

TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH



LƯ HUỆ PHƯỚC

**NGHIÊN CỨU KHÍ THẢI CỦA ĐỘNG CƠ Ô TÔ
SỬ DỤNG HỖN HỢP NHIÊN LIỆU 2,5-
DIMETHYLFURAN-DIESEL**

ĐỀ ÁN TỐT NGHIỆP THẠC SĨ

Ngành: Kỹ Thuật Ô Tô

Mã số: 8520130

Thành phố Hồ Chí Minh, tháng 10 năm 2025

TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH



LƯ HUỆ PHƯỚC

**NGHIÊN CỨU KHÍ THẢI CỦA ĐỘNG CƠ Ô TÔ
SỬ DỤNG HỖN HỢP NHIÊN LIỆU 2,5-
DIMETHYLFURAN-DIESEL**

ĐỀ ÁN TỐT NGHIỆP THẠC SĨ

Ngành: Kỹ Thuật Ô Tô

Mã số: 8520130

NGƯỜI HƯỚNG DẪN: TS. TRẦN VIỆT DŨNG

Thành phố Hồ Chí Minh, tháng 10 năm 2025

BỘ XÂY DỰNG
TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI
THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH

Số: 251020-09/QĐ-UTH-SDH

CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập - Tự do - Hạnh phúc

TP. Hồ Chí Minh, ngày 20 tháng 10 năm 2025

QUYẾT ĐỊNH

Về việc thành lập Hội đồng đánh giá đề án tốt nghiệp thạc sĩ

HIỆU TRƯỞNG

TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH

Căn cứ Quyết định số 66/2001/QĐ-TTg ngày 26/4/2001 của Thủ tướng Chính phủ về việc thành lập Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh;

Căn cứ Quy chế Tổ chức và hoạt động của Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh ban hành theo Nghị quyết số 14/NQ-HĐTĐHGTVT ngày 11/01/2021 của Hội đồng Trường;

Căn cứ Quy chế tuyển sinh và đào tạo trình độ thạc sĩ ban hành kèm theo Quyết định số 33/QĐ-ĐHGTVT ngày 12/01/2022 của Hiệu trưởng Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh;

Căn cứ Quyết định số 250303-03/QĐ-UTH-SDH ngày 03 tháng 3 năm 2025 của Hiệu trưởng Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh về việc giao đề tài tốt nghiệp đối với các lớp chương trình đào tạo thạc sĩ;

Theo đề nghị của Viện trưởng Viện Đào tạo sau đại học.

QUYẾT ĐỊNH:

Điều 1. Thành lập Hội đồng đánh giá đề án tốt nghiệp thạc sĩ ngành Kỹ thuật ô tô (mã số 8520130) đối với học viên **Lư Huệ Phước** với đề tài: “Nghiên cứu khí thải của động cơ ô tô sử dụng hỗn hợp nhiên liệu 2,5-dimethylfuran-diesel”, người hướng dẫn: TS. Trần Việt Dũng, gồm các ông (bà) có tên sau:

1. TS. Lê Văn Vang	Trường ĐH GTVT TP.HCM	Chủ tịch Hội đồng;
2. TS. Hoàng Văn Sĩ	Trường ĐH GTVT TP.HCM	Ủy viên, phản biện;
3. PGS.TS. Lê Hữu Sơn	Trường ĐH Văn Lang	Ủy viên, phản biện;
4. PGS.TS. Đoàn Văn Đồng	Trường ĐH GTVT TP.HCM	Ủy viên;
5. TS. Đỗ Việt Dũng	Trường ĐH GTVT TP.HCM	Ủy viên, thư ký.

Điều 2. Quyết định có hiệu lực kể từ ngày ký. Các ông (bà) Viện trưởng Viện Đào tạo sau đại học, Trưởng phòng Kế hoạch - Tài vụ và ông (bà) có tên tại Điều 1 chịu trách nhiệm thi hành Quyết định này.

Nơi nhận:

- Như Điều 2;
- Hiệu trưởng (để b/c);
- Lưu: VT, VĐTSDH (Tú: 05b).

**KT. HIỆU TRƯỞNG
PHÓ HIỆU TRƯỞNG**


NGUYỄN VĂN XANG

**ĐỀ ÁN TỐT NGHIỆP ĐƯỢC HOÀN THÀNH TẠI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH**

Đại diện người hướng dẫn: TS. Trần Việt Dũng

(Ghi rõ họ, tên, học hàm, học vị, ký tên)

Đề án tốt nghiệp thạc sĩ được bảo vệ tại Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh ngày 27 tháng 10 năm 2025.

Thành phần Hội đồng đánh giá đề án tốt nghiệp thạc sĩ gồm:

(Ghi rõ họ, tên, học hàm, học vị của Hội đồng chấm bảo vệ đề án tốt nghiệp thạc sĩ theo Quyết định)

- | | |
|--------------------------|---------------------|
| 1. TS. Lê Văn Vang | Chủ tịch Hội đồng; |
| 2. TS. Hoàng Văn Sĩ | Ủy viên, phản biện; |
| 3. PGS.TS. Lê Hữu Sơn | Ủy viên, phản biện; |
| 4. PGS.TS. Đoàn Văn Đồng | Ủy viên; |
| 5. TS. Đỗ Việt Dũng | Ủy viên, thư ký. |

CHỦ TỊCH HỘI ĐỒNG

LỜI CAM ĐOAN

Tôi cam đoan:

Đề án tốt nghiệp

“Nghiên cứu khí thải của động cơ ô tô sử dụng hỗn hợp nhiên liệu 2,5-dimethylfuran-diesel”

1. Là công trình nghiên cứu của bản thân tôi được đúc kết từ quá trình học tập và nghiên cứu dưới sự hướng dẫn của thầy *TS. Trần Việt Dũng*.
2. Số liệu và kết quả trong đề án tốt nghiệp nghiên cứu là trung thực và chưa được công bố trong bất kỳ công trình nào khác.

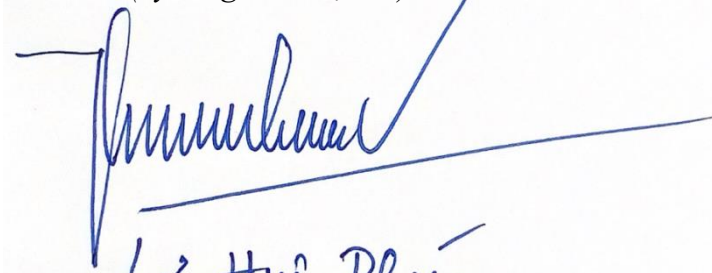
Tôi cũng xin cam đoan rằng mọi sự giúp đỡ cho việc thực hiện đề án tốt nghiệp này đã được cảm ơn và các thông tin trích dẫn trong đề án tốt nghiệp đã được chỉ rõ nguồn gốc.

Tôi xin chịu hoàn toàn trách nhiệm về nghiên cứu của mình.

Thành phố Hồ Chí Minh, tháng 10 năm 2025

Học viên thực hiện

(ký và ghi rõ họ tên)


Lu Huí Phước

LỜI CẢM ƠN

Trong quá trình nghiên cứu và hoàn thành đề án tốt nghiệp thạc sĩ tại Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh, tôi đã nhận được sự giảng dạy và hướng dẫn nhiệt tình của các thầy cô giáo. Tôi xin chân thành cảm ơn Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh, Viện Đào Tạo Sau Đại Học và Viện Cơ Khí đã tạo điều kiện để tôi học tập và hoàn thành tốt khóa học.

Tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành nhất tới TS. Trần Việt Dũng, người đã tận tình, chu đáo, hướng dẫn tôi trong suốt quá trình học tập, nghiên cứu để tôi có thể thực hiện và hoàn thành đề án.

Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành tới tất cả những thầy cô giáo đã giảng dạy và giúp đỡ tôi trong suốt quá trình nghiên cứu học tập.

Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến các thầy phản biện, các thầy trong hội đồng chấm đề án đã đồng ý đọc duyệt và đóng góp các ý kiến quý báu để tôi có thể hoàn chỉnh đề án này.

Cuối cùng tôi xin chân thành cảm ơn gia đình, tất cả bạn bè và những người đã đồng hành, giúp đỡ tôi trong suốt quá trình học tập và nghiên cứu.

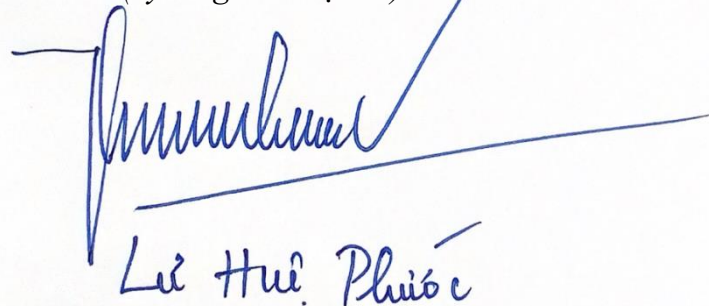
Mặc dù đã có nhiều cố gắng, song đề án tốt nghiệp không tránh khỏi những thiếu sót. Tôi rất mong nhận được ý kiến đóng góp của quý thầy cô và các bạn đọc để đề án tốt nghiệp được hoàn thiện hơn.

Xin trân trọng cảm ơn!

Thành phố Hồ Chí Minh, tháng 10 năm 2025

Học viên thực hiện

(ký và ghi rõ họ tên)



Lu Huí Phước

MỤC LỤC

LỜI CAM ĐOAN	i
LỜI CẢM ƠN	ii
MỤC LỤC	iii
DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT	vi
DANH MỤC BẢNG	ix
DANH MỤC HÌNH ẢNH	x
LỜI MỞ ĐẦU	1
1. Tính cấp thiết đề tài	1
2. Mục tiêu nghiên cứu.....	2
3. Đối tượng nghiên cứu.....	3
4. Phạm vi nghiên cứu.....	3
5. Phương pháp nghiên cứu.....	3
6. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề án.....	3
7. Kết cấu của đề án	4
CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN VỀ ĐỀ TÀI NGHIÊN CỨU.....	5
1.1. Tổng quan về ô nhiễm môi trường do phát thải của động cơ ô tô	5
1.1.1. Chỉ số chất lượng không khí	5
1.1.2. Hiện trạng và diễn biến chất lượng môi trường không khí.....	7
1.1.3. Sự phát triển các phương tiện giao thông ở Việt Nam	10
1.1.4. Tác động khí thải của động cơ đốt trong	12
1.2. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học hiện nay	16
1.2.1. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học trên thế giới.....	16
1.2.2. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học ở Việt Nam	25
1.3. Kết luận chương 1	27
CHƯƠNG 2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ NHIÊN LIỆU SỬ DỤNG TRÊN ĐỘNG	
CƠ DIESEL.....	28
2.1. Tính chất nhiên liệu diesel	28
2.1.1. Khái quát về nhiên liệu diesel.....	28
2.1.2. Thành phần hóa học nhiên liệu diesel.....	29
2.2. Tính chất nhiên liệu sinh học 2,5-dimethylfuran	30

2.2.1. Khái quát về 2,5-dimethylfuran	30
2.2.2. Tính chất lý hóa và thành phần hóa học của DMF	30
2.3. Con đường hóa học để chuyển đổi sinh khối thành DMF	33
2.3.1. Điều chế DMF bằng hệ thống hai pha	34
2.3.2. Điều chế DMF từ hệ thống dimethylacetamide	35
2.3.3. Điều chế DMF từ chất lỏng ion	37
2.3.4. Điều chế DMF từ hệ axit formic	38
2.4. Sự cháy của DMF trong động cơ đốt trong	40
2.4.1. Nghiên cứu lý thuyết về sự phân hủy và ôxy hóa DMF	40
2.4.2. Đặc điểm tính chất cháy của DMF	47
2.5. Cơ sở lý thuyết tính toán mô phỏng quá trình cháy trong động cơ khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel	53
2.5.1. Định luật nhiệt động học thứ nhất	53
2.5.2. Mô hình cung cấp môi chất	55
2.5.3. Mô hình cháy	55
2.5.4. Mô hình truyền nhiệt	59
2.5.5. Tính toán lưu lượng dòng khí nạp-thải	63
2.5.6. Mô hình phát thải	64
2.6. Kết luận chương 2	66
CHƯƠNG 3. MÔ PHỎNG ĐỘNG CƠ DIESEL SỬ DỤNG HỖN HỢP NHIÊN LIỆU DMF-DIESEL BẰNG PHẦN MỀM AVL BOOST	67
3.1. Giới thiệu phần mềm AVL Boost	67
3.1.1. Tổng quan	67
3.1.2. Các phần tử chính của phần mềm AVL Boost	67
3.1.3. Các lệnh của phần mềm AVL Boost	68
3.1.4. Các bước xây dựng mô hình	69
3.2. Xây dựng mô hình mô phỏng động cơ diesel D6AC	70
3.2.1. Thông số kỹ thuật của động cơ diesel D6AC	70
3.2.2. Mô hình mô phỏng động cơ diesel với AVL Boost	70
3.2.3. Cài đặt thông số dữ liệu đầu vào cho mô hình	71
3.3. Kết quả mô phỏng	76

3.3.1. Đánh giá độ tin cậy của mô hình mô phỏng	76
3.3.2. Kết quả mô phỏng khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel	78
3.4 Kết luận chương 3	83
KẾT LUẬN	85
1. Kết quả đạt được	85
2. Hạn chế.....	85
3. Kiến nghị	86
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	87

DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

TT	TỪ VIẾT TẮT	GIẢI NGHĨA
1	12-MPA	Axít 12-molybdophosphoric
2	AM	Phát thải bồ hóng ở chế độ tích lũy
3	AQI	Chỉ số chất lượng không khí
4	ARAS	Máy quang phổ hấp thụ cộng hưởng nguyên tử
5	ATDC	Sau điểm chết trên
6	BHMF	2,5-bishydroxymethylfuran
7	BMEP	Áp suất có ích trung bình
8	BMIMCl	1-butyl-3-methylimidazolium chloride
9	BSFC	Mức tiêu hao nhiên liệu
10	BTDC	Trước điểm chết trên
11	CA	Góc quay trục khuỷu
12	CI	Động cơ cháy nén
13	CMF	5-chloromethylfurfural
14	CO	Cacbon monoxít
15	CO ₂	Cacbon điôxít
16	CO _x	Cacbon ôxít
17	Cu:Ru/C	Đồng ruthenium
18	DFT	Phương pháp lý thuyết hàm mật độ
19	DHMF	2,5-dihydroxymethylfuran
20	DICI	Động cơ cháy nén phun trực tiếp
21	DMA	Dimethylacetamide
22	DMF	2,5-dimethylfuran
23	ĐCĐT	Động cơ đốt trong
24	ĐCT	Điểm chết trên
25	EF	2-ethylfuran
26	EGR	Hệ thống tuần hoàn khí thải
27	EHN	2-ethylhexyl nitrate
28	EI-MBMS	Phép đo quang phổ khối chùm phân tử ion hóa điện tử

29	EMIMCl	1-ethyl-3-methylimidazolium chloride
30	EPA	Cơ quan bảo vệ môi trường Hoa Kỳ
31	FAO	Tổ chức lương thực và nông nghiệp
32	FMF	Formyl ester
33	FMMF	Monoformyl ester
34	FTMS	Phép đo quang phổ khối truyền Fourier
35	FT-IR	Máy quang phổ hồng ngoại biến đổi Fourier
36	H ₂ SO ₄	Axit sulfuric
37	H ₂ SO ₃	Axit sulfuro
38	HC	Hydrocacbon
39	HCl	Axit hydrochloric
40	HCOOH	Axit formic
41	HD	Động cơ hạng nặng
42	HMF	5-hydroxymethylfurfural
43	HMMF	2-hydroxymethyl-5-methylfuran
44	HNO ₃	Axit Nitric
45	HRR	Tốc độ giải phóng nhiệt
46	IRRI	Viện nghiên cứu lúa gạo quốc tế
47	LiCl	Lithi clorua
48	MF	2-methylfuran
49	MFA	5-methylfurfuryl alcohol
50	MTHFA	5-methyltetrahydrofurfuryl alcohol
51	NLSH	Nhiên liệu sinh học
52	NM	Phát thải bồ hóng ở chế độ tạo mầm
53	NMVOC	Hợp chất hữu cơ không dễ bay hơi
54	NO ₂	Nitơ điôxít
55	NOAA	Cơ quan khí quyển và đại dương quốc gia Hoa Kỳ
56	NO _x	Nitơ ôxít
57	O ₃	Ôzôn
58	PAH	Hydrocacbon thơm đa vòng

59	Pd/C	Palladium cacbon
60	PM	Bồ hóng
61	PM _{0.1}	Bụi mịn có đường kính < 0,1 µm
62	PM _{2.5}	Bụi mịn có đường kính < 2,5 µm
63	PM ₁₀	Bụi mịn có đường kính < 10 µm
64	PSD	Kích thước hạt bồ hóng
65	RCM	Máy nén nhanh
66	SO ₂	Lưu huỳnh điôxit
67	SO _x	Lưu huỳnh ôxit
68	SVUV-PIMS	Khối quang phổ hóa cực tím chân không synchrotron
69	THF	Tetrahydrofuran
70	TSP	Bụi lơ lửng
71	WHO	Tổ chức Y tế Thế giới

DANH MỤC BẢNG

Bảng 1.1 Thang đo chỉ số AQI.....	6
Bảng 1.2 Giá trị giới hạn lớn nhất các thông số trong không khí	7
Bảng 1.3 Thống kê số liệu quan trắc môi trường không khí trên địa bàn Thành phố Hồ Chí Minh từ ngày 25/03/2024 đến 31/03/2024	9
Bảng 1.4 Thống kê số liệu đô thị ở nước ta qua các năm	10
Bảng 1.5 Chất ô nhiễm trong lĩnh vực giao thông vận tải	12
Bảng 2.1 Đặc điểm thuộc tính các thành phần trong DMF.....	31
Bảng 2.2 So sánh đặc tính hóa lý của DMF và diesel	32
Bảng 2.3 Phản ứng hình thành NO _x	64
Bảng 2.4 Phản ứng tạo thành CO	65
Bảng 3.1 Các phần tử chính của chương trình	68
Bảng 3.2 Các lệnh cơ bản trong chương trình.....	68
Bảng 3.3 Thông số động cơ D6AC	70
Bảng 3.4 Các phần tử sử dụng trong mô hình.....	71
Bảng 3.5 Tỷ lệ nhiệt trị thấp và A/F của hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel.....	73
Bảng 3.6 Thông số điều kiện biên đầu vào và đầu ra.....	76
Bảng 3.7 Kết quả so sánh động cơ, mô men xoắn giữa mô phỏng và thực tế của động cơ D6AC	77

DANH MỤC HÌNH ẢNH

Hình 1.1 Kích thước hạt bụi mịn $PM_{2.5}$ so với các vật tham chiếu	5
Hình 1.2 Bản đồ màu trên thế giới theo nồng độ $PM_{2.5}$ năm 2023 [10].....	8
Hình 1.3 Phương tiện giao thông là nguồn gây ô nhiễm chủ yếu ở nước ta	9
Hình 1.4 Số lượng ô tô qua các năm ở nước ta	11
Hình 1.5 Những tác động của khí thải tới môi trường [24].....	15
Hình 1.6 Sự bất thường về nhiệt độ toàn cầu so qua các năm [27]	15
Hình 1.7 Sản lượng nhiên liệu sinh học theo quốc gia/khu vực năm 2020 [28]	16
Hình 1.8 Áp suất xi lanh và tốc độ tỏa nhiệt của các loại nhiên liệu khác nhau ở mức 0,38 MPa BMEP (a) và 0,63 MPa BMEP (b) [32].....	18
Hình 1.9 Ảnh hưởng đặc tính nhiên liệu và tốc độ EGR đến thời gian cháy trễ và tốc độ tăng áp suất tối đa với tốc độ EGR khác nhau [33]	19
Hình 1.10 Ảnh hưởng việc bổ sung DMF hoặc ethanol lên: (a) thời gian cháy trễ (b) thời gian đốt cháy ở tốc độ EGR khác nhau ở 0,38 MPa BMEP [34]	20
Hình 1.11 Mức tiêu hao nhiên liệu tại: (a) 1330 vòng/phút, (b) 1990 vòng/phút [35] .	21
Hình 1.12 Áp suất xi lanh và tốc độ giải phóng nhiệt ở: (a) 0,2 MPa, (b) 1 MPa với 1330 vòng/phút [35]	22
Hình 1.13 Thời gian cháy trễ tại các tốc độ EGR khác nhau [36]	23
Hình 1.14 Ảnh hưởng EGR đến lượng bồ hóng với các loại nhiên liệu [37]	24
Hình 2.1 Tháp chưng cất phân đoạn dầu thô.....	28
Hình 2.2 Cấu trúc phân tử hai chiều và ba chiều của DMF	30
Hình 2.3 Con đường sản xuất DMF từ sinh khối [60]	33
Hình 2.4 Sơ đồ điều chế DMF từ fructose [62].....	34
Hình 2.5 Sơ đồ điều chế DMF từ hệ thống DMA [64]	36
Hình 2.6 Con đường phản ứng hydro hóa HMF [65].....	38
Hình 2.7 Lộ trình tổng hợp HMF thành DMF [66]	39
Hình 2.8 Phương pháp một bước để tạo DMF từ fructose [66]	39
Hình 2.9 Sơ đồ thế năng của 2,5-DMF + H [70].....	41
Hình 2.10 Sản lượng các loại sản phẩm khi chuyển đổi DMF [77]	43
Hình 2.11 So sánh tốc độ phản ứng các nhiên liệu khác nhau với OH [81]	45

Hình 2.12 Hệ số tốc độ phản ứng của $O(^3P)$ với mức 25 và 50 ppm nồng độ Furan, 2-MF, 2,5-DMF trong hỗn hợp 200 ppm SO_2/Ar [82]	46
Hình 2.13 So sánh thời gian cháy trễ của Xu và Sirjean [84]	48
Hình 2.14 Vận tốc cháy tầng với tỷ lệ tương đương và nhiệt độ khác nhau [91]	51
Hình 2.15 Chiều dài Markstein ở áp suất và tỷ lệ tương đương khác nhau [90]	52
Hình 2.16 Mô hình nhiệt trong xi lanh động cơ [93]	54
Hình 3.1 Sơ đồ các bước xây dựng mô hình mô phỏng trong AVL Boost.....	69
Hình 3.2 Mô hình mô phỏng động cơ D6AC trong AVL Boost.....	71
Hình 3.3 Nhiên liệu dùng mô phỏng	72
Hình 3.4 Thứ tự làm việc của xi lanh	74
Hình 3.5 Thiết lập thông số kỹ thuật xi lanh	75
Hình 3.6 Công suất động cơ mô phỏng so với thực tế	77
Hình 3.7 Mô men xoắn động cơ mô phỏng so với thực tế	78
Hình 3.8 Mức tiêu hao nhiên liệu động cơ mô phỏng so với thực tế	78
Hình 3.9 Đồ thị công suất động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu.....	79
Hình 3.10 Mô men xoắn của động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu	80
Hình 3.11 Mức tiêu hao nhiên liệu động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu.....	80
Hình 3.12 Lượng phát thải NO_x tương ứng với từng loại nhiên liệu	81
Hình 3.13 Lượng phát thải bồ hóng tương ứng với từng loại nhiên liệu	82
Hình 3.14 Lượng phát thải CO tương ứng với từng loại nhiên liệu.....	83

LỜI MỞ ĐẦU

1. Tính cấp thiết đề tài

Ô nhiễm không khí là một vấn đề luôn được cộng đồng quan tâm, đánh giá, tìm hiểu rất nhiều trên thế giới, các loại khí thải này không màu, không mùi vị, tưởng như vô hình, đang ngày càng tấn công sức khỏe của con người. Theo thống kê thì ô nhiễm không khí giờ đây còn nguy hiểm hơn cả rượu và thuốc lá ảnh hưởng trực tiếp đến sức khỏe con người trên trái đất [1].

Do mật độ dân số lớn, nguồn phát tán khí thải độc hại làm suy giảm chất lượng không khí chủ yếu ở khu vực đô thị và một phần ở khu vực nông thôn. Tại khu vực đô thị, mật độ đô thị hóa đạt mức cao dẫn đến các hoạt động phương tiện giao thông, xe cộ, xây dựng, sản xuất công nghiệp ngày càng gia tăng, là nguồn phát tán chính gây ô nhiễm môi trường không khí. Ở Việt Nam tình hình ô nhiễm có những diễn biến rất phức tạp, luôn nằm trong danh sách dẫn đầu thế giới về ô nhiễm không khí đặc biệt là ở hai thành phố lớn như là Hà Nội và Thành phố Hồ Chí Minh. Tại khu vực nông thôn, nguồn ô nhiễm không khí thấp hơn rất nhiều ở đô thị, chủ yếu là do đốt rơm rạ trong sản xuất nông nghiệp.

Phương tiện giao thông vận tải luôn giữ một vai trò rất quan trọng trong nền kinh tế xã hội, thúc đẩy quá trình công nghiệp hóa, hiện đại hóa đất nước. Sự gia tăng nhanh chóng các phương tiện này là nguyên nhân chính làm cho nguồn nhiên liệu hóa thạch cạn kiệt và gây ô nhiễm môi trường. Qua những thách thức trên cần có những giải pháp mang tính cấp bách để xử lý vấn đề này. Ước tính trung bình mỗi ngày thế giới tiêu thụ 90 triệu thùng dầu thô, đa phần được sử dụng cho phương tiện giao thông vận tải. Nhu cầu sử dụng nhiên liệu tăng gây nguy cơ cạn kiệt nhiên liệu và làm giá dầu mỏ tăng lên, ảnh hưởng rất lớn đến nền kinh tế chung của thế giới. Bên cạnh đó, sử dụng lớn nguồn nhiên liệu hóa thạch sản sinh ra rất lớn lượng khí thải phát tán vào môi trường gây ô nhiễm bầu khí quyển, trong khí thải có các chất như nitơ ôxít (NO_x), cacbon ôxít (CO_x), hydrocacbon (HC), bồ hóng (PM), lưu huỳnh ôxít (SO_x),... gây ảnh hưởng trực tiếp đến sức khỏe con người, cũng như toàn bộ sinh vật trên trái đất. Hiện nay, không chỉ Việt Nam mà trên thế giới đã nghiên cứu và áp dụng nhiều biện pháp khác nhau để giảm phát thải từ phương tiện giao thông như: trang bị các bộ xử lý khí thải, áp dụng các biện pháp công nghệ để cải tiến kết cấu buồng cháy, sử dụng hệ

thống tuần hoàn khí thải,... thì biện pháp sử dụng nhiên liệu sinh học (NLSH) cho động cơ đang được nhiều nước áp dụng.

Việt Nam là một nước nông nghiệp, có tiềm năng rất lớn về nguyên liệu để sản xuất NLSH phục vụ trong đời sống. Sử dụng NLSH đang là xu thế phát triển tất yếu trên thế giới, nhất là các nước nông nghiệp, tận dụng triệt để nguyên liệu thực vật tại chỗ, cũng như nguồn nhân lực dồi dào, trong tương lai gần NLSH sẽ thay thế một phần hoặc hoàn toàn các nguồn nhiên liệu hóa thạch như trước đây.

Hiện nay, NLSH được sử dụng cho động cơ đốt trong (ĐCĐT) khá đa dạng như ethanol, butanol, biodiesel, dimethyl ether (DME), 2,5-dimethylfuran (DMF),... các NLSH thường được sử dụng dưới dạng phối trộn thay thế một phần cho nhiên liệu hóa thạch truyền thống. Trong đó DMF là một chất hữu cơ không tan trong nước và tan mạnh trong xăng dầu nên rất thích hợp dùng để phối trộn. DMF là chất lỏng, tỷ lệ hàm lượng hydrocacbon cao nên quá trình cháy tạo ra ít phát thải CO₂, nhiệt độ sôi khoảng 93°C, với mật độ năng lượng khoảng 31,5 MJ/l, cao hơn hẳn so với etanol khoảng 23 MJ/l.

Sử dụng động cơ chạy bằng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel trên ô tô xử lý được ba vấn đề lớn một là giảm thiểu sự phát thải của các chất độc hại có trong khí thải so với sử dụng nhiên liệu thuần diesel, hai là tận dụng nguồn NLSH ở những nước nông nghiệp như Việt Nam, ba là sử dụng được cho các ô tô hiện đang dùng động cơ diesel mà không ảnh hưởng đến đặc tính kỹ thuật của động cơ.

Với các thực trạng trên, tác giả chọn đề tài ***“Nghiên cứu khí thải của động cơ ô tô sử dụng hỗn hợp nhiên liệu 2,5-dimethylfuran-diesel”*** là việc rất cần thiết với xu hướng hiện nay.

2. Mục tiêu nghiên cứu

- Xác định hàm lượng các thành phần khí thải của động cơ diesel và động cơ sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel.
- Đánh giá, so sánh phát thải của động cơ diesel khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel với nhiên liệu diesel nguyên chất.
- Đánh giá về khả năng sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel trên động cơ diesel.

3. Đối tượng nghiên cứu

- Nhiên liệu: Dầu DO 0,05S-II và DMF.
- Đặc tính khí thải phát ra khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel trên động cơ diesel.

4. Phạm vi nghiên cứu

- Đề án thực hiện mô phỏng động cơ diesel D6AC sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel lắp trên ô tô tải.
- Nghiên cứu về đặc tính khí thải phát ra khi hòa trộn nhiên liệu DMF vào diesel nguyên chất theo các tỷ lệ khác nhau, tương ứng với tỷ lệ DMF theo phần trăm thể tích là 10%, 20% và 30%.

5. Phương pháp nghiên cứu

- Nghiên cứu lý thuyết về các khí thải gây ô nhiễm trong động cơ diesel, những tác hại của các khí thải này đến môi trường và sức khỏe con người.
- Nghiên cứu, phân tích cơ sở lý thuyết quá trình sản xuất, tổng hợp DMF và ứng dụng DMF trong động cơ diesel trong và ngoài nước làm cơ sở cho việc định hướng nghiên cứu.
- Nghiên cứu lý thuyết về quá trình cháy của DMF, đặc điểm, tính chất phân hủy, oxy hóa và phát thải của DMF trong động cơ diesel.
- Nghiên cứu xây dựng mô hình mô phỏng trên phần mềm AVL Boost để xác định thành phần phát thải khí dùng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel.

6. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề án

- Trên cơ sở lý thuyết về nhiên liệu DMF đề án có ý nghĩa trong việc xây dựng được phương pháp xác định thành phần khí thải trên động cơ diesel khi sử dụng hỗn hợp DMF-diesel.
- Đã xây dựng thành công mô hình mô phỏng động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel trên phần mềm mô phỏng AVL Boost để xác định lượng phát thải của động cơ diesel, so sánh được sự phát thải của động cơ diesel khi sử dụng nhiên liệu diesel nguyên chất và hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel.
- Đề án đã góp phần định hướng về sự đa dạng NLSH dùng cho động cơ diesel góp phần tạo ra một nguồn nhiên liệu mới cho động cơ, tối thiểu hóa sự phụ thuộc

vào nguồn nhiên liệu hóa thạch, góp phần làm giảm các chất độc hại có trong khí thải của động cơ diesel.

7. Kết cấu của đề án

Đề án được trình bày trong ba chương với cấu trúc như sau:

Lời mở đầu

Chương 1. Tổng quan về đề tài nghiên cứu.

Chương 2. Cơ sở lý thuyết về nhiên liệu sử dụng trên động cơ diesel.

Chương 3. Mô phỏng động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel bằng phần mềm AVL Boost.

Kết luận và kiến nghị.

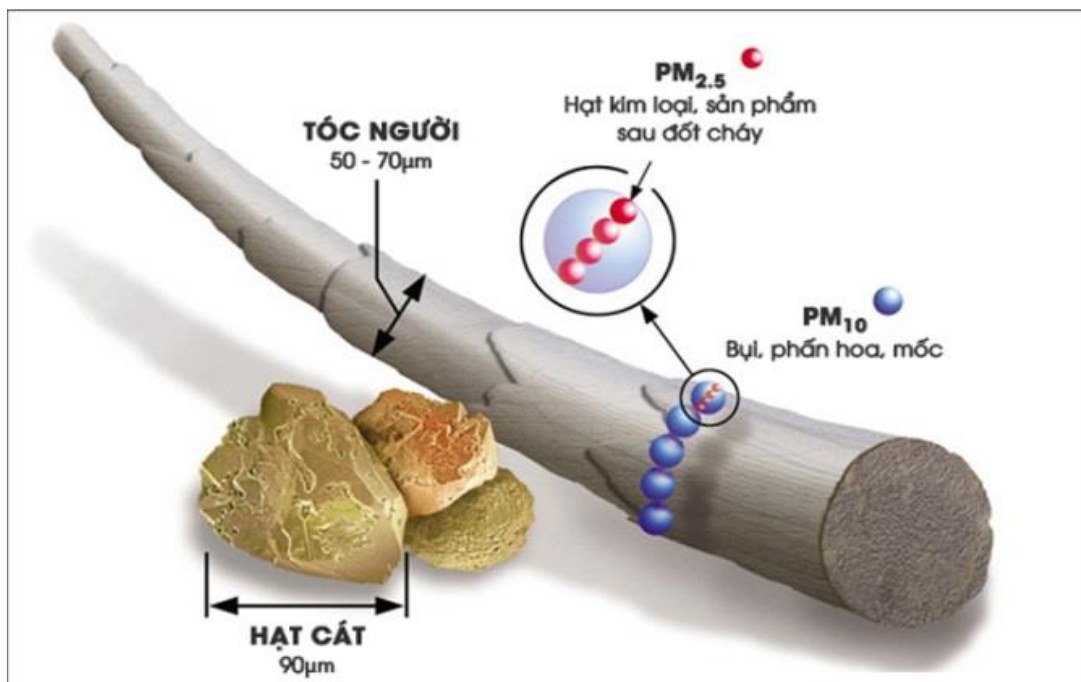
CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN VỀ ĐỀ TÀI NGHIÊN CỨU

1.1. Tổng quan về ô nhiễm môi trường do phát thải của động cơ ô tô

1.1.1. Chỉ số chất lượng không khí

Ô nhiễm không khí luôn là mối nguy lớn đe dọa đến sức khỏe con người. Ước tính cứ chín ca tử vong trên thế giới thì có một ca tử vong do ô nhiễm không khí gây ra. Các loại khí thải độc hại này chính là kẻ giết người thầm lặng, nó gây ra khoảng bảy triệu ca tử vong sớm hàng năm [1]. Tiếp xúc lâu ngày trong môi trường có nhiều bụi mịn $PM_{2.5}$ làm ảnh hưởng đến sức khỏe nghiêm trọng, có thể mắc các bệnh như hen suyễn, ung thư, đột quỵ [2]. Ngoài ra, còn làm chậm phát triển ở trẻ em, dẫn đến mắc các bệnh liên quan đến não bộ.

Biến đổi khí hậu chủ yếu do phát thải khí nhà kính, trong số các chất độc hại đó bụi mịn $PM_{2.5}$ đóng vai trò then chốt trong việc ảnh hưởng đến nồng độ các chất gây ô nhiễm không khí. Đồng thời, phát thải từ các động cơ đốt trong dùng nhiên liệu hóa thạch là nguyên nhân gây ra phần lớn số ca tử vong có liên quan đến bụi mịn $PM_{2.5}$ [3]. Bụi mịn $PM_{2.5}$ là các hạt có kích thước siêu nhỏ, lơ lửng trong môi trường không khí có đường kính 2,5 micromét (μm) trở xuống. Phát thải do nhiên liệu hóa thạch là nguồn phổ biến do con người tạo ra, chiếm 65% lượng phát thải CO_2 [4], [5], [6], [7].



Hình 1.1 Kích thước hạt bụi mịn $PM_{2.5}$ so với các vật tham chiếu

Nguồn: Cục Bảo Vệ Môi Trường Hoa Kỳ (2024)

Chỉ số chất lượng không khí AQI (Air Quality Index) là chỉ số để mô tả mức độ bụi mịn PM_{2.5} của Tổ chức Y tế Thế giới (WHO) về mức độ phơi nhiễm bụi mịn PM_{2.5}. WHO đã công bố ngưỡng phơi nhiễm trung bình hàng năm từ 0-5 microgam/mét khối ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) sẽ giảm thiểu được các rủi ro gây ảnh hưởng đến sức khỏe cho con người [8], [9]. Chỉ số AQI chuyển đổi nồng độ các chất ô nhiễm theo sáu loại thang màu khác nhau từ “tốt” (xanh lá) đến “nguy hiểm” (nâu sẫm).

Bảng 1.1 Thang đo chỉ số AQI

Mã màu	Mức độ	Giá trị AQI	Giá trị PM _{2.5} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Mô tả chất lượng không khí
Xanh lá	Tốt	0-50	5,1-10	Chất lượng không khí đạt yêu cầu và ô nhiễm không khí gây ra ít hoặc không có rủi ro cho sức khỏe con người.
Vàng	Trung bình	51-100	10,1-15	Chất lượng không khí ở mức chấp nhận được. Tuy nhiên, có thể có rủi ro đối với một số người, đặc biệt là những người nhạy cảm với ô nhiễm không khí.
Cam	Kém	101-150	15,1-25	Ảnh hưởng sức khỏe với những người đặc biệt nhạy cảm, những người có bệnh nền, hoặc người già và trẻ nhỏ.
Đỏ	Xấu	151-200	25,1-35	Không khí có chất lượng thấp làm tăng khả năng tác động đến mọi người, làm tổn thương tim và phổi với nhóm người đặc biệt nhạy cảm với ô nhiễm.
Tím	Rất xấu	201-300	35,1-50	Đây là mức cảnh báo cao, sức khỏe mọi người bị ảnh hưởng đáng kể, nhóm người nhạy cảm nên hạn chế các hoạt động ngoài trời.
Nâu sẫm	Nguy hiểm	300 và cao hơn	>50	Đây là mức cảnh báo về tình trạng khẩn cấp, mọi người đều có khả năng bị ảnh hưởng nghiêm trọng bởi không khí bị ô nhiễm.

Nguồn: Cục Bảo Vệ Môi Trường Hoa Kỳ (2023)

Các tiêu chuẩn quy định giới hạn chất lượng không khí của Việt Nam được quy định cụ thể để kiểm soát, bảo vệ sức khỏe con người và môi trường. Các giá trị giới hạn được thể hiện trong Bảng 1.2.

Bảng 1.2 Giá trị giới hạn lớn nhất các thông số trong không khí

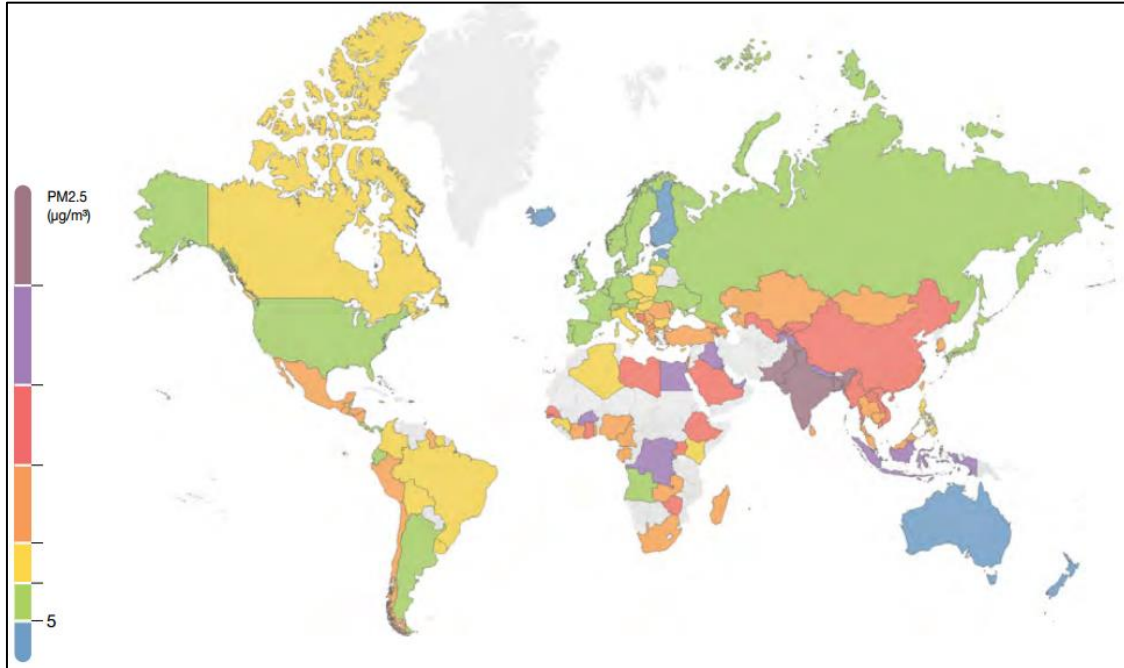
Thông số	Trung bình 1h	Trung bình 8h	Trung bình 24h	Trung bình năm
SO ₂	350	-	125	50
CO	30.000	10.000	-	-
NO ₂	200	-	100	40
O ₃	200	120	-	-
Tổng bụi lơ lửng (TSP)	300	-	200	100
Bụi PM ₁₀	-	-	100	50
Bụi PM _{2,5}	-	-	50/45*	25
Ghi chú: - Đơn vị: µg/Nm ³ - Dấu (-) là không quy định. - (*): Giá trị nồng độ áp dụng từ ngày 01/01/2026.				

Nguồn: Bộ Tài Nguyên và Môi Trường (2023)

1.1.2. Hiện trạng và diễn biến chất lượng môi trường không khí

Chất lượng không khí trên thế giới đang trải qua sự biến động đáng lo ngại, một số khu vực trên thế giới đang phải đối mặt với mức độ ô nhiễm không khí cao, gây ra nhiều vấn đề sức khỏe và môi trường. Đối với một số quốc gia, việc giảm thiểu ô nhiễm không khí đã trở thành ưu tiên hàng đầu trong các chính sách và ban hành các biện pháp hành động. Chất lượng môi trường không khí được đánh giá thông qua các chỉ tiêu thu thập được ở các quốc gia, khu vực trên thế giới. Các chỉ tiêu này là quá trình tổng hợp, thu thập số liệu ở các trạm quan trắc môi trường không khí tự động và định kỳ được phân bố rộng rãi trên khắp các vị trí trọng điểm của quốc gia. Báo cáo chất lượng không khí thế giới năm 2023 cung cấp đánh giá toàn cầu về dữ liệu chất lượng không khí cho năm 2023. Báo cáo tóm tắt dữ liệu chất lượng không khí PM_{2.5} từ 7.812 thành phố trải dài trên 134 quốc gia, khu vực và vùng lãnh thổ. Dữ liệu được sử dụng để báo cáo được tổng hợp từ hơn 30.000 trạm quan trắc môi trường không khí do các tổ chức nghiên cứu, cơ quan chính phủ, trường đại học, cơ sở giáo dục, tổ chức phi lợi nhuận, doanh nghiệp và các nhà khoa học vận hành [10]. Đứng đầu trong danh sách quốc gia có chỉ số bụi

mịn PM_{2.5} năm 2023 là Bangladesh, có chỉ số PM_{2.5} là 79,9 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ vượt mức chỉ tiêu gấp 16 lần mà WHO đặt ra cảnh báo nguy hiểm với sức khỏe con người [9].



Hình 1.2 Bản đồ màu trên thế giới theo nồng độ PM_{2.5} năm 2023 [10]

Năm 2023, có 10 trong số 134 quốc gia và khu vực được báo cáo đã thành công trong việc đạt được giá trị hướng dẫn PM_{2.5} hàng năm của WHO là 5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Với chỉ 9% thành phố được báo cáo trên toàn cầu đạt được hướng dẫn PM_{2.5} hàng năm của WHO, vẫn còn rất nhiều việc phải làm để chống ô nhiễm không khí [3].

Tình hình chất lượng môi trường không khí ở Việt Nam hiện nay được Chính Phủ **đặc biệt** quan tâm để cải thiện đời sống của người dân, ô nhiễm không khí chịu ảnh hưởng từ đô thị đến nông thôn, tập trung chủ yếu ở hai thành phố lớn là Hà Nội và Thành phố Hồ Chí Minh. Theo thống kê từ báo cáo chất lượng môi trường không khí năm 2023, Việt Nam đứng thứ 22 trong số các quốc gia có chỉ số bụi mịn PM_{2.5} là 29,6 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ cao gấp 5,9 lần mức khuyến cáo của WHO đặt ra, nồng độ PM_{2.5} trong năm 2023 tăng gấp 9% so với năm 2022 [9]. Các nguồn gây ô nhiễm chính gồm: sản xuất công nghiệp, giao thông vận tải, khí thải của nhà máy điện chạy than, nấu ăn và sưởi ấm bằng nhiên liệu sinh khối và than đá, khí thải từ nông nghiệp sau khi kết thúc vụ mùa. Trong số các nguồn ô nhiễm này thì hoạt động từ giao thông vận tải được xác định là nguyên nhân chủ yếu gây phát thải khí ô nhiễm. Sự gia tăng nhanh chóng về

các phương tiện tham gia giao thông, đồng thời các xe đã cũ, quá hạn sử dụng vẫn đang được lưu thông dẫn đến lượng phát thải ngày càng lớn.



Hình 1.3 Phương tiện giao thông là nguồn gây ô nhiễm chủ yếu ở nước ta

Nguồn: Tạp chí môi trường (2022)

Thực trạng môi trường không khí ở Việt Nam luôn vượt ngưỡng cho phép, cao hơn **nhều** lần tiêu chuẩn cho phép, chỉ số $PM_{2.5}$ có xu hướng tăng gần ở mức trước đại dịch xảy ra. Theo thống kê, tại Thành phố Hồ Chí Minh chỉ số $PM_{2.5}$ trung bình ở mức $21,8 \mu g/m^3$ thuộc nhóm kém, nhóm này ảnh hưởng mạnh mẽ đến sức khỏe những người mắc bệnh nền, người già và trẻ nhỏ. Trong quý IV của năm 2023 có những tháng có chỉ số $PM_{2.5}$ cao nhất nằm trong nhóm xấu, nhóm có khả năng tác động đến sức khỏe của mọi người, cụ thể tháng 11 chỉ số $PM_{2.5}$ đạt $31,9 \mu g/m^3$ [9] vượt quá mức khuyến cáo của WHO và quy chuẩn kỹ thuật quốc gia, chỉ số luôn nằm trong mức đáng báo động.

Theo Công văn số: 289/TTQT-TTDL [11] tổng hợp chất lượng không khí Thành phố Hồ Chí Minh được đăng trên các diễn đàn truyền thông, các mẫu đo đặc được lấy tại các trạm quan trắc trên địa bàn thành phố được trình bày trong Bảng 1.3.

Bảng 1.3 Thống kê số liệu quan trắc môi trường không khí trên địa bàn Thành phố Hồ Chí Minh từ ngày 25/03/2024 đến 31/03/2024

Thông số	TSP	PM_{10}	$PM_{2.5}$	Tiếng ồn	CO	NO_2	SO_2	Benzen
Số mẫu	252	24	24	252	252	252	252	252
Tỷ lệ	13,89%	100%	4,17%	99,21%	100%	100%	100%	3,57%

Nguồn: Sở Tài Nguyên và Môi Trường Tp. HCM (2024)

Kết quả quan trắc cho thấy các thông số quan trắc không đạt Quy chuẩn Việt Nam bao gồm: TSP có 13,89% số liệu vượt Quy chuẩn Việt Nam (QCVN 05:2023/BTNMT cho phép giới hạn tối đa trung bình 1 giờ: $300 \mu\text{g}/\text{Nm}^3$), thực tế dao động từ $70\text{-}950 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Tiếng ồn có 99,21% số liệu vượt Quy chuẩn Việt Nam (QCVN 26:2010/BTNMT cho phép giới hạn tối đa về tiếng ồn khu vực thông thường từ 6 giờ đến 21 giờ: 70 dBA), thực tế dao động từ 65,8-80,2 dBA. Benzen 3,57%, số liệu vượt Quy chuẩn Việt Nam (QCVN 05:2023/BTNMT cho phép giới hạn tối đa trung bình 1 giờ: $22 \mu\text{g}/\text{Nm}^3$), thực tế dao động từ KPH-28 $\mu\text{g}/\text{Nm}^3$. $\text{PM}_{2.5}$ có 4,17%, số liệu vượt Quy chuẩn Việt Nam (QCVN 05:2023/BTNMT cho phép giới hạn tối đa trung bình 1 giờ: $50 \mu\text{g}/\text{Nm}^3$), thực tế dao động từ 19-60 $\mu\text{g}/\text{Nm}^3$. Tất cả các thông số vượt Quy chuẩn Việt Nam chủ yếu do ảnh hưởng của hoạt động giao thông.

1.1.3. Sự phát triển các phương tiện giao thông ở Việt Nam

So với các nước láng giềng và thế giới, mật độ dân số nước ta tương đối cao, sự phân bố dân cư thành thị và nông thôn rất khác nhau. Với sự phát triển không ngừng của nước ta, quá trình hiện đại hóa tiếp tục được đẩy mạnh và số lượng thành phố tăng lên nhanh chóng. Cụ thể, tính đến cuối năm 2020, hệ thống đô thị nước ta có tổng cộng 862 **đô thị** các loại, phân bố tương đối đồng đều trên cả nước. Nền kinh tế đô thị phát triển nhanh chóng, đóng góp khoảng 70% vào GDP cả nước, sự tăng trưởng về mặt kinh tế, giáo dục, khoa học công nghệ ở các đô thị lớn đặc biệt là ở Hà Nội và Thành phố Hồ Chí Minh [12].

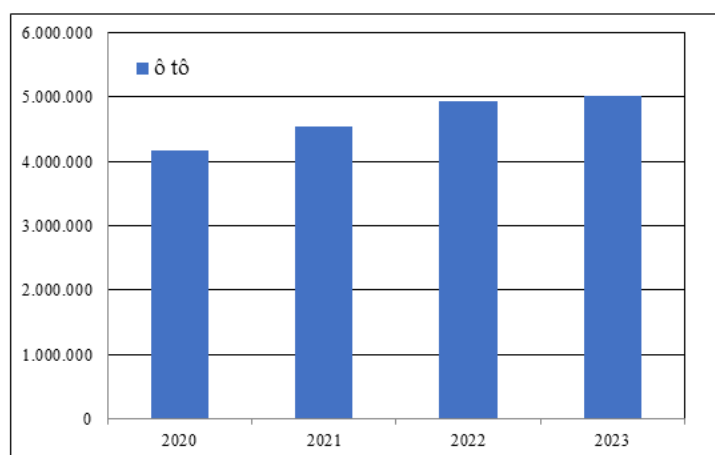
Bảng 1.4 Thống kê số liệu đô thị ở nước ta qua các năm

Năm Đô thị	2004	2017	2020	2021	2023
Loại đặc biệt	2	2	2	2	2
Loại I	2	17	23	23	23
Loại II	14	25	31	32	36
Loại III	20	43	48	48	45
Loại IV	52	85	90	90	95
Loại V	618	633	668	674	702

Nguồn: Bộ Xây Dựng (2023)

Quá trình đô thị hóa là một yêu cầu tất yếu để đất nước phát triển kinh tế, xã hội và nâng cao chất lượng cuộc sống của người dân. Vì vậy, mục tiêu chiến lược quốc gia

là đạt tỷ lệ đô thị hóa ít nhất 45% vào năm 2025 và trên 50% vào năm 2030 [12]. Bên cạnh những mặt tích cực, tốc độ đô thị hóa ngày càng tăng cũng kéo theo nhiều bất lợi cho xã hội. Cơ sở hạ tầng, dự án xây dựng, dự án giao thông và sự gia tăng dân số đô thị đã gây ra áp lực môi trường to lớn, gây ô nhiễm không khí, nước và đất. Dân số tập trung chủ yếu ở các thành phố lớn kéo theo nhu cầu vận chuyển tăng cao và là nguyên nhân chính khiến môi trường không khí đô thị bị đe dọa. Với nhu cầu đi lại rất lớn, người dân sử dụng ô tô làm phương tiện di chuyển luôn tăng qua các năm. Cụ thể, năm 2020 số lượng ô tô trong cả nước có 4.180.478 xe, đến năm 2023 con số đạt được 5.014.243 xe, số lượng ô tô tăng 19,94% qua các năm như Hình 1.4. Trong đó, năm 2022 các loại xe ô tô lưu thông trên đường bao gồm: 2.923.298 xe con, 292.872 xe khách, 1.662.082 xe tải, 135.991 xe khác (rơ-moóc, sơ mi rơ-moóc,...) Theo thông cáo báo chí về tình hình dân số của Tổng cục Thống kê, dân số Việt Nam năm 2022 đạt 99,46 triệu người. Như vậy tổng tỷ lệ xe ô tô trên 1.000 người dân là 50,4 ô tô/1.000 người dân. Hệ thống kết cấu hạ tầng giao thông ở nước ta có quy mô còn nhỏ, chưa được đầu tư phát triển mạnh mẽ, chất lượng đường xá còn kém chất lượng, so sánh với các nước lân cận trong khu vực, hệ thống kết cấu hạ tầng giao thông của nước ta ở mức thấp. Cùng với sự tăng trưởng cực kỳ nhanh chóng về số lượng phương tiện giao thông ở đô thị, dẫn đến rất nhiều thách thức khó khăn trong việc đảm bảo điều kiện môi trường ở hai thành phố trực thuộc **Trung ương**.



Hình 1.4 Số lượng ô tô qua các năm ở nước ta

Nguồn: Cục Đăng Kiểm Việt Nam

Người dân chủ yếu tập trung sinh sống và làm việc đông đúc tại Hà Nội và Tp. HCM. Mật độ dân số đông kèm theo quy mô đường xá nhỏ, vì vậy phương tiện đi lại

chủ yếu của người dân là xe mô tô, xe gắn máy. Cụ thể tại Tp. HCM, số lượng xe máy năm 2021 hơn 7,6 triệu xe tăng đến 8,3 triệu xe năm 2023, tỷ lệ tăng 9,2%; số lượng xe ô tô tăng 14%, từ 0,81 triệu xe lên 0,93 triệu xe. Còn tại Hà Nội, tính đến cuối năm 2023 Hà Nội quản lý trên 8 triệu phương tiện, số lượng xe máy là 6,7 triệu xe tăng 11,6%, số lượng ô tô là 1,1 triệu xe tăng 15,7%. Hà Nội là địa phương có số lượng ô tô nhiều nhất cả nước.

Sự gia tăng nhanh đô thị hóa trên cả nước làm cho các phương tiện giao thông phát triển nhanh chóng dẫn đến sự ô nhiễm bầu không khí ở khu vực thành thị nghiêm trọng đặc biệt là Tp. HCM, theo báo cáo hiện trạng môi trường Tp. HCM trong năm 2021, 90% các chất độc hại trong không khí được sản sinh ra là do giao thông. Trong số đó, xe máy là phương tiện đi lại chính của người dân cũng chính là nguyên nhân chính của việc phát thải. Các chất gây ô nhiễm trong khí thải được liệt kê trong Bảng 1.5 [13].

Bảng 1.5 Chất ô nhiễm trong lĩnh vực giao thông vận tải [13]

Nguồn	Chất ô nhiễm (tấn/năm)				
	PM _{2.5}	SO ₂	NMVOC	NO _x	CO
Tàu hỏa	0,17	18,1	0,74	9,7	2,8
Bến xe	2,7	1,1	3,9	56,3	16,7
Hàng không	11,98	75,5	165,6	1.254	1.374
Cảng biển/sông	293,6	2.006	260	4.121	749,5
Giao thông đường bộ	931,6	8.014	585.075	41.607	3.497.211
Tổng	1.240	10.115	585.506	47.048	3.499.354

Giao thông đường bộ là nguồn phát thải chất gây ô nhiễm nhiều nhất ở Tp. HCM, cụ thể PM_{2.5} chiếm 75,12%, SO₂ chiếm 79,22%, NMVOC chiếm 99,92%, NO_x chiếm 88,43%, CO chiếm 99,93%.

1.1.4. Tác động khí thải của động cơ đốt trong

a. Tác động khí thải đối với con người

ĐCĐT được sử dụng rộng rãi trong công nghệ ô tô chính là nguồn phát thải chủ yếu làm ô nhiễm môi trường, sự phát thải này đã gây ra không ít tác động xấu đến sức khỏe con người và môi trường sinh thái. Lượng khí thải vào khí quyển của ĐCĐT là sự kết tụ phức tạp của khí, hơi và vật chất dạng hạt. Thành phần nhiên liệu chủ yếu là các hydrocacbon, quá trình cháy trong buồng đốt của các hydrocacbon này vô cùng phức

tạp, ở kỳ cuối của quá trình cháy tạo ra khí thải độc hại như NO_x , CO, HC và bồ hóng [14].

Cacbon monoxít (CO): là khí không màu, không mùi, không vị nhưng có độc tính cao và dễ cháy. Sinh ra do sự cháy thiếu ôxy, do quá trình cháy tiến hành không được triệt để [15]. Khi chất này vào trong cơ thể con người nó ngăn chặn sự vận chuyển ôxy từ các cơ quan hô hấp đến khắp cơ thể của hemoglobin, làm ảnh hưởng đến các enzyme xúc tác cho phản ứng ôxy hóa khử làm cho cơ thể không thể sử dụng ôxy trong việc tạo ra năng lượng cho cơ thể, hơn thế làm cản trở sự giải phóng ôxy của hemoglobin trong các tế bào hồng cầu [16].

Nitơ ôxít (NO_x): sinh ra do hỗn hợp nhiên liệu và không khí quá nghèo, nhiệt độ của khí nạp và của quá trình cháy quá cao là nguyên nhân gây ra lượng NO_x quá mức [17]. Trong họ NO_x thì NO_2 là nguy hiểm nhất, NO_2 là chất khí màu hơi hồng, có mùi, rất khó hòa tan trong nước [14]. Khi chất khí này gặp hơi nước như nước mũi, nước mắt của con người sẽ hình thành nên axit nitric (HNO_3) làm co thắt phế quản, hủy hoại các tế bào hô hấp, thậm chí làm phù phổi ở mức độ **nặng**. Nồng độ trên 2 ppm làm ảnh hưởng đến hệ thống miễn dịch, đặc biệt là tế bào T CD8+. Việc tiếp xúc lâu dài với NO_x gây ra viêm phổi mãn tính và bệnh tim [18].

Sulfur điôxít (SO_2): là một loại khí vô hình, có mùi hăng, khó chịu. Là một chất rất háo nước nên rất dễ hòa tan vào hơi nước biến thành axit H_2SO_4 , H_2SO_3 . Khi hít phải khí sulfur điôxít ở nồng độ rất thấp có thể gây co thắt đường dẫn khí của phế quản. Tình trạng này được diễn ra mạnh mẽ hơn ở những người mắc bệnh phổi, người già và trẻ em [19]. Ngoài ra nó còn làm tổn thương mắt như chảy nước mắt, mờ giác mạc, cũng như làm trầm trọng thêm các bệnh về mắt có từ trước.

Hydrocacbon (HC): là nhiên liệu thô của các hợp chất hữu cơ được tạo thành từ các nguyên tử hydro và cacbon. Lượng HC có mặt trong khí thải do quá trình cháy không hoàn toàn khi hỗn hợp giàu hoặc do hiện tượng cháy không bình thường [14]. Các HC có hại được thải ra gồm benzen (C_6H_6), toluene (C_7H_8), các hydrocacbon thơm đa vòng (PAHs). Benzen không màu, có mùi ngọt, rất dễ cháy, tiếp xúc trong thời gian ngắn (5-10 phút) với nồng độ (10.000-20.000 ppm) có thể dẫn đến tử vong, ở nồng độ thấp (700-3.000 ppm) gây chóng mặt, đau đầu, nhịp tim tăng nhanh. Tiếp xúc lâu dài với benzen làm tổn thương tủy xương, làm giảm số lượng hồng cầu, dẫn đến

thiếu máu, ảnh hưởng đến hệ thống miễn dịch làm tăng nguy cơ nhiễm trùng, ảnh hưởng đến khả năng sinh sản cho cả nam giới và nữ giới. Mặt khác, theo cơ quan nghiên cứu ung thư quốc tế và EPA đều xác định rằng benzen có thể gây ung thư [20].

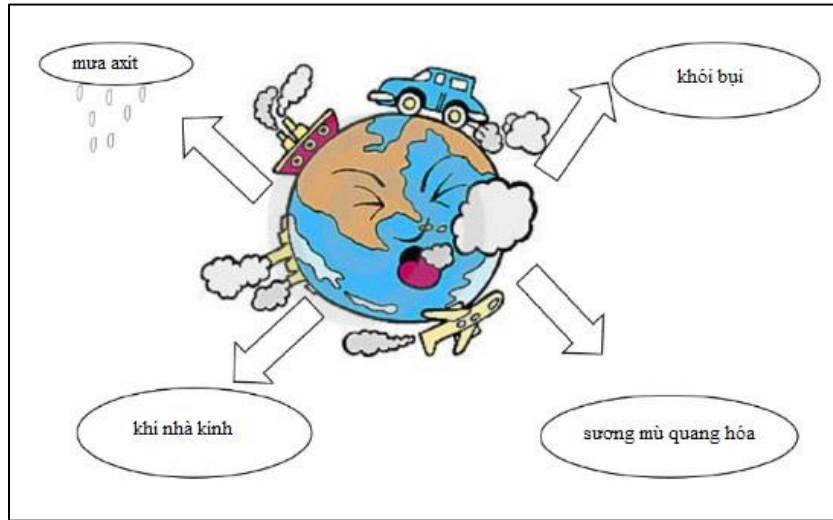
Chì (Pb): Chì được pha vào xăng để tăng tính chống kích nổ cho nhiên liệu. Kể từ tháng 7/2021, xăng pha chì đã không còn được tiêu thụ ở bất kỳ nơi nào trên thế giới [21]. Chì làm ức chế sự tổng hợp hemoglobin, ảnh hưởng đến phụ nữ mang thai, gây vô sinh ở nam giới, làm chậm sự phát triển ở trẻ em, gây ảnh hưởng đến hệ thần kinh, suy giảm trí nhớ. Ngoài ra, hàm lượng chì thấp ở trong thận cũng có thể gây ra tình trạng suy thận mãn tính [22].

Bồ hóng (PM): là những hạt có kích thước rất nhỏ được hình thành chủ yếu trong khí thải động cơ diesel. Tùy vào đường kính của hạt sẽ tác động khác nhau đến sức khỏe con người, các hạt có đường kính nhỏ hơn $10\text{ }\mu\text{m}$ (PM_{10}) có thể xâm nhập vào phổi sau khi hít phải và tích tụ ở trong các mô phổi, các hạt nhỏ hơn $2,5\text{ }\mu\text{m}$ ($\text{PM}_{2.5}$) xâm nhập sâu hơn vào các phế quản và phế nang của phổi, và những hạt nhỏ hơn $0,1\text{ }\mu\text{m}$ ($\text{PM}_{0.1}$) dễ dàng xuyên qua các thành mạch máu trực tiếp đi vào máu. Ngoài ra, tiếp xúc lâu dài với bụi hạt đóng vai trò trong sự phát triển của bệnh Alzheimer, làm tăng nguy cơ đột quỵ và tử vong do xuất huyết não cục bộ [22]. Người ta đã chứng minh rằng, cứ tăng $5\text{ }\mu\text{g}/\text{m}^3$ của $\text{PM}_{2.5}$ trong môi trường xung quanh thì tỷ lệ tử vong tăng 7% [23].

b. Tác động khí thải đối với môi trường

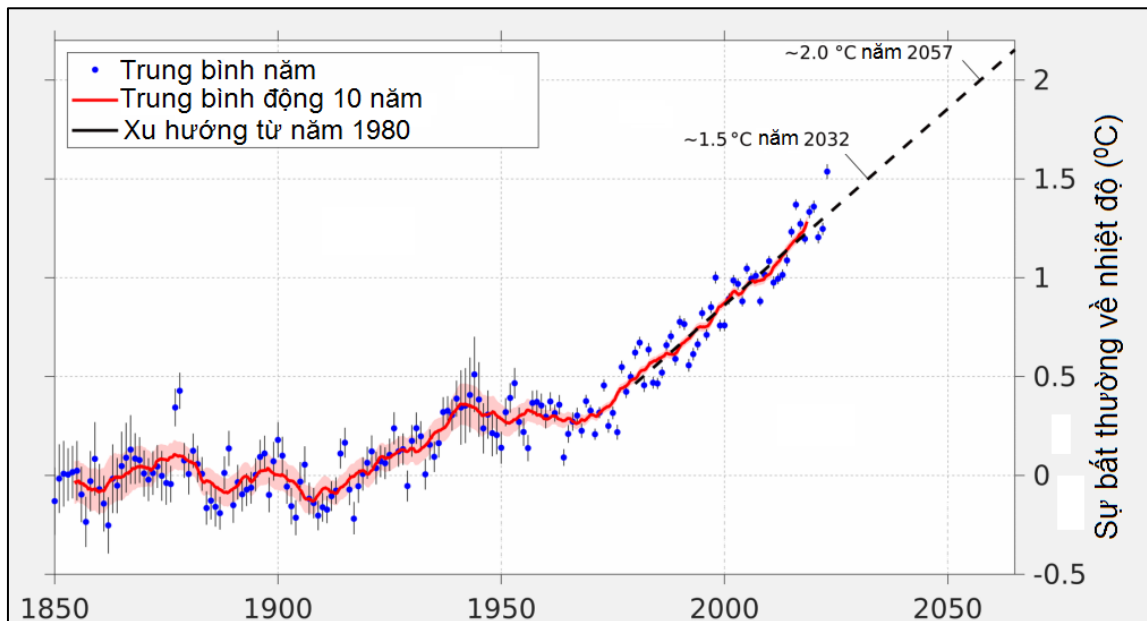
Nhiều loại khí nhà kính khác nhau được phát thải ra trong khí xả của động cơ, gây ra hai vấn đề rất lớn trên thế giới là mưa axit và hiện tượng nóng lên toàn cầu. Các khí nhà kính có thể hấp thụ nhiều nhiệt hơn từ nhiều nguồn khác nhau và làm nóng nhiệt độ của hành tinh, những tác động mà khí nhà kính gây ra đối với môi trường được gọi là hiệu ứng nhà kính. Khi môi trường bắt đầu nóng lên sẽ dẫn đến sự thay đổi nhiệt độ khí quyển và mực nước biển thay đổi, sự tan chảy của sông băng, xói mòn đất, thiên tai và sự gia tăng sức mạnh hàng năm của các cơn bão xuất hiện thường xuyên hơn. Mưa axit được hình thành từ các NO_x và SO_2 , mưa axit làm tăng tính oxy hóa các vật liệu kim loại của nhà cửa, cầu cảng,... gây hư hỏng, giảm tuổi thọ của vật liệu, làm tăng chi phí bảo dưỡng và thay thế [13]. Mưa axit làm giảm độ PH của nguồn nước gây hại cho các sinh vật sống dưới nước, làm tăng độ chua của đất, làm mất độ

màu mỡ của đất dẫn tới ảnh hưởng đến bộ rễ gây chết cây cối, hiện tượng sương mù xuất hiện dày đặc hơn dẫn đến ít mưa và bức xạ mặt trời. Tích tụ của bồ hóng trên các lá cây, làm giảm khả năng quang hợp, thoát nước làm cây cối bị hư hại [24].



Hình 1.5 Những tác động của khí thải tới môi trường [24]

CO₂ đóng vai trò chính trong việc gây hiệu ứng nhà kính, làm tăng nhiệt độ của trái đất. Lượng phát thải CO₂ do đốt nhiên liệu hóa thạch là 36,8 tỷ tấn vào năm 2023, tăng 1,1% so với năm 2022 [25]. Theo báo cáo khí hậu toàn cầu năm 2023 từ Cơ quan Khí quyển và Đại dương Quốc gia Hoa Kỳ (NOAA) nhiệt độ bề mặt toàn cầu vào năm 2023 tăng gần 1,18°C là năm ấm nhất đạt kỷ lục nhiệt độ tăng cao kể từ năm 1850 [26].



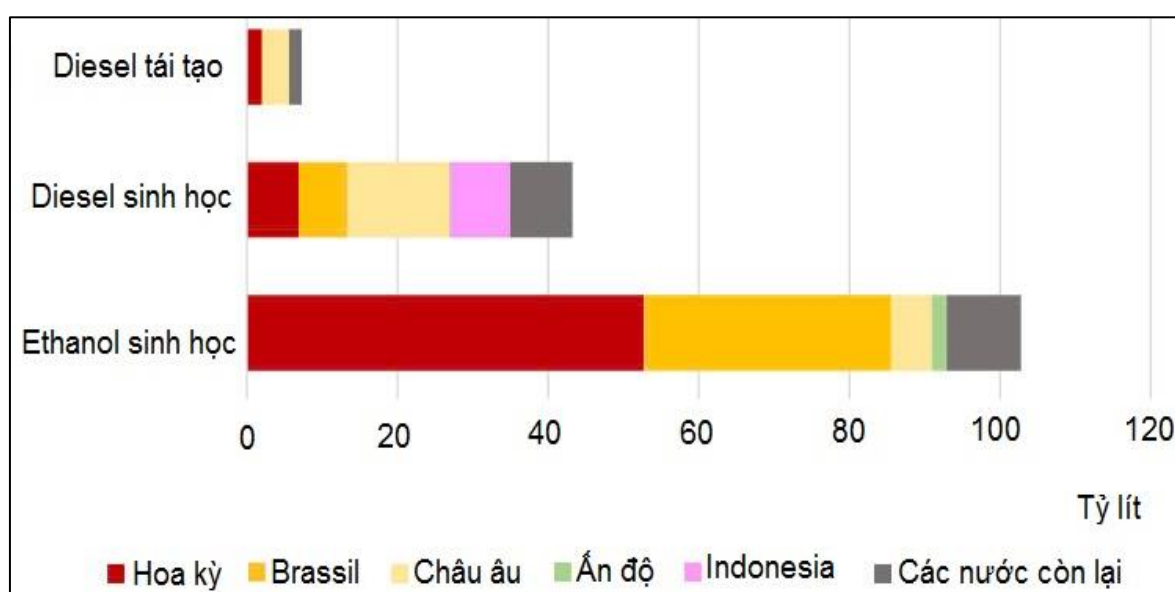
Hình 1.6 Sự bất thường về nhiệt độ toàn cầu so qua các năm [27]

Với tốc độ tăng trưởng nồng độ khí CO₂ như hiện nay thì nhiệt độ toàn cầu sẽ tăng dần lên đạt 1,5°C vào khoảng năm 2032 và sẽ đạt 2°C vào khoảng năm 2057 như thể hiện trong Hình 1.6, chính vì vậy cần phải sớm đạt được tiến bộ đáng kể trong việc giảm phát thải khí nhà kính.

1.2. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học hiện nay

1.2.1. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học trên thế giới

Ngày nay sự cạn kiệt tài nguyên nhiên liệu hóa thạch, phát thải khí nhà kính, biến đổi khí hậu và tương lai là vấn đề an ninh năng lượng của con người đã khuyến khích các nhà khoa học nghiên cứu, hoạch định các chính sách phát triển các nguồn năng lượng thay thế an toàn hơn và bền vững hơn. Trong các nguồn năng lượng thay thế, thì NLSH mang lại nhiều lợi ích, giảm thiểu ô nhiễm môi trường và phát triển kinh tế xã hội. Hiện nay, NLSH dạng lỏng tiêu biểu là diesel sinh học và ethanol sinh học được tập trung nghiên cứu sản xuất. Trên toàn cầu, có 102,8 tỷ lít ethanol sinh học, 43,2 tỷ lít dầu diesel sinh học được sản xuất năm 2020. Hoa Kỳ và Brasil là những nước sản xuất hàng đầu về ethanol sinh học, chiếm 80% sản lượng toàn cầu. Tại Hoa Kỳ, ethanol chiếm 10% lượng nhiên liệu tiêu thụ. Hầu hết các ô tô ở Hoa Kỳ đều có thể sử dụng xăng sinh học E10 và một số phương tiện giao thông khác có thể sử dụng hoàn toàn 100% nhiên liệu ethanol. Ethanol của Hoa Kỳ được sản xuất chủ yếu từ cây ngô. Tại Brasil, ethanol được sản xuất từ cây mía đường, đứng thứ hai trên thế giới về sản lượng ethanol chỉ sau Hoa Kỳ [28].



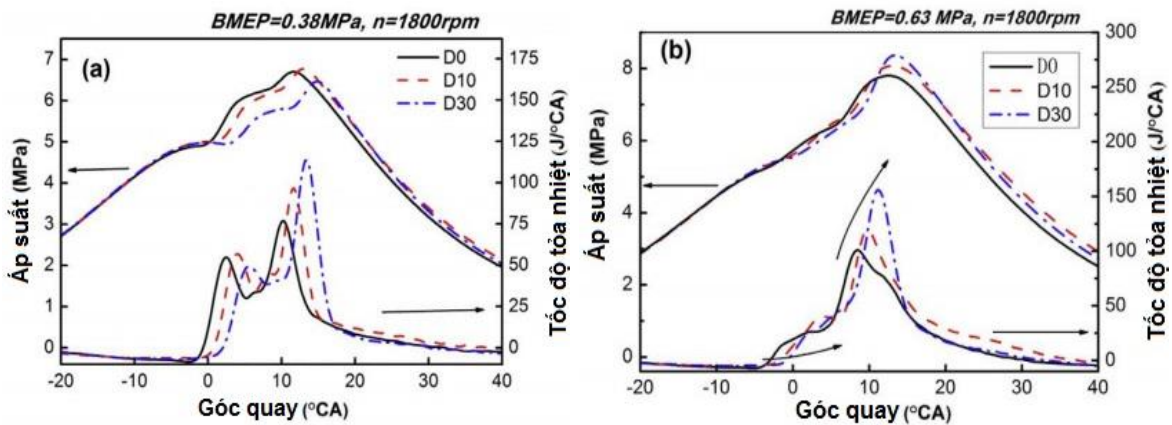
Hình 1.7 Sản lượng nhiên liệu sinh học theo quốc gia/khu vực năm 2020 [28]

Tại châu Âu, diesel sinh học được sản xuất nhiều nhất, đã tăng lên khoảng 84 triệu thùng vào năm 2022. Trong đó, Đức là quốc gia sản xuất diesel sinh học hàng đầu ở châu Âu với sản lượng 23 triệu thùng/năm. Tiếp theo sau Đức là Pháp với sản lượng 15 triệu thùng/năm. Nguyên liệu phổ biến để sản xuất bao gồm các loại cây trồng như củ cải đường, ngô, cải dầu, cũng như dầu ăn và mỡ động vật đã qua sử dụng. Tổng lượng tiêu thụ khoảng 17,02 triệu tấn nhiên liệu sinh học ở châu Âu vào năm 2021. Diesel sinh học được tiêu thụ nhiều nhất chiếm 80% cho lĩnh vực giao thông vận tải [29], [30]. Tại khu vực Đông Nam Á, Indonesia đang là nước dẫn đầu và phát triển rất nhanh chóng về sản lượng diesel sinh học, năm 2023 sản xuất 84,1 triệu thùng tăng gấp 10 triệu thùng so với năm 2022 [31].

Với nguồn NLSH đa dạng, các nhà nghiên cứu trên thế giới cũng đã sử dụng nguồn nhiên liệu DMF trên ĐCĐT. Do tính chất phức tạp và không ổn định của nhiên liệu chuyển động hỗn loạn bên trong buồng đốt, hầu hết các công trình nghiên cứu mô phỏng đều dựa vào đặc điểm cháy của nhiên liệu để mô tả và giải thích các thành phần hỗn loạn. Bao gồm một số vấn đề chính: hiệu suất cháy, góc đánh lửa, tỷ lệ không khí/nhiên liệu, hệ thống phun nhiên liệu, hiện tượng kích nổ, quá trình truyền nhiệt, động học phản ứng cháy,... Thật vậy, tốc độ cháy cao của nhiên liệu có thể cải thiện hiệu suất động cơ **nhưng** nó cũng dẫn đến áp suất và nhiệt độ cháy cao. Ngược lại, tốc độ cháy thấp của nhiên liệu ảnh hưởng nhiều đến tính năng kinh tế.

Helin Xiao và cộng sự [32] đã nghiên cứu đặc tính cháy và phát thải của động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel. Quá trình nghiên cứu thí nghiệm trên động cơ cháy nén phun trực tiếp DIC (DIC: **direct**-injection compression-ignition) 4 xi lanh, 4 kỳ và được làm mát bằng nước, tốc độ động cơ không đổi 1800 vòng/phút, tải từ 10% đến 90% trong khoảng 20%, tương ứng với áp suất có ích trung bình 0,13, 0,38, 0,63, 0,88, 1,13 MPa BMEP (BMEP: brake mean effective pressure). Thời điểm phun được duy trì tại góc quay trục khuỷu $7,5^\circ$ CA (CA: crank angle) (BTDC: Before top dead center) trước ĐCT. Hỗn hợp nhiên liệu được sử dụng để nghiên cứu gồm 0%, 10%, 30% DMF và diesel nguyên chất, được gọi lần lượt là D0, D10, D30. Kết quả nghiên cứu cho thấy, ở mức 0,38 MPa BMEP (tải 30%) khi tăng lượng DMF trong hỗn hợp áp suất cực đại của xi lanh giảm đáng kể và quá trình cháy muộn hơn góc quay trục khuỷu. Điều này là do khả năng cháy của DMF chậm hơn

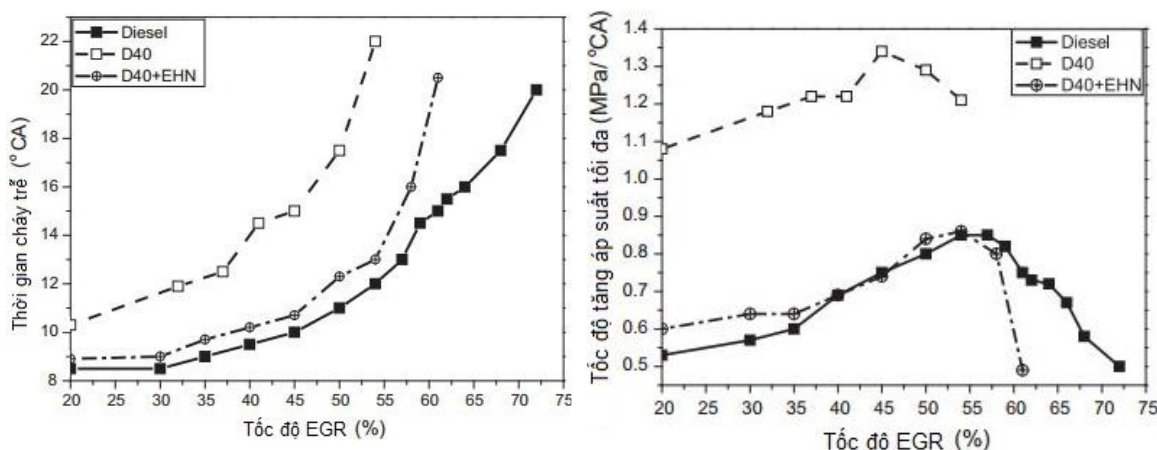
diesel, do chỉ số xêtan thấp hơn và ẩn nhiệt hóa hơi đều kéo dài thời gian cháy trễ. Tuy nhiên sự gia tăng lượng DMF trong hỗn hợp làm tăng đáng kể tốc độ tỏa nhiệt, nguyên nhân là do lượng DMF cao hình thành hỗn hợp dễ cháy hơn và cháy nhanh hơn. Ở mức 0,63 MPa BMEP (tải 50%) cả tốc độ tỏa nhiệt và áp suất cực đại của xi lanh đều tăng khi tăng lượng DMF trong hỗn hợp. Quá trình ôxy hóa DMF cũng đẩy nhanh quá trình đốt cháy và giải phóng nhiều năng lượng làm tăng đáng kể áp suất trong xi lanh (Hình 1.8).



Hình 1.8 Áp suất xi lanh và tốc độ tỏa nhiệt của các loại nhiên liệu khác nhau ở mức 0,38 MPa BMEP (a) và 0,63 MPa BMEP (b) [32]

Quangchang Zhang và cộng sự [33] đã nghiên cứu quá trình cháy và phát thải của động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel pha trộn với 2-ethylhexyl nitrate (EHN). Các thử nghiệm được thực hiện trên động cơ cháy nén một xi lanh hạng nặng CI (CI: compression **ignition**) 4 van, 4 kỳ, làm mát bằng nước, được trang bị hệ thống phun nhiên liệu common rail, tốc độ động cơ không đổi 1400 vòng/phút. Hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel (trong đó DMF chiếm 40%) được thử nghiệm trong nghiên cứu này, được gọi là D40. Và được bổ sung thêm 2% EHN vào D40, gọi tắt là D40+EHN, với mỗi loại nhiên liệu tỷ lệ tuần hoàn khí thải EGR (EGR: exhaust gas recirculation) thay đổi từ 0 đến giá trị tới hạn khiến động cơ không thể duy trì hoạt động ổn định bằng cách điều chỉnh van áp suất ngược và van EGR. Kết quả nghiên cứu cho thấy, D40 có thời gian cháy trễ dài nhất đối với tất cả các tốc độ của EGR. Thời gian cháy trễ của D40+EHN gần bằng diesel, nhưng với tỷ lệ EGR cao hơn sự khác biệt về thời gian cháy trễ của D40+EHN tăng lên so với diesel. Yếu tố quan trọng nhất ảnh hưởng đến thời gian cháy trễ là trị số xêtan, khi bổ sung thêm 2% EHN vào

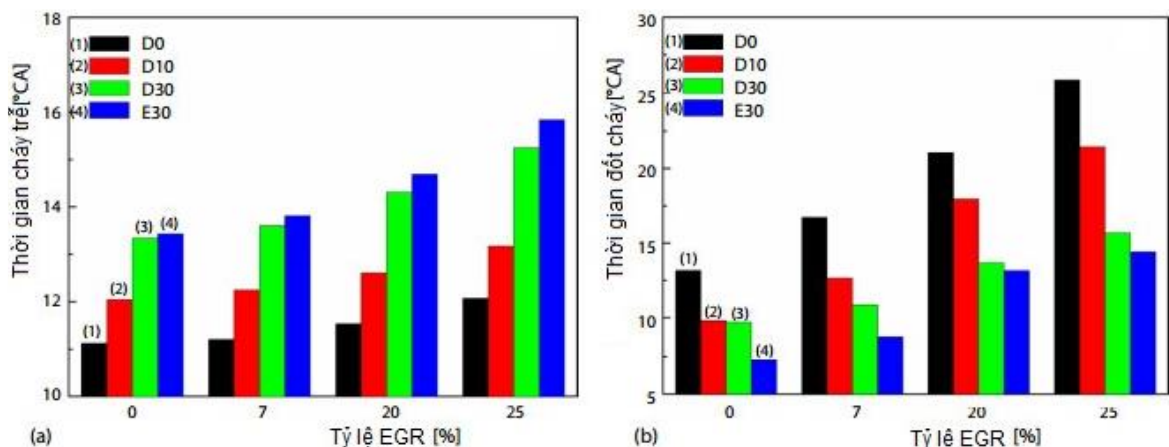
D40, trị số xêtan của D40+EHN tăng lên và thời gian cháy trễ giảm đi rất nhiều. Một kết quả khác cho thấy, tốc độ tăng áp suất tối đa của D40 là rất cao, nhưng khi bổ sung thêm 2% EHN tốc độ tăng áp suất tối đa của D40 giảm xuống ngang với mức diesel nguyên chất. Việc cân bằng giữa giảm phát thải bồ hóng (giảm thời gian cháy trễ) và tốc độ tăng áp suất tối đa (giảm tiếng ồn của động cơ) là rất khó cân đối, nhưng khi bổ sung 2% EHN thì đáp ứng được cả hai tiêu chí đề ra.



Hình 1.9 Ảnh hưởng đặc tính nhiên liệu và tốc độ EGR đến thời gian cháy trễ và tốc độ tăng áp suất tối đa với tốc độ EGR khác nhau [33]

Minrui WEI và cộng sự [34] đã nghiên cứu so sánh quá trình cháy và phát thải hạt của DMF-diesel và Ethanol-diesel trong động cơ diesel, động cơ được thử nghiệm cho nghiên cứu này là động cơ diesel bốn xi lanh, bốn kỳ, có tăng áp, làm mát bằng nước được trang bị hệ thống nhiên liệu common rail. Trong nghiên cứu này diesel nguyên chất (D0) làm nhiên liệu gốc, diesel được pha trộn với lượng DMF khác nhau (10% và 30%) được gọi tương ứng là D10 và D30. Diesel cũng được pha trộn với 30% ethanol (E30). Tốc độ của động cơ được giữ không đổi ở 1800 vòng/phút. Thời điểm phun cố định ở góc quay trục khuỷu $7,5^{\circ}$ CA BTDC. Tải trọng động cơ thay đổi từ 10-90% với mức tăng 20% tương ứng với 0,13, 0,38, 0,63, 0,88, 1,13 MPa với áp suất có ích trung bình BMEP. EGR thay đổi từ 0÷25% dưới tải động cơ 0,38 MPa. Kết quả nghiên cứu cho thấy, thời gian cháy trễ kéo dài khi tốc độ EGR tăng lên đối với mỗi loại nhiên liệu được thử nghiệm, do hàm lượng oxy trong xi lanh giảm và nhiệt dung riêng của hỗn hợp khí nạp tăng khi tốc độ EGR giảm. Thời gian cháy trễ bị kéo dài khi bổ sung DMF do trị số xêtan thấp hơn, nhiệt độ tự cháy cao hơn và ản nhiệt hóa hơi của DMF cao hơn. Còn đối với E30, do thời gian tự cháy và ản nhiệt hóa hơi cao hơn

nên thời gian cháy trễ dài hơn D30. Trong khi đó với việc tăng tỷ lệ EGR thời gian cháy trễ khác nhau rõ ràng hơn giữa D30 và E30, cho thấy độ pha loãng EGR cao đặc tính nhiên liệu sẽ ảnh hưởng đáng kể đến quá trình đánh lửa và cháy. Thời gian cháy thay đổi theo chiều hướng ngược lại so với thời gian cháy trễ, vì thời gian cháy trễ kéo dài có thể thúc đẩy quá trình trộn không khí/nhiên liệu và do đó đẩy nhanh quá trình đốt cháy hỗn hợp trước. Ngoài ra thời gian cháy của E30 ngắn hơn D30 là do trị số xêtan thấp hơn, độ bay hơi cao hơn và hàm lượng ôxy cao hơn. Cũng trong nghiên cứu này, áp suất tối đa trong xi lanh của D10 lớn hơn D0 ở cả hai điều kiện thử nghiệm với tỷ lệ EGR là 0% và 20% trong BMEP 0,38 MPa. Trong khi đó áp suất tối đa trong xi lanh của D30 giảm nhẹ và E30 cao hơn D30 ở cả hai điều kiện vận hành. Những khác biệt về quá trình đốt cháy chủ yếu là do sự khác biệt về trị số xêtan và tốc độ ôxy hóa của nhiên liệu, đối với D10 thời gian cháy trễ kéo dài, hàm lượng ôxy cao hơn có thể tăng cường quá trình đốt cháy trộn sẵn và đẩy nhanh tốc độ cháy so với D10, điều này làm tăng áp suất trong xi lanh.

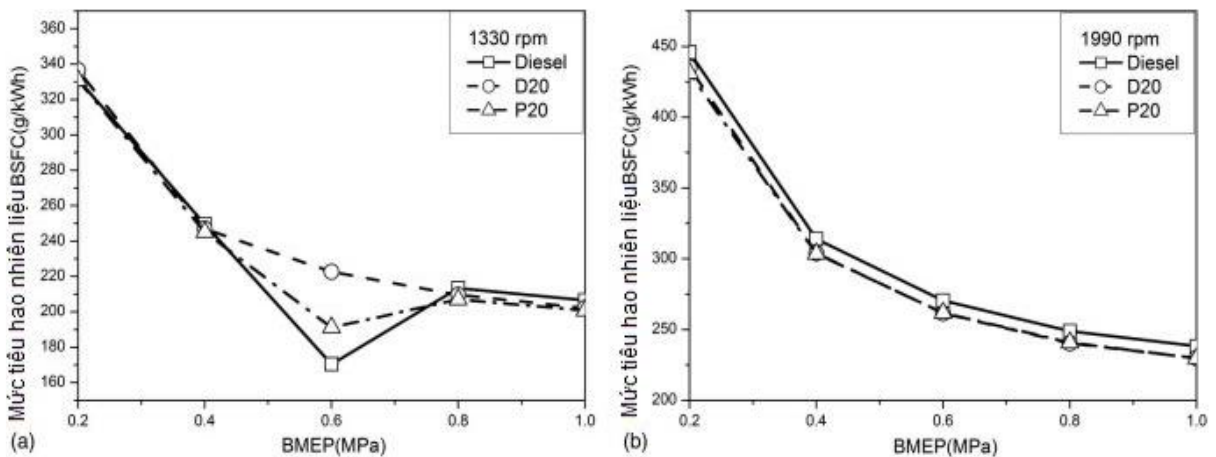


Hình 1.10 Ảnh hưởng việc bổ sung DMF hoặc ethanol lên: (a) thời gian cháy trễ (b) thời gian đốt cháy ở tốc độ EGR khác nhau ở 0,38 MPa BMEP [34]

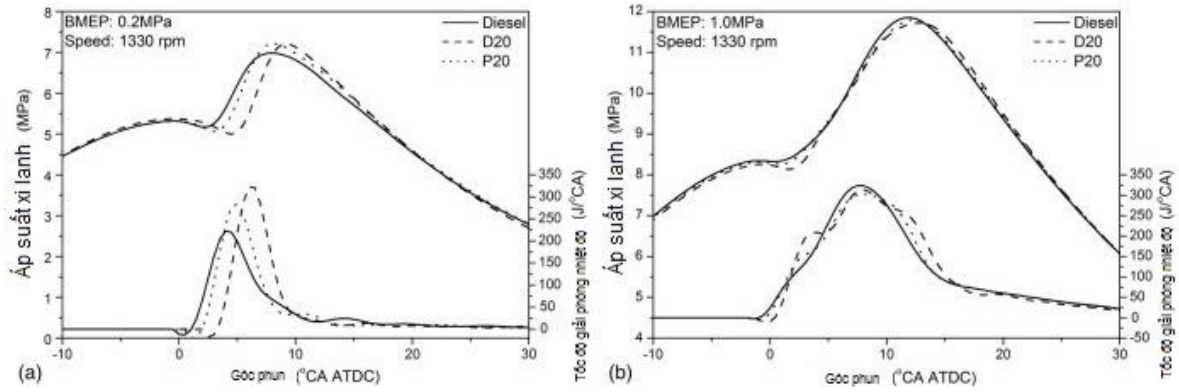
Vấn đề tiếp theo cũng phải được nghiên cứu sâu khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel là tính năng làm việc của động cơ hay hiệu suất của động cơ gồm các vấn đề như mức tiêu hao nhiên liệu, tốc độ tỏa nhiệt, mô men xoắn, công suất,... cũng ảnh hưởng tới quá trình làm việc của động cơ.

Quangchang Zhang và cộng sự [35] đã nghiên cứu đặc tính cháy và phát thải của động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu diesel, DMF/diesel và N-pentanol/diesel. Nghiên cứu này được thực hiện trên động cơ hạng nặng (HD: heavy-

duty) phun trực tiếp không có EGR, 6 xi lanh, tăng áp và làm mát bằng khí nạp. Nghiên cứu này đã thực nghiệm DMF-diesel (20% DMF theo thể tích) và n-pentanol-diesel (20% n-pentanol theo thể tích), được gọi lần lượt là D20 và P20. Tốc độ động cơ 1330 và 1990 vòng/phút được duy trì ổn định. Với mỗi tốc độ áp suất có ích trung bình BMEP là 0,2, 0,4, 0,6, 0,8, 1 MPa. Thời điểm phun nhiên liệu được cố định ở góc quay trục khuỷu -5° CA sau ĐCT (ATDC: After top dead center). Kết quả nghiên cứu cho thấy, mức tiêu hao nhiên liệu (BSFC: Brake Specific Fuel Consumption) tại 1330 vòng/phút, BSFC của nhiên liệu diesel, D20 và P20 hầu như không có sự khác biệt ngoại trừ tải ở áp suất có ích là 0,6 MPa, BSFC của D20 cao hơn diesel nguyên chất nguyên nhân là do nhiệt trị thấp của DMF thấp hơn diesel, nên BSFC tương đương diesel được tính toán trước khi thực hiện so sánh. BSFC tương đương diesel được xác định theo mức tiêu thụ năng lượng tương đối, BSFC của hỗn hợp được chuyển đổi thành BSFC của nhiên liệu diesel có cùng năng lượng. Tại 1990 vòng/phút BSFC của D20 và P20 tương đương với diesel. Cũng theo kết quả của nghiên cứu này, áp suất xi lanh và tốc độ giải phóng nhiệt độ (HRR: Heat Release Rate) ở mức tải 0,2 MPa tại tốc độ vòng quay 1330 vòng/phút của D20 cao hơn so với P20 và diesel, nguyên nhân là do trị số xêtan của DMF thấp dẫn đến thời gian cháy trễ lâu hơn, quá trình đốt cháy được đặc trưng bởi sự giải phóng nhiệt một giai đoạn, khối lượng phun nhỏ nên nhiên liệu và không khí hòa trộn hoàn toàn trước khi cháy. Ở mức tải 1 MPa, quá trình cháy chia làm hai giai đoạn (cháy khuếch tán và cháy trộn trước) và đường cong tỏa nhiệt của D20 được thể hiện rõ ràng hơn P20 và diesel, là do kéo dài thời gian cháy trễ của D20 dẫn đến hỗn hợp nhiên liệu và không khí nhiều hơn.

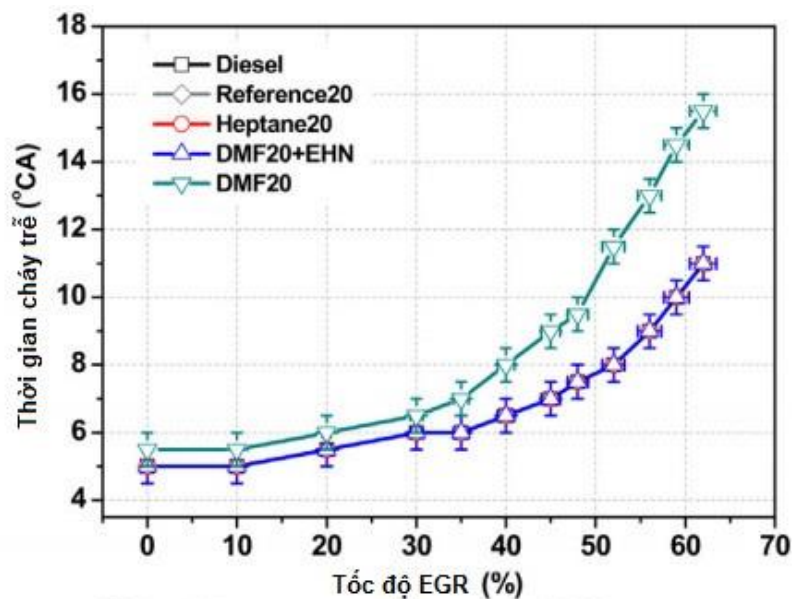


Hình 1.11 Mức tiêu hao nhiên liệu tại: (a) 1330 vòng/phút, (b) 1990 vòng/phút [35]



Hình 1.12 Áp suất xi lanh và tốc độ giải phóng nhiệt ở: (a) 0,2 MPa, (b) 1 MPa với 1330 vòng/phút [35]

Haifeng Liu và cộng sự [36] đã nghiên cứu ảnh hưởng của đặc tính nhiên liệu đến quá trình đốt cháy và phát thải ở cả chế độ đốt thông thường và chế độ đốt ở nhiệt độ thấp khi cấp nhiên liệu cho hỗn hợp DMF-diesel. Các thí nghiệm được tiến hành trên động cơ diesel một xi lanh, 4 kỳ, 4 van, làm mát bằng nước, được trang bị hệ thống phun nhiên liệu common-rail, nhiệt độ nạp được giữ ở mức 35°C và áp suất nạp được giữ ở mức 0,18 MPa. Tỷ lệ EGR dao động từ 0÷62% và tỷ lệ EGR này được tính bằng nồng độ CO_2 trong khí nạp và khí thải. Nhiên liệu sử dụng trong nghiên cứu này gồm: diesel nguyên chất, hỗn hợp 20% theo thể tích của hỗn hợp cetane và iso-cetane, n-heptane, DMF với diesel và DMF, diesel và EHN được gọi lần lượt là Reference20, Heptan20, DMF20, DMF20+EHN. Động cơ hoạt động ở tốc độ 1400 vòng/phút, thời gian phun nhiên liệu được cố định ở góc quay trục khuỷu -8°CA ATDC . Kết quả nghiên cứu cho thấy, đặc tính cháy của Reference20, Heptan20, DMF20+EHN rất giống với diesel nguyên chất, trong khi DMF20 có thời gian cháy trễ dài hơn và tỷ lệ đốt cháy hỗn hợp trước lớn hơn diesel. Điều này là do trị số xêtan của diesel cao hơn DMF, trong khi các tính chất lý hóa khác ít ảnh hưởng đến quá trình cháy. Hơn nữa, sự khác biệt về thời gian cháy trễ giữa DMF20 và diesel trở nên lớn hơn ở mức EGR cao hơn, điều này chỉ ra rằng tác dụng của trị số xêtan khi đánh lửa chậm hơn ở mức EGR cao hơn. Ngoài ra, thời gian cháy trễ của DMF20 dài hơn dẫn đến quá trình đốt trộn trước nhiều hơn và tốc độ đốt cao hơn so với nhiên liệu diesel nguyên chất. Sau đó thêm 1% EHN vào DMF20 dẫn đến áp suất cháy, pha cháy và tốc độ cháy cực đại đều giảm gần bằng diesel, điều này cho thấy quá trình ôxy hóa nhiên liệu có ảnh hưởng nhỏ đến đặc tính cháy.

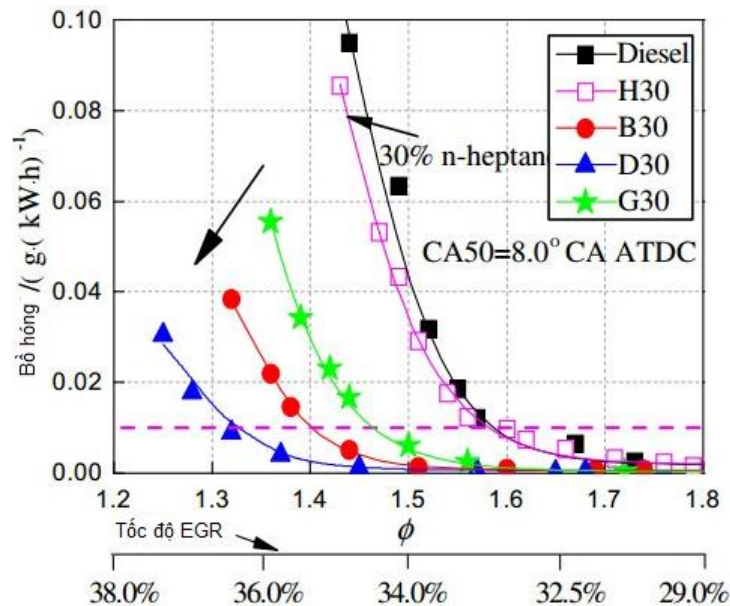


Hình 1.13 Thời gian cháy trễ tại các tốc độ EGR khác nhau [36]

Một vấn đề khác rất đáng quan tâm và được các nhà khoa học nghiên cứu kỹ lưỡng đó là quá trình phát thải của DMF, là yếu tố quan trọng trong việc đánh giá và lựa chọn tối ưu phần trăm khối lượng DMF theo thể tích cho phù hợp nhằm giảm thiểu tác động đến môi trường và sức khỏe cộng đồng. Các đặc tính phát thải trong động cơ diesel của DMF phụ thuộc lớn vào trị số xêtan, tốc độ cháy, nồng độ oxy, điểm sôi, độ nhớt,...

Guisheng Chen và cộng sự [37] đã nghiên cứu đặc tính cháy và phát thải của động cơ diesel dùng nhiên liệu hỗn hợp DMF-diesel, n-butanol-diesel, xăng-diesel. Nghiên cứu được thực hiện trên động cơ cháy nén (CI: compression-ignition) 6 xi lanh, 4 van, 4 kỳ, làm mát bằng nước, tăng áp hai cấp, trang bị hệ thống phun nhiên liệu common-rail và hệ thống EGR. Nhiên liệu thử nghiệm là DMF, n-butanol, xăng được pha trộn với diesel nguyên chất theo tỷ lệ 30% khối lượng theo thể tích được gọi là D30, B30, G30. Động cơ được vận hành ở tốc độ không đổi 1330 vòng/phút, tải ở áp suất có ích là 0,7 MPa BMEP. Kết quả nghiên cứu cho thấy, ở điều kiện tốc độ EGR thấp D30 có lượng phát thải NO_x cao nhất, nguyên nhân là do đặc tính nhiên liệu có ảnh hưởng lớn thời gian cháy trễ, thời gian cháy trễ dài sẽ dẫn đến tỷ lệ trộn trước cao hơn, tốc độ cháy nhanh hơn và nhiệt độ cháy cục bộ cao hơn. Khi EGR tăng, D30 tạo ra lượng khí thải CO cao hơn diesel, nguyên nhân là do độ trễ đánh lửa dài hơn của D30 sẽ kéo dài thời gian trộn trước nhiên liệu/không khí, điều này có xu hướng dẫn

đến các vùng có nhiệt độ thấp và ít nhiên liệu cục bộ hơn, một điều nữa là tỷ lệ H/C thấp hơn của D30 có thể làm tăng lượng khí thải CO. Hơn nữa, quá trình nhiệt phân và phân hủy DMF có thể tạo ra một số khí thải CO, có khả năng làm tăng lượng khí thải CO từ động cơ. Với tốc độ EGR ngày càng tăng D30 có lượng phát thải bồ hóng thấp nhất, là do thời gian cháy trễ và nồng độ oxy trong nhiên liệu là yếu tố chính giảm lượng bồ hóng.



Hình 1.14 Ảnh hưởng EGR đến lượng bồ hóng với các loại nhiên liệu [37]

Minrui WEI và cộng sự [38] đã nghiên cứu ảnh hưởng của thời điểm phun đến quá trình cháy và khí thải của động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel. Nghiên cứu thực nghiệm được tiến hành trên động cơ 4 xi lanh, 4 kỳ, hệ thống tăng áp, hệ thống phun common-rail ở tốc độ không đổi 1800 vòng/phút. DMF được sử dụng để thử nghiệm có thành phần khối lượng tương ứng 0, 10, 30%, trộn với diesel nguyên chất lần lượt gọi là D0, D10, D30. Kết quả nghiên cứu cho thấy, thời điểm phun có ảnh hưởng rõ rệt đến kích thước hạt bồ hóng (PSD: particle size distribution) do đặc tính cháy khác nhau. Việc bổ sung DMF làm giảm số lượng hạt ở chế độ tích lũy (AM: accumulation mode) nhưng lại làm tăng lượng hạt ở chế độ tạo mầm (NM: nucleation mode) điều này là do đông tụ và kết tụ của các hạt nhỏ chậm lại và tiêu thụ nhiên liệu hơn do nhiệt trị của DMF thấp hơn. Khí thải NO_x tăng lên, nguyên nhân là do nhiệt độ cháy tăng. Bổ sung DMF làm tăng nhiệt độ cháy bởi oxy trong DMF thúc đẩy quá

trình đốt phun ở các vùng giàu cục bộ; sự hình thành bồ hóng ít hơn làm giảm sự mất nhiệt bức xạ.

1.2.2. Tình hình sản xuất nhiên liệu sinh học ở Việt Nam

Ở Việt Nam, với điều kiện khí hậu ôn hòa rất thích hợp trồng trọt như lúa, sắn, ngô, mía là nguồn nguyên liệu dồi dào để sản xuất NLSH. Được sự quan tâm và chú trọng rất lớn của Chính Phủ đối với NLSH, tình hình nghiên cứu và sản xuất NLSH ở nước ta ngày càng phát triển. Cụ thể, Chính Phủ đã ban hành quyết định số: 177/2007/QĐ-TTg về việc phê duyệt đề án phát triển NLSH đến năm 2015, tầm nhìn đến năm 2025 [39]. Mục tiêu đến năm 2025, công nghệ sản xuất NLSH ở nước ta đạt trình độ tiên tiến trên thế giới, sản lượng ethanol và dầu thực vật đạt 1,8 triệu tấn, đáp ứng khoảng 5% nhu cầu xăng dầu của cả nước. Đến năm 2012, Chính Phủ ban hành quyết định số: 53/2012/QĐ-TTg về việc ban hành lộ trình áp dụng tỷ lệ phối trộn NLSH với nhiên liệu truyền thống [40]. Theo đó bắt đầu từ cuối năm 2014, 2015 các loại hỗn hợp nhiên liệu phối trộn được bán rộng rãi ở một số thành phố lớn trên cả nước cho các phương tiện giao thông đường bộ. Bắt đầu từ cuối năm 2017 NLSH đã được niêm yết tiêu thụ trên toàn đất nước. Năm 2017, theo thông báo số: 255/TB-VPCP về việc thực hiện đề án phát triển NLSH và lộ trình áp dụng tỷ lệ phối trộn NLSH với nhiên liệu truyền thống [41], từ đầu năm 2018 xăng RON92 đã khai tử, chỉ được phép sản xuất E5 RON92 và RON95 đảm bảo giảm phát thải cacbon, thân thiện hơn với môi trường. Nhìn chung, Chính Phủ đã đặt mục tiêu và lộ trình áp dụng NLSH nhưng bên cạnh đó vẫn chưa được phát triển, còn tồn đọng một số vấn đề như chính sách hỗ trợ từ nhà nước đối với các doanh nghiệp sản xuất NLSH còn hạn chế, chi phí đầu tư máy móc, cơ sở hạ tầng cho việc phối trộn NLSH là rất tốn kém, giá của xăng E5 thấp hơn không nhiều so với xăng RON95. Theo dữ liệu trực tuyến của Tổ chức lương thực và nông nghiệp (FAO) [42] năm 2022 sản lượng lúa gạo của Việt Nam đạt hơn 42 triệu tấn, luôn là quốc gia nằm trong danh sách dẫn đầu về sản lượng lúa gạo toàn cầu. Theo Viện nghiên cứu lúa gạo quốc tế (IRRI) [43] lượng phế phẩm nông nghiệp gồm rơm rạ, trấu,...từ sản xuất lúa gạo đạt khoảng 40 triệu tấn. Sau khi thu hoạch cuối mùa xong bà con nông dân thường “đốt đồng” để xử lý rơm rạ, thói quen này tạo ra các khí độc hại gây ảnh hưởng môi trường, chỉ có một lượng nhỏ rơm rạ được sử dụng lại vào mục đích khác để làm đệm lót trái cây, thức ăn cho gia súc hoặc

trồng nấm rơm. Ngoài các phụ phẩm từ trồng lúa, các loại cây lương thực khác cũng mang lại nguồn phế phẩm rất lớn. Theo số liệu từ Tổng cục thống kê năm 2022 sản lượng ngô đạt 4,4 nghìn tấn, sắn đạt 10,6 nghìn tấn, đường mía đạt 11 nghìn tấn, mang lại nguồn lương thực dồi dào đóng góp rất lớn vào ngân sách nhà nước. Qua đó cho thấy tận dụng triệt để phế phẩm từ sản xuất nông nghiệp là nguồn cung cấp NLSH rất lớn và đầy triển vọng.

Ở nước ta một số công trình nghiên cứu về DMF đã được thực hiện, kết quả của các nghiên cứu cho thấy nhiều mặt tích cực mà DMF mang lại, cùng với các NLSH khác sẽ góp phần thúc đẩy sự phát triển của các nguồn năng lượng thay thế tối thiểu hóa với nhiên liệu hóa thạch.

Không Vũ Quảng và cộng sự [44] đã nghiên cứu ảnh hưởng của hỗn hợp nhiên liệu 2,5-dimethylfuran-xăng tới các tính năng kinh tế, kỹ thuật của động cơ. Nghiên cứu được thực nghiệm trên động cơ 1NZFE 4 kỳ, 4 xi lanh, không tăng áp, sử dụng hệ thống phun xăng điện tử. Nhiên liệu được sử dụng là DMF theo phần trăm thể tích tương ứng 20, 30, 40% được gọi là DM20, DM30, DM40. Quá trình nghiên cứu được thực hiện ở tốc độ vòng quay động cơ 1000, 2500, 3500 vòng/phút, tại 75% mức tải. Kết quả nghiên cứu cho thấy, công suất động cơ giảm khi tỷ lệ DMF tăng, là do DMF có thời gian cháy trễ nhỏ hơn xăng làm áp suất cực đại trong xi lanh diễn ra sớm hơn làm tăng công suất nén của động cơ. Nếu thay đổi góc đánh lửa sớm thì công suất và hiệu suất tăng. Khi sử dụng nhiên liệu có tỷ lệ DMF cao thì cần phải điều chỉnh góc đánh lửa sớm để không làm hỏng động cơ cũng như các tính năng khác.

Trong luận án tiến sĩ kỹ thuật của mình, NCS. Nguyễn Danh Chấn [45] đã nghiên cứu đặc tính kỹ thuật và phát thải khi sử dụng nhiên liệu DMF trên động cơ xăng. Động cơ nghiên cứu thực nghiệm là động cơ 1NZFE, 4 kỳ, 4 xi lanh. Ở chế độ 50% và 100% tải, tốc độ vòng quay 1000÷5000 vòng/phút. Nhiên liệu được sử dụng với phần trăm DMF theo thể tích là 10% (DMF10), 20% (DMF20), 30% (DMF30), 40% (DMF40), 50% (DMF50). Kết quả nghiên cứu cho thấy, lượng phát thải HC và CO giảm khi tăng lượng DMF trong hỗn hợp nhiên liệu, ngược lại NO_x tăng. Mức tiêu hao nhiên liệu tăng dần khi DMF theo phần trăm thể tích càng lớn, công suất của động cơ giảm.

Các nghiên cứu khoa học về nhiên liệu DMF trong các năm 2018, 2019 của Trường Đại học Giao thông Vận tải TP. HCM đã được thực hiện nghiêm túc và hoàn thành đúng tiến độ được giao [46], [47].

Từ kết quả của các nghiên cứu cho thấy DMF là một dạng NLSH có tiềm năng rất lớn trong việc làm giảm phát thải cũng như cải thiện công suất động cơ, sự dồi dào phong phú từ sinh khối của nước ta sẽ thúc đẩy quá trình phát triển DMF, là cơ sở cho việc sử dụng rộng rãi nhiên liệu này trên thị trường. Tuy nhiên các nghiên cứu chỉ thực hiện trên động cơ xăng, chưa có công trình nghiên cứu nào sử dụng DMF trên động cơ diesel, vì vậy nghiên cứu xác định thành phần khí thải của hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel trên động cơ diesel là điều cần thiết.

1.3. Kết luận chương 1

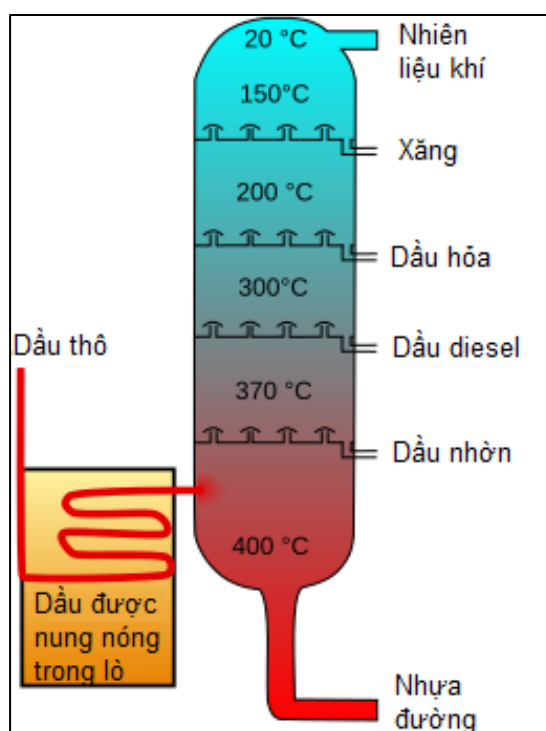
Chất lượng không khí hiện nay rất đáng báo động gây ra nhiều mặt tiêu cực cho xã hội, mang đến rất nhiều những thách thức trong công cuộc bảo vệ sự sống con người, buộc các nhà khoa học nghiên cứu kịp thời đưa ra các giải quyết mang tính cấp bách và nhanh chóng để tiếp tục duy trì các hoạt động của xã hội, song với đó không đe dọa đến sự sống. Cùng với giá dầu thô biến động liên tục do sự cạn kiệt của nguồn nhiên liệu truyền thống, nhiều năng lượng mới đã được phát hiện nghiên cứu thử nghiệm nhằm đáp ứng được các thách thức về năng lượng, tất cả các nguồn năng lượng này đã và đang triển khai ở mức trung bình thấp hoặc đang trong giai đoạn thử nghiệm. Vì vậy NLSH là ứng cử viên sáng giá giải quyết kịp thời trong giai đoạn giao thoa giữa năng lượng mới và cũ. DMF được biết đến với triển vọng rất lớn trong NLSH với sự dồi dào về nguồn sinh khối ở các nước nông nghiệp, sử dụng các phế phụ phẩm bỏ đi trong nông nghiệp để chuyển đổi DMF thành nguồn năng lượng sáng giá giải quyết bài toán về ô nhiễm môi trường. Tại Việt Nam, có một số ít các nghiên cứu về DMF trên ĐCĐT, chính vì lẽ đó đề án này sẽ nghiên cứu DMF hòa trộn với diesel nguyên chất theo các phần trăm về thể tích khác nhau, nhằm đánh giá sự phát thải của động cơ diesel sẽ có hiệu quả khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel, nhằm đa dạng hơn về sự hòa trộn DMF trên động cơ xăng và cả động cơ diesel.

CHƯƠNG 2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT VỀ NHIÊN LIỆU SỬ DỤNG TRÊN ĐỘNG CƠ DIESEL

2.1. Tính chất nhiên liệu diesel

2.1.1. Khái quát về nhiên liệu diesel

Diesel là sản phẩm của quá trình chưng cất phân đoạn, tách dầu thô thành các sản phẩm hydrocarbon khác nhau. Đây là bước đầu tiên trong quá trình xử lý dầu thô thực hiện quá trình tách thô ban đầu các loại nhiên liệu khác nhau [48].



Hình 2.1 Tháp chưng cất phân đoạn dầu thô

Nguồn: Wikimedia Commons (2015)

Dầu thô là hỗn hợp phức tạp của các hydrocarbon được khai thác từ dưới lòng đất, dầu thô sau khi khai thác chưa sử dụng được ngay mà phải trải qua các phân đoạn thành các hỗn hợp đơn giản hơn. Có thể tách hydrocarbon khác nhau trong dầu thô vì chúng có nhiệt độ sôi khác nhau. Dầu thô được nung nóng để hóa hơi và được đưa vào đáy tháp chưng cất, hơi thu được sau đó bốc lên qua cột thẳng đứng, cột nóng hơn ở phía dưới và nguội dần ở phía trên. Khi hơi bay lên, các hydrocarbon có nhiệt độ sôi cao hơn bắt đầu ngưng tụ thành chất lỏng ở nhiệt độ thấp hơn về phía đáy cột, các hydrocarbon có nhiệt độ sôi thấp tiếp tục bốc hơi lên trong cột. Khi các hydrocarbon khác nhau đạt đến độ cao khác nhau trong cột, chúng ngưng tụ thành chất lỏng ở nhiệt

độ khác nhau tạo thành các phần riêng biệt. Khi các hydrocacbon tạo thành chất lỏng chúng được đưa ra khỏi cột. Hydrocacbon chuỗi dài có lực liên phân tử mạnh hơn và do đó nhiệt độ sôi cao hơn. Những hydrocacbon này cần nhiều năng lượng hơn để phá vỡ lực hút giữa các phân tử của chúng. Kết quả là chúng bay hơi và ngưng tụ thành các phân đoạn gần đáy cột phân đoạn. Hydrocacbon chuỗi ngắn có lực liên kết phân tử yếu hơn và do đó nhiệt độ sôi thấp hơn. Điều này có nghĩa là chúng sẽ tồn tại ở dạng khí lâu hơn và bay lên cao hơn trong cột. Cần ít năng lượng hơn để phá vỡ lực hút giữa các phân tử của chúng. Kết quả là chúng ngưng tụ thành các phân số gần đầu cột [49], [50].

Sau quá trình tinh chế thô, từng loại nhiên liệu trải qua quá trình tinh chế sâu hơn để loại bỏ bất kỳ chất gây ô nhiễm hoặc chất không mong muốn nào để cải thiện chất lượng nhiên liệu.

2.1.2. Thành phần hóa học nhiên liệu diesel

Nhiên liệu diesel chứa nhiều thành phần không bay hơi hơn xăng và có dải sôi cao hơn 200-300°C do đó nhiên liệu diesel phải được phun và không thể bay hơi trong không khí mà không có nguy cơ đánh lửa sớm [51]. Giống như xăng, nhiên liệu diesel được trộn với một số chất phụ gia để tăng hiệu suất khi cháy, cần phải đảm bảo giữ cho vòi phun sạch và ngăn ngừa sự đông đặc trong thời tiết lạnh.

Nhiên liệu diesel có mật độ năng lượng cao hơn xăng, tuy nhiên diesel là nhiên liệu khó cải tiến hơn vì nhiên liệu diesel là hỗn hợp của nhiều loại parafin, naphthene và chất thơm mỗi loại có một phản ứng khác nhau và sự xuất hiện của các hợp chất organosulfur sẽ làm phức tạp quá trình cải tiến hơn nữa, đặc biệt là liên quan đến việc vô hiệu hóa chất xúc tác [52]. Cụ thể nhiên liệu diesel bao gồm 64% hydrocacbon aliphatic (số lượng cacbon chủ yếu C9-C20), 35% hydrocacbon thơm (bao gồm benzen và hydrocacbon thơm đa vòng) và 1% hydrocacbon olefin. Nó có điểm sôi trong khoảng 163-357°C, là chất lỏng dạng dầu trong suốt hoặc có màu vàng đến đỏ [53].

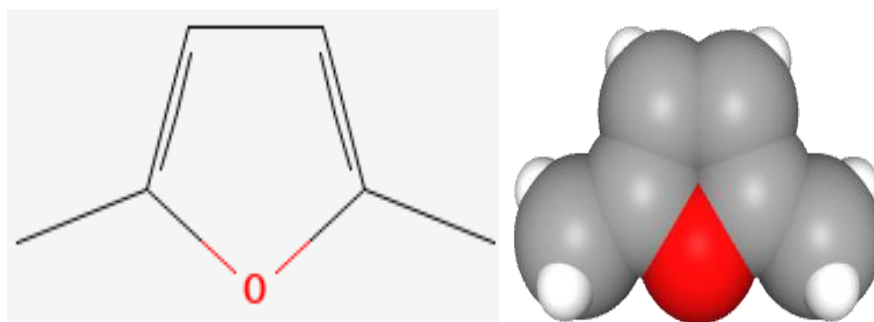
Chỉ số được chấp nhận rộng rãi nhất về chất lượng đánh lửa của nhiên liệu diesel là chỉ số xêtan, chỉ số càng cao thì càng dễ đánh lửa. Phương pháp được sử dụng để xác định chất lượng đánh lửa theo chỉ số xêtan tương tự như phương pháp xác định chất lượng chống kích nổ của xăng theo chỉ số octan. Chỉ số xêtan được xác định bằng

cách pha trộn hai nhiên liệu là n-hexadecane một hợp chất có chất lượng đánh lửa cao với một isocetane, **heptamethyl** nonane một loại parafin có nhiều nhánh có chất lượng đánh lửa thấp [54].

2.2. Tính chất nhiên liệu sinh học 2,5-dimethylfuran

2.2.1. Khái quát về 2,5-dimethylfuran

2,5-dimethylfuran có tên viết tắt là DMF, được gọi với các tên khác như 2,5-dimethyl-furan, Furan-2,5-dimethyl, 2,5-Dimethylfurane, 625-86-5, là một hợp chất dị vòng, là một thành viên của lớp furan trong đó vị trí 2 là hydrogens và vị trí 5 được thay thế bằng nhóm methyl, là một chất lỏng không màu vô phách nhớt trong suốt, mùi thơm nồng nàn, ăn mòn da khi tiếp xúc trực tiếp. DMF là chất rất bền lửa, có nhiệt độ sôi thấp, có ứng dụng trong đời sống cao dùng bào chế thuốc, dược phẩm cho y dược, làm NLSH, làm phụ phẩm trong công nghiệp hương liệu, rất dễ nhạy cảm khi tiếp xúc với không khí, hầu như không hòa tan trong nước, có thể phản ứng mạnh với các chất oxy hóa nhưng không tương thích với axit mạnh và bazơ mạnh. DMF có công thức phân tử là $(\text{CH}_3)_2\text{C}_4\text{H}_2\text{O}$ hoặc $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}$. Cấu trúc hóa học của phân tử DMF bao gồm sự sắp xếp của các nguyên tử và các liên kết hóa học giữ các nguyên tử lại với nhau [55], [56].



Hình 2.2 Cấu trúc phân tử hai chiều và ba chiều của DMF

Nguồn: Trung tâm thông tin công nghệ sinh học Hoa Kỳ (2024)

2.2.2. Tính chất lý hóa và thành phần hóa học của DMF

DMF được sản xuất nhờ vào nguồn nhiên liệu sinh khối, diesel là loại nhiên liệu từ nhiên liệu hóa thạch. Hai nguồn nhiên liệu này có thành **phần** chủ yếu là hydrocacbon, vì thế có thể hòa trộn với nhau tạo ra hỗn hợp nhiên liệu dùng cho ĐCĐT, đứng trước các thách thức rất to lớn như hiện nay, hỗn hợp nhiên liệu này

được xem là giải pháp hữu hiệu nhằm giảm sự lệ thuộc vào nguồn nhiên liệu truyền thống.

Bảng 2.1 Đặc điểm thuộc tính các thành phần trong DMF [32], [55], [56], [57]

STT	THÔNG SỐ	GIÁ TRỊ
1	Công thức phân tử	$(\text{CH}_3)_2\text{C}_4\text{H}_2\text{O}$ hoặc $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}$
2	Ngoại quan	chất lỏng nhờn màu hổ phách nhạt
3	Hàm lượng ôxy/hydro/cacbon (%)	16,7/8,3/75
4	Trọng lượng phân tử (g/mol)	96,13
5	Điểm sôi ($^{\circ}\text{C}$)	92
6	Nhiệt độ nóng chảy ($^{\circ}\text{C}$)	-63
7	Điểm chớp cháy ($^{\circ}\text{C}$)	-1
8	Nhiệt độ tự bốc cháy ($^{\circ}\text{C}$)	286
9	Tỷ lệ không khí/nhiên liệu A/F	10,79
10	Nhiệt trị thấp (MJ/kg)	33,7
11	Trị số octan	119
12	Trị số xêtan	9
13	Ân nhiệt hóa hơi ở 25°C (KJ/kg)	332
14	Mật độ chất lỏng (kg/m^3)	889,7
15	Độ nhạy từ (cm^3/mol)	$-66,37 \cdot 10^{-6}$
16	Chỉ số khúc xạ	1,437-1,443
17	Độ hòa tan trong nước ở 20°C ($\text{mL}/100 \text{ mL H}_2\text{O}$)	Không tan < 1 mg/mL
18	Mật độ hơi với không khí	3,31
19	Áp suất hơi ở 22°C (mmHg)	53
20	Mật độ phân tử ở 20°C (g/mL)	0,905
21	Sức căng bề mặt (N/m)	0,0259
22	Độ nhớt động học (cSt)	0,57

DMF có tính chất lý hóa và một số đặc tính có nhiều tiềm năng khi được sử dụng làm nhiên liệu động cơ, DMF có nhiệt độ sôi cao làm giảm sự bốc hơi của DMF trong quá trình lưu trữ và vận chuyển, DMF không hòa tan trong nước nên DMF

không hấp thụ nước từ khí quyển nên có thể lưu giữ ổn định mà không gây ô nhiễm hoặc bị ô nhiễm bởi nước trong đường ống vận chuyển ngầm.

Bảng 2.2 So sánh đặc tính hóa lý của DMF và diesel [32], [34]

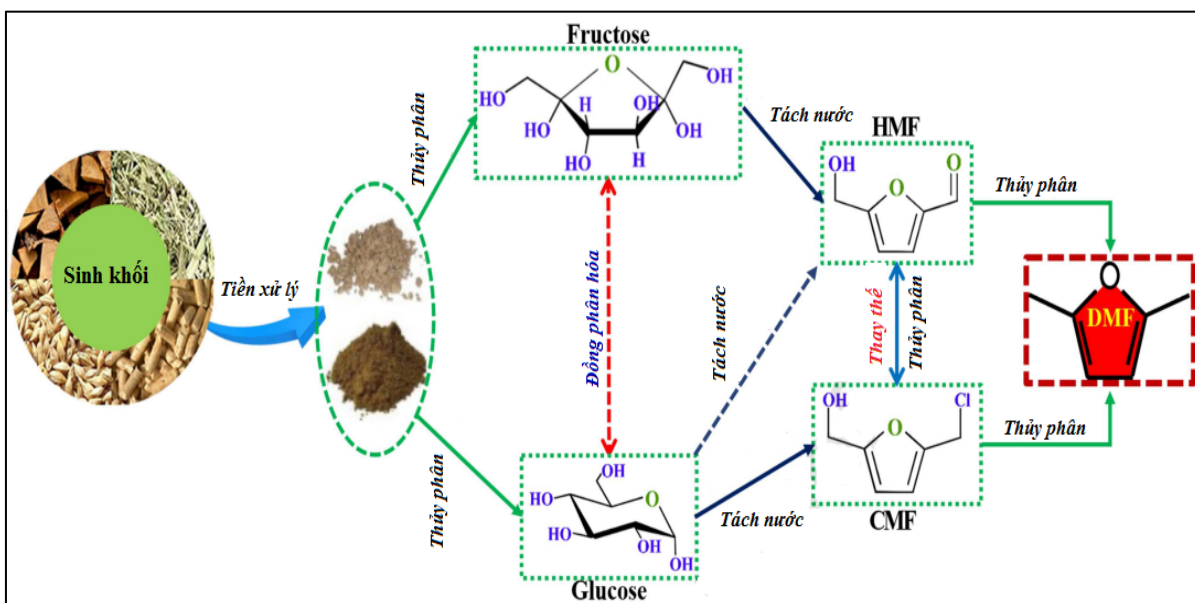
STT	THÔNG SỐ	DMF	DIESEL
1	Công thức phân tử	$(\text{CH}_3)_2\text{C}_4\text{H}_2\text{O}$ hoặc $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}$	$\text{C}_{12}\text{-C}_{25}$
2	Trị số xêtan	9	52,1
3	Điểm sôi ($^{\circ}\text{C}$)	92	180-360
4	Nhiệt trị thấp (MJ/kg)	33,7	42,8
5	Ẩn nhiệt hóa hơi (kJ/kg)	332	250-290
6	Nhiệt độ tự bốc cháy ($^{\circ}\text{C}$)	286	180-220
7	Tỷ lệ không khí/nhiên liệu A/F	10,79	14,7
8	Mật độ chất lỏng ở 20°C (kg/m^3)	889,7	826
9	Hàm lượng oxy (%)	16,7	-
10	Hàm lượng hydro (%)	8,3	12,7
11	Hàm lượng cacbon (%)	75	86,7
12	Độ tan trong nước (wt%, 20°C)	Không đáng kể	Không đáng kể
13	Mật độ năng lượng (MJ/L)	31,5	34,92
14	Sức căng bề mặt (N/m)	0,0259	0,0280
15	Độ nhớt động học (cSt)	0,57	2,00-4,50

DMF cung cấp mật độ năng lượng cao do đó giảm được mức tiêu thụ nhiên liệu, điểm chớp cháy của DMF thấp điều này sẽ giúp động cơ khởi động nguội dễ dàng hơn. DMF bay hơi nhanh nên cải thiện sự hình thành hỗn hợp trong xi lanh động cơ dẫn đến quá trình cháy hoàn toàn. Hấp dẫn hơn DMF chỉ tiêu thụ một phần ba năng lượng trong quá trình sản xuất, so với năng lượng cần thiết cho quá trình lên men ethanol, một lợi thế nữa là việc sản xuất DMF sẽ không cạnh tranh với đất đai và lương thực mà còn sử dụng lại các phế phẩm nông nghiệp bỏ đi để sản xuất ra DMF, do đó nó có thể là ứng cử viên lý tưởng cho thế hệ NLSH bền vững mới. Với những đặc tính này làm cho DMF trở thành một lựa chọn thay thế đầy hứa hẹn [45], [58].

2.3. Con đường hóa học để chuyển đổi sinh khối thành DMF

Hơn một thập kỷ trước đây, dù biết rằng DMF có các tính chất lý hóa cạnh tranh hơn so với NLSH khác nhưng việc sản xuất ra DMF rất khó khăn dẫn đến không thu hút được sự chú ý của các nhà khoa học. Gần đây những bước đột phá đáng kể đã được thực hiện trong phương pháp sản xuất DMF khiến nó có thể được ứng dụng rộng rãi làm nhiên liệu cho các phương tiện giao thông vận tải.

Nhiên liệu furan được sản xuất từ hemicellulose của chất thải sinh khối như rơm rạ, thân cây ngô, lõi ngô, vỏ đậu phộng, vỏ yến mạch do đó không cạnh tranh với chuỗi cung ứng thực phẩm của con người mà chuyển đổi chất thải thành nguồn năng lượng. Những nhiên liệu này có thể được tạo ra từ quá trình chuyển đổi hiệu quả các loại đường có năm carbon như xylose và arabinose thành furfural và đường sáu carbon như fructose và glucose thành 5-hydroxymethylfurfural (HMF). Furfural và HMF có thể được xử lý tiếp thành nhiên liệu furan [59].

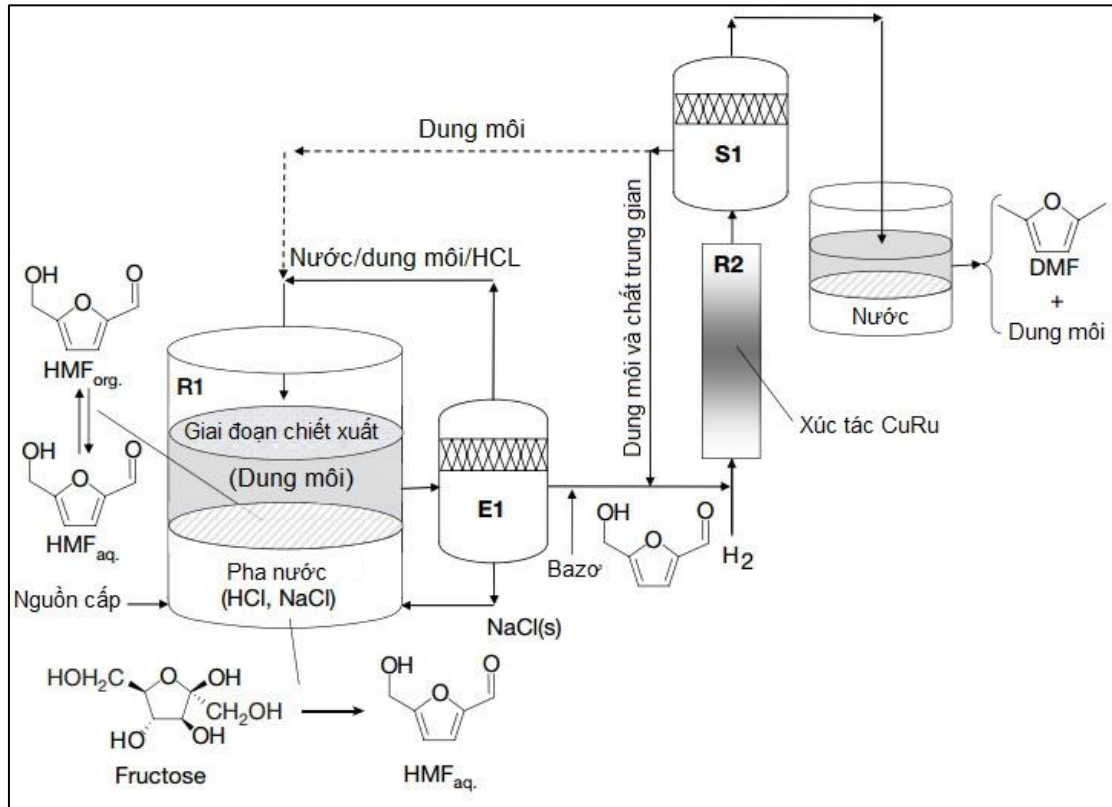


Hình 2.3 Con đường sản xuất DMF từ sinh khối [60]

Hiện nay có hai con đường chuyển đổi chính để điều chế DMF từ sinh khối, thứ nhất là sau khi tiền xử lý sinh khối đầu tiên bị phân hủy thành các carbohydrate đơn giản hay monosaccarit không bị thủy phân như glucose và fructose, sau đó các monosaccarit được khử nước có chọn lọc để loại bỏ ba nguyên tử ôxy để tạo ra HMF, sau đó HMF tiếp tục loại bỏ hai nguyên tử ôxy thông qua quá trình thủy phân để tạo ra DMF. Thứ hai là cellulose hoặc glucose đầu tiên tạo ra 5-chloromethylfurfural (CMF)

và sau đó CMF tạo ra DMF thông qua quá trình thủy phân [61]. Do nguồn nhiên liệu sinh khối sẵn có dễ dàng và giá thành thấp nên việc điều chế DMF từ sinh khối sẽ trở thành phương pháp chính để sản xuất DMF trong tương lai.

2.3.1. Điều chế DMF bằng hệ thống hai pha



Hình 2.4 Sơ đồ điều chế DMF từ fructose [62]

Nhà khoa học người Mỹ Yuriy Roman-Leshkov và cộng sự [62] đã đăng một bài báo trên tạp chí Nature, công bố việc phát triển hệ thống hai pha để chuyển đổi fructose thành DMF và thu được kết quả thực tế lý tưởng (Hình 2.4). Hệ thống này sử dụng 30% fructose làm nguyên liệu thô, 0,25 mol/L axit hydrochloric (HCl) làm chất xúc tác và phản ứng ở nhiệt độ 180°C trong ba phút trong pha nước chứa 35% natri **clorua** (NaCl) để tạo ra HMF được chiết xuất dưới tác dụng của 1-butanol. Trong pha hữu cơ thu được tốc độ chuyển hóa cuối cùng của fructose là 88%, độ chọn lọc của HMF là 82%. Sau đó HMF thu được bằng quá trình bay hơi chân không của pha hữu cơ được phản ứng ở dạng lỏng dưới nhiệt độ 220°C dưới tác dụng của các chất xúc tác đồng ruthenium (Cu:Ru/C) với tỷ lệ nguyên tử 3:1 và 6,8 bar H₂, trong mười giờ để thu được hiệu suất DMF 71%. Ở dạng khí, dưới tác dụng của chất xúc tác Cu:Ru/C, với tỷ lệ nguyên tử 3:2 và 6,8 bar H₂, hiệu suất DMF thu được khi phản ứng ở 220°C

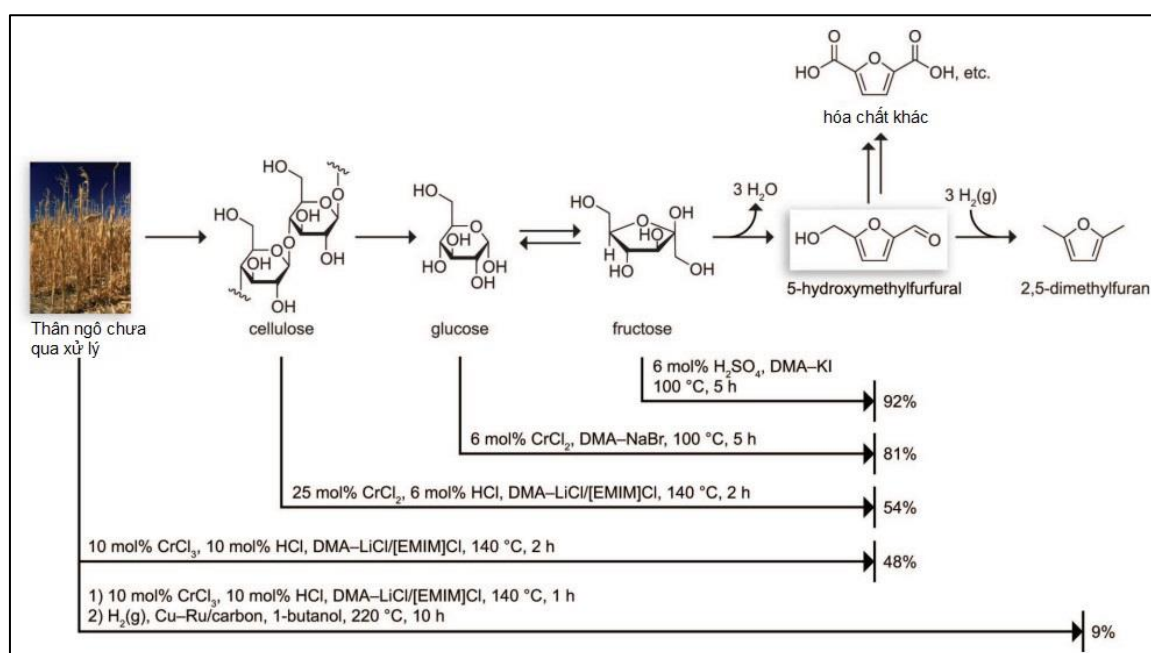
trong mười giờ là 76-79%. Có thể thấy rằng hiệu suất DMF thu được từ quá trình hydro hóa pha khí của HMF cao hơn so với quá trình hydro hóa pha lỏng. Ngoài ra, kết quả thực nghiệm cũng chỉ ra rằng quá trình hydro hóa ở pha khí có những ưu điểm cao hơn so với quá trình hydro hóa pha lỏng: không tạo ra sản phẩm phụ nào khác, không chỉ phù hợp HMF đậm đặc mà còn cho HMF chưa được xử lý trong pha hữu cơ, đối với các dung môi hữu cơ khác nhau (1-butanol, 1-hexanol hoặc các loại khác) hiệu suất thu được DMF không khác nhau nhiều, chất xúc tác khử hoạt tính từ có thể được tái sinh bằng nhiệt độ phản ứng và hydro.

Mark Mascal và Edward B. Nikitin [63] cũng sử dụng hệ thống hai pha để chuyển đổi cellulose và glucose thành DMF, điểm khác biệt là quá trình này không sử dụng HMF làm sản phẩm trung gian mà sử dụng CMF làm sản phẩm trung gian. Trước tiên hòa tan cellulose và glucose trong HCl đậm đặc chứa 5% lithi **clorua** (LiCl) khuấy ở 65°C trong mười tám giờ sau đó thêm hỗn hợp vào dung môi chiết xuất 1,2-dichloroethane trong mười hai giờ và pha hữu cơ chiết được chưng cất để thu hồi 1,2-dichloroethane, chất lỏng còn lại được sử dụng để phân tích sản phẩm. Kết quả phân tích cho thấy hiệu suất CMF thu được từ cellulose và glucose đều đạt 71%. Sau đó hydro hóa CMF sử dụng chất xúc tác palladium cacbon (Pd/C) thu được DMF với hiệu suất cao. Thí nghiệm này đã rút ra được kết luận từ các kết quả trên: hệ hai pha gồm HCl/LiCl và dichloroethane không chỉ thích hợp cho việc chuyển đổi monosaccarit mà còn có thể được sử dụng trực tiếp để chuyển đổi cellulose, bước giới hạn tốc độ của quá trình này không phải là thủy phân cellulose mà là khử nước glucose hoặc chiết xuất các sản phẩm furan. Hệ thống hai pha này cung cấp một cách tiếp cận mới cho vấn đề khó chuyển đổi glucose thành HMF, vì CMF dễ thủy phân thành HMF nên CMF có thể được sử dụng làm sản phẩm chuyển tiếp của quá trình chuyển đổi glucose, sau đó chuyển đổi thành HMF, DMF hoặc các hợp chất khác.

2.3.2. Điều chế DMF từ hệ thống dimethylacetamide

Joseph B. Binder và Ronald T. Raines [64] kết hợp **N,N**-dimethylacetamide (DMA), **halogen** và chất lỏng ion để tiến hành một nghiên cứu có hệ thống về tác dụng chuyển đổi cellulose, glucose, fructose trong rom ọ, thân cây ngô, lõi ngô thành DMF (Hình 2.5). Thí nghiệm đầu tiên kết hợp DMA với các halogen khác nhau, chất xúc tác khác nhau và các chất lỏng ion khác nhau chuyển đổi cellulose, glucose, fructose

trong rơm rạ, thân cây ngô, lõi ngô thành HMF theo tỷ lệ nhất định. Các ion halogenua làm chất trung gian cho sự hình thành HMF từ fructose trong DMA chứa axit sulfuric (H_2SO_4), các ion iodide và ion bromide rất có hiệu quả trong việc tạo ra HMF cao, tạo ra hiệu suất HMF đạt 92% trong năm giờ ở 100°C . Tổng hợp HMF từ glucose trong DMA bằng cách sử dụng hệ thống DMA-halide, bổ sung muối iodide vào hỗn hợp phản ứng chromium chloride thu được HMF 79-81% sau năm đến sáu giờ ở 100°C . Tổng hợp HMF từ cellulose, hoàn tan cellulose tinh khiết trong hỗn hợp DMA-LiCl và 1-ethyl-3-methylimidazolium chloride (EMIMCl), bổ sung CrCl_2 hoặc CrCl_3 trong hai giờ ở 140°C thu được 54% HMF. Trong bước đầu tiên của quy trình, HMF được tạo ra từ rơm rạ, thân cây ngô, lõi ngô chưa qua xử lý DMA-LiCl, sau đó loại bỏ các ion clorua khỏi HMF thô bằng sắc ký loại trừ ion trong nước, cuối cùng đưa HMF này vào quá trình thủy phân trong 1-butanol với chất xúc tác Cu:Ru/C thu được hiệu suất DMF là 48%. Ngoài ra thí nghiệm này còn sử dụng phương pháp một bước để chuyển đổi trực tiếp rơm rạ, thân cây ngô, lõi ngô chưa qua xử lý thành DMF để thu được hiệu suất DMF 9%.



Hình 2.5 Sơ đồ điều chế DMF từ hệ thống DMA [64]

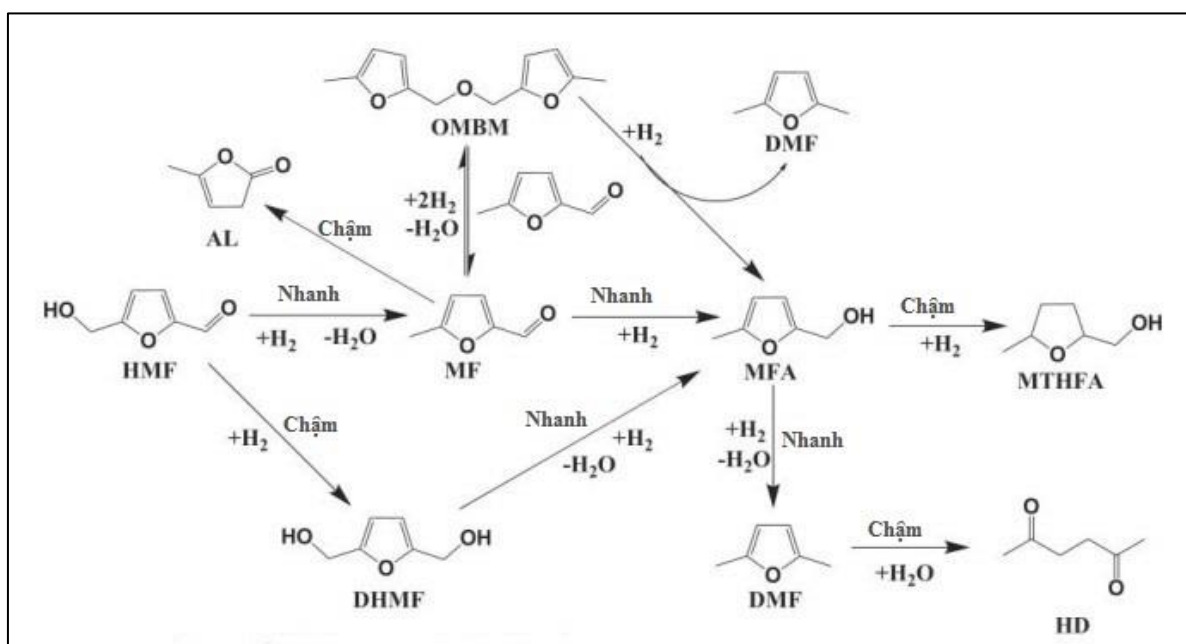
Joseph B. Binder và Ronald T. Raines cũng so sánh thí nghiệm này với thí nghiệm của Mark Mascall và Edward B. Nikitin và chỉ ra rằng, mặc dù thí nghiệm của Mark Mascall và Edward B. Nikitin thu được hiệu suất CMF cao khi thêm ion crom nhưng 1,2-dichloroethane được sử dụng trong thí nghiệm là chất gây ung thư và lượng

lớn HCl đậm đặc được sử dụng cũng rất nguy hiểm chứa các clorua độc hại, nhưng các chất này không được tìm thấy trong thí nghiệm này. DMA là dung môi công nghiệp phổ biến và cũng có thể chuyển đổi nồng độ cellulose và các chất khác cao hơn.

2.3.3. Điều chế DMF từ chất lỏng ion

Mandan Chidambaram và Alexis T. Bell [65] đã phát hiện trong quá trình chuyển hóa glucose thành DMF bằng phương pháp chuyển hóa hai bước sử dụng glucose làm nguyên liệu thô, axit 12-molybdophosphoric (12-MPA) làm chất xúc tác, acetonitrile (CH_3CN) làm chất phụ trợ, trong dung dịch 1-ethyl-3-methylimidazolium chloride (EMIMCl) chất xúc tác axit lỏng được sàng lọc để khử glucose hoặc trong 1-butyl-3-methylimidazolium chloride (BMIMCl), sau khi phản ứng ở 200°C trong ba giờ, tỷ lệ chuyển hóa glucose và độ chọn lọc của HMF lần lượt đạt 99% và 98%, đây là cách tốt nhất để tạo ra HMF từ glucose cho đến nay. Tiếp theo họ sử dụng chất xúc tác: palladium cacbon (Pd/C), platinum cacbon (Pt/C), ruthenium cacbon (Ru/C), rhodium cacbon (Rh/C) trong EMIMCl tinh khiết, độ chuyển hóa HMF sau một giờ phản ứng ở 200°C tương ứng với các chất xúc tác là: 19, 11, 23, 16%, sau đó hydro hóa HMF tạo ra độ chọn lọc DMF lần lượt là: 13, 2, 0, 6% cùng thời gian và nhiệt độ chuyển hóa HMF. Với kết quả tạo ra DMF cao nhất là 13% khi sử dụng chất xúc tác Pd/C, họ tiếp tục khám phá quá trình hydro hóa HMF bằng hỗn hợp EMIMCl và CH_3CN làm chất phụ trợ, sau thời gian phản ứng một giờ ở 200°C độ chuyển hóa của HMF nguyên chất, HMF chiết xuất thô bằng ethyl axetat ($\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$) và HMF thu được từ hỗn hợp glucose được khử nước trực tiếp trong EMIMCl đạt 47, 46 và 44%, nâng độ chọn lọc DMF lên 32, 30 và 28%. Kết quả thu được khi hydro hóa HMF được chiết xuất thô và HMF từ hỗn hợp khử nước trực tiếp glucose không khác biệt nhiều so với kết quả thu được khi hydro hóa HMF nguyên chất. HMF được hình thành sau khi khử glucose trong chất lỏng ion có thể được sử dụng trực tiếp cho các phản ứng hydro hóa để tạo ra DMF. Yuriy Roman-Leshkov và cộng sự, nghiên cứu hiệu suất DMF thu được là 71-79%, Joseph B. Binder và Ronald T. Raines hiệu suất DMF thu được là 48%, nhưng Mandan Chidambaram và Alexis T. Bell chỉ thu được hiệu suất DMF là 32%. Họ lý giải về điều này là do bị chi phối bởi các yếu tố như nhiệt độ phản ứng thấp, thời gian phản ứng ngắn hơn và độ hòa tan của H_2 trong chất lỏng ion thấp nên hiệu suất thu được DMF thấp. Khi HMF được hydro hóa ngoài DMF sản phẩm còn bao gồm: 5-methylfurfural (MF),

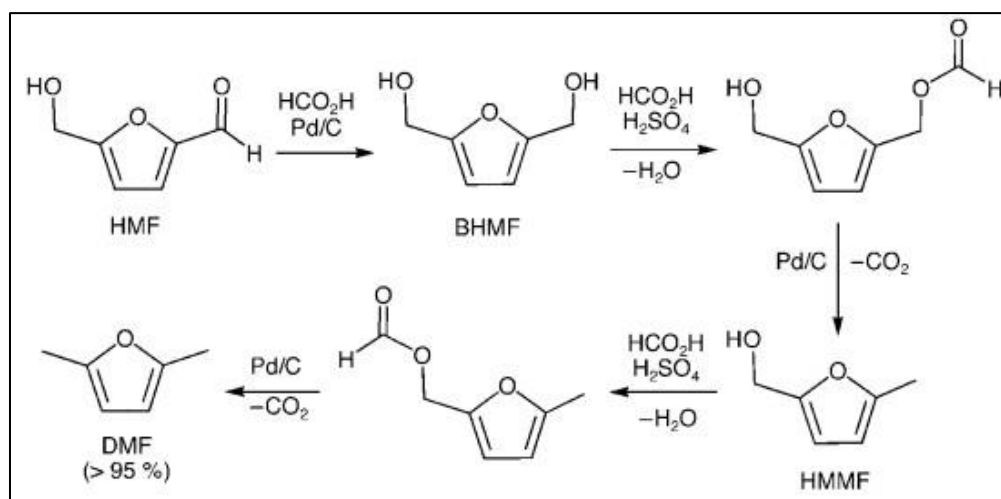
2,5-dihydroxymethylfuran (DHMF), 5-methylfurfuryl alcohol (MFA), 5-methyltetrahydrofurfuryl alcohol (MTHFA), 2,5-hexadione (HD). Để làm rõ quá trình hình thành DMF, Mandan Chidambaram và Alexis T. Bell cũng tiến hành hàng loạt nghiên cứu sử dụng MF, MFA, DHMF làm nguyên liệu ban đầu cho phản ứng (hình 2.6). Kết quả nghiên cứu cho thấy, HMF được hydro hóa thành dạng MF đầu tiên, MF tiếp tục hydro hóa và chuyển hóa thành DMF thông qua MFA. Trong quá trình này một khi DHMF được hình thành hiệu suất tạo ra DMF sẽ giảm đi do DHMF và MFA sẽ hấp thụ cạnh tranh trên bề mặt xúc tác Pd/C, ức chế quá trình hydro hóa MFA để tạo ra DMF.



Hình 2.6 Con đường phản ứng hydro hóa HMF [65]

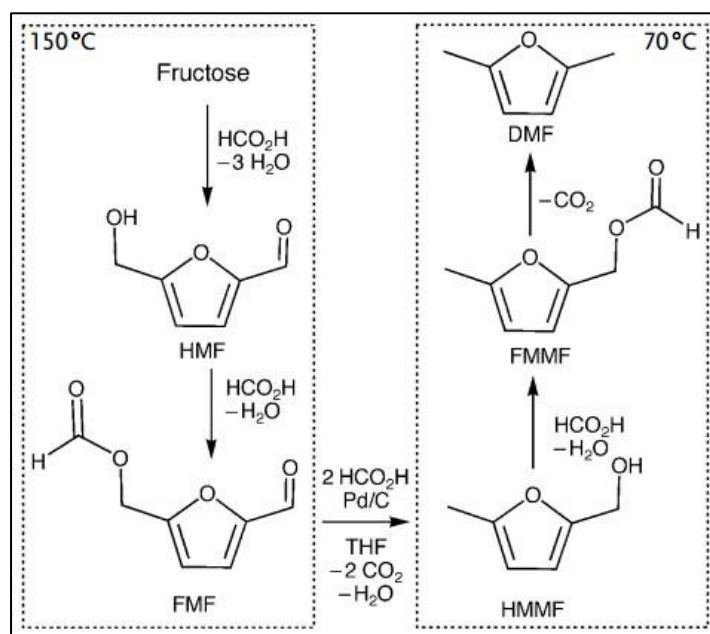
2.3.4. Điều chế DMF từ hệ axit formic

Todsapon Thananattathanachon và Thomas B. Rauchfuss [66] đã tổng hợp các kết quả nghiên cứu trước đây để phương pháp điều chế DMF trong hệ axit formic (HCOOH) phát triển. Bước đầu họ sử dụng HMF làm nguyên liệu ban đầu cho phản ứng (hình 2.7), HMF có thể dễ dàng hydro hóa thành 2,5-bishydroxymethylfuran (BHMF) khi sử dụng HCOOH làm chất xúc tác và Pd/C làm chất phụ trợ. Ở pha khí của BHMF, hydro hóa được tiến hành ở 120°C với HCOOH, H₂SO₄, Pd/C và tetrahydrofuran (THF) trong 15h, thu được hiệu suất DMF tuyệt vời >95%. Trong quá trình diễn ra của phản ứng, 2-hydroxymethyl-5-methylfuran (HMMF) tồn tại dưới dạng trung gian, theo chu trình tổng hợp DMF từng bước của HMF.



Hình 2.7 Lộ trình tổng hợp HMF thành DMF [66]

Tiếp theo họ sử dụng fructose làm nguyên liệu thô (hình 2.8) đồng thời sử dụng phương pháp một bước để điều chế DMF, với sự có mặt của HCOOH , H_2SO_4 , Pd/C và THF. Đầu tiên fructose được khử nước để tạo thành HMF, sau đó HMF lần lượt trải qua **formyl** ester (FMF), HMMF và **monoformyl** ester (FMMF) để tạo thành DMF. Sản phẩm được chiết xuất bằng diacetate ester đạt hiệu suất 52% DMF hiệu quả ở 120°C trong thời gian **0,5h**. Trong toàn bộ quá trình, HCOOH chủ yếu đóng ba vai trò: làm chất xúc tác axit cho quá trình khử nước fructose; làm chất cung cấp hydro từ HMF cho BHMF; làm chất phản ứng khử ôxy cho furanylmethanols. Do vai trò quan trọng của HCOOH hệ thống phản ứng này có thể tạo ra DMF chỉ trong một bước.



Hình 2.8 Phương pháp một bước để tạo DMF từ fructose [66]

2.4. Sự cháy của DMF trong động cơ đốt trong

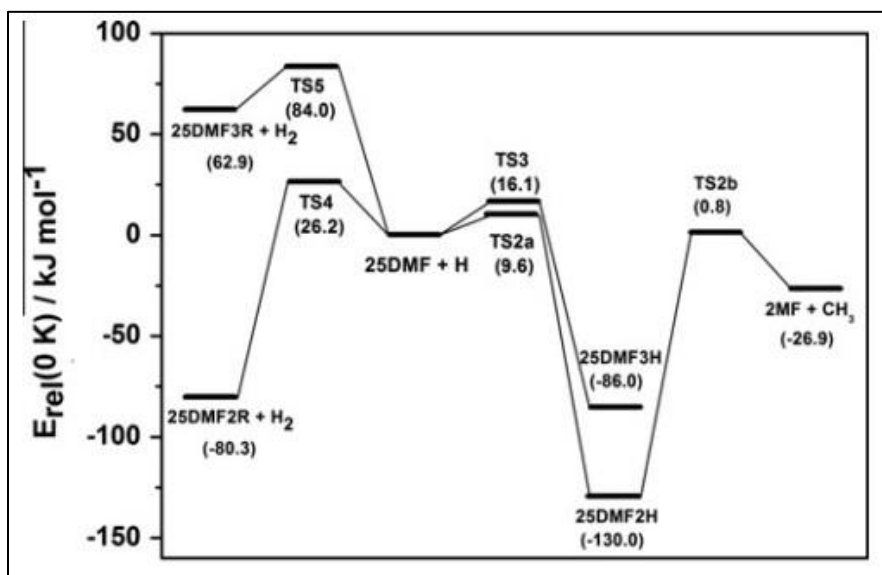
2.4.1. Nghiên cứu lý thuyết về sự phân hủy và ôxy hóa DMF

Quá trình tìm hiểu động lực học phản ứng của DMF sẽ được thảo luận với sự chú ý đến nhiệt phân và ôxy hóa. Những nghiên cứu này cung cấp cái nhìn sâu sắc về tốc độ và con đường phản ứng có thể xảy ra cũng như sự hình thành các gốc tự do. Các nghiên cứu có thể được phân thành ba loại: các phép tính toán động học hóa học lượng tử, trong đó các phương pháp lý thuyết và tính toán được sử dụng để nắm bắt động học phản ứng; nghiên cứu động học hóa học thực nghiệm, trong đó nhiên liệu được thử nghiệm trong lò phản ứng dòng chảy để xác định tốc độ phản ứng và phân hủy; mô hình động học hóa học chi tiết, được thiết kế để mô phỏng quá trình đánh lửa và lan truyền ngọn lửa, dự đoán các lộ trình phản ứng.

a. Các phép tính toán động học hóa học lượng tử

Sự phân hủy DMF cũng đã nhận được một số chú ý liên quan đến các nghiên cứu hóa học lượng tử. Baptiste Sirjean và cộng sự [67] sử dụng các phương pháp lý thuyết để khám phá các con đường quan trọng, chẳng hạn như mở vòng hai gốc, phân tách liên kết C-H ban đầu chuyển nguyên tử H và nhóm CH₃ có liên quan đến các loại carbene trung gian. Mô hình động học hóa học chi tiết cho DMF đã được phát triển dựa trên kết quả hóa học lượng tử của chúng. Các tính toán của Simmie và Metcalfe [68] đã xác định các bước ban đầu trong quá trình phân hủy DMF là sự phân cắt liên kết C-H trong chuỗi CH₃ và sự hình thành β - and α -carbenes. Kết quả cho thấy sự hình thành các gốc không bão hòa như allenylketenes do sự mở vòng furan, hơn nữa kết quả chỉ ra rằng 2-methylfuran (MF) được hình thành thông qua việc cộng H và DMF sau đó là loại bỏ **methy**l. Trong một nghiên cứu khác của Baptiste Sirjean và cộng sự [69] đã nghiên cứu sâu hơn về sự phân hủy nhiệt của 5-methyl-2-furanylmethyl một gốc tự do chính được hình thành trong quá trình đốt cháy và nhiệt phân DMF. Kết quả dự đoán rằng sự mở vòng của 5-methyl-2-furanylmethyl sau đó là sự hình thành cyclohexadienone bằng cách mở rộng vòng là kênh phân hủy được ưa chuộng. Nghiên cứu đã xác định các kênh khác dẫn đến sự hình thành các gốc C5 không bão hòa tuyến tính và tuần hoàn, cuối cùng là hình thành cyclopentadiene và CO. Trong một số nghiên cứu, đã nghiên cứu sự phản ứng của DMF với các gốc tự do, Friese và cộng sự [70] đã tính toán bề mặt năng lượng **tiềm** năng cho phản ứng $H + 2,5\text{-DMF} \rightarrow \text{sản}$

phẩm, như thể hiện trong hình 2.9. Kết quả chỉ ra rằng cơ chế chính với hiệu suất trên 75% đối với phản ứng trước đó là cơ chế bổ sung-khử để tạo ra 2-MF + CH₃. Phản ứng tương tự đã được nghiên cứu bởi Baptiste Sirjean và René Fournet [71] cho thấy các con đường quan trọng trong quá trình bổ sung là phản ứng thay thế 2,5-DMF + H → 2-MF + CH₃ và tạo ra 1,3-butadien và acetyl gốc tự do (CH₃CO), nghiên cứu cho thấy tỷ lệ phân nhánh có sự phụ thuộc nhỏ vào áp suất. Hơn nữa, Ferraz-Santos và Bauerfeldt [72] đã sử dụng phương pháp lý thuyết hàm mật độ (DFT: Density Functional Theory) để nghiên cứu bề mặt thế năng cho phản ứng 2,5-DMF + OH. Kết quả cho thấy rằng sự hình thành phức hợp tiền phản ứng trong các con đường cộng OH chỉ hiệu quả ở nhiệt độ 277⁰C, do đó các tác giả suy ra rằng các con đường cộng OH hoạt động ở nhiệt độ thấp, trong khi các gốc trừu tượng H trở nên chiếm ưu thế hơn ở nhiệt độ điển hình trong điều kiện cháy.



Hình 2.9 Sơ đồ thế năng của 2,5-DMF + H [70]

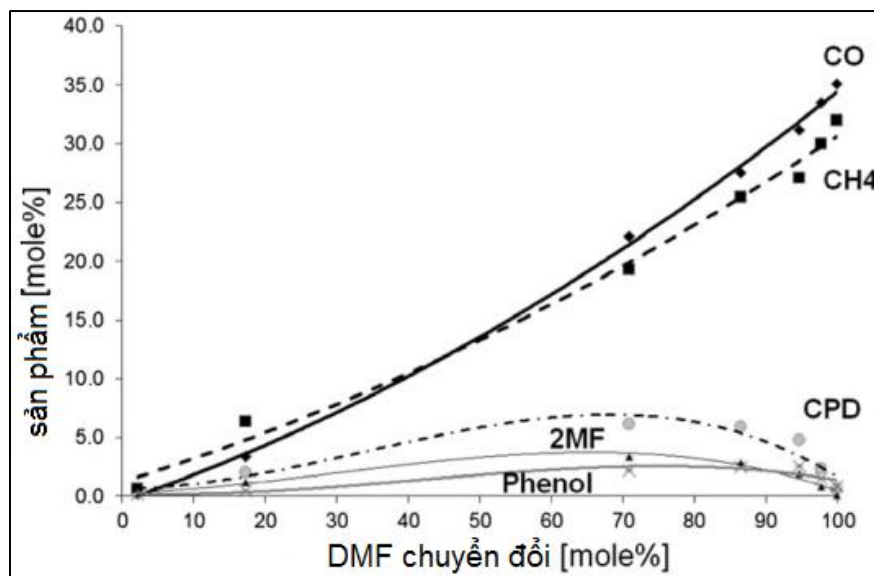
b. Nghiên cứu động học hóa học thực nghiệm

Rất nhiều các công trình đã tập trung nghiên cứu thực nghiệm về quá trình cháy của DMF để chứng minh rằng những nỗ lực về mặt nghiên cứu lý thuyết và tính toán là xác thực nhằm ước tính các thông số tỷ lệ và con đường tiêu thụ chính của DMF. Một số lượng lớn các nghiên cứu thực nghiệm liên quan đến quá trình ion hóa, hình thành và phát thải đốt cháy DMF. Các nghiên cứu khác nhằm mục đích khám phá việc điều tra sự phân hủy trong lò phản ứng dòng chảy và trong ống sốc, hơn nữa một số nghiên cứu tập trung vào hằng số tốc độ phản ứng DMF với các gốc quan trọng trong quá trình ôxy hóa.

Thứ nhất, nghiên cứu về quá trình ion hóa, hình thành và phát thải đốt cháy DMF. Mặc dù có nhiều báo cáo về ứng dụng dẫn xuất furan trong ĐCĐT và thành phần hóa học trong khí thải của chúng, nhưng có rất ít công trình nghiên cứu về sự hình thành hydrocacbon thơm đa vòng (PAH: polycyclic aromatic hydrocarbon). Trần và cộng sự [73] đã kiểm tra ảnh hưởng của các furan đến sự hình thành PAH trong ngọn lửa bằng phép đo quang phổ khối chùm phân tử ion hóa điện tử (EI-MBMS: electron-ionization molecular-beam mass spectrometry) cho thấy rằng phân tử số mol PAH trong DMF thấp hơn đáng kể so với trong ngọn lửa toluene nguyên chất. Họ cũng cho rằng C_5H_5 là chất trung gian quan trọng để hình thành PAH từ DMF, điều này chứng tỏ rằng DMF với trị số ốctan cao có khả năng hình thành lượng tiền chất bồ hóng thấp hơn đáng kể so với toluene. Một vài năm sau trong nghiên cứu tiếp theo Trần và cộng sự [74] đã thực nghiệm so sánh quá trình ôxy hóa của DMF, MF và furan ở điều kiện nhiệt độ từ thấp đến trung bình. Kết quả báo cáo cho thấy bộ dữ liệu phân tích đầy đủ có hệ thống trong phạm vi nhiệt độ 456^0C-896^0C cho DMF, MF và furan được đo cho các tỷ lệ tương đương khác nhau trong lò phản ứng dòng chảy ở áp suất 1 bar. Các chất phản ứng, chất trung gian và sản phẩm được phân tích sâu hơn bằng phương pháp EI-MBMS. Việc bổ sung HO_2 và O_2 vào 2-furylmethyl (MF-yl) và 5-methyl-2-furanylmethyl (DMF-yl) là cách làm đầu tiên cho tập hợp các phản ứng chi tiết, hơn nữa sự tách H từ 2-methylfuran và DMF bằng O_2 được xác định là loại phản ứng nhạy cảm đối với quá trình ôxy hóa hóa học ở nhiệt độ từ thấp đến trung bình, cả ba loại nhiên liệu furanic đặc biệt là DMF đều tạo ra các loài cực kỳ độc hại gồm acrolein (C_3H_4O), methyl vinyl ketone (C_4H_6O), furfural ($C_5H_4O_2$), phenol (C_6H_6O) và các tiền chất bồ hóng gây ung thư gồm benzen (C_6H_6), 1,3-butadiene (C_4H_6), propene (C_3H_6). Jiao và cộng sự [75] đã sử dụng phép đo quang phổ khối truyền Fourier (FTMS: Fourier transfer mass spectrometry) để phát hiện các chất hóa học ion trong DMF bằng quá trình ion hóa va chạm điện tử và bằng các phản ứng ion phân tử liên quan đến quá trình đánh lửa và đốt cháy bằng plasma. Kết quả cho thấy quá trình ion hóa electron của DMF dẫn đến sự hình thành năm ion trong khoảng năng lượng từ 10-200eV: $C_6H_8O^+$, $C_6H_7O^+$, $C_5H_5O^+$, $C_2H_3O^+$, C_4H_5 với các dạng ion trung tính là H, H + CO, H + C_4H_4 , CH_3 . Kết quả cũng cho thấy tiết diện ion hóa tổng có giá trị tối đa là $1,7 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ ở $\sim 90\text{eV}$. Người ta cũng phát hiện ra rằng các ion $C_2H_3^+$, $C_2H_3O^+$,

$C_5H_3O^+$ phản ứng với DMF thông qua cơ chế chuyển H^- , chuyển điện tích và chuyển H^+ .

Thứ hai, nghiên cứu về sự phân hủy DMF trong lò phản ứng dòng chảy và trong ống sốc, trong một nghiên cứu của Cheng và cộng sự [76] đã được quan sát định tính và đo lường định lượng bằng khối quang phổ hóa cực tím chân không synchrotron (SVUV-PIMS: Synchrotron vacuum ultraviolet photoionization mass spectrometry) quan sát thấy sản phẩm của quá trình nhiệt phân DMF ứng với các áp suất 30-760 Torr, nhiệt độ 506-1196 $^{\circ}C$ trong lò phản ứng dòng chảy, hàng loạt các gốc tự do và chất thơm đã được phát hiện đặc biệt là phenol, 1,3-cyclopentadiene, MF, vinylacetylene và 1,3-butadiene, có nồng độ rất cao trong quá trình phân hủy DMF. Cụ thể, ở nhiệt độ cao và áp suất cao gốc 5-methyl-2-furanylmethyl phân hủy tạo ra một lượng lớn phenol và 1,3-cyclopentadiene là tiền chất hình thành benzen, gốc phenyl và gốc cyclopentadienyl. Thứ hai ở áp suất thấp và áp suất khí quyển chủ yếu là do sự phân hủy đơn phân tử tạo ra các gốc CH_3CHCCH và acetyl, tách nguyên tử H tạo ra gốc 5-methyl-2-furanylmethyl, ipso được thay thế bằng nguyên tử H tạo ra MF và CH_3 và tấn công nguyên tử H tạo ra 1,3-butadiene và acetyl.



Hình 2.10 Sản lượng các loài sản phẩm khi chuyển đổi DMF [77]

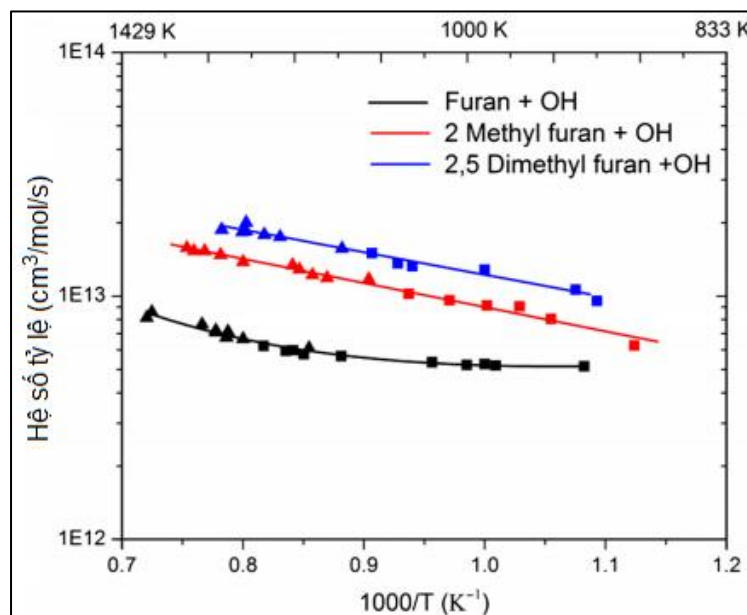
Djokic và cộng sự [77] đã tiếp tục tập trung vào việc tìm thêm các chất sinh ra từ nhiệt phân DMF trong lò phản ứng được gia nhiệt 600-825 $^{\circ}C$ áp suất được duy trì ở mức 1,7 bar ở mức chuyển hóa thấp các sản phẩm chính được tạo ra gồm: CO, CH_4 , phenol, MF, 1,3-cyclopentadiene (CPD) thể hiện ở Hình 2.10, tuy nhiên ở mức chuyển

hóa cao, các chất: benzen, toluene, indene và naphthalene ngày càng gia tăng ở nhiệt độ 825⁰C, các chất thơm: mono-, di-, tri- và tetra được hình thành rõ rệt đây là các tiền chất tạo ra bồ hóng.

Một nghiên cứu toàn diện về quá trình nhiệt phân DMF trong lò phản ứng dòng chảy khác nhau, Alexandrino và cộng sự [78] đã thực hiện ở khoảng nhiệt độ 226-1126⁰C áp suất 1-40 bar, nồng độ DMF 100-6000 ppm. Kết quả cho thấy ở nồng độ DMF cao một lượng bồ hóng đáng kể được tạo ra, ở nồng độ thấp (100-300 ppm) bồ hóng hình thành rất ít, vì vậy DMF cần được nghiên cứu kỹ để làm chất phụ gia trong các nhiên liệu khác, bổ sung gốc OH vào vị trí C2 để tạo thành gốc C₂H₂, CH₃-HCO và CH₃CO cũng như tách H là các con đường để kiểm soát quá trình nhiệt phân DMF. Một năm sau, tiếp tục cho quá trình nghiên cứu về bồ hóng sinh ra khi nhiệt phân DMF trong lò phản ứng dòng chảy, Alexandrino và cộng sự [79] đã dùng nồng độ DMF cao hơn (5000-15000 ppm) cùng nhiệt độ trong lò cao hơn (700-1200⁰C) để kiểm chứng và tính xác thực sản lượng bồ hóng, thật vậy ở nhiệt độ cao hiệu suất tạo bồ hóng rất rõ rệt, CO và H cũng được tìm thấy trong thí nghiệm. Xu hướng chính của DMF là tạo ra các gốc **cyclopentadienyl** là tiền chất tạo nên PAH mà không cần chuyển qua benzen là chất trung gian.

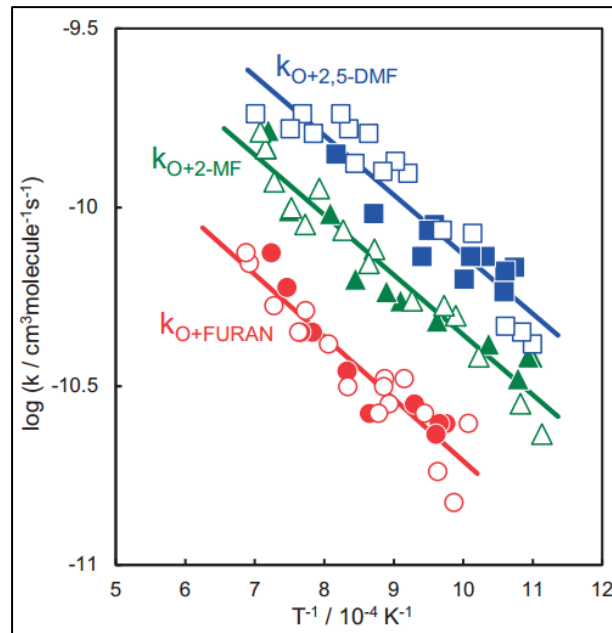
Thứ ba, một số nghiên cứu tốc độ phản ứng DMF với các gốc quan trọng trong quá trình ôxy hóa, Alexandrino và cộng sự [80] đã nghiên cứu sự tương tác giữa DMF và các chất gây ô nhiễm, cụ thể trong nghiên cứu này là NO, một nghiên cứu thực nghiệm động học gồm hai quá trình chính là sự chuyển đổi NO khi có mặt DMF và sự chuyển đổi DMF khi có mặt NO, trong lò phản ứng dòng chảy ứng với nhiệt độ 526-1126⁰C ở áp suất khí quyển, sử dụng máy quang phổ hồng ngoại biến đổi Fourier (FT-IR: Fourier transform infrared spectrometry) quan sát các sản phẩm nhiệt phân. Kết luận của quá trình này chỉ ra rằng ở trường hợp chuyển đổi NO, khi điều kiện giàu nhiên liệu, nồng độ ôxy và nhiệt độ tăng thì nồng độ NO tăng, ở nhiệt độ cao hơn (>1000⁰C) sự phân hủy đơn phân tử DMF diễn ra mạnh làm quá trình chuyển đổi NO rõ ràng hơn. Khi nghèo nhiên liệu, nhiệt độ thấp nhất, nồng độ NO giảm do quá trình chuyển đổi NO thành NO₂, nhưng khi nhiệt độ được gia tăng thì NO tăng trở lại. Quá trình chuyển đổi qua lại giữa NO và NO₂ không góp phần loại bỏ NO rỗng, khi thêm DMF vào không ảnh hưởng nhiều đến NO, vì vậy bổ sung DMF không có tác dụng có

lợi. Ở trường hợp chuyển đổi DMF, khi điều kiện nghèo nhiên liệu, ở nhiệt độ thấp, khi không có NO thì nồng độ DMF bị ảnh hưởng đáng kể đến quá trình chuyển đổi của nó. Cũng trong điều kiện nghèo nhiên liệu này, khi có hoặc không có NO, DMF được tiêu thụ bằng cách cộng OH để tạo thành acetylene, gốc acetyl và acetaldehyde. Khi giàu nhiên liệu, sự có mặt của NO không ảnh hưởng đến nồng độ DMF, tuy nhiên ở nhiệt độ cao sự có mặt NO làm giảm sự hình thành CO, CO₂, H₂, còn ở nhiệt độ thấp hơn NO làm dịch chuyển thời điểm bắt đầu tiêu thụ DMF xuống, làm tăng các sản phẩm cháy. Một nỗ lực ý nghĩa trong nghiên cứu của Elwardany và cộng sự [81] đã khám phá và so sánh tốc độ phản ứng của furan, MF, DMF với hydroxyl (OH) trong phạm vi 616-1114⁰C với áp suất 1-2 atm. Kết quả chỉ ra rằng tốc độ phản ứng của furan + OH là thấp nhất vì chủ yếu theo con đường cộng-khử OH ở nhiệt độ thấp hơn là tách H, tiếp theo là MF + OH, cao nhất là DMF + OH vì MF chỉ có một nhóm methyl trong khi đó DMF có đến hai dẫn đến tốc độ phản ứng với số lượng nhóm methyl là sự tách H nhanh hơn việc thêm OH vào các vòng furan.



Hình 2.11 So sánh tốc độ phản ứng các nhiên liệu khác nhau với OH [81]

Yoshizawa và cộng sự [82] đã trình bày một nghiên cứu động học về phản ứng oxy nguyên tử O(³P) với furan, MF và DMF ở nhiệt độ cao trong ống sốc được trang bị quang phổ hấp thụ cộng hưởng nguyên tử (ARAS: atomic resonance absorption spectroscopy). Nghiên cứu cho thấy rằng hệ số tốc độ lớn nhất đối với phản ứng oxy nguyên tử với DMF, sau đó là MF, và cuối cùng là furan.



Hình 2.12 Hệ số tốc độ phản ứng của $O(^3P)$ với mức 25 và 50 ppm nồng độ Furan, 2-MF, 2,5-DMF trong hỗn hợp 200 ppm SO_2/Ar [82]

c. Mô hình động học hóa học chi tiết

Những nỗ lực của những nghiên cứu từ các dữ liệu phương pháp tính toán cũng như các thực nghiệm về động lực hóa học để trình bày sự phân hủy, ôxy hóa, hệ số tốc độ phản ứng của DMF được xem xét ở trên là cơ sở hướng đến mô hình động học hóa học chi tiết được diễn giải trong phần này. Một số mô hình được phát triển như các mô hình kết hợp để mô phỏng hỗn hợp của DMF với nhiên liệu hóa thạch, các con đường phản ứng và phân tích độ nhạy cho phép khám phá về động học hóa học, ngoài ra thời gian cháy trễ và vận tốc cháy tầng là hai đại lượng dự đoán các đặc tính cháy của DMF. Somer và cộng sự [83] đã phát triển một mô hình động học mở rộng, mô hình gồm 1768 phản ứng và 545 loài để mô tả quá trình đốt cháy DMF trong ống sốc xung đơn ở nhiệt độ và áp suất khác nhau. Kết quả cho thấy mô hình mô phỏng thiết lập chính xác với thực nghiệm, con đường chính của phân hủy đơn phân tử DMF là phản ứng chuyển nguyên tử H ở nhiệt độ cao, phản ứng này cũng dự đoán thời gian cháy trễ và quá trình nhiệt phân. Thời gian cháy trễ của 0,75% DMF giảm khi tăng nồng độ O_2 , ở 2,66% DMF thời gian cháy trễ phù hợp ở áp suất 80 bar. Vận tốc cháy tầng không nhất quán về độ lớn cực đại và tỷ lệ giữa nhiên liệu/không khí quyết định vận tốc cháy tầng. Sirjean và cộng sự [67] xây dựng mô hình động học chi tiết mô tả thời gian cháy trễ DMF trong ống sốc phạm vi nhiệt độ 1026-1557°C, ở áp suất 1-4 bar, hỗn hợp

DMF/O₂/Ar được trộn theo các tỷ lệ tương ứng. Kết quả cho thấy thời gian cháy trễ tăng khi giảm tỷ lệ O₂ trong hỗn hợp, thời gian cháy trễ giảm khi tăng nồng độ DMF ở áp suất cố định. Hai phản ứng nhạy cảm nhất liên quan đến thời gian cháy trễ và có liên quan trực tiếp đến cơ chế chính của DMF, đầu tiên là sự tách H bởi các nguyên tử H từ DMF dẫn đến hình thành R1C₆H₇O + H₂, thứ hai là sự phân hủy đơn phân tử DMF.

2.4.2. Đặc điểm tính chất cháy của DMF

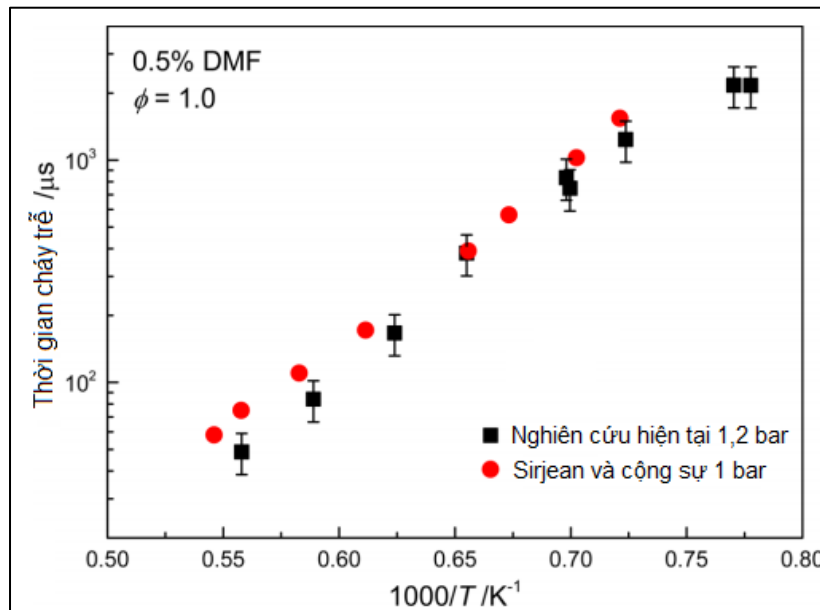
Trong phần này xem xét các nghiên cứu khác nhau về DMF, các đặc tính tự động đánh lửa, thời gian cháy trễ và đặc tính vận tốc cháy tăng của ngọn lửa DMF sẽ được nghiên cứu, sự quan tâm dành cho nhiên liệu DMF không ngừng gia tăng được xem như là chất phụ gia cho nhiên liệu khác hay như là một nhiên liệu thay thế.

a. Khả năng tự bốc cháy của DMF

DMF được coi là một loại NLSH đầy hứa hẹn nên khả năng tự bốc cháy của chúng là một đặc điểm quan trọng cần được nghiên cứu, phương pháp chính để mô tả đặc tính tự bốc cháy là thực hiện các nghiên cứu thời gian cháy trễ có thể được sử dụng để thiết lập các phản ứng của nhiên liệu và xác thực các mô hình, các phương pháp thực nghiệm chính để đo thời gian cháy trễ là sử dụng ống sốc và máy nén nhanh (RCM: rapid compression machines).

Thứ nhất, thời gian cháy trễ của DMF là đại lượng đặc trưng đầu tiên cho tính chất cháy của DMF, các đặc tính môi trường xung quanh như nhiệt độ, áp suất cũng như tính chất của nhiên liệu như độ nhớt, mật độ không khí sẽ quyết định rất rõ đến thời gian cháy trễ của DMF. Trong một nghiên cứu của Xu và cộng sự [84] họ đã phát triển mô hình dự đoán thời gian cháy trễ của DMF dựa trên mô hình con của Somers [83] và Liu [85], thời gian cháy trễ được đo trong phạm vi nhiệt độ 876-1736⁰C và áp suất 1,2, 4 và 16 bar với hỗn hợp DMF/Ar/O₂ trong ống sốc xung kích phản xạ. Kết quả cho thấy, khi sử dụng DMF/Ar/O₂ có nồng độ 0,5% DMF ở áp suất 1,2 bar gần giống với thử nghiệm của Sirjean [67] sử dụng hỗn hợp nhiên liệu tương tự nhưng ở áp suất 1 bar, kết quả thử nghiệm này tốt hơn đôi chút, thời gian cháy trễ ngắn hơn là do áp suất cao hơn một chút sau sóng xung kích phản xạ (Hình 2.13). Mặt khác, thời gian cháy trễ của DMF tăng lên khi tăng các tỷ lệ tương đương ($\phi = 0,5, 1, 2$) và giảm khi áp suất tăng. Ngoài ra, khi so sánh thời gian cháy trễ của Somers [83] và Liu [85]

ta thấy thời gian cháy trễ của Somers [83] phù hợp hơn, trong khi của Liu [85] tương đối dài hơn. Đối với ba áp suất được Xu nghiên cứu (1,2, 4 và 16 bar) trong điều kiện phong phú ($\phi = 2$) hiệu suất mô hình của Somers [83] vẫn tốt hơn của Liu [85].



Hình 2.13 So sánh thời gian cháy trễ của Xu và Sirjean [84]

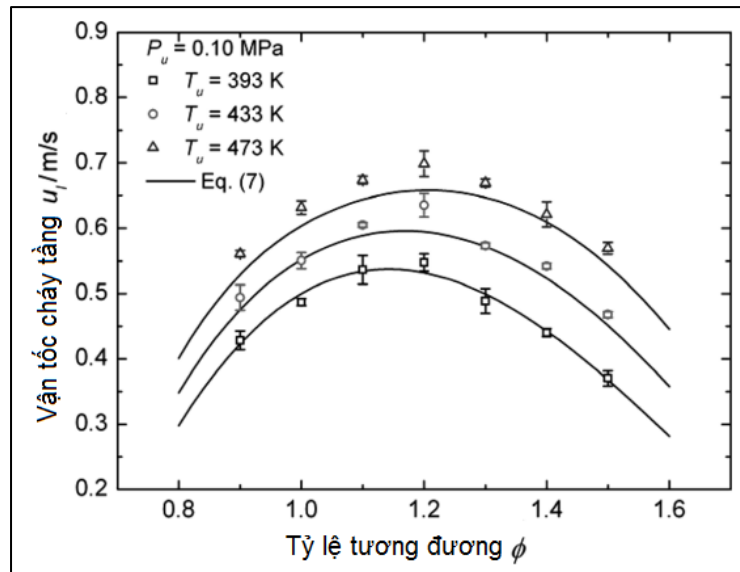
Tiếp tục nghiên cứu thời gian cháy trễ của DMF, Xu và cộng sự [86] cho thử nghiệm mô hình ở áp suất 16 và 30 bar, nhiệt độ từ 463-870⁰C, tỷ lệ tương đương $\phi = 0,5, 0,75, 1, 2$ trong một máy nén nhanh. Kết quả cho thấy khi hỗn hợp DMF/O₂/N₂/Ar có 0,5% DMF ở áp suất 16 bar trong khoảng nhiệt độ 627-870⁰C thí nghiệm của Xu ở trường Đại học Thanh Hoa được so sánh với thí nghiệm ở trường Đại học Giao Thông Tây An cùng hỗn hợp nhiên liệu nhưng ở nhiệt độ cao hơn (950-1343⁰C) trong ống sốc, kết quả chỉ ra rằng cả hai thí nghiệm đều cho thấy sự nhất quán về thời gian đo, thí nghiệm ở Đại học Thanh Hoa khi ở nhiệt độ thấp hơn 626⁰C thời gian cháy trễ so với nhiệt độ nghịch đảo có độ dốc giảm, cho thấy năng lượng hoạt hóa tổng thể của quá trình đánh lửa thấp hơn một chút. Trường hợp khác, ở 1% DMF, $\phi = 1$ ta thấy thời gian cháy trễ ở 16 bar lớn hơn 30 bar. Ngoài ra tỷ lệ tương đương cũng quyết định đến thời gian cháy trễ, ở 16 bar thời gian cháy trễ tăng dần khi tỷ lệ tương đương ngày càng tăng. Mặt khác, thời gian cháy trễ cũng lệ thuộc vào nồng độ nhiên liệu, ứng với nồng độ nhiên liệu 0,5%, 1% và 2% ở 16 bar, khi nồng độ giảm sẽ kéo dài thời gian cháy trễ. Hơn nữa khi tăng áp suất trong máy nén nhanh sẽ làm phản ứng tăng lên.

Thứ hai, cần phải nghiên cứu sâu thêm về thời gian cháy của DMF bằng việc so sánh với thời gian cháy của nhiên liệu khác để có thể thiết lập một xu hướng phản ứng toàn diện, điều này mang lại cái nhìn sâu sắc hơn về hành vi cháy của DMF và hỗ trợ thêm cho mô hình động học hóa học. Eldeeb và Akih-Kumgeh [87] đã so sánh thời gian cháy trễ của ba nhiên liệu furan, MF và DMF trong một ống sốc sau sóng xung kích phản xạ, thời gian cháy trễ được đo trong khoảng nhiệt độ 703-1296⁰C với áp suất khoảng 12 atm, hỗn hợp các nhiên liệu được hòa trộn với O₂ và Ar theo các tỷ lệ thích hợp trong điều kiện giàu nhiên liệu. Kết quả cho thấy ở áp suất 2 atm thời gian cháy trễ của DMF dài nhất, trong khi MF bốc cháy nhanh nhất, thời gian cháy trễ của furan nằm giữa DMF và MF. Từ góc độ hóa học điều này có nghĩa quá trình alkyl hóa kép của furan mang lại độ ổn định hóa học cao hơn, trong khi alkyl hóa đơn của furan mang lại khả năng phản ứng cao hơn. Ở áp suất 5 và 10 atm, thì khả năng phản ứng của MF là cao nhất, DMF và furan gần tương tự nhau. Trong một nỗ lực khác của Eldeeb và Akih-Kumgeh [88] đã đo thời gian cháy trễ của DMF và 2-ethylfuran (EF), kết quả cho thấy ở áp suất 5 atm thời gian cháy trễ của DMF dài hơn 4,7 lần EF ở nhiệt độ 1000⁰C và dài gấp 4 lần ở 930⁰C, tương tự ở áp suất 12 atm thời gian cháy trễ của DMF dài hơn 6 lần EF ở 936⁰C và dài hơn 2,3 lần ở 792⁰C, thời gian cháy trễ của DMF ít nhạy cảm nhiệt độ hơn EF, khả năng phản ứng của DMF ít hơn điều này rất tốt cho khả năng chống kích nổ phù hợp sử dụng làm nhiên liệu cho động cơ đánh lửa. Mặt khác trong nghiên cứu này cũng so sánh thời gian cháy trễ của DMF và iso-octan, ở áp suất 5 atm và 12 atm ứng với các tỷ lệ tương đương $\phi = 0,5, 1$ và 2 . Ở 5 atm, DMF có thời gian cháy trễ dài hơn iso-octan 1,5 lần ở 863⁰C và dài hơn 1,13 lần ở 1078⁰C, cho thấy khả năng phản ứng ít hơn. Ở áp suất cao (12 atm) thời gian cháy trễ của DMF hầu như không thay đổi so với 5 atm. Gao vào cộng sự [89] đã đo thời gian cháy trễ của DMF, n-heptan so sánh với hỗn hợp DMF/n-heptan ở nhiệt độ 926-1526⁰C, áp suất 2 atm và 10 atm trong ống sốc, hỗn hợp DMF/n-heptan được hòa trộn theo tỷ lệ 20%DMF/80%n-heptan, 50%DMF/50%n-heptan, 80%DMF/20%n-heptan. Kết quả cho thấy khi tăng nồng độ DMF trong hỗn hợp nhiên liệu thì thời gian cháy trễ tăng lên, khả năng phản ứng của hỗn hợp nhiên liệu nằm giữa hai nhiên liệu nguyên chất, n-heptan là chất phản ứng mạnh nhất (thời gian cháy trễ ngắn nhất), DMF là chất

ít phản ứng nhất (thời gian cháy trễ dài nhất), điều này là do quá trình tự bốc cháy của DMF khó xảy ra hơn dẫn đến thời gian cháy trễ lâu hơn.

b. Đặc điểm ngọn lửa tầng của DMF

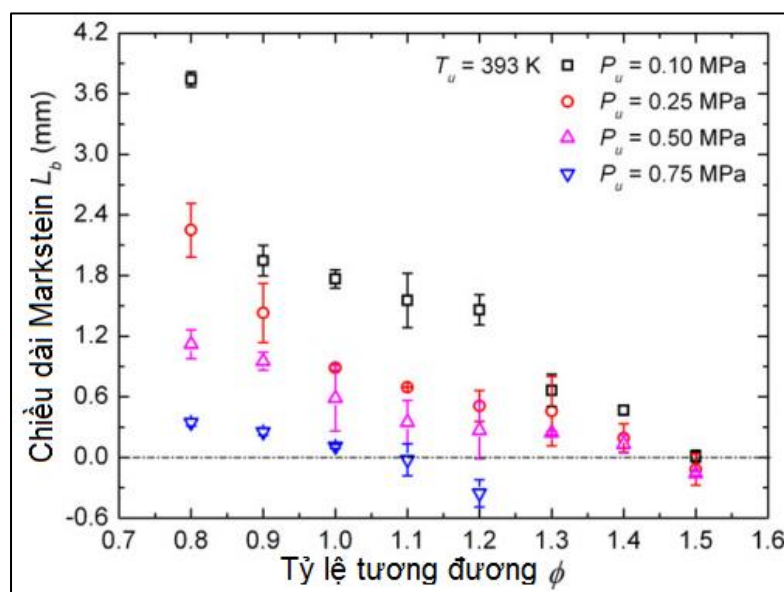
Vận tốc cháy tầng không chỉ là một đặc trưng quan trọng mà còn hữu ích cho việc xác nhận các cơ chế động học. Vận tốc cháy tầng kết hợp với đặc tính phản ứng, nhiệt hóa học và tính chất vận chuyển đóng vai trò quan trọng đại diện cho tốc độ cháy trong ĐCĐT đây là một thông số quan trọng trong mô phỏng hỗn loạn. Chiều dài Markstein là phương pháp nghiên cứu quan trọng đối với quá trình đốt cháy DMF vì chúng tập trung vào sự không ổn định ngọn lửa khuếch tán nhiệt từ đó chỉ ra mức độ thay đổi giữa khuếch tán nhiệt và khối lượng trong vùng cháy và vùng không cháy. Các nghiên cứu tập trung vào ngọn lửa DMF nguyên chất hoặc ngọn lửa của hỗn hợp DMF trộn với nhiên liệu khác. Vận tốc cháy tầng của DMF ở áp suất cao đã được Wu và cộng sự [90] nỗ lực nghiên cứu, áp suất ban đầu đặt ở mức 0,1-0,75 MPa, tỷ lệ tương đương từ 0,8-1,5 nhiệt độ ban đầu 120⁰C trong buồng đốt thể tích, kết quả cho thấy khi tăng dần lên áp suất cao, vận tốc cháy tầng DMF có xu hướng giảm giá trị đạt cực đại ở tỷ lệ tương đương $\phi = 1,2$. Lý giải cho điều này là khi tăng áp suất thì mật độ dòng tự do và các phản ứng hóa học bị ảnh hưởng đáng kể, vì vậy làm giảm vận tốc cháy tầng, điều này gây ra sự chậm lại trong động học và làm chậm tốc độ lan truyền ngọn lửa. Ngoài ra, khi tăng áp suất ban đầu thì thông lượng cháy tầng cũng gia tăng. Điều này cho thấy rằng sự gia tăng mật độ của các khí chưa cháy với áp suất ban đầu tăng sẽ khắc phục được sự giảm tốc độ cháy tầng. Các hiệu ứng kết hợp của tốc độ cháy tầng và mật độ góp phần làm tăng thông lượng cháy tầng với áp suất ban đầu tăng. Ngoài sự ảnh hưởng của áp suất lên vận tốc cháy tầng của DMF, nhiệt độ ban đầu cũng làm ảnh hưởng đáng kể, Wu và cộng sự [91] đã nghiên cứu vận tốc cháy tầng của DMF ở nhiệt độ cao, hỗn hợp DMF-không khí được thiết lập ban đầu ở áp suất khí quyển 0,1 MPa, tỷ lệ tương đương $\phi = 0,9-1,5$ nhiệt độ ban đầu 120⁰C, 160⁰C và 200⁰C. Hình 2.14 thể hiện kết quả cho thấy vận tốc cháy tầng tăng khi tăng dần nhiệt trong dải nhiệt độ nghiên cứu và đạt giá trị lớn nhất tại $\phi = 1,2$ việc tăng nhiệt độ ban đầu sẽ làm tăng nồng độ gốc trung gian trong vùng phản ứng và tăng tốc độ phản ứng hóa học.



Hình 2.14 Vận tốc cháy tăng với tỷ lệ tương đương và nhiệt độ khác nhau [91]

Chiều dài Markstein của ngọn lửa là giá trị âm độ dốc của đường thẳng phù hợp giữa tốc độ lan truyền ngọn lửa và tỷ lệ kéo dài, biểu thị tác động của tỷ lệ kéo dài lên tốc độ lan truyền ngọn lửa và đặc trưng cho sự bất ổn khuếch tán nhiệt của ngọn lửa. Chiều dài Markstein dương thể hiện sự ổn định của ngọn lửa với hiệu ứng khuếch tán nhiệt, trong khi chiều dài Markstein âm thể hiện bề mặt ngọn lửa sẽ bị biến dạng do bất ổn khuếch tán nhiệt dẫn đến tăng tốc độ ngọn lửa và hình thành các cấu trúc tế bào. Sự không ổn định của ngọn lửa được phân chia thành ba loại: sự không ổn định khuếch tán nhiệt, sự không ổn định thủy động lực học (hay sự không ổn định Darrieus-Landau) và sự bất ổn do lực đẩy nổi. Trong nhiều nghiên cứu cho thấy rằng do vận tốc cháy tăng của DMF cao nên chỉ quan sát thấy được sự không ổn định khuếch tán nhiệt và sự không ổn định thủy động lực học. Sự không ổn định khuếch tán nhiệt là hiệu ứng kết hợp của độ bất ổn không đều và độ bất ổn độ cong thuần túy của bề mặt ngọn lửa tương đối sớm trong quá trình lan truyền ngọn lửa khi chất phản ứng thiếu hụt cũng là chất khuếch tán nhiều hơn, độ không ổn định này được đặc trưng bằng chiều dài Markstein hoặc số Lewis. Trong đó số Lewis (Le) được định nghĩa là tỷ số giữa sự khuếch tán nhiệt của hỗn hợp và sự khuếch tán khối lượng. Sự không ổn định thủy động lực học hay sự bất ổn nội tại của ngọn lửa được gây ra bởi sự nhảy vọt mật độ trên ngọn lửa phía trước, các thông số kiểm soát sự không ổn định này là tỷ lệ mật độ và độ dày ngọn lửa, tăng tỷ lệ mật độ trên toàn ngọn lửa hoặc giảm độ dày ngọn lửa sẽ thúc đẩy sự không ổn định này.

Chiều dài Markstein phụ thuộc vào số Lewis của chất phản ứng thiếu, trong hỗn hợp nghèo nhiên liệu chiều dài Markstein phụ thuộc vào số Lewis của nhiên liệu, trong hỗn hợp giàu nhiên liệu chiều dài Markstein phụ thuộc vào số Lewis của chất oxy hóa. Do đó chiều dài Markstein có xu hướng tăng khi tăng tỷ lệ tương đương đối với hỗn hợp hydrocarbon nhẹ-không khí (H_2 /methan-không khí), nhưng nó có xu hướng giảm khi tăng tỷ lệ tương đương đối với hỗn hợp hydrocarbon nặng-không khí (ethanol/isooctan/propan-không khí). Thật vậy, trong nghiên cứu của Wu và cộng sự [92] đã chỉ ra rằng chiều dài Markstein của hỗn hợp DMF-không khí- N_2/CO_2 giảm khi tỷ lệ tương đương tăng vì DMF thuộc nhóm hydrocarbon nặng, mặt khác chiều dài Markstein tăng khi tỷ lệ pha loãng (N_2/CO_2) tăng, điều này cho thấy việc bổ sung chất pha loãng làm tăng độ ổn định của ngọn lửa tăng đồng thời sự gia tăng chiều dài Markstein cũng dài hơn khi tăng tỷ lệ pha loãng. Khi thử nghiệm hỗn hợp DMF ở áp suất cao trong buồng đốt thể tích Wu và cộng sự [90] đã công bố trong Hình 2.15 chiều dài Markstein giảm khi tăng áp suất và tỷ lệ tương đương, chiều dài Markstein trong hầu hết các trường hợp là dương trong nghiên cứu này, chỉ có hai trường hợp ngoại lệ là âm, khi áp suất ở 0,75 MPa tại $\phi = 1$ thì chiều dài Markstein âm; khi $\phi = 1,5$ trong tất cả áp suất ban đầu đều là âm. Hơn nữa, khi tăng áp suất và tỷ lệ tương đương làm cho ngọn lửa không ổn định, sự không ổn định khuếch tán nhiệt và thủy động lực học tác động qua lại gây ra sự không ổn định cho ngọn lửa ở áp suất cao trong điều kiện hỗn hợp nhiên liệu giàu và bán kính ngọn lửa tới hạn cũng giảm.



Hình 2.15 Chiều dài Markstein ở áp suất và tỷ lệ tương đương khác nhau [90]

2.5. Cơ sở lý thuyết tính toán mô phỏng quá trình cháy trong động cơ khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel

2.5.1. Định luật nhiệt động học thứ nhất

Quá trình cháy của nhiên liệu bên trong xi lanh là cực kỳ phức tạp, rất nhiều các quá trình khác nhau được diễn ra liên tục bên trong động cơ như quá trình cháy, quá trình truyền nhiệt, quá trình hình thành các khí thải độc hại,... Vì thế nên xây dựng lý thuyết để tính toán kỹ lưỡng các quá trình này để đánh giá đặc tính làm việc cũng như việc phát thải của động cơ. Thông thường, phương pháp nghiên cứu cân bằng năng lượng thường được các công trình nghiên cứu trước đây áp dụng để mô tả quá trình cháy vì nó mang lại hiệu quả tốt, ít sự sai lệch so với thực nghiệm nên được dùng cho các phần mềm mô phỏng, vì vậy tác giả cũng lựa chọn phương pháp này để nghiên cứu. Công năng được sinh ra do quá trình đốt cháy nhiên liệu sản sinh ra nhiệt sinh công, phương pháp cân bằng năng lượng tuân thủ theo phương trình nhiệt động thứ nhất cho phép xác định diễn biến cháy ở điểm đích và điểm xuất phát của quá trình cháy, sự biến thiên nhiệt năng, công năng và biến thiên nội năng thể hiện qua phương trình nhiệt động thứ nhất [93]:

$$\frac{d(m_c \cdot u)}{d\alpha} = -p_c \cdot \frac{dV}{d\alpha} + \frac{dQ_F}{d\alpha} - \sum \frac{dQ_w}{d\alpha} - h_{BB} \cdot \frac{dm_{BB}}{d\alpha} + \sum \frac{dm_i}{d\alpha} \cdot h_i - \sum \frac{dm_e}{d\alpha} \cdot h - q_{ev} \cdot f \cdot \frac{dm_{ev}}{dt} \quad (2.1)$$

Dựa theo phương pháp cân bằng năng lượng thì khối lượng môi chất bên trong xi lanh luôn cân bằng, hay trạng thái nhiệt cũng cân bằng, chính vì thế phương trình nhiệt động thứ nhất sẽ quyết định khối lượng môi chất công tác, được xác định qua phương trình [93]:

$$\frac{dm_c}{d\alpha} = \sum \frac{dm_i}{d\alpha} - \sum \frac{dm_e}{d\alpha} - \frac{dm_{BB}}{d\alpha} + \frac{dm_{ev}}{dt} \quad (2.2)$$

Trong đó:

$\frac{d(m_c \cdot u)}{d\alpha}$: là biến đổi nội năng bên trong xi lanh

$p_c \cdot \frac{dV}{d\alpha}$: công chu trình thực hiện

$\frac{dQ_F}{d\alpha}$: nhiệt lượng cấp vào (đốt cháy nhiên liệu)

$\sum \frac{dQ_w}{d\alpha}$: tổn thất nhiệt qua vách

$h_{BB} \cdot \frac{dm_{BB}}{d\alpha}$: tổn thất nội năng do lọt khí

m_c : khối lượng môi chất bên trong xi lanh

u : nội năng của hệ

p_c : áp suất bên trong xi lanh

V : thể tích xi lanh

Q_F : nhiệt lượng do nhiên liệu cung cấp

Q_w : nhiệt lượng tổn thất qua vách

α : góc quay trục khuỷu

h_{BB} : trị số enthalpy

$\frac{dm_{BB}}{d\alpha}$: biến thiên khối lượng dòng chảy

dm_i : khối lượng phần tử lưu lượng vào xi lanh

dm_e : khối lượng phần tử lưu lượng ra khỏi xi lanh

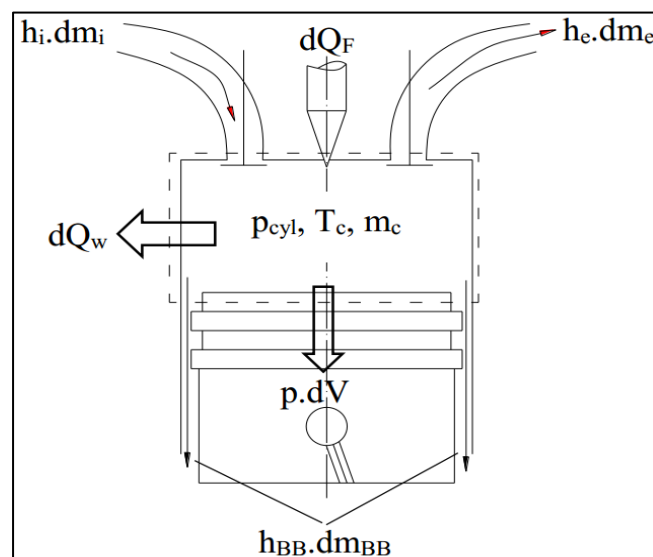
h_i : enthalpy của khối lượng vào xi lanh

h_e : enthalpy của khối lượng ra khỏi xi lanh

q_{ev} : nhiệt hóa hơi của nhiên liệu

f : phần tử của nhiệt hóa hơi khi nạp vào xi lanh

m_{ev} : lượng nhiên liệu hóa hơi



Hình 2.16 Mô hình nhiệt trong xi lanh động cơ [93]

Phương trình nhiệt động thứ nhất mô tả sự biến thiên nội năng của hỗn hợp môi chất trong xi lanh bằng nhiệt lượng của hỗn hợp môi chất, tổng công sinh ra phía trên đỉnh piston, thất thoát do lọt khí các te, thất thoát nhiệt do truyền qua vách xi lanh.

Cùng với phương trình trạng thái của khí:

$$p_c = \frac{1}{V} \cdot m_c \cdot R_0 \cdot T_c \quad (2.3)$$

Trong đó:

p_c : áp suất bên trong xi lanh

m_c : khối lượng môi chất trong xi lanh

R_0 : hằng số

T_c : nhiệt độ môi chất trong xi lanh

V : thể tích xi lanh

2.5.2. Mô hình cung cấp môi chất

Hỗn hợp nhiên liệu được sử dụng để mô phỏng trong động cơ gồm diesel, DMF và một số thành phần khác, các tính chất của nhiên liệu thể hiện được: công thức hóa học, nhiệt độ tự bốc cháy, nhiệt trị thấp,... Cách thức xác định quá trình cháy của nhiên liệu bên trong xi lanh được tính toán theo phương trình [93]:

$$\frac{c_{pk}}{R} = a_{1k} + a_{2k}T + a_{3k}T^2 + a_{4k}T^3 + a_{5k}T^4 \quad (2.4)$$

$$\frac{H_k}{RT} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T + \frac{a_{3k}}{3}T^2 + \frac{a_{4k}}{4}T^3 + \frac{a_{5k}}{5}T^4 + \frac{a_{6k}}{T} \quad (2.5)$$

$$\frac{S_k}{R} = a_{1k} \cdot \ln T + a_{2k}T + \frac{a_{3k}}{2}T^2 + \frac{a_{4k}}{3}T^3 + \frac{a_{5k}}{4}T^4 + a_{7k} \quad (2.6)$$

Trong đó:

T : nhiệt độ

R : hằng số chất khí

C_p : nhiệt dung riêng đẳng áp

H^0 và S^0 : entanpy và entropy

a_1 - a_7 : các hằng số tùy thuộc cho mỗi loại nhiên liệu

2.5.3. Mô hình cháy

Để xác định đặc điểm cháy có thể chọn phương pháp giải phóng nhiệt, chu trình cháy lý thuyết hoặc chương trình do người dùng xây dựng. Tổng nhiệt lượng giải phóng trong quá trình đốt cháy được tính toán từ lượng nhiên liệu bị đốt cháy trong xi lanh và nhiệt trị thấp của nhiên liệu. Để xác định đặc tính giải phóng nhiệt theo góc trục khuỷu, AVL Boost đã đề xuất một số mô hình cháy có sẵn trong thư viện cho người dùng có thể lựa chọn.

a. Single vibe

Hàm vibe là một phương pháp rất tiện lợi để mô tả đặc điểm giải phóng nhiệt, nó được xác định bởi thời điểm bắt đầu và thời gian cháy, tham số hình dạng “m” và tham số “a”. Các giá trị này có thể được chỉ định là giá trị hằng số hoặc phụ thuộc vào tốc độ động cơ và tải động cơ. Với động cơ diesel đặc tính cháy phụ thuộc mạnh vào khả năng của hệ thống phun nhiên liệu, tỷ số nén và nhiệt độ không khí nạp. Thời điểm bắt đầu của quá trình đốt cháy phải được xác định dựa trên mức tiêu thụ nhiên liệu, giới hạn áp suất cực đại của xi lanh hoặc đặc tính gõ của động cơ. Hàm vibe dùng để ước tính các đặc tính giải phóng nhiệt của động cơ được mô tả như sau [93]:

$$\frac{dx}{d\alpha} = \frac{a}{\Delta\alpha_c} \cdot (m+1) \cdot y^m \cdot e^{-a \cdot y^{(m+1)}} \quad (2.7)$$

Trong đó:

$$dx = \frac{dQ}{Q} ; y = \frac{\alpha - \alpha_0}{\Delta\alpha_c}$$

Q: tổng nhiệt lượng nhiên liệu đầu vào

α : góc quay trục khuỷu

α_0 : thời điểm bắt đầu cháy

$\Delta\alpha_c$: thời gian cháy

a: thường được lấy bằng 6,9 là tham số mô hình

Phân số khối lượng nhiên liệu đã bị đốt cháy kể từ khi bắt đầu quá trình đốt cháy được xác định:

$$x = \int \frac{dx}{d\alpha} \cdot d\alpha = 1 - e^{-a \cdot y^{(m+1)}} \quad (2.8)$$

Mô hình vibe thường được tính tốc độ tỏa nhiệt khi cháy, không quan tâm ảnh hưởng thời điểm phun, lượng phun và cấu trúc tia phun, cũng như quy luật cung cấp nhiên liệu mà coi hỗn hợp cháy là đồng nhất. Vì vậy, mô hình cháy này không phù hợp với phạm vi nghiên cứu của đề án, mặt khác trong phần mềm AVL Boost khi lựa chọn mô hình vibe thì các tham số để xác định thành phần khí thải cũng không được hiệu chỉnh, kết quả mô phỏng cũng không cho ra các giá trị khí thải nên không phù hợp với hướng nghiên cứu.

b. Double vibe

Mô hình double vibe là sự kết hợp của hai hàm vibe để mô tả gần chính xác về đặc điểm giải phóng nhiệt đã xác định được của động cơ. Trong đó hàm vibe thứ nhất

mô tả quá trình cháy của hỗn hợp nhiên liệu của vùng đã chuẩn bị trước (cháy trộn trước), hàm vibe thứ hai mô tả quá trình cháy của hỗn hợp nhiên liệu mới (cháy khuếch tán), chúng được chồng lẫn lên nhau trong quá trình tính toán. Bên cạnh thời điểm bắt đầu quá trình đốt cháy, phải chỉ định phân bố nhiên liệu. Phân bố nhiên liệu được hiểu là phần nhiên liệu bị đốt cháy với các đặc điểm của hàm vibe. Đối với mỗi hàm vibe, thời gian đốt cháy và tham số hình dạng “m” cũng phải được xác định. Vì mô hình cháy này cũng không xét đến các hỗn hợp khí ở vùng chưa cháy, nên cũng không thể xác định được các thành phần khí thải nên cũng chưa phù hợp với đề án.

c. Single-zone HCCI

Mô hình HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) là một kiểu đốt cháy không cần đánh lửa, hỗn hợp nhiên liệu không khí được trộn đều, sau đó được nén đến một áp suất và nhiệt độ đủ cao dẫn đến tự cháy trong xi lanh. Single-zone HCCI là mô hình hóa buồng cháy như một vùng nhiệt động học duy nhất (áp suất, nhiệt độ, tốc độ phản ứng là giống nhau kể cả không chia thành nhiều vùng cháy khác nhau), mô hình này cũng áp dụng phương trình nhiệt động lực học thứ nhất để xây dựng [93]:

$$\frac{dQ_F}{d\alpha} = \sum_{i=1}^{nSpcGas} u_i \cdot MW_i \cdot \omega_i \quad (2.9)$$

Phân số khối lượng loài được tính toán:

$$\rho \frac{dw_i}{d\alpha} = MW_i \cdot \omega_i \quad (2.10)$$

Trong đó:

nSpcGas: Số lượng các loài trong pha khí

MW: khối lượng phân tử của loài (Kg/Kmol)

u: năng lượng bên trong của loài (J/KgK)

w: phân số khối lượng loài

ρ : mật độ hỗn hợp (Kg/m³)

ω : tốc độ phản ứng của loài (Kmol/m³s)

Tốc độ phản ứng của từng loại chất được tính toán dựa trên một tập hợp các phản ứng hóa học cụ thể mô tả quá trình tự bốc cháy. Vì mô hình này tính toán đơn giản cũng như xem áp suất, nhiệt độ, tốc độ phản ứng của hỗn hợp nhiên liệu là đồng

nhất nên mô hình khó có độ chính xác cao. Mặt khác, khi chọn mô hình này kết quả mô phỏng cũng không cho ra các giá trị thành phần khí thải nên tác giả cũng không lựa chọn để nghiên cứu.

d. Vibe two zone

Đối với mô hình cháy Vibe two zone tốc độ giải phóng nhiệt và phân khối lượng nhiên liệu bị đốt cháy được xác định bởi một hàm vibe. Tuy nhiên các giả định ở mô hình vibe gồm diện tích bị đốt cháy và chưa cháy có cùng nhiệt độ đã bị loại bỏ. Thay vào đó mô hình cháy Vibe two zone được sử dụng để định lượng tốc độ giải phóng nhiệt với mô hình này chia buồng đốt thành hai vùng: vùng cháy là nơi xảy ra quá trình cháy, vùng chưa cháy chứa nhiên liệu còn lại, khí sót và hỗn hợp không khí. Quá trình cháy được tính toán dựa trên cân bằng nhiệt được thể hiện qua hai phương trình [93]:

$$\frac{dm_{bu_b}}{d\alpha} = -p_c \frac{dV_b}{d\alpha} + \frac{dQ_F}{d\alpha} - \sum \frac{dQ_{wb}}{d\alpha} + h_u \frac{dm_b}{d\alpha} - h_{BB,b} \frac{dm_{BB,b}}{d\alpha} \quad (2.11)$$

$$\frac{dm_{uu_u}}{d\alpha} = -p_c \frac{dV_u}{d\alpha} - \sum \frac{dQ_{wu}}{d\alpha} - h_u \frac{dm_b}{d\alpha} - h_{BB,u} \frac{dm_{BB,u}}{d\alpha} \quad (2.12)$$

Trong đó:

b: là vùng cháy

u: là vùng chưa cháy

$h_u \frac{dm_b}{d\alpha}$: là dòng nhiệt từ vùng chưa cháy đến vùng cháy

Ngoài ra, tổng thể tích thay đổi phải bằng thể tích thay đổi của xi lanh và tổng thể tích của vùng phải bằng thể tích xi lanh nên:

$$\frac{dV_b}{d\alpha} + \frac{dV_u}{d\alpha} = \frac{dV}{d\alpha} \quad (2.13)$$

$$V_b + V_u = V \quad (2.14)$$

Đối với động cơ diesel thì mô hình này rất thích hợp để mô phỏng khi sử dụng hỗn hợp môi chất hình thành bên trong xi lanh, thể hiện tính chính xác, độ tin cậy cao. Mô hình này cũng dự đoán các đặc tính của động cơ cũng như phát thải động cơ với điều kiện tốc độ giải phóng nhiệt thực tế được mô tả đúng bởi hàm vibe. Với các đặc điểm trên, tác giả lựa chọn mô hình cháy Vibe two zone để tính toán mô phỏng cho mô hình động cơ diesel trên phần mềm AVL Boost.

Ngoài các mô hình tác giả đã trình bày, còn rất nhiều các mô hình cháy khác mà AVL Boost đề xuất người dùng có thể chọn, tùy thuộc vào mục đích sử dụng khác

nhau. Các mô hình được kể đến gồm: Fractal, HCCI 6 zone, Target Pressure Curve, Open Chamber Gas Engine, PCSI, Multiple vibe, MCC,...

2.5.4. Mô hình truyền nhiệt

Quá trình truyền nhiệt dự đoán sự truyền nhiệt của khí cháy trong buồng đốt sang thành xi lanh, ống lót, nắp máy,... ra bên ngoài, từ đó ảnh hưởng đến hiệu suất động cơ.

a. Truyền nhiệt trong buồng đốt

Sự truyền nhiệt đến thành buồng đốt tức là đầu xi lanh, piston, ống lót xi lanh được tính toán từ phương trình sau [93]:

$$Q_{wi} = A_i \cdot \alpha_w \cdot (T_c - T_{wi}) \quad (2.15)$$

Trong đó:

Q_{wi} : là nhiệt truyền cho thành

A_i : là diện tích bề mặt

α_w : là hệ số truyền nhiệt

T_c : là nhiệt độ khí trong xi lanh

T_{wi} : là nhiệt độ thành

Trong trường hợp có sự thay đổi nhiệt độ của ống lót theo trục giữa vị trí ĐCT và điểm chết dưới (ĐCD) của piston thì:

$$T_L = T_{L,ĐCT} \cdot \frac{1 - e^{-c \cdot x}}{x \cdot c} \quad (2.16)$$

Trong đó:

$$c = \ln \left(\frac{T_{L,ĐCT}}{T_{L,ĐCD}} \right)$$

T_L : nhiệt độ ống lót

$T_{L,ĐCT}$: nhiệt độ ống lót ở ĐCT

$T_{L,ĐCD}$: nhiệt độ ống lót ở ĐCD

x : hành trình piston dịch chuyển thực tế

Các mô hình truyền nhiệt được AVL Boost đề xuất trong thư viện gồm: Woschni 1978 và 1990, Hohenberg, Lorenz 1978 và 1990, AVL 2000, Bargende. Ngoài ra, người dùng có thể chọn “không”.

+ Mô hình Hohenberg

Trong mô hình truyền nhiệt hohenberg phương trình sau được sử dụng để tính toán hệ số truyền nhiệt [93]:

$$\alpha_w = 130 \cdot V^{-0,06} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,4} \cdot (c_m + 1,4)^{0,8} \quad (2.17)$$

Trong đó:

V: thể tích buồng cháy (m^3)

p_c : áp suất xi lanh (bar hoặc Pa)

T_c : nhiệt độ khí trong xi lanh (K)

c_m : hằng số hiệu chỉnh

Mô hình cháy này mô tả tốc độ đặc trưng cho chuyển động của hỗn hợp khí đốt bên trong động cơ, mô hình này phù hợp với những động cơ có vận tốc dòng chảy khí trong xi lanh rất cao và áp suất trung bình trong xi lanh lớn, nên chưa thích hợp với hướng nghiên cứu của đề án.

+ Mô hình Lorenz

Phương trình truyền nhiệt Lorenz có giá trị đối với xi lanh có buồng đốt kèm theo, là tốc độ đặc trưng trong xi lanh được mô tả:

$$w_C = C_1 \cdot c_m \quad (2.18)$$

Ngoài ra, phương trình này còn được biểu diễn chi tiết:

$$w_C = \frac{4 \cdot \frac{dV_{CP}}{dt}}{D \cdot \pi \cdot x} + C_1 C_m \quad (2.19)$$

Trong đó:

$\frac{dV_{CP}}{dt}$: lưu lượng thể tích từ ống nối đến xi lanh

x : khoảng hở giữa đầu xi lanh và piston

C_1 : hằng số hiệu chỉnh thực nghiệm

C_m : tốc độ hỗn hợp khí đặt trung (m/s)

D: đường kính xi lanh (m)

Mô hình cháy này thích hợp để mô tả quá trình truyền nhiệt dùng cho động cơ có buồng cháy ngăn cách. Do sự phức tạp của mô hình, nên chưa có nhiều nghiên cứu thực nghiệm để kiểm chứng mức độ chính xác trong điều kiện vận hành. Chính vì thế, tác giả không lựa chọn để thực hiện mô phỏng cho mô hình.

+ Mô hình AVL 2000

Sự truyền nhiệt trong quá trình trao đổi khí ảnh hưởng mạnh đến hiệu suất thể tích của động cơ, đặc biệt là đối với tốc độ động cơ thấp. Mô hình này là một mô hình thực nghiệm cải tiến do AVL phát triển, kế thừa từ mô hình Woschni nhưng đã được tối ưu hóa riêng cho động cơ trong môi trường mô phỏng **AVL Boost**. Trong quá trình trao đổi khí, hệ số truyền nhiệt được tính theo phương trình sau:

$$\alpha = \text{Max} \left[\alpha_{\text{Woschni}}, 0,013 d^{-0,2} p^{0,8} T^{-0,53} \left(c_4 \left(\frac{d_{in}}{d} \right)^2 |v_{in}| \right)^{0,8} \right] \quad (2.20)$$

Trong đó:

$$C_4 = 14$$

d: đường kính xi lanh (m)

p: áp suất (Pa)

T: nhiệt độ (K)

d_{in} : đường kính ống kết nối với cổng nạp (m)

v_{in} : Tốc độ tại cổng nạp (m/s)

Đường kính cổng nạp trực tiếp có ý nghĩa đặc biệt đối với mô hình này, do đó đường kính của cổng nạp này phải được chỉ định chính xác trên toàn bộ chiều dài ống. Vì thế, cần phải có thông số đường kính cổng nạp chính xác từ động cơ thực tế để mô hình tính toán chính xác nhất, lẽ đó tác giả đã không áp dụng mô hình này.

+ Mô hình Woschni

Hệ số truyền nhiệt (α_w) thường được tính bằng mô hình Woschni, mô hình Woschni được công bố năm 1978 cho chu trình áp suất cao được tóm tắt như sau:

$$\alpha_w = 130 \cdot D^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,53} \cdot \left[C_1 \cdot c_m + C_2 \cdot \frac{V_D \cdot T_{c,1}}{p_{c,1} \cdot V_{c,1}} \cdot (p_c - p_{c,o}) \right]^{0,8} \quad (2.21)$$

Trong đó:

$$C_1 = 2,28 + 0,308 \cdot c_u / c_m$$

$$C_2 = 0,00324 \text{ cho động cơ DI}$$

$$C_2 = 0,00622 \text{ cho động cơ IDI}$$

$$c_u = (3,14 \cdot D \cdot n_d) / 60 : \text{là tốc độ quay tròn}$$

D: là lỗ xi lanh

c_m : là tốc độ trung bình của piston

V_D : là chuyển vị trên mỗi xi lanh

$p_{c,o}$: là áp suất xi lanh

$T_{c,1}$: là nhiệt độ trong xi lanh khi đóng van nạp

$p_{c,1}$: là áp suất trong xi lanh tại thời điểm đóng van nạp

Mô hình truyền nhiệt Woschni đã sửa đổi công bố năm 1990 nhằm mục đích dự đoán chính xác hơn về quá trình truyền nhiệt ở chế độ tải một phần:

$$\alpha_w = 130 \cdot D^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,53} \cdot \left\{ c_1 \cdot c_m \cdot \left[1 + 2 \left(\frac{V_{DCT}}{V} \right)^2 \cdot IMEP^{-0,2} \right] \right\}^{0,8} \quad (2.22)$$

Trong đó:

V_{DCT} : thể tích ĐCT trong xi lanh

V : thể tích xi lanh thực tế

IMEP: áp suất hiệu quả trung bình có ích

Trong trường hợp đó:

$$C_2 \cdot \frac{V_{D,T_{c,1}}}{p_{c,1} \cdot V} \cdot (p_c - p_{c,o}) \geq 2 \cdot C_1 \cdot c_m \cdot \left(\frac{V_{DCT}}{V} \right)^2 \cdot IMEP^{-0,2} \quad (2.23)$$

Phương trình tính toán hệ số truyền nhiệt của mô hình Woschni với quá trình trao đổi khí được thể hiện:

$$\alpha_w = 130 \cdot D^{-0,2} \cdot p_c^{0,8} \cdot T_c^{-0,53} \cdot (C_3 \cdot c_m)^{0,8} \quad (2.24)$$

Trong đó:

$$C_3 = 6,18 + 0,417 \cdot c_u / c_m$$

D : là lỗ xi lanh

c_m : tốc độ trung bình piston

c_u : vận tốc ngoài biên

Mô hình truyền nhiệt Woschni 1978 rất phù hợp để tính toán quá trình truyền nhiệt cho động cơ diesel, bởi vì mô hình này chỉ xem xét tới các chỉ tiêu rất cơ bản của động cơ như diện tích ống lót xi lanh, diện tích bề mặt đỉnh piston,... Vì vậy, trong phạm vi của đề án nghiên cứu tác giả đã lựa chọn mô hình này để tính toán trong quá trình mô phỏng trên phần mềm AVL Boost, nhờ sự đơn giản, hiệu quả, mang lại độ tin cậy cao trong nhiều trường hợp thực tế.

b. Truyền nhiệt ở cổng nạp và cổng thải

Cũng giống như truyền nhiệt trong buồng đốt, truyền nhiệt ở cổng nạp và cổng thải sử dụng mô hình Woschni 1978 để mô tả thể hiện qua phương trình [93]:

$$T_d = (T_u - T_w) \cdot e^{\left(-A_w \frac{\alpha_p}{\dot{m} \cdot c_p}\right)} + T_w \quad (2.25)$$

Trường hợp với lưu lượng khí vào buồng đốt:

$$\alpha_p = [C_7 + C_8 \cdot T_u - C_9 \cdot T_u^2] \cdot T_u^{0,33} \cdot \dot{m}^{0,68} \cdot d_{vi}^{-1,68} \cdot \left[1 - 0,765 \cdot \frac{h_v}{d_{vi}}\right] \quad (2.26)$$

Trường hợp với lưu lượng khí ra buồng đốt:

$$\alpha_p = [C_4 + C_5 \cdot T_u - C_6 \cdot T_u^2] \cdot T_u^{0,44} \cdot \dot{m}^{0,5} \cdot d_{vi}^{-1,5} \cdot \left[1 - 0,797 \cdot \frac{h_v}{d_{vi}}\right] \quad (2.27)$$

Trong đó:

α_p : hệ số trao đổi nhiệt tại cửa

T_d : nhiệt độ sau cửa

T_u : nhiệt độ trước cửa

T_w : nhiệt độ thành cửa

A_w : diện tích tiết diện lưu thông

$\dot{m}$: lưu lượng khối lượng

c_p : nhiệt dung riêng đẳng áp

h_v : độ nâng **xu páp**

d_{vi} : đường kính trong năm **xu páp**

2.5.5. Tính toán lưu lượng dòng khí nạp-thải

Hỗn hợp nhiên liệu được nạp vào bên trong xi lanh thông qua van nạp, sau quá trình đốt cháy nhiên liệu khí thải được xả ra ngoài qua van xả, vì vậy sự tính toán lưu lượng dòng khí nạp-thải bị ảnh hưởng lớn bởi kích thước của van nạp-xả, giả thuyết rằng dòng khí nạp-thải ổn định và liên tục ta có phương trình sau [93]:

$$\frac{dm}{dt} = A_{eff} \cdot p_{o1} \cdot \sqrt{\frac{2}{R_o \cdot T_{o1}}} \cdot \psi \quad (2.28)$$

Trong đó:

$\frac{dm}{dt}$: Lưu lượng dòng khí

A_{eff} : Tiết diện lưu thông

p_{o1} : Áp suất miệng hút

T_{o1} : Nhiệt độ miệng hút

R_o : Hằng số chất khí

ψ : Hệ số lưu lượng

Đối với dòng có vận tốc dưới vận tốc âm thanh:

$$\psi = \sqrt{\frac{k}{k-1} \cdot \left[\left(\frac{p_2}{p_{01}} \right)^{\frac{2}{k}} - \left(\frac{p_2}{p_{01}} \right)^{\frac{k+1}{k}} \right]} \quad (2.29)$$

Trong đó:

p_2 : áp suất ra

k : chỉ số đoạn nhiệt, dòng lưu động dưới giới hạn.

Đối với dòng có vận tốc ngang vận tốc âm thanh:

$$\psi = \psi_{\max} = \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{1}{k-1}} \cdot \sqrt{\frac{k}{k+1}} \quad (2.30)$$

Diện tích lưu thông có thể xác định thông qua hệ số dòng chảy $\mu\sigma$ (đo được):

$$A_{\text{eff}} = \mu\sigma \cdot \frac{d_{vi}^2}{4} \cdot \pi \quad (2.31)$$

Trong đó:

$\mu\sigma$: hệ số dòng chảy tại cửa lưu thông

d_{vi} : đường kính trong năm **xu páp**

2.5.6. Mô hình phát thải

a. Mô hình hình thành NO_x

NO_x được hình thành và sinh ra từ phản ứng ôxy hóa nitơ trong điều kiện hỗn hợp nhiên liệu/không khí quá nghèo, nhiệt độ khí nạp và quá trình cháy cao, sáu phản ứng tạo ra khí thải NO_x được giới thiệu trong Bảng 2.3, dựa trên cơ chế Zeldovich nổi tiếng.

Bảng 2.3 Phản ứng hình thành NO_x [93]

Tỷ lệ	Phản ứng	Tốc độ $k_i = k_{0,i} \cdot T^a \cdot e^{\left(\frac{-T_{A_i}}{T}\right)}$
r_1	$\text{N}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{N}$	$r_1 = k_1 \cdot c_{\text{N}_2} \cdot c_{\text{O}}$
r_2	$\text{O}_2 + \text{N} = \text{NO} + \text{O}$	$r_2 = k_2 \cdot c_{\text{O}_2} \cdot c_{\text{N}}$
r_3	$\text{N} + \text{OH} = \text{NO} + \text{H}$	$r_3 = k_3 \cdot c_{\text{N}} \cdot c_{\text{OH}}$
r_4	$\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{NO} + \text{NO}$	$r_4 = k_4 \cdot c_{\text{N}_2\text{O}} \cdot c_{\text{O}}$
r_5	$\text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{N}_2\text{O} + \text{O}$	$r_5 = k_5 \cdot c_{\text{O}_2} \cdot c_{\text{N}_2}$
r_6	$\text{OH} + \text{N}_2 = \text{N}_2\text{O} + \text{H}$	$r_6 = k_6 \cdot c_{\text{OH}} \cdot c_{\text{N}_2}$

Trong đó:

r_i : tốc độ phản ứng ($\text{mole}/\text{cm}^3\text{s}$)

C_i : nồng độ mol trong điều kiện cân bằng (mole/cm^3)

k_i : hằng số phản ứng

T : nhiệt độ phản ứng

Nồng độ N_2O được tính theo:

$$c_{N_2O} = 1,1802 \cdot 10^{-6} \cdot T^{0,6125} \cdot e^{\left(\frac{9471,6}{T}\right)} \cdot c_{N_2} \cdot \sqrt{p_{O_2}} \quad (2.32)$$

Trong đó T_1 : nhiệt độ tại thời điểm bắt đầu quá trình nén (K).

Tốc độ cuối cùng của quá trình sản xuất/phá hủy NO [mole/cm³s] được tính như sau:

$$r_{NO} = C_{PostProcMult} \cdot C_{KneticMult} \cdot 2 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \frac{r_1}{1 + \alpha \cdot A \cdot K_2} \cdot \frac{r_4}{1 + A K_4} \quad (2.33)$$

$$\text{Với: } \alpha = \frac{C_{NO,act}}{C_{NO,eq}} \cdot \frac{1}{C_{PostProcMult}}; \quad A K_2 = \frac{r_1}{r_2 + r_3}; \quad A K_4 = \frac{r_4}{r_5 + r_6}$$

b. Mô hình hình thành CO

Sự hình thành CO sau hai phản ứng được đưa ra trong Bảng 2.4:

Bảng 2.4 Phản ứng tạo thành CO [93]

Tỷ lệ	Phản ứng	Tốc độ
r_1	$CO + OH = CO_2 + H$	$r_1 = 6,76 \cdot 10^{10} \cdot e^{\frac{T}{1102}} \cdot c_{CO} \cdot c_{OH}$
r_2	$CO + O_2 = CO_2 + O$	$r_2 = 2,51 \cdot 10^{12} \cdot e^{\frac{-24055}{T}} \cdot c_{CO} \cdot c_{O_2}$

Tốc độ cuối cùng của quá trình sản xuất/phá hủy CO [mole/cm³s] được tính như sau:

$$r_{CO} = C_{const} \cdot (r_1 + r_2) \cdot (1 - \alpha) \quad (2.34)$$

$$\text{Với: } \alpha = \frac{C_{CO,act}}{C_{CO,eq}}$$

c. Mô hình hình thành bồ hóng

Sự hình thành bồ hóng được mô tả bằng hai bước bao gồm sự hình thành và quá trình ôxy hóa. Tốc độ thay đổi thực của khối lượng bồ hóng (m) là sự chênh lệch giữa tốc độ bồ hóng được hình thành ($m_{s,f}$) và tốc độ bị ôxy hóa ($m_{s,ox}$).

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{s,f}}{dt} - \frac{dm_{s,ox}}{dt} \quad (2.35)$$

Trong đó:

$$\frac{dm_{s,f}}{dt} = A_f \cdot m_{f,v} \cdot p^{0,5} \cdot e^{\left[\frac{-E_{s,f}}{RT}\right]} - \text{tốc độ hình thành bồ hóng.} \quad (2.36)$$

$$\frac{dm_{s,ox}}{dt} = A_{ox} \cdot m_s \cdot \frac{p_{O_2}}{p} \cdot p^{1,8} \cdot e^{\left[\frac{-E_{s,ox}}{RT}\right]} - \text{tốc độ ôxy hóa.} \quad (2.37)$$

Trong đó:

m_s : khối lượng bồ hóng

$m_{f,v}$: lượng bay hơi của nhiên liệu

P_{O_2} : áp suất của các phân tử O_2

$E_{s,f}$: năng lượng kích hoạt (52,335 kJ/kmol)

$E_{s,ox}$: năng lượng ôxy hóa (58,615 kJ/kmol)

A_f, A_{ox} : hằng số chọn theo kiểu động cơ và kinh nghiệm

2.6. Kết luận chương 2

Trong nội dung chương này đã trình bày cơ sở lý thuyết về tính chất lý hóa và thành phần hóa học của nhiên liệu DMF cũng như các con đường khác nhau để điều chế ra DMF từ các nguyên liệu sinh khối.

Nghiên cứu cơ sở lý thuyết về quá trình cháy, quá trình ôxy hóa, nhiệt phân, phân hủy của DMF và sự hình thành các sản phẩm sau quá trình phản ứng, các đặc điểm khác về tính chất cháy của DMF như tốc độ lan truyền ngọn lửa, vận tốc cháy tầng, quá trình tự bốc cháy cũng đã được trình bày.

Đề án đã lựa chọn mô hình cháy Vibe two zone, mô hình truyền nhiệt Woschni 1978, mô hình cung cấp hỗn hợp môi chất rất phù hợp cho động cơ diesel, ngoài ra mô hình hình thành khí thải NO_x theo cơ chế Zeldovich, các phản ứng hình thành CO, HC, bồ hóng cũng đã được tính toán kỹ lưỡng. Qua đó cho thấy nhiên liệu DMF rất thích hợp để dùng làm chất phụ gia cho nhiên liệu khác hay được sử dụng hoàn toàn như nhiên liệu thay thế trong động cơ diesel.

CHƯƠNG 3. MÔ PHỎNG ĐỘNG CƠ DIESEL SỬ DỤNG HỖN HỢP NHIÊN LIỆU DMF-DIESEL BẰNG PHẦN MỀM AVL BOOST

3.1. Giới thiệu phần mềm AVL Boost

3.1.1. Tổng quan

AVL Boost là một phần mềm máy tính mô phỏng động cơ đốt trong nổi tiếng do công ty AVL nước Áo phát triển. Phần mềm này được sử dụng rộng rãi trong ngành công nghiệp ô tô và các lĩnh vực liên quan đến thiết kế, tối ưu hóa động cơ đốt trong. Nhờ vào khả năng mô phỏng chi tiết và chính xác, AVL Boost giúp người dùng rút ngắn thời gian thử nghiệm thực tế, đồng thời tăng hiệu quả thiết kế và phát triển động cơ.

Các tính năng chính của AVL Boost gồm:

- Mô phỏng động cơ: AVL Boost cho phép người dùng mô phỏng quá trình cháy trong động cơ giúp phân tích và tối ưu hóa hiệu suất động cơ dựa trên nhiều yếu tố khác nhau, cung cấp các mô hình mô phỏng chính xác.
- Tối ưu hóa hiệu suất: phần mềm hỗ trợ người dùng trong việc tối ưu hóa cấu hình động cơ nhằm đạt được hiệu suất cao nhất, giảm tiêu thụ nhiên liệu và khí thải.
- Phân tích chi tiết: AVL Boost cung cấp các công cụ phân tích và báo cáo chi tiết giúp người dùng hiểu rõ hơn về các yếu tố ảnh hưởng đến hiệu suất động cơ.
- Tính năng mở rộng: phần mềm có khả năng tích hợp các công cụ và phần mềm khác của AVL cho phép người dùng thực hiện các nghiên cứu chi tiết và toàn diện hơn, như AVL FIRE để mô phỏng dòng khí và cháy trong động cơ.
- Giao diện thân thiện: giao diện người dùng của AVL Boost được thiết kế trực quan dễ sử dụng giúp các kỹ sư và nhà phát triển có thể nhanh chóng làm quen và khai thác hiệu quả.

3.1.2. Các phần tử chính của phần mềm AVL Boost

Phần mềm AVL Boost bao gồm nhiều phần tử, mô-đun khác nhau cho phép người dùng mô phỏng chi tiết các hệ thống và thành phần động cơ đốt trong. Các phần tử chính có thể được chia thành các thành phần chức năng phục vụ mục đích mô phỏng và phân tích, dưới đây là các phần tử chính của mô hình được lựa chọn phù hợp với mô hình thực tế trình bày trong Bảng 3.1.

Bảng 3.1 Các phần tử chính của chương trình

Phần tử	Ký hiệu	Tính năng
Động cơ		Thiết lập công suất, tốc độ vòng quay, kiểu động cơ.
Điều kiện biên hệ thống		Cung cấp kết nối giữa mô hình tính toán với môi trường xung quanh do người dùng xác định.
Turbo tăng áp		Bộ phận tăng áp, có mẫu đơn giản và mẫu đầy đủ.
Máy làm mát		Phần tử làm mát khí, tương tự như bộ lọc khí, tổn thất áp suất, hiệu suất làm mát, ổn định lưu lượng cần được xác định.
Bình ổn áp		Áp suất và nhiệt độ duy trì ổn định trong không gian.
Xi lanh		Mô phỏng hoạt động cháy nổ và quá trình làm việc của piston.
Điểm đo		Truy cập dữ liệu lưu lượng và điều kiện khí qua góc trục khuỷu tại một vị trí nhất định trong đường ống.

3.1.3. Các lệnh của *phần mềm AVL Boost*

Các phần tử chính được lựa chọn cho mô hình cần có các lệnh để kết nối với nhau, phần tử đường ống hoặc dây nối sẽ kết nối tạo thành một mô hình hoàn chỉnh.

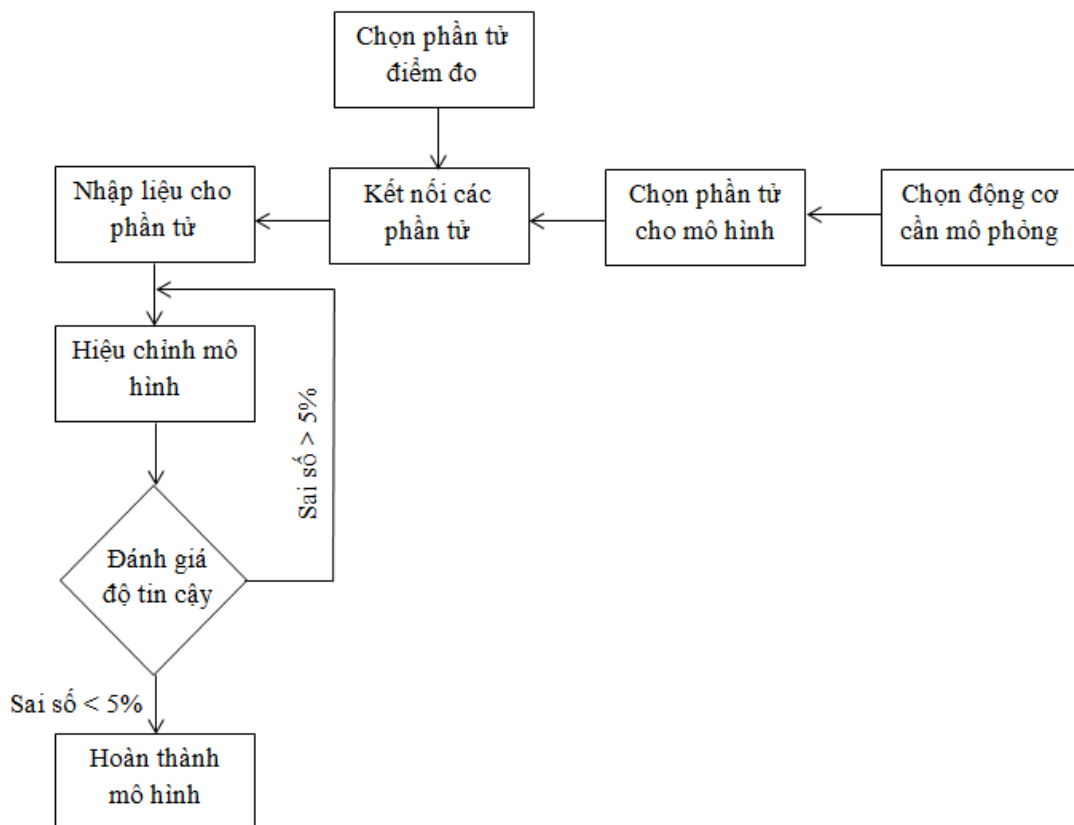
Bảng 3.2 Các lệnh cơ bản trong chương trình

Ký hiệu	Tính năng
	Được sử dụng để kết nối đường ống giữa hai phần tử với nhau.
	Đảo ngược hướng dòng chảy của đường ống đã chọn.
	Thay đổi các phụ kiện của một đường ống hoặc dây đã chọn.
	Nhập tham số cho mô hình.
	Thiết lập tham số chuỗi mô hình.
	Chạy mô hình.
	Tóm tắt mô hình hoàn tất.
	Xem kết quả mô hình hoàn tất.

3.1.4. Các bước xây dựng mô hình

Mô hình mô phỏng động cơ trong AVL **Boost** được xây dựng dựa trên động cơ thực tế, đưa các số liệu thực từ tài liệu kỹ thuật động cơ vào xây dựng mô hình mô phỏng, Hình 3.1 diễn tả chi tiết các bước thực hiện xây dựng mô hình mô phỏng:

- Bước 1: Lựa chọn động cơ thực tế cần mô phỏng, xác định đặc tính và các thông số kỹ thuật của động cơ để lấy số liệu xây dựng mô hình.
- Bước 2: Trong cửa sổ phần mềm, lựa chọn phần tử theo động cơ thực tế để xây dựng mô hình, cần xác định đầy đủ các phần tử trong phần mềm để có được kết quả mô phỏng đúng nhất với động cơ thực tế.
- Bước 3: Sử dụng đường ống để kết nối các phần tử lại với nhau, lưu ý cần nối đúng theo chiều mũi tên đã được đánh dấu sẵn, ở bước này xây dựng các phần tử điểm đo để xác định nhiệt độ, áp suất, lưu lượng,...
- Bước 4: Nhập liệu các thông số đầu vào cho mô hình đầy đủ và chính xác, giảm thiểu tối đa sự sai số so với thực tế.
- Bước 5: Hiệu chỉnh mô hình mô phỏng để đạt được độ chính xác cao nhất.
- Bước 6: Chạy và xuất kết quả.



Hình 3.1 Sơ đồ các bước xây dựng mô hình mô phỏng trong AVL **Boost**

3.2. Xây dựng mô hình mô phỏng động cơ diesel D6AC

3.2.1. Thông số kỹ thuật của động cơ diesel D6AC

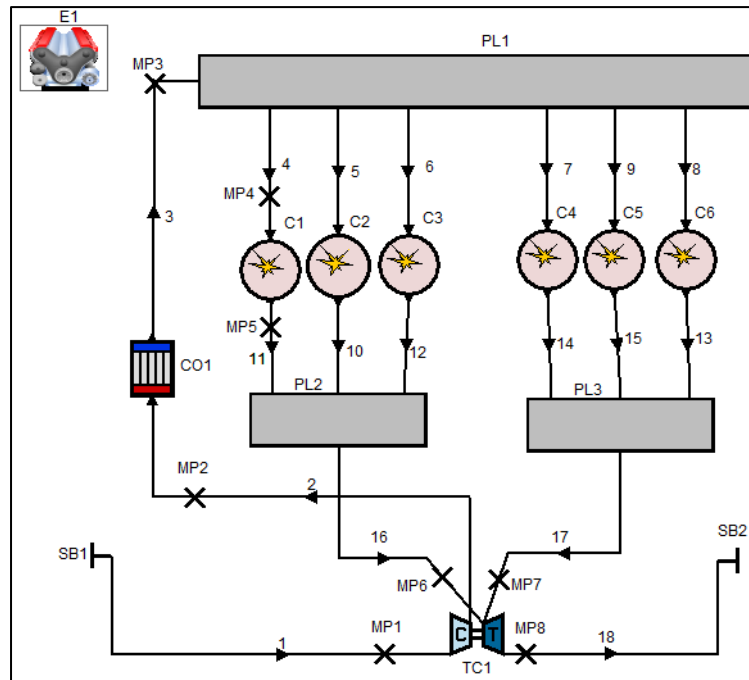
Động cơ D6AC được thiết kế cho các dòng xe hạng nặng và xe đầu kéo để kéo theo rơ móc hoặc sơ mi rơ móc chở hàng hóa của hãng Hyundai, cung cấp nhiều mẫu xe hạng nặng với động cơ mạnh mẽ, bền bỉ và tiết kiệm nhiên liệu. Động cơ D6AC là động cơ diesel tăng áp, được bố trí 6 xi lanh thẳng hàng được lắp đặt rộng rãi trên các dòng xe như: xe đầu kéo HD 700, xe ben HD 270, xe tải hạng nặng HD 260, có công suất trung bình từ 148-340 mã lực, các thông số động cơ được tham khảo từ tài liệu kỹ thuật của hãng được trình bày trong bảng 3.3 [94].

Bảng 3.3 Thông số động cơ D6AC

STT	Thông số	Ký hiệu	Giá trị	Đơn vị
1	Số xi lanh	i	6	-
2	Dung tích xi lanh	V	11.149	cc
3	Đường kính xi lanh	D	130	mm
4	Hành trình piston	S	140	mm
5	Chiều dài thanh truyền	L	220	mm
6	Tỷ số nén	ε	16,5 : 1	-
7	Kiểu làm mát	-	Bằng nước	-
8	Kiểu cháy	-	DI	-
9	Thứ tự nổ	-	1 – 5 – 3 – 6 – 2 – 4	-
10	Công suất định mức ở 2200 vòng/phút	N_e	250	kW
11	Mô men xoắn cực đại ở 1400 vòng/phút	M_e	1374,4	N.m
12	Đường kính xu páp nạp	D_n	41	mm
13	Đường kính xu páp xả	D_x	39	mm
14	Góc phun sớm	φ_s	12^0	-
15	Đường kính thân xu páp nạp	D_{tn}	11,5	mm
16	Đường kính thân xu páp xả	D_{tx}	11,5	mm
17	Thời điểm xu páp nạp mở	φ_1	310^0	-
18	Thời điểm xu páp xả mở	φ_2	82^0	-

3.2.2. Mô hình mô phỏng động cơ diesel với AVL Boost

Dựa trên các thông số kỹ thuật của động cơ xác định ở Bảng 3.3 được tham khảo từ tập tài liệu kỹ thuật thực tế của hãng Hyundai và chọn lựa các phần tử trong phần mềm mô phỏng ta có thể xây dựng được mô hình mô phỏng động cơ D6AC như Hình 3.2.



Hình 3.2 Mô hình mô phỏng động cơ D6AC trong AVL Boost

Các phần tử và số lượng tạo thành mô hình hoàn chỉnh được trình bày trong Bảng 3.4 dưới đây:

Bảng 3.4 Các phần tử sử dụng trong mô hình

STT	Tên gọi phần tử	Ký hiệu	Số lượng
1	Động cơ (Engine)	E	1
2	Điều kiện biên hệ thống (System Boundary)	SB	2
3	Turbo tăng áp (Turbocharger)	TC	1
4	Máy làm mát (Cooler)	CO	1
5	Bình ổn áp (Plenum)	PL	3
6	Xi lanh (Cylinder)	C	6
7	Điểm đo (Measuring Point)	MP	8
8	Đường ống (Connection)	-	18

3.2.3. Cài đặt thông số dữ liệu đầu vào cho mô hình

a. Xây dựng hỗn hợp nhiên liệu

Trong mô hình mô phỏng, nhiên liệu được dùng để chạy gồm diesel và hỗn hợp DMF-diesel, vì vậy cần tiến hành xây dựng các giá trị của hỗn hợp nhiên liệu theo tỷ

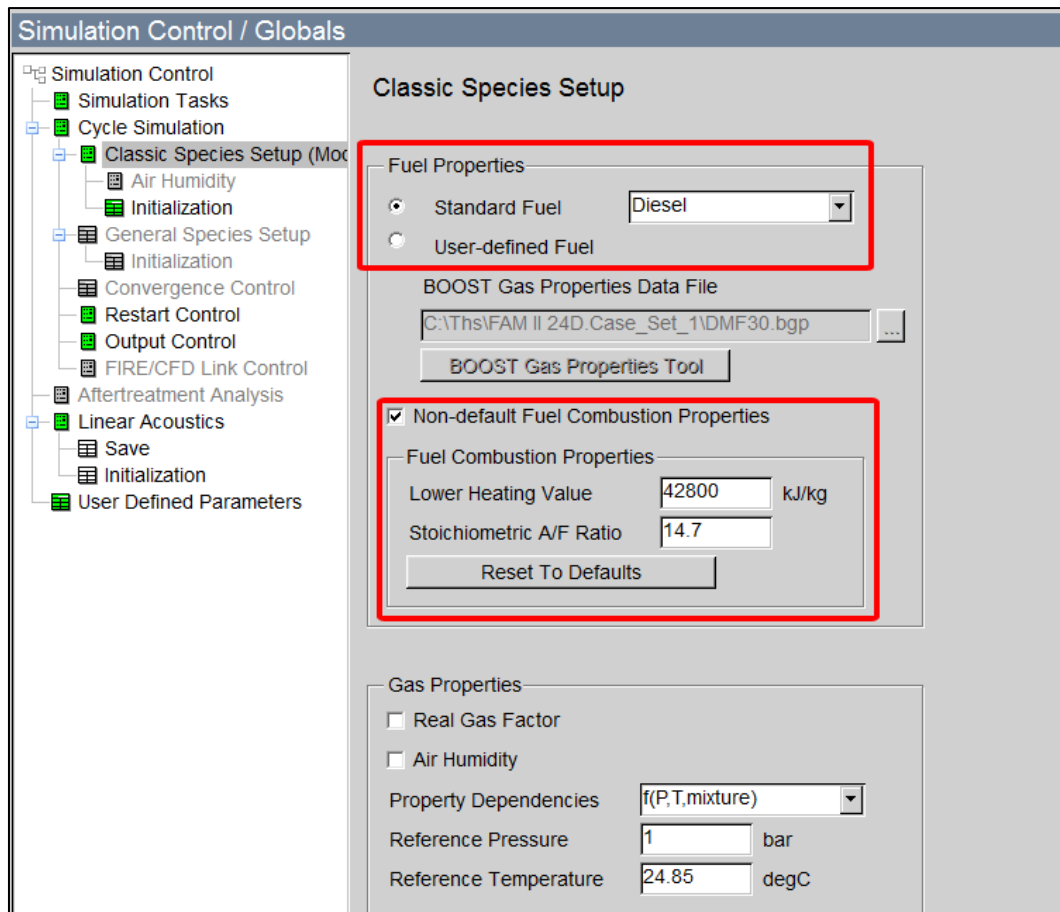
lệ tương ứng 10%, 20%, 30% DMF. Cung cấp hỗn hợp nhiên liệu sao cho động cơ vẫn giữ nguyên về công suất cũng như mô men xoắn khi sử dụng nhiên liệu diesel nguyên chất.

$$\text{Tỷ lệ DMF thay thế} = \frac{\text{Lượng diesel thay thế}}{\text{Tổng diesel ban đầu}}$$

Khi thay đổi lượng hỗn hợp nhiên liệu thì nhiệt trị thấp và A/F của nhiên liệu cũng sẽ thay đổi theo, cho nên nhiệt trị thấp và A/F của từng hỗn hợp nhiên liệu được xác định theo công thức:

$$\left(\frac{A}{F}\right)_{\text{diesel}} \cdot \text{Tỷ lệ \% diesel trong nhiên liệu} + \left(\frac{A}{F}\right)_{\text{DMF}} \cdot \text{Tỷ lệ \% DMF trong nhiên liệu}$$

$$(\text{Nhiệt trị thấp})_{\text{diesel}} \cdot \text{Tỷ lệ \% diesel trong nhiên liệu} + (\text{Nhiệt trị thấp})_{\text{DMF}} \cdot \text{Tỷ lệ \% DMF trong nhiên liệu}$$



Hình 3.3 Nhiên liệu dùng mô phỏng

Giá trị nhiệt trị thấp và A/F của nhiên liệu diesel và DMF được trình bày trong Bảng 2.2, sau khi tính toán ta xây dựng được các giá trị phù hợp được thể hiện như trong Bảng 3.5.

Bảng 3.5 Tỷ lệ nhiệt trị thấp và A/F của hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel

Nhiên liệu	Tỷ lệ hòa trộn	Nhiệt trị thấp (kJ/kg)	A/F
Diesel	0% DMF-100% diesel	42.800	14,7
DMF10	10% DMF-90% diesel	41.890	14,309
DMF20	20% DMF-80% diesel	40.980	13,918
DMF30	30% DMF-70% diesel	40.070	13,527

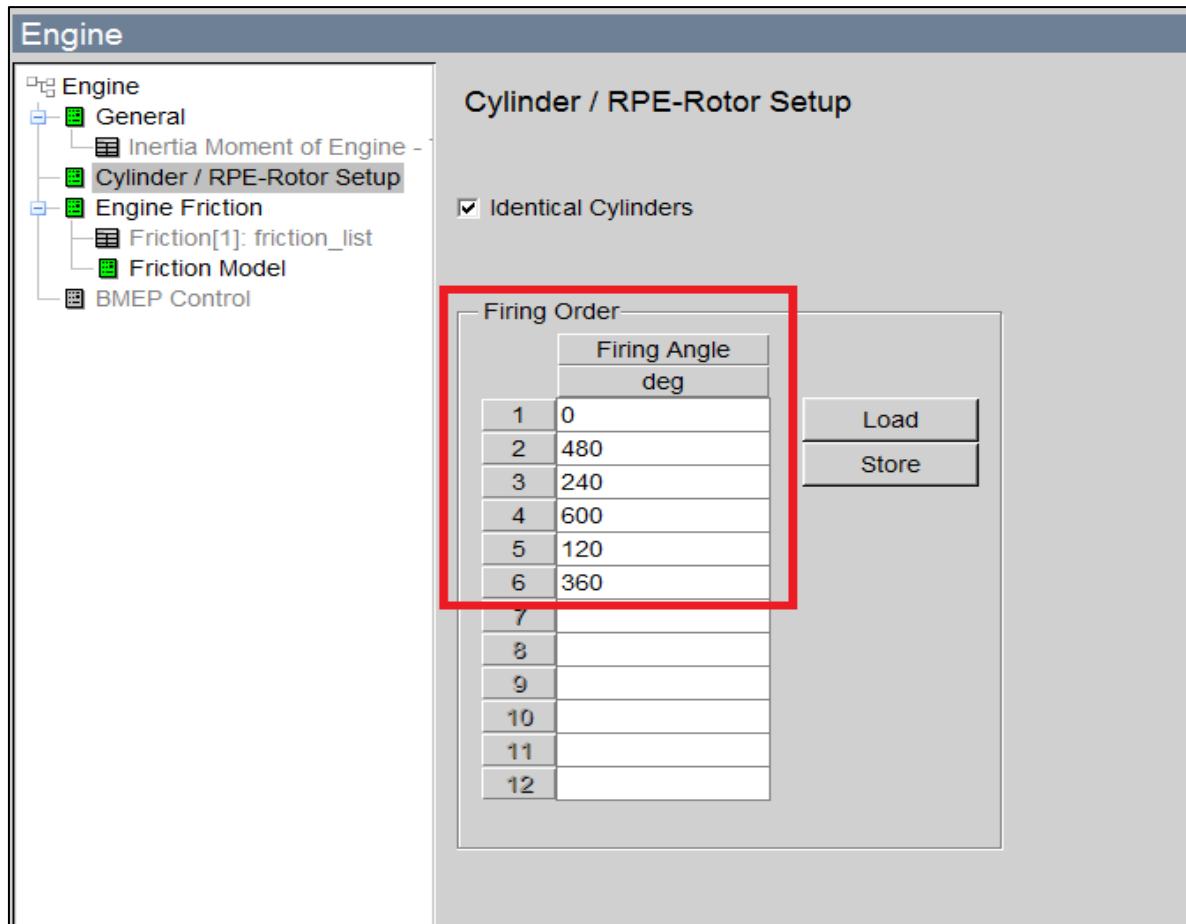
Để thiết lập hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel theo tỷ lệ DMF được hòa trộn vào diesel tương ứng 10%, 20%, 30% cần thực hiện các bước sau: trên giao diện thanh công cụ chọn “Simulation”, chọn “Control”, tại mục “Cycle Simulation” chọn “Classic Species Setup”, chọn “User-defined Fuel”, chọn “Boost Gas Properties Tool” sẽ xuất hiện hộp thoại sau: Tiếp tục nhấn vào “Fuel Component”, tại mục “Kind of fraction ratio” chọn “Liquid Volume fraction based” để tạo hỗn hợp nhiên liệu. Trong mục “Fuel label” chọn nhiên liệu cần hòa trộn là diesel và DMF, trong mục “Fraction Ratio” nhập % của mỗi loại nhiên liệu cần hòa trộn, trong mục “Liquid Density (Kg/m³)” nhập giá trị mật độ chất lỏng của diesel và DMF được tham khảo trong Bảng 2.2. Sau khi thiết lập hỗn hợp nhiên liệu, sẽ có từng file nhiên liệu. Tiếp tục trở lại mục “Simulation Control” để chọn file nhiên liệu vừa tạo.

b. Thiết lập bộ làm mát

Bộ làm mát được chọn để làm mát nhiệt độ của dòng khí nạp vào bên trong buồng đốt, với các thông số của bộ làm mát như tổng thể tích bộ làm mát không khí là 10L, chiều dài lõi làm mát 600mm, nhiệt độ nước làm mát 298K, nhiệt độ đầu ra là 340K. Các giá trị này được lựa chọn sao cho mô hình đạt được nhiệt độ và áp suất như mong muốn để đạt được kết quả chính xác nhất.

c. Thiết lập phần tử động cơ

Trong phần này ta tiến hành nhập tốc độ làm việc của động cơ từ 1000 đến 2200 vòng/phút với bước phân chia tốc độ động cơ là 200 vòng/phút, số kỳ là 4, thứ tự làm việc của piston là 1-5-3-6-2-4 với sáu xi lanh được chọn giống nhau và bố trí thẳng hàng.



Hình 3.4 Thứ tự làm việc của xi lanh

d. Thiết lập phần tử xi lanh

Nhập các giá trị từ thông số kỹ thuật thực tế của hãng cung cấp, ta có:

- + Đường kính xi lanh: 130 mm.
- + Hành trình piston: 140 mm.
- + Tỷ số **nén**: 16,5.
- + Chiều dài thanh truyền: 220 mm.
- + Độ lệch chốt piston: 0 mm.
- + Áp suất cạc te: 1 bar.
- + Khe hở giữa xéc măng và thành piston: 0 mm.

Thông số vật lý của kim phun diesel:

- + **Số lỗ phun: 6.**
- + **Đường kính lỗ: 0,5 mm.**
- + **Hệ số lưu lượng: 1.**
- + **Áp suất phun: 260 bar.**

Cylinder = Identical Cylinders =

General

Author: LU HUE PHUOC
 Comment: LUAN VAN THS
 Result Name:
 Date: 23. Feb 2025

Bore: 130 mm
 Stroke: 140 mm
 Compression Ratio: 16.5 [-]
 Con-Rod Length: 220 mm
 Piston Pin Offset: 0 mm
 Effective Blow By Gap: 0 mm
 Mean Crankcase Press.: 1 bar

☐ User Defined Piston Motion
☐ Chamber Attachment
 Scavenge Model: Perfect Mixing

Hình 3.5 Thiết lập thông số kỹ thuật xi lanh

Tác giả lựa chọn mô hình cháy Vibe 2 vùng cho cả hai trường hợp là diesel và hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel, mô hình này áp dụng cho cả hai vùng hỗn hợp cháy và vùng hỗn hợp chưa cháy, hỗn hợp cháy được hình thành bên trong buồng đốt động cơ. Mô hình truyền nhiệt Woschni 1978 với kiểu hệ thống đốt cháy phun trực tiếp (DI) và hệ số dòng chảy xoáy lốc ngang được chọn là 1,9.

e. Thiết lập phần tử bình ổn áp

Phần tử bình ổn áp trong mô hình AVL Boost là một thành phần thể tích trung gian có chức năng làm ổn định áp suất dòng khí nạp và thải giữa các đường ống trong mô hình. PL1 được đặt ngay phía sau phần tử máy làm mát là bình ổn áp chính đầu vào có dung tích 6 L, áp suất khí quyển 100.000 Pa và nhiệt độ môi trường 298 K. PL2 và PL3 là bình ổn áp khí thải được bố trí phía sau các phần tử xi lanh, chia ra làm hai nhánh chính có thể tích tương ứng là 0,3 L, áp suất khí quyển 100.000 Pa và nhiệt độ khí thải 780 K.

f. Thiết lập điều kiện biên hệ thống

Phần tử điều kiện biên của hệ thống thể hiện liên kết giữa môi trường làm việc bên ngoài và mô hình, trong mô hình này sử dụng hai điều kiện biên, điều kiện biên đầu vào và đầu ra. Các phần tử điều kiện biên được trình bày trong Bảng 3.6.

Bảng 3.6 Thông số điều kiện biên đầu vào và đầu ra

Phần tử	Thông số	Giá trị	Đơn vị
Biên đầu vào (SB1)	Loại biên	Tiêu chuẩn	-
	Điều kiện loại biên	Cục bộ	-
	Áp suất	100.000	Pa
	Nhiệt độ khí vào	298	K
	Hơi nhiên liệu	0	-
	Sản phẩm cháy	0	-
	Tỷ số A/F	14,7	-
	Hệ số dòng chảy	0,95	-
Biên đầu ra (SB2)	Loại biên	Tiêu chuẩn	-
	Điều kiện loại biên	Cục bộ	-
	Áp suất	100.000	Pa
	Nhiệt độ khí ra	780	K
	Hơi nhiên liệu	0	-
	Sản phẩm cháy	0	-
	Tỷ số A/F	18	-
	Hệ số dòng chảy	0,75	-

g. Thiết lập phần tử turbo tăng áp

Phần tử turbo tăng áp được sử dụng để mô phỏng quá trình tăng áp của động cơ D6AC. Hệ thống này gồm tuabin và máy nén được nối bằng trục quay chung, trong đó tuabin khai thác năng lượng từ dòng khí xả để dẫn động máy nén, làm tăng áp suất và mật độ khí nạp. Việc tăng áp giúp cải thiện hiệu suất nạp, tăng công suất động cơ và giảm phát thải. AVL Boost đề xuất mô hình đơn giản hóa, hiệu suất máy nén 0,79, tỷ lệ áp suất 2,6, tổn thất bộ tăng áp 0,15 được đặt ở áp suất khí quyển và nhiệt độ môi trường.

3.3. Kết quả mô phỏng**3.3.1. Đánh giá độ tin cậy của mô hình mô phỏng**

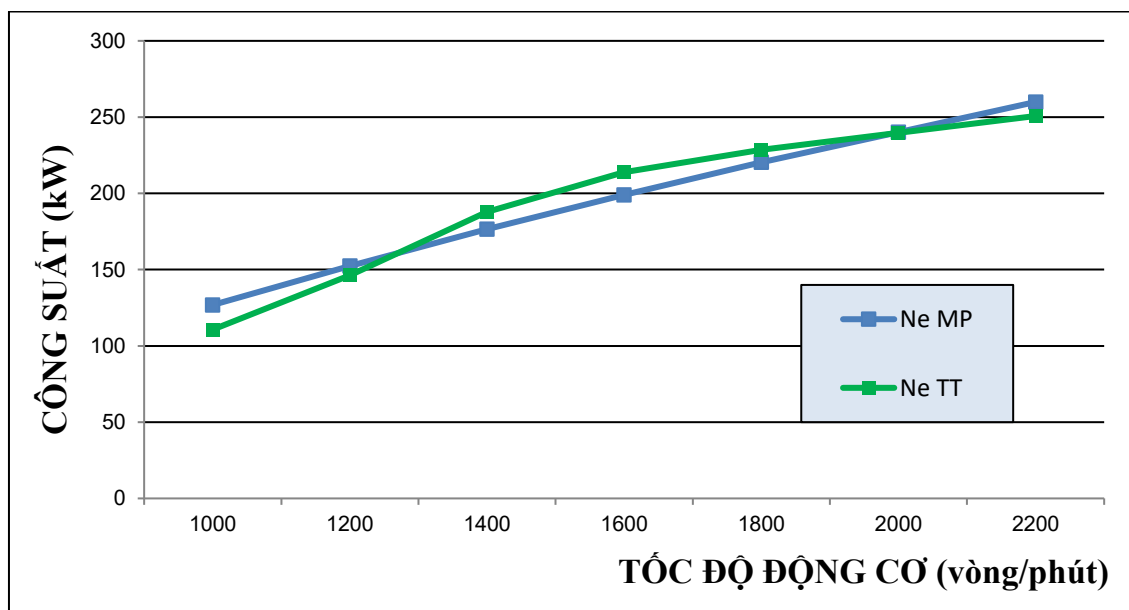
Sau khi thiết lập các giá trị đầy đủ cho các phần tử trong mô hình ta kiểm tra lại tính đúng đắn của mô hình, sau đó tiến hành chạy mô phỏng với AVL Boost. Mô hình khởi chạy sau khi hoàn thành sẽ thông báo ở thanh trạng thái là mô hình thành công hoặc bị lỗi. Mô hình báo lỗi phải kiểm tra lại tất cả các giá trị tham số nhập vào, điều chỉnh các giá trị tham số cho đúng với thực tế, tiến hành thực hiện chạy lại mô hình

cho hoàn chỉnh. Từ các kết quả thu được của quá trình mô phỏng, so sánh với động cơ thực tế do nhà chế tạo công bố được trình bày trong Bảng 3.7.

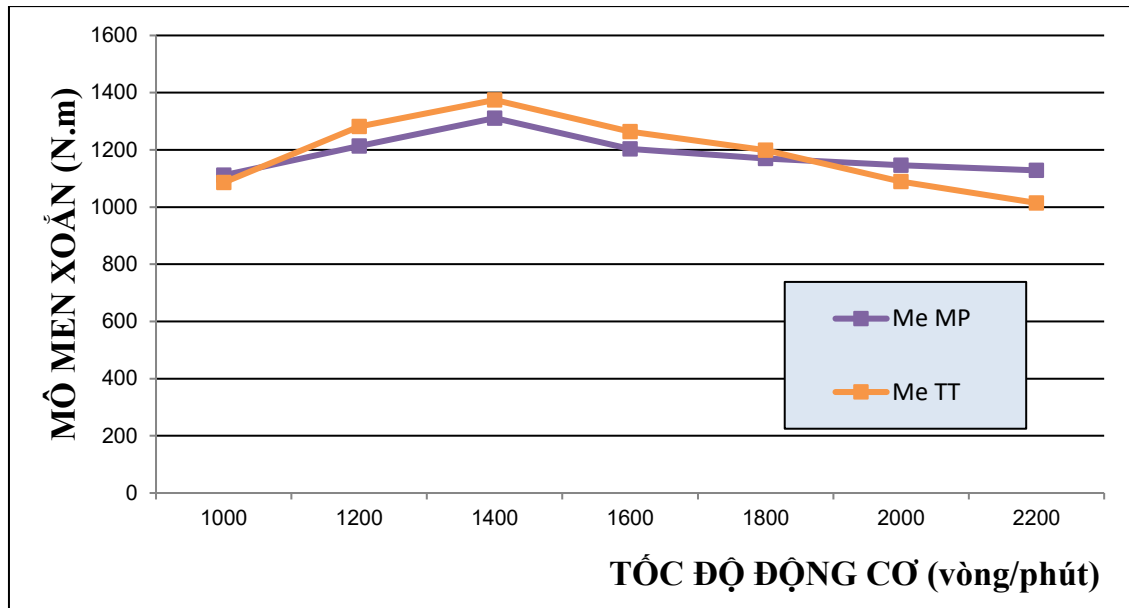
Bảng 3.7 Kết quả so sánh động cơ, mô men xoắn giữa mô phỏng và thực tế của động cơ D6AC

Tốc độ (vòng/phút)	Công suất (kW)			Mô men xoắn (N.m)		
	Mô phỏng	Thực tế	Sai số (%)	Mô phỏng	Thực tế	Sai số (%)
1000	126,84	110,68	12,74	1111,19	1085,89	2,28
1200	152,44	146,33	4,01	1213,12	1282,02	5,68
1400	176,43	187,92	6,51	1310,99	1374,40	4,84
1600	199,06	213,83	7,42	1203,41	1263,48	4,99
1800	220,41	228,58	3,71	1169,34	1198,27	2,47
2000	240,11	239,63	0,20	1146,42	1089,22	4,99
2200	259,90	250,72	3,57	1128,14	1014,39	10,08

Dựa vào kết quả số liệu được trình bày ở bảng trên có thể thấy giá trị công suất mô phỏng cực đại là 259,9 (kW) ở tốc độ vòng quay động cơ 2200 vòng/phút, sai số 3,57%. Mô men xoắn mô phỏng cực đại là 1310,99 (N.m) ở tốc độ vòng quay động cơ 1400 vòng/phút, sai số 4,84%. Nhìn chung, các sai lệch này vẫn nằm trong khoảng sai số cho phép, mô hình có độ chính xác tương đối gần kề với động cơ thực tế.

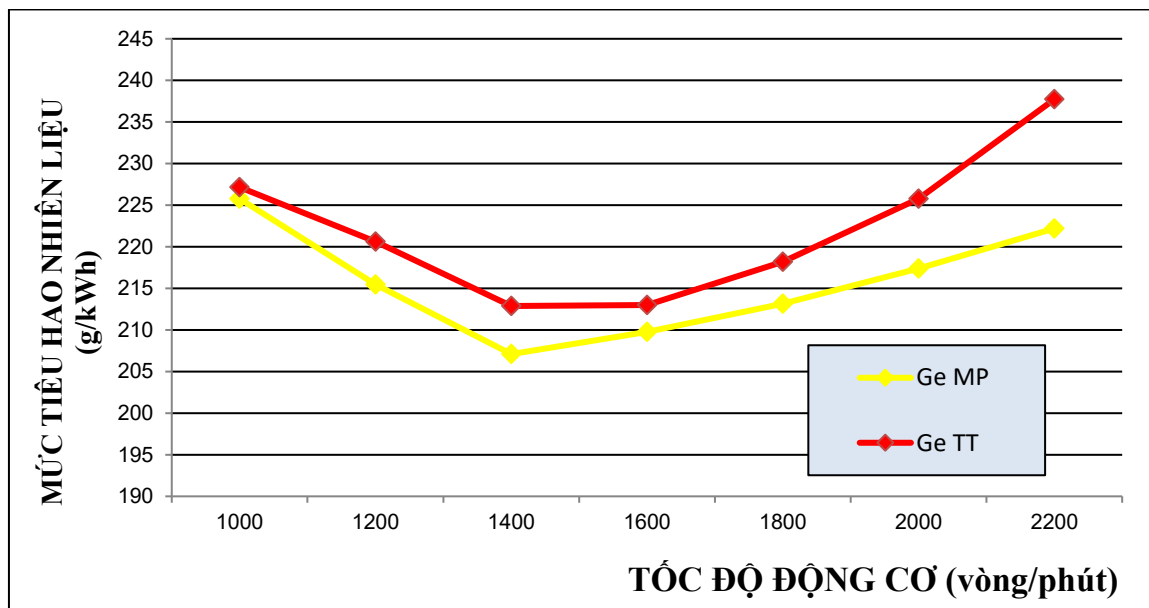


Hình 3.6 Công suất động cơ mô phỏng so với thực tế



Hình 3.7 Mô men xoắn động cơ mô phỏng so với thực tế

Với hình 3.8 cho thấy mức tiêu hao nhiên liệu mô phỏng của động cơ trên toàn dải tốc độ sai lệch 2,86%, giá trị này vẫn nhỏ hơn độ sai lệch cho phép 5% điều đó chứng minh mô hình xây dựng phù hợp với yêu cầu.



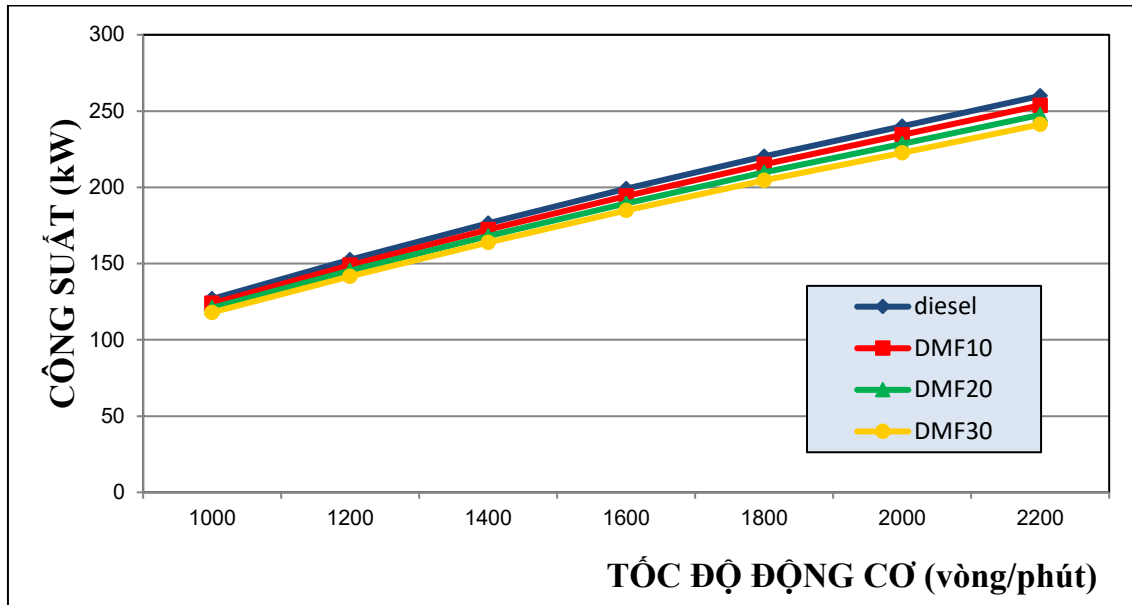
Hình 3.8 Mức tiêu hao nhiên liệu động cơ mô phỏng so với thực tế

3.3.2. Kết quả mô phỏng khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel

Tiến hành thay đổi lần lượt các hỗn hợp nhiên liệu gồm DMF10, DMF20, DMF30 mà vẫn giữ nguyên các đặc tính kỹ thuật khác của động cơ, thực hiện ở chế độ làm việc trên đường đặc tính ngoài (100% tải) và hệ số dư lượng không khí không đổi

($\lambda=1$). Các kết quả thu được từ quá trình chạy mô phỏng được trình bày chi tiết dưới đây.

a. Công suất của động cơ



Hình 3.9 Đồ thị công suất động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu

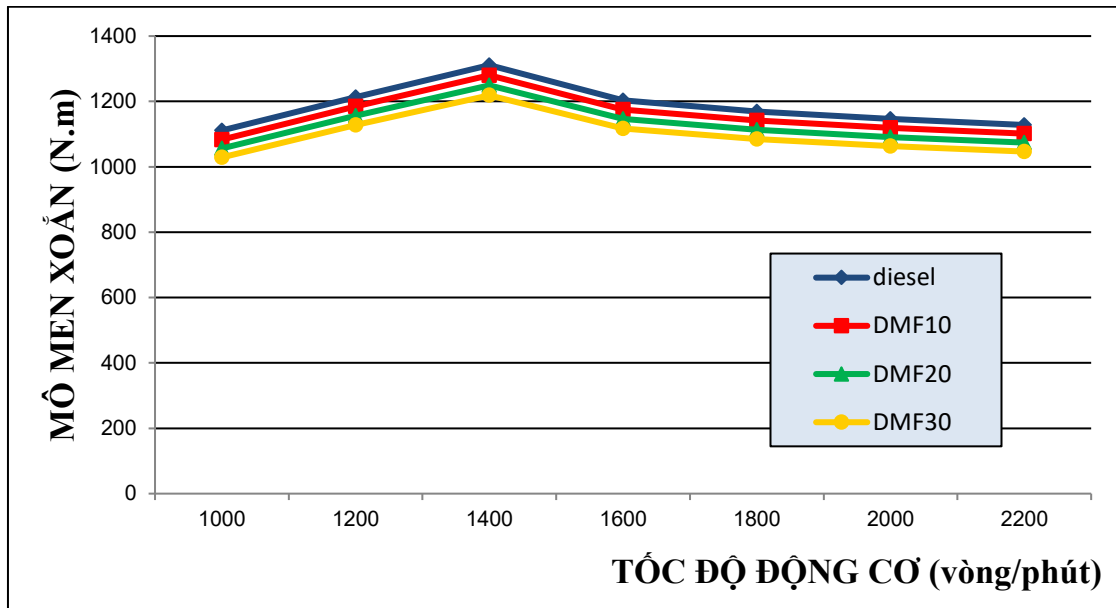
Dựa vào kết quả đồ thị ở Hình 3.9 ta thấy công suất của động cơ có xu hướng giảm khi hàm lượng DMF trong hỗn hợp nhiên liệu ngày càng tăng theo tỷ lệ thay thế. Cụ thể, với nhiên liệu DMF10 công suất giảm 2,37%, với nhiên liệu DMF20 công suất giảm 4,75%, với nhiên liệu DMF30 công suất giảm 7,16% so với công suất của động cơ khi sử dụng hoàn toàn bằng nhiên liệu diesel.

Nguyên nhân dẫn đến công suất của động cơ giảm là do nhiệt trị thấp của DMF (33,7 MJ/kg) nhỏ hơn nhiệt trị thấp của diesel (42,8 MJ/kg), vì vậy khi hàm lượng DMF tăng sẽ làm giảm nhiệt trị thấp của hỗn hợp nhiên liệu dẫn đến nhiệt lượng tỏa ra theo tốc độ vòng quay động cơ giảm gây suy giảm công suất động cơ. Ngoài ra, khả năng bắt lửa của DMF thấp hơn diesel, trị số xêtan của DMF thấp hơn rất nhiều so với diesel nguyên chất, ản nhiệt hóa hơi cao hơn và nhiệt độ tự bốc cháy cao hơn sẽ làm kéo dài thời gian cháy trễ của hỗn hợp nhiên liệu bên trong buồng đốt làm giảm công suất động cơ.

b. Mô men xoắn của động cơ

Có thể thấy, cũng giống tương tự như công suất động cơ giá trị mô men xoắn của động cơ lớn nhất khi sử dụng nhiên liệu diesel nguyên chất. Ứng với mỗi hỗn hợp

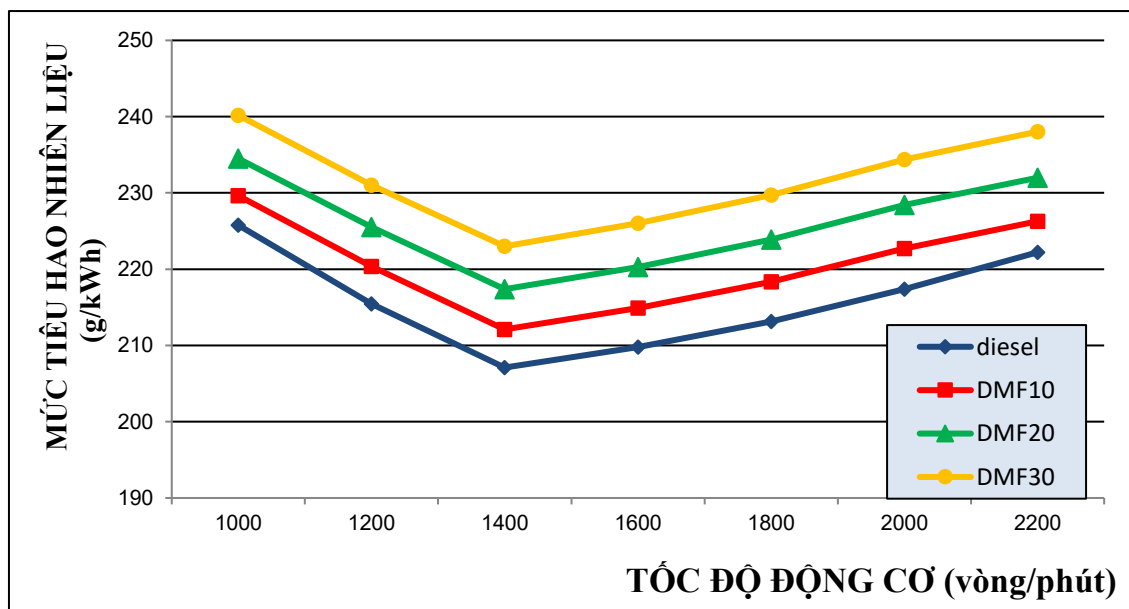
nhiên liệu DMF10, DMF20, DMF30 thì mô men xoắn giảm lần lượt là 2,39%, 4,77%, 7,18%.



Hình 3.10 Mô men xoắn của động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu

Nguyên nhân làm mô men xoắn động cơ giảm là do công suất của động cơ giảm dẫn đến mô men xoắn của động cơ giảm theo trên toàn dải tốc độ động cơ.

c. Mức tiêu hao nhiên liệu



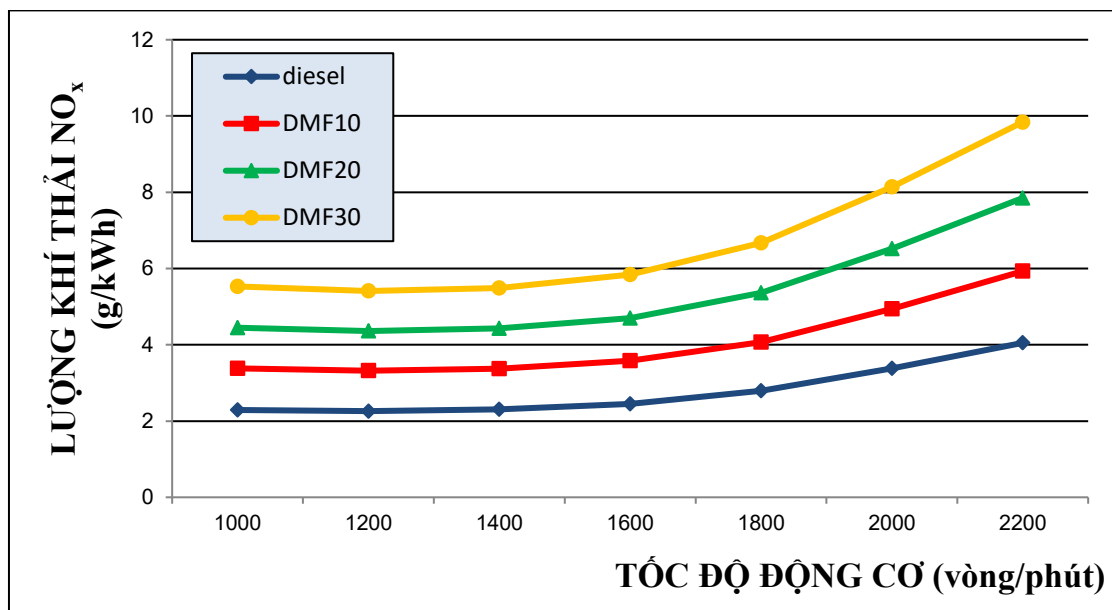
Hình 3.11 Mức tiêu hao nhiên liệu động cơ tương ứng với từng loại nhiên liệu

Trên Hình 3.11 so sánh mức tiêu hao nhiên liệu của động cơ ở tốc độ vòng quay từ 1000 ÷ 2200 vòng/phút khi sử dụng 100% nhiên liệu diesel nguyên chất và khi bổ sung thêm nhiên liệu DMF tương ứng 10÷30%. Đồ thị cho thấy, mức tiêu hao nhiên

liệu động cơ tăng dần khi hàm lượng DMF bổ sung vào nhiên liệu trung bình từ 2,22% (DMF10), 4,71% (DMF20), 7,38% (DMF30).

Nguyên nhân làm cho mức tiêu hao nhiên liệu động cơ tăng là do nhiệt trị thấp của DMF nhỏ hơn diesel, khi bổ sung hàm lượng DMF vào làm cho tỷ lệ nhiên liệu/không khí cũng thấp. Vì vậy cần cung cấp nhiều hàm lượng oxy hơn để cải thiện quá trình cháy trong buồng đốt nhằm chuyển hóa năng lượng hóa học của nhiên liệu thành công có ích của động cơ, lượng khí nạp mới vào lớn hơn dẫn đến cần nhiều nhiên liệu hơn khi sử dụng hỗn hợp DMF-diesel.

d. Phát thải NO_x

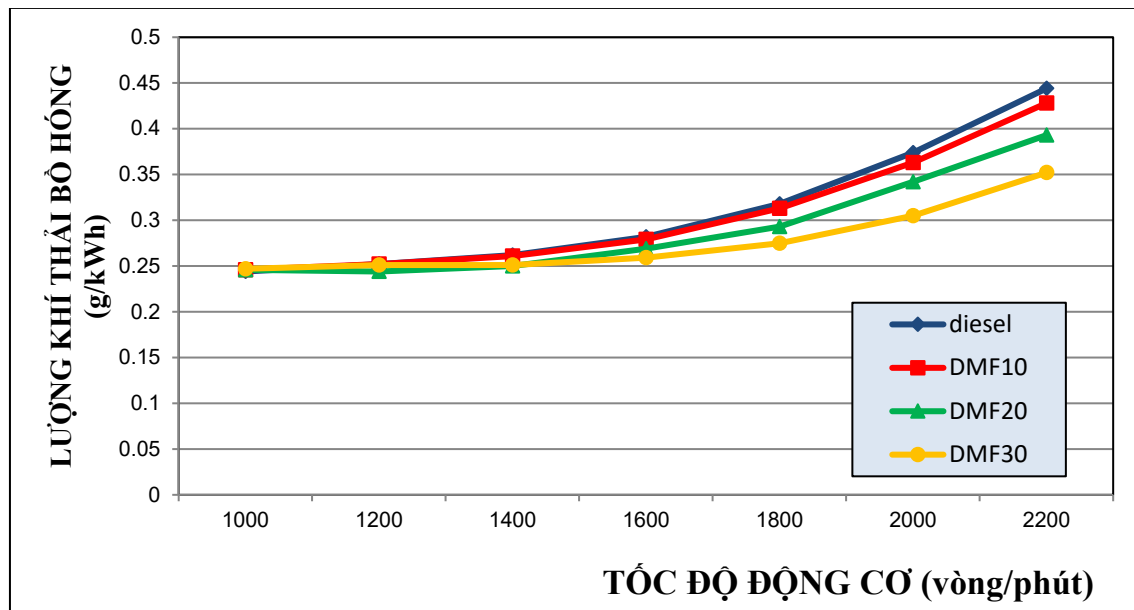


Hình 3.12 Lượng phát thải NO_x tương ứng với từng loại nhiên liệu

Dựa vào kết quả đồ thị ta thấy lượng khí thải NO_x có xu hướng tăng dần khi có mặt của nhiên liệu DMF trong hỗn hợp nhiên liệu. Hàm lượng khí thải NO_x tăng cụ thể là 46,39%, 92,88%, 140,25% tương ứng với các loại nhiên liệu DMF10, DMF20, DMF30.

Nguyên nhân là do hàm lượng DMF cao sẽ hình thành hỗn hợp dễ cháy hơn và cháy nhanh hơn dẫn đến tốc độ tỏa nhiệt và áp suất cực đại của piston gia tăng đáng kể làm quá trình oxy hóa DMF đẩy nhanh quá trình đốt cháy và giải phóng nhiều năng lượng làm tăng lượng NO_x . Mặt khác, hàm lượng oxy trong DMF cao thúc đẩy khả năng cung cấp oxy cho nhiên liệu trong quá trình đốt cháy hỗn hợp nhiên liệu bên trong buồng đốt.

e. Phát thải bồ hóng



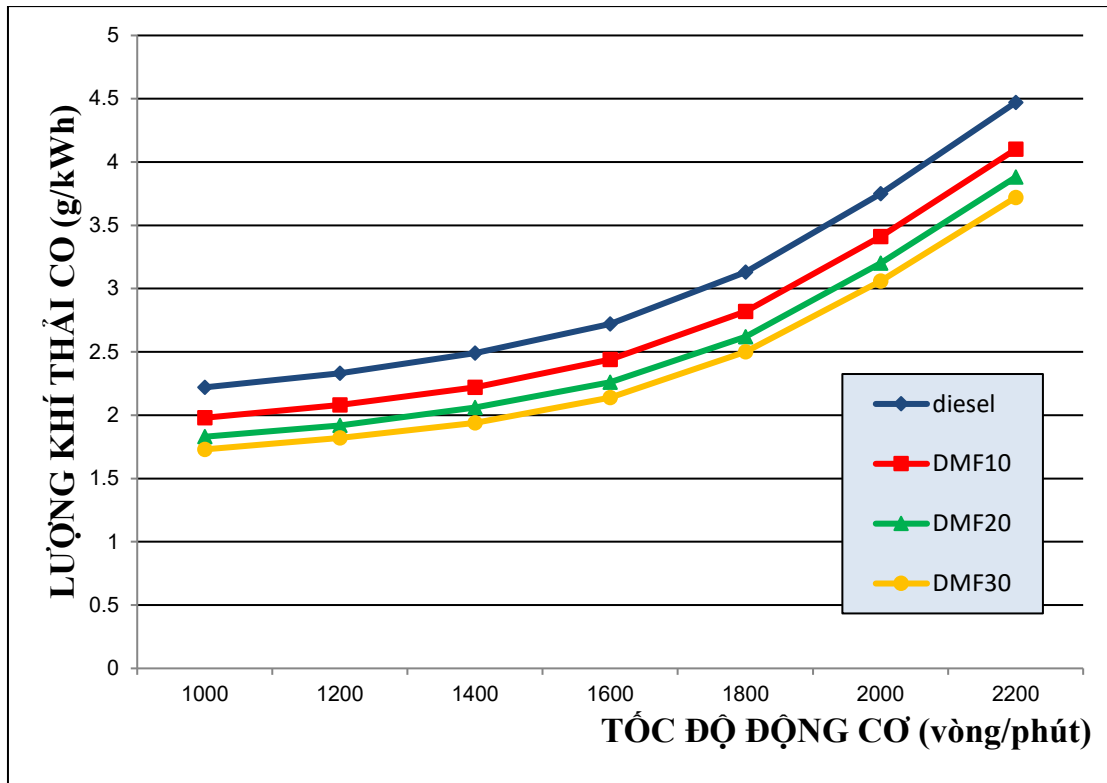
Hình 3.13 Lượng phát thải bồ hóng tương ứng với từng loại nhiên liệu

Lượng phát thải bồ hóng được trình bày trên Hình 3.13, khi bổ sung DMF nồng độ bồ hóng giảm theo tỷ lệ phần trăm thể tích hỗn hợp nhiên liệu, cụ thể mức giảm trung bình 3,6% (DMF10), 11,49% (DMF20), 20,72% (DMF30).

Giải thích cho điều này là do hàm lượng lớn oxy trong DMF tăng tốc quá trình đốt cháy với khả năng giải phóng nhiệt nhanh hơn ở cả giai đoạn trộn trước và khuếch tán, đẩy nhanh quá trình oxy hóa bồ hóng trong khí thải và ức chế sự hình thành bồ hóng. Sức căng bề mặt và độ nhớt động lực học của DMF thấp hơn diesel cũng làm giảm sự hình thành bồ hóng. Sự phát triển của các vòng thơm và hình thành bồ hóng bị ức chế bởi các gốc tự do cao (chủ yếu là OH) được tạo ra sau khi bổ sung oxy trong hỗn hợp nhiên liệu. Hàm lượng cacbon trong DMF thấp hơn diesel, nên lượng cacbon trong hỗn hợp nhiên liệu giảm dẫn đến làm giảm liên kết C-C (nguồn hình thành bồ hóng). Ngoài ra, khi bổ sung DMF thời gian cháy trễ của hỗn hợp nhiên liệu kéo dài làm giảm sự hình thành bồ hóng.

f. Phát thải CO

Thông qua đồ thị ta thấy lượng khí thải CO có xu hướng giảm dần khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel so với nhiên liệu diesel nguyên chất. Có thể thấy khi sử dụng DMF10, DMF20, DMF30 lượng phát thải CO giảm tương ứng 9,05%, 15,82%, 19,90%.



Hình 3.14 Lượng phát thải CO tương ứng với từng loại nhiên liệu

Nguyên nhân dẫn đến việc hàm lượng khí thải CO giảm là do hàm lượng ôxy có trong hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel lớn giúp quá trình đốt cháy nhiên liệu diễn ra tốt hơn. Bên cạnh đó, hàm lượng thành phần hydrocacbon trong nhiên liệu hỗn hợp cũng thấp hơn so với diesel cũng góp phần làm giảm sự hình thành CO trong khí thải. Hơn nữa, do giữ nguyên lượng nhiên liệu cung cấp nên dư lượng không khí khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu cao hơn làm tăng khả năng ôxy hóa CO thành CO₂ dẫn đến phát thải giảm dần theo mức tăng của hỗn hợp nhiên liệu.

3.4 Kết luận chương 3

Từ các kết quả được trình bày cụ thể ở trên, có thể đúc kết lại một số kết luận với nội dung như sau:

- Đã xây dựng thành công mô hình mô phỏng động cơ diesel D6AC trên phần mềm AVL Boost với hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel và nhiên liệu diesel nguyên chất.
- Mô hình mô phỏng trên cơ sở đảm bảo giữ nguyên đặc tính kỹ thuật của động cơ, chỉ thay đổi phần trăm về thể tích của hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel. Từ đó so sánh tính năng kinh tế động cơ và lượng phát thải ra bên ngoài môi trường.

- Kết quả chỉ ra những ảnh hưởng nhất định khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel gồm DMF10, DMF20, DMF30 thực hiện ở chế độ toàn tải, vẫn đảm bảo giữ nguyên $\lambda=1$, trên dải tốc độ động cơ từ 1000÷2200 vòng/phút. Cụ thể: công suất động cơ giảm 2,37%, 4,75%, 7,16% so với 100% diesel; mô men xoắn giảm 2,39%, 4,77%, 7,18% so với 100% diesel; mức tiêu hao nhiên liệu tăng 2,22%, 4,71%, 7,38% so với 100% diesel. Lượng phát thải NO_x tăng 46,39%, 92,88%, 140,25% so với 100% diesel; lượng phát thải CO giảm 9,05%, 15,82%, 19,90% so với 100% diesel; lượng phát thải bồ hóng giảm 3,6%, 11,49%, 20,72% so với 100% diesel.

KẾT LUẬN

1. Kết quả đạt được

Mục đích của nghiên cứu là phát hiện ra thêm một nhiên liệu sinh học để sử dụng trên động cơ đốt trong, nhằm giải quyết được bài toán về sự cạn kiệt của nhiên liệu truyền thống cũng như những thách thức rất to lớn đến môi trường. Vì vậy, DMF là một nguồn nhiên liệu sinh học rất thích hợp ở các nước nông nghiệp về sự dồi dào của sinh khối từ các phụ phẩm nông nghiệp. Bên cạnh đó, đề án đã trình bày, hướng dẫn xây dựng mô hình động cơ diesel sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel với các tỷ lệ khác nhau trên phần mềm AVL Boost để đánh giá so sánh sự ảnh hưởng của hỗn hợp nhiên liệu này đến đặc tính kinh tế và lượng phát thải ra bên ngoài môi trường.

Sau quá trình nghiên cứu, đề án đã đạt được các kết quả như sau:

- Tìm hiểu tổng quan về ô nhiễm môi trường hiện nay do các phương tiện giao thông gây ra, những ảnh hưởng xấu của các khí thải từ động cơ đến sức khỏe con người và môi trường.

- Tìm hiểu tổng quan về tính chất lý hóa và các con đường để điều chế ra DMF từ sinh khối. Nghiên cứu những công trình khoa học về quá trình nhiệt phân và phân hủy DMF khi sử dụng trong động cơ đốt trong.

- Giới thiệu phần mềm AVL Boost, công dụng, chức năng của các phần tử để xây dựng một mô hình mô phỏng hoàn chỉnh. Trình bày các bước xây dựng mô hình mô phỏng và thiết lập các tham số của động cơ thực tế vào trong mô hình.

- Kết quả mô phỏng cho thấy, khi hòa trộn DMF vào nhiên liệu diesel trên động cơ diesel thì công suất và mô men xoắn giảm, mức tiêu hao nhiên liệu tăng, lượng phát thải NO_x cũng tăng, lượng phát thải bồ hóng và CO giảm so với động cơ sử dụng hoàn toàn nhiên liệu diesel.

Tóm lại, kết quả nghiên cứu là tiền đề cho việc sử dụng nhiên liệu diesel pha DMF dùng trên động cơ diesel cỡ lớn phổ biến trên thị trường hiện nay. Ngoài ra, việc sử dụng hỗn hợp nhiên liệu này giúp đảm bảo an ninh năng lượng và giảm ô nhiễm môi trường.

2. Hạn chế

Quá trình nghiên cứu chỉ đang dừng lại ở mức độ mô phỏng động cơ, nhiên liệu trên phần mềm máy tính. Cho nên để mô hình có tính chính xác cao hơn và bám sát

vào thực tiễn hơn cần phải thử nghiệm trên động cơ thực tế, sau đó đối chứng kết quả của mô phỏng với thực nghiệm và đưa ra kết luận. Vì vậy, kết quả trong đề án này chỉ ở mức tương đối và mang tính chất định hướng phát triển sử dụng nhiên liệu sinh học trên động cơ đốt trong.

3. Kiến nghị

Dựa trên các kết quả nghiên cứu đạt được, đề án có một số kiến nghị sau:

- Nghiên cứu thêm các chất phụ gia khác để phối trộn vào diesel sinh học có hàm lượng DMF nhiều hơn khi sử dụng trên động cơ diesel.
- Từ mô hình mô phỏng đạt được, nghiên cứu thêm các chỉ tiêu khác của động cơ (hệ thống tuần hoàn khí thải, hệ số dư lượng không khí) để cải thiện đặc tính kinh tế, kỹ thuật cũng như lượng phát thải khí thải của động cơ cho phù hợp.
- Nghiên cứu sử dụng lắp thêm các bộ xử lý khí thải, bộ lọc hạt để làm giảm các khí thải còn gia tăng khi sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel.
- Nghiên cứu tuổi thọ của động cơ diesel từ việc sử dụng hỗn hợp nhiên liệu DMF-diesel, từ đó đề xuất các giải pháp tối ưu động cơ cho hợp lý.
- Nghiên cứu thêm các phương án hòa trộn hỗn hợp nhiên liệu, làm cơ sở so sánh sự ảnh hưởng của các phương án hòa trộn để tìm ra phương án tốt nhất.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] UN Environment Programme, "Pollution action note – Data you need to know," Published September 7, 2021, Updated 6 Sept 2023. [Online]. Available: <https://www.unep.org/interactives/air-pollution-note/>.
- [2] C. Zehnder, K. Manoylov, S. Mutiti and et al, Introduction to environmental science: 2nd edition. In Biological Sciences Open Textbooks, 2018.
- [3] K. Vohra, A. Vodnos, J. Schwartz, E. A. Marais, M. P. Sulprizio and L. J. Mickley, "Global mortality from outdoor fine particle pollution generated by fossil fuel combustion: Results from GEOSChem," Environmental Research, vol. 195, pp. 0013-9351, 2021.
- [4] O. Edenhofer, R. Pichs-Madruga, Y. Sokona and et al, Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change, Cambridge University Press, 2014.
- [5] R. K. Pachauri and L. A. Meyer, AR5 Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change, IPCC, 2014.
- [6] S. Apte,, J. D. Marshall, A. J. Cohen and M. Brauer, "Addressing global mortality from ambient PM2.5," Environmental Science & Technology, vol. 49, no. 13, pp. 8057-8066, 2015.
- [7] U.S. Environmental Protection Agency, "Particulate Matter (PM) Basics," 2024. [Online]. Available: <https://www.epa.gov/pm-pollution/particulate-matter-pm-basics>.
- [8] U.S. Air Quality Index, "Air Quality Index (AQI) Basics," 2023. [Online]. Available: <https://www.airnow.gov/aqi/aqi-basics/>.
- [9] IQAir, "World Air Quality Report, Region & City PM2.5 Ranking," 2023.
- [10] IQAir, "Interactive global map of 2023 PM2.5 concentrations by city," 2023. [Online]. Available: <https://www.iqair.com/world-air-quality-report>.
- [11] Sở Tài Nguyên và Môi Trường TP. HCM, "Bản tin chất lượng môi trường không khí 05/04/2024," 2024.
- [12] Ban Chấp Hành Trung Ương, Nghị quyết số: 06-NQ/TW về quy hoạch, xây dựng, quản lý và phát triển bền vững đô thị Việt Nam đến năm 2030, tầm nhìn

đến năm 2045, 2022.

- [13] Sở Tài Nguyên và Môi Trường TP. HCM, "Báo cáo hiện trạng môi trường Tp. HCM năm 2021," 2021.
- [14] Bùi Văn Ga , Văn Thị Bông, Phạm Xuân Mai and Trần Văn, Ô tô và ô nhiễm môi trường. Hà Nội: Nhà xuất bản Hà Nội, 1997.
- [15] N. Yamaki, T. Kohno, S. Ishiwata and et al, "The state of the art on the chemical characterization of diesel particulates in Japannopp," no. 13, pp. 17-40, 1986.
- [16] B. A. Morgunov, V. P. Chashchin, A. B. Gudkov and et al, "Health Risk Factors of Emissions from Internal Combustion Engine Vehicles: An Up-to-Date Status of the Problem," Scientific and practical, vol. 30, no. 5, pp. 7-14, 2022.
- [17] D. D. Zaebst, L. M. Blade, J. A. Morris and D. Schuet, "Elemental carbon as a surrogate index of diesel exhaust exposureI," In: Proceedings of the American Industrial Hygiene Conference, San Francisco, CA, Cincinnati, OH, National Institute for Occupational Safety and Health, Division of Surveillance, Hazard Evaluation and Field Studies, 1988.
- [18] U. S. E. P. A. (EPA), "Nitrogen Dioxide," 2013. [Online]. Available: <https://www.epa.gov/environmental-topics/air-topics>.
- [19] T. Dahlgren, "Health Effects from Automobile Emissions," Emission Check, 2014. [Online]. Available: <https://apps.ecology.wa.gov/publications/documents/0002008.pdf>.
- [20] Department of Health and Human Services and Public Health Service Agency for Toxic Substances , "Public Health Statement Benzene," 2007. [Online]. Available: <https://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp3-c1-b.pdf>.
- [21] World Health Organization (WHO), "Lead poisoning," 2024. [Online]. Available: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/lead-poisoning-and-health>.
- [22] M.S. Collin, S.K. Venkatraman, N. Vijayakumar and et al, "Bioaccumulation of lead (Pb) and its effects on human: A review," Journal of Hazardous Materials Advances, vol. 7, 2022.

- [23] R. Beelen, O. Raaschou-Nielsen, M. Stafoggia and et al, "Effects of long-term exposure to air pollution on natural-cause mortality: an analysis of 22 European cohorts within the multicentre ESCAPE project," *The Lancet*, vol. 383, no. 9919, pp. 785-795, 2014.
- [24] Mayada E. Abdel Razek, Gamal E.M. Nasr, Magdy A. Baiomy, A. Z. Taieb and Mohamed Refai, "Exhaust Emissions Gas on the Environment Pollution and Processing Technologies," *Euro-Mediterranean Journal for Environmental Integration*, vol. 10, pp. 361-376, 2025.
- [25] The Global Carbon Project science team, "Fossil CO₂ emissions at record high in 2023," 2023. [Online]. Available: <https://globalcarbonbudget.org/fossil-co2-emissions-at-record-high-in-2023>.
- [26] NOAA National Centers for Environmental Informatio, "Annual 2023 Global Climate Report," 2024. [Online]. Available: <https://www.ncei.noaa.gov/access/monitoring/monthly-report/global/202313>.
- [27] Berkeley Earth, "Global Temperature Report for 2023," 2024. [Online]. Available: <https://berkeleyearth.org/global-temperature-report-for-2023/>.
- [28] T. Morgan and M. Kelly, Renewable Fuels Incentive Policies. The World LPG Association, 2022.
- [29] Statista Research Department, "Biofuel industry in Europe - statistics & facts," 2024. [Online]. Available: <https://www.statista.com/topics/6828/biodiesel-in-europe/#topicOverview>.
- [30] Statista Research Department, "Biofuel production in Europe in 2023, by country," 2024. [Online]. Available: <https://www.statista.com/statistics/332510/biofuels-production-in-selected-countries-in-europe/>.
- [31] Mona Siahaan, "Biofuel energy supply in Indonesia from 2014 to 2023," 2024. [Online]. Available: <https://www.statista.com/statistics/991002/biofuel-energy-supply-indonesia/>.
- [32] H. Xiao, B. Hou, P. Zeng, A. Jiang, X. Hou and J. Liu, "Combustion and emission characteristics of diesel engine fueled with 2,5-dimethylfuran and diesel

- blends," *Fuel*, vol. 192, pp. 53-59, 2017.
- [33] Q. Zhang, M. Yao, J. Luo, H. Chen and X. Zhang, "Diesel engine combustion and emissions of 2,5-dimethylfuran-diesel blends with 2-ethylhexyl nitrate addition," *Fuel*, vol. 111, p. 887–891, 2013.
- [34] M. Wei, S. Li, H. Xiao and G. Guo, "A comparison study on the combustion and particulate emissions of 2,5-dimethylfuran/diesel and ethanol/diesel in a diesel engine," *Fuel*, vol. 22, no. 3, pp. 1351-1361, 2018.
- [35] Q. Zhang, X. Hu, Z. Li, B. Liu, Z. Chen and J. Li, "Combustion and Emission Characteristics of Diesel Engines Using Diesel, DMF/Diesel, and N-Pentanol/Diesel Fuel Blends," *Energy*, vol. 144, pp. 04018030-1-04018030-8, 2018.
- [36] H. Liu, J. Xu, Z. Zheng, S. Li and M. Yao, "Effects of fuel properties on combustion and emissions under both conventional and low temperature combustion mode fueling 2,5-dimethylfuran/diesel blends," *Energy*, vol. 62, pp. 215-223, 2013.
- [37] G. Chen, Y. Shen, Q. Zhang, M. Yao, Z. Zheng and H. L., "Experimental study on combustion and emission characteristics of a diesel engine fueled with 2,5-dimethylfuran-diesel, n-butanol-diesel and gasoline-diesel blends," *Energy*, vol. 54, pp. 333-342, 2013.
- [38] M. Wei, S. Li, J. Liu, G. Guo, Z. Sun and H. Xiao, "Effects of injection timing on combustion and emissions in a diesel engine fueled with 2,5-dimethylfuran-diesel blends," *Fuel*, vol. 192, pp. 208-217, 2017.
- [39] Thủ tướng Chính phủ, Quyết định số 177/2007/QĐ-TTg: Về việc phê duyệt “Đề án phát triển nhiên liệu sinh học đến năm 2015, tầm nhìn đến năm 2025”, 2007.
- [40] Thủ tướng Chính phủ, Quyết định 53/2012/QĐ-TTg của Thủ tướng Chính phủ về việc “Ban hành lộ trình áp dụng tỷ lệ phối trộn nhiên liệu sinh học với nhiên liệu truyền thống”.
- [41] Văn phòng Chính phủ, Thông báo 255/TB-VPCP của Văn phòng Chính phủ về “Kết luận của Phó Thủ tướng Chính phủ Trịnh Đình Dũng tại cuộc họp về việc

thực hiện Đề án phát triển nhiên liệu sinh học và Lộ trình áp dụng tỷ lệ phối trộn nhiên liệu sinh học với nhiên liệu truyền thống, 2017.

- [42] FAO, "Production quantities of Rice by Viet Nam," Food and Agriculture Organization of the United Nations, 2022. [Online]. Available: <https://www.fao.org/faostat/en/#data/QCL/visualize>.
- [43] Trà My, "Nâng giá trị lúa gạo từ mô hình kinh tế tuần hoàn," 2024. [Online]. Available: <https://baovinhlong.com.vn/kinh-te/202406/nang-gia-tri-lua-gao-tu-mo-hinh-kinh-te-tuan-hoan-3184174/>.
- [44] Không Vũ Quảng, Nguyễn Duy Tiến, Đinh Xuân Thành, Đái Trinh Quý, Nguyễn Thế Trục and Lê Đăng Duy, "Nghiên cứu ảnh hưởng của hỗn hợp nhiên liệu 2,5 dimethylfuran-xăng tới các tính năng kinh tế, kỹ thuật của động cơ," Khoa học-Công nghệ, vol. 56, no. 4, p. 69, 2020.
- [45] Nguyễn Danh Chấn, "Nghiên cứu đặc tính kỹ thuật và phát thải khi sử dụng nhiên liệu dimethylfuran trên động cơ xăng," Luận án Tiến Sĩ kỹ thuật, Trường Đại Học Giao Thông Vận Tải TP. HCM, 2021.
- [46] Đồng Văn Hường, "Nghiên cứu tổng hợp phụ gia nhiên liệu dimethylfuran từ sinh khối sử dụng cho động cơ đốt trong nhằm giảm suất tiêu hao nhiên liệu và phát thải độc hại," 2018.
- [47] Đồng Văn Hường, "Ứng dụng thí điểm phụ gia sinh khối (dimethylfuran) cho động cơ xăng lắp trên ô tô nhằm giảm thiểu ô nhiễm môi trường," 2019.
- [48] R. Ristinen and J. Kraushaar, Energy and the environment, 2nd Edition. NJ. Hoboken USA, Publisher: John Wiley & Sons, 2005.
- [49] GCSE Bitesized, "Fractional Distillation," 2016. [Online]. Available: http://www.bbc.co.uk/schools/gcsebitesize/science/aqa_pre_2011/rocks/fuelsrev3.shtml.
- [50] G. Boyle, B. Everett, S. Peake and J. Ramage, Energy Systems and Sustainability: Power for a Sustainable Future, 2nd ed., UK: Oxford University Press, 2012.
- [51] R. Wolfson, Energy, Environment and Climate, 2nd ed., New York, USA:

Publisher: W. Norton, 2012.

- [52] T. Kaltschmitt and O. Deatschmann, "Fuel processing for fuel cells," *Advances in chemical engineering*, vol. 41, pp. 1-64, 2012.
- [53] SC. Gad, "Diesel fuel," *Encyclopedia of Toxicology*, vol. 2, pp. 115-118, 2014.
- [54] Y. Zvirin, M. Gutman and L. Tartakovsky, "Fuel Effects on Emissions," *Handbook of Air Pollution From Internal Combustion Engines*, p. 547–651, 1998.
- [55] Chemical book, "2,5-Dimethylfuran Basic information," 2023. [Online]. Available : https://www.chemicalbook.com/ProductChemicalPropertiesCB2854009_EN.htm.
- [56] National Library of Medicine , "Compound Summary 2,5-Dimethylfuran," 2024. [Online]. Available: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2_5-Dimethylfuran.
- [57] Q. Li, J. Fu, X. Wu, C. Tang and Z. Huang, "Laminar Flame Speeds of DMF/Iso-octane-Air-N₂/CO₂ Mixtures," *Energy Fuels*, vol. 26, pp. 917-925, 2012.
- [58] H. Xiao, P. Zeng, L. Zhao, Z. Li and X. Fu, "An experimental study of the combustion and emission performances of 2,5-dimethylfuran diesel blends on a diesel engine," *Thermal Science*, vol. 20, p. 12, 2017.
- [59] C. Westbrook, K. Heufer and A. Wildenberg, "Key Chemical Kinetic Steps in Reaction Mechanisms for Fuels from Biomass: A Perspective," *Energy & Fuels*, pp. 1-87, 2021.
- [60] D. C. Nguyen, A. T. Hoang, Q. V. Tran and H. Hadiyant, "A review on the performance, combustion and emission characteristics of SI engine fueled with 2,5-Dimethylfuran (DMF) compared to ethanol and gasoline," *J. Energy Resour. Technol*, vol. 143, no. 4, pp. 1-23, 2020.
- [61] X. Tong, Y. Ma and Y. Li, "Biomass into chemicals: Conversion of sugars to furan derivatives by catalytic processes," *General*, vol. 385, pp. 1-13, 2020.
- [62] Y. Roman-Leshkov, C.J. Barrett, Z.Y. Liu and J.A. Du, "Production of dimethylfuran for liquid fuels from biomass-derived carbohydrates," *Nature*, vol. 7147, pp. 982-985, 2017.

- [63] M. Mascal and E.B. Nikitin, "Direct, High-Yield Conversion of Cellulose into Biofuel," *Angew. Chem*, vol. 120, p. 8042–8044, 2008.
- [64] J.B. Binde and R.T. Raines, "Simple Chemical Transformation of Lignocellulosic Biomass into Furans for Fuels and Chemicals," *J. AM. CHEM. SOC*, p. 1979–1985, 2009.
- [65] M. Chidambaram and A.T. Bell, "A two-step approach for the catalytic conversion of glucose to 2,5-dimethylfuran in ionic liquids," *Green Chem*, vol. 12, p. 1253–1262, 2010.
- [66] T. Thananathanachon and T.B. Rauchfuss, "Efficient Production of the Liquid Fuel 2,5-Dimethylfuran from Fructose Using Formic Acid as a Reagent," *Angew. Chem*, vol. 122, pp. 6676-6768, 2010.
- [67] B. Sirjean, R. Fournet, P.A. Glaude and et al, "A shock tube and chemical kinetic modeling study of the oxidation of 2,5-dimethylfuran," *J. Phys. Chem. A*, vol. 117, pp. 1371-1392, 2013.
- [68] J. M. Simmie and W. K. Metcalfe, "Ab Initio Study of the Decomposition of 2,5-Dimethylfuran," *J. Phys. Chem. A*, p. 8877–8888, 2011.
- [69] B. Sirjean and R. Fournet, "Theoretical Study of the Thermal Decomposition of the 5-Methyl-2- furanylmethyl Radical," *J. Phys. Chem. A*, vol. 116, p. 6675–6684, 2012.
- [70] P. Friese, J.M. Simmie and M. Olzmann, "The reaction of 2,5-dimethylfuran with hydrogen atoms – An experimental and theoretical study," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, pp. 233-239, 2013.
- [71] B. Sirjean and R. Fournet, "Theoretical study of the reaction 2,5-dimethylfuran + H → products," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, p. 241–249, 2013.
- [72] T. Ferraz-Santos and G. F. Bauerfeldt, "Ab Initio Study of the Reactions of OH Radical with 2,5 Dimethylfuran," pp. 1-6, 2015.
- [73] Luc-Sy Tran, B. Sirjean, P.A. Glaude and K.K. Höingha, "Influence of substituted furans on the formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in

- flames," *Proc. Combust. Inst.*, pp. 1-9, 2014.
- [74] Luc-Sy Tran, Z. Wang, H.H. Carstensen, C. Hemken, F.B. Leclerc and K.K. Höinghaus, "Comparative experimental and modeling study of the low- to moderate-temperature oxidation chemistry of 2,5-dimethylfuran, 2-methylfuran, and furan," *Combustion and Flame*, vol. 181, pp. 251-269, 2017.
- [75] C.Q. Jiao, S.F. Adams and A. Garscadden, "Ionization of 2,5-dimethylfuran by electron impact and resulting ion-parent molecule reactions," *J. Appl. Phys.*, vol. 106, pp. 013306 (1)- 013306 (4), 2009.
- [76] Z. Cheng, L. Xing, M. Zeng, W. Dong, F. Zhang and F. Li, "Experimental and kinetic modeling study of 2,5-dimethylfuran pyrolysis at various pressures," *Combust. Flame*, vol. 161, p. 2496–2511, 2014.
- [77] M. Djokic, H.H. Carstensen, K.M. Van Geem and G.B. Mar, "The thermal decomposition of 2,5-dimethylfuran," *Proc. Combust. Inst.*, vol. 34, pp. 251-258, 2013.
- [78] K. Alexandrino, Á. Millera, R. Bilbao and M.U. Alzueta, "Novel aspects in the pyrolysis and oxidation of 2,5-dimethylfuran," *Proc. Combust. Inst.*, vol. 35, p. 1717–1725, 2015.
- [79] K. Alexandrino, P. Salvo, Á. Millera, R. Bilbao and M.U. Alzueta, "Influence of the Temperature and 2,5-Dimethylfuran Concentration on Its Sooting Tendency," *Combust. Sci. Technol.*, vol. 188, p. 651–666, 2016.
- [80] K. Alexandrino, A. Millera, R. Bilbao and M.U. Alzueta, "Interaction between 2,5-dimethylfuran and nitric oxide: Experimental and modeling study," *Energy Fuels*, vol. 28, pp. 4193-4198, 2014.
- [81] A. Elwardany, E. Es-Sebbar and F. Khaled, "A chemical kinetic study of the reaction of hydroxyl with furans," *Fuel*, vol. 166, pp. 245-252, 2016.
- [82] H. Yoshizawa, H. Nagashima, Y. Murakami and K. Takahashi, "Kinetic Studies on the Reactions of Atomic Oxygen with Furan, 2-Methylfuran, and 2,5-Dimethylfuran at Elevated Temperatures," *Chem. Lett.*, pp. 1207-1210, 2017.
- [83] K.P. Somers, J.M. Simmie, F. Gillespie and et al, "A comprehensive

- experimental and detailed chemical kinetic modelling study of 2,5-dimethylfuran pyrolysis and oxidation," *Combust. Flame*, vol. 160, p. 2291–2318, 2013.
- [84] N. Xu,, C. Tang, X. Meng, X. Fan, Z. Tian and Z. H, "Experimental and Kinetic Study on the Ignition Delay Times of 2, 5-Dimethylfuran and the Comparison to 2-Methylfuran and Furan," *Energy & Fuels*, vol. 8, p. 5372–5381, 2015.
- [85] D. Liu, C. Togbé, T. Luc-Sy and et al, "Combustion chemistry and flame structure of furan group biofuels using molecular-beam mass spectrometry and gas chromatography—Part I: Furan," *Combustion and Flame*, vol. 161, p. 748–765, 2014.
- [86] N. Xu, W. Yingtao, C. Tang and et al, "Experimental study of 2, 5-dimethylfuran and 2-methylfuran in a rapid compression machine: comparison of the ignition delay times and reactivity at low to intermediate temperature," *Combustion and Flame*, vol. 168, pp. 216-227, 2016.
- [87] M.A. Eldeeb and B. Akih-Kumgeh, "Reactivity Trends in Furan and Alkyl Furan Combustion," *Energy Fuels*, vol. 28, pp. 6618-6626, 2014.
- [88] M.A. Eldeeb and B. Akih-Kumgeh, "Investigation of 2,5-dimethyl furan and iso-octane ignition," *Combust. Flame*, vol. 162, p. 2454–2465, 2015.
- [89] Z. Gao, H. Erjiang, X. Zhaohua, G. Yin and Z. Huang, "Effect of 2, 5-Dimethylfuran Addition on Ignition Delay Times of N-Heptane at High Temperatures," *Frontiers in Energy*,, vol. 13, no. 3, pp. 464-73, 2019.
- [90] X. Wu, Z. Huang, X. Wang and et al, "Laminar burning velocities and flame instabilities of 2,5-dimethylfuran–air mixtures at elevated pressures," *Combust. Flame*, vol. 158, pp. 539-549, 2011.
- [91] X. Wu, Z. Huang, C. Jin, X. Wang and L. Wei, "Laminar burning velocities and Markstein lengths of 2,5-dimethylfuran-air premixed flames at elevated temperatures," *Combust. Sci. Technol*, vol. 183, pp. 220-237, 2011.
- [92] X. Wu, Z. Huang, C. Jin and et al, "Measurements of laminar burning velocities and Markstein lengths of 2,5-dimethylfuran-air-diluent premixed flames," *Energy Fuels*, vol. 23, p. 4355–4362, 2009.

- [93] AVL List GmbH, Theory AVL Boost Version 2013.2, 2013.
- [94] Hyundai, Part Catalog (for industrial use)-Diesel engine D6A. Hyundai Motor Co., Ltd, 11/2020.