

УДК 662.611.2:662,613,5

Бондаренко А. В.  
ОНМА

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ГАЗООБРАЗНОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА**

### **Состояние вопроса**

Одно из направлений повышения энергетической эффективности национальной экономики состоит в разработке моделей и методов оптимального сжигания любых смесей газообразного углеводородного топлива с изменяющейся во времени концентрацией составляющих компонентов.

Такие топлива могут быть получены из каменных и бурых углей, торфа, горючих сланцев, а также при прямой перегонки нефти, термическом и каталитическом крекинге черных нефтепродуктов, при пиролизе древесины и растительной массы.

Оптимальный режим обеспечивается подачей в область горения количества воздуха, близкого к стехиометрическому. В случае, когда состав топлива известен и постоянен, это не сложно организовать технически при факельном сжигании.

Сжигание перечисленных ранее смесей синтетических газов в факелах на имеющемся оборудовании не представляется возможным по причине отсутствия средств управления таким процессом. Для решения такой задачи, на первом этапе, необходимо разработать модель образования продуктов сгорания при любом коэффициенте избытка воздуха. Модель должна определять энтальпии продуктов сгорания и их температуру в факеле при горении на интервале отношения (газ–воздух) от минимально разумного 0.4, до максимально возможного более 2.0.

Целью данной статьи является разработка математической модели определения состава продуктов сгорания их энтальпий и температур при сжигания углеводородного топлива при варьировании количества воздуха.

### **Анализ литературных данных и постановка проблемы**

Широко применяемый сегодня подход по определению температуры и энтальпии продуктов сгорания основанный на методе и модели Менделеева не дает приемлемого решения при горении углево-

дородного газа в воздушной атмосфере при отношении (газ–воздух) существенно больше или меньше стехиометрического [1]. В одной расчетной модели метод Менделеева не позволяет учитывать образование окислов азота NO и угарного газа CO.

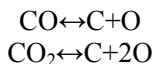
В работе [2] изучены этапы горения метана в воздухе для отношений от 0,5 до 1,4 и давления от 1 до 70 атм. В основу модели был кинетический механизм. Получены аналитические выражения для скорости горения и для характерной температуры. Для обедненного топлива численные и натурные эксперименты совпали. Результаты по скоростям горения получились завышенными для стехиометрического и богатого пламени. Было принято, что в основу разрабатываемой модели необходимо положить изложенный подход, такой же подход был изложен в [3] для расчета и проектирования камер сгорания реактивных двигателей.

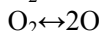
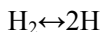
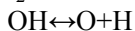
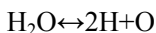
Поэтому проблему эффективного и качественного сжигания углеводородного газа переменного состава, с изменяющейся концентрацией во времени, для энергетических установок можно сформулировать следующим образом. Необходимо разработать модель сжигания любого углеводородного топлива в энергетической установке, которая будет определять кроме энтальпий и температур продуктов сгорания, их состав в том числе, окислы азота и углерода.

### Основы математической модели

Для формирования математической модели решения прямой задачи были приняты допущения, состоящие в известности качественного и количественного состава горючего. Моль любого газа при нормальных условиях занимает объем 22,4. Для решения должна быть известна условная топливная формула. Для углеводородного горючего она состоит из двух простых элементов «С» и «Н». Кроме того, известна условная формула окислителя, принимаем, что это кислород «О». Исходя из изложенного, топливо состоит из трех простых элементов — «Н», «С», «О».

Для формирования математической модели была рассмотрена возможность образования из этих трех элементов только шести значимых индивидуальных веществ, входящих в состав продуктов сгорания: CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, OH, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, которые могут образовывать 6 обратимых реакций:





Первая часть математическая модель прямой задачи состоит из шести уравнений закона действующих масс записанного для образования шести индивидуальных веществ:

$$\frac{P_C \cdot P_O}{P_{\text{CO}}} = \kappa_1(T),$$

$$\frac{P_C \cdot P_O^2}{P_{\text{CO}_2}} = \kappa_2(T),$$

$$\frac{P_H^2 \cdot P_O}{P_{\text{H}_2\text{O}}} = \kappa_3(T),$$

$$\frac{P_H \cdot P_O}{P_{\text{OH}}} = \kappa_4(T),$$

$$\frac{P_H^2}{P_{\text{H}_2}} = \kappa_5(T),$$

$$\frac{P_O^2}{P_{\text{O}_2}} = \kappa_6(T),$$

где  $P_{\text{CO}}, P_{\text{CO}_2}, P_{\text{H}_2\text{O}}, P_{\text{OH}}, P_{\text{O}_2}, P_{\text{H}_2}, P_{\text{H}}, P_{\text{O}}, P_{\text{C}}$  – соответствующие парциальные давления образованных индивидуальных веществ и элементов, находящихся в продуктах сгорания,  $\kappa_1(T), \kappa_3(T), \kappa_3(T), \kappa_4(T), \kappa_5(T), \kappa_6(T)$ , – константы химического равновесия образования индивидуальных веществ по парциальным давлениям.

Вторая часть математической модели прямой задачи состоит из трех уравнений закона сохранения вещества записанного для материального баланса трех элементов образования шести принятых индивидуальных веществ.

$$M_T \cdot \epsilon_C^{(T)} = \epsilon_C^{(T)} \cdot M_T = P_{\text{CO}} + P_{\text{CO}_2} + P_{\text{C}},$$

$$M_T \cdot \epsilon_H^{(T)} = \epsilon_H^{(T)} \cdot M_T = 2 \cdot P_{H_2O} + 2 \cdot P_{H_2} + P_{OH} + P_H,$$

$$M_T \cdot \epsilon_O^{(T)} = \frac{V_{ок}}{V_{Г}} \cdot a \cdot M_T =$$

$$= P_{CO} + 2 \cdot P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{O_2} + P_O,$$

где  $V_{ок}$ ,  $V_{Г}$  – объёмные расходы окислителя и горючего соответственно;  $M_T$  – количество молей топлива  $\epsilon_H^{(T)}$ ,  $\epsilon_C^{(T)}$  – количество атомов водорода и углерода в условной формуле горючего,  $a = 2$  – количество атомов кислорода в окислителе,  $\epsilon_H^{(T)}$ ,  $\epsilon_C^{(T)}$ ,  $\epsilon_O^{(T)}$  – количество атомов водорода, углерода и кислорода в условной формуле топлива.

Третья часть математической модели прямой задачи состоит из уравнения закона Дальтона.

$$P_{CO} + P_{CO_2} + P_{H_2} + P_{O_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + P_H + P_O + P_C = P_{\Sigma},$$

где  $P_{\Sigma}$  – суммарное давление в камере горения при котором происходит образование продуктов сгорания.

Четвертая часть математической модели прямой задачи состоит из уравнения сохранения энергии, в предположении изохорности процесса горения

$$(I_{Г} + \alpha \cdot \chi_0 \cdot I_{O}) \cdot M_T = \sum_q I_q$$

где  $\alpha$  – коэффициент избытка окислителя;  $\chi_0$  – мольный стехиометрический коэффициент соотношения компонентов;  $I_{Г}$ ,  $I_{O}$ ,  $I_q$  – мольные энтальпии горючего, окислителя и газов в смеси продуктов сгорания,  $P_q$  – соответствующие парциальные давления образованных индивидуальных веществ и элементов.

Получена система 9-ти алгебраических нелинейных уравнений. Решение было найдено в численном виде. Численное решение было найдено с помощью метода Ньютона путем разложения уравнений системы в ряд Тейлора по степеням, не выше первой. При поиске нового приближения к предыдущему прибавляется только часть найденной поправки. Величина этой части определяется коэффици-

ентом нижней релаксации. Он подбирается опытным путем и для демонстрационного примера составил  $k = 0.4$ , давление  $P_{\Sigma} = 1 \text{ бар}$ .

### Демонстрационный пример

Для проверки адекватности и работоспособности записанной модели был проведен тестовый расчет по данным из [3]. В качестве демонстрационного примера были взяты исходные данные по следующему топливу: горючее – газообразный керосин  $\text{C}_{11,956}$ ; окислитель – кислород  $\text{O}_2$ .

В рассматриваемом тестовом варианте должно быть:

$b_c = 1$ ,  $b_H = 1,956$ ,  $I_c = -1948 \text{ кДж/кг} = -27237,7 \text{ кДж/кмоль}$ , молекулярная масса керосина принята равной  $\mu = 13,9824 \text{ кг/кмоль}$ , коэффициент избытка окислителя  $\alpha=0.4$ . В табл.1 приведены результаты демонстрационного примера.

Таблица 1. Результаты расчетов для  $\alpha=0,4$

Состав продуктов сгорания	Начальное приближение	Решение	Данные по [3]
$P_{\text{CO}}^{(1)}$	1.0	0,4869	0,4432
$P_{\text{CO}_2}^{(1)}$	1.0	0,0181	0,0203
$P_{\text{H}_2\text{O}}^{(1)}$	1.0	0,0784	0,1011
$P_{\text{OH}}^{(1)}$	0.1	0,0001	0,0001
$P_{\text{H}_2}^{(1)}$	0.1	0,4143	0,4332
$P_{\text{O}_2}^{(1)}$	0.1	0,0000	0,0000
$P_{\text{H}}^{(1)}$	0.1	0,0022	0,0023
$P_{\text{O}}^{(1)}$	0.1	0,0000	0,0000
$P_{\text{C}}^{(1)}$	0.1	0,0000	0,0000
$M_{\text{T}}^{(1)}$	1.0	0,5050	0,4910
T[K]		2124	2125

Поиск температуры продуктов сгорания осуществлялся итерационным процессом. Принималась температура продуктов сгорания заведомо завышенная. Далее по выражению 11 модели осуществлялся балансовый расчет из принятого предположения изознальпийности процесса. Первоначальное значение температуры уменьшалось

до тех пор, пока выражение не превращалось в тождество с заданной вычислительной точностью.

Сравнение данных из столбцов табл.1. “Решение” и “Данные [3]” показывает, что решение получено с высокой точностью, т.е. модель не дает каких либо искажений, связанных с допущениями или неточностью численных расчетов. Исходя из проведенных расчетов и построенной модели можно сделать вывод о корректности полученных расчетов и возможности проведения расчетов при различных количествах окислителя отличных от стехиометрического.

### Совершенствование модели

Для проведения расчетов по определению характеристик продуктов сгорания, где окислителем мог бы выступать атмосферный воздух. Принят состав воздуха из  $N_2$  – 80%, и  $O_2$  – 20% по объему. И как следствие было осуществлено следующее дополнение к модели. Теперь условная формула окислителя состоит из элементов «O» и «N». Поэтому топливо состоит из четырех простых элементов — «H», «C», «O», «N». Следовательно группа индивидуальных веществ входящих в продукты сгорания увеличилась до восьми к рассмотренным ранее было добавлено образования азота  $N_2$  и его окисла NO по обратимым реакциям  $N_2 \leftrightarrow 2N$  и  $NO \leftrightarrow N+O$ , остальными окислами азота в рассматриваемой модели пренебрегаем.

В первую часть математическая модель прямой задачи добавляем два уравнения закона действующих масс записанного для образования NO и  $N_2$  как индивидуального вещества.

$$\frac{P_N \cdot P_O}{P_{NO}} = \kappa_7(T)$$
$$\frac{P_N^2}{P_{N_2}} = \kappa_8(T)$$

где  $P_{NO}, P_N$  — соответствующие парциальные давления образованных индивидуальных веществ и элементов,  $\kappa_7(T)$ , — константа химического равновесия образования NO из индивидуальных веществ по парциальным давлениям,  $\kappa_8(T)$  — константа химического равновесия образования  $N_2$  из индивидуальных веществ по парциальным давлениям.

Во вторую часть математической модели прямой задачи вводим дополнительное четвертое уравнений закона сохранения вещества записанного для материального баланса азота.

$$M_T \cdot b_N^{(T)} = \frac{V_{ок}}{V_T} \cdot \alpha \cdot M_T = P_{NO} + P_{N_2},$$

а уравнение материального баланса кислорода примет вид

$$\begin{aligned} M_T \cdot \epsilon_O^{(T)} &= \frac{V_{ок}}{V_T} \cdot a \cdot M_T = \\ &= P_{CO} + 2 \cdot P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{O_2} + P_O + P_{NO} + 2 \cdot P_{N_2} \end{aligned}$$

где  $b_N^{(T)}$  – количество атомов азота в условной формуле топлива.

В третью часть математической модели прямой задачи добавим парциальные давления  $P_{NO}, P_{N_2}$ .

$$\begin{aligned} P_{CO} + P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + P_{O_2} + P_{H_2} + \\ + P_{NO} + P_H + P_O + P_C + P_N = P_\Sigma \end{aligned}$$

В четвертую часть математической модели прямой задачи состоящей из уравнения сохранения энергии введем слагаемые определяющие энтальпию свободного азота в воздухе и энтальпию окисла азота в продуктах горения

$$(I_T + \alpha \cdot \chi_0 \cdot (0,2 \cdot I_O + 0,8 \cdot I_N)) \cdot M_T = \sum_q I_q \cdot P_q$$

где  $I_O, I_N$  – мольные энтальпии кислорода и азота в окислителе.

Получена система 12-ти алгебраических нелинейных уравнений. Решение было найдено в численном виде, подходом описанном ранее.

В качестве следующего демонстрационного примера были взяты исходные данные по топливу: горючее – газообразный метан  $CH_4$ ; окислитель – воздух. В таблице 2 приведены результаты моделирования температуры  $T$ , парциальных давления некоторых продуктов сгорания  $P_{CO}$  и  $P_{NO}$  при варьировании относительного коэффициента избытка воздуха  $\alpha$ .

Таблица 2. Результаты моделирования протекающие при горении метана в воздушной атмосфере при изменении коэффициента избытка воздуха.

$\alpha$	T, [K]	$P_{CO}$	$P_{NO}$
0.4	1228	0.1371	1.9055E-12
0.5	1532	0.1152	3.673E-09
0.6	1761	0.0941	2.4453E-07
0.7	1940	0.0728	4.1579E-06
0.8	2084	0.0503	3.8136E-05
0.9	2197	0.0264	0.0003
0.95	2233	0.0150	7.67E-04
1.0	2230	0.0071	0.0017
1.05	2192	0.0034	0.0024
1.1	2143	0.0018	0.0029
1.2	2040	5.53E-04	0.0030
1.3	1943	1.90E-04	0.0027
1.4	1855	6.99E-05	0.0023
1.5	1775	2.67E-05	0.0020
1.6	1703	1.06E-05	0.0016
1.7	1637	4.32E-06	0.0013
1.8	1578	1.83E-06	0.0011
1.9	1523	7.80E-07	8.54E-04
2.0	1473	3.41E-07	6.90E-04

### Выводы по работе

Математическая модель прямой задачи для газообразного углеводородного топлива позволяет определить количественный состав его условной формулы, энтальпию топлива, состав и температуру продуктов сгорания.

Результаты моделирования адекватно отображают физико-химические процессы, протекающие при горении метана в воздушной атмосфере при изменении коэффициента избытка воздуха. Рассчитана максимальная температура продуктов сгорания 2233 К при  $\alpha=0.95$ . Уменьшение практически до нуля парциального давления CO при увеличении коэффициента избытка воздуха соответствует действительности. Так же адекватно вычислено наличие максимума парциального давления NO при  $\alpha=1.2$ . Уменьшение количества образования NO связано с уменьшением температуры горения.



*СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ*

1. Химия горения // У. Гардинер, Г. Диксон–Льюис, Р. Целнер и др. — М.: Мир, 1988. — 464 с.
2. Buipham, M. The asymptotic structure of premixed methane–air flames with slow CO oxidation / M. Buipham, K. Seshadri, F. A. Williams // *Combustion and Flame*. – 1992. – Т. 89 – С. 343–362
3. Глушко, В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник [Текст] / В. П. Глушко, В. Е. Алемасов // ВИНТИ. – М., 1971. – Том 1. – 266 с.