Материальные расчеты равновесных ВТП

ПЕРВАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ МР РВТП

Исходные данные:

1) состав исходных компонентов;
2) соотношения расходов отдельных компонентов;
3) перечень химических реакций, равновесием которых определяется равновесный состав продуктов;
4) термодинамические параметры продуктов: $p_п$, $T_п$.

Искомые величины – те же, что и в МР_ИВТП.

Равновесная паровая конверсия природного газа

Формулировка задачи сводится к трем группам уравнений:

1. УМБ химических элементов;
2. Уравнение нормировки;
3. Уравнения равновесия.

Исходные данные:

1. состав топлива: $CH_4^{т}, C_2H_6^{т}, C_3H_8^{т}, CO_2^{т}, N_2^{т}$, %,
   влагосодержание топлива $d_т = 0$, 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, равновесием которых определяется равновесный состав продуктов:
   1) $CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$,
   2) $CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$;
5. давление и температура продуктов конверсии: $p_{п.к}$, $T_{п.к}$.

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

Уравнение материального баланса по углероду

$$\frac{V_{CH_4}+V_{CO}+V_{CO_2}}{22{,}4}12=\frac{0{,}01\left(CH_4{}^{т}+2C_2H_6{}^{т}+3C_3H_8{}^{т}+CO_2{}^{т}\right)}{22{,}4}12,$$ кг С/(м^3 топлива);

или после преобразований в размерности м^3 С /(м^3 топлива)

$$V_{CH_4}+V_{CO}+V_{CO_2}=0{,}01\left(CH_4{}^{т}+2C_2H_6{}^{т}+3C_3H_8{}^{т}+CO_2{}^{т}\right). \quad (1)$$

Уравнение материального баланса по кислороду (м^3 О /(м^3 топлива))

$$V_{H_2O}+V_{CO}+2V_{CO_2}=0{,}01\cdot 2CO_2{}^{т}+V_{ок}. \quad (2)$$

Уравнение материального баланса по водороду (м^3 H_2 /(м^3 топлива))

$$2V_{CH_4}+V_{H_2O}+V_{H_2}=0{,}01\left(2CH_4{}^{т}+3C_2H_6{}^{т}+4C_3H_8{}^{т}\right)+V_{ок}. \quad (3)$$

Уравнение материального баланса по азоту (м^3 N_2 /(м^3 топлива))

$$V_{N_2}=0{,}01\cdot N_2{}^{т}. \quad (4)$$

Уравнение закона действующих масс для реакции 1 (см. выше п.4 исходных данных)

$$\frac{p_{\mathrm{CO}}\,p_{\mathrm{H_2}}^3}{p_{\mathrm{CH_4}}\,p_{\mathrm{H_2O}}} = K_{p1}(T_{\text{п.к}}) \quad \text{или} \quad \frac{V_{\mathrm{CO}}V_{\mathrm{H_2}}^3}{V_{\mathrm{CH_4}}V_{\mathrm{H_2O}}}\left(\frac{p_{\text{п.к}}}{V_{\text{п.к}}}\right)^2 = K_{p1}(T_{\text{п.к}}). \qquad (5)$$

Уравнение закона действующих масс для реакции 2 (см. выше п.4 исходных данных)

$$\frac{p_{\mathrm{CO_2}}\,p_{\mathrm{H_2}}}{p_{\mathrm{CO}}\,p_{\mathrm{H_2O}}} = K_{p2}(T_{\text{п.к}}) \quad \text{или} \quad \frac{V_{\mathrm{CO_2}}V_{\mathrm{H_2}}}{V_{\mathrm{CO}}V_{\mathrm{H_2O}}} = K_{p2}(T_{\text{п.к}}). \qquad (6)$$

Уравнение нормировки

$$V_{\text{п.к}} = V_{\mathrm{CH_4}} + V_{\mathrm{CO}} + V_{\mathrm{CO_2}} + V_{\mathrm{H_2}} + V_{\mathrm{H_2O}} + V_{\mathrm{N_2}}\ . \qquad (7)$$

Семь уравнений (1) – (7) и семь неизвестных. Система замкнута.

Случай I

Продукты процесса – смесь идеальных газов (например, паровая конверсия метана). Здесь уравнения равновесия – это уравнения закона действующих масс или уравнения констант равновесия.

В примере 3.6 для уравнения паровой конверсии метана

$$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$$

уравнение закона действующих масс имеет вид

$$\frac{p_{CO}\, p_{H_2}^3}{p_{CH_4}\, p_{H_2O}} = K_p\left(T_{п.к}\right). \qquad (8)$$

Парциальные давления и удельные выходы компонентов связаны равенством

$$p_j = \frac{V_j}{V_{п.к}}\, p_{п.к},$$

с учетом которого уравнение (8) приводится к виду

$$\frac{V_{CO}\, V_{H_2}^3}{V_{CH_4}\, V_{H_2O}} \left(\frac{p_{п.к}}{V_{п.к}}\right)^2 = K_p\left(T_{п.к}\right). \qquad (9)$$

Случай II

В продуктах процесса – смесь веществ в различных агрегатных состояниях (в твердом или жидком виде: CH_4, C), но каждое вещество – в чистом виде, не растворяет и не растворяется в других.

$$CH_4 \leftrightarrow C + 2H_2$$

$$K_p = \frac{p_{H_2}^2}{p_{CH_4}}.$$

Подходы к рассмотрению других случаев изложены в [1].

Альтернативные постановки задач

Постановка	I	II	III	IV
1. Состав исходных компонентов	+	+	+	+
2. Соотношения между компонентами	+	?	+	+
3. Список химических реакций	+	+	+	+
4. Термодинамические параметры $T_п$, $p_п$	+	+	$T_п$ - ?	$p_п$ - ?

ЛИТЕРАТУРА

1. Рузинов Л.П., Гуляницкий Б.С. Равновесные превращения металлургических реакций. – М.: Металлургия, 1975. – 416 с.
2. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, 1972.
3. Продукты сгорания природного газа при высоких температурах / Карп И.Н., Сорока Б.С., Дашевский Л.Н., Семернина С.Д. – Киев: Техніка, 1967. – 362 с.