

КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГОРЕНИЯ БЕНЗИНА

© 2023 г. Г. Я. Герасимов¹, В. Ю. Левашов^{1*}

¹Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: vyl69@mail.ru; levashovvy@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 30.01.2023;

после доработки 16.02.2023;

принята в печать 20.02.2023

Рассмотрено современное состояние исследований по разработке кинетических моделей горения бензина и его составляющих. Проанализированы суррогатные модели бензина, которые описывают физические и химические свойства реального топлива и используются при разработке детальных и редуцированных кинетических моделей. Сделан обзор экспериментальных данных, на основе которых проводится тестирование кинетических моделей различной степени сложности. Приведены примеры применения кинетических моделей при численном моделировании процессов, протекающих в двигателях внутреннего сгорания.

Ключевые слова: бензин, углеводороды, горение, кинетические модели, вычислительная гидродинамика, двигатели внутреннего сгорания.

DOI: 10.31857/S0207401X23080046, **EDN:** HYNZAZ

ВВЕДЕНИЕ

Бензин получается путем переработки нефти и в настоящее время является одним из основных видов транспортного топлива, которое широко используется в двигателях с искровым зажиганием [1]. Это топливо представляет собой сложную смесь жидких углеводородов, физические и химические свойства которой сильно влияют на процессы тепловыделения и образования вредных веществ при ее сжигании в камере сгорания двигателя [2]. В связи с этим понимание кинетических механизмов горения бензина играет важную роль в совершенствовании экологически безопасных и экономически выгодных технологий его использования [3].

За последние годы достигнут значительный прогресс в разработке кинетических механизмов различной степени сложности, описывающих как низкотемпературное, так и высокотемпературное горение бензина и его составляющих [4–7]. Созданы достаточно полные детальные кинетические модели, на основе которых разрабатываются упрощенные (редуцированные) кинетические модели, применяемые в дальнейшем для моделирования методами вычислительной гидродинамики (Computational Fluid Dynamics (CFD)) процессов, протекающих в реальных камерах сгорания [7–9]. Получено большое количество экспериментальных данных по измерению профилей концентраций компонентов химически реагирующей системы [10, 11], времен задержки воспламенения в широ-

ком диапазоне изменения температур и давлений [12–14], а также скоростей распространения ламинарного пламени [15], которые используются для тестирования кинетических моделей.

Тем не менее в связи с разработкой новых технологий сжигания топлива в двигателях внутреннего сгорания, адаптированных к современным нормам выбросов вредных веществ, потребность в более глубоком понимании химии горения бензина и его составляющих постоянно растет. Разрабатываются кинетические модели горения смесей бензина с различными видами биотоплива [16–20]. Исследуется влияние различных добавок к топливу на уменьшение образования токсичных веществ [21–23]. Увеличивается количество работ по численному моделированию методами CFD физико-химических процессов в камерах сгорания двигателей внутреннего сгорания [24–26].

В настоящей работе анализируется современное состояние исследований по разработке кинетических моделей горения бензина и его составляющих. В связи с тем, что количество публикаций по данной тематике достаточно велико, в обзоре приведены наиболее типичные работы по каждому из рассмотренных вопросов.

СУРРОГАТНАЯ МОДЕЛЬ БЕНЗИНА

Бензин представляет собой сложную смесь, состоящую из нескольких сотен углеводородных компонентов. Ее состав зависит от природы перерабатываемой нефти и применяемых в техноло-

гии переработки нефтехимических процессов. Марки данного вида моторного топлива различаются составом, чистотой и некоторыми другими параметрами. Маркировка бензина обычно проводится с указанием его основного показателя — октанового числа. Моторное октановое число (Motor Octane Number (MON)) определяет, насколько устойчив бензин к детонации при максимальной мощности мотора. Исследовательское октановое число (Research Octane Number (RON)) характеризует детонационную стойкость бензина при эксплуатации мотора с частичной нагрузкой [2]. Данные характеристики топлива определяются в ходе его испытания на специальных установках в соответствии с действующими стандартами [27].

Современная классификация отечественных бензинов включает шесть основных марок: АИ-80, АИ-92, АИ-95, АИ-95+, АИ-98 и АИ-100. Иногда в маркировку бензинов включают ссылку на европейские стандарты. В частности, бензин марки АИ-98-5 обозначает бензин автомобильный (А) с октановым числом 98, определенным по исследовательскому (И) методу, с экологическим стандартом, соответствующим техническим регламентам Евро-5.

Углеводородные составляющие бензина можно объединить в несколько основных групп: нормальные парафины, изопарафины, нафтены (циклопарафины) и арены [1]. Из-за сложности состава бензина при моделировании его горения обычно используются так называемые “суррогатные” топлива. Суррогатная модель бензина должна включать ограниченное количество углеводородных компонентов с четко определенными свойствами и описывать поведение реального моторного топлива, моделируя его физические и химические свойства [28].

Самым простым заменителем бензина является изооктан, который использовался на ранних этапах исследований по моделированию горения бензина [29]. Бинарные смеси *n*-гептана и изооктана (2,2,4-триметил пентана), которые относятся к так называемым первичным эталонным топливам (Primary Reference Fuels (PRFs)), использовались в течение многих лет в качестве удобных заменителей бензинов с переменным октановым числом [30]. В качестве более реальной топливной смеси, моделирующей горение бензина, обычно рассматривается тройная смесь *n*-гептана, изооктана и толуола [31], которую часто называют толуоловым эталонным топливом (Toluene Reference Fuel (TRF)). Современные суррогатные модели бензина включают от пяти [17] до двадцати трех [32] углеводородных составляющих.

Стандартные правила построения суррогатной модели топлива еще не разработаны, но общие принципы такой процедуры очевидны, и для ее реализации требуется, чтобы суррогатное топли-

во имело основные физические и химические свойства реального топлива [33–35]. Интересный подход к проблеме построения суррогатной модели бензина предложен в работе [36], где в качестве критерия для выбора состава суррогатной смеси были использованы расчетные данные по времени задержки воспламенения суррогатной смеси в гомогенном реакторе периодического действия. Сопоставление данных расчета с временами задержки воспламенения в смесях с известными RON и MON было использовано для определения октановых чисел предлагаемой суррогатной смеси. Эта методология определения RON и MON является достаточно точной, но для нее требуются высокоточные кинетические модели.

В общем случае процедуру построения суррогатной модели топлива можно представить в виде схемы, изображенной на рис. 1. Анализ схемы показывает, что процедура основана на минимизации отклонения физических и химических свойств реального топлива от соответствующих параметров его суррогатной модели. В качестве исходного набора компонентов для процесса оптимизации обычно выбирается последовательность нормальных парафинов, изопарафинов, нафтен и аренов с количеством атомов углерода в диапазоне от 7 до 17.

КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ПРОЦЕССА

Кинетический механизм горения топлива представляет собой набор элементарных химических реакций, описывающих превращение исходных компонентов топлива в продукты реакции с образованием большого количества промежуточных компонентов. Так как жидкое моторное топливо представляет собой смесь различных углеводородов, кинетический механизм его окисления должен включать в себя механизмы окисления отдельных составляющих его суррогатной модели.

Механизмы окисления PRFs, входящих в состав бензина, практически идентичны, несмотря на то, что молекула *n*-гептана имеет линейное строение, а молекула изооктана характеризуется разветвленной и достаточно компактной структурой [37]. Тем не менее нормальные парафины легче воспламеняются, чем изопарафины, и эти свойства воспламенения применительно к горению PRFs в двигателях внутреннего сгорания обычно количественно определяются различными значениями октанового числа. Причина заключается в разных величинах константы скорости и теплоты реакций окисления этих двух составляющих суррогатной модели бензина, что связано в первую очередь с их разной структурой [38].

Кинетический механизм горения *n*-гептана подробно исследован в ряде работ (см., напри-

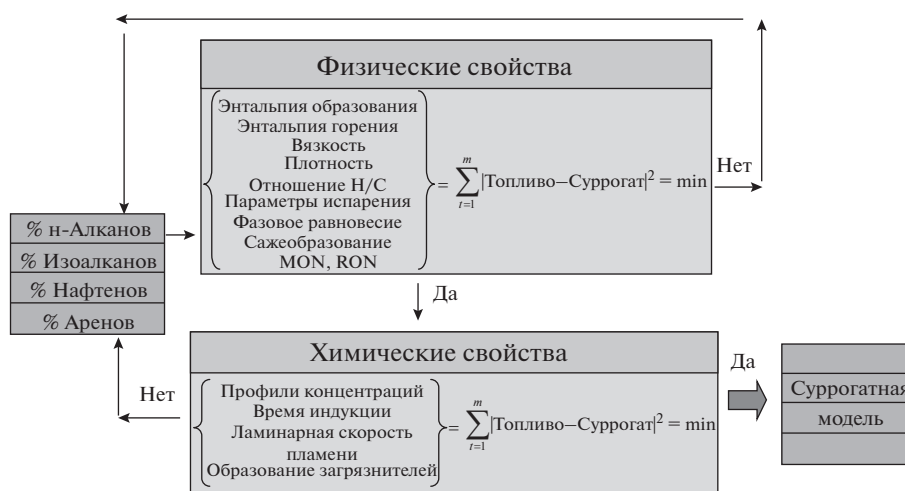


Рис. 1. Процедура построения суррогатной модели бензина.

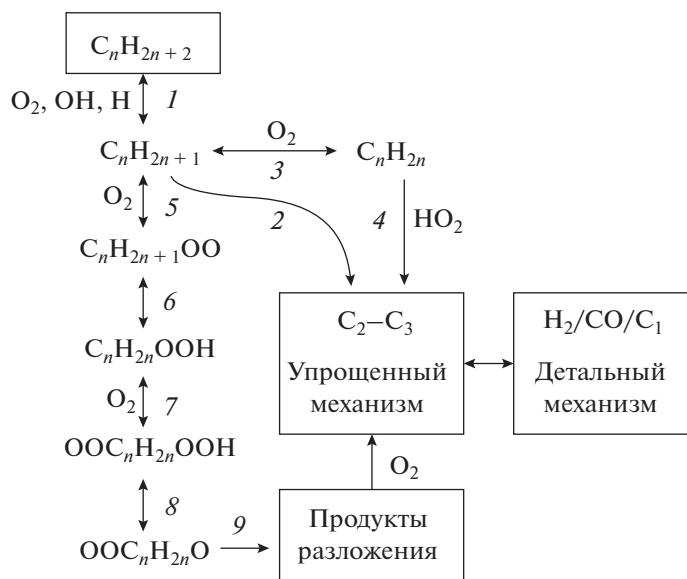


Рис. 2. Кинетический механизм окисления PRFs.

мер, [39–41]). Соответствующий механизм горения изооктана (см., например, [5, 42]) описывается примерно тем же набором химических реакций. В целом, кинетический механизм окисления PRFs можно представить в виде двух составляющих: высокотемпературного механизма, в котором основные алкильные радикалы термически разлагаются на меньшие алкильные радикалы и олефины, и низкотемпературного механизма ($T \leq 850$ K), который описывается реакцией присоединения молекулярного кислорода к основным алкильным радикалам с последующим распадом образующихся аддуктов [37]. Иницирование

процесса описывается реакцией мономолекулярного распада исходных молекул топлива с образованием алкильного радикала или двух мелких алкильных радикалов, а также отщеплением атома Н от молекулы топлива при ее взаимодействии с молекулой кислорода.

Упрощенный вариант кинетического механизма горения PRFs, включающий как высокотемпературное, так и низкотемпературное окисление топлива, приведен на рис. 2. Механизм состоит из следующих классов реакций, показанных на этом рисунке:

1 – мономолекулярный распад исходной молекулы топлива, а также отщепление атома Н от молекулы топлива при ее взаимодействии с молекулами O_2 , атомами Н и радикалами ОН с образованием алкильных радикалов;

2 – β -распад алкильного радикала с образованием молекулы олефина и более мелкого алкильного радикала;

3 – взаимодействие алкильного радикала с молекулой кислорода с последующим распадом образующегося аддукта на олефин и радикал HO_2 ;

4 – разложение олефина;

5 – присоединение молекулы кислорода к алкильному радикалу с образованием алкилпероксидного радикала $C_nH_{2n+1}OO\cdot$;

6 – изомеризация $C_nH_{2n+1}OO\cdot$ с образованием алкилгидропероксидного радикала $C_nH_{2n}OOH\cdot$;

7 – присоединение молекулы кислорода к радикалу $C_nH_{2n}OOH\cdot$ с образованием $OOCC_nH_{2n}OOH\cdot$;

8 – расщепление связи $O-O$ в $OOCC_nH_{2n}OOH\cdot$ с образованием кетогидропероксида $OOCC_nH_{2n}O$;

9 – разложение кетогидропероксида.

Данный механизм хорошо описывает зависимость времени задержки воспламенения PRFs от температуры в широком диапазоне ее изменения, включая достаточно точное воспроизведение так называемого отрицательного температурного коэффициента (Negative Temperature Coefficient (NTC)) в низкотемпературной области. В конечном счете проблема окисления PRFs сводится к окислению низших алкильных радикалов (метила и этила) в подсистемах $H_2/O_2/CO$ и C_1/C_2 . Эта часть кинетического механизма является лимитирующей и ответственна за подобие пламен всех парафинов.

Ароматические соединения, входящие в состав суррогатной модели бензина, имеют высокое октановое число, но концентрация этих соединений в смеси ограничена несколькими процентами из-за их повышенной склонности к сажеобразованию [1]. Более того, при горении аренов образуется большое количество канцерогенных веществ, что снижает экологические показатели работы двигателя. За счет низкой концентрации аренов в суррогатной смеси кинетика окисления этих составляющих бензина не оказывает сильного влияния на общую динамику химического процесса.

Преобладающей ароматической компонентой в составе бензина является толуол, который обычно входит в тройную суррогатную смесь, моделирующую свойства воспламенения и горения бензина. При воспламенении толуола не проявляется действие NTC, так как механизм его окисления отличается от соответствующих механизмов для PRFs вследствие структурных различий

[43, 44]. Эти различия делают пути окислительно-го процесса более разнообразными и сложными, чем в изооктане и н-гептане. На рис. 3 приведен упрощенный кинетический механизм окисления толуола, полученный в работе [45] на основе обобщения различных кинетических данных. Как видно из рис. 3, наиболее активное звено в молекуле толуола – метильная группа. Поэтому основным каналом инициирования реакции окисления толуола является отрыв атома Н от метильной группы при взаимодействии исходной молекулы толуола с молекулами O_2 и радикалами ОН с образованием радикала $C_6H_5CH_2\cdot$, который при взаимодействии с атомами О превращается в радикал $C_6H_5O\cdot$. Конечные продукты цепочки преобразования радикала $C_6H_5O\cdot$ – ацетилен и СО. Конкурирующим процессом является термическое разложение молекулы толуола на радикалы $C_6H_5\cdot$ и $CH_3\cdot$, которое приводит к образованию молекул бензола и метана [46].

Содержание нафтеновых углеводородов в бензине не должно превышать 20 об.%, так как эти соединения имеют низкое октановое число и легко превращаются в ароматические углеводороды за счет дегидрирования [1, 47]. Типичные нафтены, содержащиеся в бензине, находятся в диапазоне от C_5 до C_8 . Самое высокое октановое число среди циклоалканов имеет циклопентан. Кинетический механизм окисления циклопентана, так же как и при окислении PRFs, можно представить в виде высокотемпературной и низкотемпературной составляющих [48]. В первом случае процесс инициируется реакцией отщепления атома Н от исходной молекулы с образованием циклопентилового радикала. Реакция β -распада циклопентилового радикала открывает кольцо и формирует линейный радикал, который далее преобразуется в цепочке реакций, аналогичной высокотемпературному окислению алканов. В низкотемпературной области реакция присоединения молекулы O_2 к циклопентиловому радикалу приводит к образованию пероксидного радикала, который после изомеризации и вторичного присоединения молекулы O_2 распадается на более мелкие углеводородные составляющие.

ДЕТАЛЬНЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Кинетическая модель процесса представляет собой кинетический механизм, дополненный константами скоростей химических реакций и термодинамическими параметрами индивидуальных компонентов. Термодинамические параметры используются для вычисления теплового эффекта химических реакций, а также констант скоростей обратных реакций и берутся из известных баз данных [49]. Константы скоростей определяются с помощью различных теоретических и экс-

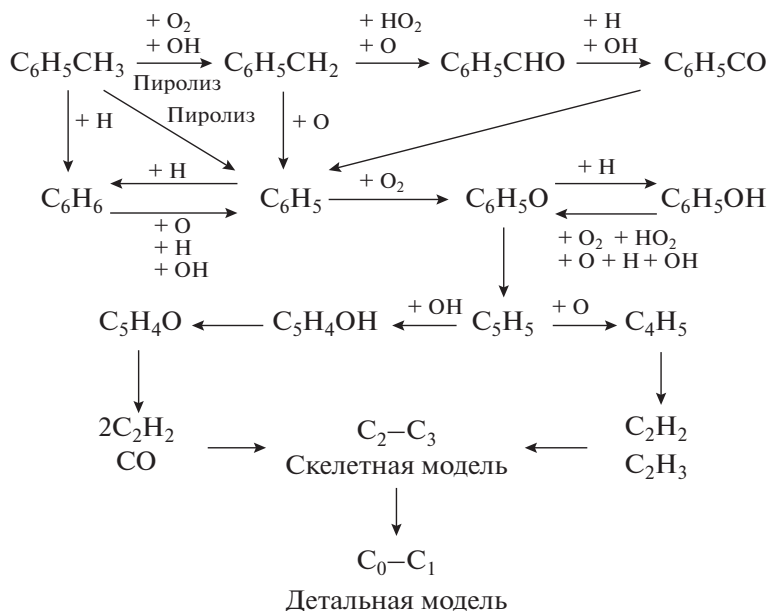


Рис. 3. Кинетический механизм окисления толуола.

периментальных методов. Современные квантово-механические расчеты констант скоростей элементарных химических реакций основываются на применении методов переходного состояния [50] и квазиклассических траекторий [51]. Среди экспериментальных методов большое количество информации получено в ударных трубах [52].

Детальные кинетические модели горения углеводородов, входящих в суррогатную модель бензина, состоят из большого количества элементарных стадий и возможных компонентов химически реагирующей системы. Такие модели содержат достаточно информации для описания широкого круга исследуемых явлений [53] и отличаются друг от друга как набором элементарных химических реакций и числом участвующих в них компонентов, так и значениями констант скоростей реакций. Достаточно полный обзор имеющихся в литературе моделей как отдельных составляющих суррогатной смеси, так и смеси в целом приведен в недавней работе [1]. Совершенствование компьютерных технологий стимулировало в последнее время создание различных численных методов построения детальных кинетических моделей [54].

Детальная кинетическая модель горения н-гептана, разработанная в [55], включает 349 химических компонентов и 3686 элементарных химических реакций. Аналогичная модель, предложенная в [56], содержит 624 компоненты и 2727 реакций. Обе модели протестированы на измеренных значениях времени задержки воспламенения и скорости распространения ламинарного пламени в широком диапазоне температур и давлений. Бо-

лее подробная модель, разработанная в [57], состоит из 5335 реакций и 1268 компонентов. Модель протестирована на наборе экспериментальных данных по задержкам воспламенения, профилям концентраций основных и промежуточных компонентов, измеренных в реакторе со струйным перемешиванием, и скоростям ламинарного пламени. Как отмечено в [57] авторы, модель может способствовать развитию кинетических моделей горения других составляющих суррогатной смеси, поскольку н-гептан относится к широко используемым основным эталонным топливам.

Кинетические модели горения изооктана похожи на кинетические модели горения н-гептана, но различаются набором промежуточных компонентов и значениями констант скоростей реакций [58]. Детальная кинетическая модель, разработанная в [59], состоит из 9920 реакций и 2768 компонентов и включает дополнительный блок реакций, связанных с изомеризацией и последующим разложением радикала $OO\dot{C}_nH_{2n}OOH$, являющегося одним из основных промежуточных компонентов низкотемпературного окисления PRFs. Тестирование модели проведено на экспериментальных данных, полученных в ударных трубах, проточных реакторах, машинах быстрого сжатия и реакторах струйного смешения. Результаты тестирования показывают, что модель лучше подходит для воспроизведения режимов горения топлива в двигателях, работающих на обедненных смесях, чем другие известные модели.

Имеющиеся детальные кинетические модели окисления ароматических углеводородов, в частности толуола, входящего в состав TRFs, имеют

небольшой размер по сравнению с соответствующими моделями для парафинов. Кинетическая модель, предложенная в работе [60], содержит 1740 реакций и 273 компоненты. Модель дает удовлетворительное согласие экспериментально наблюдаемых и предсказанных профилей концентраций основных продуктов и большинства промежуточных продуктов горения. Детальная кинетическая модель окисления толуола, разработанная в [61], содержит 1698 реакций и 279 компонентов. Ряд ключевых реакций в модели был пересмотрен на основе недавних теоретических исследований, особенно для некоторых зависимых от давления реакций мономолекулярного разложения и химически активированных реакций.

Детальные кинетические модели горения смесей, входящих в суррогатную модель топлива, имеют более сложную структуру и включают в себя ряд перекрестных реакций между составляющими смеси и промежуточными продуктами их разложения. Наиболее простые модели описывают окисление в суррогатных смесях, состоящих из нескольких углеводородных компонентов. В частности, кинетическая модель, предложенная в работе [62], включает 6128 реакций и 1426 компонентов и описывает окисление бинарной суррогатной смеси, состоящей из *n*-гептана и толуола. Анализ чувствительности позволил выявить особенности взаимодействия между продуктами разложения двух составляющих TRF, показав роль толуола как ингибитора реакционной способности смеси в основном за счет более высокого распада радикалов OH при окислении.

Детальная кинетическая модель окисления трехкомпонентной суррогатной смеси TRFs (*n*-гептан, изооктан и толуол) [63] содержит 8217 элементарных химических реакций и 2185 компонентов. Модель включает блок реакций, описывающих образование и дальнейший рост полициклических ароматических углеводородов (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs)) вплоть до коронена ($C_{24}H_{12}$), а также модель образования частиц сажи с последующей их коагуляцией и конденсацией на их поверхности ароматических соединений. Модель была применена для описания сажеобразования при горении данной суррогатной смеси в противоточном диффузионном пламени. Результаты расчетов показали, что модель достаточно точно отражает характеристики образования PAHs, наблюдаемые экспериментально для бинарных смесей *n*-гептан/толуол и изооктан/толуол. Кроме того, с помощью этой модели были выявлены различные тенденции в образовании более крупных PAHs как в бинарных, так и в тройных смесях *n*-гептан/изооктан/толуол.

В детальной кинетической модели, предложенной в работе [8], рассматривается окисление четырех суррогатных составляющих смеси, кото-

рые в разных сочетаниях могут воспроизводить физические и химические свойства реальных марок бензина. Особое внимание уделено линейным и разветвленным предельным углеводородам (смеси PRFs), олефинам (1-гексен) и ароматическим соединениям (толуол). При построении модели были учтены последние данные по константам скоростей реакций, имеющиеся в литературных обзорах, а также данные полученные на основе квантовохимических расчетов. Полная модель, описание которой с константами скоростей реакций и термодинамическими параметрами химических компонентов приведено в приложении к статье [8], содержит 1338 компонентов и 5933 элементарных химических реакций.

Результаты кинетических расчетов, полученные с помощью данной модели для чистых компонентов, бинарных смесей и многокомпонентных суррогатных моделей бензина, сравниваются с недавней экспериментальной информацией, измеренной в машинах быстрого сжатия, ударных трубах и реакторах струйного смешения. Эксперименты охватывают широкий диапазон условий, характерных для двигателей внутреннего сгорания (давление $p = 3\text{--}50$ атм, температура $T = 650\text{--}1200$ К, коэффициент избытка топлива $\phi = 1$). Было проанализировано влияние исходного состава суррогатного топлива на поведение кривой NTC.

Более сложная детальная кинетическая модель бензина [64] описывает горение суррогатной топливной смеси, содержащей девять составляющих. Как утверждают авторы [64], их модель на момент публикации была наиболее полной из доступных в литературе. Модель включает 10079 реакций и 2315 химических компонентов. Особенностью модели является кинетическая связь ароматических соединений с нафтенами, которая влияет на концентрацию радикалов, и тем самым контролируется воспламенение. Результаты численного моделирования, проведенного для различных суррогатных смесей, позволили понять различия, экспериментально наблюдаемые при сжигании различных марок бензина.

РЕДУЦИРОВАННЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Детальные кинетические модели горения углеводородного топлива слишком сложны для их непосредственного использования в трехмерном численном моделировании. Редуцированные кинетические модели содержат ограниченное число реакций и компонентов химически реагирующей системы, имеющих принципиальное значение для окисления данного углеводорода [65]. Разновидностью редуцированных моделей являются скелетные кинетические модели, которые могут

включать как элементарные, так и глобальные химические реакции [40].

Наиболее распространенным в настоящее время методом редуцирования детальных кинетических моделей является метод направленного графа отношений (Directed Relationshipgraph (DRG)), в котором значимость химических компонентов в редуцируемом механизме определяется их связью с предварительно выбранными важными компонентами [66]. Использование данного метода представляет собой отдельную задачу, что делает процесс редуцирования трудноосуществимым в автоматическом режиме. Методика автоматического редуцирования числа компонентов и реакций детальной кинетической модели по расчету задержки воспламенения горючей смеси предложена в работе [67]. Достаточно подробный обзор современных методов построения редуцированных кинетических моделей на основе детальных кинетических моделей приведен в [68].

При рассмотрении редуцированных кинетических моделей воспламенения и горения различных суррогатных смесей, воспроизводящих свойства бензина, в первую очередь следует остановиться на PRFs. Упрощенная кинетическая модель воспламенения изооктана для последующего применения в CFD-моделировании процессов, протекающих в двигателях внутреннего сгорания с воспламенением от сжатия однородного заряда (Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI)), когда хорошо перемешанное топливо и окислитель (обычно воздух) сжимаются до точки самовоспламенения, была разработана в [69]. Модель, включающая 38 компонентов и 69 реакций, хорошо описывает экспериментальные данные, полученные в ударных трубах, машинах быстрого сжатия и двигателе HCCI (время воспламенения, продолжительность горения, профили давления и т.д.). Кроме того, несмотря на принятые упрощения, данная кинетическая модель способна воспроизводить профили концентраций изооктана, CO и CO₂ в реакторах струйного смешения, а также выбросы несгоревших углеводородов, NO_x, CO и CO₂ в HCCI-двигателе.

Процесс последовательного редуцирования кинетической модели горения н-гептана рассмотрен в работе [70], где на основе детальной кинетической модели получен 61-ступенчатый механизм, который в дальнейшем был упрощен до 26-ступенчатого механизма. Хорошее воспроизведение как времени задержки воспламенения, так и тепловыделения, достигнутое с помощью 26-ступенчатой модели, позволяет использовать ее при CFD-моделировании. Дальнейшие попытки разработки наиболее упрощенной модели, максимально приближенной к детальной модели по описанию времени задержки воспламенения и профиля давления в цилиндре двигателя, приве-

ли к построению модели горения н-гептана, низкотемпературный механизм которой включает 10 реакций и 17 компонентов, а высокотемпературный — 8 реакций и 14 компонентов, причем 11 из них входят в оба механизма [71].

Редуцированная кинетическая модель воспламенения и горения трехкомпонентной суррогатной смеси TRFs, содержащая 62 реакции и 49 компонентов, разработана в [72]. Модель протестирована на экспериментальных данных, полученных в HCCI-двигателе (температура на входе варьируется от 290 до 500 К, коэффициент избытка топлива — от 0.2 до 0.7 и степень сжатия — от 8 до 18), а также в ударной трубе и машине быстрого сжатия ($T = 700\text{--}1400$ К и $p = 9\text{--}55$ атм) для однокомпонентных н-гептана, изооктана и толуола, а также бинарных и тройных смесей этих составляющих бензина. Аналогичная кинетическая модель, содержащая 67 реакций и 48 компонентов, предложена в работе [73]. Процесс редуцирования осуществлялся с использованием анализа чувствительности, исследования поведения концентраций частиц и рассмотрения основных путей реакции. Сравнение времен задержки воспламенения, рассчитанных с использованием предложенного механизма, с результатами измерения, полученными в ударной трубе и машине быстрого сжатия, показывает, что модель достаточно хорошо работает в широком температурном интервале.

Наиболее простые кинетические модели горения основаны на концепции глобального кинетического механизма, когда химический процесс представляется в виде нескольких последовательных и частично перекрывающихся брутто-стадий, кинетические параметры которых определяются на основе сопоставления результатов расчета и эксперимента. Примером может служить глобальная кинетическая модель горения изооктана, н-гептана и их смесей [74], в которой основное внимание уделено моделированию самовоспламенения топлива и оценке поведения основных продуктов горения (CO₂, H₂O, CO и H₂). Модель содержит 19 в основном глобальных реакций, описывающих как высокотемпературное, так и низкотемпературное окисление PRFs. Модель протестирована на экспериментальных данных по времени задержки воспламенения в бедных ($\phi = 0.5$) и богатых ($\phi = 2$) смесях при $T = 600\text{--}1250$ К и $p = 13\text{--}40$ атм, а также на результатах расчета с использованием детальной кинетической модели.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

К настоящему времени накоплен большой объем экспериментальной информации по различного рода параметрам процесса горения бензина и его составляющих, которые являются

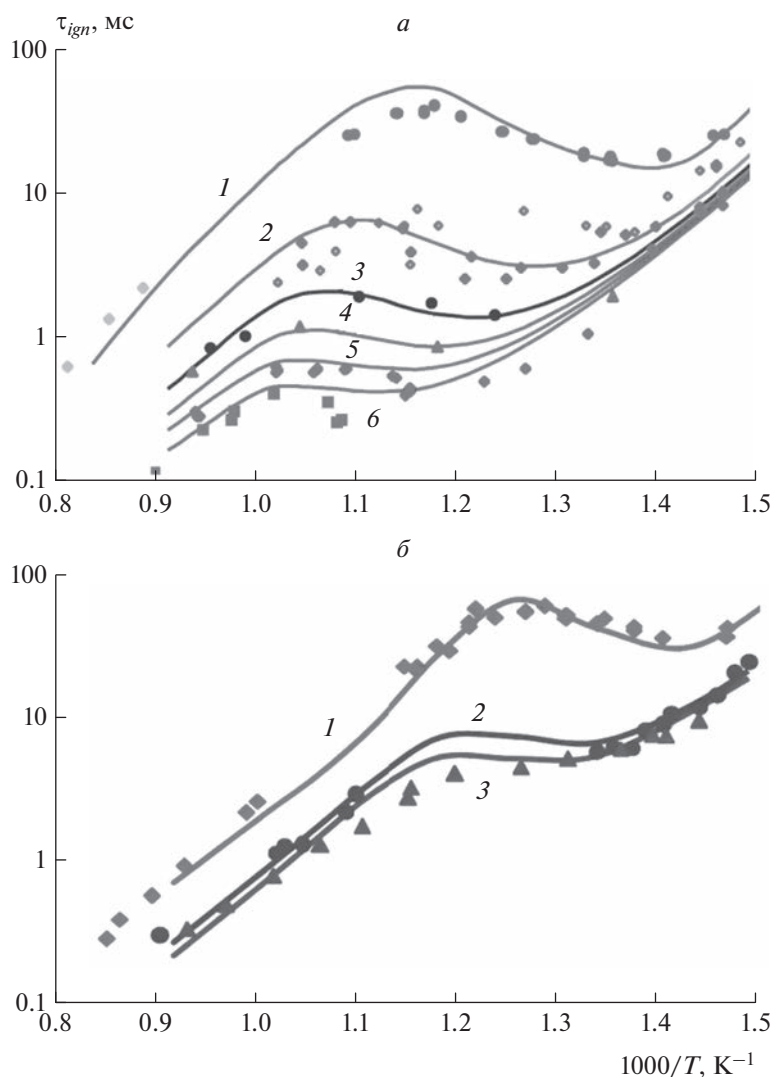


Рис. 4. Время задержки воспламенения, τ_{ign} , стехиометрических смесей н-гептан/воздух (а) при $p = 4$ (1), 10 (2), 20 (3), 30 (4), 41 (5), 50 атм (6) и изооктан/воздух (б) при $p = 15$ (1), 34 (2), 41 атм (3). Символы — экспериментальные данные [12, 77–80], линии — расчет по кинетической модели [8].

удобным инструментом для тестирования кинетических моделей различной степени точности [1]. Эта информация включает данные по воспламенению горючих смесей в ударных трубах и машинах быстрого сжатия, распространению ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси, а также измерению температуры и концентраций основных и промежуточных компонентов в проточных реакторах и реакторах со струйным перемешиванием.

Эксперименты по измерению времени задержки воспламенения топливной смеси являются основным источником интегральных характеристик процесса. При высоких температурах ($T \geq 1000$ К) данная величина измеряется в ударных трубах [75], при низких температурах ($T \leq 900$ К) — в машинах быстрого сжатия [76]. На рис. 4 показана

зависимость времени задержки воспламенения PRFs от температуры процесса при различных значениях давления. Экспериментальные значения времени задержки воспламенения, τ_{ign} , относящиеся к н-гептану (см. рис. 4а), представлены данными из работы [77], полученными при $T = 600$ – 900 К и $p = 2.7$ – 4.5 атм, данными [78], полученными при $T = 660$ – 1350 К и $p = 3.2$ – 42 атм, и данными из [12], полученными при $T = 850$ – 1350 К и $p = 15$ – 40 атм. Четко прослеживается NTC-зависимость в низкотемпературной области. Для изооктана соответствующие данные по времени задержки воспламенения τ_{ign} приведены на рис. 4б [79, 80]. Здесь NTC-кривая не столь ярко выражена из-за меньшей константы скорости изомеризации алкилпероксидного радикала при окислении изооктана в низкотемпературной об-

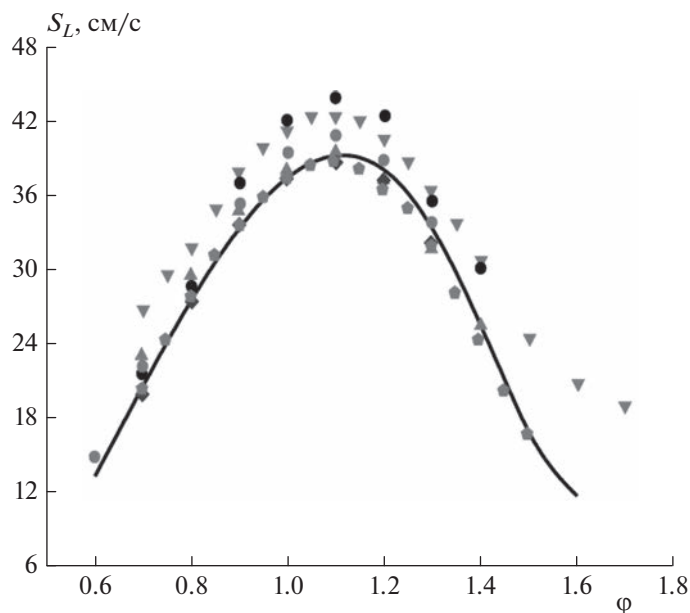


Рис. 5. Скорость распространения ламинарного пламени, S_L , в стехиометрической смеси н-гептан/воздух в зависимости от коэффициента избытка топлива, ϕ , при температуре $T = 300$ К и давлении $p = 1$ атм. Точки — экспериментальные данные [81], линия — результат кинетического расчета [82].

ласти [5]. Расчетные кривые на рис. 4 получены с использованием детального кинетического механизма [8]. Ссылки на более поздние работы по измерению времени задержки воспламенения в различных суррогатных смесях бензина приведены в обзоре [1].

Экспериментальные данные по скоростям распространения ламинарного пламени в предварительно перемешанных горючих смесях также играют важную роль при тестировании как детальных, так и редуцированных кинетических моделей горения бензина и его составляющих. Достаточно подробное рассмотрение современных методов измерения скоростей распространения ламинарного пламени, а также имеющихся экспериментальных данных приведено в недавних обзорах [15, 81]. На рис. 5 приведены экспериментальные данные по измерению скорости распространения ламинарного пламени, S_L , в стехиометрической смеси н-гептана и воздуха и их сравнение с результатами расчета по детальной кинетической модели [82]. Исследование влияния октанового числа и отношения Н/С на скорость распространения ламинарного пламени в суррогатной TRF-смеси проведено в работе [83]. Измерение скорости распространения ламинарного пламени в четырехкомпонентной суррогатной смеси метилциклогексана и TRF проведено в [84]. Для пятикомпонентной суррогатной смеси соответствующие данные получены в [85].

Экспериментальные данные по концентрациям реагентов, конечных продуктов, стабильных

промежуточных компонентов, свободных радикалов и изомерных соединений в химически реагирующей среде играют важную роль при разработке структуры кинетических моделей. Для получения подобной информации обычно используются реакторы со струйным перемешиванием [86] и проточные реакторы [61]. На рис. 6 показаны температурные профили концентраций основных и промежуточных компонентов, измеренных при горении стехиометрической смеси PRFs с $RON = 90$ в струйном реакторе при давлении $p = 10$ атм в момент времени $t = 1$ с после начала процесса [46]. Подобная информация является удобным тестовым инструментом для концентраций компонентов системы.

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Кинетические модели горения топливной смеси используются для численного исследования процессов, протекающих в реальных камерах сгорания. При этом они являются частью более общей газодинамической модели, которая дополняется рядом вспомогательных моделей, ответственных за распыление жидкого топлива, испарение жидких капель, их перемешивание с окружающей газовой средой, образование частиц сажи и других вредных веществ и т.д. Результаты численного моделирования методами CFD дают дополнительную информацию о процессах, протекающих в камере сгорания, которые трудно, а иногда и невозможно получить эксперименталь-

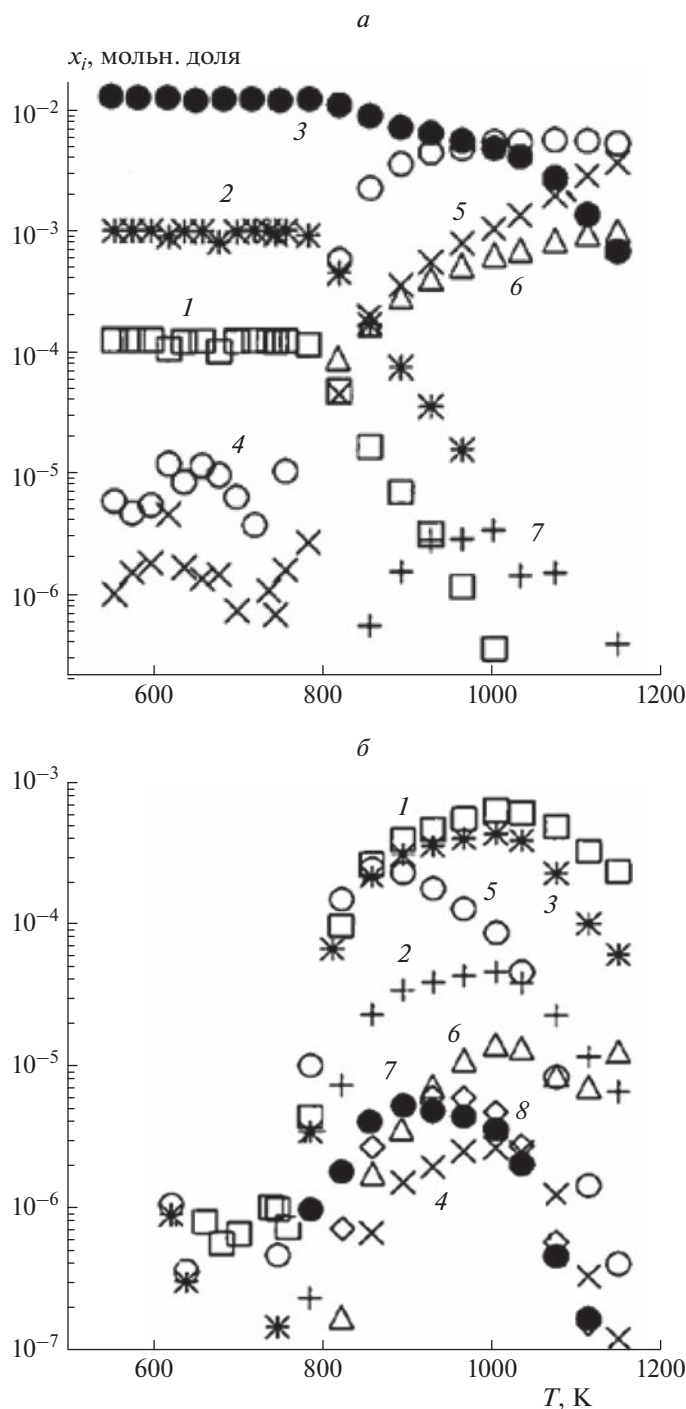


Рис. 6. Измеренные зависимости концентраций компонентов, x_i , от температуры при горении стехиометрической смеси PRFs с $\text{RON} = 90$ в момент времени $t = 1$ с после начала процесса [46]. Основные компоненты (а): 1 – н-гептан, 2 – изооктан, 3 – O_2 , 4 – CO , 5 – CO_2 , 6 – H_2 , 7 – C_6H_6 ; промежуточные компоненты (б): 1 – CH_4 , 2 – C_2H_6 , 3 – C_2H_4 , 4 – C_3H_8 , 5 – C_3H_6 , 6 – C_2H_2 , 7 – $a\text{-C}_3\text{H}_4$, 8 – $p\text{-C}_3\text{H}_4$.

ным путем [6, 87]. Анализ работ по данной тематике проведен в обзоре [88].

В недавней работе [89] скелетный механизм горения бензина, состоящий из 563 реакций и 152 компонентов, использован для трехмерного рас-

чета процессов, протекающих в экспериментальной установке, с применением метода моделирования крупных вихрей. Полученные результаты позволяют предсказать изменение давления и скорость выделения тепла при горении суррогат-

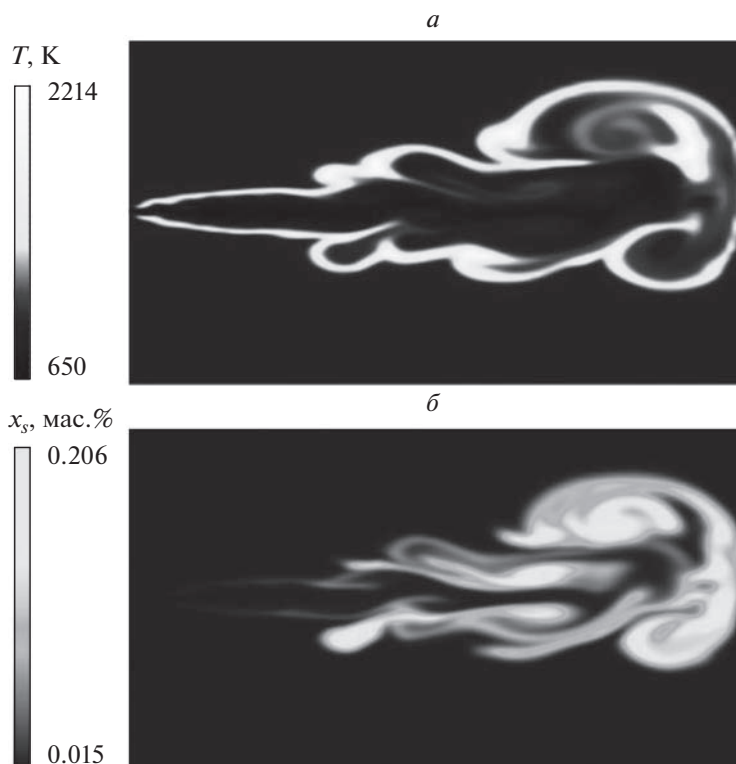


Рис. 7. Вычисленные контуры температуры T (а) и концентрации x_s образующейся сажи (б) в дисперсной струе н-гептана, впрыскиваемой в камеру сгорания [26].

ной смеси. Влияние граничных условий на тепловыделение и потерю энергии при горении изооктана в камере сгорания двигателя исследовано в работе [90]. Особенности предварительного впрыска топлива на работу бензинового двигателя с автоматическим зажиганием проанализированы в [91]. Изучение теплофизического и химического влияния добавок пара к топливу на работу бензинового двигателя проведено в [92]. Детонационные характеристики топлива при его сжигании в бензиновом двигателе изучены в [23].

Суррогатная четырехкомпонентная смесь н-гептана, изооктана, толуола и этанола была использована в работе [93] для моделирования горения низкооктанового бензина в камере сгорания двигателя с воспламенением от сжатия. Соответствующая кинетическая модель содержит 270 реакций и 50 компонентов. Моделирование газодинамических процессов при струйном впрыске жидкого топлива осуществлялось с применением коммерческого CFD-кода CONVERGE. Турбулентные процессы описывались с помощью k - ϵ -модели. Движение частиц распыленного топлива в газовом потоке описывалось в приближении Лагранжа. Результаты численного моделирования были использованы для интерпретации имеющихся экспериментальных данных.

Комплексное исследование горения жидкого топлива в камере сгорания двигателя проведено в работе [26]. Цель исследования состояла в том, чтобы с помощью методов CFD улучшить понимание ранее полученных экспериментальных данных по воспламенению смесей дизельного топлива и бензина применительно к условиям их сжигания в двигателе внутреннего сгорания. Экспериментальные данные включают измерение длины проникновения струи топлива в объем камеры сгорания, длины отрыва пламени, времени задержки воспламенения горючей смеси и количества образующейся сажи.

Вычисления проводились с использованием программного обеспечения для CFD-моделирования Fluent 2019-R1. Для описания распыления и испарения капелек жидкого топлива применена модель Кельвина–Гельмгольца–Рэля–Тейлора [94]. Турбулентная структура течения описывалась с помощью гибридной турбулентной модели отдельных вихрей [95]. Моделирование кинетических процессов проведено с помощью редуцированной кинетической модели горения суррогатной смеси дизельного/биодизельного топлива и бензина, в которой в качестве заменителя дизельного топлива использовался н-гептан, в качестве заменителей биодизельного топлива — метилбутаноат и метилдеканоат, а в качестве заменителей бензина —

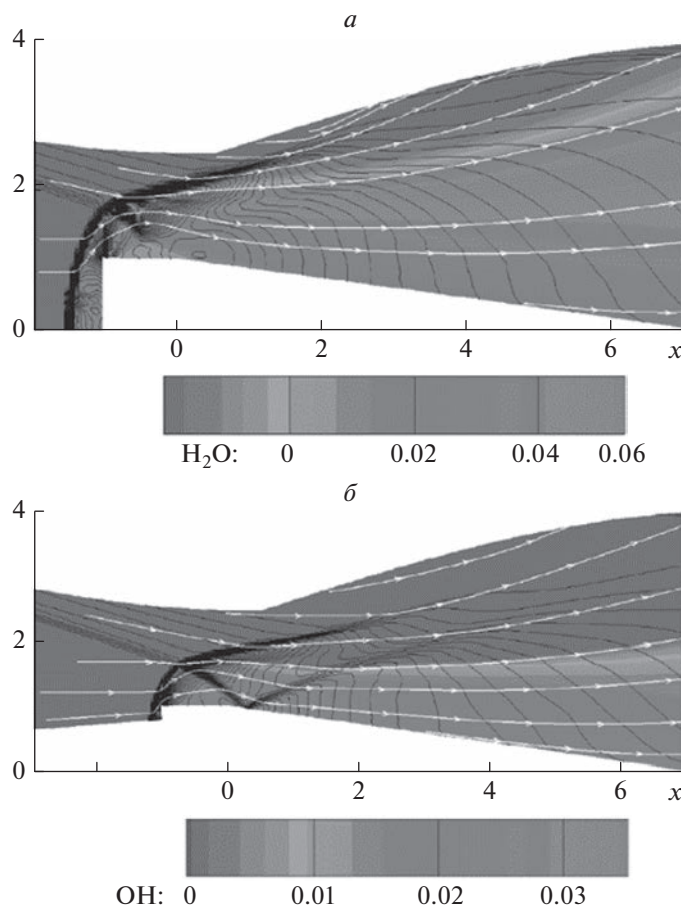


Рис. 8. Линии тока и изобары на фоне изменения массовой доли (x) паров воды (*a*) и радикалов OH (*б*) в установившемся сверхзвуковом потоке стехиометрической смеси бензин/воздух в осесимметричном конвергентно-дивергентном сопле с центральным телом [96].

изооктан и толуол [18]. Процесс сажеобразования при горении был представлен ростом ароматической структуры молекул PAHs вплоть до пирена с последующим применением простой кинетической модели образования и разложения сажевых частиц.

На рис. 7 приведены результаты расчета горения дисперсной струи *n*-гептана при ее впрыске в объем камеры сгорания, заполненной воздухом. Контуры температуры среды и концентрации образующейся сажи показаны через 2 мс после начала впрыска, когда топливо и воздух успевают хорошо перемешаться и прореагировать друг с другом. Начальная температура окружающей среды выбрана равной 900 К, что соответствует температуре цилиндров реальных двигателей непосредственно перед сгоранием. Видно, что температура среды (см. рис. 7*a*) имеет максимальное значение на поверхности факела и достигает значений порядка 2200 К. При этом концентрация образующейся сажи на поверхности факела (см. рис. 7*б*) достигает 0.2 мас. %.

Численное исследование возможности стабилизации детонационного горения паров бензина в сверхзвуковом потоке воздуха, поступающем в осесимметричное конвергентно-дивергентное сопло с центральным телом, проведено в работе [96]. Центральное тело обеспечивает прямое инициирование детонации за счет тепловой и кинетической энергии набегающего потока. Моделирование осесимметричного течения газа в сопле осуществлялось на основе двумерных нестационарных уравнений Эйлера для многокомпонентного химически реагирующего газа. Кинетическая модель горения бензина включает 33 компоненты, которые участвуют в 44 реакциях. При решении системы газодинамических уравнений использовалась модификация численной схемы Годунова второго порядка точности по пространственным переменным [97].

На рис. 8 показаны результаты численного анализа течения в сопле, которое формируется при горении стехиометрической смеси паров бензина с воздухом. Видно, что только часть бензиновой смеси сгорает в детонационной волне,

сформировавшейся перед торцевой стенкой центрального тела в сопле. Иными словами, кинетической и тепловой энергии, выделяющейся за отошедшей ударной волной, не хватает для прямого инициирования детонационного горения во всем потоке даже в случае стехиометрической смеси при числе Маха, равном 9. Для увеличения энергии инициирования детонации необходимо значительно увеличить скорость набегающего потока и радиус центрального тела, что непредсказуемым образом скажется на структуре течения и величине генерируемой тяги.

ВЫВОДЫ

При разработке новых технологий сжигания бензина в двигателях внутреннего сгорания, адаптированных к современным нормам выбросов вредных веществ, возникает потребность в более глубоком понимании химии горения бензина и его составляющих. В связи с этим актуальным является построение более совершенных кинетических моделей, которые используются для моделирования методами вычислительной гидродинамики процессов, протекающих в реальных камерах сгорания двигателей.

К настоящему времени накоплен большой объем экспериментальной информации по различного рода параметрам процесса горения бензина и его составляющих, которая включает данные по воспламенению горючих смесей в ударных трубах и машинах быстрого сжатия, распространению ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси, а также измерению температуры и концентраций основных и промежуточных компонентов в проточных реакторах и реакторах со струйным перемешиванием. Подобная информация является удобным инструментом для тестирования кинетических моделей различной степени точности.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № АААА-А19-119012990112-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sarathy S.M., Farooq A., Kalghatgi G.T.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2018. V. 65. P. 67.
2. *Boot M.D., Tian M., Hensen E.J.M., Sarathy S.M.* // Ibid. 2017. V. 60. P. 1.
3. *Xu R., Saggese C., Lawson R. et al.* // Combust. and Flame. 2020. V. 220. P. 475.
4. *Battin-Leclerc F.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2008. V. 34. P. 440.
5. *Тумова Н.С., Торохов С.А., Фаворский О.Н., Старик А.М.* // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52. № 6. С. 13.
6. *Tan J.Y., Bonatesta F., Ng H.K., Gan S.* // Appl. Thermal. Eng. 2016. V. 107. P. 936.
7. *Михалкин В.Н., Сумской С.И., Тереза А.М. и др.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 8. С. 3.
8. *Mehl M., Pitz W.J., Westbrook C.K., Curran H.J.* // Proc. Combust. Inst. 2011. V. 33. P. 193.
9. *Cheng S., Saggese C., Kang D. et al.* // Combust. and Flame. 2021. V. 228. P. 57.
10. *Selim H., Mohamed S.Y., Hansen N., Sarathy S.M.* // Ibid. 2017. V. 179. P. 300.
11. *Chen B., Togbe C., Selim H., Dagaut P., Sarathy S.M.* // Energy Fuels. 2017. V. 31. P. 5543.
12. *Gauthier B.M., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Combust. and Flame. 2004. V. 139. P. 300.
13. *Javed T., Lee C., AlAbbad M. et al.* // Ibid. 2016. V. 171. P. 223.
14. *Li J., Zhu J., Wang S. et al.* // Fuel. 2021. V. 295. № 120e645.
15. *Konnov A.A., Mohammad A., Kishore V.R. et al.* // Prog. Energy Combust. Sci. 2018. V. 68. P. 197.
16. *Cheng S., Kang D., Fridlyand A. et al.* // Combust. and Flame. 2020. V. 216. P. 369.
17. *Wang S., Feng Y., Qian Y. et al.* // Ibid. 2020. V. 213. P. 369.
18. *Zandie M., Ng H.K., Gan S., Said M.F.M., Cheng X.* // Transport. Eng. 2022. V. 7. № 100101.
19. *Fan G., Zheng Z., Zhu Z.* // ACS Omega. 2022. V. 7. P. 26e375.
20. *Li S., Wen Z., Hou J. et al.* // Ibid. P. 17797.
21. *Comandini A., Nativel D., Chaumeix N.* // Energy Fuels. 2021. V. 35. P. 14913.
22. *Kalvakala K.C., Pal P., Kukkadapu G., McNenly M., Aggarwal S.* // Ibid. 2022. V. 36. P. 7052.
23. *Xu L., Chang Y., Treacy M. et al.* // Fuel. 2023. V. 331. № 125830.
24. *Battistoni M., Mariani F., Risi F., Poggiani C.* // Energy Procedia. 2015. V. 82. P. 424.
25. *He L., Jingyuan L., Xiumin Y., Mengliang L., Tian Y.* // Ibid. 2019. V. 158. P. 1449.
26. *Zandie M., Ng H.K., Gan S., Said M.F.M., Cheng X.* // Energy. 2022. V. 260. № 125191.
27. Определение детонационных характеристик моторных топлив. ГОСТ Р 52946-2019, ГОСТ Р 52947-2019. М.: Стандартинформ, 2019.
28. *Slavinskaya N.A., Zizin A., Aigner M.* // J. Eng. Gas Turbines Power. 2010. V. 132. P. 111501.
29. *Pitz W., Cernansky N., Dryer F., Egolfopoulos F. et al.* SAE Paper 2007-01-0175.
30. *Andrae J., Brinck T., Kalghatgi G.* // Combust. and Flame. 2008. V. 155. P. 696.
31. *Sakai Y., Miyoshi A., Koshi M., Pitz J.* // Proc. Combust. Inst. 2009. V. 32. P. 411.

32. Kim D., Song J., Song H., Lim Y., Lee S., Song H.H. // *Fuel*. 2022. V. 328. № 125286.
33. Slavinskaya N., Riedel U., Saibov E., Herzler J., Naumann C. AIAA Paper 2014-0126.
34. Su X., Ra Y., Reitz R. // *SAE Intern. J. Fuels Lubr.* 2014. V. 7. P. 236.
35. Al-Esawi N., Al Qubeissi M. // *Fuel*. 2021. V. 283. № 118e923.
36. Mehl M., Chen J.Y., Pitz W.J., Sarathy S.M., Westbrook C.K. // *Energy Fuels*. 2011. V. 25. P. 5215.
37. Westbrook C.K., Pitz W.J., Herbinet O., Curran H.J., Silke E.J. // *Combust. and Flame*. 2009. V. 156. P. 181.
38. Tanaka S., Ayala F., Keck J.C. // *Ibid.* 2003. V. 133. P. 467.
39. Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K. // *Ibid.* 1998. V. 114. P. 149.
40. Тумова Н.С., Торохов С.А., Старик А.М. // *Физика горения и взрыва*. 2011. Т. 47. № 2. С. 3.
41. Chang Y., Jia M., Liu Y., Li Y., Xie M. // *Combust. and Flame*. 2013. V. 160. P. 1315.
42. Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K. // *Ibid.* 2002. V. 129. P. 253.
43. Zheng Z., Lv Z. // *Appl. Energy*. 2015. V. 147. P. 59.
44. Grégoire C.M., Cooper S.P., Petersen E.L. // *Fuel*. 2023. V. 332. № 126234.
45. Liu Y.-D., Jia M., Xie M.-Z., Pang B. // *Energy Fuels*. 2013. V. 27. P. 4899.
46. Dagaut P., Pengloan G., Ristort A. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2002. V. 4. P. 1846.
47. Lindgren E.B., Monteiro J.G.S., dos Santos A.R., Fleming F.P., Barbosa A.G.H. // *Fuel*. 2021. V. 303. № 121e205.
48. Al Rashidi M.J., Mehl M., Pitz W.J., Mohamed S., Sarathy S.M. // *Combust. and Flame*. 2017. V. 183. P. 358.
49. Burcat A., Ruscic B. Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database. Tech. Rep. № ANL-05/20, TAE 960. Lemont, IL, USA: Argonne National Laboratory, 2005.
50. Krasnoukhov V.S., Porfiriev D.P., Zavershinskiy I.P., Azyazov V.N., Mebel A.M. // *J. Phys. Chem. A*. 2017. V. 121. P. 9191.
51. Esposito F., Armenise I. // *Ibid.* 2021. V. 125. P. 3953.
52. Hanson R.K., Davidson D.F. // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2014. V. 44. P. 103.
53. Miller J.A., Sivaramakrishnan R., Tao Y. et al. // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2021. V. 83. № 100886.
54. Simm G.N., Vaucher A.C., Reiher M. // *J. Phys. Chem. A*. 2019. V. 123. P. 385.
55. Seidel L., Moshhammer K., Wang X. et al. // *Combust. and Flame*. 2015. V. 162. P. 2045.
56. Cai L., Pittsch H., Mohamed S.Y. et al. // *Ibid.* 2016. V. 173. P. 468.
57. Zhang K., Banyon C., Bugler J. et al. // *Ibid.* 2016. V. 172. P. 116.
58. Malewicki T., Comandini A., Brezinsky K. // *Proc. Combust. Inst.* 2013. V. 34. P. 353.
59. Atef N., Kukkadapu G., Mohamed S.Y. et al. // *Combust. and Flame*. 2017. V. 178. P. 111.
60. Tian Z., Pitz W.J., Fournet R., Glaude P.-A., Battin-Leclerc F. // *Proc. Combust. Inst.* 2011. V. 33. P. 233.
61. Yuan W., Li Y., Dagaut P., Yang J., Qi F. // *Combust. and Flame*. 2015. V. 162. P. 3.
62. Malliotakis Z., Banyon C., Zhang K. et al. // *Ibid.* 2019. V. 199. P. 241.
63. Park S., Wang Y., Chung S.H., Sarathy S.M. // *Ibid.* 2017. V. 178. P. 46.
64. Sarathy S.M., Kukkadapu G., Mehl M. et al. // *Ibid.* 2016. V. 169. P. 171.
65. Герасимов Г.Я., Туник Ю.В., Козлов П.В., Левашов В.Ю., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 8. С. 10.
66. Lu T., Law C.K. // *Proc. Combust. Inst.* 2005. V. 30. P. 1333.
67. Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Бетев А.С., Медведев С.П. // *Хим. физика*. 2020. Т. 39. № 12. С. 29.
68. Xi S., Xue J., Wang F., Li X. // *Combust. and Flame*. 2020. V. 222. P. 326.
69. Jia M., Xie M. // *Fuel*. 2006. V. 85. P. 2593.
70. Maroteaux F., Noel L. // *Combust. and Flame*. 2006. V. 146. P. 246.
71. Maroteaux F. // *Ibid.* 2017. V. 186. P. 1.
72. Machrafi H., Cavadias S., Amouroux J. // *Fuel Process. Technol.* 2009. V. 90. P. 247.
73. Lee K., Kim Y., Min K. // *Combust. Theory Model.* 2011. V. 15. P. 107.
74. Voglsam S., Winter F. // *Chem. Eng. J.* 2012. V. 203. P. 357.
75. Козлов П.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Акимов Ю.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 9. С. 35.
76. Kukkadapu G., Kumar K., Sung C.-J., Mehl M., Pitz W.J. // *Combust. and Flame*. 2015. V. 162. P. 2272.
77. Minetti R., Carlier M., Ribaucour M., Therissen E., Sochet L.R. // *Ibid.* 1995. V. 102. P. 298.
78. Ciezki H.K., Adomeit G. // *Ibid.* 1993. V. 93. P. 421.
79. Minetti R., Carlier M., Ribaucour M., Therissen E., Sochet L.R. // *Proc. Sympos. (Intern. on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst.* 1996. V. 26. P. 747.
80. Frieweger K., Blumental R., Adomeit G. // *Combust. and Flame*. 1997. V. 109. P. 599.
81. Chu H., Xiang L., Nie X., Ya Y., Gu M., E J. // *Fuel*. 2020. V. 269. № 117451.
82. Chu H., Ren F., Xiang L. et al. // *J. Energy Inst.* 2019. V. 92. P. 1821.
83. Hann S., Grill M., Bargende M. SAE Tech. Paper 2018-01-0857.

84. *Kumar R., Padhi U.P., Kumar S.* // *Fuel*. 2022. V. 329. № 125459.
85. *Sok R., Kataoka H., Kusaka J., Miyoshi A., Reitz R.D.* // *Ibid.* 2023. V. 333. № 126508.
86. *Chen B., Wang Z., Wang J.-Y. et al.* // *Fuel*. 2019. V. 236. P. 1282.
87. *Басевич В.Я., Беляев А.А., Иванов В.С. и др.* // *Хим. физика*. 2019. Т. 38. № 8. С. 69.
88. *Zandie M., Ng H.K., Gan S., Said M.F.M., Cheng X.* // *Transport. Eng.* 2022. V. 7. № 100102.
89. *Cho S., Lopez-Pintor D., Sofianopoulos A.* // *Fuel*. 2023. V. 332. № 126236.
90. *Wei J., Liu H., Zhu H., Cai Y., Wang H., Yao M.* // *Ibid.* 2022. V. 327. № 125147.
91. *Steege F., Raffius T., Schulz C. et al.* // *Combust. and Flame*. 2022. V. 244. № 112283.
92. *Sun X., Zhao P., Liang X., Jing G., Zhou Z., Chen G.* // *Fuel*. 2023. V. 334. № 126625.
93. *Li Y., Alfazazi A., Mohan B. et al.* // *Ibid.* 2019. V. 247. P. 164.
94. *Zhong W., Mahmoud N.M., Wang Q.* // *Ibid.* 2022. V. 310. № 122293.
95. *Pischke P., Christ D., Cordes D., Kneer R.* // *Proc. 12th Int. Conf. Liquid Atomiz. Spray Syst. Heidelberg: ICLASS, 2012.*
96. *Туник Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю.* // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 9. С. 8.
97. *Tunik Y.V.* // *Comput. Math. Math. Phys.* 2018. V. 58. P. 1573.