

УДК 662.611.2:662,613,5

Максимов М.В.

Одесский национальный политехнический университет

Брунеткин А.И.

Одесский национальный политехнический университет

Максименко А.А.

Одесский национальный политехнический университет

Лысюк О.В.

Одесский национальный политехнический университет

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТАВА СМЕСИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГАЗОВ СЖИГАЕМОГО ТОПЛИВА

Установлена причина, затрудняющая использование несертифицированных видов топлива – 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.

Постановка проблемы. Тенденции освоения промышленностью топлив с непостоянной теплотворной способностью, таких как газы при добыче нефти, в т. ч. сланцевый и рудничный, продукты пиролиза, сбраживание органических остатков, биотопливо, доменные газы, газы брожения мусора и пр. вызывают интерес к решению задачи по созданию модели и метода, обеспечивающих эффективное сжигание таких газов. Особое внимание следует обратить на экологический аспект продуктов сгорания, так как в результате некачественного и неполного сжигания таких топлив образуются и сбрасываются в окружающую среду большое количество вредных органических соединений.

При использовании в качестве топлива для энергоустановок сертифицированных природных энергоносителей самым важным показателем является постоянство 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. Интерес пред-

ставляет работа [1], 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 [2] иллюстрирует результаты исследования по выбросу тяжелых углеводородов при работе дизельного двигателя.

Постановка задачи. 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, 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 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 выходу их из строя. Стоимость системы растет с увеличением этого перечня.

Целью данной статьи является разработка математической модели по определению состава смеси углеводородных кислородсодержащих газов в модельном представлении ее условной формулой с исходными данными в виде измеренных технологических параметров: температура продуктов сгорания и объемные расходы смеси и воздуха.

Для достижения поставленной цели необходимо решить ряд задач. 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 кислородсодержащего углеводородного топлива провести расчеты.

Изложение основного материала исследования.

1. Математическая модель определения состава продуктов сгорания

Рассмотрим реакцию горения спирта в кислороде при их стехиометрическом соотношении:



Из (2.1) следует, что для стехиометрического сжигания одного моля спирта необходимо три моля кислорода. Другими словами, для пары спирт – кислород мольный стехиометрический коэффициент имеет значение

$$\chi_0^o = 3. \quad (2.2)$$

С учетом же принятого состава окислителя в виде воздуха мольный стехиометрический коэффициент реакции будет равен:

$$\chi_0^w = 14.32. \quad (2.3)$$

Реакции горения в энергетическом оборудовании не обязательно идут в стехиометрическом соотношении. Это учитывается введением коэффициента избытка окислителя α и все соотношения реакций строятся с использованием мольного коэффициента соотношения компонентов:

$$\chi^w = \alpha \cdot \chi_0^w \quad (2.4)$$

Расчет состава продуктов сгорания ведется на основе условной формулы топлива, включающей горючее и окислитель с учетом величины χ^w .

В общем виде для произвольного углеводородного кислородсодержащего горючего, сжигаемого в воздухе, условная формула топлива будет иметь вид:

$$C_{bc} H_{bH} O_{(bO + \alpha \cdot \chi_0^w \cdot 0.419)} N_{(\alpha \cdot \chi_0^w \cdot 1.581)} \quad (2.5)$$

Запишем перечень веществ и ионов, которые могут образоваться в процессе горения такого топлива:

$$[CO], [CO_2], [H_2], [O_2], [H_2O], [OH], [N_2], [NO], [C], [H], [O], [N]. \quad (2.6)$$

Определение состава продуктов сгорания заключается в нахождении количественного соотношения газов из этого перечня. Количество неизвестных в модели определяется перечнем веществ в (2.6).

При варьировании коэффициента избытка окислителя α будет меняться количество и состав образующихся веществ. Например, при $\alpha < 1$, т. е. при нехватке окислителя, в смеси может отсутствовать $[O_2]$ и присутствовать $[CO]$ и $[H_2]$. В противоположность этому при $\alpha > 1$ появляются $[O_2]$ и $[NO]$, но исчезают $[CO]$ и $[H_2]$. В состав продуктов сгорания могут входить и другие вещества более сложного состава, но при любой величине α их количество будет исчезающе мало. Поэтому в расчетах они не принимаются во внимание. Таким образом, в (2.6) приведен перечень веществ, охватывающий практически важные случаи.

Рассмотрим уравнения химического равновесия для веществ из списка (2.6). Их перечень приведен в табл. 1.

Таблица 1

Основные реакции образования зависимых веществ

1	$CO \leftrightarrow C + O$
2	$CO_2 \leftrightarrow C + 2O$
3	$H_2O \leftrightarrow 2H + O$
4	$OH \leftrightarrow H + O$
5	$H_2 \leftrightarrow 2H$
6	$O_2 \leftrightarrow 2O$
7	$N_2 \leftrightarrow 2N$
8	$NO \leftrightarrow N + O$

Для уравнений, приведенные в таблице, можно записать закон действующих масс, который представляет собой отношение концентрации веществ соответствующих реакций, являющийся константой химического равновесия. Так, например, для второго уравнения из табл. 1. выражение закона будет иметь вид:

$$\frac{c(C) \cdot c^2(O)}{c(CO_2)} = K_{CO_2}(T). \quad (2.7)$$

Здесь $c(C)$, $c(O)$, $c(CO_2)$ – мольные концентрации соответственно углерода, кислорода и углекислого газа, $K_{CO_2}(T)$ – константа химического равновесия образования углекислого газа при некоторой температуре T . Показатель степени определяется коэффициентом при соответствующем химическом элементе. Уравнения вида (2.7), записанные для веществ из табл. 1., являются частью разрабатываемой модели.

Удобнее состав смеси газов определять не через концентрации, а через их парциальные давления. Уравнения вида (2.7) можно выразить и через эти величины. Мольные концентрации продуктов сгорания определяются по отношению, например, к одному молью топлива на основании выражения (2.5). Для замены концентраций на парциальные давления дополнительно к ним введем еще одну переменную M_T – количество рассматриваемых молей топлива. Ее величину будем не выбирать, а определять в процессе расчетов таким образом, чтобы величины парциальных давлений продуктов сгорания численно были равны их концентрациям. Всего модель включает 13 неизвестных величин: 12 парциальных давлений газов (2.6) в продуктах сгорания и число молей M_T рассматриваемого количества топлива.

Первые 8 уравнений запишем, выражая через парциальные давления продуктов сгорания закон действующих масс для реакций из табл. 1:

$$\frac{P_C \cdot P_O}{P_{CO}} = K_{CO}(T); \quad (2.8)$$

$$\frac{P_C \cdot P_O^2}{P_{CO_2}} = K_{CO_2}(T); \quad (2.9)$$

$$\frac{P_H^2 \cdot P_O}{P_{H_2O}} = K_{H_2O}(T); \quad (2.10)$$

$$\frac{P_H \cdot P_O}{P_{OH}} = K_{OH}(T); \quad (2.11)$$

$$\frac{P_H^2}{P_{H_2}} = K_{H_2}(T); \quad (2.12)$$

$$\frac{P_O^2}{P_{O_2}} = K_{O_2}(T); \quad (2.13)$$

$$\frac{P_N^2}{P_{N_2}} = K_{N_2}(T); \quad (2.14)$$

$$\frac{P_N \cdot P_O}{P_{NO}} = K_{NO}(T). \quad (2.15)$$

Константы химического равновесия табулированы в соответствующих справочниках и в расчетах для соответствующей температуры могут быть выбраны или рассчитаны с помощью аппроксимационных полиномов. Кроме того, они могут быть рассчитаны на основе энтальпий образования и энтропий веществ, входящих в рас-

сматриваемые реакции, которые, в свою очередь, также табулированы или могут быть рассчитаны на основе аппроксимационных полиномов [3].

Следующие четыре уравнения запишем, выражая закон сохранения вещества в виде равенства количества атомов соответствующего химического элемента в топливе и продуктах сгорания. Воспользуемся тем, что в рассматриваемом случае парциальные давления газов в продуктах сгорания численно равны их концентрациям. Количество атомов в топливе берем на основании выражения (2.5) с учетом количества рассматриваемых его молекул M_T :

$$\text{для [C]} \quad b_C \cdot M_T = P_{CO} + P_{CO_2} + P_C; \quad (2.16)$$

$$\text{для [H]} \quad b_H \cdot M_T = 2 \cdot P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{H_2} + P_H; \quad (2.17)$$

$$\text{для [O]} \quad (b_O + \alpha \cdot \chi_0^w \cdot 0.419) \cdot M_T = ; \\ = P_{CO} + 2 \cdot P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{O_2} + P_{NO} + P_O \quad (2.18)$$

$$\text{для [N]} \quad (\alpha \cdot \chi_0^w \cdot 1.581) \cdot M_T = 2 \cdot P_{N_2} + P_{NO} + P_N. \quad (2.19)$$

Для замыкания системы в качестве последнего уравнения запишем закон Дальтона, выражающий равенство суммы парциальных давлений продуктов сгорания давлению в камере сгорания (топке) P_Σ :

$$P_\Sigma = P_{CO} + P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + P_{H_2} + \\ + P_{O_2} + P_{N_2} + P_{NO} + P_C + P_H + P_O + P_N \quad (2.20)$$

2. Метод решения модельной задачи

Записанная модель представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений. Для ее решения может быть использован метод Ньютона. Он подразумевает линеаризацию уравнений системы и решение их относительно поправок неизвестных величин. С целью повышения точности, уменьшим разницу в порядке величин путем логарифмирования системы.

Для примера рассмотрим уравнение (2.9). После логарифмирования имеем:

$$\ln(P_C) + 2 \cdot \ln(P_O) - \ln(P_{CO_2}) = \ln[K_{CO_2}(T)], \quad (2.21)$$

а после его линеаризации:

$$1 \cdot \Delta[\ln(P_C)] + 2 \cdot \Delta[\ln(P_O)] - 1 \cdot \Delta[\ln(P_{CO_2})] = \\ (-1) \cdot \{\ln(P_C) + 2 \cdot \ln(P_O) - \ln(P_{CO_2}) - \ln[K_{CO_2}(T)]\}^0. \quad (2.22)$$

Здесь верхний индекс 0 говорит о том, что выражение в фигурных скобках является начальным приближением или берется с предыдущего шага расчета.

Чтобы несколько снизить громоздкость записей, в дальнейшем выражение вида $\Delta[\ln(P_O)]$ будет представляться как \varnothing_0 , а, например, $\Delta[\ln(P_{CO_2})]$ как \varnothing_{CO_2} .

Большую сложность представляет обработка таким образом уравнений вида (2.16–2.20).

Рассмотрим в качестве примера уравнение (2.16).

После его логарифмирования получим:

$$\ln(b_c) + \ln(M_T) = \ln(P_{CO} + P_{CO_2} + P_C), \quad (2.23)$$

а после линеаризации:

$$\frac{P_{CO}}{A} \cdot \Delta_{CO} + \frac{P_{CO_2}}{A} \cdot \Delta_{CO_2} + \frac{P_C}{A} \cdot \Delta_C - 1 \cdot \Delta_{M_T} =, \quad (2.24)$$

$$(-1) \cdot [\ln(A) - \ln(M_T) - \ln(b_c)]^0$$

где $A = P_{CO} + P_{CO_2} + P_C$.

Преобразовав описанным способом исходную систему (2.13 2.24), получим линеаризованную систему уравнений:

$$1 \cdot \Delta_C + 1 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{CO} = (-1) \cdot \{\ln(P_C) + \ln(P_O) - \ln(P_{CO}) - \ln[K_{CO}(T)]\}^0; \quad (2.25)$$

$$1 \cdot \Delta_C + 2 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{CO_2} = (-1) \cdot \{\ln(P_C) + 2 \cdot \ln(P_O) - \ln(P_{CO_2}) - \ln[K_{CO_2}(T)]\}^0; \quad (2.26)$$

$$2 \cdot \Delta_H + 1 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{H_2O} = (-1) \cdot \{2 \cdot \ln(P_H) + \ln(P_O) - \ln(P_{H_2O}) - \ln[K_{H_2O}(T)]\}^0; \quad (2.27)$$

$$1 \cdot \Delta_H + 1 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{OH} = (-1) \cdot \{\ln(P_H) + \ln(P_O) - \ln(P_{OH}) - \ln[K_{OH}(T)]\}^0; \quad (2.28)$$

$$2 \cdot \Delta_H - 1 \cdot \Delta_{H_2} = (-1) \cdot \{2 \cdot \ln(P_H) - \ln(P_{H_2}) - \ln[K_{H_2}(T)]\}^0; \quad (2.29)$$

$$2 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{O_2} = (-1) \cdot \{2 \cdot \ln(P_O) - \ln(P_{O_2}) - \ln[K_{O_2}(T)]\}^0; \quad (2.30)$$

$$2 \cdot \Delta_N - 1 \cdot \Delta_{N_2} = (-1) \cdot \{2 \cdot \ln(P_N) - \ln(P_{N_2}) - \ln[K_{N_2}(T)]\}^0; \quad (2.31)$$

$$1 \cdot \Delta_N + 1 \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{NO} = (-1) \cdot \{\ln(P_N) + \ln(P_O) - \ln(P_{NO}) - \ln[K_{NO}(T)]\}^0; \quad (2.32)$$

$$\text{для [C]} \quad \frac{P_{CO}}{A} \cdot \Delta_{CO} + \frac{P_{CO_2}}{A} \cdot \Delta_{CO_2} + \frac{P_C}{A} \cdot \Delta_C - 1 \cdot \Delta_{M_T} = (-1) \cdot [\ln(A) - \ln(M_T) - \ln(b_c)]^0, \quad (2.33)$$

где $A = P_{CO} + P_{CO_2} + P_C$;

$$\text{для [H]} \quad \frac{2 \cdot P_{H_2O}}{B} \cdot \Delta_{H_2O} + \frac{P_{OH}}{B} \cdot \Delta_{OH} + \frac{2 \cdot P_{H_2}}{B} \cdot \Delta_{H_2} + \frac{P_H}{B} \cdot \Delta_H - 1 \cdot \Delta_{M_T} = (-1) \cdot [\ln(B) - \ln(M_T) - \ln(b_H)]^0, \quad (2.34)$$

где $B = 2 \cdot P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{H_2} + P_H$;

$$\begin{aligned} & \frac{P_{CO}}{B} \cdot \Delta_{CO} + \frac{2 \cdot P_{CO_2}}{B} \cdot \Delta_{CO_2} + \frac{P_{H_2O}}{B} \cdot \Delta_{H_2O} + \\ & \text{для [O]} \quad \frac{P_{OH}}{B} \cdot \Delta_{OH} + \frac{2 \cdot P_{O_2}}{B} \cdot \Delta_{O_2} + \frac{P_{NO}}{B} \cdot \Delta_{NO} + \frac{P_O}{B} \cdot \Delta_O - 1 \cdot \Delta_{M_T} = \\ & (-1) \cdot [\ln(B) - \ln(M_T) - \ln(b_O + \alpha \cdot \chi_0^w \cdot 0.419)]^0, \end{aligned} \quad (2.35)$$

где $B = P_{CO} + 2 \cdot P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + 2 \cdot P_{O_2} + P_{NO} + P_O$;

$$\begin{aligned} \text{для [N]} \quad & \frac{P_{N_2}}{G} \cdot \Delta_{N_2} + \frac{P_{NO}}{G} \cdot \Delta_{NO} + \frac{P_N}{G} \cdot \Delta_N - 1 \cdot \Delta_{M_T} = \\ & = (-1) \cdot [\ln(G) - \ln(M_T) - \ln(\alpha \cdot \chi_0^w \cdot 1.581)]^0, \end{aligned} \quad (2.36)$$

где $G = 2 \cdot P_{N_2} + P_{NO} + P_N$;

$$\begin{aligned} \text{для [P}\Sigma] \quad & \frac{P_{CO}}{D} \cdot \Delta_{CO} + \frac{P_{CO_2}}{D} \cdot \Delta_{CO_2} + \frac{P_{H_2O}}{D} \cdot \Delta_{H_2O} + \frac{P_{OH}}{D} \cdot \Delta_{OH} + \frac{P_{H_2}}{D} \cdot \Delta_{H_2} + \\ & \frac{P_{O_2}}{D} \cdot \Delta_{O_2} + \frac{P_{N_2}}{D} \cdot \Delta_{N_2} + \frac{P_{NO}}{D} \cdot \Delta_{NO} + \frac{P_C}{D} \cdot \Delta_C + \\ & \frac{P_H}{D} \cdot \Delta_H + \frac{P_O}{D} \cdot \Delta_O + \frac{P_N}{D} \cdot \Delta_N = \\ & = (-1) \cdot [\ln(D) - \ln(P_\Sigma)]^0, \end{aligned} \quad (2.37)$$

где $D = P_{CO} + P_{CO_2} + P_{H_2O} + P_{OH} + P_{H_2} + P_{O_2} + P_{N_2} + P_{NO} + P_C + P_H + P_O + P_N$.

Решение строится на предположении об изэн- тальпийности процесса в камере сгорания (топке) энергетического оборудования. Для выбранной пары горючее – окислитель с известными для них энтальпиями $I^{(e)}$ и $I^{(o)}$ и заданной величины χ^w (2.3) мольного коэффициента соотношения ком- понентов вычисляется энтальпия топлива:

$$I^{(T)} = I^{(e)} + \chi^w \cdot I^{(o)} \quad (2.38)$$

Далее процесс решения строится в соответ- ствии со следующим алгоритмом:

1. Выбирается некоторая температура T^0 (началь- ное приближение). Она считается реализуемой в рас- сатриваемый момент в камере сгорания $T_i = T^0$;

2. С помощью итерационного процесса на основе линеаризованной модели (2.25 2.37) опре- деляется состав (парциальные давления P_i , а, сле- довательно, и мольные доли) продуктов сгорания, соответствующий текущей рассматриваемой тем- пературе T_i . Как отмечалось ранее, необходимые для этого расчета значения констант химического равновесия могут быть взяты из таблиц или рас- считаны с помощью аппроксимационных полино- мов, подобных, приведенным в [3];

3. Определяются энтальпии продуктов сгора- ния I_i , соответствующие текущей рассматрива- емой температуры T_i . Эти величины могут быть также взяты из таблиц или рассчитаны с помо- щью аппроксимационных полиномов, подобных приведенным в [3];

4. Используя значения парциальных давлений как величины мольных долей соответствующих газов, входящих в состав продуктов сгорания, вычисляется их энтальпия I_{PC} :

$$I_{PC} = \sum_i (P_i \cdot I_i). \quad (2.39)$$

5. Сравниваются величины энтальпий топлива и продуктов сгорания при текущей рассматривае- мой температуре. Следует учитывать, что исполь-

званные для расчета $I_{лс}$ значения парциальных давлений численно равны мольным концентрациям только в том случае, когда рассматривается M_T молей топлива. Иными словами, сравнение энтальпий должно происходить в виде соотношения $M_T \cdot I^{(T)} \Leftrightarrow I_{лс}$;

6. В случае равенства этих величин или допускаемой величине отклонения температура и состав продуктов сгорания **считаются определенными. Расчет останавливается.** В противном случае переходим к следующему пункту;

7. В зависимости от превышения левой или правой части выражения $M_T \cdot I^{(T)} \Leftrightarrow I_{лс}$ происходит корректировка значения текущей рассматриваемой температуры T_i в сторону ее увеличения или уменьшения. С новым значением величины T_i переходим к пункту 2 алгоритма и все расчеты повторяем.

Однако изоэнтальпийность наблюдается лишь в отдельных энергетических установках. Например, в камерах сгорания жидкостных ракетных двигателей (ЖРД) за счет специальным образом организованной системы охлаждения. Такой подход может быть реализован и при расчете процессов в цилиндре двигателя внутреннего сгорания (ДВС) в границах одного такта его работы. Это обуславливается быстротой протекающих процессов и, соответственно, малой долей потерь через стенки цилиндра. В подавляющем большинстве энергетических устройств условия изоэнтальпийности процесса горения неосуществимы.

3. Определение температуры и состава продуктов сгорания этилового спирта в воздухе

Этиловый спирт в качестве горючего для решения модельной задачи выбран по причине его широкого распространения и наличия результа-

Таблица 2.1

Результаты расчета определения состава и температуры продуктов сгорания этилового спирта в воздухе на основе модели (2.25 2.37) для различных значений α

α	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2
T, K	1567	1781	1951	2089	2198	2225	2146	2048
P_{CO}	1,35E-01	1,09E-01	8,29E-02	5,58E-02	2,86E-02	8,38E-03	2,36E-03	7,74E-04
P_{CO2}	5,23E-02	6,03E-02	7,18E-02	8,64E-02	1,03E-01	1,13E-01	1,10E-01	1,03E-01
P_{H2O}	1,35E-01	1,60E-01	1,76E-01	1,84E-01	1,85E-01	1,78E-01	1,66E-01	1,55E-01
P_{OH}	3,71E-07	7,77E-06	6,04E-05	2,84E-04	1,04E-03	2,43E-03	2,37E-03	1,71E-03
P_{H2}	1,46E-01	9,41E-02	5,61E-02	2,93E-02	1,17E-02	2,96E-03	8,48E-04	2,96E-04
P_{O2}	1,08E-11	3,73E-09	2,45E-07	7,68E-06	2,08E-04	4,27E-03	1,64E-02	2,99E-02
P_{N2}	5,31E-01	5,76E-01	6,13E-01	6,44E-01	6,70E-01	6,88E-01	6,98E-01	7,06E-01
P_{NO}	9,45E-09	4,26E-07	6,11E-06	5,10E-05	3,51E-04	1,72E-03	2,83E-03	2,99E-03
P_C	3,77E-20	3,61E-18	4,62E-17	1,68E-16	1,81E-16	2,05E-17	5,54E-19	1,42E-20
P_H	1,40E-05	9,02E-05	2,65E-04	4,86E-04	5,93E-04	3,47E-04	1,17E-04	3,75E-05
P_O	2,62E-11	5,09E-09	1,85E-07	2,95E-06	3,21E-05	1,73E-04	2,03E-04	1,37E-04
P_N	1,99E-13	1,80E-11	3,19E-10	2,33E-09	9,40E-09	1,31E-08	5,07E-09	1,40E-09
M_T	9,38E-02	8,48E-02	7,73E-02	7,11E-02	6,57E-02	6,09E-02	5,62E-02	5,21E-02
α	1,3	1,4	1,5	1,6	1,7	1,8	1,9	2,0
T, K	1955	1869	1790	1718	1651	1597	1543	1494
P_{CO}	2,79E-04	1,05E-04	4,12E-05	1,66E-05	6,74E-06	3,11E-06	1,37E-06	6,22E-07
P_{CO2}	9,67E-02	9,06E-02	8,51E-02	8,04E-02	7,61E-02	7,20E-02	6,84E-02	6,53E-02
P_{H2O}	1,45E-01	1,36E-01	1,28E-01	1,20E-01	1,14E-01	1,08E-01	1,03E-01	9,79E-02
P_{OH}	1,14E-03	7,37E-04	4,70E-04	2,99E-04	1,89E-04	1,25E-04	8,10E-05	5,31E-05
P_{H2}	1,15E-04	4,69E-05	1,98E-05	8,62E-06	3,79E-06	1,87E-06	8,88E-07	4,33E-07
P_{O2}	4,22E-02	5,32E-02	6,30E-02	7,24E-02	8,09E-02	8,60E-02	9,20E-02	9,76E-02
P_{N2}	7,12E-01	7,18E-01	7,23E-01	7,28E-01	7,34E-01	7,33E-01	7,36E-01	7,39E-01
P_{NO}	2,76E-03	2,40E-03	2,02E-03	1,68E-03	1,38E-03	1,13E-03	9,22E-04	7,53E-04
P_C	4,16E-22	1,31E-23	4,40E-25	1,57E-26	5,63E-28	3,23E-29	1,53E-30	7,97E-32
P_H	1,24E-05	4,15E-06	1,41E-06	4,93E-07	1,72E-07	6,94E-08	2,64E-08	1,04E-08
P_O	7,95E-05	4,33E-05	2,28E-05	1,19E-05	6,13E-06	3,38E-06	1,79E-06	9,64E-07
P_N	3,66E-10	9,35E-11	2,38E-11	6,10E-12	1,55E-12	4,69E-13	1,31E-13	3,81E-14
M_T	4,85E-02	4,53E-02	4,26E-02	4,02E-02	3,81E-02	3,60E-02	3,42E-02	3,26E-02

тов, пригодных для проверки адекватности разработанной модели. Так, в [12] приведены результаты расчета процесса горения этилового спирта в воздухе при изменении α в диапазоне [0.7–1.4] Были выполнены расчеты, охватывающие более широкий диапазон изменения α [0.5 2]. Сравним рассчитанные температуры и величины парциальных давлений некоторых газов. Часть веществ для сравнения выберем, исходя из их заметной доли в составе продуктов сгорания. Это связано с тем, что именно они определяют энтальпию газовой смеси и, следовательно, ее температуру. Рассмотрим также величины парциальных давлений окиси углерода (угарного газа) и окиси азота, поскольку они определяют вредные выбросы продуктов сгорания.

Выше было обосновано учет в составе воздуха только кислорода и азота. Кроме того, в расчетах будут заданы условия применения спирта со 100% концентрацией. Это сделано для упрощения модели и расчетов на ее основе. На практике это не соответствует действительности, и спирт

всегда содержит в своем составе некоторое количество воды. Так, в [12] приведены результаты для спирта с 5% содержания H_2O . Кроме того, учитывается содержание в воздухе некоторого количества аргона и углекислого газа (суммарно в пределах 1%). Отклонение заложенных в расчеты условий от данных справочника [12] позволит оценить чувствительность разработанной модели к погрешности задания исходных данных.

В табл. 2.1. приведены результаты расчета на основе модели (2.25 2.37) для различных значений α . В (табл. 2.2.) приведены данные, взятые из [12].

Сравнение таблиц показывает качественное совпадение рассматриваемых результатов. Заметные расхождения наблюдаются для температуры и парциального давления паров воды. Количественную величину этих расхождений можно оценить из данных, приведенных в табл. 2.3.

Сравнение таблиц показывает качественное совпадение рассматриваемых результатов. Заметные расхождения наблюдаются для температуры и парциального давления паров воды. Количе-

Таблица 2.2

Результаты расчета определения состава продуктов сгорания этилового спирта в воздухе из [12]

α	0,7	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4
T, K	1897	2038	2151	2190	2108	2010	1918	1835
P_{CO}	8,42E-02	5,71E-02	2,91E-02	7,50E-03	1,90E-03	6,00E-04	2,00E-04	
P_{CO_2}	6,91E-02	8,41E-02	1,02E-01	1,14E-01	1,10E-01	1,03E-01	9,64E-02	9,03E-02
P_{H_2O}	1,86E-01	1,93E-01	1,93E-01	1,86E-01	1,73E-01	1,61E-01	1,50E-01	1,41E-01
P_{OH}		2,00E-04	7,00E-04	2,00E-03	2,00E-03	1,40E-03	9,00E-04	6,00E-04
P_{H_2}	5,36E-02	2,75E-02	1,07E-02	2,30E-03	6,00E-04	2,00E-04		
P_{O_2}			1,00E-04	3,60E-03	1,61E-02	2,96E-02	4,19E-02	5,28E-02
P_{N_2}	5,99E-01	6,30E-01	6,56E-01	6,75E-01	6,85E-01	6,93E-01	6,99E-01	7,05E-01
P_{NO}			2,00E-04	1,60E-03	2,70E-03	2,90E-03	2,70E-03	2,30E-03
P_C								
P_H	1,00E-04	2,00E-04	3,00E-04	2,00E-04				
P_O				1,00E-04	1,00E-04			
P_N								
M_T								

Таблица 2.3

Относительные отклонения для величин процесса сжигания этилового спирта в воздухе между результатами расчетов и данными из [12]

A	0.7			1.0			1.4		
	Расчет	Глушко	ϵ	Расчет	Глушко	ϵ	Расчет	Глушко	E
T, K	1951	1897	2,8%	2225	2190	1,6%	1869	1835	1,8%
P_{CO}	8.29E-02	8.42E-02	0,1%	8.38E-03	7.50E-03	0,1%			
P_{NO}				1.72E-03	1.60E-03	0,0%	2.40E-03	2.30E-03	0,0%
P_{CO_2}	7.18E-02	6.91E-02	0,3%	1.13E-01	1.14E-01	0,0%	9.06E-02	9.03E-02	0,0%
P_{H_2O}	1.76E-01	1.86E-01	1,1%	1.78E-01	1.86E-01	0,8%	1.36E-01	1.41E-01	0,5%
P_{O_2}				4.27E-03	3.60E-03	0,1%	5.32E-02	5.28E-02	0,0%

ственную величину этих расхождений можно оценить из данных, приведенных в табл. 2.3.

Отклонение в определении температуры и парциального давления паров воды можно объяснить различием в составе горючего, принятого в расчетах и использованного при получении данных для справочника [12]. Содержание в последнем случае 5% воды ведет к уменьшению энтальпии по сравнению со 100% спиртом и, как следствие, к снижению температуры продуктов сгорания. Данные, приведенные в табл. 2.3., показывают, что относительное различие рассматриваемых температур не превосходит 2,8%. Погрешность определялась относительно величины рассчитанной температуры. Эта величина позволяет оценить параметрическую чувствительность разработанной модели: 5% изменения состава горючего ведет к 2,8% отклонения величины рассчитанной температуры. Аналогичная причина лежит в основе отклонения в определении парциального давления паров воды. Именно наличие 5% воды в горючем ведет к превышению величин данных из справочника [12] по сравнению с рассчитанными величинами. Относительная погрешность не превышает 1,1%. Это отражено в табл. 2.3. Погрешность определена относительно давления в камере сгорания (топке). В расчетах она была принята равной 1 бару. Все остальные погрешности рассмотренных величин (табл. 2.3.) меньше отмеченных выше.

Пустые графы в табл. 2.3. обусловлены отсутствием данных в [12]. При записи величин относительных погрешностей ϵ отображалась только одна значащая цифра после запятой. Больше их количество при инженерных расчетах не имеет оснований. Такой подход, а так же малые погреш-

ности, привели к появлению нулевых значений погрешностей в табл. 2.3.

Все вычисленные и приведенные в табл. 2.3. погрешности <5%, что соответствует допустимой точности инженерных расчетов. Это позволяет использовать данные, приведенные в табл. 2.1., в качестве расширенной, по сравнению с [12], основы для определения состава и температуры продуктов сгорания этилового спирта в воздухе при различных α .

Выводы. 1. Математическая модель на основании уравнений вида (2.25 2.37) 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 ($[C]$, $[H]$, $[O]$ и т. д.).

2. Математическая точность модели позволяет использовать полученные на ее основе данные для оценки чувствительности результатов расчетов на неточность измерительного канала исходных технологических параметров.

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

Список литературы:

1. Kento T., Gomez M., Olson M., Okuda T., Walz A., Schauer J. Sensitivity of hazardous air pollutant emissions to the combustion of blends of petroleum diesel and biodiesel fuel. *Atmospheric Environment*. 2012. T. 50. P. 307–313.
2. Barbella R., Ciajolo A., D'Anna A. The emission of heavy hydrocarbons from a diesel engine and a spray flame. *Fuel*. 1989. T. 68, June. P. 690–696.
3. Глушко В.П. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник. АН СССР, ВИНТИ. 1972. Т. 1. 266 с.
4. Fokion N., Dimotakis P.E. Non-premixed hydrocarbon ignition at high strain rates. Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. 1998. P. 641–648.
5. Sangiovanni J.J., Liscinsky D.S. Soot formation characteristics of well-defined spray flames. Twentieth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. 1984. P. 1063–1073.
6. Alfe M., Apicella B., Rouzaud J.-N. The effect of temperature on soot properties in premixed methane flames. *Combustion and Flame*. 2010. T. 157. P. 1959–1965.
7. Buipham M., Seshadri K., Williams F.A. The asymptotic structure of premixed methane-air flames with slow CO oxidation. *Combustion and Flame*. 1992. T. 89. P. 343–362.
8. Shigezuki T., Ayala F., Keck J.C. A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine. *Combustion and Flame*. 2003. T. 133. P. 467–481.

9. Максимов М.В., Брунеткин А.И., Бондаренко А.В. Модель и метод определения условной формулы углеводородного топлива при сжигании. Вост.-европ. журн. передовых технологий. 2013. Т. 6. № 8(66). С. 20–27.

10. Давыдов В.О., Бондаренко А.В. Метод расчета температуры горения произвольной смеси газообразного углеводородного топлива при произвольном избытке воздуха. Тр. Одес. политехн. ун. О., 2013. Вып. 3 (42). С. 98–102.

11. Бондаренко А.В. Моделирование образования продуктов сгорания газообразного углеводородного топлива. Судновые энергетические установки. О., 2013. Вып. 31. С. 178–187.

12. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник / под ред. В.П. Глушко. АН СССР, ВИНТИ. 1972. Т. 2. Топлива на основе кислорода. 490 с.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ВИЗНАЧЕННЯ СКЛАДУ СУМІШІ ВУГЛЕВОДНЕВИХ КИСНЕВМІСНИХ ГАЗІВ ПАЛИВА, ЩО СПАЛЮЄТЬСЯ

Встановлено причину ускладнення використання несертифікованих видів палива – невідомість і змінність їх складу. Запропоновано математичну модель та метод, що 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 згорання, математична модель.*

MATHEMATICAL MODEL OF DETERMINATION OF COMPOSITION OF MIXTURE OF HYDROCARBONIC ACID-CONTAINING GASES OF COMBUSED FUEL

In this paper has been identified the cause that makes it difficult to use uncertified fuels – the uncertainty and variability of their composition. A mathematical model and a method that allow determining its composition in the combustion process of such a fuel and providing optimal parameters of the combustion process are proposed. The limitations imposed by the model on the method used are determined

Key words: *hydrocarbon fuel, definitions of the conventional formula, combustion products, mathematical model.*