Материальные расчеты неравновесных ВТП

Исходные данные:

1) состав исходных компонентов;

2) соотношения расходов отдельных компонентов. То есть задаем ко-эффициенты расходов i-х компонентов;

3) перечень химических реакций;

4) σ_i – степень завершения каждой i-й реакции:

$\sigma_i = 1$ – реакция прошла необратимо, до конца;

$\sigma_i = 0$ – реакция не идет. Вещества не реагируют.

Искомые величины – те же, что и в МР_ИВТП.

Неравновесный процесс обжига известняка

Исходные данные:

1) состав известняка:

$$CaCO_3, MgCO_3, SiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, H_2O$$

карбонаты *балласт*

(не участвует в хим. реакциях)

2) химические реакции:

$$CaCO_3 = CaO + CO_2 \qquad \sigma_1$$

100кг 56кг 44кг

$$MgCO_3 = MgO + CO_2 \qquad \sigma_2$$

84кг 40кг 44кг

3) степени завершения каждой реакции:

$$\sigma_1 < 1; \quad \sigma_2 = 1; \quad \sigma_{балласт} = 0; \quad \sigma_{H_2O} = 0.$$

Искомые величины:

$$m_{CaCO_3}, m_{CaO}, m_{MgCO_3}, m_{MgO}, m_{бал}, m_{H_2O}, m_{CO_2}, m_{т.п}, m_{о.г}, V_{о.г}$$

Решение:

$$m_{CaO} = \frac{56}{100}\ 0{,}01CaCO_3\,\sigma_1$$

$$m_{CaCO_3} = 0{,}01CaCO_3\left(1-\sigma_1\right)$$

$$m_{MgO} = \frac{40}{84}\ 0{,}01MgCO_3\,\sigma_2$$

$$m_{MgCO_3} = 0{,}01MgCO_3\left(1-\sigma_2\right) = 0$$

$$m_{бал} = 0{,}01\left(SiO_2 + Al_2O_3 + Fe_2O_3\right)\left(1-\sigma_3\right)$$

$$m_{т.п} = m_{CaO} + m_{CaCa\ 3} + m_{MgO} + m_{бал}$$

$$m_{H_2O} = 0{,}01H_2O$$

$$m_{CO_2} = \frac{44}{100}\ 0{,}01CaCO_3\,\sigma_1 + \frac{44}{84}\ 0{,}01MgCO_3\,\sigma_2$$

$$m_{о.г} = m_{CO_2} + m_{H_2O}$$

$$V_{о.г} = \frac{m_{CO_2}}{\rho_{CO_2}} + \frac{m_{H_2O}}{\rho_{H_2O}};\quad \rho_{CO_2} = \frac{44}{22{,}4};\quad \rho_{H_2O} = \frac{18}{22{,}4}$$

Пиролиз газообразного топлива (неравновесный процесс)

Исходные данные:

1) состав топлива: $CH_4^{т} = 100\%$
2) химическая реакция и степень ее завершения:

$$CH_4 \rightarrow C + 2H_2; \quad 0 < \sigma < 1.$$

Искомые величины:

$$V_{CH_4};\ V_{H_2};\ V_{г} = V_{CH_4} + V_{H_2},\ м^3/(м^3\ топлива);\ m_C,\ кг/(м^3\ топлива).$$

Решение:

1) $V_{CH_4} = 1 - \sigma; \quad V_{H_2} = 2\sigma; \quad V_{г} = 1 - \sigma + 2\sigma = 1 + \sigma;$
2) Уравнение материального баланса по углероду:

$$\underbrace{\frac{1}{22{,}4} \cdot 12}_{M_C^{исх}} = \underbrace{\frac{V_{CH_4}}{22{,}4} \cdot 12 + m_C}_{M_C^{продукты}}; \quad \frac{1}{22{,}4} \cdot 12 = \frac{1-\sigma}{22{,}4} \cdot 12 + m_C; \quad m_C = \sigma \frac{12}{22{,}4}.$$

Неравновесный процесс паровой конверсии природного газа

Исходные данные:

1. состав топлива: $CH_4^{т}, C_2H_6^{т}, C_3H_8^{т}, CO_2^{т}, N_2^{т}$, %,
   влагосодержание топлива $d_т$, г/м^3;
2. состав окислителя: $H_2O^{ок} = 100\ \%$;
3. удельный расход окислителя: $V_{ок}$, м^3/(м^3 топлива);
4. перечень химических реакций и степени их завершения:

1)	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$,	$0 < \sigma_1 < 1$
2)	$C_2H_6 + 2H_2O \rightarrow 2CO + 5H_2$,	$\sigma_2 = 1$
3)	$C_3H_8 + 3H_2O \rightarrow 3CO + 7H_2$,	$\sigma_3 = 1$
4)	$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$;	$0 < \sigma_4 < 1$
5)	$CO_2^{т}, N_2^{т}, H_2O^{т}$	$\sigma_5 = 0$

Искомые величины:

V_{CH_4}; V_{CO}; V_{CO_2}; V_{H_2}; V_{H_2O}; V_{N_2}; $V_{п.к}$, м^3/(м^3 топлива)

Решение

$$V_{CH_4} = 0{,}01 CH_4{}^{т} (1 - \sigma_1)$$

$$V_{C_2H_6} = V_{C_3H_8} = 0$$, т.к. $\sigma_2 = \sigma_3 = 1$;

Суммарный выход CO по реакциям 1, 2, 3

$$V_{CO}{}^{(1,2,3)} = 0{,}01 \left(CH_4{}^{т} \sigma_1 + C_2H_6{}^{т} \sigma_2 + C_3H_8{}^{т} \sigma_3 \right).$$

Расход CO по реакции 4

$$V_{CO}{}^{(4)} = V_{CO}{}^{(1,2,3)} \sigma_4 .$$

Итоговый выход CO по реакциям 1–4

$$V_{CO} = V_{CO}{}^{(1,2,3)} - V_{CO}{}^{(4)} = V_{CO}{}^{(1,2,3)} (1 - \sigma_4).$$

Суммарный выход H_2 по реакциям 1, 2, 3

$$V_{H_2}{}^{(1,2,3)} = 0{,}01 \left(3CH_4{}^{т} \sigma_1 + 5C_2H_6{}^{т} \sigma_2 + 7C_3H_8{}^{т} \sigma_3 \right).$$

Выход H_2 по реакции 4

$$V_{H_2}^{(4)} = V_{CO}^{(4)}.$$

Итоговый выход H_2 по реакциям 1–4

$$V_{H_2} = V_{H_2}^{(1,2,3)} + V_{H_2}^{(4)}.$$

Выходы прочих компонентов

$$V_{H_2O} = \frac{d_т}{804} + V_{ок} - V_{CO}^{(1,2,3)} - V_{CO}^{(4)} = \frac{d_т}{804} + V_{ок} - V_{CO}^{(1,2,3)}\left(1+\sigma_4\right);$$

$$V_{CO_2} = 0{,}01CO_2^{\,т} + V_{CO}^{(4)};$$

$$V_{N_2} = 0{,}01N_2^{\,т}.$$

Выход продуктов конверсии

$$V_{п.к} = V_{CH_4} + V_{CO} + V_{CO_2} + V_{H_2} + V_{H_2O} + V_{N_2}.$$

Выход сухих продуктов конверсии

$$V_{с.п.к} = V_{CH_4} + V_{CO} + V_{CO_2} + V_{H_2} + V_{N_2}.$$

Кислородная газификация углерода (неравновесный процесс)

Исходные данные:

1. Состав исходных компонентов: $C^{р} = 100\%, \quad O_2^{ок} = 100\ \%$.
2. Состав технологического продукта – генераторного газа:

$$CO^{г.г}, CO_2^{г.г}, \%; \quad (CO^{г.г} + CO_2^{г.г} = 100).$$

3. химические реакции, определяющие состав продукта:

$$2C + O_2 \rightarrow 2CO, \quad C + O_2 \rightarrow CO_2.$$

Искомые величины:

- удельный расход окислителя $V_{ок}$, м^3/(кг топлива);
- удельный расход генераторного газа $V_{г.г}$ и его компонентов V_{CO}, V_{CO_2}, м^3/(кг топлива).

Решение

$$\begin{cases} \dfrac{V_{CO}+V_{CO_2}}{22,4}12 = 0,01C^{р} \\ \dfrac{V_{CO}+2V_{CO_2}}{22,4}16 = V_{ок}0,01O_2^{ок}\cdot 2\dfrac{16}{22,4}, \\ V_{CO}+V_{CO_2} = V_{г.г} \end{cases}$$

$$\begin{cases} V_{г.г} = 0,01C^{р}\dfrac{22,4}{12} \\ V_{г.г}\left(CO^{г.г}+2CO_2^{г.г}\right) = 2V_{ок}O_2^{ок} \end{cases}$$

$$\begin{cases} V_{г.г} = 0,01C^{р}\dfrac{22,4}{12} \\ V_{г.г}\left(100+CO_2^{г.г}\right) = 2V_{ок}O_2^{ок} \end{cases}$$

Вычисляем $V_{г.г}$, $V_{ок}$. Затем находим удельные выходы компонентов генераторного газа: $V_{CO} = 0,01V_{г.г}CO^{г.г}$; $V_{CO_2} = V_{г.г} - V_{CO}$.