РАСЧЕТЫ. КОНСТРУИРОВАНИЕ. ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИГАТЕЛЕЙ

УДК 621.436

СНИЖЕНИЕ РЕАКЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ КИСЛОРОДА ИНЕРТНЫМИ КОМПОНЕНТАМИ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ В ДВИГАТЕЛЯХ С ВОСПЛАМЕНЕНИЕМ ОТ СЖАТИЯ

В.Г. Камалтдинов, к.т.н.

ФГБОУ ВПО Южно-Уральский государственный университет (НИУ)

Предложено выражение для определения коэффициента реакционной активности кислорода, с помощью которого учитывается влияние инертных компонентов горючей смеси на скорость сгорания. Определены величины этого коэффициента при сгорании диметилового эфира в смеси воздуха с отработавшими газами. Показано снижение скорости сгорания в результате влияния инертных компонентов смеси.

В настоящее время рециркуляция отработавших газов (ОГ) рассматривается в качестве одного из наиболее эффективных методов снижения выбросов оксидов азота с отработавшими газами ДВС. Для перспективных двигателей с воспламенением от сжатия, работающих на гомогенной рабочей смеси, то есть при реализации рабочего цикла HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), в России и за рубежом выполнен целый ряд исследований по математическому и экспериментальному моделированию рабочего процесса, в том числе и с рециркуляцией ОГ [1-5 и др.]. Однако вопрос о влиянии содержания инертных компонентов (азота, углекислого газа и водяного пара) в рабочей смеси на процесс сгорания остается недостаточно изученным. Одной из причин этого является отсутствие в применяемых математических моделях количественной оценки содержания данных компонентов в горючей смеси.

Для проведения такого аналитического исследования использована математическая модель горения топлива в ДВС [6-8], которая успешно применялась при моделировании рабочего цикла НССІ двигателей [9–14 и др.]. Предложенная математическая модель отличается от известных тем, что позволяет количественно оценить влияние на скорость сгорания не только снижения содержания кислорода, но и увеличения содержания инертных компонентов, которое имеет место в реальном процессе сгорания.

Скорость сгорания топлива в модели определяется по выражению:

$$w = \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\tau} = \frac{Z_E}{\tau_v},\tag{1}$$

где dN — изменение количества вещества в результате реакции; $d\tau$ — интервал времени; Z_E — количество активных молекул топлива, энергия которых выше энергии активации, составляющих группу одновременно реагирующих молекул; τ_y — условная продолжительность реакции окисления группы активных молекул топлива. Количество активных молекул топлива определяется по известному закону Аррениуса:

$$Z_E = Z_{\rm T} \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}},\tag{2}$$

где $Z_{\rm T}$ — общее количество молекул топлива в рассматриваемом объеме V цилиндра двигателя; E_A — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; T — температура смеси.

Условная продолжительность реакции окисления группы активных молекул топлива τ_y определяется по выражению:

$$\tau_{y} = \frac{Z_{T}}{\operatorname{const} \cdot K_{1} \cdot K_{2} \cdot V \cdot C_{T}^{p} \cdot C_{02}^{q}} =$$

$$= \frac{V}{\operatorname{const} \cdot K_{1} \cdot K_{2} \cdot Z_{T}^{p-1} \cdot Z_{02}^{q}},$$
(3)

где const — константа, учитывающая количество активных соударений молекул реагирующих веществ в единицу времени в единице объема; K_1 — коэффициент реакционной активности кислорода, учитывающий влияние инертных составляющих рабочего тела (азота и продуктов сгорания); K_2 — коэффициент, учитывающий турбулентность внутри камеры сгорания, $K_2 \ge 1$; $C_T = Z_T/V$ и $C_{02} = Z_{02}/V$ — концентрации всех молекул топлива Z_T и кислорода Z_{02} в объеме V соответственно; p, q — показатели степени, причем p + q = n — кинетический порядок реакции, n = 2.

Для получения численного значения скорости сгорания в любой момент времени достаточно определить количество одновременно реагирующих активных молекул топлива и разделить его на условную продолжительность реакции их окисления.

В модель процесса сгорания введено понятие реакционной активности кислорода, которым характеризуется способность молекул кислорода вступать в реакцию окисления с молекулами топлива. Из моделирования процесса сгорания топлива как результата активных столкновений молекул топлива и кислорода естественным образом следует, что при наличии в горючей смеси инертных примесей частота этих столкновений будет ниже, чем без примесей, из-за нахождения между ними молекул инертных компонентов, которые участвуют в столкновениях. Скорость реакции окисления топлива также будет уменьшаться, что можно рассматривать как снижение реакционной активности кислорода. Максимальная реакционная активность кислорода соответствует коэффициенту $K_1 = 1$, когда инертных компонентов в горючей смеси нет, и условная продолжительность реакции окисления активных молекул топлива т, будет наименьшая, а скорость окисления — наибольшая.

Коэффициент реакционной активности кислорода K_1 определяется из выражения, описывающего зависимость относительной величины периода задержки воспламенения (ПЗВ) топлива τ_{3B} от массовой доли кислорода в окислителе в смеси с азотом ψ [15], представленную на рис. 1:

$$K_{1} = 1 - \left(1 - \frac{Z_{02}}{Z_{02} + Z_{N2} + Z_{C02} + Z_{H20} + Z_{C0}}\right)^{0}, (4)$$

где Z_{N2} , Z_{CO2} , Z_{H2O} и Z_{CO} — соответственно количества молекул азота, диоксида углерода, воды и оксида углерода в расчетном объеме V.

Коэффициент турбулентности K_2 введен для моделирования влияния скорости движения горючей смеси на процесс ее сгорания. При моделировании HCCI процесса сгорания принималось $K_2 = 1$.

На рис. 1 приведены результаты расчетов процесса воспламенения дизельного топлива в окислителе, состоящем из кислорода и азота. При снижении массовой доли кислорода в окислителе ψ от 1 до 0,2 начальное значение коэффициента реакционной активности кислорода К₁ уменьшается от 1 до 0,69. Увеличение относительной величины периода задержки воспламенения при этих условиях составляет ~2,8 раза (пунктирные линии на рис. 1), что согласуется с известными экспериментальными данными [15] как по величине, так и по характеру изменения. Это подтверждает правомочность применения принятого подхода к учету влияния инертных компонентов в горючей смеси на процессы ее воспламенения и сгорания коэффициентом K_1 .

С помощью разработанной модели выполнены расчетные исследования процесса сгорания гомогенной воздушной смеси диметилового эфира (ДМЭ) при объемном ее самовоспламенении в камере сгорания (КС) постоянного объема при следующих начальных условиях: давление p = 1,5 МПа, температура T = 700 К. Для исключения влияния количества топлива цикловая подача ДМЭ принималась постоянной, равной $0,053 \cdot 10^{-3}$ кг. Изменение содержания инертных компонентов моделировалось величиной коэффициента остаточных газов γ_{ocr} в диапазоне от 0 до 0,5.



Рис. 1. Зависимость относительной величины периода задержки воспламенения и коэффициента реакционной активности кислорода от массовой доли кислорода в окислителе ψ :

– – – расчет по модели для дизельного топлива;
 — – эксперимент [15]



Рис. 2. Влияние коэффициента остаточных газов на начальный состав воздушной смеси ДМЭ в КС постоянного объема при p = 1,5 МПа, T = 700 К



Рис. 3. Изменение в процессе сгорания воздушной смеси ДМЭ количеств молекул топлива Z_{T} , кислорода Z_{02} , воды Z_{H20} и диоксида углерода Z_{C02} в КС постоянного объема при $\alpha_{\rm B} = 2,0$; p = 1,5 МПа; T = 700 К; $\gamma_{\rm ocr} = 0$; $K_1 = \text{var}$ [8]

Изменение начального состава рабочей смеси в зависимости от коэффициента остаточных газов представлено на рис. 2. Здесь видно, что при увеличении γ_{oct} от 0 до 0,5 уменышается начальное количество молекул кислорода в смеси в 1,94 раза и, соответственно, коэффициент избытка воздуха $\alpha_{\text{в}}$ в пересчете на кислород также снижается в 1,94 раза. Количество молекул инертных компонентов $Z_{\text{ин}}$, включая азот, диоксид углерода и воду, увеличивается на 13 %, азота — уменьшается на 6 %. Причем если при $\gamma_{oct} = 0$ количество молекул инертных компонентов превышает количество молекул кислорода в 3,76 раза, то при $\gamma_{oct} = 0,5$ превышение достигает 8,26 раз.

На рис. 3 приведено расчетное изменение состава воздушной смеси ДМЭ в процессе сгорания при отсутствии остаточных газов [8]. Здесь видно, что количество молекул кислорода за 1 мс уменьшается в ~1,71 раза. В то же время количество молекул инертных компонентов увеличивается на большую величину частично за счет диоксида углерода (Z_{CO2}) и частично за счет воды (Z_{H2O}). С учетом первоначального количества молекул азота и аргона увеличение составляет 19%.

По результатам расчетов скорости сгорания, описываемой выражением (1), с учетом влияния инертных составляющих рабочего тела коэффициентом реакционной активности кислорода K_1 , получаемого по выражению (4) и без его учета $(K_1 = 1)$, построены графики при различных значениях коэффициента остаточных газов (рис. 4, а). В случае исключения влияния инертных компонентов на условную продолжительность реакции окисления τ_v ($K_1 = 1$) максимальные значения скорости сгорания и моменты ее достижения изменяются незначительно (пунктирные линии на рис. 4, а). А при одновременном учете влияния реагирующих и инертных компонентов с помощью коэффициента К₁ выявлено существенное замедление процесса сгорания (сплошные линии на рис. 4, *a*).

В случае отсутствия остаточных газов расчетная максимальная скорость сгорания уменьшилась в 1,59 раза в сравнении с расчетами при $K_1 = 1$, а время ее достижения увеличилось в 1,37 раза. При повышении количества остаточных газов отличия в величине и времени достижения максимальной скорости сгорания становятся еще больше. При $\gamma_{ocr} = 0,3$ и 0,5 максимальная скорость сгорания снижается в 2 и 3,08 раз, а время увеличивается в 1,58 и 2,1 раза соответственно.

Для выяснения причины снижения скорости сгорания согласно выражению (1) проанализированы закономерности изменения количества активных молекул топлива Z_E и условной продолжительности реакции их окисления τ_y , вычисляемые по выражениям (2) и (3). Увеличение содержания остаточных газов в рабочей смеси при $K_1 = 1$ приводит к некоторому уменьшению



Рис. 4. Результаты расчета сгорания воздушной смеси ДМЭ в КС постоянного объема: p = 1,5 МПа, T = 700 К; a — изменение скорости сгорания ДМЭ; δ — изменение количества активных молекул ДМЭ; $1 - \gamma_{ocr} = 0$; $2 - \gamma_{ocr} = 0,1$; $3 - \gamma_{ocr} = 0,3$; $4 - \gamma_{ocr} = 0,5$; сплошные линии — K_1 = var, пунктирные линии — $K_1 = 1$



Рис. 5. Изменение давления *p* и температуры *T* при сгорании воздушной смеси ДМЭ в КС постоянного объема: $\alpha_{\rm s} = 2,0, p = 1,5 \text{ M}\Pi a; T = 700 \text{ K}; \gamma_{\rm ocr} = 0; ---- K_1 = \text{var};$ ----- $K_1 = 1$

текущего количества активных молекул топлива (пунктирные линии на рис. 4, б). Однако при учете влияния инертных компонентов коэффициентом реакционной активности кислорода ($K_1 = var$) текущее количество активных молекул и особенно момент достижения его максимума изменяются значительно больше (сплошные линии на рис. 4, б). Согласно уравнению (2) в начальной фазе сгорания увеличение количества активных молекул Z_E согласуется с ростом температуры смеси (рис. 5) при уост = 0. По мере выгорания ДМЭ (уменьшения Z_T) количество его активных молекул снижается, несмотря на продолжающийся рост температуры. Без учета инертных компонентов ($K_1 = 1$) за счет большей интенсивности тепловыделения давление и температура в КС возрастают быстрее и до более высокого уровня (см. рис. 5).

По результатам расчетов построены графики изменения коэффициента реакционной активности кислорода и условной продолжительности окисления активных молекул ДМЭ при различных коэффициентах остаточных газов (рис. 6).

Без учета влияния инертных компонентов $(K_1 = 1)$ условная продолжительность окисления активных молекул топлива (пунктирные линии) в период задержки воспламенения на 26 % меньше, чем при учете влияния (сплошные линии) (рис. 6, δ). Это приводит к повышению частоты образования и окисления активных молекул топлива, и, соответственно, увеличению скорости сгорания ДМЭ в начальный период продолжительностью 0,4 мс.

Применение коэффициента К₁ позволяет моделировать замедление образования и продолжительности окисления активных молекул топлива в процессе сгорания по мере изменения состава горючей смеси при различных значениях коэффициента остаточных газов. Например, в случае отсутствия остаточных газов ($\gamma_{oct} = 0$) начальное значение коэффициента реакционной активности кислорода К₁ в течение продолжительности сгорания 1 мс уменьшается в 1,46 раза (рис. 6, а). Это увеличивает условную продолжительность окисления активных молекул топлива (рис. 6, δ) и, соответственно, снижает скорость сгорания (рис. 4, а) по сравнению с отсутствием инертных компонентов в 1,32 раза в начале сгорания и в 1,92 раза в конце процесса сгорания (на рис. 6, δ окончание сгорания при K_1 = var не показано).

В результате условная продолжительность реакции окисления активных молекул топлива, определенная с учетом коэффициента K_1 , не



Рис. 6. Результаты расчета сгорания воздушной смеси ДМЭ в КС постоянного объема: p = 1,5 МПа, T = 700 К; a — изменение коэффициента реакционной активности кислорода K_1 ; δ — изменение условной продолжительности окисления активных молекул ДМЭ τ_y : $1 - \gamma_{ocr} = 0$; $2 - \gamma_{ocr} = 0,1$; $3 - \gamma_{ocr} = 0,3$; $4 - \gamma_{ocr} = 0,5$; — $K_1 = var$, ---- $K_1 = 1$

Камалтдинов В.Г.

только больше на 26 % в ПЗВ, но и в процессе сгорания увеличивается быстрее, чем без учета инертных компонентов (рис. 6, δ). При максимальном исследованном коэффициенте остаточных газов 0,5 коэффициент реакционной активности кислорода K_1 уменьшается от начального значения 0,496 до менее 0,1, то есть более чем в 5 раз (на рис. 6, *a* окончание сгорания не показано). Это приводит к значительному затормаживанию процесса сгорания, несмотря на обогащение смеси до $\alpha_{\rm B} = 1,03$ (см. рис. 2).

После достижения максимального значения скорость сгорания снижается (рис. 4, *a*), как в случае учета влияния инертных компонентов коэффициентом K_1 (K_1 = var на рис. 6, *a*), так и без его учета ($K_1 = 1$). Это происходит вследствие увеличения условной продолжительности реакции окисления активных молекул топлива τ_y (рис. 6, *b*) и снижения количества активных молекул ДМЭ (рис. 4, *b*), несмотря на продолжающийся рост температуры (рис. 5, *b*).

Таким образом, введение коэффициента реакционной активности кислорода K_1 в выражение для определения условной продолжительности реакции окисления активных молекул топлива τ_y позволило моделировать изменение количества активных соударений молекул реагирующих веществ (в единицу времени в единице объема), вызванное увеличением количества инертных молекул, образующихся в процессе сгорания. В результате расчетный процесс сгорания при учете влияния инертных компонентов стал более «мягким» и протяженным во времени. Например, при $\gamma_{ocr} = 0$ расчетный максимум скорости сгорания уменьшился в ~1,6 раза и сместился по времени на ~37 %.

Обобщенные результаты влияния коэффициента остаточных газов на показатели процесса сгорания гомогенной воздушной смеси ДМЭ в КС постоянного объема приведены на рис. 7. Здесь видно, что с увеличением коэффициента остаточных газов уост максимальные значения скорости сгорания, количества активных молекул топлива, а также давления и температуры в КС уменьшаются, а временные параметры, наоборот, увеличиваются. Учет влияния инертных компонентов коэффициентом реакционной активности кислорода K_1 сделал зависимость этих параметров от содержания остаточных газов в горючей смеси более выраженной, что согласуется с известными данными об их влиянии на процессы воспламенения и сгорания [15].

На основании выполненных расчетных исследований сгорания ДМЭ в КС постоянного объема можно сделать следующие выводы.

1. Применение коэффициента реакционной активности кислорода *К*₁ позволяет моделировать

замедление образования и продолжительности окисления активных молекул топлива при балластировке окислителя азотом, а также в процессе сгорания по мере изменения состава горючей смеси при различных коэффициентах остаточных газов.



Рис. 7. Влияние коэффициента остаточных газов α_{oct} на составляющие скорости сгорания (*a*) и показатели процесса сгорания (*б*):

 $1 - K_1 = \text{var}$ (рис. 6, *a*); $2 - K_1 = 1$; начальный состав смеси соответствует рис. 2

2. В процессе сгорания смеси при $\alpha_{\rm B} = 2,0$ и $\gamma_{\rm oct} = 0$ коэффициент реакционной активности кислорода снижается от начального значения 0,757, определяемого наличием азота воздуха, до 0,52 (в 1,46 раза) в конце процесса за счет образования продуктов сгорания. Это приводит к уменьшению расчетной скорости сгорания только под действием инертных компонентов в начальный период в 1,32 раза, а в конце сгорания в 1,92 раза.

3. Увеличение содержания инертных компонентов в горючей смеси при повышении коэффициента остаточных газов от 0 до 0,5 приводит к снижению начальной реакционной активности кислорода в 1,53 раза. Одновременное снижение $\alpha_{\rm B}$ (от 2,0 до 1,03) приводит к уменьшению начального количества молекул кислорода в 1,94 раза. В процессе сгорания количество кислорода и коэффициент его реакционной активности уменьшаются в несколько раз. В результате чего максимальная скорость тепловыделения снижается в 2,53 раза, а время ее достижения увеличивается в 1,71 раза.

4. Разработанная математическая модель влияния инертных компонентов топливно-воздушной смеси на процесс ее сгорания полнее отражает физику этого процесса, что позволяет точнее моделировать его динамику и рабочий цикл НССІ двигателей и исследовать возможные способы их улучшения.

Литература

1. Гусаков С.В., Махмуд Мохамед Эль Гобаши Эль Хагар. Опыт моделирования рабочего процесса ДВС с воспламенением гомогенного заряда от сжатия // Вестник Российского университета дружбы народов. — 2004. — № 2. — С. 25–28. (Сер.: «Инженерные исследования»).

2. Злотин Г.Н., Федянов Е.А., Иткис Е.М., Кузьмин В.Н. Математическое моделирование индикаторного процесса в двигателе с самовоспламенением от сжатия гомогенной метановоздушной смеси / Г.Н. Злотин, // Сборник научных трудов по материалам Международной конференции Двигатель-2007, посвященной 100-летию школы двигателестроения МГТУ им. Н.Э. Баумана. — М. : МГТУ им. Н.Э. Баумана, — 2007. — С. 57-61.

3. *Chen Z., Konno M., Oguma M., Yanai T.* Experimental Study of CI Natural-Gas / DME Homogeneous Charge Engine // SAE Paper 2000-01-0329. – 10 p.

4. Kong S.C. A study of natural gas/DME combustion in HCCI engines using CFD with detailed chemical kinetics // Fuel 86. - 2007. - P. 1483-1489.

5. *Flowers D., Aceves S., Smith R.* et al. HCCI in a CRF Engine: Experiments and Detailed Kinetic Modeling // SAE Paper 2000-01-0328. - 13 p.

6. Камалтдинов В.Г., Абелиович Е.В., Теребов А.С. Моделирование процесса сгорания в двигателях внутреннего сгорания с воспламенением гомогенного заряда от сжатия // Вестник ЮУрГУ. — 2007. — Вып. 10 — № 25(97). — С. 44–47. (Сер.: «Машиностроение»).

7. *Камалтдинов В.Г.* Новая модель процесса горения топлива в ДВС // Двигателестроение. — 2008. — № 3 (233). — С. 17–20.

8. *Kamaltdinov V*. Combustion process modeling in HC-CI engine // SAE Paper 2011-01-1789. — 10 p.

9. Камалтдинов В.Г., Абелиович Е.В. Влияние состава двухкомпонентного топлива на процесс сгорания в двигателе с объемным самовоспламенением от сжатия // Вестник ЮУрГУ. — 2008. — Вып. 12 — № 23 (123). — С. 46-53. (Сер.: «Машиностроение»).

10. *Камалтдинов В.Г., Никифоров С.С.* Управление рабочим процессом в НССІ двигателе // Двигателестроение. — 2010. — № 3 (241). — С. 3–9.

11. Камалтдинов В.Г., Марков В.А. Расчетное исследование процесса сгорания и показателей рабочего цикла НССІ двигателя, работающего на смеси природного газа и диметилового эфира // Автогазозаправочный комплекс + альтернативное топливо. — 2010. — № 6 (54). — С. 8–15.

12. *Камалтдинов В.Г., Марков В.А.* Влияние температуры огневой поверхности цилиндра на процесс сгорания и показатели рабочего цикла HCCI двигателя // Грузовик. — 2010. — № 12. — С. 38–47.

13. Камалтдинов В.Г., Марков В.А. Влияние параметров свежего заряда на показатели рабочего цикла НССІ двигателя с наддувом // Известия вузов. — 2011. — № 6. — С. 31–37. (Сер.: «Машиностроение»).

14. *Камалтдинов В.Г., Марков В.А.* Геометрическая степень сжатия, угол закрытия впускных клапанов и показатели рабочего цикла НССІ // Автомобильная промышленность. — 2011. — № 9. — С. 10–14.

15. Дубовкин Н.Ф. Справочник по теплофизическим свойствам углеводородных топлив и их продуктам сгорания. — М.-Л.: Госэнергоиздат, — 1962. — 288 с.

ПРЕДЛАГАЕМ РАЗМЕЩЕНИЕ РЕКЛАМЫ Ориентировочные тарифы на 1 полугодие 2012 г.

Первая страница обложки	Полноцветная	40 000 руб.
Вторая и третья страницы обложки	Полноцветная	36 000 руб.
Четвертая страница обложки	Полноцветная	38 000 руб.
Внутри журнала из расчета одна страница формата А4	Полноцветная	36 000 руб.
	Черно-белая	30 000 руб.