

УДК 662.611.2:662.613.5

**А. И. БРУНЕТКИН**, канд. техн. наук, доц.; доц. ОНПУ, Одесса;  
**М. В. МАКСИМОВ**, д-р техн. наук, проф.; зав. кафедры АТП ОНПУ, Одесса;  
**А. В. БОНДАРЕНКО**, аспирант, инженер ОНМА, Одесса

### **ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА НЕИЗВЕСТНОГО ГАЗООБРАЗНОГО ГОРЮЧЕГО И ЕГО ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ НА ОСНОВЕ ИЗМЕРЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА СЖИГАНИЯ ТОПЛИВА**

Отмечена широкая база и значительный потенциал альтернативных (не сертифицированных) видов горючих газов. Выделена причина, затрудняющая их использование – неизвестность и переменность состава. В силу этого в ряде случаев топливо такого вида сжигается при не оптимальных (не стехиометрических) соотношениях горючего и окислителя. Выбрана математическая модель, на основе соотношений химической термодинамики, позволяющая, в таких условиях, рассчитать состав продуктов сгорания. Это осуществляется на основе известного состава топлива (горючее и окислитель – воздух), их теплотворной способности (энтальпия) и качественного состава продуктов сгорания. В результате можно получить количественный состав продуктов сгорания и соответствующую их температуру. Получены аппроксимационные соотношения, для расчета необходимых термодинамических функций. На основе выделенных известных соотношений решения выше отмеченной «прямой» задачи предложено решение «обратной»: при известном качественном составе продуктов сгорания, их замеренных объемном расходе и температура (замеренных технологических параметрах) определение их количественного состава и теплотворной способности (энтальпии). Это позволяет обеспечить оптимальное сжигание подобного вида топлива. Выполнена оценка адекватности предложенной модели. Определены ее ограничения.

**Ключевые слова:** не сертифицированное топливо, переменный состав, продукты сгорания, математическая модель.

#### **Введение**

Настоящее время характеризуется, при непрерывном повышении стоимости основных энергоресурсов (угля, природного газа, продуктов нефтепереработки), поиском и освоением не сертифицированных видов углеводородного топлива. К ним относят газообразные, жидкие и твердые виды топлив различного происхождения:

– геологического (спутные газы при добыче нефти, в том числе сланцевый, рудничные газы и т.д.);

– из возобновляемых источников (продукты пиролиза органических остатков: медленного – в основном газообразные, быстрого – в основном жидкие; сбраживание органических остатков в метантенках, биотопливо и т.д.);

– отходы производства (доменные газы, спутные газы переработки нефтепродуктов, газы брожения мусора на свалках и т.д.).

Общей чертой при использовании основных энергоресурсов является постоянство их состава (стандартизация) и, как следствие, постоянство теплотворной способности. Это позволяет при периодической режимной наладке оборудования обеспечивать эффективное сжигание топлива при минимизации вредных выбросов.

Такой подход для не сертифицированных видов топлив не приемлем: их состав, а, следовательно, и теплотворная способность, не остается постоянным в процессе сжигания. Изменение химического состава происходит случайным образом, в любой момент времени. Горелочные устройства могут обеспечивать независимое друг от друга регулирование подачи горючего и окислителя (воздуха). В этом случае сжигание

---

© А.И. Брунеткин, М.В. Максимов, А.В. Бондаренко, 2014

горючего неизвестного состава в соотношении с окислителем, близким к стехиометрическому, может быть обеспечено, например, контролируемым изменением расхода окислителя (воздуха) при заданном расходе горючего и поиском максимальной температуры пламени с помощью экстремального регулятора. Максимальная температура достигается при коэффициенте избытка окислителя  $\alpha$  близким к 1,0. Для оптимального сжигания горючего неизвестного состава могут быть использованы и другие методы [1].

Организация процесса оптимального сжигания топлива является необходимым условием его эффективного использования, но недостаточным. Продукты сгорания представляют собой высокотемпературные многокомпонентные химически реагирующие смеси. Определение равновесного состава и свойств таких смесей является частью многих задач высокотемпературной энергетики [2]. Расчетно-теоретический путь их решения является основным. Отсутствие сведений о составе топлива и продуктах сгорания не позволяет выполнить необходимых расчетов.

Состав неизвестного вещества или смеси веществ при неизменном составе во времени может быть определен различными способами: спектроскопией, методами аналитической химии, для смеси газов – с помощью газоанализаторов. Все эти методы обладают рядом недостатков: ресурсоемки, громоздки, имеют большое время инерции и, как следствие, запаздывание, поэтому трудно интегрируемы в автоматизированную систему управления сжигания топлива. Для газоанализаторов требуется информация по перечню газов в смеси. Применение газоаналитических приборов осложняется тем, что вторичные энергетические ресурсы содержат в своем составе нежелательные компоненты, которые приводят к ускоренному износу первичных приборов и выходу их из строя. Стоимость системы растет с увеличением этого перечня.

**Целью данной статьи** является разработка метода анализа, позволяющего в процессе сжигания топлива произвольного (или с минимальными ограничениями) состава, определять этот состав, а так же состав продуктов сгорания в режиме реального времени.

#### **Математическая модель**

Во многих источниках, в частности в [2], описаны математическая модель и метод решения прямой задачи расчета состава продуктов сгорания при известном составе топлива (в общем случае смесевом). На основе известных массовых или объемных долей составных частей топлива, а так же их химических формул, записывается условная формула топлива в виде

$$A_{b_{iT}}^{(1)} A_{b_{iT}}^{(2)} \dots A_{b_{iT}}^{(i)}, \quad (1)$$

где  $A^{(i)}$  – символ химического элемента;  $b_{iT}$  – количество атомов  $i$ -го химического элемента в условной молекуле топлива.

В дальнейшем все расчеты выполняются на основе выражения (1) и знание конкретных составных частей топлива не требуются. При определении неизвестного состава горючего его условная формула может быть записана в аналогичном виде. Количество атомов каждого химического элемента в этом случае неизвестно. Определение этого количества и, соответственно, состава продуктов, образующихся при его сгорании, является целью решения рассматриваемой расширенной задачи.

Для решения этой задачи в качестве основы будет использована модель, применяемая в [2], но её необходимо дополнить замыкающими уравнениями,

позволяющими найти новые дополнительные неизвестные  $b_{iT}$ . Рассмотрим эту расширенную модель.

Уравнение сохранения вещества записывается в виде

$$\sum_q (a_{iq} n_q) = b_{iT}, \quad (2)$$

где  $q$  – количество веществ в продуктах сгорания;  $a_{iq}$  – количество атомов этого же вещества в  $q$ -ом веществе продукта сгорания;  $n_q$  – количество молей  $q$ -го вещества в продуктах сгорания.

Для получения простого варианта записи уравнений химического равновесия в [3] предложен и в [2] использован вариант записи уравнений сохранения вещества в виде

$$\sum (a_{iq} P_q) = M_T b_{iT}. \quad (3)$$

В (3) в отличие от (2) в расчетах учитывается  $M_T$  молей топлива, количество которых выбирается таким образом, чтобы количество молей ( $n_q$ )  $q$ -го вещества в продуктах сгорания было равно его парциальному давлению  $P_q$ . В этом случае  $M_T$  является дополнительной неизвестной величиной и подлежит определению.

С учетом (3) закон действующих масс (закон химического равновесия по парциальным давлениям) записывается в виде

$$\frac{\prod P_i^{a'_{ij}}}{P_j} = K_j^0, \quad (4)$$

где  $P_j, P_i$  – парциальные давления веществ в продуктах сгорания соответственно зависимых  $j$  и независимых  $i$ , из которых зависимые могут быть образованы;  $a'_{ij}$  – стехиометрический коэффициент в реакции химического равновесия;  $K_j^0$  – константа химического равновесия по парциальным давлениям.

Уравнений (3) и (4) достаточно для нахождения  $q$  парциальных давлений газов, входящих в продукты сгорания. Для определения величины  $M_T$  используется уравнение закона Дальтона

$$\sum_q P_q = P, \quad (5)$$

где  $P$  – давление смеси газов продуктов сгорания в топке котла (камере сгорания, химическом реакторе и т.д.).

#### Дополнительные замыкающие соотношения

Модель в виде уравнений (3)–(5) применяется для решения прямой задачи в случае известной условной формулы топлива (1). Рассмотрим решение расширенной

задачи для распространенной формы топлива, горючее и окислитель которого находятся в газообразном состоянии:

- окислитель известного состава (воздух, кислород и др.);
- горючее-газ или смесь газов неизвестного состава.

Для этого дополнительно к (3)–(5) запишем замыкающие соотношения. Для газообразного состояния мольные объемы любых идеальных веществ одинаковы. В силу этого отношения объемных расходов горючего и окислителя равны мольным отношениям в рассматриваемых реакциях горения. С учетом вышесказанного, а также уравнения (3), можно записать дополнительное балансовое уравнение для топлива и продуктов сгорания в виде

$$(I_{\Gamma} + \alpha\chi_0 I_{\text{O}})M_{\text{T}} = \sum_q I_q P_q, \quad (6)$$

где  $\alpha$  – коэффициент избытка окислителя;  $\chi_0$  – мольный стехиометрический коэффициент соотношения компонентов;  $I_{\Gamma}, I_{\text{O}}, I_q$  – мольные энтальпии горючего, окислителя и газов в смеси продуктов сгорания.

В аналогичном виде это уравнение используется при решении прямой задачи, т.е. определении состава продуктов сгорания при известном составе топлива. Подбирается температура и состав продуктов сгорания для неё таким образом, чтобы обеспечить баланс энтальпий. Особенностью является то, что в расчете оно используется один раз для определения одной дополнительной переменной – температуры.

Чтобы применить уравнение (6) для нахождения нескольких дополнительных переменных можно использовать работу экстремального регулятора. При одном из шагов его работы замеряются объемные расходы окислителя и горючего  $^{(1)}\dot{V}_{\text{O}}, ^{(1)}\dot{V}_{\Gamma}$ , а так же температура продуктов сгорания  $^{(1)}T$ , соответствующая этим расходам (верхний индекс  $^{(1)}$ ). При этом в уравнении (6)

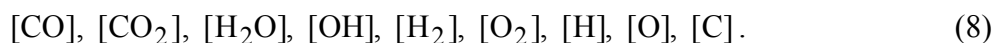
$$\alpha\chi_0 = ^{(1)}\dot{V}_{\text{O}} / ^{(1)}\dot{V}_{\Gamma}, \quad (7)$$

где  $\dot{V}_{\text{O}}, \dot{V}_{\Gamma}$  – объемные расходы окислителя и горючего, а температуре  $^{(1)}T$  будут соответствовать энтальпии веществ  $^{(1)}I_q$ , входящих в продукты сгорания и их парциальные давления.

При этом в рассматриваемой задаче (в отличие от прямой) количество неизвестных расширяется: при известной (измеренной) температуре и расходах горючего и окислителя подбирается (вычисляется) количественный состав условной формулы горючего и рассчитывается состав продуктов сгорания таким образом, чтобы обеспечить баланс энтальпий. Перечень химических элементов, из которых состоит горючее ( $b_{\Gamma}$ ), должен быть известен. Это является ограничением рассматриваемой модели, которое не представляется очень строгим. Так учет даже ограниченного количества атомов веществ, например [C], [H], [O], [S], [N], позволяет учесть почти все органические соединения, горящие в воздушной атмосфере. Хотя на перечень учитываемых элементов ограничений нет. Он определяется составом сырья, продуктом

переработки которого является не сертифицированное горючее. Поэтому является известным.

Если горючее состоит из ( $n$ ) элементов, то количество новых неизвестных составляет ( $n + 1$ ): кроме количества атомов элементов в условной формуле горючего необходимо определить его энтальпию  $I_{\Gamma}$ . Для этого необходимо записать ( $n + 1$ ) уравнений вида (6). Каждому такому уравнению соответствует свое измерение величин  $^{(1)}\dot{V}_O$ ,  $^{(1)}\dot{V}_{\Gamma}$ ,  $^{(1)}T$  при пробном сжигании топлива и варьировании величины  $^{(1)}\dot{V}_O$ . При принятом количестве газов в продуктах сгорания ( $q$ ) для каждого уравнения (6) необходимо записать ( $q + 1$ ) уравнения основной модели (3)–(5) и с учетом количества новых неизвестных ( $n + 1$ ) всего  $((q + 1) + 1) \cdot (n + 1)$  уравнений. Так, например, при использовании углеводородного горючего, состоящего из  $n = 2$  элементов (углерода [C] и водорода [H]) и при использовании в качестве окислителя кислорода [O] в качестве продуктов сгорания можно рассматривать  $q = 9$  веществ



В этом случае при решении прямой задачи требуется решить систему уравнений из  $(q + 1) = 10$  уравнений и добиться соблюдения баланса в уравнении (6). При решении расширенной задачи потребуются решить систему из  $((9 + 1) + 1) \cdot (2 + 1) = 33$  уравнений.

#### **Определение особенностей работы модели**

Для проверки работоспособности предложенной модели и выявления особенностей, возникающих в процессе вычислений, была использована топливная пара  $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$  (керосин) +  $\text{O}_2$  (жидкий кислород), данные по продуктам сгорания которой приведены в [4]. При подготовке исходных данных для расчета:

– выбиралась некоторая величина коэффициента  $\alpha$ , рассчитывалось соответствующее ему мольное отношение окислителя и горючего, которое в тестовом расчете принималось в качестве замеренного отношения  $^{(1)}\dot{V}_O / ^{(1)}\dot{V}_{\Gamma}$ ;

– отыскивалась температура  $T$ , приведенная в [4] для камеры сгорания, соответствующая выбранному  $\alpha$ , в тестовом расчете эта величина принималась в качестве измеренной температуры в камере сгорания  $^{(1)}T$ .

Горючее в тестовой паре состоит из  $n = 2$  элементов: [C] и [H]. Это необходимо знать до начала расчетов, что является ограничением модели. В этом случае в реальной ситуации необходимо выполнить  $n + 1 = 3$  измерения технологических параметров при любом расходе окислителя. Поэтому было подготовлено 3 комплекта исходных данных  $V_O$ ,  $V_{\Gamma}$ ,  $T$  для различных  $\alpha$ . Целью расчета является определение количественного состава горючего (величин  $b_{i\Gamma}$ ) и его энтальпии. В рассматриваемом тестовом варианте это должно быть:

$$b_C = 1; \quad b_H = 1,956; \quad I_{\Gamma} = -1948 \text{ кДж/кг} = -27237,7 \text{ кДж/кмоль}.$$

Энтальпия горючего приведена в двух размерностях в следствии того, что в качестве исходной величины в [4] она дана в первом варианте, а расчеты выполнялись для мольных соотношений. Молекулярная масса керосина, используемая для пересчета, принята равной  $\mu = 13,9824 \text{ кг/кмоль}$ .

Таблиця 1  
Сравнение результатов расчетов энтальпий продуктов сгорания (ПС), рассчитанных с помощью полиномов из [2] и данных таблиц [5]

Хим. элемент	$\Delta = I_{\text{ПС}} - I_{\text{T}}$ , кДж/моль	$\varepsilon = \frac{I_{\text{ПС}} - I_{\text{T}}}{I_{\text{T}}} 100 \%$
CO	-5,25	+45,2 %
CO <sub>2</sub>	-9,54	+4,1 %
H <sub>2</sub> O	-12,60	+12,5 %
ОН	-8,80	-6,4 %
H <sub>2</sub>	-8,29	-8,5 %
O <sub>2</sub>	-31,13	-29,2 %
H	-4,23	-1,5 %
O	-4,24	-1,4 %
C	-2,59	-0,3 %

Примечание:  $I_{\text{ПС}}$  – энтальпия, рассчитанная по модели [2];  $I_{\text{T}}$  – энтальпия, определенная по [5].

2,2 К. Это соответствует действительности. Но сравнение вычисленных по [2] энтальпий при  $T = 3000$  К для рассматриваемых продуктов сгорания с данными [5] дает несколько другие величины, как по абсолютной, так и по относительной величине. Результаты сравнения приведены в табл. 1.

Как видно из сравнения данных из таблицы отклонения существенны.

При составлении баланса в реакции горения в [2] для топлива исходные данные по энтальпиям берутся из таблиц (точно), а для продуктов сгорания вычисляются (с погрешностью). В [2] отмечено, что достигнутая точность, а, следовательно, и момент окончания расчетов назначался погрешностью определения состава продуктов сгорания (парциальных давлений) и не обсуждается оставшийся количественный дисбаланс по энтальпиям топлива и продуктов сгорания. В предлагаемой модели для расчета неизвестного состава горючего соблюдение баланса энтальпии является основным требованием. В связи с этим возникла необходимость проверки точности соблюдения при расчетах в [4] этого баланса и возможности использования имеющихся данных для проверки рассматриваемой модели. Для выбранной топливной пары были выполнены расчеты при различных соотношениях компонентов, результаты которых, а также соответствующие результаты из [4] приведены в табл. 2.

По соблюдению баланса энтальпий расчеты выполнялись до достижения относительной погрешности вычислений  $\sim 10^{-4}$ . Данные приведены для давления в камере сгорания (топке)  $P_{\text{КС}} = 1$  бар. Парциальные давления также измеряются в барах. В соответствии с [2] расчет выполнен таким образом, чтобы парциальные давления были равны мольным долям продуктов сгорания. Расход продуктов сгорания через камеру сгорания составляет 1 кмоль/с.

Сравнение результатов показывает, что при  $\alpha = 0,4$  рассчитанные температура и энтальпия продуктов сгорания близки величинам, приведенным в [4]. При  $\alpha = 0,7$  и  $\alpha = 2,0$  отклонения температур также незначительны и составляют соответственно  $\Delta T = 16$  К и  $\Delta T = 40$  К при относительной погрешности  $\varepsilon \approx 0,5 \%$  и  $\varepsilon \approx 1,4 \%$ .

На первом этапе тестировалось решение прямой задачи на основе уравнений (3)–(5). Метод решения исходной системы уравнений, полиномы свойств, используемые для вычисления энтальпий и энтропий продуктов сгорания, приняты такими же, как и описанные в [2] и использованные в [4]. Замыкающим выступает уравнение баланса энтальпий топлива и продуктов сгорания. В связи с этим была оценена погрешность их аппроксимации. В [2] отмечено, что, например, для (НС1) при  $T = 3000$  К абсолютная погрешность аппроксимации по сравнению с [5] составляет  $\sim 0,08$  кДж/моль или 17 % в относительных величинах. Вычисленная энтальпия составляет 0,464 кДж/моль. Это принимается допустимой погрешностью, т.к. приводит к ошибке при определении температуры не более

Сравнение результатов из [4] с результатами решения прямой задачи при уточнении баланса по энтальпиям

Коэф. избытка окислителя	$\alpha = 0,4$		$\alpha = 0,7$		$\alpha = 2,0$		
	[4]	расчет	[4]	расчет	[4]	расчет	
кДж	$I_T = -17588$		$I_T = -18523$		$I_T = -17112$		
кМоль	$I_{пс} = -7625$	$I_{пс} = -7584$	$I_{пс} = -22195$	$I_{пс} = -18520$	$I_{пс} = -25000$	$I_{пс} = -17096$	
$T, K$	2124	2125	3065	3081	2855	2895	
Парциальные давления	$P_{CO}$	0,4868	0,4869	0,3458	0,3440	0,0618	0,0594
	$P_{CO_2}$	0,0181	0,0181	0,1108	0,1131	0,2036	0,2031
	$P_{H_2O}$	0,0783	0,0784	0,2744	0,2761	0,2127	0,2047
	$P_{OH}$	–	–	0,0551	0,0592	0,0660	0,0778
	$P_{H_2}$	0,4143	0,4143	0,1124	0,1094	0,0090	0,0082
	$P_{O_2}$	–	–	0,0180	0,0130	0,3952	0,3783
	$P_H$	0,0023	0,0022	0,0645	0,0638	0,0094	0,0098
	$P_O$	–	–	0,0189	0,0213	0,0422	0,0587
	$P_C$	–	–	–	–	–	–
	$M_T$	–	0,505	–	0,4571	–	0,2625

Энтальпии же продуктов сгорания в [4] имеют значительный небаланс с энтальпиями топлива: при  $\alpha = 0,7 \approx 20\%$ , а при  $\alpha = 2,0 \approx 46\%$ . Не смотря на это, парциальные давления газов, входящих в продукты сгорания в обоих случаях приблизительно одинаковы.

На основании выше изложенного определено:

– оценка работоспособности рассматриваемой модели и точности полученных на её основе результатов расчетов (речь идет о математической точности) должны проводиться по уточненным, по сравнению с [4], данным температурам;

– данные из [4] могут рассматриваться как ориентировочные для контроля рассчитанного состава продуктов сгорания;

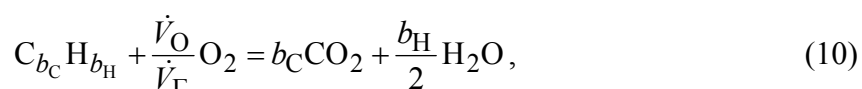
– высокая чувствительность энтальпии продуктов сгорания к их температуре может привести к неустойчивости при решении составленной на основе рассматриваемой модели системы нелинейных уравнений.

Для решения расширенной задачи в тестовом варианте взяты точки, соответствующие  $\alpha = 0,4; 0,7; 1,0$ . Вычислены соответствующие им отношения объемных расходов (7). Решены прямые задачи и уточнены соответствующие им температуры и составы продуктов сгорания. При математической корректности предлагаемой модели численное решение составленной на её основе системы уравнений оказалось плохо устойчивым, зависимым от начальных приближений. Для повышения устойчивости решения необходимо найти жесткую связь между определяемыми величинами, не изменяющуюся в процессе вычислений состава продуктов сгорания. С этой целью была определена связь между количеством атомов

[С] и [Н] в горючем при  $\alpha = 1$  (стехиометрическом соотношении компонентов). С одной стороны, из (7) при  $\alpha = 1$  следует

$$(\text{стех})\dot{V}_O / (\text{стех})\dot{V}_\Gamma = \alpha\chi_0 = \chi_0. \quad (9)$$

С другой стороны, при стехиометрическом соотношении количество максимальных валентностей окислительных элементов равно количеству максимальных валентностей восстановительных элементов. Поэтому применительно, например, к углеводородам и кислороду можно записать такой баланс



а из него баланс по атомам кислорода

$$2 \frac{\dot{V}_O}{\dot{V}_\Gamma} = 2b_C + \frac{b_H}{2}. \quad (11)$$

Это уравнение можно использовать в качестве одного из замыкающих для решения расширенной задачи вместо одного из уравнений баланса энтальпий (6). При этом отпадает необходимость в уравнениях для расчета состава продуктов сгорания одного из замеров, что для керосина с кислородом составляет 10 единиц и общее количество уравнений в этом случае уменьшается с 33 до 23. На практике при работе экстремального регулятора отношение объемных расходов горючего и окислителя, соответствующее стехиометрическому соотношению может быть определено следующим образом:

- замеренные объемные расходы при найденной максимальной температуре;
- по нескольким замерам (желательно с переходом через максимум температуры) строится аппроксимационная зависимость температуры от отношения объемных расходов горючего и окислителя и по ней определяется максимальная температура и соответствующее ей отношение объемных расходов;
- сочетание первого и второго способа с усреднением найденных отношений в случае их различия.

#### **Результаты проверки работоспособности модели**

В конечном варианте проверочный расчет выполнялся для двух отношений объемных расходов  $\dot{V}_O^{(1)} / \dot{V}_\Gamma^{(1)} = 0,5956$  и  $\dot{V}_O^{(2)} / \dot{V}_\Gamma^{(2)} = 1,0423$ , соответствующих  $\alpha^{(1)} = 0,4$  и  $\alpha^{(2)} = 0,7$ , а так же температурам  $T^{(1)} = 2125$  К и  $T^{(2)} = 3081$  К (табл. 2). Отношение объемных расходов при стехиометрическом соотношении принято  $\dot{V}_O^{(\text{стех})} / \dot{V}_\Gamma^{(\text{стех})} = 1,489$ .

Выбор из  $q$  индивидуальных веществ смеси газов продуктов сгорания  $m$  независимых компонентов, с помощью которых можно записать  $l$  независимых реакций образования оставшихся зависимых ( $q - m$ ) веществ, является наиболее существенным для формы записи уравнений (4). Наиболее просто, удобно и единообразно рассматривать диссоциацию всех молекулярных компонентов только на атомы. При



решении рассматриваемой тестовой задачи из списка (8) 9-ти возможных в продуктах сгорания компонентов выбрано  $m = 3$  независимых: [H], [O], [C]. С их помощью записаны  $l = 6$  независимых реакций (4) образования оставшихся зависимых веществ [CO], [CO<sub>2</sub>], [H<sub>2</sub>O], [OH], [H<sub>2</sub>], [O<sub>2</sub>].

Конечная система уравнений содержит:

- два комплекта по 10 уравнений на основании (3)–(5), соответствующим двум измерениям температур и объемных расходов. Каждый комплект описывает 9 неизвестных парциальных давлений (8) и  $M_T$ , соответствующих определенному замеру;

- два уравнения (6), соответствующие этим же измерениям;

- уравнение (11).

Таким образом, имеем систему 23 алгебраических уравнений, многие из которых нелинейные. Решение ищем в численном виде. В качестве неизвестных целесообразно принять не сами определяемые величины, а их логарифмы. Логарифмическая форма позволяет не опасаться «исчезновения» определяемых неизвестных в процессе решения при любых значениях температур и давлений. Такая запись так же исключает возможность появления в процессе расчета отрицательных значений парциальных давлений, не имеющих физического смысла. Это повышает устойчивость численного решения, которое ищем с помощью метода Ньютона путем разложения уравнений системы в ряд Тейлора по степеням не выше первой. Производные ищем не по определяемым неизвестным, а по их логарифмам. Поправки так же определяются для логарифмов неизвестных. Для повышения устойчивости численного решения приняты специальные меры. При поиске нового приближения к предыдущему прибавляется только часть найденной поправки. Величина этой части определяется коэффициентом нижней релаксации. Он подбирается опытным путем, находится в интервале [0...1], задается перед началом расчетов. Давление в камере сгорания  $P_\Sigma = 1$  бар. Коэффициент нижней релаксации при расчете новых приближений  $k = 0,4$  во всех случаях.

Результаты расчета приведены в табл. 3.

В табл. 3:

Столбец 1:

- $P$  – парциальные давления (бар);

- $M_T$  – количество кмоль топлив в реакции для получения 1 кмоль продуктов сгорания;

- <sup>(1)</sup>, <sup>(2)</sup> – верхние индексы показывают номер замера, к которому относится рассматриваемый параметр;

- $b_H$ ,  $b_C$  – количество атомов водорода и углерода в формуле горючего;

- $I_T$  – энтальпия горючего (кДж/кмоль).

Столбец 2: начальные приближения.

Столбцы (3–6): данные расчета при решении расширенной задачи через 5, 10, 15, 20 шагов соответственно.

Столбец 7: уточненные данные, полученные при решении прямой задачи (табл. 2), используемые для оценки точности решения рассматриваемой задачи (эталон).

Столбец 8: результаты расчета при решении расширенной задачи с исходными данными (температурами) из [4].

Таблица 3

Результаты расчета по расширенной модели с использованием уравнения (11)

Парциальные давления	Нач. пригл.	5 шагов расчета	10 шагов расчета	15 шагов расчета	20 шагов расчета	Точн. реш. (прям. задача)	Данные по работе [4]
1	2	3	4	5	6	7	8
$P_{CO}^{(1)}$	1,0	0,6005	0,4944	0,4872	0,4867	0,4869	0,4432
$P_{CO_2}^{(1)}$	1,0	0,0314	0,0190	0,0182	0,0181	0,0181	0,0203
$P_{H_2O}^{(1)}$	1,0	0,1393	0,0828	0,0789	0,0786	0,0784	0,1011
$P_{OH}^{(1)}$	0,1	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
$P_{H_2}^{(1)}$	0,1	0,5003	0,4208	0,4149	0,4145	0,4143	0,4332
$P_{O_2}^{(1)}$	0,1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$P_H^{(1)}$	0,1	0,0035	0,0023	0,0022	0,0022	0,0022	0,0023
$P_O^{(1)}$	0,1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$P_C^{(1)}$	0,1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$M_T^{(1)}$	1,0	0,5498	0,5082	0,5051	0,5049	0,5050	0,4910
$P_{CO}^{(2)}$	1,0	0,4037	0,3480	0,3441	0,3438	0,3440	0,3172
$P_{CO_2}^{(2)}$	1,0	0,1322	0,1144	0,1132	0,1131	0,1131	0,1042
$P_{H_2O}^{(2)}$	1,0	0,3353	0,2807	0,2767	0,2763	0,2761	0,3043
$P_{OH}^{(2)}$	0,1	0,0622	0,0594	0,0592	0,0592	0,0592	0,0584
$P_{H_2}^{(2)}$	0,1	0,1316	0,1111	0,1096	0,1095	0,1094	0,1213
$P_{O_2}^{(2)}$	0,1	0,0128	0,0130	0,0130	0,0130	0,0130	0,0117
$P_H^{(2)}$	0,1	0,0730	0,0645	0,0639	0,0638	0,0638	0,0641
$P_O^{(2)}$	0,1	0,0221	0,0214	0,0213	0,0213	0,0213	0,0191
$P_C^{(2)}$	0,1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$M_T^{(2)}$	1,0	0,4854	0,4591	0,4572	0,4571	0,4571	0,4464
$b_H$	1,0	2,0158	1,9631	1,9578	1,9574	1,9560	2,1808
$b_C$	1,0	0,9773	0,9976	0,9995	0,9996	1,0000	0,9438
$I_\Gamma$	-12000	-79699	-7223	-6567	-6517	-27238	-30527

**Анализ результаты расчетов**

– сравнение данных из столбцов 6 и 7 показывает, что решение получено с высокой степенью математической точности, т.е. модель не дает каких либо искажений, связанных с допущениями или неточностью численных расчетов. Незначительные расхождения в результатах (в 4-м знаке) могут быть объяснены тем, что эталонные данные (столбец 7) были получены с такой же точностью;

– быстрая сходимость результатов расчетов (столбцы 3–6) позволяет, хотя и косвенным образом, судить о высокой устойчивости численного решения;

– пробные расчеты и сравнение результатов (столбцы 7 и 8) показывают высокую чувствительность и значительную погрешность в определении количественного состава условной формулы горючего и его энтальпии. Но

погрешности в определении состава продуктов сгорания не столь велики (это наблюдается и при решении прямой задачи) и в данном случае не превосходят половины разряда второй значащей цифры, что соответствует относительной погрешности  $\sim 0,05$  (допустимой инженерной точности).

### **Выводы**

1) Математическая модель на основании уравнений вида (3)–(6), (11) для газообразного топлива позволяет определить количественный состав его условной формулы, энтальпию топлива, состав продуктов сгорания при использовании в качестве исходных данных величин замеренных технологических параметров (расходов компонентов топлива, соответствующих им температур в камере сгорания), известного элементного (качественного) состава топлива ( $[C]$ ,  $[H]$ ,  $[O]$ , и т.д.).

2) Математическая точность модели позволяет использовать полученные на её основе данные для оценки чувствительности результатов расчетов на неточность измерительного канала исходных технологических параметров.

3) При решении реальных технологических задач энтальпии и энтропии продуктов сгорания должны определяться с максимально возможной точностью на основании таблиц типа [5] или программных комплексов, табулирующих подобного рода таблицы. Полиномиальные зависимости для определения энтальпий и энтропий продуктов сгорания, описанные в [2], в следствии значительных погрешностей аппроксимации, не могут быть использованы для решения расширенной задачи.

**Список литературы:** 1. Кинаш, А. В. Корреляционно–экстремальная система управления котлами на основе текущих оценок КПД в металлургическом производстве: дис. ... канд. техн. наук: 05.13.06; защищена 28.07.2011; утв. 23.09.2011 / Кинаш Александр Викторович. – Ч.: РФ, ЮУГУ «АУТПиП», 2011. – 242 с. 2. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник [Текст]: справ. / В. П. Глушко, В. Е. Алемасов, А. П. Ваничев и др. – М.: ВИНТИ, 1971. – Том 1. – 266 с. 3. Huf, V. N. Rept. 1037 [Текст] / V. N. Huf, S. Gordon, V. E. Morrel // NASA. – 1951. 4. Глушко, В. П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник [Текст] / В. П. Глушко, В. Е. Алемасов М.: ВИНТИ, 1972. – Т. 2. – 390 с. 5. Гурвич, Л. В. Термодинамические свойства индивидуальных веществ [Текст] / Л. В. Гурвич, И. В. Вейц, В. А. Медведев. – М.: Наука, 1978. – Т. 1. – 328 с.

**Bibliography (transliterated):** 1. Kinash, A. V. *Korreljacionno–jekstremal'naja sistema upravlenija kotlami na osnove tekushhijh ocenok KPD v metallurgicheskom proizvodstve: dis. ... kand. tehn. nauk.* Ch.: RF, JuUGU «АУТПиП», 2011. Print. 2. Glushko, V. P., et al. *Termodinamicheskie i teplofizicheskie svojstva produktov sgoranija: spravochnik.* Vol. 1. Moscow: VINITI, 1971. Print. 3. Huf, V. N., S. Gordon and V. E. Morrel. "Rept. 1037." *NASA.* 1951. Print. 4. Glushko, V. P., and V. E. Alemasov. *Termodinamicheskie i teplofizicheskie svojstva produktov sgoranija: spravochnik.* Vol. 2. Moscow: VINITI, 1972. Print. 5. Gurvich, L. V., I. V. Vejc and V. A. Medvedev. *Termodinamicheskie svojstva individual'nyh veshhestv.* Vol. 1. Moscow: Nauka, 1978. Print.

*Поступила (received) 04.01.2014*