

# САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И Н-ГЕПТАНА ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ. I. ВВЕДЕНИЕ В ПРОБЛЕМУ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТУКА ИЛИ ДЕТОНАЦИИ

Сеначин А.П., Сеначин П.К. (АлтГТУ им. И.И. Ползунова)

В двигателях внутреннего сгорания с искровым зажиганием со времени их создания существует проблема «стука» или детонации, которая до настоящего времени по большому счету не решена. Явление возникает при форсировании двигателя с целью увеличения мощности или индикаторного КПД и проявляется в виде отдельных чередующихся или непрерывных металлических стуков, обусловленных возбуждением ударных волн в камере сгорания, сопровождающихся появлением дыма в отработавших газах, перегревом и снижением мощности двигателя, а при длительной работе разрушением деталей цилиндро-поршневой группы [1].

В настоящее время большинство исследователей считают, что стук или детонация в двигателе обусловлены самовоспламенением смеси перед фронтом пламени (тепловым взрывом), являющимся причиной внезапного жесткого сгорания оставшейся смеси (переходом фронтального режима горения в объемный), 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. Но уже достаточно давно гипотеза самовоспламенения имеет серьезное теоретическое обоснование [3-6].

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

ных 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 ДКМ 43/31 из 43 реакций и 31 частицы (33 частиц с учетом азота N<sub>2</sub> и аргона Ar), принятый и исследованный нами в работах [10, 11] (таблица 1).

Таблица 1. Сокращенный ДКМ 43/31 смесей изооктана и н-гептана с воздухом

№	Блоки механизма 43/31	22	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + HO <sub>2</sub>
<b>Самовоспламенения и редукции к C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub></b>		23	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> + CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> → CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> H + C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>
1	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + H	24	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> H → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O + OH
2	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> → C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> + CH <sub>3</sub>	25	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O → C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> + CH <sub>3</sub> + CH <sub>3</sub> O
3	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> + C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + CH <sub>4</sub> + CO <sub>2</sub>	26	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> + C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> → 2C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O
4	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> + OH → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + H <sub>2</sub> O	27	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> H + O <sub>2</sub>
5	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	28	H <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + HO <sub>2</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O + OH
6	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + O <sub>2</sub>	<b>Блок самовоспламенения C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub></b>	
7	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> + C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> H + C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	29	H + O <sub>2</sub> → HO <sub>2</sub>
8	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + HO <sub>2</sub>	30	OH + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> → HO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> O
9	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> + CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> → CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> H + C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	31	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> → 2OH
10	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> H → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O + OH	32	2HO <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>
11	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O → C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> + CH <sub>3</sub> + OH	33	CH <sub>2</sub> O + OH → HCO + H <sub>2</sub> O
12	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> + 2O <sub>2</sub> → C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> + 2CH <sub>4</sub> + 2CO <sub>2</sub>	34	HCO + O <sub>2</sub> → HO <sub>2</sub> + CO
13	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> + C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> → 2C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O	35	CH <sub>3</sub> + O <sub>2</sub> → CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
14	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> H + O <sub>2</sub>	36	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> → CH <sub>3</sub> + O <sub>2</sub>
15	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> + HO <sub>2</sub> → C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O + OH	37	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> → CH <sub>2</sub> O + OH
16	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + H	38	CH <sub>3</sub> O → CH <sub>2</sub> O + H
17	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> → C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> + C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	39	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> + OH → C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> + H <sub>2</sub> O
18	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> + OH → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + H <sub>2</sub> O	40	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub>
19	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	41	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> + CH <sub>2</sub> O → HCO + C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
20	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> + O <sub>2</sub>	42	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + O <sub>2</sub> → C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> + HO <sub>2</sub>
21	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> + C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> → C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub> H + C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	43	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> + OH → CH <sub>3</sub> + CH <sub>3</sub> O

Из таблицы 1 видно, что продуктами реакции окисления на стадии воспламенения являются следующие 8 частиц: H<sub>2</sub>O\*, CO\*, CO<sub>2</sub>\*, CH<sub>4</sub>\*, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>\*, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H\*, C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>\*, C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>\*. Отметим, что концентрации последних трех частиц в смеси весьма малы, и их можно было бы исключить из числа продуктов реакции, например, путем включения в схему следующих обратимых реакций с участием частицы CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H [10]: CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H + CH<sub>3</sub> ↔ CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> + CH<sub>4</sub>, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H ↔ CH<sub>3</sub>O + OH, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H + H ↔ CH<sub>4</sub> + HO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H + O<sub>2</sub> ↔ CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> + HO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>H + OH ↔ CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>O. Но последние две реакции выводят метан CH<sub>4</sub> 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<sub>6</sub>H<sub>11</sub> и C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>, то скорость образования продуктов в их реакциях с кислородом O<sub>2</sub> 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  $C_1 - C_2$ . К приведенному в таблице 1 механизму реакций 43/31 можно предъявить различного рода претензии. Например, почему в нем отсутствует, корректирующая количество промежуточных радикалов, реакция  $CH_3 + H \rightarrow CH_4$ , протекающая с нулевой энергией активации? Подобный вопрос можно задать и в отношении ряда других реакций, также протекающих с нулевой энергией активации [10]. Но, 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 ДКМ 43/31. На рис. 1 и 2 приведены некоторые результаты верификации принятого ДКМ при самовоспламенении рассматриваемой смеси в гомогенном реакторе постоянного объема.

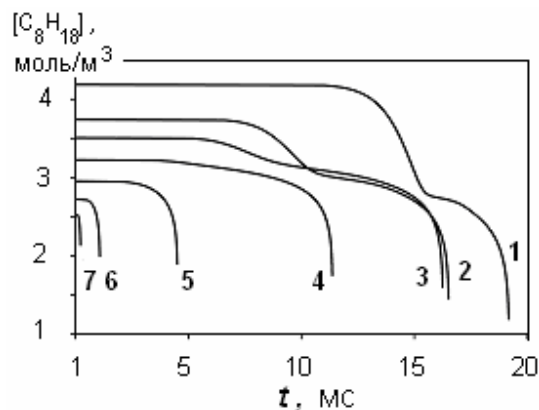


Рис. 1. Зависимость концентрации изооктана от времени для смеси с ОЧ=90 при  $p=1,5$  МПа и начальной температуре  $T_0$ , К: 1 – 670, 2 – 750, 3 – 800, 4 – 870, 5 – 950, 6 – 1030, 7 – 1110

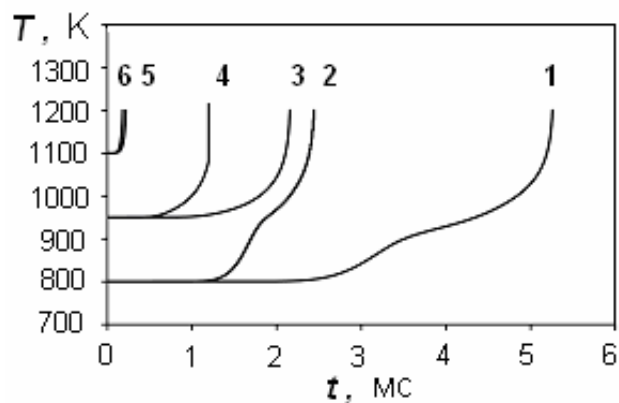


Рис. 2. Зависимость температуры от времени для смеси с ОЧ=90,  $\alpha=1$  при начальных температурах 800, 950 и 1100 К. Кривые 1 и 2 –  $T=800$  К, давление 4 и 8 МПа; 3 и 4 –  $T=950$  К, давление 4 и 8 МПа; 5 и 6 –  $T=1100$  К, давление 4 и 8 МПа

На рисунках видна двухстадийность процесса самовоспламенения, характерная для углеводородов, что свидетельствует об удовлетворительном качестве сокращенного ДКМ. Двухстадийность процесса особенно четко проявляется при низких (менее 900 К) начальных температурах смеси.

В данной работе моделирование пределов стука или детонации проводится на основе использования приближения детальной химической кинетики (ДКМ 43/31) 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.

Предварительные результаты численного моделирования самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием показывают влияние конструктивных, геометрических, термодинамических, физико-химических и других параметров процесса на возникновение стука или детонации в двигателе. В таблице 2 приведено сопоставление известных экспериментальных данных разных авторов, теоретических результатов [2-4], полученных на основе макрокинетического уравнения, и численного моделирования на основе ДКМ 43/31 для смесей изооктана и н-гептана с воздухом.

Из таблицы видно полное качественное соответствие результатов моделирования с известными экспериментальными и теоретическими данными. Это свиде-

тельствуем о верности гипотезы возникновения стука или детонации в двигателе через самовоспламенение (тепловой взрыв) несгоревшей смеси перед фронтом пламени. Поэтому основной задачей борьбы с детонацией в двигателе в настоящее время является моделирование процесса на основе ДКМ химической реакции.

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

Изменение параметров системы	ДКМ 43/31	Аналитическое решение	Экспериментальные данные
Повышение начального давления смеси $p = p_a$	1	1	1
Повышение начальной температуры $T_u = T_a$	1	1	1
Увеличение частоты вращения коленвала $n$	0	0	0
Увеличение характерных размеров $r, D, V_c$	1	1	1
Увеличение геометрической степени сжатия $\epsilon$	1	1	1
Увеличение угла опережения зажигания $\phi_1$	1; 0	1; 0	1
Увеличение коэффициента избытка воздуха $\alpha$	0	0	0
Турбулизация смеси $u_t = 4rnk_{\Pi}$	0	0	0
Увеличение нормальной скорости пламени $S_{u0}$	0	0	0
Увеличение скорости химической реакции $k_i, 1/E_i$	1	1	1

### Литература:

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. инта.- 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, № 8-9.- 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. 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.

11. Сеначин, А.П. Численное моделирование самовоспламенения смесей изооктана и н-гептана с воздухом перед фронтом пламени в поршневых двигателях с искровым зажиганием / А.П. Сеначин, П.К. Сеначин // Ползуновский вестник.- 2010.- № 1.- С.3-12.

## САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ ИЗООКТАНА И Н-ГЕПТАНА ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВЫМ ЗАЖИГАНИЕМ. II ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ

**Сеначин А.П., Сеначин П.К.** (Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова)

В двигателях внутреннего сгорания с искровым зажиганием проблема стука или детонации является наиболее древней, известной и до настоящего времени по большому счету окончательно нерешенной. Несмотря на то, что число исследователей этой задачи даже приблизительно трудно оценить, решающие успехи на этом пути все еще впереди. В дальнейшем продвижении к решению проблемы ключевым моментом является гипотеза самовоспламенения смеси перед фронтом пламени, которая с привлечением детального кинетического механизма, например, подобного ДКМ 43/31, приобретает новое звучание.

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

- динамики объема для одного цилиндра двигателя (аксиального КШМ)

$$\dot{V} = 0,5V_c(\varepsilon - 1)\sin\varphi \left( 1 + \cos\varphi / \sqrt{1/\lambda^2 - \sin^2\varphi} \right), \quad (1)$$

где  $\dot{V} = dV/d\varphi$  - производная объема по углу ПКВ;  $V_c$  - объем камеры сгорания;  $\varepsilon = 1 + 0,5\pi rD/V_c$  - геометрическая степень сжатия;  $D$  - диаметр поршня;  $\lambda = r/l$  - отношение радиуса кривошипа к длине шатуна;