza rezultata numeričke simulacije denitrifikacije dimnih gasova

Osnovni razlog za formiranje 2D numeričke simulacije procesa u eksperimentalnoj aparaturi za ispitivanje denitrifikacije dimnih gasova, je detaljna analiza postupaka i procesa datog složenog strujno termičkog sistema sa hemijskim reakcijama pre izrade opsežnog eksperimentalnog istraživanja. Time će se uštedeti vreme i sredstva neophodna za iznalaženje optimalnog koncepta aparature i organizacije eksperimenta.

Geometrija, dimenzije i granični uslovi proračunskog prostora su definisani u radu (Mladenović i dr. 2017) koji se odnosi na opis eksperimentalne adijabatske komore za simulaciju sagorevanja biomase. Ovde treba napomenuti da se ulaz za uvođenje amonijaka u simuliran radni prostor komore za denitrifikaciju nalazi na zidu komore a ne na mlaznici kako je predviđeno na realnom eksperimentalnom postrojenju. Razlog ovome

je taj što bi kod 2D numeričke simulacije mlaznica imala efekat dodatne pregrade u komori.

Pošto se analiziraju procesi u dimnim gasovima usled sagorevanja biomase, u radnom prostoru realnog postrojenja se može očekivati prisustvo radikala ugljovodonika (hydrocarbon radicals) kao što su CH, CH₂, CH₃, koji mogu sami za sebe proizvesti efekta denitrifikacije. Međutim, kod planiranih eksperimenata se, umesto realnih produkata sagorevanja, koristi simulacija dimnih gasova, tj. smeša osnovnih komponenata dimnog gasa bez primesa, kao što su radikalni ugljovodonika. Zbog toga je potrebno predloženim postupkom numeričke simulacije analizirati moguće razlike u efektima denitrifikacije dimnih gasova sa i bez radikala.

Jedan od modela denitrifikacije usled prisustva ugljovodoničnih radikala se može prikazati na sledeći način:

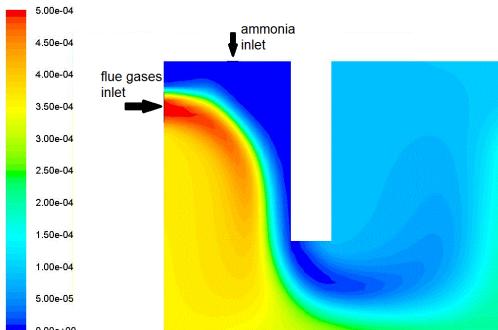


Pri tome se konstante brzina odgovarajućih reakcija, prema (Bowman, 1991), definišu pomoću sledećih izraza:

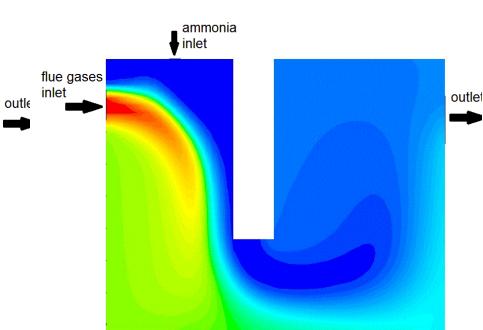
$$k_1 = 1 \cdot 10^8 \quad k_2 = 1.4 \cdot 10^6 e^{-550/T} \quad k_3 = 2 \cdot 10^5 \quad (20)$$

Na Slikama 2 i 3 su prikazani konturni dijagrami molskih udela NO u simuliranoj komori za denitrifikaciju i to bez prisustva ugljovodoničnih radikala i sa ugljovodoničnim radikalima u dimnom gasu, respektivno. Ulagana temperatura dimnih gasova je 1200K a amonijaka 300K. Sadržaj kiseonika u dimnim gasovima je 8 Vol.%, pri tome je maseni protok dimnih gasova (sa NO) bio 0.02kg/s, a protok za uvođenje amonijaka je 0.01kg/s. Ulagana koncentracije NO je bila 500 ppm (vol.), a struja NH₃ je ulazila sa 0.1 Vol. %

Kako se sa Slika 2 i 3 vidi, efekat denitrifikacije je vidljiv u oba slučaja, sa i bez prisustva ugljovodoničnih radikala, pri čemu je koncentracija NO u izlaznom toku znatno niža kada su uključene i reakcije redukcije NO zbog prisustva ugljovodoničnih radikala, što se može videti i iz Sl. 3 i Tabele 1. Planirani eksperimenti će se obaviti sa simulacijom dimnih gasova, tj. bez prisustva ugljovodoničnih radikala, pa se nivo denitrifikacije može očekivati u skladu sa Sl. 2 i Tabelom 1. To znači da za sve zaključke, koji budu izvedeni na osnovu eksperimenata, treba računati da su izvedeni pri lošijim uslovima, sa tačke gledišta efikasnosti procesa denitrifikacije, u odnosu na realan sastav dimnih gasova pri sagorevanju biomase.

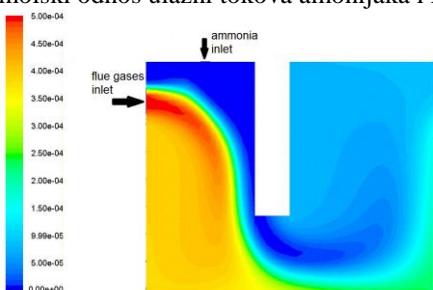


Sl. 2. Raspodela molskih udela NO u slučaju denitrifikacije bez ugljovodoničnih radikala
Fig. 2. NO molar fraction distribution without the presence of hydrocarbon radicals.

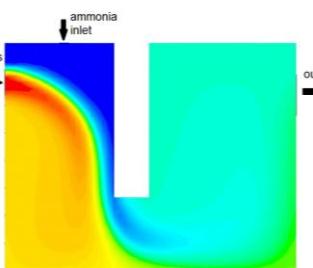


Sl. 3. Molski udeli NO sa ugljovodoničnim radikalima
Fig. 3. NO molar fraction without the presence of hydrocarbon radicals.

Na Slikama 4. i 5. su prikazani rezultati numeričke simulacije procesa denitrifikacije dimnih gasova, primenjene na analizu uticaja organizacije strujanja i ulaznog toka sa amonijakom. Granični uslovi i parametri proračuna kod ovih numeričkih eksperimenata su isti kao za slučajevе proračuna prikazane na Sl. 2 i 3, osim što je ulazna temperatura dimnih gasova bila 1123 K i što je primenjen dvostruko veći maseni protok kroz eksperimentalnu komoru za denitrifikaciju (0.06 kg/s). Pored toga, za slučaj proračuna čiji su rezultati prikazani na Sl. 4 odnos masenog protoka ulazne struje sa amonijakom, prema toku dimnih gasova je 1/3 (kao i u slučajevima prikazanim na Sl. 2 i 3), dok ovaj odnos iznosi 1/6 kod proračuna čiji su rezultati prikazani na Sl. 4, pri čemu je molski odnos ulazni tokova amonijaka i NO ostao isti.



Sl. 4. Molski udeli NO kada je ulazni tok sa amonijakom 1/3 protoka dimnih gasova.
Fig. 4. NO molar fraction when input flow with ammonia is 1/6 of flue gases flow.



Sl. 5. Molski udeli NO kada je tok sa amonijakom 1/6 protoka dimnih gasova.
Fig. 5. NO molar fraction when input ammonia flow is 1/6 of flue gases flow.

Kako se sa Slika 2 i 4 (i Tabele 1) vidi, uticaj ulazne temperature dimnih gasova i masenog protoka kroz denitrifikacionu komoru (intenzivnija turbulencija), ima relativno mali uticaj na efikasnost denitrifikacije. Prema razmatranjima iz Poglavlja 3.1, niža temperatura pogoduje pomeranju ravnoteže hemijskih kinetika ka reakcijama redukcije. Takođe intenzivnija turbulencija može da utiče na rezultantnu brzinu reakcije denitrifikacije. Međutim, kako se iz Tabele 1 vidi, izlazna koncentracija (molski ideo)

NO u slučaju niže temperature i većeg protoka je $1.14\text{E-}4$ umesto $1.15\text{E-}4$ za slučaj veće temperature i protoka.

Tab. 1. Maseno usrednjeni maseni udeli NO na izlazu iz komore

Tab. 1. Mass-weighted average mole fraction of NO on outlet

Režim Case	Ulaz Inlet	Izlaz Outlet
T 1200K, bez prisustva ugljovodoničnih radikala (Slika 2.)	5.00E-4	1.15E-4
T 1200K, without the presence of hydrocarbon radicals (Fig. 2.)		
T 1200K, sa prisustvom ugljovodoničnih radikala (Slika 3.)	5.00E-4	6.40E-5
T 1200K, with the presence of hydrocarbon radicals (Fig. 3.)		
T 1123 K, maseni protok ulaza NH ₃ je 1/3 ukupnog ulaznog toka (Sl. 4.)	5.00E-4	1.14E-4
T 1123 K, mass flow of NH ₃ inlet is 1/3 of total inlet flow (Fig. 4.)		
T 1123 K, maseni protok ulaza NH ₃ je 1/6 ukupnog ulaznog toka (Sl. 5.)	5.00E-4	2.00E-4
T 1123 K, mass flow of NH ₃ inlet is 1/6 of total inlet flow (Fig. 5.)		

Što se tiče odnosa protoka ulaznog toka sa amonijakom i dimnih gasova (sa NO), uticaj na efikasnost denitrifikacije je znatno izraženiji. Kako se može videti poređenjem Slika 4 i 5 i iz podataka iz Tabele 1., kod slučaja gde je maseni odnos toka sa amonijakom i ulaznog toka dimnih gasova 1/6 izlazne koncentracije NO su značajno više nego kada je odnos ovih tokova 1/3. Razlog ovome najverovatnije leži u intenzivnijem mešanju reaktanata u slučaju kada je protok ulaznog toka sa NH₃ veći u odnosu na ukupan protok u komori za denitrifikaciju.

4. ZAKLJUČAK

U radu je primjenjen uprošćen hemijsko-kinetički model na analizu reakcije selektivne nekalitičke redukcije azot-monoksida (NO) primenom amonijaka (NH₃) kao reagensa. Takođe se pristupilo i sveobuhvatnom CFD modeliranju složenih procesa industrijske denitrifikacije. Odnos brzina reakcija redukcije NO i oksidacije NH₃ (generisanja NO), prema predloženim modelima zavisi od odnosa odgovarajućih konstanti brzina reakcije i odnosa koncentracija NO i kiseonika. Odatle proizilazi da se uklanjanje NO razmatranom metodom efikasnije odvija u sredinama sa manjim sadržajem kiseonika. Pored toga, predloženi model pokazuje da vrednosti odnosa brzina reakcije redukcije i oksidacije imaju intenzivniji rast sa porastom odnosa koncentracija NO i kiseonika, pri nešto nižim temperaturama dimnih gasova (850°C).

Primenom CFD modela za simulaciju procesa u eksperimentalnoj komori za ispitivanje procesa denitrifikacije dimnih gasova je utvrđen efekat prisustva ugljovodoničnih radikala. Efekat denitrifikacije je vidljiv u oba slučaja, sa i bez prisustva ugljovodoničnih radikala, pri čemu je koncentracija NO u izlaznom toku znatno niža kada su uključene i reakcije redukcije NO zbog prisustva ugljovodoničnih radikala. Planirani eksperimenti će se obaviti sa simulacijom dimnih gasova, tj. bez prisustva ugljovodoničnih radikala, što znači da za sve zaključke, koji budu izvedeni na osnovu eksperimenata, treba računati da su izvedeni pri lošijim uslovima, sa tačke gledišta efikasnosti procesa denitrifikacije, u odnosu na realan sastav dimnih gasova pri sagorevanju biomase.

Postupak numeričke simulacije je, takođe, primjenjen na analizu uticaja organizacije strujanja i ulaznog toka sa amonijakom, kao i uticaja temperature u komori. Proračuni pokazuju da uticaj ulazne temperature dimnih gasova, kao i nivoa masenog protoka kroz denitrifikacionu komoru (intenzivnija turbulencija), ima relativno mali uticaj na efikasnost denitrifikacije. Nasuprot ovome, vrednost odnosa masenih protoka ulaznog toka sa amonijakom i dimnih gasova (sa NO), ima znatno izraženiji uticaj na efikasnost denitrifikacije. Kod slučaja gde je maseni odnos toka sa amonijakom i ulaznog toka dimnih gasova 1/6 izlazne koncentracije NO su značajno više nego kada je odnos ovih tokova 1/3.

Nomenclature

c_p	fluid heat capacity for constant pressure	R	universal gas constant
D_k	mass diffusion coefficient	R_k	chemical conversion rate of component k
E_a	energy activation	S_ϕ	sources and sinks of ϕ
h	enthalpy	T	temperature
H_k	heat formation of component k	U_i	velocity vector
M_k	molar mass of the species k	x	axial coordinate and distance
p	pressure	Y_k	mass fraction of species k
Q_R	radiation heat transfer between solid and environment		

Greek symbols

			Subscripts
α	gas-solid heat transfer coefficient	eff	effective
ε	porosity	g	gas
λ	heat conductivity	k	species
μ	dynamic viscosity	s	solid
ν	stoichiometric number, mol number	sol	solid
ρ	density		

5. LITERATURA

- [1] Bowman C.T. (1991). Chemistry of Gaseous Pollutant Formation and Destruction. In W. Bartok and A. F. Sarofim, editors Fossil Fuel Combustion. J.Wiley and Sons, Canada.
- [2] Brouwer J, Heap M.P, Pershing D.W, Smith P.J. (1996). A Model for Prediction of Selective on- Catalytic Reduction of Nitrogen Oxides by Ammonia, Urea, and Cyanuric Acid with Mixing imitations in the Presence of CO. In Proc: 26th Symposium (Int'l) on Combustion. The Combustion Institute.
- [3] Kee R.J, Rupley F.M, Miller J.A. (1992). The Chemkin Thermodynamic Data Base. Sandia National Laboratories Rept. SAND-8215B.
- [4] Magnussen B.F, Hjertager B.H. (1976). On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In Proc: 16th Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute.

- [5] Mladenović M, Marinković A, Paprika M, Repić B. (2017). Eksperimentalna aparatura za simulaciju sagorevanja biomase i kontrolu azotnih oksida. In Proc: 30. kongres o procesnoj industriji PROCESING 2017, 175-182. Beograd, 1-2 juna.
- [6] Patankar S.V. (1980). Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. New York, USA: Hemisphere
- [7] Patankar S.V, Spalding D.B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. International Journal of Heat and Mass Transfer 15: 1787-1806.

MODELING OF THE PROCESS IN THE EXPERIMENTAL CHAMBER FOR DENITRIFICATION OF BIOMASE COMBUSTION PRODUCTS

SUMMARY

In spite of the many advantages that promote biomass as a renewable energy source, its combustion emits certain pollutants, as any other fuel. Although these negative effects are less pronounced compared to the combustion of fossil fuels, they need to be identified and controlled. The nitrogen oxides (NOx) emission generated from the biomass combustion is one of the key challenges, and their controlling is necessary in order to meet the legal emission limit and to develop high-quality biomass combustion technologies. For a better understanding of the process of NOx reduction, the experimental apparatus was designed for testing of the secondary denitrification techniques at the biomass combustion. This paper provides a description of the experimental installation. Before accessing extensive experiments, it is very useful and important to carry out calculations and initial numerical simulations of processes that need to be in detail experimentally examined. The reactions of selective non-catalytic reduction of nitrogen-monoxide (NO) using ammonia (NH₃) as a reagent are analyzed here first. The paper presents the dependence of the reaction rates of reduction and oxidation on the relation between NO and oxygen concentrations in the NH₃-SNCR process under conditions of biomass combustion products. In the framework of the preparation of detailed experiments, a comprehensive CFD modeling of complex industrial denitrification processes has been applied, with a comprehensive process analysis including simulation of flow, mixing of components and monitoring of local chemical reactions, taking into account the effects of turbulence on global chemical kinetics.

Key words: biomass, combustion, nitrogen oxide emissions, denitrification, chemical kinetics.

Napomena: Rad je urađen u okviru istraživanja na projektima koje finansira Ministarstvo za prosvetu, nauku i tehnološki razvoj: TR33042 i III42011.

Primljeno: 18. 08. 2017. god.

Prihvaćeno: 29. 08. 2017. god.