

УДК 536.46+662.61

МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ПЕРЕД ФРОНТОМ ПЛАМЕНИ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВЫМ ЗАЖИГАНИЕМ НА ОСНОВЕ ДЕТАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ РЕАКЦИЙ

© 2011 П.К. Сеначин, А.П. Сеначин

Алтайский государственный технический университет им.И.И. Ползунова

Поступила в редакцию 17.03.2011

В статье приведены результаты численного моделирования пределов самовоспламенения смесей изооктана и н-гептана перед фронтом пламени в поршневом двигателе с искровым зажиганием в фазовой плоскости частота вращения – угол зажигания при варьировании степени сжатия для смесей различного стехиометрического состава.

Ключевые слова: *двигатель с искровым зажиганием, фронт пламени, самовоспламенение, стук и детонация, детальная кинетика, моделирование*

Проблема жесткого сгорания, со стуком или детонацией, в двигателях внутреннего сгорания с искровым зажиганием все еще далека от окончательного решения [1-3]. В настоящее время исследователи решают эту задачу с привлечением детальности кинетики химических реакций [4-8]. Однако, неэмпирические детальности кинетические механизмы (ДКМ) окисления углеводородов бензиновых фракций содержат тысячи элементарных реакций и сотни частиц, что является серьезным препятствием для применения подобных ДКМ при численном моделировании процессов горения в ДВС. Кроме того, в настоящее время эти ДКМ или отсутствуют или практически недоступны (полностью не опубликованы). Предлагаемая работа посвящена численному моделированию самовоспламенения смеси изооктана и н-гептана с воздухом на основе сокращенного детального кинетического механизма (ДКМ).

Принятый в данной работе на основе разработок специалистов Института химической физики им.Н.Н. Семенова РАН, ДКМ 43/31 включает 43 реакции и 31 частицу (табл. 1) и состоит из: блока самовоспламенения и редукции к углеводородам C_1 - C_2 (реакции 1-28) и блока реакций самовоспламенения C_1 - C_2 (реакции 29-43) [5-7]. Верификация ДКМ 43/31 на гомогенном реакторе идеального смешивания показала, что он удовлетворительно воспроизводит двухстадийность воспламенения

углеводородов [8], результаты расчетов близки к результатам моделирования по ДКМ 284/43 и другим [5-7]. Постановка задачи соответствует работе [9]. Моделирование проводится применительно к характеристикам двигателя автомобиля «Renault Logan» типа «K7J710» размерностью 4Ч 7,95/7 для модельных смесей, соответствующих бензину с октановым числом (ОЧ), равным 90.

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

№ п/п	Механизм 43/31
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	$C_8H_{17}O_2 \rightarrow C_8H_{17} + O_2$

Сеначин Павел Кондратьевич, доктор технических наук, профессор кафедры двигателей внутреннего сгорания. E-mail: senachinpk@mail.ru

Сеначин Андрей Павлович, инженер кафедры двигателей внутреннего сгорания. E-mail: andrey.senachin@myitk.ru

Продолжение таблицы	
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	$C_8H_{17} + HO_2 \rightarrow C_8H_{17}O + OH$
29	$H + O_2 \rightarrow HO_2$
30	$OH + H_2O_2 \rightarrow HO_2 + H_2O$
31	$H_2O_2 \rightarrow 2OH$
32	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + H_2O$
33	$CH_2O + OH \rightarrow HCO + H_2O$
34	$HCO + O_2 \rightarrow H_2O + CO$
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	$C_2H_5 + OH \rightarrow CH_3 + CH_3O$

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

- динамики объема для одного цилиндра двигателя

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

где $\dot{V} = dV/d\varphi$ - производная объема по углу ПКВ; V_c - объем камеры сгорания; ε - геометрическая степень сжатия; $\lambda = r/l$ - 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 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; - 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, определяемая как поверхность сферических сечений рабочего объема через приведенную координату фронта пламени r_f и текущую координату поршня z ; n - частота вращения коленвала;

- 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

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

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

- динамики давления в цилиндре двигателя (энергии всей системы)

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

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; - 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 на скорость химической реакции; k_i и E_i - предэкспонент константы скорости и энергия активации i -ой реакции (таблица 1); A_{ij} - концентрации j -ой компоненты 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;
 - средней температуры продуктов сгорания (для идеального газа)

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

где M_b – средняя молекулярная масса продуктов сгорания;
 - динамики концентраций компонентов свежей смеси (частиц)

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

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

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

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

Численное интегрирование системы уравнений (1)-(85) проводилось по собственной программе с привлечением специальных методов интегрирования систем жестких уравнений. На рис. 1 представлены зависимости критического угла опережения зажигания, обеспечивающего сгорание без стука и детонации, от частоты вращения коленчатого вала при различных значениях степени сжатия и коэффициентах избытка воздуха. Характер зависимостей соответствует результатам, ранее полученным в [9] с использованием макрокинетического уравнения для химической реакции самовоспламенения смеси перед фронтом пламени. 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.

На рис. 2 приведена динамика самовоспламенения (теплого взрыва) стехиометрической смеси ($\alpha=1,0$) перед фронтом пламени при степени сжатия $\epsilon=11$ и частоте вращения вала $n=2500 \text{ мин}^{-1}$ для значения угла зажигания $\varphi_1=30$ Град ПКВ. 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 2 точки перегиба во время

холоднопламенной 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. 2, линия 2).

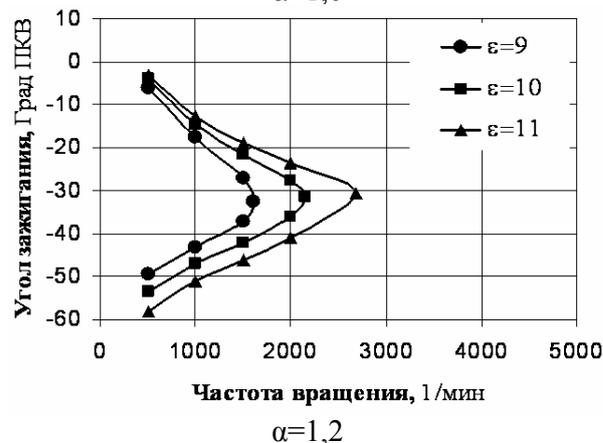
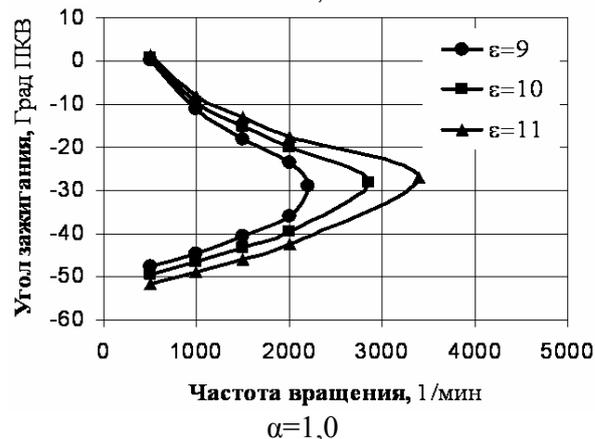
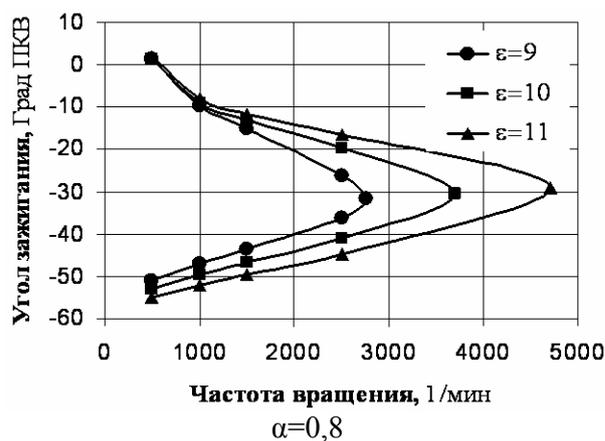


Рис. 1. Графики зависимостей критического угла зажигания φ_1 от частоты вращения вала n при различных значениях степени сжатия ϵ для смесями разного стехиометрического состава. Вне полуострова самовоспламенения отсутствует, внутри полуострова – область стука или детонации

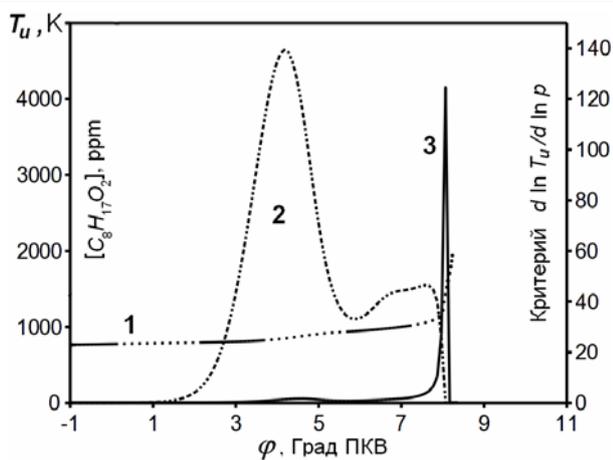


Рис. 2. Динамика самовоспламенения смеси перед фронтом пламени:

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 $d \ln T_u / d \ln p$

Динамика дифференциального критерия самовоспламенения [2]

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

(безразмерной функции процесса) следующая. 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 до нуля. Причем локальный максимум функции совпадает с максимумом концентрации изооктанового перекисного радикала $C_8H_{17}O_2$ (рис. 2, линия 3). Затем при переходе к второй стадии теплового взрыва величина критерия самовоспламенения снова резко возрастает и достигает максимального значения порядка 120. Поэтому при моделировании углеводородных смесей с детальной химической кинетикой в ДВС с искровым зажиганием в качестве условия самовоспламенения смеси можно принять достижение критерия самовоспламенения $d \ln T_u / d \ln p$ численного значения порядка 20-30. Отметим, что ранее при теоретическом решении задач самовоспламенения смеси при адиабатическом сжатии, в том числе в ДВС с искровым зажиганием [2, 9], с уравнением глобальной химической кинетики (макрокинетики), численное значение критерия принималось равным единице $d \ln T_u / d \ln p = 1$.

Выводы: численное моделирование самовоспламенения смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием с 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 фазовой плоскости частота вращения вала – угол зажигания, ранее полученного с использованием уравнения макрокинетики [9];
- с использованием ДКМ подтверждено влияние термодинамических, конструктивно-геометрических, динамических и других параметров процесса на самовоспламенение смеси перед фронтом пламени в ДВС с искровым зажиганием, ранее полученное при использовании уравнения макрокинетики;

- 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;

- предложенный в [2] дифференциальный критерий $d \ln T_u / d \ln p$ при самовоспламенении смесей изооктана и н-гептана с воздухом в ДВС с искровым зажиганием имеет 2 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 (при численных расчетах за критерий самовоспламенения 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. *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.

3. *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.
4. *Варнац, Ю.* Моделирование процессов горения с помощью детальной кинетики элементарных реакций / *Ю. Варнац* // *Химическая физика*. 1994. Т. 13, № 2. С. 3-16.
5. *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.
6. *Басевич, В.Я.* Моделирование самовоспламенения изооктана и н-гептана применительно к условиям ДВС / *В.Я. Басевич, А.А. Беляев, В. Брандштеттер* и др. // *Физика горения и взрыва*. 1994. Т. 30, № 6. С. 15-25.
7. *Басевич, В.Я.* Моделирование задержек самовоспламенения метановоздушных смесей в двигателе внутреннего сгорания / *В.Я. Басевич, В.И. Веденев, В.С. Арутюнов* // *Физика горения и взрыва*. 1994. Т. 30, № 21. С. 7-14.
8. *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.
9. *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.

SPONTANEOUS IGNITION MODELING BEFORE FLAME FRONT IN THE ENGINE WITH SPARK IGNITION ON THE BASIS OF DETAILED ELEMENTARY REACTIONS KINETICS

© 2011 P.K. Senachin, A.P. Senachin

Altay State Technical University named after I.I. Polzunov

In article results of numerical modeling of spontaneous ignition limits of iso-octane and n-heptane mixtures before flame front in the piston engine with spark ignition in a phase plane of rotation speed – the spark-ignition angle at variation of compression degree for mixtures of various stoichiometric structure are resulted.

Key words: engine with spark ignition, flame front, spontaneous ignition, knock and detonation, detailed kinetics, modeling

Pavel Senachin, Doctor of Technical Sciences, Professor at the Internal Combustion Engines Department. E-mail: senachinpk@mail.ru

Andrey Senachin, Engineer at the the Internal Combustion Engines Department. E-mail: andrey.senachin@mytk.ru