

БАЗА ДАННЫХ ДЛЯ РАСЧЕТА ФУНКЦИЙ  
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ САЖЕВЫХ ЧАСТИЦ  
ПО РАЗМЕРАМ В ДВИГАТЕЛЯХ  
ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ

С. Н. Медведев<sup>1</sup>, П. А. Власов<sup>1</sup>, С. М. Фролов<sup>1</sup>, В. Basara<sup>2</sup>,  
Р. Priesching<sup>2</sup>, М. Suffa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ИХФ РАН

г. Москва, Россия

<sup>2</sup>AVL LIST GmbH

Graz, Austria

В скором времени в европейском экологическом стандарте Euro-VI вводится новое ограничение — число частиц конденсированной фазы в выхлопных газах автомобильных двигателей не должно превышать  $6 \cdot 10^{11}$  шт./км [1]. В отработавших газах двигателей внутреннего сгорания (ДВС) конденсированная фаза представлена, прежде всего, частицами сажи с адсорбированными летучими органическими соединениями и полициклическими ароматическими углеводородами (ПАУ), а также неорганическими сера- и азотсодержащими соединениями и, в меньшей степени, микрокаплями конденсата летучих органических и неорганических соединений. Поэтому в связи с новыми ограничениями разработчики ДВС активно работают, с одной стороны, над проектированием фильтров, конверторов и дожигателей частиц, а с другой — над дальнейшим совершенствованием рабочего процесса, нацеленным на существенное снижение эмиссии сажи.

Совершенствование рабочего процесса в ДВС сегодня невозможно без глубокого понимания всех физико-химических процессов, сопутствующих сажеобразованию в цилиндре двигателя. Для этого необходимы модели, которые способны предсказывать не только выход сажи в процессах пиролиза, окисления и горения, но и распре-

деление частиц сажи по размерам в отработавших газах. Разработка таких моделей — очень непростая задача, так как ее решение требует детального моделирования процесса сажеобразования в цилиндре двигателя с описанием различных механизмов появления зародышей, их роста, формы и структуры кластеров, а также различных химических процессов с их участием, включая гомогенные и гетерогенные реакции.

В ИХФ РАН в течение длительного времени разрабатывается детальная модель сажеобразования (ДМС) при пиролизе и частичном окислении углеводородов [1, 2]. Кроме всех известных каналов образования и роста зародышей сажи эта модель включает кинетические механизмы пиролиза и окисления высших углеводородов вплоть до гексадекана, а также реакции с участием ПАУ. Важнейшее достоинство этой модели заключается в том, что она в целом удовлетворительно описывает все имеющиеся экспериментальные данные по выходу сажи при пиролизе и частичном окислении различных углеводородов, полученные на ударных трубах. Другое ее достоинство — это то, что она оперирует с такими характеристиками конденсированной фазы, как числовая концентрация частиц  $n_{\Sigma}$ , диаметр частиц  $d$ , средний диаметр частиц  $\bar{d}$  и распределение частиц по размерам  $n(d)$ . Отмеченные достоинства позволяют рассматривать эту модель как инструмент для решения поставленной выше задачи — определения числа частиц сажи в отработавших газах ДВС.

Следуя этой идее, на основе ДМС мы разработали базу данных для расчета функций распределения (ФР) сажевых частиц по размерам применительно к ДВС. База данных оформлена в виде таблиц и может использоваться в многомерных расчетах рабочего процесса. Ниже приведены краткое описание базы данных и пример ее применения.

В табл. 1 представлен перечень условий, для которых проведены расчеты сажеобразования по ДМС и сформирована база данных. Здесь  $T$  — температура,  $P$  — давление,  $\Phi$  — коэффициент избытка горючего,  $\theta$  — массовая доля отработавших газов в смеси,  $\tau$  — время процесса. Отметим, что на нижнем пределе температур  $T < 1300\text{--}1400$  К и при  $\Phi < 2$  за время  $\tau = 3$  мс сажа в расчетах практически не образовывалась, а на верхнем пределе  $T > 2400\text{--}2800$  К вся образованная сажа окислялась.

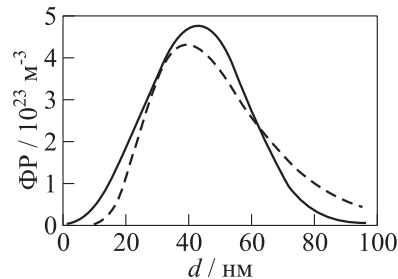
**Таблица 1** Перечень условий, включенных в базу данных ИХФ РАН

Горючее	$T$ , К	$P$ , атм	$\Phi$	$\theta$	$\tau$ , мс
$\text{CH}_4$	1300–2700	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	1400–2600	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$\text{C}_3\text{H}_8$	1300–2800	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$n\text{-C}_7\text{H}_{16}$	1300–2800	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$i\text{-C}_8\text{H}_{18}$	1300–2400	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$	1300–2700	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3
$n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$	1300–2800	1–240	2–4	0,0–0,6	0–3

Расчетные распределения частиц по размерам аппроксимировались логнормальной ФР:

$$n(d) = \frac{n_{\Sigma}}{\sqrt{2\pi} \sigma d} \exp\left(-\frac{\ln^2(d/\bar{d})}{2\sigma^2}\right),$$

где  $\sigma$  — дисперсия ФР. На рис. 1 представлен пример сравнения логнормальной ФР с результатами прямых расчетов по ДМС для богатой смеси  $n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$ –воздух с  $\Phi = 4$  при  $P = 100$  атм,  $T = 2200$  К и  $\theta = 0,6$  в момент времени  $\tau = 3,0$  мс. Видно, что в целом принятая аппроксимация вполне удовлетворительна. В отдельных случаях, когда расчетные ФР значительно отличались от



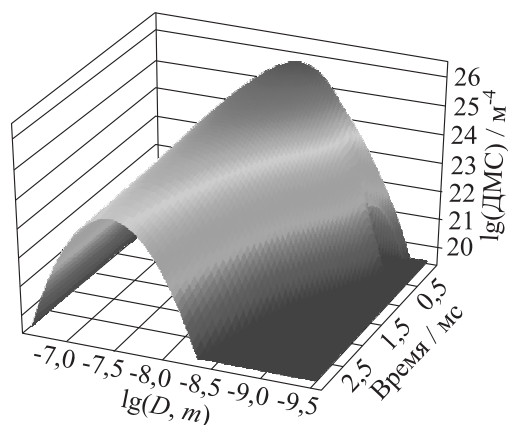
**Рис. 1** Иллюстрация точности аппроксимации ФР сажевых частиц по размерам, полученной прямым расчетом по ДМС (сплошная кривая), с помощью логнормальной ФР (штриховая кривая); горючее:  $n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$ ,  $\Phi = 4$ ,  $P = 100$  атм,  $T = 2200$  К,  $\theta = 0,6$ ,  $t = 3,0$  мс

**Таблица 2** Фрагмент базы данных для логнормального распределения сажевых частиц по размерам (горючее:  $\text{CH}_4$ ,  $\Phi = 2$ ;  $P = 180$  атм;  $T = 1700$  К,  $\theta = 0,2$ ,  $0 \leq \tau \leq 3$  мс)

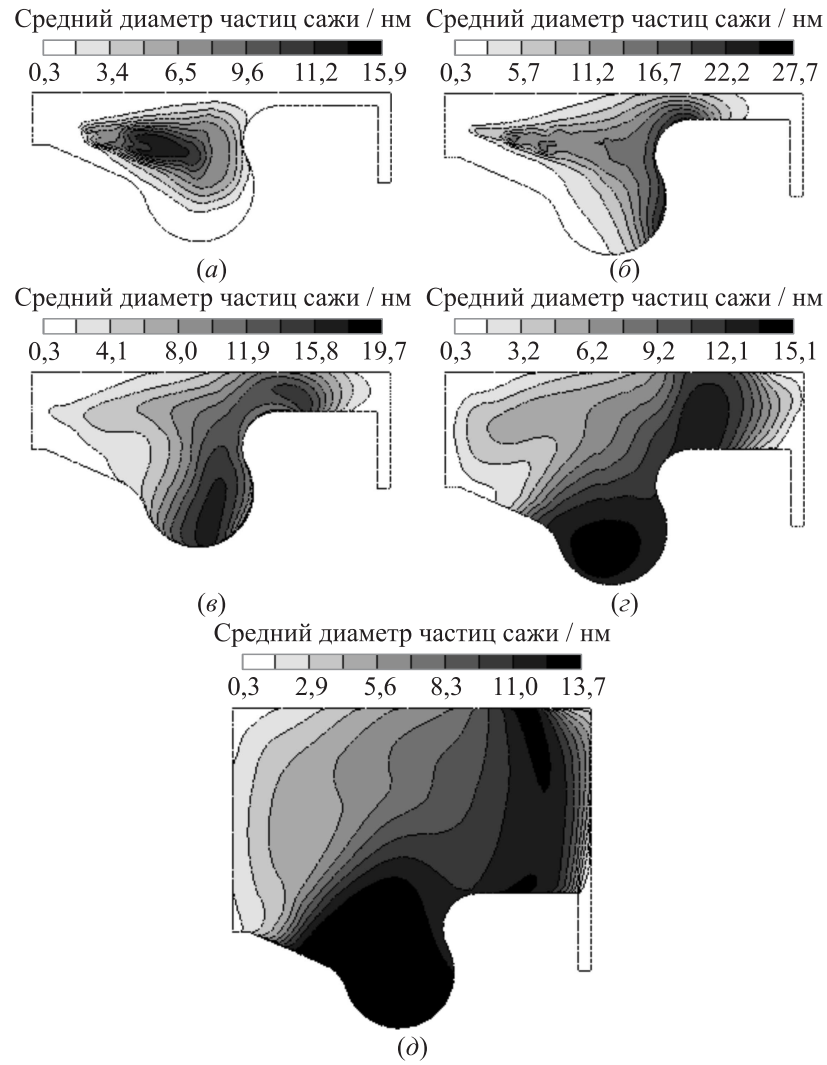
Время, мс	$\bar{d}$ , м	$n_{\Sigma}$ , $\text{м}^{-3}$	$\sigma$
0,0	$3,72 \cdot 10^{-9}$	$0,0 \cdot 10^{00}$	0,0
0,5	$9,87 \cdot 10^{-9}$	$3,2 \cdot 10^{19}$	0,417
1,0	$1,40 \cdot 10^{-8}$	$4,5 \cdot 10^{19}$	0,609
1,5	$1,65 \cdot 10^{-8}$	$3,9 \cdot 10^{19}$	0,693
2,0	$1,85 \cdot 10^{-8}$	$3,4 \cdot 10^{19}$	0,740
2,5	$1,99 \cdot 10^{-8}$	$3,0 \cdot 10^{19}$	0,765
3,0	$2,14 \cdot 10^{-8}$	$2,6 \cdot 10^{19}$	0,785

логнормального распределения, параметры логнормальной ФР  $n_{\Sigma}$ ,  $\bar{d}$  и  $\sigma$  получали линейной интерполяцией между ближайшими точками в базе данных.

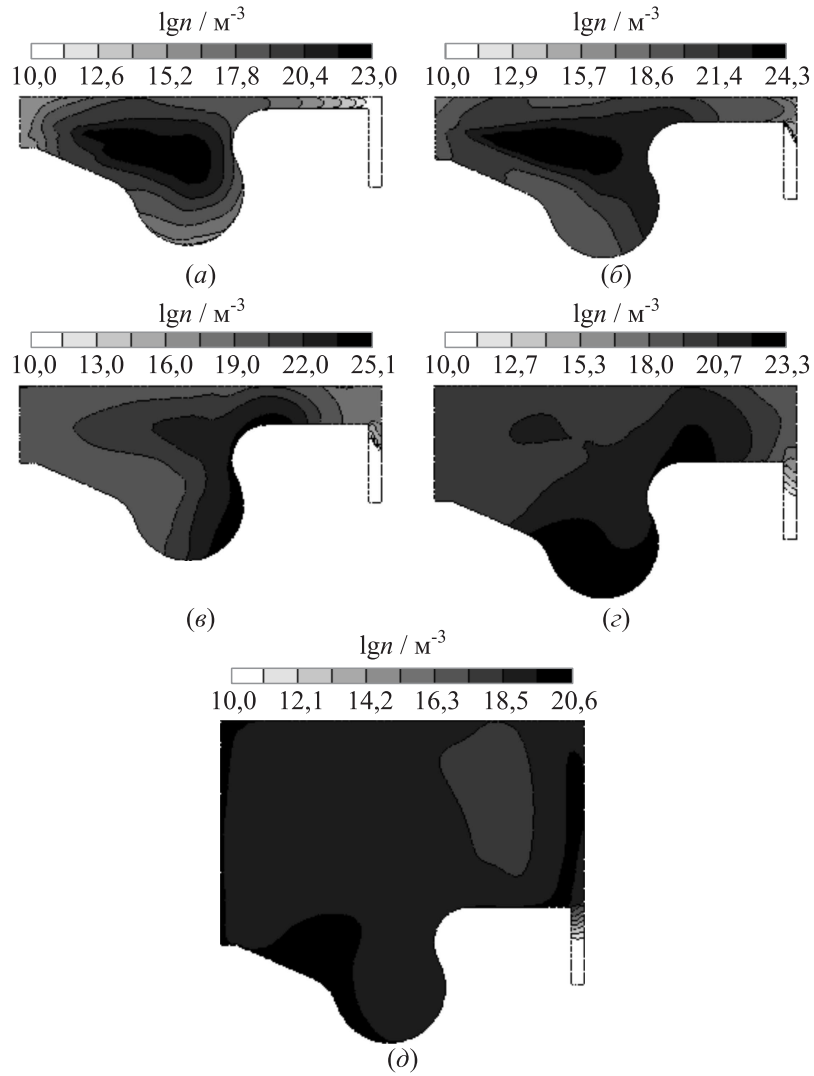
В табл. 2 представлен фрагмент базы данных для ФР сажевых частиц по размерам применительно к метановоздушной смеси, разбавленной отработавшими газами ( $\theta = 0,2$ ) при  $\Phi = 2$ ,  $P = 180$  атм и  $T = 1700$  К, а на рис. 2 показана эволюция логнормальной ФР



**Рис. 2** Эволюция логнормальной ФР для н-гептановоздушной смеси во времени при  $\Phi = 4$ ,  $P = 10$  атм,  $T = 2000$  К и  $\theta = 0$



**Рис. 3** Расчетная эволюция полей среднего диаметра частиц сажи в малоразмерном дизеле; угол поворота коленчатого вала: (а)  $\varphi = 728^\circ$ ; (б)  $735^\circ$ ; (в)  $740^\circ$ ; (г)  $750^\circ$ ; (д)  $\varphi = 770^\circ$



**Рис. 4** Расчетная эволюция полей числовой концентрации частиц сажи (логарифмическая шкала) в малоразмерном дизеле; угол поворота коленчатого вала: (а)  $\varphi = 728^\circ$ ; (б)  $735^\circ$ ; (в)  $740^\circ$ ; (г)  $750^\circ$ ; (д)  $\varphi = 770^\circ$

для н-гептановоздушной смеси во времени при  $\Phi = 4$ ,  $P = 10$  атм,  $T = 2000$  К и  $\theta = 0$ . При построении рис. 2 использована соответствующая таблица из базы данных. Видно, что для условий рис. 2 средний диаметр сажевых частиц с течением времени увеличивается, достигая 41 нм.

Разработанную базу данных применили при трехмерном расчете рабочего процесса в малоразмерном дизеле с помощью вычислительного пакета AVL FIRE<sup>®</sup> [3]. На рис. 3 и 4 представлены некоторые результаты расчета в виде полей среднего диаметра частиц сажи (см. рис. 3) и числовой концентрации (см. рис. 4) в поперечном сечении камеры сгорания дизеля при разных углах поворота коленчатого вала  $\varphi$ : от  $728^\circ$  до  $770^\circ$ . Максимальный средний диаметр сажевых частиц в этом расчете ( $\bar{d} \approx 28$  нм при  $n_\Sigma \approx 10^{24}$  м<sup>-3</sup>) наблюдается после воспламенения струи жидкого топлива ( $\varphi = 735^\circ$ ) в выемке поршня в окрестности стенки, что связано с большим переобогащением топливной смеси в этой области камеры. Максимальная локальная числовая концентрация сажевых частиц ( $n_\Sigma \approx 10^{25}$  м<sup>-3</sup>) наблюдается при  $\varphi = 740^\circ$  в той же области камеры, однако средний размер сажевых частиц здесь к этому моменту времени уменьшился до  $\bar{d} \approx 10$  нм. С течением времени средний размер сажевых частиц в цилиндре двигателя выходит на уровень 4–14 нм, а числовая концентрация сажевых частиц — на уровень  $n_\Sigma \approx 10^{18}$ – $10^{20}$  м<sup>-3</sup>.

Таким образом, в ИХФ РАН создана уникальная база данных для расчета функций распределения сажевых частиц по размерам применительно к ДВС. База данных оформлена в виде электронных таблиц и может использоваться в многомерных расчетах рабочего процесса. В работе представлено краткое описание базы данных и приведен пример ее применения в трехмерном расчете рабочего процесса дизеля.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 11-08-01168 и 11-08-97548-р-центр).

## Литература

1. Agafonov, G. L., V. N. Smirnov, and P. A. Vlasov. 2011. Shock tube and modeling study of soot formation during the pyrolysis and oxidation of

- a number of aliphatic and aromatic hydrocarbons. *Proc. Combust. Inst.* 33(1): 625–32.
2. Басевич В. Я., Власов П. А., Скрипник А. А., Фролов С. М. Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания // Горение и взрыв / Под ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2008. Вып. 1. С. 40–43.
  3. AVL FIRE<sup>®</sup> — Computational Fluid Dynamics for Conventional and Alternative Powertrain Development. <https://www.avl.com/fire>.