

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА ДИЗЕЛЯ С РЕЦИРКУЛЯЦИЕЙ ОТРАБОТАВШИХ ГАЗОВ НА БАЗЕ ДЕТАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ГОРЕНИЯ ТОПЛИВА\*

С. С. Сергеев<sup>1</sup>, С. М. Фролов<sup>2</sup>, В. Я. Басевич<sup>3</sup>, Б. Басара<sup>4</sup>, П. Пришинг<sup>5</sup>

**Аннотация:** Работа посвящена моделированию процесса горения в дизеле, оснащённом системой рециркуляции отработавших газов (ОГ). Предложен алгоритм определения качественного и количественного состава свежей смеси при разбавлении атмосферного воздуха продуктами сгорания. В качестве объекта исследований рассматривается автомобильный дизель на режиме работы с 37%-ным разбавлением атмосферного воздуха продуктами сгорания. Для проверки предложенного алгоритма проведены численные эксперименты на основе трехмерной модели рабочего процесса с применением детального кинетического механизма (ДКМ) окисления и горения *n*-гептана. Проведенная проверка подтвердила корректность предложенного алгоритма и выявила необходимость точного расчета начального состава смеси при моделировании процесса сгорания с рециркуляцией ОГ. Установлено, что рециркуляция ОГ влияет на задержку возникновения горячего взрыва, и прежде всего за счет воздействия на стадию голубого пламени.

**Ключевые слова:** рециркуляция отработавших газов; вычислительная газовая динамика (CFD); детальный кинетический механизм (ДКМ)

DOI: 10.30826/CE19120212

## 1 Введение

Рециркуляция ОГ (Exhaust Gas Recirculation — EGR) — неперенный атрибут большинства современных транспортных дизелей [1], а также некоторых конфигураций бензиновых моторов [2]. Кроме того, система EGR является одной из ключевых частей двигателей с частично-гомогенным процессом сгорания [3–5].

Основное назначение системы — снижение эмиссии оксидов азота, достигаемое, прежде всего, за счет снижения концентрации кислорода в свежем заряде.

Характерно, что в работах, посвященных расчету горения в двигателях с системой EGR, начальный состав свежей смеси, как правило, полностью не приводится [3, 4], а если приводится, то не ука-

зывается метод, на основе которого он был определен [5]. Исходя из этого, можно допустить, что состав смеси определялся либо на основе экспериментальных данных по содержанию продуктов сгорания, либо на основе некоторых гипотетических предположений.

Цели работы — разработка и проверка алгоритма расчета состава свежей смеси, не требующего обращения к экспериментальным данным и позволяющего с приемлемой точностью определить концентрации исходных компонентов в зависимости от заданных параметров режима работы двигателя.

Объект исследований — автомобильный дизель РЕНО рабочим объемом 1,6 л. Параметры режима работы: частота вращения коленчатого вала  $n = 1750 \text{ мин}^{-1}$ ; коэффициент избытка воздуха  $\alpha_{\text{в}} = 2,38$ ; степень рециркуляции ОГ — 37%. Процесс

\*Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение Государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5, и субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0005 «Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем» (номер государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6), а также частично при поддержке РФФИ (проект 16-29-01065офи-м).

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, sergeev.ss@mail.ru

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

<sup>4</sup>АВЛ Лист ГмБХ, Грац, Австрия, branislav.basara@avl.com

<sup>5</sup>АВЛ Лист ГмБХ, Грац, Австрия, peter.priesching@avl.com

топливоподачи разделен во времени на две предварительных и одну основную порции топлива.

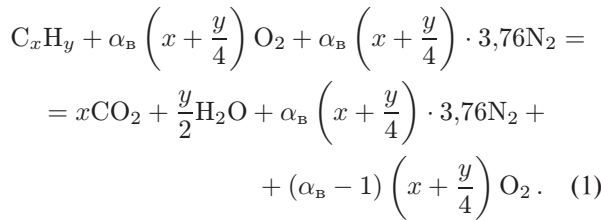
## 2 Алгоритм расчета начального состава воздуха в цилиндре при наличии рециркуляции продуктов сгорания

Состав свежей смеси характеризуется коэффициентом избытка воздуха:

$$\alpha_B = \frac{Q_B}{Q_T L_0},$$

где  $Q_B$  — массовый расход воздуха;  $Q_T$  — массовый расход топлива;  $L_0$  — масса воздуха, необходимая для полного сгорания 1 кг топлива. Величина  $L_0$  зависит от химической формулы топлива и концентрации кислорода в свежей смеси.

В случае, когда  $\alpha_{B_0} > 1,0$ , смесь бедная, уравнение полного сгорания 1 моля топлива выглядит следующим образом:



Согласно стехиометрическому уравнению для бедной смеси, в случае полного сгорания топлива и отсутствия диссоциации продуктов сгорания ОГ состоят из следующих компонентов: кислород ( $O_2$ ), азот ( $N_2$ ), углекислый газ ( $CO_2$ ) и вода ( $H_2O$ ).

Рассмотрим связь между начальной массовой концентрацией кислорода  $[O_2]$  и массовой концентрацией кислорода в продуктах сгорания на основе стехиометрического уравнения (1).

Выпишем соответствующие массовые доли:

$$\begin{aligned} [O_2]_0 &= x_{O_2_0} \frac{M_{O_2}}{\left(\sum x_i M_i\right)_0} = \\ &= \frac{\alpha_B (x + y/4)}{\sum n_{i_0}} \frac{M_{O_2}}{\left(\sum x_i M_i\right)_0}; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} [O_2]_{пр.сг} &= x_{O_2_{пр.сг}} \frac{M_{O_2}}{\left(\sum x_i M_i\right)_{пр.сг}} = \\ &= \frac{(\alpha_B - 1) (x + y/4)}{\sum n_{i_{пр.сг}}} \frac{M_{O_2}}{\left(\sum x_i M_i\right)_{пр.сг}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $x_{O_2_0}$  — мольная доля кислорода в свежей смеси;  $\sum n_{i_0}$  — суммарное количество молей исходных компонентов;  $\left(\sum x_i M_i\right)_0$  — мольная масса свежей смеси;  $\sum n_{i_{пр.сг}}$  — суммарное количество молей продуктов реакции;  $\left(\sum x_i M_i\right)_{пр.сг}$  — мольная масса продуктов в реакции (1);  $M_{O_2}$  — молярная масса кислорода.

Пренебрегая утечками газа через поршневые кольца, считаем, что масса газа в цилиндре в ходе тактов сжатия и расширения не изменяется, тогда

$$\sum n_{i_{пр.сг}} \left(\sum x_i M_i\right)_{пр.сг} = \sum n_{i_0} \left(\sum x_i M_i\right)_0.$$

Разделив (3) на (2) и проведя преобразования, получим:

$$[O_2]_{пр.сг} = [O_2]_0 \left(1 - \frac{1}{\alpha_B}\right). \quad (4)$$

Проверка выражения: в случае стехиометрической смеси ( $\alpha_B = 1,0$ )  $[O_2]_{пр.сг} = 0$ .

При включении системы рециркуляции часть потока ОГ ( $Q_{пр.сг.р}$ ) возвращается обратно в цилиндр (рис. 1), снижая таким образом концентрацию кислорода в свежей смеси за счет разбавления атмосферного воздуха продуктами сгорания.

Степень рециркуляции (EGR) определяется отношением расхода рециркулируемых газов к полному расходу воздушной смеси на впуске:

$$EGR = \frac{Q_{пр.сг.р}}{Q_B + Q_{пр.сг.р}}.$$

Новое значение концентрации кислорода в цилиндре при подводе продуктов сгорания получается из соотношения расходов чистого воздуха и рециркулируемых газов:

$$[O_2]_0 = [O_2]_B (1 - EGR) + [O_2]_{пр.сг} EGR. \quad (5)$$

Вследствие снижения концентрации кислорода в воздушном заряде в цилиндре установится новое

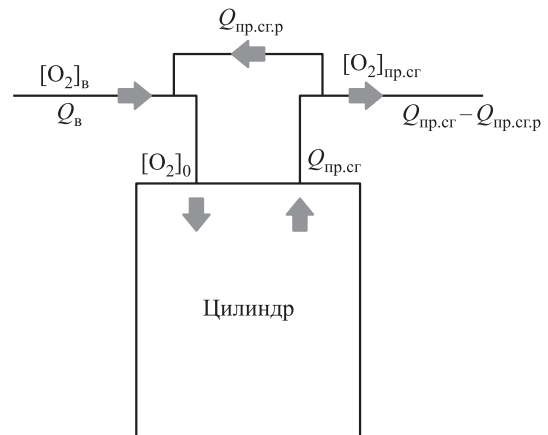


Рис. 1 Схема процесса рециркуляции отработавших газов

значение коэффициента избытка воздуха, которое пропорционально отношению начальных концентраций воздуха в новом и в предыдущем цикле:

$$\alpha_{\text{ВЕGR}} = \alpha_{\text{В}} \frac{[\text{O}_2]_0}{[\text{O}_2]_{\text{В}}} = \alpha_{\text{В}} \frac{[\text{O}_2]_{\text{В}} (1 - \text{EGR}) + [\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} \text{EGR}}{[\text{O}_2]_{\text{В}}}. \quad (6)$$

В связи с тем что значение коэффициента избытка воздуха изменилось, выражение (4) нужно уточнить:

$$[\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} = [\text{O}_2] \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{ВЕGR}}} \right). \quad (7)$$

Теперь значение  $[\text{O}_2]_{\text{пр.сг}}$  известно и можно вычислить начальную концентрацию кислорода в цилиндре по (5). Однако на основе (7) можно заметить, что после первого цикла с рециркуляцией концентрация кислорода в продуктах сгорания станет меньше, чем в цикле, когда продукты сгорания в свежей смеси отсутствовали.

Проведем такую оценку для рассматриваемого режима работы. Основные параметры режима:  $\alpha_{\text{В}} = 2,3$ ;  $\text{EGR} = 0,37$ ;  $[\text{O}_2]_{\text{В}} = 0,231$ .

1. Цикл без рециркуляции ОГ:

$$\begin{aligned} [\text{O}_2]_0 &= [\text{O}_2]_{\text{В}}; \\ [\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} &= [\text{O}_2]_0 \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{В}}} \right) = \\ &= 0,231 \left( 1 - \frac{1}{2,38} \right) = 0,134. \end{aligned}$$

2. Первый цикл с рециркуляцией ОГ:

$$\begin{aligned} [\text{O}_2]_0 &= [\text{O}_2]_{\text{В}} (1 - \text{EGR}) + [\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} \text{EGR} = \\ &= 0,231(1 - 0,37) + 0,134 \cdot 0,37 = 0,195; \\ \alpha_{\text{ВЕGR}} &= \alpha_{\text{В}} \frac{[\text{O}_2]_0}{[\text{O}_2]_{\text{В}}} = 2,38 \cdot \frac{0,195}{0,231} = 2,01; \\ [\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} &= [\text{O}_2]_0 \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{ВЕGR}}} \right) = \\ &= 0,195 \left( 1 - \frac{1}{2,01} \right) = 0,098. \end{aligned}$$

Итак, содержание кислорода в продуктах сгорания после первого цикла с рециркуляцией снизилось на 3,6%. Для следующего, второго, цикла с рециркуляцией начальное содержание кислорода будет

$$\begin{aligned} [\text{O}_2]_0 &= [\text{O}_2]_{\text{В}} (1 - \text{EGR}) + [\text{O}_2]_{\text{пр.сг}} \text{EGR} = \\ &= 0,231 \cdot (1 - 0,37) + 0,098 \cdot 0,37 = 0,182, \end{aligned}$$

что на 1,3% меньше, чем в первом цикле с рециркуляцией.

Аналогичные вычисления были проведены еще для 7 циклов с рециркуляцией отработавших газов. С каждым новым циклом разница с предыдущим циклом сокращалась:  $[\text{O}_2]_0^0 = 0,231$ ;  $[\text{O}_2]_0^1 = 0,195$ ;  $[\text{O}_2]_0^2 = 0,182$ ;  $[\text{O}_2]_0^3 = 0,177$ ;  $[\text{O}_2]_0^4 = 0,175$ ;  $[\text{O}_2]_0^5 = 0,1743$ ;  $[\text{O}_2]_0^6 = 0,1740$ ;  $[\text{O}_2]_0^7 = 0,1739$ , т. е. получили, что при данных параметрах режима работы устанавливается начальная концентрация кислорода, примерно равная  $[\text{O}_2]_0 = 0,174$ .

Если в выражениях (5)–(7) принять, что  $[\text{O}_2]_0$  — установившаяся концентрация воздуха в цилиндре, а  $\alpha_{\text{ВЕGR}}$  — установившееся значение коэффициента избытка воздуха, можно получить выражение для  $[\text{O}_2]_0$ , позволяющее исключить проведение приведенных выше оценок:

$$[\text{O}_2]_0 = [\text{O}_2]_{\text{В}} \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{В}}} \frac{\text{EGR}}{1 - \text{EGR}} \right), \quad (8)$$

где  $\alpha_{\text{В}}$  — значение коэффициента избытка воздуха в отсутствие рециркуляции ОГ.

Проверим это выражение для рассматриваемого случая:

$$[\text{O}_2]_0 = 0,231 \cdot \left( 1 - \frac{1}{2,38} \cdot \frac{0,37}{1 - 0,37} \right) = 0,173997.$$

Теперь необходимо рассчитать концентрации остальных компонентов свежей смеси. Принимая, что  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$  в атмосферном воздухе отсутствуют, получим:

$$[\text{CO}_2]_0 = [\text{CO}_2]_{\text{пр.сг}} \text{EGR};$$

$$[\text{H}_2\text{O}]_0 = [\text{H}_2\text{O}]_{\text{пр.сг}} \text{EGR}.$$

Теперь на основе уравнения (1) составим уравнение полного сгорания топлива при наличии рециркуляции:

$$\begin{aligned} C_x H_y + \alpha_{\text{ВЕGR}} \left( x + \frac{y}{4} \right) \text{O}_2 + \alpha_{\text{В}} \left( x + \frac{y}{4} \right) \cdot 3,76 \text{N}_2 + \\ + k \text{EGR} x \text{CO}_2 + k \text{EGR} \frac{y}{2} \text{H}_2\text{O} = \\ = k(1 + \text{EGR})x \text{CO}_2 + k(1 + \text{EGR}) \frac{y}{2} \text{H}_2\text{O} + \\ + \alpha_{\text{В}} \left( x + \frac{y}{4} \right) \cdot 3,76 \text{N}_2 + (\alpha_{\text{ВЕGR}} - 1) \left( x + \frac{y}{4} \right) \text{O}_2. \end{aligned}$$

Здесь принято, что число молекул  $\text{N}_2$  в системе остается неизменным. Снижение концентрации кислорода учитываем за счет замены  $\alpha_{\text{В}}$  на  $\alpha_{\text{ВЕGR}}$ , а рост концентрации  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$  при снижении

содержания  $O_2$  в цилиндре учитываем за счет коэффициента  $k$ .

На основе (6) и (8) для  $\alpha_{\text{ВЕGR}}$  можно записать:

$$\alpha_{\text{ВЕGR}} = \alpha_{\text{В}} \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{В}}} \frac{\text{EGR}}{1 - \text{EGR}} \right).$$

Коэффициент  $k$  можно вычислить через суммарное число молей исходных компонентов:

$$\begin{aligned} \sum n_{i_0}^{\text{EGR}} &= 1 + \alpha_{\text{ВЕGR}} \left( x + \frac{y}{4} \right) + \\ &+ \alpha_{\text{В}} \left( x + \frac{y}{4} \right) \cdot 3,76 + k \text{EGR} x + k \text{EGR} \frac{y}{2}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} k &= \frac{1}{\text{EGR} (x + y/2)} \left( \sum n_{i_0}^{\text{EGR}} - 1 - \right. \\ &\left. - \alpha_{\text{ВЕGR}} \left( x + \frac{y}{4} \right) - \alpha_{\text{В}} \left( x + \frac{y}{4} \right) \cdot 3,76 \right). \end{aligned}$$

Здесь суммарное количество молей  $\sum n_{i_0}^{\text{EGR}}$  (предполагаемое, которое установится в результате смешения чистого воздуха и продуктов сгорания) может быть вычислено по аналогии с уравнениями (3):

$$\sum n_{i_0}^{\text{EGR}} = \sum n_{i_0} (1 - \text{EGR}) + \sum n_{i_{\text{нп.ср}}} \text{EGR}.$$

В этом выражении  $\sum n_{i_0}$  и  $\sum n_{i_{\text{нп.ср}}}$  рассчитываются по уравнению (1).

Теперь неизвестные величины в уравнении (4) определены и можно вычислить концентрации всех компонентов свежей смеси при наличии рециркуляции ОГ.

### 3 Пример расчета

Проведем такой расчет для рассматриваемого режима работы ( $\text{EGR} = 0,37$ ,  $\alpha_{\text{В}} = 2,38$ ), принимая, что химическая формула топлива  $C_xH_y = C_7H_{16}$  (*n*-гептан).

Уравнение полного сгорания без рециркуляции ОГ:

$$\begin{aligned} C_7H_{16} + 2,38 \cdot 11O_2 + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76N_2 = \\ = 7CO_2 + 8H_2O + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76 \cdot N_2 + 1,38 \cdot 11O_2. \end{aligned}$$

Суммарное число молей исходных компонентов:

$$\begin{aligned} \sum n_{i_0} &= 1 + 2,38 \cdot 11 + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76 = 125,6; \\ \sum n_{i_{\text{нп.ср}}} &= 7 + 8 + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76 + 1,47 \cdot 11 = \\ &= 128,6. \end{aligned}$$

Предполагаемое суммарное число молей при наличии рециркуляции:

$$\begin{aligned} \sum n_{i_0}^{\text{EGR}} &= \sum n_{i_0} (1 - \text{EGR}) + \sum n_{i_{\text{нп.ср}}} \text{EGR} = \\ &= 125,6 \cdot 0,63 + 128,6 \cdot 0,37 = 126,7. \end{aligned}$$

Новое значение коэффициента избытка воздуха:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{ВЕGR}} &= \alpha_{\text{В}} \left( 1 - \frac{1}{\alpha_{\text{В}}} \frac{\text{EGR}}{1 - \text{EGR}} \right) = \\ &= 2,38 \left( 1 - \frac{1}{2,38} \cdot \frac{0,37}{1 - 0,37} \right) = 1,792. \end{aligned}$$

Значение коэффициента  $k$ :

$$k = \frac{126,7 - 1 - 1,792 \cdot 11 - 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76}{0,37(7 + 8)} = 1,364.$$

Стехиометрическое уравнение полного сгорания с учетом рециркуляции ОГ:

$$\begin{aligned} C_7H_{16} + 1,792 \cdot 11O_2 + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76N_2 + \\ + 1,364 \cdot 0,37 \cdot 7CO_2 + 1,364 \cdot 0,37 \cdot 8H_2O = \\ = 1,364 \cdot (1 + 0,37) \cdot 7CO_2 + 1,364 \cdot (1 + 0,37) \cdot 8H_2O + \\ + 2,38 \cdot 11 \cdot 3,76N_2 + 1,792 \cdot 11O_2. \end{aligned}$$

Топливо поступает в цилиндр только в конце такта сжатия, поэтому для расчета концентраций исходных компонентов необходимо рассмотреть смесь  $19,7O_2 + 98,4N_2 + 3,53CO_2 + 4,04H_2O$ .

Мольные доли:

$$x_{O_2} = \frac{19,7}{126,7} = 0,155;$$

$$x_{N_2} = \frac{98,4}{126,7} = 0,778;$$

$$x_{CO_2} = \frac{3,53}{126,7} = 0,028;$$

$$x_{H_2O} = \frac{4,04}{126,7} = 0,032.$$

Средняя молярная масса смеси:

$$\begin{aligned} \left( \sum x_i M_i \right)_0 &= 0,155 \cdot 32 + 0,778 \cdot 28 + 0,028 \cdot 44 + \\ &+ 0,032 \cdot 18 = 28,53. \end{aligned}$$

Массовые доли компонентов:

$$[O_2]_0 = 0,155 \cdot \frac{32}{28,53} = 0,1745;$$

$$[N_2]_0 = 0,778 \cdot \frac{28}{28,53} = 0,7624;$$

$$[\text{CO}_2]_0 = 0,028 \cdot \frac{44}{28,53} = 0,0430;$$

$$[\text{H}_2\text{O}]_0 = 0,032 \cdot \frac{18}{28,53} = 0,0201.$$

Значение концентрации  $[\text{O}_2]_0$  получилось несколько выше, чем при расчете по формуле (8), что объясняется приближенным методом расчета  $\sum n_{i_0}^{\text{EGR}}$ .

## 4 Проверка алгоритма

Для проверки алгоритма и изучения влияния способа учета рециркуляции ОГ провели численный эксперимент, в котором выполнили последовательные трехмерные расчеты рабочего процесса на базе ДКМ для пяти циклов двигателя.

Для сокращения времени счета одного варианта рассматривали сегментную модель камеры сгорания (КС) (1/7 часть в соответствии с количеством сопловых отверстий форсунки), предполагая, что процесс сгорания протекает осесимметрично. Для учета объемов технологических выточек в поршне и в головке блока цилиндров сетку дополнили так называемым компенсационным объемом (КО). В соответствии с [6, 7] КО предпочтительнее размещать над поршнем, чтобы та часть воздушного заряда, которая сосредоточена в технологических выточках, гарантированно участвовала в процессе горения. При таком размещении КО расчетный режим работы двигателя воспроизводится более корректно, чем при размещении КО вдоль стенки цилиндра.

Расчетная сетка подвижная: нижняя стенка (огневая поверхность поршня) с профилированной выемкой движется возвратно-поступательно из нижней мертвой точки (НМТ) в верхнюю мертвую точку (ВМТ). Такты впуска и выпуска не моделируются. Расчеты начинаются в момент закрытия впускного клапана ( $35^\circ$  после НМТ) и заканчиваются в момент открытия выпускного клапана ( $40^\circ$  до НМТ). Начальное давление в цилиндре задается на основе экспериментальной индикаторной диаграммы, начальная температура воздуха рассчитывается через уравнение состояния идеального газа. Начальная закрутка впускного воздуха задается по закону вращения твердого тела, а ее значение получено из эксперимента по статической продувке головки блока цилиндров при максимальном подьеме впускных клапанов. Используется экспериментальная характеристика впрыскивания с учетом временной задержки между электрическим сигналом на управляющий клапан форсунки и ходом иглы форсунки.

В основу расчетов положены осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье–Стокса с применением  $k-\xi-f$ -модели турбулентности [8]. Выбор модели турбулентности основан на результатах сравнения с результатами LES (large eddy simulation, метод крупных вихрей) при аэродинамических (без горения) расчетах КС [6]. Конвективный перенос в законе сохранения массы аппроксимируется центральной разностью, в законе сохранения количества движения — схемой TVD (total variation diminishing) с лимитером MINMOD, а для конечно-объемной аппроксимации всех других уравнений используется стандартная схема UPWIND первого порядка.

Для моделирования горения используется квазиламинарная модель без явного выделения фронта пламени. Влияние турбулентных пульсаций на среднюю скорость химических превращений не учитывается. В модели горения каждая расчетная ячейка рассматривается как реактор идеального смешения. Для расчета движения, испарения и дробления капель жидкого топлива используется лагранжев метод пробных частиц. Расчет испарения капель основан на модели, разработанной в ИХФ РАН [9] с добавлением поправок, учитывающих эффект внутренней циркуляции жидкости в капле [10] и нестационарность температурного поля в газе, окружающем каплю [11]. Распад струи на капли и вторичное дробление капель описываются с помощью модели WAVE [12]. Начальный диаметр капель принимается равным диаметру соплового отверстия форсунки (120 мкм).

Шаг интегрирования по времени ( $\Delta\varphi = 0,1$  ПКВ (поворота коленчатого вала) на стадии впрыскивания и горения топлива) и средний размер ячеек сетки (рис. 2) выбирался исходя из условия, чтобы развитие реакции в очагах самовоспламенения прошло через все характерные стадии [13].

Численная реализация расчетной модели осуществляется в пакете AVL FIRE с использованием ДКМ окисления *n*-гептана ( $n\text{-C}_{17}\text{H}_{16}$ ) [14].

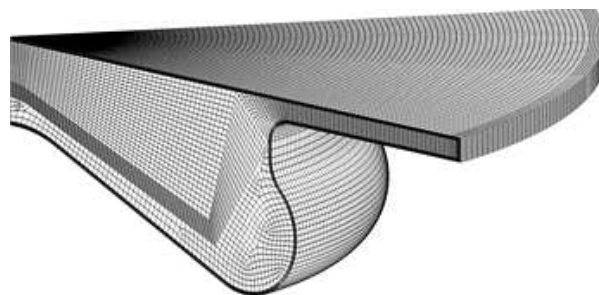


Рис. 2 Разбивка сегмента КС на контрольные объемы (274 000 ячеек в ВМТ, средний размер ячеек — 0,4 мм)

Массовые доли исходных компонентов и продуктов сгорания

Компонент	$EGR = 0\%$		$EGR = 37\%$							
	Цикл 0		Цикл 1		Цикл 2		Цикл 3		Цикл 4	
	$Y_{i_0}$	$Y_{i_{np.cr}}$	$Y_{i_0}$	$Y_{i_{np.cr}}$	$Y_{i_0}$	$Y_{i_{np.cr}}$	$Y_{i_0}$	$Y_{i_{np.cr}}$	$Y_{i_0}$	$Y_{i_{np.cr}}$
O <sub>2</sub>	<b>23,0</b>	13,0	<b>19,4</b>	9,5	<b>18,1</b>	8,2	<b>17,6</b>	7,8	<b>17,4</b>	—
N <sub>2</sub>	<b>77,0</b>	74,8	<b>76,1</b>	74,2	<b>75,4</b>	74,0	<b>75,8</b>	73,8	<b>75,7</b>	—
H <sub>2</sub> O	—	3,8	<b>1,4</b>	5,2	<b>1,9</b>	5,6	<b>2,1</b>	5,9	<b>2,2</b>	—
CO <sub>2</sub>	—	8,1	<b>3,0</b>	11,0	<b>4,1</b>	12,1	<b>4,5</b>	12,5	<b>4,6</b>	—
NO <sub>x</sub>	—	0,24	—	0,073	—	0,0386	—	0,031	—	—
CO	—	0,0045	—	0,0048	—	0,0063	—	0,0066	—	—

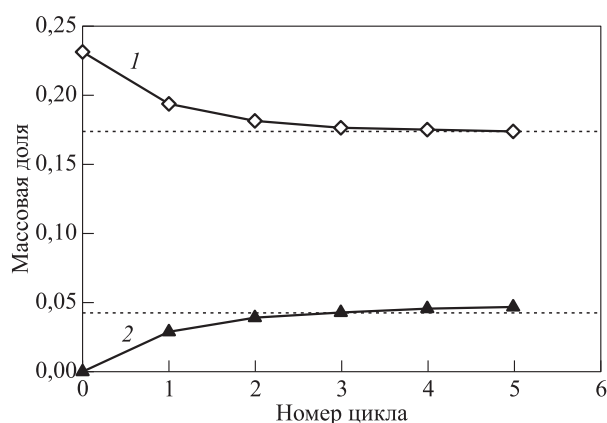


Рис. 3 Начальные массовые доли кислорода (1) и углекислого газа (2) в цилиндре

Первый цикл рассчитывался без рециркуляции продуктов сгорания, в следующих четырех циклах моделировался подвод ОГ фиксированного количества, причем начальные концентрации компонентов в каждом новом цикле рассчитывали через

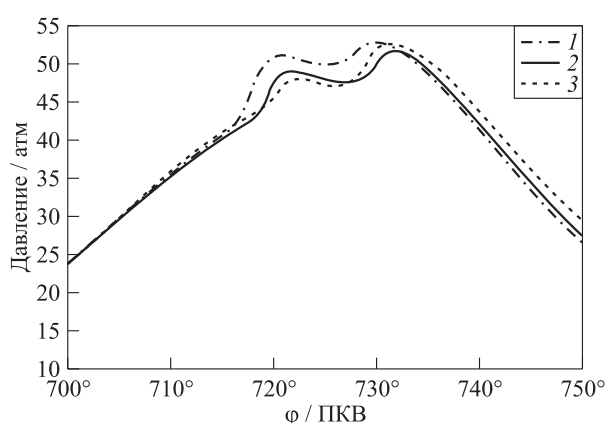
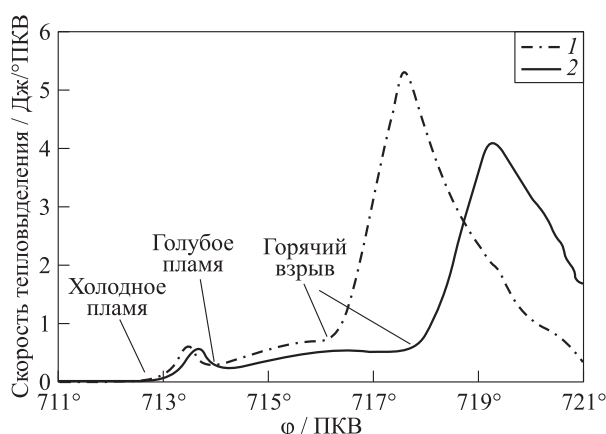
значения концентраций продуктов на предыдущем цикле по зависимости

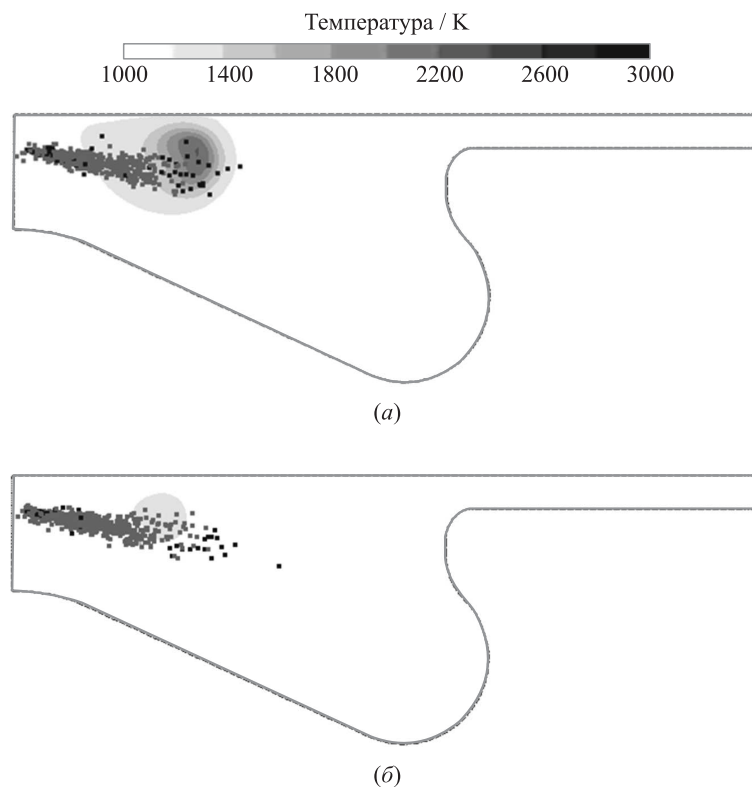
$$Y_{i_0} = Y_{i_v}(1 - EGR) + Y_{i_{np.cr}} EGR.$$

В таблице представлены значения массовых долей исходных компонентов и продуктов сгорания в пяти последовательных циклах. Таблицу дополнили расчетными концентрациями продуктов неполного сгорания — оксида углерода и оксида азота в цилиндре двигателя. Видно, что концентрации продуктов неполного сгорания пренебрежимо малы и предположение о полном сгорании топлива оправдано.

На рис. 3 проведено сравнение результатов расчета по предложенному алгоритму (пунктирные линии) с результатами численного эксперимента. Значения, полученные в результате численного эксперимента, стремятся к величинам, рассчитанным по предложенным зависимостям.

На рис. 4–6 приведены результаты расчетов рабочего процесса при различных начальных составах воздуха в КС. В первом случае (расчет *a*) концент-


 Рис. 4 Влияние начального состава воздуха в КС на изменение среднего давления в цилиндре: 1 — расчет (а) (19,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,1%(масс.)N<sub>2</sub> / 3,0%(масс.)CO<sub>2</sub> / 1,4%(масс.)H<sub>2</sub>O); 2 — расчет (б) (17,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,2%(масс.)N<sub>2</sub> / 4,3%(масс.)CO<sub>2</sub> / 2,1%(масс.)H<sub>2</sub>O); 3 — эксперимент

 Рис. 5 Влияние начального состава воздуха в КС на скорость тепловыделения: 1 — расчет (а) (19,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,1%(масс.)N<sub>2</sub> / 3,0%(масс.)CO<sub>2</sub> / 1,4%(масс.)H<sub>2</sub>O); 2 — расчет (б) (17,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,2%(масс.)N<sub>2</sub> / 4,3%(масс.)CO<sub>2</sub> / 2,1%(масс.)H<sub>2</sub>O)



**Рис. 6** Воспламенение паров топлива — местные температуры. Начальный состав воздуха в цилиндре: 1 — расчет (а) (19,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,1%(масс.)N<sub>2</sub> / 3,0%(масс.)CO<sub>2</sub> / 1,4%(масс.)H<sub>2</sub>O); 2 — расчет (б) (17,4%(масс.)O<sub>2</sub> / 76,2%(масс.)N<sub>2</sub> / 4,3%(масс.)CO<sub>2</sub> / 2,1%(масс.)H<sub>2</sub>O)

рации компонентов были рассчитаны на основе допущения, что концентрация кислорода в продуктах сгорания при наличии рециркуляции такая же, как и при ее отсутствии. Этот случай соответствует циклу № 1 из таблицы. Во втором случае (расчет б) концентрации компонентов были взяты из результатов рассмотренного выше примера.

Экспериментальная кривая давления 3 (см. рис. 4) характеризуется двумя максимумами. На рассматриваемом режиме работы производится многократное впрыскивание топлива (две предварительных и одна основная порция). Первый подъем кривой представляет собой горение малых предварительных порций, а второй — воспламенение основной массы впрыскиваемого топлива. В первом случае (расчет а) получено завышенное значение давления в цилиндре на стадии горения предварительных порций и более раннее достижение максимального давления сгорания. Во втором расчете (расчет б) совпадение с экспериментом значительно лучше.

На рис. 5 показаны стадии самовоспламенения паров топлива предварительных порций. Снижение концентрации кислорода в цилиндре способствует незначительному смещению вспышки хо-

лодного пламени и более затянутой стадии голубого пламени с меньшей скоростью тепловыделения.

Снижение тепловыделения на стадии голубого пламени способствует смещению момента возникновения горячего пламени. В момент времени  $\varphi = 717^\circ$  ПКВ (см. рис. 6) в расчете а уже возник очаг горячего пламени, в то время как в расчете б горение паров предварительных порций все еще идет на стадии голубого пламени.

Таким образом, проведенная проверка подтверждает корректность предложенного алгоритма и выявляет необходимость точного расчета начального состава смеси при моделировании процесса сгорания с рециркуляцией ОГ.

## 5 Заключение

Предложен алгоритм определения качественного и количественного состава свежей смеси для расчета рабочего процесса двигателей, оснащенных системой рециркуляции ОГ. Установлено значительное влияние начальных концентраций компонентов свежего заряда на стадии самовоспламенения струй топлива. Проведенная проверка подтвердила корректность предложенного ал-

горитма и выявила необходимость точного расчета начального состава смеси при моделировании процесса сгорания в двигателях с системой рециркуляции ОГ. Установлено, что рециркуляция ОГ влияет на задержку возникновения горячего взрыва, и прежде всего за счет воздействия на стадию гомологического пламени.

## Литература

1. Reif K. Dieselmotor-Management. Systeme, Komponenten, Steuerung und Regelung. — Springer Vieweg, 2012. 545 p.
2. Merker G., Schwarz C., Teichmann R. Grundlagen Verbrennungsmotoren. Funktionsweise, Simulation, Messtechnik. — Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2012. 823 p.
3. Diwakar R., Singh S. NOx and soot reduction in diesel engine premixed charge compression ignition combustion: A computational investigation // Int. J. Engine Res., 2008. Vol. 9. doi: 10.1243/14680874JER00308.
4. Shuai S., Abani N., Yoshikawa T., Reitz R. D., Park S. W. Simulating low temperature diesel combustion with improved spray models // Int. J. Therm. Sci., 2009. Vol. 48. P. 1786–1799. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2009.01.011.
5. Zehni A., Saray R. K., Poorghasemi K. Numerical comparison of PCCI combustion and emission of diesel and biodiesel fuels at low load conditions using 3D-CFD models coupled with chemical kinetics // Appl. Therm. Eng., 2017. Vol. 110. P. 1483–1499. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2016.09.056.
6. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басара Б. Численное моделирование сгорания и образования вредных веществ в цилиндре дизеля с применением детального кинетического механизма окисления n-гептана // Горение и взрыв, 2017. Т. 10. № 2. С. 26–34.
7. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басара Б. Расчет сгорания в дизеле с применением детального кинетического механизма окисления топлива // Сб. докл. V Минского Международного коллоквиума по физике ударных волн, горения и детонации. — Минск: Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, 2017. С. 157–158.
8. Hanjalic K., Popovac M., Hadziabdic M. A robust near wall elliptic relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD // Int. J. Heat Fluid Fl., 2004. No. 25. P. 897–901.
9. Frolov S. M., Frolov F. S., Basara B. Simple model of transient drop vaporization // J. Russ. Laser Res., 2006. Vol. 27. No. 6. P. 562–574.
10. Сметанюк В. А., Фролов С. М. Испарение и горение капли углеводородного топлива. III. Прогрев капли в газовом потоке с учетом внутренних движений жидкости // Хим. физика, 2004. Т. 23. № 7. С. 40–48.
11. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Нестационарный теплообмен металлических частиц с газом // Хим. физика, 2006. Т. 25. № 11. С. 17–24.
12. Reitz R. D. Mechanism of atomization processes in high pressure vaporizing spray // Atomisation Spray Technology, 1987. No. 3. P. 309–337.
13. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басевич В. Я., Басара Б., Пришинг П. Моделирование процессов смесеобразования и сгорания в дизеле с применением детального кинетического механизма окисления горючего // Горение и взрыв, 2018. Т. 11. № 2. С. 88–98. doi: 10.30826/CE18110212.
14. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C<sub>1</sub>–C<sub>10</sub> к C<sub>11</sub>–C<sub>16</sub> // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.

Поступила в редакцию 18.01.19

# MODELING OF THE DIESEL-ENGINE OPERATION PROCESS WITH EXHAUST GAS RECIRCULATION ON THE BASIS OF A DETAILED KINETIC MECHANISM OF FUEL COMBUSTION

S. S. Sergeev<sup>1</sup>, S. M. Frolov<sup>1,2,3</sup>, V. Ya. Basevich<sup>1</sup>, B. Basara<sup>4</sup>, and P. Priesching<sup>4</sup>

<sup>1</sup>N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation

<sup>3</sup>Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation

<sup>4</sup>AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria

**Abstract:** The work is devoted to the combustion process modeling in engines equipped with the exhaust recirculation system. An approach for calculating the fresh mixture composition, when the atmospheric air is diluted with the combustion products, is suggested. The object of investigations is a passenger car diesel engine in an operation



mode with 37% air dilution with combustion products. To verify the suggested approach, numerical experiments are performed on the basis of three-dimensional model of the operation process in combination with the detailed reaction mechanism of *n*-heptane oxidation and combustion. The verification confirmed the corrections of the suggested approach and highlighted that the accurate estimation of initial air composition is necessary for the adequate modeling of the operation process of the engines with exhaust gas recirculation.

**Keywords:** diesel; CFD; detailed reaction mechanism; multistage self-ignition

**DOI:** 10.30826/CE19120212

## Acknowledgments

This work was supported by the subsidy given to the N.N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences to implement the state assignment on the topic No.0082-2016-0011 “Fundamental studies of conversion processes of energetic materials and development of scientific grounds of controlling these processes” (Registration No. AAAA-A17-117040610346-5) and to the Scientific Research Institute for System Analysis to implement the state assignment on the topic No. 0065-2019-0005 “Mathematical modeling of dynamic processes in deformed and reactive media using multiprocessor computational systems” (Registration No. AAAA-A19-119011590092-6), and partly by the Russian Foundation for Basic Research (project 16-29-01065ofi-m).

## References

1. Reif, K. 2012. Dieselmotor-Management. Systeme, Komponenten, Steuerung und Regelung. Springer Vieweg. 545 p.
2. Merker, G., C. Schwarz, and R. Teichmann. 2012. *Grundlagen Verbrennungsmotoren. Funktionsweise, Simulation, Messtechnik*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag. 823 p.
3. Diwakar, R., and S. Singh. 2008. NOx and soot reduction in diesel engine premixed charge compression ignition combustion: A computational investigation. *Int. J. Engine Res.* 9. doi: 10.1243/14680874JER00308.
4. Shuai, S., N. Abani, T. Yoshikawa, R. D. Reitz, and S. W. Park. 2009. Simulating low temperature diesel combustion with improved spray models. *Int. J. Therm. Sci.* 48:1786–1799. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2009.01.011.
5. Zehni, A., R. K. Saray, and K. Poorghasemi. 2017. Numerical comparison of PCCI combustion and emission of diesel and biodiesel fuels at low load conditions using 3D-CFD models coupled with chemical kinetics. *Appl. Therm. Eng.* 110:1483–1499. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2016.09.056.
6. Sergeev, S. S., S. M. Frolov, and B. Basara. 2017. Chislennoe modelirovanie sgoraniya i obrazovaniya vrednykh veschestv v tsilindre dizelya s primeneniem detal'nogo kineticheskogo mekhanizma okisleniya *n*-geptana [Numerical modeling of combustion and pollutants formation in cylinder of diesel using a detailed kinetic mechanism of *n*-heptane oxidation]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 10(2):26–34.
7. Sergeev, S. S., S. M. Frolov, and B. Basara. 2017. Raschet sgoraniya v dizele s primeneniem detal'nogo kineticheskogo mekhanizma okisleniya topliva [Calculation of combustion in a diesel engine using a detailed kinetic mechanism of fuel oxidation]. *5th Minsk Colloquium (International) on Physics of Shock Waves, Combustion and Detonation Proceedings*. Minsk: A. V. Luikov Institute of Heat and Mass Transfer of the National Academy of Sciences of Republic of Belarus. 157–158.
8. Hanjalic, K., M. Popovac, and M. Hadziabdic. 2004. A robust near wall elliptic relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD. *Int. J. Heat Fluid Fl.* 25:897–901.
9. Frolov, S. M., F. S. Frolov, and B. Basara. 2006. Simple model of transient drop vaporization. *J. Russ. Laser Res.* 27(6):562–574.
10. Smetanyuk, V. A., and S. M. Frolov. 2004. Isparenie i gorenie kapli uglevodorodnogo topliva. III. Progreiv kapli v gazovom potoke s uchetom vnutrennikh dvizheniy zhidkosti [Evaporation and combustion of hydrocarbon fuel droplet. Part III. Droplet heating in gas flow with regard for internal liquid circulation]. *Khim. Fiz.* 23(7):40–48.
11. Avdeev, K. A., F. S. Frolov, and S. M. Frolov. 2006. Nestatsionarnyy teploobmen metallicheskih chastits s gazom [Nonstationary heat transfer of metal particles with gas]. *Khim. Fiz.* 25(11):17–24.
12. Reitz, R. D. 1987. Mechanism of atomization processes in high pressure vaporizing spray. *Atomisation Spray Technology* 3:309–337.
13. Sergeev, S. S., S. M. Frolov, V. Ya. Basevich, B. Basara, and P. Priesching. 2018. Modelirovanie protsessov smeseobrazovaniya i sgoraniya v dizele s primeneniem detal'nogo kineticheskogo mekhanizma okisleniya goryuchego [Modeling of mixture formation and combustion processes in diesel engine using a detailed kinetic mechanism of fuel oxidation]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 11(2):88–98. doi: 10.30826/CE18110212.
14. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and S. M. Frolov. 2013. Mechanisms of the oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons: Transition from C<sub>1</sub>–C<sub>10</sub> to C<sub>11</sub>–C<sub>16</sub>. *Russ. J. Phys. Chem. B* 7(2):161–169.

Received January 18, 2019

## Contributors

**Sergeev Sergey S.** (b. 1985) — Candidate of Science in technology, senior research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; sergeev.ss@mail.ru

**Frolov Sergey M.** (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

**Basevich Valentin Ya.** (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; basevich@chph.ras.ru

**Basara Branislav** (b. 1964) — PhD, Doctor hab., Chief Developer, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; branislav.basara@avl.com

**Priesching Peter** (b. 1971) — PhD, Senior Project Leader, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; peter.priesching@avl.com