

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

А.П. Сеначин, А.А. Коржавин, П.К. Сеначин

*Изложены результаты исследований глобальной кинетики модельного дизельного топлива на основе смеси цетана и 1-метилнафталина путем численного решения обратной задачи динамики самовоспламенения топливно-воздушного факела дизеля. Анализ основан на экспериментальных данных по задержкам воспламенения топлива, полученным на лабораторной одноцилиндровой установке, и физико-химической модели самовоспламенения локального объема, содержащего некоторое количество паров топлива, при адиабатическом сжатии в условиях дизеля в рамках задачи динамического теплового взрыва.*

*Ключевые слова: дизель; динамика самовоспламенения; задержка воспламенения топлива; глобальная кинетика; численное решение; обратная задача.*

### Введение

Среди физико-химических процессов, протекающих в камере сгорания дизельного двигателя, особое значение имеет процесс самовоспламенения порции дизельного топлива, впрыснутой в камеру сгорания в определенный момент времени. Процесс горения заряда начинается только после того, как произойдет воспламенение этой порции топлива, то есть после истечения некоторого периода индукции, величина которого заранее неизвестна и определяется исключительно на основе экспериментальных методов. В то же время задержка воспламенения топлива является важной характеристикой рабочего процесса дизеля, знание которой необходимо еще на стадии проектирования двигателя.

В настоящее время в литературе практически отсутствуют попытки определения задержки воспламенения топлива в дизеле теоретическими методами. Поэтому до сих пор она является экспериментальной величиной или рассчитывается по эмпирическим или полуэмпирическим формулам, полученным на основе экспериментальных данных и, как правило, имеющих весьма ограниченное применение [1-11].

Для разработчиков новых моделей дизельных двигателей важно иметь способ по возможности более точного определения задержки воспламенения топлива на основе расчета начальной стадии рабочего процесса двигателя с помощью адекватной физическоматематической модели и строгих уравнений энергии, учитывающих процессы тепломассообмена и предпламенные химические реакции. Эта задача должна решаться в рамках

теории динамического теплового взрыва, поскольку именно к этому классу задач теории горения относится рассматриваемая задержка воспламенения топлива [12].

Преыдущие наши работы по определению задержки воспламенения топлива в дизеле аналитическими методами на основе известной макрокинетики (прямая задача) не учитывали многие аспекты этого весьма сложного физико-химического процесса и давали только качественную зависимость ряда конструктивных, термодинамических и некоторых других параметров процесса на рассматриваемую величину [13-19].

В данной работе предпринимается попытка определения констант глобальной кинетики (обратная задача) модельного дизельного топлива, состоящего из равных долей цетана и 1-метилнафталина, на основе физико-математической модели самовоспламенения некоторого локального объема топливно-воздушной смеси в камере сгорания дизеля [18, 19]. Определение констант макрокинетики производится путем численного моделирования процесса воспламенения топлива в дизеле типа АЧ13/14 и сопоставления полученных результатов с собственными экспериментальными данными, полученными на опытной одноцилиндровой экспериментальной установке УК-8 ОАО «Алтайдизель».

### ИСХОДНЫЙ СОСТАВ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

С целью адекватного моделирования рабочего процесса дизеля, в задаче необходимо задать коэффициент избытка воздуха  $\alpha$  и основные 5 компонентов составляющих (объемных долей) атмосферного (наддувочного) воздуха. Для воздуха средней влажности имеем состав: кислорода  $a_{O_2}=0.20642$ ,

азота  $a_{N_2}=0.76952$ , паров воды  $a_{H_2O}=0.01450$ , аргона  $a_{Ar}=0.00923$  и двуокиси углерода  $a_{CO_2}=0.00033$  [20].

Для определения исходного состава газа в цилиндре необходимо также задать значения коэффициентов наполнения цилиндра  $\eta_v$  и остаточных газов  $\gamma_r$  и вычислить давление  $p_a$  и температуру  $T_a$  смеси в начале сжатия (в момент закрытия впускного клапана). Для определения состава остаточных газов необходимо провести расчет состава продуктов сгорания. Сгорание в дизеле при  $\alpha > 1$  будем условно считать полным. Реакцию сгорания топлива (брутто-процесс) представим уравнением глобальной кинетики (макрокинетики)  $C_cH_hO_o + (c+h/4-o/2)O_2 \rightarrow cCO_2 + (h/2)H_2O$ . (1)

Исходный состав газовой смеси на момент закрытия впускного клапана находится по ранее разработанной методике [19, 21]. В результате расчета в цилиндре имеем: кислорода-  $v_{1a}$ , азота-  $v_{2a}$ , паров воды-  $v_{3a}$ , аргона-  $v_{4a}$  и двуокиси углерода-  $v_{5a}$  молей.

Число молей воздушного заряда до момента начала впрыска топлива в цилиндр двигателя определится из уравнения состояния на момент закрытия впускного клапана (используем для контроля баланса)

$$v_a = p_a V_a / (RT_a) = \sum_{j=1}^5 a_{ja}.$$

Теперь (если это необходимо) можно найти действительный (эффективный) коэффициент избытка воздуха  $\alpha_a = v_{1a} / (1000 L_0 a_{1k} m_z)$ .

#### ЛОКАЛЬНЫЙ ОБЪЕМ

В качестве исходных примем следующие допущения относительно физико-химических процессов, протекающих в локальном объеме и в системе в целом до момента воспламенения факела:

1) топливно-воздушный факел поджигается от воспламенившегося локального объема, находящегося вне факела и образовавшегося практически в момент начала подачи топлива в цилиндр из испарившихся мельчайших капель (вблизи сопла);

2) капли испаряются за счет внутренней энергии локального объема, который в дальнейшем вплоть до самовоспламенения, не обменивается энергией и массой с окружающим газом, другими каплями вне факела и с самим топливным факелом;

3) с целью упрощения задачи полагаем, что образовался один локальный объем;

4) физическое время задержки воспламенения [11] не учитываем.

В локальном объеме, текущее уравнение состояния которого

$$pw = m_l R \theta / \langle M_l \rangle = m_l R \theta / \sum_{j=1}^6 a_j M_j = R \theta,$$

протекает предпламенная брутто-реакция, кинетическое уравнение которой для смешанного топлива (в условную молекулу которого  $C_cH_hO_o$  ( $j=6$ ) входит  $c$ - атомов углерода,  $h$ - атомов водорода и  $o$ - атомов кислорода) было записано выше. Начальный состав смеси в локальном объеме может быть определен на основе ранее найденного состава газа в начале процесса сжатия:

$$a_{1l} = (c + h/4 - o/2) / B, \quad (2)$$

$$a_{2l} = (a_{2a} / a_{1a}) (c + h/4 - o/2) / B, \quad (3)$$

$$a_{3l} = (a_{3a} / a_{1a}) (c + h/4 - o/2) / B, \quad (4)$$

$$a_{4l} = (a_{4a} / a_{1a}) (c + h/4 - o/2) / B, \quad (5)$$

$$a_{5l} = (a_{5a} / a_{1a}) (c + h/4 - o/2) / B, \quad (6)$$

$$a_{6l} = 1 / [1 + (c + h/4 - o/2) / a_{1a}] = 1 / B. \quad (7)$$

Здесь, согласно (7),  $B = 1 + (c + h/4 - o/2) / a_{1a}$ .

Исходная температура смеси в локальном объеме (непосредственно после момента начала подачи топлива  $\phi_1$ ) находится из уравнения баланса энергии (энтальпии) для одного моля смеси, с учетом процессов прогрева капель от температуры подачи топлива из сопла  $T_1$  до температуры кипения  $T_s$  и полного их испарения для заранее заданного для него коэффициента избытка воздуха

$$\theta_1 = \frac{T_1 \sum_{j=1}^5 a_j C_{pj} + a_{6l} (C_f (T_1 - T_s) - L_s)}{\sum_{j=1}^5 a_{jl} C_{pj} + a_{6l} C_{p6}}. \quad (8)$$

Скорость реакции в реальном масштабе времени для  $j$ -го компонента смеси на основе известного брутто-процесса запишется как

$$W_j = \zeta_j \xi_j k A_6^{s_6} A_1^{s_1} \exp[-E / (R \theta)],$$

где  $A_6, A_1$ - концентрации паров топлива  $C_cH_hO_o$  ( $j=6$ ) и кислорода  $O_2$  ( $j=1$ ) соответственно,  $\zeta_j, \xi_j$ - знаковый и стехиометрический коэффициенты для  $j$ -го компонента смеси,  $k, E, s$ - константа скорости, энергия активации и суммарный порядок химической реакции соответственно. Для удобства решения задачи положим, что порядки реакции по компонентам  $A_6, A_1$  равны, то есть  $s_6 = s_1 = s/2$ .

Тогда скорость брутто-реакции, с учетом  $A_j = a_j p / (R \theta)$ , будет равна

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

$$W = k(a_1 a_6)^{5/2} \left( \frac{p}{R\theta} \right)^5 \exp\left( -\frac{E}{R\theta} \right), \quad (9)$$

а скорости по компонентам смеси запишутся следующим образом:

- для паров топлива ( $j=6$ ) и кислорода  $O_2$  ( $j=1$ )

$$W_6 = -W, \quad (10)$$

$$W_1 = \left( c + \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right) W, \quad (11)$$

- для двуокиси углерода  $CO_2$  ( $j=5$ ) и паров воды  $H_2O$  ( $j=3$ )

$$W_5 = cW, \quad (12)$$

$$W_3 = \frac{h}{2} W, \quad (13)$$

- для инертных компонентов, азота  $N_2$  ( $j=2$ ) и аргона  $Ar$  ( $j=4$ )

$$W_2 = 0, \quad (14)$$

$$W_4 = 0. \quad (15)$$

Текущая концентрация  $j$ -го компонента смеси в условиях переменного объема, температуры и давления описывается следующим уравнением [22]

$$\dot{A}_j = \frac{W_j}{2\pi n_0} + A_j \left( \frac{\dot{p}}{p} - \frac{\dot{\theta}}{\theta} - \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} \sum_j W_j \right),$$

где точка над символом обозначает производную по углу п.к.в., то есть  $\dot{A}_j = dA_j/d\varphi$ .

Поскольку мольная и относительная концентрации  $j$ -го компонента смеси связаны соотношением  $A_j = a_j p / (R\theta)$ , то с использованием логарифмической производной этого выражения, из предыдущей формулы имеем уравнение изменения относительных концентраций компонентов

$$\dot{a}_j = \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} \left( W_j - a_j \sum_j W_j \right),$$

откуда для конкретных компонентов смеси в локальном объеме, с учетом (10)-(15), имеем:

$$\dot{a}_1 = \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W \left[ -c - \frac{h}{4} + \frac{o}{2} + a_1 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right) \right], \quad (16)$$

$$\dot{a}_2 = -\frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W a_2 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right), \quad (17)$$

$$\dot{a}_3 = -\frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W \left[ \frac{h}{2} + a_3 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right) \right], \quad (18)$$

$$\dot{a}_4 = \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W a_4 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right), \quad (19)$$

$$\dot{a}_5 = \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W \left[ c + a_5 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right) \right], \quad (20)$$

$$\dot{a}_6 = \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} W \left[ -1 + a_6 \left( 1 - \frac{h}{4} - \frac{o}{2} \right) \right]. \quad (21)$$

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Как уже отмечалось, локальный объем мал по сравнению с общим объемом системы, поэтому протекающие в нем предпламенные химические реакции не оказывают влияния на динамику давления в рассматриваемой системе. Объемом жидкого топлива по сравнению с газовой фазой также пренебрегаем. Система уравнений процесса самовоспламенения локального объема в объеме камеры сгорания, кроме (9), (16)-(21), включает уравнения:

- объема системы и его динамики (для аксиального механизма)

$$\dot{V} = \frac{V_c(\varepsilon - 1)}{2} \left( \frac{\varepsilon + 1}{\varepsilon - 1} - \cos\varphi + \frac{1}{\lambda} - \sqrt{\frac{1}{\lambda^2} - \sin^2\varphi} \right), \quad (22)$$

$$\dot{V} = \frac{V_c(\varepsilon - 1)}{2} \sin\varphi \left( 1 + \frac{\cos\varphi}{\sqrt{1/\lambda^2 - \sin^2\varphi}} \right), \quad (23)$$

- закона поступления жидкого топлива (для  $\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_1 + \varphi_z$ )

$$\dot{m}_f = \frac{2\pi m_z}{\varphi_z} \sin^2 \left( \frac{\varphi - \varphi_1}{\varphi_z} \cdot \pi \right), \quad (24)$$

(здесь  $m_z$  - масса топлива, поступающая в камеру сгорания за один цикл,  $\varphi_z$  - длительность цикловой подачи топлива),

- массы испарившегося топлива - скорости образования массы газовой фазы [23]

$$\dot{m}_s = \text{Nu}_m \frac{3\lambda_g M_f}{\pi n_0 \rho_f \langle a \rangle^2 L_s} m_f (T - T_s), \quad (25)$$

- состояния воздушного заряда (смеси общее)

$$pV = \left( \sum_{j=1}^5 \frac{m_j}{M_j} + \frac{m_s}{M_f} \right) RT, \quad (26)$$

- динамики давления (уравнения энергии всей смеси)

$$\begin{aligned} \dot{p}V \left( \langle C_p \rangle / R - 1 \right) = & -p\dot{V} \langle C_p \rangle / R + \\ & \sum_n \alpha_n (T_n - T) / 2\pi n_0 + \\ & [H_f(T_s) - H_f(T) - L_s] \cdot \dot{m}_s / M_f + \\ & C_f (T_0 - T_s) \cdot \dot{m}_f / M_f \end{aligned}, \quad (27)$$

- динамики температуры в локальном объеме (уравнения энергии, из которого с помощью уравнения состояния исключен объем)

$$\dot{\theta} = \frac{R\theta}{\langle C_{pl} \rangle p} - \frac{1}{\langle C_{pl} \rangle} \sum_j \dot{a}_j H_j, \quad (28)$$

Расчет задержки воспламенения топлива в дизеле по уравнениям (9), (16)-(28) проводится путем численного интегрирования системы дифференциальных уравнений до тех пор, пока степень выгорания топлива в локальном объеме не достигнет заданной величины, которую можно положить равной 99%, то есть период индукции, определяемый критическим значением угла ПКВ  $\varphi^*$ , заканчивается при условии

$$a_6/a_{6l} \leq 0,01. \quad (29)$$

#### ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ

В системе уравнений (9), (16)-(29) температурные зависимости теплоемкостей и энтальпии частиц взяты из справочных данных [24-26], а также найдены одним из аддитивно-групповых методов (по Джонсону и Хуангу, Рихани и Доресвейни и другим) [27].

В качестве модели дизельного топлива в задаче рассматривается смесевое топливо, состоящее из 50% цетана  $C_{16}H_{34}$  и 50% 1-метилнафталина  $C_{11}H_{10}$  (эталонное топливо), сгорание которого протекает по макрокинетическому уравнению (1).

Как известно, задержка воспламенения топлива в дизеле есть сумма двух времен – физического и химического времени задержки, то есть  $\tau_i = \tau_{\text{физ}} + \tau_{\text{хим}}$ . Как уже отмечалось выше, физическое время задержки воспламенения в данной работе мы не учитываем, а именно, полагаем  $\tau_{\text{физ}} = 0$  и  $\tau_i = \tau_{\text{хим}}$ .

Для численного решения задачи о задержке воспламенения необходимо знать константы макрокинетики в уравнении (9) – энергию активации  $E$ , предэкспонент константы скорости  $k$  и суммарный порядок химической реакции  $s$ . Необходимо отметить, что эти макрокинетические константы для дизельного топлива в настоящее время известны с весьма низкой степенью точности, не позволяющей непосредственно приступить к численному решению задачи.

Отметим, что в эмпирических формулах разных авторов для расчета задержки воспламенения топлива в дизеле, которые обычно имеют вид формулы О.М. Тодеса [28, 29] (полученной для периода индукции адиабатического теплового взрыва)

$$\tau_i = Bp^n \exp(E/RT), \quad (30)$$

в качестве энергии активации  $E$  и суммарного порядка реакции  $s = 1 - n$  принимаются существенно отличающиеся друг от друга численные значения [11].

Другая проблема выбора констант макрокинетики заключается в том, что и для легких и для тяжелых углеводородов макрокинетика самовоспламенения замечательна тем, что энергия активации суммарной реакции в области температур 700-900 К испытывает довольно резкий излом, подобный приведенному на рисунке 1, взятому из [29].

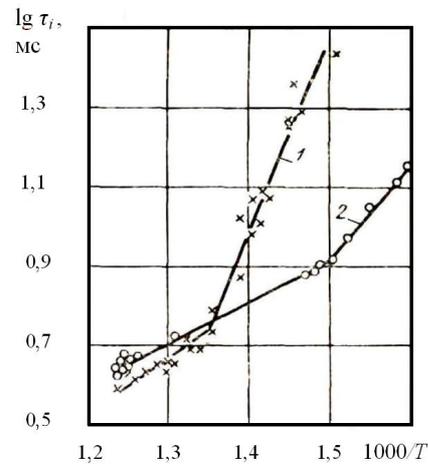


Рисунок 1 – Задержка воспламенения топлива при впрыске в нагретую бомбу: 1- стандартное дизельное топливо; 2- облегченное топливо. Давление в бомбе 1,5 МПа.

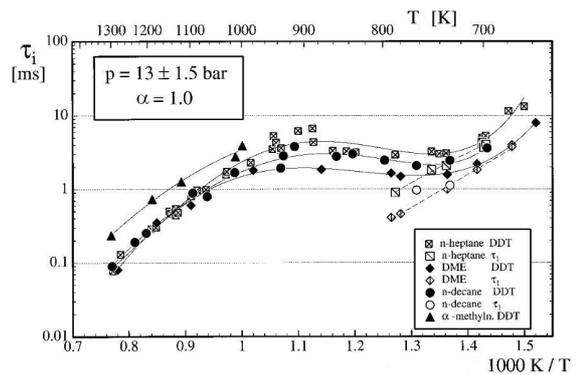


Рисунок 2 – Зависимость задержки воспламенения топливно-воздушных смесей в дизеле для различных углеводородных топлив

Более детальное рассмотрение переходной области (от низких температур к высоким) показывает, что и для легких и для тяжелых углеводородов эта область достаточно широкая (до 200 К) и энергия активации

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

для этой области температур (от 700 до 900 К) является весьма неопределенной величиной. Например, для весьма широкой группы углеводородов переходная область приведена на рисунке 2, взятому из [30]. Видно, что в переходной области энергия активации имеет неопределенное значение.

Подобное поведение энергии активации суммарной химической реакции в переходной области температурного интервала, по-видимому, связано с двухстадийностью самовоспламенения углеводородов. Двухстадийность самовоспламенения углеводородов неоднократно отмечалась разными авторами.

Согласно формуле О.М.Тодеса (30), энергия активации может быть определена из графика зависимости задержки воспламенения топлива от обратной температуры  $\lg \tau_i(1/T)$  по двум точкам по формуле [11, 29]

$$E = 2,303R \cdot \frac{\lg \tau_1 - \lg \tau_2}{1/T_1 - 1/T_2}. \quad (31)$$

Вычисляя по экспериментальным данным (рисунок 1), полученным при постоянном давлении  $p = const$ , имеем для высокотемпературной области энергию активации суммарной реакции  $E=25$  кДж/моль, а для низкотемпературной – около 90 кДж/моль. В работе [11] приводятся близкие данные для  $E$  – высокотемпературная область 25140, низкотемпературная – 76670 Дж/моль.

Таким образом, при моделировании задержки воспламенения топлива в дизеле с помощью макрокинетического уравнения (9) возникает проблема выбора оптимальной величины энергии активации химической реакции. Поскольку при самовоспламенении термодинамическое состояние смеси последовательно проходит интервал от низких температур до высоких (рисунки 1 и 2), включая переходную область, необходимо также выяснить влияние энергии активации на задержку воспламенения топлива и сопутствующие ей параметры.

### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАКРОКИНЕТИКИ

При численном моделировании задачи вначале была принята энергия активации  $E$  макрокинетической реакции 25140 Дж/моль, характерная для высокотемпературной области (рисунки 1 и 2), и рассмотрено влияние коэффициента избытка воздуха  $\alpha$  в локальном объеме (ЛО) на задержку воспламенения топлива.

Численное моделирование процесса самовоспламенения топлива в ЛО, который, как уже отмечалось выше, расположен на пери-

ферии дизельного факела на небольшом расстоянии от сопла, производилось следующим образом.

Для  $\alpha=1$  по известной из экспериментальных данных задержке воспламенения, полученной на опытной одноцилиндровой установке, определялась эффективная константа скорости суммарной реакции при порядке реакции  $s=1,5$ . Далее для этой константы скорости варьировался коэффициент избытка воздуха в ЛО. Расчеты показывают, что при увеличении  $\alpha$  задержка воспламенения сначала уменьшалась, а затем медленно возрастала. Минимум соответствовал  $\alpha=1,35$  (рисунок 3, нижняя кривая).

Затем для нового коэффициента избытка воздуха в ЛО  $\alpha=1,35$  определялась новая эффективная константа скорости при порядке реакции 1,5 для тех же экспериментальных данных. При этом варьирование величины коэффициента избытка воздуха  $\alpha$  в ЛО подтверждало наличие минимума задержки при  $\alpha=1,35$  (рисунок 3, верхняя кривая).

Аналогичные расчеты были проведены для энергии активации  $E=76670$  Дж/моль, характерной для низкотемпературной области (рисунок 4, нижняя кривая). При варьировании коэффициента избытка воздуха в ЛО получили минимум при величине  $\alpha=1,19$ . Для этого значения нашли новую константу скорости и убедились в наличии минимума при  $\alpha=1,19$  (рисунок 4, верхняя кривая).

Как показывает численный эксперимент, вариация энергии активации в широких пределах при постоянном суммарном порядке химической реакции  $s=1,5$  выявляет зависимость оптимального коэффициента избытка воздуха в ЛО (с точки зрения минимальной задержки воспламенения) – при увеличении энергии активации  $E$  от 25140 до 76670 Дж/моль оптимальный коэффициент избытка воздуха  $\alpha$  в ЛО монотонно уменьшается от значения 1,35 до 1,19. При этом предэкспонент константы скорости суммарной химической реакции  $k$ , соответствующий оптимальному значению  $\alpha$ , монотонно растет от значения  $2,18 \cdot 10^8$  до  $5,85 \cdot 10^9$  моль<sup>-0,5</sup> м<sup>1,5</sup> с<sup>-1</sup>.

При окончательном выборе величины эффективной энергии активации химической реакции, по-видимому, можно остановиться на значении  $E=38000$  Дж/моль, являющейся средней величиной между низкотемпературной и высокотемпературной областями (рисунки 1 и 2), то есть характерной для переходной области.

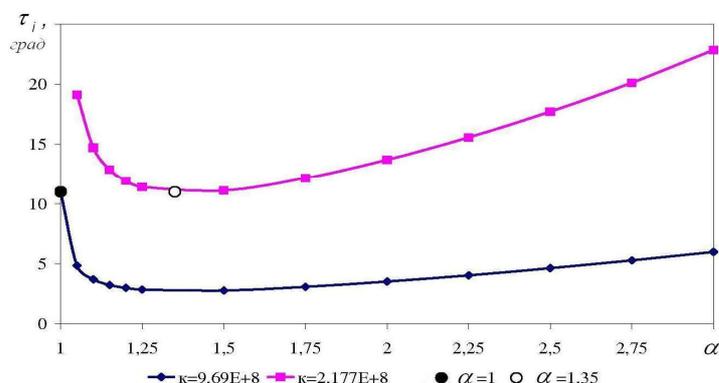


Рисунок 3 – Зависимость задержки воспламенения топлива в дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО при энергии активации  $E=25140$  Дж/моль и порядке реакции  $s=1,5$

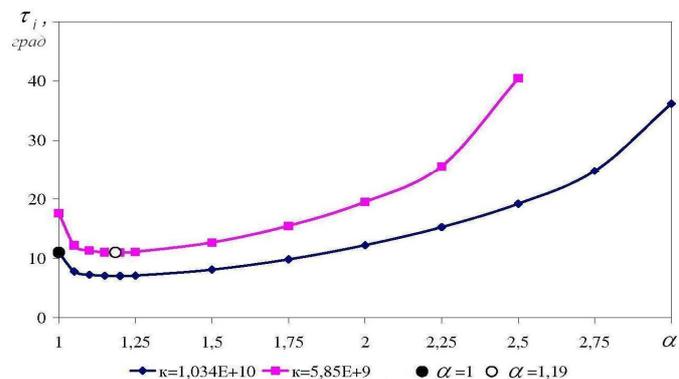


Рисунок 4 – Зависимость задержки воспламенения топлива в дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО при энергии активации  $E=76670$  Дж/моль и порядке реакции  $s=1,5$

Таблица 1  
Сравнение экспериментальных и моделируемых значений задержек воспламенения топлива в дизеле 1Ч 13/14 (УК-8)

Степень сжатия, $\varepsilon$	Частота вращения, $n$ , $\text{мин}^{-1}$	Задержка воспламенения $\tau_i$ , Град п.к.в.		Оптимальное значение $\alpha$ в ЛО	Значения кинетических констант		
		Экспер.	Расчет		$E$ , Дж/моль	$k$ , (моль, м, с)	$s$
1	2	3	4	5	6	7	8
15,5	1300	9,5	9,5	1,35	25140	$2,18 \cdot 10^8$	1,5
				1,19	76670	$5,85 \cdot 10^9$	
				1,30	38000	$4,04 \cdot 10^8$	
15,5	1700	10,9	11,71	1,30	38000	$4,04 \cdot 10^8$	1,5
	1500	9,4	10,51				
	1300	9,5	9,5				
	1200	9,1	8,91				
	1100	9,0	8,32				
15,5	1700	10,9	10,91	1,40	38000	$9,39 \cdot 10^{12}$	2,5
	1500	9,4	9,96				
	1300	9,5	9,5				
	1200	9,1	9,1				
	1100	9,0	8,7				
	1700	9,7	8,73				

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

Продолжение таблицы 1

1	2	3	4	5	6	7	8
17,5	1500	7,8	8,2	1,40	38000	$9,39 \cdot 10^{12}$	2,5
	1300	8,2	7,39				
	1200	8,2	7,38				
	1100	7,3	7,14				

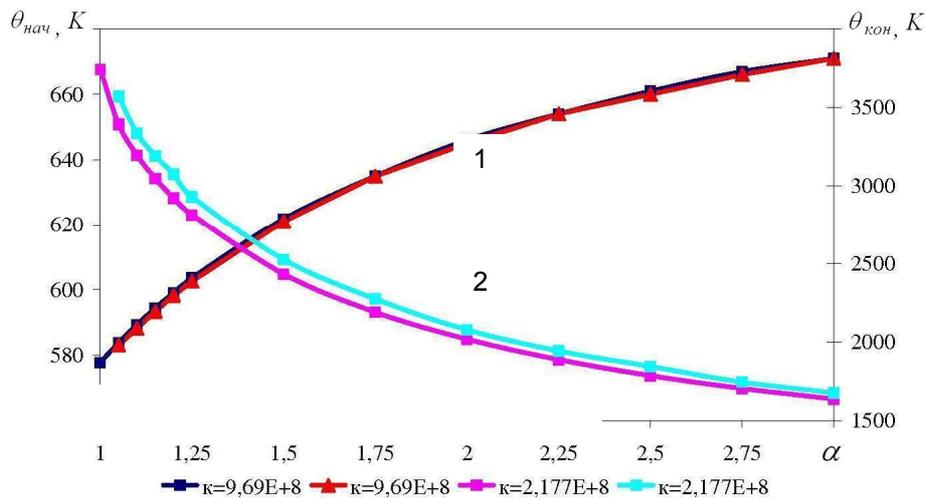


Рисунок 5 – График зависимости температуры смеси в ЛО при варьировании коэффициента избытка воздуха при энергии активации  $E=25140$  Дж/моль и порядке реакции  $s=1,5$ :  
1 – температура смеси до самовоспламенения;  
2 – температура после сгорания смеси (без учета диссоциации)

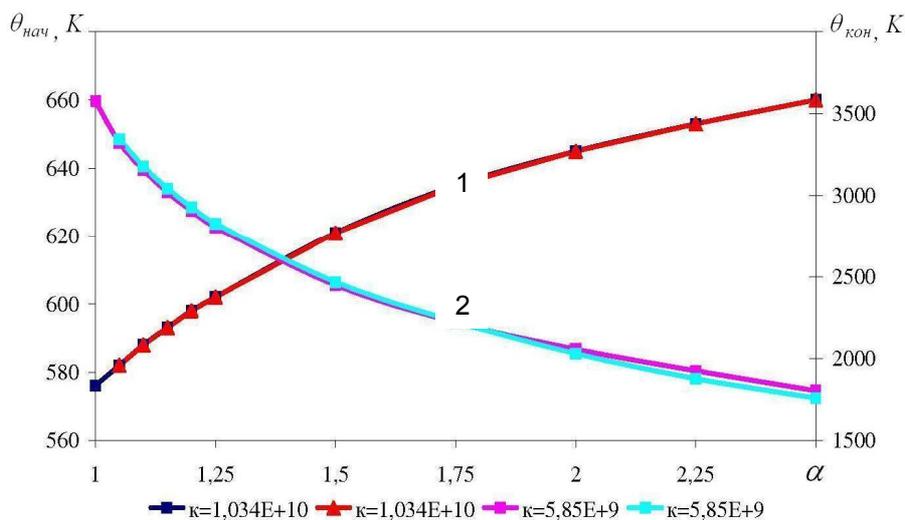


Рисунок 6 -График зависимости температуры смеси в ЛО при варьировании коэффициента избытка воздуха при энергии активации  $E=76670$  Дж/моль и порядке реакции  $s=1,5$  (обозначения на рисунке 5)

Кроме того, анализ ряда эмпирических формул по задержкам воспламенения топли-

ва, имеющих вид теоретической формулы О.М. Тодеса (30), обзор которых приведен в

работе [11], показывает, что в них для дизельного топлива принято значение барического показателя, соответствующее порядку реакции  $s=1-n$ , в большинстве своем, лежащим в пределах от 2,0 до 3,0 (таблица 2). Поэтому нами было проведено численное исследование влияния порядка реакции на тангенс угла наклона скоростной характеристики  $\tau_i(n)$ .

Для энергии активации  $E=38000$  Дж/моль и суммарном порядке реакции  $s=1,5$  зависимости задержки воспламенения топлива  $\tau_i$  от коэффициента избытка воздуха  $\alpha$  в ЛО аналогичны зависимостям, полученным для высокотемпературной  $E=25140$  Дж/моль и низкотемпературной  $E=76670$  Дж/моль областей (рисунки 3 и 4). Минимум  $\tau_i$  имеет место при  $\alpha$  в ЛО, равном 1,30 (таблица 1).

Таким образом, для любой экспериментальной точки (например, для  $n=1300$  мин<sup>-1</sup>), при заданной степени сжатия  $\varepsilon=15,5$ , после выбора некоторого значения энергии активации  $E$  (например, 38000 Дж/моль), в резуль-

тате численных расчетов можно найти коэффициент избытка воздуха в ЛО  $\alpha$ , то есть 1,30, соответствующий минимальной задержке воспламенения  $\tau_i$ , а затем численное значение предэкспоненты константы скорости  $K$ , то есть  $4,04 \cdot 10^8$  моль<sup>-0,5</sup> м<sup>1,5</sup> с<sup>-1</sup> (таблица 1).

Обобщая проведенные численные исследования, отметим следующие результаты:  
- полученные графики зависимостей начальной и конечной температуры смеси в ЛО от коэффициента  $\alpha$  в ЛО практически идентичны (рисунки 5 и 6) - при увеличении  $\alpha$  начальная температура смеси (до самовоспламенения, кривая 1) растет, а конечная (после самовоспламенения, кривая 2) падает;

- в интервале изменения  $\alpha$  в ЛО от 1,19 до 1,35 конечная температура смеси в ЛО (после самовоспламенения и сгорания) достаточно высока, чтобы поджечь топливно-воздушный факел (рисунки 5 и 6).

Таблица 2

Кинетические константы, принятые в эмпирических формулах

Автор (авторы) эмпирической формулы	Принятое значение энергии активации, $E$ , Дж/моль	Значение барического показателя, $n$	Соответствующий порядок реакции, $s$
Б. Книхт	38600	-0,39	1,39
Ф. Стрингер	45500	-0,76	1,76
Х. Фуджи-мото	42650	-1,06	2,06
Ф. Шмидт	52630	-1,08	2,08
Х. Вольфер	38660 (37900)	-1,19	2,19
Г. Хироясу, Т. Кадота и М. Араи	60530	-1,23	2,23
Р.З. Кавтарадзе	36580	-1,3	2,3
М. Туге	17100	-1,66	2,66
Л. Спадаци-ни и Дж. Те Велде	174000	-2,0	3,0

При построении скоростной характеристики задержки воспламенения топлива в дизеле  $\tau_i(n)$  получается, что, кроме исходной точки при  $n=1300$  мин<sup>-1</sup>, все остальные вычисленные точки не достаточно хорошо согласуются с экспериментом (для меньших значений частоты вращения оказываются ниже экспериментальных, а для больших – выше). То есть тангенс угла наклона теоретической зависимости  $\tau_i(n)$  не соответствует экспериментальному значению (таблица 1).

При этом, численные расчеты показывают, что варьирование величины энергии активации  $E$  в довольно широких пределах от 25140 до 76670 Дж/моль не влияет на тангенс угла наклона скоростной характеристики  $\tau_i(n)$ . В связи с этим, возникает предположение, что принятое нами численное значение суммарного порядка химической реакции  $s=1,5$  не является оптимальным.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

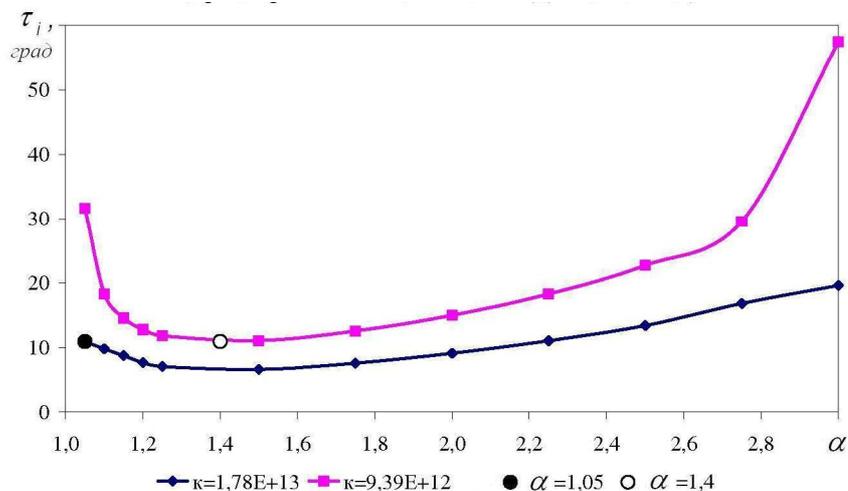


Рисунок 7- зависимость задержки воспламенения топлива в дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО произнергии активации  $E=38000$  Дж/моль и порядке реакции  $s=2,5$

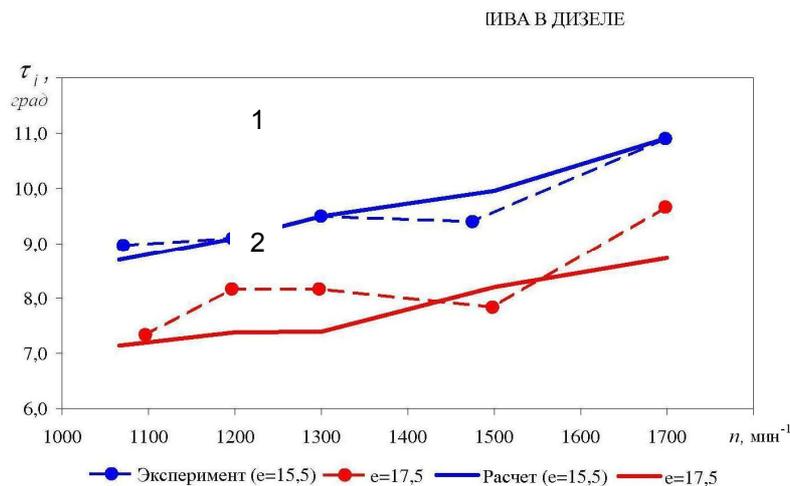


Рисунок 8 – Зависимость задержки воспламенения в дизеле от частоты вращения коленчатого вала при  $s=2,5$ ,  $E=38000$  Дж/моль и  $k=9,39 \cdot 10^{12}$  моль<sup>-1,5</sup>·м<sup>4,5</sup>·с<sup>-1</sup>:

1 -  $\varepsilon = 15,5$ ;

2 -  $\varepsilon = 17,5$ .

В ЛО оптимальное значение коэффициента  $\alpha = 1,40$ .

Численные расчеты при изменении порядка реакции  $s$  в сторону увеличения показывают, что тангенс угла наклона скоростной характеристики  $\tau_i(n)$  уменьшается и при значении  $s=2,5$  согласуется с экспериментальными данными (таблица 1).

Далее путем вариации  $\alpha$  в ЛО для энергии активации  $E=38000$  Дж/моль находим минимум задержки воспламенения топлива при величине  $\alpha=1,40$  (рисунок 7, нижняя кривая).

Для этого значения находим новый предэкспонент константы скорости суммарной химической реакции  $k=9,39 \cdot 10^{12}$  моль<sup>-1,5</sup>·м<sup>4,5</sup>·с<sup>-1</sup> и убеждаемся в наличии минимума при  $\alpha = 1,40$  (рисунок 7, верхняя кривая). Как и ожидалось, полученные зависимости аналогичны построенным на рисунках 3 и 4.

ФИЗИЧЕСКОЕ ВРЕМЯ ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТОПЛИВА

Полученные новые макрокинетические константы и оптимальное значение  $\alpha=1,40$  в

ЛО используем для построения скоростных характеристик задержки воспламенения от частоты вращения  $\tau_i(n)$  для различных значений геометрической степени сжатия  $\varepsilon$ , соответствующим экспериментальным данным. На рисунке 8 и в таблице 1 приведено сравнение экспериментальных и теоретических (моделируемых) значений задержки воспламенения топлива в дизеле для найденных в работе констант макрокинетики.

Видно, что при  $\varepsilon=15,5$  (рисунок 8, верхняя линия 1) имеем хорошее согласие экспериментальных и теоретических значений задержки воспламенения топлива - относительная ошибка аппроксимации

$$\delta = \frac{100}{n} \sum_i \left| 1 - \frac{\tau_{i\text{теор}}}{\tau_{i\text{эксп}}} \right| = 1,9 \%$$

При  $\varepsilon=17,5$  (рисунок 8, нижняя линия 2) согласие экспериментальных и теоретических значений удовлетворительное -  $\delta=7,6 \%$ .

Отметим что, относительная ошибка аппроксимации экспериментальных и теоретических задержек воспламенения  $\tau_i$  при  $\varepsilon=15,5$  и  $\varepsilon=17,5$  отличается в 4 раза, что едва ли можно объяснить экспериментальными ошибками при  $\varepsilon=17,5$ , поскольку обе серии опытов производились на одной и той же экспериментальной установке, в одно и то же время и при одинаковых условиях.

Если бы при  $\varepsilon=17,5$  ошибка аппроксимации не превышала обычной инженерной точности (около 5 %), то с ней можно было бы смириться. В нашем случае ее можно попытаться исправить. Вспомним, что в проведенном анализе мы пренебрегаем физической задержкой воспламенения, полагая  $\tau_{\text{физ}} = 0$ .

Как указывают разные авторы [8-11] и свидетельствуют известные нам экспериментальные данные (со скоростной видеосъемкой процесса), воспламенение дизельного факела происходит на некотором удалении от сопла, то есть топливо сначала «пролетает» некоторое расстояние  $l_0$ , прежде чем струя начинает дробиться, испаряться и реагировать с кислородом воздуха (самовоспламеняться).

Можно попытаться включить физическую задержку воспламенения в нашу математическую модель

$$\tau_{i\Sigma} = \tau_{i\text{физ}} + \tau_{i\text{хим}} \quad (32)$$

Таким образом, найденная ранее задержка воспламенения топлива есть химическая задержка  $\tau_i = \tau_{i\text{хим}}$ .

Тогда из экспериментальных данных по задержкам воспламенения следовало бы вычесть некоторую физическую задержку  $\tau_{i\text{физ}}$ , а затем моделировать макрокинетические константы. Это, по видимому, приведет к небольшому (примерно на 25 %) увеличению предэкспонента константы скорости  $k$  при тех же значениях энергии активации  $E$  и порядка реакции  $s$ .

Поскольку скорость струи топлива на срезе сопла зависит от перепада давления в канале сопла  $w_0 = \sqrt{2(p_0 - p)/\rho_f}$ , то физическая задержка воспламенения  $\tau_{i\text{физ}} = l_0/w_0$  (выраженная в Град п.к.в.) запишется в виде  $\tau_{i\text{физ}} = 2\pi n l_0 / \sqrt{2(p_0 - p)/\rho_f} = An / \sqrt{p_0 - p}$ .

Оценки показывают, что в наших экспериментах физическая задержка воспламенения  $\tau_{i\text{физ}}$  изменялась в пределах от 0,4 до 0,7 Град п.к.в. при увеличении частоты вращения  $n$  от 1100 до 1700 мин<sup>-1</sup>.

Учет физической составляющей задержки воспламенения топлива в дизеле – задача дальнейших исследований.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лернер, М.О. Химические регуляторы горения моторных топлив.- М.: Химия, 1979.- 224 с.
2. Вибе, И.И. Теория двигателей внутреннего сгорания: Конспект лекций. Челябинск: Изд-во Челябин. политех. ин-та, 1974. 252 с.
3. Толстов, А.И. К теории рабочего процесса быстроходного дизеля с воспламенением от сжатия // Двигатели с воспламенением от сжатия. Тр. ЦНИДИ-ВНИТОЭ, 1951. Вып. 18. С. 56-98.
4. Моделирование процессов в судовых поршневых двигателях и машинах / В.В. Ляханин, О.Н. Лебедев, В.С.Семенов и др. Л.: Судостроение, 1967.- 271 с.
5. Семенов, В.И. Исследование периода задержки воспламенения быстроходного многотопливного дизеля с камерой в поршне // *Изв. вузов. Машиностроение.*- 1970. № 1. С. 81-85.
6. Некоторые результаты экспериментального исследования процесса воспламенения топлив различного состава / М.С. Ховах и др. // Двигатели внутреннего сгорания. Тр. МАДИ, 1974. Вып. 92.- С. 15-22.
7. Одинцов, В.И. Метод расчета продолжительности задержки воспламенения топлива с учетом влияния конструктивных факторов // *Двигателестроение.*- 1990. № 3. С. 17-18.
8. Воинов А.Н., Четти В. Джанардан. Анализ воспламенения в дизеле с учетом влияния химико-кинетических и физических факторов // *Изв. вузов. Машиностроение.*- 1970. № 4. С. 77-81.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ЧИСЛЕННЫМ РЕШЕНИЕМ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ

9. Камфер, Г.М. Расчет процесса воспламенения распыленного топлива // *Изв. вузов. Машиностроение*. 1976.- № 3. С. 98-102.
10. Камфер Г.М., Назаров В.П., Аднан И.Ш. Расчет периода задержки воспламенения в дизелях с объемно-пристеночным смесеобразованием // Рабочие процессы автотракторных двигателей и их агрегатов. Тр. МАДИ, 1983.- С. 20-28.
11. Кавтарадзе, Р.З. Теория поршневых двигателей. Специальные главы: Учебник для вузов.- М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2008.- 720 с.
12. Сеначин П.К. Некоторые вопросы моделирования процессов самовоспламенения и горения в ограниченных объемах и двигателях внутреннего сгорания // *Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова*.- 2000. № 2. С. 52-60.
13. Сеначин П.К., Абдуллин Р.Х., Бабкин В.С. Анализ воспламенения в дизеле // *Физика горения и методы ее исследования: Межвуз. сборник. Чебоксары: Изд-во Чуваш. гос. ун-та, 1983. С. 50-53.*
14. Сеначин П.К., Матиевский Д.Д. Расчетное определение задержки воспламенения топлива в дизеле // Совершенствование рабочих органов сельхозмашин и агрегатов: Тезисы докл. Междунар. научно-техн. конф. Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1994. С. 93-95.
15. Матиевский Д.Д., Сеначин П.К., Залюбовский М.Н. Расчет задержки воспламенения топлива в дизеле // Исследование и совершенствование быстроходных двигателей: Межвуз. сборник науч. трудов / Под ред. Л.В. Нечаева. Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1997. С. 75-83.
16. Сеначин П.К., Свистула А.Е., Матиевский Д.Д. Задержка воспламенения двухкомпонентного топлива в газодизеле и в дизеле, работающем на спиртах // Двигатель-97: Матер. Междунар. научно-техн. конф. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1997. С. 116-118.
17. Куприенко Г.В., Сеначин А.П., Матиевский Д.Д., Сеначин П.К. Моделирование процессов самовоспламенения и горения смеси в дизеле // Совершенствование систем автомобилей, тракторов и агрегатов: Матер. II Междунар. конф. / Под ред А.Л. Новоселова. Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 2000. С. 78-79.
18. Матиевский Д.Д., Сеначин П.К. Задержка воспламенения топлива в дизеле как период индукции динамического теплового взрыва // *Известия ВУЗов. Машиностроение*.- 1995.- № 4-6.- С. 27-32.
19. Сеначин П.К., Матиевский Д.Д., Сеначин А.П. Моделирование задержки воспламенения топлива в дизеле // *Вестник АлтГТУ им. И.И. Ползунова*.- 2001. № 3. С. 64-68.
20. Миртов, Б.А. Газовый состав атмосферы Земли и методы его анализа. М.: Изд-во АН СССР, 1968.- 592 с.
21. Сеначин П.К., Матиевский Д.Д., Сеначин А.П. Метод расчета исходного состава газовой смеси в дизеле // Повышение экологической безопасности автотракторной техники: Сборник статей / Под ред. А.Л. Новоселова / Академия транспорта РФ.- Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 2001.- С. 6-10.
22. Варнац, Ю. Моделирование процессов горения с помощью детальной кинетики элементарных реакций // *Химическая физика*.- 1994.- Т. 13, № 2.- С. 3-16.
23. Кумагаи, С. Горение / Пер. с япон.- М.: Химия, 1979.- 256 с.
24. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей.- М.: Наука, 1972.- 720 с.
25. 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.
26. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. акад. И.К. Кикоина / В.Г. Аверин, Б.А. Аронзон, Н.С. Бабаев и др.- М.: Атомиздат, 1976.- 1008 с.
27. Рид Р., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей / Пер. с англ. под ред. В.Б. Когана.- Л.: Изд-во «Химия», 1971.- 704 с.
28. Тодес, О.М. Теория теплового взрыва // *Журнал физической химии*.- 1937.- Т. 13.- С. 868-882.
29. Воинов, А.Н. Сгорание в быстроходных поршневых двигателях.- М.: Машиностроение, 1977.- 277 с.
30. Phahl U., Fiweiger K., Adomeit G. Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures Under Engine Conditions // Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute, 1996.- P. 781-789.

**Сеначин А.П., Коржавин А.А., Сеначин П.К.**  
д.т.н., проф., E-mail: senachinpk@mail.ru