

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

Д.Д. Матиевский, П.К. Сеначин, М.Ю. Свердлов, К.А. Москвитин

Постоянно возрастающие стоимость жидкого топлива нефтяного происхождения и требования к экологическим характеристикам двигателей мобильных машин, стационарных поршневых энергостановок и мини-ТЭЦ требуют перевода их на альтернативные топлива, из которых наиболее перспективным со многих точек зрения в настоящее время является природный газ. Это обстоятельство требует ускоренной разработки и создания новых поколений газодизелей и газовых двигателей с искровым зажиганием, что особенно актуально в связи с перспективами использования природного газа Сибирских месторождений.

При традиционном подходе к проектированию и доводке новых двигателей на основе серийного аналога и эмпирической функции тепловыделения корректные расчеты рабочего тела, а именно процессов горения, теплообмена, образования вредных веществ и развития жестких режимов горения (со стуком и детонацией) практически невозможны. Выход из сложившейся ситуации состоит в разработке физических и математических моделей, описывающих реальные процессы в рабочем теле и основанные на многозонном его описании, на основе которых производится оптимизация конструкции и характеристик двигателя по всему комплексу показателей, включая экологические характеристики. При этом процесс горения должен описываться во времени и пространстве в рамках концепции фронтального распространения пламени от точечного источника по камере сгорания и цилиндру переменного объема (обусловленному движением поршня) [1-7].

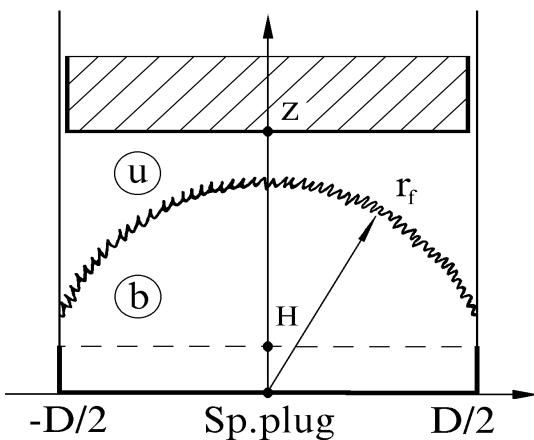


Рис. 1. Фронтальное распространение турбулизированного пламени в симметричной камере сгорания: r_f - радиус фронта сферической волны горения; Sp. Plug- точка поджигания смеси

Рассматриваемый рабочий объем системы состоит из одной зоны перед фронтом пламени (свежей смеси) и одной или N зон в продуктах горения (рис. 1). За начальные параметры приняты параметры системы в момент зажигания φ_i . Переход системы в состояние φ_i из состояния φ_a осуществляется по политропе (близкой к закону Пуассона).

Математическая модель процесса горения смеси в ДВС с искровым зажиганием с учетом равновесного состава продуктов горения включает уравнения: объема системы и его динамики (для аксиального механизма)

$$V = \frac{\pi D^2}{4} \left[\frac{\varepsilon + 1}{\varepsilon - 1} - \cos \varphi + \frac{\lambda}{2} \sin^2 \varphi \right],$$

$$\dot{V} = (\pi/4) r D^2 \sin \varphi (1 + \lambda \cos \varphi), \quad (1)$$

сохранения массы и баланса объема

$$x_u + x_b = 1, \quad x_b = \sum_{n=1}^N x_{bn}, \quad V = V_u + V_b, \quad V_b = \sum_{n=1}^N V_{bn}, \quad (2)-(3)$$

состояния свежей смеси и продуктов горения в зонах

$$pV_u = m_i x_u RT_u / \langle M_u \rangle,$$

$$pV_{bn} = m_i x_{bn} RT_{bn} / \langle M_{bn} \rangle, \quad (4)-(5)$$

энергии свежей смеси и продуктов горения в зонах

$$\begin{aligned} \frac{C_{pu}}{R} \cdot \frac{\dot{T}_u}{T_u} &= \frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_u}{pV_u} + \\ &+ \frac{1}{RT_u} \sum_j \dot{a}_j M_j \left(\frac{H_u}{\langle M_u \rangle} - \frac{H_j}{M_j} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{C_{pbn}}{R} \cdot \frac{\dot{T}_{bn}}{T_{bn}} = \frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_{bn}}{RT_{bn}} + \\ & + \frac{1}{RT_{bn}} \sum_k \dot{a}_{nk} M_k \left(\frac{H_{bn}}{\langle M_{bn} \rangle} - \frac{H_k}{M_k} \right) + \\ & + \frac{\langle M_{bn} \rangle}{RT_{bn}} \cdot \frac{\dot{x}_{bn}}{x_{bn}} \left(\frac{H_u}{\langle M_u \rangle} - \frac{H_{bn}}{\langle M_{bn} \rangle} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

динамики давления

$$\begin{aligned} & \dot{p} \left(V - \frac{R}{C_{pu}} V_u - \sum_n \frac{R}{C_{pbn}} V_{bn} \right) = -p \dot{V} + \frac{R}{C_{pu}} \dot{Q}_u + \\ & + \sum_n \frac{R}{C_{pbn}} \dot{Q}_{bn} + \\ & + \frac{pV_u}{C_{pu} T_u} \sum_j \dot{a}_j M_j \left(\frac{H_u - C_{pu} T_u}{\langle M_u \rangle} - \frac{H_j}{M_j} \right) + \\ & + \sum_n \frac{pV_{bn}}{C_{pbn} T_{bn}} \left[\sum_k \dot{a}_{nk} M_k \left(\frac{H_{bn} - C_{pbn} T_{bn}}{\langle M_{bn} \rangle} - \frac{H_k}{M_k} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{x_{bn}}{x_{bn}} \langle M_{bn} \rangle \left(\frac{H_u}{\langle M_u \rangle} - \frac{H_{bn} - C_{pbn} T_{bn}}{\langle M_{bn} \rangle} \right) \right] - , \end{aligned} \quad (8)$$

$$- p V_u \frac{\dot{x}}{1-x}$$

массовой скорости горения на фронте пламени

$$\dot{x} = D_p V_i \frac{1-x}{V_u} (p/p_i)^\varepsilon f(p), \quad (9)$$

функции площади поверхности пламени (10)

$$f(p) = (8/D^2) r_f^2, \quad r_f = (3V_b/2\pi)^{1/3},$$

при $r_f \leq D/2$, $r_f \leq z$,

$$f(p) = (8/D^2) z r_f, \quad r_f = (V_b/\pi z + z^2/3)^{1/2},$$

при $r_f \leq D/2$, $r_f > z$,

$$f(p) = (8/D^2) r_f^2 \left[1 - \sqrt{1 - D^2/4r_f^2} \right],$$

$$r_f \left[1 - (1 - D^2/4r_f^2)^{3/2} \right]^{1/3} = (3V_b/2\pi)^{1/3}.$$

при $r_f > D/2$, $r_f \leq z$,

$$f(p) = (8/D^2) r_f^2 \left[z/r_f - \sqrt{1 - D^2/4r_f^2} \right],$$

$$r_f \left[3z/2r_f - (z/r_f)^3/2 - (1 - D^2/4r_f^2)^{3/2} \right]^{1/3} =$$

$$(3V_b/2\pi)^{1/3}, \quad \text{при } r_f > D/2, r_f > z.$$

В этих уравнениях обозначено: p - давление; V - объем; T - температура; R - универсальная газовая постоянная; $m_i = p_i V_i \langle M_u \rangle / RT_i$ - масса заряда, поступающего в камеру сгорания за один цикл; M_j, M_k - молекулярная масса компонента, средняя молекулярная масса рассчитывается с учетом всех j -х компонентов в свежей смеси $\langle M_u \rangle = \sum_j a_j M_j$ и k -х в зонах продуктах горения $\langle M_{bn} \rangle = \sum_k a_{nk} M_k$; $x = m/m_i$ - массовая доля; $C_{pu}(T) = \sum_j C_{pj}(T) a_j$,

$C_{pbn}(T) = \sum_k C_{pnk}(T) a_k$ - теплоемкости свежей смеси и продуктов горения в зонах; a_j, a_{nk} - мольные доли компонентов смеси;

$H_u = \sum_j a_j H_j$, $H_{bn} = \sum_k a_{nk} H_k$ - мольные энталпии свежего газа и продуктов горения в зонах;

$$H_j = H_j^\circ + \int_{T^\circ}^{T_u} c_{pj} dT,$$

$H_k = H_k^\circ + \int_{T^\circ}^{T_{bn}} c_{pk} dT$ - мольная энталпия j -ой компоненты свежей смеси и k -ой компоненты в продуктах горения; H_j°, H_k° - мольная энталпия при стандартной температуре T° ;

\dot{Q}_u, \dot{Q}_{bn} - суммарные скорости конвективного и радиационного теплообмена свежей смеси и продуктов горения в зонах, задаваемые отдельными уравнениями; S_{ui}° - нормальная скорость пламени для смеси стехиометрического состава;

$S_{ui} = S_{ui}^\circ (p_i/p_a)^\varepsilon$ - нормальная скорость пламени в момент зажигания;

$\chi_t = 1 + 4krn_0/S_{ui}^\circ$ - фактор турбулизации пламени; k - коэффициент турбулизации;

r - радиус кривошипа; n_0 - частота вращения вала двигателя; $D_p = \chi_t S_{ui} D^2 / (8n_0 V_i)$ - динамический параметр; D - диаметр поршня;

$z = (4\varepsilon_i V_c / \pi D^2) V/V_i$ - текущее значение координаты поршня. Индексы i, u, b, n, j, k относятся к начальному состоянию, свежей смеси, продуктам горения, номеру зоны в продуктах, соответствующим компонентам в свежей

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

смеси и продуктах горения соответственно. Точки над переменными обозначают производную по углу поворота коленчатого вала, например, $\dot{p} = dp/d\varphi$.

Пусть в момент закрытия впускного клапана φ_a заданы параметры состояния смеси p_a , T_a , V_a , коэффициент избытка воздуха α и составляющие атмосферного воздуха средней влажности $a_{O_2} = 0.20642$, $a_{N_2} = 0.76952$, $a_{H_2O} = 0.0145$, $a_{Ar} = 0.00923$, $a_{CO_2} = 0.00033$. Концентрация (мольная доля) топлива a_f при этом определяется заданным коэффициентом избытка воздуха $a_f = 1/[1 + \alpha(1/a_f - 1)]$. Параметры концентрации в свежей смеси остаются неизменными. В продуктах горения учитывается 19 компонентов: O_2 , N_2 , H_2O , Ar , CO_2 , CH_4 , H_2 , C , O_3 , O , N , H , OH , CO , NO , NO_2 , HCN , NH_3 , HNO_3 , концентрации которых изменяются по ходу процесса.

В системе уравнений (1)-(10) для решения данной задачи в первом приближении можно пренебречь конвективным и радиационным теплообменом свежей смеси и продуктов горения, а также химическими реакциями в свежем газе.

Продукты горения разбиваются на n зон (достаточно выбрать $n=10$), внутри которых температура усредняется по объемам. Для каждой из зон в процессе фронтального горения и вплоть до момента окончания горения (выброса) рассчитывается равновесное состояние продуктов. В системе уравнений для расчета равновесного состава продуктов горения константами являются: суммарное число атомов в одном моле свежей смеси и число атомов кислорода в начале процесса в единицах числа Авогадро N_A :

$$S = a_f(c + h + n + o) + (1 - a_f)(2 \cdot 0,20642 + 2 \cdot 0,76952 + 3 \cdot 0,0145 + 0,00923 + 3 \cdot 0,00033),$$

$$S_0 = a_f o + (1 - a_f)(2 \cdot 0,20642 + 0,0145 + 2 \cdot 0,00033)$$

и отношение числа атомов соответственно C , H , N , Ar к числу атомов кислорода

$$\beta_C = [a_f c + (1 - a_f) 0,00033] / S_0,$$

$$\beta_H = [a_f h + 2(1 - a_f) 0,0145] / S_0,$$

$$\beta_N = [a_f n + 2(1 - a_f) 0,76952] / S_0,$$

$$\beta_{Ar} = (1 - a_f) 0,00923 / S_0.$$

Система для расчета равновесного состава включает уравнения: материального баланса (через мольные доли)

$$\beta_C a_{O_\Sigma} = a_{CO_2} + a_{CH_4} + a_C + a_{CO} + a_{HCN}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \beta_H a_{O_\Sigma} &= 2a_{H_2O} + 4a_{CH_4} + 2a_{H_2} + a_H + a_{OH} \\ &+ a_{HCN} + 3a_{NH_3} + a_{HNO_3}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \beta_N a_{O_\Sigma} &= 2a_{N_2} + a_N + a_{NO} + a_{NO_2} + a_{HCN} + \\ &+ a_{NH_3} + a_{HNO_3}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\beta_{Ar} a_{O_\Sigma} = a_{Ar}, \quad (14)$$

где число атомов кислорода в одном моле продуктов горения

$$\begin{aligned} a_{O_\Sigma} &= 2a_{O_2} + a_{H_2O} + 2a_{CO_2} + 3a_{O_3} + a_O + \\ &a_{OH} + a_{CO} + a_{NO} + 2a_{NO_2} + 3a_{HNO_3}. \end{aligned}$$

Для суммы мольных долей компонентов смеси имеем

$$\sum_k a_{nk} = 1, \quad (15)$$

Уравнения химического равновесия (16)-(27) записутся:

$$H_2 \leftrightarrow 2H, \quad K_1 = (a_H^2 / a_{H_2}) p,$$

$$H_2O \leftrightarrow 2H + O, \quad K_2 = (a_H^2 a_O / a_{H_2O}) p^2,$$

$$CO_2 \leftrightarrow C + 2O, \quad K_3 = (a_C a_O^2 / a_{CO_2}) p^2,$$

$$N_2 \leftrightarrow 2N, \quad K_4 = (a_N^2 / a_{N_2}) p,$$

$$CO \leftrightarrow C + O, \quad K_5 = (a_C a_O / a_{CO}) p,$$

$$CH_4 \leftrightarrow C + 4H, \quad K_6 = (a_C a_H^4 / a_{CH_4}) p^4,$$

$$HCN \leftrightarrow H + C + O,$$

$$K_7 = (a_H a_C a_N / a_{HCN}) p^2,$$

$$O_2 \leftrightarrow 2O, \quad K_8 = (a_O^2 / a_{O_2}) p,$$

$$O_3 \leftrightarrow 3O, \quad K_9 = (a_O^3 / a_{O_3}) p^2,$$

$$OH \leftrightarrow O + H, \quad K_{10} = (a_O a_H / a_{OH}) p,$$

$$NO \leftrightarrow N + O, \quad K_{11} = (a_N a_O / a_{NO}) p,$$

$$NO_2 \leftrightarrow N + 2O, \quad K_{12} = (a_N a_O^2 / a_{NO_2}) p^2,$$

$$NH_3 \leftrightarrow N + 3H, \quad K_{13} = (a_N a_H^3 / a_{NH_3}) p^3,$$

$$HNO_3 \leftrightarrow H + N + 3O,$$

$$K_{14} = (a_H a_N a_O^3 / a_{HNO_3}) p^4.$$

В данной системе уравнений справедливо сохранение числа атомов в продуктах горения

$$S \frac{p_i V_i}{T_i} = \frac{p}{x} \sum_n \frac{V_{bn}}{T_{bn}} (2a_{H_2} + 3a_{H_2O} + 3a_{CO_2} + 2a_{N_2} + a_{Ar} + a_C + a_H + a_O + a_N + 2a_{CO} + 5a_{CH_4} + 3a_{HCN} + 2a_{O_2} + 3a_{O_3} + 2a_{OH} + 2a_{NO} + 3a_{NO_2} + 4a_{NH_3} + 5a_{HNO_3}).$$

Константы химического равновесия $K_1 - K_{14}$ являются функциями текущей температуры продуктов сгорания и рассчитываются на основе термодинамического уравнения для каждой m -ой реакции (уравнения изобары реакции) $(d \ln K_p / dT)_m = (\Delta H_T^\circ)_m / RT^2$, где

ΔH_T° - тепловой эффект при температуре T . Поскольку в практических расчетах целесообразно пользоваться не свободной энергией G_T° , а приведенной энергией Гиббса $\Phi'_T = -(G_T^\circ - H_0^\circ)/T$, тогда имеем уравнение

$$\lg K_m(T) = \left[\sum_k \nu_k \Phi'_k(T) - \sum_j \nu_j \Phi'_j(T) - \Delta H_0^\circ / T \right] / 2,3026R,$$

где ν_j , ν_k - стехиометрические коэффициенты m -ой реакции; $\Phi'_k(T)$ и $\Phi'_j(T)$ - приведенные энергии Гиббса соответствующих реагентов, ΔH_0° - тепловой эффект m -ой реакции при абсолютном нуле температуры. Значения $\Phi'(T)$ для текущей температуры T рассчитываются на основе аппроксимирующих уравнений для соответствующих реакций диссоциации.

Математическая модель процесса представляет собой систему дифференциальных уравнений, для решения которой используется метод Рунге-Кутта четвертого порядка. При этом на каждом шаге счета рассчитывается равновесный состав продуктов горения в каждой зоне. После окончания горения до момента открытия выпускного клапана расчет ведется аналогично, за исключением уравнения (9), которое принимает вид: $x = 0$.

Система уравнений для расчета равновесного состава продуктов (11)-(27) является нелинейной, для ее решения используется метод Ньютона. В расчетах варьируется: коэффициент избытка воздуха α , угол опера-

жения зажигания φ_i , степень сжатия ε , частота вращения коленчатого вала n_0 . В качестве модельных топлив принимались: водород H_2 , метан CH_4 , пропан C_3H_8 , бутан C_4H_{10} , гептан C_7H_{16} , изооктан C_8H_{18} и бензин (смесь изооктана и гептана).

На рис. 2 приведены зависимости концентрации токсичных веществ от коэффициента избытка воздуха α для метана (сплошная линия), бензина-92 (пунктир) и водорода (сплошная тонкая линия), $\varphi_i=20$ град. п.к.в., $\varepsilon=7$, $n_0=2000$ об/мин, $T_a=298$ К, $p_a=1$ атм; для остальных рассматриваемых топлив имеет тот же характер. При обогащении смеси увеличивается выход CO , HCN и NH_3 , причем достаточно резко при уменьшении коэффициента избытка воздуха до $\alpha=0,6-0,8$; доля NO_x и HNO_3 здесь минимальна. При обеднении смеси ($\alpha>0,8$) возрастает выход NO_x и HNO_3 и при $\alpha>1$ их концентрации достигают максимального значения.

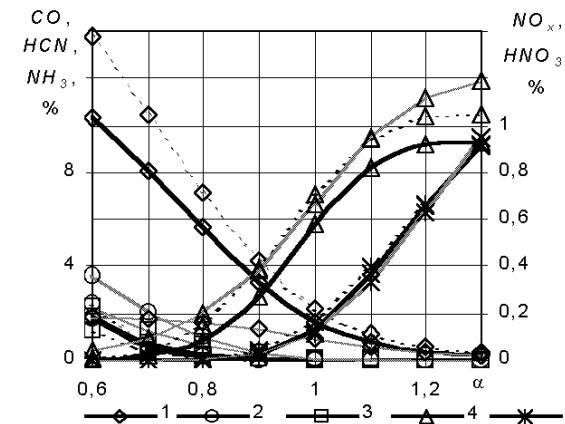


Рис. 2. Зависимость концентрации токсичных веществ от α : 1- CO (для водорода $CO \cdot 10^2$), 2- $HCN \cdot 10^4$ (для водорода $HCN \cdot 10^7$), 3- $NH_3 \cdot 10^3$, 4- NO_x , 5- $HNO_3 \cdot 10^7$

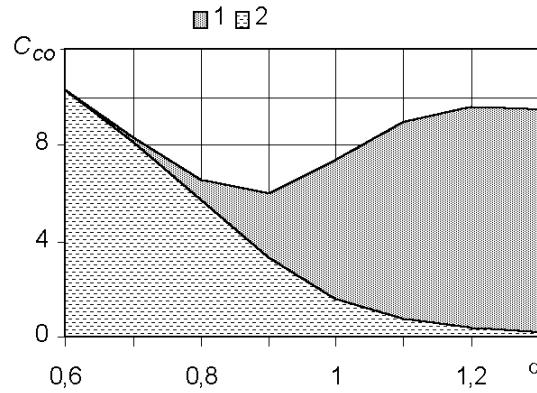


Рис. 3. Суммарная токсичность метана (1) и доля, вносимая CO (2)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

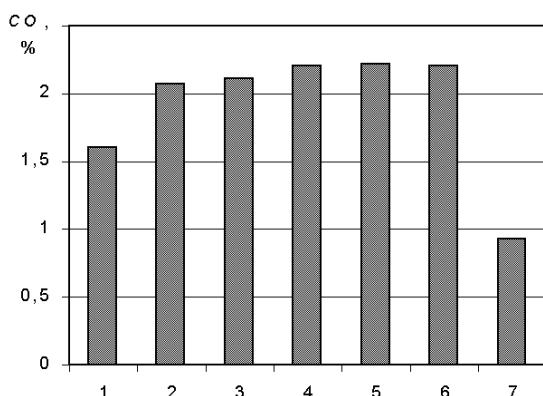


Рис. 4. Зависимость концентрации CO от вида топлива: 1 – метан, 2 – пропан, 3 – бутан, 4 – гептан, 5 – изооктан, 6 – бензин-92, 7 – водород ($\times 10^2$)

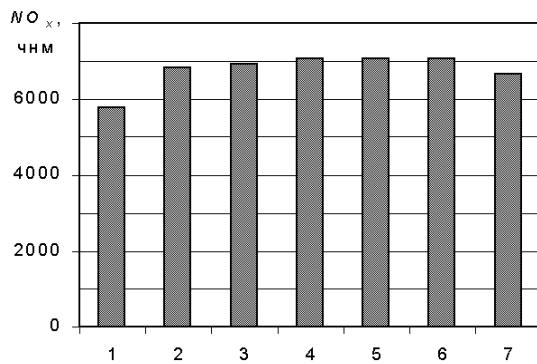


Рис. 5. Зависимость концентрации NO_x от вида топлива: 1 – метан, 2 – пропан, 3 – бутан, 4 – гептан, 5 – изооктан, 6 – бензин-92, 7 – водород

На рис. 3 приведена суммарная токсичность метана (природного газа). На рис. 4 и 5 приведены сравнительные оценки различных топлив в зависимости от выбросов CO и NO_x.

В результате расчета получаем:

- температуру в каждой зоне и соответственно градиент температур в продуктах;
 - полный состав продуктов горения в каждой зоне;
 - суммарный выход продуктов, позволяющий оценить количество выбросов вредных веществ (CO, NO, NO₂, HCN, NH₃, HNO₃), образующихся в процессе горания.
- В качестве дополнительного результата имеем реальную (действительную) теплоту сго-

рания для любого однокомпонентного или смесевого топлива.

Результаты численного исследования показывают (на момент окончания горения), что основными токсичными составляющими продуктов горения из рассматриваемых являются оксид углерода CO и окислы азота NO_x, доля остальных компонентов незначительна. Из окислов азота образуется практически только NO (доля NO₂ менее 1% от их общего количества).

ЛИТЕРАТУРА

1. Сеначин П.К., Свердлов М.Ю., Жгутова В.И. Математическая модель процесса горения смеси в двигателе с искровым зажиганием с учетом равновесного состава продуктов горения // Экспериментальные методы в физике структурно-неоднородных сред. "Гидродинам. структурно-неднород. сред" Том 4. // Труды Всерос. научно-техн. конф. АлтГТУ, 1996. Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1997. - С. 80-84.
2. Ильина М.А., Свердлов М.Ю., Сеначин П.К. Динамика горения смеси в двигателе с искровым зажиганием при различных законах изменения поверхности пламени // Совершенствование рабочих процессов ДВС: Труды АлтГТУ им. И.И. Ползунова. Авторакторный фак-т. Вып. 8. Ч. 1. Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 1999. - С. 50-58.
3. Матиевский Д.Д., Сеначин П.К., Свердлов М.Ю., Ильина М.А. Новый подход к проблеме моделирования горения смеси в ДВС с искровым зажиганием // Ползуновский альманах. 1999. № 2.- С. 101-110.
4. Жгутова В.И., Свердлов М.Ю., Сеначин П.К., Матиевский Д.Д. Моделирование взрыва газа в бомбе постоянного объема с учетом равновесного состава продуктов горения // Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова. 1999. №2. - С. 127-136.
5. Ильина М.А., Свердлов М.Ю., Матиевский Д.Д., Сеначин П.К. Моделирование процессов горения и теплообмена в ДВС с искровым зажиганием с учетом формы камеры горения // Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова. 2000. №2. - С. 44-51.
6. Жгутова В.И., Свердлов М.Ю., Сеначин П.К., Матиевский Д.Д. Моделирование горения смеси в ДВС с искровым зажиганием с образованием токсичных веществ в рамках многозонной модели // Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова. 2000. №2. - С. 67-76.
7. Жгутова В.И., Свердлов М.Ю., Сеначин П.К., Матиевский Д.Д. Моделирование процесса горения в бомбе постоянного давления с учетом равновесного состава продуктов горения // Повышение экологической безопасности автотракторной техники: Сборник статей / Под ред. А.Л. Новоселова. Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 2000. - С. 3-26.