Швецов; исполн.: В.А. Горбунов [и др.]. – М., 2011. – № ГР 01201056386.

5. *Швецов, А.Н.* Построение приближенной концептуальной модели предметной области на основе анализа смысла естественно-языковых текстов / А.Н. Швецов, В.С. Алешин // Международная конференция по мягким вычислениям и измерениям SCM'2003: сб. докл. Т. 2. – СПб., 2003. – С. 120 – 123.

6. *Montague, R.* English as a formal language / R. Montague, edited by R. H. Thomason // Formal Philosophy. – Yale University Press, 1974.

7. *Riley, Michael D.* Some applications of tree-based modeling to speech and language indexing / Michael D. Riley // Proceedings of the DARPA Speech and Natural Language Workshop. – Stroudsburg, PA, USA, 1989. – P. 339 – 352.

УДК 621. 778.04.

Р.А. Юдин, И.Р. Юдин

ОСОБЕННОСТИ ГОРЕНИЯ ТОПЛИВА ПРОИЗВОЛЬНОГО ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА

В статье приведены физико-химические реакции горения однокомпонентных газов и горючих элементов в воздухе при стехиометрических условиях. На их основе получено аналитическое уравнение горения в воздухе топлива произвольного химического состава, позволяющее рассчитывать важнейшие теплотехнические параметры горения, например, объем воздуха, который необходим для полного сгорания единицы горючего вещества.

Углерод, водород, сера, алканы, алкены, алкины, физико-химические реакции горения топлива.

Physico-chemical reactions of combustion of one-component gases and flammable elements in the air at stoichiometric conditions are considered in the article. An analytical equation of fuel combustion of random chemical composotion in the air is got on their basis allowing to count the significant heat engineering burning parameters, for example: volume of the air, which is necessary for the full combustion of the unit of combustible substance.

Carbon, hydrogen, sulfur, alkanes, alkenes, alkynes, physico-chemical reactions of fuel combustion.

Горючими составляющими топлива являются: углерод, сера, водород, входящие в твердое топливо, оксид углерода, молекулярный водород, сероводород, а также жидкие и газообразные углеводороды. Особый практический интерес представляет углеводородное газообразное топливо, так как им наиболее часто отапливают теплотехнические установки различного технологического назначения. Это топливо содержит газообразные составляющие трех гомологических рядов – алканы, алкены и алкины. Алканы являются насыщенными углеводородами и относятся к гомологическому ряду метана (CH_4). Общая химическая формула ряда алканов – C_nH_{2n+2}. Алкены – ненасыщенные углеводороды, гомологи ряда этилена (C_2H_4). В структуре молекул алкенов имеется двойная физико-химическая связь между атомами углерода. Общая химическая формула ряда алкенов – C_nH_{2n}. К алкинам относятся ацетилен (C_2H_2) и бензол (C_6H_6) с общей химической формулой – C_nH_n. Алкины также являются ненасыщенными углеводородами. В структуре молекулы ацетилена имеется одна тройная физико-химическая связь между атомами углерода, а в бензольном кольце между атомами углерода имеются три двойные физико-химические связи.

Химические реакции горения топлива в воздухе для стехиометрических условий и при избытках воздуха ($\alpha \geq 1$) хорошо изучены и широко известны. Однако для углеводородных газов имеется только одно математическое обобщение химических реакций при сжигании этих газов в кислороде, представленное в монографии А.В. Арсеева [1, с. 51], следующей формулой:

$$C_mH_n + (m + n/4)\, O_2 = m\, CO_2 + n/2\, H_2O. \quad (1)$$

Известно, что в объемных процентах азота в воздухе в 3,76 раза больше, чем кислорода. Как правило, азот не участвует в процессе горения, а присутствует в начальных и конечных продуктах реакции как балласт. Отсюда очевидно, что при сжигании любого углеводородного газа в воздухе формула (1) примет следующий вид:

$$C_mH_n + (m + n/4)O_2 + 3{,}76(m + n/4)N_2 = nCO_2 + n/2\, H_2O + 3{,}76(m + n/4)N_2. \quad (2)$$

С одной стороны, химические уравнения (1 – 2) компактны, абсолютно справедливы для всех гомологических рядов и приемлемы для использования в теплотехнических расчетах. Однако они имеют формальный характер, так как в них не отражен дифференцированный вклад алканов, алкенов и алкинов в совокупный процесс горения, поэтому делать однозначный вывод о том, что компактность формул обуславливает уменьшение объема вычислений, по меньшей мере, преждевременно.

Кроме того, во-первых, в такой записи формулы (1), (2) неоправданно усложнены тем, что содержат два переменных коэффициента: n, m. Однако все три гомологических ряда углеводородных газов содержат только один переменный коэффициент – n. Во-вторых, в конкретных теплотехнических расчетах необходимо вычислять только отдельные составляющие реакций горения, например, стехиометрические объемы кислорода и воздуха, коэффициент расхода воздуха (α_Σ). Для этого необходимо исполь-

зовать только левые составляющие реакции (2). При расчетах общего объема продуктов сгорания, объема сухих продуктов сгорания, максимального содержания диоксида углерода и водяных паров используют только правые составляющие реакции (2).

Впервые разработка алгоритма расчета процессов горения углеводородных газов с использованием одного переменного коэффициента n была предпринята в работах [4], [5], [6], [7]. Наиболее полно ее результаты изложены в диссертации к.т.н. Юдина И.Р. [5], но в этой работе рассматривались процессы двухстадийного сжигания природного газа, который не содержит алкинов. В связи с этим итоговые формулы [4] также не содержали алкинов, а задача получения итогового химического уравнения совместного горения различных углеводородных газов в воздухе не ставилась.

Однако возможность получения такого уравнения в указанных работах была убедительно доказана, а объединение всех углеводородных газов формулой CmHn, в которой не отражена их физико-химическая структура, нецелесообразно. Более того, использование этой формулы может привести к ошибкам формального характера, поэтому весьма актуально получение химического уравнения горения, которое содержит только один переменный коэффициент: n. Здесь уместно отметить, что, получив искомую формулу, нетрудно повысить универсальность ее использования для топлива, содержащего другие горючие составляющие. Их включение в итоговую формулу наиболее целесообразно при совместном сжигании различных по агрегатному состоянию видов топлива, например, мазута и различных газовых смесей в газо-мазутных газогорелочных устройствах.

Состав мазута в отличие от газового топлива определяют не по компонентам, а по содержанию в нем химических элементов [4], [5]. Так, согласно данным табл. 107 [5, с. 225], различные марки мазута содержат 85,8 – 89,1 % углерода, 0,3 – 3,2 % серы и 9,6 – 12,2 % водорода, входящего в жидкие углеводородные фракции нефтяных остатков, полученных в процессе переработки нефти. Для получения универсальной формулы первоначально необходимо записать физико-химические уравнения горения элементов и компонентов топлива в воздухе в стехиометрических условиях. Сначала это целесообразно выполнить для горючих элементов, содержащихся в твердом и жидком топливе, а затем перейти к газообразным компонентам.

Физико-химические уравнения горения углерода, серы и элементарного водорода в воздухе имеют следующий вид:

$$C^P + O_2 + 3{,}76\ N_2 = CO_2 + 3{,}76\ N_2 + 8100\ \text{ккал/м}^3,\ (33915\ \text{кДж/м3}), \quad (3)$$

$$S^P + O_2 + 3{,}76\ N_2 = SO_2 + 3{,}76\ N_2 + 2600\ \text{ккал/м}^3,\ (10900\ \text{кДж/м3}), \quad (4)$$

$$H^P + 0{,}25O_2 + 0{,}94\ N_2 = 0{,}5\ H_2O + 0{,}94\ N_2 + 24600\ \text{ккал/м}^3,\ (103000\ \text{кДж/м}^3), \quad (5)$$

Реакции горения оксида углерода (CO), водорода (H_2) и сероводорода (H_2S) в воздухе имеют следующий вид:

$$CO + 0{,}5\ O_2 + 1{,}88\ N_2 = CO_2 + 1{,}88\ N_2 + 3020\ \text{ккал/м}^3,\ (12640\ \text{кДж/м}^3), \quad (6)$$

$$H_2 + 0{,}5\ O_2 + 1{,}88\ N_2 = H_2O + 1{,}88\ N_2 + 2580\ \text{ккал/м}^3,\ (10800\ \text{кДж/м}^3), \quad (7)$$

$$H_2S + 1{,}5\ O_2 + 5{,}64\ N_2 = SO_2 + H_2O + 5{,}64\ N_2 + 5585\ \text{ккал/м}^3.\ (23385\ \text{кДж/м}^3) \quad (8)$$

Для последующих математических обобщений особый интерес представляет сгорание однокомпонентных углеводородных газов в воздухе. При сжигании алканов ($C_n\ H_{2n+2}$) физико-химические уравнения горения имеют следующий вид:

– горение метана:

$$CH_4 + 2\ O_2 + 7{,}52\ N_2 = CO_2 + 2\ H_2O + 7{,}52\ N_2 + 8550\ \text{ккал/м}^3,\ (35800\ \text{кДж/м}^3), \quad (9)$$

– горение этана:

$$C_2H_6 + 3{,}5\ O_2 + 13{,}16\ N_2 = 2\ CO_2 + 3\ H_2O + 13{,}16\ N_2 + 15200\ \text{ккал/м}^3,\ (63640\ \text{кДж/м}^3), \quad (10)$$

– горение пропана:

$$C_3H_8 + 5\ O_2 + 18{,}8\ N_2 = 3\ CO_2 + 4\ H_2O + 18{,}8\ N_2 + 21800\ \text{ккал/м}^3,\ (99280\ \text{кДж/м}^3), \quad (11)$$

– горение бутана:

$$C_4H_{10} + 6{,}5\ O_2 + 24{,}44\ N_2 = 4\ CO_2 + 5\ H_2O + 24{,}44\ N_2 + 28300\ \text{ккал/м}^3,\ (128540\ \text{кДж/м}^3). \quad (12)$$

Сгорание алкенов ($C_n\ H_{2n}$) протекает следующим образом:

– горение этена:

$$C_2H_4 + 3\ O_2 + 11{,}28\ N_2 = 2\ CO_2 + 2\ H_2O + 11{,}28\ N_2 + 14100\ \text{ккал/м}^3,\ (509040\ \text{кДж/м}^3), \quad (13)$$

– горение пропена:

$$C_3H_6 + 4{,}5\ O_2 + 16{,}92\ N_2 = 3\ CO_2 + 3\ H_2O + 16{,}92\ N_2 + 20500\ \text{ккал/м}^3,\ (85830\ \text{кДж/м}^3), \quad (14)$$

– горение бутена:

$$C_4H_8 + 6\ O_2 + 22{,}56\ N_2 = 4\ CO_2 + 4\ H_2O + 22{,}56\ N_2 + 27110\ \text{ккал/м}^3,\ (113510\ \text{кДж/м}^3). \quad (15)$$

Сжигание алкинов (C_nH_n) – ацетилена и бензола – протекает по реакциям:

– горение этина:

$$C_2H_2 + 2{,}5\ O_2 + 9{,}4\ N_2 = 2\ CO_2 + H_2O + 9{,}4\ N_2 + 13385\ \text{ккал/м}^3,\ (56040\ \text{кДж/м}^3), \quad (16)$$

– горение бензола:

$$C_6H_6 + 7{,}5\ O_2 + 28{,}2\ N_2 = 6\ CO_2 + 3\ H_2O + 28{,}2\ N_2 + 33530\ \text{ккал/м}^3,\ (140380\ \text{кДж/м}^3). \quad (17)$$

Сопоставляя стехиометрические уравнения горения насыщенных и ненасыщенных углеводородов, следует отметить, что, несмотря на меньший энергетический барьер, который необходимо преодолеть при разрыве двойной и тройной связи между атомами углерода в молекуле, теплота сгорания насыщенных углеводородов (алканов) больше, чем у ненасыщенных углеводородов (алкенов и алкинов). Это является следствием большего числа в них атомов водорода. На основе приведенных химических уравнений несложно получить аналитические формулы для расчета характеристик, которые являются важнейшими параметрами процессов горения. Одной из таких характеристик является стехиометрический объем воздуха, необходимый для полного сгорания топлива.

Параметр $Vв^0$ позволяет рассчитывать многие характеристики процессов горения топлива, например, коэффициент расхода воздуха:

$$\alpha_\Sigma = V_в^{ф} / V_в^{0}, \quad (18)$$

где $V_в^{ф}$ – фактическое количество воздуха, подаваемого на горение.

Объединив данные уравнений (3 – 17), получим:

$$V_в^{0} = 4{,}76\cdot(C^P + S^P + 0{,}25\ H^P + 0{,}5\ CO + 0{,}5\ H_2 + 1{,}5\ H_2S + 2\ CH_4 + 3{,}5\ C_2H_2 + 5\ C_3H_8 + 6{,}5\ C_4H_{10} + 3\ C_2H_4 + 4{,}5\ C_3H_6 + 6\ C_4H_8 + 2{,}5\ C_2H_2 + 7{,}5\ C_6H_6), \quad (19)$$

где цифровые коэффициенты перед химическими символами элементов и газовых компонентов отвечают необходимому для сжигания 1 кг и 1 $м^3$ соответственно элемента и компонента рассматриваемого топлива объему кислорода. Таким образом, размерность этих коэффициентов $м^3/кг$ и $м^3/м^3$, а самих символов, как и искомого параметра – $м^3$.

Формула (19) справедлива практически для любого топлива, содержащего горючие химические элементы и газы. Однако имеет более компактный вид для любой реального топлива, например, для природного газа, так как в нем, как правило, отсутствуют первые три и последние два компонента. Этой формуле можно придать более компактный вид, если выявить следующую закономерность. Алканы – гомологи метана – представлены в формуле (20) четырьмя компонентами, начиная с метана, шестого члена формулы, и заканчивая бутаном, девятым членом этой формулы. Для каждого следующего (в порядке возрастания) гомолога ряда метана требуется на 1,5 объема больше кислорода, чем у предыдущего, а полный объем кислорода, необходимого для сжигания всех компонентов ряда алканов, описывается компактной формулой:

$$Vo_2 = (1{,}5n + 0{,}5)\cdot C_n H_{2n+2}. \quad (20)$$

Алкены – гомологи этена (этилена) – представлены в формуле (19) тремя членами: этеном, пропеном и бутеном. Для них, как и для всего ряда алкенов, характерна следующая закономерность:

$$Vo_2 = 1{,}5n\cdot C_nH_{2n}. \quad (21)$$

Алкины представлены в формуле (19) только двумя членами: этином (ацетилен) и гексином (бензол). Для них характерна следующая закономерность:

$$Vo_2 = 1{,}25n\cdot C_nH_n. \quad (22)$$

В связи с закономерностями, выявленными для алканов, алкенов и алкинов, а также других газов и элементов топлива, формулу (19) можно представить в следующем виде:

$$V_в^{0} = 4{,}76\ [C^P + S^P + 0{,}25\ H^P + 0{,}5\ (CO + H_2 + 3\ H_2S) + (1{,}5n + 0{,}5)\cdot C_n H_{2n+2} + 1{,}5n\ C_n H_{2n} + 1{,}25n\ C_n H_n]. \quad (23)$$

Если топливо содержит только углеводородные газы, то расчет объема воздуха ограничивается тремя последними членами.

Суммируя результаты химических реакций для углеродосодержащих компонентов по диоксиду углерода, получим формулу:

$$V^0_{CO_2} = C^P + CO + CH_4 + 2C_2H_6 + 3\ C_3H_8 + 4\ C_4H_{10} + 2\ C_2H_4 + 3\ C_3H_6 + 4\ C_4H_8 + 2\ C_2H_2 + 6\ C_6H_6. \quad (24)$$

Проведя анализ формулы (25), аналогичный представленному выше для воздуха, получим следующую формулу:

$$V^0_{CO_2} = C^P + CO + n\ (C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_nH_n). \quad (25)$$

Суммируя результаты химических реакций для водородосодержащих компонентов по водяному пару, получим формулу:

$$V^0_{H_2O} = 0{,}5H^P + H_2 + H_2S + 2\ CH_4 + 3\ C_2H_6 + 4\ C_3H_8 + 5\ C_4H_{10} + 2\ C_2H_4 + C_3H_6 + 4\ C_4H_8 + C_2H_2 + C_6H_6, \quad (26)$$

где H^P, H_2 соответственно – количество элементарного и молекулярного водорода в исходном топливе. Проведя анализ формулы (26), получим:

$$V^0_{H_2O} = 0{,}5\ H^P + H_2 + H_2S + (n+1)\ C_nH_{2n} + 2\ n\ C_n H_{2n} + 0{,}5n\ C_nH_n. \quad (27)$$

В результате суммирования представленных хи-

мических уравнений и формул, используя элементарные алгебраические преобразования, получим развернутое химическое уравнение горения топлива произвольного химического состава в воздухе при коэффициентах расхода воздуха $\alpha_\Sigma \geq$: 1:

$$C^P + S^P + H^P + CO + H_2 + H_2S + C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_n H_n + \alpha_\Sigma (O_2 + 3{,}76\ N_2) \cdot [(C^P + S^P + 0{,}25H^P) + 0{,}5\ (CO + H_2 + 3H_2S) + (1{,}5n + 0{,}5) \cdot C_nH_{2n+2} + 1{,}5n \cdot C_nH_{2n} + 1{,}25n\ C_nH_n] = CO_2 \cdot [(C^P + CO) + n\ (C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_nH_n)] + SO_2 \cdot (S^P + H_2S) + H_2O \cdot [(0{,}5\ H^P + H_2 + H_2S) + (n + 1) \cdot C_nH_{2n+2} + n\ C_nH_{2n} + 0{,}5n\ C_nH_n] + [O_2\ (\alpha_\Sigma - 1) + 3{,}76\ N_2\ \alpha_\Sigma] \cdot [(C^P + S^P + 0{,}25\ H^P) + 0{,}5\ (CO + H_2 + 3\ H_2S) + (1{,}5n + 0{,}5n) \cdot C_nH_{2n+2} + 1{,}5n\ C_nH_{2n} + 1{,}25n\ C_nH_n]. \quad (28)$$

Очевидно, что при сжигании углеводородного газового топлива химическое уравнение (28) имеет более компактный вид:

$$C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_n H_n + n \cdot (O_2 + 3{,}76\ N_2) \cdot [(1{,}5 + 0{,}5/n) \cdot C_nH_{2n+2} + 1{,}5\ C_nH_{2n} + 1{,}25\ C_nH_n] = n\ \{CO_2 \cdot (C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_nH_n) + H_2O \times [(1 + 1/n) \cdot C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + 0{,}5C_nH_n] + 3{,}76\ N_2 \times [(1{,}5 + 0{,}5/n)\ C_nH_{2n+2} + 1{,}5\ C_nH_{2n} + 1{,}25\ C_nH_n]\}. \quad (28.1)$$

Сопоставляя уравнения (2) и (28.1), можно увидеть, что последнее, в отличие от уравнения (28), записано для стехиометрических условий горения ($\alpha_\Sigma = 1{,}0$). Уравнение (2) отличается компактностью, а это свойство дает известные преимущества при инженерных расчетах без привлечения современных программ и алгоритмов расчета. Однако уравнения (2), (28), как показано выше, содержат несколько теплотехнических параметров, каждый из которых рассчитывается по достаточно компактной формуле, поэтому при наличии современных вычислительных средств использование уравнений с одним переменным коэффициентом позволяет существенно уменьшить время расчета.

Об этом свидетельствует алгоритм расчета химических параметров сжигания топлива, представленный на рис. 1. Следует отметить, что формулы ячеек этого алгоритма отвечают традициям органической химии и не позволяют использовать при расчетах ошибочные формулы химических соединений. Кроме того, предлагаемый алгоритм является универсальным при расчетах сжигания любого вида топлива независимо от его агрегатного состояния, так как содержит все горючие составляющие.

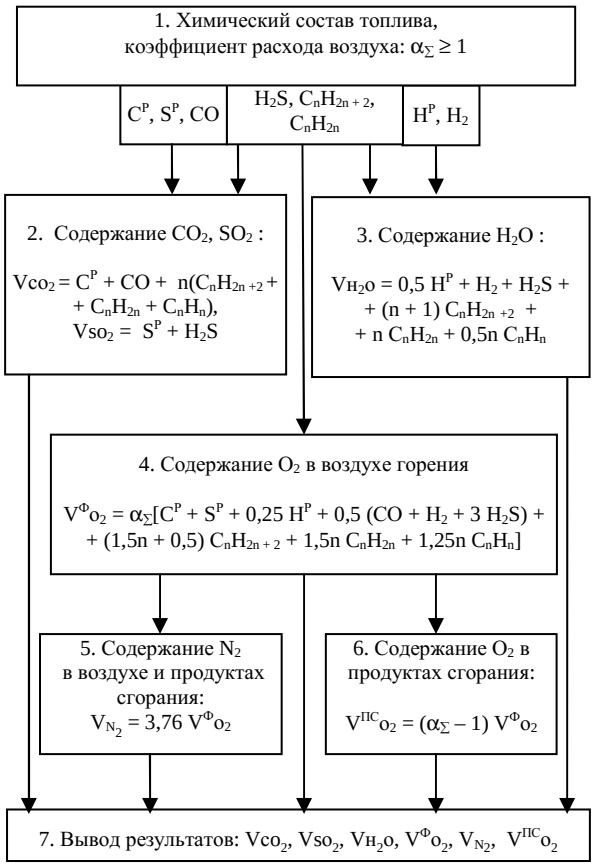


Рис. 1. Алгоритм расчета полного сжигания топлива ($\alpha_\Sigma \geq 1$)

Литература

1. *Арсеев, А.В.* Сжигание природного газа / А.В. Арсеев. – М., 1963.

2. *Равич, М.Б.* Газ и его применение народном хозяйстве / М.Б. Равич. – М., 1974.

3. *Равич, М.Б.* Эффективность использования топлива / М.Б. Равич. – М., 1972.

4. *Юдин, И.Р.* Повышение эффективности тепловой работы плавильных печей метизного производства: дис. … канд. техн. наук / И.Р. Юдин. – Череповец, 2006.

5. *Юдин, Р.А.* Алгоритм расчета тепло-физических характеристик и химического состава продуктов неполного сгорания природного газа / Р.А. Юдин, А.В. Виноградов, И.Р. Юдин // Сталь. – 2008. – № 6. – С. 63 – 67.

6. *Юдин, Р.А.* Протяжные печи открытого малоокислительного нагрева алгоритм их расчета / Р.А. Юдин, А.В. Виноградов, И.Р. Юдин // Вестник ЧГУ. – 2008. – № 3. – С. 74 – 78.

7. *Юдин, Р.А.* Разработка алгоритма расчета нагрева метизов в расплавах / Юдин Р.А., Шестаков Н.И., Юдин И.Р. // Сталь. – 2005. – № 11. – С. 105 – 109.