

УДК 621.43.068.8

АДАПТАЦІЯ МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКУ НЕРІВНОВАЖНОГО ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ПРОДУКТІВ ЗГОРЯННЯ ГАЗОВОГО ДВИГУНА З ІСКРОВИМ ЗАПАЛЮВАННЯМ

О.М. Кабанов, доцент, к.т.н.,
О.О. Приходкін, студент, ХНАДУ

Анотація. Приведено методику розрахунку нерівноважного хімічного складу продуктів згоряння газového двигуна з іскровим запалюванням. Одержано результати розрахунку нерівноважного хімічного складу продуктів згоряння газového двигуна 4ГЧ7,5/7,35 з використанням даної методики.

Ключові слова: газований двигун, нерівноважний склад, природний газ.

АДАПТАЦИЯ МЕТОДИКИ РАСЧЕТА НЕРАВНОВЕСНОГО ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ГАЗОВОГО ДВИГАТЕЛЯ С ИСКРОВЫМ ЗАЖИГАНИЕМ

А.Н. Кабанов, доцент, к.т.н.,
А.А. Приходкин, студент, ХНАДУ

Аннотация. Приведена методика расчета неравновесного химического состава продуктов сгорания газového двигателя с искровым зажиганием. Получены результаты расчета неравновесного химического состава продуктов сгорания газového двигателя 4ГЧ7,5/7,35 с применением данной методики.

Ключевые слова: газовой двигатель, неравновесный состав, природный газ.

ADAPTATION OF CALCULATION METHODS OF NON-EQUILIBRIUM CHEMICAL BURNT SUBSTANCES COMPOSITION OF THE GAS ENGINE WITH SPARK IGNITION

A. Kabanov, Associate Professor, Candidate of Technical Science,
A. Pryikhodkin, student, KhNAHU

Abstract. Methods of calculation of the non-equilibrium chemical composition of exhaust gases of the gas engine with spark ignition have been presented. The results of calculation of the non-equilibrium chemical composition of exhaust gases of 4GF7,5/7,35 gas engine according to this technique were obtained.

Key words: gas engine, non-equilibrium composition, natural gas.

Вступ

Основними причинами використання газових палив автомобільним транспортом у всьому світі є економічні та екологічні фактори.

Сьогодні у світі як альтернатива рідким нафтовим паливам найбільш широко застосову-

ється природний газ. Широке використання природного газу зумовлене тим, що його виробництво не потребує глибокої хімічної переробки первинної сировини, а підготовку до застосування проводять фізичними методами, такими як: стиснення (компримування) чи зрідження (скраплення). Завдяки цьому у більшості країн світу вартість газових мо-

торних палив для споживачів є нижчою за вартість рідинних палив.

У зв'язку з поширенням використання природного газу в якості моторного палива, виникає необхідність виконання розрахунку хімічного складу продуктів згоряння з метою пошуку шляхів зниження токсичності відпрацьованих газів газового двигуна з іскровим запалюванням.

Аналіз публікацій

Зараз для розрахунку вмісту токсичних компонентів у відпрацьованих газах двигуна з іскровим запалюванням (ІЗ) використовується переважно методика розрахунку рівноважного складу продуктів згоряння, запропонована проф. Звоновим В.О. [1]. Для розрахунку концентрації NO_x дана методика доповнюється кінетичним рівнянням Зельдовича [3].

Суть методу полягає у такому: спочатку виконується розрахунок рівноважного складу продуктів згоряння (вирішується система з N нелінійних рівнянь з N невідомих) [1, 2, 4, 5]. Потім виконується розрахунок NO (оскільки у ДВЗ із іскровим запалюванням монооксид азоту NO становить більше 97 % викидів оксидів азоту, то при визначенні концентрацій NO_x приймається допущення, що зі всіх оксидів азоту утвориться тільки він) за кінетичним рівнянням Зельдовича [3]. І виконується повторний розрахунок рівноважного складу з попередньо знайденими значеннями NO , які приймаються константами.

Також існує методика розрахунку нерівноважного складу продуктів згоряння. В основу цієї методики було покладено механізм горіння природного газу GRI 3.0, запропонований Каліфорнійським університетом в Берклі [7].

Суть цієї методики полягає у тому, що на основі рівнянь хімічних реакцій, що відбуваються у циліндрі двигуна (ці рівняння беруться з механізму GRI 3.0 [7]), складається система диференціальних рівнянь відносно кожного з компонентів продуктів згоряння. Вирішуючи цю систему, отримуємо концентрації складових відпрацьованих газів.

Аналіз літератури показав, що, на відміну від розрахунку рівноважного складу, розрахунок нерівноважного складу має такі переваги:

- вище точність результату внаслідок більш досконалої моделі розрахунку;
- можливість розраховувати концентрацію оксидів азоту без застосування окремих методів;
- розраховується більша кількість отруйних речовин, у тому числі й альдегіди.

Головним недоліком методу розрахунку нерівноважного складу є те, що він є більш складним у використанні, ніж розрахунок рівноважного складу. Але у сучасних умовах цей недолік є таким, що не заважає використовувати цю методику.

Отже, оскільки розрахунок нерівноважного складу має більше переваг, ніж недоліків, порівняно з розрахунком рівноважного складу, й недоліки не є критичними, то для розрахунку складу відпрацьованих газів газового двигуна було обрано метод розрахунку нерівноважного складу.

Мета дослідження

Метою даного дослідження є адаптація методики розрахунку нерівноважного хімічного складу продуктів згоряння до умов у циліндрі газового двигуна.

Принцип складання системи диференціальних рівнянь для розрахунку нерівноважного складу продуктів згоряння

Система диференціальних рівнянь складається за таким принципом:

- початкові рівняння хімічних реакцій [7]

$$\begin{aligned} 1) & A + B \xrightleftharpoons[k_1^b]{k_1^f} C; \\ 2) & A + D \xrightleftharpoons[k_2^b]{k_2^f} C, \end{aligned} \quad (1)$$

де A, B, C, D – компоненти продуктів згоряння, концентрації яких необхідно визначити

$$k_i^{f(b)} = k_0 \cdot T^x \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right); \quad (2)$$

де E_i – енергія активації; R – характеристична газова стала;

– константи швидкості прямої та зворотної реакцій i -го рівняння, що визначаються згідно з рівнянням Ареніуса.

Після перетворень отримаємо систему диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{dn_A}{dt} = -k_1^f \cdot n_A \cdot n_B + k_1^b \cdot n_C - k_2^f \cdot n_A \cdot n_D + k_2^b \cdot n_C \\ \frac{dn_B}{dt} = -k_1^f \cdot n_A \cdot n_B + k_1^b \cdot n_C \\ \frac{dn_C}{dt} = k_1^f \cdot n_A \cdot n_B - k_1^b \cdot n_C + k_2^f \cdot n_A \cdot n_D - k_2^b \cdot n_C \\ \frac{dn_D}{dt} = -k_2^f \cdot n_A \cdot n_D + k_2^b \cdot n_C \end{cases}, \quad (3)$$

де n_X – концентрація відповідного компонента.

У скороченому вигляді цю систему можна записати так

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = f(A, B, C, D) \\ \frac{dB}{dt} = f(A, B, C) \\ \frac{dC}{dt} = f(A, B, C, D) \\ \frac{dD}{dt} = f(A, C, D) \end{cases}, \quad (4)$$

де A, B, C, D – концентрації компонентів продуктів згоряння, які необхідно визначити.

Адаптація методики розрахунку нерівноважного складу продуктів згоряння до умов газового двигуна

Оскільки основою даної методики є механізм горіння газу GRI 3.0 [7], то під адаптацією методики розрахунку нерівноважного складу до умов газового двигуна розуміється адаптація саме механізму GRI 3.0 до цих умов.

Цей механізм передбачає горіння газу за нормальних умов (температура – 20 °С, тиск – 768 мм рт. ст.), але у циліндрі двигуна і температура, і тиск набагато вище. Це означає, що у початковому вигляді не можна застосувати механізм GRI 3.0 до розрахунку нерівноважного складу продуктів згоряння газового двигуна, оскільки це призведе до отримання невірних результатів розрахунку.

Механізм горіння природного газу GRI 3.0 включає в себе 325 рівнянь хімічних реакцій для 53 компонентів [7]. Але за тих умов, що виникають під час горіння робочої суміші у циліндрі газового ДВЗ, утворюються не всі компоненти (через те, що температура та тиск у циліндрі не відповідають умовам їх утворення).

Також кількість деяких компонентів, з тих, що утворюються, є настільки малою, що їх вмістом у відпрацьованих газах двигуна можна знехтувати. Це дає змогу зменшити кількість компонентів реакцій, а значить і кількість диференціальних рівнянь у розрахунковій системі, до 25, а кількість рівнянь реакцій – до 121 (оскільки реакції, компоненти котрих були вилучені з розрахунку, не можуть відбутися, то ці реакції також виключаються з подальших розрахунків).

Ці спрощення полегшать процес складання та розв'язку системи диференціальних рівнянь, але це ніяким чином не вплине на точність отриманих результатів.

Початковий набір компонентів у механізмі GRI 3.0 такий [7]

$H_2, H, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_2(S), CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, C_2H, C_2H_2, C_2H_3, C_2H_4, C_2H_5, C_2H_6, HCCO, CH_2CO, HCCOH, N, NH, NH_2, NH_3, NNH, NO, NO_2, N_2O, HNO, CN, HCN, H_2CN, HCNN, HCNO, HOCN, HNCO, NCO, N_2, AR, C_3H_7, C_3H_8, CH_2CHO, CH_3CHO.$

Після адаптації набір компонентів став таким

$H_2, H, O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, N, NO, NO_2, N_2O, N_2.$

Отже, внаслідок адаптації механізму горіння природного газу до умов у газовому двигуні вдалося суттєво зменшити кількість компонентів, концентрації яких треба знайти, що, у свою чергу, значно полегшило складання та розв'язок розрахункової системи і, водночас, не вплинуло на точність результатів.

Після адаптації механізму горіння до умов у двигуні необхідно скласти розрахункову систему. Цю систему було складено, і у скороченій формі вона має вигляд

$$\begin{aligned}
 \frac{dH_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dH}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, N, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dO}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, N, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dO_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, N, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dOH}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, N, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dH_2O}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dHO_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dH_2O_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH_3, CH_4) \\
 \frac{dC}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, C, CH, CO, N, NO) \\
 \frac{dCH}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, C, CH, CH_2, CH_3, CO, CO_2, HCO, CH_2O, N, NO) \\
 \frac{dCH_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O) \\
 \frac{dCH_3}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dCH_4}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, H_2O_2, CH_2, CH_3, CH_4, CO, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dCO}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, C, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, N, NO) \\
 \frac{dCO_2}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, HO_2, CH, CH_2, CO, CO_2, HCO, N, NO) \\
 \frac{dHCO}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, CO_2, HCO, CH_2O, N, NO) \\
 \frac{dCH_2O}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, CO, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O) \\
 \frac{dCH_2OH}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH_3, CH_4, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dCH_3O}{dt} &= f(H_2, H_2O, O_2, OH, H_2O, HO_2, CH_3, CH_4, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dCH_3OH}{dt} &= f(H_2, H_2O, OH, H_2O, CH_3, CH_4, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH) \\
 \frac{dN}{dt} &= f(H_2O, O_2, OH, C, CO, CO_2, N, NO, N_2) \\
 \frac{dNO}{dt} &= f(H_2O, O_2, OH, HO_2, C, CH, CO, CO_2, HCO, N, NO, NO_2, N_2O, N_2) \\
 \frac{dNO_2}{dt} &= f(H_2O, O_2, OH, HO_2, NO, NO_2) \\
 \frac{dN_2O}{dt} &= f(H_2O, O_2, OH, HO_2, NO, N_2O, N_2) \\
 \frac{dNO_2}{dt} &= f(H_2O, O_2, OH, HO_2, N, NO, N_2O, N_2)
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

Розрахункове дослідження складу продуктів згоряння газового двигуна

Результати розрахунку даної системи за різних частот обертання колінчастого вала представлено на рис. 1 та 2 у виді навантажувальних характеристик.

Порівняння результатів розрахунку нерівноважного складу та експериментальних даних

На прикладі навантажувальної характеристики двигуна 4ГЧ7,5/7,35 на рис. 3 та 4 приведено порівняння результатів розрахунку нерівноважного складу та результатів експерименту [6].

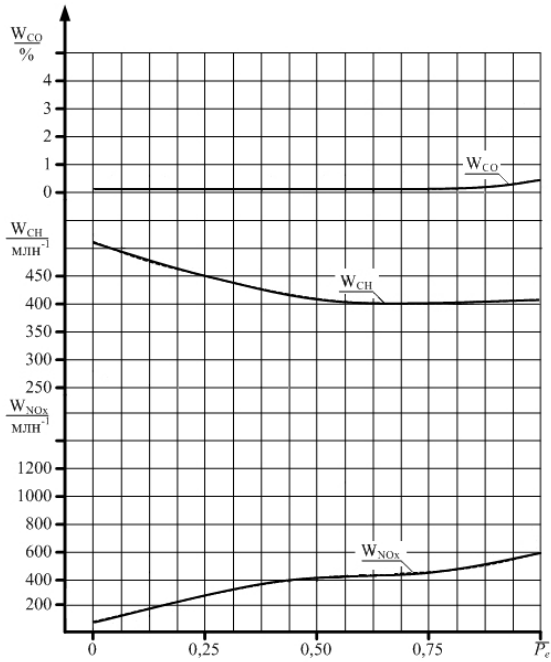


Рис. 1. Показники токсичності двигуна 4ГЧ7,55/7,35 при $n = 2500 \text{ хв}^{-1}$

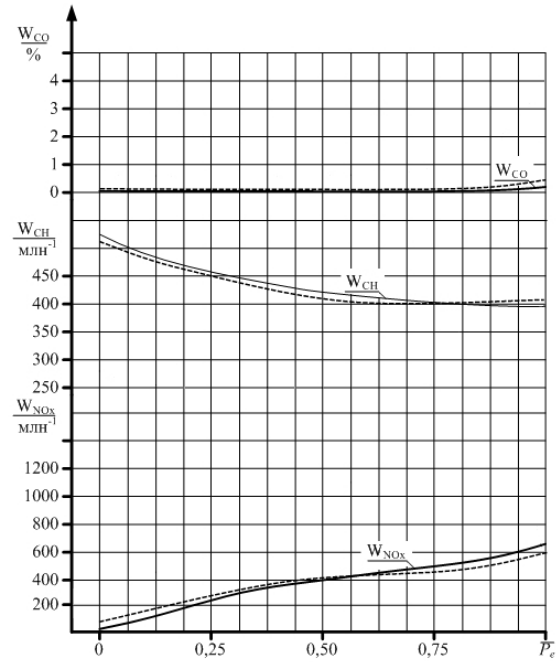


Рис. 3. Порівняння показників токсичності двигуна 4ГЧ7,55/7,35 при $n = 2500 \text{ хв}^{-1}$
 — експериментальні дані;
 - - - - - результати розрахунку

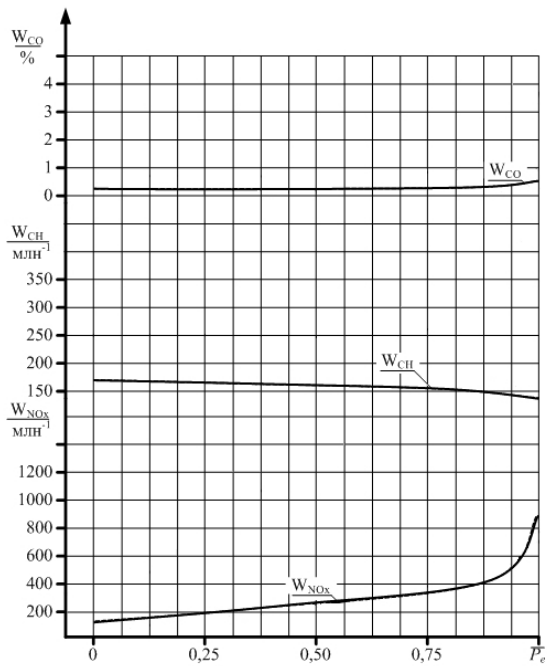


Рис. 2. Показники токсичності двигуна 4ГЧ7,55/7,35 при $n = 4000 \text{ хв}^{-1}$

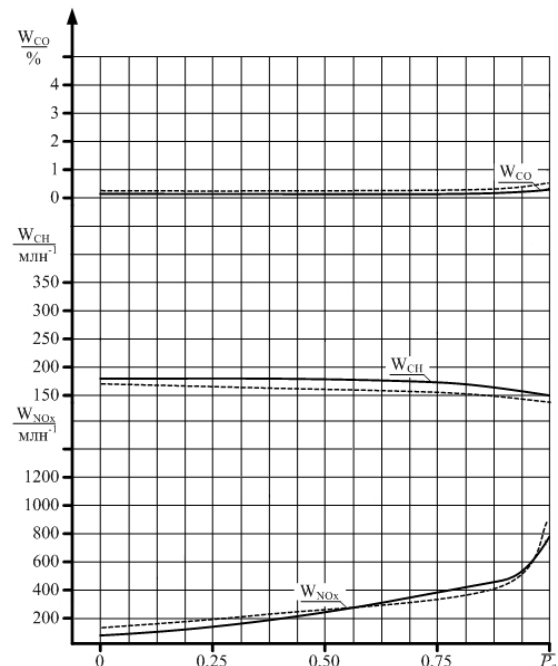


Рис. 4. Порівняння показників токсичності двигуна 4ГЧ7,55/7,35 при $n = 4000 \text{ хв}^{-1}$
 — експериментальні дані;
 - - - - - результати розрахунку

Висновки

Розрахунок нерівноважного хімічного складу продуктів згоряння газового двигуна з іскровим запалюванням має такі переваги:

- вище точність результату внаслідок більш досконалої моделі розрахунку;
- можливість розраховувати концентрацію оксидів азоту без застосування окремих методів;
- розраховується більша кількість шкідливих речовин, у тому числі й альдегіди.

Головним недоліком методу розрахунку нерівноважного складу є те, що він є більш складним у використанні, ніж розрахунок рівноважного складу.

Для визначення нерівноважного хімічного складу відпрацьованих газів газового двигуна з іскровим запалюванням пропонується використовувати систему з 25 диференціальних рівнянь із 25 невідомими, що базується на 121 хімічній реакції.

Порівняння результатів розрахунку з використанням одержаної математичної моделі з результатами експерименту показало, що похибка між цими результатами не перевищує 15 %.

Література

1. Звонов В.А. Токсичность двигателей внутреннего сгорания: учеб. пособие для

ВУЗов / В.А. Звонов. – 2-е изд., перераб. и дополн. – М.: Машиностроение, 1981. – 154 с.

2. Куценко А.С. Моделирование рабочих процессов двигателей внутреннего сгорания на ЭВМ / А.С. Куценко. – К.: Наукова 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.: Государственное изд-во оборонной промышленности, 1955. – 488 с.
5. Квасников В.А. Теория жидкостных ракетных двигателей / В.А. Квасников. – Л.: Государственное союзное изд-во судостроительной промышленности, 1959. – 542 с.
6. Кабанов А.Н. Основы использования природного газа в качестве топлива для автомобильных двигателей: монография / А.Н. Кабанов. – Х.: ХНАДУ, 2012. – 240 с.
7. Gri Mech home page [Электронный ресурс] / М. Frenklach, Т. Bowman, G. Smith, B. Gardiner: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

Рецензент: Ф.І. Абрамчук, професор, д.т.н., ХНАДУ.

Стаття надійшла до редакції 9 жовтня 2012 р.