

УДК 621.1-1/9

С.А. Плотников, Ш.В. Бузиков, П.Н. Черемисинов
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СМЕСЕВОГО ТОПЛИВА
НА МЕХАНИЗМЫ ПРОЦЕССА СГОРАНИЯ
ДЛЯ АВТОМОБИЛЬНЫХ И ТРАКТОРНЫХ ДВС

Вятский государственный университет

Использование смесевых топлив ставит задачу определения их влияния на процесс сгорания. Ее решение с помощью химической кинетики позволяет выяснить некоторые аспекты, крайне важные с точки зрения организации рабочего процесса дизеля. В связи с этим актуальной является разработка теоретических предпосылок определения механизма сгорания смесевого топлива. С целью определения влияния смесевого топлива на механизмы процесса сгорания проведены теоретические исследования кинетики процессов сгорания, в рамках которых использованы аналитические зависимости известных уравнений определения скоростей химических реакций. Анализ полученных данных показал, что добавка в топливо доли рапсового масла приводит к увеличению на эту долю давления в цилиндре дизеля, снижению константы скорости химической реакции при сгорании смесевого топлива и жесткости процесса сгорания, а также максимального давления цикла дизеля. Для подтверждения теоретических предпосылок необходимо рассмотрение экспериментальных индикаторных диаграмм дизеля.

Ключевые слова: смесевое топливо, процесс сгорания, рапсовое масло, давление цикла, индикаторная диаграмма.

Использование смесевых топлив ставит перед исследователями задачу определения их влияния на процесс сгорания, которая в настоящее время крайне мало освещена в научной литературе. Рассмотрение этой проблемы с помощью химической кинетики позволяет изучить некоторые аспекты, крайне важные с точки зрения организации рабочего процесса двигателя [1]. Разработанные модели не позволяют достаточно точно описать химические процессы при использовании в качестве топлива рапсового масла с присадками целенаправленного действия, что объясняется их неоднородным химическим составом [2-6]. С целью определения влияния смесевого топлива на механизмы процесса сгорания проведены теоретические исследования кинетики процессов сгорания. Смесевое топливо, состоящего из ДТ, рапсового масла и присадки целенаправленного действия, впрыскивается в камеру сгорания дизеля. При впрыскивании смесевого топлива происходят изменения показателей процесса сгорания, характеризующиеся смещениями кривой давления на индикаторных диаграммах: как по абсциссе, так и по ординате. Данные изменения обусловлены влиянием рапсового масла, вызывающим изменения структуры и механизма протекания гетерогенных химических реакций, связанных с его окислением. Эти обстоятельства можно объяснить некоторыми особенностями химической кинетики протекающих реакций на основе сложных химических превращений в виде цепочки последовательности элементарных актов [7,8]. Горение смесевого топлива в камере сгорания дизеля обусловлено сложным физико-химическим процессом его взаимодействия с окислителем, сопровождающимся изменениями показателей тепловыделения. Этот процесс сопровождается рядом физических явлений: испарение, диффузия паров воздуха и продуктов сгорания, движение газа и тепло- массообмен. Согласно фундаментальной теории химической кинетики, скорость сгорания определяется как скорость химической реакции. На скорость сгорания смесевого топлива, в связи с этим, будет оказывать влияние концентрация рапсового масла.

Химический процесс сгорания впрыснутого смесевого топлива можно рассмотреть на принципах деструкции и рекомбинации молекул, т.е., уменьшения их молекулярных масс и размеров, а также перераспределения атомов между молекулами. Рассмотрим данный про-

цесс более подробно. Прежде всего, высокое давление и температура свежего заряда в камере сгорания в конце такта сжатия приводит к деструкции молекул впрыскиваемого смесового топлива, т.е., к уменьшению их молекулярных масс и размеров [7]. Процесс деструкции молекул смесового топлива происходит по цепному механизму. С нарастанием давления и температуры в камере сгорания дизеля процессы рекомбинации молекул впрыснутого смесового топлива начинают происходить быстрее, чем процессы деструкции. Это обстоятельство можно выразить следующим условием:

$$\alpha - \beta > 0, \quad (1)$$

где α – вероятность рекомбинации молекул впрыснутого смесового топлива, %;

β – вероятность деструкции молекул впрыснутого смесового топлива, %.

При изменении внешних факторов (температура и давление) происходит изменение величин α и β , однако α в большей степени зависит от температуры, чем β . Этот факт объясняется тем, что вероятность деструкции молекул впрыснутого топлива не связана с энергией их активации [8]. В результате химических реакций рекомбинации молекул впрыснутого смесового топлива получается a количества молекул конечного продукта, поэтому скорость рекомбинации будет выглядеть:

$$\omega = a\alpha n = a\alpha \frac{\omega_0}{\alpha - \beta} [\exp((\alpha - \beta)\varphi) - 1], \quad (2)$$

где n – количество рекомбинированных молекул впрыснутого смесового топлива;

φ – угол поворота коленчатого вала дизеля, град. п.к.в.;

ω_0 – скорость рекомбинации молекул впрыснутого смесового топлива;

a – количество молекул конечного продукта, образующегося в результате рекомбинации молекул впрыснутого смесового топлива.

Разность величин α и β является фактором определения момента и степени самоускорения химической реакции. Согласно выражению (1), реакция протекает с положительным ускорением $\frac{d\omega}{d\varphi} > 0$, что позволяет выделить две ее основные стадии. На первой из них скорость химической реакции небольшая, и ее невозможно измерить. Химическая реакция с такой скоростью продолжается в течении времени τ_i угла п.к.в., равного φ_i , называемого периодом индукции теплового взрыва [9]. На второй стадии скорость химической реакции увеличивается до значений $\omega = \max$. Таким образом, период индукции теплового взрыва – это угол п.к.в. за время τ_i , которое необходимо для накопления во впрыснутой порции смесового топлива такого количества рекомбинированных молекул, при котором скорость реакции принимает $\omega = \min$. В связи с этим будет наблюдаться увеличение общего количества рекомбинированных молекул впрыснутого топлива. Этот факт можно объяснить тем, что превышение давления в камере сгорания дизеля в процессе крекинга имеет следующий вид:

$$\frac{P}{P_0} = \frac{n}{n_0}, \quad (3)$$

где P_0 – текущее давление в камере сгорания дизеля в момент времени τ_i угла п.к.в., равного φ_i , без рапсового масла в топливе, МПа;

n_0 – количество рекомбинированных молекул впрыснутого топлива без рапсового масла, шт.

Анализ выражения (3) показывает пропорциональную зависимость изменения ординаты кривой давления на индикаторной диаграмме от количества рекомбинированных молекул впрыснутого смесового топлива. Поскольку количество рекомбинированных молекул впрыснутого смесового топлива находится в прямо пропорциональной зависимости от концентрации рапсового масла, можно определить изменение давления на индикаторной диаграмме. Отсюда следует, что добавка в топливо доли рапсового масла приведёт к увеличению на эту самую долю давления в цилиндре дизеля. Для объяснения дальнейших особенностей изменения кривых давления на индикаторных диаграммах необходимо проанализировать изменение константы скорости химической реакции, как следствие произошедшей деструкции молекул впрыснутого смесового топлива.

В связи с этим рассмотрим два случая:

- 1) непосредственное влияние деструкции молекул впрыснутого смесового топлива на протекающие химические реакции;
- 2) косвенное влияние уменьшения размеров молекул впрыснутого смесового топлива на энергию активации химической реакции их окисления.

Согласно кинетической теории газов, предэкспоненциальный множитель K_0 характеризует количество взаимодействий молекул смесового топлива с окислителем [10]. В связи с этим уравнение Аррениуса принимает следующий вид:

$$\frac{z_E}{z_0} = \exp \left[-\frac{E}{RT} \right], \quad (4)$$

где E – энергия активации впрыснутой порции смесового топлива, Дж/моль;

R – универсальная газовая постоянная, $R=8,3144598(48)$, Дж/(моль·К);

T – текущая температура заряда в цилиндре дизеля, К;

z_E – количество активных взаимодействий молекул смесового топлива;

z_0 – количество полных взаимодействий молекул смесового топлива.

На количество активных и полных столкновений молекул смесового топлива, впрыснутого в камеру сгорания дизеля, будет оказывать влияние химическая реакция окисления. Кинетика данного процесса обуславливается многомолекулярной химической реакцией, состоящей из совокупности элементарных стадий, т.е., различных реакций имеющих, в основном, би- и тримолекулярный характер [11]. Большинство химических реакций горения смесовых топлив являются сложными. Порядок таких сложных химических реакций может быть дробным и не совпадать с молекулярностью реакций, определяемых стехиометрическими уравнениями [11]. Таким образом, определение самого порядка химической реакции, в соответствии с методом Вант-Гоффа, справедливо только для элементарных реакций стехиометрических смесей. Сложные химические реакции протекают как би- и тримолекулярные, это происходит, когда определяющая часть реакции – медленная [11]. Поскольку в состав смесового топлива входят три компонента: дизельное топливо (ДТ), рапсовое масло и присадка целенаправленного действия, имеет смысл рассмотреть сложную химическую реакцию как тримолекулярную. При рассмотрении тримолекулярной химической реакции начинают проявляться силы отталкивания между молекулами. При этом нормальная составляющая кинетической энергии взаимодействующих частиц переходит в потенциальную. Энергия затрачивается на деструкцию первоначальных связей в молекулах [12]. Эти связи разрушаются при условии возникновения потенциальной энергии, превышающей энергию активации:

$$\frac{m u_n^2}{2} \geq E, \quad (5)$$

где m – приведенная масса молекул, кг;

u_n – нормальная составляющая относительной скорости молекул, км/ч.

Скорость реакции, с учётом уравнения Аррениуса, выглядит следующим образом:

$$z_E = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \pi \sigma_{1,2,3} n_{A1} n_{A2} n_{A3} \exp \left[-\frac{E}{RT} \right] \quad (6)$$

где k – константа скорости химической реакции при температуре T ;

$\sigma_{1,2,3}$ – сечение взаимодействия молекул;

n_{A1} , n_{A2} , n_{A3} – концентрации молекул $A1$, $A2$ и $A3$, соответственно.

Множитель $\exp \left[-\frac{E}{RT} \right]$ представляет собой долю молекул, скорость которых превышает минимальную скорость u_n . Рассматривая взаимодействие молекул, необходимо понимать, что не все взаимодействия, при которых кинетическая энергия превышает энергию активации, могут привести к химическим реакциям. Для протекания химической реакции необходимо, чтобы взаимодействующие молекулы были сориентированы должным образом между собой. Тогда константа скорости химической реакции будет выглядеть:

$$K = P \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \sigma_{1,2,3} \exp \left[-\frac{E}{RT} \right]. \quad (7)$$

где P – стерический фактор, $P \in [1, 10^{-7}]$.

После прохождения порции топливного заряда через фазу деструкции средний размер молекул уменьшается, вследствие этого должно уменьшаться и сечение $\sigma_{1,2,3}$ [8]. Оценку уменьшения этого параметра можно сделать на основе предположения о том, что параметр уменьшается на долю $1/q$. Тогда сечение взаимодействия молекул запишется:

$$\sigma_{1,2,3} = \left[\left(1 - \frac{1}{q} \right) \sigma_0 \right]^2, \quad (8)$$

где σ_0 – сечение взаимодействия молекул без действия добавки рапсового масла.

Анализ зависимости (8) показывает, что соответствующее увеличение тепловой скорости молекул не может компенсировать уменьшение константы скорости химической реакции. Действительно, если считать, что уменьшение приведённой массы молекул будет аналогичным, то:

$$m = \left(1 - \frac{1}{q} \right) m_0, \quad (9)$$

где m_0 – приведенная масса молекул без добавки рапсового масла, кг.

Данная зависимость (9) показывает, что с уменьшением доли сечения молекул уменьшается и их масса. Имеет место также и увеличение средней тепловой скорости молекул после деструкции по сравнению с исходной величиной \bar{u}_0 . Данные обстоятельства приводят к соответствующему суммарному уменьшению предэкспоненциального множителя константы скорости химической реакции.

Рассмотренный механизм относится к разветвленным цепным химическим реакциям. Если параллельно или последовательно с этим механизмом будут протекать реакции и по тепловому механизму, то константа скорости химической реакции будет уменьшаться также и за счет увеличения энергии активации [10]. В этом случае уменьшение молекулярной массы будет приводить к увеличению энергии активации и, как следствие, к еще большему ингибированию последующих химических реакций. Поэтому, в зависимости от концентрации рапсового масла в смесевом топливе, на индикаторной диаграмме будет наблюдаться смещение точки отрыва давления от линии сжатия к более поздним углам п.к.в. Данное обстоятельство ряд авторов [8-12] объясняет увеличением периода индукции вспышки топливной смеси вследствие прошедшей серии предпламенных химических реакций. В уравнении Тодеса, с учетом выражения Аррениуса [6], адиабатический период индукции вспышки можно выразить через размеры сечения взаимодействия молекул и их средней тепловой скорости:

$$\tau = B (\sigma_{1,2,3} \bar{u})^{-1} e^{\frac{E}{RT}}, \quad (10)$$

где B – параметр связывающий скорости реакции, теплофизические свойства среды и условия теплоотдачи.

Из анализа выражения (10) видно, что с увеличением энергии активации и уменьшением произведения $\sigma_{1,2,3} \bar{u}$ должен увеличиться и период индукции теплового взрыва. Однако, как видно из проведенного выше анализа, увеличение средней тепловой скорости молекул происходит за счет уменьшения доли размеров сечения взаимодействия молекул. Тем самым произведение $\sigma_{1,2,3} \bar{u}$ незначительно изменяется по сравнению с энергией активации. Следовательно, период индукции вспышки топливной смеси, состоящей из ДТ, рапсового масла и присадки целенаправленного действия, в значительной мере зависит только от энергии активации последнего. Изменения угла наклона кривой давления относительно угла п.к.в. на индикаторной диаграмме объясняется изменениями процессов воспламенения в топливном заряде и формировании фронта пламени [9]. В связи с этим скорость распространения фронта пламени, по Зельдовичу, с учетом выражений для средней тепловой скорости молекул и доли размеров сечения взаимодействия молекул, будет иметь следующий вид:

$$U = \sqrt{\frac{4\lambda\sigma_{1,2,3}\bar{u}\exp^{-\frac{E}{RT}}n_i}{\rho Q(T_1 - T_0)} \left(\frac{RT_1}{E}\right)}, \quad (11)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);

n_i – концентрация компонентов, %;

ρ – плотность среды в камере сгорания дизеля, кг/м³;

T_0 – начальная температура среды в камере сгорания дизеля в ВМТ, К;

T_1 – температура горения газовой среды, К;

Q – низшая расчетная теплота сгорания смесового топлива, Дж/кг.

Как видно из соотношения (11), скорость сгорания прямо пропорциональна константе скорости химической реакции, уменьшающейся при сгорании смесового топлива по причинам, отмеченным ранее. Это приведет к тому, что в температурном поле уменьшится мощность источников тепла при сохранении теплоотдачи на прежнем уровне, что, в свою очередь, увеличит во времени процесс рекомбинации молекул топливного заряда и уменьшит все локальные градиенты и температуры. Можно ожидать снижения жесткости процесса сгорания и уменьшения максимального давления цикла дизеля. Уменьшение мощности источников тепловыделения, при сохранении интенсивности теплоотдачи на неизменном уровне, обуславливает уменьшение и максимальной, и средней температуры над поршнем.

Механизм действия можно будет подтвердить особенностями на индикаторной диаграмме. Отличия на индикаторной диаграмме позволят сделать вывод о том, что присутствие рапсового масла в прогретой топливной смеси вызывает крекинг молекул топлива в процессе впрыскивания. Для подтверждения данных теоретических предпосылок необходимо рассмотрение экспериментальных индикаторных диаграмм дизеля.

Библиографический список

1. Альтернативные виды топлива для двигателей [Текст] / А.Н. Карташевич и др. – Горки: БГСХА, 2013. – 376 с.
2. Плотников, С.А. Определение эксплуатационных показателей трактора «Беларус-922» при работе на смесовом топливе [Текст] / С.А. Плотников, Ш.В. Бузиков, В.С. Товстыка, П.Н. Черемисинов // Вестник Мордовского университета. 2018. Т. 28. № 3. С. 445-459.
3. Плотников, С.А. Определение влияния компонентного состава топливной смеси на кинематическую вязкость [Текст] / С.А. Плотников, Ш.В. Бузиков, И.С. Козлов // Общество. Наука. Инновации (НПК-2018): сборник статей XVIII Всероссийской научно-практической конференции: в 3-х т. Т. 1. – Киров, ВятГУ. 2018. С. 759-765.
4. Plotnikov, S.A. Analysis of pre-heated fuel combustion and heat-emission dynamics in a diesel engine [Текст] / S.A. Plotnikov, A.N. Kartashevich, S.V. Buzikov // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Т. 944. С. 012089.
5. Абрамзон, А.А. Поверхностно-активные вещества. Свойства и применение [Текст] / А.А. Абрамзон. – Л.: Химия, 1981. – 304 с.
6. Ребиндер, П.А. Поверхностные явления в дисперсных системах. Коллоидная химия. Избранные труды [Текст] / П.А. Ребиндер. – М.: Наука, 1978. – 368 с.
7. Дизели. Справочник [Текст] / под общ. ред. В.А. Ваншейдта, Н.Н. Иванченко, Л.Н. Коллерова. – Л.: Машиностроение, 1977. – 490 с.
8. Химия горения [Текст] / Под ред. У. Гардинера, мл. – М.: Мир, 1988. С. 216-217.
9. Зельдович, Я.Б. Теория теплового распространения пламени [Текст] / Я.Б. Зельдович, Д.А. Франк-Каменецкий // Теория горения и взрыва. – М.: Наука. 1981. С. 249.
10. Франк-Каменецкий, Д.А. К нестационарной теории теплового взрыва [Текст] // Теория горения и взрыва. – М.: Наука. 1981. С. 205-213.
11. Штиллер, В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика [Текст] / В. Штиллер. – М.: Мир. 2000. С. 28-29.
12. Шимонаев, Г.С. Общие закономерности горения. Теоретические основы химмотологии [Текст] / Г.С. Шимонаев. – М.: Химия. 1985. С. 130-137.