

УДК 662.611.2:662,613,5

МОДЕЛЬ И МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ УСЛОВНОЙ ФОРМУЛЫ УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА ПРИ СЖИГАНИИ

Визначено причину, яка ускладнює використання несертифікованих видів палив - невідомість і змінність їх складу. Запропоновано математичну модель і метод, які дозволяють в процесі спалювання такого палива визначити його склад і забезпечити оптимальні параметри процесу горіння. Визначено обмеження, що накладаються моделлю на використовуваний метод

Ключові слова: вуглеводневе паливо, визначення умовної формули, продукти згоряння, математична модель

Установлена причина, затрудняющая использование несертифицированных видов топлив – неизвестность и переменность их состава. Предложены математическая модель и метод, позволяющие в процессе сжигания такого топлива определить его состав и обеспечить оптимальные параметры процесса горения. Определены ограничения, накладываемые моделью на используемый метод

Ключевые слова: углеводородное топливо, определения условной формулы, продукты сгорания, математическая модель

М. В. Максимов

Доктор технических наук,
профессор, заведующий кафедрой*
E-mail: prof.maksimov@gmail.com

А. И. Брунеткин

Кандидат технических наук, доцент*
E-mail: alexbrun@rambler.ru

А. В. Бондаренко

Аспирант, инженер*
E-mail: bondandrey@ukr.net

*Кафедра автоматизации теплоэнергетических процессов

Одесский национальный политехнический университет
пр. Шевченко 1, г. Одесса, Украина, 65044

1. Введение

Мировые тренды подорожания природных энергоносителей и тенденции по освоению промышленностью несертифицированных видов углеводородного топлива, получаемого при переработке нефти, вызывают интерес к решению задачи по созданию модели и метода, обеспечивающих эффективное сжигание углеводородных газов, теплотворная способность которых изменяется случайным образом во времени. Более того, решение такой задачи также актуально для обеспечения эффективного сжигания топлива с постоянной теплотворной способностью, которые могут быть получены в различных технологиях. К ним можно отнести: газы при добыче нефти, в том числе сланцевый и рудничный, продукты пиролиза, сбраживание органических остатков, биотопливо, доменные газы, газы брожения мусора и пр. Особое внимание следует обратить на экологический аспект продуктов сгорания, так как в результате некачественного и неполного сжигания таких топлив образуются и сбрасываются в окружающую природную среду большое количество вредных органических соединений.

2. Постановка проблемы

При использовании в качестве топлива для энергоустановок сертифицированных природных энергоносителей самым важным показателем является по-

стоянство их состава и, как следствие, постоянство теплотворной способности, что позволяет при режимной наладке энергетических установок обеспечить эффективное сжигание топлива при минимизации вредных выбросов для соблюдения экологических норм. В [1] приведен анализ распространения в атмосфере полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) за несколько лет от различных промышленных источников при исследовании городских и загородных объектов. В рассматриваемом исследовании показано, что ПАУ в аэрозольных частицах в концентрациях больших нормы, были получены в зимние периоды при сжигании ископаемого топлива для отопления жилых помещений. В неотапительные сезоны преобладание над нормой получено за счет выхлопных газов дизельных и бензиновых двигателей автомобилей. Определенный интерес представляет исследование [2] по распространению загрязнений в атмосфере, где были измерены концентрации летучих органических соединений (ЛОС) и идентифицированы источники их происхождения. Следует обратить внимание, что транспортные средства вносят 25 % от измеренной концентрации ЛОС; промышленные растворители – до 17 %; испарившееся топливо – до 15 %; растворители красителей – до 15 %; промышленное производство стали – 12 %; биомасса и биотопливо – 9 %, а сжигание угля – до 7 %. Приведенные исследовательские материалы [1, 2] показали, что для крупных промышленных мегаполисов, с точки зрения экологии, главной

стоит задача обеспечения качественного сжигания любого вида углеводородного топлива, в том числе для энергетических технологий сжигания топлив в двигателях транспортных установок.

Определенный интерес представляет работа [3], где исследуются причины вредных выбросов при эксплуатации дизельного двигателя на смесях нефтяного и биодизельного топлива. Анализ проводился для выбросов органических соединений, которые классифицируются по охране окружающей среды США как токсичные вещества. Другая работа [4], иллюстрирует результаты исследования по выбросу тяжелых углеводородов при работе дизельного двигателя. Констатируется, что при любых характеристиках выбросов тяжелых углеводородов топливо претерпевает различные тепловые и кинетические процессы при сгорании. Образование продуктов происходит из газовой фазы реакции пиролиза тяжелого углеводорода в пламени. Поэтому выброс тяжелых углеводородов из двигателя является следствием несгоревшего топлива. В [5] приведены результаты численного исследования и моделирования характеристики зажигания углеводородных топливных смесей при прохождении термического крекинга для реактивного топлива в воздушно-реактивном двигателе при высоких числах Маха. В основу метода исследования положена модель молекулярного переноса и химической кинетики, особое внимание уделено изменению состава топлива, температуры и добавок. Показано влияние на температуры горения и воспламенения смеси добавки небольшого количества CH_4 и C_2H_4 в реактивное топливо. Проведены исследования влияния добавок в смеси до 10 % водорода и до 1 % фтора. Следует отметить, что физические и численные эксперименты в рассматриваемых работах [3 – 5] проводились при неизменной и известной смеси горючего.

Для несертифицированных топлив такой подход [5] не может быть приемлем потому, что изменение химического состава топлива происходит случайным образом в любой момент времени, что в первую очередь характерно для нефтеперерабатывающих технологий. В табл. 1 приведены результаты измерений теплоты сгорания смеси углеводородных газов Q_n^p в десяти характерных точках при нефтепереработке с разницей во времени в один час. Относительная погрешность δ этих измерений составила от 3 до 15 %.

Для примера рассмотрим организацию сжигания топлива на установке первичной переработке нефти. В горелочных устройствах ГДК-5,8 и ГП-2,5Д1 расположенных в атмосферных и вакуумных печах для разогрева нефти в установке первичной переработки, существует жесткая связь между подачей горючего и окислителя.

Наладка печей осуществляется для работы на топочном мазуте или на газе, теплотворная способность которых составляет 9800 ккал/кг и 8550 ккал/м³ соответственно. Для экономии топочного мазута печи могут работать в комбинированном режиме. Около 75 % энергии обеспечивается за счет сгоревшего мазута, 25 % – за счет сгоревшего не сертифицированного газа с характеристиками Q_n^p (табл. 1). Регулирование отношения топливо/воздух осуществляется только за счет горелочных устройств, работающих на мазуте. Канал обратной связи поддержания постоянного коэффициента избытка воздуха, обеспечивающий эффективное дожигание в виде газоанализатора, расположенного в трубе, обеспечивает изменение воздуха в мазутных горелках. Такой способ организации сжигания не может обеспечить работу печей полностью на углеводородном не сертифицированном газе нефтепереработки, так как невозможно регулирование и обеспечение экологических норм из-за непостоянной характеристики Q_n^p . Поэтому проблему эффективного и качественного сжигания углеводородного газа переменного состава, с изменяющейся концентрацией во времени, можно сформулировать следующим образом. Необходимо разработать метод сжигания любого углеводородного топлива изменяющегося состава в энергетической установке, который будет доводить до норм, определяемых экологическими требованиями, продукты сгорания для их безопасного выброса в атмосферу. На первом этапе необходимо провести численное моделирование такого метода.

3. Цель и задачи исследования

Управление сжиганием горючего неизвестной теплотворной способности может быть обеспечено экстремальным регулятором. При заданном расходе горючего путем изменения расхода окислителя (воздуха) обеспечивается стехиометрическое соотношение, что соответствует максимальной температуре продуктов сгорания. Максимальная температура достигается при коэффициенте избытка воздуха α , который равен 1,0.

Максимальная температура достигается при коэффициенте избытка воздуха α , который равен 1,0.

Альтернативой такому методу может служить определение состава газа неизвестной теплотворной способности с помощью газоанализатора.

Такой метод обладает рядом недостатков: ресурсоемкий, громоздкий, имеет большое время инерции и, как следствие, запаздывание. Поэтому такой метод трудно интегрируется в автоматизированную систему управления. Для газоанализаторов требуются данные по

Таблица 1

Изменение погрешности измерения в характерных точках

№ точки отбора	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Q_n^p , ккал/кг, 1-ое измерение	11239	19102	17208	15374	10750	15789	11059	11064	11981	13202
Q_n^p , ккал/кг, 2-ое измерение	10307	17707	14720	15883	12063	17166	11913	12144	12596	14532
δ , %	8,29	7,30	14,46	3,31	12,21	8,72	7,72	9,76	5,13	10,07

перечню газов в смеси. Применение газоаналитических приборов усложняется тем, что такие газы содержат в своем составе нежелательные компоненты, которые приводят к ускоренному износу первичных приборов и выводу их из строя. Стоимость системы растёт с увеличением этого перечня.

Целесообразно рассмотреть подходы к моделированию и результаты натуральных и численных экспериментов в ряде исследований, которые были получены при изучении образования сажи, фактически углерода. В [6] рассматриваются топлива, обладающие свойствами образования сажи, содержащие полициклические ароматические углеводороды (нафталин). Избыточная концентрация кислорода на эффект образования сажи не повлияла. Влияние оказало изменение температуры пламени, расход топлива и продолжительности горения топлива. А в [7] было обнаружено, что в условиях высокой температуры пламени появляется возможность разложить метан на водород и $C_2 - C_4$ углеводороды, тем самым снизить формирование бензола и конденсированных фаз, в том числе и сажи. Это означает, что ароматизации/дегидрогенизации сажи в предварительно смешанном топливе во время горения больше зависит от характеристик топлива. Результаты рассмотренных материалов [5 – 7] показали, что созданные и примененные численные модели не являются универсальными и не могут быть взяты за основу изучения сгорания углеводородного газа при изменении во времени концентраций составляющих его частей.

Целью данной статьи является разработка метода и модели, позволяющих в процессе сжигания (окисления) углеводородного газа произвольного (или с минимальными ограничениями) состава, определять этот состав, а так же состав продуктов сгорания в режиме реального времени.

Для достижения поставленной цели необходимо решить ряд задач. На основании проведенных ранее исследований по разработке различных моделей по сжиганию различных углеводородов разработать общую математическую модель для решения поставленной цели. При необходимости разработать дополнительные замыкающие соотношения для нахождения решения в аналитическом виде. Рассмотреть особенности модели и на примере типового углеводородного топлива провести расчеты.

4. Математическая модель расширенной задачи определения условной формулы сжигаемого газа произвольного состава

В работе [8] изучены этапы горения метана в воздухе для отношений воздух/топливо от 0,5 до 1,4 и давлении от 1 до 70 атм. В основу анализа был положен сокращенный до четырех этапов кинетический механизм. Продолжительности этапов связаны со скоростями элементарных реакций, входящих в цепной механизм для окисления метана. Получены аналитические выражения для скорости горения и для характерной температуры. Для обедненного топлива численные и натурные эксперименты совпали. Результаты по скоростям горения получились завышенными для стехиометрического и богатого пламени.

Модель воспламенения первичных эталонных топлив (32 вида) была разработана в [9] исходя из упрощенной кинетической модели, которая включала 55 реакций. Результаты исследований подтвердили известные двухступенчатые характеристики зажигания тяжелых углеводородов, которые включают низкие и высокие температурные циклы с последующей разветвленной цепью взрыва. Показано, что на первом этапе выделение энергии уменьшается, а задержка воспламенения увеличивается нелинейно с повышением октанового числа и уменьшением начального давления. Скорость выделения энергии определяется, прежде всего, скоростью окисления CO во время взрывной фазы после задержки воспламенения. Предварительный анализ [8, 9] построения кинетической модели показал, что для создания универсальной модели окисления необходимо использовать подход, состоящий из подходов, основанный на моделировании цепного механизма.

Поэтому математическая модель и метод решения прямой задачи расчета состава продуктов сгорания при известном составе топлива основываются на результатах исследований, приведенных в [10]. При известных массовых или объемных долях составных частей топлива записывается условная формула топлива в виде

$$A_{b_{iТ}}^{(i)} A_{b_{jТ}}^{(j)} \dots A_{b_{kТ}}^{(k)}, \quad (1)$$

где $A^{(i)}$ - символ i -го химического элемента;

$b_{iТ}$ - количество атомов i -го химического элемента в условной молекуле топлива.

Метод предполагает, что все расчеты выполняются на основе условной формулы топлива (1). Количество атомов каждого химического элемента в случае неопределенного состава углеводородного горючего неизвестно. Определение этого количества и состава продуктов, образующихся при его сгорании, является целью решения расширенной задачи.

Основу метода составит модель, примененная в [10], но ее необходимо дополнить замыкающими уравнениями, позволяющими найти новые дополнительные неизвестные $b_{iТ}$.

Уравнение сохранения вещества имеет вид

$$\sum_q (a_{iq} \cdot n_q) = b_{iТ}, \quad (2)$$

где q - количество веществ в продуктах сгорания;

a_{iq} - количество атомов этого же вещества в q -ом веществе в продуктах сгорания;

n_q - количество молей q -го вещества в продуктах сгорания.

Уравнение химического равновесия, предложенное в [10, 11] использует уравнение сохранения вещества в виде:

$$\sum (a_{iq} \cdot P_q) = M_T \cdot b_{iТ}. \quad (3)$$

В уравнении (3), в отличие от (2), в расчетах учитывается M_T молей топлива, количество которых выбирается таким образом, чтобы количество молей (n_q) q -го вещества в продуктах сгорания было равно его парциальному давлению P_q . В таком случае M_T

является неизвестной величиной и дополнительно подлежит определению.

С учетом (3) закон химического равновесия по парциальным давлениям записывается как:

$$\frac{\prod P_i^{a'_{ij}}}{P_j} = K_j^0, \quad (4)$$

где P_j, P_i - парциальные давления веществ в продуктах сгорания, соответственно зависимых j и независимых i , из которых зависимые могут быть образованы;

a'_{ij} - стехиометрический коэффициент в реакции химического равновесия;

K_j^0 - константа химического равновесия по парциальным давлениям.

Уравнений (3) и (4) достаточно для нахождения q парциальных давлений газов, входящих в продукты сгорания. Для определения величины M_T используется закона Дальтона:

$$\sum_q P_q = P, \quad (5)$$

где P - давление смеси газов продуктов сгорания в топке.

5. Дополнительные замыкающие соотношения расширенной задачи

Модель в выражениях (3), (4), (5) решает прямую задачу в случае известной условной формулы топлива (1). Рассмотрим решение расширенной задачи для пространенной формы топлива, горючее и окислитель которого находятся в газообразном состоянии: окислитель известного состава, горючее – газ или смесь газов неизвестного состава.

Дополнительно к (3), (4), (5) запишем замыкающие соотношения. Для газообразного состояния мольные объемы любых идеальных веществ одинаковы. В силу этого отношения объемных расходов горючего и окислителя равны мольным отношениям в рассматриваемых реакциях горения. Дополнительное балансовое уравнение для топлива и продуктов сгорания с учетом (3) имеет вид:

$$(I_T + \alpha \cdot \chi_0 \cdot I_O) \cdot M_T = \sum_q I_q \cdot P_q. \quad (6)$$

Здесь α - коэффициент избытка окислителя;

χ_0 - мольный стехиометрический коэффициент соотношения компонентов;

I_T, I_O, I_q - мольные энтальпии горючего, окислителя и газов в смеси продуктов сгорания.

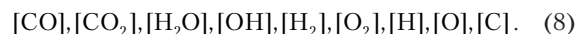
Чтобы применить уравнение (6) для нахождения нескольких дополнительных переменных, необходимо использовать работу экстремального регулятора. При одном из шагов его работы замеряются объемные расходы окислителя и горючего ${}^{(1)}\dot{V}_O, {}^{(1)}\dot{V}_T$, а также температура продуктов сгорания ${}^{(1)}T$, соответствующая этим расходам (верхний индекс ${}^{(1)}$). При этом в уравнении (6) осуществим следующую замену:

$$\alpha \cdot \chi_0 = {}^{(1)}\dot{V}_O / {}^{(1)}\dot{V}_T, \quad (7)$$

где \dot{V}_O, \dot{V}_T - объемные расходы окислителя и горючего, а температуре ${}^{(1)}T$ будут соответствовать энтальпии веществ ${}^{(1)}I_q$, входящих в продукты сгорания и их парциальные давления.

Перечень химических элементов, из которых состоит горючее (b_T), должен быть известен. Это является ограничением рассматриваемой модели, которое не представляется очень строгим. Так учет даже ограниченного количества атомов веществ, например [C], [H], [O], [S], [N], позволяет смоделировать почти все органические соединения, горящие в воздушной атмосфере [3 – 9].

Если горючее состоит из (n) элементов, то количество новых неизвестных составляет ($n+1$), так как кроме количества атомов элементов в условной формуле горючего необходимо определить и его энтальпию I_T . Для этого необходимо записать ($n+1$) уравнений вида (6). Каждому такому уравнению соответствует свое измерение величин ${}^{(1)}\dot{V}_O, {}^{(1)}\dot{V}_T, {}^{(1)}T$ при пробном сжигании топлива и варьировании величины ${}^{(1)}\dot{V}_O$. При принятом количестве газов в продуктах сгорания (q) для каждого уравнения (6) необходимо записать ($q+1$) уравнения основной модели (3), (4), (5) и с учетом количества новых неизвестных ($n+1$) всего $((q+1)+1) \cdot (n+1)$ уравнений. Так, например, при использовании углеводородного горючего, состоящего из $n=2$ элементов (углерода [C] и водорода [H]) с использованием в качестве окислителя кислорода [O], в качестве продуктов сгорания можно рассматривать $q=9$ веществ:



Для решения прямой задачи необходимо решить систему уравнений из $(q+1)=10$ уравнений и добиться соблюдения баланса в уравнении (6). При решении расширенной задачи потребуется решить систему из $((9+1)+1) \cdot (2+1) = 33$ уравнений.

6. Особенности модели при решении прямой расширенной задачи

Работоспособность модели прямой расширенной задачи и изучение особенностей, возникающих в процессе вычислений, проверялось на топливной паре $CH_{1,956}$ (керосин) + O_2 , так как его условная топливная формула близка к условной формуле топочного мазута, с одной стороны, используемого в печах установки, кроме того, данные по продуктам сгорания этой пары приведены в [12].

Были предложены следующие данные для расчета:

- выбиралась произвольная величина коэффициента α , рассчитывалось соответствующее ему мольное отношение кислорода и керосина, которое в тестовом расчете принималось в качестве замеренного отношения ${}^{(1)}\dot{V}_O / {}^{(1)}\dot{V}_T$;
- находилась температура T , приведенная в [12] для камеры сгорания, соответствующая выбранному α , которая в тестовом расчете принималась в качестве измеренной температуры в камере сгорания ${}^{(1)}T$.

Горючее в тестовой паре состоит из $n=2$ элементов: [C] и [H]. Это должно быть известно до начала расчетов. В этом случае в реальной ситуации необходимо выполнить $n+1=3$ измерения технологических параметров при любом расходе кислорода. Поэтому было подготовлено 3 комплекта исходных данных V_O, V_T, T для различных α . Целью расчета является определение количественного состава горючего (величин b_C) и его энтальпии. Результатом расчетов тестового варианта должно быть значение количества атомов в условной формуле $b_C=1, b_H=1.956$, и энтальпия горючего $I_T=-1948$ кДж/кг= $-27237,7$ кДж/кмоль. Молекулярная масса керосина, используемая для пересчета, принята равной $\mu=13,9824$ кг/моль.

На первом этапе тестирования решалась прямая задача на основе уравнений (3), (4), (5). Метод решения исходной системы уравнений изложен в [10]. Полиномы для вычисления энтальпий и энтропий продуктов сгорания, приняты по [12].

Замыкающим выступает уравнение баланса энтальпий топлива и продуктов сгорания. Сравнение вычисленных по [10] энтальпий при $T=3000$ К для рассматриваемых продуктов сгорания с данными [13] дает несколько другие величины, как по абсолютной, так и по относительной величине. Результаты сравнения приведены в табл. 2, I_{II} - энтальпия, рассчитанная по модели [10], I_T - энтальпия, определенная по [13].

Таблица 2

Сравнение результатов расчетов энтальпий продуктов сгорания

	CO	CO ₂	H ₂ O	OH	H ₂	O ₂	H	O	C
$\Delta = I_{II} - I_T,$ кДж / моль	-5,25	-9,54	-12,60	-8,80	-8,29	-31,13	-4,23	-4,24	-2,59
$\delta = \frac{I_{II} - I_T}{I_T} \cdot 100\%$	+45,2	+4,1	+12,5	-6,4	-8,5	-29,2	-1,5	-1,4	-0,3

В [10] отмечено, что достигнутая точность, а, следовательно, и момент окончания расчетов, назначался погрешностью определения состава продуктов сгорания (парциальных давлений). При этом не проводился анализ оставшегося количественного дисбаланса по энтальпиям топлива и продуктов сгорания. В предлагаемой модели для расчета неизвестного состава горючего соблюдение баланса энтальпии является основным требованием. Для выбранной топливной пары были выполнены расчеты при различных соотношениях компонентов, результаты которых, а также соответствующие результаты из [12], приведены в табл. 3.

По соблюдению баланса энтальпий расчеты выполнялись до достижения относительной погрешности вычислений $\sim 10^{-4}$. Данные приведены для давления в камере сгорания $P_{КС}=1$ бар. Парциальные давления также измеряются в барах. В соответствии с [10] расчет выполнен таким образом, чтобы парциальные давления были равны мольным долям продуктов сгорания. Расход продуктов сгорания через камеру сгорания составляет 1 кмоль/сек.

Сравнение результатов показывает, что при $\alpha=0,4$ рассчитанные температура и энтальпия продуктов сгорания близки величинам, приведенным в [12].

При $\alpha=0.7$ и $\alpha=2.0$ отклонения температур также незначительны и составляют соответственно $\Delta T=16$ К и $\Delta T=40$ К при относительной погрешности $\epsilon \approx 0,5\%$ и $\epsilon \approx 1,4\%$. Энтальпии же продуктов сгорания в [12] имеют значительный дисбаланс с энтальпиями топлива: при $\alpha=0.7 \approx 20\%$, а при $\alpha=2.0 \approx 46\%$. Несмотря на это, парциальные давления газов, входящих в продукты сгорания, в обоих случаях приблизительно одинаковы.

Были выявлены следующие особенности модели для решения прямой расширенной задачи:

- оценка работоспособности рассматриваемой модели и точности, полученных на ее основе результатов расчетов должны проводиться по уточненным данным температуры;

- данные из [12] могут рассматриваться как ориентировочные для контроля рассчитанного состава продуктов сгорания;

- высокая чувствительность энтальпии продуктов сгорания к их температуре может привести к неустойчивости при решении составленной на основе рассматриваемой модели системы нелинейных уравнений.

Для решения расширенной задачи взяты точки, соответствующие $\alpha=0.4; 0.7; 1.0$. Вычислены отношения объемных расходов (7). Решены прямые задачи и уточнены соответствующие им температуры и составы продуктов сгорания. При математической корректности рассматриваемой модели, численное решение, полученное при решении системы уравнений, оказалось плохо устойчивым, зависимым от начальных приближений. Для повышения устойчивости решения необходимо было найти жесткую связь между определяемыми величинами, не изменяющуюся в процессе вычислений состава продуктов сгорания. Была предложена связь между количеством атомов [C] и [H] в горючем при $\alpha=1$ (стехиометрическом соотношении компонентов). С одной стороны, из (7) при $\alpha=1$ следует

$$\dot{V}_O / \dot{V}_T = \alpha \cdot \chi_0 = \chi_0. \tag{9}$$

С другой стороны, при стехиометрическом соотношении количество максимальных валентностей окислительных элементов равно количеству максимальных валентностей восстановительных элементов. Поэтому, применительно, например, к углеводородам и кислороду можно записать такой баланс:

$$C_{bc}H_{bh} + \frac{\dot{V}_O}{\dot{V}_T} \cdot O_2 = b_C \cdot CO_2 + \frac{b_H}{2} \cdot H_2O, \tag{10}$$

а из него баланс по атомам кислорода:

$$2 \cdot \frac{\dot{V}_O}{\dot{V}_T} = 2 \cdot b_C + \frac{b_H}{2}. \tag{11}$$

Для решения расширенной задачи уравнение (11) можно использовать в качестве замыкающего вместо одного из уравнений баланса энтальпий (6). При этом отпадает необходимость в уравнениях для расчета состава продуктов сгорания одного из замеров, что для керосина с кислородом составляет 10 уравнений и об-

щее количество уравнений в этом случае уменьшается с 33 до 23. В производственных условиях при работе экстремального регулятора отношение объемных расходов горючего и окислителя, соответствующее стехиометрическому соотношению может быть определено следующим образом:

- замеренные объемные расходы при найденной максимальной температуре;
- по нескольким замерам строится аппроксимационная зависимость температуры от отношения объемных расходов горючего и окислителя и по ней определяется максимальная температура и соответствующее ей отношение объемных расходов;
- сочетание первого и второго способа с усреднением найденных отношений в случае их различия.

- Конечная система уравнений содержит:
- двадцать уравнений на основании (3), (4), (5), соответствующих двух измерений температур и объемных расходов кислорода и керосина. Эти уравнения содержат 18 неизвестных парциальных давлений (8) и два M_T молей топлива, соответствующих определенным замерам;
 - два уравнения (6), соответствующих этим же измерениям;
 - уравнение (11).

Получена система 23-х алгебраических уравнений, многие из которых нелинейные. Решение было найдено в численном виде. В качестве неизвестных были приняты не сами определяемые величины, а их логарифмы. Логарифмическая форма позволяет не опасаться «исчезновения» определяемых неизвестных в процессе решения при любых значениях температур и давлений. Кроме того, такая запись исключает возможность появления в процессе расчета отрицательных значений парциальных давлений, не имеющих физического смысла. Это повышает устойчивость численного решения, которое было найдено с помощью метода Ньютона путем разложения уравнений системы в ряд Тейлора по степеням, не выше первой. Производные были найдены не по определяемому неизвестному, а по их логарифмам. Поправки также определяются для логарифмов неизвестных. Для повышения устойчивости численного решения приняты специальные меры. При поиске нового приближения к предыдущему прибавляется

только часть найденной поправки. Величина этой части определяется коэффициентом нижней релаксации. Он подбирается опытным путем, находится в интервале $[0...1]$, задается перед началом расчетов $k=0.4$. Давление $P_2=1$ бар.

Проанализируем результаты расчета, приведенные в табл. 4. В первом столбце приведены парциальные давления P (бар) и количество кмоль топлив в реакции для получения 1 кмоль продуктов сгорания $M_T^{(1)}, M_T^{(2)}$ – верхние индексы показывают номер замера, к которому относится рассматриваемый параметр; b_H, b_C – количество атомов водорода и углерода в формуле горючего; I_T – энтальпия горючего (кДж/кмоль).

В столбце 2 приведены начальные приближения. В столбцах (3 – 6) – данные расчета при решении расширенной задачи через 5, 10, 15, 20 шагов соответственно. В столбце 7 – уточненные данные, полученные при решении прямой задачи (табл. 3), используемые для оценки точности решения рассматриваемой задачи (эталон). В столбце 8 приведены результаты расчета при решении расширенной задачи с исходными данными (температурами) из [12].

Таблица 3
Сравнение результатов из [12] с результатами решения прямой задачи при уточнении баланса по энтальпиям

Коэф. избытка окислителя	$\alpha=0,4$		$\alpha=0,7$		$\alpha=2,0$		
	[12]	расчет	[12]	расчет	[12]	расчет	
Энтальпии, кДж/кмоль	IT= -17588		IT= -18523		IT= -17112		
	$I_{PC}=-7625$	$I_{PC}=-7584$	$I_{PC}=-22195$	$I_{PC}=-18520$	$I_{PC}=-25000$	$I_{PC}=-17096$	
Температура T, K	2124	2125	3065	3081	2855	2895	
Парциальные давления	P_{CO}	0,4868	0,4869	0,3458	0,3440	0,0618	0,0594
	P_{CO2}	0,0181	0,0181	0,1108	0,1131	0,2036	0,2031
	P_{H2O}	0,0783	0,0784	0,2744	0,2761	0,2127	0,2047
	P_{OH}	-	-	0,0551	0,0592	0,0660	0,0778
	P_{H2}	0,4143	0,4143	0,1124	0,1094	0,0090	0,0082
	P_{O2}	-	-	0,0180	0,0130	0,3952	0,3783
	P_H	0,0023	0,0022	0,0645	0,0638	0,0094	0,0098
	P_O	-	-	0,0189	0,0213	0,0422	0,0587
	P_C	-	-	-	-	-	-
M_T		0,505		0,4571		0,2625	

7. Проверка работоспособности модели при решении прямой расширенной задачи

Проверочный расчет выполнялся для двух отношений объемных расходов $\dot{V}_O^{(1)}/\dot{V}^{(1)}=0.5956$ и $\dot{V}_O^{(2)}/\dot{V}^{(2)}=1.0423$, соответствующих $\alpha^{(1)}=0.4$ и $\alpha^{(2)}=0.7$, а также температурам $T^{(1)}=2125$ K и $T^{(2)}=3081$ K (табл. 2). Отношение объемных расходов при стехиометрическом соотношении принято $\dot{V}_O^{(стех)}/\dot{V}_T^{(стех)}=1,489$.

Выбор из q индивидуальных веществ смеси газов продуктов сгорания m независимых компонентов, с помощью которых можно записать l независимых реакций образования оставшихся зависимых ($q-m$) веществ, является наиболее существенным для формы записи уравнений (4). Наиболее просто, удобно и единообразно рассматривать диссоциацию всех молекулярных компонентов только на атомы. При решении рассматриваемой тестовой задачи из 9-ти возможных компонентов продуктов сгорания списка (8) выбраны независимые $[H],[O],[C]$, т. е. $m=3$. С их помощью записаны $l=6$ независимых реакций (4) образования оставшихся зависимых веществ $[CO],[CO_2],[H_2O],[OH],[H_2],[O_2]$.

Таблица 4

Результаты расчета по расширенной модели с использованием уравнения (11)

Состав продуктов сгорания	Нач. пригл.	5 шагов расчета	10 шагов расчета	15 шагов расчета	20 шагов расчета	Точн. реш. (прям. задача)	Данные по работе [12]
1	2	3	4	5	6	7	8
$P^{(1)}_{CO}$	1.0	0.6005	0,4944	0,4872	0,4867	0,4869	0,4432
$P^{(1)}_{CO_2}$	1.0	0.0314	0,0190	0,0182	0,0181	0,0181	0,0203
$P^{(1)}_{H_2O}$	1.0	0.1393	0,0828	0,0789	0,0786	0,0784	0,1011
$P^{(1)}_{OH}$	0.1	0.0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
$P^{(1)}_{H_2}$	0.1	0.5003	0,4208	0,4149	0,4145	0,4143	0,4332
$P^{(1)}_{O_2}$	0.1	0.0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$P^{(1)}_H$	0.1	0.0035	0,0023	0,0022	0,0022	0,0022	0,0023
$P^{(1)}_O$	0.1	0.0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$P^{(1)}_C$	0.1	0.0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$M^{(1)}_T$	1.0	0.5498	0,5082	0,5051	0,5049	0,5050	0,4910
$P^{(2)}_{CO}$	1.0	0.4037	0,3480	0,3441	0,3438	0,3440	0,3172
$P^{(2)}_{CO_2}$	1.0	0.1322	0,1144	0,1132	0,1131	0,1131	0,1042
$P^{(2)}_{H_2O}$	1.0	0.3353	0,2807	0,2767	0,2763	0,2761	0,3043
$P^{(2)}_{OH}$	0.1	0.0622	0,0594	0,0592	0,0592	0,0592	0,0584
$P^{(2)}_{H_2}$	0.1	0.1316	0,1111	0,1096	0,1095	0,1094	0,1213
$P^{(2)}_{O_2}$	0.1	0.0128	0,0130	0,0130	0,0130	0,0130	0,0117
$P^{(2)}_H$	0.1	0.0730	0,0645	0,0639	0,0638	0,0638	0,0641
$P^{(2)}_O$	0.1	0.0221	0,0214	0,0213	0,0213	0,0213	0,0191
$P^{(2)}_C$	0.1	0.0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
$M^{(2)}_T$	1.0	0.4854	0,4591	0,4572	0,4571	0,4571	0,4464
b_H	1.0	2.0158	1,9631	1,9578	1,9574	1,9560	2,1808
b_C	1.0	0.9773	0,9976	0,9995	0,9996	1,0000	0,9438
Γ	-12000	-79699	-7223	-6567	-6517	-27238	-30527

8. Анализ результатов расчета прямой расширенной задачи

Сравнение данных из столбцов 6 и 7 показывает, что решение получено с высокой степенью математической точности, т.е. модель не дает каких-либо искажений, связанных с допущениями или неточностью численных расчетов. Незначительные расхождения в результатах (в 4^м знаке) могут быть объяснены тем, что эталонные данные (столбец 7) были получены с такой же точностью.

Быстрая сходимость результатов расчетов (столбцы 3 - 6) позволяет, хотя и косвенным образом, судить о высокой устойчивости численного решения.

Пробные расчеты и сравнение результатов (столбцы 7 и 8) показывают высокую чувствительность и значительную погрешность в определении количественного состава условной формулы горючего и его энтальпии. Но погрешности в определении состава продуктов сгорания не столь велики и в данном случае не превосходят половины разряда второй значащей цифры, что соответствует относительной погрешности ~ 0,05 (допустимой инженерной точности).

9. Выводы

Математическая модель на основании уравнений вида (3) - (6), (11) для газообразного топлива позволяет определить количественный состав его условной формулы, энтальпию топлива, состав продуктов сгорания при использовании в качестве исходных данных величин замеренных технологических параметров (расходов компонентов топлива, соответствующих им температур в камере сгорания), известного элементного (качественного) состава топлива ([C], [H], [O]).

Математическая точность модели позволяет использовать полученные на ее основе данные для оценки чувствительности результатов расчетов с учетом погрешностей измерительных каналов: температуры продуктов сгорания и расходов горючего и окислителя.

При решении реальных технологических задач значения энтальпии и энтропии продуктов сгорания должны определяться с максимально возможной точностью на основании таблиц типа [13] или программных комплексов, табулирующих подобного рода таблицы. Полиномиальные зависимости для определения энтальпий и энтропий продуктов сгорания, описанные в [10], вследствие значительных погрешностей аппроксимации, не могут быть использованы для решения расширенной задачи.

Литература

- Jiabin, Z. Size distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons in urban and suburban sites of Beijing, China [Текст] / Z. Jiabin, T. Wang, Y. Huang, T. Mao, N. Zhong // *Chemosphere*. – 2005. -Т. 61 - С. 792-799
- Cai, C. Characteristics and source apportionment of VOCs measured in Shanghai, China [Текст] / C. Cai, F. Geng, X. Tie, Y. Qiongu, A. Junlin // *Atmospheric Environment*. – 2010. - Т. 44 - С. 5005-5014
- Kento, T., Gomez, M. Sensitivity of hazardous air pollutant emissions to the combustion of blends of petroleum diesel and biodiesel fuel [Текст] / T. Kento, M. Gomez, M. Olson, T. Okuda, A. Walz, J. Schauer // *Atmospheric Environment*. – 2012. - Т. 50 - С. 307-313
- Barbella, R. The emission of heavy hydrocarbons from a diesel engine and a spray flame [Текст] / R. Barbella, A. Ciajolo, A. D'Anna // *Fuel*. - 1989. – Т. 68, June, - С. 690-696
- Fokion, N. Non-premixed hydrocarbon ignition at high strain rates [Текст] / N. Fokion, P. E. Dimotakis // *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*. – 1998. – С. 641-648
- Sangiovanni, J. J. Soot formation characteristics of well-defined spray flames [Текст] / J. J. Sangiovanni, D. S. Liscinsky // *Twentieth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute*. - 1984. - С. 1063-1073
- Alfe, M. The effect of temperature on soot properties in premixed methane flames [Текст] / M. Alfe, B. Apicella, J.-N. Rouzaud, A. Tregrossi, A. Ciajolo // *Combustion and Flame*. - 2010. - Т. 157 - С. 1959-1965
- Buiphram, M. The asymptotic structure of premixed methane-air flames with slow CO oxidation [Текст] / M. Buiphram, K. Seshadri, F. A. Williams // *Combustion and Flame*. - 1992. - Т. 89 - С. 343-362

9. Shigeyuki, T. A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine [Текст] / T. Shigeyuki, F. Ayala, J. C. Keck // Combustion and Flame. - 2003 - Т.133 - С. 467-481
10. Глушко, В. П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания [Текст] / В. П. Глушко // Справочник АН СССР, ВИНТИ; Алемасов, В. Е. Методы расчета / В. Е. Алемасов // Справочник АН СССР, ВИНТИ. - 1971. - Т. 1 - 266 с.: ил.
11. Huf, V. N., Gordon, S., Morrel, V. E., NASA Rept. 1037, 1951.
12. Глушко, В. П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания [Текст] / В. П. Глушко // Справочник АН СССР, ВИНТИ; Алемасов, В. Е. Топливо на основе кислорода / В. Е. Алемасов // Справочник АН СССР, ВИНТИ. - 1972. - Т. 2 - 390 с.: ил.
13. Гурвич, Л. В. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. [Текст] / Л. В. Гурвич, И. В. Вейц, В. А. Медведев и др. // Справочное издание: В 4-х т. - 1978.- Т. I. Кн. 2. - 328 с.

Проаналізовано витрати дизельного палива маневровими тепловозами за видами руху. Досліджено час роботи дизель-генераторних установок тепловозів ЧМЕЗ, що працюють за системою двох одиниць в різних режимах. Виконано аналіз відомих технічних рішень з підвищення ступеня використання локомотивних енергетичних установок

Ключові слова: маневровий тепловоз, система двох одиниць, дизель-генераторна установка, витрата палива

Проанализированы расходы дизельного топлива маневровыми тепловозами по видам движения. Исследовано время работы дизель-генераторных установок тепловозов ЧМЭЗ, работающих по системе двух единиц в различных режимах. Выполнен анализ известных технических решений по повышению степени использования локомотивных энергетических установок

Ключевые слова: маневровый тепловоз, система двух единиц, дизель-генераторная установка, расход топлива

UDC 629.421.4

INVESTIGATION OF EFFECTIVENESS OF CHME3 DIESEL LOCOMOTIVES, WORKS ON TWO-UNIT SYSTEM

A. Falendysh

Professor

Department of Thermotechnics and heat engines
Ukrainian State Academy of railway transport
Feuerbach Square 7, Kharkiv, Ukraine, 61050
E-mail: fap_hiit@rambler.ru

V. Gatchenko

Candidate of Technical Sciences

Department of railway rolling stock
Donetsk Institute of Railway Transport
Ukrainian State Academy of Railway Transport
Str. Artem, 184, Donetsk, Ukraine, 83122
E-mail:vgatchenko@yandex.ru

1. Introduction

The use of the locomotive sector of railway transport of Ukraine shunting locomotives operating on multiple-unit, to ensure the required power, has long been a concern of specialists, but it is necessary to consider their modes of operation and the need to save diesel fuel when operating at low loads. This issue is the main topic when considering the efficient use of fuel - in the management of energy resources and the formation of trains at railway stations, taking into account the introduction of the program by resursozberezhniyu in rail transport [1].

2. Statement of the problem

Saving diesel fuel during the operation of diesel vehicles is one of the most important issues of the railway transport

of Ukraine. The reduction of costs for diesel fuel, used for diesel locomotive engines, maintaining the engine power is the primary task, requiring constant search for new opportunities, which makes it possible to reduce fuel consumption [1 – 4].

At the present time the diesel fuel cost is one of the principal expenses for locomotive facilities of Ukrainian railways.

Aim of the article is to analyze fuel consumption by diesel-locomotives on Donetsk Railways according to the kinds of motion; study the annual fuel consumption by diesel-locomotives with a two-unit set; explore the operation time of diesel generating sets of ChME3 diesel-locomotive shunters with a two-unit set in various modes while performing shunting operations; analyze existing engineering solutions for longer usage of locomotive power plants of diesel-locomotives.