

УДК 621.43.052

Ф. И. Абрамчук*, д-р техн. наук

А. Н. Кабанов*, канд. техн. наук

Н. В. Петров**

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет
Северо-Восточный федеральный университет
(Российская Федерация, г. Якутск)

МЕТОДИКА РАСЧЁТА ТОКСИЧНОСТИ ОТРАБОТАВШИХ ГАЗОВ БИОГАЗОВОГО ДВИГАТЕЛЯ

Приведена методика расчёта показателей токсичности биогазового двигателя внутреннего сгорания. Предложен метод решения системы нелинейных уравнений в рамках данной методики. Дано сравнение результатов расчета с экспериментальными данными.

Наведена методика розрахунку показників токсичності біогазового двигуна внутрішнього згорання. Запропонований метод розв'язання системи нелінійних рівнянь у рамках даної методики. Дано порівняння результатів розрахунку з експериментальними даними.

Введение

В настоящее время во всём мире ведутся активные работы по использованию биогаза в качестве моторного топлива. Вследствие постоянного ужесточения норм токсичности по отношению к автомобильным двигателям внутреннего сгорания возникает задача оптимизации показателей их токсичности.

Выполнение экспериментальных исследований в данном направлении связано с большими затратами ресурсов, поэтому было бы целесообразным заменить часть экспериментов расчётными исследованиями.

Следовательно, создание расчётной модели, позволяющей рассчитать содержание основных токсичных компонентов в отработавших газах биогазового автомобильного ДВС, является актуальной задачей.

Анализ публикаций

В настоящее время для расчёта содержания токсичных компонентов в отработавших газах двигателя с искровым зажиганием в основном используется методика расчёта равновесного состава продуктов сгорания, предложенная В. А. Звоновым [1]. Для расчёта концентрации NO_x данная методика дополняется кинетическим уравнением Зельдовича [1].

Математически методика В. А. Звонова представляет собой систему из N нелинейных уравнений с N неизвестными. Для решения такого рода системы используются два основных подхода: численный [2] и алгебраический [3].

Первый подход достаточно сложный для автоматизации расчётов, поэтому программы, его использующие, создаются квалифицированными специалистами и, как правило, являются либо платными, либо закрытыми для общего доступа.

Второй подход не требует таких навыков, достаточно широко используется [4, 5 и др.] и может быть реализован любым специалистом для решения своих прикладных задач.

Цель исследования

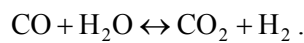
Целью данного исследования является анализ существующих подходов решения системы нелинейных уравнений в методике расчёта содержания токсичных компонентов в

отработавших газах биогазового ДВС и разработка рекомендаций по выбору методики решения.

Выбор количества неизвестных в методике Зельдовича–Полярного

Так как механизм развития цепных реакций в процессе сгорания смесей воздуха и углеводородов изучен не до конца и в основном представляет собой теоретические допущения, у разных авторов предполагается разное количество уравнений. Так, в [6] использовалась система из 155 элементарных реакций для 39 компонентов. Однако увеличение числа уравнений увеличивает сложность решения системы уравнений. Кроме того, многие авторы указывают, что учитывать многие промежуточные продукты реакций не обязательно [2, 5, 6 и др.].

В [4] предлагается решать систему из 14 уравнений с 14 неизвестными, из них – 11 химических компонентов. Однако в данной системе используются избыточные элементы: энтальпии компонентов, кажущаяся молярная масса смеси. Кроме того, в [4] при горении с $\alpha \geq 1$ используется «реакция водяного газа»

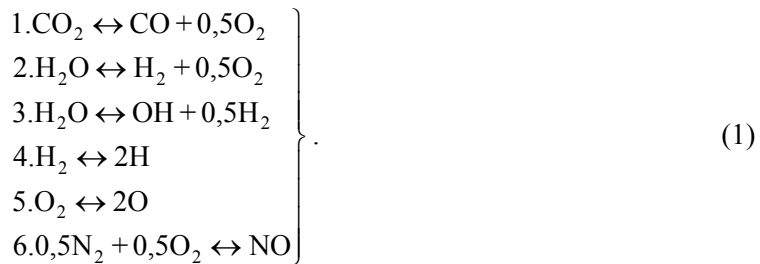


Однако в условиях газового двигателя внутреннего сгорания с искровым зажиганием прохождение такой реакции при $\alpha \geq 1$ практически невозможно.

Наиболее целесообразным является подход, предложенный в [5]. Здесь используется система из 10 уравнений с 10 неизвестными. Система содержит необходимый минимум уравнений для нахождения парциальных давлений CO и NO_x, при этом данные уравнения пригодны для использования в условиях газового ДВС с искровым зажиганием.

Описание расчётной методики

Предполагается, что в продуктах сгорания проходят следующие реакции:



Также считается, что в качестве топлива используется метан и в состав продуктов сгорания входят следующие 10 газов: CO₂; CO; H₂O; H₂; O₂; N₂; NO; OH; O; H.

Основу системы уравнений составляют уравнения химического равновесия

$$\begin{array}{l} \frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}}{P_{\text{CO}_2}} = K_1, \quad \frac{P_{\text{H}_2} \cdot P_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}}{P_{\text{H}_2\text{O}}} = K_2, \quad \frac{P_{\text{OH}} \cdot P_{\text{H}_2}^{\frac{1}{2}}}{P_{\text{H}_2\text{O}}} = K_3, \\ \frac{P_{\text{H}}^2}{P_{\text{H}_2}} = K_4, \quad \frac{P_{\text{O}}^2}{P_{\text{O}_2}} = K_5, \quad \frac{P_{\text{NO}}}{P_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}} \cdot P_{\text{N}_2}^{\frac{1}{2}}} = K_6, \end{array} \tag{2}$$

где K_1, \dots, K_6 – константы равновесия химических реакций (1); P_i – парциальное давление i -го компонента газовой смеси.

Значения констант равновесия K_1, \dots, K_6 вычисляются из таблиц, приведенных в [5, 7].

Уравнения (2) дополняются тремя уравнениями материального баланса

$$\frac{O_T + \chi_{OC} O_{\text{возд}}}{C_T + \chi_{OC} C_{\text{возд}}} = \frac{\mu_O (2P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}} + A)}{\mu_C (P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}})}, \quad \frac{H_T + \chi_{HC} \cdot H_{\text{возд}}}{C_T + \chi_{HC} \cdot C_{\text{возд}}} = \frac{\mu_H \cdot (B)}{\mu_C \cdot (P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}})}, \quad (3)$$

$$\frac{N_T + \chi_{NC} \cdot N_{\text{возд}}}{C_T + \chi_{NC} \cdot C_{\text{возд}}} = \frac{\mu_N \cdot (2 \cdot P_{\text{N}_2} + P_{\text{NO}})}{\mu_C \cdot (P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}})},$$

где $A = P_{\text{H}_2\text{O}} + 2P_{\text{O}_2} + P_{\text{OH}} + P_{\text{NO}} + P_{\text{O}}$; O_T – массовая доля атома кислорода в топливе; $O_{\text{возд}}$ – массовая доля атома кислорода в воздухе; C_T – массовая доля атома углерода в топливе; $C_{\text{возд}}$ – массовая доля атома углерода в воздухе; χ_{OC} – действительное соотношение масс атомов О и С в несгоревшей смеси; μ_O – молекулярная масса атома кислорода, кг/кмоль; μ_C – молекулярная масса атома углерода, кг/кмоль; $B = 2 \cdot P_{\text{H}_2\text{O}} + 2 \cdot P_{\text{H}_2} + P_{\text{OH}} + P_{\text{H}}$; H_T – массовая доля атома водорода в топливе; $H_{\text{возд}}$ – массовая доля атома водорода в воздухе; χ_{HC} – действительное соотношение масс атомов Н и С в несгоревшей смеси; μ_H – молекулярная масса атома водорода, кг/кмоль; N_T – массовая доля атома азота в топливе; $N_{\text{возд}}$ – массовая доля атома азота в воздухе; χ_{NC} – действительное соотношение массы атомов Н и С в несгоревшей смеси; μ_N – молекулярная масса атома азота, кг/кмоль.

Замыкается система уравнений десятым уравнением, представляющим собой закон Дальтона

$$P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}} + P_{\text{H}_2\text{O}} + P_{\text{H}_2} + P_{\text{O}_2} + P_{\text{N}_2} + P_{\text{OH}} + P_{\text{NO}} + P_{\text{H}} + P_{\text{O}} = P, \quad (4)$$

где P – давление в камере сгорания на данном расчётном шаге.

Таким образом, уравнения (2)–(4) представляют собой систему из 10 нелинейных уравнений с 10 неизвестными.

В первом приближении будем считать равными нулю парциальные давления следующих газов:

$$P_{\text{O}_2} = P_{\text{NO}} = P_{\text{O}} = P_{\text{H}} = P_{\text{OH}} = 0.$$

Тогда уравнения (3) могут быть представлены

$$\frac{2 \cdot P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}} + P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}}} = W_1, \quad W_1 = \frac{\mu_C \cdot O_T + \chi_{OC} \cdot O_{\text{возд}}}{\mu_O \cdot C_T + \chi_{OC} \cdot C_{\text{возд}}}. \quad (5)$$

$$\frac{2 \cdot P_{\text{H}_2\text{O}} + 2 \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}}} = W_2, \quad W_2 = \mu_C \cdot \frac{H_T + \chi_{HC} \cdot H_{\text{возд}}}{C_T + \chi_{HC} \cdot C_{\text{возд}}}.$$

Уравнение (3) запишем так

$$\frac{2 \cdot P_{\text{N}_2}}{P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}}} = W_3, \quad W_3 = \frac{\mu_C \cdot N_T + \chi_{NC} \cdot N_{\text{возд}}}{\mu_N \cdot C_T + \chi_{NC} \cdot C_{\text{возд}}}. \quad (6)$$

С учётом данных условий закон Дальтона (4)

$$P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}} + P_{\text{H}_2\text{O}} + P_{\text{H}_2} + P_{\text{N}_2} = P. \quad (7)$$

Преобразуем уравнения (2)

$$\frac{P_{\text{CO}} \cdot P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}} = \frac{K_1}{K_2}. \quad (8)$$

Преобразуем уравнение (5)

$$2P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}} + P_{\text{H}_2\text{O}} = W_1 P_{\text{CO}_2} + W_1 P_{\text{CO}}.$$

Отсюда

$$P_{\text{H}_2\text{O}} = P_{\text{CO}_2} (W_1 - 2) + P_{\text{CO}} (W_1 - 1); \quad (9)$$

$$P_{\text{H}_2} = 0,5W_2 (P_{\text{CO}_2} + P_{\text{CO}}) - P_{\text{CO}_2} (W_1 - 2) - P_{\text{CO}} (W_1 - 1). \quad (10)$$

Из уравнения (6) следует, что

$$P_{N_2} = 0,5 \cdot W_3 (P_{CO_2} + P_{CO}). \quad (11)$$

Подставим значения (9)–(11) в уравнение (7) и получим

$$P_{CO_2} + P_{CO} + 0,5W_2P_{CO_2} + 0,5W_2P_{CO} + 0,5W_3P_{CO_2} + 0,5W_3P_{CO} = P, \quad (12)$$

а, упростив последнее равенство, имеем

$$P_{CO_2} + P_{CO} = \frac{P}{1 + 0,5W_2 + 0,5W_3}. \quad (13)$$

Подставив правую часть уравнения (3) в равенство (11), получим следующее выражение для расчета парциального давления азота:

$$P_{N_2} = \frac{W_3 P}{2 + W_2 + W_3}. \quad (14)$$

Чтобы получить выражение для расчета парциального давления СО, воспользуемся уравнением (12). Оставляя в левой части слагаемые с СО и перенося в правую часть слагаемые с СО₂, имеем

$$P_{CO} + 0,5W_2P_{CO} + 0,5W_3P_{CO} = P - P_{CO_2} - 0,5W_2P_{CO_2} - 0,5W_3P_{CO_2}.$$

Вынеся за скобки парциальные давления и разделив полученное равенство на $0,5(2 + W_2 + W_3)$, получаем уравнение для расчёта парциального давления СО в продуктах сгорания

$$P_{CO} = \frac{2P}{2 + W_2 + W_3} - P_{CO_2}. \quad (15)$$

Чтобы получить уравнение для расчета парциального давления Н₂О в продуктах сгорания, выполним следующие действия.

Подставив выражение (15) в (9), раскрыв скобки и приведя подобные слагаемые, имеем

$$P_{H_2O} = \frac{2P(W_1 - 1)}{2 + W_2 + W_3} - P_{CO_2}. \quad (16)$$

Чтобы получить уравнение для вычисления парциального давления Н₂, выполним подобным образом подстановку выражения (15) в уравнение (10), в результате чего

$$P_{H_2} = P_{CO_2} + \frac{P(2 - 2W_1 + W_2)}{2 + W_2 + W_3}. \quad (17)$$

Чтобы составить квадратное уравнение относительно парциального давления СО₂, воспользуемся равенством (8). Перенеся все компоненты уравнения (8) влево и приведя полученное уравнение к общему знаменателю, получим

$$K_2 P_{CO} P_{H_2O} - K_1 P_{CO_2} P_{H_2} = 0. \quad (18)$$

Введем промежуточные параметры

$$\frac{2P}{2 + W_2 + W_3} = M_1, \quad \frac{2P(W_1 - 1)}{2 + W_2 + W_3} = M_2, \quad \frac{P(2 - 2W_1 + W_2)}{2 + W_2 + W_3} = M_3.$$

Перепишем уравнение (18) так, чтобы все парциальные давления в нем были выражены через парциальное давление СО₂

$$K_2 (M_1 - P_{CO_2})(M_2 - P_{CO_2}) - K_1 P_{CO_2} (P_{CO_2} + M_3) = 0.$$

Раскрыв скобки, приведя подобные слагаемые и выполнив их группировку, получаем квадратное уравнение относительно P_{CO_2}

$$P_{\text{CO}_2}^2(K_2 - K_1) + K_2 M_1 M_2 - P_{\text{CO}_2}(K_2 M_1 + K_2 M_2 + K_1 M_3) = 0. \quad (19)$$

Дискриминант данного уравнения находим по формуле

$$D = -(K_2 M_1 + K_2 M_2 + K_1 M_3) - 4(K_2 - K_1)K_2 M_1 M_2.$$

Корень уравнения (19), имеющий физический смысл, определяется при помощи зависимости

$$P_{\text{CO}_2} = \frac{K_2 M_1 + K_2 M_2 + K_1 M_3 - \sqrt{D}}{2(K_2 - K_1)}.$$

Найдя по формуле (14) парциальное давление N_2 и решив уравнение (19) относительно CO_2 , находим парциальные давления CO , H_2O и H_2 по формулам (15)–(17) соответственно.

Далее переходим ко второму приближению и вычисляем значения парциальных давлений оставшихся пяти компонентов продуктов сгорания.

Парциальное давление O_2

$$P_{O_2} = \left(\frac{K_1 \cdot P_{CO_2}}{P_{CO}} \right)^2.$$

Парциальное давление гидроксильной группы OH

$$P_{OH} = \frac{K_3 \cdot P_{H_2O}}{\sqrt{P_{H_2}}}.$$

Парциальное давление атомарного водорода

$$P_H = \sqrt{K_4 \cdot P_{H_2}}.$$

Парциальное давление атомарного кислорода

$$P_O = \sqrt{K_5 \cdot P_{O_2}}.$$

Парциальное давление NO

$$P_{NO} = K_6 \sqrt{P_{N_2} \cdot P_{O_2}}.$$

Уточнение содержания NO в отработавших газах производится с использованием кинетического уравнения Я. Б. Зельдовича по методике, описанной в [1].

Сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными

На рисунке на примере нагрузочной характеристики двигателя 4ГЧ7,5/7,35 показано сравнение результатов расчёта с использованием описанной методики с результатами эксперимента. При расчётах применялась методика расчёта процесса сгорания с переменным показателем сгорания, описанная в [8–10].

Для эксперимента использовался моторный стенд, созданный на базе двигателя ММЗ-307, переведенного на биогаз.

Эксперимент выполнялся с использованием нагрузочной характеристики, полученной на частоте вращения, соответствующей максимальному крутящему моменту биогазового ДВС ($n = 3600 \text{ мин}^{-1}$).

Как видно из рисунка, погрешность расчётов в сравнении с экспериментом с использованием приведенной методики составляет до 10%.

Выводы

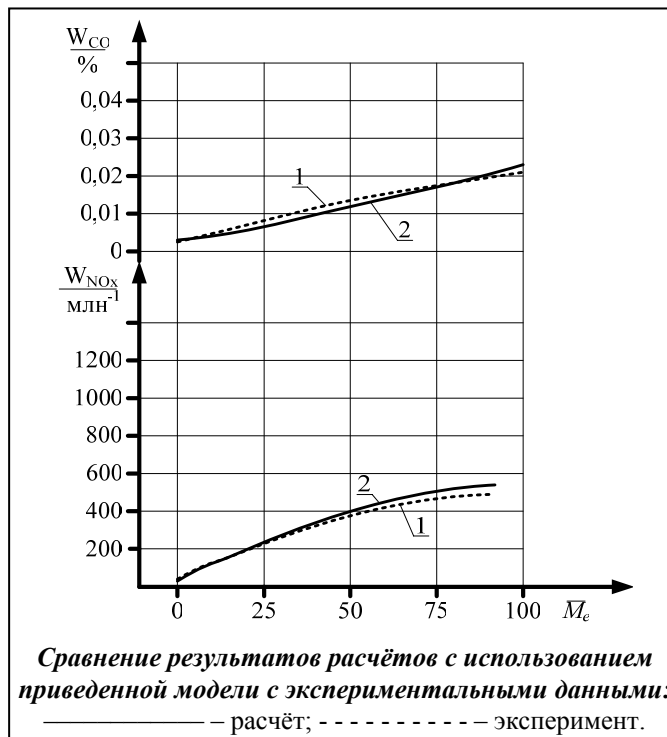
1. Для определения равновесного состава продуктов сгорания в газовом двигателе с искровым зажиганием предложено использовать систему из 10 уравнений с 10 неизвестными, основанную на 6 химических реакциях, 3 уравнениях материального баланса и уравнении закона Дальтона.

2. Предложена методика алгебраического решения данной системы нелинейных уравнений.

3. Сравнение результатов расчётов с использованием данной методики с результатами экспериментов показало, что разница между этими величинами в обоих случаях составляет до 10%.

Литература

1. Звонов В. А. Токсичность двигателей внутреннего сгорания: Учеб. пособие для ВУЗов / В. А. Звонов. – 2-е изд., перераб. и доп.: – М.: Машиностроение, 1981. – 154 с.
2. Куценко А. С. Моделирование рабочих процессов двигателей внутреннего сгорания на ЭВМ / А. С. Куценко. – Киев: Наук. думка, 1988. – 104 с.
3. Зельдович Я. Б. Расчёты тепловых процессов при высокой температуре / Я. Б. Зельдович, А. И. Полярный. – М.: НИИ №1, 1947. – 68 с.
4. Синярёв Г. Б. Жидкостные ракетные двигатели / Г. Б. Синярёв, М. В. Добровольский. – М.: Гос. изд-во оборон. пром-сти, 1955. – 488 с.
5. Квасников В. А. Теория жидкостных ракетных двигателей / В. А. Квасников. – Л.: Гос. союз. изд-во судостроит. пром-сти, 1959. – 542 с.
6. Bade Shrestha S. O. A Predictive Model for Gas Fueled Spark Ignition Engine Applications / S. O. Bade Shrestha, G. A. Karim. – Calgary, CA: University of Calgary, 1999. – 18 p. – (Preprint / University of Calgary: SAE 1999-01-3482).
7. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: в 4-х т. / Л. В. Гурвич, И. В. Вейц, В. А. Медведев и др. – 3-е изд., перераб. и расшир. – М.: Наука, 1978. – Т. 1: Элементы O, N (D, T), F, Cl и их соединения. – 1978. – 496 с.
8. Двонна модель процесу згорання малолітражного газового двигуна з іскровим запалюванням / Ф. І. Абрамчук, О. М. Кабанов, А. П. Кузьменко та ін. // Вісн. нац. трансп. ун-ту. – 2011. – № 23. – С. 56–65.
9. Кабанов А. Н. Основы использования природного газа в качестве топлива для автомобильных двигателей / А. Н. Кабанов. – Харьков: Харьков. нац. автодор. ун-т, 2012. – 240 с.
10. Кабанов А. Н. Методика расчёта характеристики тепловыделения в газовых двигателях с искровым зажиганием / А. Н. Кабанов // Наук. нотатки. – 2012. – № 36. – С. 122–125.



Поступила в редакцию
10.09.13