

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СМЕСЕОБРАЗОВАНИЯ И СГОРАНИЯ В ДИЗЕЛЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ ДЕТАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ ГОРЮЧЕГО*

С. С. Сергеев¹, С. М. Фролов², В. Я. Басевич³, Б. Басара⁴, П. Пришинг⁵

Аннотация: Проведены трехмерные численные расчеты процессов смесеобразования и сгорания в цилиндре дизеля с применением детального кинетического механизма (ДКМ) окисления жидкого горючего — н-тетрадекана (н-С₁₄H₃₀) и смеси 56% н-гексадекана — 44% толуол. Особое внимание уделено исследованию особенностей процесса самовоспламенения. Показано, что, несмотря на высокую температуру (1100 К) в камере сгорания (КС) перед впрыскиванием струи горючего, самовоспламенение имеет многостадийный характер с образованием локальных очагов «холодного» и «голубого» пламени. Изучено влияние величины шага интегрирования по времени и пространственного разрешения на характеристики стадий самовоспламенения. Установлено, что для правильного моделирования задержки самовоспламенения необходимо выбирать шаг интегрирования по времени и пространственное разрешение соответствующих областей течения таким образом, чтобы развитие реакции в очагах самовоспламенения прошло через все характерные стадии.

Ключевые слова: дизель; вычислительная газовая динамика; детальный кинетический механизм (ДКМ); многостадийное самовоспламенение

DOI: 10.30826/CE18110212

Литература

1. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Моделирование самовоспламенения и горения капель н-гептана с использованием детального кинетического механизма // Хим. физика, 2010. Т. 29. № 12. С. 50–59.
2. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₁₀ к C₁₁–C₁₆ // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 1–10.
3. Басевич В. Я., Фролов С. М. Кинетика «голубых» пламен при газофазном окислении и горении углеводородов и их производных // Успехи химии, 2007. Т. 76. № 9. С. 927–944.
4. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басара Б. Численное моделирование сгорания и образования вредных веществ в цилиндре дизеля с применением детального кинетического механизма окисления н-гептана // Горение и взрыв, 2017. Т. 10. № 2. С. 26–34.
5. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басара Б. Расчет сгорания в дизеле с применением детального кинетического механизма окисления топлива // Сб. докл. V Минского Междунар. коллоквиума по физике ударных волн, горения и детонации. — Минск: Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, 2017. С. 157–158.
6. Hanjalic K., Popovac M., Hadziabdic M. A robust near wall elliptic relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD // Int. J. Heat Fluid Fl., 2004. No. 25. P. 897–901.
7. Фролов С. М., Иванов В. С., Basara B., von Berg E., Suf-fa M. Модель распределенных пробных частиц для расчета двухфазных струйных течений в двигателях внутреннего сгорания // Горение и взрыв, 2012. № 5. С. 159–166.
8. 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. — Moscow: TORUS PRESS, 2014. P. 14–25.

* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 44.8 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами» (номер госрегистрации 0082-2016-0011).

¹ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, sergeev.ss@mail.ru

² Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук; smfrol@chph.ras.ru

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

⁴ AVL LIST GmbH, Грац, Австрия, branislav.basara@avl.com

⁵ AVL LIST GmbH, Грац, Австрия, peter.priesching@avl.com

9. Фролов С. М., Басевич В. Я., Фролов Ф. С., Борисов А. А.,
Сметанюк В. А., Авдеев К. А., Гоц А. Н. Корреляция

между испарением и самовоспламенением капли //
Хим. физика, 2009. Т. 28. № 5. С. 3–18.

Поступила в редакцию 10.04.18

MODELING OF MIXTURE FORMATION AND COMBUSTION PROCESSES IN DIESEL ENGINE USING A DETAILED KINETIC MECHANISM OF FUEL OXIDATION

S. S. Sergeev¹, S. M. Frolov^{1,2,3}, V. Ya. Basevich¹, B. Basara⁴, and P. Priesching⁴

¹N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation

³Scientific Research Institute of System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation

⁴AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria

Abstract: Three-dimensional numerical simulations of mixture formation and combustion processes in a cylinder of diesel engine using the detailed reaction mechanism of fuel oxidation (liquid *n*-tetradecane, C₁₄H₃₀, and 56% *n*-hexadecane – 44% toluene mixture) are performed. Special attention is paid to the self-ignition process. Calculations show that despite the high in-cylinder temperature before the start of injection (1100 K), the self-ignition process has a staged nature with cool and blue flames followed by a hot explosion. The influence of the numerical time step and spatial resolution on the multistage self-ignition is investigated. It has been established that for the correct modeling of the self-ignition delay both the integration time step and spatial resolution have to be varied so that the reaction evolution in the exothermic centers passes through all the typical stages.

Keywords: diesel; computational fluid dynamics (CFD); detailed reaction mechanism; multistage self-ignition

DOI: 10.30826/CE18110212

Acknowledgments

This work was supported by the subsidy given to the N. N. Semenov Institute of Chemical Physics to implement the state assignment on the topic “Fundamental studies of conversion processes of energetic materials and development of scientific grounds of controlling these processes” (Registration No. 0082-2016-0011).

References

1. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, S. N. Medvedev, V. S. Posvyanskii, F. S. Frolov, and S. M. Frolov. 2010. Simulation of the autoignition and combustion of *n*-heptane droplets using a detailed kinetic mechanism. *Russ. J. Phys. Chem. B* 4(6):995–1004.
2. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and S. M. Frolov. 2013. Mechanisms of the oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons: transition from C₁–C₁₀ to C₁₁–C₁₆. *Russ. J. Phys. Chem. B*. 7(2):161–169.
3. Basevich, V. Ya., and S. M. Frolov. 2007. Kinetics of “blue” flames in the gas-phase oxidation and combustion of hydrocarbons and their derivatives. *Russ. Chem. Rev.* 76(9):867–884.
4. Sergeev, S. S., S. M. Frolov, and B. Basara. 2017. Chislennoe modelirovanie sgoraniya i obrazovaniya vrednykh veshchestv v tsilindre dizelya s primeneniem detal'nogo kineticheskogo mekhanizma okisleniya *n*-geptana [Numerical modeling of combustion and pollutants formation in cylinder of diesel using a detailed kinetic mechanism of *n*-heptane oxidation]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 10(2):26–34.
5. Sergeev, S. S., S. M. Frolov, and B. Basara. 2017. Raschet sgoraniya v dizele s primeneniem detal'nogo kineticheskogo mekhanizma okisleniya topliva [Calculation of combustion in a Diesel engine with using of detailed mechanism of fuel oxidation]. *5th Colloquium (International) “Physics of Shock Waves, Combustion and Detonation” Proceedings*. Minsk. 157–158.
6. Hanjalic, K., M. Popovac, and M. Hadziabdic. 2004. A robust near wall elliptic relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD. *Int. J. Heat Fluid Fl.* 25:897–901.
7. Frolov, S. M., V. S. Ivanov, B. Basara, E. von Berg, and M. Suffa. 2012. Model' raspredelennykh probnykh chastits dlya rascheta dvukhfaznykh struynykh techeniy v dvi-gatelyakh vnutrennego sgoraniya [The model of distributed parcels for calculating two-phase spray flows in internal combustion engines]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 5:159–166.
8. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, F. S. Frolov, S. M. Frolov, and S. N. Medvedev. 2014. 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*. Moscow: TORUS PRESS. 14–25.

9. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, F. S. Frolov, A. A. Borisov, V. A. Smetanyuk, K. A. Avdeev, and A. N. Gots. 2009. Correlation between drop vaporization and self-ignition. *Russ. J. Phys. Chem. B* 3:333–347.

Received April 10, 2018

Contributors

Sergeev Sergey S. (b. 1985) — Candidate of Science in technology, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; sergeev.ss@mail.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Basevich Valentin Ya. (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; basevich@chph.ras.ru

Basara Branislav (b. 1964) — PhD, Doctor hab., Chief Developer, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; branislav.basara@avl.com

Priesching Peter (b. 1971) — PhD, Senior Project Leader, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; peter.priesching@avl.com