

ЭФФЕКТЫ ДИССОЦИАЦИИ ГАЗОВ ПРИ ОСУЩЕСТВЛЕНИИ РАБОЧЕГО ЦИКЛА КОМБИНИРОВАННОГО ДВИГАТЕЛЯ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

Эффекты диссоциации и рекомбинации газов исследовались в приложении к различным областям знаний в связи с осуществлением и влиянием на показатели цикла газотурбинных и ракетных двигателей, обеспечением требуемых значений и интервалов температуры в зоне плавки и дугового пространства – металлургия, сварочное производство, в активной зоне ядерного реактора – атомная энергетика [1, 2].

В теории комбинированных двигателей внутреннего сгорания (КДВС: ДВС и ГТД) диссоциация и рекомбинация газов ассоциируются с процессами сгорания и расширения; влияние на показатели цикла полагается незначительным: диссоциации – ввиду низкой температуры ($T \leq 2500$ К), рекомбинации – ввиду малой эффективности преобразования выделяющейся теплоты в механическую работу [3]. Имеются также и другие точки зрения: 1) затраты теплоты на диссоциацию газов не могут быть причиной химической неполноты сгорания топлива, т. к. вполне компенсируются в обратном процессе рекомбинации; 2) из-за диссоциации в процессе сгорания существует граница максимальной температуры, для ДВС на углеводородных топливах это $T \approx 3000$ К (ниже теоретически возможной на ≈ 200 К) [4, 5].

Настоящий этап развития двигателестроения отличается повышенными требованиями к эффективности и экономичности продукции, а также жесткими экологическими нормами. В связи с этим обоснованность принимаемых допущений, полное, адекватное и точное описание цикла, минимизация потерь и оптимизация энергетического баланса остаются объектами пристального внимания научных и проектных организаций.

Вибе И. И. оценил потери теплоты относительно низшей теплоты сгорания топлива для бензиновых двигателей: от диссоциации 7 %, от теплоотдачи в стенки цилиндра 4 % [6]. В современных физико-математических моделях КДВС и расчетных методиках учтены только потери от теплоотдачи (меньшие!), диссоциация и рекомбинация, ввиду недостаточной изученности и действующих штампов, не рассматриваются [7, 8], лишь в некоторых работах упоминаются и приводится краткое описание [3, 9]. Поэтому углубление знаний, учет и оценка влияния диссоциации и рекомбинации на показатели КДВС актуальны и остры.

В химии различают реакции прямые и обратные, происходят они одновременно с разной интенсивностью, сущность процесса определяется преобладанием (оценивается по соотношению интенсивностей: скоростей, равенство означает химическое равновесие). В ходе реакции количество вещества может увеличиться, уменьшиться, не измениться. Термический механизм прямых цепных реакций окисления в процессах сгорания разработали Зельдович Я. Б., Звонов В. А., значительный вклад в теорию внесли Разлейцев Н. Ф., Воинов А. Н., Кошкин В. К., Иноземцев Н. В. [5].

В цилиндре и выпускной системе КДВС имеют место диссоциация и рекомбинация газов, составляющих рабочего тела (РТ). Эти процессы взаимосвязаны и взаимозависимы, противоположны: когда диссоциация интенсифицируется, рекомбинация подавляется. Диссоциация – реакция разложения, обратная для реакции окисления; рекомбинация – реакция объединения (ассоциации, например атомов в молекулу), подобна прямой реакции окисления.

Диссоциация газов при низкой температуре $T < 1750$ К очень слабая, зачастую не учитывается, пренебрегается, при $1775 \leq T \leq 2500$ К – становится заметной, значимой, при $2500 < T \leq 6000$ К молекулы разлагаются на атомы, могут проявляться свойства плазмы, при $T \leq 4000$ К начинается ионизация атомов [10]. Степень диссоциации возрастает при повышении температуры и снижении давления [11], влияние этих факторов с течением цикла КДВС противоположное. В КДВС все химические реакции, диссоциации и рекомбинации в т.ч., лимитированы временем: не достаточно – не могут произойти [1].

Тепловой эффект химической реакции зависит от температуры, при которой она происходит, и от изменения количества вещества. Если количество вещества увеличивается, РТ совершает работу за счет своей внутренней энергии, при этом температура понижается. Если количество вещества уменьшается, работу совершает внешняя среда, РТ получает теплоту и его температура повышается. Если же количество вещества не меняется, тепловой эффект отсутствует.

На осуществление диссоциации энергия затрачивается, при рекомбинации наоборот энергия выделяется (эндотермические и экзотермические реакции: идут с поглощением и выделением теплоты – количество равно выделяющемуся при прямой реакции). Это влечет изменение состава и состояния РТ, индикаторной работы цикла и энергии выпускного газа, направляющегося в турбину, перераспределение энергетического баланса.

Оптимальный энергетический баланс означает такое сочетание показателей эффективности, экономичности, мощности, прочности, др., которое обеспечивает соблюдение действующих экологических норм в т.ч. (на данном этапе скорее в первую очередь). При осуществлении цикла КДВС образуются вредные токсичные и канцерогенные вещества: окись углерода (угарный газ) СО, окись и двуокись азота NO, NO₂. Их происхождение связывают обычно с прямыми реакциями окисления, однако они есть следствие диссоциации и рекомбинации в т.ч. [5]: значительны

корреляция эффектов реакций (максимумы концентрации и интенсификация), перекрытие областей определения по температуре.

Каждый горючий элемент углеводородного топлива окисляется в связи с конкретно сложившимися условиями (может происходить одновременно до 10-ти конкурирующих реакций – включая промежуточные), сущность процесса сгорания (набор реакций) определяется по превалированию. Обозначить сущность сгорания, ответить какая именно реакция произойдет, возможно, пользуясь законами химической термодинамики: по соотношению констант равновесия и состоянию химического равновесия. При этом определяются состав РТ, температуры сгорания теоретическая и калориметрическая (действительная) – с учетом снижения ввиду диссоциации [1, 2, 10].

В общем случае в течение цикла КДВС в РТ могут быть представлены составляющие, молекулы: N₂, O₂ – азот и кислород; NO_x: NO, NO₂, N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅, – различные окислы азота: окись, двуокись и др.; CO₂, H₂O_{газ} – углекислый газ и вода в парообразном состоянии; CO, H₂ – окись углерода и водород; атомы: N, O, H – азот, кислород, водород; OH – гидроксильная группа; происхождение и состояние составляющих (молекула, атом): исходное состояние, продукты полного и неполного окисления (сгорания), диссоциации и рекомбинации, распада на атомы и ионизации. NO_x, в отличие от др., образуются вне связи с процессом сгорания: вне пламени в высокотемпературной зоне продуктов сгорания (ПС, т.н. термический механизм), причем NO – в цилиндре ДВС, NO₂ – в выпускной системе и окружающей среде после выпуска отработавшего газа. С – углерод в виде сажи (графит), продукт сгорания топлива – твердое агрегатное состояние, не является составляющей РТ.

Реакции диссоциации газов приведены в табл. 1. С течением цикла количества составляющих РТ меняются, в определенные периоды некоторые могут отсутствовать; количества составляющих возможно рассчитать по стехиометрическим соотношениям [5, 7], состав молекулярных ПС приведен в табл. 2.

Таблица 1 – Реакции при стандартных атмосферных условиях и области значимой диссоциации газов

Реакция	T, К	Источник
CO ₂ + 405260 Дж/моль ↔ C + O ₂	1800 ... 2500	[3, 12]
2CO ₂ + 273000 Дж/моль ↔ 2CO + O ₂		[2]
2CO + 238300 Дж/моль ↔ 2C + O ₂		[3]
2H ₂ O + 484360 Дж/моль ↔ 2H ₂ + O ₂	1900... 2500	[3, 6, 12]
2H ₂ O + 564000 Дж/моль ↔ H ₂ + 2OH;	2200 ... 2800	
2NO ₂ + 111790 Дж/моль ↔ 2NO + O ₂	2300 ... 2500	[2, 12, 13]
H ₂ + 435000 Дж/моль ↔ 2H	2500 ... 2800	[10, 12]
O ₂ + 494000 Дж/моль ↔ 2O	2500 ... 2800	[10, 12]

Q_x, Дж/моль – тепловой эффект

Таблица 2 – Состав продуктов сгорания ДВС по объему, % [5]

Газ	N ₂	O ₂	CO ₂	CO	H ₂ O, пар	NO _x
ДВС						
Бензиновый	74...77	0.3...10	5...12	4...5	3.0...5.5	0.01...0.8
Дизель	74...78	2...18	1...12	0.1...0.3	0.5...9.0	0.004...0.5

NO_x: NO – 95 ... 99 %, NO₂ – остальное; N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅ – пренебрежимо мало

В [1, 5, 9, 14] тепловые эффекты реакций окисления и диссоциации N, N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅ оставлены без внимания; в практических целях использовался и более урезанный список: CO₂, H₂O_{газ} [2, 3]. Количество (N и NO_x) в ПС ДВС на 2–3 порядка меньше каждой наиболее представленной составляющей (табл. 1) и их долей в энергетическом балансе без ущерба достоверности можно пренебречь.

За основу принята известная расчетная методика [8] и соответствующее программное обеспечение DVS-2. Настоящая методика учитывает энергию, участвующую в реакциях диссоциации и рекомбинации составляющих РТ, ниже приводятся ее отличительные особенности.

Уравнение энергии РТ

$$dT = \frac{1}{C_v m} (dQ_c + dQ_w - dQ_{duc}) - T \frac{dm}{m} - (\kappa - 1) \frac{dV}{V} T.$$

Теплота, затраченная на диссоциацию составляющих РТ

$$Q_{\text{дис}} = \sum_i^n (\alpha \cdot v \cdot Q_x)_i,$$

где i, n – порядковый номер и количество газов;

α – степень диссоциации;

V – парциальный объем;

Q_x – тепловой эффект химической реакции.

Уравнение состояния РТ

$$\frac{dp}{p} = \frac{dm}{m} + \frac{dT}{T} - \frac{dV}{V}.$$

Расчитан цикл автомобильного бензинового четырехтактного двигателя МеМЗ-307, учитывалась диссоциация двух составляющих РТ: $\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}_{\text{газ}}$. Установлена индикаторная работа цикла $L_i = 364$ Дж и затраты энергии топлива в связи с диссоциацией за цикл $Q_{\text{цикл}} = 16$ Дж, в принятых ограничениях погрешность базовой методики составляет 4,4 %.

Полученные результаты согласуются с оценкой И. И. Вибе [6], заниженные результаты поясняются учетом диссоциации не всех составляющих РТ.

Список литературы

1. Болдырев О. И. Необходимость учета равновесного состояния продуктов сгорания при термодинамических расчетах ГТД / О. И. Болдырев // Молодой ученый. – 2011. – № 7. – Т.1. – С. 19–24.
2. Щукин А. А. Газовое и печное хозяйство заводов / Щукин А. А. – М.-Л. : Энергия, 1966. – 232 с.
3. Дьяченко В. Г. Теория двигателей внутреннего сгорания : учебник / Дьяченко В. Г. – Харьков : ХНАДУ, 2009. – 500 с.
4. Путилов К. А. Курс физики. Том I. Механика. Акустика. Молекулярная физика. Термодинамика / Путилов К. А. – М. : ГИ ФМЛ, 1963, 560 с.
5. Двигуни внутрішнього згорання: серія підручників у 6 томах. Т. 5. Екологізація ДВЗ / за ред. Марченка А. П., Шеховцова А. Ф. – Харків : Прапор, 2004. – 360 с.
6. Вибе И. И. Новое о рабочем цикле двигателей / Вибе И. И. – М. : Машгиз, 1962. – 272 с.
7. Двигатели внутреннего сгорания : Теория поршневых и комбинированных двигателей / под ред. А. С. Орлина, М. Г. Круглова. – М. : Машиностроение, 1983. – 372 с.
8. Егоров Я. А. Физико-математическая модель рабочего цикла двигателя внутреннего сгорания автотракторного типа : Учебное пособие. – К. : УМК ВО, 1991. – 56 с.
9. Мехтиев Р. И. Расчет концентрации равновесных продуктов сгорания топливоздушных смесей в ДВС / Мехтиев Р. И., Посвянский В. С., Багиров Х. Б. // Исследование, расчет, конструирование и испытание двигателей. – Харьков : ХПИ, 1981. – Вып. 3. – С. 13–15.
10. Беляев Н. М. Термодинамика / Беляев Н. М. – К. : Вища шк., 1987. – 344 с.
11. Эстеркин Р. И. Теплотехнические измерения при сжигании газового и жидкого топлива : справочное руководство / Эстеркин Р. И., Иссерлин А. С., Певзнер М. И. – Л. : Недра, 1981. – 424 с.
12. Теоретические основы теплотехники. Теплотехнический эксперимент : справочник / под ред. В. А. Григорьева, В. М. Зорина. – М. : Энергоатомиздат, 1988. – 560 с. – (Теплотехника и теплоэнергетика; Кн. 2).
13. Крестовников А. Н. Химическая термодинамика / Крестовников А. Н., Вигдорович В. Н. – М. : Metallurgizdat, 1962. – 280 с. – С. 152.
14. Бондаренко Е. В. Образование окислов азота при сгорании моторных топлив / Бондаренко Е. В., Ерохов В. И. – http://vestnik.osu.ru/2004_5_1/5.pdf

Одержано 23.04.2015

© Канд. техн. наук В. А. Мазин

Запорожский национальный технический университет, г. Запорожье

Mazin V. Effects of gases dissociation during realization of working cycle of combined internal combustion engine