

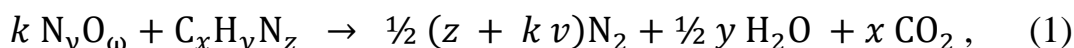
УДК 683.87

Д.Д. МЕДВЕДЕВ, аспирант (ДГТУ)  
А.С. СТЕПАНИЦЫН, студент гр. ВПМ31 (ДГТУ)  
Д.С. СУЛИМЕНКО, студент гр. ВПМ41 (ДГТУ)  
Д.С. ЦЫМБАЛОВ, аспирант (ДГТУ)  
Научный руководитель О.В. ЯЦЕНКО, к.ф.-м.н., доцент (ДГТУ)  
г. Ростов-на-Дону

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТОКСИЧНОСТИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ ГОРЕЛКИ МОЩНОСТЬЮ 1 МВт ДЛЯ АГРОПРОМЫШЛЕННОГО КОМПЛЕКСА

Спроектированное для обогрева тепличных хозяйств горелочное устройство (ГУ) тепловой мощностью 0.2-1 МВт должно обеспечивать минимальную токсичность дымовых газов (ДГ) во всех режимах эксплуатации [1]. Это достигается надлежащим расчетом и доводкой аэродинамики конструкции, систем топливоподачи, смесеобразования, поджига и управления. При этом технические испытания ГУ позволяют совершенствовать не только изделие и процесс, но также соответствующие информационные модели [2]. Таким образом, цель данного исследования – теоретически описать и экспериментально изучить образование токсичных веществ (ТВ) в ДГ разрабатываемого ГУ представляется актуальной.

**Математическая модель** стехиометрического сжигания топлива  $C_xH_yN_z$  в окислителе  $N_vO_\omega$  определяется химической реакцией



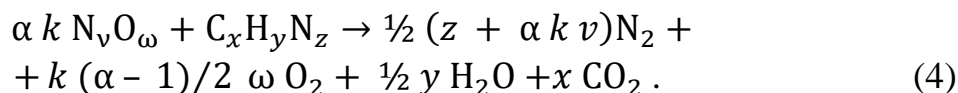
в котором  $k, x, y, z, v$  и  $\omega$  характеризуют химический состав реагентов (далее R) и продуктов (P).

Параметры модели (1) связаны материальными ограничениями вида:

$$x + y + z = 1 \quad \text{и} \quad v + \omega = 1, \quad (2)$$

$$k = (2x + \frac{1}{2}y) \cdot v^{-1}. \quad (3)$$

В типичных для промышленных ГУ условиях сжигания окислитель избыточен по сравнению со стехиометрическим значением с коэффициентом  $\alpha$  [1], что требует усложнить модель (1) до вида:



При качественной организации горения, схема которого приведена на рис. 1, состав ДГ ГУ близок к равновесному [3]. Это обстоятельство позволяет существенно упростить расчеты.

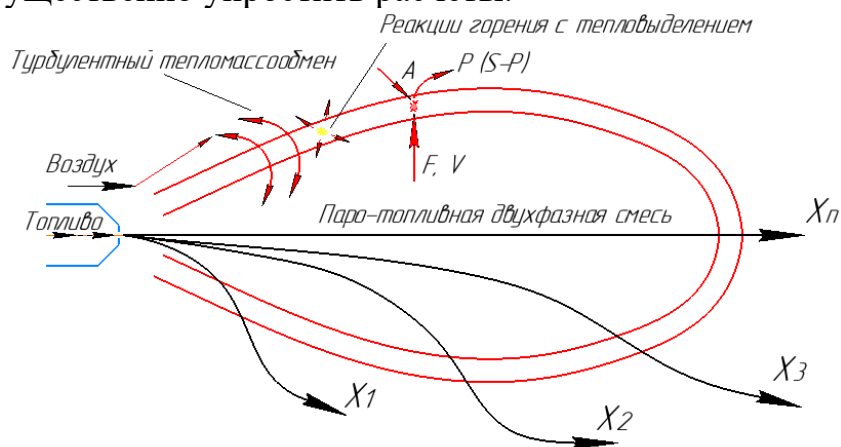


Рис. 1. Параметры горючей смеси в ГУ для АПК

При расчете равновесного состава важно корректно выбрать «химическое множество» – набор учитываемых в модели веществ. В него следует включить химически значимые при условиях реагирования вещества, а также вещества, опасные для биосферы. Одновременно этот набор должен быть минимален во избежание серьезных математических трудностей, связанных с жесткостью модельных уравнений.

Ограничим математическую модель следующими веществами:  $O_2$ ,  $O$ ,  $H_2$ ,  $H$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ ,  $H_2O_2$ ,  $HO_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $CH$ ,  $CH_2$ ,  $C$ ,  $N_2$ ,  $N$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O$ ,  $C_2N_2$  и  $HCN$ . Это рациональное ограничение номенклатуры, поскольку при качественной организации процесса сжигания в ГУ образующиеся ДГ не содержат высокомолекулярных веществ. Таким образом материальная схема процесса ограничивается двадцатью двумя веществами, а условия протекания превращений температурным диапазоном  $\sim 900-1500$  К при давлении 1 бар и степени избытка воздуха  $\alpha$  до уровня 1.3 [1].

Рассчитать равновесный химический состав можно двумя способами – непосредственной минимизацией термохимического потенциала (ТХП) и решением системы уравнений химического равновесия между отдельными веществами при соблюдении материального баланса и условий состояния газовой смеси. Недостаток первого метода обусловлен высокой размерностью результирующей системы и ее «жесткостью», что ведет к серьезным номенклатурным ограничениям исследуемых математических моделей. Второй метод (констант равновесия) оказывается в такой ситуации продуктивней, поскольку размерность соответствующей системы уравнений невелика и равна числу химических элементов в системе  $N$ , что значительно меньше, чем в альтернативном методе.

Алгоритм расчета равновесного состава ДГ представляет собой последовательность шагов: определяется «химический базис», т.е. набор веществ, из которых затем «собираются» все прочие; составляются уравнение материального баланса для  $N - 1$  элемента; система замыкается уравнениями полного давления (как суммы парциальных) и состояния газа. Так получается система независимых балансных уравнений, решение которой отыскивается посредством итерационного пересчета.

Конечная формулировка математической модели состава ДГ ГУ следующая:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^M P_{Hm} &= \sum_{m=1}^M P_{Hm}^{\text{init}}, & \sum_{m=1}^M P_{Nm} &= \sum_{m=1}^M P_{Nm}^{\text{init}}, \\ \sum_{m=1}^M P_{Cm} &= \sum_{m=1}^M P_{Cm}^{\text{init}}, & \sum_{m=1}^M P_m &= P, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $P_{nm}$  – содержание  $n$ -го элемента (H, N, C) в  $m$ -м веществе;  $P_m$  – парциальное давление  $m$ -го вещества;  $P$  – полное давление смеси; индекс  $\text{init}$  обозначает начальные параметры процесса.

Если реакции записывать в формате

$$\sum_i \nu_i^+ R_i \leftrightarrow \sum_j \nu_j^- P_j, \quad (6)$$

давление небазисных веществ  $P_m$  рассчитывается через константы равновесия реакций их формирования из базисных реагентов:

$$K_p = \exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right) = \prod_j \left(\frac{P_{Pj}}{P}\right)^{\nu_j^-} / \prod_i \left(\frac{P_{Ri}}{P}\right)^{\nu_i^+}. \quad (7)$$

В формуле (7)  $\Delta G = G_P - G_R$  – изменение ТХП,  $T$  – температура горения,  $K$ ,  $\nu_i^+$  и  $\nu_j^-$  – стехиометрические коэффициенты,  $R$  – газовая постоянная. Независимость уравнений (5) требует комбинировать небазисные вещества исключительно из базисных.

ТХП каждого вещества  $G_m$  состоит из энтальпийного  $H_m$  и энтропийного  $S_m$  слагаемых, агрегируемых как

$$G_m = H_m - T \cdot S_m. \quad (8)$$

«Химическим базисом» модели выберем рекомендуемый авторами [3]:  $\text{CO} - \text{H}_2 - \text{N}_2 - \text{O}_2$ : их количество в ДГ значительно, что исключает из состава базиса малых величин, определяемых с высокой погрешностью. Конечная система реакций, определяющих состав ДГ ГУ, приведена в таблице.

Разработанная математическая модель и исходные данные тестировались сопоставлением с результатами компьютерной имитации при помощи online-версии химического калькулятора JANAF [4]. В результате установлено, что содержание основных компонентов – веществ, объемная доля которых превышает  $10^{-6}$ , рассчитываются верно. Это означает не только корректность алгоритмических решений, но также верный выбор «химического базиса».

Таблица

Модель реакций в «химическом базисе»  $\text{CO} - \text{H}_2 - \text{N}_2 - \text{O}_2$

№	Вещество	Реакция	№	Вещество	Реакция
1	<b>CO</b>	<b><math>\text{CO} \leftrightarrow \text{CO}</math></b>	12	<b>OH</b>	<b><math>\text{OH} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{O}_2 + \frac{1}{2} \text{H}_2</math></b>
2	<b>O<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{O}_2 \leftrightarrow \text{O}_2</math></b>	13	<b>HO<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{HO}_2 \leftrightarrow \text{O}_2 + \frac{1}{2} \text{H}_2</math></b>
3	<b>H<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{H}_2 \leftrightarrow \text{H}_2</math></b>	14	<b>H<sub>2</sub>O</b>	<b><math>\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{O}_2 + \text{H}_2</math></b>
4	<b>N<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{N}_2 \leftrightarrow \text{N}_2</math></b>	15	<b>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{H}_2\text{O}_2 \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{H}_2</math></b>
5	<b>CO<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{CO}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \frac{1}{2} \text{O}_2</math></b>	16	<b>CH</b>	<b><math>\text{CH} \leftrightarrow \text{CO} - \frac{1}{2} \text{O}_2 + \frac{1}{2} \text{H}_2</math></b>
6	<b>O</b>	<b><math>\text{O} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{O}_2</math></b>	17	<b>CH<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{CH}_2 \leftrightarrow \text{CO} - \frac{1}{2} \text{O}_2 + \text{H}_2</math></b>
7	<b>H</b>	<b><math>\text{H} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{H}_2</math></b>	18	<b>CH<sub>4</sub></b>	<b><math>\text{CH}_4 \leftrightarrow \text{CO} - \frac{1}{2} \text{O}_2 + 2 \text{H}_2</math></b>
8	<b>N</b>	<b><math>\text{N} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{N}_2</math></b>	19	<b>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{C}_2\text{H}_2 \leftrightarrow 2 \text{CO} - \text{O}_2 + \text{H}_2</math></b>
9	<b>NO</b>	<b><math>\text{NO} \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{N}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2</math></b>	20	<b>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></b>	<b><math>\text{C}_2\text{H}_4 \leftrightarrow 2 \text{CO} - \text{O}_2 + 2 \text{H}_2</math></b>
10	<b>N<sub>2</sub>O</b>	<b><math>\text{N}_2\text{O} \leftrightarrow \text{N}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2</math></b>	21	<b>C<sub>2</sub>N<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{C}_2\text{N}_2 \leftrightarrow 2 \text{CO} - \text{O}_2 + \text{N}_2</math></b>
11	<b>NO<sub>2</sub></b>	<b><math>\text{NO}_2 \leftrightarrow \frac{1}{2} \text{N}_2 + \text{O}_2</math></b>	22	<b>HCN</b>	<b><math>\text{HCN} \leftrightarrow \text{CO} - \frac{1}{2} \text{O}_2 + \frac{1}{2} \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{N}_2</math></b>

**Условия и результаты компьютерной симуляции.** В компьютерном эксперименте давление выбиралось равным атмосферному, температура и коэффициент избытка воздуха варьировались в типичном для промышленных ГУ интервале, а соотношение секундного расхода пара и топлива – в диапазоне  $0 \leq \beta \leq 0.3$ . Опыт сценарной имитации результирующей токсичности ДГ ГУ в различных режимах обобщался на основе совокупной токсичности  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$  и  $\text{C}_n\text{H}_m$ :

$$R_T = [\text{CO}] + 500 \cdot [\text{NO}_x] + 50 \cdot [\text{C}_n\text{H}_m], \quad (9)$$

где  $500 = \left( \frac{\text{ПДК}_{\text{CO}}}{\text{ПДК}_{\text{NO}_x}} \right)$  и  $50 = \left( \frac{\text{ПДК}_{\text{CO}}}{\text{ПДК}_{\text{C}_n\text{H}_m}} \right)$  – веса, отвечающие токсичности  $\text{NO}_x$  и  $\text{C}_n\text{H}_m$  по отношению к токсичности  $\text{CO}$ . Поскольку каждое сочетание параметров  $T$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  требует трудоёмкого расчета, результаты представлялись посредством аппроксимирующих формул  $R_T(\alpha, \beta, T)$ .

Результаты вычислительного эксперимента в форме (10) сопоставлялись с данными технических испытаний. Определенную погрешность в последние вносит то обстоятельство, что инструментальные газоанализаторы ограничивают температуру анализируемого газа величиной 333 К. Поэтому в измерениях ДГ смешивались с атмосферным воздухом в пропорции 1 к 20 (см. рис. 2). Тем не менее, экспериментально зафиксировано, что расчетная токсичность ДГ ГУ совпадает с измеренной в техническом эксперименте до множителя  $\sim 2$ . Установлено также, что надлежащая подача пара в зону горения, снижает токсичность ДГ.

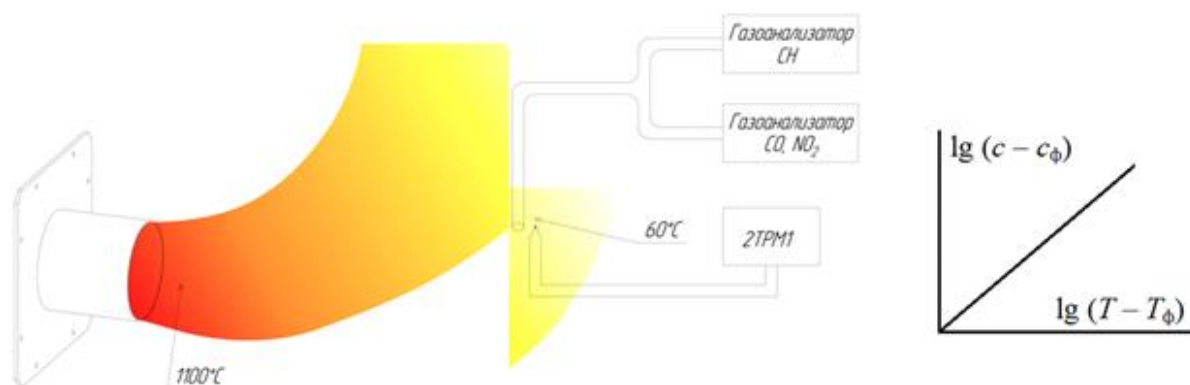


Рис. 2. Схема забора ДГ в техническом эксперименте

### Заключение

Разработана математическая модель для расчета токсичности ДГ ГУ с пароплазменной активацией горения. Сопоставление результатов компьютерного и технического экспериментов подтвердили пригодность предлагаемых научных и алгоритмических решений для оптимизации рабочего процесса ГУ по критерию минимальной токсичности ДГ.

### Список литературы:

1. ГОСТ 27824-2000. Горелки промышленные на жидком топливе. Общие технические требования. М.: Изд-во стандартов, 2002. – 12 с.
2. ГОСТР 57700.37-2021. Компьютерные модели и моделирование. Цифровые двойники изделий. М.: Изд-во стандартов, 2021. – 11 с.
3. Варнатц, Ю., Маас, У., Диббл, Р. Горение: Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. М.: Физматлит, 2003. – 352 с.
4. JANAF Thermochemical Tables, Second Edition, 1971.

### Информация об авторах:

Медведев Денис Дмитриевич, аспирант, ДГТУ, 344001, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1, корп. 1, spu-37.5@donstu.ru

Степаницын Артем Сергеевич, студент гр. ВПМ31, ДГТУ, 344001,  
г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1, корп. 1, spu-37.5@donstu.ru

Сулименко Денис Сергеевич, студент гр. ВПМ41, ДГТУ, 344001,  
г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1, корп. 1, spu-37.5@donstu.ru

Цымбалов Денис Сергеевич, аспирант, ДГТУ, 344001, г. Ростов-на-  
Дону, пл. Гагарина, 1, корп. 1, spu-37.5@donstu.ru

Яценко Олег Вадимович, к.ф.-м.н., доцент, ДГТУ, 344001, г. Ростов-  
на-Дону, пл. Гагарина, 1, корп. 1, spu-37.5@donstu.ru