

+

Материальный баланс равновесного процесса энергохимической аккумуляции газовых отходов и тепловой баланс реактора конверсии (совместное решение системы уравнений)

1. Исходные данные

1.1. Состав газовых отходов, %

$$\begin{array}{lll} N2_{go} := 14.62 & O2_{go} := 4.22 & H2_{go} := 0.29 \\ CO2_{go} := 23.52 & CO_{go} := 57.35 & H2O_{go} := 0 \end{array}$$

Проверка:

$$N2_{go} + CO2_{go} + CO_{go} + H2_{go} + O2_{go} + H2O_{go} = 100$$

1.2. Температура газовых отходов, град.С

$$t_{go} := 1600$$

1.3. Состав природного газа, %

$$\begin{array}{ll} CH4_{г} := 89.7 & N2_{г} := 2.7 \\ C2H6_{г} := 5.2 & CO2_{г} := 0.1 \\ C3H8_{г} := 1.70 & O2_{г} := 0.0 \\ C4H10_{г} := 0.5 & CO_{г} := 0.0 \\ C5H12_{г} := 0.1 & H2_{г} := 0.0 \end{array}$$

Влагосодержание природного газа, г/(куб.м сухого топлива) $d_{г} := 10$

Проверка:

$$CH4_{г} + C2H6_{г} + C3H8_{г} + C4H10_{г} + C5H12_{г} + N2_{г} + CO2_{г} + CO_{г} + H2_{г} + O2_{г} = 100$$

1.4. Температура природного газа, град.С

$$t_{пр_газ} := 20$$

1.5. Теплоты сгорания:

- горючих газов, кДж/куб.м:

$$\begin{array}{lll} Q_{пр_CH4} := 35820 & Q_{пр_C2H6} := 63750 & Q_{пр_C4H10} := 118650 \\ Q_{пр_CO} := 12636 & Q_{пр_C3H8} := 91250 & Q_{пр_C5H12} := 146080 \\ Q_{пр_H2} := 10798 & & \end{array}$$

- условного топлива, кДж/кг: $Q_{ut} := 29330$

- природного газа, кДж/куб.м:

$$Q_{\text{прир_газ_1}} := 0.01 \cdot (CH_4_г \cdot Q_{\text{нр_CH}_4} + C_2H_6_г \cdot Q_{\text{нр_C}_2H_6} + C_3H_8_г \cdot Q_{\text{нр_C}_3H_8})$$

$$Q_{\text{прир_газ_1}} := Q_{\text{прир_газ_1}} + 0.01 \cdot (C_4H_{10}_г \cdot Q_{\text{нр_C}_4H_{10}} + C_5H_{12}_г \cdot Q_{\text{нр_C}_5H_{12}})$$

$$Q_{\text{прир_газ}} := Q_{\text{прир_газ_1}} + 0.01 \cdot (CO_г \cdot Q_{\text{нр_CO}} + H_2_г \cdot Q_{\text{нр_H}_2})$$

- газовых отходов, кДж/куб.м: $Q_{\text{прир_газ}} = 3.774 \times 10^4$

$$Q_{go} := 0.01 \cdot (CO_{go} \cdot Q_{\text{нр_CO}} + H_{2go} \cdot Q_{\text{нр_H}_2}) = 7.278 \times 10^3$$

1.6. Давление синтез-газа, получаемого при ЭХА, атм:

$$P_{sum} := 1$$

**1.7. Удельный расход природного газа на ЭХА,
(куб.м прир.газа)/(куб.м газовых отходов):**

$$V_{\text{пр_газ_ЭХА}} := 0.138$$

1.8. Плотность водяных паров, кг/(куб. м):

$$\rho_{\text{вп}} := \frac{18}{22.4} = 0.804$$

2. Вспомогательные функции

2.1. Температурные функции для удельных теплоемкостей, заданные таблично

`data := READPRN("capacity.inf")`

`tem := data`^{<0>} (Примечание: массив температур - в град.С)

`KCO2 := data`^{<1>} `CCO2_(t) := linterp(tem, KCO2, t)`

`KH2O := data`^{<2>} `CH2O_(t) := linterp(tem, KH2O, t)`

`KO2_ := data`^{<3>} `CO2_(t) := linterp(tem, KO2_, t)`

`KN2 := data`^{<4>} `CN2_(t) := linterp(tem, KN2, t)`

`KCO := data`^{<5>} `CCO_(t) := linterp(tem, KCO, t)`

`KH2 := data`^{<6>} `CH2_(t) := linterp(tem, KH2, t)`

2.2. Температурные зависимости натуральных логарифмов констант атомизации, заданные таблично

`data := READPRN("disslog.inf")`

$temp := data^{(0)}$ (Примечание: массив температур - в К)
 $ln_KCO2 := data^{(1)}$
 $ln_KH2O := data^{(2)}$
 $ln_KO2 := data^{(3)}$
 $ln_KN2 := data^{(4)}$
 $ln_KCO := data^{(5)}$
 $ln_KH2 := data^{(6)}$
 $ln_KCH4 := data^{(7)}$

2.2.1. Реакция водяного газа

$ln_Kpp(T) := \text{linterp}(temp, ln_KH2O, T) + \text{linterp}(temp, ln_KCO, T)$
 $ln_Kp(T) := ln_Kpp(T) - \text{linterp}(temp, ln_KCO2, T) - \text{linterp}(temp, ln_KH2, T)$
 $Kp(T) := e^{ln_Kp(T)}$

2.2.2. Реакция паровой конверсии метана

$ln_KppCH4(T) := \text{linterp}(temp, ln_KCH4, T) + \text{linterp}(temp, ln_KH2O, T)$
 $ln_KpCH4(T) := ln_KppCH4(T) - (3 \text{linterp}(temp, ln_KH2, T) + \text{linterp}(temp, ln_KCO, T))$
 $KpCH4(T) := e^{ln_KpCH4(T)}$

2.3. Температурные функции для удельных теплоемкостей горючих газов

$vt1 :=$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 200 \\ 400 \\ 600 \\ 800 \\ 1000 \end{pmatrix}$	$vc_CH4 :=$	$\begin{pmatrix} 1.550 \\ 1.760 \\ 2.015 \\ 2.263 \\ 2.497 \\ 2.703 \end{pmatrix}$	$vc_C2H6 :=$	$\begin{pmatrix} 2.212 \\ 2.778 \\ 3.310 \\ 3.779 \\ 4.186 \\ 4.534 \end{pmatrix}$	$vc_C3H8 :=$	$\begin{pmatrix} 3.050 \\ 3.968 \\ 4.764 \\ 5.434 \\ 5.992 \\ 6.465 \end{pmatrix}$
		$vc_C4H10 :=$	$\begin{pmatrix} 4.131 \\ 5.258 \\ 6.272 \\ 7.119 \\ 7.814 \\ 8.409 \end{pmatrix}$			$vc_C5H12 :=$	$\begin{pmatrix} 5.133 \\ 6.520 \\ 7.747 \\ 8.791 \\ 9.633 \\ 10.353 \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned}
CCH4_t &:= \text{linterp}(vt1, vc_CH4, t) & CC2H6_t &:= \text{linterp}(vt1, vc_C2H6, t) \\
CC3H8_t &:= \text{linterp}(vt1, vc_C3H8, t) & CC4H10_t &:= \text{linterp}(vt1, vc_C4H10, t) \\
CC5H12_t &:= \text{linterp}(vt1, vc_C5H12, t)
\end{aligned}$$

2.4. Удельная теплоемкость природного газа

$$\begin{aligned}
C_fuel0(t) &:= 0.01(CH4_r \cdot CCH4_t + C2H6_r \cdot CC2H6_t + C3H8_r \cdot CC3H8_t + C4H10_r \cdot CC4H10_t) \\
C_fuel1(t) &:= C_fuel0(t) + 0.01(C5H12_r \cdot CC5H12_t + N2_r \cdot CN2_t + CO2_r \cdot CCO2_t) \\
C_fuel(t) &:= C_fuel1(t) + 0.01(CO_r \cdot CCO_t + H2_r \cdot CH2_t)
\end{aligned}$$

$$C_fuel(200) = 1.86$$

2.5. Удельная теплоемкость газовых отходов

$$\begin{aligned}
C_ro1(t) &:= 0.01(N2_ro \cdot CN2_t + CO2_ro \cdot CCO2_t + O2_ro \cdot CO2_t) \\
C_ro(t) &:= C_ro1(t) + 0.01(CO_ro \cdot CCO_t + H2_ro \cdot CH2_t)
\end{aligned}$$

$$C_ro(200) = 1.42$$

2.6. Удельная теплоемкость синтез-газа, кДж/(куб.м*град):

$$\begin{aligned}
C_singas1(V_cr, t) &:= V_cr2 \cdot CCH4_t + V_cr3 \cdot CCO_t + V_cr4 \cdot CH2_t + V_cr0 \cdot CCO2_t \\
C_singas2(V_cr, t) &:= C_singas1(V_cr, t) + V_cr1 \cdot CH2O_t + V_cr5 \cdot CN2_t
\end{aligned}$$

$$C_singas(V_cr, t) := \frac{C_singas2(V_cr, t)}{\sum V_cr}$$

Вектор компонентов синтез-газа,
куб.м/(куб.м газовых отходов)

$$C_singas(V_cr, 200) = 1.411$$

$$V_cr := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} \quad V_cr := \begin{pmatrix} Vco2 \\ Vh2o \\ Vch4 \\ Vco \\ Vh2 \\ Vn2 \end{pmatrix}$$

3. Материальный баланс процесса ЭХА и тепловой баланс реактора ЭХА

3.1. Удельные объемы химических элементов:

в природном газе, (м^3 хим. элемента)/(м^3 прир. газа),

в окислителе (газовых отходах), (м^3 хим. элемента)/(м^3 газовых отходов)

3.1.1. Удельный объем С в природном газе и газовых отходах ⁺

$$vC_{\text{пр_газ}} := \frac{C_{\text{H4_т}} + 2 \cdot C_{\text{2H6_т}} + 3 \cdot C_{\text{3H8_т}} + 4 \cdot C_{\text{4H10_т}} + 5 \cdot C_{\text{5H12_т}} + CO_{2_т} + CO_{\text{т}}}{100}$$

$$vC_{\text{го}} := \frac{CO_{2_го} + CO_{\text{го}}}{100}$$

3.1.2. Удельный объем Н в природном газе и газовых отходах

$$vH_{\text{пр_газ}} := \frac{4C_{\text{H4_т}} + 6 \cdot C_{\text{2H6_т}} + 8 \cdot C_{\text{3H8_т}} + 10 \cdot C_{\text{4H10_т}} + 12 \cdot C_{\text{5H12_т}} + 2 \cdot H_{2_т}}{100} + 2 \frac{d_{\text{т}} \cdot 10^{-3}}{\rho_{\text{вп}}}$$

$$vH_{\text{го}} := \frac{2 \cdot H_{2_го} + 2H_{2}O_{\text{го}}}{100}$$

3.1.3. Удельный объем О в природном газе и газовых отходах

$$vO_{\text{пр_газ}} := \frac{2 \cdot O_{2_т} + 2 \cdot CO_{2_т} + CO_{\text{т}}}{100} + \frac{d_{\text{т}} \cdot 10^{-3}}{\rho_{\text{вп}}}$$

$$vO_{\text{го}} := \frac{2 \cdot O_{2_го} + 2 \cdot CO_{2_го} + CO_{\text{го}} + H_2O_{\text{го}}}{100}$$

3.1.4. Удельный объем N в в природном газе и газовых отходах

$$vN_{\text{пр_газ}} := \frac{2 \cdot N_{2_т}}{100}$$

$$vN_{\text{го}} := \frac{2 \cdot N_{2_го}}{100}$$

3.2. Удельные объёмы химических элементов

в исходных веществах ЭХА, (куб.м хим. эл-та)/(куб.м газовых отходов)

$$vC_{\text{исх}} := vC_{\text{пр_газ}} \cdot V_{\text{пр_газ_ЭХА}} + vC_{\text{го}} \quad vO_{\text{исх}} := vO_{\text{пр_газ}} \cdot V_{\text{пр_газ_ЭХА}} + vO_{\text{го}}$$

$$vH_{\text{исх}} := vH_{\text{пр_газ}} \cdot V_{\text{пр_газ_ЭХА}} + vH_{\text{го}} \quad vN_{\text{исх}} := vN_{\text{пр_газ}} \cdot V_{\text{пр_газ_ЭХА}} + vN_{\text{го}}$$

3.3 Предварительные расчеты

Статьи теплового баланса РК, не зависящие от температуры и состава синтез-газа:

3.3.1 Химическая и физическая теплота газовых отходов, кДж/(куб.м газовых отходов):

$$Q_{ro_сум} := Q_{ro} + C_{ro}(t_{ro}) \cdot t_{ro} = 9.968 \times 10^3$$

3.3.2. Химическая и физическая теплота природного газа, направляемого на конверсию, кДж/(куб.м газовых отходов):

$$Q_{пр_газ_сум} := V_{пр_газ_ЭХА} \cdot (Q_{прир_газ} + C_{fuel}(t_{пр_газ}) \cdot t_{пр_газ}) = 5.212 \times 10^3$$

3.4. Нулевые приближения для решения системы уравнений

3.4.1. Удельные объемы компонентов синтез-газа, куб.м/(куб.м газовых отходов)

$$\begin{pmatrix} V_{co2} \\ V_{h2o} \\ V_{ch4} \\ V_{co} \\ V_{h2} \\ V_{n2} \end{pmatrix} := 1.154 \times 10^{-5} \begin{pmatrix} 0.118 \\ 0.055 \\ 0.839 \\ 0.233 \\ 0.15 \end{pmatrix} \quad V_{cr} := \begin{pmatrix} V_{co2} \\ V_{h2o} \\ V_{ch4} \\ V_{co} \\ V_{h2} \\ V_{n2} \end{pmatrix}$$

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

3.4.2. Температура синтез-газа, получаемого при ЭХА, град.С: $t_{cr} := 1000$

Нулевые приближения в п.3.4.1 и 3.4.2 при необходимости уточняются в процессе расчетов

3.4.3. Нулевые приближения химической и физической теплоты синтез-газа

Химическая теплота синтез-газа (на выходе из РК) кДж/(куб.м газовых отходов)

$$Q_{cr_хим} := V_{ch4} \cdot Q_{нр_CH4} + V_{co} \cdot Q_{нр_CO} + V_{h2} \cdot Q_{нр_H2} = 1.312 \times 10^4$$

Физическая теплота синтез-газа (на выходе из РК), кДж/(куб.м газовых отходов)

$$Q_{cr_физ} := \sum V_{cr} \cdot C_{singas}(V_{cr}, t_{cr}) \cdot t_{cr} = 2.058 \times 10^3$$

3.5. Система уравнений материального и теплового балансов

Given

Уравнение материального баланса по углероду,
(куб.м С)/(куб.м газовых отходов)

$$V_{cr2} + V_{cr0} + V_{cr3} = vC_{исх} \qquad V_{ch4} + V_{co2} + V_{co} = vC_{исх}$$

Уравнение материального баланса по кислороду,
(куб.м O)/(куб.м газовых отходов)

$$2 \cdot V_{cr0} + V_{cr3} + V_{cr1} = vO_{исх} \qquad 2 \cdot V_{co2} + V_{co} + V_{h2o} = vO_{исх}$$

Уравнение материального баланса по водороду,
(куб.м H)/(куб.м газовых отходов)

$$4 \cdot V_{cr2} + 2 \cdot V_{cr1} + 2 \cdot V_{cr4} = vH_{исх} \qquad 4 \cdot V_{ch4} + 2 \cdot V_{h2o} + 2 \cdot V_{h2} = vH_{исх}$$

Уравнение материального баланса по азоту,
(куб.м N)/(куб.м газовых отходов)

$$2 \cdot V_{cr5} = vN_{исх} \qquad 2 \cdot V_{n2} = vN_{исх}$$

Уравнение закона действующих масс для реакции водяного газа

$$\frac{V_{cr0} \cdot V_{cr4}}{V_{cr3} \cdot V_{cr1}} = K_p(t_{cr} + 273) \qquad \frac{V_{co2} \cdot V_{h2}}{V_{co} \cdot V_{h2o}} = K_p(t_{cr} + 273)$$

Уравнение закона действующих масс для реакции паровой конверсии метана

$$\frac{V_{cr3} \cdot (V_{cr4})^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{cr2} \cdot V_{cr1} \cdot \left(\sum V_{cr}\right)^2} = K_{pCH4}(t_{cr} + 273) \qquad \frac{V_{co} \cdot V_{h2}^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{ch4} \cdot V_{h2o} \cdot V_{sum}^2} = K_{pCH4}(t_{cr} + 273)$$

Химическая теплота синтез-газа (на выходе из РК)

$$Q_{cr_хим} = V_{cr2} \cdot Q_{нр_CH4} + V_{cr3} \cdot Q_{нр_CO} + V_{cr4} \cdot Q_{нр_H2}$$

Физическая теплота синтез-газа (на выходе из РК), кДж/(куб.м газовых отходов)

$$Q_{\text{cr_физ}} = \sum V_{\text{cr}} \cdot C_{\text{singas}}(V_{\text{cr}}, t_{\text{cr}}) \cdot t_{\text{cr}}$$

Уравнение теплового баланса РК

$$Q_{\text{го_сум}} + Q_{\text{пр_газ_сум}} = Q_{\text{cr_хим}} + Q_{\text{cr_физ}}$$

$$\begin{pmatrix} V_{\text{cr}} \\ Q_{\text{cr_хим}} \\ Q_{\text{cr_физ}} \\ t_{\text{cr}} \end{pmatrix} := \text{Find}(V_{\text{cr}}, Q_{\text{cr_хим}}, Q_{\text{cr_физ}}, t_{\text{cr}})$$

$$\begin{pmatrix} V_{\text{co2}} \\ V_{\text{h2o}} \\ V_{\text{ch4}} \\ V_{\text{co}} \\ V_{\text{h2}} \\ V_{\text{n2}} \end{pmatrix} := V_{\text{cr}} = \begin{pmatrix} 0.118 \\ 0.054 \\ 1.16 \times 10^{-5} \\ 0.839 \\ 0.233 \\ 0.15 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} t_{\text{cr}} &= 1.002 \times 10^3 \\ Q_{\text{cr_хим}} &= 1.312 \times 10^4 \\ Q_{\text{cr_физ}} &= 2.062 \times 10^3 \end{aligned}$$

4. Результаты расчета

4.1. Температура синтез-газа, град.С:

$$t_{\text{cr}} = 1002$$

4.2. Удельный расход природного газа на ЭХА,
куб.м/(куб.м газовых отходов)

$$V_{\text{пр_газ_ЭХА}} = 0.138$$

4.3. Удельный выход синтез-газа,
куб.м/(куб.м газовых отходов)

$$V_{\text{cr_сум}} := \sum V_{\text{cr}} = 1.395$$

4.4. Теплота сгорания синтез-газа, кДж/куб.м

$$Q_{\text{cr}} := \frac{Q_{\text{cr_хим}}}{V_{\text{cr_сум}}} = 9.405 \times 10^3$$

4.5. Состав синтез-газа, %

$$\begin{pmatrix} \text{CO}_2 \\ \text{H}_2\text{O} \\ \text{CH}_4 \\ \text{CO} \\ \text{H}_2 \\ \text{N}_2 \end{pmatrix} := 100 \frac{V_{\text{cr}}}{\sum V_{\text{cr}}} = \begin{pmatrix} 8.486 \\ 3.906 \\ 8.316 \times 10^{-4} \\ 60.161 \\ 16.696 \\ 10.749 \end{pmatrix}$$

4.6. Коэффициент эффективности генерации водорода

$$\eta_{\text{H}} := \frac{2 \cdot V_{\text{h2}}}{v_{\text{H_исх}}} = 0.81$$

$$V_{\text{h2}} = 0.233$$

$$v_{\text{H_исх}} = 0.575$$

5. Исследование зависимостей температуры синтез-газа, процентного содержания в нем водорода и метана, а также коэффициента эффективности генерации водорода от давления синтез-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.

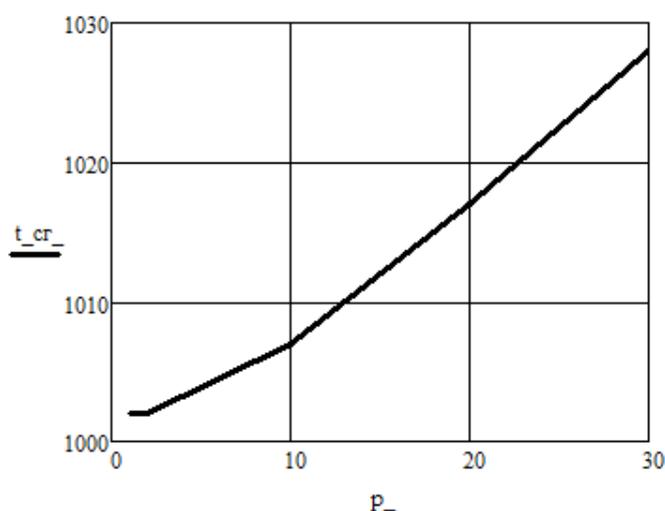
Для удобства варьирования давления синтез-газа данная переменная может быть объявлена как глобальная посредством использования знака присвоения "тильда".

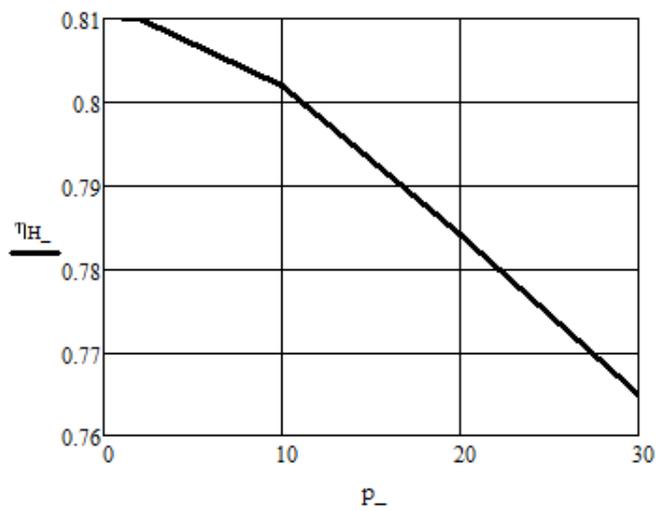
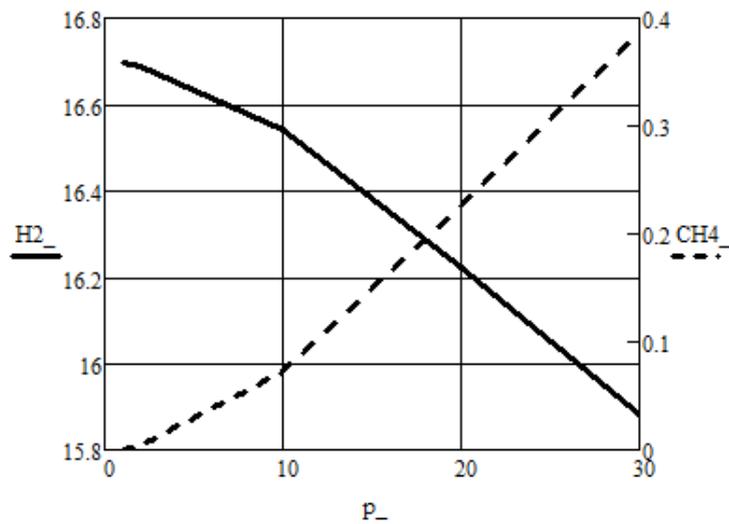
При этом нужно отключить присвоение значения давления в пункте 1.6.

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

$$p_{\text{~}} := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 10 \\ 20 \\ 30 \end{pmatrix} \quad t_{\text{cr}_{\text{~}}} := \begin{pmatrix} 1002 \\ 1002 \\ 1007 \\ 1017 \\ 1028 \end{pmatrix} \quad \text{H}_2_{\text{~}} := \begin{pmatrix} 16.695 \\ 16.69 \\ 16.542 \\ 16.221 \\ 15.882 \end{pmatrix} \quad \text{CH}_4_{\text{~}} := \begin{pmatrix} 8.277 \times 10^{-4} \\ 3.297 \times 10^{-3} \\ 0.073 \\ 0.226 \\ 0.387 \end{pmatrix} \quad \eta_{\text{H}_{\text{~}}} := \begin{pmatrix} 0.810 \\ 0.810 \\ 0.802 \\ 0.784 \\ 0.765 \end{pmatrix}$$

Графические зависимости параметров от давления синтез-газа:





6. Результаты расчета температуры синтез-газа, процентного содержания водорода и метана, а также коэффициента эффективности генерации водорода от удельного расхода природного газа на процесс ЭХА при постоянном давлении

Исследование проводится при давлении синтез-газа, ата: P_{sum} := 1

Изменение удельного расхода природного газа: 0,8; 0,9; 1,0; 1,1; 1,2 от изначально заданного

$$V_{\text{пр_газ_ЭХА}_0} := 0.138$$

$$V_{np_raz_ЭХА_} := V_{np_raz_ЭХА_0} \cdot \begin{pmatrix} 0.8 \\ 0.9 \\ 1 \\ 1.1 \\ 1.2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.11 \\ 0.124 \\ 0.138 \\ 0.152 \\ 0.166 \end{pmatrix}$$

$$V_{np_raz_ЭХА} = 0.166$$

$$t_{cr_} := \begin{pmatrix} 1187 \\ 1092 \\ 1002 \\ 916 \\ 836 \end{pmatrix} \quad H_2_ := \begin{pmatrix} 12.438 \\ 14.581 \\ 16.695 \\ 18.734 \\ 20.599 \end{pmatrix} \quad CH_4_ := \begin{pmatrix} 1.757 \times 10^{-5} \\ 1.158 \times 10^{-4} \\ 8.277 \times 10^{-4} \\ 6.563 \times 10^{-3} \\ 0.056 \end{pmatrix} \quad \eta_H_ := \begin{pmatrix} 0.707 \\ 0.762 \\ 0.81 \\ 0.852 \\ 0.884 \end{pmatrix}$$

Зависимости параметров от удельного расхода природного газа на процесс ЭХА:

