

## МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

УДК 534.46

А. В. Алиев, доктор физико-математических наук, профессор

О. А. Воеводина, аспирант

Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

### ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВПРЫСКА ВОДЫ ДЛЯ ОЧИСТКИ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ОРГАНИЧЕСКОГО ТОПЛИВА

*Рассматривается процесс минимизации вредных выбросов при горении органического горючего как задача о решении системы нелинейных уравнений. Для решения используется метод Ньютона – Рафсона, в котором на этапе решения линеаризованной системы уравнений применяется QR-метод.*

**Ключевые слова:** вредные выбросы, химически равновесный состав, продукты сгорания, математическая модель, система нелинейных уравнений, метод Ньютона – Рафсона, QR-метод.

Развитие энергетики, промышленности и транспорта вызывает рост потребления углеводородного топлива, и это, как следствие, приводит к увеличению вредных выбросов, содержащихся в продуктах сгорания, в атмосферу. В частности, при работе двигателей внутреннего сгорания (ДВС), котельных установок наибольшее внимание уделяется выбросам окислов азота  $\text{NO}_x$  и оксида углерода  $\text{CO}$ . Процесс их образования приведен, например, в работах [1, 2]. В частности, известно, что образование окислов азота в продуктах сгорания органических топлив соответствует интервалу температур от 1500 до 1800 К. На практике для снижения вредных выбросов применяются конструктивные методы (изменение геометрии тепловых устройств, ступенчатое сжигание) и методы, связанные с очисткой выхлопных (дымовых) газов [3] (организация каталитического горения, дожигание продуктов сгорания и др.).

Известны устройства, в которых нейтрализация выброса вредных веществ в атмосферу обеспечивается впрыском в выхлопную (дымовую) трубу воды. В частности, такой процесс реализован в патенте [4]. Однако в патенте не рассматриваются вопросы, связанные с проектированием устройств впрыска. Тем не менее на практике представляют интерес, например, такие вопросы – при каких температурах впрыск воды обеспечивает наибольшую эффективность, какое количество воды необходимо впрыскивать в выхлопную (дымовую) трубу? Ниже рассматривается методика, позволяющая ответить на перечисленные вопросы.

Будем рассматривать процесс горения органического горючего  $\text{C}_a\text{H}_b$  в воздушной среде. В соответствии с химическим анализом в продуктах сгорания топлива будут содержаться следующие вещества –  $\text{C}$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{N}$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCN}$ ,  $\text{HCO}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ . Химический состав не изменится при добавлении в продукты сгорания воды. Однако при этом изменятся концентрации отдельных компонентов смеси. Будем полагать,

что продукты сгорания находятся в термодинамическом равновесии. Математическая модель, позволяющая определить равновесный состав продуктов сгорания, изложена в [5] и сводится к записи уравнений сохранения массы для каждого химического элемента, уравнения сохранения энергии и уравнений химического равновесия, записанных для каждой принимаемой в расчет химической реакции. Уравнения химического равновесия существенно нелинейны, и это создает определенные трудности при решении задачи. В [6] система уравнений химического равновесия переписывается в виде для логарифмов парциальных давлений, для решения которой применяется метод Ньютона – Рафсона в сочетании с методом Гаусса. Опыт показывает, что применение метода Гаусса (метод используется на каждой итерации для определения поправок к разыскиваемым концентрациям химических элементов и соединений) не всегда обеспечивает устойчивый численный счет. В связи с этим в разработанной методике вместо метода Гаусса используется ортогональный QR-метод, к достоинствам которого следует отнести невозрастание ошибок вычислений для системы линейных уравнений любого порядка [7, 8].

С использованием разработанной методики выполнены расчеты равновесного состава продуктов сгорания бензина (условная формула  $\text{C}_{72,8}\text{H}_{128,3}$ ) с воздухом (условная формула  $\text{N}_{14,85}\text{O}_{53,92}\text{Ar}_{0,32}\text{C}_{0,01}$ ) в стехиометрическом соотношении (отношение массовых долей бензина и воздуха – 1:14,7).

Введем следующие обозначения:

–  $p_i, i=1,19$  – парциальные давления компонентов смеси продуктов сгорания (значение  $i$  соответствует выше приведенному порядку следования компонентов смеси, значения давлений принимаются в атмосферах);

–  $\Delta_i, i=1,20$  – поправки на значения  $\ln p_i$  и  $\ln M_m$ , устанавливаемые на очередной итерации решения систем линейных уравнений;

–  $M_m$  – нормирующий множитель, связывающий парциальные давления с мольными концентрациями компонентов смеси (число молей исходных веществ);

–  $K_j^p(T)$ ,  $j = 6, 19$  – константы равновесия по парциальным давлениям для химических реакций (реакций диссоциации), вычисляемые по энтропиям и эн-

тальпиям продуктов, участвующих в реакциях [9] и зависящих от температуры продуктов реакции  $T$ .

Запись исходных уравнений, позволяющих определить равновесный состав продуктов сгорания, не составляет труда, поэтому ниже приводится линеаризованная система алгебраических уравнений, используемая для нахождения очередных итераций неизвестных значений  $\ln p_i$  и  $\ln M_m$

$$\begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_8 & p_9 & 2p_{10} & 2p_{11} & 2p_{12} & 2p_{13} & 3p_{14} & p_{15} & 0 & 0 & 0 & -f_1 \\ 0 & p_2 & 0 & 0 & 0 & p_6 & 2p_7 & 0 & p_9 & p_{10} & 0 & 2p_{12} & p_{13} & 0 & p_{15} & 0 & 2p_{17} & p_{18} & 2p_{19} & -f_2 \\ 0 & 0 & p_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{14} & 0 & 2p_{16} & 0 & p_{18} & p_{19} & -f_3 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -f_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_5 & p_6 & p_7 & p_8 & p_9 & p_{10} & 0 & p_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -f_5 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ p_1 & p_2 & p_3 & p_4 & p_5 & p_6 & p_7 & p_8 & p_9 & p_{10} & p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & p_{15} & p_{16} & p_{17} & p_{18} & p_{19} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \\ \Delta_4 \\ \Delta_5 \\ \Delta_6 \\ \Delta_7 \\ \Delta_8 \\ \Delta_9 \\ \Delta_{10} \\ \Delta_{11} \\ \Delta_{12} \\ \Delta_{13} \\ \Delta_{14} \\ \Delta_{15} \\ \Delta_{16} \\ \Delta_{17} \\ \Delta_{18} \\ \Delta_{19} \\ \Delta_{20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -g_1 \\ -g_2 \\ -g_3 \\ -g_4 \\ -g_5 \\ -g_6 \\ -g_7 \\ -g_8 \\ -g_9 \\ -g_{10} \\ -g_{11} \\ -g_{12} \\ -g_{13} \\ -g_{14} \\ -g_{15} \\ -g_{16} \\ -g_{17} \\ -g_{18} \\ -g_{19} \\ -g_{20} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Коэффициенты  $f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, g_1 \dots g_{20}$ , входящие в уравнение (1), определяются формулами:

$$f_1 = p_1 + p_8 + p_9 + 2p_{10} + 2p_{11} + 2p_{12} + 2p_{13} + 3p_{14} + p_{15},$$

$$f_2 = p_2 + p_6 + 2p_7 + p_9 + p_{10} + 2p_{12} + p_{13} + p_{15} + 2p_{17} + p_{18} + 2p_{19},$$

$$f_3 = p_3 + p_9 + p_{14} + 2p_{16} + p_{18} + p_{19},$$

$$f_4 = p_4,$$

$$f_5 = p_5 + p_6 + p_7 + p_8 + p_9 + p_{10} + p_{11},$$

$$g_1 = f_1 \cdot (\ln f_1 - \ln(z \cdot M_m)),$$

$$g_2 = f_2 \cdot (\ln f_2 - \ln(x \cdot M_m)),$$

$$g_3 = f_3 \cdot (\ln f_3 - \ln(v \cdot M_m)),$$

$$g_4 = f_4 \cdot (\ln f_4 - \ln(q \cdot M_m)),$$

$$g_5 = f_5 \cdot (\ln f_5 - \ln(j \cdot M_m)),$$

$$g_6 = \ln p_2 - \ln p_1 - \ln p_5 + K_6,$$

$$g_7 = \ln p_7 - 2 \ln p_2 - \ln p_5 + K_7,$$

$$g_8 = \ln p_8 - \ln p_1 - \ln p_3 - \ln p_5 + K_8,$$

$$g_9 = \ln p_9 - \ln p_1 - \ln p_2 - \ln p_3 - \ln p_5 + K_9,$$

$$g_{10} = \ln p_{10} - 2 \ln p_1 - \ln p_2 + K_{10},$$

$$g_{11} = \ln p_{11} - 2 \ln p_1 - \ln p_5 + K_{11},$$

$$g_{12} = \ln p_{12} - 2 \ln p_1 - 2 \ln p_2 + K_{12},$$

$$g_{13} = \ln p_{13} - 2 \ln p_1 - \ln p_2 + K_{13},$$

$$g_{14} = \ln p_{14} - 3 \ln p_1 - \ln p_3 + K_{14},$$

$$g_{15} = \ln p_{15} - \ln p_1 - \ln p_2 + K_{15},$$

$$g_{16} = \ln p_{16} - 2 \ln p_3 + K_{16},$$

$$g_{17} = \ln p_{17} - 2 \ln p_2 + K_{17},$$

$$g_{18} = \ln p_{18} - \ln p_2 - \ln p_3 + K_{18},$$

$$g_{19} = \ln p_{19} - 2 \ln p_2 - \ln p_3 + K_{19},$$

$$g_{20} = \ln \sum_{i=1}^{19} p_i - \ln p_{\kappa}.$$

Последовательность решения задачи о равновесном составе продуктов реакции устанавливается в следующем порядке:

– задаются первоначальные значения парциальных давлений  $p_i$  и  $M_m$ ;

– решением системы линейных уравнений (1) определяются поправки  $\Delta_i$ , система уравнений (1) решается  $QR$ -методом;

– полученные поправки используются для определения новых значений парциальных давлений  $p_i$  и  $M_m$ :

$$(\ln p_i)^{(N)} = (\ln p_i)^{(N-1)} + \Delta_i, \quad i = 1, 19, \quad (2)$$

$$(\ln M_m)^{(N)} = (\ln M_m)^{(N-1)} + \Delta_{20}, \quad (3)$$

в уравнениях (2), (3)  $N$  – номер итерации;

– если поправки  $\Delta_i$  превосходят заданную точность, то принимается решение о необходимости проведения новой итерации.

Расчеты равновесного состава продуктов сгорания бензина при впрыске в продукты сгорания воды проводились при следующих исходных данных – давление продуктов сгорания 1,0–2,0 МПа. Температура продуктов сгорания в окрестности впрыска воды принималась в диапазоне от 800 до 2000 К. Результаты выполненных расчетов представлены на рис. 1, 2.

На рис. 1 представлены зависимости массовых концентраций оксида углерода от функции температуры продуктов сгорания. Зависимости представлены для пяти вариантов, соответствующих различным массовым долям (от общей массы продуктов сгорания) впрыскиваемой воды – от 0 до 20 %. На рис. 2 представлены такие же результаты, но построенные для массовых концентраций оксида азота. Расчеты показывают, что характер зависимостей для массовых концентраций других окислов азота остается подобным приведенным на рис. 2.

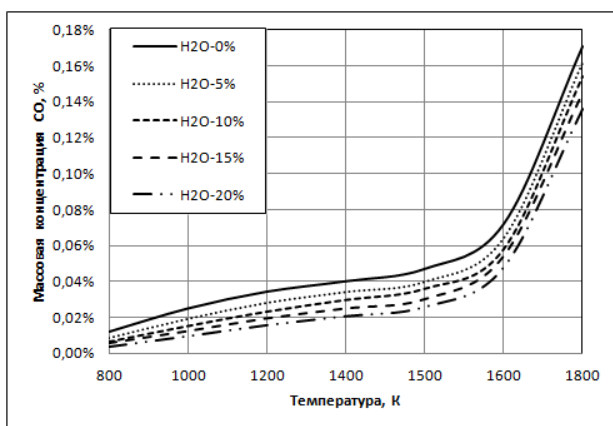


Рис. 1. Зависимость массовой концентрации CO от температуры продуктов сгорания и количества впрыскиваемой воды

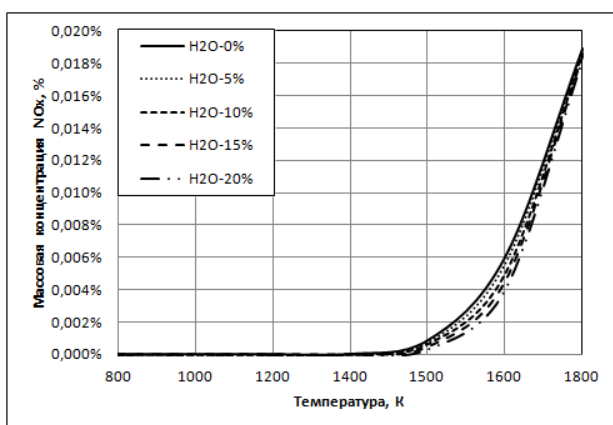


Рис. 2. Зависимость массовой концентрации NO от температуры продуктов сгорания и количества впрыскиваемой воды

Анализ результатов расчетов показывает, что наибольшее количество оксида углерода и окислов азота соответствует температурному диапазону выше 1500 К. Этот факт позволяет сделать вывод о том, что для нейтрализации токсичных веществ, присутствующих в продуктах сгорания, следует впрыски-

вать пары воды в окрестности выхода продуктов сгорания из реакторной камеры (камеры сгорания ДВС), чтобы максимально быстро снизить температуру продуктов сгорания до температуры ниже 1500 К (ниже этой температуры скорость образования окислов азота значительно снижается).

Из результатов, представленных на рис. 3, следует, что при впрыске воды в количестве до 10 % от массы бензина температура продуктов сгорания снижается более, чем на 300 градусов. При этом, как следует из рис. 4, при впрыске воды в количестве до 5 % она расходуется, прежде всего, на протекание химических реакций. Дальнейшее увеличение количества впрыскиваемой жидкости приводит к росту концентрации водяных паров в составе продуктов сгорания (вода испаряется без химического взаимодействия).

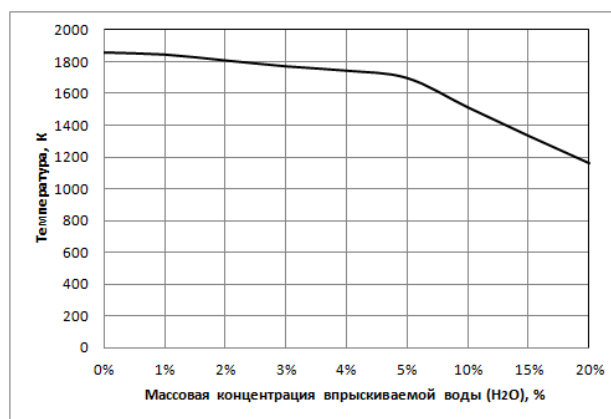


Рис. 3. Зависимость температуры отработавших газов от количества впрыскиваемой воды

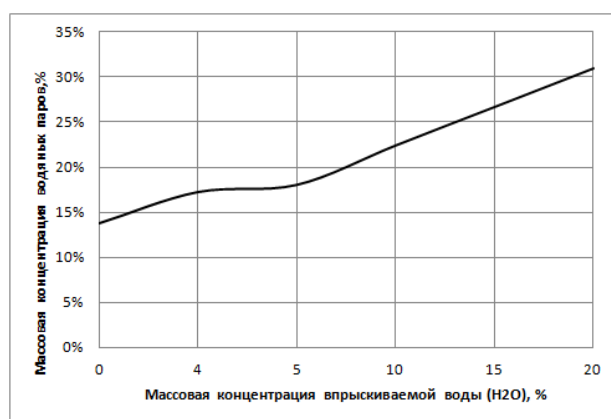


Рис. 4. Массовая концентрация водяных паров в составе продуктов сгорания как функция массовой доли впрыскиваемой воды

В заключение следует отметить, что процесс испарения воды при подаче ее в продукты сгорания происходит в течение определенного времени, которое необходимо минимизировать. Технически это можно обеспечить, пропустив предварительно воду через теплообменник и нагрев ее до температуры, близкой к температуре испарения (90–100 °С).

**Библиографические ссылки**

1. Варнатц Ю, Маас У., Диббл Р. Горение: физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / пер. с англ. Г. Л. Агафонова ; под ред. П. А. Власова. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 352 с.

2. Сигал И. Я. Защита воздушного бассейна при сжигании топлива. – Л. : Недра, 1988. – 312 с.

3. Росляков П. В. Малотоксичные горелочные устройства : учеб. пособие по курсам «Технология сжигания органического топлива», «Методы защиты окружающей среды». – М. : Изд-во МЭИ, 2002. – 64 с.

4. Устройство нейтрализации выхлопных газов двигателя внутреннего сгорания: пат. RU 2265735 Рос. Федерация: МПК7:F01N3/08 / В. Г. Ковалев, А. А. Старостин, В. В. Сеньковский, С. П. Пишевец; заявитель и патентообладатель Общевойсковая академия вооруженных сил Российской Федерации.

5. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания : справочник в 10 т. / В. Е. Алемасов, А. Ф. Дрегаллин, А. П. Тишин, В. А. Худяков ; под ред. В. П. Глушко. – М. : ВИНТИ, 1971. – Т. 1–10.

6. Там же.

7. Алиев А. В., Мищенкова О. В. Математическое моделирование в технике. – Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2012. – 456 с.

8. Мищенкова О. В., Воеводина О. А. Применение LU- и QR-методов при решении задачи о равновесном составе продуктов химической реакции // Вестник Ижевского государственного технического университета, 2014. – № 3 (63). – С. 172–176.

9. Устройство нейтрализации выхлопных газов двигателя внутреннего сгорания: пат. RU 2265735 Рос. Федерация: МПК7:F01N3/08 / В. Г. Ковалев, А. А. Старостин, В. В. Сеньковский, С. П. Пишевец; заявитель и патентообладатель Общевойсковая академия Вооруженных сил Российской Федерации.

\*\*\*

A. V. Aliev, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University  
O. A. Voevodina, Post-graduate, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

**Thermodynamic analysis of effectiveness of water injection for treatment of organic fuels combustion products**

*The paper considers the process of minimizing the harmful emission during combustion of organic fuel as the task of solving the system of nonlinear equations. The Newton – Raphson method is used here, with applying the QR-method at the stage of solving the linearized system of equations.*

**Keywords:** harmful emission, chemically equilibrium composition, combustion products, mathematics model, system of non-linear equations, Newton – Raphson method, QR-method.

Получено: 14.10.14

УДК 539.37

А. В. Алиев, доктор физико-математических наук, профессор

А. А. Калинин, аспирант

А. Е. Калинин, доктор технических наук, профессор

Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

## ДИНАМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРЕХСЛОЙНОЙ СЭНДВИЧ-ПЛАСТИНЫ С НАПОЛНИТЕЛЕМ В ВИДЕ ПЕСЧАНОГО ГРУНТА ПРИ НАГРУЖЕНИИ ВЗРЫВОМ

*Исследуется поведение прямоугольной трехслойной пластины с наполнителем в виде песчаного грунта при нагружении ее давлением, создаваемым при взрыве заданной массы взрывчатого вещества. Поставленная задача решается численным методом конечных элементов. Приведено сравнение напряженно-деформированного состояния и кинематических параметров (перемещения, скорости и ускорения) характерных точек пластин для двух материалов промежуточного слоя пластины. Приведены количественные данные по способности пластины поглощать энергию взрыва.*

**Ключевые слова:** прямоугольная пластина, метод конечных элементов, кинематические параметры (перемещение, скорость, ускорение), поглощение энергии.

В работе [1] показано, в частности, что трехслойную пластину с промежуточным слоем из алюминиевой пены можно использовать в качестве эффективного конструктивного средства для защиты соответствующих объектов (оборудование, приборы, экипаж автомобиля или другого транспорта и т. п.) от действия взрывной волны.

Ниже рассматривается использование песчаного грунта в качестве наполнителя для трехслойной пластины вместо алюминиевой пены с целью проверки

эффективности такого специфического материала противостоять взрыву заряда взрывчатого вещества (ВВ) под днищем автомобиля и целесообразности использования его в качестве наполнителя в противовзрывном днище. Применение песчаного грунта как наполнителя является экономически выгодным по сравнению с алюминиевой пеной, поскольку днище с грунтовым наполнителем более ремонтнопригодно в ходе реального использования авто-