

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

*П.П. Ощепков к.т.н., доцент, С.В. Смирнов к.т.н., доцент
Российский университет дружбы народов, Москва
И.А., Заев к.ф.-м.н., научный сотрудник
ООО «Кинтех Лаб», Москва*

Приводится методика кинетического моделирования процесса самовоспламенения биодизельного топлива в воздухе, а также результаты расчетных исследований особенностей процесса сгорания биодизельного топлива с 20 %-ной добавкой пальмового масла и перекиси водорода и влияние добавок на время задержки воспламенения и процесс горения. Установлены предельные значения добавки перекиси водорода в рассматриваемое биодизельное топливо, которые позволяют сократить время задержки воспламенения. Показано, что выявленное влияние добавок перекиси водорода на реакционную способность биодизельного топлива с добавками пальмового масла позволяет управлять временем задержки воспламенения биодизельного топлива.

Введение

Мировой спрос на нефть и жидкие биотоплива (более 55 %) [1] во многом определяется потреблением топлива транспортом. Во многих странах мира ведутся исследования по поиску альтернативных видов топлива для двигателей внутреннего сгорания. Существует два наиболее распространенных типа биотоплива — этанол и биодизельное топливо [2].

В РУДН традиционно ведутся совместные исследования с представителями развивающихся стран Азии, Африки и Латинской Америки. Такие страны как Малайзия, Индонезия, Таиланд, Нигерия, активно производят биотоплива из внутренних возобновляемых ресурсов.

По данным The «Global Petroleum Club» [3], наибольшей производительностью (среди растений) в килограммах и литрах масла с гектара обладает пальмовое масло. Мировыми лидерами по производству пальмового масла являются Индонезия и Малайзия. В этих странах проводятся научные исследования [4, 5] по использованию пальмового масла в качестве альтернативного топлива для дизельных двигателей.

К ведущим странам-производителям пальмового масла относится и Нигерия [6], автомобильный транспорт в которой осуществляет

большую часть грузовых и пассажирских перевозок [7], а в сельском хозяйстве занято 65 % населения [8].

При использовании пальмового масла в качестве добавки к основному виду топлива в транспортном секторе сельского хозяйства Нигерии можно существенно уменьшить потребление дизельного топлива, сократить транспортные издержки на перевозку нефтепродуктов и снизить токсичность отработавших газов дизельных транспортных средств, используемых в аграрных районах страны.

Сравнение физико-химических свойств [9–11] растительных масел показывает, что пальмовое масло по ряду свойств (теплота сгорания, стехиометрическое соотношение, цетановое число и др.) наиболее близко к традиционному дизельному топливу. Однако пальмовое масло имеет серьезные отличия от традиционного нефтяного топлива (кинематическая вязкость, температура застывания), что делает невозможным применение чистого пальмового масла в дизельных двигателях без внесения изменений в конструкцию двигателя и топливной аппаратуры.

Поэтому наиболее перспективным является использование биодизельного топлива, представляющего смесь дизельного топлива и пальмового масла, при работе на котором не потребуются существенные изменения конструкции двигателя. Как показали экспериментальные исследования, биодизельное топливо с добавками пальмового масла до 20 % отвечает поставленным требованиям.

Цель исследования

Цель данного исследования — определение влияния добавок пальмового масла и перекиси водорода на процесс самовоспламенения биодизельного топлива и разработка метода управления сгоранием биодизельного топлива с добавками пальмового масла за счет использования перекиси водорода.

Мощностные и экономические показатели работы двигателя во многом определяются организацией процесса горения топлива, поэтому необходимо исследовать особенности горения:

- дизельного топлива без каких-либо добавок;
- дизельного топлива с добавкой 20 % пальмового масла (биодизельное топливо);
- биодизельное топливо с добавкой 20 % пальмового масла и различными добавками перекиси водорода.

Расчетные исследования процесса горения исследуемых топлив

При изучении процесса горения надо выделить два процесса, зависящих от реакционной способности топлива: момент самовоспламенения топливовоздушной смеси и процесс распространения ламинарного пламени.

Первый из них определяется кинетикой самовоспламенения топлива, второй — конструктивными и другими параметрами организации рабочего процесса (мелкость распыливания топлива, форма камеры сгорания в поршне, степень закрутки потока и т. д.). Следовательно, при сохранении конструктивных параметров дизельного двигателя наибольший интерес представляет регулирование стадии самовоспламенения горючей смеси для обеспечения оптимальных условий воспламенения и последующего сгорания топлива.

В настоящей работе исследуется влияние состава биодизельного топлива (дизельное топливо + + пальмовое масло) на характеристики его воспламенения в условиях, характерных для работы дизельного двигателя, а также проводится оценка возможности повышения реакционной способности биодизельного топлива за счет добавок к нему перекиси водорода.

Процесс самовоспламенения топливо-воздушной смеси характеризуется временем задержки воспламенения. Именно изменение времени задержки воспламенения биодизельного топлива по сравнению с исходным дизельным, в том числе с добавками перекиси водорода, является целевым параметром для оценки эффективности использования пальмового масла в дизельных двигателях без существенного ухудшения экономичности работы двигателя.

Для определения времени задержки воспламенения выбрана методика кинетического моделирования процесса самовоспламенения биодизельного топлива в воздухе, которая заключается в следующем.

Реальное дизельное топливо является смесью сотен углеводородов, моделирование самовоспламенения которой представляется невозможным в настоящее время из-за отсутствия данных о химических реакциях всех возможных углеводородов. Реальное дизельное топливо заменяется суррогатом — н-гептаном. Н-гептан имеет близкое цетановое число к дизельному топливу, то есть демонстрирует подобные характеристики самовоспламенения. Ранее н-гептан использовался

в качестве компонента суррогата дизельного топлива [12], далее будем называть его дизельным топливом (ДТ).

Биотопливо представляет собой результат эстерификации растительных масел. В случае пальмового масла основными компонентами являются метилэфиры пальмовой и олеиновой кислот [13]. Эквимолярная смесь метилэфира пальмовой и олеиновой кислот используются в качестве суррогата пальмового масла (ПМ).

Для кинетического моделирования процесса самовоспламенения биодизельного топлива рассматриваются следующие условия, характерные для дизельного двигателя в момент впрыска и самовоспламенения топлива:

- стехиометрическая топливо-воздушная смесь (самовоспламенение впервые происходит именно в зоне, где коэффициент избытка воздуха равен 1);
- диапазон начальных температур (ТВС), характерных для температуры сжатого воздуха вблизи ВМТ: 700–1100 К;
- давление 40 бар;
- состав биодизельного топлива представляет собой смесь пальмового масла (ПМ) и дизельного топлива с массовой долей ПМ 20 %;
- массовая доля перекиси водорода (%) на 1 кг топлива у H_2O_2 меняется от 0 до 9,3 % (от 0 до 93 г перекиси на 1 кг топлива).

Моделирование процесса самовоспламенения проводится с помощью библиотеки кинетического моделирования Cantera [14], в расчетах используется модель адиабатического реактора периодического действия. В основе модели — решение дифференциальных уравнений изменения концентраций веществ в реагирующей смеси при заданном давлении и адиабатических условиях протекания процесса.

Полная система кинетических уравнений для адиабатических условий при постоянном давлении p_0 имеет вид:

$$\rho \frac{dY_i}{dt} = M_i W_i; \quad (1)$$

$$W_i = \sum_{j=1}^m (v_{ij}'' - v_{ij}') R_j; \quad (2)$$

$$R_i = k_j + \prod_{k=1}^n \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{v_{ik}'} - k_j - \prod_{k=1}^n \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{v_{ik}'}, \quad (3)$$

$$p_0 = \rho RT \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i}; \quad (4)$$

$$k_{j\pm} = A_{j\pm} \cdot T^{N_{j\pm}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{j\pm}}{RT}\right); \quad (5)$$

где: ρ — плотность реагирующей смеси, которая рассчитывается из уравнения состояния идеального газа (4); Y_i — массовая доля i -го вещества (полное число веществ n , то есть $i = 1 - n$); M_i — молярная масса i -го вещества; W_i — полная скорость его образования (расходования) в моль/с; R_j — скорость j -й реакции (полное число реакций m , то есть $j = 1 - m$); ν'_{ij} — стехиометрический коэффициент i -го вещества в левой части (реагенты) уравнения j -й реакции; ν''_{ij} — стехиометрический коэффициент i -го вещества в правой части (продукты) уравнения j -й реакции; $k_{j\pm}$ — константа скорости j -ой реакции в прямом (+) и обратном (–) направлениях, значение которой вычисляется согласно уравнению Аррениуса (5) с параметрами $A_{j\pm}$, $N_{j\pm}$, $E_{j\pm}$, или из более сложных аппроксимаций зависимости от температуры и давления в зависимости от используемого химического механизма. Для системы уравнений (1)–(5) задаются начальные условия

$$Y_i|_{t=0} = Y_{i0}. \quad (6)$$

Для расчета констант скоростей реакций $k_{j\pm}$ и плотности ρ необходимо определить температуру системы T . Температура рассчитывается из условия постоянства полной энтальпии системы при изобарном процессе самовоспламенения:

$$h(T, Y_i) = h(T_0, Y_{i0}), \quad (7)$$

где T_0 — начальная температура реагирующей смеси.

В уравнении (7) энтальпия смеси рассчитывается как сумма энтальпий индивидуальных веществ:

$$h(T, Y_i) = \sum_{i=1}^n Y_i h_i(T). \quad (8)$$

Энтальпия i -го вещества h_i рассчитывается исходя из полиномиальных зависимостей энтальпии от температуры, коэффициенты которых являются частью кинетического механизма и предоставляются его авторами.

Для описания процесса самовоспламенения используется универсальный кинетический механизм [15], который был верифицирован для расчета самовоспламенения суррогатов дизельного топлива [12], биодизельного топлива [15], образования токсичных веществ и сажи в процессах горения [16, 17]. Данный механизм содержит 417 веществ и 15 742 реакции.

На рис. 1 приведены результаты расчета времени задержки воспламенения (в секундах) от начальной температуры (в Кельвинах) дизельного топлива без добавок (ДТ) и биодизельного топлива с добавкой 20 % пальмового масла (ПМ20) в воздухе для коэффициента избытка воздуха $\alpha = 1,0$. Как видно из представленных

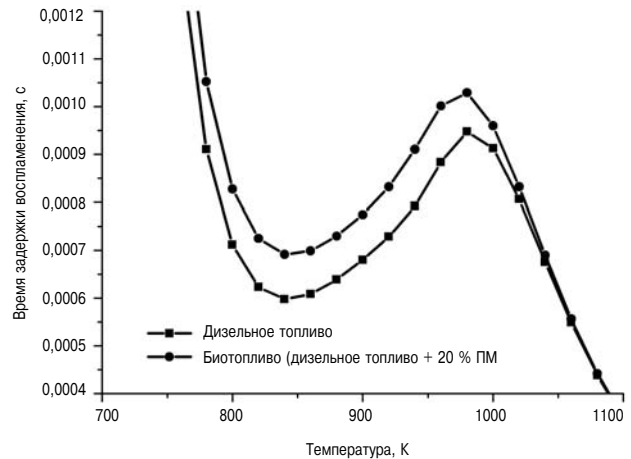


Рис. 1. Время задержки воспламенения биодизельного топлива 80 % ДТ + 20 % ПМ в воздухе при $\alpha = 1$

результатов расчета, добавки ПМ к ДТ увеличивают задержку самовоспламенения топлива в воздухе. Наиболее существенно увеличение в области низких и средних температур — от 700 до 950 К. Именно при данных температурах происходит самовоспламенение топлива в дизеле вблизи верхней мертвой точки (ВМТ).

Для исследования возможности повышения реакционной способности биодизельного топлива была проведена серия расчетов времени задержки воспламенения для чистого ДТ и для биодизельного топлива с добавкой 20 % пальмового масла ПМ20 и с добавками перекиси водорода H_2O_2 от 0 до 10 % по массе на 1 кг топлива. Результаты расчетов приведены на рис. 2. Как видно из представленных результатов, для биодизельного топлива ПМ20 добавки перекиси водорода в количестве до 1,5 % на 1 кг топлива

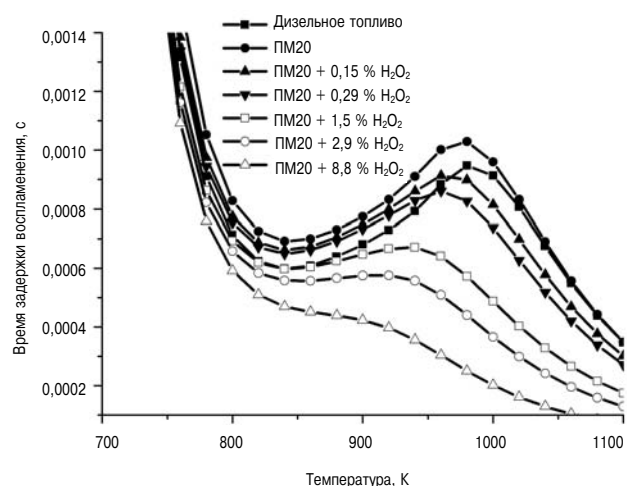


Рис. 2. Время задержки воспламенения дизельного топлива, биодизельного топлива «добавка ПМ20» и биодизельного топлива «добавка ПМ20» с добавками перекиси водорода (указаны массовые доли перекиси в % на 1 кг топлива)

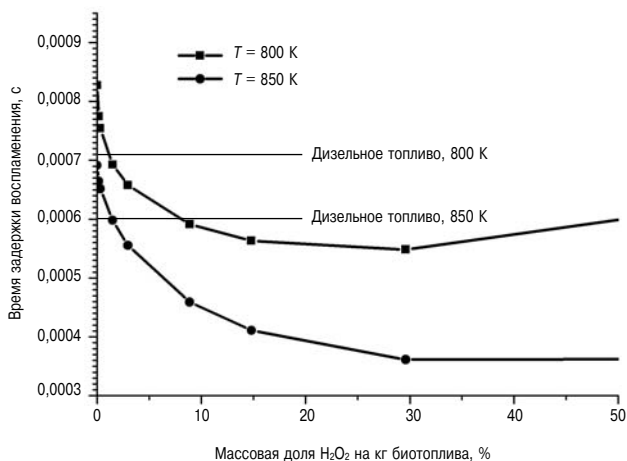


Рис. 3. Время задержки воспламенения биотоплива (добавка пальмового масла 20 %) с добавками перекиси водорода в воздухе при $\alpha = 1$ и температуре 800 и 850 К:

горизонтальные линии — задержка воспламенения дизельного топлива при соответствующей температуре воздуха

(15–29 г на 1 кг топлива) позволяют модифицировать кинетику его воспламенения таким образом, что задержка воспламенения практически не отличается от задержки воспламенения ДТ в диапазоне температур от 750 до 900 К, а при увеличении добавки свыше 1,5 % позволяет уменьшить время задержки воспламенения (при добавке 8,8 % перекиси водорода уменьшение времени задержки воспламенения составляет 25 % при температуре сжатого воздуха 850 К).

На рис. 3 приведен график зависимости времени задержки воспламенения биодизельного топлива (ПМ20) с добавками перекиси водорода при температуре сжатого воздуха 800 и 850 К от массовой доли перекиси водорода на 1 кг топлива в более широком диапазоне ее изменения. Горизонтальными линиями на рисунке показаны значения времени задержки воспламенения чистого дизельного топлива при 800 и 850 К.

Результаты расчетов показывают, что с помощью добавок перекиси водорода в биодизельное топливо можно повышать реакционную способность топлива и тем самым управлять важнейшим параметром процесса сгорания, влияющим на мощностные и экономические показатели двигателя. При этом эффективными такие добавки являются для концентрации перекиси водорода до 15 %. При больших концентрациях перекиси водорода ее влияние близко к насыщению (происходит минимальное сокращение времени задержки воспламенения в случае температуры сжатого воздуха 850 К) или негативно (время задержки воспламенения растет с увеличением концентрации перекиси водорода в случае температуры сжатого воздуха 800 К).

Выводы

Расчетными исследованиями установлено влияние добавки 20 % пальмового масла и перекиси водорода на время задержки воспламенения топлива.

Расчетные исследования показали эффективность использования в качестве добавки к биодизельному топливу перекиси водорода. При добавке к дизельному топливу 20 % пальмового масла время задержки биодизельного топлива увеличивается в диапазоне температур (800–950 К) до 15–18 %.

Для биодизельного топлива ПМ20 (20 % пальмового масла + 80 % дизельного топлива) добавки перекиси водорода в количестве до 1,5 % на 1 кг топлива позволяет приблизить задержку воспламенения данного топлива в диапазоне температур от 750 до 900 К к воспламенению дизельного топлива, а при дальнейшем увеличении добавки перекиси водорода свыше 1,5 % позволяет сократить время задержки воспламенения по сравнению с дизельным топливом (при добавке 8,8 % уменьшение составляет 25 % при температуре сжатого воздуха 850 К).

Путем изменения концентрации добавки перекиси к биотопливу в широком диапазоне (от 0 до 50 %) в расчетах установлено, что влияние перекиси на время задержки воспламенения биотоплива имеет эффект насыщения, и не рекомендуется использовать добавки перекиси в концентрации более 15–20 %.

Проведенные исследования показали, что с помощью добавок перекиси водорода в биодизельное топливо можно повышать реакционную способность топлива и тем самым управлять временем задержки воспламенения биодизельного топлива. В сочетании с обоснованным выбором момента впрыска это позволит оптимизировать процесс сгорания и тем самым улучшить мощностные и экономические показатели двигателя.

Публикация подготовлена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 02.A03.21.0008)

Литература

1. Прогноз развития энергетики мира и России 2016 / под ред. А.А. Макарова, Л.М. Григорьева, Т.А. Митровой; ИНЭИ РАН-АЦ при Правительстве РФ. Москва, 2016. 200 с.
2. Aziz A.A., Said M.F., Awang M.A. and Said M. «The Effects of Neutralized Palm Oil Methyl Esters (NPOME) on Performance and Emission of a Direct Injection Diesel Engine», in Proc. Of the 1st International Conference on Natural Resources Engineering and Technology INRET2006, 24–25 July 2006.
3. <http://www.abercade.ru/research/analysis/2314.html> (дата обращения 13.11.2017 г.)

4. https://www.researchgate.net/publication/253329374_Performance_and_Emission_Characteristics_of_Diesel_Engine_Running_on_Blended_Palm_Oil (дата обращения 3.12.2017 г)
5. http://people.idsia.ch/~nagi/conferences/iccbt_palm_biodiesel.pdf (дата обращения 3.12.2017 г)
6. <http://ab-centre.ru/articles/mirovoy-gynok-pal-movogo-masla-v-2001-2013-gg>
7. Шумилов К. Транспортная инфраструктура республики Нигерия. / «Зарубежное военное обозрение» № 7, 2004 г. С. 18–22.
8. <http://www.gecont.ru/articles/econ/nigeria.htm> (дата обращения 8.11.2017 г.).
9. Гусаков С.В. Перспективы применения в дизелях альтернативных топлив из возобновляемых источников: Учеб. Пособие. М. : РУДН, 2008. 318 с.
10. Ощепков П.П., Адедожа Адегбенро С. Альтернативное топливо для автотранспорта Нигерии на основе пальмового масла. Вестник РУДН. Серия: Инженерные исследования, 2017, том 18, № 4. С. 437–444.
11. Ощепков П.П., Симеон А.А. Возможность использования пальмового масла в качестве добавки к дизельному топливу на примере Нигерии. /Сборник научных трудов по материалам 76-ой научно-методической и научно-исследовательской конференции МАДИ. М. : Техполграфцентр. 2018. С. 155–162.
12. Ranzi E., Frassoldati A., Stagni A., Pelucchi M., Cuoci A., Faravelli T. Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: Fossil and biomass-derived transportation fuels, *International Journal of Chemical Kinetics*, 46 (9). P. 512–542 (2014), DOI: 10.1002/kin.20867.
13. Chiara Saggese, Alessio Frassoldati, Alberto Cuoci, Tiziano Faravelli, Eliseo Ranzi. A lumped approach to the kinetic modeling of pyrolysis and combustion of biodiesel fuels, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 427–434.
14. <https://cantera.org/>
15. Ranzi E., Frassoldati A., Grana R., Cuoci A., Faravelli T., Kelley A.P., Law C.K. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels, *Progress in Energy and Combustion Science*, 38 (4). P. 468–501 (2012), DOI: 10.1016/j.peccs.2012.03.004.
16. Faravelli T., Frassoldati A. and Ranzi E. Kinetic modeling of the interactions between NO and hydrocarbons in the oxidation of hydrocarbons at low temperatures, *Combustion and Flame*, 132(1–2). P. 188–207 (2003), doi:10.1016/S0010-2180(02)00437-6
17. Frassoldati A., Faravelli T. and Ranzi E. Kinetic modeling of the interactions between NO and hydrocarbons at high temperature, *Combustion and Flame* 135. P. 97–112 (2003), doi:10.1016/S0010-2180(03)00152-4.