

## ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЕЙ ГОРЕНИЯ В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПЕЧНОГО ТИПА ПРИ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКОМ СПОСОБЕ СЖИГАНИЯ ТОПЛИВА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ ANSYS CFX

В статье рассмотрен вопрос по расчету камеры сгорания химического реактора в программном комплексе Ansys CFX, который позволяет определить тепловые характеристики, а также концентрации CO, CO<sub>2</sub> на выходе при применении различных коэффициентов расхода воздуха. В работе представлены расчетная модель, начальные условия и описаны алгоритм расчета и формирование диффузионной схемы. Проведена верификация методики на адекватность при сравнении численной модели в ANSYS CFX с литературными данными, которая показала максимальное расхождение 6,92 %. Расчеты показали, что режим работы реактора будет соблюдаться при  $\alpha < 1$ .

**Ключевые слова:** химический реактор, камера сгорания, нестехиометрия, коэффициент расхода воздуха.

**Введение.** Инновационный подход при опытном исследовании математических моделей в химическом реакторе печного типа с применением нестехиометрического сжигания природного газа позволяет представить картину происходящих процессов в активной зоне горения. При проведении опытных исследований в программном комплексе Ansys CFX представляется возможность, анализируя полученные результаты, полагать, что при данном способе сжигания топлива возможно применение коэффициента расхода воздуха  $\alpha < 1$  без потери в производительности получения конечного продукта.

В зависимости от гидродинамической обстановки можно разделить все реакторы на реакторы смешения и вытеснения.

Реакторы смешения — это емкостные аппараты, в которых процесс смешения происходит при помощи механической мешалки или циркуляционным насосом.

Реакторы вытеснения — это трубчатые аппараты, имеющие вид цилиндрического удлиненного канала [1]. В трубчатых реакторах перемешивание имеет локальный характер и вызывается неравномерностью распределения скорости потока и ее флуктуациями, а также завихрениями [2]. Данные реакторы широко распространены в промышленности и используются в производствах формалина CH<sub>2</sub>O, аммиака NH<sub>3</sub>, винилхлорида C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl, оксида этилена C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O, винилацетата C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, цианурхлори-

да C<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub>N<sub>3</sub>, а также в различных процессах гидрогенизации, дегидрирования и т.д. [3].

**1. Теория.** В настоящее время существует большое количество методик расчета, предназначенных для моделирования трехмерных течений жидкости и газа в технических объектах, а также визуализации этих течений методами компьютерной графики.

Одними из наиболее распространённых моделей турбулентности являются: The Laminar Model; The Zero Equation Model; The k-epsilon Model; The RNG k-epsilon Model; The k-omega and SSTModels; The Reynolds Stress Model; Omega-Based Reynolds Stress Models; ANSYS CFX Transition Model; The Large Eddy Simulation Model (LES); The Detached Eddy Simulation Model (DES); The Scale-Adaptive Simulation (SAS); Buoyancy Turbulence. Эти модели позволяют рассчитать сложные движения жидкости, включая течения с сильной закруткой, горением, течения со свободной поверхностью. Для расчета радиационной составляющей теплового потока (излучения) применяют модели: Radiation Transport; Rosseland Model (или модель диффузионной аппроксимации); The P1 Model (также известна как модель Гиббса, или сферическая модель гармоник); Discrete Transfer Model; Monte Carlo Model (модель Монте-Карло); Spectral Models, а также модели горения: Reaction Models; Using Combustion Models; Eddy Dissipation Model (EDM); Finite Rate Chemistry

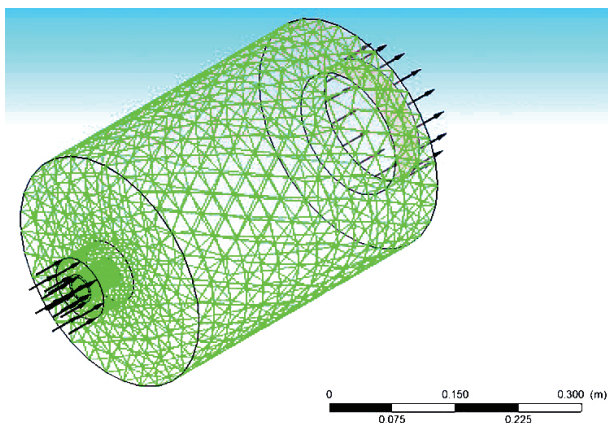


Рис. 1. Расчетная область топочной камеры химического реактора

Model; Combined EDM/ Finite Rate Chemistry Model [4, 5].

При выполнении экспериментальных расчетов в программном комплексе Ansys CFX ставилась задача провести анализ существующего оборудования для получения технического углерода печным способом и на основании имеющихся паспортных характеристик, а также режимных карт, необходимых для построения трехмерной модели топочной камеры. Рассмотрим алгоритм расчета в топочной камере реактора [6, 7].

На рис. 1 показана расчетная область.

Данная модель (рис. 1) загружается в рабочую зону Ansys CFX. На первом этапе расчетная модель делится по методу конечных элементов и составляет множество элементов одной системы, одного тела, декомпозиция с целью в дальнейшем упростит процесс расчета распределения температур и концентраций продуктов горения. Каждой поверхности модели в модуле CFX-Mesh определены соответствующие регионы для последующего задания на них условий однозначности в CFX-Pre.

На втором этапе задаются начальные условия. На входе для запуска процесса горения в реакторе задаются:

— в качестве топлива, природный газ следующего состава:  $\text{CH}_4 = 0,9751 \%$ ,  $\text{CO}_2 = 0,0065 \%$ ,  $\text{N}_2 = 0,0184 \%$ . Начальные параметры газа: температура  $T_g = 298 \text{ K}$ , давление  $P_g = 0,1 \text{ МПа}$ .

— в качестве окислителя воздух со следующим составом:  $\text{N}_2 = 0,767 \%$ ,  $\text{O}_2 = 0,233 \%$ . Начальные параметры воздуха: температура  $T_{air} = 1073 \text{ K}$ , скорость подачи воздуха  $v = 40 \text{ м/с}$ , коэффициент расхода изменялся в диапазоне  $\alpha = 0,97 - 1,45$ .

Важно, что окислитель подается без предварительного смешения с природным газом, вследствие чего достигается диффузионное горение.

На стенке задаются условия адиабатической стенки топочной камеры, это является обязательным условием, т.к. стенка изолирована и в идеальном случае отсутствуют потери в окружающую среду  $Q=0$ . На выходе из топки задаются давления для стабильной тяги уходящих газов.

Несмотря на сложность процессов, протекающих в химических реакторах, для понимания процессов необходимо исследование идеальных моделей. Часто оказывается, что реальные процессы довольно хорошо описываются такими идеальными моделями. В более сложных случаях в реакционной зоне можно выделить отдельные участки, которые

хорошо описываются идеальными моделями; таким образом, с их помощью можно описать практически самые различные процессы.

Моделирование тепловых процессов проведено с использованием программного комплекса ANSYS. Единицы измерения на всех этапах соответствовали СИ. Максимальное количество итераций расчетов принималось 200, при неопределенности в расчетах в  $10^{-5}$ .

Тепловой расчет в ANSYS CFX выполнялся по k-Epsilon (k-ε) модели турбулентности. Выбор указанной модели обоснован отсутствием неопределенностей при расчете турбулентной вязкости в расчетном диапазоне чисел Рейнольдса в соответствии с литературными источниками [6, 7]. Физические свойства реагирующих газов задавались согласно библиотекам рабочих веществ CFX [5].

Алгоритм расчета топки химического реактора заключался в задании геометрических характеристик трехмерной модели; задании начальных условий для всего объема; задании и расчете граничных условий; расчете уравнений гидромеханики; расчете теплового потока излучения; расчете уравнений энергии и температур; расчете характеристик турбулентности; расчете массовых и объемных долей; расчете интегральных тепловых характеристик топки. Для расчета применялись уравнения, которые необходимы для описания реагирующей газовой смеси: уравнения неразрывности для всей смеси и для каждого компонента; моментов; энергии и диссипации; энергии и энтальпии; вязкости; уравнении состояния. Приняты основные допущения — теплота от факела переносится излучением и конвективным теплообменом [5].

Формирование диффузионной схемы является необходимым этапом моделирования высокотемпературных процессов в агрегатах энергоустановок для построения схем химического взаимодействия. При протекании реакции уравнение имеет вид [3]:

$$lL + mM + \dots = qQ + rR + \dots \quad (1)$$

где  $l$ ,  $m$  и  $q$ ,  $r$  — стехиометрические коэффициенты исходных и конечных веществ;  $L$ ,  $M$  и  $Q$ ,  $R$  — исходные и конечные вещества.

Принимая скорость химической реакции, которая является количеством молекул данного вида, реагирующим в единицу времени, то скорости различных реакций приравниваем друг к другу при учете, что скорость реакции относится к единице объема. Следовательно, скорость реакции определяется числом молекул данного вещества.

Зная изменение во времени количества только одного из веществ — исходного или конечного — участников реакции, можно определить скорость химической реакции, так как изменение количества всех остальных веществ можно найти на основании стехиометрии из уравнения (7).

Скорости изменяются от бесконечно малых до бесконечно больших. Поэтому очевидно, что необходимо знание факторов, воздействующих на протекание реакции до конца за минимальное время. Следует учитывать следующие четыре параметра [3]:

1. Влияние концентрации реагентов. Если одним из реагентов является газ, то необходимо знать влияние давления, чтобы эффективно использовать сосуды высокого давления.

2. Влияние температуры. Некоторые гетерогенные реакции значительно ускоряются с повышением температуры.

3. Влияние перемешивания или скорости потока газа.

4. Влияние размеров частиц.

Как известно, число столкновений прямо пропорционально числу молекул, поэтому скорость реакции должна быть пропорциональна концентрации реагирующих веществ, т.е. в общем случае

$$\omega = k_1 c_L^l c_M^m, \quad (2)$$

где  $\omega$  — скорость химической реакции;  $k_1$  — константа скорости химической реакции;  $c_L$  и  $c_M$  — концентрации реагирующих веществ;  $l$  и  $m$  — стехиометрические коэффициенты веществ [3].

Основой для расчета камеры смешения для реакторов с учетом теплового режима служит уравнение теплового баланса, составленное обычно на единицу времени. Для экзотермической реакции можно записать уравнение [8]:

$$Q_{\text{нак}} = -(Q_{\text{прог}} - Q_{\text{реар}}) - Q_T + Q_{x,p}, \quad (3)$$

где  $Q_{\text{реар}}$  — количество тепла, вносимого исходными реагентами;  $Q_{x,p}$  — количество тепла, выделяющегося при химической реакции;  $Q_{\text{нак}}$  — количество тепла, накапливающегося в реакторе;  $Q_{\text{прог}}$  — количество тепла, уносимого продуктами;  $Q_T$  — количество тепла, выводимого в результате теплообмена.

С учетом

$$Q_{\text{прог}} - Q_{\text{реар}} = Q_{\text{конв.}}, \quad (4)$$

где  $Q_{\text{конв.}}$  — количество тепла, выносимого конвективным потоком, с учетом которого получим

$$Q_{\text{нак}} = -Q_{\text{конв.}} - Q_T + Q_{x,p}. \quad (5)$$

Полученное уравнение теплового баланса (3) может принимать различную форму в зависимости от типа реактора и теплового режима процесса [8].

В данном случае параметры процесса изменяются как в объеме реактора, так и во времени, уравнения теплового баланса составляют в дифференциальной форме.

Для этой цели используют дифференциальное уравнение конвективного теплообмена

$$\rho C_p \frac{\delta T}{\delta \tau} = -\rho C_p \left( w_x \frac{\delta T}{\delta x} + w_y \frac{\delta T}{\delta y} + w_z \frac{\delta T}{\delta z} \right) + \lambda \left( \frac{\delta^2 T}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta z^2} \right), \quad (6)$$

где  $\rho$ ,  $C_p$  — плотность и удельная теплоемкость реакционной смеси;  $x$ ,  $y$ ,  $z$  — пространственные координаты;  $w_x$ ,  $w_y$ ,  $w_z$  — составляющие скорости движения потока в направлении осей;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности реакционной смеси.

Для описания уравнения по отношению к реакции  $A \rightarrow R + Q$  его составляют по одному из компонентов реакционной смеси (любому) и вводят в него дополнительные члены, учитывающие отвод тепла в результате теплообмена и тепло реакции [8].

Составляя баланс по компоненту  $A$  и вводя в уравнение (6) дополнительные члены в соответствии с уравнением (5), дифференциальное уравнение конвективного теплообмена может быть записано в виде

$$\rho C_p \frac{\delta T}{\delta \tau} = -\rho C_p \left( w_x \frac{\delta T}{\delta x} + w_y \frac{\delta T}{\delta y} + w_z \frac{\delta T}{\delta z} \right) + \lambda \left( \frac{\delta^2 T}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta z^2} \right) - F_{yg} K \Delta T + r_a \Delta H. \quad (7)$$

Левая часть уравнения (7) характеризует скорость накопления тепла в элементарном объеме, для которого составляется тепловой баланс. Этому члену соответствует величина в уравнении (5)

$$Q_{\text{нак}} = \rho C_p \frac{\delta T}{\delta \tau}.$$

Первая группа членов правой части уравнения (7) определяет скорость конвективного переноса тепла по соответствующим координатам ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) в элементарном объеме [9].

Вторая — скорость отвода тепла в результате молекулярной и конвективной теплопроводности реакционной среды.

Первая и вторая группы членов правой части уравнения (7) соответствуют параметру  $Q_{\text{конв.}}$  в уравнении (5):

$$-Q_{\text{конв.}} = -\rho C_p \left( w_x \frac{\delta T}{\delta x} + w_y \frac{\delta T}{\delta y} + w_z \frac{\delta T}{\delta z} \right) + \lambda \left( \frac{\delta^2 T}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 T}{\delta z^2} \right). \quad (8)$$

Новые вводимые в уравнение (7) группы членов характеризуют скорость отвода тепла путем теплообмена (третья группа)

$$Q_T = F_{yg} K \Delta T \quad (9)$$

и скорость подвода тепла в результате химической реакции (четвертая группа)

$$-Q_{x,p} = r_a \Delta H, \quad (10)$$

где  $F_{yg}$  — удельная поверхность теплообмена;  $K$  — коэффициент теплопередачи;  $\Delta T = T - T_{\text{ха}}$  ( $T$ ,  $T_{\text{ха}}$  — температура реакционной смеси и хладоагента);  $H$  — тепловой эффект химической реакции [9].

В зависимости от характера реакции, теплового режима и режима движения реакционной среды [10] (т.е. от гидродинамической обстановки в реакторе) в уравнение (5) вводятся упрощения:

- для адиабатического реактора —  $Q_m = 0$ ;
- для изотермического реактора —  $Q_{\text{конв.}} = 0$ .

**2. Верификация.** При проведении опытных расчетов с использованием представленной методики и рассчитанных с применением программной среды Ansys CFX возникает вопрос об адекватности получения данных.

Для проверки методики на адекватность при сравнении численной модели в ANSYS CFX с литературными данными был проведен расчет турбулентного горения газа в канале. Значения, полученные опытным путем, отражены в табл. 1

В табл. 1 отображены максимальные параметры в топочной камере и на выходе из нее ( $T_{\text{max}}$ ,  $T$ ,  $\text{CO}_{\text{max}}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_{2\text{max}}$ ,  $\text{CO}_2$ ) от коэффициента расхода воздуха  $\alpha$ . Значения сравнивались с работой В. И. Ивановского [1].

Проведя анализ табл. 1 по концентрации диоксида углерода от различных коэффициентов расхода воздуха, можно судить о корректности полученных

Сводная таблица результатов расчетов в Ansys CFX

$\alpha$	$T_{max}$ , К	$T$ , К	$CO_{max}$ , %	$CO$ , %	$CO_{2max}$ , %	$CO_2$ , %
0,97	1943	1614	9,1	6,368	12,53	10,03
1,05	1957	1791	10,59	6,354	12,67	11,4
1,25	1943	1449	9,172	3,669	12,55	10,04
1,45	1943	1450	9,3	3,72	12,58	8,604

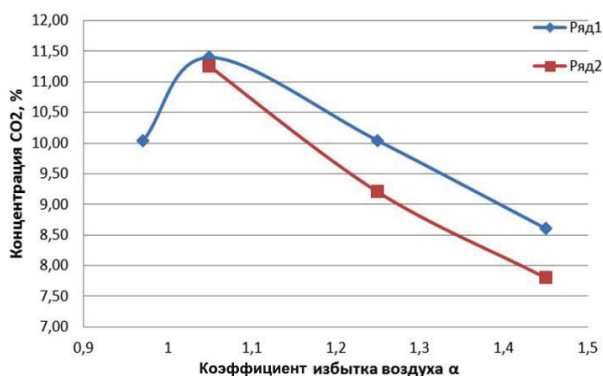


Рис. 2. Зависимость полученных данных при расчете в среде Ansys CFX и литературных данных: ряд 1 — Ansys CFX; ряд 2 — В. И. Ивановский

данных. Расхождение полученных данных с литературными данными при различных значениях  $\alpha$  составляет 6,92 % (рис. 2) (в диапазоне от  $\alpha=1,05$  до 1,45), что подтверждает адекватность полученных данных при опытном расчете топочной камеры. Значения  $\alpha < 1,05$ , полученные данной методикой, не верифицируются по причине отсутствия литературных данных значений для рассматриваемых областей.

**3. Расчет.** При проведении расчетов в программном комплексе Ansys CFX ставилась задача рассмотреть математическую модель горения природного газа в топочной камере химического реактора печного типа. Опытные исследования проводились при разных коэффициентах расхода воздуха, а также проверялся нестехиометрический способ сжигания ( $\alpha < 1$ ). При проведении опытных расчетов задавались следующие коэффициенты  $\alpha = 1,45; 1,25; 1,05; 0,97$ . Последнее значение в проведении опыта стало крайним, т.к. последующие за ним значения коэффициента расхода воздуха уже не могли удовлетворить рабочим параметрам среды в топочной камере и на выходе из нее.

Последствия применения  $\alpha$  ниже значения 0,97 характеризовали резкое падение температуры в топке реактора, что не соответствует режиму работы данного оборудования.

На рис. 3–5 показана зависимость коэффициента расхода воздуха от температуры и концентраций ( $CO$ ,  $CO_2$ ) на выходе из камеры сгорания.

На рис. 3 видно, что наибольшая температура наблюдалась при значении  $\alpha = 1,05$ . Но при нестехиометрическом сжигании и достижении  $\alpha = 0,97$  значение температуры составило около 1350 °С, что сопоставимо по температуре (около 1200 °С) с режимом работы при коэффициенте расхода воздуха  $\alpha = 1,25 - 1,45$ .

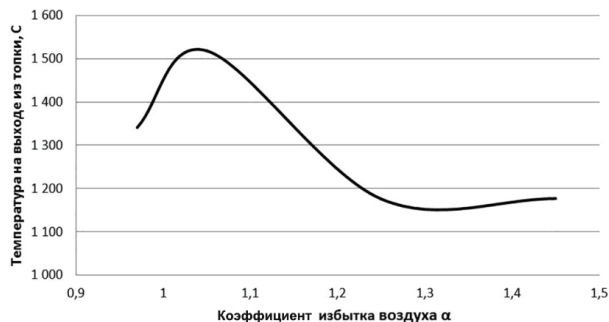


Рис. 3. Зависимость коэффициента расхода воздуха  $\lambda$  от температуры на выходе из топочной камеры

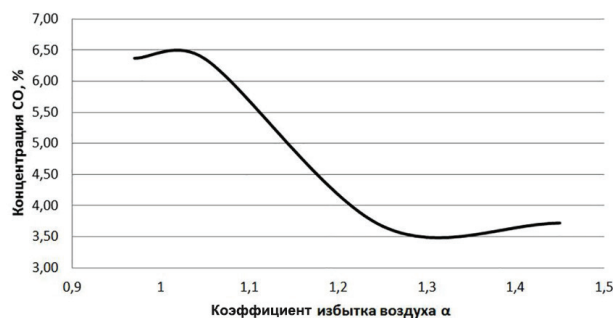


Рис. 4. Зависимость коэффициента расхода воздуха  $\alpha$  от концентрации  $CO$  (%) на выходе из топочной камеры

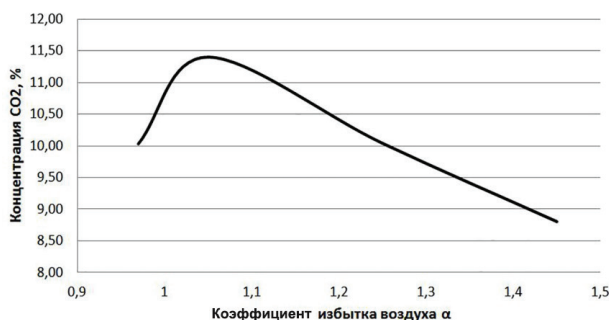


Рис. 5. Зависимость коэффициента расхода воздуха  $\alpha$  от концентрации  $CO_2$  (%) на выходе из топочной камеры

Рис. 4 показывает, что при недостатке в сгораемой смеси воздуха происходит выход монооксида углерода ( $CO$ ) в количестве, сопоставимом со значением при расходе воздуха ( $\alpha < 1,05$ ). На графике также видно, что значение угарного газа при недостатке воздуха выше, чем значение  $CO$  при

$\alpha = 1,25 - 1,45$ , что, в свою очередь, приводит к выводу, что применение нестехиометрического сжигания дает увеличенный выход CO относительно стандартного способа сжигания топлива в химическом реакторе.

Анализируя рис. 5 и опираясь на описанный ранее материал, можно сделать вывод, что, используя в данном случае оптимальный коэффициент расхода воздуха,  $\alpha = 1,05$ , получилось наибольшее значение диоксида углерода. В случае с расходом воздуха ( $\alpha < 0,97$ ) значение  $CO_2$  сопоставимо со значением при коэффициентах расхода воздуха больше 1 ( $\alpha > 1$ ).

**Вывод.** Исходя из вышеописанного, можно сделать вывод, что режим работы реактора будет соблюдаться при  $\alpha < 1$ . Опыт, проведенный в программном комплексе Ansys CFX, показывает, что нет необходимости подавать в топочную камеру лишний воздух, который будет способствовать догоранию углеводорода при дальнейшем технологическом процессе в химическом реакторе, что, в свою очередь, будет негативно сказываться на производительности конечного продукта.

#### Библиографический список

1. Мумладзе Д. Г., Батраков П. А., Беляков А. А., Зиновьев Е. В. Технологический процесс получения технического углерода печным способом // Актуальные вопросы энергетики: материалы Междунар. науч.-практ. конф. 2017. С. 49–51.
2. Ивановский В. И. Технический углерод. Процессы и аппараты. Омск: ОАО Техуглерод, 2004. 228 с.
3. Бесков В. С. Общая химическая технология. М.: Академкнига, 2005. 452 с. ISBN 5-94628-150-X.
4. Юн А. А. Теория и практика моделирования турбулентных течений М.: Либроком, 2009. 272 с. ISBN:978-5-397-00583-8.
5. ANSYS CFX-Solver Theory Guide. ANSYS CFX Release 11.0 / ANSYS, Inc. // Southpointe 275 Technology Drive. Canonsburg: PA 15317, 2006. 312 p.

6. Hottel H. C., Sarofim A. F. Radiative transfer. NY: McGraw-Hill Publishing Company, 1967. 520 p.

7. Хзмалян Д. М. Теория топочных процессов. М.: Энергоатомиздат, 1990. 352 с. ISBN 5-283-00063-X.

8. Макаров Ю. И., Генкин А. Э. Технологическое оборудование химических и нефтегазоперерабатывающих заводов. М.: Машиностроение, 1976. 368 с.

9. Макарова И. Д., Макаров С. Е. Условия устойчивости стационарного режима в химическом реакторе с кипящим слоем катализатора // Омский научный вестник. 2011. № 3 (103). С. 30–32.

10. Guinand C., Dabros M., Meyer T. Reactor dynamics investigation based on calorimetric data // The Canadian Journal of Chemical Engineering. 2017. Vol. 95, Issue 2. P. 231–240. DOI: 10.1002/cjce.22700.

**БАТРАКОВ Петр Андреевич**, кандидат технических наук, доцент кафедры «Теплоэнергетика» Омского государственного технического университета.

SPIN-код: 4626-0054

ORCID: 0000-0002-0939-585X

AuthorID (SCOPUS): 5650399260

ResearcherID: D-4330-2016

**МУМЛАДЗЕ Даниэль Григорьевич**, старший инженер-теплотехник отдела главного энергетика ООО «Омсктехуглерод».

Адрес для переписки: peter\_1cool@mail.ru

#### Для цитирования

Батраков П. А., Мумладзе Д. Г. Исследование моделей горения в химическом реакторе печного типа при нестехиометрическом способе сжигания топлива в программном комплексе Ansys CFX // Омский научный вестник. 2018. № 4 (160). С. 59–63. DOI: 10.25206/1813-8225-2018-160-59-63.

Статья поступила в редакцию 08.06.2018 г.

© П. А. Батраков, Д. Г. Мумладзе