

Расчет равновесного состава и температуры продуктов сгорания н-декана (суррогата авиационного керосина)

Введение

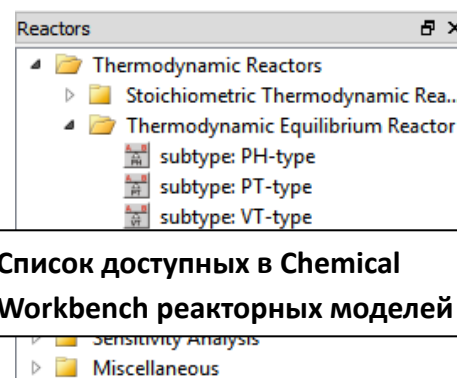
Состав и температура продуктов сгорания являются неотъемлемой частью анализа энергетических, энергетических и транспортных систем. Он широко используется для оценки эффективности, теплового анализа, а также выбора начального начального приближения в детальных исследованиях таких систем.

Постановка задачи

Требуется рассчитать равновесную температуру и состав продуктов сгорания н-декана $C_{10}H_{22}$ – суррогата авиационного керосина - для диапазона стехиометрических отношений смеси. Начальная температура воздуха керосина составляет 600 К, начальное давление - 10 атм. Стехиометрические отношения от 0,5 до 3.

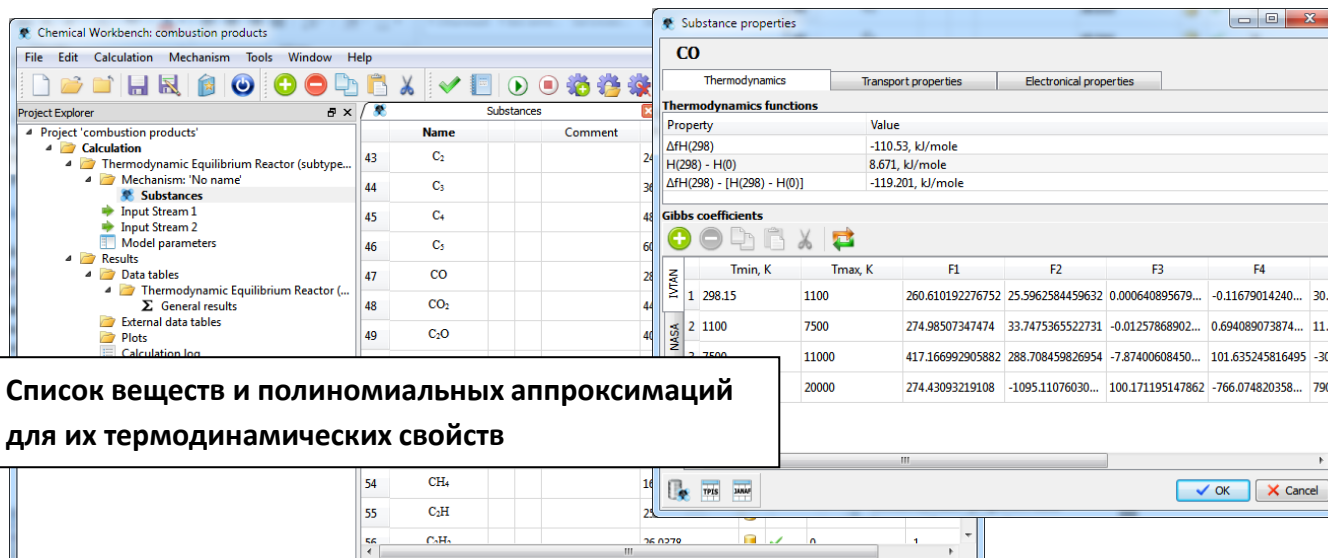
Решение задачи в Chemical Workbench

Для расчета равновесного состава и температуры сгорания н-декана в воздухе мы используем модель полного химического равновесия **TER_PH** (адиабатические условия при постоянном давлении), доступную в Chemical Workbench. Эта модель требует информации только о списке всех возможных продуктов, их термодинамических свойствах (удельная теплоемкость, энтальпия образования, стандартная энтропия) и начальные условия. Информация о протекающих химических реакциях не требуется.



Список доступных в Chemical Workbench реакторных моделей

Список возможных продуктов сгорания (механизм) генерируется автоматически по запросу из базы данных KintechDB, которая тесно интегрирована с Chemical Workbench и предоставляет справочные данные по термодинамическим свойствам для более чем 4100 веществ. Для горения н-декана запрос к базе генерирует список из 423 возможных веществ, состоящих из элементов С, Н, О, N, составляющих исходную смесь: н-декана ($C_{10}H_{22}$) и воздуха ($0,2 O_2 + 0,78 N_2$). Одновременно загружаются и их термодинамические свойства.



Список веществ и полиномиальных аппроксимаций для их термодинамических свойств

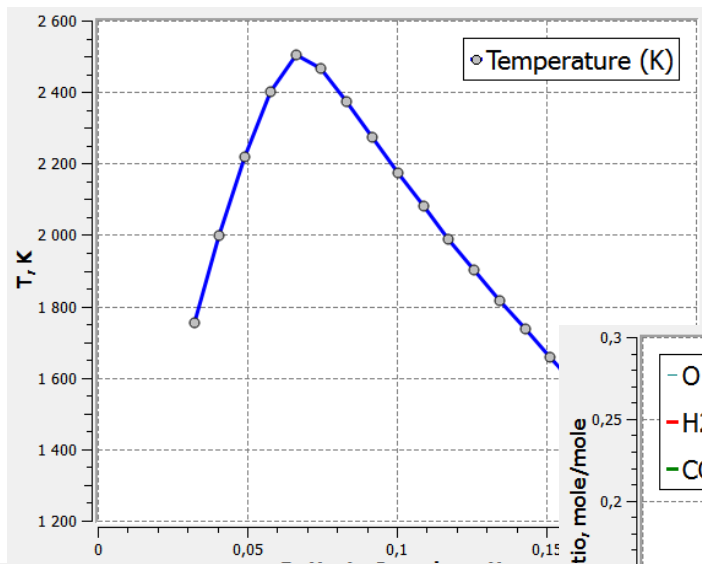
	Tmin, K	Tmax, K	F1	F2	F3	F4
1	298.15	1100	260.610192276752	25.5962584459632	0.000640895679...	-0.11679014240...
2	1100	7500	274.98507347474	33.7475365522731	-0.01257868902...	0.694089073874...
3	7500	11000	417.166992905882	288.708459826954	-7.87400608450...	101.635245816495
4	11000	20000	274.43093219108	-1095.11076030...	100.171195147862	-766.074820358...

Stream properties	
Состав исходной смеси	
Comment	
Flow Rate	1, mole/s
Temperature	600, K
Fraction units	Mole
Substances fractions	
Substance	Fraction
1 C ₁₀ H ₂₂	Variable
2 O ₂	1
3 N ₂	3.76

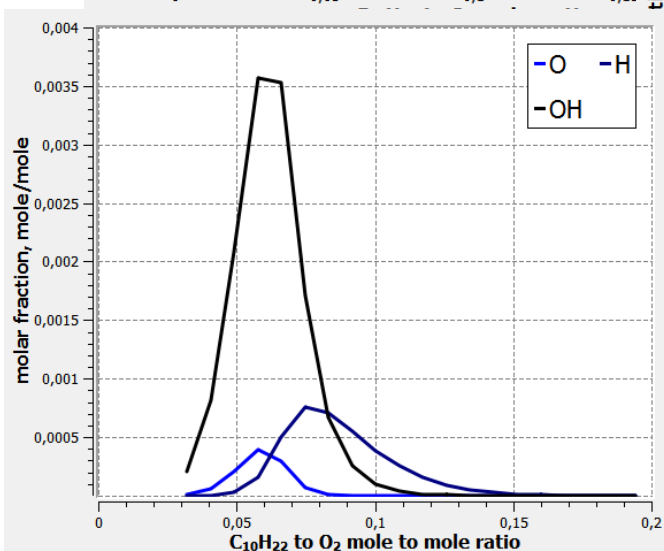
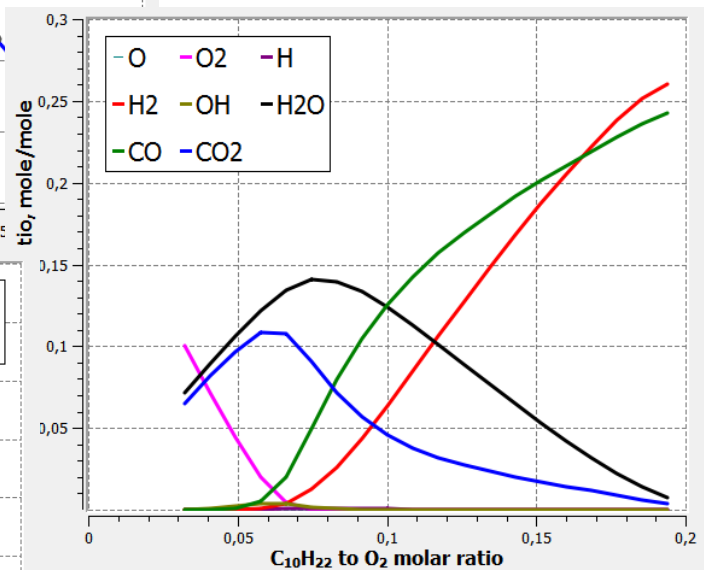
Исходную смесь устанавливают в том же входном потоке реактора с составом $x\text{C}_{10}\text{H}_{22} + \text{O}_2 + 3,76\text{N}_2$ (в молях), где $x = 0,0322 - 0,194$ ($\phi = 0,5 - 3$). Начальная температура 600 К, давление в реакторе 10 атм.

Результаты

Как и следовало ожидать, максимальная температура горения n-декана достигается в почти стехиометрических условиях. Максимальное значение температуры составляет 2502 К. В условиях, богатых топливом, концентрация CO и H₂ возрастает, в то время как другие продукты сгорания отсутствуют из-за недостатка кислорода. Концентрация радикалов низкая, концентрация H и O составляет менее 0,001 мольной доли, для OH - порядка нескольких тысячных.



Равновесная температура и состав продуктов сгорания n-декана с воздухом: $\phi = 0,5 - 3$, $T_0 = 600\text{K}$, $P = 10\text{ atm}$



Следующие шаги

- Сохранить в списке веществ только C₁₀H₂₂, O₂, N₂, CO, CO₂, H₂, N₂ и посмотреть, как изменится температура горения из-за пренебрежения диссоциацией продуктов сгорания..
- Ввести топливо C₁₀H₂₂ с температурой 300К в качестве отдельного входного потока TER_PH модели реактора. Разрешить модели реактора автоматически учитывать разные температуры отдельных потоков. Таким образом, утомительный расчет начальной температуры смеси опускается.