

І.Г. Грабар, д.т.н., проф.
А.М. Вінічук, студ.

Житомирський державний технологічний університет

МОДЕЛЮВАННЯ КІНЕТИКИ НАКОПИЧЕННЯ NO_x В КАМЕРІ ЗГОРЯННЯ ДИЗЕЛЬНОГО ДВИГУНА

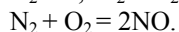
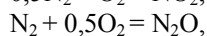
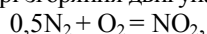
Моделювання кінетики накопичення оксидів азоту в камері згоряння дизеля – важливий чинник оптимізації його експлуатації – як на стадії проектування, так і у виборі найбільш оптимального складу пального за критеріями екологічності, економічності та довговічності. Числове моделювання процесів накопичення оксидів азоту виконано за допомогою програмного комплексу МДТУ ім. М.Е. Баумана, розробленого А.С. Кулешовим. На основі результатів чисельного моделювання побудована узагальнена математична модель процесу, в основі якої використано відому модель Фермі-Дірака, модернізовану проф. І.Г. Грабаром.

Постановка проблеми. ДВЗ знайшли широке використання в перетворенні енергії рідких та газоподібних вуглеводнів для виконання роботи у технологічних, енергетичних та транспортних машинах. Підвищення потужності, зменшення витрат пального та токсичних викидів вимагає розробки математичних моделей робочих процесів, що протікають в ДВЗ. Автомобільні ДВЗ є одними з найбільших забруднювачів повітря атмосфери токсичними речовинами в містах. Їх доля в загальному забрудненні атмосфери в містах США складає майже 61 %, – 33,5 %, Франції – 32 % [4]. Робочими тілами ДВЗ є пальне та окислювач, в якості якого використовується атмосферне повітря. В більшості випадків пальне ДВЗ – суміш складних вуглеводнів (вуглецю, водню, невеликих доз кисню, сірки та ін.) В ході протікання робочих процесів в камері згоряння з паливної суміші утворюється значна кількість газоподібних та твердих (сажі) компонентів, що викидаються в навколишнє середовище. Характерно, що у камері згоряння виникають умови, коли реакційна здатність речовин суттєво змінюється. Наприклад, азот, що міститься у значних кількостях в атмосферному повітрі і при кімнатних температурах є інертним газом, при високих температурах – а в камері згоряння температура може досягати до 2800 К – вступає у реакцію з киснем та іншими компонентами робочої суміші. У результаті в атмосферу викидається велика кількість дуже токсичних оксидів азоту [16]. Необхідно пам'ятати, що оксиди негативно впливають на слизисту оболонку носа та очей, нервову, серцево-судинну системи, печінку та інші органи. Виходячи з того, що в атмосферному повітрі присутні пари, існує велика ймовірність утворення оксидів азоту та парів води азотистої та азотної кислот, що руйнують легеневу тканину людини, негативно впливають на флору та фауну, а також на екосистему в цілому. Відомо, що стратегія математичного моделювання процесу в більшості випадків визначає не тільки успішність проекту, а й терміни виконання та матеріальні витрати на його [1]. Моделювання робочих процесів ДВЗ, створення математичних моделей цих процесів – багатофункціональне завдання техніки, економіки та екології. Збільшення можливостей сучасних програмних та апаратних засобів обчислювальної техніки, всебічне застосування інформаційно-комп'ютерних технологій та постійно зростаючі еколого-економічні вимоги спонукають до розвитку математичного моделювання робочих процесів як ДВЗ, що знаходяться в експлуатації (оптимізація експлуатації за критеріями економічності, екологічності, та енергозбереження), так і тих, що проектуються (за тими ж критеріями плюс можливість впливати на геометрію та металоємність конструкції). Математичні моделі, максимально наближені до реальних робочих процесів у доступній області режимів роботи, дозволяють заглянути за горизонт, спрогнозувати шляхи розвитку ДВЗ завтрашнього дня, з недоступними сьогодні навіть в лабораторних умовах режимами роботи, перш за все – за критеріями температурної стійкості та механічної міцності [1].

В даній роботі ставилося завдання на основі відомого програмного комплексу ДИЗЕЛЬ-РК, розробленого А.С. Кулешовим (МДТУ ім. М.Е. Баумана), отримати кількісні залежності накопичення оксидів азоту в камері згоряння дизельного двигуна при різних режимах роботи та описати їх з єдиних позицій моделі Фермі-Дірака-Грабара [10–11].

Детальний опис програмного комплексу ДИЗЕЛЬ-2/4т наведено в INTERNET, на сервері МГТУ ім. М.Е. Баумана, сайті кафедри “Поршневі двигуни” <http://www.bmstu.ru/facult/em/em2/p01rus.htm>.

Аналіз останніх досліджень і публікай. Проблеми кількісного дослідження шкідливих викидів ДВЗ та зменшенню їх впливу на довкілля присвячена значна кількість робіт [1–16]. Кінетику концентрації оксидів азоту в камері згоряння двигуна в першу чергу формують такі реакції [1]:



В даній роботі числовий експеримент виконувався на програмному комплексі “ДИЗЕЛЬ-РК”, який належить до класу термодинамічних. Параметри газу в таких системах визначаються покроковим розв'язком системи різницевих рівнянь, побудованих на принципах збереження маси та енергії, а також

рівнянь стану відкритих термодинамічних систем. Теплообмін в циліндрі двигуна розраховується для різних поверхонь, температури яких визначаються розв'язком задачі теплопровідності. Високий рівень математичної культури, використаний при створенні “ДИЗЕЛЬ-РК”, відображення глибокої суті фізичних процесів, що протікають в ДВЗ, дозволяють отримати високу точність результатів числового експерименту, його високе наближення до натурального експерименту [3, 4].

Комплекс “ДИЗЕЛЬ-РК” має багато спільного із загальновідомими програмами BOOST (AVL), WAVE (Ricardo), GT-Power (Gamma Technologies). В той же час, наближення про те, що всі циліндри працюють ідентично, дозволяє суттєво економити час розрахунків [3, 4]. При цьому великою заслугою розробників є відкритий віддалений доступ до програмного комплексу через INTERNET. Розрахунок сумішоутворення та згоряння виконується за РК-моделлю М.Н.Розлейцева [5], вдосконаленої А.С. Кулешовим [6–8]. Емісія оксидів азоту розраховується за схемою акад. Я.Б. Зельдовича.

При температур використано зонну модель проф. В.О. Звонова [9]. При цьому, як показано в [3, 4], за правильного налаштування програмного комплексу, розходження даних числового та натурального експерименту не перевищує 1 %.

Крім суто наукових досліджень, програмний комплекс “ДИЗЕЛЬ-РК” має величезне освітнясько-навчальне значення, дозволяє виконувати необмежений обсяг лабораторних робіт з моделювання процесів робочих ДВЗ, особливо в сьогодишніх складних економічних умовах, коли натурний експеримент у більшості ВНЗ недосяжний через просту причину – відсутність коштів.

Методологія числового експерименту. Температура продуктів згоряння в зоні горіння паливної суміші визначалася за співвідношенням [4]:

$$T_{nc} = \frac{\sqrt{B^2 - 4A \left\{ \frac{1-r_{nc}}{r_{nc}} [H_{cm}(T_{cm}) - H_{cm}(T_{cm})] - AT_{cp}^2 - BT_{cp} \right\}} - B}{2A},$$

де А і В – коефіцієнти рівняння для ентальпії продуктів згоряння (кДж/моль) вигляду:

$$H_{nc}(T_{nc}) = AT_{nc}^2 + BT_{nc} + C,$$

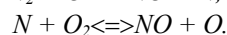
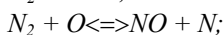
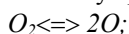
коефіцієнти А, В, С визначаються із спеціальних розрахунків. Наприклад, для дизельного пального: А = 0,000966; В = 35,45 + 0,47283 Р, r_{nc} – доля продуктів згоряння в заряді циліндра; Р – тиск у циліндрі в кінці розрахункової ділянки; T_{cm} – температура свіжої суміші в кінці розрахункової ділянки; T_{cp} – середня температура заряду в кінці розрахункової ділянки, К; H_{cm} – ентальпія свіжої суміші, кДж/кмоль:

$$H_{nc}(T_{nc}) = \left[a_{cm} + 8,314 + \frac{b_{cm} T_{cm}}{2} + \frac{c_{cm} T_{cm}^2}{3} \right] T_{cm},$$

де a_{cm} , b_{cm} , c_{cm} – коефіцієнти рівняння істинної молярної ізохорної теплоємності заряду, що стискається.

Оскільки умови процесу згоряння палив у двигунах внутрішнього згоряння супроводжується утворенням “термічних” NO, то в запропонованій моделі всі розрахунки проводяться відповідно до термічного механізму.

Окислення азоту проходить відповідно до ланцюгового механізму, основні реакції якого такі:



Визначальною є реакція (3), швидкість якої залежить від атомарного кисню.

Розрахунок утворення NO за рівнянням ланцюгового механізму проводиться для зони згоряння, потім визначається середня концентрація NO в камері згоряння. Об'ємна частка оксиду азоту в продуктах згоряння r_{NO} , утворених у зоні на даному кроці розрахунку визначається згідно з таким виразом:

$$\frac{dr_{NO}}{d\phi} = \frac{P \cdot 2,333 \cdot 10^7 \cdot e^{\frac{38020}{T_{sc}}} \cdot r_{N_2eq} \cdot r_{Oeq} \cdot \left[1 - \left(\frac{r_{NO}}{r_{O_2eq}} \right)^2 \right]}{RT_{nc} \cdot \left(1 + \frac{2346}{T_{nc}} \cdot e^{\frac{3365}{T_{nc}}} \cdot \frac{r_{NO}}{r_{O_2eq}} \right)} \cdot \frac{1}{\omega},$$

де Р – тиск в циліндрі, Па; T_{nc} – температура в зоні продуктів згоряння, К; R – універсальна газова стала, Дж/(моль К); ω – кутова швидкість колінчастого вала, рад/с; r_{NOeq} , r_{N_2eq} , r_{Oeq} , r_{O_2eq} – рівноважні концентрації оксиду азоту, молекулярного азоту, атомарного та молекулярного кисню, відповідно.

Рівноважні концентрації компонентів розраховуються на кожному кроці розрахунку. Розрахунок ведеться для 17 компонентів відпрацьованих газів: O_2 , O_3 , H , H_2 , OH , H_2O , C , CO , CO_2 , CH_4 , N , N_2 , NO , NO_2 , NH_3 , HNO_3 , NCH . Для цього вирішується система з 14 рівнянь рівноваги, трьох рівнянь матеріального балансу та рівняння Дальтона.

Частку оксиду азоту в цілому по камері згоряння (циліндру) знаходимо з рівняння:

$$r_{NO\Omega} = r_{NO} r_{nc}.$$

Частка оксиду азоту в «сухих» продуктах згоряння визначаємо так:

$$r_{NO_{сух}} = \frac{r_{NO}}{1 - r_{H_2O}},$$

де r_{H_2O} – об'ємна частка водяних парів у камері згоряння.

“Суха” частка оксиду азоту в камері згоряння вираховується так:

$$r_{NO\Omega}^{сух} = \frac{r_{NO}}{1 - r_{H_2O}}.$$

Питомий викид оксиду азоту NO , г/кВт·год знаходимо з рівняння:

$$e_{NO} = \frac{30 \cdot r_{NO} \cdot M_{ПС}}{L_{\Omega} \eta_M} \cdot 3600000,$$

де $M_{ПС}$ – кількість продуктів згоряння в кінці процесу згоряння, кмоль; L_{Ω} – робота, виконана за весь робочий цикл, кДж; η_M – механічний ККД двигуна.

Основні результати. Як зазначалося вище, числовий експеримент в даній роботі виконувався з використанням програмного комплексу “ДИЗЕЛЬ-РК”. На рисунку 1 наведено 12 діаграм кінетики концентрації оксидів азоту в камері згоряння, як функції кута повороту колінчастого вала та частоти його обертання.

Інші параметри числового моделювання зведені в таблицю 1.

Таблиця 1

Деякі параметри числового моделювання

Тип двигуна	ЯМЗ-236
Форма камери згоряння:	
Зовнішній діаметр камери згоряння, мм	53,2
Глибина камери згоряння в центрі, мм	26,7
Радіус округлення в центрі камери згоряння, мм	23,6
Глибина камери згоряння на периферії, мм	10,6
Кут нахилу твірної до площини поршня, град.	120
Надпоршневий зазор, мм	2
Кількість форсунок	1
Кількість струменів	5
Діаметр соплових отворів, мм	0,248

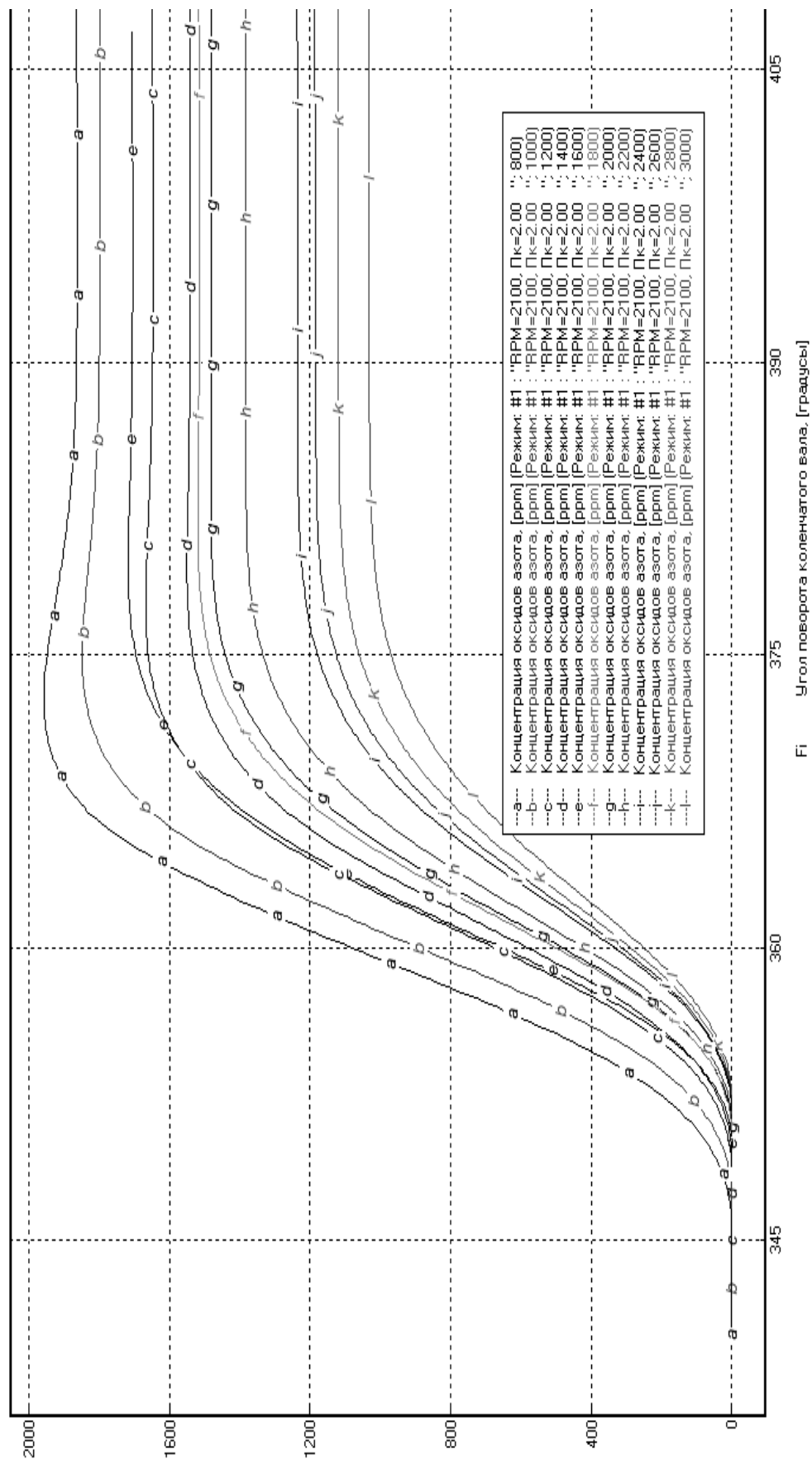


Рис. 1. Залежності концентрації оксидів азоту в камері згоряння $Q(\varphi)$ від кута повороту колінчастого вала при різних частотах його обертання

На рисунку 2 наведено кореляційну залежність $Q_{\max}$ від концентрації NO_x (рис. 1) для різних частот обертання колінчастого вала.

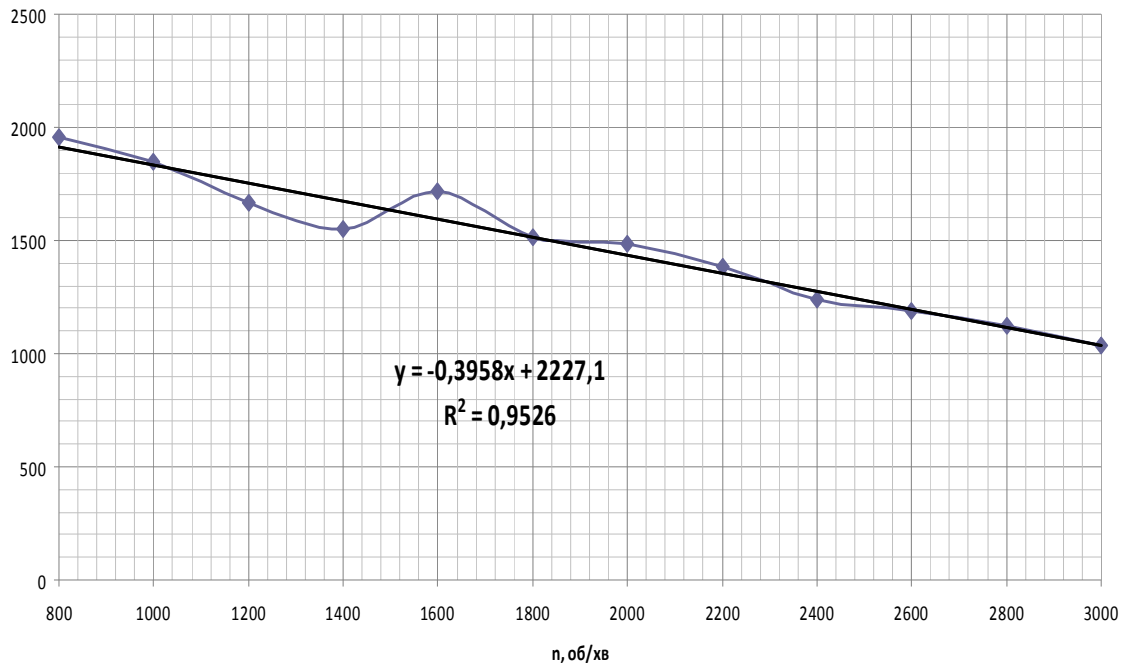


Рис. 2. Зміна $Q_{\max}$ залежно від концентрації NO_x в камері згоряння дизельного двигуна частоти обертання колінчастого вала. Дизельне паливо

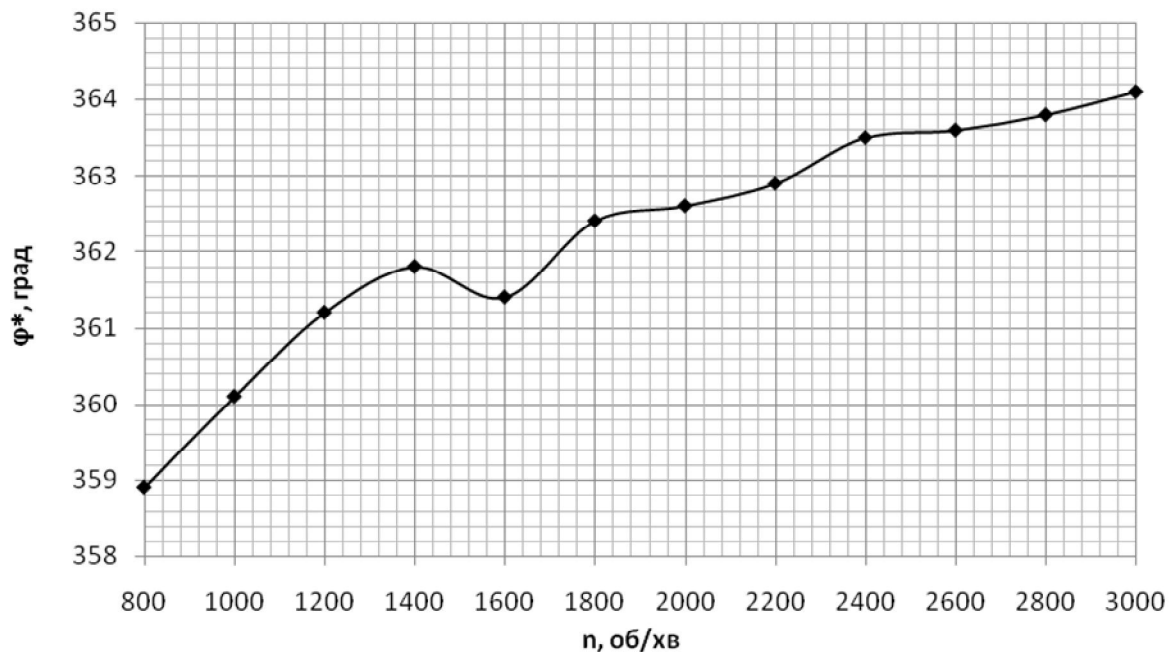
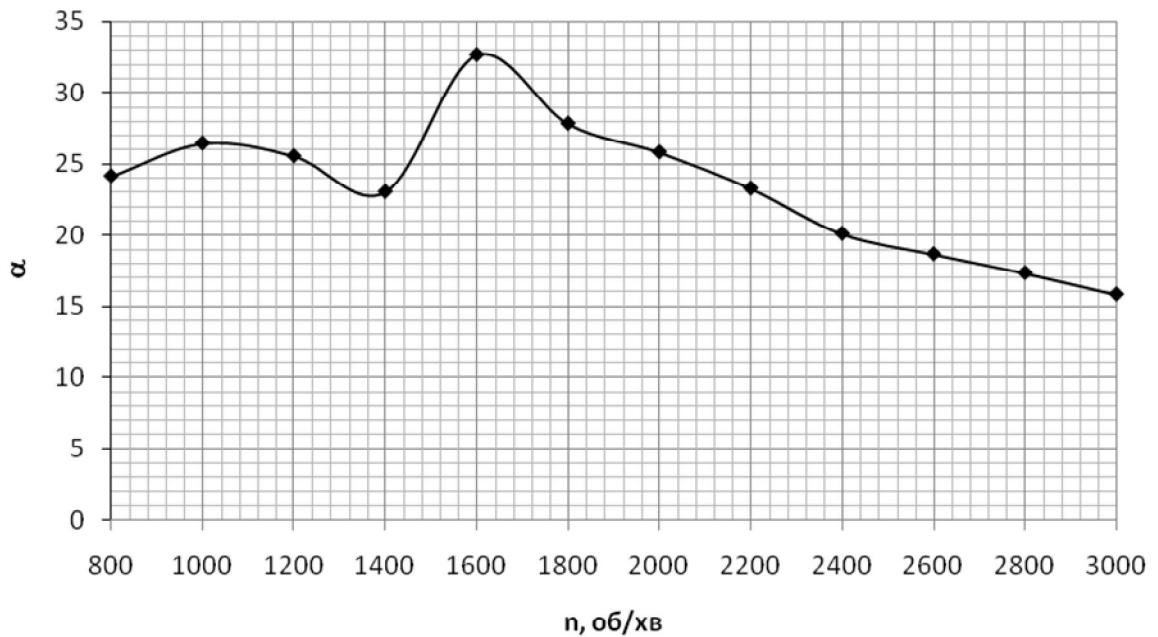


Рис. 3. Зміна ϕ^* від частот обертання колінчастого вала

Узагальнення результатів числового експерименту. Концентрація оксидів азоту в камері згоряння (рис.1) від кута повороту колінчастого вала $Q(\phi) \in [Q_{\min}; Q_{\max}]$ добре апроксимується функцією проф. І.Г. Грабара, отриманою з відомої функції сучасної фізики – розподілу Фермі-Дірака.

Рис. 4. Зміна коефіцієнта α від частоти обертання колінчастого вала

Після модернізації проф. І.Г. Грабара дана кінетична залежність має вигляд [4, 5]

$$Q(\varphi) = Q_{\min} + \frac{Q_{\max} - Q_{\min}}{1 + e^{\alpha(\varphi^* - \varphi)}}, \quad (1)$$

де $Q_{\min}$ та $Q_{\max}$ – мінімальна та максимальна концентрація оксидів азоту в камері згоряння, φ – кут повороту колінчастого вала; φ^*, α – експериментальні параметри, причому α відповідає за швидкість накопичення оксидів азоту; φ^* – кут повороту колінчастого вала, при якому:

$$Q^* = \frac{Q_{\max} - Q_{\min}}{2} + Q_{\min} = \frac{Q_{\min} + Q_{\max}}{2}, \quad (2)$$

коли $Q_{\max} \gg Q_{\min} \approx 0$, то рівняння 1 спрощується до вигляду:

$$Q(\varphi) = \frac{Q_{\max}}{1 + e^{\alpha(\varphi^* - \varphi)}}. \quad (3)$$

Спрощене рівняння (3) дає можливість суттєво полегшити апроксимацію експериментальних даних. Наприклад, для масиву експериментальних даних.

Таблиця 2

τ_i	τ_1	τ_2	τ_3	...	τ_n
Q_i	Q_1	Q_2	Q_3	...	Q_n

При цьому для подальшої апроксимації для $\tau \rightarrow \infty$ $Q_{\max} = Q_n + \Delta Q$, тоді з рівняння (3) маємо:

$$e^{\alpha(\varphi^* - \varphi)} = \frac{Q_{\max}}{Q(\varphi)} - 1. \quad (4)$$

або

$$b - \alpha\tau = \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q_{\min}} - 1\right) = z. \quad (5)$$

Таблиця 3

τ_1	τ_2	τ_3	...	τ_n
$z_1 = \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q(1)} - 1\right)$	$z_2 = \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q(2)} - 1\right)$	$z_3 = \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q(3)} - 1\right)$	...	$z_n = \ln\left(\frac{Q_{\max}}{Q(n)} - 1\right)$

На рисунку 4 наведені значення параметрів b та α для 12 режимів роботи двигуна. При цьому варто вказати, що $b = \alpha \cdot \tau^*$,

$$\tau^* = \frac{b}{\alpha}. \quad (6)$$

На графіках рисунків 1–3 наведені взаємозв'язки між параметрами b та α для різних частот обертання колінчастого вала. Високі значення коефіцієнтів кореляції для цих залежностей підтверджують високу “фізичність” моделі (1) та (3) для моделювання кінетики $Q(\varphi)$. З іншого боку, лінійні взаємозв'язки між параметрами b та α дозволяють стверджувати, що нам вдалося в двох-параметричному просторі b та α виділити автомодельний підпростір, двохмірний простір зводиться до одновимірного скалярного, що дозволяє співставити кожний з дванадцяти режимів роботи двигуна деякій скалярній мірі (числу). Цей результат дозволяє звести складну багатовимірну (n -мірну) векторну задачу до однієї скалярної міри (в даному випадку для порівняння кінетики накопичення оксидів азоту в камері згоряння). Це дозволяє порівняти вплив режимів роботи на екологічні показники двигуна через зрозумілу скалярну міру.

Як видно з рисунка 2,

$$\begin{aligned} Q_{\max} &= 2227,1 - 0,396 \cdot n \\ R_{1/1}^2 &= 0,953 \end{aligned} \quad (7)$$

За даними рисунків 3, 4 побудовано залежності $\varphi^*(n)$, $\alpha(n)$ рівняння (3):

– для діапазону $n \in [800 \dots 1400]$ об./хв.:

$$Q = \frac{2227,1 - 0,396 \cdot n}{1 + e^{(-0,00003 \cdot n^2 - 0,0646n - 8,0744)[355,11 + 0,0049 \cdot n - \varphi]}};$$

для діапазону $n \in [1500 \dots 3000]$ об./хв.:

$$Q = \frac{2227,1 - 0,396 \cdot n}{1 + e^{(49,416 - 0,0116 \cdot n)[359 + 0,0018 \cdot n - \varphi]}}.$$

Висновки:

1. Для чисельного моделювання кінетики накопичення оксидів азоту в камері згоряння дизельного двигуна при різних режимах роботи використано програмний комплекс О.С. Кулешова (МДТУ ім. М.Е. Баумана).
2. Кінетика накопичення оксидів азоту в камері згоряння добре описується кінетичними залежностями (1)–(3), модернізованими проф. І.Г. Грабаром з відомого розподілу Фермі-Дірка (модель ФДГ).
3. Запропонована методологія ефективної апроксимації експериментальних даних рівнянням ФДГ, що після ряду нескладних перетворень майже зводиться до класичного методу найменших квадратів.
4. Експериментальні дані $H(t)$ для різних режимів роботи ДВЗ виявили тісний зв'язок між параметрами лінійної кореляції b та α .
5. Виявлено автомодельний підпростір, що дозволяє багатовимірний простір кінетики накопичення оксидів азоту в камері згоряння звести до скалярної міри.

Список використаної літератури:

1. Болдырев О.И. Математическая модель расчёта термодинамических параметров гомогенной смеси продуктов сгорания углеводородного топлива в термодинамическом цикле газотурбинных двигателей / О.И. Болдырев // Современные проблемы науки и образования. – 2011. – № 6; URL [Электронный ресурс]. – Режим доступа : www.science-education.ru/100-5181.
2. Термодинамические свойства индивидуальных веществ : справочник : В 4 т. / Под ред. В.П. Глушко. – М. : Наука, 1979–1982.
3. Расчет параметров рабочего процесса двигателя мемз 2471 на номинальном режиме с помощью программного комплекса дизель-рк / С.В. Мурай, Л.П. Данилевич, А.И. Квашиневский, О.И. Олешенко. — Праці ТДАТУ. — 2009. — Вип. 9, Т. 2. — С. 96–104.

4. Мурай С.В. Математическое моделирование внешней скоростной характеристики и оценка выбросов оксидов азота двигателя МеМЗ-2471 с помощью программного комплекса ДИЗЕЛЬ-РК / С.В. Мурай // Праці ТДАТУ. – Вип. 9, Т. 5. – С. 99–107.
5. Разлейцев Н.Ф. Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях / Н.Ф. Разлейцев. – Харьков : Вища школа, 1980. – 169 с.
6. Кулешов А.С. Многозонная модель для расчета сгорания в дизеле. Расчет распределения топлива в струе / А.С. Кулешов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. – М. : Машиностроение, 2007. – С. 18–31.
7. Кулешов А.С. Многозонная модель для расчета сгорания в дизеле. Расчет скорости тепловыделения при многократном впрыске / А.С. Кулешов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. – М. : Машиностроение, 2007. – С. 32–45.
8. Kuleshov A.S. Model for predicting air-fuel mixing, combustion and emissions in DI diesel engines over whole operating range / A.S. Kuleshov // SAE Paper. – 2005-01-2119.
9. Звонов В.А. Токсичность двигателей внутреннего сгорания / В.А. Звонов. – М. : Машиностроение, 1981. – 160 с.
10. Грабар І.Г. Моделювання кінетики росту рослин томатів в часі / І.Г. Грабар, Л.Д. Романчук, О.В. Стежко // Праці ПДАТУ. – К.-Подільський, 2012.
11. Перколяційно-фрактальні матеріали: моделювання, властивості, технології, застосування / І.Г. Грабар, О.А. Гутніченко, Ю.О. Кубрак, О.І. Грабар. – Житомир : ЖДТУ, 2007. – 354 с.
12. Левтеров А.М. Образование монооксида азота и исследование влияния на его эмиссию регулируемых параметров двигателя и вида используемого топлива / А.М. Левтеров, Л.И. Левтерова, Н.Ю. Гладкова // Двигатели внутреннего сгорания. – 2010. – № 2. – С. 113–117.
13. Марков В.А. Токсичность отработавших газов дизелей и возможности ее снижения / В.А. Марков // Грузовик. – 2009. – № 8. – С. 27–41.
14. Дорохов А.Ф. Метод расчета токсичных составляющих в отработавших газах дизельных двигателей / А.Ф. Дорохов, Е.В. Климова // Вестник машиностроения. – 2009. – № 12. – С. 79–82.
15. Физико-химические и токсикологические характеристики частиц, выбрасываемых дизельными двигателями в окружающую среду : обзор / В.А. Звонов и др. // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2005. – № 2. – С. 37–47.
16. Шароглазов Б.А. Двигатели внутреннего сгорания: теория, моделирование и расчёт процессов / Б.А. Шароглазов, М.Ф. Фарафонов, В.В. Климентьев. – Челябинск, 2004. – 170 с.

ГРАБАР Іван Григорович – доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри процесів, машин і обладнання Житомирського національного агроекологічного університету.

Наукові інтереси:

- моделювання нелінійних процесів;
- нерівноважна фізика, синергетика;
- мікрорезонансні явища та моделі.

ВІНІЧУК Антон Михайлович – студент Житомирського державного політехнічного університету.

Наукові інтереси:

- комп'ютеризовані технології моделювання складних процесів;
- екологія автомобільного транспорту.

Стаття надійшла до редакції 14.05.2013