

УДК 536.46:621.43

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ВОДОРОДА В ДИЗЕЛЕ

В. А. Бунев¹, А. А. Коржавин¹, А. П. Сеначин², П. К. Сеначин^{3,4}

¹Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, 630090 Новосибирск

²Алтайский государственный университет, 656038 Барнаул

³Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, 656038 Барнаул
senachinpk@mail.ru

⁴Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск

На основе макрокинетики предложена математическая модель для численного моделирования периода самовоспламенения топлива в локальном объеме водородного дизеля с аппаратурой высокого давления впрыска топлива. На основе выбранного детального кинетического механизма окисления водорода с помощью специального пакета программ проведено моделирование процесса самовоспламенения водорода в гомогенных химических реакторах для условий работы реального водородного дизеля в момент начала впрыска газообразного водорода. Результаты этих расчетов для реакторов постоянного объема и постоянного давления были использованы для получения уравнения макрокинетики окисления водорода при высоких давлениях. На основе этого уравнения численными методами рассмотрены различные варианты работы водородного дизеля с подогревом воздуха и водорода. Указаны пути снижения периода индукции и повышения надежности работы двигателя.

Ключевые слова: водородный дизель, период индукции, самовоспламенение, математическая модель, численное моделирование.

DOI 10.15372/FGV20220409

ВВЕДЕНИЕ

Водородный дизель серийно пока не выпускается, но интерес исследователей к нему непрерывно растет [1]. Важной характеристикой рабочего процесса любого дизеля является задержка воспламенения топлива (период индукции), знание которой необходимо еще на стадии проектирования. Задержку воспламенения измеряют экспериментально или рассчитывают по эмпирическим формулам, обычно близким по виду к формуле Тодеса для периода индукции адиабатического теплового взрыва [2, 3]. Отметим, что существующие в настоящее время эмпирические формулы для углеводородных смесей отличаются недостаточной точностью и имеют ограниченное применение, а для водородного дизеля вообще отсутствуют.

В предположении гомогенного рабочего тела задача о задержке воспламенения в дизеле, основанная на результатах работы [4], как задача динамического теплового взрыва, по видимому, впервые теоретически решена в ра-

ботах [5–7]. Для синусного механизма получено условие самовоспламенения по критическому давлению $P^* = p^*/p_1$ в системе в области $P^* < P_{\max}$, т. е. до верхней мертвой точки:

$$\left[\frac{Q}{c_p T_1} k_0 \left(\frac{p_1}{RT_1} \right)^{s-1} (P^*)^{(s-1)/\gamma-1} \right] /$$

$$/ \left\{ 2\pi n_0 [1 + \alpha(1/a_f^\circ - 1)]^s \times \right.$$

$$\times \sqrt{\left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon_1} - (P^*)^{-1/\gamma} \right] \left[(P^*)^{-1/\gamma} - \frac{1}{\varepsilon_1} \right]} \times$$

$$\times \exp \left[\frac{E}{RT_1} (P^*)^{1/\gamma-1} \right] = \frac{1}{e}, \quad (1)$$

$$\tau_i = \frac{\Delta\varphi^*}{2\pi n_0} = \frac{\varphi^* - \varphi_1}{2\pi n_0} =$$

$$= \frac{1}{2\pi n_0} \left(\arccos \frac{\varepsilon + 1 - 2\varepsilon_1(P^*)^{-1/\gamma}}{\varepsilon - 1} - \varphi_1 \right),$$

$$P_{\max} = \frac{p_{\max}}{p_1} = \varepsilon_1^\gamma.$$

Здесь T — температура; R — газовая постоянная; τ_i — период индукции; e — основание натуральных логарифмов; $\varepsilon = 1 + 2rF_p/V_c$ — геометрическая степень сжатия; ε_1 — степень сжатия при угле поворота коленчатого вала $\varphi = \varphi_1$; V_c — объем камеры сгорания; $F_p = \pi D^2/4$ — площадь поршня; r — радиус кривошипа; n_0 — частота вращения коленчатого вала; α — коэффициент избытка воздуха; a_f^o — стехиометрическая концентрация топлива в гомогенной смеси с воздухом; k_0 , s — коэффициент константы скорости и суммарный порядок химической реакции при самовоспламенении; $\gamma = C_p/C_V$ — отношение молярной теплоемкости при постоянном давлении к массовой теплоемкости при постоянном объеме; Q — молярная теплота сгорания топлива. Индекс 1 относится к моменту начала впрыска топлива, индекс * — к критическому давлению (в момент самовоспламенения).

Несмотря на простоту математической модели [5, 6], аналитическое решение задачи о самовоспламенении смеси от сжатия (1) правильно отражает физико-химические процессы при самовоспламенении топлива в дизеле и даже может быть рекомендовано к практическому использованию. Отметим, что вопросами задержки воспламенения топлива в дизеле занимались и занимаются многие отечественные и зарубежные ученые [8–12].

Целью работы является определение с помощью глобальной кинетики области параметров рабочего тела двигателя (начальное давление, начальные температуры воздуха и водорода) и рабочего процесса (степень сжатия, частота вращения вала, угол начала подачи топлива, наличие наддува), которые обеспечивают удовлетворительный период индукции в рабочем цикле двигателя. Для этого необходимо определить параметры уравнения глобальной кинетики k_0 , s , E , удовлетворительно описывающие периоды задержки самовоспламенения водорода по детальной кинетике в условиях по давлению и температуре, приближенных к условиям работы водородного дизеля.

1. КРАТКИЕ СВЕДЕНИЯ О РАБОЧЕМ ПРОЦЕССЕ ДИЗЕЛЯ И ПРИНЯТЫХ ДОПУЩЕНИЯХ

Сформулируем основные положения математической модели процесса самовоспламенения в дизеле, часть из которых рассматривалась в работах [13–15].

1. В качестве рабочего пространства принимаем камеру сгорания дизеля с переменным объемом, изменяемым по закону теоретического аксиального кривошипно-шатунного механизма $V = f(\varphi)$. Камера наполнена атмосферным воздухом, смешанным с остаточными газами с коэффициентом γ_r . Коэффициент избытка воздуха α для двигателя задается количеством впрыскиваемого топлива (водорода).

2. Далее происходит адиабатическое (или политропное) сжатие воздушного заряда при повороте коленчатого вала от угла φ_a (угла закрытия впускного клапана) до φ_1 (угла начала впрыска газового топлива).

3. Впрыск топлива производится аппаратурой впрыска высокого давления в виде нескольких (начиная от четырех) высокоскоростных турбулентных струй газового топлива в течение длительного времени (практически конец подачи топлива совпадает с концом сгорания). При этом процесс впрыска топлива полагается квазистационарным для всех турбулентных струй.

4. В результате поперечной диффузии в турбулентных струях на их периферии образуются локальные объемы (ЛО) с переменной концентрацией газового топлива (водорода) и различной температурой среды. Полагаем, что ЛО являются адиабатически изолированными системами и в дальнейшем не обмениваются теплом и массой с воздушным зарядом и топливом. Различные температуры и концентрации газового топлива (водорода) в ЛО обусловлены отличием температуры впрыскиваемого топлива от температуры воздушного заряда.

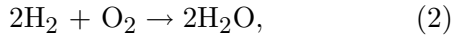
5. Смеси в ЛО реагируют до момента быстрого сгорания (самовоспламенения) в условиях адиабатического сжатия. Самовоспламенение в них происходит в разное время. Задержкой воспламенения τ_i будем считать время от начала впрыска топлива (и образования ЛО) до самовоспламенения первого по времени ЛО.

6. Дополнительно полагаем, что объем, занимаемый всеми турбулентными струями (а также образовавшимися ЛО), мал по срав-

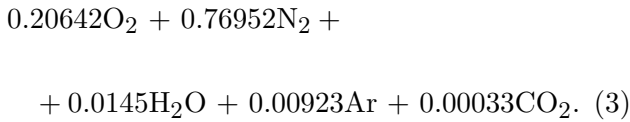
нению с текущим объемом цилиндра V и до момента самовоспламенения топлива им пренебрегаем.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ЛОКАЛЬНОГО ОБЪЕМА

Согласно кинетическому уравнению макрокинетики окисления водорода (глобальной кинетики)



стехиометрическая молярная доля топлива в смеси с воздухом равна $a_f^0 = 0.2922$. Для нашей задачи самовоспламенения водородно-воздушной смеси может быть принят следующий состав воздуха средней влажности [16]:



В результате смешения воздушного заряда с топливом в момент образования ЛО, соответствующий углу начала впрыска топлива $\varphi = \varphi_1$, происходит формирование состава горючей смеси. Если коэффициент избытка воздуха в ЛО положить равным α_{LV} , начальная относительная концентрация топлива в нем $a_f^{(1)}$ будет равна

$$a_f^{(1)} = \frac{1}{1 + \alpha_{LV}(1/a_f^0 - 1)}. \quad (4)$$

Будем считать, что ЛО условно содержит 1 моль газа, тогда начальные концентрации остальных компонентов смеси в ЛО, согласно (2)–(4), составят

$$a_j^{(1)} = a_j^{(a)}(1 - a_f^{(1)}), \quad (5)$$

где начальные концентрации компонентов заряда заданы формулой (3).

Для численного моделирования процесса в ЛО необходимо знать конкретный вид уравнения макрокинетики. Например, можно воспользоваться достаточно старым эмпирическим уравнением горения водорода (Lezberg E., Lancashire R., 1961, цит. по [17]) или же попытаться получить уравнение макрокинетики численными методами на основе детального

кинетического механизма (ДКМ), надежно работающего при высоких давлениях.

Современные ДКМ окисления водорода (без образования оксидов азота) включают в себя порядка 40 прямых и обратных реакций. Сравнительный анализ различных ДКМ окисления водорода, в силу их весьма большого количества, является достаточно проблемной задачей. Можно, например, рассмотреть варианты ДКМ, описанные в [18–24], в которые кроме водорода входят реакции с 11 частицами (в том числе водород, составляющие воздуха (3) и радикалы). Анализ ДКМ [18–24] при различных давлениях и концентрациях показал, что некоторые из них практически идентичны. В результате для дальнейших расчетов был выбран ДКМ [24], состоящий из 38 прямых и обратных элементарных реакций (дополнительно 4 декларированные дуплексные реакции и ряд реакций с тройными столкновениями с частицами H_2O , H_2 , Ar и O_2). Этот ДКМ весьма хорошо описывает процессы самовоспламенения водорода при высоких давлениях (до 8.7 МПа в широком диапазоне концентраций водорода). Кинетические константы этих реакций приведены в работе [24].

Принимаем, что смесь в ЛО реагирует согласно уравнению (2), при этом новые компоненты смеси в ЛО не образуются, поскольку в продуктах реакции присутствует только вода.

Для удобства дальнейшего рассмотрения задачи присвоим j -м компонентам газа в ЛО следующие индексы: 1 — кислород O_2 , 2 — азот N_2 , 3 — пары воды H_2O , 4 — аргон Ar , 5 — диоксид углерода CO_2 . Впрыскиваемому газу топливу (водороду) присвоим индекс f . В случае детального кинетического механизма компонентов j -х частиц будет больше, дополнительно будем использовать индексы: 6 — частица HO_2 , 7 — перекись водорода H_2O_2 , 8 — радикал H , 9 — радикал O , 10 — радикал OH .

Исходная температура смеси в ЛО после начала подачи топлива при $\varphi = \varphi_1$ определяется балансом энергии (энтальпии). С учетом температур в цилиндре T_1 и впрыскиваемого топлива T_f имеем (ЛО условно содержит 1 моль смеси)

$$\theta^{(1)} = \left(T_1 \sum_j a_j^{(1)} C_{pj} + T_f a_f^{(1)} C_{pf} \right) / \left(\sum_j a_j^{(1)} C_{pj} + a_f^{(1)} C_{pf} \right), \quad (6)$$

где C_{pj} , C_{pf} — молярные теплоемкости j -го компонента и топлива, а относительные концентрации компонентов газовой смеси $a_j^{(1)}$ и топлива $a_f^{(1)}$ определяются формулами (4) и (5).

Концентрации A_j j -х компонентов смеси и их сумма (одновременно являющаяся уравнением состояния) определяются формулами

$$A_j = a_j \frac{p}{R\theta}, \quad \sum_j A_j = \sum_j a_j \frac{p}{R\theta} = \frac{p}{R\theta}. \quad (7)$$

Скорости образования j -х компонентов смеси в ЛО $B_j = \xi_j W$ и их сумма $\sum_j B_j$ (скорость изменения числа частиц) с учетом уравнения (2) и знака стехиометрического коэффициента ξ_j записываются в виде

$$B_1 = -W, \quad B_2 = 0, \quad B_3 = 2W, \quad (8)$$

$$B_4 = 0, \quad B_f = -2W, \quad \sum_j B_j = -W,$$

где W — скорость химической реакции, определяемая уравнением макрокинетики

$$W = k_0 A_1^{s_1} A_f^{s_f} \exp\left(-\frac{E}{R\theta}\right), \quad (9)$$

θ — температура газа в ЛО, A_j — концентрации кислорода и водорода, $s = s_1 + s_f$ — порядок реакции, E — энергия активации.

Скорости изменения концентрации компонентов смеси в ЛО при переменных давлении p и температуре θ , с учетом (2) и (8) имеют вид [25]

$$\dot{A}_j = \frac{B_j}{2\pi n_0} + A_j \left(\frac{\dot{p}}{p} - \frac{\dot{\theta}}{\theta} - \frac{R\theta}{2\pi n_0 p} \sum_j B_j \right). \quad (10)$$

Здесь $\dot{A}_j = \frac{dA_j}{d\varphi}$ — производная концентрации j -го компонента по углу поворота коленчатого вала (ПКВ) двигателя $\varphi = 2\pi n_0 t$ (выражен в радианах), t — время, n_0 — частота вращения вала двигателя.

Уравнение энергии смеси в ЛО может быть представлено в виде

$$\frac{\langle C_p \rangle}{R} \frac{\dot{\theta}}{\theta} = \frac{\dot{p}}{p} + \frac{1}{p} \sum_i h_i W_i, \quad (11)$$

где $\langle C_p \rangle = \sum_j A_j C_{pj} / \sum_j A_j$ — средняя молярная теплоемкость при постоянном давлении; h_i , W_i — теплота и скорость i -й реакции (в случае макрокинетики имеем одну реакцию, $i = 1$, тогда индекс и знак суммирования можно опустить).

Полагаем, что рациональная постановка задачи может базироваться на том, что дизельный факел поджигается от некоторого самовоспламенившегося ЛО, расположенного вблизи внешней поверхности топливной струи [13–15]. Этот ЛО образуется практически в момент начала впрыска топлива, $\varphi = \varphi_1$. Задача сводится к нахождению задержки самовоспламенения этого ЛО. Для упрощения математической модели полагаем, что образуется всего один ЛО (это не снижает общности задачи, поскольку в разных вариантах можно изменять начальные концентрационные условия в этом ЛО).

Для численного моделирования процесса в ЛО необходимо знать конкретный вид уравнения макрокинетики. Для этого проведен расчет периода индукции τ_i на основе детального кинетического механизма.

3. РАСЧЕТ КИНЕТИКИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ДКМ В ГОМОГЕННЫХ РЕАКТОРАХ

Для детальной химической кинетики [24] численным моделированием с помощью пакета программ [26, 27] рассчитывались зависимости периода индукции водородно-воздушной смеси от коэффициента избытка воздуха α_{LV} в гомогенных реакторах постоянного объема (ПО) и постоянного давления (ПД). Использование механизма [24] обусловлено тем, что этот механизм превосходно работает при давлениях до 8.7 МПа и в диапазоне концентраций водорода, соответствующих значениям $\alpha_{LV} = 0.2 \div 4$. Результаты моделирования приведены на рис. 1, из которого видно, что линии 3 и 5 (реактор ПО) практически близки к линиям 2 и 4 (реактор ПД). В то же время линии 4 и 5 (начальное давление $p_1 = 5.8$ МПа) и линии 2 и 3 ($p_1 = 2.9$ МПа) значительно разнесены на графике. Таким образом, при высоких давлениях, соответствующих дизелю, кинетика самовоспламенения водорода существенно зависит от давления. Начальные условия в реакторах ПО и ПД приблизительно соответство-

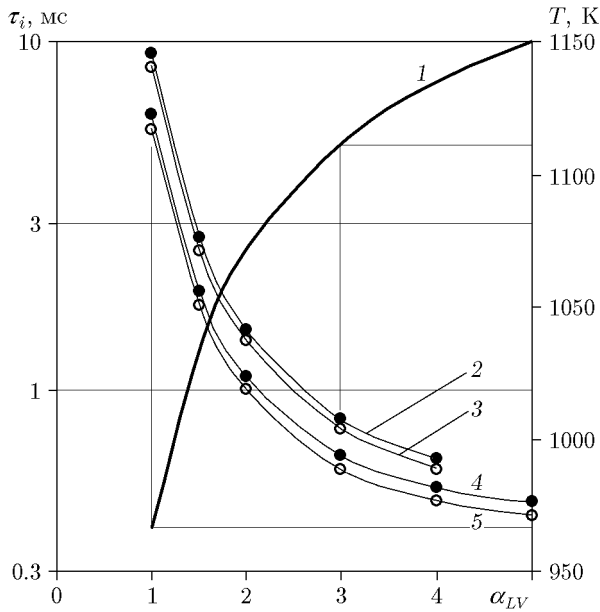


Рис. 1. Зависимости периода индукции водорода от коэффициента избытка воздуха и начальной температуры в реакторах ПО (светлые точки) и ПД (темные точки):

1 — начальная температура, 2, 3 — начальное давление $p_1 = 2.9$ МПа (двигатель без наддува), 4, 5 — начальное давление $p_1 = 5.8$ МПа (двигатель с наддувом)

вали условиям в ЛО водородного дизеля в момент начала впрыска газообразного водорода (см. таблицу). Напомним, что рассматриваемый ЛО образован при смешении холодного водорода с горячим воздушным зарядом дизеля. На рис. 1 приведена также линия 1, соответствующая начальной температуре в реакторах (каждой вертикальной группе точек соответствует своя начальная температура).

На рис. 2 представлены результаты моделирования на основе уравнений (7)–(11) периода индукции водорода τ_i в гомогенных реакторах ПО и ПД. Расчеты проводились при начальных давлениях $p_1 = 5.8$ МПа (линии 3 и 4) и 2.9 МПа (линии 1 и 2), приблизительно соответствующих условиям в водородном дизеле (см. таблицу).

Исследования показали, что уравнение макрокинетики самовоспламенения водорода при высоких давлениях имеет порядок реакции $s = s_1 + s_f = 1.4$ (причем $s_1 = 1.1$ и $s_f = 0.3$), а энергия активации в уравнении Аррениуса близка к $E = 170\,000$ Дж/моль, т. е. получаем

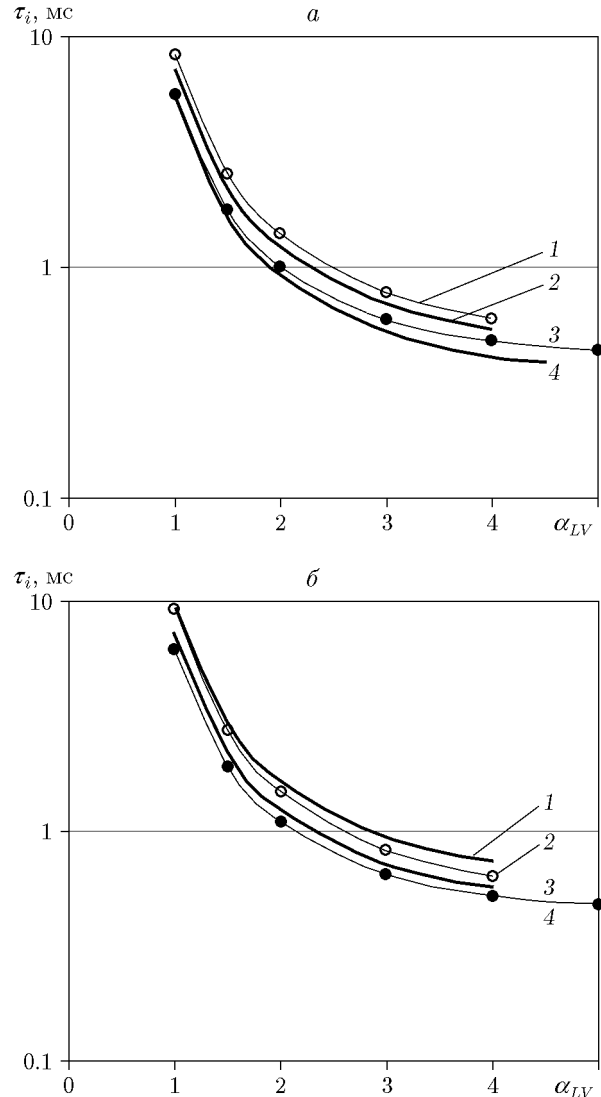


Рис. 2. Зависимость периода индукции водорода в реакторах ПО (а) и ПД (б) от коэффициента избытка воздуха:

тонкие линии со светлыми и темными точками — расчет по детальной кинетике [24]; толстые линии — макрокинетика; 1, 2 — начальное давление 2.9 МПа (двигатель без наддува), 3, 4 — начальное давление 5.8 МПа (двигатель с наддувом)

$$W = k_0 A_1^{1.1} A_f^{0.3} \exp\left(-\frac{170\,000}{RT}\right), \quad (12)$$

где размерность W — [моль/(м³·с)], A_j — [моль/м³], k_0 — [(м³/моль)^{0.4}/с]. Здесь коэффициент $k_0 = 1.314 \cdot 10^9$ (м³/моль)^{0.4}/с является среднеарифметическим значением коэффициента $1.177 \cdot 10^9$ (м³/моль)^{0.4}/с (когда линии 1 и 3 для ДКМ практически полностью совпадают с линиями 2 и 4 для мак-

Параметры двигателя и начальные условия в ЛО и гомогенных реакторах ПО и ПД

Параметр	Значение
Частота вращения n_0 , мин ⁻¹	1 500
Степень сжатия, ε	18
Температура воздушного заряда T_a при угле закрытия впускного клапана φ_a , К	500
Давление в цилиндре p_a при угле φ_a : – двигатель без наддува, кПа – двигатель с наддувом, кПа	95 190
Угол начала впрыска топлива φ_1 , град (ПКВ)	–10
Давление в цилиндре p_1 при угле φ_1 : – двигатель без наддува, МПа – двигатель с наддувом, МПа	2.9 5.8
Температура впрыскиваемого водорода T_f , К	300
Температура в цилиндре двигателя T_1 при угле φ_1 , К	1 212
Диапазон начальных температур в ЛО (θ_1) при угле φ_1 и $\alpha_{LV} = 1 \div 5$, К	967 ÷ 1 149

рокинетики в реакторе ПО) и коэффициента $1.450 \cdot 10^9 \text{ (м}^3/\text{моль)}^{0.4}/\text{с}$ (для аналогичных линий в реакторе ПД). Из рис. 2 видно, что при среднем значении коэффициента $k_0 = 1.314 \cdot 10^9 \text{ (м}^3/\text{моль)}^{0.4}/\text{с}$ периоды индукции водорода в реакторах ПО и ПД удовлетворительно согласуются. При этом линии макрокинетики 2 и 4 для реактора ПО (рис. 2,а) располагаются ниже линий детальной кинетики 1 и 3, а для реактора ПД (рис. 2,б), наоборот, линии макрокинетики 1 и 3 расположены выше линий детальной кинетики 2 и 4.

При численном моделировании окончанием периода индукции принимался момент времени, когда текущая температура в реакторах превышала начальную температуру на 400 К.

Итак, уравнение (12) может быть взято за основу при моделировании процессов самовоспламенения рабочей смеси в водородном дизеле.

Согласно теории двигателей внутреннего сгорания, самовоспламенение топлива (с периодом индукции τ_i) должно происходить вблизи верхней мертвой точки на линии сжатия, но не на линии расширения заряда.

Таким образом, период индукции $\tau_i = \varphi_1/n_0$ в ЛО дизеля при частоте вращения $n_0 =$

$1\,500 \text{ мин}^{-1}$ и угле ПКВ в начале подачи топлива $\varphi_1 = -10^\circ$ должен быть не более 1 мс.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИОДА ИНДУКЦИИ ТОПЛИВА В ЛО ВОДОРОДНОГО ДИЗЕЛЯ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ МАКРОКИНЕТИКИ

4.1. Математическая модель внутрицилиндрового процесса в дизеле

Запишем уравнение динамики объема системы (цилиндра двигателя) для аксиального кривошипно-шатунного механизма:

$$\frac{\dot{V}}{V_c} = \frac{\varepsilon - 1}{2} \sin \varphi \left(1 + \frac{\cos \varphi}{\sqrt{1/\lambda^2 - \sin^2 \varphi}} \right), \quad (13)$$

где $\lambda = r/l$ — отношение радиуса кривошипа к длине шатуна, $\varepsilon = V_{\max}/V_c$ — геометрическая степень сжатия, V_c — объем камеры сгорания.

По сравнению с объемом цилиндра объем ЛО незначителен, поэтому протекающие в нем химические реакции самовоспламенения не оказывают влияния на динамику давления и температуры в цилиндре дизеля. Уравнения состояния воздушного заряда в начале процесса сжатия при $\varphi = \varphi_a$ и в процессе сжатия запишутся в виде

$$p_a V_a = \nu_a R T_a, \quad p V = \nu_a R T = p_a V_a T / T_a, \quad (14)$$

где ν_a — количество молей воздушного заряда.

В момент закрытия впускного клапана при угле ПКВ $\varphi = \varphi_a$ рабочий объем $V = V_a$, начальное давление p_a и температура T_a воздушного заряда предполагаются известными из теории двигателей внутреннего сгорания или из эксперимента.

Система уравнений процесса в объеме камеры сгорания при $\varphi_a < \varphi < \varphi_1$ и далее до момента самовоспламенения ЛО при $\varphi \leq \varphi_i$, кроме (11) и (12), включает в себя уравнения:

– адиабатического или политропного сжатия воздушного заряда (динамики давления)

$$\frac{\dot{p}}{p} = -n_u \frac{\dot{V}}{V}, \quad (15)$$

– энергии (динамики температуры) воздушного заряда

$$\frac{\dot{T}}{T} = (1 - n_u) \frac{\dot{V}}{V}, \quad (16)$$

где n_u — показатель политропного сжатия воздушного заряда. При этом объемом впрыскиваемого топлива пренебрегаем (ввиду его малости).

4.2. Выбор начальных условий для моделирования

Предварительный анализ эмпирических и теоретических данных показывает, что численное моделирование процесса самовоспламенения топлива в водородном дизеле должно учитывать следующие факторы:

- 1) удовлетворительный процесс самовоспламенения имеет место только при значительном подогреве подаваемого воздуха (например, с помощью рекуперативного теплообмена с уходящими газами) до достаточно высокой температуры. Поэтому желательно рассмотреть широкий диапазон начальных температур;
- 2) с точки зрения конструктивных особенностей дизеля степень сжатия ε следует брать в диапазоне от среднего значения, равного 18, до высокого, порядка 23;
- 3) начало подачи топлива (газообразного водорода) лучше располагать на небольшом удалении от верхней мертвой точки (ВМТ) в районе угла ПКВ $\varphi_1 = -10^\circ$;
- 4) частоту вращения вала двигателя при этом желательно принять $n_0 = 1500$ и 750 мин^{-1} .

Для кинетических расчетов использовалась собственная вычислительная программа численного моделирования задержки самовоспламенения топлива в водородном дизеле. Моделирование проводилось с привлечением уравнения макрокинетики окисления водорода при высоких давлениях (12) и при заданных параметрах двигателя (давлении p_a и температуре T_a в момент закрытия впускного клапана при $\varphi = \varphi_a$). С помощью уравнений (13)–(16) программа рассчитывала давление p_1 и температуру T_1 воздушного заряда в цилиндре двигателя в момент начала впрыска водорода (при $\varphi = \varphi_1$). Затем по формулам (3)–(6) программа рассчитывала начальные концентрации компонентов смеси $a_j^{(1)}$ и температуру смеси θ_1 в ЛО.

Далее методом Рунге — Кутты 4-го порядка интегрировалась система уравнений (7)–(11) с учетом (12), совместно с (13)–(16), с целью расчета динамики внутрицилиндрового процесса в камере сгорания и в ЛО в течение периода индукции водорода.

В результате интегрирования системы уравнений с помощью дифференциального критерия самовоспламенения [4]

$$K = \frac{\dot{\theta}/\theta}{\dot{p}/p} = \frac{d \ln \theta}{d \ln p} \geq 1, \quad (17)$$

определяли период индукции $\tau_i = (\varphi_i - \varphi_1)/(2\pi n_0)$. Значения критерия K , рассчитанные по формуле (17), обычно находятся в диапазоне $20 \div 40$. Практически та же точность расчета τ_i получается, если численное интегрирование проводить до тех пор, пока температура ЛО θ не превысит температуру в цилиндре дизеля T на заданную величину (порядка $300 \div 400 \text{ K}$).

4.3. Результаты моделирования и обсуждение

Известно, что водородно-воздушные смеси являются взрывоопасными в широких концентрационных пределах и в некоторых условиях их ламинарные (дефлаграционные) пламена могут переходить в детонационный режим. В то же время их горение без инициирования (например, искровым электрическим разрядом) весьма затруднено. В дизеле, в том числе водородном, смесь самовоспламеняется от сжатия поршнем при его движении к ВМТ. Поэтому топливо (газообразный водород) впрыскивается в уже горячий воздушный заряд, на-

гретый в такте сжатия, при подходе поршня к ВМТ. При этом самовоспламенение топлива происходит до ВМТ, самовоспламенение на такте расширения после ВМТ исключено (из-за неустойчивости процесса). Тяжелые углеводородные топлива достаточно легко самовоспламеняются от сжатия, в отличие от водородно-воздушных смесей. Поэтому при подаче в рабочий объем (до момента закрытия впускного клапана) холодного воздуха с температурой порядка 300 К и его нагрева путем адиабатического или политропного сжатия поршнем, движущимся к ВМТ, температура воздуха может оказаться недостаточной для воспламенения. Экспериментальные исследования рабочих процессов на опытных одноцилиндровых установках проводятся с предварительно нагретым воздушным зарядом [1]. Однако конкретные характеристики процесса в известной авторам литературе практически не описаны [28].

Целями моделирования периода индукции топлива в водородном дизеле, основанного на полученном в данной работе эмпирическом уравнении макрокинетики горения водорода при высоких давлениях (12), были следующие:

- 1) проверка работоспособности кинетического уравнения (12) с приведенной выше математической моделью водородного дизеля;
- 2) определение диапазона приемлемых начальных температур подогреваемого воздушного заряда, до начала сжатия, в водородном дизеле (со средними характеристиками рабочего процесса двигателя);
- 3) оценка влияния наддува двигателя на период индукции топлива (при вариации начальной температуры воздушного заряда);
- 4) оценка влияния повышенной степени сжатия на период индукции топлива (при вариации начальной температуры воздушного заряда);
- 5) оценка влияния пониженной частоты вращения вала двигателя на период индукции топлива (при вариации начальной температуры воздушного заряда);
- 6) оценка влияния разогрева впрыскиваемого форсункой газообразного водорода (при вариации начальной температуры воздушного заряда).

На рис. 3 (а также на остальных рисунках данной работы — рис. 4, рис. 5) приведены результаты численного моделирования периода индукции топлива τ_i в водородном дизеле

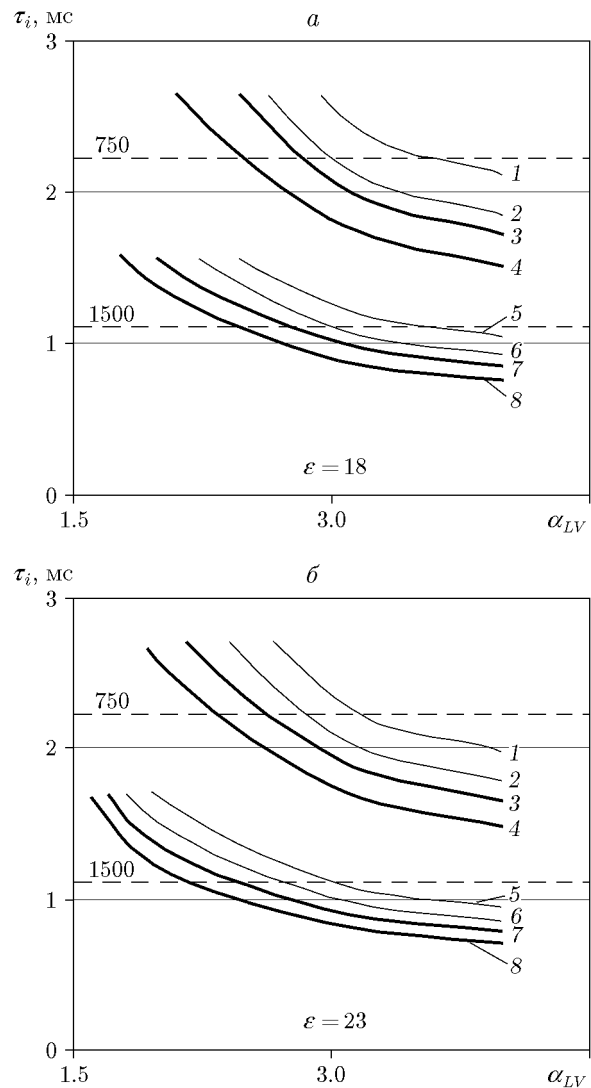


Рис. 3. Зависимость периода индукции в водородном дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО при различных начальных температурах воздушного заряда и степенях сжатия $\epsilon = 18$ (а), 23 (б):

тонкие линии — двигатель без наддува, толстые — с наддувом;

а: 1, 3 — $T_a = 438$ К, 2, 4 — $T_a = 443$ К, 5, 7 — $T_a = 458$ К, 6, 8 — $T_a = 463$ К;

б: 1, 3 — $T_a = 403$ К, 2, 4 — $T_a = 407$ К, 5, 7 — $T_a = 423$ К, 6, 8 — $T_a = 427$ К

от коэффициента избытка воздуха α_{LV} в локальном объеме. Период индукции определялся при различных начальных температурах воздушного заряда T_a (при частоте вращения вала двигателя $n_0 = 1500$ и 750 мин $^{-1}$ в двигателях со степенью сжатия $\epsilon = 18$ и 23, а также с применением или отсутствием дополни-

тельного наддува воздушного заряда на стадии впуска). Во всех вариантах расчета угол ПКВ в начале впрыска топлива принят неизменным и равным $\varphi_1 = -10^\circ$.

На рис. 3 и 4 толстыми линиями (3, 4, 7, 8) показаны зависимости для двигателя с наддувом ($p_a = 190$ кПа), а тонкими линиями (1, 2, 5, 6) — для двигателя без наддува ($p_a = 95$ кПа). На рис. 5 толстые линии (1, 2, 5, 6) также относятся к двигателю с наддувом, а тонкие линии (3, 4, 7, 8) — к двигателю без наддува. На всех этих рисунках штриховые линии с цифрами 1500 и 750 соответствуют моменту прохождения поршнем ВМТ.

На рис. 3,а приведены результаты моделирования для двигателя со средней степенью сжатия $\varepsilon = 18$, а на рис. 3,б — с повышенной степенью сжатия $\varepsilon = 23$. Видно, что удовлетворительное самовоспламенение водорода (до ВМТ) происходит в бедной области при значении α_{LV} , близком к 3, а в области вблизи $\alpha_{LV} = 4$ самовоспламенение в ЛО вырождается из-за практически полного выгорания водорода за период индукции.

На рис. 3 приведены результаты моделирования периода индукции при низкой температуре водорода $T_f = 300$ К, впрыскиваемого в рабочий объем. При этом начальная температура подогретого воздуха при $\varepsilon = 18$ (рис. 3,а) должна быть не менее $T_a = 458$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или не менее $T_a = 438$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹. Наддув двигателя снижает период индукции, что эквивалентно снижению температуры воздуха примерно на 5 К. При $\varepsilon = 23$ (рис. 3,б) начальная температура воздуха может быть снижена до $T_a = 423$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или до $T_a = 407$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹, т. е. на 30 ÷ 35 К.

На рис. 4 приведены результаты моделирования периода индукции при сильном нагреве впрыскиваемого водорода и при обычной начальной температуре воздушного заряда $T_a = 323$ К. В этом случае самовоспламенение в ЛО сдвигается в богатую область с минимумом при $\alpha_{LV} = 0.2$. Для нормального (до ВМТ) самовоспламенения в ЛО температура впрыскиваемого водорода при степени сжатия $\varepsilon = 18$ (рис. 4,а) должна быть не менее $T_f = 1233$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или не менее $T_f = 1163$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹. При $\varepsilon = 23$ (рис. 4,б) температура водорода может быть снижена до $T_f = 1173$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или до

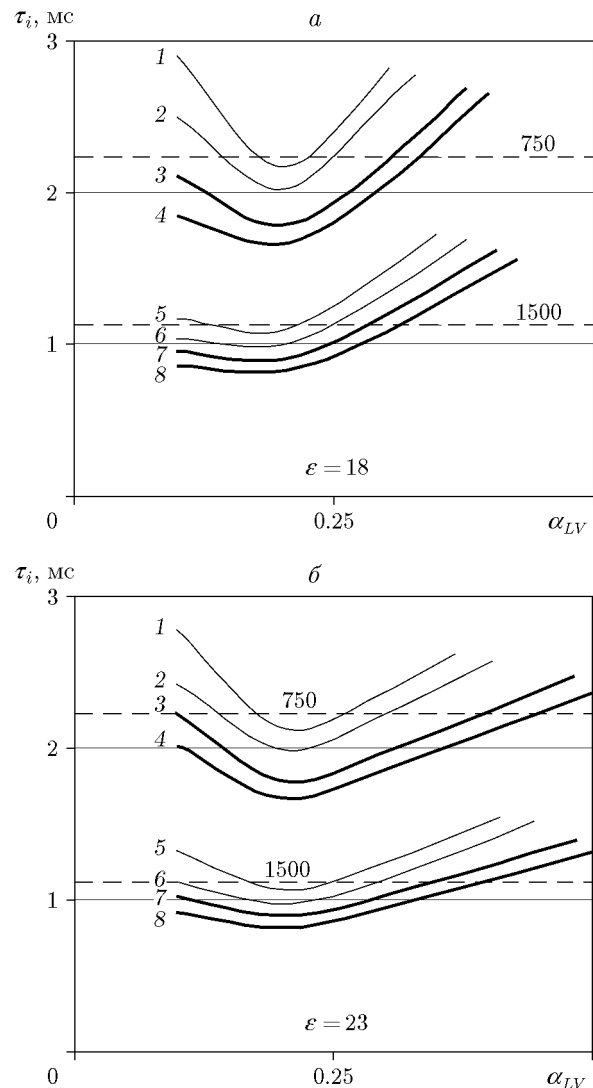


Рис. 4. Зависимость периода индукции в водородном дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО при различных температурах впрыскиваемого водорода и степенях сжатия $\varepsilon = 18$ (а), 23 (б):

тонкие линии — двигатель без наддува, толстые — с наддувом;
а: 1, 3 — $T_f = 1163$ К, 2, 4 — $T_f = 1173$ К, 5, 7 — $T_f = 1233$ К, 6, 8 — $T_f = 1248$ К;
б: 1, 3 — $T_f = 1103$ К, 2, 4 — $T_f = 1113$ К, 5, 7 — $T_f = 1173$ К, 6, 8 — $T_f = 1188$ К

$T_f = 1103$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹, т. е. примерно на 60 К. Однако следует отметить, что организовать такой высокий разогрев впрыскиваемого водорода весьма проблематично. При этом наддув двигателя позволяет снизить температуру впрыскиваемого водорода примерно на 10 ÷ 15 К.

Поскольку отдельный нагрев только воздушного заряда (1-й вариант — рис. 3) или только впрыскиваемого водорода (2-й вариант — рис. 4) до приемлемых температур не является оптимальным, возникает вариант совместного нагрева воздушного заряда и впрыскиваемого водорода (3-й вариант — рис. 5) до промежуточных температур, который организовать значительно проще. Один из вариантов такой совместной подготовки (в смысле подогрева за счет рекуперации тепла уходящих газов) приведен на рис. 5. Здесь следует отметить, что в отношении впрыскиваемого водорода нагревать достаточно только первую (начальную) порцию топлива (в каждом цикле).

На рис. 5 приведены зависимости периода индукции в водородном дизеле с наддувом и без наддува от коэффициента избытка воздуха в ЛО при температуре впрыскиваемого водорода $T_f = 873$ К и различных начальных температурах воздушного заряда (при $n_0 = 1500$ и 750 мин⁻¹ для двигателей со степенью сжатия $\varepsilon = 18$ и 23).

Как видно из рис. 5, самовоспламенение водорода в ЛО происходит в бедной области (аналогично 1-му варианту — рис. 5), однако в этом случае минимальный период индукции приходится на весьма широкую область коэффициентов избытка воздуха. Оптимальное значение α_{LV} лежит в пределах $1.5 \div 3.5$. Это значительно облегчает процесс самовоспламенения водорода в ЛО.

Для нормального (до ВМТ) самовоспламенения в ЛО начальная температура воздушного заряда при степени сжатия $\varepsilon = 18$ (рис. 5, а) должна быть не менее $T_a = 437$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или не менее $T_a = 416$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹. При $\varepsilon = 23$ (рис. 5, б) температура воздушного заряда может быть снижена до $T_a = 398$ К при $n_0 = 1500$ мин⁻¹ или до $T_a = 380$ К при $n_0 = 750$ мин⁻¹, т. е. примерно на 40 К. При этом наддув двигателя позволяет снизить температуру водорода примерно на 5 К.

Следует отметить, что организовать такой разогрев воздушного заряда (по сравнению с 1-м вариантом — рис. 3) и впрыскиваемого водорода (по сравнению со 2-м вариантом — рис. 4) значительно проще.

Анализ полученных результатов показывает, что наиболее предпочтительным является третий вариант — одновременного подогре-

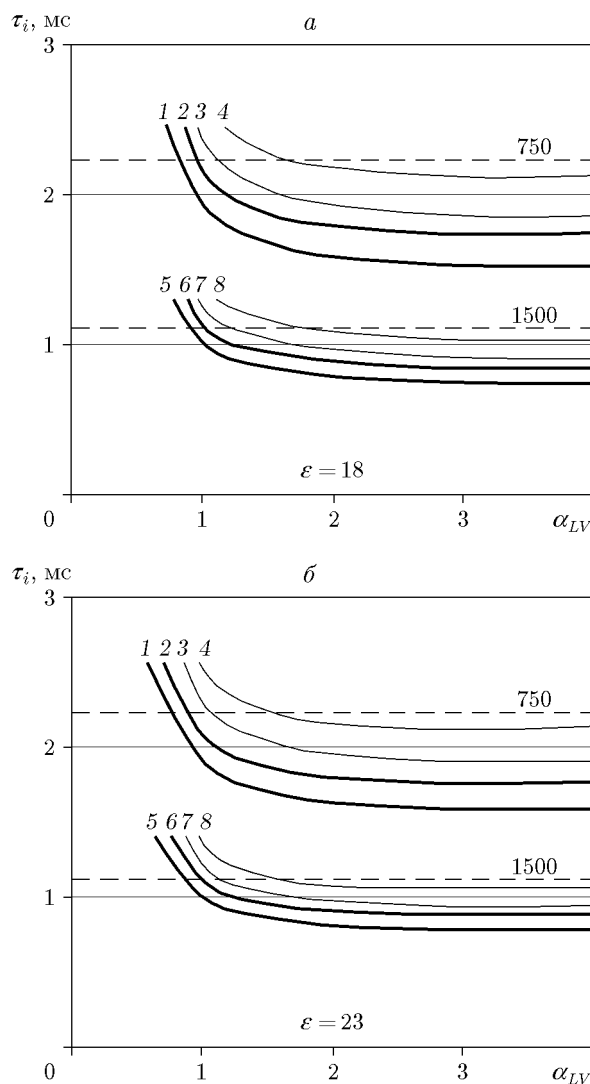


Рис. 5. Зависимость периода индукции в водородном дизеле от коэффициента избытка воздуха в ЛО при температуре впрыскиваемого водорода $T_f = 873$ К и разных начальных температурах воздушного заряда при степенях сжатия $\varepsilon = 18$ (а), 23 (б):

тонкие линии — двигатель без наддува, толстые — с наддувом;
а: 2, 4 — $T_a = 416$ К, 1, 3 — $T_a = 421$ К, 6, 8 — $T_a = 437$ К, 5, 7 — $T_a = 442$ К;
б: 2, 4 — $T_a = 380$ К, 1, 3 — $T_a = 384$ К, 6, 8 — $T_a = 398$ К, 5, 7 — $T_a = 403$ К

ва воздушного заряда (уходящими газами) и нагрева водорода до умеренной (но достаточно высокой) температуры.

ВЫВОДЫ

На основе анализа литературных источников выбран детальный кинетический механизм окисления водорода при высоких давле-

ниях. Для выбранного кинетического механизма [24] с помощью пакета программ PREMIX и CHEMKIN-II [26, 27] проведены расчеты самовоспламенения водорода в гомогенных реакторах постоянного объема и постоянного давления при давлениях, соответствующих условиям работы дизеля.

С использованием результатов этих расчетов по уточненным математическим моделям самовоспламенения водорода в реакторах постоянного объема и постоянного давления получено новое уравнение макрокинетики, вполне удовлетворительно описывающее процессы самовоспламенения водорода при высоких давлениях.

Для выбранных параметров двигателя по собственному компьютерному коду проведены численные расчеты задержки самовоспламенения топлива в водородном дизеле. Рассмотрено три варианта подачи в водородный дизель подогретого воздуха и впрыскиваемого водорода:

1) подача на стадии впуска подогретого воздушного заряда с впрыском холодного газообразного водорода с температурой $T_f = 300$ К;

2) впрыск водорода, нагретого до высокой температуры $T_f \approx 1150 \div 1250$ К, с подачей воздушного заряда со средней начальной температурой $T_a \approx 323$ К;

3) впрыск водорода, нагретого до умеренной температуры $T_f = 873$ К, с подачей воздушного заряда с невысоким начальным подогревом до температуры $T_a \approx 416 \div 437$ К или $380 \div 398$ К при пониженной частоте вращения.

Наиболее предпочтительным является третий вариант — одновременного подогрева воздушного заряда (уходящими газами) и нагрева водорода до умеренной (но достаточно высокой) температуры.

Результаты численного моделирования процесса самовоспламенения водорода в водородном дизеле показали, что при снижении частоты вращения вала двигателя из-за увеличения времени до прохождения поршнем ВМТ облегчаются условия самовоспламенения топлива. Период индукции также снижается при увеличении степени сжатия, при реализации наддува двигателя и при увеличении начальной температуры воздуха и/или впрыскиваемого газообразного водорода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кавтарадзе Р. З. Водородный дизель — двигатель будущего: в 3 т. // Тр. 7-й Российской национальной конференции по теплообмену, 22–26 октября 2018 г., Москва. — М.: Изд. дом МЭИ, 2018. — С. 15–19.
2. Тодес О. М. Адиабатический тепловой взрыв // Журн. физ. химии. — 1933. — Т. 4, вып. 1. — С. 71–75.
3. Тодес О. М. Теория теплового взрыва. I. Тепловой взрыв реакций «нулевого» порядка // Журн. физ. химии. — 1939. — Т. 13, вып. 7. — С. 868–879.
4. Сеначин П. К., Бабкин В. С. Самовоспламенение газа перед фронтом пламени в закрытом сосуде // Физика горения и взрыва. — 1982. — Т. 18, № 1. — С. 3–8.
5. Сеначин П. К., Абдуллин Р. Х., Бабкин В. С. Анализ воспламенения в дизеле // Физика горения и методы ее исследования: межвуз. сб. — Чебоксары: Изд-во Чуваш. гос. ун-та, 1983. — С. 50–53.
6. Матиевский Д. Д., Сеначин П. К. Задержка воспламенения топлива в дизеле как период индукции динамического теплового взрыва // Изв. вузов. Машиностроение. — 1995. — № 4-6. — С. 27–32.
7. Сеначин П. К., Матиевский Д. Д., Сеначин А. П. Моделирование задержки воспламенения топлива в дизеле // Вестн. Алтайского гос. техн. ун-та им. И. И. Ползунова. — 2001. — № 3. — С. 64–68.
8. Воинов А. В., Джанардан Четти В. Анализ воспламенения в дизеле с учетом влияния химико-кинетических и физических факторов // Изв. вузов. Машиностроение. — 1970. — № 4. — С. 77–81.
9. Камфер Г. М. Расчет процесса воспламенения распыленного топлива // Изв. вузов. Машиностроение. — 1976. — № 3. — С. 98–102.
10. Одинцов В. И. Метод расчета продолжительности задержки воспламенения топлива с учетом влияния конструктивных факторов // Двигателестроение. — 1990. — № 3. — С. 17–18.
11. Pfahl U., Fieweger K., Adomeit G. Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions // Symp. (Int.) on Combust. — 1996. — V. 26, N 1. — P. 781–789. — DOI: 10.1016/S0082-0784(96)80287-6.
12. Septivany N., Riyandwita B. W. Spark ignition engine modeling for in-cylinder pressure and temperature prediction using simulink // MATEC Web Conf. — 2018. — V. 204. — 04001. — DOI: 10.1051/mateconf/201820404001.
13. Сеначин А. П., Коржавин А. А., Сеначин П. К. Определение глобальной кинетики дизельного топлива численным решением обратной задачи динамики самовоспламенения в дизеле // Ползуновский вестн. — 2009. — № 4. — С. 155–165.
14. Сеначин П. К., Сеначин А. П. Задержка воспламенения топлива в дизеле с системой топливоподачи повышенного давления // Изв.

- Самар. науч. центра РАН. — 2011. — Т. 13, № 1(2). — С. 479–486.
15. **Senachin A. P., Korzhavin A. A., Senachin P. K.** Simulation of fuel ignition delay in diesel engines with various fuel feeding systems // *Procedia Eng.* — 2016. — V. 150. — P. 190–203. — DOI: 10.1016/j.proeng.2016.06.746.
 16. **Миртов Б. А.** Газовый состав атмосферы Земли и методы его анализа. — М.: Изд-во АН СССР, 1961.
 17. **Щетинков Е. С.** Физика горения газов. — М.: Наука, 1965.
 18. **Варнатц Ю., Маас У., Диблл Р.** Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ: пер. с англ. — М.: Физматлит, 2003.
 19. **Conaire M. O., Curran H. J., Simmie J. M., Pitz W. J., Westbrook Ch. K.** A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // *Int. J. Chem. Kinet.* — 2004. — V. 36, N 11. — P. 603–622. — DOI: 10.1002/kin.20036.
 20. **Boivin P., Sánchez A. L., Williams F. A.** Four-step and three-step systematically reduced chemistry for wide-range H_2 –air combustion problems // *Combust. Flame.* — 2013. — V. 160, N 1. — P. 76–82. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.09.014.
 21. **Sánchez A. L., Williams F. A.** Recent advances in understanding of flammability characteristics of hydrogen // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2014. — V. 41. — P. 1–55. — DOI: 10.1016/j.pecs.2013.10.002.
 22. **Димитров В. И.** Простая кинетика / под ред. Р. И. Солоухина. — Новосибирск: Наука, 1982.
 23. **Glassman I., Yetter R. A.** Combustion. — 4th ed. — Elsevier, 2008.
 24. **Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F. L.** An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion // *Int. J. Chem. Kinet.* — 2004. — V. 36, N 10. — P. 566–575. — DOI: 10.1002/kin.20026.
 25. **Варнац Ю.** Моделирование процессов горения с помощью детальной кинетики элементарных реакций // *Хим. физика.* — 1994. — Т. 13, № 2. — С. 3–16.
 26. **Kee R. J., Grcar J. F., Smooke M. D., Miller J. A.** PREMIX: A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-dimensional Premixed Flames // Sandia National Laboratories, 1985. — Rep. No. SAND 85-8240.
 27. **Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.** CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics // Sandia National Laboratories, 1989. — Rep. No. SAND 89-8009B.
 28. **Кавтарадзе Р. З.** Теплофизические процессы в дизелях, конвертированных на природный газ и водород. — М.: Изд-во МВТУ им. Н. Э. Баумана, 2011.

*Поступила в редакцию 22.12.2021.
Принята к публикации 28.02.2022.*