

# Материальный баланс равновесного процесса энергохимической аккумуляции газовых отходов

## 1. Исходные данные

1.1. Состав газовых отходов, %

$$\begin{aligned} N2_{го} &:= 14.62 & O2_{го} &:= 4.22 & H2_{го} &:= 0.29 \\ CO2_{го} &:= 23.52 & CO_{го} &:= 57.35 \end{aligned}$$

Проверка:

$$N2_{го} + CO2_{го} + CO_{го} + H2_{го} + O2_{го} = 100$$

1.2. Состав природного газа, %

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

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

Проверка:

$$\begin{aligned} CH4_{г} + C2H6_{г} + C3H8_{г} + C4H10_{г} + C5H12_{г} + N2_{г} + CO2_{г} + \dots \\ + CO_{г} + H2_{г} + O2_{г} = 100 \end{aligned}$$

1.3. Давление синтез-газа, получаемого при ЭХА, атм:  $P_{sum} := 1$

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

1.5. Удельный расход природного газа на ЭХА,  
(куб.м прир.газа)/(куб.м газовых отходов):  $V_{пр\_газ\_ЭХА} := 0.138$

1.6. Плотность водяных паров, кг/(куб. м):  $\rho_{вп} := \frac{18}{22.4} = 0.804$

## 2. Вспомогательные функции

2.1. Температурные зависимости натуральных логарифмов  
констант атомизации, заданные таблично

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

`temp := data(0)` (Примечание: массив температур - в К)

$$\ln\_KCO2 := \text{data}^{(1)}$$

$$\ln\_KH2O := \text{data}^{(2)}$$

$$\ln\_KO2\_ := \text{data}^{(3)}$$

$$\ln\_KN2 := \text{data}^{(4)}$$

$$\ln\_KCO := \text{data}^{(5)}$$

$$\ln\_KH2 := \text{data}^{(6)}$$

$$\ln\_KCH4 := \text{data}^{(7)}$$

## 2.2. Реакция водяного газа

$$\ln\_Kpp(T) := \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KH2O, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KCO, T)$$

$$\ln\_Kp(T) := \ln\_Kpp(T) - \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KCO2, T) - \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KH2, T)$$

$$Kp(T) := e^{\ln\_Kp(T)}$$

## 2.3. Реакция паровой конверсии метана

$$\ln\_KppCH4(T) := \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KCH4, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KH2O, T)$$

$$\ln\_KpCH4(T) := \ln\_KppCH4(T) - (3 \cdot \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KH2, T) + \text{linterp}(\text{temp}, \ln\_KCO, T))$$

$$KpCH4(T) := e^{\ln\_KpCH4(T)}$$

## 3. Равновесный состав синтез-газа - продукта ЭХА - при заданной его температуре и давлении

### 3.1. Удельные объемы химических элементов:

в природном газе, (м<sup>3</sup> хим. элемента)/(м<sup>3</sup> прир. газа),

в окислителе (газовых отходах), (м<sup>3</sup> хим. элемента)/(м<sup>3</sup> газовых отходов)

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

$$vC\_пр\_газ := \frac{CH4\_г + 2 \cdot C2H6\_г + 3 \cdot C3H8\_г + 4 \cdot C4H10\_г + 5 \cdot C5H12\_г + CO2\_г + CO\_г}{100}$$

$$vC\_го := \frac{CO2\_го + CO\_го}{100}$$

#### 3.1.2. Удельный объем Н в природном газе и газовых отходах

$$vH\_пр\_газ := \frac{4CH4\_г + 6 \cdot C2H6\_г + 8 \cdot C3H8\_г + 10 \cdot C4H10\_г + 12 \cdot C5H12\_г + 2 \cdot H2\_г}{100} \dots$$

$$+ 2 \frac{d\_г \cdot 10^{-3}}{\rho\_вп}$$

$$vH\_го := \frac{2 \cdot H2\_го}{100}$$

### 3.1.3. Удельный объем O в природном газе и газовых отходах

$$vO_{\text{пр\_газ}} := \frac{2 \cdot O2_{\text{г}} + 2 \cdot CO2_{\text{г}} + CO_{\text{г}}}{100} + \frac{d_{\text{г}} \cdot 10^{-3}}{\rho_{\text{вп}}}$$

$$vO_{\text{го}} := \frac{2 \cdot O2_{\text{го}} + 2 \cdot CO2_{\text{го}} + CO_{\text{го}}}{100}$$

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

$$vN_{\text{пр\_газ}} := \frac{2 \cdot N2_{\text{г}}}{100}$$

$$vN_{\text{го}} := \frac{2 \cdot N2_{\text{го}}}{100}$$

### 3.2. Удельные объёмы химических элементов в исходных веществах ЭХА, (куб.м хим. эл-та)/(куб.м газовых отходов)

$$vC_{\text{исх}} := vC_{\text{пр\_газ}} \cdot V_{\text{пр\_газ\_ЭХА}} + vC_{\text{го}}$$

$$vO_{\text{исх}} := vO_{\text{пр\_газ}} \cdot V_{\text{пр\_газ\_ЭХА}} + vO_{\text{го}}$$

$$vH_{\text{исх}} := vH_{\text{пр\_газ}} \cdot V_{\text{пр\_газ\_ЭХА}} + vH_{\text{го}}$$

$$vN_{\text{исх}} := vN_{\text{пр\_газ}} \cdot V_{\text{пр\_газ\_ЭХА}} + vN_{\text{го}}$$

### 3.3. Нулевые приближения

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

$$\begin{pmatrix} V_{\text{co2}} \\ V_{\text{h2o}} \\ V_{\text{ch4}} \\ V_{\text{co}} \\ V_{\text{h2}} \\ V_{\text{n2}} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.121 \\ 0.055 \\ 9.687 \cdot 10^{-6} \\ 0.833 \\ 0.226 \\ 0.173 \end{pmatrix} \quad V_{\text{ср}} := \begin{pmatrix} V_{\text{co2}} \\ V_{\text{h2o}} \\ V_{\text{ch4}} \\ V_{\text{co}} \\ V_{\text{h2}} \\ V_{\text{n2}} \end{pmatrix}$$

Нулевые приближения при необходимости уточняются в процессе расчетов

### 3.4. Система уравнений для определения состава синтез-газа

Given

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

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

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

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

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

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

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

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

Уравнение закона действующих масс для реакции водяного газа

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

Уравнение закона действующих масс для реакции  
паровой конверсии метана

$$\frac{V_{cr3} \cdot (V_{cr4})^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{cr2} \cdot V_{cr1} \cdot \left(\sum V_{cr}\right)^2} = Kp_{CH4}(t_{cr} + 273)$$

$$\frac{V_{co} \cdot V_{h2}^3 \cdot P_{sum}^2}{V_{ch4} \cdot V_{h2o} \cdot V_{sum}^2} = Kp_{CH4}(t_{cr} + 273)$$

$$V_{cr} := \text{Find}(V_{cr})$$

$$V_{cr} = \begin{pmatrix} 0.118 \\ 0.054 \\ 1.2 \times 10^{-5} \\ 0.839 \\ 0.233 \\ 0.15 \end{pmatrix} \quad V_{cr} := \begin{pmatrix} V_{co2} \\ V_{h2o} \\ V_{ch4} \\ V_{co} \\ V_{h2} \\ V_{n2} \end{pmatrix}$$

#### 4. Результаты расчета

4.1. Температура синтез-газа, град.С:

$$t_{cr} = 1 \times 10^3$$

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

$$V_{пр\_газ\_ЭХА} = 0.138$$

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

$$V_{cr\_сум} := \sum V_{cr} = 1.395$$

4.4. Состав синтез-газа, %

$$Proc_{sg} := 100 \frac{V_{cr}}{\sum V_{cr}} = \begin{pmatrix} 8.495 \\ 3.897 \\ 8.603 \times 10^{-4} \\ 60.152 \\ 16.706 \\ 10.749 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} CO_2 \\ H_2O \\ CH_4 \\ CO \\ H_2 \\ N_2 \end{pmatrix}$$

4.5. Коэффициент эффективности генерации водорода

$$\eta_H := \frac{2 \cdot V_{cr4}}{vH_{исх}} = 0.811$$

#### 5. Зависимости процентного содержания 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 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.

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

$$p_- := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 10 \\ 20 \\ 30 \end{pmatrix} \quad H2_- := \begin{pmatrix} 16.706 \\ 16.701 \\ 16.563 \\ 16.176 \\ 15.645 \end{pmatrix} \quad CH4_- := \begin{pmatrix} 8.603 \times 10^{-4} \\ 3.438 \times 10^{-3} \\ 0.083 \\ 0.308 \\ 0.618 \end{pmatrix} \quad \eta := \begin{pmatrix} 0.811 \\ 0.811 \\ 0.803 \\ 0.78 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

