

Редуцированный механизм горения бензина и образования загрязняющих веществ в двигателях

Введение

В двигателях внутреннего сгорания протекает ряд процессов: искровое зажигание, турбулентное распространение пламени, образование NO_x и сажи, стук. Каждый процесс чувствителен к химическому составу смеси. При моделировании эти химические процессы следует воспроизводить как можно точнее. Для обеспечения этой возможности были разработаны детальные химические механизмы горения. Единственная проблема заключается в использовании столь больших химических механизмов (> 1000 веществ, > 10000 реакций) в полномасштабных гидродинамических расчетах.

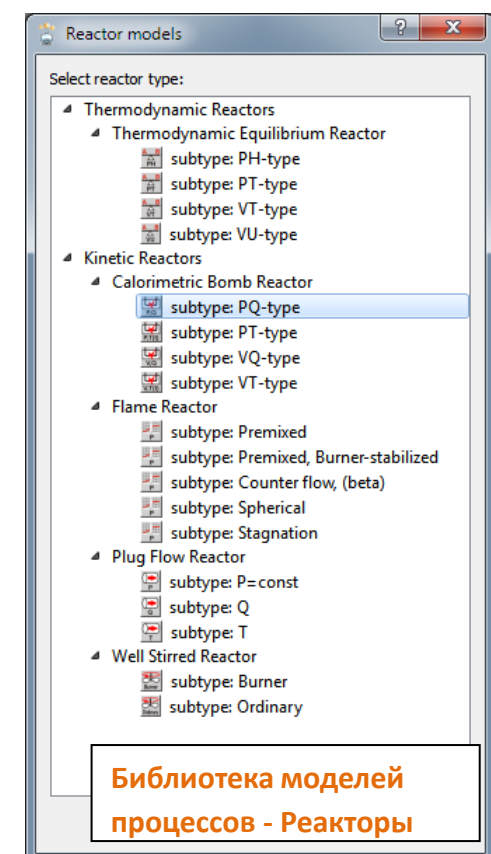
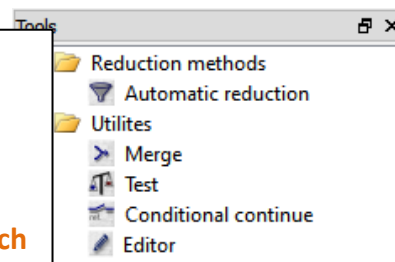
Постановка задачи

Требуется уменьшить размер механизма горения PRF [1], сохраняя отклонение времени задержки воспламенения, температуру в турбулентном пламени и концентрацию NO_x, предсказанную с детальными и сокращенными механизмами, в диапазоне 10%. Целевые условия: стехиометрическая смесь 80% изооктана + 20% н-гепатана, диапазон начальных температур 600 - 1500 К, диапазон давлений 20 - 40 атм.

Решение задачи в Chemical Workbench

Для уменьшения механизма в программе Mechanism Workbench использовался инструмент автоматического редуцирования с высокоэффективным алгоритмом Кинтех Лаб. Сокращались как избыточные вещества, так и реакции.

Операции с детальным и редуцированным механизмами в Mechanism Workbench

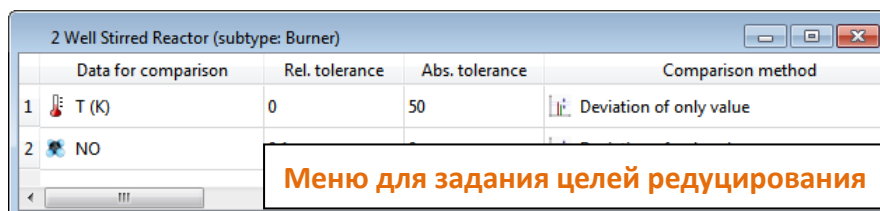


Следующие процессы горения были включены как важные при редуцировании:

- Воспламенение (модель процесса - калориметрическая бомба при постоянном давлении и адиабатических условиях - CBR_PQ)
- Турбулентное горение и образование загрязняющих веществ (модель процесса – реактор идеального смешения - WSR_Burner)

Были выбраны следующие Цели редуцирования:

- Для воспламенения
 - Задержка воспламенения, максимальное отклонение 10%
 - Температура, максимальное отклонение 100K
- Для турбулентного горения
 - Температура, максимальное отклонение 100K
 - Концентрация NO, максимальное отклонение 100K



	Data for comparison	Rel. tolerance	Abs. tolerance	Comparison method
1	T (K)	0	50	Deviation of only value
2	NO			

Меню для задания целей редуцирования

Результаты

На Intel Core i7 редуцирование механизма было выполнено за 20 часов. Оно не требовало мониторинга во время выполнения и выполнялось автоматически.

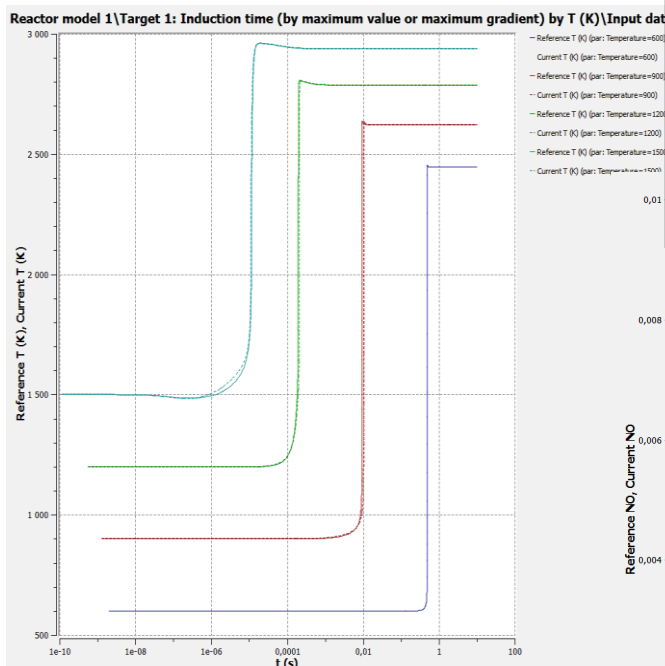
Исходный механизм включал

- 484 вещества
- 19341 реакций

После редуцирования механизм составил

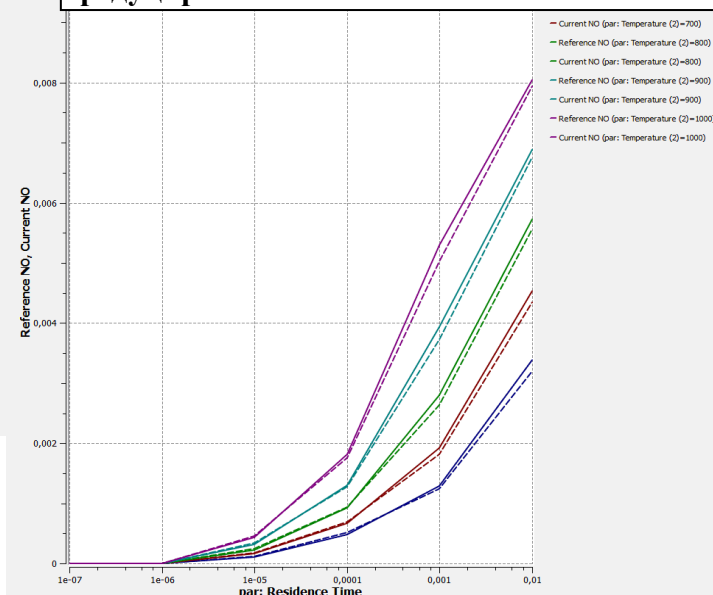
- 114 веществ
- 284 реакций

Редуцированный механизм воспроизводит требуемые характеристики горения (время задержки воспламенения, профили температуры/тепловыделения, NOx) с требуемой точностью при заданных условиях работы двигателя.



Поведение редуцированного механизма

температурный профиль / время задержки воспламенения и концентрации NOx, предсказанные с помощью детального и редуцированного механизмов



Следующие шаги

- Редуцированный механизм может храниться в формате CHEMKIN и использоваться непосредственно в любом пакете для гидродинамического моделирования (CFD) или использоваться для расчета времени задержки зажигания и таблиц скорости ламинарного пламени для моделей, доступных в CFD кодах.
- Для систем стратифицированного заряда двигателей можно указать диапазон стехиометрических условий, чтобы редуцированный механизм работал как для бедных, так и для богатых топливно-воздушных смесях.
- CO, ПАУ и несгоревшие углеводороды (UHC) могут быть добавлены в качестве целей редуцирования механизма для расширения возможностей редуцированного механизма описывать углеводородные выбросы двигателей.
- Подготовить проект по редуцированию детального механизма моделирования дизельных двигателей.

Литература

[1] E. Ranzi, A. Frassoldati, R. Grana, A. Cuoci, T. Faravelli, A.P. Kelley, C.K. Law, Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels, Progress in Energy and Combustion Science, 38 (4), pp. 468-501 (2012), DOI: 10.1016/j.pecs.2012.03.004