

## The Problems and Prospects of Russian Fuel and Energy Complex

*Makarov A.A.*

*The Energy Research Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow*

The postsoviet experience of program documents development and realization of fuel and energy complex of Russia development and the methods and models are considered. The basic problems and their decision probable trends are characterized in Russia Power Strategy for the period till 2030. The basic aim of the Strategy is to consider the economic growth and environment protection correct combination with the Strategy realization mechanisms creation.

**Key words:** fuel and energy complex of Russia, the Power Strategy of Russia.

Received August 22, 2008

УДК 662.61+523.036.7

## Энергоэкологический анализ эффективности использования топлива и энергии с применением математического и компьютерного моделирования. 1. Методика расчета энергетической эффективности и ее теплофизическое обоснование

*Сорока Б.С., Кудрявцев В.С., Карабчиевская Р.С.*

*Институт газа НАН Украины, Киев*

Предложена методология и процедуры ее реализации, а также программные продукты для расчета энергетической эффективности использования топливо-окислительных смесей произвольного состава. «Идеальная печь» принята как модельный объект, где в качестве теплоносителя рассматривается смесь равновесных продуктов сгорания, уровень рабочих температур оценивается температурой уходящих газов  $T_{fl}$ , а критериями совершенства являются энтальпийные КПД использования топлива  $\eta_f$  и теплоты  $\eta_H$ . Учтено образование конденсированной фазы (воды и сажистых частиц) при стандартной температуре  $T_0 = 298,15$  К, а также по мере приближения температуры  $T_{fl}$  к  $T_0$ .

**Ключевые слова:** анализ и расчет термодинамического равновесия, идеальная печь, теоретическая температура горения, удельная полная энтальпия, эффективность использования топлива.

Запропоновано методологію та процедури її реалізації, а також програмні продукти для розрахунку енергетичної ефективності використання паливо-окислювальних сумішей довільного складу. «Ідеальна піч» прийнята як модельний об'єкт, де як теплоносії розглядається суміш рівноважних продуктів згорання, рівень робочих температур оцінюється температурою викидних газів  $T_{fl}$ , а критеріями досконалості є ентальпійні ККД використання палива  $\eta_f$  та теплоти  $\eta_H$ . Враховано утворення конденсованої фази (води та сажистих часток) при стандартній температурі  $T_0 = 298,15$  К, а також по мірі наближення температури  $T_{fl}$  до  $T_0$ .

**Ключові слова:** аналіз та розрахунок термодинамічної рівноваги, ідеальна піч, теоретична температура горіння, питома повна ентальпія, ефективність використання палива.

Математическое и компьютерное моделирование является основным научным инструментом прогнозирования эффективности использования тепловой энергии и топлива. Это особенно важно для случаев оценки возможностей экономии энергоресурсов при утилизации теплоты и замещении дефицитных видов топлива (углеводородов: природного газа, нефтепродуктов) технологическими газами, биотопливом и продуктами их переработки, а также при использовании топливных смесей в условиях обогащения окислителя кислородом.

В [1] предлагается определение физического моделирования как «замены изучения некоторого объекта или явления экспериментальным исследованием его модели, которая имеет ту же физическую природу». Развивая соответствующий подход, следует понимать под математическим моделированием процесса анализ математических выражений, которые описывают свойства физического явления или объекта. Значимость моделирования возрастает в современных условиях, когда затраты на создание физического объекта не соизмеримы с моделированием виртуальным, которое обеспечивается применением компьютерных технологий.

Основу анализа эффективности использования энергии топлива представляет расчет равновесного состояния продуктов горения топливо-окислительных смесей разного состава с определением покомпонентного состава продуктов сгорания и их свойств: термодинамических и теплофизических транспортных, переносных [2–4].

Результаты расчетов, представленные в этой работе, выполнены с применением оригинального программного продукта «FUEL», разработанного в Институте газа под руководством проф. Б.С.Сороки, и частично проходили тестирование по разным литературным источникам, а также по результатам аналогичных расчетов, выполненных с привлечением компьютерной программы «TERRA» (Россия), разработанной в МВТУ им. Баумана проф. Б.Г.Трусовым [5].

## 1. Энергетическая эффективность использования топлива в печах с учетом утилизации теплоты

### 1.1. Тепловой баланс «идеальной печи»

При выполнении расчетов энергоэффективности топливоиспользующих агрегатов принимается их схематизация моделью «идеальной печи» [6]. Под «идеальной печью» понимается топочная или печная камера, в которой отсутствуют обычные статьи тепловых потерь  $i$  ( $i = 1,$

$2, \dots, N$ ). Единственными потерями теплоты, связанными с «идеальной печью», являются потери с отходящими газами ( $i = N + 1$ ).

Для проведения расчетов, как правило, вводятся следующие упрощающие допущения относительно «идеальной» печи: а) в печи происходит скачкообразное изменение температур от  $T_T$  к  $T_g$ ; б) величина коэффициента теплоотдачи от продуктов сгорания к теплоприемнику бесконечно большая, вследствие чего  $T_M \rightarrow T_g$ , то есть разность температур теплоприемника  $T_M$  и теплоносителя  $T_g$  практически отсутствует:  $T_g - T_M \rightarrow 0$ ; в) печь (или зона печи) является реактором перемешивания, то есть градиенты температур в ней отсутствуют и  $T_g \rightarrow T_{fl}$ , причем в этих условиях  $T_{fl}$  является оценкой «температуры печи» и принимает значение, соответствующее (равное) технологической температуре.

Такая упрощенная модель подходит и для прогноза образования  $NO_x$  по термическому механизму Зельдовича—Боумена, так как оксиды азота образуются на пике температур, а потом их последующее образование экспоненциально убывает с понижением локальных температур в факеле или топочной камере [7].

Проблемы сокращения затрат топлива должны решаться одновременно за счет совершенствования технологии тепловой обработки материалов и создания новых технологий, с одной стороны, интенсификации тепломассообменных процессов при сжигании с минимизацией разных статей тепловых потерь внутри топочного пространства и утилизацией (рекуперацией, регенерацией) теплоты выбросных газов как внутри, так и вне рабочего пространства печи, с другой стороны. Наконец, современные тенденции ресурсосбережения в значительной мере определяются сокращением затрат ценного органического топлива (природного газа прежде всего) технологическими газами (в зависимости от производства, например, в металлургии — коксовым, доменным, конверторным и др.), а также топливом местного или биологического происхождения.

Благодаря такому подходу удается свести все расчеты к операциям с характеристиками теплоносителя — продуктов сгорания при характерных температурах: теоретической (адиабатной)  $T_T$  и на выходе из топки (печи)  $T_{fl}$ , — не прибегая к оценкам состояния теплоприемников (котельных секций, экранов, нагреваемых изделий в печах и т.п.) и анализа тепловых потерь. Если для реальной печи с предварительным подогревом окислителя, в частности, воздуха горения тепловой баланс в терминах полных энталь-

пий, которые учитывают стандартные энтальпии образования веществ из элементов [8], имеет вид:

$$\dot{Q}_{use} + \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{loss,i} = B_f [\Delta H_f^* + (\alpha L_{st} \frac{M_{ox}}{M_f} I_{ox}) - \dot{m}_g I_{g,fl} = \dot{m}_g (I_{g,T} - I_{g,fl}), \quad (1)$$

то для «идеальной печи»:

$$\dot{Q}_{use} = \dot{m}_g (I_{g,T} - I_{g,fl}) = B_f (1 + \alpha L_{st} \frac{M_{ox}}{M_f}) (I_{g,T} - I_{g,fl}), \quad (2)$$

$$\dot{Q}_{loss,i} = 0 (i \neq N+1); \quad \sum_{i=1}^N \dot{Q}_{loss,i} = 0. \quad (3)$$

### 1.2. КПД использования топлива $\eta_f$ и теплоты $\eta_H$ для случаев «идеальной печи»

КПД процесса тепловой обработки определяется через разность полных энтальпий теплоносителя (или их избыточных значений): при теоретической температуре горения  $T_T$  и температуре на выходе из агрегата  $T_{fl}$ :

$$\eta_f = (I_{f,T} - I_{f,fl}) / (I_{f,T}^* - I_{f,0}^*); \quad (4)$$

$$\eta_H = (I_{g,T} - I_{g,fl}) / (I_{g,T} - I_{g,0}). \quad (5)$$

При этом для упрощения рассмотрения процессов в «идеальной печи» предполагается, что печь представляет реактор перемешивания с единой характерной температурой продуктов сгорания, которая не отличается от температуры выбросных газов в выходном сечении печи  $T_{fl}$ .

В условиях варьирования избытка окислителя  $\alpha$  по отношению к сжиганию стехиометрической смеси горючего с окислителем КПД уменьшается:

$$\eta_f \equiv \eta_f^{id,\alpha} = \dot{Q}_{use} / B_f \Delta H_f^* = [(1 + \alpha L_{st} M_{ox} / M_f) (I_{g,T} - I_{g,fl})] / [(1 + L_{st} M_a / M_f) \Delta H_f^*]. \quad (6)$$

Тогда изменение затрат топлива, вызванное при фиксированном горючем изменением состава топливо-окислительной смеси (коэффициента избытка окислителя  $\alpha$  и обогащения его кислородом), а также параметров (температуры топлива и прежде всего окислителя, в частности, воздуха), может быть найдено через изменение КПД  $\eta_f$  в условиях, которые рассматриваются и в базовом  $\eta_f^*$  случае:

$$\delta B_f = [(\eta_f / \eta_f^*) - 1] \cdot 100 \%. \quad (7)$$

Из приведенных формул следует, что основным параметром, который определяет потребные затраты топлива и его изменение, является состав и полная энтальпия равновесных продуктов сгорания.

В работе [9] изложена методология определения эффективности использования топлива, реализованная на базе компьютерной программы «FUEL», разработанной в Институте газа под руководством проф. Б.С.Сороки. Все расчеты выполняются с использованием полной энтальпии теплоносителя – продуктов сгорания оцениваемой топливо-окислительной смеси.

### 1.3. Совместное рассмотрение системы «печь – рекуператор»

В отличие от предложенной методологии [9, 10] традиционный подход оценки КПД состоит в использовании располагаемой энергии в некоторых контрольных сечениях.

Данные из работы [11] получены по зависимости:

$$\eta_f = Q_0 / P_A = (P_B - P_E) / P_A = (P_A + Q_V - P_E) / P_A = 1 - (P_S / P_A). \quad (8)$$

Выражение (8) показывает, что анализ КПД использования топлива может быть проведен двояко:

1) при рассмотрении в качестве системы именно топливоиспользующего агрегата – печи. В этом случае подведенная энергия определяется как теплотой сгорания топлива  $P_A$ , так и теплотой  $Q_V$ , аккумулированной горячим воздухом (утилизированная из печи теплота). Энергия на выходе из системы (печи)  $P_E$ ; полезно потребленная энергия для идеальной печи при этом

$$Q_0 = P_A + Q_V - P_E; \quad (9)$$

2) при рассмотрении системы «печь – утилизатор теплоты (рекуператор)» в целом. В этом случае внешней относительно системы (энергии, подведенной к системе) выступает теплота сгорания топлива, а на выходе система характеризуется энергией за рекуператором  $P_S$ . Полезно потребленная энергия в рассмотренной постановке  $P_A - P_S$ ;

Наш анализ позволил определить составляющие этого выражения при рассмотрении энергетического баланса идеальной системы: печь – утилизатор теплоты (рекуперативный подогреватель воздуха горения), представленные на рис.1. Здесь  $Q_0$  – полезная теплота, переданная в печи теплоприемнику;  $P_A$  – подведенная в печь тепловая энергия сжигания топлива;  $P_B$  –

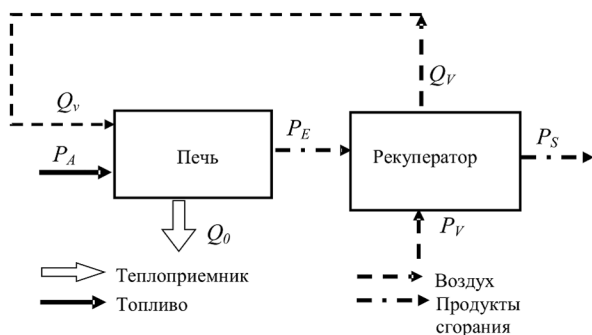


Рис.1. Схема идеальной системы «печь — рекуператор» для оценки энергетической эффективности использования топлива.

полная тепловая энергия, которая отводится из печи,  $P_B = P_E + Q_0$ . Поток теплоты  $P_B$  может быть представлен через энергию, введенную в печь с топливом  $P_A$  и воздухом  $Q_V$ , подогретым в рекуператоре,  $P_B = P_A + Q_V$ ;  $P_E$  — энергия теплоносителя (полная энтальпия топливо-воздушной смеси) на выходе из печи и входе в рекуператор (предполагается отсутствие тепловых потерь — адиабатность воздушного тракта);  $P_S$  — энергия теплоносителя (энтальпия продуктов сгорания) на выходе из рекуператора,  $P_S = P_E - Q_V$ ;  $P_V$  — исходная энергия потока воздуха.

## 2. Термодинамические расчеты состава и свойств продуктов сгорания

### 2.1. Универсальный программный комплекс «FUEL»

Программа предназначена для расчета состава и термодинамических свойств равновесных продуктов химических реакций, в том числе продуктов сгорания разных органических или технологических топлив, топливных смесей и окислителей, образованных пятью элементами: С, Н, N, О, S. Число возможных компонентов в равновесной смеси продуктов — свыше 100.

Состав исходной смеси может быть задан массовыми или объемными долями отдельных компонентов или элементов, а также относительными тепловыми частями отдельных групп горючих. Рассмотренные исходные компоненты (топливо, окислитель) могут быть газообразные, твердофазные, жидкофазные или их смеси. Равновесные смеси, которые рассчитываются, могут быть гомо- и гетерофазными в зависимости от состава исходной смеси и заданной температуры. Диапазон расчетных температур 298–6000 К.

**Решаемые задачи.** В рамках задачи определения состава продуктов химической реакции могут рассчитываться условия выпадения

конденсированной (твердой, жидкой) фазы из газовой смеси, массовая часть конденсированной фазы, температуры точки росы, паро- и влагосодержание газовых смесей.

По заданному составу горючей смеси, одно- или многофазной, определяется теоретическая (адиабатная) температура горения  $T_T$  с учетом диссоциации продуктов.

При произвольных (задаваемых) температурах, давлениях, а также для теоретических температур горения определяются следующие свойства равновесных смесей продуктов:

#### Термодинамические

|       |  |
|-------|--|
| $v$   | — удельный объем, м <sup>3</sup> /кг               |
| $I$   | — энтальпия, кДж/кг                                |
| $S$   | — энтропия, кДж/(кг·К)                             |
| $M$   | — молекулярная масса вещества, кг/моль             |
| $C_p$ | — теплоемкость при постоянном давлении, кДж/(кг·К) |
| $A$   | — скорость звука, м/с                              |
| $k$   | — показатель адиабаты                              |
| $R$   | — газовая постоянная, кДж/(кг·К)                   |

#### Теплофизические

|            |  |
|------------|--|
| $\nu$      | — кинематическая вязкость, м <sup>2</sup> /с                 |
| $\mu$      | — динамическая вязкость, Па·с                                |
| $\lambda$  | — коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К)                     |
| $a$        | — коэффициент температуропроводности, м <sup>2</sup> /с      |
| $\epsilon$ | — излучательная способность (степень черноты) слоя продуктов |
| $d_p$      | — точка росы, К  |

### 2.2. Программа термодинамического расчета состава фаз произвольных гетерогенных систем, их термодинамических и транспортных свойств — «TERRA»

Программа предназначена для моделирования предельно равновесных состояний сложных систем. Используемый метод расчета не позволяет находить «траекторию» (кинетику) перехода к равновесному состоянию. Поэтому в качестве исходных данных, однозначно определяющих химический состав системы после реакции, достаточно задать только массовое содержание химических элементов.

Программа сопряжена с большой базой данных свойств индивидуальных веществ, что делает ее пригодной для исследования произвольных по химическому составу композиций.

Предельное число химических элементов, из которых может состоять исследуемая система, равняется двадцати пяти, а число компонентов фаз, которые образуются в равновесии (число индивидуальных веществ) может достигать пятисот.

### 3. Использование различных топливо-окислительных смесей

Определение энергетической эффективности использования топлива в случае его нестехиометрического сжигания, в частности, когда в качестве теплоносителя выступают продукты неполного сгорания в технологических процессах, можно проводить на базе положений равновесной термодинамики [5, 12].

Определяющим параметром при проведении расчетов энергетической эффективности топливоиспользующих процессов и агрегатов является полная энтальпия теплоносителя — продуктов сгорания. Как представительные величины рассматриваются полные энтальпии 1 кг продуктов сгорания  $I_g(T)$  топливной смеси заданного состава или полные энтальпии продуктов сгорания 1 кг топлива  $I_f(T)$  для анализируемых смесей (рис.2).

#### 3.1. Методология оценки энергетической эффективности

В случае процессов, которые протекают при постоянном давлении  $p = \text{const}$ , мерой уровня энергетического состояния системы является ее энтальпия (полная энтальпия  $I$ , учитывающая энергию образования веществ из химических элементов [2, 6]).

В закрытой адиабатической системе ( $\delta Q = 0$ ) при  $p = \text{const}$  первый закон термодинамики (сохранения энергии) дает  $dI = 0$  [8]. При этом оценку эффективности использования потенциала теплоносителя можно проводить по аналогии с расчетом КПД идеального цикла Карно:

$$\eta^{\text{id},\alpha} = \eta_H = 1 - (\Delta I_{g,\text{fl}}^\alpha / \Delta I_{g,\text{T}}^\alpha). \quad (10)$$

В нашем случае  $\Delta I_g^\alpha = I_g(T) - I_g(T_0)$  — располагаемая энергия — избыточная энтальпия 1 кг теплоносителя (продуктов сгорания топлива при заданном коэффициенте его избытка  $\alpha$  и температуре  $T_{\text{fl}} \leq T \leq T_{\text{T}}$ ) по отношению к таковой при базовой температуре  $T_0$ . При этом  $\alpha = 1,0$  отвечает стехиометрическому соотношению горючее : окислитель;  $\alpha > 1,0$  отвечает обедненной смеси;  $\alpha < 1,0$  — богатой смеси.

В случае принятия допущения об «идеальной печи» как объекте проведения исследуемого процесса предполагается отсутствие иных потерь энергии, кроме потерь с уходящими продуктами сгорания  $\Delta I_{g,\text{fl}}$ .

Если печь рассматривается как реактор идеального перемешивания, то процесс характеризуется единой температурой  $T_{\text{fl}} = \text{idem}$  по всему объему рабочего пространства и на выходе из печи. Величина в знаменателе правой час-

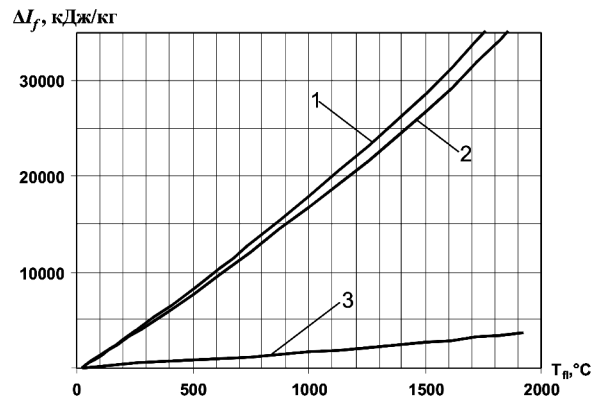


Рис.2. Зависимость от температуры полной избыточной энтальпии стехиометрической смеси равновесных продуктов сгорания 1 кг топлива или исходной топливо-воздушной смеси для 1 кг топлива: 1 — природный газ L; 2 — коксовый газ; 3 — доменный газ.

ти уравнения (10) — максимальная располагаемая энергия. В соответствии с представлением Карно о КПД обратимого теплового двигателя упомянутая величина составляет меру количества теплоты, поглощенной из горячего источника (отданного горячим источником) [13].

В этой работе знаменатель представлен тепловым эффектом реакции, избыточной энтальпией продуктов сгорания при теоретической температуре горения.

С другой стороны, для обобщения данных по эффективности использования топлива при варьировании избытка окислителя ( $\alpha = \text{var}$ ) целесообразно энергию, использованную в топливном агрегате (котле, печи и других тепловых системах), относить к максимальной располагаемой энергии — теплоте сгорания  $Q_{\text{сг}}$  стехиометрической ( $\alpha = 1,0$ ) смеси, взятой при базовой температуре  $T_0$ :

$$Q_{\text{сг}}^{\text{max}} = \Delta I_{f,\text{T}^*}^\alpha = \Delta I_{f,\text{T}^*}^{\alpha=1,0}. \quad (11)$$

В дальнейшем нужно разделить рассмотренные  $Q_{\text{сг}}$  как величин, которые соответствуют высшей  $Q_{\text{P}_\text{в}}$  или низшей  $Q_{\text{P}_\text{н}}$  теплоте сгорания (в зависимости от избранного состояния  $\text{H}_2\text{O}$  в продуктах сгорания) соответственно с учетом реального (конденсированного) состояния воды при  $T_0$  или при принятии  $\text{H}_2\text{O}$  в виде пара.

Для случаев «идеальной печи» в условиях варьирования  $\alpha$  КПД использования топлива  $\eta_f$  с учетом выражения (10):

$$\eta_f = \eta^{\text{id},\alpha} = (\Delta I_{g,\text{T}}^\alpha - \Delta I_{g,\text{fl}}^\alpha) / \Delta I_{g,\text{T}^*}^\alpha. \quad (12)$$

$$\eta^{\text{id},\alpha} = \eta^{\text{id},\alpha} (\Delta I_{g,\text{T}}^\alpha / \Delta I_{g,\text{T}^*}^\alpha). \quad (13)$$

Разумеется,  $\Delta I_{g,\text{T}}^\alpha < \Delta I_{g,\text{T}^*}^\alpha$  в случае  $\alpha < 1,0$  вследствие химического недожога топлива, сле-

довательно, происходит недоиспользование его потенциальной энергии. По этой причине

$$\eta_{*id,\alpha} < \eta_{id,\alpha}. \quad (14)$$

В случае  $\alpha > 1,0$  будет  $\Delta I_{g,T} < \Delta I_{g,T}^*$  вследствие разбавления продуктов сгорания избыточным окислителем, что приводит также к  $\eta_{*id,\alpha} < \eta_{id,\alpha}$ .

При  $\alpha = 1,0$  будет  $\eta_{id,\alpha=1,0} \equiv \eta_{*id,\alpha=1,0}$ , а  $\eta_{*id,\alpha=1,0}$  является максимальным из возможных значений КПД  $\eta^*$  при варьировании  $\alpha \geq 1,0$ .

В этом случае избыточная энтальпия  $\Delta I_{g,T}^*$  принимается по аналогии с понятием  $Q_{P_H}^*$  — низшей теплотой сгорания. Различие между  $Q_{P_H}^*$  и  $\Delta I_{g,T}^*$  заключается в том, что первая величина касается 1 кг топлива (горючего), вторая — 1 кг продуктов сгорания. Величина  $\Delta I_{g,T}^*$  оценивается по разности энтальпий единицы массы (1 кг) реагирующей смеси (соответственно исходных компонентов и равновесных продуктов сгорания в газовой фазе без конденсации, взятых при  $\alpha = 1,0$ ) при  $T_0$ . Связь между рассмотренными величинами, согласно определению, следующая:

$$Q_{P_H}^* \approx [1 + (L_{st} M_{ox}/M_f)] \Delta I_{g,T}^*, \quad (15)$$

где  $M_{ox}$ ,  $M_f$  — соответственно молекулярные массы окислителя и топлива (горючего).

Поскольку  $Q_{P_H}^*$  предполагает рассмотрение теплового эффекта сгорания топливо-окислительной смеси при учете энергии  $H_2O$  (пар), а при базовой (стандартной) температуре  $T_0 = 298,15$  К в равновесных продуктах сгорания  $H_2O$  преимущественно находится в жидкой фазе, для оценки  $\Delta I_{g,T}^*$  при  $\alpha = 1,0$  и  $\Delta I_{g,T}$  при  $\alpha \neq 1,0$  используется следующий прием. Рассчитываются равновесные процессы и энтальпии  $I_g$  при температурах  $T_{min}$ , слегка превосходящих температуру точки росы и кипения воды; для упрощения принимаем температуру выше  $100$  °С равной  $373$  К. По энтальпиям при этих температурах  $I_g(T_{min})$  проводится интерполяция значений  $I_g$  на температуру  $T_0$ :

$$I_g(T_0) = I_{g,0} = I_g(T_{min}) - \Delta I_g^{gas}(T_{min}). \quad (16)$$

Практически процедура выполняется таким образом:

$$\Delta I_g^{gas} = \frac{dI_g^{gas}}{dT_g^{gas}}(T_{min}^{gas} - T_0). \quad (17)$$

Для отыскания производной для равновесных продуктов сгорания используем приближенный переход к конечным приращениям:

$$\frac{dI_g^{gas}}{dT_g^{gas}} \approx \frac{\Delta I_g^{gas}}{\Delta T_g^{gas}} = \frac{I_g^{gas}(T_{min,1}^{gas}) - I_g^{gas}(T_{min,2}^{gas})}{dT_{min,1}^{gas} - dT_{min,2}^{gas}}. \quad (18)$$

Изложенная выше методика была реализована при расчете эффективности использования природного и других газов в условиях варьирования коэффициента избытка воздуха  $\alpha$ , температуры его подогрева  $T_a$  для процессов с разным уровнем технологических температур  $T_{fl}$  [14].

### 3.2. Образование дисперсной фазы

Из методики, изложенной выше, следует, что определение любых энергетических характеристик горения топлива (теплоты сгорания, КПД) связано с оценкой состояния продуктов сгорания при характерных температурах ( $T_T$ ,  $T_{fl}$ ) по отношению к базовому состоянию при стандартных условиях ( $T_0 = 298,15$  К). Энтальпия продуктов при  $T_0$  зависит от их равновесного состава. При указанной температуре происходит существенная конденсация паров воды (например, при сжигании природного газа  $T_0$  во всем диапазоне варьирования  $\alpha$  ниже точки росы продуктов сгорания [15]. Учет конденсации паров производится введением понятий о высшей  $Q_{P_B}^*$  и низшей  $Q_{P_H}^*$  теплоте сгорания (см. выражения (11) и (15)).

Помимо этого, в случае сжигания углеводородного топлива при понижении температуры продуктов сгорания увеличивается вероятность появления дисперсного углерода (частичек сажи) в составе равновесных продуктов.

Образование твердой фазы (обычно сажистого углерода С) при сжигании газообразного топлива может иметь место в случае предварительно перемешанных смесей и в диффузионном пламени. В первом случае, как правило, это имеет место при существенном недостатке окислителя (коэффициент избытка окислителя  $\alpha \ll 1,0$ ), а во втором может происходить в отдельных локализациях с низким содержанием  $O_2$  при общем стехиометрическом или даже избыточном ( $\alpha \geq 1,0$ ) вводе окислителя через горелку.

Образование сажи при горении газообразных углеводородов, в том числе в условиях рециркуляции продуктов сгорания [10], и их конверсии (воздушной, кислородной, паровой, углекислотной или смешанной) является сугубо кинетическим процессом и развивается во времени. Такой процесс зависит от локального состава реагирующей смеси и температуры. Если к этому добавить указания на то, что образование сажи требует значительного времени ( $\tau > 10^{-4}$  с для предвестников и зародышей сажи

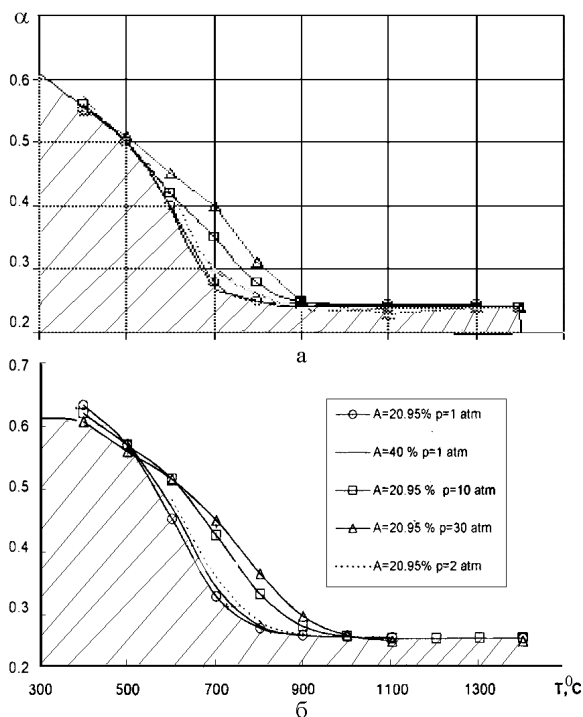
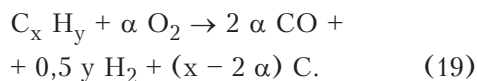


Рис.3. Область сажеобразования (заштрихована) в координатах  $T - \alpha$  при сжигании смесей природного газа с азотодородными окислителями. Расчет: а – с использованием программы «FUEL»; б – по упрощенной модели на 7 компонент в продуктах сгорания.

[16]), то термодинамическое описание ( $\tau \rightarrow \infty$ ) является первым, однако необходимым приближением математической модели процесса.

Термодинамический анализ позволяет оценить влияние состава смеси и режимных параметров (температура, давление) на равновесное содержание  $C$  в продуктах реакции.

Первичная оценка появления углерода в продуктах горения углеводородов в условиях недостатка окислителя может быть проведена с использованием брутто-реакции:



В монографии [8], исходя из рассмотрения этой реакции, указывается на то, что соотношение  $x > 2 \alpha$  или отношение числа грамм-атомов  $C/O > 1$  является условием появления сажи в продуктах реакции. Признавая оценочный характер этого условия, нельзя согласиться с высказанным в [8] соображением о том, что подтверждение или неподтверждение этого соотношения в эксперименте является свидетельством соответственно термодинамической или кинетической природы образования сажистых частиц при горении.

В работе [8] приведена сводка измеренных пределов сажеобразования для некоторых случаев: бунзеновской горелки, реактора идеального перемешивания и плоского пламени – для давлений 1 и 26 мбар при температуре 1800 К. В этом обобщении показано, что в опытах отмечалось соотношение  $C/O = 0,42-0,95$  в качестве предельного для образования сажи, то есть фиксировалась величина меньше 1. Это дает основание утверждать, что процесс сажеобразования определяется кинетическими факторами [8].

На наш взгляд, этот вывод представляется необоснованно абсолютизированным. Уравнение неполного горения углеводородов (19) является чрезвычайно ограниченным (сами авторы [8] указывают на его формальный характер), не учитывающий попутного образования множества других компонент: промежуточных (важнейшие из них в соответствии с термодинамическими расчетами –  $NH_3, C_2H_2, C_2H_6$ ), а также продуктов завершеного горения ( $CO_2, H_2O$ ) [1, 4].

При этом даже термодинамический состав равновесных продуктов, включая сажистые частицы, может быть различным, ибо зависит от температуры и давления процесса, а также от выбора адекватного набора компонент в смеси продуктов реакции и метода численного решения системы уравнений равновесия.

Расчетная область сажеобразования и ее граница в координатах «температура процесса  $T$  – коэффициент избытка окислителя  $\alpha$ » при сжигании смесей  $CH_4 - O_2 - N_2$  представлена на рис.3 по результатам наших расчетов с использованием программы «FUEL» на сотни компонент, разработанной под руководством автора и нашей упрощенной методики. Установлено, что  $\alpha \approx 0,25$  соответствует максимальному значению  $\alpha$ , вызывающему сажеобразование при температурах выше 800 °С. Чем ниже температура, тем выше значение  $\alpha$  для области сажеобразования в условиях термодинамического равновесия.

С точки зрения термодинамики при повышении температуры отмечаются две противоположные тенденции: увеличение выхода  $C$  с ростом температуры в процессе термического крекинга и снижение сажеобразования при этом для реакций окисления богатых смесей природного газа с малыми  $\alpha$ .

Реакция разложения  $CH_4$  с образованием  $C$  нарастает с температурой, асимптотически стремясь к предельной концентрации  $[C] \sim 75\%$  (мас.). По мере увеличения доли окислителя при смешивании с воздухом  $CH_4$  и последующем сжигании про-

исходит переход от нарастания доли С (сажи) с повышением температуры к существенному падению, вплоть до практического исчезновения твердой фазы. Уровень выбранных температур  $T = 573\text{--}1773\text{ К}$  в диапазоне  $\alpha = 0,1\text{--}0,2$  предполагает использование внешнего источника энергии. В области  $\alpha \leq 0,12$  содержание сажи возрастает с температурой, при  $\alpha \geq 0,14$  с повышением  $T$  доля [С] снижается до определенного уровня, где слабо зависит от температуры (конечная сажа). При этом доля упомянутой термодинамически равновесной сажи с повышением  $\alpha \geq 0,14$  понижается [17].

### 3.3. Оценка надежности результатов расчетов с использованием программного продукта «FUEL»

Для оценки программного продукта «FUEL» полученные с его помощью результаты сопоставим с таковыми, найденными другими средствами. Расчеты проводились относительно использования европейского природного газа Holland L. Природный газ Holland-Erdgas L имеет следующий состав [18], % (об.):  $\text{CO}_2$  —

1,71;  $\text{N}_2$  — 10,11;  $\text{O}_2 < 0,01$ ;  $\text{CH}_4$  — 83,08;  $\text{C}_2\text{H}_6$  — 3,97;  $\text{C}_3\text{H}_8$  — 0,81;  $\text{C}_4\text{H}_{10}$  — 0,22;  $\text{C}_5\text{H}_{12}$  — 0,06;  $(\text{C}_6^+)$  — 0,04.

В табл.1 приведены составы равновесных продуктов сгорания природного газа Holland L [18] при разных температурах и коэффициентах избытка воздуха  $\alpha$ , которые получены с использованием программных продуктов «FUEL» и «TERRA». Анализ результатов, приведенных в табл.1, свидетельствует о хорошем совпадении состава равновесных продуктов при их расчете с использованием программ «FUEL» и «TERRA». Для компонентов с концентрацией меньше 1 % абсолютное расхождение составляет 0,05–0,10 %, с концентрацией меньше 20 % — 0,05–0,70 %, для  $\text{N}_2$  — не превышает 1 %.

В табл.2 приведены результаты расчета теоретических температур горения  $T_T$  разных топливных смесей с окислителями при температуре исходной смеси 298,15 К и  $\alpha = 1,0$ , полученные с помощью программ «FUEL» и «TERRA». Эти результаты сопоставлены с литературными данными из работы [8]. Расхождения не превышают 0,8 % (отн.), что указыва-

**Таблица 1. Состав равновесных продуктов сгорания в зависимости от температуры**

| Компонент, % (об.)  | 378 К (105 °С) | 573 К (300 °С) | 773 К (500 °С) | 2198 К (1925 °С) |
|---------------------|----------------|----------------|----------------|------------------|
| При $\alpha = 1,05$ |                |                |                |                  |
| H                   | —/—            | —/—            | —/—            | 0,023/0,023      |
| H <sub>2</sub>      | —/—            | —/—            | —/—            | 0,181/0,16       |
| H <sub>2</sub> O    | 17,46/17,66    | 17,46/17,65    | 17,46/17,66    | 17,03/17,24      |
| N <sub>2</sub>      | 72,22/71,74    | 72,22/71,74    | 72,22/71,74    | 71,76/71,28      |
| O <sub>2</sub>      | 0,98/1,28      | 0,98/1,2       | 0,98/1,28      | 1,08/1,34        |
| CO                  | —/—            | —/—            | —/—            | 0,50/0,45        |
| CO <sub>2</sub>     | 9,34/9,32      | 9,34/9,32      | 9,34/9,31      | 8,80/8,83        |
| При $\alpha = 0,70$ |                |                |                |                  |
| H                   | —/—            | —/—            | —/—            | 0,14/0,13        |
| H <sub>2</sub>      | 0,012/0,012    | 1,27/1,27      | 9,17/9,06      | 6,01/0,16        |
| H <sub>2</sub> O    | 21,40/21,92    | 16,61/17,24    | 12,57/13,20    | 17,06/17,74      |
| NO                  | —/—            | —/—            | —/—            | 0,0083/0,0085    |
| N <sub>2</sub>      | 69,28/68,69    | 69,22/68,25    | 65,61/65,10    | 64,33/63,98      |
| O                   | —/—            | —/—            | —/—            | 0,00083/0,0009   |
| CO                  | —/—            | 0,18/0,18      | 1,46/1,39      | 4,33/4,59        |
| CO <sub>2</sub>     | 7,52/7,69      | 9,80/9,94      | 10,25/10,41    | 8,80/8,83        |
| При $\alpha = 1,30$ |                |                |                |                  |
| H                   | —/—            | —/—            | —/—            | 0,015/0,056      |
| H <sub>2</sub>      | —/—            | —/—            | —/—            | 0,075/0,074      |
| H <sub>2</sub> O    | 14,37/14,54    | 14,37/14,54    | 14,37/14,54    | 14,05/14,22      |
| NO                  | —/—            | —/—            | —/—            | 0,0083/0,0085    |
| N <sub>2</sub>      | 73,43/73,00    | 73,43/73,00    | 73,42/73,00    | 72,95/72,50      |
| O <sub>2</sub>      | 4,50/4,80      | 4,50/4,79      | 4,50/4,78      | 4,24/4,51        |
| CO                  | —/—            | —/—            | —/—            | 0,21/0,21        |
| CO <sub>2</sub>     | 7,69/7,67      | 7,69/7,67      | 7,69/7,67      | 7,45/7,44        |

*Примечание.* В числителе — «FUEL», в знаменателе — «TERRA». При  $\alpha = 0,70$  и 378 К присутствует углерод в форме сажи в количестве 0,0178 кг/кг смеси.



**Таблица 2. Теоретические температуры  $T_T$  горения топливо-окислительных смесей**

| Источник | $H_2$ /воз-<br>дух | $H_2/O_2$ | $CH_4$ /воз-<br>дух | $C_2H_2$ /воз-<br>дух |
|----------|--------------------|-----------|---------------------|-----------------------|
| «FUEL»   | 2375               | 3079      | 2221                | 2537                  |
| «TERRA»  | 2385               | 3079      | 2225                | 2543                  |
| [8]      | 2380               | 3083      | 2222                | 2523                  |

ет на замечательное соответствие математических моделей, реализованных в алгоритме обеих программ.

### Выводы

Предлагается использовать теорему Карно для химически реагирующей системы при определении КПД использования топлива  $\eta_f$  и теплоты  $\eta_H$  в печной или топочной камере, в том числе при использовании системы утилизации теплоты продуктов.

Установлено, что характерной величиной при выполнении расчетов является удельная избыточная полная энтальпия 1 кг равновесных продуктов сгорания  $\Delta I_g$  или продуктов сгорания 1 кг топлива  $\Delta I_f$  при теоретической температуре горения  $T_T$  (верхний потенциал) и при температуре уходящих продуктов сгорания  $T_{ff}$  (нижний потенциал).

Описана компьютерная программа «FUEL» для расчета составов и свойств термодинамически равноценных продуктов сгорания в системе элементов C–H–O–N–S, разработанная в Институте газа под руководством Б.С.Сороки. Проведена верификация программы по другим программным продуктам («TERRA») и литературным данным, доказывающая адекватность расчетов по программе «FUEL».

В связи с образованием веществ в конденсированной фазе (вода, частицы сажи) по мере понижения  $T_{ff}$  изучены пределы сажеобразования в координатах «коэффициент избытка воздуха  $\alpha$  — температура», а также предложена методика расчета высшей  $Q_{P_v}$  и низшей  $Q_{P_n}$  теплоты сгорания топлив с использованием программы «FUEL».

### Условные обозначения

|                    |   |
|--------------------|---|
| $V_f$              | – массовые затраты топлива, кг/ч  |
| $\Delta H_f^*$     | – тепловой эффект горения, кДж/кг   |
| $I_{ox}, I_g$      | – удельная полная энтальпия 1 кг окислителя и продуктов сгорания                            |
| $I_{st}$           | – объемный стехиометрический коэффициент окислитель/горючее, м <sup>3</sup> /м <sup>3</sup> |
| $\dot{m}_g$        | – массовый поток (затраты) продуктов сгорания, кг/ч   |
| $M$                | – молекулярная масса вещества   |
| $\dot{Q}_{loss,i}$ | – поток тепловых потерь i-го вида   |
| $\dot{Q}_{use}$    | – поток полезной теплоты, кДж/ч (или кДж/с $\equiv$ кВт)                                    |
| $\alpha$           | – коэффициент избытка окислителя  |

Индексы: a – воздух-окислитель, f – горючее (топливо), g – продукты сгорания, H – при оценке энергии (теплоты), M – приемная поверхность в печи, ox – окислитель, fl – при температуре на выходе из топки, T – при теоретической температуре горения, значок \* в верхнем или нижнем индексе соответствует равновесным продуктам сгорания стехиометрической топливо-воздушной смеси ( $\alpha = 1,0$ ), взятой при стандартных условиях ( $T_0 = 298,15$  К), либо по отношению к характеристикам такой смеси, 0 – база отсчета, стандартные условия ( $T_0, P = 0,1$  МПа).

### Список литературы

1. Тарг С.М., Вишневецкий С.Л., Арутюнов В.А. Моделирование // Физический энциклопедический словарь. – М.: Сов. энцикл., 1984. – С. 426–427.
2. Карп И.Н., Сорока Б.С., Дашевский Л.Н., Семернина С.Д. Продукты сгорания природного газа при высоких температурах (состав и термодинамические свойства). – Киев: Тэхника, 1967. – 382 с.
3. Piore L.S., Piore I.L., Kostyuk T.O., Soroka B.S. Industrial Application of Submerged Combustion Melters. – Kyiv: Fact Publ., 2006. – 240 p.
4. Soroka B., Sandor P. Simplified design method of efficiency's and NO<sub>x</sub> yield's evaluation at the industrial furnaces under replacement of type of combustible Gas // Proc. VII Intern. Sci. Conf. on Combustions and Heat Technics, Miscolc, May 27, 1998. – Miscolc: University of Miscolc, 1998. – P. 103–113.
5. Трусов Б.Г. «TERRA»: Программа термодинамического расчета состава фаз произвольных гетерогенных систем, а также их термодинамических и транспортных свойств. – М., 2002.
6. Сорока Б.С. Интенсификация тепловых процессов в топливных печах. – Киев: Наук. думка, 1993. – 416 с.
7. All-Halbouni A. Kontinuierliche Luftstufung: Ein neuer Weg zur Beherrschung des Verbrennungs- und Schadstoffverhaltens von Gasflammen // Gas Wärme. – 2000. – Н. 4/5 (49). – S. 207–212.
8. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение (физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ). – М.: Физмат, 2003. – 347 с.
9. Сорока Б.С., Кудрявцев В.С. Методология термодинамического анализа использования топлива с применением математического и компьютерного моделирования // Сб. тр. конф. «SIMULATION–2008», Киев, 14–16 мая 2008 г. – Киев: Ин-т проблем моделирования в энергетике НАН Украины, 2008. – Т. 1. – С. 337–343.
10. Сорока Б.С. Сжигание природного газа с недостатком окислителя. 3. Сажеобразование при сжигании газа в условиях, обеспечивающих пониженный выход NO<sub>x</sub> // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2005. – № 3. – С. 8–15.
11. Warmetechische Begriffe und Erlauterungen (Teil 4) // GASWARME Intern. – 2007. – Н. 6 (56). – S. 445–446.
12. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. / Под ред. акад. В.П.Глушко. – М.: Наука, 1978–1982.

13. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. — М. : Мир, 2002. — 461 с.
14. Сорока Б.С., Кудрявцев В.С. Методология термодинамического анализа с применением математического и компьютерного моделирования // 36. наук. пр. — Київ : Ін-т проблем моделювання в енергетиці НАН України, 2008. — Вип. 48. — С. 26–34.
15. Сорока Б.С. Методика расчета выпаривания жидкости при работе аппаратов погружного горения // Хим. технология. — 1992. — № 2. — С. 32–39.
16. Wishnick D., Smirnov V., Hobson B. et al. Development and commercialization of the next generation oxygen / fuel burner. — Chicago : Eclipse / Combustion Tec / Gas Technology Institute. — 2002. — 9 p.
17. Сорока Б.С. Сжигание природного газа с недостатком окислителя и сажеобразование. 2. Сажеобразование при базовых схемах сжигания газового топлива // Экологические и ресурсосбережение. — 2005. — № 1. — С. 9–19.
18. Warmetechnische Daten und Begriffe. Erdgas — Datenblatt // GASWARME Intern. — 2007. — H. 6 (56). — S. 444.

Поступила в редакцию 06.05.09

## Energy and Environmental Analysis of Fuel and Energy Utilization Efficiency by Means of Mathematical and Computer Modelling.

### 1. Calculation Procedure of Energy Efficiency Account and Thermal Physics Studying of the Technique

**Soroka B.S., Kudryavtsev V.S., Karabchievskaya R.S.**

*The Gas Institute of NASU, Kiev*

The methodology and the technique of implementation the procedures as well as appropriate computer codes for calculations of the energy efficiency of fuel – oxidant mixtures of arbitrary composition have been proposed. The model of «ideal furnace» has been assumed by evaluation the thermal process under fuel combustion. The mixture of equilibrium combustion products is considered as heat – transfer medium, level of process temperatures is represented by flue gases temperature  $T_{fl}$ , evaluation of perfection the thermal process is performed with enthalpy efficiencies of fuel  $\eta_f$  and heat  $\eta_H$  utilization. Formation of the components in condensed phase (of water and of soot particles) has been taken into account both at standard temperature  $T_0 = 298,15$  K and by process condition approaching from  $T_{fl}$  to  $T_0$ .

**Key words:** thermodynamic equilibrium analysis and computation, ideal furnace, theoretical combustion temperature, specific total enthalpy, fuel utilization efficiency.

Received May 6, 2009

Подписывайтесь на журнал  
**«Энерготехнологии и ресурсосбережение»** (индекс 74546)  
 на 2010 г. по Каталогу изданий Украины,  
 Каталогу Агентства «Роспечать»,  
 Сводному Каталогу агентства «УКРІНФОРМНАУКА» для  
 изданий, выпускаемых академиями наук — членами МААН

**Информацию о журнале  
 и правилах оформления статей можно найти на сайтах:**

<http://www.ingas.org.ua/index.files/Page765.htm>  
<http://www.nbu.gov.ua/portal/natural/ETRS/index.html>