

РАСЧЕТНАЯ ПРОГРАММА ДЛЯ ПРОЦЕССА
САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ОТ СЖАТИЯ
В ДВИГАТЕЛЕ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

**В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев¹, А. Н. Гоц²,
В. С. Посвянский¹, И. В. Семенов³,
С. М. Фролов¹, Ф. С. Фролов¹**

¹ИХФ РАН

г. Москва, Россия

²ВлГУ

г. Владимир, Россия

³ИАП РАН

г. Москва, Россия

Для дальнейшего совершенствования рабочего процесса и конструкции современных поршневых двигателей с зажиганием от сжатия необходимо глубокое понимание внутрикамерных физико-химических процессов, включая смесеобразование при впрыске газовых или жидких струй горючего в цилиндр двигателя, самовоспламенение паров горючего, горение капель и образование вредных веществ (NO, CO, сажа). Для этой цели в ИХФ РАН разработана вычислительная программа, которая позволяет проводить расчеты самовоспламенения и горения капель в дизеле или гомогенной топливно-воздушной смеси (ТВС) в двигателе с гомогенным зарядом (по западной терминологии — HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), а также заряда ТВС в смешанном газодизельном цикле, когда газовая смесь воспламеняется от капель жидкого топлива. Важнейшие особенности программы — возможность использования как глобальных, так и детальных кинетических механизмов (ДКМ) окисления горючего и учет влияния коллективных эффектов при самовоспламенении и горении плотных капельных газозвесей в условиях переменного объема камеры сгорания. В данном сообщении представлены некоторые расчетные результаты для двигателей с дизельным, HCCI и смешанным газодизельным циклом.

В [1] подробно описана математическая постановка задачи о прогреве, испарении, самовоспламенении и горении газозвеси капель жидкого горючего в безграничной атмосфере газообразного окислителя. Модель [1] основана на сопряженной системе уравнений сохранения массы и энергии для сферической капли горючего и окружающего газа, учитывающей конечные скорости протекания всех физико-химических процессов, многокомпонентную диффузию и переменные теплофизические свойства жидкости и газа. Коллективные эффекты в газозвесах учитываются с помощью граничных условий нулевых потоков массы и энергии на поверхности элементарной сферической ячейки (ЭСЯ), окружающей каплю в однородной монодисперсной капельной газозвеси. Давление в системе считается постоянным.

Модель [1] применили к описанию поведения капель в цилиндре двигателя внутреннего сгорания (ДВС), приняв лишь во внимание, что в этом случае необходимо учитывать изменение давления, вызванное как движением поршня (изменение объема камеры сгорания), так и другими процессами, включая межфазный тепло- и массообмен и энерговыделение. Таким образом, в соответствии с моделью [1] считали, что после впрыска жидкости весь объем цилиндра равномерно заполнен монодисперсной капельной газозвесью. Для простоты впрыск жидкости считали мгновенным. Момент впрыска задавали как параметр задачи.

Если, как и в [1], в качестве объекта исследования рассматривать сферическую каплю жидкого горючего с начальным радиусом R_0 , окруженную ЭСЯ радиусом R_c , то изменение объема камеры сгорания можно учесть с помощью заданной зависимости R_c от времени t , определяемой законом движения поршня:

$$R_c(t) = R_{c0} \left[\frac{h_c + h_r(1 + \cos((\pi\nu/30)t))}{h_c + 2hr} \right]^{1/3},$$

где $R_{c0} = R_c(0)$ — начальный радиус ЭСЯ; h_c — размер камеры сгорания; h_r — радиус кривошипа; ν — частота вращения коленчатого вала двигателя.

Давление в цилиндре двигателя $p(t)$ определяли из условия, что массовая скорость газа на поверхности ЭСЯ $u_g(R_c, t)$ совпадает со скоростью изменения $R_c(t)$, т. е. из условия

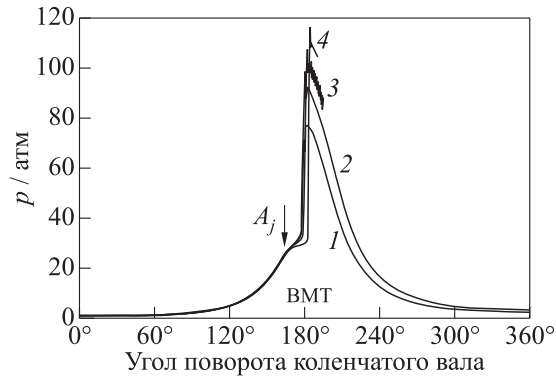


Рис. 1 Расчетные индикаторные диаграммы дизельного процесса. Топливо — н-тетрадекан; радиус капле $R_0 = 10$ мкм; степень сжатия $\epsilon = 13$; $\nu = 1800$ об/мин, начальная температура $T_{in} = 340$ К, начальное давление $p_{in} = 1$ атм; коэффициент избытка горючего Φ : 1 — 0,35; 2 — 0,50; 3 — 0,65; 4 — 1,00; ВМТ — верхняя мертвая точка

$$u_g(R_c, t) = \frac{dR_c}{dt}.$$

которое следует из закона сохранения массы газа в ЭСЯ. Чтобы добиться выполнения этого условия, на каждом временном шаге требовались дополнительные итерации.

Ниже приведено несколько расчетных примеров, демонстрирующих возможности новой вычислительной программы.

На рис. 1 представлены расчетные индикаторные диаграммы — зависимости давления в цилиндре ДВС от угла поворота коленчатого вала (ПКВ) в дизельном процессе при разном количестве впрыскиваемого топлива (Φ — коэффициент избытка горючего). Расчеты проведены с использованием глобального кинетического механизма окисления н-тетрадекана, включающего 10 реакций. Стрелкой на рисунке указан момент впрыска топлива.

На рис. 2 проведено сравнение двух расчетных индикаторных диаграмм НССИ-процесса с применением двух ДКМ окисления и горения н-гептана, опубликованных в [2] и [3].

В работе [4] сообщалось об обнаружении зоны голубых пламен вне (но вблизи) границ области самовоспламенения метана при его

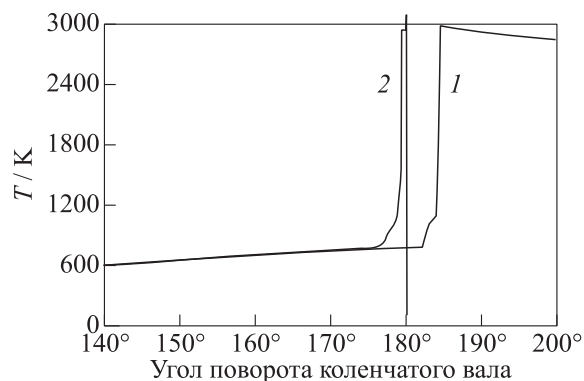


Рис. 2 Расчетные индикаторные диаграммы HCCI-процесса по данным [2] (1) и [3] (2): $\Phi = 1$, $\epsilon = 13$, $\nu = 1800$ об/мин, $T_{in} = 340$ К, $p_{in} = 1$ атм

подаче в ДВС (рис. 3, а). По нашей идентификации «голубые» пламена углеводородов — это предпламенная реакция, инициируемая появлением гидроксильных радикалов OH, возникающими при распаде перекиси водорода H_2O_2 .

Из расчетов (рис. 3, б) видно, что в условиях, близких к области, указанной в [4], действительно появляется и накапливается H_2O_2 , частичный распад которой в зоне с максимальными температурами приводит к появлению OH. Одновременно, и даже несколько ранее, появляется и гидроперекись метила CH_3O_2H , частичный распад которой при высоких температурах также дает гидроксил. Распадом алкилгидроперекиси, как известно, объясняется появление у углеводородов «холодных» пламен.

Из рис. 3, б видно, что оба распада у метана дают один суммарный совмещенный пик концентрации OH. В [5] показано, что у метана «холодные» и «голубые» пламена фактически не разделены. Следовательно, названные авторами [5] «голубые» пламена, появляющиеся в ДВС при сжатии метановоздушных смесей — это еще один пример совмещенного «холодно-голубого» пламени. В этом пламени частично расходуется метан и кислород и появляются продукты, прежде всего CO_2 , CO, H_2O , H_2 , а также ряд промежуточных компонентов.

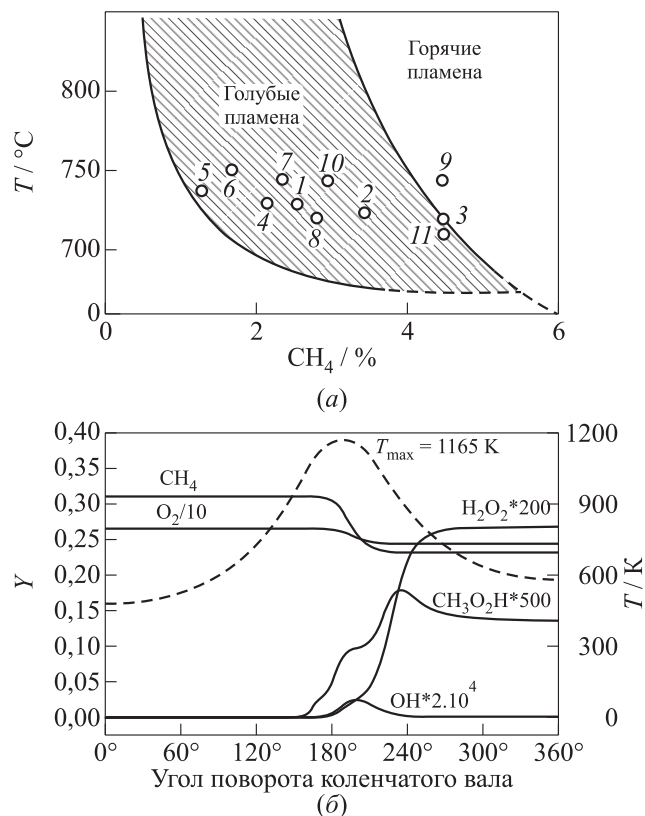


Рис. 3 Границы областей голубых и горячих пламен в смесях метана с воздухом при воспламенении от сжатия [4] (а) и расчетные значения относительных массовых концентраций Y (сплошные кривые) и температуры (штриховая кривая) при воспламенении сжатием метана с воздухом (б): $[\text{CH}_4]_0 = 4,67\%$, $\epsilon = 14,7$, $\nu = 1000$ об/мин, $T_{\text{in}} = 475 \text{ K}$, $p_{\text{in}} = 1 \text{ атм}$

Таким образом, в ИХФ РАН разработана новая вычислительная программа, позволяющая проводить расчеты рабочего процесса в ДВС с дизельным, НССИ и смешанным газодизельным циклом. Важнейшие особенности программы — возможность использования как глобальных, так и детальных кинетических механизмов

окисления горючего и образования вредных веществ и учет влияния коллективных эффектов при самовоспламенении и горении плотных капельных газовзвесей в условиях переменного объема камеры сгорания. Приведено несколько расчетных примеров, демонстрирующих возможности новой вычислительной программы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 11-08-01168 и 11-08-97548-р-центр).

Литература

1. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Моделирование самовоспламенения и горения капель n-гептана с использованием детального кинетического механизма // *Химическая физика*, 2010. Т. 12. № 12. С. 50–59.
2. U.S. Department of Energy, Energy Efficiency and Renewable Energy. Office of Transportation Technologies. 2001. Homogeneous charge compression ignition (HCCI) technology. A Report to the U.S. Congress.
3. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C_1 – C_6 к C_7H_{16} // *Химическая физика*, 2010. Т. 29. № 12. С. 40–49.
4. Gaydon, A. G., N. P. W. Moore, and J. R. Simonson. 1955. Chemical and spectroscopic studies of blue flames in the auto-ignition of methane. *Proc. Soc. Lond. A* 230:1–19.
5. Басевич В. Я., Веденев В. И., Фролов С. М., Романович Л. Б. Холодные и голубые пламена при окислении метана // *Химическая физика*, 2005. Т. 24. № 2. С. 77–81.