

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И n-ГЕПТАНА С ВОЗДУХОМ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЯХ С ИСКРОВЫМ ЗАЖИГАНИЕМ

А.П. Сеначин, П.К. Сеначин

Проведена верификация сокращенного механизма детальной химической кинетики смесей изооктана и n-гептана с воздухом в гомогенном реакторе постоянного объема и приведены результаты численного моделирования пределов самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в двигателе с искровым зажиганием в фазовой плоскости частота вращения – угол зажигания при варьировании степени сжатия

Ключевые слова: поршневой двигатель с искровым зажиганием; гомогенный реактор; фронт пламени; самовоспламенение; стук и детонация; детальная кинетика; численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

В двигателях внутреннего сгорания (ДВС) с искровым зажиганием со времени их создания уже более 100 лет существует так называемая проблема стука или детонации, которая до настоящего времени по большому счету не решена. Это явление возникает при форсировании двигателя с целью увеличения мощности или индикаторного коэффициента полезного действия. Явление проявляется в виде отдельных чередующихся или непрерывных металлических стуков, обусловленных возбуждением ударных волн в камере сгорания, и сопровождается появлением дыма в отработавших газах, перегревом двигателя и снижением его мощности, а при длительной работе разрушением ряда деталей цилиндра-поршневой группы [1].

В настоящее время большинство исследователей считают, что стук или детонация в двигателе обусловлены самовоспламенением смеси перед фронтом пламени – адиабатическим тепловым взрывом, что являющегося причиной внезапного жесткого сгорания оставшейся смеси, то есть перехода фронтального режима горения смеси к объемному, с образованием ударных волн [2]. Однако полной ясности в природе явления до сих пор нет. Особенностью его рассмотрения является исторически сложившееся множество различных, часто противоречащих друг другу модельных представлений, каждое из которых отражает какую-либо одну сторону проблемы, отвлекаясь от других не менее важных сторон. Тем не менее, уже достаточно давно гипотеза самовоспламенения получила серьезное теоретическое обоснование [3-6].

В данной работе численными методами решается задача о моделировании самовоспламенения смеси изооктана и n-гептана с воздухом на основе сокращенного кинетического механизма в дух систематизации:

1) в гомогенном реакторе постоянного объема с целью верификации принятого кинетического механизма;

2) перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием.

Моделирование пределов стука или детонации, в отличие от работ [3-6], проводится не на основе макрокинетического подхода к описанию процессов самовоспламенения смеси перед фронтом пламени, а с использованием приближения детальной химической кинетики. Моделирование проводится применительно к геометрическим, термодинамическим, физико-химическим и другим характеристикам рабочего процесса двигателя автомобиля «Renault Logan» типа «K7J 710» размерностью 4Ч 7,95/7 для модельных смесей, соответствующих бензину с октановым числом (ОЧ), равным 90.

ВЕРИФИКАЦИЯ СОКРАЩЕННОГО КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА

Проблема моделирования внутрикамерных процессов в бензиновых ДВС с искровым зажиганием, например, перехода фронтального горения в объемное со «стуком» и детонацией, связанного с предварительным самовоспламенением свежей смеси, требует рассмотрения детального кинетического механизма (ДКМ) предпламенных химических реакций. Неземпирические ДКМ окисления углеводородов бензиновых фракций содержат тысячи элементарных реакций и сотни частиц. Например, предложенный в [7] меха-

низм окисления н-гептана содержит 2300 элементарных реакций и 620 частиц. Это обстоятельство является серьезным препятствием для применения подобных кинетических механизмов при численном моделировании процессов горения в ДВС. Кроме того, в настоящее время они или отсутствуют или практически недоступны (полностью не опубликованы). В работах [8, 9] предложен простой вариант ДКМ окисления изооктана, н-гептана и их смесей с воздухом, состоящий из 284 реакций с 43 частицами (механизм 284/43), удовлетворительно описывающий процессы горения в ДВС, а также получен сокращенный механизм из 38 реакций и 27 частиц (механизм 38/27, который в этих работах не приведен) для описания процессов самовоспламенения топлива, с большой точностью повторяющий решения полной схемы в течение периода индукции самовоспламенения. В результате дальнейших исследований предложены короткие механизмы 27/18, 23/16 и 21/13 и проведена их численная проверка, показавшая приемлемую точность для практических расчетов.

Однако эти короткие механизмы не позволяют моделировать топлива с разными октановыми числами (ОЧ), поскольку в них среди рассматриваемых частиц отсутствует н-гептан C_7H_{16} . В то же время приведенный в [8, таблица 1] блок реакций самовоспламенения и редукции к низкомолекулярным углеводородам исходных компонентов смеси, состоящий из 29 реакций, после сокращения реакции № 29 (высокая величина константы скорости при нулевых значениях энергии активации и теплового эффекта реакции), совместно с низкомолекулярным блоком реакций самовоспламенения №1-№15 [8, таблица 2] позволяет составить сокращенный механизм из 43 реакций и 31 частицы (или 33 частиц с учетом азота N_2 и аргона Ar , содержащихся в воздухе). Этот сокращенный ДКМ 43/31, который был принят и исследован нами в работе [19], приведен в таблице 1.

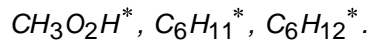
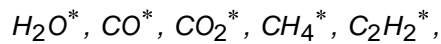
Таблица 1 - Сокращенный ДКМ смесей изооктана и н-гептана с воздухом

№ пп.	Механизм 43/31
Блок самовоспламенения и редукции к углеводородам $C_1 - C_2$	
1	$C_7H_{16} \rightarrow C_7H_{15} + H$
2	$C_7H_{15} \rightarrow C_6H_{12} + CH_3$
3	$C_6H_{12} + O_2 \rightarrow C_2H_3 + C_2H_5 + CH_4 + CO_2$
4	$C_7H_{16} + OH \rightarrow C_7H_{15} + H_2O$

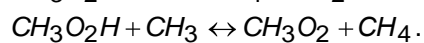
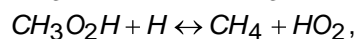
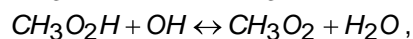
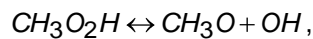
5	$C_7H_{15} + O_2 \rightarrow C_7H_{15}O_2$
6	$C_7H_{15}O_2 \rightarrow C_7H_{15} + O_2$
7	$C_7H_{15}O_2 + C_7H_{16} \rightarrow C_7H_{15}O_2H + C_7H_{15}$
8	$C_7H_{16} + O_2 \rightarrow C_7H_{15} + HO_2$
9	$C_7H_{16} + CH_3O_2 \rightarrow CH_3O_2H + C_7H_{15}$
10	$C_7H_{15}O_2H \rightarrow C_7H_{15}O + OH$
11	$C_7H_{15}O \rightarrow C_6H_{11} + CH_3 + OH$
12	$C_6H_{11} + 2O_2 \rightarrow C_2H_3 + 2CH_4 + 2CO_2$
13	$C_7H_{15}O_2 + C_7H_{15} \rightarrow 2C_7H_{15}O$
14	$C_7H_{15}O_2 + HO_2 \rightarrow C_7H_{15}O_2H + O_2$
15	$C_7H_{15} + HO_2 \rightarrow C_7H_{15}O + OH$
16	$C_8H_{18} \rightarrow C_8H_{17} + H$
17	$C_8H_{17} \rightarrow C_6H_{12} + C_2H_5$
18	$C_8H_{18} + OH \rightarrow C_8H_{17} + H_2O$
19	$C_8H_{17} + O_2 \rightarrow C_8H_{17}O_2$
20	$C_8H_{17}O_2 \rightarrow C_8H_{17} + O_2$
21	$C_8H_{17}O_2 + C_8H_{18} \rightarrow C_8H_{17}O_2H + C_8H_{17}$
22	$C_8H_{18} + O_2 \rightarrow C_8H_{17} + HO_2$
23	$C_8H_{18} + CH_3O_2 \rightarrow CH_3O_2H + C_8H_{17}$
24	$C_8H_{17}O_2H \rightarrow C_8H_{17}O + OH$
25	$C_8H_{17}O \rightarrow C_6H_{11} + CH_3 + CH_3O$
26	$C_8H_{17}O_2 + C_8H_{17} \rightarrow 2C_8H_{17}O$
27	$C_8H_{17}O_2 + HO_2 \rightarrow C_8H_{17}O_2H + O_2$
28	$H_8H_{17} + HO_2 \rightarrow C_8H_{17}O + OH$
Блок реакций самовоспламенения $C_1 - C_2$	
29	$H + O_2 \rightarrow HO_2$
30	$OH + H_2O_2 \rightarrow HO_2 + H_2O$
31	$H_2O_2 \rightarrow 2OH$
32	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$
33	$CH_2O + OH \rightarrow HCO + H_2O$
34	$HCO + O_2 \rightarrow HO_2 + CO$
35	$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_3O_2$
36	$CH_3O_2 \rightarrow CH_3 + O_2$
37	$CH_3O_2 \rightarrow CH_2O + OH$
38	$CH_3O \rightarrow CH_2O + H$
39	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$
40	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$
41	$C_2H_3 + CH_2O \rightarrow HCO + C_2H_4$
42	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$
43	$C_2H_5 + OH \rightarrow CH_3 + CH_3O$

Из таблицы 1 видно, что продуктами реакции окисления на стадии воспламенения являются следующие 8 частиц

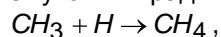
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И
 n-ГЕПТАНА С ВОЗДУХОМ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЯХ
 С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ



Отметим, что концентрации последних трех частиц в смеси весьма малы, и их можно было бы исключить из числа продуктов реакции окисления. Во-первых, путем включения в схему следующих обратимых реакций с участием частицы CH_3O_2H [10]:



Но последние две обратимые реакции выводят метан CH_4 из числа продуктов и требует добавления блока реакций с его участием. Однако если не рассматривать обратные реакции, то этого можно избежать. Что касается промежуточных частиц C_6H_{11} и C_6H_{12} , то скорость образования продуктов в их реакциях с кислородом O_2 практически равна скорости тех реакций, в которых эти частицы появляются [8]. Поэтому для их исключения из числа продуктов необходимо добавить блок реакций редукции этих частиц к углеводородам $C_1 - C_2$. В результате сокращенный ДКМ реакций самовоспламенения может возрасти до 70 и более реакций. Конечно, к приведенному в таблице 1 механизму реакций 43/31 можно предъявить различного рода претензии. Например, почему в нем отсутствует, корректирующая количество промежуточных радикалов, реакция



протекающая с нулевой энергией активации? Подобный вопрос можно задать и в отношении ряда других реакций, также протекающих с нулевой энергией активации [10]. Но, как уже было сказано, в результате снятия различного рода вопросов ДКМ резко возрастет в объеме (таблица 1), что затруднит его применение при моделировании процессов самовоспламенения в двигателе. Поэтому на данном этапе ограничимся принятым сокращенным механизмом 43/31.

Для проведения кинетических расчетов использована собственная вычислительная программа, моделирующая гомогенный реактор постоянного объема ($V=V_0=const$), соответствующий идеализированному процессу адиабатического самовоспламенения. Система уравнений процесса самовоспламенения описывает материальный и тепловой ба-

ланс химической реакции [8, 9, 11], который включает:

- уравнения скоростей химических реакций

$$W_i = k_i T^{n_i} \prod_{ij} A_{ij} \cdot \exp(-E_i/RT), \quad (1)-(43)$$

- уравнения концентрации частиц и материального баланса

$$A_j = v_j/V_0, \quad (44)-(74)$$

$$\dot{v}_j = V_0 \sum_i W_{ij}, \quad (75)-(105)$$

- уравнение состояния смеси

$$pV_0 = RT \sum_j v_j, \quad (106)$$

- уравнение энергии смеси

$$\sum_j (C_{pj} - R) v_j \cdot \dot{T} = V_0 \sum_i h_i W_i \quad (107)$$

и начальные условия:

$$t = 0, T = T_0, v_j = v_{j0}. \quad (108)$$

Здесь обозначено: W_i, k_i, E_i, h_i - скорость, предэкспонент константы скорости, энергия активации и тепловой эффект i -ой реакции; v_j, A_j, C_{pj} - число молей, концентрация и молярная теплоемкость при постоянном давлении j -х частиц; p, T - давление и температура; $V = V_0$ - объем системы.

В системе уравнений (1)-(108) значения величин k_i, E_i, h_i взяты из [8] с уточнением некоторых величин по [10, 12] и другим источникам, а температурные зависимости теплоемкостей частиц - из справочных данных [13-15], а также найдены одним из аддитивно-групповых методов (по Джонсону и Хуангу или Рихани и Доресвейни) [16].

Численные решения системы уравнений (1)-(108), представляющих собой систему жестких дифференциальных уравнений, требуют применения специальных методов интегрирования [17], поэтому моделирование динамики и периода индукции самовоспламенения осуществлялось на ПЭВМ методами Рунге-Кутты различных порядков, Гира, Мерсона и другими [18] по собственным программам.

В [8, 9] приведены обширные экспериментальные данные по задержкам самовоспламенения смесей изооктана и n-гептана с воздухом, полученные в экспериментах, проведенных на машинах адиабатического сжатия и в ударных трубах, то есть в условиях весьма близких к ДВС, которые частично представлены на рисунке 1. Эти данные свидетельствуют о заметном разбросе опытных точек (данные разных авторов о задержках

воспламенения для одних и тех же условий опытов отличаются в 6-7 раз). В то же время во всех опытах при уменьшении температуры задержки воспламенения в целом растут. В то же время практически все авторы отмечают наличие локальных максимума и минимума в области изменения температуры от 850 К до 650 К, при дальнейшем снижении температуры задержки воспламенения растут. В этой же области наблюдается максимальный разброс значений задержек воспламенения у разных авторов. В [8, 9] приведены данные численного моделирования задержек самовоспламенения по ДКМ 284/43 для смесей различного состава, которые в целом дают хорошую корреляцию с экспериментами, в частности отмечается наличие локальных максимума и минимума (или по крайней мере горизонтального участка) при изменении температуры от 850 К до 650 К. Это свидетельствует о том, что ДКМ 284/43 правильно моделирует известную двухстадийность кинетики самовоспламенения углеводородов (в нашем случае изооктана и н-гептана).

Погрешность, которая возникает вследствие сокращения ДКМ 284/43 [8, 9] до принятого нами реакционного механизма 43/31, оценивалась путем сопоставления результатов численного моделирования с экспериментальными данными и результатами расчетов по ДКМ. На рисунке 1 представлены экспериментальные задержки самовоспламенения для различных температур в координатах $\lg \tau(1/T)$, которые сравниваются с результатами расчетов по ДКМ 284/43 и сокращенному ДКМ 43/31 для смесей с ОЧ равным 90 (далее ОЧ=90). Видно, что ДКМ 43/31 при моделировании задержки самовоспламенения смесей изооктана и н-гептана с воздухом удовлетворительно воспроизводит величину задержки самовоспламенения и содержит элементы двухстадийности в отмеченном выше температурном интервале (результаты весьма близки к полученным по ДКМ 284/43).

На рисунке 2 приведены зависимости от давления $\tau(p)$ экспериментальных и расчетных по ДКМ 284/43 [8, 9] задержек самовоспламенения и по принятому сокращенному ДКМ 43/31. Откуда следует, что сокращенный ДКМ 43/31 практически с той же точностью воспроизводит экспериментальные задержки, что и ДКМ 284/43.

На рисунке 3 приведены зависимости температуры смеси от времени при различных значениях начальной температуры. Видно, что при начальных температурах 670, 750

и 800 К наглядно проявляется двухстадийность процесса самовоспламенения смеси.

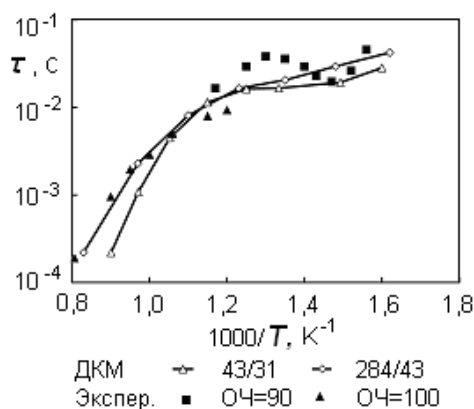


Рисунок 1 – Зависимость задержек самовоспламенения τ стехиометрических смесей изооктана и н-гептана с воздухом от обратной температуры

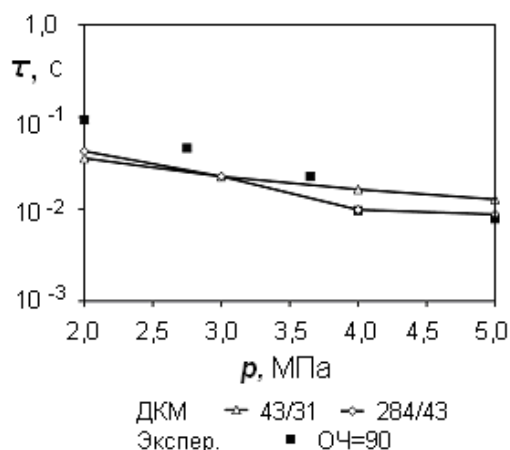


Рисунок 2 – Сопоставление экспериментальных и расчетных задержек самовоспламенения от давления для смеси с ОЧ=90; $\alpha = 2$; $T = 798$ К

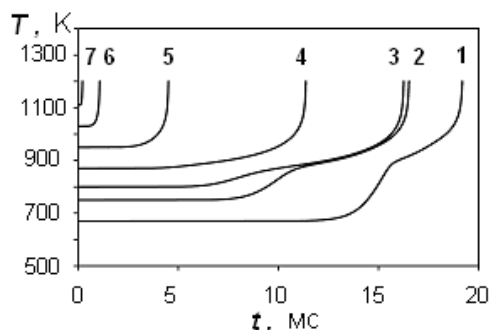


Рисунок 3 – Зависимости температуры от времени при самовоспламенении смеси с ОЧ=90 при $p=1,5$ МПа и начальной температуре T_0 , К:
1 – 670, 2 – 750, 3 – 800, 4 – 870, 5 – 950, 6 – 1030, 7 – 1110

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И n-ГЕПТАНА С ВОЗДУХОМ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЯХ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

На рисунках 4 и 5 приведены соответственно зависимости от времени расходования изооктана C_8H_{18} и появления и расходования перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ в течение периода индукции самовоспламенения.

Из рисунка 4 видно проявление двухстадийности процесса в отмеченном выше температурном интервале. На рисунке 5 отмечается наличие максимума концентрации перекисного радикала в момент наибольшей скорости расходования изооктана – «холоднопламенный максимум». А также видно, что в момент окончания периода индукции самовоспламенения концентрация перекисного радикала стремится к нулю, поэтому этот эффект может быть выбран в качестве индикатора задержки воспламенения топлива.

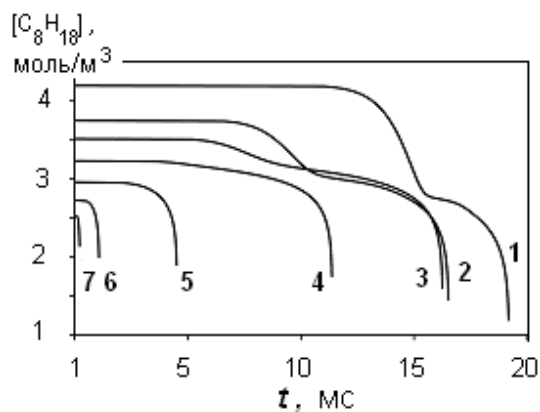


Рисунок 4 – Зависимость концентрации изооктана от времени для смеси с $O/C=90$ при $p=1,5$ МПа и начальной температуре T_0 , К: 1 – 670, 2 – 750, 3 – 800, 4 – 870, 5 – 950, 6 – 1030, 7 – 1110

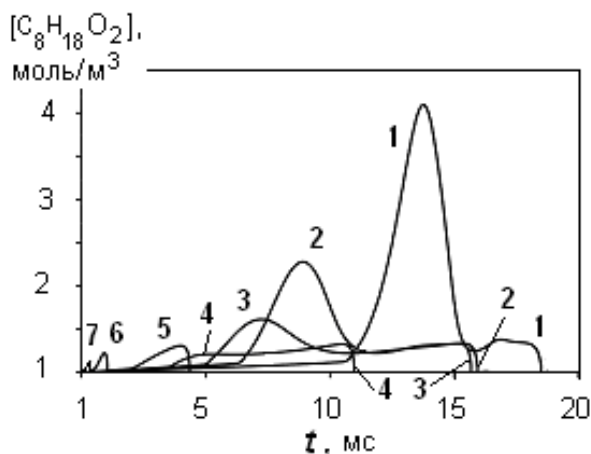


Рисунок 5 – Зависимость концентрации изооктанового перекисного радикала от времени для смеси с $O/C=90$ при $p=1,5$ МПа и начальной температуре T_0 , К: 1 – 670, 2 – 750, 3 – 800, 4 – 870, 5 – 950, 6 – 1030, 7 – 1110

Расчеты при давлениях $p=4$ и 8 МПа. Дополнительные оценочные расчеты с ДКМ 43/31 процесса самовоспламенения при повышенных начальных давлениях проводились с целью моделирования поведения рабочего заряда при самовоспламенении применительно к условиям в ДВС. На рисунке 6 приведены результаты расчетов задержки воспламенения топлива стехиометрического состава ($\alpha=1$) при давлениях 4 и 8 МПа, проведенных для начальных температур 800, 950 и 1100 К. Полученные расчетные зависимости типичны для двухстадийного самовоспламенения, характерного для углеводородов в области низких температур. При более высоких начальных температурах интенсивность холоднопламенных процессов уменьшается и обнаруживается переход к одностадийному самовоспламенению. Кроме того, зависимость периода индукции от давления особенно сильно проявляется при низких температурах.

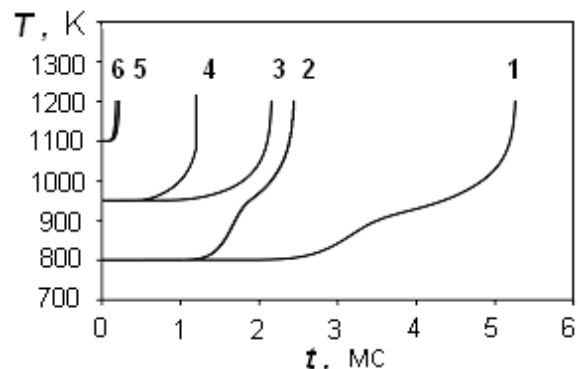


Рисунок 6 – Зависимость температуры от времени для смеси с $O/C=90$, $\alpha=1$ при начальных температурах 800, 950 и 1100 К. Кривые 1 и 2 – $T=800$ К, давление 4 и 8 МПа; 3 и 4 – $T=950$ К, давление 4 и 8 МПа; 5 и 6 – $T=1100$ К, давление 4 и 8 МПа

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВА СМЕСИ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ

Математическая модель процесса фронтального горения смеси в ДВС с искровым зажиганием и развития самовоспламенения (теплового взрыва) перед фронтом пламени включает следующие основные уравнения в функции угла поворота коленчатого вала (ПКВ) φ :

- динамики объема для одного цилиндра двигателя (аксиального КШМ)

$$\dot{V} = V_c \frac{\varepsilon - 1}{2} \sin \varphi \left(1 + \frac{\cos \varphi}{\sqrt{1/\lambda^2 - \sin^2 \varphi}} \right), \quad (109)$$

где $\dot{V} = dV/d\varphi$ - производная объема по углу п.к.в.; V_c - объем камеры сгорания; ε - геометрическая степень сжатия; $\lambda = r/l$ - отношение радиуса кривошипа к длине шатуна; \dot{V}_u - объема свежей смеси (термическое уравнение состояния идеального газа)

$$\dot{V}_u = \left(\frac{m_a}{M_u} \right) (1-x) \frac{RT_u}{p}, \quad (110)$$

где m_a - полная масса смеси в цилиндре двигателя; M_u - средняя молекулярная масса свежей смеси; R - универсальная газовая постоянная; T_u - температура зоны свежей смеси; p - давление в цилиндре двигателя; x - массовая доля сгоревшей смеси в цилиндре двигателя; \dot{V}_b - объема продуктов сгорания

$$\dot{V}_b = \dot{V} - \dot{V}_u, \quad (111)$$

- динамики скорости горения топливной смеси (массовой доли)

$$\dot{x} = \frac{F_f}{2\pi n} \cdot \frac{1-x}{V_u} \sqrt{S_u^2 + u_t^2}, \quad (112)$$

где F_f - площадь поверхности фронта пламени [20], определяемая как поверхность сферических сечений рабочего объема через приведенную координату фронта пламени r_f и текущую координату поршня z ; n - частота вращения коленчатого вала; u_t - нормальной скорости пламени

$$S_u = S_{u0} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{m_p} \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^{m_T}, \quad (113)$$

где S_{u0} - нормальная скорость пламени при нормальных условиях; p_0, T_0 - давление и температура при нормальных условиях; m_p, m_T - скорости турбулентных пульсаций на фронте пламени

$$u_t = k_{пор} \langle u_{пор} \rangle = 4rnk_{пор} \cong 4,2rn, \quad (114)$$

где $k_{пор}$ и $\langle u_{пор} \rangle$ - эмпирический коэффициент и средняя скорость поршня; \dot{p} - динамики давления в цилиндре двигателя (энергии всей системы)

$$\dot{p} \left(V - V_u \frac{R}{C_{pu}} - V_b \frac{R}{C_{pb}} \right) = -p \dot{x} \left(\frac{V_u}{1-x} - \frac{V_b}{x} \right) - p \dot{V}_u + \dot{x} \frac{R}{C_{pb}} \left(\frac{H_u}{1-x} - \frac{H_b}{x} \right) + \dot{Q}_u \frac{R}{C_{pu}} + \dot{Q}_b \frac{R}{C_{pb}}, \quad (115)$$

где \dot{Q}_u и \dot{Q}_b - теплообмен со стенками цилиндра, поршня и крышки зон свежей смеси и продуктов сгорания соответственно; C_{pu}, C_{pb}

C_{pb} и H_u, H_b - средние молярные теплоемкости и энтальпии свежей смеси и продуктов сгорания соответственно;

- скоростей химических реакций в зоне свежей смеси (116)-(158)

$$W_i = k_p \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\beta_i} T^{n_i} \prod_{ij} A_{ij} \cdot \exp(-E_i/RT),$$

где k_p - коэффициент учитывающий влияние давления на скорость химической реакции; β_i и E_i - предэкспонент константы скорости и энергия активации i -ой реакции (таблица 1); A_{ij} - концентрации j -ой компоненты (для частиц, вступающих в i -ую реакцию); \dot{T}_u - динамики температуры свежей смеси

$$\frac{\dot{T}_u}{T_u} = \frac{R}{C_{pu}} \left(\frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_u}{pV_u} - \frac{1}{2\pi n p} \sum_i h_i W_i \right), \quad (159)$$

где h_i - теплота (энтальпия) i -ой реакции;

- температуры продуктов сгорания (термическое уравнение состояния идеального газа)

$$T_b = pV_b M_b / \left(\frac{m_a R x}{\lambda} \right), \quad (160)$$

где M_b - средняя молекулярная масса продуктов сгорания;

- динамики концентраций компонентов свежей смеси (частиц) [9] (161)-(191)

$$\dot{A}_j = \frac{W_j}{2\pi n} + A_j \left(\frac{\dot{p}}{p} - \frac{\dot{T}_u}{T_u} - \frac{RT_u}{2\pi n p} \sum_i W_i \right)$$

и начальные условия в моменты закрытия впускного клапана (индекс a) b зажигания (индекс 1):

$$\varphi = \varphi_a, \quad p = p_a, \quad T_u = T_a, \quad A_j = A_{aj}, \quad (192)$$

$$\varphi = \varphi_1, \quad p = p_1, \quad T_u = T_1, \quad A_j = A_{aj}. \quad (193)$$

Численное моделирование процесса самовоспламенения смеси перед фронтом пламени на основе системы алгебраических и дифференциальных уравнений (109)-(191) и начальными условиями (192) и (193) проводилось по собственной программе, с привлечением специальных методов интегрирования систем жестких уравнений [17, 18]. Необходимые термодинамические данные – теплоемкости и энтальпии веществ определялись и вычислялись по [13-16].

Расчеты показывают влияние конструктивных, геометрических, термодинамических, физико-химических и других параметров процесса на условие возникновения «стука» или детонации в двигателе. В таблице 2 приведено сопоставление известных экспериментальных данных разных авторов, результатов

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И n-ГЕПТАНА С ВОЗДУХОМ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЯХ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

[2-4] и численного моделирования на основе ДКМ 43/31(33) для смесей изооктана и n-гептана с воздухом. Как видно из таблицы соответствие теоретических и экспериментальных результатов полное.

Таблица 2 – Сравнение численных результатов моделирования ДКМ 43/31, аналитического решения и экспериментальных данных (фактор способствует самовоспламенению: 1-да; 0- нет)

Изменение Параметров системы	Моделирование с ДКМ 43/31	Аналитическое решение	Экспериментальные данные
Повышение начального давления смеси	1	1	1
Повышение начальной температуры	1	1	1
Увеличение частоты вращения коленвала	0	0	0
Увеличение характерных размеров	1	1	1
Увеличение геометрической степени сжатия	1	1	1
Увеличение угла опережения зажигания	1; 0	1; 0	1
Увеличение коэффициента избытка воздуха	0	0	0
Турбулизация смеси	0	0	0
Увеличение нормальной скорости пламени	0	0	0
Увеличение скорости химической реакции	1	1	1

Более того, теория и численное моделирование предсказывают существование полуострова воспламенения в фазовой плоскости частота вращения – угол зажигания (рисунок 7), который экспериментально не обнаруживается, поскольку при больших по модулю углах зажигания ДВС с искровым зажиганием становится неэффективным по экономическим соображениям.

На рисунке 7 представлен график зависимостей критического угла опережения зажигания, обеспечивающего сгорание без стука или детонации, от частоты вращения коленчатого вала при различных значениях степени сжатия. Как видно из рисунка, характер зависимости соответствует ранее ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 1 2010

ченным результатам [4] с использованием макрокинетического уравнения для химической реакции самовоспламенения смеси перед фронтом пламени.

В качестве примера, на рисунке 7 для двигателя со степенью сжатия $\varepsilon = 11$ и частоты вращения вала $n=2500 \text{ мин}^{-1}$ отмечены три жирных точки. Причем средняя из них соответствует наиболее жесткому режиму с самовоспламенением смеси перед фронтом пламени (индикаторная диаграмма 30 рисунка 8), а верхняя и нижняя точки – критическим режимам на береговой линии полуострова самовоспламенения (индикаторные диаграммы 20 и 40 рисунка 8 соответственно).

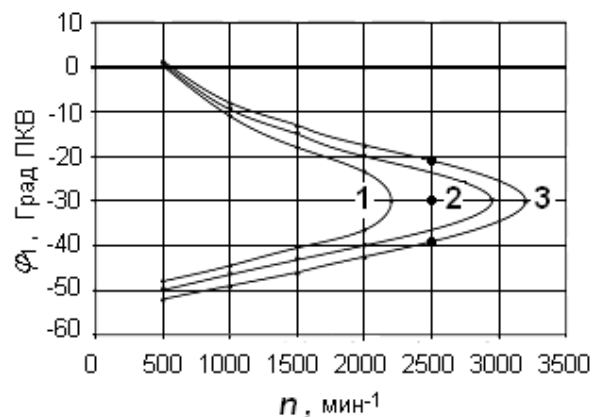


Рисунок 7 – График зависимости критического угла зажигания φ_1 от частоты вращения вала n при различных значениях степени сжатия ε для стехиометрической смеси:

1- $\varepsilon = 9$; 2- $\varepsilon = 10$; 3- $\varepsilon = 11$.

Вне полуострова самовоспламенение отсутствует, внутри полуострова – область детонации

На рисунке 8 приведены расчетные индикаторные диаграммы ДВС с искровым зажиганием - зависимости текущего давления от угла ПКВ для различных значений угла зажигания φ_1 . Видно, что существует вполне определенная область углов зажигания, для которых в некоторый момент времени фронтальный режим горения смеси переходит в объемный (со стуком или детонацией) из-за самовоспламенения смеси перед фронтом пламени.

При этом на индикаторной диаграмме виден скачок давления, обусловленный практически мгновенным сгоранием смеси перед фронтом пламени (кривая 30 рисунка 8). Далее рабочий процесс продолжается по адиабате или политропе продуктов сгорания.

Если рассматривать индикаторный коэффициент полезного действия (КПД) цикла с

учетом возможности самовоспламенения смеси перед фронтом пламени, то на основании индикаторной диаграммы (рисунок 8) можно отметить следующее. Если самовоспламенение происходит до момента прохождения ВМТ, то КПД цикла падает по сравнению с нормальным режимом горения смеси, а при самовоспламенении в ВМТ или после нее КПД цикла возрастает из-за скачка давления (например, кривая 30 на рисунке 8).

На рисунке 9 приведена динамика самовоспламенения (теплового взрыва) смеси перед фронтом пламени, соответствующая индикаторной диаграмме 4 на рисунке 8.

Можно отметить следующие особенности динамики процесса самовоспламенения. Температура смеси перед фронтом пламени T_u после момента зажигания плавно растет в результате процессов сжатия поршнем и продуктами фронтального горения смеси. Далее она проходит две точки перегиба во время холоднотеплой стадии, а при переходе к

второй стадии самовоспламенения, проходит третью точку перегиба. Затем в процессе объемного взрывного горения оставшейся смеси температура резко возрастает.

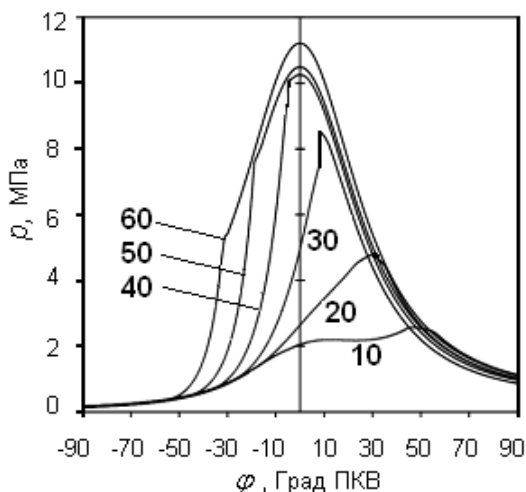


Рисунок 8 – Индикаторные диаграммы ДВС с искровым зажиганием при степени сжатия $\varepsilon = 11$, частоте вращения вала $n=2500 \text{ мин}^{-1}$ для различных значений угла зажигания φ_1 (Град ПКВ):

10- $\varphi_1 = -10$; 20- $\varphi_1 = -20$; 30- $\varphi_1 = -30$ (режим с самовоспламенением, скачок давления выделен); 40- $\varphi_1 = -40$; 50- $\varphi_1 = -50$; 60- $\varphi_1 = -60$

Поэтому при моделировании процесса горения углеводородных смесей с детальной химической кинетикой в условиях ДВС с

При наступлении холоднотеплой стадии самовоспламенения резко возрастает и затем падает концентрация изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$, при этом максимальное значение концентрации достигает 4600 ppm (рисунок 9, линия 2).

Динамика дифференциального критерия самовоспламенения (безразмерной функции процесса) [3]

$$dT_u/dp = T_u/p \text{ или}$$

$$d \ln T_u / d \ln p = \text{const} \quad (194)$$

следующая. В начале фронтального горения смеси его значение близко к нулю, во время холоднотеплой стадии перед фронтом пламени его величина достигает нескольких единиц (порядка 1-3) и падает практически до нуля, причем локальный максимум функции совпадает с максимумом концентрации изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ (кривая 2 на рисунке 9). Затем при переходе ко второй стадии теплового взрыва величина критерия самовоспламенения снова резко возрастает и достигает максимального значения порядка 120.

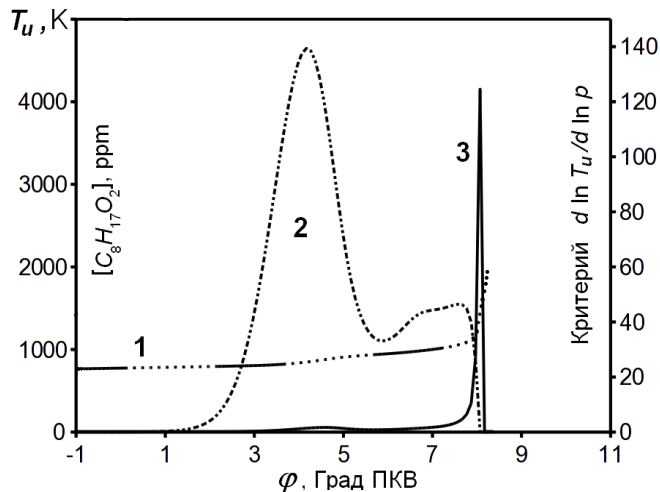


Рисунок 9 – Динамика самовоспламенения смеси перед фронтом пламени, соответствующая индикаторной диаграмме 30 на рисунке 8:

1- динамика температуры смеси перед фронтом пламени T_u ; 2- концентрация изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ в единицах ppm; 3- динамика дифференциального критерия самовоспламенения $d \ln T_u / d \ln p$

крывым зажиганием в качестве условия самовоспламенения смеси перед фронтом пламени можно принять достижение безразмерной

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И n-ГЕПТАНА С ВОЗДУХОМ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЯХ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

функцией процесса $d \ln T_u / d \ln p$ (критерием самовоспламенения) численного значения порядка 20-30.

Отметим, что при теоретическом решении задач самовоспламенения смеси при адиабатическом сжатии [3-6], например, в ДВС с искровым зажиганием с привлечением уравнения глобальной кинетики химической реакции (макрокинетики), численное значение дифференциального критерия самовоспламенения принималось равным единице $d \ln T_u / d \ln p = 1$.

ВЫВОДЫ

1) На основе разработок ученых ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН составлен сокращенный ДКМ смесей изооктана и n-гептана с воздухом - ДКМ 43/31, включающий 43 реакции и 31 частицу, для численного моделирования процессов самовоспламенения в ДВС.

2) Проведена верификация ДКМ 43/31 в условиях гомогенного реактора постоянного объема (адиабатической бомбы), которая показала, что принятый сокращенный ДКМ удовлетворительно описывает особенности как низкотемпературного двухстадийного процесса, так и высокотемпературного окисления в течение периоде индукции – результаты расчетов достаточно близки к экспериментальным данным и результатам моделирования по базовому ДКМ 284/43;

3) Построена уточненная математическая модель рабочего процесса ДВС с искровым зажиганием, описывающая процесс фронтального турбулизированного горения смеси в камере сгорания реальной геометрии с учетом предпламенных процессов в несгоревшей смеси с химической кинетикой по предложенному ДКМ 284/43.

4) Разработан алгоритм и программа для численного моделирования процессов самовоспламенения смеси в гомогенном реакторе постоянного объема (адиабатической бомбе) и ДВС с искровым зажиганием с ДКМ и уточнены или вычислены необходимые кинетические и термодинамические параметры и константы с учетом их зависимости от давления и температуры.

5) Численное моделирование самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием с на основе ДКМ 43/31 показывает:

- предложенный кинетический механизм ДКМ 43/31 для смесей изооктана и n-гептана с воздухом удовлетворительно описывает процесс самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 1 2010

нием и может быть использован для прогнозирования пределов стука или детонации в двигателях;

- подтверждено существование полуострова самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в фазовой плоскости частота вращения вала – угол зажигания, ранее численно полученного с использованием уравнения макрокинетики [6];

- с использованием ДКМ подтверждено влияние термодинамических, конструктивно-геометрических, динамических и физико-химических параметров двигателя, рабочего тела и процесса на самовоспламенение смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием, ранее теоретически полученное при использовании уравнения макрокинетики [5, 6], полностью соответствующее известным экспериментальным данным;

- индикаторный КПД цикла ДВС с искровым зажиганием при возникновении самовоспламенения перед фронтом пламени в момент прохождения ВМТ и после него возрастает, а до прохождения ВМТ – падает;

- при самовоспламенении углеводородных смесей в ДВС с искровым зажиганием динамика температуры перед фронтом пламени имеет три точки перегиба по причине двухстадийности процесса;

- при самовоспламенении смесей изооктана и n-гептана в ДВС с искровым зажиганием концентрация изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ последовательно проходит четко выраженные максимум и минимум на первой (холоднопламенной) стадии процесса, а на второй стадии (перехода к объемному взрыву или детонации) стремится к нулю, что может быть использовано при численном моделировании процесса;

- предложенный в работах [3, 5] дифференциальный критерий $d \ln T_u / d \ln p$ при самовоспламенении смесей изооктана и n-гептана с воздухом в ДВС с искровым зажиганием имеет два максимума, причем первый является слабовыраженным с численным значением 1-3 при прохождении холоднопламенной стадии (с дальнейшим снижением практически на порядок), а второй, на стадии перехода к взрыву, является пикообразным (подобным дельта-функции) с максимальным значением порядка 100-120 (с дальнейшим стремлением к нулю);

- предложено уточненное значение дифференциального критерия самовоспламенения вида $d \ln T_u / d \ln p$ - для численных расчетов процессов горения в ДВС с искровым зажиганием за критерий самовоспламе-

нения можно положить достижение его значения порядка 20-30.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воинов, А.Н. Сгорание в быстроходных поршневых двигателях / А.Н. Воинов.- М.: Машиностроение, 1977.- 277 с.
2. Bradley, D. Influence of Autoignition Delay Time Characteristics of Different Fuels on Pressure Waves and Knock in Reciprocating Engines / D. Bradley, G.T. Kalghatgi // Combustion and Flame.- 2009.- Vol. 156.- No. 8.- P. 2307-2318.
3. Сеначин, П.К. Самовоспламенение газа перед фронтом пламени в закрытом сосуде / П.К. Сеначин, В.С. Бабкин // Физика горения и взрыва.- 1982.- Т. 18, № 1.- С. 3-8.
4. Сеначин, П.К. Теоретический анализ явления "стука" в поршневых двигателях / П.К. Сеначин, А.В. Вьюн, В.С. Бабкин // Совершенствование сельскохозяйственной техники для работы в условиях Сибири: Науч. труды Новосиб. сельхоз. ин-та.- Т. 132.- Новосибирск: РПО СО ВАСХНИЛ, 1980.- С. 87-95.
5. Сеначин, П.К. К теории стука в поршневых двигателях, работающих на водороде / П.К. Сеначин, Р.Х. Абдуллин, В.С. Бабкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Атомно-водородная энергетика и технология. 1985.- № 2.- С. 51-53.
6. Сеначин, П.К. Самовоспламенение смеси перед фронтом пламени в поршневых двигателях с искровым зажиганием / П.К. Сеначин, В.С. Бабкин, А.В. Борисенко // Физика горения и взрыва.- 1997.- Т. 33, № 6.- С. 3-13.
7. Chevalier C., Goyal G., Louessard P., Warnatz J. Simulation of auto-ignition chemistry in hydrocarbon-air mixtures // Proc. Joint Meeting of the Soviet and Italian Sections of the Combustion Inst. Pisa.- 1990.- P. 5-10.
8. Басевич, В.Я. Сокращенная кинетическая схема для моделирования самовоспламенения воздушных смесей изооктана и н-гептана в течение периода индукции применительно к двигателям внутреннего сгорания / В.Я. Басевич, С.М. Фролов // Химическая физика.- 1994.- Т. 13, № 8.- С. 146-156.
9. Басевич, В.Я. Моделирование самовоспламенения изооктана и н-гептана применительно к условиям ДВС / В.Я. Басевич, А.А. Беляев, В. Брандштетер, М.Г. Нейгауз, Р. Ташл, С.М. Фролов // Физика горения и взрыва.- 1994.- Т. 30, № 6.- С. 15-25.
10. Басевич, В.Я. Моделирование задержек самовоспламенения метановоздушных смесей в двигателе внутреннего сгорания / В.Я. Басевич, В.И. Веденеев, В.С. Арутюнов // Физика горения и взрыва.- 1994.- Т. 30, № 21.- С. 7-14.
11. Kondratiev, V.N. Comprehensive Chemical Kinetics.- N.-Y.: Elsevier Publ., 1969.
12. Манташян, А.А. Моделирование гомогенной реакции пропана с кислородом / А.А. Манташян, Л.А. Хачатрян, А.А. Сукиасян, Дж.М. Адилханян, И.В. Великян // Химическая физика.- 1994.- Т. 13, № 10.- С. 88-96.
13. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей.- М.: Наука, 1972.- 720 с.
14. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. / Ред. В.П. Глушко, Л.В. Гурвиц и др.- Т.2. Кн.2. / Л.В. Гурвиц, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др.- М.: Наука, 1979.- 344 с.
15. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. акад. И.К. Киикоина / В.Г. Аверин, Б.А. Аронзон, Н.С. Бабаев и др.- М.: Атомиздат, 1976.- 1008 с.
16. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей / Р. Рид., Т. Шервуд / Пер. с англ. под ред. В.Б. Когана.- Л.: Изд-во «Химия», 1971.- 704 с.
17. Варнац Ю. Моделирование процессов горения с помощью детальной кинетики элементарных реакций // Химическая физика.- 1994.- Т. 13, № 2.- С.3-16.
18. Мудров А.Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль.- Томск: МП «Раско», 1991.- 272 с.
19. Сеначин, А.П. Проверка кинетического механизма самовоспламенения смесей изооктана и н-гептана с воздухом для моделирования процессов горения в ДВС / А.П. Сеначин, Т.А. Сеначина // Экологические проблемы энергоустановок с тепловыми двигателями: Сб. статей / Под ред. А.А. Мельберт / Российский союз научных и инженерных организаций, АлтГТУ им. И.И. Ползунова.- Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2008.- С. 105-116.
20. Жгутова, В.И. Моделирование горения смеси в ДВС с искровым зажиганием с образованием токсичных веществ в рамках многозонной модели / В.И. Жгутова, М.Ю. Свердлов, Д.Д. Матиевский, П.К. Сеначин // Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова.- 2000.- № 2.- С. 67-76.

**Сеначин А.П.,
Сеначин П.К., д.т.н., проф.,
АлтГТУ им. И.И. Ползунова, Барнаул,
тел. (8385)260516, e-mail: senachinpk@mail.ru**

*Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы (ФЦП)
«Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы*