

И.А. Рыбенко

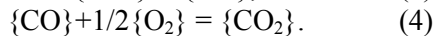
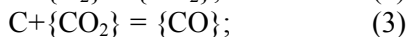
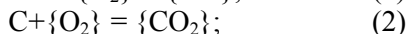
Сибирский государственный индустриальный университет

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ ТОПЛИВА

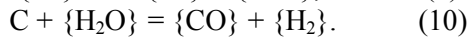
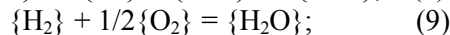
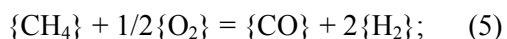
С целью выявления возможности реализации различных процессов в технологическом агрегате разработана методика расчета, исследования и оптимизации [1] процессов в элементарных системах с использованием программного комплекса «Терра» [2], с применением которой были проведены термодинамические исследования для ряда систем [3 – 5].

Поскольку углерод является основной составляющей любого вида твердого или жидкого топлива, а водород – газообразного топлива и летучих компонентов, исследование условий горения топлива осуществлялось на модельных системах С – О и С – О – Н.

Предполагается, что в модельной системе С – О протекают следующие реакции:



В модельной системе С – О – Н, кроме реакций (1) – (4), в зависимости от количества кислорода могут протекать реакции полного и неполного горения метана (CH_4), горения монооксида углерода (CO) и водорода (H_2) и взаимодействия углерода с водяным паром:



При моделировании были рассмотрены задачи определения возможных составов и температур, которые могут получаться в результате протекания процессов горения при различных соотношениях содержания углерода, водорода и кислорода. Для этого модельные системы с поэлементным составом С – О или С – О – Н формировались путем задания исходного состава смеси в числах молей. Количество молей углерода, метана и кислорода варьировалось соответственно параметрами n , k и m .

Для задания окислительно-восстановительного состава системы по входным параметрам использовались следующие показатели:

$\alpha = m/k$ – степень конверсии природного газа, определяемая как отношение количества молей m газообразного кислорода к количеству молей k углерода метана;

$\alpha^* = m/(n + k)$ – окислительный потенциал системы, определяемый как отношение количества молей газообразного кислорода к общему количеству молей углерода ($n + k$), подаваемого в систему;

$$Z = \frac{\{\text{CO}\} + \{\text{H}_2\}}{\{\text{CO}\} + \{\text{H}_2\} + \{\text{CO}_2\} + \{\text{H}_2\text{O}\}} - \text{восста-}$$

новительный потенциал газовой фазы, равный отношению суммы концентраций CO и H_2 к суммарному содержанию всех компонентов газовой фазы.

Перечень веществ, которые могут образовываться при взаимодействии указанных элементов, был определен с использованием программного комплекса «Тера» в результате термодинамического анализа протекающих процессов в теоретически возможном интервале температур горения.

При исследовании термодинамических условий горения углерода в системе $n\text{C} + m\text{O}_2$ значение параметра n было задано равным единице, а количество молей кислорода варьировали параметром m в диапазоне $0 \div 1$, что при $m = 1$ соответствует по стехиометрии полному горению углерода до CO_2 . При этом использовался показатель α , численное значение которого при $n = 1$ совпадает со значением параметра m . На рис. 1 приведены зависимости составов и температур t продуктов сгорания углерода, а также мольной доли монооксида углерода (X_{CO}) от показателя α , из которых следует, что при значениях $\alpha < 0,4$ происходит горение углерода до CO по реакции (1). При $\alpha > 0,4$ в связи с развитием реакции (2) в системе появляется CO_2 . Температура при увеличении количества кислорода возрастает до значений порядка 3000°C и при $\alpha > 0,4$ стабилизируется. При $\alpha > 0,6$ в газовой фазе начинает появляться свободный кислород. Величина показателя

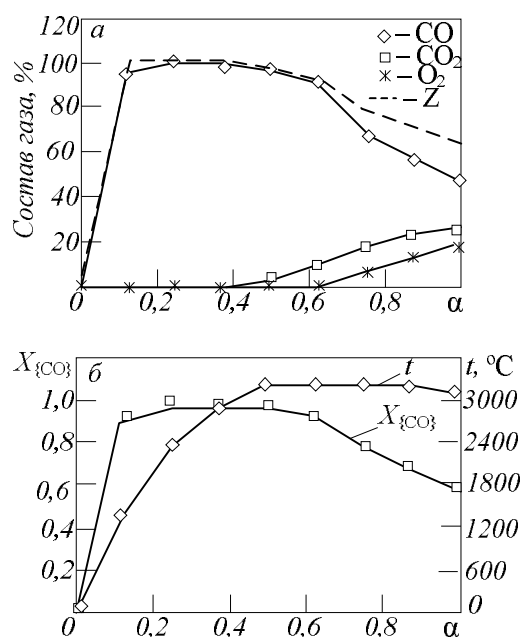


Рис. 1. Зависимости состава (а) и температуры (б) продуктов сгорания углерода в системе $nC + mO_2$ от показателя α

теля Z при низких значениях α составляет 100 %, а при появлении в системе CO₂ уменьшается до 65 %.

Исследование термодинамических условий горения газообразного топлива осуществлялось на модельной системе $kCH_4 + mO_2$. Значение параметра k было задано равным единице, а количество кислорода варьировали параметром m в диапазоне $0 \div 2$; $m = 2$ соответствует полному горению метана. Численное значение степени конверсии α совпадает с параметром m . На рис. 2 приведены зависимости составов и температуры продуктов сгорания метана от показателя α . Из рисунка видно, что в диапазоне $\alpha = 0 \div 0,5$ при недостатке кислорода происходит неполная кислородная конверсия метана по реакции (5). Компонентами газовой фазы являются метан, монооксид углерода и водород. При $\alpha > 0,5$ получают развитие реакции (6) – (8), в газовой фазе появляются CO₂ и H₂O. При $\alpha > 1$ в системе появляется свободный кислород. Температуры в диапазоне $\alpha = 0 \div 0,5$ не превышают 800 °С, что объясняется низким тепловым эффектом реакции (5); при $\alpha = 0,5 \div 1,0$ наблюдается рост температуры до значений порядка 2800 °С и при $\alpha > 1$ – ее стабилизация. Значение показателя $Z = 95$ % максимально при $\alpha = 0,5$, а при изменении параметра α в пределах от 0,5 до 2,0 значение Z падает до 37 % из-за увеличения концентраций CO₂ и H₂O в газовой фазе.

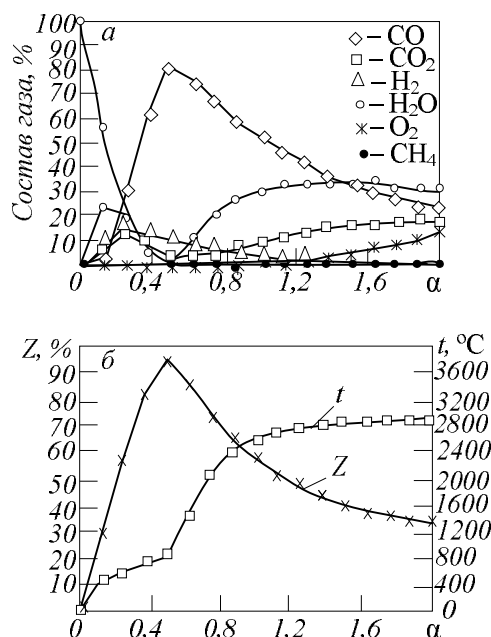


Рис. 2. Зависимости состава (а) и температуры (б) продуктов сгорания метана в системе $nC + kCH_4 + mO_2$ от показателя α

Исследование термодинамических условий совместного горения твердого и газообразного топлива осуществлялось на модельной системе $nC + kCH_4 + mO_2$. Параметры n и k приняли равными 0,5, а количество кислорода варьировали соответственно параметром m в диапазоне $0 \div 2$. На рис. 3 приведены зависимости составов и температуры продуктов сгорания метана и углерода от параметра α . Из рисунка видно, что для процесса горения смешанного топлива характерно смещение влево области неполного горения, которая характеризуется более высоким содержанием CO в продуктах сгорания, что связано с уменьшением количества метана в исходной смеси и, следовательно, уменьшением абсолютного количества водорода в системе. Этим также объясняется снижение содержания H₂O и увеличение содержания CO₂ в зоне полного горения топлива, а также более плавный рост температурной кривой. Значение показателя Z также максимально при $\alpha^* = 0,5$ и составляет 99,8 %.

Выводы. За счет изменения степени конверсии природного газа (α) и показателя α^* можно в широких диапазонах управлять как температурным режимом, так и составом газовой фазы. Максимальная восстановительная способность соответствует диапазону $\alpha = 0,45 \div 0,55$, однако при этом имеют место относительно низкие (1200 ÷ 1600 °С) температуры продуктов сгорания.

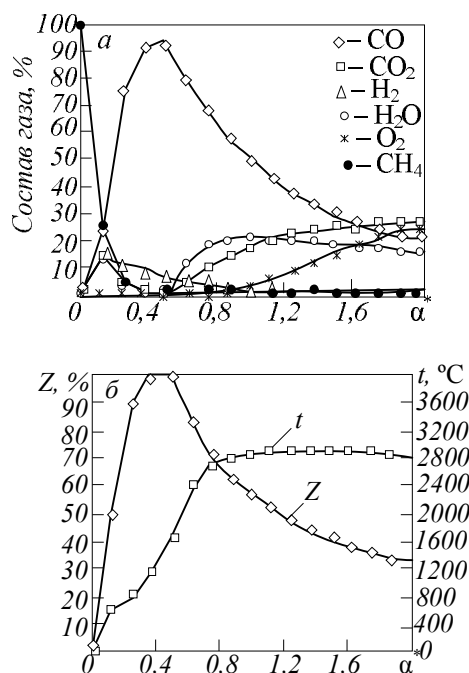


Рис. 3. Зависимости состава (а) и температуры (б) продуктов сгорания углерода и метана в системе $nC + kCH_4 + mO_2$ от показателя α *

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Рыбенко И.А. Разработка методики и системы расчета вариантов технологий непрерывного получения металла в агрегатах струйно-эмульсионного типа. Автореф. дис. канд. техн. наук. – Новокузнецк, 2000. – 23 с.
2. Трусов Б.Г. / Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Инженерный журнал: наука и инновации. 2012. № 1 (1). С. 21.
3. Голодова М.А., Дмитриенко В.И., Рожихина И.Д., Рыбенко И.А. / Исследование условий и режимов процесса восстановления ванадия в элементарных системах // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 4. С. 7 – 11.
4. Рыбенко И.А., Кожемяченко В.И., Красноперов С.Ю. / Моделирование условий и режимов восстановления железа в элементарной системе Fe – C – O // Междисциплинарные исследования в области математического моделирования и информатики. Материалы 3-ей науч.-практ. конф. – Ульяновск: SIMJET, 2014. С. 339 – 343.
5. Дмитриенко В.И., Нохрина О.И., Рожихина И.Д., Рыбенко И.А. / Термодинамическая оценка возможности легирования стали при обработке ее ванадийсодержащим шлаком // Изв. вуз. Черная металлургия. 2010. № 10. С. 17 – 20.

© 2014 г. И.А. Рыбенко
Поступила 16 июня 2014 г.