

## Математическое моделирование образования и выгорания сажи в цилиндре дизеля 2Ч 10,5/12,0 при работе на рапсовом масле и этаноле

© В.А. Лиханов, А.Н. Козлов, М.И. Арасланов

Вятская государственная сельскохозяйственная академия,  
г. Киров, 610017, Россия

*Рассмотрен один из перспективных способов снижения дымности отработавших газов дизеля — использование альтернативных топлив, применение которых позволяет решить задачу по замещению нефтяного топлива. Представлена математическая модель образования сажи в цилиндре дизеля при сгорании рапсового масла и этанола, основанная на химической кинетике пиролиза углеводородов топлива и высокотемпературном ацетиленовом механизме. На базе современных представлений о механизме образования зародышевой частицы сажи в условиях камеры сгорания дизеля предложен химизм сажеобразования при работе на рапсовом масле и этаноле. Результаты проведенного расчета уровня дымности отработавших газов дизеля 2Ч 10,5/12,0 на рапсовом масле и этаноле показывают, что при работе на альтернативных топливах на номинальном режиме концентрация сажи в отработавших газах снижается в 3,7 раза по сравнению с использованием дизельного топлива. Полученные результаты теоретических расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.*

**Ключевые слова:** дизель, рапсовое масло, этанол, камера сгорания, пиролиз, двойная система топливоподачи, сажа, дымность отработавших газов

Изучение процессов сажеобразования в камере сгорания (КС) дизелей связано прежде всего с постоянно ужесточающимися требованиями к экологическим характеристикам энергетических установок. Известно, что в результате высокой излучательной способности сажи значительно возрастают потери энергии в цилиндре дизеля в виде теплового излучения пламени. Часть тепла, выделяемая при сгорании дисперсного углерода, отводится конвективным путем. Таким образом, образование сажи снижает индикаторный КПД дизеля, в том числе за счет неполноты и несвоевременности окисления углеводородов топлива [1].

Особую опасность представляет сажа, образовавшаяся в КС дизеля, поскольку на своей поверхности способна адсорбировать другие продукты неполного сгорания топлива, в том числе бензапирен, имеющий канцерогенные свойства. При быстром охлаждении газовой смеси в цилиндре часть высокомолекулярных углеводородов не успевает пройти все стадии процесса окисления и накапливается на поверхности сажевых частиц, что и определяет канцерогенную опас-

ность сажи [2]. Известно, что канцерогены, адсорбированные на поверхности твердых частиц, действуют на живые клетки активнее, чем канцерогены в чистом виде [3]. В образцах сажи из выхлопной системы или отобранных при низких температурах отработавших газов (ОГ) обнаруживаются тяжелые углеводороды, сконденсированные в агломераты и превращенные в смолистые вещества. Попадая в легкие человека, частицы сажи вызывают раздражение, способствуют появлению злокачественных новообразований. Кроме того, исследования показали, что и сельскохозяйственные растения способны накапливать сажу в значительном количестве [4].

Один из перспективных способов снижения дымности дизелей — это применение альтернативных топлив [5, 6]. Для оптимизации процессов сгорания и максимального снижения выбросов сажи при работе дизеля на альтернативном топливе необходимо иметь полное представление об основных стадиях быстропротекающих процессов в цилиндре. Для этого, в частности, необходимо разработать адекватную математическую модель образования и выгорания сажи в цилиндре дизеля, описывающую основные стадии сажеобразования от стадии термического разложения углеводородов исходного топлива и их производных до реакций газификации на поверхности частиц сажи. Такая модель должна не только с достаточной точностью позволять рассчитывать показатели сажесодержания в ОГ, но и давать представление о динамике процессов сажеобразования в цилиндре дизеля при работе на альтернативных видах топлива — этаноле и рапсовом масле (РМ).

Образование и выгорание частиц сажи в КС дизеля — сложные физико-химические процессы, интенсивно протекающие в короткие промежутки времени в нестационарных температурных условиях, при переменных значениях давления и концентрации компонентов газовой смеси.

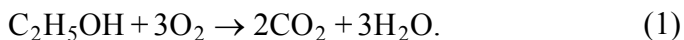
По температурным условиям, наличию кислорода, концентрации углеводородов топлива объем КС дизеля неоднороден. При работе дизеля на РМ и этаноле с двойной системой топливоподачи в КС можно условно выделить несколько зон.

В зонах КС дизеля с дефицитом кислорода воздуха при высоких температурах углеводороды топлива подвергаются пиролизу с образованием молекул с меньшим количеством атомов углерода. По мере роста температуры устойчивыми остаются молекулы с более короткими цепями, а также циклические молекулы и радикалы бензольного ряда. При температурах свыше 1500 °С остаются только молекулы  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $C_2H_2$  и некоторые углеводородные радикалы, устойчивые к распаду.

В зонах с достаточным присутствием кислорода процесс распада углеводородов топлива значительно ускоряется. Энергия, освобожденная в результате соединения кислорода с неустойчивыми молекулами углеводородов, достаточна для того, чтобы вызвать в молекулах разрыв одной или нескольких С—С-связей. При таких реакциях образуются разнообразные продукты, большинство из которых являются случайными промежуточными. Высокоактивные радикалы с атомами кислорода ускоряют цикл превращений.

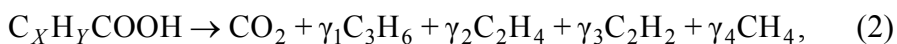
В зонах с недостаточной концентрацией углеводородного топлива, где температура на границах факелов впрыскиваемых РМ и этанола понижена вследствие испарения спирта, процесс термического разложения углеводородов замедляется. В них возможно развитие холоднопламенных реакций, ведущих к образованию и осаждению на стенках цилиндра кислородсодержащих молекул, в частности пероксидов и альдегидов [7].

На участках факела спирта с достаточной концентрацией кислорода при распространении фронта пламени происходит выгорание спирта с образованием углекислого газа и воды по реакции



Процесс пиролиза молекул РМ происходит в две стадии: декарбоксилирование и разложение олефина. Декарбоксилирование — начальная стадия термического распада молекул карбоновых кислот РМ и происходит при более низких температурах, поэтому скорость брутто-реакции распада молекулы РМ в зоне высокотемпературного пиролиза лимитирована скоростью разложения олефина, образовавшегося в результате декарбоксилирования молекулы карбоновой кислоты РМ.

Для определения скорости разложения углеводородов РМ необходимо провести химическую аппроксимацию процессов декарбоксилирования и пиролиза одной мономолекулярной реакцией термической конверсии карбоновой кислоты РМ с произвольно ограниченным числом стабильных компонентов:



где  $\text{C}_x\text{H}_y\text{COOH}$  — условная молекула карбоновой кислоты РМ;  $\gamma_i$  — стехиометрический коэффициент.

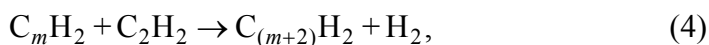
Стехиометрические коэффициенты в уравнении (2) были определены с учетом индуктивного и мезомерного эффектов, наблюдаемых при термическом распаде олефинов.

Заключительный этап глубокого пиролиза — взрывное разложение ацетиленов с образованием химических зародышей частиц сажи, достаточно подробно рассмотренное в монографии [8]. Общий вид

уравнения реакции разложения ацетиленового радикала может быть записан следующим образом [9]:



Науглероживание радикала зародыша сажи происходит при взаимодействии с ацетиленом за счет присоединения атомов углерода и усиления их связей. При достижении числа атомов углерода 80...100 и более появляется физическая поверхность сажистой частицы [10]. Таким образом, происходит фазовый переход к твердой конденсированной фазе по следующей брутто-реакции:



где  $m$  — количество атомов углерода в зародыше сажи.

Дальнейший рост частицы сажи осуществляется за счет реакции разложения ацетиленового радикала на поверхности и может быть ускорен за счет взаимодействия с радикалами, другими химическими и физическими зародышами сажи. Росту зародышей сажи в пламени этанола активно препятствует большое количество образовавшихся радикалов гидроксильной группы и водорода. Активная адсорбция радикалов водорода препятствует контакту частиц с окружающей средой. Гидроксильные группы ОН взаимодействуют на поверхности частицы с атомами углерода, разрушают углеродный каркас, препятствуя дальнейшему росту частицы.

При работе дизеля на РМ и этаноле, даже в зонах с богатой топливоздушной смесью, параллельно с образованием и ростом сажевых частиц происходит их выгорание из-за наличия атомов кислорода, поступающего в КС вместе с топливом. Принято, что процесс газификации твердого углерода сажевых частиц может происходить за счет взаимодействия с радикалами, содержащими кислород, молекулами воды, монооксидом и диоксидом углерода, а также за счет реакции со свободным кислородом. Химический механизм включает в себя гетерогенные и гомогенные реакции окисления, идущие на поверхности и в пограничном объеме углеродной частицы [9]:





Полное сажевыделение дизеля при работе на этаноле и РМ с двойной системой топливоподачи (ДСТ) складывается из сажи, образовавшейся по различным механизмам в пламени богатой топливно-воздушной смеси (ТВС) этанола и запального РМ (рис. 1).

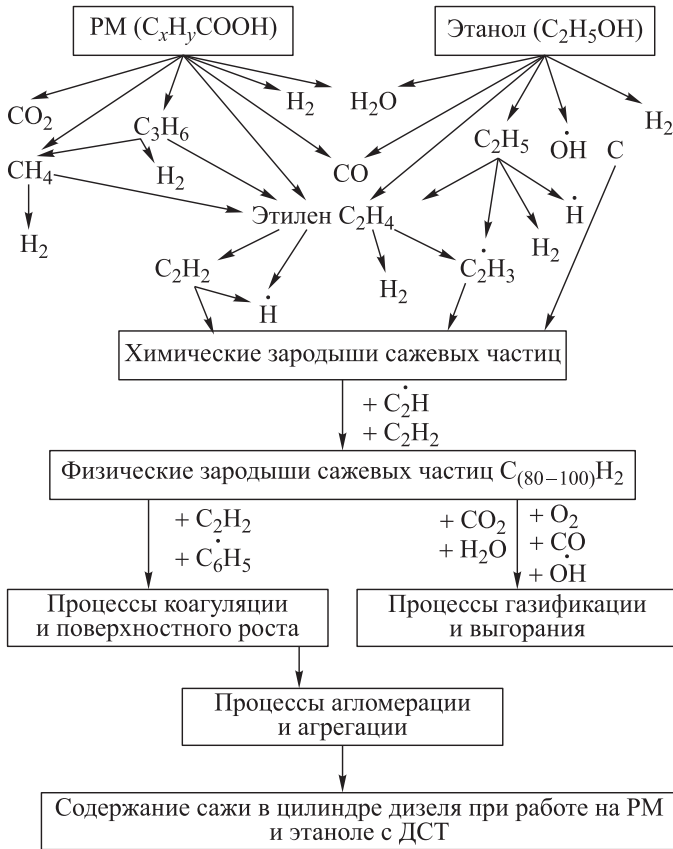


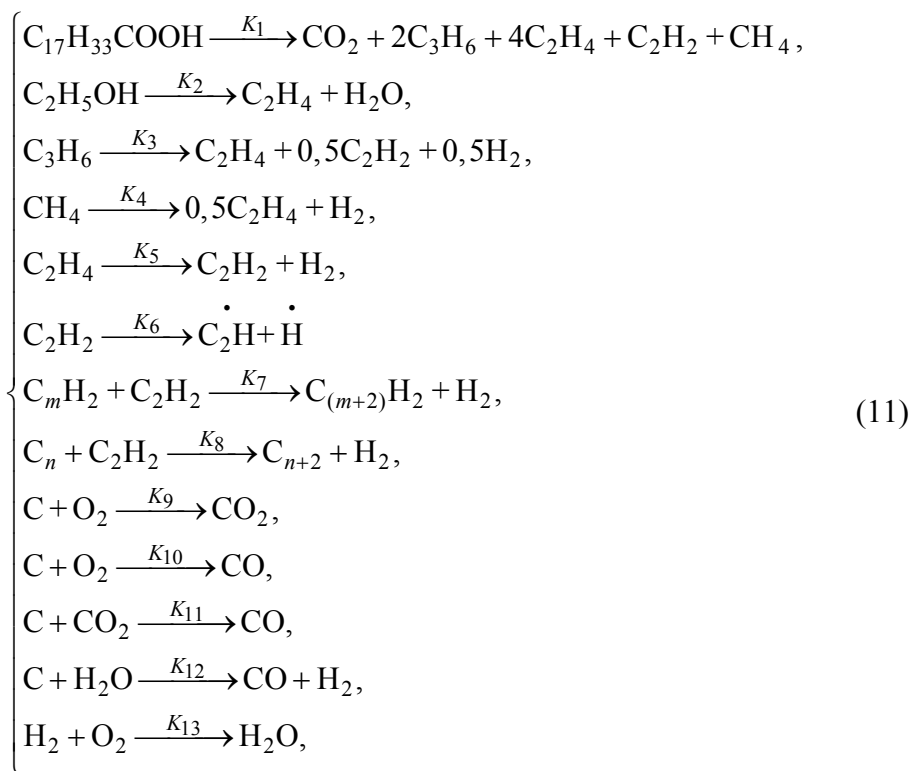
Рис. 1. Химизм сажеобразования при работе дизеля на этаноле с использованием ДСТ с воспламенением от запальной струи РМ

На сегодняшний день в научной среде существует несколько гипотез о ключевом механизме процесса сажеобразования. В условиях подачи в КС двух топлив, различных по своим физико-химическим свойствам, в цилиндре дизеля характерно наличие значительной температурной и концентрационной неоднородности топлив и кислорода в объеме КС, следовательно, образование сажи в нем потенциально может идти с помощью различных механизмов.

Вследствие временной и пространственной ограниченности условий, необходимых для протекания низкотемпературных механизмов

образования сажи (через полициклические ароматические углеводороды), предполагаем, что эти реакции не вносят существенного вклада в конечный выход сажи. С некоторой долей вероятности можно говорить о частичном фракционировании негорящих капель в топливном факеле РМ и на поверхностях КС. Однако допускаем, что этот процесс не вносит существенного вклада в суммарное сажеобразование. Предполагаем, что для этанола не характерен процесс сажеобразования путем высокотемпературной термической полимеризации и дегидрогенизации парожидкостного ядра испаряющихся капель, предложенный Н.Ф. Разлейцевым [11], ввиду высокой скорости испарения.

Окончательно процессы образования и газификации сажи в цилиндре дизеля 2Ч 10,5/12,0, работающем на этаноле и запальном РМ, можно представить в упрощенном виде как систему брутто-реакций:



где  $K_i$  — константа скорости  $i$ -й реакции;  $C_n$  — количество атомов углерода на поверхности частицы.

Для аналитического описания процесса сажевыделения используем методы решения прямой задачи химической кинетики. Обобщенную химическую модель процесса сажевыделения описывает система уравнений (11). Для определения скорости образования химических зародышей частиц сажи необходимо провести кинетический

расчет первых пяти уравнений, проходящих в газовой фазе. Для этого составим систему уравнений для расчета мгновенных концентраций основных компонентов газовой смеси, участвующих в образовании ацетилена и влияющих на скорость сажеобразования в зонах богатой ТВС:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dM_1}{d\varphi} = -\frac{k_1 M_1}{6n}, \\ \frac{dM_2}{d\varphi} = -\frac{k_2 M_2}{6n}, \\ \frac{dM_3}{d\varphi} = \frac{1}{6n} (2k_1 M_1 - k_3 M_3), \\ \frac{dM_4}{d\varphi} = \frac{1}{6n} (k_1 M_1 - k_4 M_4), \\ \frac{dM_5}{d\varphi} = \frac{1}{6n} (4k_1 M_1 + k_2 M_2 + k_3 M_3 + 0,5k_4 M_4 - k_5 M_5), \\ \frac{dM_6}{d\varphi} = \frac{1}{6n} (0,5k_3 M_3 + k_4 M_4 + k_5 M_5), \\ \frac{dM_7}{d\varphi} = \frac{1}{6n} (0,5k_3 M_3 + k_1 M_1 + k_5 M_5), \\ \frac{dM_8}{d\varphi} = \frac{k_2 M_2}{6n}, \\ \frac{dM_9}{d\varphi} = \frac{k_1 M_1}{6n}, \end{array} \right. \quad (12)$$

где  $M_i$  — текущая концентрация  $i$ -го компонента газовой смеси;  $\varphi$  — угол поворота коленчатого вала двигателя относительно верхней мертвой точки (ВМТ);  $k_i$  — константа  $i$ -й реакции системы (11);  $n$  — частота вращения коленчатого вала двигателя,  $\text{мин}^{-1}$ . Здесь индексы текущей концентрации системы (12) соответствуют следующим компонентам газовой смеси: 1 — РМ; 2 — этанол; 3 — пропилен; 4 — метан; 5 — этилен; 6 — водород; 7 — ацетилен; 8 — вода; 9 — углекислый газ. Константы скоростей реакций могут быть вычислены с использованием справочных данных.

Для связывания процессов образования и горения компонентов газовой смеси в условиях КС дизеля используем уравнение [12], учитывающее подвод компонентов с испаренным топливом, химические преобразования и выгорание в процессе основного горения:

$$\frac{dM_i}{d\varphi} = \left( \frac{dM_i}{d\varphi} \right)_{\sigma} + \left( \frac{dM_i}{d\varphi} \right)_k + \left( \frac{dM_i}{d\varphi} \right)_{\chi}, \quad (13)$$

где  $dM_i/d\varphi$  — суммарная скорость изменения концентрации  $i$ -го компонента газовой смеси;  $(dM_i/d\varphi)_{\sigma}$  — скорость изменения концентрации  $i$ -го компонента, связанного с подводом испаренного топлива;  $(dM_i/d\varphi)_k$  — скорость изменения концентрации  $i$ -го компонента вследствие предпламенных химических превращений топлива;  $(dM_i/d\varphi)_{\chi}$  — скорость изменения концентрации  $i$ -го компонента в процессе основного горения.

Предполагаем, что сажистые частицы проходят через реакционную зону пламени без газификации и окисляются в зоне продуктов сгорания, тогда результирующее сажевыделение можно представить в виде алгебраической суммы составляющих:

$$\left( \frac{dN}{d\tau} \right)_{\Sigma} = \left( \frac{dN}{d\tau} \right)_{\text{обр}} - \left( \frac{dN}{d\tau} \right)_{\text{выг}}, \quad (14)$$

где  $(dN/d\tau)_{\Sigma}$  — суммарная скорость изменения сажесодержания в цилиндре дизеля;  $(dN/d\tau)_{\text{обр}}$  — скорость образования сажи;  $(dN/d\tau)_{\text{выг}}$  — скорость выгорания сажи;  $N$  — текущее значение сажесодержания в цилиндре, кг.

Скорость сажеобразования в предпламенной зоне пропорциональна концентрации ацетилена [12] и определяется по выражению

$$\left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{обр}} = B_1 \frac{10^7 k_p p r_{\text{C}_2\text{H}_2} N_{\text{обр}} S_{\text{уд}}}{6n}, \quad (15)$$

где  $B_1$  — эмпирический коэффициент;  $k_p$  — константа скорости поверхностного роста;  $p$  — текущее давление в цилиндре, МПа;  $r_{\text{C}_2\text{H}_2}$  — объемная концентрация ацетилена, определяемая по уравнению материального баланса;  $N_{\text{обр}}$  — текущее значение сажесодержания в зоне образования, кг;  $S_{\text{уд}}$  — удельная поверхность частицы сажи.

Скорость выгорания частиц сажи в условиях дизельного пламени, согласно работе [7], определяем по выражению

$$\left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{выг}} = B_2 N m S_{\text{уд}} \frac{q_{\text{в}}(\alpha - \chi)}{V\alpha} \left( 2k^* \exp \left[ -\frac{E_2}{RT_m} \left( 1 - \frac{T_m}{T^*} \right) \right] + 2k^* \exp \left[ -\frac{E_1}{RT_m} \left( 1 - \frac{T_m}{T^*} \right) \right] \right), \quad (16)$$



где  $B_2$  — эмпирический коэффициент;  $q_v$  — цикловая подача воздуха, кг/цикл;  $\alpha$  — суммарный коэффициент избытка воздуха;  $\chi$  — доля выгоревшего топлива;  $V$  — текущий объем цилиндра, м<sup>3</sup>;  $k^*$ ,  $T^*$  — координаты полюса химических реакций по зависимости Аррениуса;  $E_1$ ,  $E_2$  — энергия активации, кал/моль, соответственно для реакций (5) и (6);  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T_m$  — среднемассовая температура сажистых частиц.

Константа скорости поверхностного роста частиц сажи вычисляется по данным П.А. Теснера [12]:

$$k_p = 17,1 \cdot 10^{-4} \exp(-138\,000 / RT). \quad (17)$$

Учитывая, что процесс сажеобразования происходит в предпламенной зоне, температура которой изменяется от осредненной температуры газов  $T_r$  до среднемассовой температуры сажистых частиц  $T_m$ , за определяющую температуру процесса принимаем среднеарифметическую

$$T_{\text{обр}} = \frac{T_r + T_m}{2}. \quad (18)$$

Под среднемассовой температурой  $T_m$  понимается среднеинтегральная температура частиц, распределенных в объеме, осредняющая действительную температуру частиц в зависимости от их местонахождения от  $T_{\text{min}}$  в пристеночной зоне до  $T_{\text{max}}$  в пламенной зоне. За определяющую температуру процесса выгорания принимаем среднемассовую температуру  $T_{\text{выг}} = T_m$ .

По данным исследований [12], температура частиц сажи в пламени находится в диапазоне 2600...2800 К, что значительно превышает осредненную температуру газов. Очевидно, что такие высокие температуры частиц нельзя распространять на весь излучающий объем. Для определения  $T_m$  необходимы данные о распределении температуры частиц в объеме КС. Выгорание частиц сажи происходит преимущественно в зоне продуктов сгорания, поэтому характер изменения  $T_m$  в цикле соответствует изменению температуры пламени  $T_{\text{п}}$ . Тогда упрощенно  $T_m$  можно определить как

$$T_{\text{выг}} = T_m = T_{\text{п}} - \Delta T, \quad (19)$$

где  $T_{\text{п}}$  — температура пламени;  $\Delta T$  — величина, характеризующая снижение среднемассовой температуры частиц сажи относительно  $T_{\text{п}}$ .

Величина  $\Delta T$  на основании экспериментальных данных составляет 300...400 К. Отношение температуры пламени к температуре газов [7] в общем виде можно определить функцией

$$\frac{T_{\Pi}}{T_{\Gamma}} = 1,2\alpha^{0,3} + 2\left(\frac{P_i}{P_{iM}}\right)^{0,5} \left(\frac{C_m}{C_{mн}}\right)^{0,5} \times \exp - \left\{ \frac{2,4 \left[ \varphi_i - 5,5\varphi_{2\max} \left( q_{ц} / q_{цM} \right)^{0,333} \right]}{5,5\varphi_{2\max} \left( q_{ц} / q_{цM} \right)^{0,333}} \right\}^2, \quad (20)$$

где  $P_i$  — среднее индикаторное давление;  $P_{iM}$  — среднее индикаторное давление на режиме максимального крутящего момента;  $C_m$  — средняя скорость движения поршня;  $C_{mн}$  — средняя скорость движения поршня на номинальном режиме работы двигателя;  $\varphi_i$  — текущий угол поворота коленчатого вала (п.к.в.), отсчитываемый от начала видимого горения;  $\varphi_{2\max}$  — угол 2-го максимума тепловыделения;  $q_{ц}$  — цикловая подача топлива;  $q_{цM}$  — цикловая подача топлива на режиме максимального крутящего момента.

Начальное содержание реагирующих веществ примем пропорционально их объемной концентрации в исходной смеси  $r_i$  и количеству топлива  $\sigma(\varphi_{н})$ , поданного в цилиндр к моменту  $\varphi = \varphi_{н}$ . Величина  $\sigma(\varphi_{н})$  определяется законом топливоподачи и скоростью испарения топлив, а значения начальных концентраций РМ и этанола соответственно равны

$$r_{1н} = 1 / M_{\Sigma}; \quad (21)$$

$$r_{2н} = \upsilon / M_{\Sigma}, \quad (22)$$

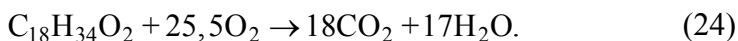
где  $M_{\Sigma}$  — сумма молей газовой смеси;  $\upsilon$  — соотношение количества молей этанола, поданного в цилиндр дизеля, к одному молю запального РМ.

Основываясь на принятых предпосылках, уравнениях (12) и (14), математическую модель сажевыделения, в зависимости от угла п.к.в. дизеля при работе на РМ и этаноле с использованием ДСТ, с учетом подвода испаренных топлив в газовую смесь и выгорания компонентов смеси, можно записать в виде системы дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{dM_1}{d\varphi} &= \alpha_{\Gamma} M_{0PM} r_{1H} \frac{d\sigma_1}{d\varphi} - \frac{k_1 M_1}{6n} - M_1 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_2}{d\varphi} &= \alpha_{\Gamma} M_{03} r_{2H} \frac{d\sigma_2}{d\varphi} - \frac{k_2 M_2}{6n} - M_2 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_3}{d\varphi} &= \frac{1}{6n} (2k_1 M_1 - k_3 M_3) - M_3 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_4}{d\varphi} &= \frac{1}{6n} (k_1 M_1 - k_4 M_4) - M_4 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_5}{d\varphi} &= \frac{1}{6n} (4k_1 M_1 + k_2 M_2 + k_3 M_3 + 0,5k_4 M_4 - k_5 M_5) - M_5 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_6}{d\varphi} &= \frac{1}{6n} (0,5k_3 M_3 + k_4 M_4 + k_5 M_5) - M_6 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_7}{d\varphi} &= \frac{1}{6n} (0,5k_3 M_3 + k_1 M_1 + k_5 M_5) - M_7 \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \frac{dM_8}{d\varphi} &= \frac{k_2 M_2}{6n}, \\
 \frac{dM_9}{d\varphi} &= \frac{k_1 M_1}{6n}, \\
 \left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{обр}} &= N_{\text{H}} \frac{\alpha_{\Gamma}}{\alpha} \frac{d\sigma_{\Sigma}}{d\varphi} + B_1 \frac{10^7 k_p p r_{C_2H_2} N_{\text{обр}} S_{\text{уд}}}{6n} - N_{\text{обр}} \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{выг}} &= N_{\text{H}} \frac{\alpha - \alpha_{\Gamma}}{\alpha} \frac{d\sigma_{\Sigma}}{d\varphi} + B_2 N S_{\text{уд}} A + N_{\text{обр}} \frac{1}{\sigma_{\Sigma} - \chi} \frac{d\chi}{d\varphi}, \\
 \left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\Sigma} &= \left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{обр}} - \left( \frac{dN}{d\varphi} \right)_{\text{выг}},
 \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

где  $\alpha_{\Gamma}$  — локальный коэффициент избытка воздуха в зоне горения;  $M_{0PM}$ ,  $M_{03}$  — стехиометрическое количество воздуха, необходимого для полного сгорания одного моля условной молекулы PM и этанола соответственно;  $r_{iH}$  — начальная концентрация  $i$ -го компонента;  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_{\Sigma}$  — относительная доля испарившегося PM и этанола в цилиндре дизеля и приведенный по теплоте сгорания суммарный подвод испаренных топлив соответственно;  $N_{\text{H}}$  — начальное саже-содержание в цилиндре;  $A$  — функция, введенная для упрощения записи уравнения выгорания сажи в системе.

Учитывая известное процентное содержание атомов кислорода, водорода и углерода по массе, средний состав РМ можно приближенно выразить в виде формулы молекулы олеиновой кислоты  $C_{18}H_{34}O_2$ . В соответствии с принятой аппроксимированной формулой молекулы уравнение реакции полного выгорания запального топлива примет вид



На основании уравнений (1) и (24) определим необходимое количество молей воздуха для сгорания одного моля топлива для этанола и РМ:

$$M_{0э} = 3 / 0,21 = 14,28; \quad (25)$$

$$M_{0PM} = 25,5 / 0,21 = 121,42. \quad (26)$$

Начальное содержание сажи в цилиндре принимаем пропорционально количеству ОГ, оставшихся в цилиндре, и концентрации сажи, замеренной в отработавших газах на выпуске из цилиндра:

$$N_H = \gamma_r q_v C_d, \quad (27)$$

где  $\gamma_r$  — коэффициент остаточных газов;  $C_d$  — действительная концентрация сажи в ОГ.

Численно интегрируя систему дифференциальных уравнений (20) с заданным вектором начальных условий, получаем мгновенные концентрации основных компонентов газовой смеси в реакционной зоне. Значение концентрации сажи в момент открытия выпускного клапана принимаем за результирующую концентрацию сажи в ОГ дизеля, т. е. не учитываем газификацию сажи на участке выпускной коллектор — пробоотборник. Для сравнения с результатами экспериментального измерения дымности ОГ полученная расчетная концентрация может быть переведена в шкалу Bosch [13] по эмпирической формуле

$$[C] = 565 \left( \ln \frac{10}{10 - Bosch} \right)^{1,206}, \quad (28)$$

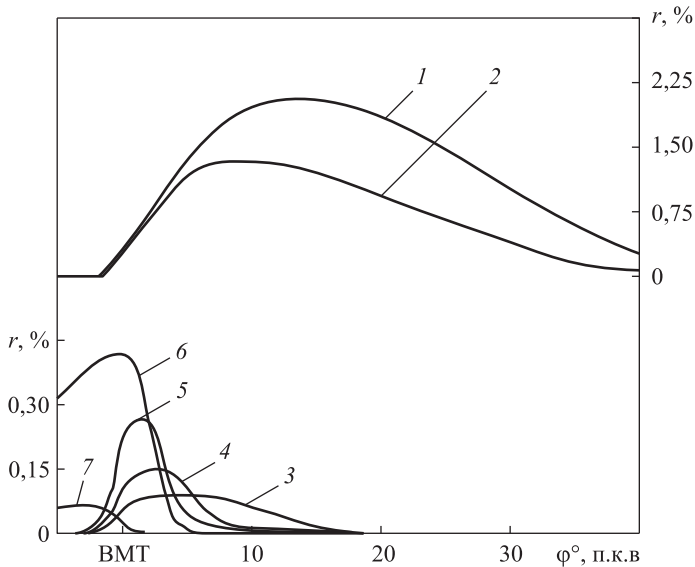
где  $[C]$  — расчетная концентрация сажи в ОГ.

На основе представленной модели были проведены теоретические расчеты показателей сажесодержания в цилиндре дизеля 2Ч 10,5/12,0 при работе на этаноле и запальном РМ.

В представленном расчете при работе дизеля на альтернативных топливах на номинальном режиме:

Установочные углы опережения впрыскивания	
топлив п.к.в. до ВМТ $\Theta$ , град.....	34
Частота вращения $n$ , мин <sup>-1</sup> .....	1800
Среднее эффективное давление $p_e$ , МПа.....	0,588
Цикловые подачи топлива, мг/цикл:	
для этанола $q_3$ .....	52
для запального РМ $q_{PM}$ .....	13

По результатам расчетов видно, что процесс пиролиза топлив инициируется в момент начала тепловыделения (рис. 2). До начала тепловыделения происходит постепенное увеличение концентрации паров топлива, связанное с продолжающимся испарением.

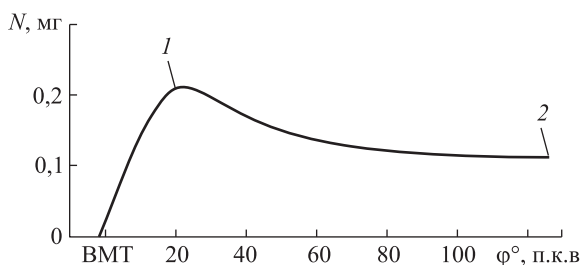


**Рис. 2.** Концентрации углеводородов топлива и продуктов пиролиза в реакционной зоне КС при работе дизеля 2Ч 10,5/12,0 на этаноле и РМ на номинальном режиме работы дизеля:  
 1 — H<sub>2</sub>; 2 — C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>; 3 — CH<sub>4</sub>; 4 — C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>; 5 — C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>; 6 — этанол; 7 — РМ

С развитием кинетического сгорания и прогревания топливовоздушной среды увеличивается скорость мономолекулярных реакций распада топлива, в связи с этим увеличивается концентрация продуктов пиролиза. Вместе с тем интенсивно растет расход топлива, связанный с выгоранием. После 5° п.к.в. после ВМТ концентрация газифицированного топлива (РМ и этанола) в реакционной зоне КС минимальна. Несмотря на то, что процесс испарения продолжается, испарившееся топливо быстро подвергается термическому разложению и выгоранию.

С ростом температуры в КС дизеля увеличивается скорость разложения продуктов пиролиза углеводородов топлива с образованием ацетилена. С этим связано смещение пика концентрации ацетилена на более поздний угол п.к.в. Ацетилен образуется в ходе пиролиза в КС до конца процесса испарения топлива, т. е. до  $25^\circ$  п.к.в. после ВМТ на номинальном режиме работы дизеля. Постепенное снижение концентрации ацетилена на более поздних углах связано с окислением и сажеобразованием. В ходе этих гетерогенных реакций выделяется водород, максимальная концентрация которого смещена на более поздний угол п.к.в. относительно пика концентрации ацетилена. Последующее снижение концентрации  $H_2$  объясняется постепенным преобладанием процесса окисления в связи с диффузией кислорода из других зон КС и снижением интенсивности образования водорода в ходе пиролиза углеводородов топлива и сажеобразования.

С некоторой задержкой относительно начала тепловыделения ( $4...6^\circ$  п.к.в.) в КС дизеля при сгорании этанола и РМ начинается процесс интенсивного сажеобразования (рис. 3). Скорость газификации частиц сажи на начальном этапе минимальна преимущественно по причине относительно низкой температуры в зоне продуктов сгорания. По мере увеличения осредненной температуры в КС скорость газификации сажи увеличивается. После  $20^\circ$  п.к.в. при работе дизеля на рассматриваемом режиме процесс газификации сажи начинает преобладать над процессом образования, и массовое содержание сажи  $N_{расч}$  в цилиндре дизеля уменьшается.



**Рис. 3.** Изменение массового содержания сажи  $N_{расч}$  в цилиндре дизеля 2Ч 10,5/12,0 на номинальном режиме работы на этаноле и РМ:

1 —  $N_{расч}$ ; 2 —  $N_{вых. расч}$

Снижается и скорость сажеобразования, поскольку уменьшается концентрация ацетилена в предпламенной зоне. К моменту открытия выпускного клапана (при  $\varphi = 126^\circ$  п.к.в.) массовое содержание сажи в цилиндре дизеля стабилизируется и становится равным  $N_{вых. расч}$ .

Предложенная математическая модель позволяет рассчитать концентрации сажи и основных компонентов газовой смеси в реак-

ционной зоне КС на протяжении всего процесса сгорания, а также содержание сажи в ОГ на различных скоростных и нагрузочных режимах работы дизеля. Вместе с тем данная модель позволяет получить ценную информацию о динамике протекания основных этапов образования и выгорания сажи в цилиндре при работе дизеля на этаноле и РМ.

Расчетное значение концентрации сажи в цилиндре дизеля при открытии выпускного клапана составляет  $C_{\text{вых. расч}} = 0,114 \text{ г/м}^3$ , что соответствует уровню дымности ОГ, равному 2,2 ед. по шкале Bosch, — это в 3,7 раза ниже, чем при работе двигателя на дизельном топливе.

Результаты расчетов дымности ОГ дизеля 2Ч 10,5/12,0 при работе на РМ и этаноле по приведенной математической модели удовлетворительно соответствуют полученным экспериментальным данным.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Матиевский Д.Д., Свистула А.Е. Влияние переменности состава топливовоздушной смеси в зоне горения на сажевыделение, параметры рабочего цикла и индикаторный КПД цикла дизеля. *Ползуновский вестник*, 2002, № 1, с. 10–16.
- [2] Матвеев С.Г., Орлов М.Ю., Чечет И.В., Семенов А.В. Взаимосвязь между выбросами сажи и бенз(а)пирена тепловыми двигателями на углеводородном топливе. *Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета*, 2009, № 3, с. 210–214.
- [3] Шаромов И.М., Зонов А.В., Чупраков А.И. Образование бенз(а)пирена и зародышей сажи. Улучшение эксплуатационных показателей двигателей внутреннего сгорания. *Материалы IV Междунар. науч.-практ. конф. «Наука — Технология — Ресурсосбережение». Сб. науч. трудов*. Киров, Вятская ГСХА, 2011, с. 154–159.
- [4] Денисова Е.С. Аккумуляция некоторыми сельскохозяйственными растениями техногенной пыли сажевых заводов. *Омский научный вестник*, 2014, № 2 (134), с. 196–199.
- [5] Торопов А.Е. Улучшение экологических показателей дизеля 4Ч 11,0/12,5 при работе на метаноле-топливной эмульсии путем снижения дымности отработавших газов. Дис. ... канд. техн. наук. Киров, 2010, 172 с.
- [6] Россохин А.В. Результаты исследований влияния применения этаноле-топливной эмульсии на показатели процесса сгорания и сажесодержания в цилиндре и отработавших газах дизеля 4Ч 11,0/12,5 в зависимости от нагрузки. *Молодой ученый*, 2015, № 15 (95), с. 171–174.
- [7] Ложкин В.Н. Исследование динамики и термических условий сажевыделения при сгорании распыленного топлива в цилиндре дизелей. Дис. ... канд. техн. наук. Ленинград, 1978, 228 с.
- [8] Лиханов В.А., Шаромов И.М. Снижение дымности отработавших газов дизеля 4Ч 11,0/12,5 путем применения этаноле-топливных эмульсий. Киров, Вятская ГСХА, 2012, 144 с.
- [9] Петриченко Р.М., Батулин С.А., Исаков Ю.Н., Пугачев Б.П. *Элементы системы автоматизированного проектирования ДВС. Алгоритмы прикладных программ*. Ленинград, Машиностроение, 1990, 328 с.

- [10] Россохин А.В. Особенности расчета сажевыделения в дизелях. *Материалы VI Междунар. науч.-практ. конф. «Наука — Технология — Ресурсосбережение»*. Сб. науч. трудов. Киров, Вятская ГСХА, 2013, с. 196–199.
- [11] Разлейцев Н.Ф. *Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях*. Харьков, Высшая школа, 1980, 169 с.
- [12] Батулин С.А. *Физические основы и математическое моделирование процессов сажевыделения и теплового излучения в дизелях*. Дис. ... д-ра техн. наук. Ленинград, 1982, 441 с.
- [13] Кулешов А.С. *Программа расчета и оптимизации двигателей внутреннего сгорания ДИЗЕЛЬ-РК. Описание математических моделей, решение оптимизационных задач*. Москва, Изд-во МГТУ Н.Э. им. Баумана, 2004, 123 с.

Статья поступила в редакцию 03.04.2017

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Лиханов В.А., Козлов А.Н., Арасланов М.И. Математическое моделирование образования и выгорания сажи в цилиндре дизеля 2Ч 10,5/12,0 при работе на рапсовом масле и этаноле. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2017, вып. 8.

<http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2017-8-1649>

**Лиханов Виталий Анатольевич** — д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедрой тепловых двигателей, автомобилей и тракторов Вятской государственной сельскохозяйственной академии (Вятской ГСХА). Область научных интересов: улучшение эксплуатационных показателей дизелей путем применения альтернативных видов топлива, в первую очередь природного газа и спиртов; теоретические и экспериментальные исследования рабочих процессов, протекающих в цилиндрах автотракторных дизелей при работе на альтернативных видах топлива, и образования основных токсичных компонентов; разработка систем дозирования и регулирования; создание новых смесевых топлив на основе спиртов. Автор более 600 научных работ. e-mail: lihanov.va@mail.ru

**Козлов Андрей Николаевич** — ассистент кафедры тепловых двигателей автомобилей и тракторов Вятской ГСХА. Область научных интересов: улучшение показателей работы дизеля путем применения альтернативных топлив. e-mail: dnka59@mail.ru

**Арасланов Марат Ильдарович** — ассистент кафедры тепловых двигателей автомобилей и тракторов Вятской ГСХА. Область научных интересов: улучшение показателей работы дизеля путем применения альтернативных топлив. e-mail: araslanov.89@mail.ru



## Mathematical modeling of soot generation and burnout in a 2Ch 10,5/12,0 diesel cylinder operating on rapeseed oil and ethanol

© V.A. Likhanov, A.N. Kozlov, M.I. Araslanov

Vyatka State Agricultural Academy, Kirov, 610017, Russia

*We consider one of the promising methods of decreasing diesel exhaust gas opacity, namely using alternative fuels, employing which makes it possible to replace petroleum fuel. We present a mathematical model for soot generation in a diesel cylinder during rapeseed oil and ethanol combustion. The model is based on the chemical kinetics for pyrolysis of fuel hydrocarbons and a high-temperature acetylene mechanism. We suggest a soot generation chemism for diesels operating on rapeseed oil and ethanol, based on contemporary understanding of the soot particle precursor formation mechanism in diesel combustion chambers. Calculation results for the exhaust gas opacity level of the 2Ch 10,5/12,0 diesel using rapeseed oil and ethanol show that while operating on alternative fuels under nominal conditions, soot concentration in exhaust gases decreases by 3.7 times as compared to using diesel fuel. The results of theoretical computations obtained are in satisfactory agreement with the experimental data.*

**Keywords:** diesel, rapeseed oil, ethanol, combustion chamber, pyrolysis, dual fuel supply system, soot, exhaust gas opacity

### REFERENCES

- [1] Matievskiy D.D., Svistula A.E. *Polzunovskiy vestnik — Polzunovskiy vestnik (Herald of I.I. Polzunov Altai State Technical University)*, 2002, no. 1, pp. 10–16.
- [2] Matveev S.G., Orlov M.Yu., Chechet I.V., Semenov A.V. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta — Vestnik (Herald) of the Samara State Aerospace University. Aerospace and Mechanical Engineering*, 2009, no. 3, pp. 210–214.
- [3] Sharomov I.M., Zonov A.V., Chuprakov A.I. *Образование бенз(а)пирена и зародышей сажи. Улучшение эксплуатационных показателей двигателей внутреннего сгорания [Benzo[a]pyrene and soot precursor formation. Improving performance characteristics of internal combustion engines]. Materialy IV Mezhdunar. nauch.-prakt. konf. Nauka — Tekhnologiya — Resursoberezhenie. Sb. nauch. trudov [Proc. of the 4th International scientific and applied conference, Science — Technology — Resource Conservation]. Kirov, Vyatka State Agricultural Academy Publ., 2011, pp. 154–159.*
- [4] Denisova E.S. *Omskiy nauchnyy vestnik — Omsk Scientific Bulletin*, 2014, no. 2 (134), pp. 196–199.
- [5] Toropov A.E. *Улучшение экологических показателей дизеля 4Ch 11,0/12,5 при работе на метаноле-топливной эмульсии путем снижения дымности отработавших газов. Diss. .... kand. tekhn. nauk [Improving environmental performance of the 4ChN 11.0/12.5 diesel running on methanol/fuel emulsion by means of decreasing the exhaust gas opacity. Cand. eng. sc. diss.]. Kirov, 2010, 172 p.*
- [6] Rossokhin A.V. *Molodoy uchenyy — Young Scientist*, 2015, no. 15 (95), pp. 171–174.

- [7] Lozhkin V.N. *Issledovanie dinamiki i termicheskikh usloviy sazhevydeleniya pri sgoranii raspylenogo topliva v tsilindre dizeley*. Diss. ... kand. tekhn. nauk [Investigating the dynamics and thermal conditions of soot generation during combustion of fuel sprayed in diesel cylinders. Cand. eng. sc. diss.]. Leningrad, 1978, 228 p.
- [8] Likhanov V.A., Sharomov I.M. *Snizhenie dymnosti otrabotavshikh gazov traktornogo dizelya 4Ch 11,0/12,5 putem primeneniya etanolo-toplivnykh emulsiy* [Reducing exhaust gas opacity of the 4ChN 11.0/12.5 tractor diesel by means of using ethanol/fuel emulsion]. Kirov, Vyatka State Agricultural Academy Publ., 2012, 144 p.
- [9] Petrichenko R.M., Baturin S.A., Isakov Yu.N., Pugachev B.P. *Elementy sistemy avtomatizirovannogo proektirovaniya DVS. Algoritmy prikladnykh programm* [Elements of computer aided design systems for internal combustion engines. Software application algorithms]. Leningrad, Mashinostroenie Publ., 1990, 328 p.
- [10] Rossokhin A.V. *Osobennosti rascheta sazhevydeleniya v dizelyakh* [Specifics of soot formation computations in diesels]. *Materialy VI Mezhdunar. nauch.-prakt. konf. Nauka — Tekhnologiya — Resursoberezhenie. Sb. nauch. trudov* [Proc. of 6th International scientific and applied conference, Science — Technology — Resource Conservation]. Kirov, Vyatka State Agricultural Academy Publ., 2013, pp. 196–199.
- [11] Razleytsev N.F. *Modelirovanie i optimizatsiya protsessa sgoraniya v dizelyakh* [Modeling and optimising the combustion process in diesels]. Kharkiv, Vysshaya Shkola Publ., 1980, 169 p.
- [12] Baturin S.A. *Fizicheskie osnovy i matematicheskoe modelirovanie protsessov sazhevydeleniya i teplovogo izlucheniya v dizelyakh*. Diss. ... dokt. tekhn. nauk [Physical foundations and mathematical modeling of soot generation and heat emission processes in diesels. Dr. eng. sc. diss.]. Leningrad, 1982, 441 p.
- [13] Kuleshov A.S. *Programma rascheta i optimizatsii dvigateley vnutrennego sgoraniya DIZEL-RK. Opisaniye matematicheskikh modeley, resheniye optimizatsionnykh zadach* [DIZEL-RK software for computing and optimising internal combustion engine parameters. Description of mathematical models, solutions to optimisation problems]. Moscow, BMSTU Publ., 2004, 123 p.

**Likhanov V.A.**, Dr. Sc. (Eng.), Professor, Head of Department of Heat Engines, Automobiles and Tractors, Vyatka State Agricultural Academy. Specialises in improving performance characteristics of diesel engines by using alternative fuels, primarily natural gas and alcohols; theoretical and experimental studies of work cycles of automotive diesel engine cylinders running on alternative fuels; theoretical and experimental studies of primary toxic component formation; developing metering and regulating systems; formulating new alcohol-based mixed fuels. Author of over 600 scientific publications.  
e-mail: lihanov.va@mail.ru

**Kozlov A.N.**, Assist. Lecturer, Department of Heat Engines, Automobiles and Tractors, Vyatka State Agricultural Academy. Specialises in improving performance characteristics of diesel engines by using alternative fuels. e-mail: dnka59@mail.ru

**Araslanov M.I.**, Assist. Lecturer, Department of Heat Engines, Automobiles and Tractors, Vyatka State Agricultural Academy. Specialises in improving performance characteristics of diesel engines by using alternative fuels. e-mail: araslanov.89@mail.ru