

17. Nagle J., Strickland-Constable Oxidation of carbon between 1000–2000°C.F. // Proceedings of the Fifth Conference on Carbon, London, Pergamon Press. – 1962. – P.154–164. 18. Frenklach M. On surface growth mechanism of soot particles// Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, Proc. Combust. Inst., 1996. –P. 2285–2293 19. Frenklach M., Wang H. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth //Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, Proc. Combust. Inst.– 1991, 23.–P. 1559–1566. 20. Разлейцев Н.Ф. Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях. –Харьков: Вища школа, 1980. – 169 с. 21. Звонов В.А., Корнилов Г.С., Козлов А.В. Оценка и контроль выбросов дисперсных частиц с отработавшими газами дизелей. – М.: Из-во Прима-Пресс-М, 2005. –312 с. 22. Басевич В.Я., Власов П.А., Фролов С.М. Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания. – Горение и взрыв: Сб. трудов под ред. Фролова. – 2008, Вып 1. – 112 с.

*Поступила в редколлегию 07.02.2013 г.*

---

УДК 621.43

**Анализ математических моделей механизма сажеобразования при сжигании углеводородных топлив / А. М. Левтеров, Л. И. Левтерова // Вісник НТУ «ХПИ». Серія: Математичне моделювання в техніці та технологіях. – Харків: НТУ «ХПИ», 2013. – №5 (979). – С. 130-141. Бібліогр.: 21 назва.**

Розглянуто побудову математичної моделі робочого циклу дизеля з безпосереднім впорскуванням. Передбачається прогнозування робочих характеристик дизеля, що працює на традиційному і альтернативному паливах з урахуванням емісії шкідливих складових у відпрацьованих газах, у тому числі й сажі, що є особливо важливим для цього типу поршневих двигунів.

**Ключові слова:** робочий процес, дизель, сажа, поліциклічні ароматичні вуглеводні, ацетилен, радикали, оксиди азоту.

This article discusses the construction of a mathematical model of the operating cycle of diesel engine with direct injection. This paper also provides that result of modeling becomes possible predict the performance of diesel engine on traditional and alternative fuels with the emission of harmful substances in the exhaust gases, including carbon black, which is particularly important for this type of piston engines.

**Key words:** working process, diesel, soot, polycyclic aromatic hydrocarbons, acetylene, radicals, nitrogen oxides.

УДК 621.43

**А.М. ЛЕВТЕРОВ**, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., ИПМаш НАНУ,  
Харьков;

**Л.И. ЛЕВТЕРОВА**, вед. инженер, ИПМаш НАНУ, Харьков

### **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧЕГО ЦИКЛА ДИЗЕЛЯ С НЕПОСРЕДСТВЕННЫМ ВПРЫСКОМ. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭМИССИИ САЖИ И ОКСИДОВ АЗОТА**

Рассматривается построение математической модели рабочего цикла дизельного двигателя с непосредственным впрыском. Предусматривается прогнозирование рабочих характеристик дизеля на традиционном и альтернативном топливах с учетом эмиссии вредных составляющих в отработавших газах, в том числе сажи, что является особенно важным для этой категории поршневых двигателей.

**Ключевые слова:** рабочий процесс, дизель, сажа, полициклические ароматические углеводороды, ацетилен, радикалы, оксиды азота.

---

© А. М. Левтеров, Л. И. Левтерова, 2013

**Цель и постановка задачи.** Поршневые двигатели, работающие по циклу Дизеля, – один из основных видов силовых энергоустановок. Особое место в этом ряду занимают дизели с непосредственным впрыском, обладающие большим потенциалом совершенствования показателей экономичности, бесшумности, токсичности на фоне развития электронного управления рабочими процессами. Дизели экономичнее, надежнее в эксплуатации, но в связи с особенностями сгорания топлива наличие вредных составляющих в отработавших газах у них выше, чем у двигателей с искровым зажиганием. Растущие требования к снижению вредных выбросов, расходу топлива и стремление к получению оптимальных показателей двигателя вызывают необходимость анализа процессов, связанных с преобразованием энергии, образованием токсических составляющих, применением альтернативных топлив. Эффективным методом при проведении такого анализа является численное моделирование, обеспечивающее и прогнозирование, и стратегию выбора характеристик и параметров ДВС. В настоящее время при наличии достаточных материальных средств, для численного анализа можно воспользоваться существующими стандартными программными комплексами, используемыми промышленностью (модификации KIVA, STAR-CD, FLUENT, AVL FIRE, VECTIS, другие), которые при всех их достоинствах все-таки представляют для пользователя «черный ящик», оставляют массу вопросов, очень дороги и затратны по времени. Кроме того, необходимым требованием при использовании стандартных комплексов является корректное задание граничных условий, что в свою очередь связано с проведением не одного эксперимента. Как правило, использование таких разработок целесообразно в основном для задач проектирования.

Целью предлагаемого исследования является разработка гибкой, удобной и малозатратной в вычислительном отношении математической модели рабочего цикла дизельного двигателя с соответствующим программным обеспечением, которые позволили бы для научных и инженерных исследований прогнозирование его энергетических и экологических характеристик, в частности сажи и оксидов азота. Опираясь на многообразие термодинамических, феноменологических и детальных многомерных моделей рабочего цикла дизеля, рассматриваемая модель использует модульную философию, которая позволяет, получив однажды рабочую модель с игнорированием наиболее трудных в описании процессов (моделирование испарения, смешивания, эффекта завихрения, струйного сгорания), постоянно ее совершенствовать добавлением усложняющих подмоделей. Такой подход упрощает внесение изменений, дает возможность проводить отдельные исследования частных проблем, объединяя их затем в общую картину рабочего цикла двигателя.

**Математическая модель рабочего цикла дизеля.** Разработанная математическая модель рабочего цикла дизеля (структурная схема построения модели представлена на рис. 1) опирается на базовую *термодинамическую квазимерную модель двигателя с искровым зажиганием*, разработанную в ИПМаш НАН Украины [1], и основные фундаментальные положения теории сгорания в двигателях внутреннего сгорания [2, 3].

При моделировании приняты следующие допущения: рабочее вещество

в цилиндре представляет собой гомогенную смесь идеального газа; потери рабочего вещества не учитываются; давление однородно по всему объему цилиндра; между зонами нет передачи тепла; процесс нагрева, испарения и смешивания испарившегося топлива с предварительно сжатым воздухом осуществляется за период задержки воспламенения; бесконечно тонкий фронт пламени разделяет камеру сгорания на две зоны (свежего заряда и продуктов сгорания) и перемещается со скоростью, постоянной на всем протяжении химического процесса; перед воспламенением температура по всей камере сгорания одинакова.

Исходные данные (геометрические, режимные параметры двигателя, давление и температура во впускном и выпускном коллекторах, средняя температура стенок цилиндра, база данных для индивидуальных веществ рабочего тела) и начальные условия для интегрирования дифференциальных уравнений формируются во внешнем цикле.

В соответствии с выбранной схемой химических реакций горения топлива вводится *матрица стехиометрических коэффициентов* и *молекулярная матрица индивидуальных веществ*, массивы теплофизических свойств индивидуальных веществ. Справочник теплофизических свойств индивидуальных веществ пополнен новыми данными по топливам [4].

Последовательность моделирования полного рабочего цикла двигателя (сжатие, сгорание, расширение и газообмен) реализуется циклически до достижения сходимости по начальным и конечным значениям термодинамических параметров цикла в процессах впуска и выпуска с необходимой коррекцией начальных условий по конечному результату.

Интегральные показатели цикла включают химическую энергию топливовоздушного заряда и продуктов сгорания с учетом недогара топлива для богатых смесей, теплоотдачу в стенки цилиндра; индикаторные показатели двигателя. Кроме того, фиксируются максимальные и текущие значения давления и температуры в цилиндре, коэффициент наполнения и токсические составляющие продуктов сгорания – оксиды азота и углерода, сажа. Процедура вычислений основана на интегрировании *уравнений I и II начала термодинамики, уравнения состояния идеального газа* по углу поворота коленчатого вала двигателя с заданным шагом применительно к каждой фазе рабочего цикла дизеля. Текущие значения объема ( $V$ ) и площади поверхности надпоршневого пространства ( $F$ ) в цилиндре определяются соответственно как

$$V = V_a / \varepsilon \cdot \left\{ \left[ 1 + (\varepsilon - 1) / 2 \cdot \left[ 1 + 1 / \lambda - \cos \varphi - \left( 1 - \lambda^2 \cdot \sin^2 \varphi \right)^{0.5} \right] \right] \right\}$$

и

$$F = 4 \cdot (V - (V_R / (\varepsilon - 1))) / D + \pi \cdot D^2 / 4 + F_{KC},$$

где  $V_a$  – максимальный объем цилиндра;  $\varepsilon$  – геометрическая степень сжатия;  $\varphi$  – угол поворота коленчатого вала;  $\lambda$  – геометрический параметр;  $V_R$  – рабочий объем цилиндра;  $D$  – диаметр поршня;  $F_{KC}$  – площадь поверхности камеры сгорания, равная  $(V_R / (\varepsilon - 1))^{2/3}$ .

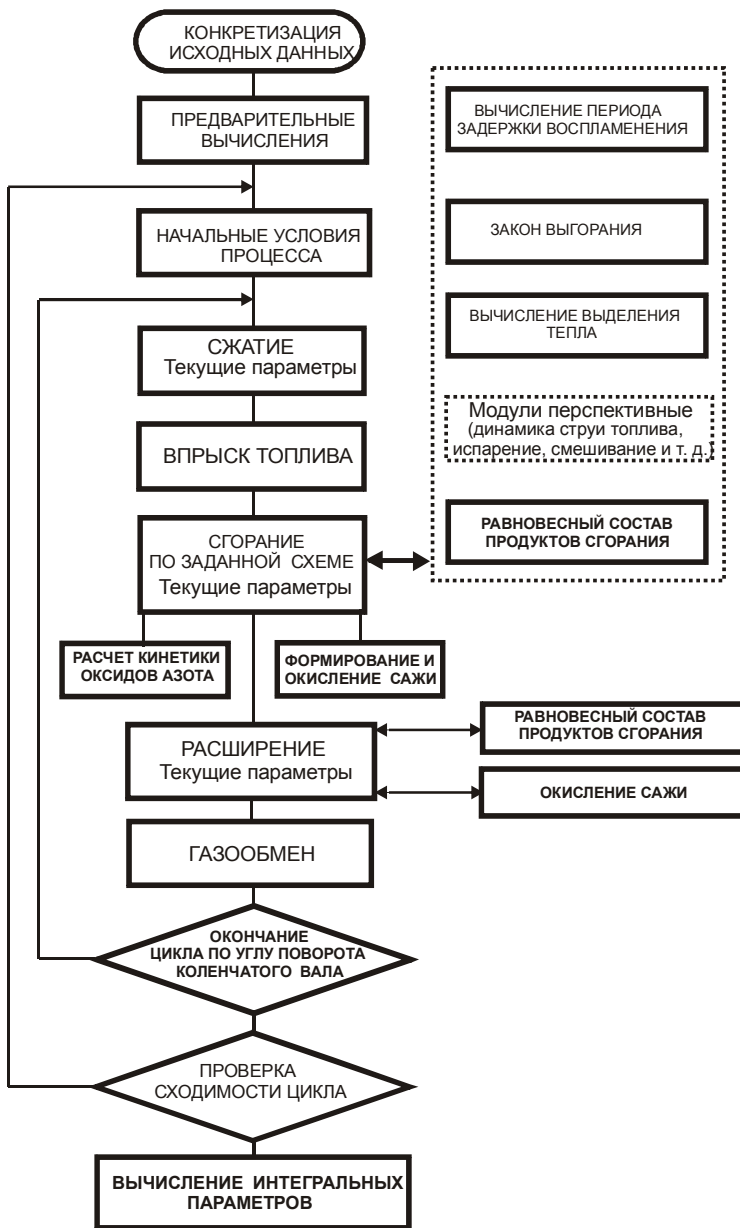


Рис. 1 – Структурная схема построения модели рабочего цикла дизеля.

Химически связанная энергия топлива, поступающего в цилиндр, идет

на выполнение работы, испарение топлива, изменение внутренней энергии, потери тепла и потока смеси и подчиняется закону сохранения энергии в дифференциальной форме

$$dQ_X = dU + pdV + dQ_W + \Sigma dH_I,$$

где  $dQ_X$  – химически связанная энергия топлива или выделенное тепло;  $dU$  – изменение внутренней энергии заряда в цилиндре;  $pdV$  – работа, выполненная системой;  $dQ_W$  – теплоотдача в стенку цилиндра;  $\Sigma dH_I$  – потери через щели в и из цилиндра.

Применяя условие энергетического баланса к заряду в цилиндре при закрытых клапанах, и, пренебрегая потерями, получим

$$dU = -pdV + dQ_W \quad \text{или} \quad m \frac{du}{d\phi} + u \frac{dm}{du} = \frac{dQ_W}{d\phi} - p \frac{dV}{d\phi}.$$

Начальное значение внутренней энергии  $U$  для итерационного процесса можно определить в первом приближении, задаваясь температурой и давлением смеси ( $T, p$ ) в момент начала сжатия и, обращаясь к процедуре вычисления удельной внутренней энергии  $u$ , соответствующей единице массы свежего заряда из уравнения газового состояния

$$(m = p \cdot V / (R \cdot T)).$$

Таким образом, на участке сжатия математическая модель процесса может быть представлена *уравнением закона сохранения энергии, уравнением газового состояния* и процедуры, ставящей в соответствие составу смеси и температуре внутреннюю энергию. Уравнение состояния дает возможность получения массы заряда, знание температуры – значения внутренней энергии, других термодинамических свойств смеси.

На участке расширения эту систему необходимо дополнить системой уравнений, определяющих равновесный состав продуктов сгорания.

Топливо в камеру сгорания вводится незадолго до верхней мертвой точки (ВМТ) строго перед моментом начала желаемого сгорания. Полную массу впрыснутого топлива можно определить зависимостью [2]

$$m_{inj} = C_d \cdot A \sqrt{2 \rho_f \cdot \Delta p} \cdot \left( \frac{\Delta \phi_{inj}}{360n} \right) \cdot z,$$

где  $C_d$  – характеристика сопла, (*коэффициент разряжения*);  $A$  – площадь поперечного сечения сопла;  $\Delta p$  – избыточное давление;  $z$  – количество сопел;  $\Delta \phi_{inj}$  – продолжительность впрыска;  $n$  – частота вращения коленчатого вала двигателя;  $\rho_f$  – плотность топлива. Для коэффициента разряжения  $C_d$  существует зависимость, связывающая его с характеристиками сопла. Расчет впрыска топлива выделен в отдельную процедуру.

Топливо, поступаая в цилиндр, превращается в аэрозоль, испаряется, нагреваясь от предварительно сжатого воздуха, смешивается с горячим воздухом и воспламеняется после определенного периода задержки воспламенения. Часть топлива за период индукции успевает нагреться от предварительно сжатого воздуха, испариться, перемешаться с воздухом до гомогенного состояния. Сгорание гомогенных смесей, а это, как правило, обеднен-

ные смеси, позволяет избежать высоких температур в камере сгорания, что желательно по многим показателям. Далее происходит процесс диффузного сгорания, когда горючее и окислитель перемешиваются непосредственно в процессе сгорания. Типичный характер выделения тепла в дизеле в результате сгорания топлива имеет вид [2].

Период индукции характерен для радикально цепных взрывных процессов, когда концентрация химических радикалов возрастает с экспоненциальной скоростью, но количество выделенной энергии и расходование горючего очень малы. За этот период протекают важные химические процессы, а температура системы остается почти постоянной [3], и, таким образом, перед воспламенением можно принять однородность температуры по всей камере сгорания.

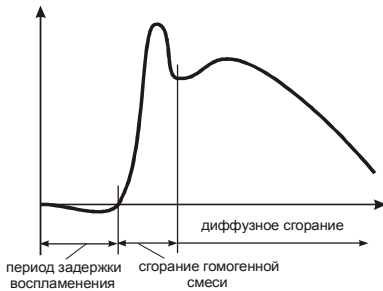
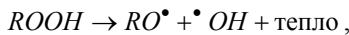


Рис. 2 – Характер выделения тепла при сгорании топливовоздушной смеси в камере сгорания дизеля

Процесс самовоспламенения (иницирование реакции) можно объяснить следующей теорией [5]. Часть молекул топлива под влиянием повышенной температуры и плотности воздуха вступает в соединение с молекулами кислорода, образуя перенасыщенные кислородные соединения, так называемые гидроперекиси  $C_nH_m + O_2 \rightarrow ROOH$ , где  $ROOH$  – общая формула гидроперекисей.

Эти соединения устойчивы лишь в узких пределах температур и плотностей. Вне этих пределов перекиси распадаются с освобождением большого количества теплоты и образованием свободных радикалов и атомов, расщепление происходит

по связям  $O-O$ :



где  $RO^{\bullet}$  – алкоксильный радикал.

Распад гидроперекисей при критических значениях температуры и давления приводит к образованию начальных активных центров, свободных радикалов и атомов, которые начинают цепную реакцию, обеспечивающую воспламенение практически мгновенно. Температурой самовоспламенения является низшая температура, при которой воспламенение происходит без помощи внешнего источника зажигания. Она зависит от вида топлива, рода и плотности окислителя.

Время задержки воспламенения представляет собой сложную функцию температуры смеси, давления в цилиндре, коэффициента остаточных газов, свойств топлива, степени сжатия, режима работы двигателя, зависит от расхода горючего. Подготовка к инициированию реакции сгорания является важным и сложным процессом. Установлено, что процесс самовоспламенения наступает в газовой фазе, что лимитируется фазой испарения [5]. Для испарения топлива требуется определенное количество тепловой энергии, которая передается от нагретого при сжатии воздуха аэрозоли топлива. При

установившемся процессе теплопередачи (что является упрощением) для условия самовоспламенения можно записать уравнение теплоотдачи (*закон Ньютона*)

$$Q_n = \alpha(T_c - T_f) \cdot F \cdot \tau_{id},$$

где  $Q_n$  – теплота, необходимая для испарения массы топлива, достаточной для образования локального очага самовоспламенения;  $T_c$  – средняя температура воздуха за период задержки воспламенения;  $T_f$  – температура впрыскиваемого топлива;  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи;  $F$  – поверхность капель распыленного топлива;  $\tau_{id}$  – период задержки воспламенения.

Таким образом, период задержки воспламенения можно искать из выражения  $\tau_{id} = Q_n / \alpha(T_c - T_f) \cdot F$ , в котором составляющие его компоненты, в свою очередь, имеют сложные зависимости от многих факторов.

Для углеводородовоздушных смесей время задержки воспламенения экспоненциально зависит от температуры в минус первой степени, что соответствует известной *зависимости Аррениуса* в виде

$$\tau_{id} = A \cdot p \exp(-E_a / RT),$$

где  $A$  и  $n$  экспериментально определяемые константы;  $p$  – давление в цилиндре;  $E_a$  – энергия активации реакции воспламенения топлива;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $T$  – температура в цилиндре.

К настоящему времени на базе обобщения экспериментальных материалов и некоторых теоретических положений появились достаточно обоснованные полуэмпирические выражения для периода индукции в разных видах топлива. Для дизельного топлива используется общепринятая зависимость

$$\tau_{id} = 3 / 45 \cdot p^{-1,02} \exp(2100 / T).$$

Выполнение условия

$$\int_{\tau_{нач}}^{\tau_{впр}} (1 / \tau) dt = 1,$$

где  $\tau_{впр}$  и  $\tau_{нач}$  начало впрыскивания и начало воспламенения топлива соответственно, а  $dt$  – шаг интегрирования по времени (или по углу поворота), предполагает проверку величины периода задержки воспламенения [2]. Определение периода задержки воспламенения в модели оформлено в отдельную процедуру.

Состав рабочего тела в течение рабочего цикла двигателя изменяется по мере движения поршня и изменения давления и температуры в цилиндре двигателя. Согласно принятой практике давление в камере сгорания однородно на каждом шаге поворота коленчатого вала, а условия для сгоревшего и несгоревшего состояния горючей смеси отвечают условиям сохранения массы и энергии [2]:

$$\frac{V}{m} = \int_0^x v_1 dx + \int_x^1 v_2 dx; \tag{1}$$

$$\frac{U - W - Q}{m} = \int_0^x u_1 dx + \int_x^1 u_2 dx ; \quad (2)$$

$$W = \int_{v_0}^v p dV ; \quad (3)$$

$$Q = \int_{\varphi_0}^{\varphi} (Q/360 \cdot n) d\varphi , \quad (4)$$

где  $V$  – объем цилиндра;  $m$  – масса рабочего вещества в цилиндре;  $v$  – удельный объем;  $x$  – доля выгоревшего топлива;  $U$  – полная внутренняя энергия;  $u$  – удельная внутренняя энергия;  $W$  – полезная работа;  $Q$  – теплоотдача в стенки цилиндра. Уравнения состояния для сгоревшей и несгоревшей частей рабочего тела имеют вид:

$$pv_1 = R_1 T_1 ; \quad u_1 = c_{v1} T_1 + h_{f1} ; \quad (5)$$

$$pv_2 = R_2 T_2 ; \quad u_2 = c_{v2} T_2 + h_{f2} . \quad (6)$$

Совместное решение уравнений (1) – (6) дает возможность получить параметры рабочего процесса на стадии сгорания: давление и значения средней температуры сгоревшей и несгоревшей зон рабочего тела. Моделирование процесса сгорания непосредственно связано с выделением тепла, с необходимостью задания закона выгорания топливоздушнoй смеси или доли выгоревшего топлива  $x(\varphi) = m_2(\varphi)/m$ . Для инженерных расчетов детализация механизма распространения пламени, во всяком случае, на этом этапе моделирования, не оправдана, так как влечет за собой дополнительные вычислительные трудности и увеличение временного фактора. В настоящее время сформировалось несколько упрощенных типов функций для описания тепловыделения (выгорания топлива): в виде синусоиды, в виде треугольника, основанием которого является продолжительность сгорания. За последние пять десятилетий, судя по публикациям в разных странах, наиболее широко используется *зависимость Вибе И.И.* [6]

$$x = 1 - \exp \left[ -a \cdot ((\varphi - \varphi_0) / \Delta\varphi)^{c+1} \right],$$

где  $\varphi$ ,  $\varphi_0$ ,  $\Delta\varphi$  – текущий угол поворота коленчатого вала, угол начала сгорания, продолжительность сгорания соответственно;  $a$  и  $c$  константы, устанавливаемые на основе экспериментальных данных для каждого типа двигателя.

Будем считать, что после сжатия воздуха с остаточными газами и впрыскивания топлива, все топливо за период индукции полностью испарится, перемешается с воздухом до гомогенного состояния, и при благоприятных локальных термодинамических условиях произойдет мгновенное самовоспламенение смеси. В феноменологических моделях дизеля гомогенное сгорание часто моделируется распространением фронта пламени, когда бесконечно тонкий фронт пламени после воспламенения разделяет рабочее вещество на две зоны: зону продуктов сгорания ( $m_2$ ) и зону свежего однородного заряда ( $m_1$ ). В отличие от диффузного сгорания, когда пламя поддер-



живается диффузией со стороны горючего и со стороны окислителя, химические реакции в гомогенной смеси мгновенно начинаются при переходе от несгоревшего газа к сгоревшему на границе раздела между реагентами и продуктами реакций, граница раздела распространяется с ламинарной скоростью [3]. Гомогенное сгорание протекает быстро, (см. рис. 2), потребляет большую часть введенного топлива, что соответствует большей доле выделения тепла за период этого вида сгорания и этим сгоранием определяется химический процесс в камере сгорания [7].

Технология дизелей с прямым впрыском (HSDI – High Speed DI) постоянно совершенствуется. Стратегия заключается в том, чтобы осуществлять в дизеле процесс сгорания сжатого гомогенного заряда (HCCI – Homogeneous Charge Compression System). Это тем более выдвигается на передний план при констатации эксплуатационных данных, показывающих, что в мультиинжекционных системах горение соответствует именно гомогенному сгоранию [8].

В связи с вышеизложенным можно полагать, что моделирование сгорания в разрабатываемой модели рабочего цикла дизеля уместно и своевременно. Термодинамическая система в цилиндре двигателя при закрытых клапанах определена следующей совокупностью уравнений:

$$u = (1-x) \cdot u(T_1, g_1) + x \cdot u(T_2, g_2); \quad (7)$$

$$p \cdot v = (1-x) \cdot R(g_1) \cdot T_1 + x \cdot R(g_2) \cdot T_2, \quad (8)$$

где индекс 1 относится к параметрам зоны заряда, а 2 – к параметрам зоны продуктов сгорания;  $v_1, v_2$  – удельные объемы зоны свежего заряда и зоны продуктов сгорания;  $v$  – удельный объем системы (рабочего вещества в цилиндре);  $u(T_{1,2}, g_{1,2})$  – удельная внутренняя энергия соответствующей зоны;  $u$  – удельная внутренняя энергия системы;  $R$  – газовая постоянная, соответствующая составу;  $g_1$  – вектор состава свежего заряда;  $g_2$  – вектор состава продуктов сгорания;  $x$  – изменяется в соответствии с законом выгорания топлива. Дополнение уравнений (7) и (8) выражением *второго начала термодинамики* для зоны свежего заряда

$$s_T \cdot (g_1, T_1) - R(g_1) \cdot \ln p = s, \quad (9)$$

где  $s$  – удельная энтропия зоны заряда;  $s_T$  – температурная составляющая удельной энтропии, являющаяся функцией состава и температуры, позволит в результате численного решения системы уравнений (7) – (9) получить искомые параметры  $T_1, T_2$  и  $p$  при заданных  $x, u, v, s, g_1$  и  $g_2$ . В качестве начальных приближений итерационного процесса для  $u$  и  $s$  принимаются  $U$  и  $S$  в конце процесса сжатия, получаемые интегрированием дифференциальных уравнений I и II законов термодинамики

$$dU = -p \cdot dV - dQ_1 - dQ_2, (u = U / m); \quad dS = dQ_1 / T_1, (s = S / m),$$

где  $dQ_1, dQ_2$  – элементы теплоотдачи от зон свежего заряда и продуктов сгорания.

Модель сгорания дополняется системой уравнений для определения равновесного состава продуктов сгорания ( $c_k = f(T_2, v_2)$ ,  $g_{2k} = \mu_k \cdot v_2 \cdot c_k$ ), соответствующего температуре ( $T_2$ ) в зоне сгорания, давлению ( $p$ ) в цилиндре и

удельному объему  $v_2 = (R(g_2) \cdot T_2) / p$ . Для этого используется схема традиционного химического равновесия сгорания углеводородного топлива для определения концентраций продуктов сгорания с учетом диссоциации [1]. Рассматривается 11 веществ ( $N$  компонентов): N, O, H, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, NO, OH, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, концентрации, которых рассчитываются численным решением 11 нелинейных алгебраических уравнений: 7 уравнений представляют химически обратимые реакции равновесия и 4 – уравнения материального баланса для элементарного (атомного) состава веществ – N, O, H, C

$$\prod_{i=1}^n c_i^{a_{ij}} = K_{c_j}(T), \quad j = 1, \dots, m; \quad \sum_{i=1}^N l_{ij} c_i = \frac{\lambda_j}{v}, \quad j = 1, \dots, r.$$

Здесь  $c_j$  – молярная концентрация  $i$ -го вещества;  $K_{c_j}$  – константа равновесия  $j$ -ой реакции, которая определяется специальной процедурой как известная функция температуры;  $N$  – количество компонентов в продуктах сгорания;  $m$  – количество химических реакций;  $l_{ij}$  – элемент молекулярной матрицы, представляющий количество атомов  $i$ -го вида в  $j$ -м индивидуальном веществе;  $v$  – удельный объем;  $\lambda_j$  – концентрация  $j$ -го элемента;  $r$  – количество элементов (атомов), составляющих индивидуальные вещества;  $a_{ij}$  – стехиометрический коэффициент  $i$ -го вещества в  $j$ -й реакции;  $A_i$  – символ, участвующего в реакции  $j$ -го вещества.

Моделирование токсичных составляющих в отработавших газах дизеля, наряду с определением равновесного состава продуктов сгорания, оформлено в отдельные процедуры, описывающие образование и кинетику оксидов азота по *механизму Зельдовича* и образование сажи с использованием *моделей Hiroyasu* или *Fusco* [9, 10].

Главными загрязнителями, выбрасываемыми с отработавшими газами дизеля, являются макрочастицы, в частности сажа, и оксиды азота.

**Моделирование образования сажи и оксидов азота.** Моделирование образования сажи сопряжено со многими трудностями; пожалуй, главная из них – это большие вычислительные затраты при детализации описания процесса, значительно уменьшить которые позволяет уровень используемого в моделях эмпиризма. В 3-мерных и в квазимерных термодинамических моделях дизеля чаще всего используются как детальные, так и упрощенные *модели Суровикина, Fusco и двух ступенчатая модель Hiroyasu*, которые отвечают стремлению максимально возможного охвата описания физико-химического процесса и несложного интегрирования в модель двигателя. Фокусирование внимания на качественном аспекте образования сажи помогает облегчить понимание влияния на этот процесс параметров двигателя. Подробный анализ моделей образования сажи и обоснование выбора модели для дизеля рассмотрен в [12].

В разработанную модель рабочего цикла дизеля на первом этапе адаптирована модель сажеобразования Hiroyasu [9], которая опирается на очевидные факты, влияющие на механизм сажеобразования, то есть давление, температуру, соотношение воздух – топливо. Единственным ограничением

модели является необходимость ее настройки с помощью эксперимента в случае изменения геометрии двигателя. За короткий период времени протекания сгорания в цилиндре и при высокой температуре можно допустить, что полный механизм (скорость) формирования и окисления сажи подчиняется закону Аррениуса. Эмпирические константы адаптируют модель образования сажи к конкретному топливу и тепловому режиму, полагается, что энергия, выделившаяся с реагентами реакции образования сажи, равна энергии продуктов реакции.

Двухступенчатый механизм образования сажи [9], включает два уравнения: скорость формирования сажи и скорость ее окисления

$$dm_{sf} / dt = A_f \cdot m_f \cdot p^{0.5} \exp(E_f / RT);$$

$$dm_{so} / dt = A_o \cdot m_{sf} \cdot [O_2] \cdot p^{1.8} \exp(E_o / RT),$$

где  $m_f$ ,  $m_{sf}$ ,  $m_{so}$  – массы выгоревшего топлива, сформировавшейся сажи, окислившейся сажи соответственно;  $A_f$ ,  $A_o$  – калибровочные константы, определяемые типом двигателя;  $E_f$ ,  $E_o$  – энергия активации реакций формирования и окисления сажи;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $p$ ,  $T$  – давление и температура в цилиндре двигателя;  $[O_2]$  – мольная равновесная концентрация кислорода.

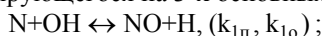
Решение дифференциальных уравнений сажеобразования реализуется методом Эйлера и выделено в отдельную подмодель. Данные по равновесным концентрациям как для процедуры определения оксидов азота, так и для процедуры образования сажи берутся по результатам решения системы уравнений, определяющих равновесный состав продуктов сгорания на соответствующем шаге интегрирования.

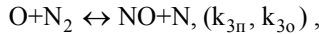
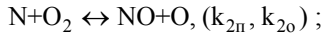
При температуре 1000 К (это утверждение базируется на трудах Фостера и Казакова [13]) процесс формирования сажи заканчивается, происходит закалка образования, в связи с этим заканчивается и расчетный процесс формирования сажи. Процесс окисления сажи продолжается до завершения рабочего цикла дизеля. В дальнейших исследованиях для образования сажи используется также феноменологическая модель Fusco.

Присутствие реакции образования монооксида азота в общей схеме химических реакций позволяет получать равновесное значение его концентрации в продуктах сгорания. Однако Я.Б. Зельдовичем установлено, что формирование оксидов азота управляется химической кинетикой, а не химическим равновесием, и что независимо от состава горючей смеси (надо понимать, что независимо и от вида топлива) образование

$$NO \sim \sqrt{[N_2] \cdot [O_2]},$$

где  $[O_2]$  – концентрация кислорода в продуктах горения [11]. Отмеченное отсутствие какого-либо влияния химической специфики горения на образование NO – важный аргумент в пользу термического характера окисления азота, который и описывается с помощью так называемого расширенного механизма Зельдовича, базирующегося на 3-х основных обратимых реакциях:





где  $k_i$  – константы скоростей реакций, прямых и обратных соответственно, взяты из работы [2].

Дифференциальное уравнение изменения концентраций оксида азота

$$\frac{dC_{NO}}{dt} = k_{1П} \cdot C_N C_{OH} - k_{1O} \cdot C_H C_{NO} + k_{2П} \cdot C_N C_{O_2} - k_{2O} \cdot C_O C_{NO} + \\ + k_{3П} \cdot C_{N_2} C_O - k_{3O} \cdot C_N C_{NO}$$

при известных концентрациях веществ, входящих в уравнение, и заданной температуре, влияющей на значения констант скоростей промежуточных реакций образования NO ( $k_i$ ), разрешимо аналитически и оформлено отдельной процедурой. Учтено, что в процессе расширения газа в цилиндре происходит закалка оксидов азота на уровне максимальных концентраций.

**Газообмен.** Процесс газообмена характеризуется непостоянством массы ( $m$ ) рабочего вещества в цилиндре, которое обусловлено её связью с впускной (индекс 1) и выпускной (индекс 2) системами. Система дифференциальных уравнений, описывающих процесс газообмена как открытой газодинамической системы, состоит из уравнения закона сохранения энергии и уравнений материального баланса [1]:

$$\frac{dU}{dt} = -p \cdot \frac{dV}{dt} - h \cdot (G_{01} - G_{02}) + h_1 \cdot G_{10} + h_2 G_{20} + Q_w ; \quad \frac{dm}{dt} = G_{10} + G_{20} - G_{01} - G_{02} ; \\ m \frac{dg_z^1}{dt} = (1 - g_z^1) \cdot G_{10} - g_z^1 \cdot G_{20} ; \quad g_z^2 = 1 - g_z^1 ,$$

где  $G_{01}$   $G_{10}$   $G_{02}$   $G_{20}$  – расходы вещества между коллекторами и цилиндром;  $h, h_1, h_2$  – удельные энтальпии рабочего вещества (вектор  $g_z$ ) в цилиндре, во впускном (массовая доля заряда  $g_z^1$ ) и выпускном (массовая доля продуктов сгорания  $g_z^2$ ) коллекторах. Поскольку процесс в двигателе циклический, значение  $U$  и  $m$  в начале сжатия и в конце впуска должны совпадать, а значение  $g_z^2$  по завершении процесса газообмена соответствует коэффициенту остаточных газов  $y_r$ . Если после завершения интегрирования по всему рабочему циклу не наблюдается совпадения начальных значений  $U_0$  и  $m_0$  и значений  $U_k$  и  $m_k$  конца интегрального процесса с заданной точностью, необходима коррекция начальных условий и повторение процесса интегрирования. Коррекция возможна в виде *простой итерации* подстановкой  $U_k$  и  $m_k$  в качестве начальных условий на следующем шаге.

**Теплообмен.** Жизнеспособность двигателя, его конструкция, и в целом его эффективность во многом определяются теплообменом, от которого зависит теплонпряженность деталей и потери тепла. Важной является задача определения количества теплоты, переданного системе или отобранного извне при взаимодействии деталей цилиндропоршневой группы с движущимся потоком рабочего вещества. Очевидно, что все виды теплообмена (теп-

лопроводность, конвекция, излучение) в природе редко существуют в чистом виде. В камере сгорания дизельного двигателя доля радиационного теплообмена настолько высока, что использование аддитивного подхода при определении полного теплового потока, переданного от рабочего тела в стенки камеры сгорания, недопустимо [14]. В соответствии с уже упоминаемым законом Ньютона плотность полного теплового потока, переданного или отобранного в любой момент времени ( $\tau$ ) от поверхности твердого тела с распределением температуры  $T(x, y, z, \tau)$  к омывающей среде с температурой  $T_\infty$  прямо пропорциональна температурному перепаду  $q = \alpha(T_\infty - T(x, y, z, \tau))$ , где  $\alpha$  – коэффициент пропорциональности, называемый *коэффициентом теплоотдачи*, в сложности определения которого в основном и состоят трудности расчета теплообменного процесса в двигателях [15].

Выводом так называемых  $\alpha$  – формул, а точнее сказать, исследованиями теплообменных процессов, занимались многие видные ученые. Чаще других для расчета коэффициента теплоотдачи используют  $\alpha$  – формулу Г. Вошни, основанную на теории подобия и квазистационарном представлении процесса [16]. Такой подход является до сих пор традиционным в теории поршневых двигателей. Зависимость Вошни за последние 30 лет претерпела изменения, включает в себя как учет конвективного, так и лучистого теплообмена с помощью эмпирических коэффициентов, не выделяя их в отдельные составляющие, и имеет вид

$$\alpha = 0,12793D^{-0,2}T_\infty^{-0,53}p^{0,8} \left( C_1c_m + C_2(V_hT_a / p_aV_a)(p - p_0) \right)^{0,8}$$

или  $\alpha = 0,12793D^{-0,2}T_\infty^{-0,53}p^{0,8} \left( C_1c_m \left( 1 + 2(V_c / V_\varphi)^2 \cdot C_3 \right) \right)^{0,8}$ , если

$$2C_1c_m(V_c / V_\varphi)^2 \cdot C_3 \geq C_2(V_hT_a / p_aV_a)(p - p_0),$$

где  $D$  – диаметр цилиндра;  $T$  – температура, соответствующая рассчитываемому процессу;  $p$  – давление в цилиндре;  $V_a, V_h, V_c, V_\varphi$  – значения характерных объемов цилиндра двигателя;  $c_m$  – средняя скорость поршня;  $\alpha_6$  – коэффициент избытка воздуха;  $C_1, C_2, C_3$  – коэффициенты, принимающие разные значения, которые зависят от вида и стадии рабочего цикла, а также топлива.

По мнению Кавтарадзе, «ни одна известная до этого времени  $\alpha$  – формула не позволяет получить такие хорошие приближения к экспериментальным данным, как формула Вошни».

Строго говоря, формулы Вошни можно применять для однозонных моделей рабочего процесса с температурой  $T_\infty$  и давлением  $p$ . В случае двухзонной модели сгорания возникает необходимость задания коэффициентов теплообмена со стенками цилиндра отдельно для сгоревшей и несгоревшей зон. Но, несмотря на эти сложности, формулы Вошни априори применяют для оценки теплообмена не только в 2-х зонных, но и в многозонных моделях.

Теплоотдача для каждой ступени моделирования рабочего цикла (сжа-

тие, расширение, сгорание, газообмен) рассчитывается с учетом допущений модели и вышеизложенного в соответствии с зависимостью

$$dQ_k = \alpha(p_k, T_k) \cdot F_k \cdot (T_k - T_w) \cdot d\tau,$$

где  $k$  – указатель итерационного процесса.

На стадии сгорания рассматривается два механизма теплоотдачи отдельно для каждой зоны:

$$dQ_1 = \alpha_1(p, T_1) \cdot F_1 \cdot (T_1 - T_w) d\tau; \quad dQ_2 = \alpha_2(p, T_2) \cdot F_2 \cdot (T_2 - T_w) d\tau,$$

где  $F_1$  и  $F_2$  – поверхности контакта зоны заряда и зоны продуктов сгорания со стенками цилиндра, а  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  – коэффициенты теплоотдачи, соответствующие каждой зоне.

Рассмотренное структурное построение математической модели рабочего цикла дизельного двигателя сопровождается соответствующим программным обеспечением для реализации на ЭВМ современного типа.

**Выводы.** Разработанная математическая модель рабочего процесса дизельного двигателя позволяет уже на данном этапе проводить исследования характеристик дизеля, работающего на традиционном и альтернативных топливах; реализация модели малозатратна в вычислительном отношении. Модульная структура модели дает возможность совершенствовать описание составляющих ее процессов, в частности рассмотрение диффузного сгорания, и учета турбулентности, по мере проведения новых исследований.

**Список литературы:** 1. Куценко А.С. Моделирование рабочих процессов двигателей внутреннего сгорания на ЭВМ.– К.: Наук. Думка, 1988.– 100 с. 2. Heywood J.B. Internal Combustion Engine Fundamental.– New York: McGraw– Hill, 1988.– 930 p. 3. Варнац Ю., Маас У., Диббл Р. Горение: физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ; Перевод с англ.; под ред. В. Власова.– М.: Физматлит, 2003.– 351 с. 4. JANAF Thermochemical Tables, 2d ad./NSRDS-NB537, U.S. National Bureau, 1971.– 929 p. 5. Шароглазов Б.А., Фарафонов М.Ф., Клементьев В.В. Двигатели внутреннего сгорания: теория, моделирование и расчет процессов; под ред. Б.А. Шароглазова. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2006.– 382 с. 6. Виле И.И. Новое о рабочем цикле двигателя. – М.: Машгиз, 1962.– 271 с. 7. Bordet N., Caillot C., Higelin P. A Physical 0D Diesel Combustion Model Using Tabulated Chemistry with Presumed Probability Density Function Approach: For engine pre-Mapping // Oil and Gas Science and Technology. – 2011.– Vol. 66, № 5.– P.– 823–843. 8. Mauviot G., Albrecht A., Poinsoit T. A new 0D approach for Diesel combustion modelling coupling probability density function with complex chemistry //SAE Techn. Pap. Ser. –2006.–№ 2006-01-3332. – 25 p. 9. Hiroyasu H., Kadota T., Arai M. Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions (part. 1) //Bulletin of the JSME, 1983.– Vol. 26.–№214.– P. 569 – 575. 10. Fusco A., Knox-Kelecy A., Foster D. Application of a Phenomenological Soot Model to Diesel Engine Combustion //In: International Symposium COMMEDIA, Tokyo. – 1994. – P. – 571 – 576. 11. Зельдович Я.Б. Садовников П.Я., Франк-Каменецкий Д.И. Окисление азота при горении. – М.: Изд. АН СССР, 1947. – 145 с. 12. Левтеров А.М. Анализ математических моделей механизма сажеобразования при сжигании углеводородных топлив / А.М. Левтеров, Л.И. Левтерова // Вісник НТУ «ХП». Серія: Математичне моделювання в техніці та технології, – Х.: НТУ «ХП», 2013. – №5 (979). – С. 130-141. 13. Kazakov A., Foster D. Modeling of Soot Formation During DI Diesel Combustion Using a Multi-Step Phenomenological Model // SAE Techn. Pap. Ser. – 1998. – 982463. – 15 p. 14. Кавтарадзе П.З. Локальный теплообмен в поршневых двигателях.– М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001.– 592 с. 15. Дьяченко Н.Х., Дашков С.Н., Костин А.К. Теплообмен в двигателях и теплонапряженность их деталей, – Л.: Машиностроение, 1969.– 247 с. 16. Woschni G. Beitrag zum Problem des Wärmeüberganges im Verbrennungsmotor // In: MTZ. – 1965, № 4.– S. 128–133.

Поступила в редколлегию 07.02.2013 г.