

Редуцированный механизм горения дизельного топлива в двигателе

Введение

В дизельных двигателях протекает множество процессов: самовоспламенение, диффузионное турбулентное горение, образование токсичных веществ и сажи. Каждый процесс чувствителен к химическому составу смеси и присущим ему химическим реакциям. При моделировании эти химические процессы необходимо моделировать с высокой точностью. Для обеспечения этой возможности были разработаны детальные химические механизмы горения дизельного топлива. Единственная проблема заключается в том, как использовать такие огромные химические механизмы (> 1000 веществ, > 10000 реакций) в гидродинамическом моделировании процессов горения (CFD).

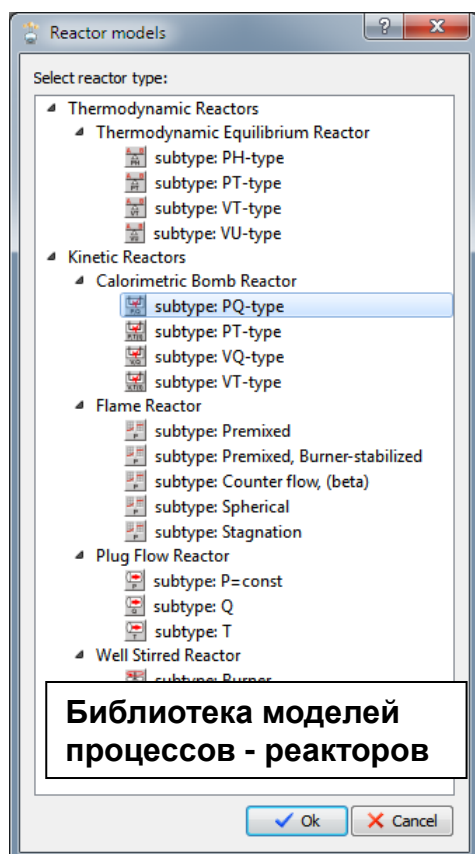
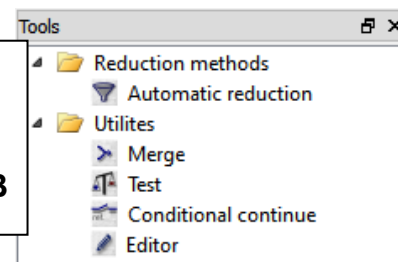
Постановка задачи

Требуется сократить (редуцировать) размер механизма горения суррогата дизельного топлива - гептана [1], при этом предельное отклонение времени задержки воспламенения и температуры, предсказанные с помощью детального и редуцированного механизмов, не должны превышать соответственно 10% и 100 К при следующих условиях: стехиометрическая смесь н-гептана и воздуха, диапазон начальных температур 600 - 1500 К, диапазон давлений 1-40 атм.

Решение задачи в Chemical Workbench

Для редуцирования механизма в Mechanism Workbench использовался инструмент **Automatic Reduction** с использованием высокоэффективного алгоритма Kintech Lab. Удалялись как избыточные для указанных условий вещества, так и реакции.

**Операции над
детальным и
редуцированным
механизмами в CWB**



Следующие процессы горения рассматривались при редуцировании

- Самовоспламенение (соответствующая модель процесса – Calorimetric Bomb Reactor при постоянном давлении и адиабатических условиях – CBR_PQ)

Для редуцирования выбраны следующие цели:

- Для самовоспламенения
 - Время задержки воспламенения, максимальная привнесённая ошибка 10% Temperature (maximum introduced error 100K)
 - Температура, максимальная привнесённая ошибка 100K

Задание целей редуцирования

	Data for comparison	Rel. tolerance	Abs. tolerance	Comparison method
1	T (K)	0	50	Deviation of only value
2	NO	0.1	0	Deviation of only value

Результаты

На Intel Core i7 редуцирование механизма было выполнено за 20 часов. Он не требовал мониторинга во время выполнения и выполнялся автоматически.

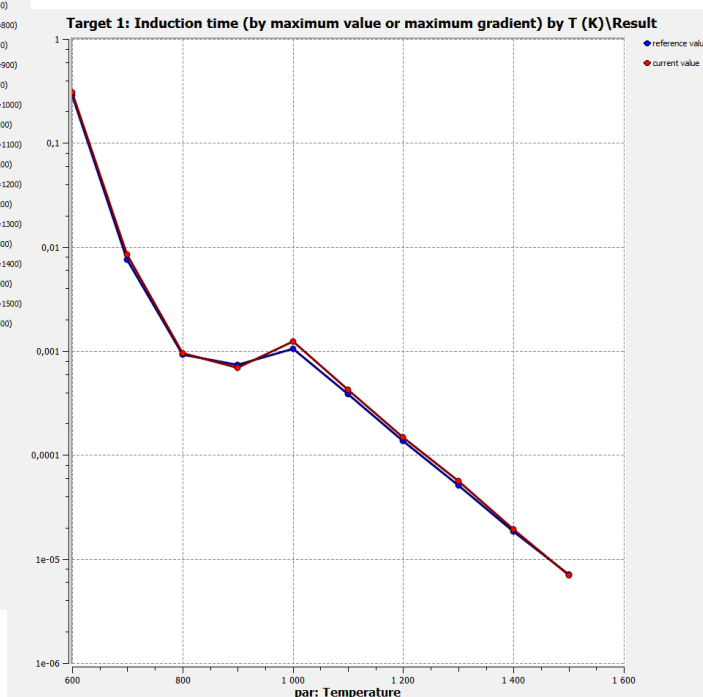
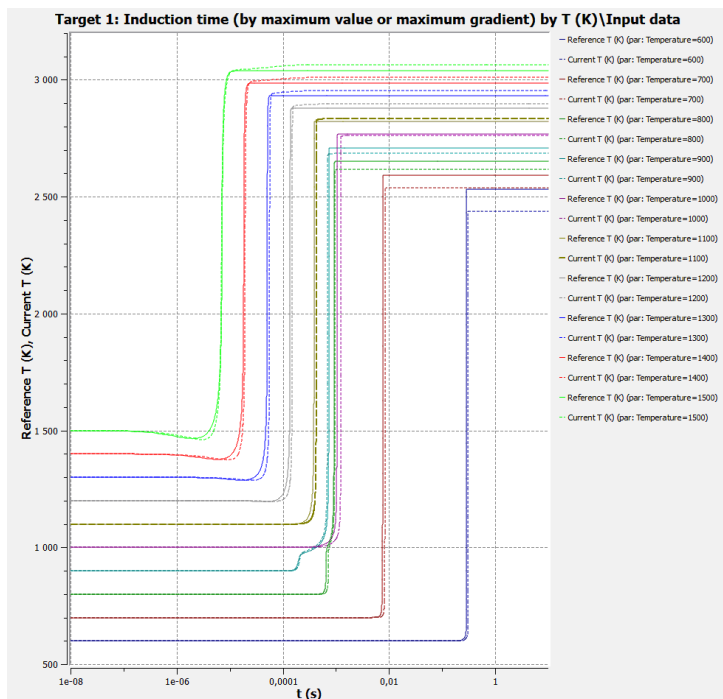
Начальный механизм включал

- 561 вещество
- 5059 реакций (прямых)

После редуцирования механизм включает

- 111 веществ
- 249 реакций (прямых)

Редуцированный механизм способен имитировать требуемые характеристики горения (время задержки зажигания, профили температуры / тепловыделения) с требуемой точностью при заданных условиях.



Поведение редуцированного механизма

температурный профиль / время задержки зажигания и концентрации NO_x, предсказанные с помощью детального и редуцированного механизмов

Следующие шаги

Этот пример может быть исследован дальше

1. Редуцированный механизм может быть сохранён в формате CHEMKIN и использован непосредственно в любом программном обеспечении для гидродинамического моделирования ДВС или использоваться для расчета времени задержки воспламенения и таблиц скорости ламинарного пламени для моделей горения в двигателях, доступных в этом же программном обеспечении.
2. NO_x, CO, ПАУ и несгоревшие углеводороды (УНС) могут быть добавлены в качестве целей при редуцировании механизма для расширения возможностей уменьшенного механизма для оценки выбросов углекислого газа из дизельных двигателей
3. Подготовить новый проект по редуцированию детального механизма для моделирования бензиновых двигателей

Литература

[1] Curran, H. J., P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation" Combustion and Flame 114:149-177 (1998)