

УДК 621.435

ПРИМЕНЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ MICROSOFT EXCEL ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТЕРМОДИНАМИКИ ГОРЕНИЯ ТОПЛИВ

©2013 Е. Л. Михеенков, С. О. Некрасова, Е. А. Рамзаева

Самарский государственный аэрокосмический университет
имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет)

Практически основным источником получения полезного эффекта цикла тепловой машины является тепловая энергия от сгорания топлив. Для расчёта циклов тепловых машин необходимо знание температуры и термодинамических характеристик продуктов сгорания, являющихся рабочим телом в процессах расширения. Серьёзной задачей становится решение балансов масс исходных веществ и продуктов химических реакций, энергетических балансов реакций. Для освоения расчётных методов реакций горения на этапе обучения студентов и инженеров полезными, на взгляд авторов, являются электронные таблицы Microsoft Excel, входящие в обязательный набор программных продуктов Microsoft Office компьютеров и ноутбуков.

Тепловые двигатели, энергетические установки, топлива, максимальные температуры цикла, термодинамические свойства продуктов сгорания, методы и способы решения задач термодинамики горения, электронные таблицы Excel.

Под теплотворной способностью топлива обычно понимают количество тепловой энергии, выделяемое веществом в результате химической реакции горения. Условно вещества, способные вступать в соединения с другими веществами с выделением теплоты, называют топливом (горючим), а вещества, вступающие с ними в химические реакции, называют окислителями.

Основными веществами, входящими в состав топлива, являются углерод и водород и их химические соединения, называемые углеводородами, а при наличии в них кислорода – спиртами. Окислителем является кислород воздуха, а для спиртов – и находящийся в топливе кислород. Исходными уравнениями баланса масс исходных компонентов и продуктов реакций являются уравнения этих реакций. Поэтому массовые доли представляются молями веществ как для исходных реагентов, так и для молей продуктов реакции. При горении основных веществ в воздухе массовые соотношения между горючим и окислителем таковы.

При полном сгорании углерода С расходуется $8/3$ кг кислорода O_2 и

получается $11/3$ кг двуокиси углерода CO_2 .

При неполном сгорании углерода С расходуется $4/3$ кг O_2 и получается $8/3$ кг окиси углерода CO .

При сгорании водорода H_2 на 1 кг H_2 расходуется $4/3$ кг O_2 и получается 7 кг воды H_2O .

Основным источником окислителя для большинства энергетических установок является кислород атмосферного воздуха. Концентрация кислорода в воздухе определяет минимальное количество воздуха, потребное для сгорания единицы массы (объёма) топлива. Его называют теоретически необходимым количеством воздуха и в отечественной научной литературе обозначают L_0 (V_0), а смесь этого количества воздуха (L_0) с единицей массы или объёма горючего (для V_0) называют стехиометрической.

При горении в воздухе теплота сгорания (или теплотворная способность топлива) определяется (кДж/кг) опытным путём при сжигании в калориметрической бомбе или по эмпирической формуле Д.И. Менделеева:

$$Q = 339C + 1256H - 109(O - S) - 25(9H + W),$$

где С, Н, S и О – массовое процентное содержание углерода, водорода, серы и кислорода в топливе, а W – процент влажности топлива.

Учитывая тот факт, что образующаяся от сгорания водорода вода может находиться в паровой или жидкой фазе, различают теплотворную способность топлива при сгорании углеводородов: с учётом конденсации паров воды имеем дело с *высшей теплотворной способностью* (она включает в себя теплоту конденсации паров воды), а в случае сохранения воды в паровой фазе имеем дело с *низшей теплотворной способностью* топлива.

Низшая теплотворная способность сгорания сложного топлива (кДж/м^3) рассчитывается по формуле

$$Q = 108\text{H}_2 + 126\text{CO} + 358\text{CH}_4 + 236\text{H}_2\text{S} + 637\text{C}_2\text{H}_6 + 913\text{C}_3\text{H}_8$$

Максимальный уровень выделения тепла при сгорании топлива соответствует стехиометрической смеси.

Выделившаяся в ходе химической реакции теплота идёт на повышение температуры продуктов сгорания. Автор [2] предлагает рассматривать три вида температур горения топлив: калориметрическая, теоретическая и расчётная. Максимальную температуру ПС без учета процессов диссоциации в ходе горения автор называет калориметрической $t_{\text{кал}}$. Температуру, определяемую с учетом диссоциации, автор [1] предлагает именовать $t_{\text{теор}}$.

Поскольку $t_{\text{кал}}$ углерода и водорода близки между собой, следует ожидать, что $t_{\text{кал}}$ разных углеводородов также должны близко совпадать друг с другом. Правда, здесь имеет место неравенство теплот разрыва связей внутри молекул у различных углеводородов. Если расщепление молекул углеводородов является эндотермической реакцией, как это имеет место у алканов и, например, у метана, то $t_{\text{кал}}$ углеводородов, соответственно, ниже $t_{\text{кал}}$ углерода и водорода. Если же расщепление молекул является экзотермическим процессом, что

характерно для непредельных углеводородов (например, у этилена и особо у ацетилен), то $t_{\text{кал}}$ этих углеводородов выше, чем у углерода и водорода. С увеличением молекулярной массы и числа групп гомологической разности « CH_2 » в молекуле $t_{\text{кал}}$ алканов возрастает с 2043°C у метана до 2132°C у эйкозана ($\text{C}_{20}\text{H}_{42}$), $t_{\text{кал}}$ алкенов снижается с 2284°C у этена (этилена) до 2151°C у эйкозена ($\text{C}_{20}\text{H}_{40}$), а $t_{\text{кал}}$ алкинов с 2620°C у этина (ацетилен) до 2167°C у эйкозина ($\text{C}_{20}\text{H}_{38}$). Расчётной называют температуру, подсчитанную по балансу энтальпий продуктов сгорания и их теплоёмкостей.

Рассмотрим пример расчёта сгорания газообразных горючих в воздухе при заданном объёмном составе горючего.

Воспользуемся наиболее надёжным источником свойств природных газов – ГОСТом 31369 – 2008 «Газ природный. Вычисление теплоты сгорания, относительной плотности и числа Воббе на основе компонентного состава». (Видимо, надо дать пояснения понятий относительная плотность и число Воббе). Относительной плотностью называют отношение плотности газа к плотности воздуха, подсчитанных при единичных стандартных значениях давления и температуры – 101,3 кПа и 0, 15 или 25°C . Число Воббе – это характеристика горючего газа, определяющая взаимозаменяемость горючих газов при сжигании в бытовых и промышленных горелочных устройствах; измеряется в мегаджоулях на кубический метр).

В табл. 1 приводятся данные по низшей теплотворной способности стандартных углеводородных горючих, молярной массе, плотности, потребным количествам воздуха для стехиометрического сгорания, количественному составу продуктов сгорания на базе данных ГОСТа и по уравнению Д.И. Менделеева.

Интересным будет сопоставление этих расчётных величин, основанных на реакциях горения, со справочными данными.

Таблица 1. Анализ состава продуктов сгорания и calorиметрической температуры природных газов, объёмные доли. Исходные данные - ГОСТ 31369-2008

Газ	Формула	Молек. вес	Газовая постоянная	r , кг/м ³ (T=298 K)	H_u , МДж/м ³	H_u , кДж/моль
Бутан	C ₄ H ₁₀	58,123	143,05008	2,37690724	112,4	2657,3
Бутилен	C ₄ H ₈	56,108	148,18742	2,29450495	107	2533
Водород	H ₂	2,0159	4142,4605	0,08243909	10,223	241,81
Метан	CH ₄	16,043	518,26342	0,65606942	33,948	802,6
Окись углерода	CO	28,01	296,84041	1,14545312	11,96	282,98
Пропан	C ₃ H ₈	44,097	188,55024	1,80332189	86,42	2043,1
Пропилен	C ₃ H ₆	42,081	197,58323	1,72087871	81,46	1925,97
Этан	C ₂ H ₆	30,07	276,50482	1,22969566	60,43	1428,6
Этилен	C ₂ H ₄	28,054	296,37485	1,14725248	55,96	1323,1
Ацителен	C ₂ H ₂	26,038	319,32176	1,06480929	53,16	1257,03

Таблица 1 (окончание). Анализ состава продуктов сгорания и calorиметрической температуры природных газов, объёмные доли.

Газ	Потребное кол-во воздуха		Объемы продуктов сгорания, м ³ /м ³				$m_{\text{прод.сг.}}$	$R_{\text{прод.сг.}}$, Дж/кгК
	V_0 , м ³ /м ³	$n+m/4$	CO ₂	H ₂ O	N ₂	всего		
Бутан	30,95238	6,5	4	5	24,44	33,44	28,43174	292,4372
Бутилен	28,57143	6	4	4	22,56	30,56	28,79835	288,7145
Водород	2,380952	0,5	0	1	1,88	2,88	24,54166	338,7912
Метан	9,52381	2	1	2	7,52	10,52	27,63302	300,89
Окись углерода	2,38	1	1	0	1,38	2,38	34,73424	239,3747
Пропан	23,80952	5	3	4	18,8	25,8	28,32318	293,5581
Пропилен	21,42857	4,5	3	3	16,92	22,92	28,79835	288,7145
Этан	16,66667	3,5	2	3	13,16	18,16	28,12328	295,6448
Этилен	14,28571	3	2	2	11,28	15,28	28,79835	288,7145
Ацителен	11,90476	2,5	2	1	9,4	12,4	28,787	279,1319
$V_0 \rightarrow (n + m/4)(100/21)$			n	$m/2$		0.7896	V_0	$V - V_0 = m/4$

Расход кислорода – моль на моль или $\text{нм}^3/\text{нм}^3$ для стехиометрического сгорания углеводородов с обобщённой формулой C_nH_m находится по уравнению

$$C_nH_m + \left(n + \frac{m}{4}\right)O_2 \Leftrightarrow nCO_2 + \frac{m}{2}H_2O.$$

Теоретически необходимое количество воздуха для сложного горючего находят по развёрнутой зависимости

$$V^0 = 0.048[0.5CO + 0.5H_2 + 1.5H_2S + [+ 2CH_4 + \sum \left(n + \frac{m}{4}\right)C_nH_m - O_2]], \text{ нм}^3/\text{нм}^3$$

Коэффициент перед квадратной скобкой является обратной величиной объёмной доли кислорода в воздухе на уровне земли – 21,00 %. Концентрации веществ подставляются в виде объёмных процентов.

В расчётной табл. 1 приведены для объёмных долей состава газов по ГОСТ 31369 – 2008 значения молекулярной массы, газовой постоянной, плотности и низшей теплотворной способности наиболее распространённых природных газов для температуры +25⁰С. Там же приведены справочные материалы для этих же газов из [2]. Таблица дополнена расчётным значением низшей теплоты сгорания по приведённой выше

зависимости для сложных горючих. Важное значение играют обобщённые коэффициенты n и m для углеводородов. Столбцы со значениями объемов продуктов сгорания, как это легко обнаружить, определяются величинами n (объемы для CO_2) и $m/2$ (объемы для H_2O). Столбец для N_2 равен 0,79 от V_0 .

Разность объемов продуктов сгорания и потребного количества воздуха равна $m/4 \text{ м}^3$. Простое соотношение потребных объемов воздуха и объемов продуктов сгорания с коэффициентами n и m имеет место, если горючее состоит только из углерода и водорода. При наличии кислорода, азота и серы в горючем потребные объёмы воздуха и состав продуктов сгорания необходимо определять с использованием развёрнутых зависимостей и учётом всех компонентов.

Калориметрическая температура продуктов сгорания находится из условия равенства энтальпии продуктов сгорания низшей теплотворной способности горючего. Суммарная энергия продуктов сгорания E_{nc} приведена в приложении II из книги [1]. Достаточно перебором нескольких температурных уровней найти такое значение для каждого горючего, чтобы с учетом известного объёмного состава продуктов сгорания найти момент, когда суммарная энергия продуктов сгорания превысит значение низшей теплотворной способности.

Надо напомнить, что полная энергия составляющих продуктов сгорания по приложению II дана при температуре $+25^\circ\text{C}$.

При необходимости определения калориметрических температур при начальном уровне, например в 100, 200 $^\circ\text{C}$ и т.д. надо в соответствии с приложением II из книги [1] провести расчёт массива полной энергии E_{nc} продуктов сгорания при более высоких температурах, а

начальное значение H_u увеличить на величину роста энтальпии воздуха при новой начальной температуре горения. Энтальпию воздуха принимаем по данным таблиц $T-I-\pi$ функций, хорошо подтверждённым расчётной практикой и широко применяемым в расчётах процессов и циклов тепловых двигателей в СГАУ.

При расчётах энергии продуктов сгорания изменение энтальпии воздуха учитывается теоретическим потребным расходом воздуха для стехиометрического горения каждого конкретного газа. Затем перебором определяется уровень температур продуктов сгорания, когда энергия ПС станет равной новой исходной величине баланса энергий перед началом горения, так как величина низшей теплотворной способности топлива остаётся неизменной.

Результаты расчёта приведены в табл.2. Можно определить стехиометрическую температуру горения при любой начальной температуре горения. Увеличение калориметрической температуры меньше увеличения начальной температуры горения, но с увеличением температуры подогрева воздуха эта разность уменьшается. Фактически табл. 2 является продолжением табл. 1 в системе Microsoft Excel, расчёты требуют учёта большого количества факторов, размещившихся в верхней части единой таблицы.

Проведённые вычисления можно рекомендовать использовать при расчётах процессов и циклов тепловых машин при использовании в качестве горючего природных газов, а алгоритм и использование возможностей программного продукта Microsoft Excel рекомендовать в исследовании процессов горения как в учебных целях, так и при оценочных расчётах в научных исследованиях.

Таблица 2. Расчёт calorиметрической температуры сгорания при начальной температуре $t=25\text{ }^{\circ}\text{C}$

Газ	Формула	H_u , кДж/моль	T , К	E_{CO_2}	$E_{\text{H}_2\text{O}}$	E_{N_2}
Бутан	C4H10	2657,3	2200	103,874508	82,60564	63,43
Бутилен	C4H8	2533	2300	110,029104	87,755328	67,07
Водород	H2	241.81	2400	116,1837	92,94696	70,72
Метан	CH4	802.6	2500	122,380164	98,222328	74,36
Окись углерода	CO	282.98	2900	147,37536	119,49127	89,1
Пропан	C3H8	2043.1	3000	153.65556	124.89224	92.821356
Пропилен	C3H6	1925.97	3100	159.93576	130.29322	96.547608
Этан	C2H6	1428.6	3200	166.257828	135.73606	100.23199
Этилен	C2H4	1323.1	3300	172.621764	141.1789	104.00011
Ацителен	C2H2	1257.03	3400	178.943832	145.6636	107.72636

Таблица 2 (продолжение). Расчёт calorиметрической температуры сгорания при начальной температуре $t=25\text{ }^{\circ}\text{C}$

Газ	Формула	E_{nc} 2200	E_{nc} 2300	E_{nc} 2400	E_{nc} 2500	E_{nc} 2900	E_{nc} 3000
Бутан	C4H10	2378.7555	2518.146	2657.745	2797.931	3364.442	3507.637
Бутилен	C4H8	2176.9015	2304.294	2431.854	2559.917	3077.452	3208.241
Водород	H2	201.854	213.8517	225.8913	238.0146	286.9901	299.3964
Метан	CH4	746.07939	789.9252	833.8548	238.0145	286.9901	1101.457
Окись углерода	CO	191.40794	202.5892	213.7705	224.9936	270.3266	281.749
Пропан	C3H8	1834.5302	1942.072	2049.782	2157.952	2959.079	2705.577
Пропилен	C3H6	1632.6762	1728.221	1823.891	1919.938	2308.089	2406.181
Этан	C2H6	1290.3048	1365.999	1441.818	1517.973	1825.716	1903.517
Этилен	C2H4	1088.4508	1152.147	1215.927	1279.958	1538.726	1604.121
Ацителен	C2H2	886.59677	938.2954	990.0358	1041.944	1251.736	1304.724

Таблица 2 (окончание). Расчёт calorиметрической температуры сгорания при начальной температуре $t=25\text{ }^{\circ}\text{C}$

Газ	Формула	E_{nc} 3100	E_{nc} 3200	E_{nc} 3300	E_{nc} 3400	$T_{\text{кал}}$, К	$t_{\text{кал}}$, $^{\circ}\text{C}$
Бутан	C4H10	3650.8327	3793.381	3938.144	4081.92568	2400	2127
Бутилен	C4H8	3339.0299	3469.209	3601.445	3732.7365	2421.018	2205.98
Водород	H2	311.802719	324.1722	336.6991	349.18917	2530.999	2257.99
Метан	CH4	1146.5602	1191.475	1237.06	1282.3733	2340.553	2055.85
Окись углерода	CO	293.171459	304.578	316.1419	327.60621	3011.648	2738.65
Пропан	C3H8	2816.07517	2926.079	3037.783	3148.7416	2306.204	2120.79
Пропилен	C3H6	2504.27246	2601.907	2701.084	2799.5524	2506.281	2233.28
Этан	C2H6	1981.31769	2058.777	2137.422	2215.5574	2382.566	2109.56
Этилен	C2H4	1669.51497	1734.605	1800.723	1866.3683	2580.031	2307.03
Ацителен	C2H2	1357.71225	1410.432	1464.023	1517.1791	2910.094	2637.09

Таблица 3. Расчет калориметрической температуры продуктов сгорания при различных значениях $t_{нач}$ горения

Газ	$Hu + \Delta I_{100}$	$T_{кал} + 100, K$	$\Delta t_{кал}$	$Hu + \Delta I_{200}$	$T_{кал} + 200, K$	$\Delta t_{кал}$
Бутан	2724.96332	2452.051	52.050884	2816.032	2512.912	60.86111
Бутилен	2595.45845	2527.47	48.490002	2679.5219	2592.442	64.97213
Водород	247.01487	2573.509	42.518693	254.02016	2630.723	57.2146
Метан	823.419482	2376.245	47.395325	851.44063	2439.842	63.59664
Оксись углерода	288.182789	3057.556	45.905747	295.15827	3117.655	60.09919
Пропан	2095.1487	2441.94	48.150203	2165.2016	2506.634	64.69355
Пропилен	1972.81383	2554.49	48.210377	2035.8614	2619.463	64.97213
Этан	1465.03409	2430.485	47.925022	1514.0711	2494.876	64.39143
Этилен	1354.32922	2614.962	34.931606	1396.3609	2679.934	64.97213
Ацителен	1283.05435	2959.713	49.623157	1318.0808	3025.207	65.49375

Таблица 3 (окончание). Расчёт калориметрической температуры продуктов сгорания при различных значениях $t_{нач}$ горения

Газ	$Hu + \Delta I_{300}$	$T_{кал} + 300, K$	$\Delta t_{кал}$	$Hu + \Delta I_{400}$	$T_{кал} + 400, K$	$\Delta t_{кал}$
Бутан	2908.77968	2578.267	65.35547	3015.95098	2653.94	75.67114
Бутилен	2765.13509	2658.612	66.16994	2864.06245	2735.07	76.46037
Водород	261.15459	2688.993	58.2694	269.398537	2756.32	67.33117
Метан	879.978362	2504.451	64.60889	912.954149	2578.4	73.95359
Оксись углерода	302.316853	3180.177	62.52197	310.557502	3251.71	71.53145
Пропан	2236.5459	2571.919	65.28476	2318.98537	2647.36	75.43754
Пропилен	2100.07131	2685.632	66.16994	2174.26683	2762.09	76.46037
Этан	1564.01213	2559.841	64.96464	1621.71976	2634.85	75.00751
Этилен	1439.16754	2746.104	66.16994	1488.63122	2822.56	76.46037
Ацителен	1353.75295	3092.528	67.32104	1394.97269	3170.68	78.14789

Библиографический список

1. Равич, М.Б. Топливо и эффективность его использования [Текст] / М.Б. Равич – М.: Наука, 1971, – 358 с.

2. Болгарский, А. В. Рабочие процессы в жидкостно-реактивных двигателях [Текст]: учеб. пособие для авиац. вузов / А. В. Болгарский, В. К. Щукин. – М.: Оборонгиз, 1953. – 424 с.

APPLYING THE POSSIBILITIES OF MICROSOFT EXCEL FOR SOLVING PROBLEMS OF FUEL BURNING THERMODYNAMICS

© 2013 E. L. Mikheenkova, S. O. Nekrasova, E. A. Ramzaeva

Samara State Aerospace University named after academician S. P. Korolyov
(National Research University)

Heat energy obtained from burning fuels is practically the main source of useful effect of the heat engine cycle. To calculate the cycles of heat engines it is necessary to know the temperature and thermodynamic characteristics of the products of combustion that constitute the working substance in the processes of expansion. The solution of the balances of the initial substance masses and those of the masses of products of chemical reactions as well as the power balances of reactions becomes a serious task. In the authors' opinion Microsoft Excel spreadsheets that make up the compulsory set of software for Microsoft Office computers and laptops are useful for the development of computational methods of reactions of burning at the stage of training students and engineers.

Heat engines, power plants, fuel, maximum temperature of the cycle, thermodynamic properties of combustion products, methods and ways of solving the tasks of combustion thermodynamics, Excel spreadsheets.

Информация об авторах

Михеенков Евгений Леонтьевич, кандидат технических наук, доцент кафедры теплотехники и тепловых двигателей, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет). E-mail: Eugene.mikh.@gmail.com. Область научных интересов: термодинамика циклов тепловых машин, теплопередача.

Некрасова Светлана Олеговна, инженер кафедры теплотехники и тепловых двигателей, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет). E-mail: yhoji@yandex.ru. Область научных интересов: компьютерное моделирование процессов горения и теплообмена.

Рамзаева Елена Анатольевна, инженер кафедры производства двигателей, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет). Область научных интересов: компьютерное моделирование и математические методы расчетов производственных процессов.

Mikheenkov Evgeny Leontyevich, candidate of technical science, associate professor of the department of heat engineering and heat engines, Samara State Aerospace University named after academician S. P. Korolyov (National Research University). E-mail: Eugene.mikh.@gmail.com. Area of research: thermodynamics of cycles of heat engines, heat transfer.

Nekrasova Svetlana Olegovna, engineer of the department of heat engineering and heat engines, Samara State Aerospace University named after academician S. P. Korolyov (National Research University). E-mail: yhoji@yandex.ru. Area of research: computer modeling and mathematical methods of calculation of production processes.

Ramzaeva Elena Anatolievna, engineer of the department of engine production, Samara State Aerospace University named after academician S. P. Korolyov (National Research University). Area of research: computer modeling and mathematical methods of calculation of production processes.