

УДК 530.17+536.7+541.8(11)

А. М. Левтеров, канд. техн. наук

В. С. Маринин, д-р техн. наук

К. Р. Умеренкова, канд. техн. наук

Институт проблем машиностроения им. А. Н. Подгорного НАН Украины
(г. Харьков, E-mail: dppp@ipmach.kharkov.ua)

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ

Проанализировано состояние проблемы загрязнения окружающей среды продуктами сгорания углеводородных топлив промышленных и транспортных энергоустановок. Для повышения эффективности использования альтернативных моторных топлив (АМТ) как одного из аспектов решения проблемы предложен оригинальный метод расчета теплофизических свойств некоторых АМТ.

Проаналізовано стан проблеми забруднення довкілля продуктами згорання вуглеводневих палив промислових та транспортних енергоустановок. Для підвищення ефективності використання альтернативних моторних палив (АМП) як одного з аспектів розв'язання проблеми запропоновано оригінальний метод розрахунку теплофізичних властивостей деяких АМП.

Анализ публикаций и постановка задачи

Значительная антропогенная нагрузка на биосферу в больших городах приводит к существенным изменениям их мезоклимата, что определяется, как правило, формированием дымопылевого купола, т.е. особого слоя воздуха, насыщенного газовыми примесями и разными аэрозолями. Это приводит к усилению парникового эффекта, что обусловлено высокой концентрацией водяного пара и двуокиси углерода, а также к изменению интенсивности солнечной радиации за счет изменения оптических свойств околосреднего слоя воздуха. Постепенно в атмосфере над городами накапливается большое количество токсических, канцерогенных и мутагенных соединений, которые попадают в окружающую среду с продуктами сгорания угля, нефти, топлив автотранспортных двигателей (более 70% всех вредных выбросов) и промышленных предприятий. Все это существенно нарушает равновесие в биосфере и ставит перед обществом проблему экологии как наиважнейшую.

Приближенная оценка суммарной массы токсических, мутагенных и канцерогенных веществ, которые попадают в атмосферу Украины с отработавшими газами автотранспортных двигателей, составляет 4560 тыс. т за год (2000 г.). Общеизвестно, что за последние десять лет количество автотранспорта в мире увеличилось с 500 до более 800 млн единиц, т.е. почти вдвое. Темпы роста этого показателя в Украине еще более высокие, чем в мире. Учитывая, что основная масса вредных выбросов концентрируется в дымопыльных куполах городов, можно обоснованно считать, что на каждого городского жителя приходится не менее 130 кг токсических выбросов ежегодно [1].

Как уже было отмечено, одним из направлений решения проблемы загрязнения атмосферы вредными выбросами транспортных ДВС является использование альтернативных топлив и, в частности, природного газа (ПГ) и биогаза (БГ), близкого по своим характеристикам к ПГ, что позволяет существенно улучшить экологические характеристики транспорта [2]. Для этого необходимы разработка и внедрение технологии переоборудования бензиновых и дизельных двигателей автомобилей, а также создание современных «экологических двигателей». За рубежом производство газовых двигателей достаточно хорошо развито и

ряд фирм производит двигатели, работающие на традиционном топливе и на биогазе или ПГ.

Например, австрийская фирма Иенбахе Берке выпускает серийные газовые двигатели с эффективной мощностью 30–2200 кВт [3], западногерманская Машиненверке (Аугсбург–Нюрнберг) – двигатели, работающие на ПГ, которые легко модифицируются в случае применения БГ. Мощность двигателей составляет 99–130 кВт [4]. Фирма Даймлер-Бенц (ФРГ, Штутгарт) выпускает двигатель средней мощности марки М407, работающий на ПГ с возможностью его модификации под БГ [5].

В Украине пока нет массового применения АМТ для установок с ДВС, поэтому развитие данного направления представляется актуальным.

Использование ПГ и БГ в качестве моторного топлива для транспорта способствует снижению уровня выбросов вредных веществ с ОГ. Так, по сравнению с бензиновыми двигателями в продуктах сгорания газовых двигателей снижается содержание токсических веществ [6]: Pb с 0,42 до 0 г/дм³; SO₂ с 5,5 до 0 млн⁻¹; NO_x с 257,3 до 18,0 млн⁻¹; CH с 83,2 до 19,2 млн⁻¹; CO с 1,46 до 0,16%. Как видно, использование ПГ и БГ вместо бензина позволяет существенно снизить уровень токсичности отработавших газов, что является одним из важных аспектов решения означенной проблемы. Суть его заключается в создании энергоустановок с ДВС, адаптированными к АМТ, и частичном замещении ими традиционных нефтяных топлив. Важное значение в процессе приспособления двигателей к АМТ имеет изучение теплофизических свойств последних. Информация о теплофизических свойствах топлив позволяет более точно моделировать процессы рабочих циклов ДВС, корректировать конструкцию и характеристики дозирующих устройств систем питания двигателей, характеристики систем управления.

В результате патентных исследований и анализа научно-технической литературы установлено, что основными тенденциями новых разработок ведущих фирм является улучшение экологических показателей ДВС, снижение токсичности их ОГ, совершенствование организации рабочих процессов, исследование и совершенствование физических свойств АМТ.

Для исследований, связанных с особенностями использования АМТ для транспортных ДВС, актуальной задачей является разработка современных методов прогнозирования теплофизических свойств топлив в широких диапазонах состояний – от сжиженного газа до параметров сгорания или термического разложения. На основе анализа существующих методов [7-10] сделан вывод о том, что различные модельные схемы и эмпирические зависимости (теория соответственных состояний, решеточные модели, групповые модели) могут давать приемлемые количественные результаты в ограниченных диапазонах состояний. При этом для расчетов требуется значительная исходная информация о свойствах компонентов и их смесей. Что касается практически важной области – жидкой фазы АМТ, то здесь указанные методы, как правило, неприемлемы.

Такое состояние вопроса диктует необходимость развития современных статистико-механических методов описания свойств АМТ, в которых используется минимум исходных данных и параметров. Проводимые исследования посвящены применению оригинальной модифицированной схемы термодинамической теории возмущений (МТВ) [11] для описания свойств многокомпонентных смесей (ПГ и БГ).

Метод расчета теплофизических свойств АМТ

Предложенная расчетная схема [12] обобщена для определения теплофизических свойств многокомпонентных АМТ. Удельная свободная энергия f_m n -компонентной смеси в рамках МТВ, учитывающей второй порядок, имеет вид

$$\beta f_m = \beta f_m^{(0)} + \sum_{i,k=1}^n x_i x_k \rho_{ik}^* (I_{ik}^{(1)} + I_{ik}^{(2)} / T_{ik}^*) / T_{ik}^*,$$

где $f_m^{(0)}$ – свободная энергия n -компонентной смеси твердых сфер; x_i – концентрация (мольная доля) i -го компонента; $\beta = 1/kT$; k – постоянная Больцмана; $\rho_{ik}^* = \rho\sigma_{ik}^3$ – приведенная плотность числа частиц; $T_{ik}^* = (\beta\varepsilon_{ik})^{-1}$; σ_{ik} и ε_{ik} – параметры исходных потенциалов межмолекулярного взаимодействия $u_{ik} = \varepsilon_{ik} \varphi(r/\sigma_{ik})$ (используется потенциал Леннард–Джонса $\varphi(x) = 4(x^{-12} - x^{-6})$); $I_{ik}^{(1)}$, $I_{ik}^{(2)}$ – обобщения групповых интегралов первого и второго порядков для смесей.

Начальным этапом расчетов свойств в двухфазной n -компонентной системе является определение плотности ρ_m^* смеси при заданных температуре T и давлении p .

Расчеты фазовых равновесий, т. е. определение составов жидкой (L) и паровой (V) фаз и их плотностей, выполняются на основе формальной системы уравнений

$$\begin{cases} p_m(\rho_m^{*L}, T, \{x_i^L\}) - p = 0; \\ p_m(\rho_m^{*V}, T, \{x_i^V\}) - p = 0; \\ \mu_1(\rho_m^{*L}, T, \{x_i^L\}) - \mu_1(\rho_m^{*V}, T, \{x_i^V\}) = 0; \\ \dots\dots\dots \\ \mu_n(\rho_m^{*L}, T, \{x_i^L\}) - \mu_n(\rho_m^{*V}, T, \{x_i^V\}) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где p_m – давление смеси; μ_i – химический потенциал i -го компонента.

Если сосуществующие фазы образуются из исходной смеси $\sum_{i=1}^n x_i^0 = 1$, где $\{x_i^0\}$ – набор исходных мольных концентраций, то система (1) дополняется уравнениями материального баланса для фаз $\sum_{i=1}^n x_i^L = 1$ и $\sum_{i=1}^n x_i^V = 1$ и уравнением распределения компонентов смеси между фазами $n^V(x_i^V - x_i^L) = x_i^0 - x_i^L, i = 1, \dots, n$, где n^V – газосодержание (мольная доля паровой фазы в двухфазной смеси). Это дает возможность определить также равновесные составы $\{x_i^L\}, \{x_i^V\}$ данных фаз.

В табл. 1 полученные расчетным путем значения молярного объема углеводородной смеси, соответствующей возможному составу ПГ или БГ, сравниваются с экспериментальными данными, приведенными в литературе [7]. Погрешность расчета показывает хорошее согласование экспериментальных и расчетных значений.

Таблица 1. Сравнение экспериментального и расчетного значений молярного объема углеводородной смеси

Состав смеси. Мольные доли компонентов, %	T, К	P, МПа	V _{эксп} , м ³ /кмоль [7]	Расчет по МТВ	
				V _{расч} , м ³ /кмоль	Погрешность, %
CH ₄ =77,43 C ₂ H ₆ =5,74 C ₃ H ₈ =2,99 n-C ₅ H ₁₂ =4,66 C ₇ H ₁₆ =3,59 C ₁₀ H ₂₂ =2,63 H ₂ S=2,96	338,71	21,75	0,1003	0,1004	0,09

В результате решения задачи о равновесии фаз жидкость–пар для углеводородных АМТ различных фракционных составов определены плотность, энтальпия и энтропия вдоль линии насыщения (табл.2).

Таблица 2. Термодинамические свойства смесей АМТ в равновесии с паровой фазой

Состав смеси. Мольные доли компонентов, %	T, K	$D_m,$ кг/м ³	$-H_m,$ кДж/кг	$S_m,$ кДж/(кг К)
CH ₄	105	431,37	308,60	4,729
	112	422,07	285,46	4,942
	120	410,27	257,62	5,181
CH ₄ =99,5 C ₂ H ₆ =3 N ₂ =1 CO ₂ =0,5	105	448,18	310,16	4,688
	112	438,71	288,05	4,891
	120	426,86	261,37	5,120
CH ₄ =99,5 C ₂ H ₆ =3 C ₃ H ₈ =0,5 N ₂ =1	105	446,35	311,86	4,695
	112	436,97	289,71	4,898
	120	425,22	263,01	5,127
CH ₄ =95 C ₂ H ₆ =3 C ₃ H ₈ =0,5 N ₂ =1 CO ₂ =0,5	105	450,78	311,04	4,675
	112	441,32	289,11	4,876
	120	429,50	262,66	5,103
CH ₄ =94 C ₂ H ₆ =3 C ₃ H ₈ =0,5 N ₂ =2 CO ₂ =0,5	105	453,80	306,18	4,676
	112	444,19	284,27	4,877
	120	432,19	257,91	5,104
CH ₄ =94 C ₂ H ₆ =4 C ₃ H ₈ =0,5 N ₂ =1 CO ₂ =0,5	105	453,76	313,44	4,660
	112	444,32	291,75	4,859
	120	432,56	265,55	5,084

Здесь D_m – плотность смеси; H_m – энтальпия смеси; S_m – энтропия смеси.

Выводы

В комплекс научно-технических мероприятий, направленных на снижение техногенной нагрузки на окружающую среду, входит и создание экологичных транспортных двигателей.

В настоящее время техногенная нагрузка на окружающую среду (уровень токсичных веществ в продуктах сгорания углеводородных топлив) в городах Украины превышает в 4–5 раз соответствующие показатели развитых стран.

Предложен метод расчета параметров АМТ (в частности ПГ и БГ), которые используются при математическом моделировании рабочих процессов ДВС с низким уровнем содержания вредных веществ в отработавших газах.

Литература

1. Карп І. М. Перспективи використання природного газу як моторного палива на автотранспорті України / І. М. Карп, Г. О. Биков // Экологические технологии и ресурсосбережение. – 2002. – № 1. – С. 3–8.
2. Буравлев Е. П. Устойчивое развитие энергетики / Е. П. Буравлев, В. С. Стогний // Экологические технологии и ресурсосбережение. – 2002. – № 2. – С. 3–8.
3. Тейс Т. Химическое поведение тяжелых металлов при анаэробном сбраживании / Т. Тейс, Т. Д. Хайес // Химия пром. сточных вод. – М., 1983. – С. 99–288.
4. Колеров Л. К. Энергетические установки с газовыми поршневыми двигателями / – Л.: Машиностроение, 1976. – 248 с.

5. Харченко А. Н. Производство биотоплива в Европе в ближайшее время возрастёт // Химия Украины. – 2006. – № 12. – С. 53.
6. Fghbali B. Natural gas as a vehicular fuel // SAE Techn. Pap. Ser. – 1984. – № 841159. – P. 9.
7. Калашиников О. В. Моделирование фазового поведения углеводородов: выбор уравнения состояния // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2003. – № 1. – С. 22–29.
8. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии. – М.: Мир, 1989. – 664 с.
9. Морачевский А. Г. Термодинамика равновесия жидкость-пар / А. Г. Морачевский, Н. А. Смирнова, Е. М. Пиотровская – Л.: Химия, 1989. – 344 с.
10. Смирнова Н. А. Молекулярные теории растворов. – Л.: Химия, 1987. – 336 с.
11. Маринин В. С. О возможной модификации метода теории возмущений в статистической физике жидкостей / В. С. Маринин, В. В. Пашков // Укр. физ. журн. – 1976. – Т, 21, № 10. – С. 1695–1700.
12. Маринин В. С. Теплофизика альтернативных энергоносителей. – Харьков: Форт, 1999. – 212 с.

Поступила в редакцию
15.03.10