

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССОВ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТОПЛИВА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ ДИЗЕЛЯ НА РЕЖИМАХ ПУСКА

## MATHEMATICAL MODELING OF THE CHEMICAL KINETICS OF THE PROCESSES OF FUEL IGNITION IN THE COMBUSTION CHAMBER OF A DIESEL ENGINE ON START MODES

В.Н. БОНДАРЬ<sup>1</sup>, к.т.н.  
А.А. МАЛОЗЕМОВ<sup>1</sup>, д.т.н.  
В.С. КУКИС<sup>1</sup>, д.т.н.  
Е.А. ОМЕЛЬЧЕНКО<sup>2</sup>, к.т.н.  
Г.А. МАЛОЗЕМОВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Южно-Уральский государственный университет  
(национальный исследовательский университет),  
Челябинск, Россия

<sup>2</sup> Омский филиал Военной академии материально-технического обеспечения им. генерала армии  
А.В. Хрулева, Омск, Россия, idem74@mail.ru

V.N. BONDAR<sup>1</sup>, PhD in Engineering  
A.A. MALOZYOMOV<sup>1</sup>, DSc in Engineering  
V.S. KUKIS<sup>1</sup>, DSc in Engineering  
E.A. OMEL'CHENKO<sup>2</sup>, PhD in Engineering  
G.A. MALOZYOMOV<sup>1</sup>

<sup>1</sup> South Ural State University (National Research University),  
Chelyabinsk, Russia

<sup>2</sup> Omsk branch of the Military Academy of logistics n.a. general  
Andrey V. Khrulyov, Omsk, Russia, idem74@mail.ru

В статье представлены результаты расчетно-теоретического исследования, направленного на обеспечение соответствия дизелей требованиям нормативно-технических документов к пусковым качествам. В ходе исследования создана и реализована в виде отдельного программного обеспечения математическая модель химической кинетики процессов воспламенения и горения топлива в камере сгорания, которая может быть использована при прогнозировании пусковых качеств дизеля. Разработанная математическая модель имплементирована в трехмерную газодинамическую модель процессов в камере сгорания. В ходе расчетного исследования химической кинетики реакций горения топлива на режимах пуска дизеля установлено, что для обеспечения воспламенения топлива в камере сгорания необходимая величина локальных температур рабочего тела должна составлять не менее 1350 К. Допустимая доля оксида углерода в рабочем теле на режиме сопровождения подогревателем воздуха на впуске не должна превышать 40 %. Показано, что увеличение степени сжатия при постоянной температуре газов мало влияет на химическую кинетику предпламенных процессов и скорость реакции горения. Выявлено, что температура стенок камеры сгорания имеет превалирующее влияние на возможность воспламенения топлива. Установлены значения температур стенок, до которых необходимо разогреть дизель с применением средств предпусковой подготовки и облегчения пуска для различных температур среды, частот вращения коленчатого вала, степени сжатия, концентрации продуктов сгорания подогревателя воздуха на впуске. Разработанные математическая модель и программное обеспечение используются в текущих научно-исследовательских и опытно-конструкторских работах Южно-Уральского государственного университета по созданию новых и модернизации существующих дизелей ООО «ЧТЗ – Уралтрак» различных типов.

**Ключевые слова:** дизель, пуск, рабочие процессы, химическая кинетика, газовая динамика, воспламенение топлива, горение, математическая модель, программное обеспечение.

The article presents results of calculation and theoretical research, aimed at ensuring the compliance of diesel engines with the requirements of regulatory technical documents for starting characteristics. In course of the study, the mathematical model of chemical kinetics, ignition processes and fuel combustion in the combustion chamber was developed. Model can be used for predicting diesel engine starting characteristics. Model was realized as separate software. The developed mathematical model is implemented in the three-dimensional gas-dynamic model of processes in combustion chamber. In the course of the fuel combustion reactions chemical kinetics computational studies on diesel start-up modes, it was determined, that to ensure ignition of fuel in combustion chamber, required gases local temperature should be at least 1350 K. The permissible proportion of carbon oxide in the gases, produced by intake air heater, should not exceed 40 %. It is shown, that increase of compression ration, at a constant gas temperature, has little effect on the chemical kinetics of pre-flame processes and combustion reaction rate. It is revealed, that temperature of the combustion chamber walls has a prevailing effect on the possibility of fuel ignition. The wall temperatures have been determined, to which it is necessary to heat the diesel engine using pre-start heating and start facilitate tools for various environmental temperatures, crankshaft rotational speeds, compression ratios and concentration of the intake air heater combustion products. The developed mathematical model and software are used in current research and development work of the South Ural State University to create new and modernize existing diesel engines of various types, produced by Chelyabinsk tractor plant.

**Keywords:** diesel engine, start-up, working processes, chemical kinetics, gas dynamics, fuel ignition, combustion, mathematical model, software.

## Введение

Одной из основных характеристик поршневых двигателей внутреннего сгорания (ПДВС) является возможность пуска в любых условиях, предусмотренных конструкторской и эксплуатационной документацией. Если ПДВС не запустится, машина, на которой он установлен, полностью потеряет возможность функционирования. Поэтому обеспечение гарантированного пуска двигателей является одной из основных задач, стоящих перед разработчиками, при создании новых и модернизации существующих моделей ПДВС. Одна из составляющих этой задачи – проведение расчетных исследований с целью прогнозирования влияния тех или иных изменений в конструкции двигателя на его пусковые качества. Общепринято считать, что пуск возможен, если величина суммарного крутящего момента, включающего крутящий момент стартера, момент, создаваемый давлением газов (в том числе, пусковым воздухом) в камере сгорания (КС) и момент трения в механизмах и агрегатах ПДВС, является положительной величиной [1]. Если в КС отсутствует горение топлива, то пуск становится невозможным. Определение закона тепловыделения на режимах пуска с использованием традиционных математических моделей, например, Н.Ф. Разлейцева [2] или Н. Hiroyasu и др. [3] невозможно, так как они не учитывают пространственное распределение параметров состояния рабочего тела в КС, наличие средств облегчения пуска и очень упрощенно описывают химическую кинетику окисления топлива. Целью исследования, результаты которого представлены в настоящей статье, являлась разработка математической модели химической кинетики процессов воспламенения топлива в КС дизеля на режимах пуска и ее имплементация (внедрение) в трехмерную газодинамическую модель процессов в КС, реализованную с применением методов вычислительной газовой динамики (CFD).

## Математическая модель химической кинетики окисления дизельного топлива

Для расчета химической кинетики предпламенных процессов и горения дизельного топлива был использован кинетический механизм, разработанный Центром исследования двигателей Висконсинского университета в Мэдисоне (Engine Research Center University of Wisconsin-Madison, США) [4], основанный

на уравнениях окисления нормального гептана (29 реагентов и 52 реакции) и системе уравнений Аррениуса для каждой реакции [5]:

$$k_f = A \cdot T^b \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right), \quad (1)$$

где  $k_f$  – коэффициент скорости реакции;  $A$  – предэкспоненциальный коэффициент;  $b$  – показатель степени;  $E_a$  – энергия активации;  $T$  – температура.

Схема кинетического механизма здесь не приводится из-за ее громоздкости, с ней можно ознакомиться в отечественной литературе [6]. Начальные концентрации реагентов устанавливаются исходя из реальных концентраций топлива и воздуха в КС, с учетом наличия продуктов сгорания подогревателя воздуха на впуске. Скорость реакции (скорость изменения концентрации реагентов) определяется по уравнению:

$$\frac{dC_{12}}{dt} = -k_f \cdot C_1^c \cdot C_2^d, \quad (2)$$

где  $c, d$  – показатели степени;  $C$  – концентрация реагента.

Для определения термодинамических свойств реагентов используются полиномы NASA [5, 7, 8]:

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 \cdot T + a_3 \cdot T^2 + a_4 \cdot T^3 + a_5 \cdot T^4, \quad (3)$$

$$\frac{H}{R \cdot T} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + a_6 \frac{T^4}{T}, \quad (4)$$

$$\frac{S}{R} = a_1 \cdot \ln(T) + a_2 \cdot T + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_5 \frac{T^4}{4} + a_7, \quad (5)$$

где  $c_p$  – удельная теплоемкость при постоянном давлении;  $R$  – индивидуальная газовая постоянная;  $H$  – энтальпия;  $S$  – энтропия;  $a_1 \dots a_7$  – коэффициенты полиномов.

Так как коэффициенты полиномов зависят от температурного диапазона, при изменении температуры газовой смеси происходит переход от одного диапазона к другому, что влечет нелинейное (скачкообразное) изменение скорости реакции и нестабильность либо ошибку расчета. Для устранения этого недостатка была выполнена корректировка некоторых коэффициентов полиномов, которая не повлияла на достоверность расчета.

Система дифференциальных уравнений вида (2) относится к типу сверхжестких, по-

этому для ее решения использование традиционных численных методов (Эйлера, Рунге – Кутта, Адамса – Башфорта и т.д. [9]) является нецелесообразным, т.к. требует существенного (на несколько порядков) уменьшения расчетного шага и ведет к неприемлемому увеличению трудоемкости вычислительного эксперимента. Поэтому был использован решатель DASSL (differential / algebraic system solver) [10].

Для обеспечения возможности оценки влияния различных факторов на химическую кинетику воспламенения и горения дизельного топлива было создано программное обеспечение (ПО), которое реализует описанную выше математическую модель [11], представляющую собой программный класс на языке Modelica [12]. На рис. 1 показано окно графического редактора с результатами расчета, выполненного с применением разработанного класса. Необходимо отметить, что на рисунке 1 показано 29 реагентов, однако концентрация большинства промежуточных реагентов намного меньше масштаба графика.

Для расчета пространственно распределенных параметров состояния рабочего тела в КС математическая модель химической кинетики был имплементирована в код свободно распространяемого ПО OpenFOAM [14], в котором реализованы CFD-методы в трехмерной постановке. Для расчета процессов в КС на режимах пуска, были задействованы подмодели:

- турбулентного течения реагирующего газа – RANS и k-ε модель [15];
- распада струи: первичного – LISA, вторичного – KHRT [16];
- взаимодействия капель топлива в струе – O'Rourke [17];
- физических процессов при горении топлива – PaSR [18];
- взаимодействия капли топлива и стенки – Bai и Gosman [19].

Детальное описание математических моделей из-за большого объема не приводится, более подробная информация дана в работе А.А. Малоземова [20]. Верификация модели проводилась путем сравнения результатов тестового расчета с экспериментальными данными и результатами расчета выполненного с применением широко используемого в отрасли ПО AVL FIRE. На рис. 2. показаны индикаторные диаграммы, а на рис. 3 – поле температуры газов в КС.

## Результаты исследования химической кинетики горения топлива на режимах пуска

Расчетное исследование химической кинетики реакций горения топлива на режимах пуска дизеля проводилось для оценки влияния различных факторов на химические процессы в КС и определения условий воспламенения дизельного топлива. Исходные данные, ис-

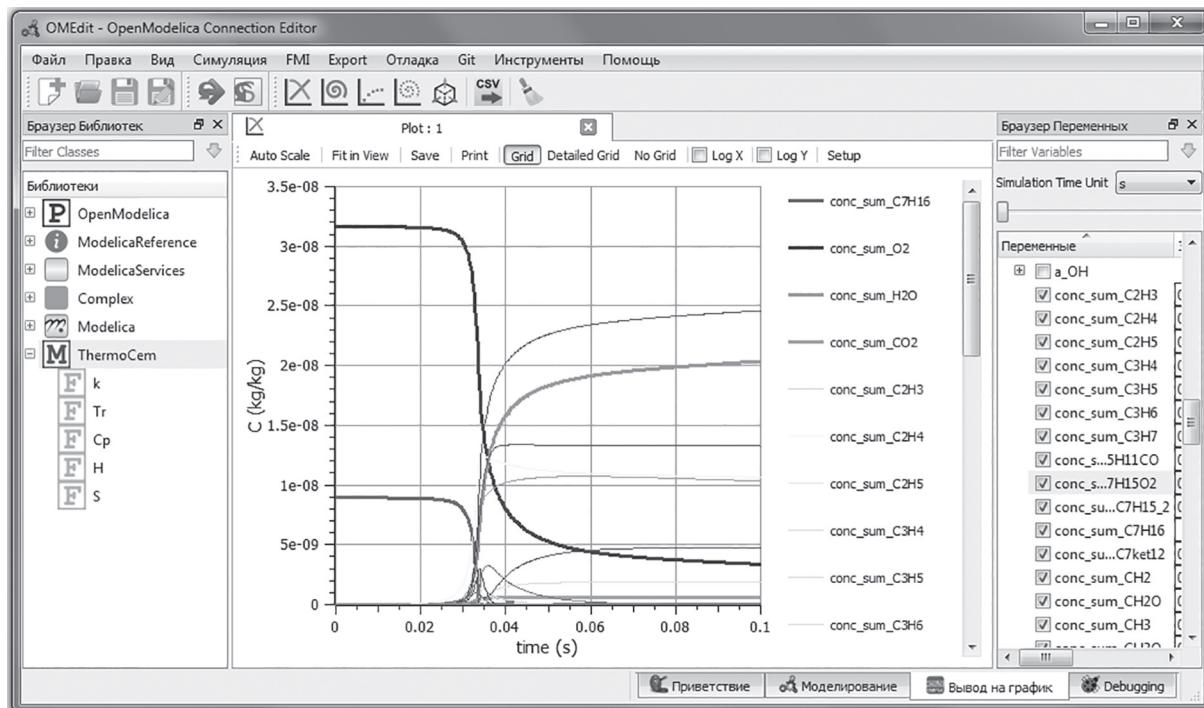
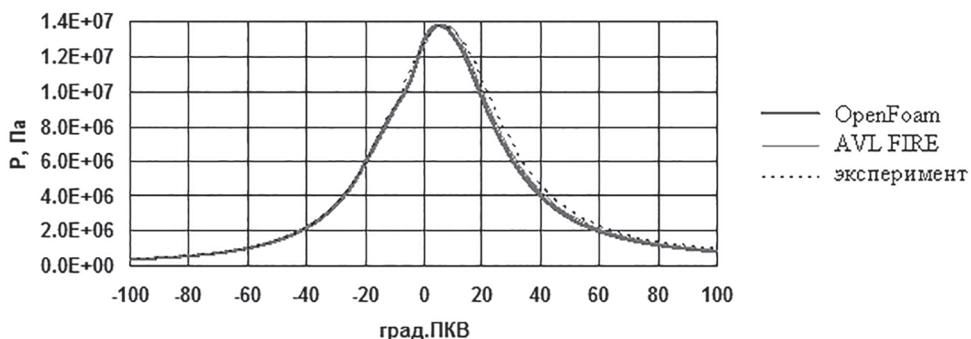
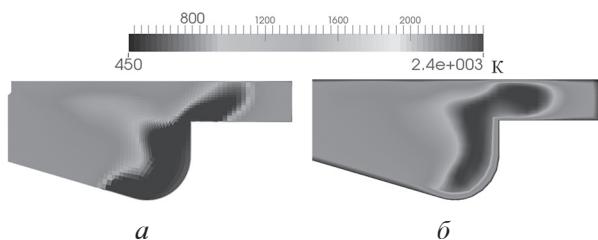


Рис. 1. Окно редактора OMEdit [13] с результатами расчета концентрации реагентов, образующихся при горении дизельного топлива



**Рис. 2. Сравнение расчетных индикаторных диаграмм давления газов в КС дизеля 12ЧН13/15 на режиме максимальной мощности**

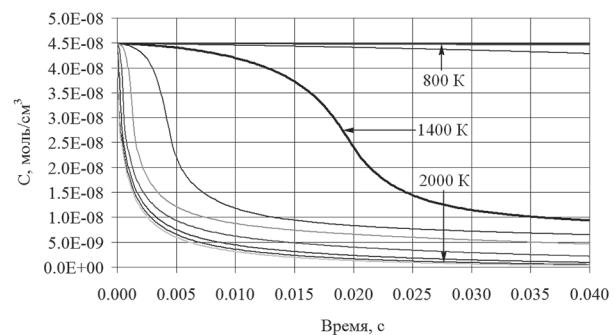


**Рис. 3. Сравнение расчетной температуры газов в КС дизеля 12ЧН13/15 на режиме максимальной мощности:**  
а) AVL FIRE; б) OpenFOAM

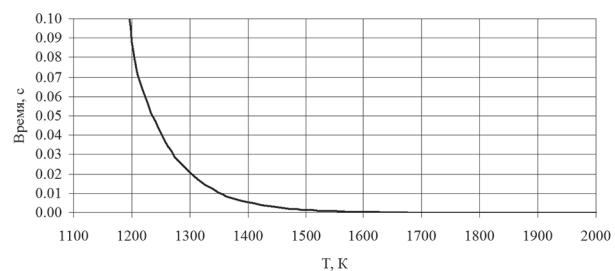
пользованные при расчете, соответствовали дизелю ООО «ЧТЗ – Уралтрак» с диаметром цилиндра 150 мм.

На рис. 4 показано изменение концентрации нормального гептана (*n*-гептана) при различных постоянных температурах газа в КС, а на рис. 5 – зависимость времени достижения концентрации *n*-гептана величины  $1.2 \cdot 10^{-8}$  моль/см<sup>3</sup> (величина выбрана условно, примерно соответствует 7 % вступившего в реакцию топлива, что может свидетельствовать о видимом начале реакции горения) от температуры газа в КС. Из рисунков видно, что скорость реакции существенно увеличивается с ростом температуры, при этом выбранная доля топлива 7 % вступает в реакцию за 0,02 с (что соответствует 24 град. поворота коленчатого вала (ПКВ)) при локальной температуре газов 1315 К.

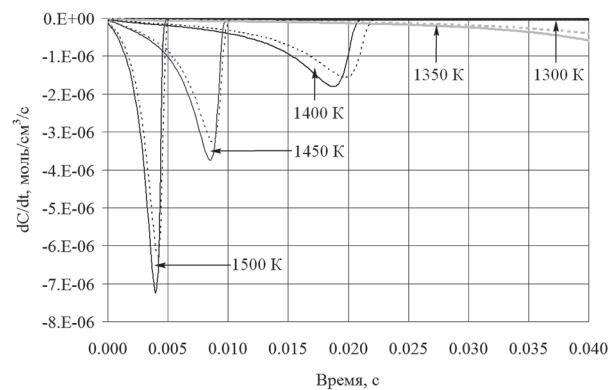
Очевидный максимум скорости реакции имеет место при локальной температуре газов 1350...1400 К в момент времени 0,02 с, то есть через 10 град ПКВ после верхней мертвой точки (ВМТ), при угле начала впрыска 14 град ПКВ до ВМТ (рис. 6). Для уточнения условий воспламенения топлива выполнен расчет химической кинетики при линейно увеличивающейся температуре газов в КС (рис. 7). Начало видимого изменения скорости изменения концентрации реагентов наблюдается также при температуре 1350...1400 К.



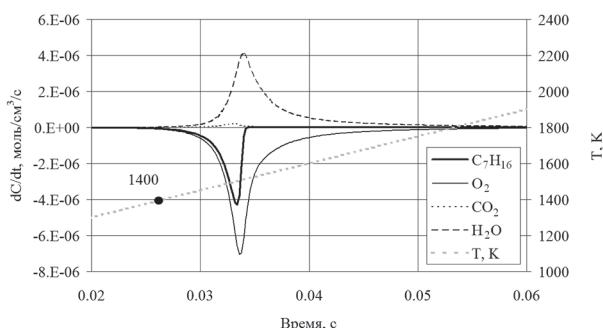
**Рис. 4. Изменение концентрации *n*-гептана при различных (шаг – 100 К) температурах газа в КС (поршень в ВМТ,  $\epsilon = 12,5$ ,  $n = 200$  мин<sup>-1</sup>)**



**Рис. 5. Зависимость времени достижения концентрации *n*-гептана величины  $1.2 \cdot 10^{-8}$  моль/см<sup>3</sup> от температуры газа в КС**

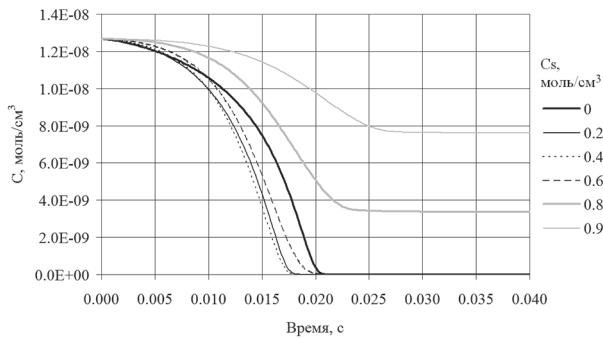


**Рис. 6. Скорость изменения концентрации реагентов при различных температурах газа в КС (поршень в ВМТ,  $\epsilon = 12,5$ ,  $n = 200$  мин<sup>-1</sup>):**  
— *n*-гептан; ----- – кислород

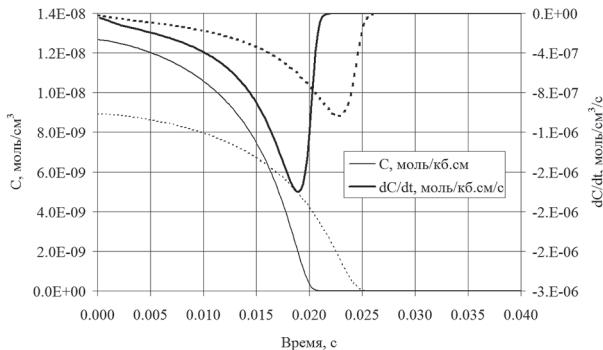


**Рис. 7. Скорость изменения концентрации реагентов при линейно растущей температуре газа в КС (поршень в ВМТ,  $\varepsilon = 12,5$ ,  $n = 200$  мин<sup>-1</sup>)**

На рис. 8 показано изменение концентрации реагентов при различной начальной массовой доле оксида углерода в КС, что иллюстрирует химическую кинетику реакции окисления топлива на режиме сопровождения подогревателем воздуха на впуске. Из рисунка видно, что увеличение массовой концентрации  $\text{CO}_2$  свыше 40 % приводит к неполному сгоранию топлива. При меньших долях оксида углерода его влияние на скорость реакции нельзя назвать существенным.



**Рис. 8. Изменение концентрации *n*-гептана при различной начальной массовой доле  $\text{CO}_2$  ( $C_s$ ) в КС (поршень в ВМТ,  $\varepsilon = 12,5$ ,  $n = 200$  мин<sup>-1</sup>)**



**Рис. 9. Изменение концентрации *n*-гептана ( $\varepsilon = 12,5$ ,  $n = 200$  мин<sup>-1</sup>) при:**  
— — — — — постоянном объеме КС;  
— · · · · · — переменном объеме КС

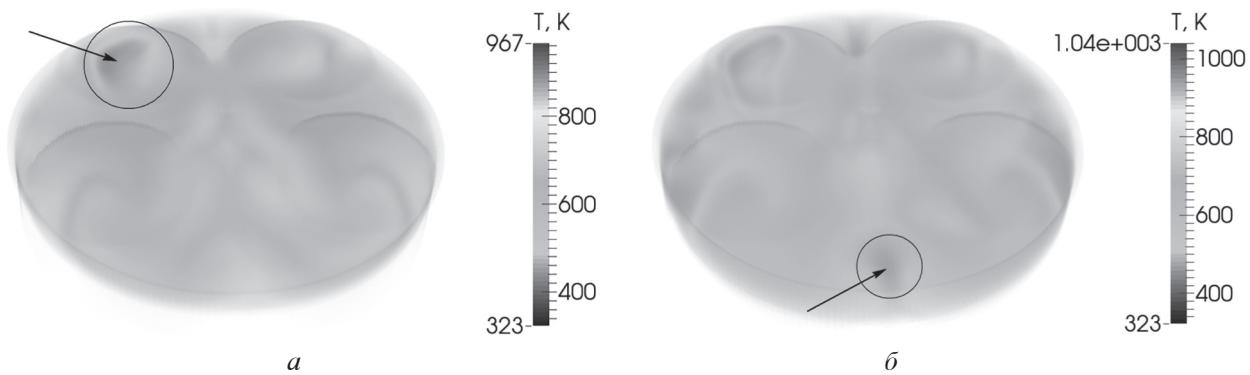
Предыдущие расчеты выполнялись при постоянном объеме КС исходя из предположения, что при малых частотах вращения на пусковых режимах основная реакция происходит вблизи ВМТ и изменение объема, в рамках решения задач настоящего расчетно-теоретического исследования, можно не учитывать. Для оценки обоснованности данного предположения и вносимой погрешности выполнен расчет изменения концентрации *n*-гептана при постоянном и переменном объеме КС (рис. 9). Из рисунка видно, что, несмотря на почти двукратное различие в скорости реакции, продолжительность видимого горения при переменном объеме КС увеличилась с 24 до 28 град ПКВ (на 17 %).

### Результаты исследования химической кинетики горения топлива на режимах пуска с применением CFD-модели

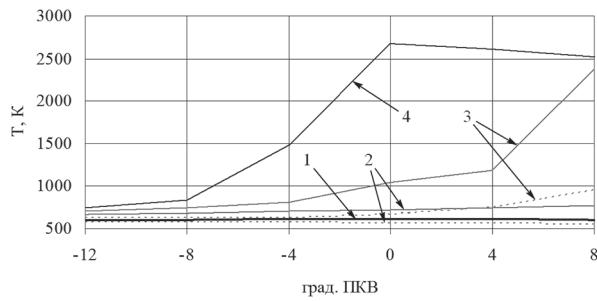
Рабочие процессы в КС дизеля на режимах пуска существенно отличаются от процессов на номинальных режимах. Замедляется скорость предпламенных процессов, на номинальном режиме видимое горение начинается примерно через 0,7...1 мс после начала впрыскивания, на режиме пуска (температура стенки КС  $T_w = 423$  К) – примерно через 11...15 мс, т.е. период задержки воспламенения увеличивается в 15...20 раз. При  $T_w = 323$  К видимого горения не наблюдается совсем, хотя реакция окисления топлива начинается.

Другой особенностью режима пуска является существенная неравномерность распределения температур рабочего тела в объеме КС. Это проявляется как локальным охлаждением в областях испарения топливной струи, так и снижением средней температуры на величину до 30 °C, что отрицательно влияет на процесс самовоспламенения.

Тепловыделение в ходе реакции окисления топлива происходит также крайне неравномерно по объему КС (рис. 10) и по времени процесса. На рис. 11 приведены средние и максимальные локальные температуры газов в КС. Анализ рисунка 11 показывает, что, например, для  $t_w = 100$  °C средняя температура газов вблизи ВМТ не превышает 1000 К и, согласно расчету химической кинетики, видимого горения не должно наблюдаться. Тем не менее, оно есть. Это объясняется тем, что локальные температуры газов превышают установленную в ходе ранее выполненного расчета границу воспламенения 1350 К и достигают 2400 К.



**Рис. 10. Локальные очаги горения топлива:**  
а) 22 град ПКВ после ВМТ; б) 32 град ПКВ после ВМТ



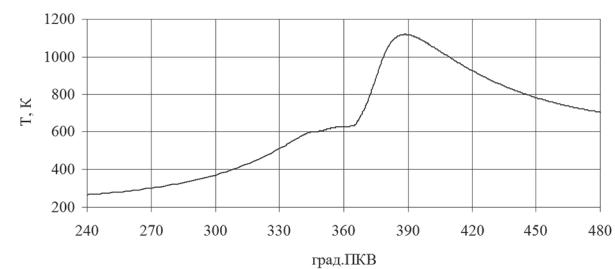
**Рис. 11. Средние (……) и максимальные локальные (—) температуры газов в КС:**  
1 – сжатие (без подачи топлива); 2 –  $t_w = 50^\circ\text{C}$ ;  
3 –  $t_w = 100^\circ\text{C}$ ; 4 –  $t_w = 150^\circ\text{C}$

Вышеизложенное позволяет утверждать, что возможность воспламенения топлива на режимах пуска определяется не столько средними, сколько локальными температурами газа, которые, в свою очередь, зависят от газодинамических условий в КС. Максимальные локальные температуры составляют 2700 К и в условиях интенсивного горения достигаются вблизи ВМТ. Согласно теории цепных реакций Н.Н. Семенова [21], самовоспламенение топлива происходит, если скорость тепловыделения реакции превышает скорость теплоотвода. В нормальных условиях работы дизеля теплоотвод из зоны реакции определяется теплопередачей и работой сжатия или расширения газов. На режиме пуска, при низких частотах вращения, реакция протекает вблизи ВМТ и работа газов близка к нулю. Поэтому определяющими становятся процессы теплообмена, зависящие от перепада температур между стенками КС и зоной реакции, которая близка к стенкам. Данное утверждение подтверждается «виртуальным» экспериментом по расчету рабочего процесса дизеля с адиабатными граничными условиями на стенках КС. Как видно из рис. 12, при температуре среды  $t_0 = -25^\circ\text{C}$ , когда при

нормальных условиях самовоспламенение невозможно, при отсутствии теплообмена наблюдается видимое горение.

При температуре среды  $t_0 = 5^\circ\text{C}$  граничной величиной температуры стенки, при которой происходит воспламенение топлива, можно считать  $100^\circ\text{C}$  (при  $95^\circ\text{C}$  и ниже видимого горения не наблюдается, рис. 13). Однако при  $t_w = 100^\circ\text{C}$  среднее индикаторное давление и, соответственно, работа цикла возрастают недостаточно для того, чтобы преодолеть момент сопротивления прокручиванию двигателя (рис. 14), и поэтому нельзя сказать, что пуск состоялся. Необходимо еще несколько циклов для дальнейшего прогрева стенок КС. В условиях  $t_0 = -25^\circ\text{C}$ , при той же температуре стенки –  $t_w = 100^\circ\text{C}$  воспламенения на первом цикле не происходит.

На рис. 15 расчетом подтверждено положительное влияние увеличения степени сжатия на процесс самовоспламенения дизельного топлива. Необходимо отметить, что при  $t_w = 50^\circ\text{C}$  воспламенения топлива не происходит даже при степени сжатия 14,5 единиц, несмотря на то что температура сжатия совпадает с величиной, определенной для двигателя со степенью сжатия 12,5 и  $t_w = 100^\circ\text{C}$ , что подтверждает предположение о том, что для обе-



**Рис. 12. Индикаторная температура газов в КС при адиабатных условиях на стенке КС ( $t_0 = -25^\circ\text{C}$ )**

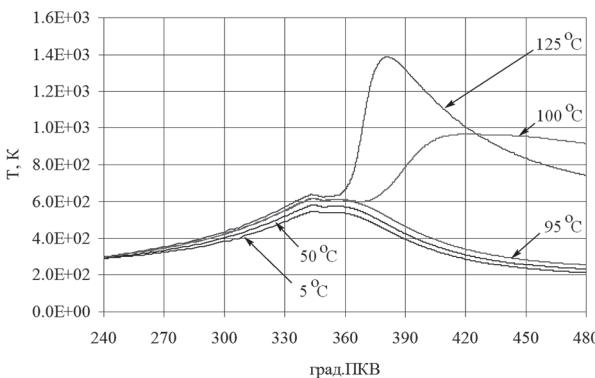


Рис. 13. Индикаторная температура газов в КС при различных температурах стенок ( $t_0 = 5 ^\circ\text{C}$ )

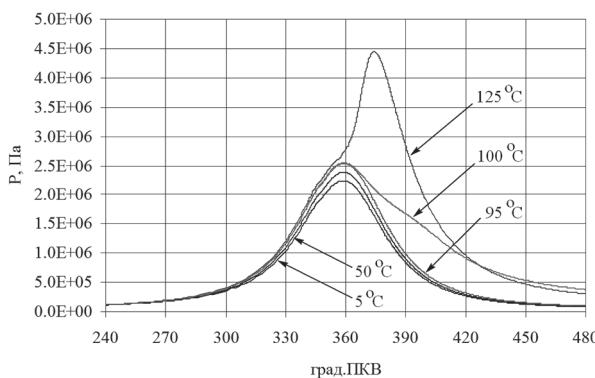


Рис. 14. Индикаторное давление газов в КС при различных температурах стенок ( $t_0 = 5 ^\circ\text{C}$ )

спечения устойчивого самовоспламенения топлива температура стенок имеет более важное значение, чем средняя температура рабочего тела.

На рис. 16 показано влияние начальной концентрации продуктов сгорания в КС на характеристику тепловыделения. Полученные данные подтверждают результаты расчетного исследования химической кинетики реакций горения топлива дизеля на режимах пуска, а именно то, что допустимая доля продуктов сгорания в рабочем теле на режиме сопровождения подогревателем воздуха на впуске может достигать 50 %. Однако, учитывая неравномерность концентрации  $\text{CO}_2$  в объеме КС, для обеспечения гарантированного пуска желательно ограничить эту величину значением 40 %.

## Выводы

Таким образом, в ходе исследования:

- создана и реализована в виде отдельного программного обеспечения математическая модель химической кинетики процессов воспламенения топлива в камере сгорания дизеля на режимах пуска;

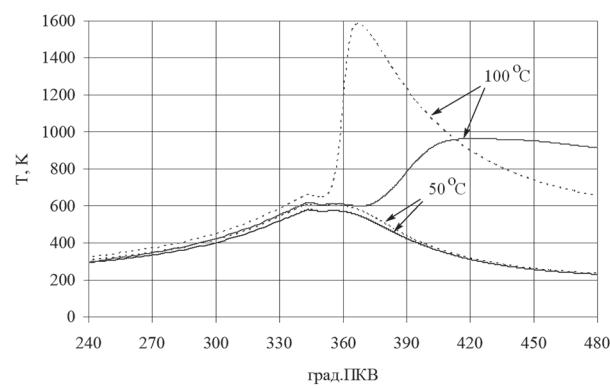


Рис. 15. Индикаторная температура газов при степени сжатия 12,5 (—) и 14,5 (···) и различных температурах стенок КС ( $t_0 = 5 ^\circ\text{C}$ )

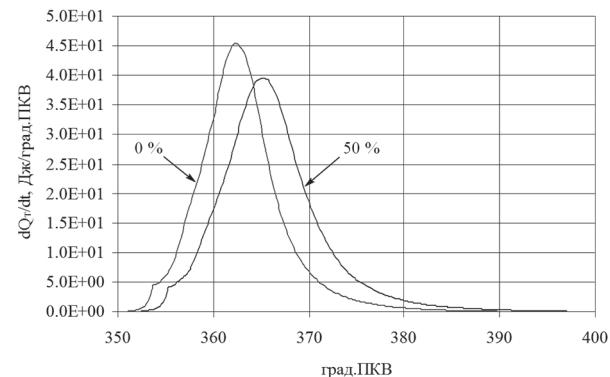


Рис. 16. Тепловыделение при сгорании топлива в КС при различных начальных долях продуктов сгорания в воздухе ( $t_0 = -25 ^\circ\text{C}$ ;  $t_w = 150 ^\circ\text{C}$ )

– разработанная математическая модель имплементирована в трехмерную газодинамическую модель процессов в камере сгорания дизеля.

В ходе расчетного исследования химической кинетики реакций горения топлива на режимах пуска дизеля установлено:

- для обеспечения воспламенения топлива в КС необходимая величина локальных температур рабочего тела должна составлять не менее 1350 K;

- допустимая доля оксида углерода в рабочем теле на режиме сопровождения подогревателем воздуха на впуске не должна превышать 40 %;

- увеличение степени сжатия при постоянной температуре мало влияет на химическую кинетику предпламенных процессов и скорость реакции горения (положительный эффект от роста степени сжатия на пусковые характеристики дизеля обусловлен, главным образом, ростом температуры сжатия);

- температура стенок КС имеет превалирующее влияние на возможность воспламенения топлива в КС, ее минимальная величина зави-

сит от температуры среды, частоты вращения коленчатого вала, степени сжатия, концентрации продуктов сгорания подогревателя воздуха на впуске.

Результаты исследования были использованы Южно-Уральским государственным университетом при выполнении работ по доводке дизелей производства ООО «ЧТЗ – Уралтрак» с целью обеспечения их соответствия требованиям нормативно-технических документов к пусковым качествам.

Работа выполнена при методической и научной поддержке фирмы AVL (г. Грац, Австрия) (Agreement for Use of Simulation Software AVL BOOST, AVL CRUISE, AVL EXCITE and AVL FIRE between SUSU (Chelyabinsk, Russia) and AVL LIST GmbH (Graz, Austria)) в части, касающейся верификации математической модели.

## Литература

1. Купершмидт В.Л. Улучшение пусковых качеств дизелей // Тр. НАТИ. Вып. 200. М.: ОНТИ НАТИ, 1968. С. 15–22.
2. Разлейцев Н.Ф. Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях. Харьков: Вища школа, 1980. 169 с.
3. Hiroyasu H., Kadota T., Arai M. Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emissions // Bull. JSME. 1983. Vol. 26. No 214. P. 576–583.
4. Pitz W., Cernansky N., Dryer F., Egolfopoulos F. Development of an experimental database and chemical kinetic models for surrogate gasoline fuels // SAE Paper 2007-01-0175. 2007. P. 1–25.
5. Burcat A., McBride B. Ideal gas thermodynamic data for combustion and air-pollution use // Techno Report TAE. No 697. 1993.
6. Потехин В.М. Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки. М.: Химиздат, 2007. 944 с.
7. McBride B., Gordon S., Reno M. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual // NASA Report TM-4513, 1993. 250 p.
8. Daubert T., Danner R. Physical and thermodynamic properties of pure chemicals: Data compilations. Taylor & Francis, 1994. 142 p.
9. Колесов Ю.Б., Сениченков Ю.Б. Моделирование систем. Практикум по компьютерному моделированию. СПб.: БХВ-Петербург, 2007. 352 с.
10. Petzold L.R. A description of DASSL: A differential/algebraic system solver // Scientific Computing, 1983. P. 65–68.
11. Малоземов А.А. Барельеф-термохимия: свидетельство о государственной регистрации № 2018616031, Российская Федерация. Опубликовано 21.05.2018. Бюл. № 6.
12. Fritzson P. Principles of object-oriented modeling and simulation with Modelica 3.3: A cyber-physical approach. New-York: Wiley, 2014. 1252 p.
13. OpenModelica. Режим доступа: <https://openmodelica.org> (дата обращения 24.10.2018).
14. OpenFOAM Foundation. Режим доступа: [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com) (дата обращения 24.10.2018).
15. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 735 с.
16. Senecal P., Schmidt D., Nouar I., Rutland C. Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization // International Journal of Multiphase Flow. 1999. No 25. P. 1073–1097.
17. O'Rourke P. Collective drop effects on vaporizing liquid sprays // PhD thesis. Princeton University. Princeton. 1981.
18. Crowe C., Sommerfeld M., Tsuji Y. Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press LLC, 1998. 509 p.
19. Bai C., Gosman A. Development of Methodology for Spray Impingement Simulation // SAE paper 950283. 1995.
20. Malozemov A.A. Development of software for calculation and optimization of diesel operating processes and fuel supply // International Conference on Industrial Engineering 2015. Procedia Engineering. 2015. No 129. Elsevier Ltd. P. 724–730.
21. Семенов Н.Н. Самовоспламенение и цепные реакции // Успехи химии. 1967. № 36. С. 3–22.

## References

1. Kupershmidt V.L. Improving the starting quality of diesel engines. Tr. NATI. Vyp. 200. Moscow: ONTI NATI Publ., 1968, pp. 15–22 (in Russ.).
2. Razlejcev N.F. Modelirovanie i optimizacii procesa sgoraniya v dizelyah [Simulation and optimization of the combustion process in diesel engines]. Har'kov: Vishcha shkola Publ., 1980. 169 p.
3. Hiroyasu H., Kadota T., Arai M. Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emissions // Bull. JSME. 1983. Vol. 26. No 214. P. 576–583.
4. Pitz W., Cernansky N., Dryer F., Egolfopoulos F. Development of an experimental database and chemical kinetic models for surrogate gasoline fuels // SAE Paper 2007-01-0175. 2007. P. 1–25.
5. Burcat A., McBride B. Ideal gas thermodynamic data for combustion and air-pollution use // Techno Report TAE. No 697. 1993.

6. Potekhin V.M. Osnovy teorii himicheskikh processov tekhnologii organiceskikh veshchestv i neftepererabotki [Fundamentals of the theory of chemical processes, technology of organic substances and oil refining]. Moscow: Himizdat Publ., 2007. 944 p.
7. McBride B., Gordon S., Reno M. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual // NASA Report TM-4513, 1993. 250 p.
8. Daubert T., Danner R. Physical and thermodynamic properties of pure chemicals: Data compilations. Taylor & Francis, 1994. 142 p.
9. Kolesov YU.B., Senichenkov YU.B. Modelirovanie sistem. Praktikum po kompyuternomu modelirovaniyu [Modeling of systems. Workshop on computer modeling]. SPb.: BHV-Peterburg Publ., 2007. 352 p.
10. Petzold L.R. A description of DASSL: A differential/algebraic system solver // Scientific Computing, 1983. P. 65–68.
11. Malozymov A.A. Barel'ef-termohimiya [Bas-relief thermochemistry]: svidetel'stvo o gosudarstvennoj registracii No 2018616031, Rossijskaya Federaciya. Opublikovano 21.05.2018. Byul. No 6.
12. Fritzson P. Principles of object-oriented modeling and simulation with Modelica 3.3: A cyber-physical approach. New-York: Wiley, 2014. 1252 p.
13. OpenModelica. Rezhim dostupa: <https://openmodelica.org> (data obrashcheniya 24.10.2018).
14. OpenFOAM Foundation. Rezhim dostupa: [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com) (data obrashcheniya 24.10.2018).
15. Tihonov A.N., Samarskij A.A. Uravneniya matematicheskoy fiziki [Equations of mathematical physics]. Moscow: Nauka Publ., 1977. 735 p.
16. Senecal P., Schmidt D., Nouar I., Rutland C. Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization // International Journal of Multiphase Flow. 1999. No 25. P. 1073–1097.
17. O'Rourke P. Collective drop effects on vaporizing liquid sprays // PhD thesis. Princeton University. Princeton. 1981.
18. Crowe C., Sommerfeld M., Tsuji Y. Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press LLC, 1998. 509 p.
19. Bai C., Gosman A. Development of Methodology for Spray Impingement Simulation // SAE paper 950283. 1995.
20. Malozemov A.A. Development of software for calculation and optimization of diesel operating processes and fuel supply // International Conference on Industrial Engineering 2015. Procedia Engineering. 2015. No 129. Elsevier Ltd. P. 724–730.
21. Semyonov N.N. Self-ignition and chain reactions. Uspokhi himii. 1967. No 36, pp. 3–22 (in Russ.).