
РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИЙ ОКСИДОВ АЗОТА В НССІ-ДВИГАТЕЛЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОЗОННОЙ НУЛЬМЕРНОЙ ХИМИКО-КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

С.В. Гусаков, И.В. Епифанов

Кафедра комбинированных ДВС
Российский университет дружбы народов
Ул. Миклухо-Маклая, 6, Москва, Россия, 117198

Разработан и проверен способ многозонного моделирования НССІ ДВС с начальными данными из газодинамического расчета. Получены концентрации оксидов азота с использованием механизма GRI-Mech 3 окисления природного газа.

Двигатель с самовоспламенением гомогенного заряда от сжатия, известный как НССІ-двигатель (НССІ ДВС), рассматривается в качестве альтернативы дизелю. Гомогенная топливовоздушная смесь образуется перед впускными клапанами цилиндра, как в двигателе с искровым зажиганием (ДсИЗ), а в конце такта сжатия происходит самовоспламенение как в дизеле. Горение в НССІ ДВС значительно отличается от горения в дизеле тем, что смесь воспламеняется по всему объему камеры сгорания (КС) и сгорание смеси не зависит от процессов распространения пламени и турбулентности. Преимущество НССІ-процесса в том, что температура смеси в объеме КС однородна, отсутствуют локальные зоны, а это позволяет достичь ультранизких выбросов NO_x и твердых частиц (ТЧ). Термохимия процесса НССІ-горения позволит создать ДВС с высоким КПД (равным или даже большим чем у дизеля).

Производство НССІ ДВС в настоящее время связано с необходимостью преодоления некоторых технических проблем. Наиболее значимой из них является отсутствие возможности непосредственного управления моментом самовоспламенения гомогенной топливовоздушной смеси. Средства управления процессом горения НССІ ДВС с использованием однозонной модели предлагались в работе [1].

В работе [3] рассмотрен метод расчета локальных концентраций оксидов азота в объеме КС дизеля, на основании механизма Зельдовича. Способ моделирования НССІ процесса, предложенный в [4; 5] связывает гидродинамику с процессами окисления, описанными химико-кинетическими (ХК) механизмами.

В данной статье сняты некоторые допущения, принятые для однозонного моделирования. Такие как отсутствие расслоения топливовоздушного заряда по объему КС, однородность температурного поля. Давление, в отличие от температуры, в зонах КС одинаково. Тепловые потери учитываются по модифицированной формуле Вошни для НССІ ДВС [7].

НССІ-процесс условно разбивают на три стадии: сжатие, горение, догорание. В процессе сжатия химические реакции мало влияют на формирование топ-

ливной среды (наблюдается лишь относительно небольшое образование радикалов). При подаче топлива во впускной патрубок превалирует процесс перемешивания топлива с воздухом и остаточными газами. В ходе процесса сжатия турбулентные потоки и теплопередача, распределение температуры топливовоздушной смеси (ТВС) по объему КС и ее локальный состав в основном определяют момент начала процесса самовоспламенения.

На стадии горения наблюдается большее влияние химической кинетики. За счет ветвления цепных реакций горение идет настолько быстро, что топливовоздушная смесь не успевает перемешаться [8].

После основного тепловыделения на такте расширения турбулентная диффузия продуктов сгорания больше действует на процесс догорания, но в этом процессе выделяется значительно меньше теплоты. При этом перемешивание несгоревших и частично прореагировавших молекул топлива с горячей и полностью сгоревшей смесью приведет к дополнительному окислению, что в данном исследовании не учитывается. Однако такое допущение может сказаться на результатах вычисления выбросов CO и CH.

В связи с этим в предложенном подходе моделирования HCCI-процесс разбит на два: процесс сжатия до начала горения, в котором преобладают турбулентные процессы, и процесс основного горения, в котором применяется химическая кинетика окисления. Этот подход позволяет сократить время вычислений и повысить их точность в отношении к однозонной модели.

Для исследования применен химико-кинетический (ХК) механизм окисления природного газа *GRI-Mech 3* [10], учитывающий кинетику горения, с участием 53 компонентов и 325 реакций. Этот механизм включает основные реакции горения метана, этана, пропана, а также реакции образования NO и других компонентов вредных веществ.

Экспериментальные данные взяты из публикаций университета Lawrence Livermore National Laboratory, US [8]. Основой для разработки и тестирования HCCI-горения был выбран автомобильный двигатель VW TDI, предназначенный для обычных и гибридных силовых установок. Это 4-цилиндровый дизель, с наддувом и непосредственным впрыском. Рабочий объем двигателя 1,9 л, степень сжатия 19. При проведении экспериментальных исследований форсунки дизеля были демонтированы, и на их место установлены пьезокварцевые датчики давления, охлаждаемые водой. В табл. 1 представлены основные данные исследуемого HCCI ДВС.

Таблица 1

Технические данные дизель VW TDI

Диаметр цилиндра, мм	79,5	Углы опережения открытия, град: впускного клапана выпускного клапана	16 28
Ход поршня, мм	95,5		
Степень сжатия	19		
Диапазон частот вращения коленчатого вала, мин ⁻¹	800—3 600	Углы запаздывания закрытия, град: впускного клапана выпускного клапана	25 19

Результаты газодинамического расчета по методике [2] процессов впуска и сжатия до начала горения послужили основанием для задания начальных данных по формированию топливного и воздушного заряда по объему камеры сгорания.

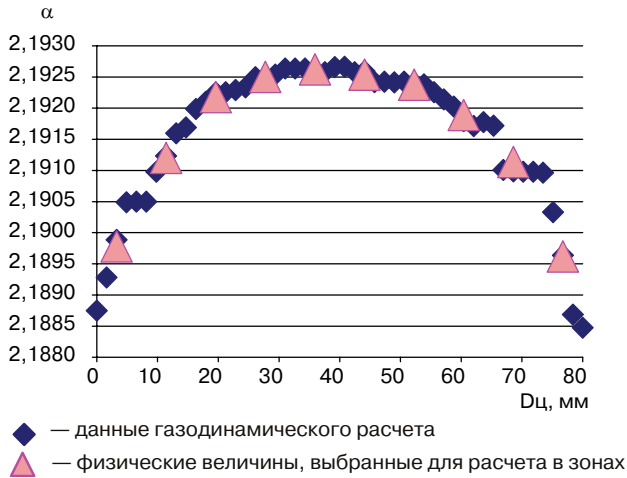


Рис. 1. Распределение коэффициента избытка воздуха вдоль поверхности днища поршня за 10град ПКВ до ВМТ

Расчет показал, зависимости коэффициента α имеют характерную выпуклость и асимметрию (см. рис. 1) [2].

На рис. 2 представлена зависимость распределения температуры по радиусу на поверхности днища поршня от центра к периферии. Как видно, температура распределяется неравномерно, с понижением у стенок КС.

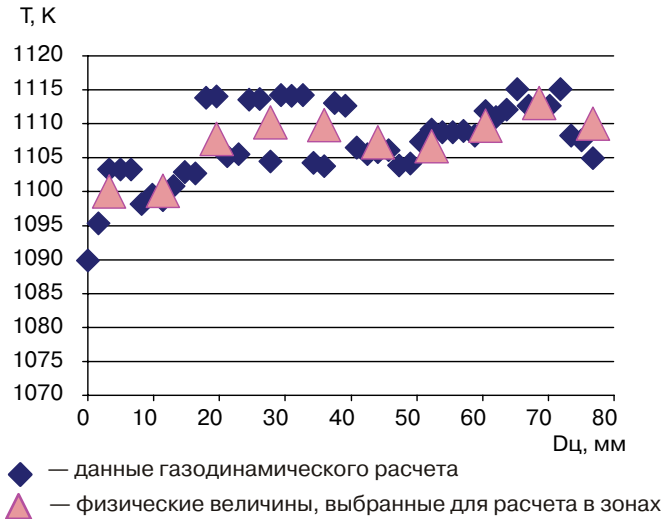


Рис. 2. Распределение температуры вдоль поверхности днища поршня за 10град ПКВ до ВМТ

С использованием результатов реализованной однозонной модели [1] была сформирована многозонная химико-кинетическая модель, по которой для 10 зон выполнен расчет процесса горения за 10 град ПКВ до ВМТ.

Для наглядности на рис. 3 представлены результаты эксперимента и расчета, полученные по одно- и многозонной моделям в виде зависимостей давления от угла ПКВ. Резкое возрастание кривой 1 обусловлено экспоненциальной зависимостью скоростных параметров реакций от однородной по всему объему КС температуры, также как и других физических параметров. Зависимость 2, рассчитанная по многозонной модели, удовлетворительно согласуется с экспериментом (зависимость 3), что объясняется наличием зон горения с начальными данными, приближенными к реальной картине состояния рабочего тела в начале расчета (см. рис. 1, 2).

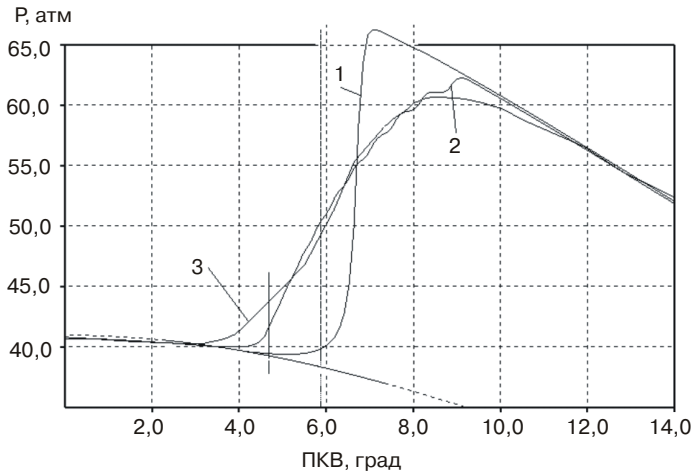


Рис. 3. Зависимости давления в цилиндре НССИ ДВС от угла ПКВ:
 1 — расчет по однозонной модели; 2 — расчет по многозонной модели;
 3 — эксперимент

Расчеты показывают, что увеличение числа зон в многозонной модели приводит к повышению точности вычислений таких параметров ДВС, как концентрации компонентов ОГ, давления, момента воспламенения, длительности сгорания и др. Однако при этом значительно возрастает время проведения расчетов.

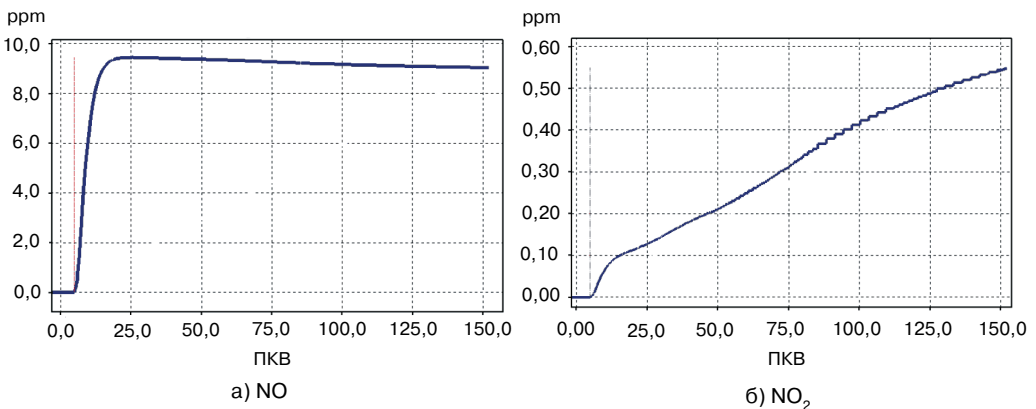
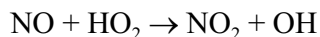


Рис. 4. Вредные выбросы, ppm

На рис. 4 приведены результаты расчета зависимостей частиц NO и NO₂ от угла ПКВ. Установлено, что на образование выбросов NO и NO₂ влияет температура горения, которая учитывается константами скоростей химических реакций в химико-кинетическом механизме *GRI-Mech 3.0*. Обнаружено также, что с увеличением угла ПКВ в процессе горения NO окисляется до NO₂. По данным [9] переход NO в NO₂ в основном протекает через гидропероксидовый радикал:



В работе [6] отмечается, что высокий уровень NO₂ в ОГ может послужить индикатором тепловых потерь, а также низкой эффективности горения.

Экспериментальные данные по вредным выбросам для одного цилиндра VW TDI двигателя здесь не приводятся, так как датчики по токсичным компонентам были установлены в выпускном коллекторе HCCI ДВС, поэтому не определено влияние каждого цилиндра на их показания, что существенно, так как малейшее отклонение момента самовоспламенения в одном из цилиндров приводит к различию состава ОГ на выходе.

Таким образом, можно сделать следующие выводы.

1. Предложенный подход многозонного нульмерного химико-кинетического моделирования HCCI-процесса выполняется по результатам газодинамического расчета, которые используются в качестве начальных данных расчета горения.

2. Применение предложенного многозонного нульмерного химико-кинетического моделирования HCCI-процесса позволяет определить концентрации оксидов азота по объему КС и их изменение по ходу рабочего процесса в зависимости от распределения топлива и локальных температур по объему КС.

3. Увеличение числа зон расчетной модели сопровождается повышением точности результатов вычислений, но при этом резко возрастает время счета.

4. Разработанная методика многозонного нульмерного химико-кинетического моделирования HCCI-процесса HCCI ДВС различных конструкций может быть без существенных изменений предложена для проектировщиков двигателей.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Гусаков С.В., Епифанов И.В. Исследование HCCI процесса с использованием нульмерной однозонной химико-кинетической модели горения // Вестник РУДН. — 2007.
- [2] Гусаков С.В., Епифанов И.В. Газодинамические процессы в HCCI двигателе до момента самовоспламенения // Международная научно-техническая конференция «Двигатель-2007», МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007.
- [3] Кавтарадзе Р.З., Голосов А.С. Расчет содержания оксидов азота в КС дизеля на основе многозонной модели рабочего процесса // ДВС XXI века. — СПб., 2000.
- [4] Acaves S.M., Flowers D., Martinez-Frias J. et al. Multi-Zone Analysis of Propane HCCI Combustion // SAE Paper 2001-01-1027, 2001.
- [5] Acaves S.M., Flowers D., Westbrook C.K. et al. A Multi-Zone Model for prediction of HCCI combustion and emissions // SAE paper 2000-01-0327, 2000.
- [6] Amneus P., Mauss F., Kraft M. et al. NO_x and N₂O formation in HCCI engines // Lund, Cambridge, 2005.

- [7] *Assanis D., Chang J., Guralp O. et al.* New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux // Univ. of Michigan, GM R&D Center, 2004.
- [8] *Flowers D.L.* Combustion in HCCI Engines: Experiments and Detailed Chemical Kinetic Simulations // Thesis (Ph.D.), 2002.
- [9] *Hori M., Matsunaga N., Marinov N. et al.* // 27th Symp. (int.) on Combustion, pp. 389—396 (1998), 1998.
- [10] *Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M. et al.* GRI-Mech 3.0 // Gas Research Institute, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ 1999 г.

HCCI ENGINE NOX ESTIMATION WITH MULTIZONE MODEL

S.V. Gusakov, I.V. Epifanov

Internal Combustion Engines' Department
Peoples' Friendship University of Russia
Miklukho-Maklaya str., 6, Moscow, Russia, 117198

Researched & developed HCCI engine multizone approach with initial data from CFD calculations. Obtained NO_x concentrations based on chemical-kinetics mechanism GRI-Mech 3.