

УДК 662.613

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА В ВСГ НА СОСТАВ
ДЫМОВЫХ ГАЗОВ: ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ В CANTERA**
**INFLUENCE OF HYDROGEN CONCENTRATION IN HCG ON FLUE GAS
COMPOSITION: NUMERICAL ANALYSIS IN CANTERA**

В.А. Кочетков, Н.Ю. Набоков

Научный руководитель – И.А. Некало, старший преподаватель

Белорусский национальный технический университет,

г. Минск, Республика Беларусь

nekalo@bntu.by

V. Kochetkov, N. Nabokov

Supervisor – I. Nekalo, Senior Lecturer

Belarusian national technical university, Minsk, Belarus

Аннотация: в статье проводится анализ воздействия процентного содержания водорода в водородсодержащем газе (ВСГ) на количественный состав продуктов сгорания при помощи открытого программного кода Cantera.

Abstract: the article analyzes the effect of the percentage of hydrogen in hydrogen-containing gas (HCG) on the component composition of combustion products using the open-source software code Cantera.

Ключевые слова: водород содержащий газ, ВСГ, водород, природный газ, состав дымовых газов, снижение выбросов, cantera, моделирование.

Keywords: hydrogen gas, HCG, hydrogen, natural gas, flue gas composition, emission reduction, modeling.

Введение

Процессы горения топливных смесей играют ключевую роль в энергетике, промышленности и экологии, определяя эффективность использования ресурсов и уровень выбросов. Современные подходы к изучению этих процессов требуют точных инструментов моделирования, способных учитывать сложные химические взаимодействия. Одним из таких инструментов является программный комплекс Cantera, который позволяет рассчитывать равновесные составы, температуры реакций и динамику химических процессов на основе детализированных кинетических механизмов.

Основная часть

Водород содержащий газ представляет собой смесь природного газа с водородом (10% и выше). Переход передовых стран (Китай, Германия, США, Австралия и др.) на ВСГ или смесь водорода с сжиженным природным газом обусловлен снижением зависимости от ископаемого топлива и снижением выбросов [1]. Помимо уменьшения выбросов, добавление водорода в природный газ позволит увеличить температуру сгорания смеси [2].

Произведем анализ изменения количественного состава дымовых газов при добавлении различной концентрации водорода в природный газ с химическим составом, приведенным в таблице 1.

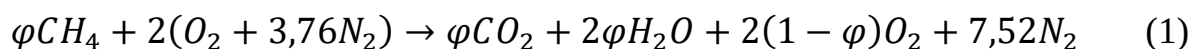
Таблица 1 – Состав природного газа газопровода Торжок-Минск-Ивацевичи [3]

Вид топлива	Состав, %							Низшая теплота сгорания кДж/кг
	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	N ₂	CO ₂	
Природный газ	97,756	0,826	0,254	0,103	0,019	0,942	0,03	33501,29

Воспользуемся программным кодом Cantera для нахождения количественного состава дымовых газов ВСТ с различной концентрацией водорода.

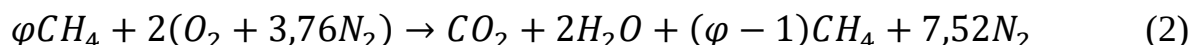
Стехиометрическое уравнение полного сгорания обедненной смеси метана и воздуха ($\varphi < 1$):

Обедненная смесь ($\varphi < 1$):



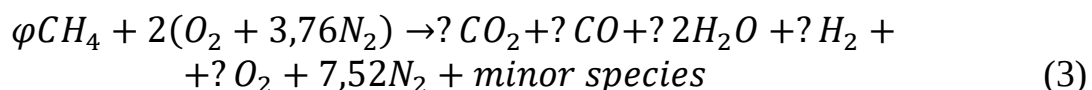
где φ – это коэффициент эквивалентности, показывающий сколько сгорает топлива.

Богатая смесь ($\varphi > 1$):



Для нахождения температуры пламени создается объект Solution, который содержит только те вещества, которые указаны в уравнениях выше. Затем используется функция Solution.equilibrate, чтобы найти состав и температуру полученной смеси. Это делается на основе предположения, что система стремится к равновесию, и большая часть топлива (метана) превращается в продукты сгорания (CO₂ и H₂O) [4].

При неполном сгорании топлива в воздухе состав продуктов реакции заранее неизвестен, так как горение происходит не полностью. Это означает, что вместо полного превращения топлива в CO₂ и H₂O, образуются также другие вещества, такие как CO (угарный газ), H₂ (водород), и, возможно, другие второстепенные компоненты (*minor species*). Реакция в общем виде для метана выглядит так:



Чтобы найти состав продуктов реакции, нужно рассчитать равновесный состав при заданных условиях. Для этого используются следующие шаги:

1. Используем механизм GRI 3.0: это химический механизм, который описывает реакции горения метана и включает 53 различных химических вида. В Cantera создается объект газовой фазы, который содержит все 53 вида, описанные в GRI 3.0.

2. Задаем условия: реакция происходит при постоянной энтальпии (то есть энергия системы сохраняется), Температура и состав продуктов рассчитываются на основе равновесия.

3. Вычисляем равновесный состав: используя функцию `Solution.equilibrate` в Cantera, находим равновесный состав продуктов реакции.

Равновесие рассчитывается для каждого значения коэффициента эквивалентности φ (который показывает, насколько смесь богатая или бедная).

Коэффициент эквивалентности φ показывает соотношение топлива и воздуха в смеси:

- Если $\varphi = 1$: Стехиометрическая смесь (идеальное соотношение топлива и воздуха);
- Если $\varphi < 1$: Обедненная смесь (воздуха больше, чем нужно);
- Если $\varphi > 1$: Богатая смесь (топлива больше, чем нужно).

Программный код Python представлен на рисунке 1 для нахождения температуры сгорания и количественного состава продуктов сгорания для природного газа. По аналогии сделан код для ВСГ с концентрацией водорода от 5 до 20% с шагом в 5%.

```
import cantera as ct

# Определение состава природного газа (мольные доли)
natural_gas = {'CH4': 0.978, 'C2H6': 0.0084, 'C3H8': 0.0038, 'H2': 0.0095, 'CO2': 0.0003}

# Создание объекта газа с использованием механизма GRI 3.0
gas = ct.Solution("gri30.yaml")

# Задание начальных условий
T_final = 423 # Температура горения в K
P_final = ct.one_atm # Давление (1 атм)
phi = 1.0 # Эквивалентное соотношение (стехиометрическое)

# Установка состава смеси
gas.set_equivalence_ratio(phi, natural_gas, 'O2:1, N2:3.76')

# Установка начальных температуры и давления
gas.TP = 300, ct.one_atm # Начальная температура 300 K, давление 1 атм

# Расчет равновесия при постоянных энтальпии и давлении
gas.equilibrate('HP')

# Установка конечной температуры (423 K) и давления (1 атм)
gas.TP = T_final, P_final

# Извлечение мольных долей продуктов сгорания
mole_fractions = gas.mole_fraction_dict()

# Вывод результатов
print("Мольные доли продуктов сгорания при T = 423 K и P = 1 атм:")
for species, fraction in mole_fractions.items():
    if fraction > 1e-6: # Игнорирование очень малых долей
        print(f"{species}: {fraction:.6f}")
```

Рисунок 1 – Программный код с пояснениями на Python для CANTERA при сжигании природного газа без водорода [Источник – собственная разработка автора]

Результаты процентного отклонения состава дымовых газов, полученных при сжигании ВСГ, приведены на диаграмме (рисунок 2).

Из диаграммы (рисунок 2) видно, что с увеличением концентрации водорода до 20%, увеличивается процент воды в дымовых газах на 5,138 %. Также следует отметить уменьшение концентрации CO и CO_2 на 1,37 и 6,93% соответственно. Причиной увеличения NO_x служит повышение температуры процесса горения вследствие добавления водорода, облегчая диссоциацию азота с образованием NO_x [5].

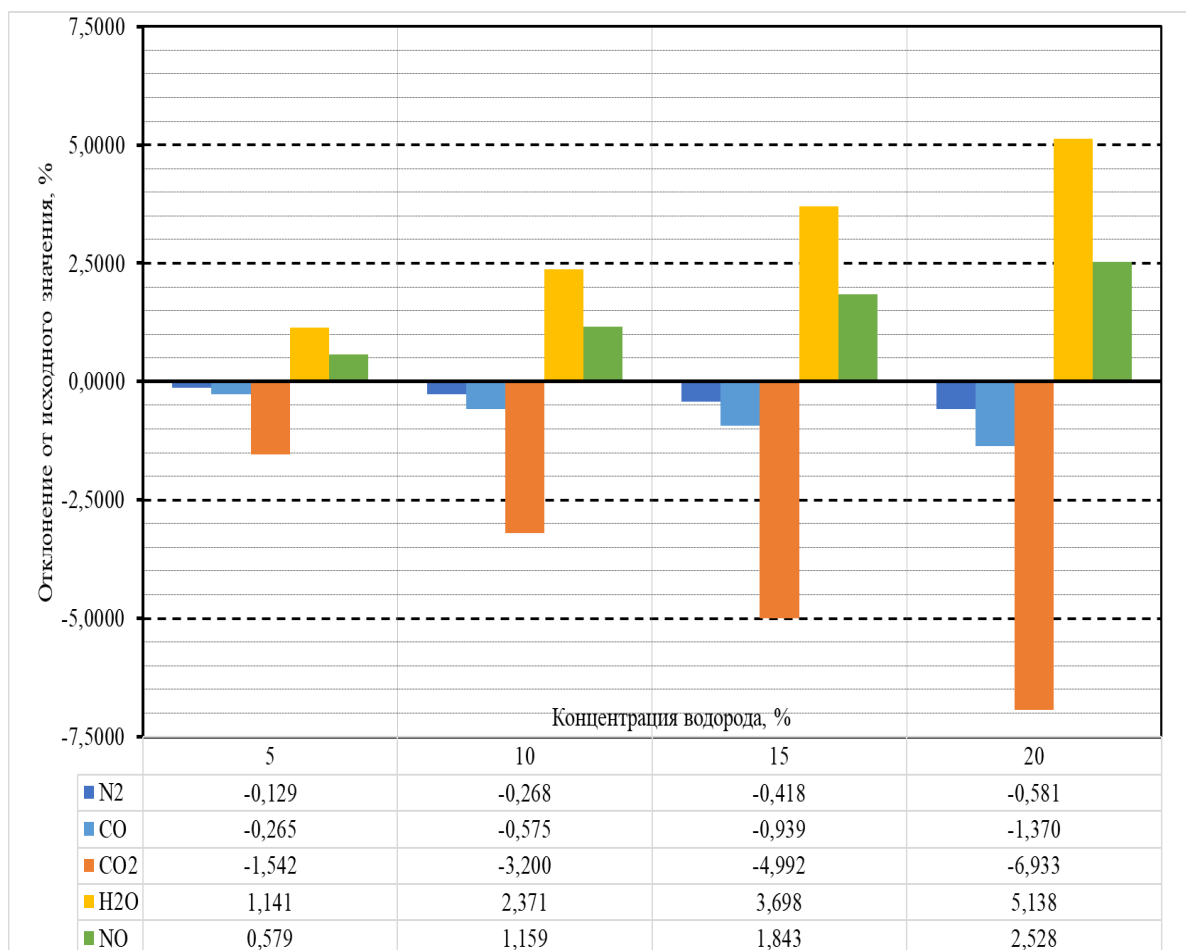


Рисунок 2 – Диаграмма изменения процентного отклонения дымовых газов при различной концентрации водорода в природном газе
[Источник – собственная разработка автора]

Изменения адиабатической температуры горения стехиометрической смеси в зависимости от концентрации водорода приведены на рисунке 3. Изменения адиабатической температуры неполного сгорания ВСГ в зависимости от коэффициента эквивалентности приведены на рисунке 4.

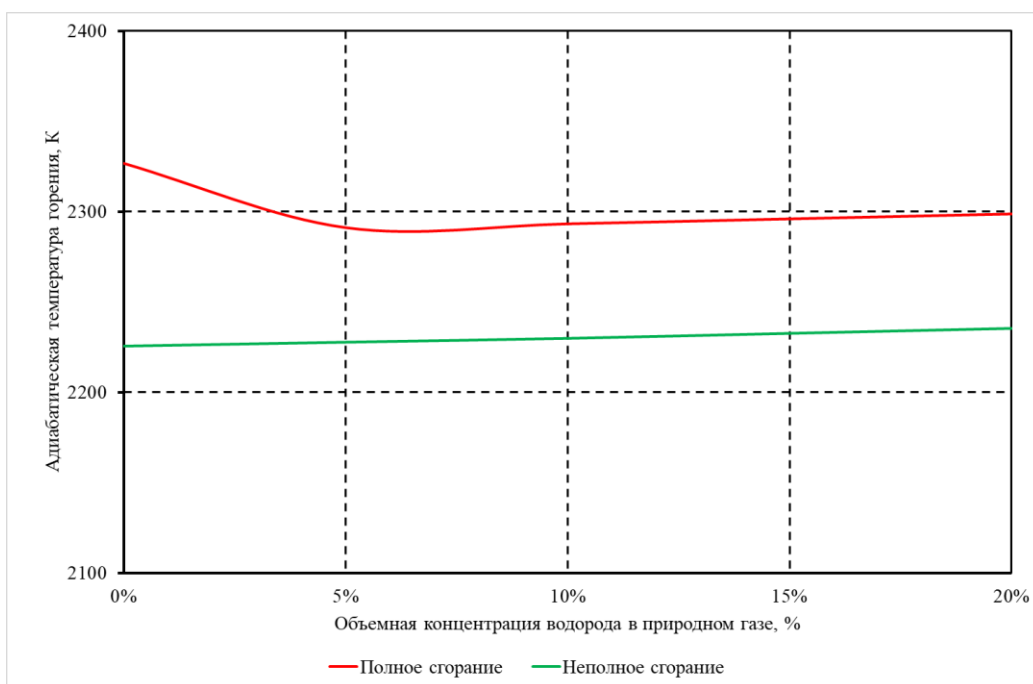


Рисунок 3 – Адиабатическая температура горения стехиометрической смеси при полном и неполном сгорании ВСГ [Источник – собственная разработка автора]

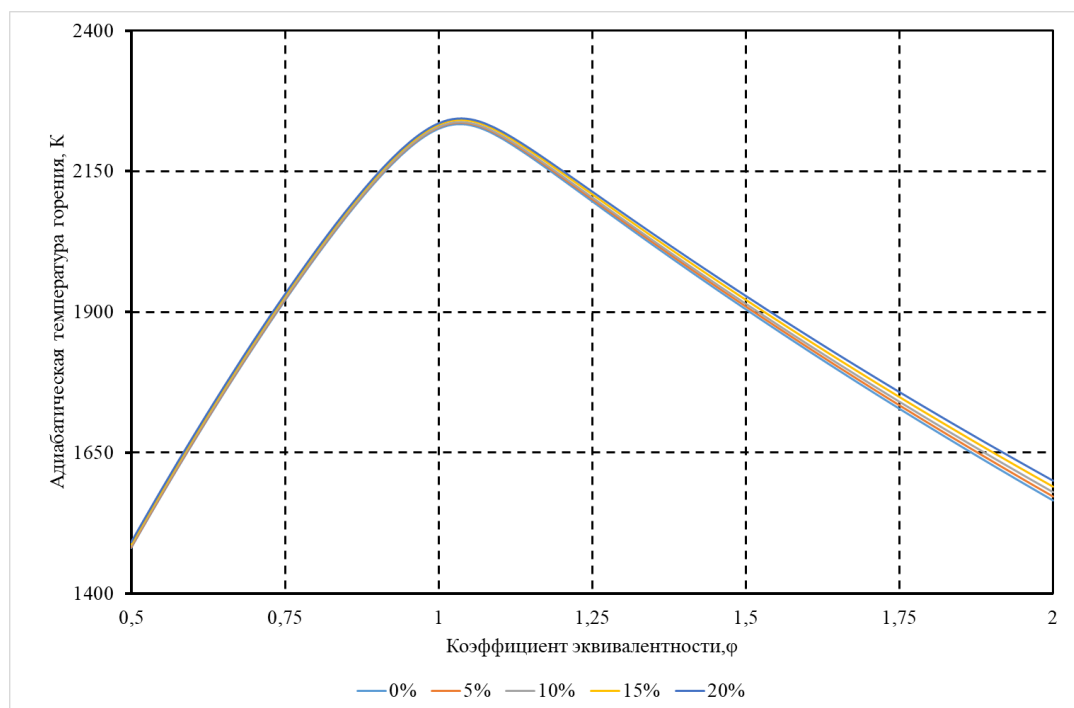


Рисунок 4 – Изменения адиабатической температуры неполного сгорания ВСГ в зависимости от коэффициента эквивалентности [Источник – собственная разработка автора]

Заключение

Анализ изменения количественного состава дымовых газов подтвердил экспериментальные данные зарубежных исследователей: добавление водорода в природный газ приводит к снижению выбросов CO_2 и увеличению NO_x [5]. Увеличение концентрации водорода выше 20% требует модернизации оборудования из-за риска охрупчивания металла [2].

Литература

1. International Energy Agency (IEA). Global Hydrogen Review 2024: report on hydrogen development trends and policies [сайт]. – Paris: IEA, 2024. – URL: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024> (дата обращения: 10.07.2024).
2. Кочетков, В. А. Интеграция водорода в газовые технологии / В. А. Кочетков // Научные исследования молодых учёных: сборник статей XXIX Международной научно-практической конференции, Пенза, 20 января 2025 года. – Пенза: Наука и Просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2025. – С. 14–18. – EDN FSDEFU.
3. Приказ Министерства природных ресурсов и охраны окружающей среды Республики Беларусь от 25 августа 1999 г. № 232 "О Методике расчета выбросов диоксида углерода в атмосферу от котлов ТЭС и котельных" // Национальный реестр правовых актов Республики Беларусь, 1999. – № 8/817.
4. Cantera: Software for Thermodynamics, Chemical Kinetics, and Transport Processes: open-source software suite for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes: [сайт]. – [S.l.]: Cantera Project, 2023. – URL: <https://cantera.org/stable/install/index.html> (дата обращения: 10.07.2024).
5. Sattar Jabbar Murad Algayyim, Khalid Saleh, Andrew P. Wandel, Islam Md Rizwanul Fattah, Talal Yusaf, Hayder A. Alrazen, Influence of natural gas and hydrogen properties on internal combustion engine performance, combustion, and emissions: A review, Fuel, Volume 362, 2024, 130844, ISSN 0016-2361. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.130844> (дата обращения: 10.07.2024).