

DOI: 10.7652/xjtub201406021

掺氢对二甲醚预混层流燃烧特性的影响

陈朝阳¹, 耿莉敏¹, 巩静², 汤成龙², 张春化¹

(1. 长安大学汽车学院, 710064, 西安; 2. 西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 利用定容燃烧弹试验和化学反应动力学数值模拟相结合的方法,研究了不同氢气掺混比下的二甲醚-氢气-空气预混层流火焰特性,分析了氢气掺混量(掺氢比)对二甲醚预混层流燃烧速度、绝热火焰温度以及火焰中主要活化自由基的影响。试验结果显示:随掺氢比的增大,混合气体的层流燃烧速度、绝热火焰温度逐渐增大,且在掺氢比小于80%时增大幅度较小,在掺氢比大于80%时,增大幅度较大;掺氢比较小时,混合燃料燃烧初期,火焰中会有一定量的氢气生成,说明混合燃料燃烧过程中,二甲醚会被优先氧化分解,在掺氢比较小的混合燃料燃烧过程中二甲醚的氧化分解占主导地位;随掺氢比的增大,火焰中自由基的浓度逐渐增大,大掺氢比时H自由基浓度增大幅度更为明显,H自由基浓度随掺氢比增大的剧增导致层流燃烧速度的剧增。

关键词: 二甲醚; 氢气; 预混层流; 定容燃烧弹; 数值模拟

中图分类号: TK16 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2014)06-0122-05

Influence of Hydrogen Addition on Combustion Characteristics of Premixed Laminar Dimethyl Ether Flames

CHEN Zhaoyang¹, GENG Limin¹, GONG Jing², TANG Chenglong², ZHANG Chunhua¹

(1. School of Automobile, Chang'an University, Xi'an 710064, China;

2. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Premixed laminar dimethyl ether-hydrogen-air flames with different hydrogen addition ratios are investigated experimentally and numerically to reveal the influences of hydrogen addition on dimethyl ether combustion, including laminar flame rate, adiabatic flame temperature and free radicals in flame. The results show that with the increasing hydrogen addition ratio, laminar flame rate and adiabatic flame temperature of mixtures rise, the rising scope is smaller for hydrogen addition ratio lower than 80%, and greater for the ratio higher than 80%; a little amount of hydrogen is produced at the initial combustion stage for low hydrogen addition ratio, which means that dimethyl ether is oxidized previously in blended mixtures and the oxidization of dimethyl ether plays a dominant role in combustion; the fractions of free radicals increase with increasing hydrogen addition, and obviously increasing of H fraction significantly accelerates laminar flame rate for high hydrogen addition ratio.

Keywords: Dimethyl ether; Hydrogen; premixed laminar; constant volume combustion bomb; numerical simulation

石油供给问题的日益紧张和排放法规的日益严格,使清洁石油替代燃料的研究成为内燃机研究与

收稿日期: 2013-11-25。 作者简介: 陈朝阳(1982—),女,博士,讲师。 基金项目: 陕西省自然科学基金资助项目(2012JQ7031);中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(CHD2012JC049)。

网络出版时间: 2014-03-19

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20140319.1749.005.html>

发展中的热点问题。二甲醚和氢气被认为是目前最有发展前景的洁净替代燃料。二甲醚可以从煤、天然气、生物质等多种原料中大量制取,其十六烷值高,分子中不含 C—C 化学键,且本身含氧,是适用于压燃式发动机的优良燃料^[1]。发动机燃用二甲醚的优势在于低噪音、低碳烟、低 CO 以及低 NO_x 排放^[2-4]。氢气点火能量低,火焰传播速度快,可燃极限宽,在燃烧时可释放出 OH、H、O 等活性很高的自由基。氢气与碳氢燃料掺混燃烧的研究结果表明,在天然气中掺混少量氢气,可以加快燃烧速度,扩展燃料燃烧极限,从而降低有害气体的排放,提高热效率^[5-6]。

层流燃烧速度是表征混合气燃烧特性的重要参数,在燃烧科学研究的诸多方面有重要的意义。准确的层流燃烧速度值不仅可以用来验证化学反应动力学模型的有效性,也是发动机模拟中湍流燃烧模型的基本输入参数。二甲醚氢气混合气的预混层流燃烧基础研究表明,掺氢能明显提高二甲醚的火焰传播速度^[7],但氢气对二甲醚燃烧细节的影响尚不清楚,因此有必要将试验和理论研究结合起来,从宏观和微观两方面系统研究掺氢对二甲醚燃烧细节的影响,进而为二甲醚发动机的掺氢研究提供理论依据和数据支持。

1 试验与数值模拟方法介绍

本文试验部分是在西安交通大学动力工程多相流国家重点试验室的定容燃烧弹上进行的。试验系统包括定容燃烧弹、加热装置、点火装置、压力采集设备和纹影摄像系统,其中定容燃烧弹是一个内腔

直径为 180 mm、长 210 mm 的圆柱体,容弹两圆形底面装有直径为 80 mm 的石英玻璃视窗,为燃烧可视化测量提供光学通路。试验系统布置如图 1 所示。

掺氢比 $\varphi(\text{H}_2)$ 定义为氢气在二甲醚-氢气混合燃料中的体积分数,即

$$\varphi(\text{H}_2) = V_{\text{H}_2} / (V_{\text{DME}} + V_{\text{H}_2}) \tag{1}$$

式中: V_{H_2} 和 V_{DME} 分别为氢气和二甲醚在混合燃料中的分体积。当量比 ϕ 定义为单位体积混合燃料完全燃烧所需空气量与实际供给空气量的比值,本文中只讨论了理论当量比下氢气掺混对二甲醚燃烧的影响情况。

试验中,首先依据掺氢比和燃空当量比计算出所需的氢气、二甲醚及空气的体积分数,然后根据分压定律在容弹中依次注入氢气、二甲醚和空气,形成均匀混合气。待混合气静止后利用电感放电式电极点燃混合气,同时启动数字采集系统同步采集燃烧压力,并触发高速摄像机对火焰进行拍照。本试验采用美国 Redlake 公司生产的 HG-100K 型号高速摄像机,选取的拍摄速度为 10 000 幅/s。

根据试验所测的火焰发展照片,依据球形扩展火焰理论,用线性处理的方法得到无拉伸火焰传播速度,再根据火焰前锋面上的质量守恒,计算出混合气的无拉伸层流燃烧速度,具体求解过程参见文献[8]。用定容燃烧弹法测定可燃混合气的层流燃烧速度时,假定未燃区气体温度和压力变化很小,所以测量条件限定在火焰发展初期未燃区压力变化很小的阶段。同时为了避免点火能量对火核发展的影响,火焰半径又不能取得太小。为避免点火能量的影响同时保证准定压的测量条件,本文所取火焰半

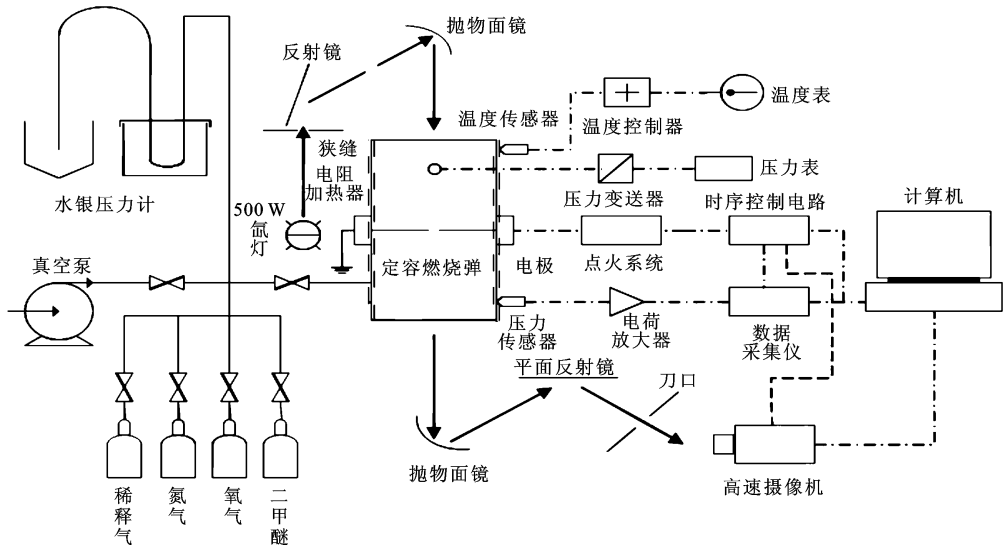


图 1 定容燃烧弹法试验系统

径范围限制在 6~26 mm 之间。

模拟研究采用 Zhao 等人发展的用于二甲醚燃烧的化学反应动力学机理^[9] (该机理是计算二甲醚燃烧过程的优化机理, 包括 55 种反应组分和 290 个基元反应), 使用 PREMIX CODE 程序进行考虑热扩散效应的一维层流火焰模拟, 并将模拟结果与试验值进行对比。

2 研究结果分析

绝热火焰温度是表征可燃混合气热力学特性的一个重要参数, 它不仅体现了混合物的放热性能, 还对火焰熄灭、火焰传播和着火极限等有着重要的影响。绝热火焰温度的大小在一定程度上可以间接反映化学反应速率的大小以及层流燃烧速度的快慢。本文中的绝热火焰温度利用 CHEMKIN 软件中的热平衡模块通过热平衡计算获得。二甲醚-氢气-空气预混合气在化学当量比条件下的绝热火焰温度及层流燃烧速度随掺氢比的变化关系如图 2 所示。从图 2 可以看出, 层流燃烧速度的模拟结果与试验结果得到了很好的吻合。随着掺氢比的增大, 二甲醚-氢气-空气混合气的绝热火焰温度和层流燃烧速度均呈指数增长。掺氢比较小时, 绝热火焰温度和层流燃烧速度随掺氢比增大的增长幅度较小, 掺氢比较大时, 增长幅度较大, 尤其在掺氢比大于 80% 以后, 混合气的绝热火焰温度和层流燃烧速度均随掺氢比的增大急剧增大。胡二江等人在甲烷掺氢的研究中也发现了相同的规律^[10]。

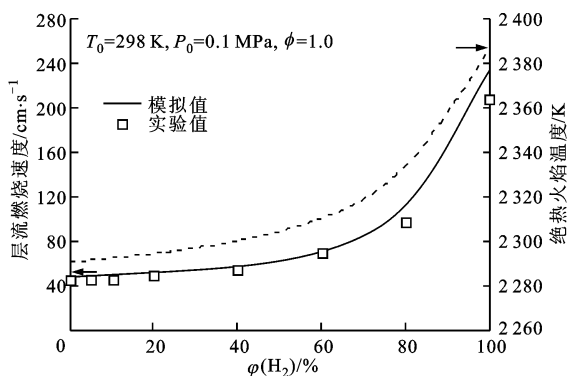


图 2 绝热火焰温度和层流燃烧速度随掺氢比的变化

二甲醚分子中的 C—H 键键能比氢气分子中的 H—H 键键能小, 二甲醚分子的脱氢反应比氢气分子的脱氢反应容易进行, 混合燃料燃烧过程中会优先氧化二甲醚。同时, 氢气也是二甲醚燃烧分解过程的主要产物之一。图 3 给出了数值模拟计算得到的二甲醚-氢气-空气火焰中氢气的摩尔分数 $x(\text{H}_2)$

的分布情况。由图 3 可以看出, 掺氢比较小 ($\varphi(\text{H}_2) < 40\%$) 时, 氢气的摩尔分数先逐渐增大, 达到一定值后又逐渐减小, 最终达到一个稳定值保持不变, 说明在掺氢比较小的混合气燃烧初期, 火焰中有一定量的氢气生成, 这也充分说明在掺氢比较小的混合燃料燃烧过程中, 二甲醚的氧化分解占主导地位, 氢气参与化学反应的机会很少。随着掺氢比的增大, 火焰中二甲醚的浓度逐渐减小, 在氢气的排挤作用下, 二甲醚处于非常稀的燃烧条件, 火焰中的二甲醚消耗完后仍有较多的氧气存在, 氢气参与化学反应的机会也逐渐增多。由图 3 也可以看出, 掺氢比大于 60% 以后, 火焰中氢气的摩尔分数随着火焰位置的增大在稳定一定距离后迅速减小, 说明在掺氢比较大的混合气燃烧过程中, 氢气参与燃烧的机会增大。一旦有氢气参与化学反应, 就会释放出 H、OH 和 O 等活性很强的自由基, 参与燃烧的氢气越多, 释放出的自由基越多, 层流燃烧速度也增长越快。

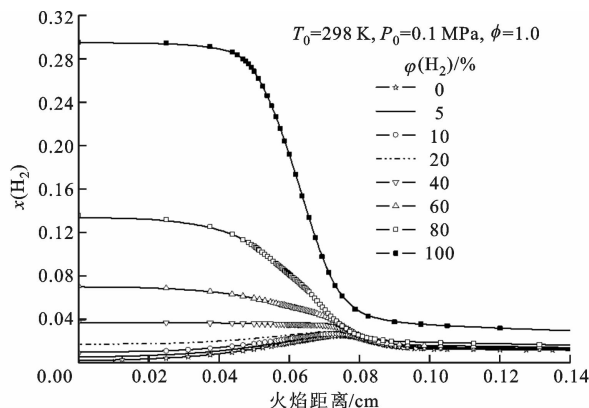
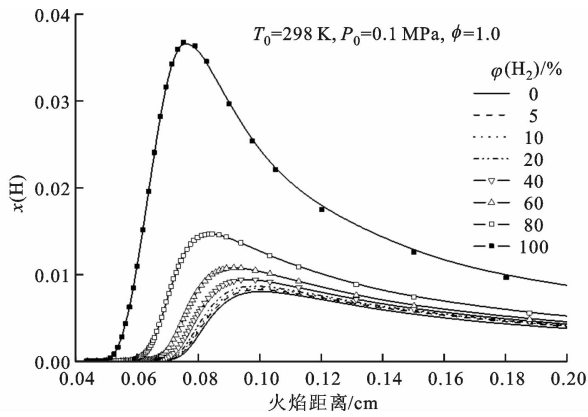


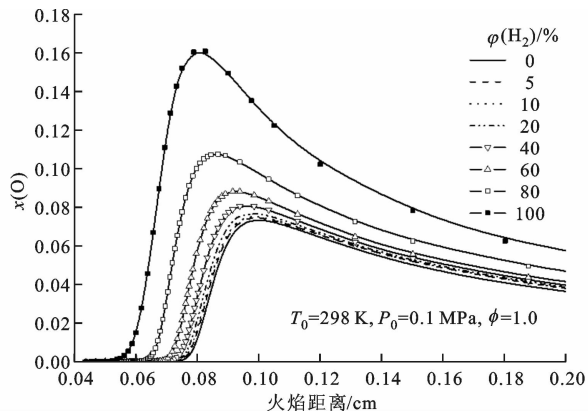
图 3 二甲醚-氢气-空气火焰中氢气的摩尔分数空间分布

自由基具有不成对电子, 因此具有很高的活性, 由其引发的链传播和链引反应是火焰传播的动力, 在火焰传播和燃烧中起着重要的作用。火焰中总自由基的浓度一定程度上决定了化学反应速率的大小和火焰传播速度的快慢。二甲醚-氢气-空气混合气火焰中自由基的摩尔分数分布如图 4 所示。由图 4 可以看出, 随着掺氢比的增大, 火焰中 H、O 及 OH 自由基的摩尔分数逐渐增大, 且其最大值位置朝火焰冷壁面方向移动。混合气中二甲醚及氢气的化学反应路径影响了火焰中自由基浓度的变化规律。

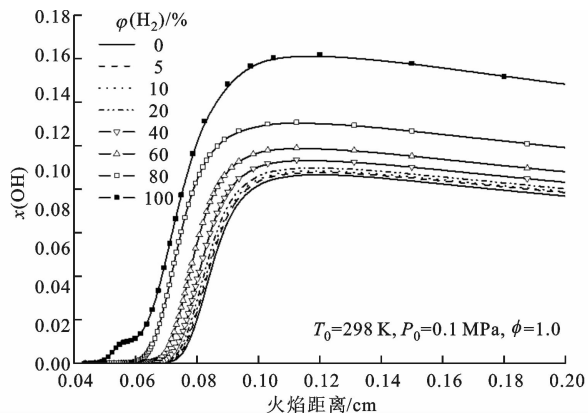
二甲醚分子中 C—O 键键能比氢气分子中 H—H 键键能大, 因此混合燃料燃烧过程中二甲醚会优先参与反应。火焰中的二甲醚主要通过脱氢反应消耗, 其主要的脱氢反应都是消耗自由基的反应, 如式 (2)~式 (4) 所示的 R240、R241 和 R243 反应



(a) H 自由基摩尔分数

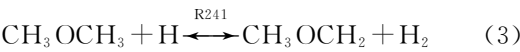


(b) O 自由基摩尔分数

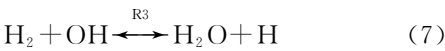
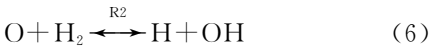


(c) OH 自由基摩尔分数

图 4 二甲醚-氢气-空气火焰自由基摩尔分数空间分布



这些反应与氢气的主要消耗反应(R2 和 R3)及主要链支化反应(R1)竞争自由基,反应式如下



在纯二甲醚火焰及掺氢比较小的二甲醚-氢气混合燃料火焰发展初期,二甲醚的脱氢反应消耗了火焰中大量的自由基,使得火焰发展初期自由基的浓度较小,随着二甲醚逐渐被消耗,火焰中的自由基浓度逐渐上升。随掺氢比的增大,火焰中二甲醚的浓度逐渐减小,二甲醚脱氢反应所消耗的自由基的数量也逐渐减小,氢气的主要消耗反应及主要链支化反应的反应速率逐渐增大,自由基浓度也逐渐增大。随着掺氢比增大,火焰厚度逐渐减小,自由基浓度峰值的相位也逐渐向火焰前端移动。

图 5 给出了二甲醚-氢气-空气混合气火焰中自由基的最大摩尔分数。从图 5 可以看出,火焰中自由基的浓度随掺氢比的增大逐渐增大。从自由基摩尔分数的增大程度来看,大掺氢比时增大幅度更大,且 H 自由基的增大幅度要比 O 和 OH 自由基的增大幅度要大。H 自由基不仅化学反应活性很高,又具有很强的扩散能力,大掺氢比下,由于 H 自由基浓度随掺氢比的急剧增大导致了混合气的层流燃烧速度随掺氢比的增大急剧增大。

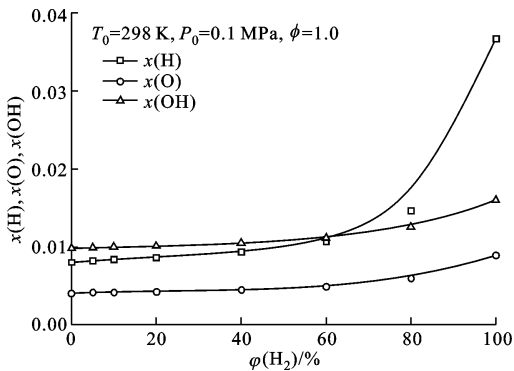


图 5 二甲醚-氢气-空气火焰中自由基的最大摩尔分数

3 结 论

本文对不同掺氢比下的二甲醚-氢气-空气层流预混火焰进行了试验和数值模拟研究,着重分析了掺氢对混合气的层流燃烧速度、绝热火焰温度及火焰中主要活化自由基的影响。研究结果表明:

(1)混合气的层流燃烧速度和绝热火焰温度都随掺氢比的增大按指数规律增大;

(2)掺氢比较小时,混合燃料燃烧初期,火焰中会有一定量的氢气生成,说明混合燃料燃烧过程中,二甲醚会被优先氧化分解,在掺氢比较小的混合燃

料燃烧过程中二甲醚的氧化分解占主导地位;

(3)随掺氢比增大,火焰中自由基的浓度逐渐增大,大掺氢比时H自由基浓度增大幅度更为明显,H自由基浓度随掺氢比增大的剧增导致层流燃烧速度的剧增。

参考文献:

- [1] TENG H, MCCANDLEEE J C, SCHNEYER J B. Thermodynamic properties of dimethyl ether-an alternative fuel for compression-ignition engines [J]. SAE Transactions, 2004, 113(4): 134-157.
- [2] 李跟宝,周龙宝. 柴油机燃用二甲醚/柴油混合燃料时的特性研究 [J]. 内燃机工程, 2010, 31(1): 13-16.
LI Genbao, ZHOU Longbao. Research on operation characteristics of compression ignition engine fueled with dimethyl ether/diesel blend [J]. Chinese Internal Combustion Engine Engineering, 2010, 31(1): 13-16.
- [3] 李君,朱昌吉,马光兴,等. 柴油机燃用二甲醚排放特性的研究 [J]. 燃烧科学与技术, 2003, 9(3): 257-260.
LI Jun, ZHU Changji, MA Guangxing, et al. Study on diesel engines fueled with dimethyl ether [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2003, 9(3): 257-260.
- [4] 鲁骏,黄震,乔信起,等. 直列泵柴油机燃用二甲醚(DME)的燃烧排放特性分析 [J]. 内燃机工程, 2006, 27(6): 36-39.
LU Jun, HUANG Zhen, QIAO Xinqi, et al. Combustion and emission analysis of DME on diesel engine with inline pump [J]. Chinese Internal Combustion Engine Engineering, 2006, 27(6): 36-39.
- [5] 王金华,黄佐华,刘兵,等. 直喷发动机燃用天然气掺氢混合燃料的性能与排放 [J]. 西安交通大学学报, 2006, 40(5): 521-526.
WANG Jinhua, HUANG Zuohua, LIU Bing, et al. Performance and emissions of a direct-injection engine fueled with natural gas/hydrogen blends [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2006, 40(5): 521-526.
- [6] SCHEFER R W. Hydrogen enrichment for improved lean flame stability [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2003, 28(10): 1131-1141.
- [7] 陈亘,陈朝阳,黄佐华,等. 二甲醚-氢气-空气预混合气燃烧基础研究 [J]. 西安交通大学学报, 2008, 42(5): 542-545.
CHEN Gen, CHEN Zhaoyang, HUANG Zuohua, et al. Experimental study on premixed combustion of dimethyl ether-hydrogen-air mixtures [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2008, 42(5): 542-545.

- [8] HUANG Zuohua, WANG Qian, YU Jinrong, et al. Measurement of laminar burning velocity of dimethyl ether-air premixed mixtures [J]. Fuel, 2007, 86(15): 2360-2366.
- [9] ZHAO Z, CHAOS M, KAZAKOV A, et al. Thermal decomposition reaction and a comprehensive kinetic model of dimethyl ether [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2007, 40(1): 1-18.
- [10] HU Erjiang, HUANG Zuohua, HE Jiajia, et al. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane-hydrogen-air flames [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(11): 4876-4888.

[本刊相关文献链接]

- 陈朝阳,张春化,陈昊,等. 当量比对二甲醚氧化分解过程的影响. 2014, 48(5): 32-36. [doi: 10. 7652/xjtuxb201405 006]
- 付子文,王长安,翁青松,等. 水洗对准东煤煤质特性影响的实验研究. 2014, 48(3): 54-60. [doi: 10. 7652/xjtuxb201403 011]
- 张猛,王金华,谢永亮,等. $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{air}$ 预混湍流火焰前锋面结构探测. 2013, 47(11): 14-18. [doi: 10. 7652/xjtuxb201311 003]
- 王金华,张猛,谢永亮,等. 合成气纯氧高压预混湍流火焰结构研究. 2013, 47(10): 87-90. [doi: 10. 7652/xjtuxb201310 015]
- 胥宇鹏,熊源泉,周海军,等. 水平管段高压超浓相煤粉输送特性的数值模拟. 2012, 46(5): 38-43. [doi: 10. 7652/xjtuxb 201205007]
- 盛新堂,黄瑾,王小荣,等. 自然吸气二甲醚发动机排气再循环 NO_x 满足国Ⅳ、V排放标准的研究. 2013, 47(7): 18-22. [doi: 10. 7652/xjtuxb201307004]
- 李东昌,汪映,孟庆斌,等. 二甲醚预混比对预混压燃发动机性能影响的试验研究. 2013, 47(3): 48-52. [doi: 10. 7652/xjtuxb201303009]
- 高广新,袁竹林,周阿朋,等. 二甲醚发动机燃料供给系统偶件间隙泄漏测量. 2012, 46(11): 12-16. [doi: 10. 7652/xjtuxb 201211003]
- 孙艳军,王晓坡,周永,等. 一个新的二甲醚气液相密度方程. 2012, 46(9): 1-5. [doi: 10. 7652/xjtuxb201209001]
- 盛新堂,高广新,吴国伟,等. 二甲醚发动机燃料喷射过程及其影响因素研究. 2012, 46(1): 9-12. [doi: 10. 7652/xjtuxb 201201002]
- 张可,吴江涛,高辉,等. 爆炸极限实验系统研制及二甲醚/HFC125的可燃性研究. 2010, 44(7): 28-32. [doi: 10. 7652/xjtuxb201007007]

(编辑 刘杨 荆树蓉)