

РАСЧЕТ ПРОЦЕССОВ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТОПЛИВ

Исаев А.В.

Восточно-украинский национальный университет им В.И.Даля
Научно-исследовательский институт прикладной экологии

Процесс самовоспламенения и начальная фаза сгорания в дизеле, как правило, происходят вблизи верхней мертвой точки, т.е. практически при постоянном объеме. Этот факт дает возможность моделировать условия самовоспламенения топлива в условиях бомбы постоянного объема. Такой подход существенно упрощает математическую модель и сокращает время проведения расчетов при обеспечении достаточной адекватности результатов расчетов.

Математическое моделирование химической кинетики процессов самовоспламенения и сгорания топлив в условиях бомбы постоянного объема основано на расчете скоростей реакций, протекающих во время этих процессов.

Величину скорости химической реакции оценивают по изменению во времени концентрации любого из компонентов реакции c . В общем виде уравнение реакции можно записать как:

$$\sum_{k=1}^K u'_{ki} c_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K u''_{ki} c_k,$$

где u_{ki} - стехиометрический коэффициент k -го компонента i -ой реакции; обозначения ' и '' - используются для идентификации прямого и обратного направления реакции.

Скорость изменения концентрации k -го вещества определяется по уравнению:

$$w_k = \sum_{i=1}^I u_{ki} q_i,$$

где

$$u_{ki} = u''_{ki} - u'_{ki};$$

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{u'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^K [X_k]^{u''_{ki}} - \text{скорость } i\text{-ой химической реакции};$$

X_k - молярная концентрация k -го вещества;

k_{fi} и k_{ri} - константы скоростей прямой и обратной реакции i , соответственно.

Константа скорости прямой реакции определяются по уравнению Аррениуса:

$$k_{fi} = A_i T^{b_i} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right),$$

где A_i – предэкспоненциальный множитель;

T – температура;

b_i – показатель степени температуры для i -ой реакции;

E_i – энергия активации для i -ой реакции;

R – газовая постоянная.

Константа скорости обратной реакции определяются из соотношения:

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{K_{ci}},$$

где $K_{ci} = \exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT}\right) \cdot \left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^K u_{ki}}$ – константа равновесия i -ой реакции;

ΔS_i^0 – изменение энтропии при полном преобразовании исходных компонентов i -ой реакции в конечные;

ΔH_i^0 – изменение энтальпии при полном преобразовании исходных компонентов i -ой реакции в конечные;

P – давление.

Параллельно с расчетом скоростей химических реакций и концентрации реагентов также рассчитываются температура и давление в бомбе на основании известных термодинамических зависимостей [1]. Величина периода задержки воспламенения определялась по началу резкого роста температуры в бомбе (по пику производной dT/dt , где t – время).

Для оценки периода самовоспламенения использовался химический механизм сгорания *n*-гептана (механизм сокращен для ускорения проведения расчета Reitz R.D. с соавт.) [2,3].

Оценка периода самовоспламенения биодизельного топлива производилась в помощью совмещенного механизма сгорания *n*-гептана и метилбутаноата (механизм для метилбутаноата разработан Lawrence Livermore National Laboratory) [4].

На основе предложенной методики были рассчитаны матрицы периодов задержки самовоспламенения для дизельного и биодизельного топлива. Варьировались температура, давление и коэффициент избытка воздуха. Результаты расчетов можно увидеть: http://diesexpert.narod.ru/Ignition_data.zip.

Признательность.

Автор статьи выражает признательность компании Reaction Design за предоставленную триальную версию программы CHEMKIN-PRO, которая использовалась для проведения описанных в статье расчетов.

Литература

1. Исаев С.И. Курс химической термодинамики. – М.: Высш. шк., 1986. – 272 с.
2. Ra, Y., Reitz, R.D. A Reduced Chemical Kinetic Model for IC Engine Combustion Simulations with Primary Reference Fuels // Combust. Flame, Vol. 155, pp. 713–738, doi:10.1016/j.combustflame.2008.05.002, 2008.
3. Liang L., Reitz R.D., Iyer C.O., Yi J. Modeling Knock in Spark-Ignition Engines Using a G-equation Combustion Model Incorporating Detailed Chemical Kinetics // SAE paper. – 2007. – No 2007-01-0165. – 12 p.
4. https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion