

Материальный баланс равновесного процесса паро-кислородной газификации твердого топлива

1. Исходные данные

1.1. Процентный состав твердого топлива, %

$$W_p := 28.0 \quad H_p := 2.0 \quad N_p := 0.5$$

$$A_p := 10.5 \quad C_p := 57.0 \quad O_p := 2.0$$

$$\text{Сера органическая и колчеданная (пиритная)} \quad S_{\text{орк}_p} := 0$$

$$C_p + H_p + O_p + N_p + W_p + A_p + S_{\text{орк}_p} = 100$$

1.2. Параметры компонентов окислителя:
азотно-кислородной смеси (АКС) и водяного пара

$$1.2.1. \text{ Объемная доля кислорода в АКС} \quad KO_2 := 0.98$$

$$1.2.2. \text{ Удельный расход кислорода в составе АКС,} \\ \text{куб.м/кг топлива} \quad V_{O_2_{\text{ок}}} := 0.3$$

$$1.2.3. \text{ Удельный расход водяного пара,} \\ \text{куб.м/кг топлива} \quad V_{H_2O_{\text{ок}}} := 0.7$$

$$1.3. \text{ Давление в газогенераторе, атм:} \quad P_{\text{sum}} := 1$$

$$1.4. \text{ Температура генераторного газа, град.С.:} \quad t_{\text{гр}} := 1000$$

2. Вспомогательные функции

2.1. Температурные зависимости натуральных логарифмов
констант атомизации, заданные таблично

$data := \text{READPRN}("disslog.inf")$ (Примечание: массив температур - в К)

$$temp := data^{(0)}$$

$$\ln_{KCO_2} := data^{(1)}$$

$$\ln_{KH_2O} := data^{(2)}$$

$$\ln_{KO_2} := data^{(3)}$$

$$\ln_{KN_2} := data^{(4)}$$

$$\ln_{KCO} := data^{(5)}$$

$$\ln_{KH_2} := data^{(6)}$$

$$\ln_{KCH_4} := data^{(7)}$$

2.2. Реакция водяного газа

$$\ln_K_{pp}(T) := \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KH_2O, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KCO, T)$$

$$\ln_K_p(T) := \ln_K_{pp}(T) - \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KCO_2, T) - \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KH_2, T)$$

$$K_p(T) := e^{\ln_K_p(T)}$$

2.3. Реакция паровой конверсии метана

$$\ln_K_{ppCH_4}(T) := \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KCH_4, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KH_2O, T)$$

$$\ln_K_pCH_4(T) := \ln_K_{ppCH_4}(T) - (3 \cdot \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KH_2, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln_KCO, T))$$

$$K_pCH_4(T) := e^{\ln_K_pCH_4(T)}$$

+

3. Подготовительные расчеты

3.1. Удельные объемы химических элементов в топливе, (куб.м химического элемента)/кг топлива

$$vO_{\text{топл}} := 0.01 \cdot \frac{22.4}{16} \cdot O_p + 0.01 \cdot \frac{22.4}{18} \cdot W_p$$

$$vH_{\text{топл}} := 0.01 \cdot \frac{22.4}{1} \cdot H_p + 0.01 \cdot \frac{22.4}{18} \cdot 2 \cdot W_p$$

$$vC_{\text{топл}} := 0.01 \cdot \frac{22.4}{12} \cdot C_p$$

$$vN_{\text{топл}} := 0.01 \cdot \frac{22.4}{14} \cdot N_p$$

$$vS_{\text{топл}} := 0.01 \cdot \frac{22.4}{32} \cdot S_{\text{орк}_p}$$

3.2. Теоретический расход кислорода с окислителем (АКС), куб.м/кг топлива

$$V_{\text{кисл}_0} := vC_{\text{топл}} + 0.25 \cdot vH_{\text{топл}} - 0.5 \cdot vO_{\text{топл}} + vS_{\text{топл}} = 1.162$$

3.3. Коэффициент расхода окислителя

$$\alpha := \frac{V_{O_2_{\text{ок}}}}{V_{\text{кисл}_0}} = 0.258$$

3.4. Действительный расход окислителя, куб.м/кг топлива

$$V_{\text{ок}} := \frac{V_{O_2_{\text{ок}}}}{KO_2} = 0.306$$

3.5. Удельные объемы химических элементов в окислителе, (куб.м химического элемента)/кг топлива

$$vO_{\text{окисл}} := 2V_{\text{ок}} \cdot KO_2 + V_{H_2O_{\text{ок}}} = 1.3$$

$$vH_{\text{окисл}} := 2V_{H_2O_{\text{ок}}} = 1.4$$

$$vC_{\text{окисл}} := 0$$

$$vN_{\text{окисл}} := V_{\text{ок}} \cdot 2 \cdot (1 - KO_2) = 0.012$$

$$vS_{\text{окисл}} := 0$$

3.6. Удельные объемы химических элементов в исходных веществах, (куб.м химического элемента)/кг топлива

$$vO_{\text{исх}} := vO_{\text{топл}} + vO_{\text{окисл}} = 1.676$$

$$vH_{\text{исх}} := vH_{\text{топл}} + vH_{\text{окисл}} = 2.545$$

$$vC_{\text{исх}} := vC_{\text{топл}} + vC_{\text{окисл}} = 1.064$$

$$vN_{\text{исх}} := vN_{\text{топл}} + vN_{\text{окисл}} = 0.02$$

$$vS_{\text{исх}} := vS_{\text{топл}} + vS_{\text{окисл}} = 0$$

4. Равновесный состав генераторного газа при заданной его температуре и давлении

4.1. Начальные приближения

Удельные выходы компонентов генераторного газа, куб.м/кг топлива:

$$\begin{pmatrix} V_{CO_2} \\ V_{CO} \\ V_{H_2O} \\ V_{H_2} \\ V_{N_2} \\ V_{CH_4} \\ V_{SO_2} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.329 \\ 0.595 \\ 0.686 \\ 0.717 \\ 0.010 \\ 5.984 \cdot 10^{-6} \\ 0 \end{pmatrix} \quad V_{sg} := \begin{pmatrix} V_{CO_2} \\ V_{CO} \\ V_{H_2O} \\ V_{H_2} \\ V_{N_2} \\ V_{CH_4} \\ V_{SO_2} \end{pmatrix}$$

$$V_{\text{sum}} := \sum V_{sg} = 2.337$$

4.2. Решение системы уравнений

Given

$$V_{sg5} + V_{sg0} + V_{sg1} = vC_{исх}$$

$$V_{ch4} + V_{co2} + V_{co} = vC_{исх}$$

$$2 \cdot V_{sg0} + V_{sg1} + V_{sg2} + 2 \cdot V_{sg6} = vO_{исх}$$

$$2 \cdot V_{co2} + V_{co} + V_{h2o} + 2V_{so2} = vO_{исх}$$

$$4 \cdot V_{sg5} + 2 \cdot V_{sg2} + 2 \cdot V_{sg3} = vH_{исх}$$

$$4 \cdot V_{ch4} + 2 \cdot V_{h2o} + 2 \cdot V_{h2} = vH_{исх}$$

$$2 \cdot V_{sg4} = vN_{исх}$$

$$2 \cdot V_{n2} = vN_{исх}$$

$$V_{sg6} = vS_{исх}$$

$$V_{so2} = vS_{исх}$$

$$\frac{V_{sg0} \cdot V_{sg3}}{V_{sg1} \cdot V_{sg2}} = Kp(t_{rr} + 273.15)$$

$$\frac{V_{co2} \cdot V_{h2}}{V_{co} \cdot V_{h2o}} = Kp(t_{rr} + 273.15)$$

$$\frac{V_{sg1} \cdot (V_{sg3})^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{sg5} \cdot V_{sg2} \cdot (V_{sum})^2} = KpCH4(t_{rr} + 273.15)$$

$$\frac{V_{co} \cdot V_{h2}^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{ch4} \cdot V_{h2o} \cdot V_{sum}^2} = KpCH4(t_{rr} + 273.15)$$

$$V_{sum} = \sum V_{sg}$$

$$V_{sum} = V_{ch4} + V_{co} + V_{co2} + V_{h2} + V_{h2o} + V_{n2} + V_{so2}$$

$$\begin{pmatrix} V_{sg} \\ V_{sum} \end{pmatrix} := \text{Find}(V_{sg}, V_{sum})$$

$$V_{sg} = \begin{pmatrix} 0.224 \\ 0.84 \\ 0.389 \\ 0.884 \\ 0.01 \\ 3.229 \times 10^{-5} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$V_{sum} = 2.347$$

5. Результаты расчета

5.1. Удельные выходы компонентов генераторного газа, куб.м/кг топлива

$$V_{sg} = \begin{pmatrix} 0.224 \\ 0.84 \\ 0.389 \\ 0.884 \\ 0.01 \\ 3.229 \times 10^{-5} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} V_{co2} \\ V_{co} \\ V_{h2o} \\ V_{h2} \\ V_{n2} \\ V_{ch4} \\ V_{so2} \end{pmatrix} \quad V_{sum} = 2.347$$

5.2. Процентный состав генераторного газа, %

$$CH4_{гр} := \frac{V_{sg5}}{V_{sum}} \cdot 100 \quad CO2_{гр} := \frac{V_{sg0}}{V_{sum}} \cdot 100 \quad N2_{гр} := \frac{V_{sg4}}{V_{sum}} \cdot 100$$

$$CO_{гр} := \frac{V_{sg1}}{V_{sum}} \cdot 100 \quad H2O_{гр} := \frac{V_{sg2}}{V_{sum}} \cdot 100$$

$$H2_{гр} := \frac{V_{sg3}}{V_{sum}} \cdot 100 \quad SO2_{гр} := \frac{V_{sg6}}{V_{sum}} \cdot 100$$

$$CH4_{гр} = 1.376 \times 10^{-3} \quad CO2_{гр} = 9.535 \quad N2_{гр} = 0.431$$

$$CO_{гр} = 35.808 \quad H2O_{гр} = 16.567 \quad SO2_{гр} = 0$$

$$H2_{гр} = 37.657$$

5.3. Удельный выход водорода, куб.м/кг топлива

$$V_{H2} := V_{sg3} = 0.884$$

5.4. Коэффициент эффективности генерации водорода

$$\eta_H := \frac{2 \cdot V_{H2}}{v_{H_{исх}}} = 0.694$$

6. Зависимости процентного содержания водорода и метана, а также коэффициента эффективности генерации водорода от давления генераторного газа

С целью исследования указанных зависимостей проводятся вычисления при нескольких значениях давления. Получаемые величины каждый раз вносятся в отдельные матрицы (вектор-столбцы), на основании которых строятся заданные графики.

Для удобства варьирования давления генераторного газа данная переменная объявлена как глобальная посредством использования знака присвоения \equiv

При этом нужно отключить вычисление (отменить присвоение) значения давления в пункте 1.3.

$$P_{\text{sum}} \equiv 1$$

$$p_{\text{gg}} := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 10 \\ 20 \\ 30 \end{pmatrix} \quad H_2_{\text{gg}} := \begin{pmatrix} 37.657 \\ 37.65 \\ 37.428 \\ 36.801 \\ 35.929 \end{pmatrix} \quad CH_4_{\text{gg}} := \begin{pmatrix} 0.0014 \\ 0.0055 \\ 0.134 \\ 0.496 \\ 1.002 \end{pmatrix} \quad \eta := \begin{pmatrix} 0.694 \\ 0.694 \\ 0.688 \\ 0.672 \\ 0.650 \end{pmatrix}$$



