

Jacek MAĆKOWSKI

Instytut Transportu

Krystian WILK

Instytut Energetyki i Urządzeń Hutniczych

MATEMATYCZNY MODEL DYSOCJACJI TERMICZNEJ WYSTĘPUJĄCEJ W CZASIE SPALANIA PRZEBIEGAJĄCEGO W SILNIKU O ZI

Streszczenie. Ponieważ badania doświadczalne nad nowo konstruowanymi silnikami są długotrwałe i kosztowne, dlatego zastępuje się je symulacją matematyczną prowadzoną przy pomocy elektronicznych maszyn cyfrowych. Jednym z przykładów wykorzystania takiej symulacji może być matematyczny model opisujący proces spalania zachodzący w silniku. Model taki może być przydatny do wyznaczania przewidywanych przebiegów parametrów termodynamicznych czynnika roboczego.

Wysoka temperatura występująca w trakcie procesu spalania przebiegającego w silniku spalinowym, jest przyczyną występowania dysocjacji termicznej produktów spalania i dlatego w obliczeniach powinna zostać uwzględniona mimo, że ciepło dysocjacji nie stanowi straty bezwzględnej, gdyż przy obniżeniu temperatury zostaje odzyskane jako tzw. ciepło dopalania. Niestety jakość pirometryczna tego ciepła jest jak wiadomo obniżona, na skutek powiększonego przyrostu entropii. Na zewnątrz silnika objawia się to zmniejszeniem sprawności obiegu energetycznego.

Przedstawiony model pozwala wyznaczyć temperaturę spalania z uwzględnieniem dysocjacji termicznej produktów, a także bada wpływ współczynnika nadmiaru powietrza i ciśnienia występującego w czasie spalania. Otrzymane wyniki porównano z adiabatyczną temperaturą spalania obliczoną przy założeniu, że spaliny zawierają w zależności od przyjętego wsp. nadmiaru powietrza tylko CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 lub CO przy braku O_2 .

1. WSTĘP

W celu sformułowania poprawnego modelu matematycznego obrazującego przebieg spalania konieczne jest uwzględnienie w obliczeniach cieplnych zjawiska dysocjacji termicznej. Ponieważ w literaturze [4,5,7] problem dysocjacji nie jest szerzej omawiany, w pracy podjęto próbę sformułowania matematycznego modelu dysocjacji termicznej przydatnego do określania przebiegu temperatury płomienia i spalin podczas spalania przebiegającego w silniku spalinowym.

2. REAKCJE DYSOCJACJI TERMICZNEJ

Dysocjacja jest reakcją odwrotną od spalania, polegającą na endotermicznym rozkładzie produktów spalania w temperaturze powyżej 1500 K [9]. W przypadku spalania węglowodorów należy brać pod uwagę następujące reakcje dysocjacji [14].

Reakcję dysocjacji dwutlenku węgla na tlenek węgla i tlen:



Dwie reakcje dysocjacji pary wodnej na wodór i tlen:



oraz na wodór i rodnik wodorotlenowy:



Reakcja dysocjacji wodoru:



Reakcja dysocjacji tlenu:



W temperaturach powyżej 2000 K należy dodatkowo uwzględnić endotermiczną reakcję tworzenia tlenku azotu [14].



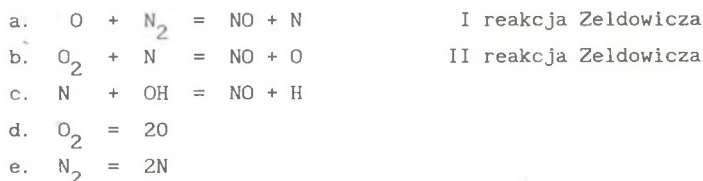
a w temperaturach powyżej 3000 K dysocjację azotu:



Pomija się natomiast w modelu obecność stałego lub lotnego węgla.

Jak wiadomo, dysocjacja wpływa na powstanie dwóch toksycznych składników spalin, tj. tlenku azotu i tlenku węgla.

W warunkach, jakie panują w komorze silnika, do opisu powstawania tlenku azotu wykorzystuje się mechanizm opisany przez Zeldowicza, rozszerzony o reakcję azotu atomowego z rodnikiem wodorotlenowym [4].



Grupa hydroksylowa OH biorąca udział w reakcji c jest również produktem dysocjacji termicznej. Reakcji, w wyniku których powstaje tlenek azotu jest dużo, jednak ich szybkość jest znacznie mniejsza niż reakcji wyżej wymienionych.

Natomiast tlenek węgla jest produktem przejściowym spalania paliw węglowodorowych i jego obecność w spalinach może być powodowana niedoborem tlenu w czasie spalania. Tlenek węgla może również powstać jako produkt dysocjacji CO_2 w wysokich temperaturach.



Następnie tlenek węgla ulega częściowemu dopaleniu według złożonych reakcji łańcuchowych, w których główne znaczenie ma reakcja (5).



Utlenianie CO na CO_2 zachodzić może także wg reakcji:



Natomiast reakcja



jest bardzo powolna i ma jedynie znaczenie stechiometryczne.

3. ADIABATYCZNA TEMPERATURA SPALANIA

Przydatność modelu matematycznego służącego do obliczania zmian temperatury spalania na skutek dysocjacji termicznej produktów oceniono w stosunku do obliczonej adiabatycznej temperatury spalania.

Adiabatyczną temperaturą spalania nazywamy temperaturę osiąganą przez niezdysocjowane produkty spalania w wyniku reakcji substratów, w adiabatycznej komorze, których temperatura początkowa jest wyższa od temperatury otoczenia. W silnikach spalinowych o zapłonie iskrowym temperaturą początkową jest temperatura końca sprężania wynosząca przeciętnie około 500-700 K [13].

Adiabatyczną temperaturę spalania obliczono z bilansu energii, w którym porównuje się sumę wartości opałowej i entalpii fizycznej mieszanki z sumą entalpii fizycznej spalin i wartości opałowej niespalonych składników spalin. W przypadku benzyny zawierającej wg analizy elementarnej jedynie wodór i węgiel składnikami palnymi w spalinach mogą być tlenek węgla CO i wolny wodór H₂.

W celu uproszczenia obliczeń do wyznaczania adiabatycznej temperatury spalania przyjęto założenie, że w spalinach nie występuje wodór, który jako bardziej aktywny chemicznie szybciej reaguje z tlenem, utleniając się do H₂O.

Równanie bilansu energii dla 1 kmola benzyny przedstawia się następująco:

$$\begin{aligned}
 (\lambda L_t + 1) \cdot (Mi)_{\text{pow}} + Wd M_p = n_{\text{CO}_2} (Mi)_{\text{CO}_2} + n_{\text{H}_2\text{O}} (Mi)_{\text{H}_2\text{O}} + \\
 + n_{\text{N}_2} (Mi)_{\text{N}_2} + n_{\text{CO}} (Mi + MWd)_{\text{CO}} + n_{\text{O}_2} (Mi)_{\text{O}_2},
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

gdzie:

- L_t - teoretyczne zapotrzebowanie powietrza kmol/kmol,
- $(Mi)_{\text{pow}}$ - fizyczna entalpia właściwa powietrza,
- Wd - wartość opałowa paliwa kJ/kg,
- M_p - masa cząsteczkowa paliwa kg/kmol,
- n_1 - ilość moli składników spalin/kmol paliwa,
- $(Mi)_1$ - fizyczne molowe entalpie właściwe składników spalin kJ/kmol,
- (MWd) - molowa wartość opałowa kJ/kmol.

Dla współczynnika nadmiaru powietrza $\lambda < 1$ wielkość $n_{\text{O}_2} = 0$, natomiast dla $\lambda > 1$, $n_{\text{CO}} = 0$.

Dla $\lambda = 1$ zakłada się, że spalanie przebiega w warunkach stechiometrycznych, więc składnikami spalin są tylko CO_2 , H_2O i N_2 .

Po lewej stronie równania wielkości L_t powiększono o 1 w celu obliczenia przybliżonej entalpii fizycznej mieszanki paliwowo-powietrznej.

Wartość (Mi) oraz (Mwd) zaczerpnięto z pracy [10].

Poszukiwanym rozwiązaniem jest temperatura, dla której suma entalpii fizycznej i wartości opałowej niezdisocjowanych składników spalin jest równa sumie doprowadzonej wartości opałowej i entalpii fizycznej substratów.

Równanie bilansu energii zostało rozwiązane w pracy metodą iteracji.

4. SKŁAD MOŁOWY PRODUKTÓW DYSOCJACJI

Kolejnym etapem obliczeń jest wyznaczenie składu molowego zdysocjowanych spalin. W tym celu zastosowano metodę Harkera - Allena [3].

Jak wiadomo, reakcja osiąga równowagę chemiczną, gdy szybkości reakcji w obydwu kierunkach są jednakowe, czyli:

$$w' = w'' \quad (13)$$

$$k' C_1^{n_1'} \cdot C_2^{n_2'} \dots = k'' C_1^{n_1''} \cdot C_2^{n_2''} \dots \quad (14)$$

Reakcja chemiczna nigdy nie przebiega do końca, czyli nigdy substraty nie przereagują całkowicie na produkty, w stanie równowagi pozostanie zawsze pewna ilość substratów zależna od wielkości wyrażonej stężeniami kilomolowymi:

$$k_C = \frac{k''}{k'} = \frac{C_1^{n_1''} \cdot C_2^{n_2''} \dots}{C_1^{n_1'} \cdot C_2^{n_2'} \dots} \quad (15)$$

lub uławkami molowymi:

$$k_x = \frac{x_1^{n_1''} \cdot x_2^{n_2''} \dots}{x_1^{n_1'} \cdot x_2^{n_2'} \dots} \quad (16)$$

Stała równowagi obliczana z ciśnień cząstkowych określana jest analogicznie do stałej równowagi obliczonej ze stężeń wzorem:

$$k_p = \frac{p_1^{n_1''} \cdot p_2^{n_2''} \dots}{p_1^{n_1'} \cdot p_2^{n_2'} \dots} \quad (17)$$

Relacje pomiędzy poszczególnymi rodzajami stałych równowagi otrzymamy stosując zależności [8]:

$$p_i = C_i RT, \quad (18)$$

$$p_i = x_i p, \quad (19)$$

$$k_p = k_C (RT)^{\Delta n}, \quad (20)$$

$$k_p = k_x p^{\Delta n}, \quad (21)$$

gdzie:

x_i - ułamek molowy reagenta "i",

Δn - zmiana liczby moli w przebiegu reakcji,

R - indywidualna stała gazowa,

C - stężenie kilomolowe = $\frac{n}{V}$.

Dlatego w celu określenia 10 nieznanych wartości udziałów 1-molowych składników spalin przyjętych do obliczeń (równanie (80)) wykorzystuje się następujące równanie:

- równanie stałych równowagi reakcji chemicznych wyznaczonych na podstawie wzoru (16) i tak:

dla równania (1)

$$k_{x_1} = \frac{x_{CO} (x_{C_2})^{\frac{1}{2}}}{x_{CO_2}}, \quad (22)$$

dla równania (2)

$$k_{x_2} = \frac{x_{H_2} (x_{O_2})^{\frac{1}{2}}}{x_{H_2O}}, \quad (23)$$

dla równania (3)

$$k_{x_3} = \frac{(x_{H_2})^{\frac{1}{2}} x_{OH}}{x_{H_2O}}, \quad (24)$$

dla równania (4)

$$k_{x_4} = \frac{x_H}{(x_{H_2})^{\frac{1}{2}}}, \quad (25)$$

dla równania (5)

$$k_{x_5} = \frac{x_O}{(x_{O_2})^{\frac{1}{2}}}, \quad (26)$$

oraz dla równania (6)

$$k_{x_6} = \frac{x_{NO}}{(x_{N_2})^{\frac{1}{2}} (x_{N_2})^{\frac{1}{2}}}, \quad (27)$$

- równania bilansowe atomów pierwiastków C, H, O oraz N w postaci:

$$n_C = x_{CO_2} + x_{CO}, \quad (28)$$

$$n_H = 2x_{H_2} + 2x_{H_2O} + x_H + x_{OH}, \quad (29)$$

$$n_O = 2x_{O_2} + 2x_{CO_2} + x_O + x_{CO} + x_{H_2O} + x_{HO} + x_{NO}, \quad (30)$$

$$n_N = x_{NO} + 2x_{N_2}, \quad (31)$$

gdzie:

$$n_C = \frac{n_C^*}{n_s^*},$$

$$n_H = \frac{n_H^*}{n_s^*},$$

$$n_O = \frac{n_O^*}{n_s^*},$$

$$n_N = \frac{n_N^*}{n_s^*}.$$

Ponadto można napisać równanie na sumę udziałów molowych

$$\sum x_i = 1. \quad (32)$$

W celu uproszczenia zapisu w dalszym ciągu obliczeń wprowadzamy następujące oznaczenia:

$$a = x_{\text{CO}}, \quad b = x_{\text{CO}_2}, \quad c = x_2, \quad d = x_{\text{H}_2}, \quad e = x_{\text{H}_2\text{O}},$$

$$f = x_{\text{OH}}, \quad g = x_{\text{H}}, \quad h = x_{\text{O}}, \quad h_1 = x_{\text{NO}}, \quad h_2 = x_{\text{N}}.$$

W ten sposób równanie stałych równowagi reakcji chemicznych (22)-(27) zapisujemy w postaci [3]:

$$k_{x_1} = \frac{a \cdot \sqrt{c}}{b}, \quad (33)$$

$$k_{x_2} = \frac{d \cdot \sqrt{c}}{b}, \quad (34)$$

$$k_{x_3} = \frac{f \cdot \sqrt{d}}{b}, \quad (35)$$

$$k_{x_4} = \frac{g}{\sqrt{d}}, \quad (36)$$

$$k_{x_5} = \frac{h}{\sqrt{c}}, \quad (37)$$

$$k_{x_6} = \frac{h_1}{\sqrt{h_2} \sqrt{c}}, \quad (38)$$

a równanie na sumę udziałów molowych jako:

$$a + b + c + d + e + f + g + h + h_1 + h_2 = 1. \quad (39)$$

Natomiast równania bilansu substancji (28)-(31) przedstawiają się następująco:

$$n_C = a + b, \quad (40)$$

$$n_H = 2d + 2e + f + g, \quad (41)$$

$$n_O = a + 2b + 2c + e + f + h + h_1, \quad (42)$$

$$n_H = h_1 + 2h_2. \quad (43)$$

Dla wyeliminowania z bilansów substancji niewiadomej ilości spalin przypadającej na jednostkę paliwa, której to wartości znajomość nie jest potrzebna w obliczeniach, wprowadzono stosunki k, l, m .

$$k = \frac{n_C}{n_H}, \quad l = \frac{n_O}{n_H}, \quad m = \frac{n_H}{n_H} \quad (44)$$

$$k \cdot n_H = a + b, \quad (44)$$

$$l \cdot n_H = a + 2b + 2c + e + f + h + h_1, \quad (45)$$

$$n_H = 2d + 2e + f + g, \quad (46)$$

$$m \cdot n_H = h_1 + 2h_2. \quad (47)$$

Aby rozwiązać układ równań (33)-(43) należy wszystkie zmienne wyrazić za pomocą wielkości d i e , z których "e" przyjmujemy jako niewiadomą a "d" jako wielkość wejściową, zakładaną na początku obliczeń.

$$(34) \longrightarrow c = \frac{(ek_2)^2}{d^2}, \quad (48)$$

$$(35) \longrightarrow f = \frac{ek_3}{\sqrt{d}}, \quad (49)$$

$$(36) \longrightarrow g = \frac{k_4}{\sqrt{d}}, \quad (50)$$

$$(37) \longrightarrow h = \frac{k_2 k_5 e}{d}. \quad (51)$$

Z równań (38) i (43) obliczamy wielkość h_1 i h_2 :

$$h_1 = \frac{(c^2 + 8ck_6^2 \cdot n_N)^{\frac{1}{2}} - c}{8k_6^2}, \quad (52)$$

$$h_2 = \frac{c + 4k_6^2 \cdot n_N - (c^2 + 8ck_6^2 \cdot n)^{\frac{1}{2}}}{8k_6^2}, \quad (53)$$

Wyliczenie wielkości h_1 i h_2 zamieszczono w załączniku 1. Wstawiając do równania (44) równanie (46), otrzymano:

$$a + b = 2 \cdot kd + 2 \cdot ke + kf + kg. \quad (54)$$

Natomiast podstawiając do równania (54) równania (49) i (50) otrzymano;

$$a + b = 2kd + 2ke + k \frac{ek_3}{\sqrt{d}} + k \frac{k_4}{\sqrt{d}}. \quad (55)$$

Ponieważ dalsze przedstawienia prowadzą jedynie do komplikowania zapisu (równanie (39) jest równaniem czwartego stopnia), przekształcenia zakończono na tym etapie.

Równanie (39) na sumę udziałów przedstawia się zatem następująco:

$$\begin{aligned} & 2 \cdot kd + 2 \cdot ke + k \cdot \frac{ek_3}{\sqrt{d}} + k \frac{k_4}{\sqrt{d}} + \frac{e^2 k_2^2}{d^2} + d + e + \frac{ek_3}{\sqrt{d}} + \\ & + \frac{k_4}{d} + \frac{k_2 k_5 e}{d} + \frac{(c^2 + 8ck_6^2 \cdot n_N)^{\frac{1}{2}} - c}{4k_6^2} + \\ & + \frac{c + 4k_6^2 \cdot n_N - (c^2 + 8ck_6^2 \cdot n_N)^{\frac{1}{2}}}{8k_6^2} = 1 \end{aligned} \quad (56)$$

Uzupełniając równanie (56) równaniami (48) i (43) oraz podstawiając:

$$n_N = m \cdot n_H$$

otrzymano układ równań wprowadzony do programu komputerowego. Ponieważ układ ten, jak zaznaczono wcześniej, prowadzi do równania czwartego stopnia, konieczne było zastosowanie metody przybliżonego rozwiązywania równań.

W programie wykorzystano metodę połowienia przedziału w postaci podprogramu zamieszczonego w [6].

W ten sposób obliczoną wartość e podstawiono kolejno do równań (48) - (53) oraz obliczono na podstawie (33) i (44) wielkości a i b , wyrażając uprzednio c za pomocą (48).

$$(33) \quad \longrightarrow \quad b = \frac{a \sqrt{c}}{k_1}. \quad (57)$$

Podstawiając równanie (57) do (44) otrzymano:

$$k \cdot n_H = a + \frac{a \sqrt{c}}{k_1} = a \cdot \left(1 + \frac{\sqrt{c}}{k_1}\right)$$

$$a = \frac{k \cdot n_H}{1 + \frac{\sqrt{c}}{k_1}} = \frac{k \cdot n_H \cdot k_1}{k_1 + \sqrt{c}} \quad (58)$$

$$a = \frac{k \cdot k_1 \cdot n_H}{k_1 + \sqrt{c}}.$$

Mając obliczoną wielkość a za pomocą równania (58) wartość tę wstawiamy do równania (33), co pozwala na obliczenie składu molowego produktów spalania dla danej temperatury.

Dla znalezienia rozwiązania wykorzystano równanie (45) jako równanie warunkowe:

$$l \cdot n_H = s,$$

a zgodnie z równaniem (45)

$$s = a + 2b + 2c + e + f + h + h_1.$$

Badając różnicę $l \cdot n_H - s$, która powinna dążyć do zera, definiuje się zakończenie obliczeń.

Wynikiem obliczeń będą udziały molowe wszystkich składników spalin.

5. OBLICZENIE WARTOŚCI STAŁYCH RÓWNOWAGI REAKCJI CHEMICZNYCH

Stałe równowagi reakcji chemicznych zostały obliczone na podstawie zestawienia zamieszczonego w [10]. Ponieważ nie wszystkie reakcje dysocjacji termicznej (1) - (5) za pomocą, których obliczono w pracy skład molowy produktów, są zamieszczone w tym zestawieniu, konieczne było obliczenie stałych równowagi reakcji według metod zaczerpniętych z pracy [14].



W celu obliczenia wartości stałej równowagi tej reakcji posłużono się dwoma reakcjami, których stałe równowagi są znane.

Są to reakcje;



Stała równowagi reakcji (1) wynosi:

$$k_1 = \frac{x_{\text{CO}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}{x_{\text{CO}_2}}, \quad (61)$$

a stałe równowagi reakcji (59) i (60) wynoszą odpowiednio:

$$k_a = \frac{x_{\text{CO}}}{x_{\text{C}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}, \quad (62)$$

$$k_b = \frac{x_{\text{CO}_2}}{x_{\text{C}} \cdot x_{\text{O}_2}}. \quad (63)$$

Z równania (62) obliczamy:

$$x_{\text{CO}} = k_a \cdot x_{\text{C}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}},$$

natomiast z równania (63):

$$x_{\text{CO}_2} = k_b \cdot x_{\text{C}} \cdot x_{\text{O}_2}.$$

Podstawiając obliczone wartości x_{CO} i x_{CO_2} do równania (61) otrzymujemy:

$$k_1 = \frac{k_a \cdot k_C \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}{k_b \cdot x_C \cdot x_{\text{O}_2}},$$

$$k_1 = \frac{k_a}{k_b}. \quad (64)$$

2. Stała równowagi reakcji $\text{H}_2\text{O} = \frac{1}{2} \text{H}_2 + \text{OH}$ (3)

Stałą równowagi tej reakcji obliczono podobnie jak w poprzednim przypadku, czyli za pomocą reakcji, których stałe równowagi są znane.



Stała równowagi reakcji [3] wynosi:

$$k_3 = \frac{(x_{\text{H}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{\text{OH}})}{x_{\text{H}_2\text{O}}}, \quad (67)$$

a stała równowagi reakcji (65) i (66):

$$k_c = \frac{(x_{\text{H}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}{x_{\text{OH}}}, \quad (68)$$

$$k_d = \frac{(x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot x_{\text{H}_2}}{x_{\text{H}_2\text{O}}}. \quad (69)$$

Z równań (68) i (69) obliczamy:

$$x_{\text{OH}} = \frac{(x_{\text{H}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}}}{k_c},$$

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{(x_{\text{O}_2})^{\frac{1}{2}} \cdot x_{\text{H}_2}}{k_d}$$

Podstawiając wielkości x_{OH} i $x_{\text{H}_2\text{O}}$ do równania (67) po uproszczeniu otrzymamo:

$$k_3 = \frac{k_d}{k_c} \quad (70)$$

Wartości stałych równowagi reakcji $k_a \cdot k_b \cdot k_x \cdot k_c$ odczytano bezpośrednio z zestawienia (10).

Stałe równowagi reakcji (2), (4), (5) obliczono jako odwrotność stałych podanych w zestawieniu (zapis odwrotny jak dla reakcji asocjacji), natomiast stałe równowagi reakcji (6) odczytano bezpośrednio.

Wartości stałych równowagi reakcji (1) - (6) odczytano i obliczono dla temperatur 1500 K i 2000 K oraz 2500 K.

Natomiast stałe równowagi reakcji dla temperatur pośrednich, w przedziałach 1500 - 2000 K i 2000 - 2500 K obliczono za pomocą wzoru interpolacyjnego (10)

$$\ln \frac{k_p}{k_{p_1}} = \frac{(T_1 - T) T_2}{(T_1 - T) T} \cdot \ln \frac{k_{p_2}}{k_{p_1}}, \quad (71)$$

gdzie:

k_{p_1}, k_{p_2} - stałe równowagi reakcji dla temperatur sąsiednich T_1 i T_2 , stałe te są znane,

k_p - poszukiwana wartość stałej dla danej temperatury pośredniej.

W budowanym modelu wzór (71) przekształcono do obliczeń w następujący sposób, podstawiając:

$$w = \frac{(T_1 - T) T_2}{(T_1 - T_2) T}$$

Wówczas:

$$\ln \frac{k_p}{k_{p_1}} = w \cdot \ln \frac{k_{p_2}}{k_{p_1}},$$

a po dalszych przekształceniach otrzymano:

$$\frac{k_p}{k_{p_1}} = \left[\frac{k_{p_2}}{k_{p_1}} \right]^w$$

$$k_p = \left[\frac{k_{p_2}}{k_{p_1}} \right]^w \cdot k_{p_1} \quad (72)$$

Powodem zastosowania w obliczeniach wzoru (72) jest bardzo mała dokładność interpolacji liniowej.

6. OKREŚLENIE WPLYWU CIŚNIENIA NA DYSOCJACJĘ TERMICZNĄ

W modelu oceniono również wpływ ciśnienia na dysocjację termiczną produktów spalania. W tym celu udziały molowe produktów zastąpiono ciśnieniami, a równania stałych równowagi reakcji chemicznych przekształcono wg wzoru (21) do postaci:

$$(33) \quad k_{p_1} = \frac{a \cdot \sqrt{c}}{b} \cdot (p_c)^{\frac{1}{2}} \quad \Delta n = \frac{1}{2}, \quad (73)$$

$$(34) \quad k_{p_2} = \frac{d \cdot \sqrt{c}}{b} \cdot (p_c)^{\frac{1}{2}} \quad \Delta n = \frac{1}{2}, \quad (74)$$

$$(35) \quad k_{p_3} = \frac{f \cdot \sqrt{d}}{b} \cdot (p_c)^{\frac{1}{2}} \quad \Delta n = \frac{1}{2}, \quad (75)$$

$$(36) \quad k_{p_4} = \frac{g}{\sqrt{d}} \cdot (p_c)^{\frac{1}{2}} \quad \Delta n = \frac{1}{2}, \quad (76)$$

$$(37) \quad k_{p_5} = \frac{h}{\sqrt{c}} \cdot (p_c)^{\frac{1}{2}} \quad \Delta n = \frac{1}{2}, \quad (77)$$

$$(38) \quad k_{p_6} = \frac{h_1}{\sqrt{h_2} \sqrt{c}} \cdot (p_c)^0 \quad \Delta n = 0, \quad (78)$$

gdzie:

p_c - ciśnienie panujące w układzie,

natomiast równanie (39) jako równanie na sumę ciśnień składnikowych zapisano w postaci:

$$a + b + c + d + e + f + g + h + h_1 + h_2 = p_c. \quad (79)$$

Rozwiązanie tego umożliwia określenie wpływu ciśnienia na przebieg temperatury równowagi.

7. OBLICZENIE TEMPERATURY RÓWNOWAGI NA PODSTAWIE BILANSU ENERGETYCZNEGO

Temperaturę równowagi uwzględniającą dysocjację termiczną produktów obliczono w pracy w podobny sposób jak temperaturę adiabatyczną spalania. Zasadnicza różnica polega na uwzględnieniu rozszerzonego składu spalin o produkty dysocjacji termicznej. Obliczenia prowadzono dla 1 kmola spalin. Obliczenie liczby kmoli paliwa dającej 1 kmol spalin było konieczne, ponieważ zarówno obliczenie składu spalin, jak i wielkość (Mi) oraz (Mwd) dane są dla 1 kmola. Dlatego lewa strona bilansu energii zawiera wartość opałową takiej ilości paliwa, która daje po spaleniu 1 kmol spalin oraz entalpię fizyczną mieszanki. Natomiast strona prawa zawiera entalpię fizyczną produktów oraz wartości opałowe składników palnych w produktach spalania. Równanie bilansu przedstawia się następująco:

$$\begin{aligned} z(\lambda L_t + 1)(Mi)_{\text{pow}} + (Mwd)_{\text{pal}} = x_{\text{CO}}(Mi + Mwd)_{\text{CO}} + \\ + x_{\text{CO}_2}(Mi)_{\text{CO}_2} + x_{\text{O}_2}(Mi)_{\text{O}_2} + x_{\text{H}_2}(Mi + Mwd)_{\text{H}_2} + x_{\text{H}_2} + x_{\text{H}_2\text{O}}(Mi)_{\text{H}_2\text{O}} + \\ + x_{\text{OH}}(Mi)_{\text{OH}} + x_{\text{H}}(Mi + Mwd)_{\text{H}} + x_{\text{O}}(Mi + Mwd)_{\text{O}} + \\ x_{\text{NO}}(Mi + Mwd)_{\text{NO}} + x_{\text{N}_2}(Mi)_{\text{N}_2}, \end{aligned} \quad (80)$$

gdzie:

z - liczba kmoli paliwa dająca 1 kmol spalin,

x_i - udziały molowe,

a pozostałe wielkości jak we wzorze (12).

Równanie (80) zostało również rozwiązane metodą iteracji, tzn. poszukiwana jest taka temperatura, dla której równowagowy skład spalin zapewnia równość stron równania.

Elementami zmiennymi, zależnymi od temperatury, są entalpie fizyczne składników spalin. Natomiast przy uwzględnieniu wpływu ciśnienia na dysocjację termiczną produktów spalania udziały molowe x_i w równaniu (79) zostały zastąpione ciśnieniami składnikowymi p_i . Wyniki obliczeń, którymi są temperatury procesu spalania przebiegającego w silniku z samochodu PF 126p bez oraz z uwzględnieniem dysocjacji, zostaną przedstawione oddzielnie.

8. OCENA MODELU I ANALIZA BŁĘDU

Dokonując oceny przeprowadzonych obliczeń należy wskazać na możliwe źródła błędów, które w różny sposób wpływają na otrzymane przebiegi temperatur. Pod względem dokładności pewien błąd wprowadzony jest do obliczeń przez przybliżone rozwiązanie równania (56) (obliczenie składu molowego) oraz przez przyjęcie wartości stałych równowagi chemicznej na podstawie wzoru (72), który również jest wzorem przybliżonym.

Do błędu w ocenie temperatury produktów może również prowadzić założenie stanu równowagi produktów spalania, który w rzeczywistości może nie być osiągnięty.

Dla współczynnika nadmiaru powietrza $\lambda < 1$ źródłem błędu jest także początkowa zawartość H_2 będąca parametrem w trakcie obliczenia składu molowego produktów.

Zmniejszenie wartości udziału H_2 poniżej przyjętej jako początkowej, tj. 0,02% prowadzi jednak, jak wykazały próby, do błędnego rozwiązania równania (56). Dla wartości stron w równaniu bilansu energetycznego, zarówno przy obliczeniu temperatury adiabatycznej nie uwzględniającej dysocjacji termicznej, jak i przy obliczeniu temperatury równowagi, która uwzględnia dysocjację termiczną produktów, istotna jest wartość opałowa W_d , obliczona w pracy ze wzoru przybliżonego.

Jest ona zawyżona w stosunku do wartości otrzymanych doświadczalnie, co podaje literatura [2].

Zmniejszenie wartości opałowej prowadziłyby do obniżenia zakresu otrzymanych temperatur.

Źródłem błędu jest także przyjęcie entalpii wodoru H i tlenu O , jak dla gazów doskonałych, jednakże dla tlenu błąd z tym związany jest znikomy ze względu na mały udział molowy.

LITERATURA

- [1] Całus H.: Podstawy obliczeń chemicznych. WNT, Warszawa 1978
- [2] Dowkont J.: Teoria silników cieplnych. WKŁ, Warszawa 1973
- [3] Harker J.H., Allen J.A.: The calculation of the temperature and composition of flame gases. Journal of the Institute of Fuel, nr 340, 1969
- [4] Kowalewicz A.: Systemy spalania szybkoobrotowych tłokowych silników spalinowych. WKŁ, Warszawa 1980
- [5] Kowalewicz A.: Tworzenie mieszanki i spalanie w silnikach o zapłonie iskrowym. WKŁ, Warszawa 1984
- [6] Migut W.: Atari Basic. KAW, Warszawa 1988
- [7] Niemirowski K.: Tłokowe silniki spalinowe. WKŁ, Warszawa 1983
- [8] Sobczyk L., Kisza A.: Chemia fizyczna dla przyrodników. PWN, Warszawa 1975
- [9] Strehlow R.: Fundamentals of Combustion. Robert E.Klieger Publishing Company Malabar, Florida
- [10] Szargut J., Guzik A., Górniak H.: Programowany zbiór zadań z termodynamiki technicznej. PWN, Warszawa 1979
- [11] Szargut J.: Termodynamika. PWN, Warszawa 1985
- [12] Teodorczyk A., Rychter T.: Model matematyczny powstawania NO w silniku tłokowym o zapłonie iskrowym. ITC PW
- [13] Werner J., Wajand J.: Silniki spalinowe małej i średniej mocy. WNT, Warszawa 1983
- [14] Wiśniewski S.: Podstawy termodynamiki silników spalinowych. WNT, Warszawa 1963

Recenzent: Prof. dr hab. inż. Tadeusz Środulski

Wpłynęło do Redakcji 14.03.1990 r.

ZAŁĄCZNIK 1

Obliczenie wielkości udziałów molowych N_2 i NO

W celu obliczenia wielkości udziałów molowych $x_{NO} = h_1$ oraz $x_{N_2} = h_2$

$$(38) \quad \longrightarrow \quad h_2 = \frac{k_6^2 h_1^2}{c}, \quad (z.1.1)$$

$$(43) \quad \longrightarrow \quad n_N = h_1 + \frac{2k_6^2 h_1^2}{c}, \quad (z.1.2)$$

$$\frac{2k_6^2}{c} h_1^2 + h_1 - n_N = 0.$$

Równanie (z.1.2) rozwiązujemy traktując jako niewiadomą wielkość h_1 :

$$\Delta = b^2 - 4ac,$$

$$\Delta = 1 + 4 \frac{2k_6^2 n_N}{c} = 1 + \frac{8k_6^2 n_N}{c}.$$

Obliczamy jedynie dodatni pierwiastek równania (z.1.2) mający sens fizyczny:

$$\begin{aligned} h_1 &= \frac{-b + \sqrt{\Delta}}{2a}, \\ h_1 &= \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{8k_6^2 n_N}{c}}}{\frac{4k_6^2}{c}} = \left(\sqrt{(c + 8k_6^2 n_N) \left(\frac{1}{c} - 1\right)} - \frac{c}{4k_6^2} \right) = \\ &= \frac{c \sqrt{(c + 8k_6^2 n_N) \frac{1}{c}} - c}{4k_6^2} = \frac{\sqrt{c^2 (c + 8k_6^2 n_N) \frac{1}{c}} - c}{4k_6^2} = \\ &= \frac{\sqrt{c (c + 8k_6^2 n_N) \frac{1}{c}} - c}{4k_6^2} \end{aligned} \quad (z.1.3)$$

$$h_1 = \frac{\sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N) \frac{1}{c}} - c}{4k_6^2} \quad (\text{z.1.3})$$

Aby obliczyć wielkość h_2 podstawiamy równanie (z.1.3.) do równania (38) (z.1.1).

$$\begin{aligned} h_2 &= \frac{k_6^2}{c} \cdot \left[\frac{\sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)} - c}{4k_6^2} \right]^2 = \\ &= \frac{k_6^2}{c} \frac{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N) - 2c \sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)} + c}{16 k_6^4} = \\ &= \frac{k_6^2}{c} \frac{c[c + 8k_6^2 \cdot n_N] - 2c \sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)} + c}{16 k_6^4} = \\ &= \frac{2c + 8k_6^2 \cdot n_N - 2 \sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)}}{16 k_6^2} = \\ &= \frac{c + 4k_6^2 \cdot n_N - \sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)}}{8 k_6^2} \\ h_2 &= \frac{c + 4k_6^2 \cdot n_N - \sqrt{c(c + 8k_6^2 \cdot n_N)}}{8 k_6^2} \quad (\text{z.1.4}) \end{aligned}$$

MATHEMATICAL MODEL (ARCHETYPE) OF THERMAL DISSOCIATION TAKING PLACE DURING COMBUSTION IN AN INTERNAL COMBUSTION ENGINE

S u m m a r y

Since experimental research on newly designed engines are long-lasting and very expensive, they are replaced with mathematical simulation carried out by means of digital computers. One of the examples of using such a simulation might be the mathematical model which describes the process of combustion taking place in an I.C. engine. Such a model can be useful when determining the expected characteristics of thermodynamic parameters of working medium.

High temperature prevailing during the combustion process taking place in the internal combustion engine is the reason for thermal dissociation of combustion products and therefore it should be taken into account in calculations, although dissociation heat does not make an absolute loss; it is recovered in the form of so-called exhaust reheat. Unfortunately the pyrometrical quality of this reheat is - as it known already - decreased in consequence of an increased gain in entropy. It is visible outside the engine in the form of lowered air-standard efficiency.

The presented model allows to determine combustion temperature taking into account the thermal dissociation of the products and also to examine the influence of the excess air and the pressure during combustion. The obtained results have been compared with the adiabatic temperature of combustion calculated at the assumption that exhaust gases comprise (depending on the assumed excess air number) only CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 or CO if no O_2 is comprised.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДИССОЦИАЦИИ ВЫСТУПАЮЩЕЙ ВО ВРЕМЯ СГОРАНИЯ В ДВИГАТЕЛЕ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

Резюме

Экспериментальные исследования разрабатываемых двигателей из-за их продолжительности и большой стоимости заменяет имитационное моделирование с помощью компьютеров. Примером использования такого моделирования является математическая модель описывающая процесс сгорания происходящий в двигателе. Такую модель можно использовать для определения предусматриваемых течений термодинамических параметров рабочего агента. Высокая температура выступающая во время процесса сгорания в двигателе внутреннего сгорания является причиной термической диссоциации продуктов сгорания и поэтому должна учитываться в расчетах несмотря на то, что теплота диссоциации не является непосредственным ущербом, так как при понижении температуры получается обратно так называемая теплота дожигаания. К сожалению пирометрическое качество этой теплоты понижено, как известно, из-за увеличенного приращения энтропии. Это проявляется в понижении отдачи энергетического цикла. Представленная модель позволяет определить температуру сгорания с учетом термической диссоциации продуктов, а также учитывает влияние коэффициента избытка воздуха и давления выступающего в процессе сгорания. Полученные результаты сравнены с адиабатической температурой сгорания рассчитанной исходя из того, что продукты сгорания содержат в зависимости от принятого коэффициента избытка воздуха только CO_2 , H_2O , O_2 , N_2 или CO в отсутствии O_2 .