

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) φ :

- 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;

- объема свежей смеси (термическое уравнение состояния идеального газа)

$$V_u = (m_a/M_u)(1-x)RT_u/p, \quad (2)$$

где m_a - полная масса смеси в цилиндре; M_u , T_u - средняя молекулярная масса и температура свежей смеси; R - газовая постоянная; p - давление в цилиндре; x - массовая доля сгоревшей смеси;

- объема продуктов сгорания

$$V_b = V - V_u, \quad (3)$$

- динамики скорости горения топливной смеси (массовой доли)

$$\dot{x} = \frac{F_f}{2\pi n} \cdot \frac{1-x}{V_u} \sqrt{S_u^2 + u_t^2}, \quad (4)$$

где F_f - площадь поверхности фронта пламени [12], определяемая поверхностью сферических сечений рабочего объема через текущие координаты фронта пламени r_f и поршня z ; n - частота вращения коленчатого вала;

- нормальной скорости пламени

$$S_u = S_{u0} (p/p_0)^{m_p} (T_u/T_0)^{m_T}, \quad (5)$$

где S_{u0} - нормальная скорость пламени при нормальных условиях; p_0, T_0 - давление и температура при нормальных условиях;

- скорости турбулентных пульсаций на фронте пламени

$$u_t = k_{\Pi} \langle u_{\Pi} \rangle = 4rnk_{\Pi} \cong 4,2rn, \quad (6)$$

где k_{Π} и $\langle u_{\Pi} \rangle$ - эмпирический коэффициент и средняя скорость поршня;

- динамики давления в цилиндре (энергии всей системы)

$$p \left(\dot{V} - V_u \frac{R}{C_{pu}} - V_b \frac{R}{C_{pb}} \right) = -p \dot{x} \left(\frac{V_u}{1-x} - \frac{V_b}{x} \right) - p \dot{V} + x \frac{R}{C_{pb}} \left(\frac{H_u}{1-x} - \frac{H_b}{x} \right) + \dot{Q}_u \frac{R}{C_{pu}} + \dot{Q}_b \frac{R}{C_{pb}}, \quad (7)$$

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

- скоростей химических реакций в зоне свежей смеси

$$W_i = k_p (p/p_0) k_i T^{n_i} \prod_{ij} A_{ij} \cdot \exp(-E_i/RT), \quad (8)-(50)$$

где k_p - коэффициент влияния давления; k_i , E_i - предэкспонент константы скорости и энергия активации i -ой реакции (таблица 1); A_{ij} - концентрации j -ой компоненты (для частиц, вступающих в i -ю реакцию);

- динамики температуры свежей смеси

$$\frac{\dot{T}_u}{T_u} = \frac{R}{C_{pu}} \left(\frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_u}{pV_u} - \frac{1}{2\pi n p} \sum_i h_i W_i \right), \quad (51)$$

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

- температуры продуктов сгорания (термическое уравнение состояния)

$$T_b = pV_b M_b / (m_a R x), \quad (52)$$

где M_b - средняя молекулярная масса продуктов сгорания;

- динамики концентраций компонентов свежей смеси (частиц) [13]

$$\dot{A}_j = \frac{W_j}{2\pi n} + A_j \left(\frac{\dot{p}}{p} - \frac{\dot{T}_u}{T_u} - \frac{RT_u}{2\pi n p} \sum_i \dot{W}_i \right) \quad (53)-(83)$$

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

$$\varphi = \varphi_a, \quad p = p_a, \quad T_u = T_a, \quad A_j = A_{aj}, \quad (84)$$

$$\varphi = \varphi_1, \quad p = p_1, \quad T_u = T_1, \quad A_j = A_{aj}. \quad (85)$$

Численное моделирование процесса самовоспламенения смеси перед фронтом пламени на основе системы алгебраических и дифференциальных уравнений (1)-(83) и начальными условиями (84) и (85) проводилось по собственной программе, с привлечением специальных методов интегрирования систем жестких уравнений [13, 14]. Необходимые термодинамические данные – теплоемкости и энтальпии веществ определялись и вычислялись по [15-18].

На рис. 1 и 2 представлены графики зависимостей критического угла опережения зажигания, обеспечивающего сгорание без стука или детонации, от частоты вращения коленчатого вала при различных значениях степени сжатия для смесей с коэффициентом избытка воздуха α равным 1,0 и 1,2 соответственно.

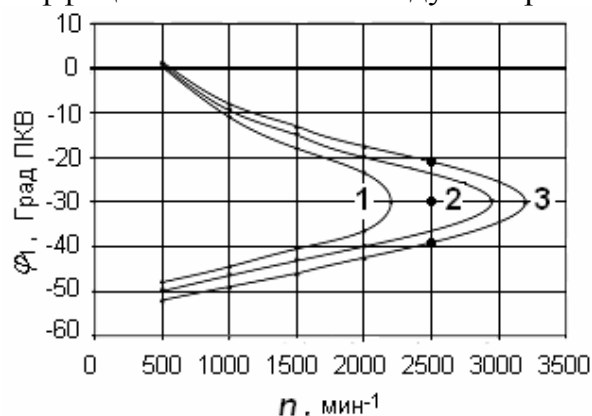


Рис. 1. – График зависимости критического угла зажигания φ_1 от частоты вращения вала n при различных значениях степени сжатия ε для стехиометрической смеси: 1- $\varepsilon=9$; 2- $\varepsilon=10$; 3- $\varepsilon=11$. Вне полуострова самовоспламенение отсутствует, внутри – область детонации

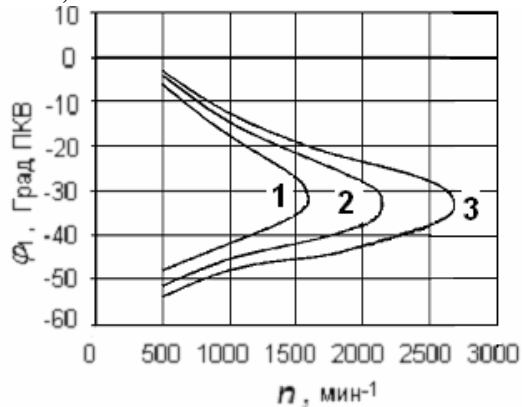


Рис. 2. График зависимости критического угла зажигания φ_1 от частоты вращения вала n при различных значениях степени сжатия ε для смеси с коэффициентом избытка воздуха $\alpha=1,2$: 1- $\varepsilon=9$; 2- $\varepsilon=10$; 3- $\varepsilon=11$.

На графиках обнаруживается существование полуострова воспламенения в фазовой плоскости частота вращения – угол зажигания. Характер этих зависимостей соответствует результатам, ранее полученным с использованием макрокинетического уравнения для химической реакции самовоспламенения смеси перед фронтом пламени [4].

В качестве примера, на рис.1 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 рис.3), а верхняя и нижняя точки – критическим режимам на береговой линии полуострова самовоспламенения (индикаторные диаграммы 20 и 40 рис.3 соответственно).

На рис.3 приведены расчетные индикаторные диаграммы ДВС с искровым зажиганием - зависимости текущего давления от угла ПКВ для различных значений

угла зажигания j_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 рис.3). Далее рабочий процесс продолжается по адиабате или политропе продуктов сгорания.

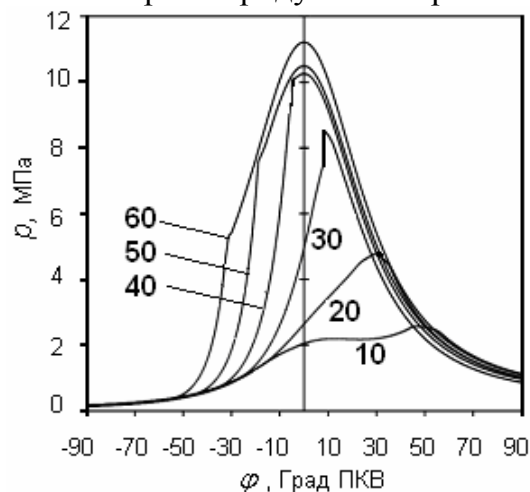


Рис. 3. Индикаторные диаграммы ДВС с искровым зажиганием при степени сжатия $\varepsilon = 11$, частоте вращения вала $n = 2500 \text{ мин}^{-1}$ для различных значений угла зажигания φ_1 (Град ПКВ) и коэффициенте избытка воздуха $\alpha = 1$: 10- $\varphi_1 = -10$; 20- $\varphi_1 = -20$; 30- $\varphi_1 = -30$ (режим с самовоспламенением, скачок давления выделен); 40- $\varphi_1 = -40$; 50- $\varphi_1 = -50$; 60- $\varphi_1 = -60$

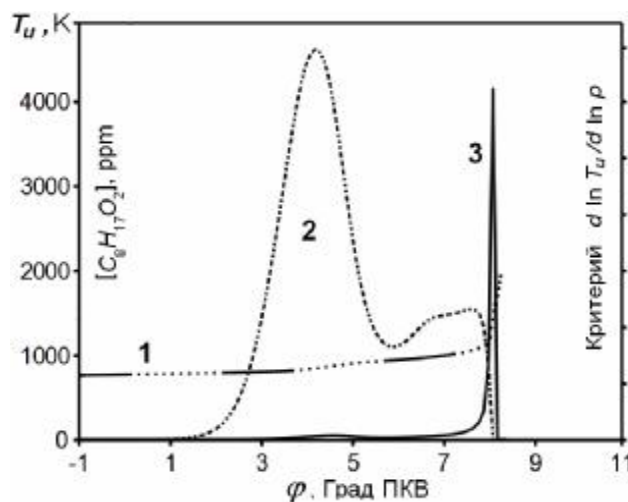


Рис. 4. Динамика самовоспламенения смеси перед фронтом пламени (индикаторная диаграмма 30 на рисунке 3): 1- динамика температуры смеси перед фронтом пламени T_u ; 2- концентрация изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ в единицах ppm; 3- динамика дифференциального критерия самовоспламенения $d \ln T_u / d \ln p$

Если рассматривать индикаторный коэффициент полезного действия (КПД) цикла с учетом возможности самовоспламенения смеси перед фронтом пламени, то на основании индикаторной диаграммы (рис.3) 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 рис. 3).

На рис.4 приведена динамика самовоспламенения (теплового взрыва) смеси перед фронтом пламени, соответствующая индикаторной диаграмме 30 на рис.3. 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 холоднотемпературной стадии, а при переходе ко второй стадии самовоспламенения, проходит третью точку перегиба. Затем в процессе объемного взрывного горения оставшейся смеси температура резко возрастает.

При наступлении холоднопламенной стадии самовоспламенения резко возрастает и затем падает концентрация изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$, при этом максимальное значение концентрации достигает 4600 ppm (рис.4, линия 2).

Динамика дифференциального критерия самовоспламенения

$$dT_u/dp = T_u/p \quad \text{или} \quad d \ln T_u / d \ln p = \text{const}, \quad (86)$$

безразмерной функции процесса [3] (кривая 3 на рисунке 2.4), имеет следующий вид. В начале фронтального горения смеси его значение близко к нулю, во время холоднопламенного процесса перед фронтом пламени его величина достигает нескольких единиц (порядка 1-3) и падает практически на порядок, причем локальный максимум функции совпадает с максимумом концентрации изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ (кривая 2 на рисунке 2.4). Затем при переходе ко второй стадии теплового взрыва его величина снова резко возрастает и достигает максимального значения порядка 120 (с дальнейшим стремлением к нулю).

Отметим, что при теоретическом решении задач самовоспламенения смеси при адиабатическом сжатии [3-6], например, в ДВС с искровым зажиганием с уравнением глобальной кинетики (макрокинетики), численное значение критерия самовоспламенения (86) принималось равным единице $d \ln T_u / d \ln p = 1$.

Сформулируем основные выводы:

1) На основе разработок ученых ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН составлен сокращенный ДКМ 43/31 смесей изооктана и н-гептана с воздухом, 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, которая показала, что принятый 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) Численное моделирование самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием на основе ДКМ 43/31 показывает:

- предложенный ДКМ 43/31 для смесей изооктана и н-гептана с воздухом удовлетворительно описывает процесс самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием и может быть использован для прогнозирования пределов стука или детонации в двигателях;

- подтверждено существование полуострова самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в плоскости частота вращения вала – угол зажигания, ранее 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 двустадийности процесса;
- при самовоспламенении смесей изооктана и н-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;
- 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 самовоспламенения можно положить достижение его значения порядка 20-30.

Литература (продолжение, начало нумерации в предыдущей статье):

12. 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.
13. Варнац Ю. Моделирование процессов горения с помощью детальной кинетики элементарных реакций // Химическая физика.- 1994.- Т. 13, № 2.- С.3-16.
14. Мудров А.Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль.- Томск: МП «Раско», 1991.- 272 с.
15. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей.- М.: Наука, 1972.- 720 с.
16. 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.
17. 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.
18. 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.

РАЦИОНАЛЬНАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ В ГАЗОВОЗДУШНОМ ТРАКТЕ ДВС В КВАЗИОДНОМЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Черноусов А.А. (Уфимский государственный авиационный технический университет)

В настоящее время показатели ДВС рассчитываются посредством численного моделирования нестационарного течения *рабочего тела* (РТ) в *газовоздушном тракте* (ГВТ). Рациональной является «сквозная» постановка задачи, т. е. моделирование зависящих от времени характеристик потока во всем объеме ГВТ ДВС. Процессы при этом описываются как моделями пространственно трехмерного (3D) течения рабочего тела, так и более огрубленными *квазиодномерными* (1D) моделями. В основе моделей обоих классов лежат законы сохранения для нестационарного потока РТ как реагирующей смеси. Уравнения конкретных моделей получаются из законов сохранения применением тех или иных замыкающих (модельных) гипотез и соотношений.