

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ В ДИЗЕЛЕ С УЧЕТОМ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА И САЖИ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ «ЛОГОС»*

И. В. Семенов¹, Р. С. Соломатин², В. В. Елесин³, М. Ю. Немцев⁴, С. М. Фролов⁵,
В. А. Сметанюк⁶, В. С. Иванов⁷, А. С. Козелков⁸, Р. Н. Жучков⁹

Аннотация: На базе пакета программ (ПП) ЛОГОС разработаны элементы цифрового двойника цилиндра дизеля для численного моделирования процессов самовоспламенения и горения дизельного топлива (ДТ) с учетом эмиссии сажи и оксидов азота. Для моделирования газовой фазы применяется RANS (Reynolds-Averaged Navier–Stokes) подход на основе модели турбулентности SST (Shear Stress Transport). Капли жидкого ДТ описываются с помощью метода квазичастиц, моделируются процессы дробления, испарения и столкновения их друг с другом. Для описания химических реакций используется разработанный глобальный кинетический механизм (ГКМ). Сажеобразование описывается с помощью макрокинетической модели, валидированной с использованием детального кинетического механизма (ДКМ). Для моделирования эмиссии оксида азота применяется термический механизм. Валидация разработанной вычислительной методики проведена с использованием серии экспериментальных и расчетных данных самовоспламенения и горения ДТ в цилиндре модельного дизеля с учетом процессов эмиссии сажи и оксида азота.

Ключевые слова: дизель; моделирование; глобальный кинетический механизм; самовоспламенение; горение; оксид азота; сажа; цифровой двойник

DOI: 10.30826/CE25190105

EDN: TJDQNC

Литература

1. Кульчицкий А. П. Токсичность автомобильных и тракторных двигателей. — Владимир: Изд-во ВлГУ, 2000. 256 с.
2. Yin Z., Liu S., Tan D., Wang B. A review of the development and application of soot modelling for modern diesel engines and the soot modelling for different fuels // *Process Saf. Environ.*, 2023. Vol. 178. P. 836–859.
3. Glarborg P., Alzueta M. U., Dam-Johansen K., Miller J. A. Kinetic modelling of hydrocarbon/nitric oxide interactions in a flow reactor // *Combust. Flame*, 1998. Vol. 115. P. 1–27.
4. Glarborg P., Kristensen P. G., Dam-Johansen K., Alzueta M. U., Millera A., Bilbao R. Nitric oxide reduction by non-hydrocarbon fuels implications for reburning with gasification gases // *Energ. Fuel.*, 2000. Vol. 14. P. 828–838.

*Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление №2 «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса- и зеттапроизводительности. Этап 2023–2025».

¹Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», ivsemenov@niisi.ras.ru

²Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», solomatin@niisi.ras.ru

³Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», elesin@niisi.ras.ru

⁴Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», nemtsev@niisi.ras.ru

⁵Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»; Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

⁶Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»; Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smetanuk@chph.ras.ru

⁷Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ivanov.vls@gmail.com

⁸Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, askozelkov@mail.ru

⁹Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, rnzchuchkov@vniief.ru

5. Skreiberg O., Kilpinen P., Glarborg P. Ammonia chemistry below 1400 K under fuel-rich conditions in a flow reactor // *Combust. Flame*, 2004. Vol. 36. P. 501–518.
6. Klippenstein S. J., Harding L. B., Glarborg P., Miller J. A. The role of NNH in NO formation and control // *Combust. Flame*, 2011. Vol. 158. P. 774–789.
7. Abian M., Alzueta M. U., Glarborg P. Formation of NO from N₂/O₂ mixtures in a flow reactor: Toward an accurate prediction of thermal NO // *Int. J. Chem. Kinet.*, 2019. Vol. 47. No. 8. P. 518–532.
8. Xi J., Yang G., Cai J., Gu Z. A review of recent research results on soot: The formation of a kind of carbon-based material in flames // *Frontiers Materials*, 2021. Vol. 8. P. 695485. doi: 10.3389/fmats.2021.695485.
9. Glarborg P., Miller J. A., Ruscic B., Klippenstein S. J. Modelling nitrogen chemistry in combustion // *Prog. Energ. Combust.*, 2018. Vol. 67. P. 31–68.
10. Gleason K., Carbone F., Sumner A. J., Drollette B. D., Plata D. L., Gomez A. Small aromatic hydrocarbons control the onset of soot nucleation // *Combust. Flame*, 2021. Vol. 223. P. 398–406. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.08.029.
11. Martin J. W., Salamanca M., Kraft M. Soot inception: Carbonaceous nanoparticle formation in flames // *Prog. Energ. Combust.*, 2022. Vol. 88. P. 100956. doi: 10.1016/j.peccs.2021.100956.
12. Frolov S. M., Ivanov V. S., Frolov F. S., Vlasov P. A., Axelbaum R., Irace P. H., Yablonsky G., Waddell K. Soot formation in spherical diffusion flames // *Mathematics*, 2023. Vol. 11. P. 261. doi: 10.3390/math11020261.
13. Zhao F., Yang W., Yu W. A progress review of practical soot modelling development in diesel engine combustion // *J. Traffic Transportation Engineering — English Edition*, 2020. Vol. 7. No. 3. P. 269–281.
14. Zhao F., Yang W., Zhou D., Yu W., Li J., Tay K. L. Numerical modelling of soot formation and oxidation using phenomenological soot modelling approach in a dual-fueled compression ignition engine // *Fuel*, 2017. Vol. 188. P. 382–389.
15. Zhou H., Li X., Liu F. Soot formation and oxidation mechanisms in a diesel engine separated swirl combustion system // *Fuel*, 2019. Vol. 257. P. 115955.
16. AVL FIRE: Computational fluid dynamics for conventional and alternative powertrain development. <https://www.avl.com/>.
17. Richards K. J., Senecal P. K., Pomraning E. CONVERGE 5*. — Madison, WI, USA: Convergent Science, 2025.
18. ANSYS Forte Theory Guide, Release 2024 R1. — Canonsburg, PA, USA: ANSYS, Inc., 2024.
19. Басевич В. Я., Медведев С. Н., Фролов С. М., Фролов Ф. С., Басара Б., Пришинг П. Макрокинетическая модель для расчета эмиссии сажи в дизеле // *Горение и взрыв*, 2016. Т. 9. № 3. С. 36–46.
20. Сергеев С. С., Фролов С. М., Басевич В. Я., Басара Б., Пришинг П. Моделирование процессов смесеобразования и сгорания в дизеле с применением детального кинетического механизма окисления горючего // *Горение и взрыв*, 2018. Т. 11. № 2. С. 88–98.
21. Басевич В. Я., Фролов С. М., Иванов В. С., Фролов Ф. С., Семенов И. В. The effects of multistage fuel-oxidation chemistry, soot radiation, and real gas properties on the operation process of compression ignition engines // *Engineering*, 2023. Vol. 4. No. 12. P. 2682–2710.
22. Frolov S. M., Avdeev K. A., Ivanov V. S., Vlasov P. A., Frolov F. S., Semenov I. V., Belotserkovskaya M. S. Evolution of the soot-particle size distribution function in the cylinder and exhaust system of piston engines. Simulation // *Atmosphere — Basel*, 2023. Vol. 14. Art. 13. 20 p.
23. 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. 58–66.
24. Kozelkov A., Kurkin A., Puzan A., Kurulin V., Tarasova N., Gerasimov V. Application features of a vof method for simulating boiling and condensation processes // *Algorithms*, 2025. Vol. 18. P. 604.
25. Korotkov A. V., Kozelkov A. S., Kurulin V. V., Shishlenin M. A. Applying a synthetic turbulence generator to an unmatched RANS–LES interface // *J. Comput. Appl. Math.*, 2025. Vol. 475. Art. 116223.
26. Menter F. R. Zonal two-equation $k-\omega$ turbulence models for aerodynamic flows. AIAA Paper No. 1993-2906, 1993.
27. Burcat A., Ruscic B. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with updates from Active Thermochemical Tables. — Argonne, IL, USA: Argonne National Laboratory, 2005. Technical Report ANL-05/20. 258 p.
28. Reitz R. D. Modelling atomization process in high-pressure vaporizing sprays // *Atomization Spray Technology*, 1987. Vol. 3. No. 4. P. 309–337.
29. Dukowicz J. K. A particle–fluid numerical model for liquid sprays // *J. Comput. Phys.*, 1980. Vol. 35. P. 229–253.
30. Басевич В. Я., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы для моделирования многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // *Хим. физика*, 2006. Т. 25. № 6. С. 54–62.
31. Басевич В. Я., Власов П. А., Скрипник А. А., Фролов С. М. Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания // *Горение и взрыв*, 2008. № 1. С. 40–43.
32. Зельдович Я. Б. The oxidation of nitrogen in combustion and explosions // *Acta Physicochem. URS*, 1946. Т. 21. С. 577–628.
33. Hanson R. K., Salimian S. Survey of rate constants in H/N/O systems // *Combustion chemistry* / Ed. W. C. Gardiner, Jr. — New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1984. P. 361–422.
34. Bogin G. E., Jr., Dehoff K. C., McCormick R. L., Ratcliff M. A. Experiments and computational fluid dynamics modelling analysis of large n -alkane ignition kinetics in the ignition quality tester // *Energ. Fuel.*, 2014. Vol. 28. No. 7. P. 4781–4794.

35. *Agafonov G. L., Naydenova I., Vlasov P. A., Warnatz J.* Detailed kinetic modelling of soot formation in shock tube pyrolysis and oxidation of toluene and *n*-heptane // *P. Combust. Inst.*, 2007. No. 31. P. 575–583.
36. *Agafonov G. L., Borisov A. A., Smirnov N. V., Troshin K. Ya., Vlasov P. A., Warnatz J.* Soot formation during pyrolysis of methane and rich methane/oxygen mixtures behind reflected shock waves // *Combust. Sci. Technol.*, 2008. Vol. 180. No. 10. P. 1876–1899.
37. *Agafonov G. L., Smirnov V. N., Vlasov P. A.* Shock tube and modelling study of soot formation during the pyrolysis and oxidation of a number of aliphatic and aromatic hydrocarbons // *P. Combust. Inst.*, 2011. Vol. 33. P. 625–632.
38. *Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М.* Образование сажи при пиролизе и окислении ацетилена и этилена в ударных волнах // *Кинетика и катализ*, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–35.
39. NIST Chemistry Webbook. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
40. *Dempsey A. B., Curran S. J., Wagner R. M.* A perspective on the range of gasoline compression ignition combustion strategies for high engine efficiency and low NO_x and soot emissions: Effects of in-cylinder fuel stratification // *Int. J. Engine Res.*, 2016. Vol. 17. No. 8. P. 897–917.

Поступила в редакцию 23.06.2025

После доработки 03.10.2025

Принята к публикации 13.10.2025