

2. Correlation of ignition delay with fuel composition and state for application to gas turbine combustion [Электронный ресурс] / S. Samuelsen [et al]; University of California.– Irvine, 2003.– Режим доступа: <http://www.clemson.edu/scies/UTSR/FinalSR084.pdf>, свободный.
3. Maigaard P., Mauss F., Kraft M. Homogeneous charge compression ignition engine: a simulation study on the effects of inhomogeneities // Trans. ASME. J. Eng. Gas Turbines and Power.– 2003.– Vol. 125, № 2.– P. 466-471.
4. Analysis of a natural gas fuelled HCCI engine with exhaust gas recirculation using a stochastic reactor model / A. Bhave, M. Balthasar, M. Kraft, F. Mauss // Ins. J. Engine Res.– 2004.– Vol. 5, № 1.– P. 83-104.

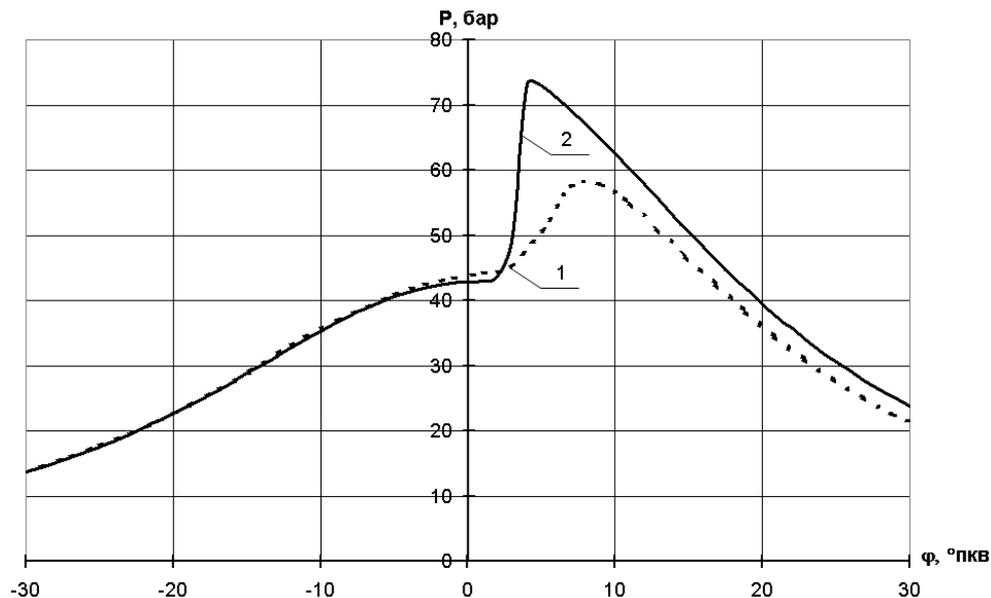


Рис. 2. Экспериментальная (1) и расчетная (2) индикаторные диаграммы двигателя Volvo TD100

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ПРИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ МОТОРНЫХ МАСЕЛ В ДВИГАТЕЛЯХ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

Зейнетдинов Р.А.

(Санкт-Петербургский государственный аграрный университет)

В поршневом двигателе процесс окисления моторного масла (ММ) можно характеризовать исходя из основных положений неравновесной термодинамики, согласно которым изменения в любой системе определяются возникновением энтропии. Тогда в соответствии с принципом неравновесной термодинамики, всю систему можно разбить на достаточно малые, но все еще макроскопические области, причем такие, что каждую из них можно рассматривать как равновесную (точнее, квазиравновесную) термодинамическую систему.

После таких предположений количество теплоты, подведенное от рабочих газов к какому-либо дифференциальному объему масляной пленки (МП) на стенках цилиндра можно представить в следующей форме:

$$Q(s, \mu) = \iiint_V \rho T \frac{dS}{dt} dV d\tau = \iiint_V \rho T \left(\frac{dS_{\text{en}}}{dt} + \frac{d_i S}{dt} \right) dV \cdot dt, \quad (1)$$

где $dS_{\text{вн}}/d\tau$ – скорость изменения удельной энтропии в элементарном термодинамическом процессе ММ только за счет теплообмена с внешней средой; $d_i S/d\tau$ – скорость изменения удельной энтропии в элементарном термодинамическом процессе только за счет внутренних процессов (процессы тепломассообмена с химическими реакциями в ММ).

С другой стороны, согласно первому закону термодинамики для открытых систем количество теплоты, участвующей в бесконечно малом процессе взаимодействия масляной пленки с рабочими газами, определяется выражением [1]:

$$\delta Q = dH - Vdp - \sum_{k=1}^N \bar{H}_k dn_k, \quad \bar{H}_k = \left(\frac{\partial H}{\partial n_k} \right)_{p,T,n_j}, \quad (2)$$

где dn_k – бесконечно малое изменение числа молей k -го компонента ММ за счет массообмена с внешней средой.

С учетом уравнения $\delta Q/T = dS_{\text{вн}} + d_i S$ определение теплоты для процессов взаимодействия МП с высокотемпературным газом может быть представлено в виде

$$\rho T \left(\frac{ds_{\text{вн}}}{dt} + \frac{d_i s}{dt} \right) = \rho \frac{dh}{dt} - \frac{dp}{dt} - \sum_{k=1}^N \bar{H}_k \frac{dc_k}{dt}. \quad (3)$$

На основании последнего выражения находим:

$$\rho T \frac{ds_{\text{вн}}}{dt} = \rho \frac{dh}{dt} - \sum_{k=1}^N H_k \frac{dc_k}{dk} - \rho T \frac{d_i s}{dt} - \frac{dp}{dt}. \quad (4)$$

Из фундаментального уравнения термодинамики – уравнения Гиббса для открытой термодинамической системы следует:

$$\rho T \frac{ds}{d\tau} = \rho \frac{dh}{d\tau} - \frac{dp}{d\tau} - \sum_{k=1}^N \mu_k \frac{dc_k}{d\tau}, \quad (5)$$

где $\mu_k = H_k - T S_k$ – химический потенциал k -го компонента системы.

Из уравнения Гиббса – Дюгема [2] также имеем:

$$\rho s \frac{dT}{d\tau} - \frac{dp}{d\tau} + \sum_{k=1}^N c_k \frac{d\mu_k}{d\tau} = 0. \quad (6)$$

Вычитая из уравнения (4) уравнение (5) и далее прибавляя к правой части полученного уравнения левую часть уравнения (6), получим искомое уравнение многокомпонентной открытой термодинамической макросистемы:

$$\rho T \frac{ds_{\text{вн}}}{d\tau} = \rho T \frac{ds}{d\tau} - \sum_{k=1}^N T \bar{s}_k \frac{dc_k}{d\tau} + \rho s \frac{dT}{d\tau} - \frac{dp}{d\tau} - \rho T \frac{d_i s}{d\tau} + \sum_{k=1}^N c_k \frac{d\mu_k}{d\tau}. \quad (7)$$

Полученное уравнение выражает количество теплоты, подводимое к данной термодинамической системе через ее фундаментальные характеристики.

Полная энтропия многокомпонентной открытой макросистемы является функцией независимых параметров состояния p , T и n :

$$S = S(p, T, n_k), \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (8)$$

Тогда полный дифференциал энтропии S можно записать в виде

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p,n} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T,n} dp + \sum_{k=1}^N \bar{S}_k dn_k. \quad (9)$$

В двигателе процессы взаимосвязанного тепломассообмена ММ осуществляются при различных полях температур и концентрациях составляющих его компонентов.

Энтропию, входящую в выражение (9) и определяемую изменением только температуры, можно найти, используя фундаментальное уравнение термодинамики (2) для рассматриваемой системы, из которого следует

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,n} = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p,n} = \frac{m}{T} \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{p,n} = \frac{m}{T} c_p. \quad (10)$$

При этом учтено, что условия, при которых определяется производная, делают термодинамическую систему закрытой. Поэтому для рассматриваемых условий масса системы постоянна.

Частную производную от энтропии системы по давлению можно определить из того же выражения (2):

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,n} = \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{T,n} - V \right] = \frac{1}{T} \left[m \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_{T,n} - V \right]. \quad (11)$$

В данном соотношении учтено, что условия, при которых определяются искомые частные производные, делают термодинамическую систему закрытой ($n_k = \text{const}$), и масса системы тоже не изменяется.

Тогда выражение (9) с учетом (10) и (11) приводится к следующему виду:

$$dS = dS_{p,n} + \left[m \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_{T,n} - V \right] \frac{dp}{T} + \sum_{k=1}^N \bar{S}_k d_e n_k + \sum_{k=1}^N \bar{S}_k d_r n_k, \quad (12)$$

где $dn_k = d_e n_k + d_r n_k$, причем первое слагаемое $d_e n_k$ — бесконечно малое изменение числа частиц k -го компонента только за счет массообмена с внешней средой, а второе $d_r n_k$ — только за счет химических реакций; $dS_{p,n_k} = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,n_k} dT$ — темпера-

турная часть энтропии.

Последнее выражение для дифференциального объема непрерывной термодинамической системы в соответствии с одной из основных гипотез термодинамики необратимых процессов может быть записано в следующей форме:

$$\rho \frac{ds}{d\tau} = \rho \frac{ds_{p,n_k}}{d\tau} + \frac{1}{T} \left[\rho \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_{T,n_k} - 1 \right] \frac{dp}{dt} + \sum_{k=1}^N \bar{S}_k \frac{dc_k}{dt} + \sum_{k=1}^N \sum_{r=1}^R \bar{S}_k \cdot v_{kr} \cdot w_r, \quad (13)$$

где v_{kr} — стехиометрический коэффициент k -компонента ММ в химической реакции r ; w_r — скорость реакции r .

Значение молярного химического потенциала k -го компонента [2]:

$$\frac{d\mu_k}{d\tau} = \frac{d\mu_{kp,T}}{d\tau} - \bar{S}_k \frac{dT}{d\tau} + \bar{V}_k \frac{dp}{d\tau}, \quad (14)$$

где $\mu_{kp,T}$ — изобарно-изотермическое (молярное) значение химического потенциала k -го компонента ММ.

Для рассматриваемых взаимосвязанных процессов тепломассообмена производство энтропии определяется следующим соотношением из работы [2]:

$$\rho \frac{d_i s}{d\tau} = -I_q \frac{1}{T^2} \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^N \bar{I}_k \nabla \mu_{kT} + \frac{1}{T} \sum_{r=1}^R w_r A_r, \quad (15)$$

где I_q^P — плотности потоков, вызванных прямыми эффектами теплопроводности и диффузии k -го компонента; I_k^P — плотности потоков, вызванных перекрестными эффектами, т. е. процессами диффузионного термоэффекта и термодиффузии; A_r — сродство r -й реакции, протекающей в общем случае между компонентами, находящимися в разных фазах..

Линейные законы, выражающие связь между обобщенными потоками и обобщенными силами, входящими в выражение для производства энтропии (15), могут быть заданы в форме законов Фурье и Фика:

$$I_q^p = -\lambda \nabla T - \sum_{n=2}^N D_{kn}^c \nabla c_n; \quad I_k^p = - \sum_{m=2}^N D_{km} \nabla c_m - D_K^T \nabla T, \quad (16)$$

где D_{kn}^c – коэффициент, характеризующий диффузионный термоэффект; D_k^T – коэффициент, характеризующий термодиффузию.

Для определения последнего слагаемого уравнения (15) рассмотрим нашу макроскопическую систему как открытую, находящуюся в стационарном неравновесном состоянии. При этом она будет находиться в состоянии неустойчивости и не будет переходить в состояние термодинамического равновесия до тех пор, пока имеется подпитка системы извне потоком вещества и энергии. В этом случае внешние негэнтропийные потоки не только удерживают систему далеко от равновесия, но и обеспечивают ее самоорганизацию и развитие.

Если рассмотреть многокомпонентное ММ как открытую макросистему и каждый ее компонент как некоторое микросостояние, то число микросостояний данной системы при термоокислительной деструкции увеличивается, что обусловлено самоорганизацией многокомпонентной системы за счет потери компонентов с повышенной свободной энергией G и переходом на более высокие уровни развития. В этом случае продуцирование энтропии внутри системы определится изменением суммарного потенциала макросистемы, взятого с обратным знаком, и равно

$$T d_i \tilde{S} = -d(G_p + G_o - G_y) \approx -\Delta G_m, \quad (17)$$

где G_p – термодинамический потенциал работающего масла, G_o – термодинамический потенциал доливаемого масла, G_y – термодинамический потенциал масла, подверженного угару.

При таком подходе «работающее» ММ в двигателе является как бы стохастической многокомпонентной системой (МСС), состоящей из преобладающих доминирующих компонентов и компонентов-примесей. В качестве доминирующих компонентов принимается углеводородный состав базового масла, а в качестве компонентов-примесей – его групповой состав (асфальтены, смолы и т.д.).

Из работы [3] следует, что в изолированной системе в каждом фиксированном состоянии компоненты нефтепродуктов распределяются по нормальному закону в функции от какого-либо термодинамического потенциала системы, т.е.

$$P_N(M) = 1/(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma^2) \cdot \exp[-(g - \bar{G})^2 / 2\sigma^2], \quad (18)$$

где \bar{G} – среднее значение термодинамического потенциала; g – термодинамический потенциал образования отдельного компонента; σ^2 – дисперсия термодинамического потенциала данного компонента в масле.

По отношению к открытой системе вид распределения, вероятнее всего, сохранится, хотя параметры будут искажаться в зависимости от режима работы двигателя и количества доливаемого ММ и вида присадки.

При описании данной динамической макросистемы со случайными флуктуациями термодинамических величин можно воспользоваться аппаратом теории случайных процессов. Процессы неравновесного фазового перехода в ММ будем рассматривать как цепочки состояний, отличающиеся термодинамическими потенциалами и характеризующиеся тем, что вероятностные свойства продуктов окисления МСС в моменты времени $t > t_l$ полностью определяются состоянием

процесса в момент времени t и не зависят от состояний процесса в моменты, предшествующие t_1 . Такая кинетика процессов в МСС образует цепочку марковских событий с определенной переходной вероятностью [4]:

$$P(t_1) \rightarrow P(t_2) \rightarrow \dots \rightarrow P(t_m). \quad (19)$$

И для случайного процесса марковского типа имеем:

$$p_n(t_1, x_1; \dots; t_m, x_m) = p_1(t_1, x_1) \cdot q(t_2, x_2 / t_1, x_1) \dots q(t_m, x_m / t_{m-1}, x_{m-1}). \quad (20)$$

Итак, если процесс деструкции ММ считать случайным процессом марковского типа, то для определения вероятности изменения какого-либо компонента масла в любой момент времени t достаточно знать начальную плотность распределения данного компонента $p_1(t_1, x_1)$ и его переходную плотность $q(t, x / t_1, x_1)$, характеризующую плотность вероятности перехода из состояния x_1 в момент времени t_1 в состояние x к моменту t .

Для последовательного описания происходящих в системе необратимых процессов можно использовать вариационный принцип минимума производства энтропии, минимальное значение которого достигается при приближении рассматриваемой системы к равновесию.

Для локально-равновесных состояний, достаточно близких к полному равновесию, основное кинетическое уравнение, описывающее необратимую эволюцию системы с учетом уравнение Паули, принимает следующий вид:

$$\frac{dp_n(t)}{dt} = \sum_m w_{nm} [p_m(t) - p_n(t)], \quad (23)$$

где w_{nm} – частота перехода из состояния x_n в состояние x_m в момент t_n .

Далее, вычисляя временную производную от больцмановской энтропии, и учитывая тождество $(\partial/\partial t) \sum_n p_n(t) = (\partial/\partial t) 1 = 0$, находим:

$$\begin{aligned} \frac{d_i \tilde{S}(t)}{dt} &= -k_s \sum_n \sum_m w_{nm} [p_m(t) - p_n(t)] \ln p_n(t) - k_B \sum_n \frac{p_n(t) \partial p_n(t)}{\partial t} = \\ &= \frac{1}{2} k_s \sum_n \sum_m w_{nm} [p_n(t) - p_m(t)] \cdot [\ln p_n(t) - \ln p_m(t)] \geq 0. \end{aligned} \quad (24)$$

Следовательно, если состояния, между которыми допускаются переходы, равновероятны, то $d_i \tilde{S}(t)/dt = 0$. Такому состоянию соответствует минимум производства энтропии, а сама система при этом будет обладать структурной устойчивостью. В противном случае, в МСС энтропия $d \tilde{S}_i(t)$ будет расти во времени с уменьшающейся скоростью ее производства.

Необратимые процессы термоокислительной полимеризации ММ, приводящие к рассеиванию энергии, являются причиной тепловой деградации свободной энергии системы, и вычисление скорости продуцирования энтропии может характеризовать энергетические затраты на протекание вышеназванных процессов. Следовательно, локальное производство энтропии $\tilde{\sigma}$, связанное с химическими процессами, равно

$$\tilde{\sigma} = \frac{d_i S}{dt} = \frac{1}{\rho \cdot T} \sum_{r=1}^R w_r A_r. \quad (25)$$

Подставляя данное соотношение в уравнение (15), и далее используя выражения (1), можно определить теплоту, подводимую к многокомпонентной многофаз-

ной масляной пленке, при наличии в ней процессов тепломассообмена с химическими термоокислительными реакциями полимеризации.

Таким образом, на основе вышеизложенного следует отметить, что одно из перспективных направлений стратегии системного анализа процессов старения ММ в двигателе состоит в использовании энтропийного подхода к оценке его состояния в условиях эксплуатации и метода диссипативных структур и структурно-информационных критериев эволюции рассматриваемой сложной физико-химической термодинамической системы. Применение этих принципов открывает широкие возможности в решении задач прогнозирования свойств процессов систем, их оптимизации, когда применение традиционных методов встречает непреодолимые трудности.

Литература:

1. Карапетьянц М. Х. Химическая термодинамика.– М.: Химия, 1975.– 584 с.
2. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов.–М.: Изд-во Мир, 1967.–544 с.
3. Эйгенсон А.С. Закономерности компонентно-фракционного состава и химическая характеристика пластовой и резервуарной нефти. – Томск: ИХН СО АН СССР, 1986.– 66 с.
4. Дынкин Е.Б. Марковские процессы.– М.: Физматгиз, 1963. – 860 с.

СТРУКТУРА ОПТИМИЗАЦИИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ СИСТЕМ ДВИГАТЕЛЕЙ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

Зейнетдинов Р. А.

(Санкт-Петербургский государственный аграрный университет)

Поршневые двигатели представляет сложную динамическую систему, в которой происходят разные переходные процессы и явлений, требующие управления на всех эксплуатационных режимах работы двигателя с целью оптимальной организации термодинамических процессов. Если учесть, что все термодинамические процессы, протекающие в ДВС, являются необратимыми, а системы, как правило, открытые, внутренне неравновесные и продолжительности процессов конечны, то данную задачу лучше всего решить на основе принципов термодинамики при конечном времени.

Тогда задача оптимальной в термодинамическом смысле организации физико-химических процессов систем ДВС состоит в том, чтобы выбором температур, давлений и химических потенциалов взаимодействующих подсистем, а также коэффициентов в уравнениях кинетики добиться минимума возникновения энтропии (диссипации) при заданной интенсивности потоков. Это позволяет также оценить степень термодинамического совершенства происходящих в системах ДВС технологических процессов с известными коэффициентами теплопереноса, заданными продолжительностями и количеством отводимого (подводимого) тепла.

Из термодинамики известно, что при описании открытых систем ведущую роль играет энтропия, так как это единственная функция, позволяющая различить неравновесные и равновесные процессы. А показателем необратимости термодинамических процессов систем является производство (возникновение) энтропии. Тогда задача оптимальной в термодинамическом смысле организации физико-химических процессов систем ДВС состоит в том, чтобы выбором температур, давлений и химических потенциалов взаимодействующих подсистем, а также ко-