

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВЫМ ЗАЖИГАНИЕМ

А.П. Сеначин

*Построена математическая модель рабочего процесса газового поршневого двигателя внутреннего сгорания с искровым зажиганием, учитывающая распространение фронта турбулентного пламени в объеме камеры сгорания реальной геометрии. Построена математическая модель образования токсичных веществ путем расчета равновесного состава продуктов сгорания с учетом 15 газовых компонентов. Проведено численное моделирование динамики рабочего процесса с образованием токсичных веществ в продуктах сгорания двигателя автомобиля «Renault Logan» типа «K7J710» размерностью 4Ч 7,95/7.*

*Ключевые слова: двигатель с искровым зажиганием, рабочий процесс, математическая модель, фронт пламени, образование токсичных веществ, равновесный состав продуктов сгорания, численное моделирование.*

### Введение

Двигатели внутреннего сгорания (ДВС), в том числе транспортные, парк которых непрерывно увеличивается, являются одними из основных загрязнителей окружающей среды [1-3]. Поэтому прогнозирование выбросов токсичных веществ с отработавшими газами (ОГ) ДВС, с целью разработки конструктивных и организационно-технических мероприятий по их снижению, является одной из важнейших научно-технических проблем.

В настоящее время моделирование образования токсичных веществ в ОГ ДВС проводится на основе различных эмпирических формул, имеющих весьма ограниченное применение [4], а именно в пределах конструктивных (для двигателя) и термодинамических и стехиометрических (для рабочего тела) параметров процесса, при которых проводились эксперименты и были получены эти эмпирические формулы.

Моделирование процесса горения заряда в двигателе обычно также проводится на основе эмпирических формул, например на основе уравнения И.И. Вибе [4, 5], в котором заранее предполагаются известными величинами время горения заряда  $\Delta j_z$  и динамическая характеристика процесса в виде показателя степени  $m$ . При этом часто ограничиваются однозонной моделью описания рабочего тела, в то время как разность температур свежей смеси и продуктов сгорания в двигателе составляет порядка 1500-2000 К. Ясно, что в таких условиях никакую физико-химическую модель

образования токсичных веществ в двигателе построить невозможно.

Кроме того, особенностью процесса горения в ДВС является принципиальная многозонность рабочей смеси, связанная с наличием температурного градиента в продуктах сгорания (Махе-эффектом) [6-8], который обусловлен различной эволюцией разных локальных объемов. Этот температурный градиент между различными зонами продуктов сгорания в двигателе достигает 800-1000 К, что приводит к большим ошибкам при моделировании образования токсичных веществ.

Поэтому весьма важным является разработка математических моделей и достаточно простых компьютерных программ для моделирования процесса горения заряда и образования токсичных веществ в продуктах сгорания без использования эмпирических законов сгорания и формул для оценки количества токсичных веществ в ОГ ДВС.

### Математическая модель фронтального горения смеси в камере сгорания ДВС

Математическая модель процесса горения смеси в ДВС с искровым зажиганием (рисунком 1) учитывает распространение сферического фронта волны турбулентного пламени, ограниченного стенками (камеры, цилиндра и поршня). Текущий радиус фронта пламени  $r_f$  определяется на каждом шаге интегрирования объемом продуктов  $V_b$  внутри сферы с поверхностью горения  $F_f$ .

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ  
С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

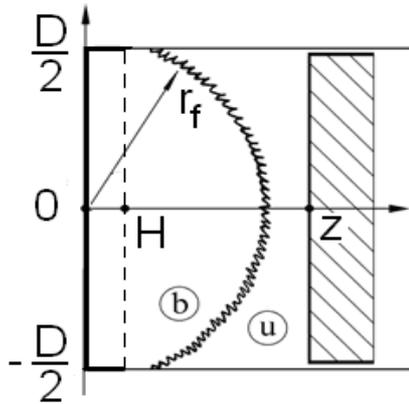


Рисунок 1 – Распространение волны горения в ДВС с искровым зажиганием:  $r_f$  - радиус фронта пламени;  $z$  - координата поршня;  $D$  - диаметр поршня;  $H$  - высота камеры сгорания;  $0$  - точка зажигания смеси

Решение объемных и поверхностных интегралов, для простейшей геометрии камеры сгорания с центральным зажиганием (рисунок 1), приводит к следующим алгебраическим и трансцендентным уравнениям (решаемых методом дихотомии) [9-11]:

при  $r_f \leq D/2$  и  $r_f \leq z$  (1)

$$r_f = (3V_b/2p)^{1/3}, \quad F_f = 2pr_f^2;$$

при  $r_f \leq D/2$  и  $r_f > z$  (2)

$$r_f = (V_b/pz + z^2/3)^{1/2}, \quad F_f = 2p_z r_f;$$

при  $r_f > D/2$  и  $r_f \leq z$  (3)

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

$$F_f = 2pr_f^2 \left[ 1 - \sqrt{1 - D^2/4r_f^2} \right];$$

при  $r_f > D/2$  и  $r_f > z$  (4)

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

$$= (3V_b/2p)^{1/3},$$

$$F_f = 2pr_f^2 \left[ z/r_f - \sqrt{1 - D^2/4r_f^2} \right].$$

В начале процесса, в момент закрытия впускного клапана (индекс  $a$ ) масса смеси (заряда) в рабочем объеме определяется из термического уравнения состояния идеального газа

$$m_a = (M_u/R)p_a V_a / T_a,$$

где объем заряда  $V_a$  равен

$$\frac{V_a}{V_c} = 1 + \frac{e-1}{2} \left( 1 - \cos j_a + \frac{1}{I} - \sqrt{\frac{1}{I^2} - \sin^2 j_a} \right)$$

Уравнение динамики рабочего объема в функции угла  $j$  поворота коленчатого вала (ПКВ) для одного цилиндра двигателя (аксиального КШМ) запишется

$$\dot{V} = V_c \frac{e-1}{2} \sin j \left( 1 + \frac{\cos j}{\sqrt{1/I^2 - \sin^2 j}} \right), \quad (5)$$

где  $\dot{V} = dV/dj$  - производная объема по углу ПКВ;  $e$  - геометрическая степень сжатия;  $I = r/l$  - отношение радиуса кривошипа к длине шатуна;  $V_c$  - объем камеры сгорания.

Уравнение сохранения массы заряда (массовой доли) свежей смеси  $x_u$  и продуктов сгорания в зонах  $x_k$  (при многозонном приближении) запишется как

$$x_u + x_b = x_u + \sum_{k=1}^N x_k = 1, \quad (6)$$

где  $k$  - индекс номера зоны в продуктах сгорания ( $k=1..N$ );  $x_u = 1 - x$  и  $x \equiv x_b = \sum_k x_k$  - текущая массовая доля свежей смеси и продуктов сгорания, в целом и в  $k$ -х зонах, соответственно.

Объем свежей смеси определяется термическим уравнением состояния идеального газа

$$V_u = (m_a/M_u)x_u RT_u/p, \quad (7)$$

где  $M_u = \sum_j a_{uj} M_j$  - средняя молекулярная масса свежей смеси;  $R$  - универсальная газовая постоянная;  $T_u$  - температура свежей смеси;  $p$  - давление в цилиндре двигателя.

Объем продуктов сгорания определяется из уравнения баланса объема системы (с учетом многозонной модели горения заряда)

$$V_b = \sum_{k=1}^N V_k = V - V_u, \quad (8)$$

где  $V_k$  - объем  $k$ -й зоны в продуктах сгорания ( $k = 1..N$ ).

Объем зон в продуктах сгорания также определяется уравнениями состояния идеального газа

$$V_k = (m_a/M_k)x_k RT_k/p, \quad (9)$$

где  $M_k = \sum_j a_{kj} M_j$  - средняя молекулярная

масса продуктов сгорания в  $k$ -й зоне;  $a_{kj}$  - объемная доля  $j$ -го компонента смеси в  $k$ -й зоне продуктов сгорания.

Уравнение динамики горения топливной смеси (массовой доли)

$$x = \frac{S_t F_f}{2pn} \cdot \frac{1-x}{V_u}, \quad (10)$$

где  $S_t$  - скорость турбулентного пламени;  $F_f$  - площадь «гладкой» поверхности сферического усеченного пламени с координатой  $r_f$ , определяемой из (1)-(4) при текущей координате поршня  $z = 4V/(pD^2)$ ;  $n$  - частота вращения коленчатого вала.

Скорость турбулентного пламени

$$S_t = \sqrt{S_u^2 + u_t^2}. \quad (11)$$

Нормальная скорость пламени

$$S_u = S_{u0} (p/p_0)^{m_p} (T_u/T_0)^{m_T}, \quad (12)$$

где  $S_{u0}$  - нормальная скорость пламени при нормальных условиях;  $p_0, T_0$  - давление и температура при нормальных условиях.

Скорость турбулентных пульсаций на фронте пламени

$$u_t = k_p \langle u_p \rangle, \quad (13)$$

где  $k_p$  - эмпирический коэффициент (значение которого близко к 1,05);  $\langle u_p \rangle = 4rn$  - средняя скорость поршня.

Уравнение динамики давления в цилиндре двигателя (энергии всей системы) [11, 12]

$$p \left( V - V_u \frac{R}{C_{pu}} - \sum_k V_k \frac{R}{C_{pk}} \right) = -p\dot{V} + \frac{R}{C_{pu}} \dot{Q}_u + \sum_k \frac{R}{C_{pk}} \dot{Q}_k - \quad (14)$$

$$- p \left( V_u \frac{\dot{x}}{1-x} - \sum_k V_k \frac{\dot{x}_k}{x_k} + \sum_k V_k \sum_j a_{kj} \frac{\dot{M}_j}{M_k} \right) + m_a \sum_k \frac{R}{C_{pk}} x_k \left( \frac{H_u}{M_u} - \frac{H_k}{M_k} \right) + m_a \sum_k \frac{R}{C_{pk}} x_k \sum_j a_{kj} \frac{M_j}{M_k} \left( \frac{H_k}{M_k} - \frac{H_{kj}}{M_j} \right),$$

где  $\dot{Q}_u$  и  $\dot{Q}_k$  - теплообмен со стенками (камеры, цилиндра и поршня) зон свежей смеси и продуктов сгорания соответственно;  $C_{pu}$ ,  $C_{pk}$  и  $H_u$ ,  $H_{uj}$ ,  $H_k$ ,  $H_{kj}$  - средние молярные теплоемкости и энтальпии свежей смеси и продуктов сгорания в зонах и индивидуальных компонентах в зонах соответственно:

$$C_{pu} = \sum_j a_{uj} C_{pj}(T_u);$$

$$C_{pk} = \sum_j a_{kj} C_{pj}(T_k);$$

$$H_u = \sum_j a_{uj} H_{uj}(T_u);$$

$$H_{uj} = H_j^0 + \int_{T_0}^{T_u} C_{pj} dT;$$

$$H_k = \sum_j a_{kj} H_{kj}(T_k);$$

$$H_{kj} = H_j^0 + \int_{T_0}^{T_k} C_{pj} dT.$$

Уравнение динамики температуры свежей смеси (калорическое уравнение состояния)

$$\frac{C_{pu}}{R} \frac{\dot{T}_u}{T_u} = \frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_u}{pV_u}. \quad (15)$$

Уравнения динамики температуры продуктов сгорания в зонах (калорические уравнения состояния)

$$\frac{C_{pk}}{R} \frac{\dot{T}_k}{T_k} = \frac{\dot{p}}{p} + \frac{\dot{Q}_k}{pV_k} + \quad (16)$$

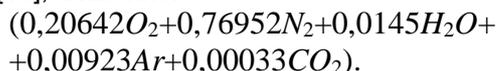
$$+ \frac{x_k}{x_k} \cdot \frac{M_k}{RT_k} \left( \frac{H_u}{M_u} - \frac{H_k}{M_k} \right) + \frac{1}{RT_k} \sum_j a_{kj} M_j \left( \frac{H_k}{M_k} - \frac{H_{kj}}{M_j} \right).$$

**Математическая модель образования токсичных веществ в продуктах сгорания**

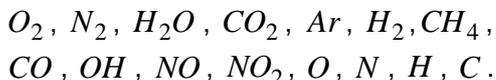
Поставленная задача моделирования образования токсичных веществ в ОГ ДВС с искровым зажиганием сводится к расчету состава продуктов сгорания. Для нахождения состава продуктов сгорания (концентраций компонентов в ОГ двигателя), прежде всего, необходимо задаться полным набором всех индивидуальных веществ в продуктах сгорания (в воздухе) углеводородного топлива с химической формулой



где  $c, h, n, o$  - количество атомов углерода, водорода, азота и кислорода в молекуле топлива соответственно (которое является целым положительным числом или принимает значение равное нулю). При этом полагаем известным состав воздуха средней влажности [13], а именно:

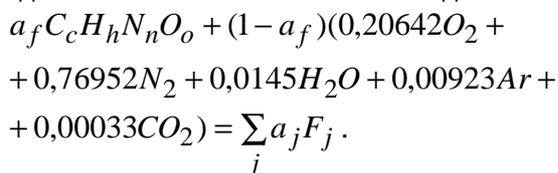


На основе анализа литературных данных, с учетом того, что математическая модель должна быть по возможности достаточно простой, полагаем, что в продуктах сгорания достаточно учитывать следующие 15 компонентов:



Считаем, что другие возможные компоненты смеси в продуктах сгорания отсутствуют (или их концентрацией в виду малости можно пренебречь).

Начальный состав продуктов сгорания (непосредственно за фронтом пламени) примем с учетом полного сгорания свежей смеси (заряда) при заданном коэффициенте избытка воздуха  $a$ . При этом реакция сгорания одного моля смеси запишется в виде:



Здесь  $F_j$  - химическая формула  $k$ -го компонента продуктов сгорания;  $a_f$  - относительная объемная концентрация (мольная доля) горючего компонента смеси

$$a_f = \frac{1}{1 + a(1/a_f^0 - 1)},$$

где  $a_f^0$  - стехиометрическая мольная доля топлива (например, для метана  $a_f^0 = 0,0936$ ).

**Теперь возникает вопрос, как считать (численно моделировать) состав продуктов сгорания?** Существует два принципиально различных подхода:

1) проводить численное моделирование рабочего процесса ДВС с учетом химических процессов в продуктах сгорания (за фронтом пламени) с использованием некоторого детального кинетического механизма (ДКМ);

2) проводить численное моделирование рабочего процесса ДВС с учетом термодинамического равновесия (равновесного состава) в продуктах сгорания (в однозонном  $k=1$  или многозонном  $k=3-10$  приближениях).

В настоящее время первый подход ввиду сложности ДКМ, описывающих процесс горения реальных топлив во фронте пламени и после его прохождения (то есть в продуктах сгорания), практически не применяется в расчетах рабочего процесса ДВС [3], поэтому в данной работе принят второй подход.

Что касается методов расчета равновесного состава продуктов сгорания, то их основы заложены в работах А.П. Ваничева [14], Я.Б. Зельдовича [15], А.В. Болгарского [16, 17], Е.С. Щетинкова [18], А.М. Гурвича и Ю.Х. Шаулова [19], Д.М. Картера и Д. Альтмана [20], С.Р. Бринкли мл. [21] и других и обобщены в монографии [22], а константы равновесия для большинства практически важных реакций диссоциации, вычисленные с достаточно высокой точностью, сведены в таблицы [23].

Методы расчета равновесного состава продуктов сгорания можно разделить на две основные группы:

1) методы, основанные на решении системы нелинейных уравнений для констант равновесия реакций диссоциации индивидуальных веществ продуктов сгорания;

2) методы, использующие минимум термодинамического потенциала и основанные на поиске экстремума функции.

В известной нам литературе не приводится достаточно полных данных о сравнительной эффективности методов первой и второй группы. Надо полагать, что для расчета равновесного состава продуктов сгорания эти методы равноценны, то есть методы, основанные на константах равновесия и на минимуме термодинамического потенциала – изобарно-изотермического (энергии Гиббса)

или изохорно-изотермического (энергии Гельмгольца). Поэтому нами выбран достаточно хорошо апробированный метод, основанный на константах равновесия.

Среди всех методов, основанных на константах равновесия, включающих в себя частные методы (в том числе метод итераций, метод ступенчатого расчета равновесия, метод численного интегрирования и другие) и общий метод, использующие константы равновесия, полагаем целесообразным выбрать общий метод. В рамках этого подхода будем придерживаться методики расчета, изложенной в работе [24].

В качестве неизвестных величин выберем относительные объемные (мольные) доли компонентов смеси, при этом порядок системы целесообразно понизить, исключением уравнений закона действующих масс. Для решения системы уравнений химического равновесия целесообразно выбрать метод Ньютона, поскольку он является достаточно удобным и эффективным методом решения на ЭВМ задачи расчета равновесного состава продуктов сгорания [25, 26].

**Особенности принятой методики и метода расчета**

В качестве независимых выбираются следующие десять реакций диссоциации молекул на составляющие их атомы и соответствующие этим реакциям уравнения для констант равновесия в каждой  $k$ -й зоне, которые являются уравнениями **закона действующих масс**:



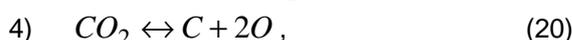
$$K_1 = (a_O^2/a_{O_2})P;$$



$$K_2 = (a_N^2/a_{N_2})P;$$



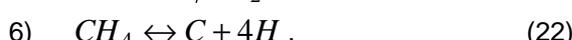
$$K_3 = (a_H^2 a_O/a_{H_2O})P^2;$$



$$K_4 = (a_C a_O^2/a_{CO_2})P^2;$$



$$K_5 = (a_H^2/a_{H_2})P;$$



$$K_6 = (a_C a_H^4/a_{CH_4})P^4;$$



$$K_5 = (a_C a_O/a_{CO})P;$$



$$K_8 = (a_O a_H/a_{OH})P;$$



$$K_9 = (a_N a_O/a_{NO})P;$$



$$K_{10} = (a_N a_O^2/a_{NO_2})P^2.$$

Здесь  $P = p/p_0$  - отношение давления в рассматриваемой системе к стандартному (атмосферному) давлению.

К уравнениям на константы равновесия (17)-(26), в которые входят 14 объемных долей компонентов смеси в каждой  $k$ -й зоне (а с учетом инертного аргона 15 компонентов), следует добавить уравнение **закона Дальтона**, также выраженное через мольные доли компонентов в зонах продуктов сгорания

$$\sum_j^{15} a_{kj} = 1. \quad (27)$$

В приведенных выше уравнениях математической модели для мольных долей компонентов справедливо для свежей смеси

$$\sum_j a_{ij} = 1,$$

а в каждой из зон продуктов сгорания, кроме (27), тождественно

$$\sum_j \overset{\bullet}{a}_{kj} = 0.$$

Поскольку число уравнений (17)-(27) меньше количества рассматриваемых компонентов  $j (j = 1..15)$ , то для решения задачи необходимо записать дополнительные независимые уравнения, в которые входят концентрации компонентов (мольные доли).

Таковыми независимыми уравнениями в нашей системе являются **уравнения материального баланса**.

Запишем для одного моля свежей смеси (то есть в начале процесса сжатия) суммарное число атомов в молекулах  $S$  и число атомов кислорода  $S_o$  в единицах числа Авогадро  $N_A$  (с учетом реакции сгорания и состава воздуха средней влажности):

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ  
С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

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

Тогда следующие отношения чисел атомов  $C, H, N, Ar$  соответственно к числу атомов кислорода в одном моле свежей смеси являются константами нашей задачи (не зависят от термодинамического и химического состояния системы), то есть запишутся:

$$\begin{aligned} b_C &= [a_f c + (1 - a_f) 0,00033] / S_O, \\ b_H &= [a_f h + 2(1 - a_f) 0,0145] / S_O, \\ b_N &= [a_f n + 2(1 - a_f) 0,76952] / S_O, \\ b_{Ar} &= (1 - a_f) 0,00923 / S_O. \end{aligned}$$

Число атомов кислорода в одном моле продуктов сгорания в любой  $k$ -й зоне в единицах числа Авогадро равно

$$S_{kO} = 2a_{O_2} + a_{H_2O} + 2a_{CO_2} + a_{CO} + a_{OH} + a_{NO} + 2a_{NO_2} + a_O,$$

где индекс  $k$  в мольных долях компонентов опущен.

С учетом принятых обозначений, материальный баланс в продуктах сгорания в любой  $k$ -й зоне запишется:

$$b_C S_{kO} = a_{CO_2} + a_{CH_4} + a_{CO} + a_C, \quad (28)$$

$$b_H S_{kO} = 2a_{H_2O} + 4a_{CH_4} + 2a_{H_2} + a_{OH} + a_H, \quad (29)$$

$$b_N S_{kO} = 2a_{N_2} + a_{NO} + a_{NO_2} + a_N, \quad (30)$$

$$b_{Ar} S_{kO} = a_{Ar}. \quad (31)$$

В данной системе уравнений справедливо также уравнение сохранения числа атомов в продуктах сгорания в каждой  $k$ -й зоне в единицах числа Авогадро

$$\begin{aligned} S \frac{p_a V_a}{T_a} &= \frac{p V_k}{x_k T_k} (2a_{O_2} + 2a_{N_2} + 3a_{H_2O} + 3a_{CO_2} + a_{Ar} + 5a_{CH_4} + 2a_{H_2} + 2a_{CO} + 2a_{OH} + 2a_{NO} + 3a_{NO_2} + a_O + a_N + a_H + a_C). \end{aligned} \quad (32)$$

Следует отметить, что уравнение (32) является избыточным, поскольку уравнения динамики, фронтального горения и баланса (1)-(16) определяют термодинамическое состояние газа в зонах свежей смеси и продуктов сгорания ( $p, T_u, T_k, V, V_u, V_k, x_u, x_k$ ), а уравнений газового состава (мольных долей

компонентов) в  $k$ -х зонах продуктов сгорания (17)-(32) всего 16, в то время как количество учитываемых компонентов смеси всего 15. Поэтому уравнение математической модели (32) в каждой  $k$ -й зоне продуктов сгорания можно использовать для контроля численного решения задачи.

При численном решении системы нелинейных уравнений закона действующих масс, закона Дальтона и уравнений материального баланса (17)-(31) следует иметь в виду, что при коэффициенте избытка воздуха  $a \geq 1$  концентрация водорода равна нулю (то есть  $a_{H_2} = 0$ ) и система не имеет решения из-за уравнения (17). Поэтому **для бедных смесей** (при  $a \geq 1$ ) в качестве независимых переменных выбираем мольные доли  $O_2, N_2, H_2O, CO_2, Ar$ , а **для богатых смесей** (при  $a < 1$ ) выбираем соответственно мольные доли  $H_2, N_2, H_2O, CO_2, Ar$ .

С целью понижения порядка системы уравнений химического равновесия (17)-(31), из нее исключаются уравнения закона Дальтона и материального баланса (27)-(31) и часть уравнений закона действующих масс (17)-(26), таким образом, чтобы мольные доли остальных 10 продуктов сгорания (кроме 5 выбранных независимых) были выражены через константы равновесия  $K_1 - K_{10}$  и выбранные независимые переменные. Полученная в результате система уравнений решается методом Ньютона [25, 26], относительно выбранных независимых мольных долей компонентов смеси

Уравнения системы представляются в следующем виде

$$F(y^{(n)} + \Delta y^{(n)}) = 0. \quad (33)$$

Здесь  $F = (f_1, f_2, f_3, f_4, f_5)$  при  $a \geq 1$  или

$$F = (f_2, f_3, f_4, f_5, f_6) \text{ при } a < 1.$$

$$y^{(n)} = (y_1, y_2, y_3, y_4, y_5)^{(n)} \text{ или}$$

$$y^{(n)} = (y_2, y_3, y_4, y_5, y_6)^{(n)} - \text{некоторое промежуточное приближение к корню } Y$$

(искомым мольным долям выбранных компонентов смеси);  $\Delta y^{(n)} = Y - y^{(n)}$  - неизвестные поправки к  $y^{(n)}$ . Выбор независимых переменных зависит от заданного коэффициента избытка воздуха:

- при  $a \geq 1$  выбраны  $y_1 = a_{O_2}$ ,  $y_2 = a_{N_2}$ ,  
 $y_3 = a_{H_2O}$ ,  $y_4 = a_{CO_2}$ ,  $y_5 = a_{Ar}$ ;
- при  $a < 1$  выбраны  $y_2 = a_{N_2}$ ,  $y_3 = a_{H_2O}$ ,  
 $y_4 = a_{CO_2}$ ,  $y_5 = a_{Ar}$ ,  $y_6 = a_{H_2}$ .

Линеаризовав нелинейные уравнения системы (33) путем разложения в ряд Тейлора с точностью до линейных членов (то есть, содержащих первые производные), получим

$$\sum_{m=1}^5 \frac{\partial f_i(y^{(n)})}{\partial y_m} \Delta y_m^{(n)} = -f_i(y^{(n)}),$$

где ( $1 \leq i \leq 5$ ), или в матричной форме

$$AY = B. \quad (34)$$

Система (34) линейна относительно приращений  $\Delta y_m^{(n)}$ , так как все коэффициенты этой системы выражаются через последнее приближение  $y^{(n)}$ . Эта система решается одним из известных алгебраических методов (Крамера, Жордана-Гаусса или обратной матрицы). В результате решения находим новое приближение

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \Delta y^{(n)}.$$

Далее процесс повторяется, пока не достигнута заданная точность  $\epsilon$  определения относительных концентраций, значение которой принимается в диапазоне  $\epsilon = 10^{-10} - 10^{-8}$ .

#### Константы химического равновесия

$K_1 - K_{10}$  являются функциями текущей температуры продуктов сгорания в зонах и рассчитываются на основе уравнения изотермы  $m$ -й реакции [27]

$$\left(\Delta G_T^0\right)_m = RT \left(\ln K_p\right)_m.$$

В практических расчетах целесообразно пользоваться не свободной энергией  $G_T^0$ , а приведенной энергией Гиббса

$$\Phi_T^0 = -\left(G_T^0 - H_0^0\right)/T, \\ T\left(\Delta \Phi_T^0\right)_m = -\left(\Delta G_T^0\right)_m - \left(\Delta H_0^0\right)_m.$$

Откуда имеем расчетное уравнение для константы равновесия  $m$ -й реакции

$$\left(\lg K_p\right)_m = \frac{\sum_j x_j \Phi_{Tj}^0 - \Delta H_0^0/T}{2,303R}, \quad (35)$$

где  $x_j$  - стехиометрические коэффициенты продуктов реакции диссоциации исходного

вещества на атомы;  $\Delta H_0^0$  - теплота образования исходного вещества из атомов при абсолютном нуле температуры;  $\Phi_T^0, \Phi_{Tj}^0$  - приведенная энергия Гиббса исходного вещества и продуктов диссоциации при текущей температуре, для которой имеется обширная справочная литература [23, 27].

**Порядок выполнения расчета** по программе следующий:

1) задаются исходные данные в момент закрытия впускного клапана двигателя, соответствующий углу ПКВ  $j = j_a$ , и исходный состав смеси с мольной долей горючего компонента  $a_f$ ;

2) интегрируется система уравнений процесса сжатия исходной смеси (5), (14) и (15) при условии  $x = 0$ ,  $x_u = 0$ ,  $V_u = V$ ,

$V_k = 0$ ,  $x_k = 0$ ,  $a_{kj} = 0$  до момента зажигания, соответствующего углу ПКВ  $j = j_1$ ;

3) далее решается система дифференциальных уравнений (1)-(16) методом Рунге-Кутты и определяются текущие термодинамические параметры системы;

4) на каждом шаге расчета определяют величины теплоемкостей и энтальпий всех компонентов смеси для новых значений температуры свежей смеси и продуктов сгорания в зонах [25, 26];

5) на каждом шаге расчета определяется равновесный состав продуктов сгорания в зонах при текущей температуре в них путем решения системы нелинейных уравнений (18)-(31) с помощью линеаризованной системы (34) и контролем по уравнению (32);

6) производится вывод результатов в файл и выдача на графические зависимости.

#### Результаты численного моделирования

При численном моделировании задачи образования токсичных веществ в ОГ ДВС с искровым зажиганием рассматривается рабочий процесс двигателя автомобиля «Renault Logan» типа «K7J710» размерностью 4ч 7,95/7.

Целью численного исследования было сравнение результатов моделирования по компьютерной программе, построенной на основе математической модели (1)-(35), с известными надежными экспериментальными и расчетными данными [1, 3, 6, 11], а также сравнение экологических характеристик (со-

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

держания токсичных веществ) в ОГ ДВС с искровым зажиганием при работе двигателя на различных топливах. В качестве топлив рассмотрены:

1) модельная бензиновая смесь МБС-90 (содержащая 90% об. изооктана  $C_8H_{18}$  и 10% об. гептана  $C_7H_{16}$ );

2) природный газ (моделируемый чистым метаном  $CH_4$ );

3) водород  $H_2$ .

Численное моделирование проводилось как для одной зоны в продуктах сгорания (для  $k=1$ ), так и в многозонном приближении (для  $k=5-10$ ). Ниже приводятся некоторые результаты численных расчетов для многозонной модели.

Вначале рассмотрим термодинамическое состояние продуктов сгорания на момент окончания горения заряда. На рисунке 2 приведена максимальная температура продуктов сгорания для трех модельных видов топлив, в зависимости от коэффициента избытка воздуха  $\alpha$ . На рисунке 3 приведен максимальный температурный градиент в продуктах сгорания для этих топлив.

Из рисунка 2 видно, что максимальная температура продуктов сгорания достигается в оклостехиометрических смесях, причем максимум находится при  $\alpha = 0,9$ .

Также видно, что самая высокая температура сгорания достигается в водородных смесях - до 3000 К, затем в бензиновых топливах - до 2850 К и несколько ниже в метановых смесях с воздухом - до 2750 К. Очевидно, что этой же последовательности должна следовать концентрация оксидов азота в продуктах сгорания, что будет подтверждено ниже.

Отметим, что при увеличении степени сжатия  $\epsilon$  в двигателе максимальная температура продуктов сгорания также растет.

Из рисунка 3 видно, что в продуктах сгорания температура распределена неравномерно, самая высокая температура у той части смеси, которая сгорела раньше всех. Этот, так называемый, Махе-эффект составляет несколько сотен градусов. Самый высокий градиент температуры в продуктах сгорания имеет место в бензиновых смесях – порядка 850 К, затем в водородных смесях – порядка 760 К и, наконец, в метановых смесях с воздухом – порядка 630 К. Это весьма существенно для образования оксидов азота, поскольку при усреднении температуры продуктов выход оксидов азота был бы меньше.

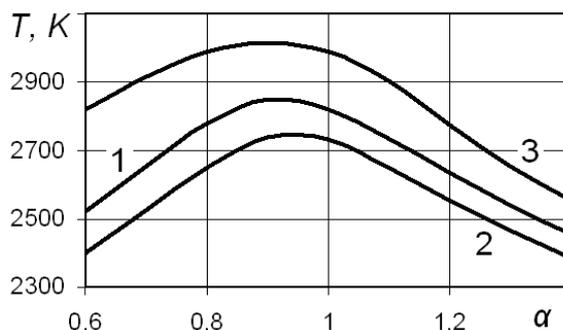


Рисунок 2 – Максимальная температура продуктов сгорания в двигателе от коэффициента избытка воздуха ( $n=1800$  1/мин;  $\epsilon=8$ ;  $j_1=-30$  град.ПКВ):  
1- МБС-90; 2- метан; 3- водород

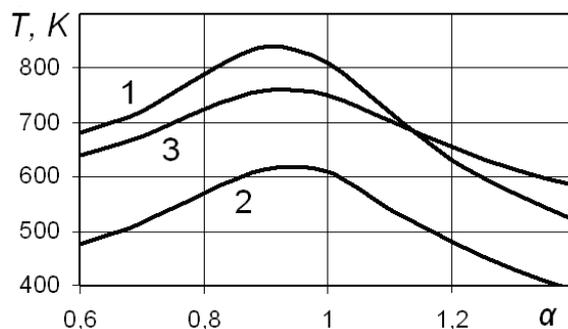


Рисунок 3 – Максимальный температурный градиент в продуктах сгорания в двигателе от коэффициента избытка воздуха ( $n=1800$  1/мин;  $\epsilon=8$ ;  $j_1=-30$  град.ПКВ):  
1- МБС-90; 2- метан; 3- водород

На рисунках 4-6 приведены зависимости концентраций токсичных газов в двигателе от коэффициента избытка воздуха при его работе на разных топливах. На этих рисунках приведена суммарная концентрация оксидов азота  $NO_x = NO + NO_2$ , при этом численное моделирование показало, что доля  $NO_2$  составляет 0,2-0,3 процента от доли  $NO$ .

Из графиков (рисунки 4-6) видно, что содержание оксида углерода  $CO$  монотонно падает с увеличением коэффициента избытка воздуха, максимальное содержание имеет место в богатых смесях, при этом в продуктах сгорания бензиновой смеси оксида углерода больше чем в продуктах метановой смеси.

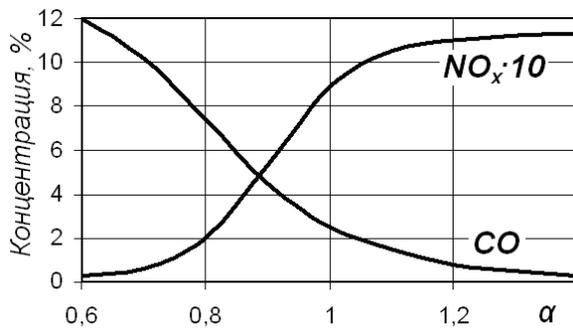


Рисунок 4 – Токсичность продуктов сгорания в ДВС от коэффициента избытка воздуха при сжигании модельной бензиновой смеси МБС-90:

CO - доля оксида углерода, %;  
 $NO_x \cdot 10$  - доля оксидов азота, %

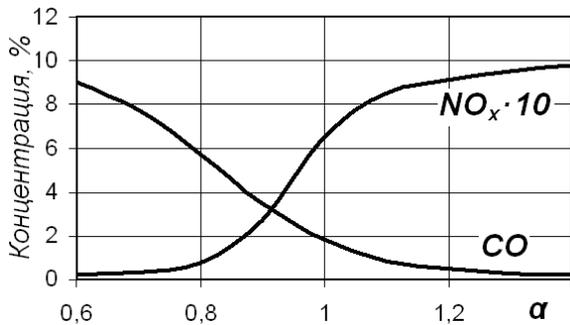


Рисунок 5 – Токсичность продуктов сгорания в ДВС от коэффициента избытка воздуха при сжигании природного газа (метана):

CO - доля оксида углерода, %;  
 $NO_x \cdot 10$  - доля оксидов азота, %

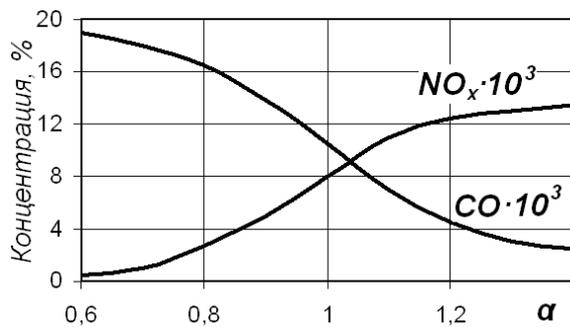


Рисунок 6 – Токсичность продуктов сгорания в ДВС от коэффициента избытка воздуха при сжигании водорода:

$CO \cdot 10^3$  - доля оксида углерода, %;  
 $NO_x \cdot 10^3$  - доля оксидов азота, %

Содержание CO в продуктах сгорания водородо-воздушных смесей в ДВС весьма незначительно (на два порядка меньше, чем в продуктах сгорания других топлив) и составляет менее 2-х сотых процента. Возникает вопрос, откуда он вообще берется? Очевидно, из диоксида углерода, содержащегося в атмосферном воздухе.

Из рисунков 4-6 видно, что содержание оксидов азота растет с увеличением коэффициента избытка воздуха. Причем, в продуктах сгорания бензиновой смеси концентрация оксидов азота больше, чем в продуктах метановой смеси с воздухом.

Из рисунка 6 следует, что содержание оксидов азота в продуктах сгорания водорода с воздухом приблизительно на два порядка выше, чем в продуктах сгорания других рассматриваемых топлив. В этом состоит одна из проблем создания экологически безопасного водородного двигателя.

Анализируя графики на рисунках 4-6, можно заметить, что максимальная скорость роста (или падения) концентрации токсичных компонентов по переменной α (имеется в виду производная по коэффициенту избытка воздуха) имеет место в углеводородных смесях при величине  $\alpha \cong 0,9$ , а при горении водорода с воздухом – при величине  $\alpha \cong 1$ . Этот факт достаточно хорошо известен из теории горения [6, 7].

### Выводы

Анализ приведенных графиков (рисунки 2-6) показывает, что результаты численного моделирования удовлетворительно согласуются с известными данными других авторов [1, 3, 6, 7, 11, 18, 19], особенно при моделировании в рамках многозонных математических моделей в продуктах сгорания. Это свидетельствует о надежности сформулированной математической формулировки задачи моделирования рабочего процесса ДВС с искровым зажиганием и разработанной компьютерной программы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Звонов, В.А. Токсичность двигателей внутреннего сгорания. - 2-е изд., перераб. - М.: Машиностроение, 1981. - 160 с.
- 2 Горбунов, В.В. Токсичность двигателей внутреннего сгорания: Учебное пособие / В.В. Горбунов, Н.Н. Патрахальцев. - М.: Изд-во РУДН, 1998. - 214 с.
- 3 Варнатц, Ю. Горение: Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц,

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В ДВИГАТЕЛЕ С ИСКРОВОМ ЗАЖИГАНИЕМ

У. Маас, Р. Диббл; пер. с англ. Г.Л. Агафонова; под ред. П.А. Власова.- М.: Физматлит, 2003.- 352 с.

4 Кавтарадзе, Р.З. Теория поршневых двигателей. Специальные главы: Учебник для вузов.- М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008.- 720 с.

5 Вибе, И.И. Теория двигателей внутреннего сгорания: Конспект лекций.- Челябинск: Изд-во Челябин. политех. ин-та, 1974.- 252 с.

6 Льюис, Б. Горение, пламя и взрывы в газах / Б. Льюис, Г. Эльбе: пер. с англ.- М.: Мир, 1968.- 2-е изд.- 592 с.

7 Зельдович, Я.Б. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе.- М.: Наука, 1980.- 479 с.

8 Абдуллин, Р.Х. Внутренний взрыв газа в вентилируемых системах: Монография / Р.Х. Абдуллин, В.С. Бабкин, П.К. Сеначин; под ред. П.К. Сеначина.- Барнаул: ОАО «Алтайский дом печати», 2006.- 104 с.

9 Бабкин, В.С. Особенности динамики сгорания газа в закрытых сосудах при разных законах изменения поверхности пламени / В.С. Бабкин, П.К. Сеначин, Т.В. Крахтинова // Физика горения и взрыва.- 1982.- Т. 18, № 6.- С. 14-20.

10 Сеначин, П.К. Особенности динамики сгорания смеси в ДВС с искровым зажиганием при различных законах изменения поверхности пламени и в двигателе с камерой реальной геометрии / П.К. Сеначин, М.Ю. Свердлов, М.А. Ильина // Экспериментальные методы в физике структурно-неоднородных сред. Том 4. «Гидродинамика структурно-неоднородных сред»: Труды Всерос. научно-техн. конф., 12-14 сентября 1996 г., Барнаул / Алт. гос. ун-т, Алт. гос. пед. ун-т.- Барнаул: Изд-во АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1997.- С. 90-96.

11 Жгутова, В.И. Моделирование горения смеси в ДВС с искровым зажиганием с образованием токсичных веществ в рамках многозонной модели / В.И. Жгутова, М.Ю. Свердлов, Д.Д. Матиевский, П.К. Сеначин // Вестник Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова. Приложение к журналу «Ползуновский альманах».- 2000.- № 2.- С. 67-77.

12 Сеначин, А.П. Уравнения энергии в многозонной модели процесса горения в двигателе с искровым зажиганием / А.П. Сеначин, Д.Д. Матиевский, П.К. Сеначин // Совершенствование мощностных, экономических и экологических показателей ДВС / Матер. VI Междунар. научно-практ. семинара.- Владимир: ВладГУ, 1997.- С. 149-152.

13 Миртов, Б.А. Газовый состав атмосферы Земли и методы его анализа.- М.: Изд-во АН СССР, 1961.- 262 с.

14 Ваничев, А.П. Термодинамический расчет горения и истечения в области высоких температур.- М.: Изд-во БНТ, 1947.

15 Зельдович, Я.Б. Расчеты тепловых процессов при высокой температуре / Я.Б. Зельдович, А.И. Полярный.- М.: Изд-во БНТ, 1947.

16 Болгарский, А.В. Расчет процессов в камере сгорания и сопле жидкостного реактивного двигателя.- М.: Оборонгиз, 1957.

17 Болгарский, А.В. Рабочие процессы в жидкостно-реактивных двигателях / А.В. Болгарский, В.К. Шукин.- М.: Оборонгиз, 1953.

18 Щетинков, Е.С. Физика горения газов.- М.: Наука. ГР ФМЛ, 1965.- 740 с.

19 Гурвич, А.М. Термодинамические исследования методом взрыва и расчеты процессов горения / А.М. Гурвич, Ю.Х. Шаулов; под ред. А.П. Ваничева.- М.: Изд-во МГУ, 1955.- 167 с.

20 Картер Джемс М., Альтман Дэвид. Равновесие при высокой температуре // Процессы горения / Под ред. Б. Льюиса, Р.Н. Пиза, Х.С. Тейлора.- М.: Физматгиз, 1961.- С. 15-34.

21 Стьюарт Р. Бринкли мл. Методы вычисления термодинамических параметров продуктов сгорания // Процессы горения / Под ред. Б. Льюиса, Р.Н. Пиза, Х.С. Тейлора.- М.: Физматгиз, 1961.- С. 67-94.

22 Алемасов, В.Е. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: Справочник.- Т. 1. Методы расчета / В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегалин, А.П. Тишин, В.А. Худяков; под ред. В.П. Глушко.- М.: АН СССР. ВИНТИ, 1971.- 267 с.

23 Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное изд. в 4-х томах / Под ред. В.П. Глушко.- М.: Наука, 1978.

24 Мольков, В.В. Методика расчета на ЭВМ равновесного состава продуктов сгорания С-Н-О-содержащих горючих в воздухе / В.В. Мольков, А.А. Дмитриев, С.А. Лесняк // Противопожарная защита технологических процессов: Сборник науч. трудов ВНИИПО.- М.: Изд-во ВНИИПО, 1983.- С. 35-47.

25 Шуп, Т. Решение инженерных задач на ЭВМ.- М.: Мир, 1982.-236 с.

26 Хемминг, Р.В. Численные методы для научных работников и инженеров.- М.: Наука, 1968.- 400 с.

27 Рябин, В.А. Термодинамические свойства веществ: Справочник / В.А. Рябин, М.А. Остроумов, Т.Ф. Свит.- Л.: Химия, 1977.- 392 с.

**Сеначин А.П., к.т.н., старший преподаватель кафедры ТГВ,  
e-mail: [senachin.ap@yandex.ru](mailto:senachin.ap@yandex.ru)  
ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный  
технический университет им. И.И. Ползунова»,  
656038, Барнаул, просп. Ленина, 46.**