УДК 621.778.04

Р.А. Юдин, Н.И. Шестаков, В.Р. Аншелес, И.Р. Юдин, Н.А. Тувалин

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА РАСЧЕТА НЕПОЛНОГО СГОРАНИЯ ПРИРОДНОГО ГАЗА

В статье представлены результаты разработки алгоритма расчета неполного сгорания природного газа, позволяющего рассчитать химический состав продуктов неполного сгорания и температур, развиваемых при горении при различных режимных параметрах. В алгоритме использованы зависимости константы термодинамического равновесия реакции водяного пара от стехиометрических объемов продуктов полного сгорания.

Оксид и диоксид углерода, водород и водяные пары, коэффициент расхода первичного воздуха, константа термодинамического равновесия.

The article presents the results of the algorithm for calculating the incomplete combustion of natural gas that allows calculating the chemical composition of the products of incomplete combustion and temperatures developed during the combustion at various regime parameters. The algorithm used according to the thermodynamic equilibrium constant of the reaction of water vapor from the stoichiometric amounts of products of complete combustion.

Oxide and carbon dioxide, hydrogen and water vapor, flow rate of primary air, constant of thermodynamic equilibrium.

До последнего времени при расчетах неполного сгорания в печах открытого малоокислительного нагрева с двухстадийным сжиганием природного газа использовали методику В.Ф. Копытова [2], основанную на принципе термодинамического равновесия компонентов продуктов неполного сгорания по обратимой физико-химической реакции, иногда именуемой реакцией водяного пара:

$$CO_2 + H_2 \Leftrightarrow CO + H_2O. \qquad (1)$$

Константа термодинамического равновесия этой реакции является табулированной величиной, значения которой в зависимости от температуры определяют по формуле:

$$k = \frac{x_{CO_2} \cdot u_{H_2}}{y_{CO} \cdot z_{H_2O}} = f(t), \qquad (2)$$

где означенные неизвестные являются соответствующими компонентами продуктов неполного сгорания топлива.

По методике В.Ф. Копытова для определения химического состава продуктов неполного сгорания составляют материальный баланс химических элементов, участвующих в реакции (1). Первоначально составляют систему, состоящую из трех линейных алгебраических уравнений, соответственно для углерода, водорода и кислорода. В левой части каждого из этих уравнений записывают количество данного элемента в продуктах неполного сгорания, а в правой – в исходном топливе и воздухе, подаваемом на горение, при различных коэффициентах расхода первичного воздуха α_1.

Четвертым уравнением этой системы является формула константы термодинамического равновесия (2), при подстановке в которую трех неизвестных образуется квадратное уравнение, которое следует решать относительно одного из компонентов реакции (1).

Однако расчет химического состава продуктов неполного сгорания и температур, развиваемых при горении, представляет известные трудности. В монографиях [1], [3] показано, что рассматриваемую систему уравнений можно решить относительно одного из неизвестных компонентов, используя в правой части уравнений вместо элементов исходного топлива стехиометрические параметры его продуктов сгорания. Полученное в [3] решение для газа произвольного химического состава имеет следующий вид:

$$k = \frac{CO_{2\max} + CO_2 - y_{CO}}{y_{CO}[\alpha_1(2CO_{2\max} + H_2O_{\max}) - 2CO_{2\max} + \alpha_1(2SO_2 - CO) - 2O_2 + y_{CO}]} \times$$

$$\times [(1-\alpha_1)(2CO_{2\max} + H_2O_{\max}) - \alpha_1(2SO_2 - CO) + 2O_2 - y_{CO}]. \qquad (3)$$

Здесь CO_{2max} и H_2O_{max} – максимальные объемы диоксида углерода и водяных паров в продуктах сгорания, соответствующие стехиометрическим условиям горения; CO, CO_2 – объемы оксида и диоксида углерода в топливе; SO_2 – объем сернистого газа в продуктах сгорания, равный объему сероводорода (H_2S) в топливе; α_1 – коэффициент расхода первичного воздуха.

Сомножители в числителе и знаменателе формулы (3) соответствуют объемам компонентам продуктов неполного сгорания в формуле (2). Для топлива, содержащего только углеводородные горючие газы и негорючие компоненты, формула (3) имеет следующий вид:

$$k = \frac{(CO_{2max} + CO_2 - y_{CO}) \cdot [(1-\alpha_1) \cdot (2CO_{2max} + H_2O_{max}) - y_{CO}]}{y_{CO}[\alpha_1(2CO_{2max} + H_2O_{max}) - 2CO_{2max} + y_{CO}]} . \quad (3.1)$$

Для метана $CO_{2max} = 1$, $H_2O_{max} = 2$, поэтому:

$$k = \frac{(1-y_{CO}) \cdot [4(1-\alpha_1) - y_{CO}]}{y_{CO}(4\alpha_1 - 2 + y_{CO})} . \quad (3.2)$$

$$k_1 y_{CO}^{\ 2} - [3 - 2k_1(2\alpha_1 - 1)]y_{CO} + 4(1-\alpha_1). \quad (4)$$

Квадратное уравнение (3.2) имеет следующее решение:

$$y_{CO} = \frac{3 - 2k_1(2\alpha_1 - 1) - \sqrt{[3 - 2k_1(2\alpha_1 - 1)]^2 - 16k_1(1-\alpha_1)}}{2k_1}, \quad (5)$$

где $k_1 = 1 - k$. Получение компактных квадратных уравнений из формул (3 – 3.1) без введения дополнительных алгебраических комплексов как, например, в монографии [1, с. 101 – 106] весьма затруднительно. В связи с этим необходимые зависимости следует получать, предварительно рассчитав для рассматриваемого топлива CO_{2max}, H_2O_{max} и задавая коэффициент расхода первичного воздуха α_1.

Полученные формулы и выявленные закономерности позволили разработать алгоритм расчета химического состава продуктов неполного сгорания топлива и температур горения при различных коэффициентах расхода первичного воздуха α_1 и температурах его нагрева. Следует отметить, что в отличие от полного сгорания топлива, химический состав продуктов неполного сгорания во многом зависит от температур горения. Структура алгоритма представлена на рис. 1.

Блок ввода исходных данных 1 алгоритма содержит три секции. В первой секции заданы табулированные зависимости константы термодинамического равновесия от температуры [3, с. 387], во второй – химический состав компонентов газообразного топлива и низшая теплота сгорания, а в третьей – табулированные зависимости теплоемкости компонентов продуктов неполного сгорания и воздуха от их температуры [3, с. 385].

В блоке 2 алгоритма по формулам, полученным в монографии [3, с. 78] и работе [4], рассчитывают стехиометрические объемы продуктов полного сгорания топлива:

$$CO_{2\,max} = CO + n(C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n} + C_nH_n),$$

$$H_2O_{max} = H_2 + H_2S + (n+1)C_nH_{2n+2} + nC_nH_{2n} + 0{,}5nC_nH_n, \quad (6)$$

где C_nH_{2n+2}, C_nH_{2n}, C_nH_n – содержание алканов, алкенов и алкинов в исходном топливе в $м^3/м^3$.

При наличии в топливе диоксида углерода его содержание в продуктах сгорания является суммой: (CO_2 + CO_{2max}). Объем сернистого газа (SO_2) в продуктах сгорания равен содержанию сероводорода (H_2S) в топливе. Объем SO_2 учитывают только при расчетах общего объема продуктов и объема сухих газов без водяных паров. Стехиометрические объемы кислорода, азота и воздуха определяют из следующей формулы:

$$V_в^{\ 0} = 4{,}76\ (CO_{2max} + 0{,}5\ H_2O_{max} + 1{,}5\ H_2S - 0{,}5\ CO). \quad (7)$$

При коэффициенте перед скобками в формуле (7) равном единице рассчитанный объем соответствует содержанию кислорода в воздухе, а при коэффициенте 3,76 – азота в воздухе и продуктах полного сгорания. Блок 2 алгоритма является единственным блоком, в котором расчеты проводят только один раз. Это обусловлено тем, что в нем расчеты соответствуют стехиометрическим условиям горения топлива.

В блоке 3 проводят расчет объемов азота и воздуха, предварительно задавая коэффициент расхода первичного воздуха α_1. Для расчета указанных объемов достаточно результаты расчетов по формуле (7) умножить на заданное значение коэффициента α_1. Это обусловлено тем, что азот в химических реакциях горения не участвует, поэтому его объем при горении не изменяется, а кислород при неполном сжигании топлива полностью расходуется на его горение.

Кроме того, в блоке (3) по формуле (3) и ее частным случаям составляют квадратное уравнение, подобное (4), для метана, корнем которого является y_{CO}. Для определения его численного значения предварительно задают искомое значение температуры горения топлива, по которому в секции 1 блока 1 определяют табулированное значение константы равновесия k.

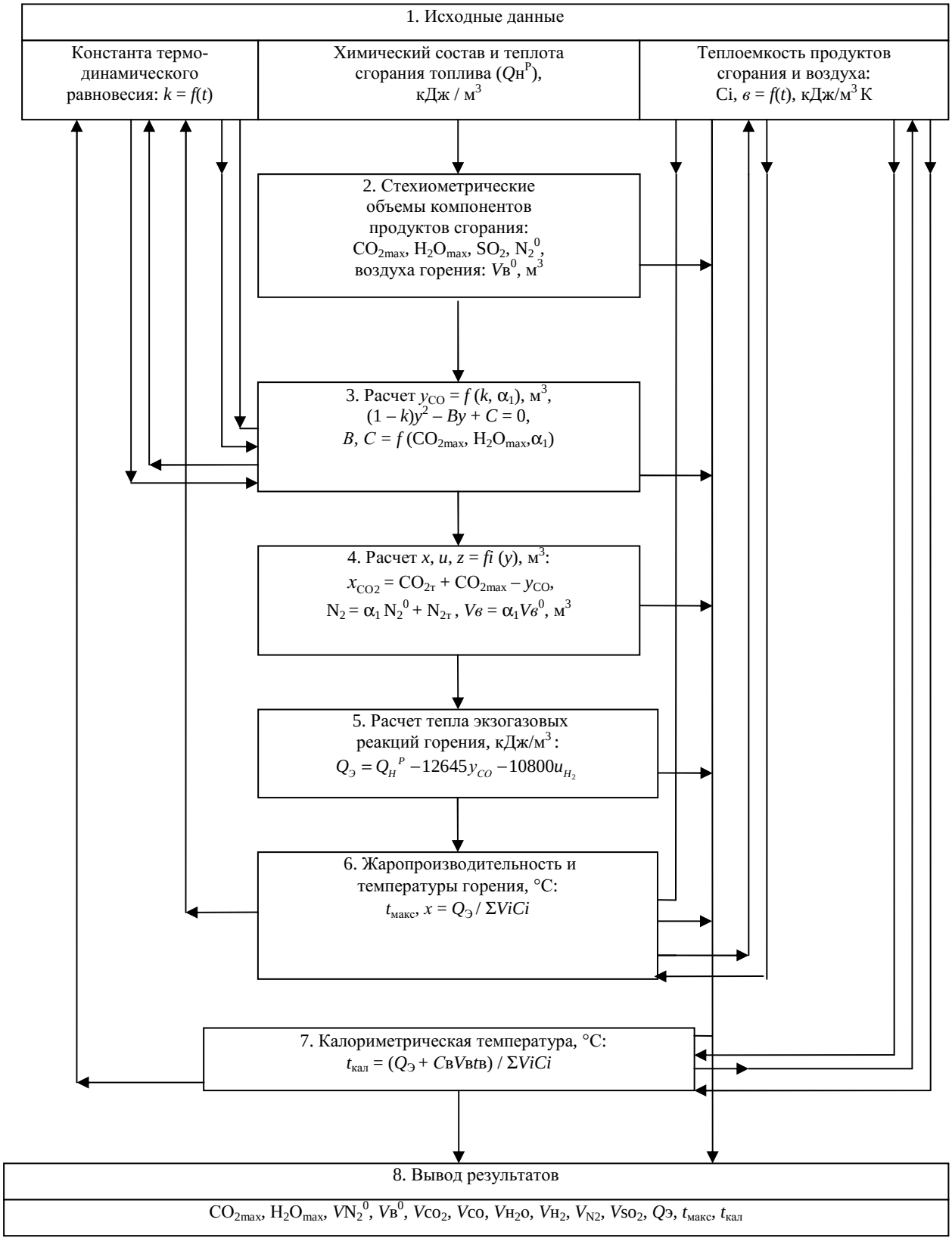


Рис. 1. Алгоритм расчета неполного сгорания топлива

Результаты расчетов блока 3 направляют в блок 4, где по составляющим числителя и знаменателя формулы (3) рассчитывают объемы трех остальных компонентов продуктов неполного сгорания (CO_2,

H_2, H_2O) и направляют результаты расчетов в блок 5. По рассчитанным объемам оксида углерода и водорода в блоке 5 определяют количество тепла, выделяемого при экзотермических реакциях неполного сгорания топлива:

$$Q_э = Q_н^P - 12645\, y_{CO} - 10786\, u_{H_2}, \text{ кДж/м}^3, \quad (8)$$

где 12645 кДж/м^3 – теплота сгорания оксида углерода, 10786 кДж/м^3 – теплота сгорания водорода.

Здесь уместно отметить, что особенностью алгоритма является то, что для уменьшения дополнительных связей, начиная с этого блока, все известные и полученные ранее данные поступают в последующие блоки. Так, в блок 5 из второй секции блока 1 также поступают данные по $Q_н^P$.

Полученное количество тепла экзотермической реакции неполного сгорания топлива – Qэ в блоке 5 передают в блоки 6 и 7, где соответственно рассчитывают температуры для холодных газовоздушных смесей и калориметрические температуры, развиваемые при неполном сжигании топлива при нагреве воздуха. В эти блоки из блоков 2 – 4 также передают полные данные об объемах компонентов продуктов сгорания. Для расчета калориметрической температуры в блок 7 из блока 3 дополнительно передают результаты расчета объема воздуха, соответствующее заданному коэффициенту его расхода α_1.

В блоки 6, 7 из третьей секции блока исходных данных 1 также передают табулированные значения теплоемкости компонентов продуктов неполного сгорания, соответствующие заданным температурам. Кроме того, в блок 7 из третьей секции блока 1 направляют табулированное значение теплоемкости воздуха при заданной температуре его нагрева. Калориметрическую температуру, развиваемую при неполном сгорании топлива, рассчитывают по формуле:

$$t_{кал} = \frac{Q_э + Q_в}{C_{CO_2}V_{CO_2} + C_{H_2O}V_{H_2O} + C_{N_2}V_{N_2} + C_{CO}V_{CO} + C_{H_2}V_{H_2}}, \quad (9)$$

где $Q_в$ – тепло, вносимое с нагретым воздухом. При расчете температуры при работе с холодным воздухом $Q_в = 0$.

В зависимости от полученных температур задаются новыми значениями t_x и $t_{кал}$ и, начиная с блока 3, используя метод итераций, повторяют расчет, обеспечивая заданную сходимость результатов.

Для уменьшения числа итераций целесообразно использовать данные таблицы, полученные в результате расчетов по предлагаемому алгоритму для метана в монографии [3, с. 344 – 364]. На основании данных табл. 1 выполнены зависимости, представленные на рис. 2. Здесь они дополнены результатами расчетов при $\alpha \geq 1$. Расчеты показывают, что в связи с близкими значениями теплотехнических параметров природного газа и метана использование этих зависимостей позволяет существенно уменьшить объем вычислений.

Таблица

Зависимости температур горения метана от коэффициента расхода первичного воздуха: α при горении в «холодном» воздухе и воздухе, нагретом до 400°С

Температуры горения метана: в «холодном» воздухе: t_x и нагретом до 400°С: $t_{кал}$	Коэффициент расхода воздуха: α					
	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
t_x, °С	-	1494	1671	1818	1937	2040
$t_{кал}$, °С	1494	1727	1913	2063	2189	2298

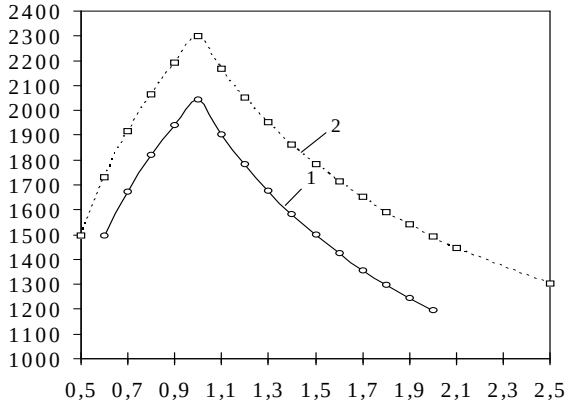


Рис. 2. Зависимости температур горения метана от коэффициента расхода первичного воздуха α_1: 1 – горение в «холодном» воздухе, 2 – горение в воздухе, нагретом до 400°С.

Литература

1. *Ващенко, А.И.* Окисление и обезуглероживание стали / [А.И. Ващенко и др.]. – М., 1972.

2. *Копытов, В.Ф.* Сжигание газа с недостатком воздуха / В.Ф. Копытов // Сталь. – 1954. – № 3. – С. 57 – 62.

3. *Юдин, Р.А.* Научно-технические основы процессов горения / Р.А. Юдин. – Череповец, 2013.

4. *Юдин, Р.А.* Особенности горения топлива произвольного химического состава / Р.А. Юдин, И.Р. Юдин // Вестник Череповецкого государственного университета. – 2013. – № 1. – С. 15 – 18.