

## МАКРОКИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭМИССИИ САЖИ В ДИЗЕЛЕ

В. Я. Басевич<sup>1</sup>, С. Н. Медведев<sup>2</sup>, С. М. Фролов<sup>3</sup>, Ф. С. Фролов<sup>4</sup>, Б. Басара<sup>5</sup>,  
П. Пришинг<sup>6</sup>

**Аннотация:** Предложена макрокинетическая модель сажеобразования, которая может быть включена в детальные и сокращенные кинетические механизмы окисления углеводородов и их смесей, моделирующих моторные топлива. Модель включает три эффективных необратимых реакции: реакцию пиролиза ацетилена и две реакции окисления сажи — диоксидом углерода и водяным паром. Аррениусовские параметры в выражениях констант скоростей эффективных реакций определены из условия наилучшего соответствия результатов расчетов по выходу сажи, полученных на основе макрокинетического механизма и на основе многократно проверенного детального кинетического механизма (ДКМ) сажеобразования. Для ряда углеводородов (СН<sub>4</sub>, С<sub>3</sub>Н<sub>8</sub>, изо-С<sub>8</sub>Н<sub>18</sub>, н-С<sub>10</sub>Н<sub>22</sub>, н-С<sub>14</sub>Н<sub>30</sub>, С<sub>6</sub>Н<sub>6</sub>, С<sub>7</sub>Н<sub>8</sub> и С<sub>2</sub>Н<sub>5</sub>ОН) определены значения коэффициента склонности к сажеобразованию по отношению к базовому углеводороду — н-гептану. Макрокинетическую модель сажеобразования применили к многомерному расчету 14 разных режимов работы дизеля, используя ДКМ окисления и горения высших углеводородов, дополненный ДКМ образования оксидов азота. Получено удовлетворительное согласие расчетных и измеренных результатов по эмиссии сажи и оксидов азота.

**Ключевые слова:** сажеобразование; макрокинетическая модель; склонность углеводородов к сажеобразованию; дизель; многомерный расчет

### Литература

1. Nagle J., Strickland-Constable R. F. Oxidation of carbon between 1000–2000 °C // 5th Conference on Carbon Proceedings. — New York, NY, USA: Pergamon Press, 1962. P. 154–164.
2. Magnussen B. F., Hjertager B. H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion // 16th Symposium (International) on Combustion. — Pittsburgh, PA, USA: The Combustion Institute, 1977.

<sup>1</sup>Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

<sup>2</sup>Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

<sup>3</sup>Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», smfrol@chph.ras.ru

<sup>4</sup>Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, f.frolov@chph.ru

<sup>5</sup>AVL LIST GmbH, Graz, Austria, branislav.basara@avl.com

<sup>6</sup>AVL LIST GmbH, Graz, Austria, peter.priesching@avl.com

3. *Hiroyasu H., Nishida K.* Simplified three dimensional modeling of mixture formation and combustion in a DI diesel engine. SAE Paper No. 890269, 1989.
4. *Mauss F., Balthasar M.* Simplification of a detailed kinetic soot model for application in 3D programs // Combustion technologies for a clean environment / Ed. S. Samuelson. — Energy, combustion and the environment ser. — London: Gordon and Breach Publishing, 1998. Vol. 4.
5. *Басевич В. Я., Власов П. А., Скрипник А. А., Фролов С. М.* Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания // Горение и взрыв, 2008. Вып. 1. С. 40–43.
6. *Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М.* Образование сажи при пиролизе и окислении ацетилена и этилена в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–35.
7. *Clarke A. E., Hunter T. G., Garner F. H.* The tendency to smoke of organic substances on burning. Part 1 // J. Inst. Petrol. Technol., 1946. Vol. 32. P. 627–642.
8. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М.* Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от  $C_1$ – $C_{10}$  к  $C_{11}$ – $C_{16}$  // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.
9. *Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Frolov F. S., Frolov S. M., Medvedev S. N.* Detailed chemistry of heavy alkane hydrocarbon fuel oxidation: Application to combustion and detonation of gaseous and liquid fuels // Transient combustion and detonation phenomena: Fundamentals and applications / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov. — Moscow: TORUS PRESS, 2014. P. 14–25.
10. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. San Diego mechanism web page. Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research). University of California at San Diego. <http://combustion.ucsd.edu>.
11. AVL FIRE: Computational fluid dynamics for conventional and alternative powertrain development. <https://www.avl.com/fire2>.

*Поступила в редакцию 18.12.15*