

DOI: 10.7652/xjtuxb201807011

异辛烷掺混乙醇在高温下层流预混燃烧特性的研究

张烨苗, 李倩倩, 闫治宇, 黄佐华

(西安交通大学动力工程多相流重点国家实验室, 西安, 710049)

摘要: 利用高速纹影摄像系统,在定容燃烧弹上对异辛烷掺混乙醇的层流预混燃烧特性进行了研究,获得了两组压力为0.1、0.5 MPa,5组乙醇体积掺混比为0、0.2、0.4、0.6、0.8、1.0,初始温度为433 K下的层流火焰速率。为了去除火焰面拉伸作用的影响,数据处理采用非线性方法进行推导。研究表明,在不同当量比条件下,异辛烷/乙醇混合燃料的层流火焰速率均随初始压力的增加而降低,随乙醇体积掺混比的增加而逐渐增大。根据一步总反应假设理论,对该实验规律进行了分析,并且计算了热力学参数、输运特性参数和总体活化能,发现了化学反应动力学因素对层流燃烧速率的变化所起的主导作用。利用Chemkin软件,对预混层流燃烧速率进行了数值模拟,结果表明,Dagaut模型对异辛烷/乙醇混合燃料的预测效果更好。另外,采用Dagaut模型,对总体反应路径和火焰面结构进行了分析,发现乙醇的替代作用是乙醇掺入后对混合燃料层流燃烧速率起促进作用的原因。

关键词: 层流燃烧速率;异辛烷/乙醇混合燃料;化学反应机理

中图分类号: TK02 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2018)07-0074-06

Laminar Flame Premixed Combustion Characteristics of Ethanol-Isooctane Blends at Elevated Temperatures

ZHANG Yemiao, LI Qianqian, YAN Zhiyu, HUANG Zuohua

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The laminar flame speeds of isooctane/ethanol/air mixtures were measured with the outwardly expanded spherical flame and high-speed schlieren photography over a wide range of ethanol blending ratios (0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0) at two initial pressures (0.1, 0.5 MPa) and elevated initial temperature (433 K). Nonlinear methodology was employed to remove the stretch effect in the data processing. Results at three equivalent ratios showed that the laminar flame speeds of the blends significantly increase with the decrease of initial pressure and slightly increase with blending ratio of ethanol. The effect of blending ratio on the laminar flame speed of the mixtures was explained through one-step total reaction hypothesis theory. The overall activation energy was obtained by calculating the parameters regarding the thermodynamics and transport behaviors, and the chemical kinetics was found to dominate the laminar flame speed variation. The experimental data were adopted to validate two models and the Dagaut model yielded better prediction on our experimental results. Finally, the effect of ethanol addition was explained through the analysis on the reaction pathway and flame structure, revealing that ethanol substitution is the intrinsic cause leading to the variation of laminar flame speeds.

收稿日期: 2017-12-04。 作者简介: 张烨苗(1994—),女,硕士生;李倩倩(通信作者),女,副教授。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51406159,51776163)。

网络出版时间: 2018-04-20

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20180420.1538.014.html>

Keywords: laminar flame speed; isooctane-ethanol blended fuel; chemical kinetics

交通运输行业对石油基能源的严重依赖,不仅带来了能源紧缺的问题,而且造成了严重的环境污染。目前,优化传统燃料燃烧过程和寻找可再生清洁能源替代燃料已经成为最有效的解决途径。乙醇作为氧含量和辛烷值较高的低碳醇,将其添加进汽油中使用,不仅可降低碳烟、CO、苯的排放^[1-2],还可增强汽油的抗爆性从而提高发动机的压缩比。另外,乙醇的火焰传播速度快、着火界限广,非常有利于发动机的稀薄燃烧和高 EGR 率燃烧^[3-5]。然而,乙醇的亲水性强、燃烧热值较低,目前主要与汽油等传统燃料掺混进行使用,异辛烷(iC_8H_{16})常常和正庚烷被用作汽油的基础替代物^[6]。

层流燃烧速度是研究湍流燃烧的基础,可用来验证化学反应机理和优化发动机设计。已有学者对乙醇掺混异辛烷在层流燃烧特性方面的研究开展了相关工作。Broustail 等测量了常压下初始温度为 393 K,掺混比包含 0、25%、50%、75%、100% 的乙醇-异辛烷混合燃料的层流燃烧速率^[7];Lipzig 等利用热流量法分别测量了常压下初始温度为 298、338 K 异辛烷/正庚烷-乙醇固定掺混比下的层流燃烧速率^[8],与冲火焰法等测量到的数据做了对比,分析了误差;Varea 等研究了初始压力对异辛烷和乙醇单质的层流特性影响^[9],包括速率和马克斯坦长度,并且着重分析了当量比和掺混比对压力指数因子的影响,但并未涉及到掺混在高压下的情况;化学反应机理方面,Frassoldati 等发展了乙醇与汽油替代燃料的混合模型,并用乙醇氧化反应过程中的物种浓度、着火延迟等多组数据进行了验证^[10],然而层流燃烧速度进行验证时主要集中在常压下,高压下该机理对燃烧宏观特性的预测准确性并不能完全保证;郑东等发展了相关混合燃料高温氧化的反应模型^[11-13],但模型机理的完整性和各个工况下的准确性都需进一步验证。

综上分析,关于乙醇掺混异辛烷在层流燃烧特性方面的研究虽有很多,但在实验测量工况上主要在常压下进行,高压下的测量不多。本文补充了宽掺混比范围下的高压数据,在保证数据可靠性的情况下,利用层流燃烧速率对已有的两个模型进行了验证。前人研究中关于乙醇掺入对混合气层流特性的影响只对实验现象进行了描述,本研究结合化学反应动力学对实验现象做了具体的分析和解释。

1 实验装置和测量

定容燃烧弹实验装置由定容燃烧弹、加热系统、点火系统、数据采集系统和高速纹影摄像系统组成,如图 1 所示。其中定容燃烧弹的内径为 180 mm,体积为 5.8 L,两侧装有对称的石英玻璃,直径为 80 mm。容弹的加热依赖于缠绕在容弹外表面的加热带,其功率为 1 500 W,容弹中心装有 K 型的热电偶用来监控容弹内混合物的温度,精确度在 1 K 左右。

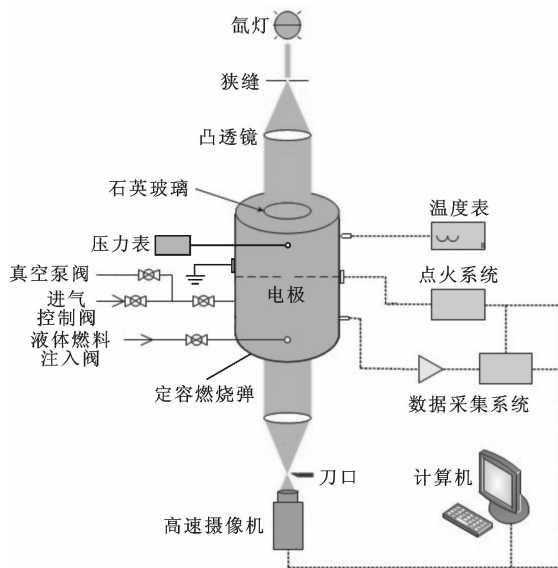


图 1 定容燃烧弹实验装置图

实验中由高速摄像机记录火焰从火核形成到发展至视窗边缘的全部过程,数据处理则借助于 Matlab 程序对拍摄到的火焰图像进行降噪、膨胀和腐蚀处理,将图像的灰度梯度最大值像素点作为球形火焰的圆弧边界,最后利用面积法得到火焰传播过程中各个时刻的半径。通过对时间微分,得到已燃混合气的拉伸传播速度

$$S_b = \frac{dR_f}{dt} \quad (1)$$

式中: S_b 为拉伸火焰传播速率; R_f 为火焰半径。

由拉伸传播速度推导无拉伸已燃混合气层流火焰传播速度,Kelly 等已做了细致的研究,推导出了非线性数据处理方法的相关模型^[14-15]。本文选取文献^[15]的非线性外推法,具体公式为

$$S_b = S_b^0 \frac{2S_b^0 L_b}{R_f} \quad (2)$$

式中: S_b^0 为无拉伸的火焰传播速率; L_b 为马克斯坦长度。根据质量守恒定律,可得无拉伸的层流火焰

速率

$$S_u^0 = \frac{\rho_b}{\rho_u} S_b^0 \quad (3)$$

式中: S_u^0 为层流燃烧速率; ρ_b 为已燃混合气密度; ρ_u 为未燃混合气密度。

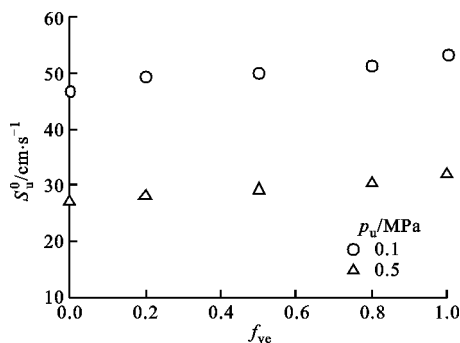
实验均在 433 K 的初始温度下展开, 分别测量了 0.1 和 0.5 MPa 两个初始压力下实验数据, 乙醇的液体体积掺混比 f_{ve} 分别为 0、0.2、0.5、0.8、1.0, 燃料与空气混合的当量比 ϕ 为 0.8、1.0、1.2。为去除点火和容弹壁面对火焰传播的影响, 本文进行数据处理选取的火焰半径范围为 8~22 cm。

2 数值模拟

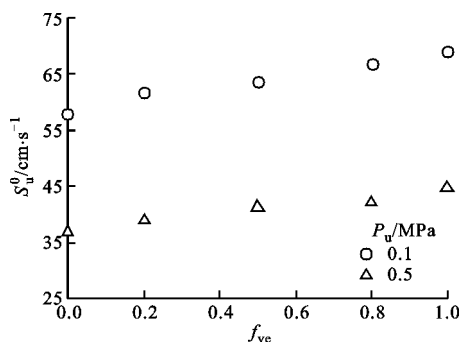
利用文献[16]中的两个模型进行模拟计算: 对于基础替代燃料(PRF)、芳香烃类、醇类和醚类等多种混合燃料构建的包括 225 个反应物、7 645 个基元反应的 CRECK 模型; 对于乙醇、正丁醇和异辛烷混合燃料构建的包括 228 个反应物、1 737 个基元反应的 Dagaut 模型。计算采用混合物平均的输运方程, 并考虑了 Soret 扩散效应。

3 结果与讨论

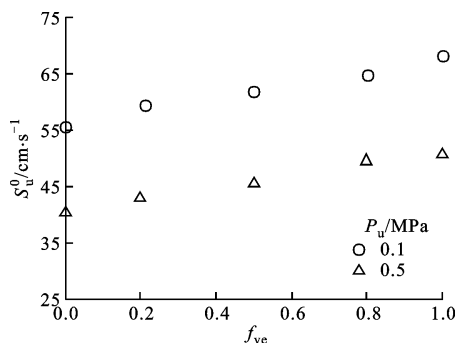
S_u^0 随乙醇体积掺混比 f_{ve} 的变化如图 2 所示, 可知初始压力 $P_u=0.1, 0.5$ MPa 时, 随着乙醇体积掺混比的增大, S_u^0 均呈现增大的趋势。



(a) $\phi=0.8$



(b) $\phi=1.0$



(c) $\phi=1.2$

图2 S_u^0 随乙醇体积掺混比的变化

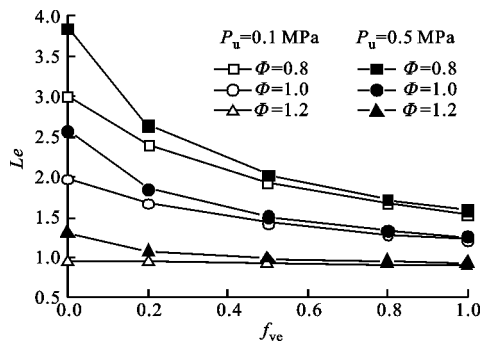
3.1 乙醇掺混对层流燃烧速率影响的原因

根据一步总反应假设, 可得关系式

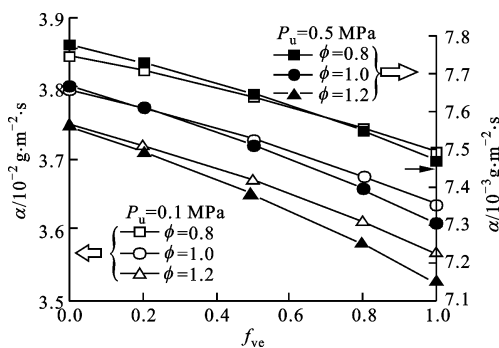
$$(\rho_u S_u^0)^2 \propto \left(\frac{\lambda}{c_p} \right) Le \left[\exp \left(\frac{-E_g}{R_0 T_{ad}} \right) \right] \quad (4)$$

式中: E_g 为总体活化能; R_0 为通用气体常数; T_{ad} 为绝热火焰温度; Le 为路易斯数; $\alpha = \lambda / (c_p \rho_u)$ 为层流火焰速率与表征输运特性的扩散系数。

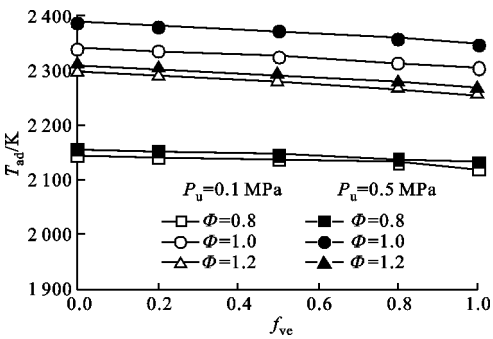
与 S_u^0 有关的 3 个参数随乙醇体积掺混比的变化如图 3 所示。由图 3 可知, 在不同初始压力下, 随着乙醇体积掺混比的增加, 这 3 个参数都呈现降低或几乎不变的趋势, 掺混乙醇而造 S_u^0 增大的主要原因是化学反应动力学方面的因素, 本文将借助于异成的 S 辛烷/乙醇混合燃料的化学反应机理模型进行反应动力学的分析。



(a) 路易斯数 Le



(b) 扩散系数 α

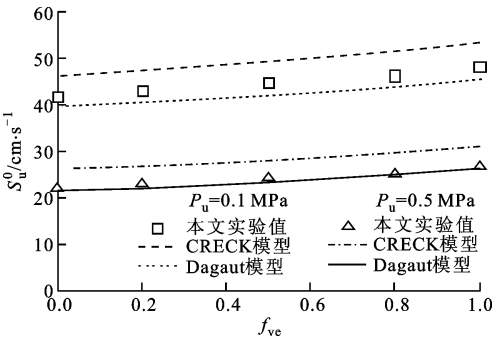


(c)绝热火焰温度 T_{ad}

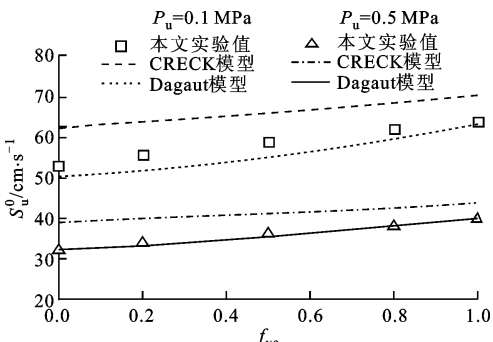
图 3 与 S_u^0 有关的 3 个参数随乙醇体积掺混比的变化

3.2 模型选择

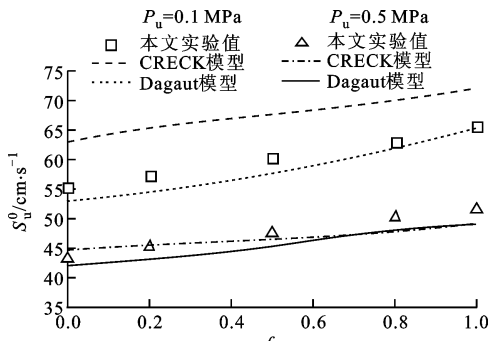
图 4 为 CRECK 和 Dagaut 模型的预测效果图。由图 4 可知,无论在常压还是高压下,Dagaut 模型



(a) $\phi = 0.8$



(b) $\phi = 1.0$

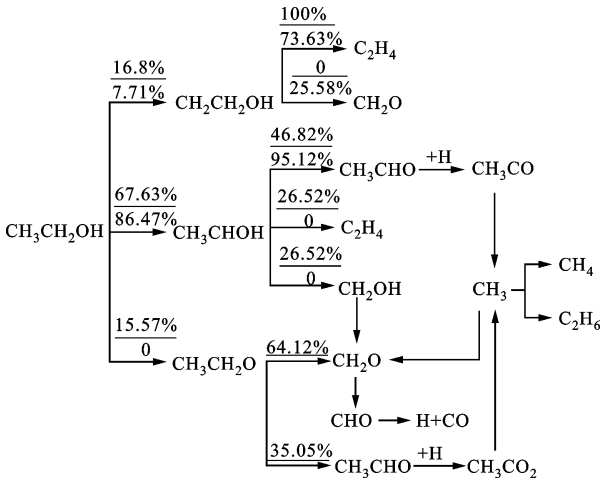


(c) $\phi = 1.2$

图 4 $T_u = 433\text{ K}$ 时不同当量比下模拟值与实验值对比

的预测效果都要优于 CRECK 模型,Dagaut 模型在变化趋势和具体数值上都与实验结果吻合,而 CRECK 模型的预测结果则出现了较大的偏差。

利用两个模型对乙醇的具体反应做了详细分析,如图 5 所示,箭头所指为乙醇的反应路径及后续中间产物的生成途径,百分数表示该反应物在此路径中的消耗占比。由图 5 可知,Dagaut 模型中乙醇的初始脱氢反应主要发生在 3 个不同位置的碳原子上,并且乙醇脱氢后产物之一的消耗反应存在 3 条路径,而在 CRECK 模型中缺少了此类重要路径。在后期模拟计算中,本文将缺失的反应补全至 CRECK 模型中,发现预测效果要较之前有极大改善,证实了反应路径的缺失是 CRECK 模型预测不准的重要原因。



带下划线的值表示 Dagaut 模型中占比;

无下划线的值表示 CRECK 模型中占比

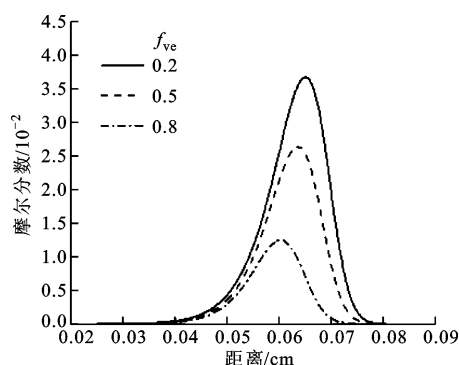
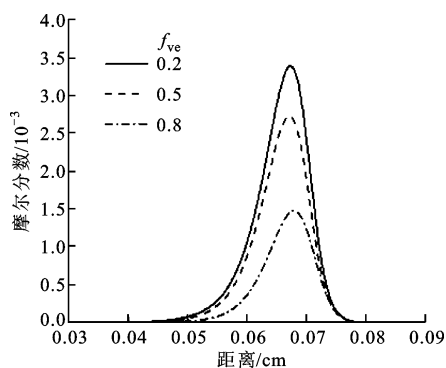
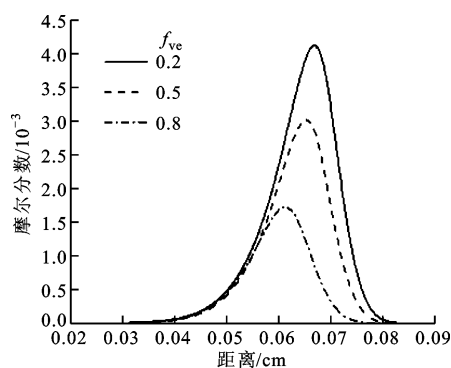
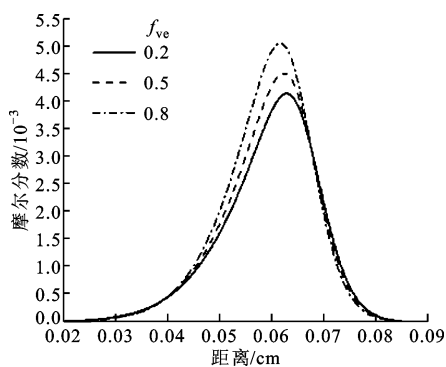
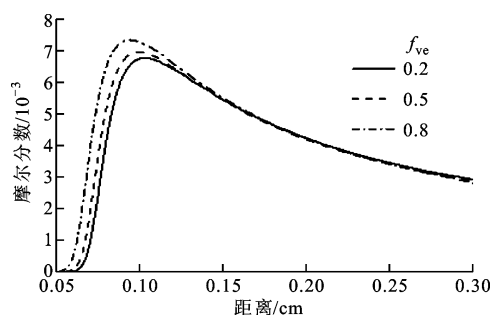
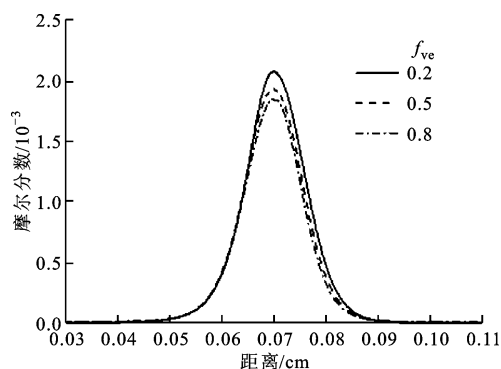
图 5 Dagaut 与 CRECK 模型中乙醇的反应路径对比

($P_u = 0.1\text{ MPa}$, $T_u = 433\text{ K}$, $f_{ve} = 0.2$, $\phi = 1.0$)

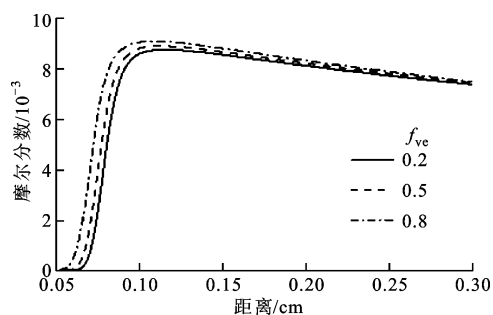
3.3 火焰结构分析

Li 等利用完善的异辛烷/甲醇混合燃料模型进行路径分析时发现,异辛烷在反应过程中会产生大量的 IC_4H_8 、 IC_4H_7 、 C_3H_6 等相对稳定的中间物种,这些物种在反应过程中会消耗 H、OH 等对反应活性起关键作用的自由基,从而导致最终的反应速率下降^[17]。文献[13]利用 JSR 装置,得到了异辛烷掺混正丁醇氧化过程中中间物种的分布, CH_3 、 C_3H_6 等参与抑制反应的物种浓度随着正丁醇体积掺混比的增加而减少,活性中间物种浓度上升,从而解释了实验现象。基于文献[13]的模型,对乙醇体积掺混比 $f_{ve} = 0.2, 0.5, 0.8$ 的异辛烷/乙醇混合气进行了火焰结构分析,重要中间物种的摩尔分数变化如图 6 所示。由图 6 可知,随着乙醇体积掺混比的逐渐

增加,异辛烷的占比下降,对火焰总体反应活性起抑制作用的中间物种 IC_4H_7 、 C_3H_6 、 IC_4H_8 和 CH_3 的

(a) IC_4H_8 (b) IC_4H_7 (c) C_3H_6 (d) C_2H_4 (e) CH_3 

(f) H



(g) OH

图6 重要中间物种的摩尔分数曲线

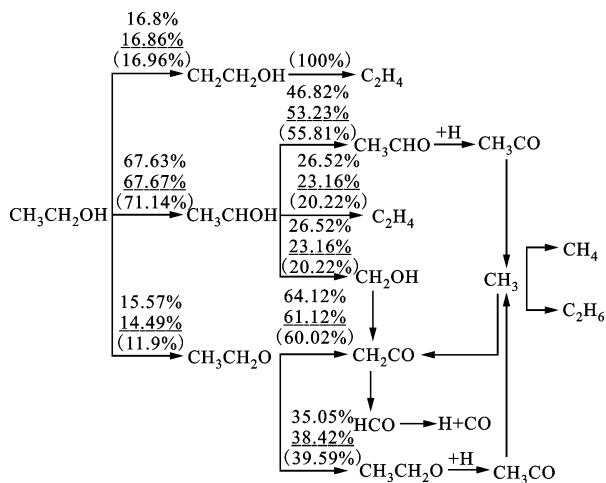
($P_u = 0.1 \text{ MPa}$, $T_u = 433 \text{ K}$, $\phi = 1.0$)

摩尔浓度减小,而对于火焰总体反应活性起促进作用的自由基 C_2H_4 的摩尔浓度增加。由于混合气火焰中不活跃中间产物含量减少,而活跃中间产物含量增多,使得控制火焰活性最重要的 H 和 OH 自由基的含量也相应增加,从而影响了混合气层流燃烧速率的增加。

3.4 反应路径分析

不同乙醇体积掺混比下混合燃料中乙醇的消耗反应路径如图7所示。由图7可知,在乙醇的反应过程中既存在诸如 $\text{HCO} + \text{M} = \text{H} + \text{CO} + \text{M}$ 产生活性自由基的链分支反应,又存在 CH_3 转化为 CH_4 和 C_2H_6 的链终止反应。并且对比不同掺混比下的乙醇反应路径可知,随着乙醇体积掺混比的逐渐增

大,链分支反应所占的比例逐渐下降,而链终止反应的占比上升。综合反应过程中中间物种的浓度变化分析可知,影响异辛烷/乙醇混合燃料层流燃烧速率上升的原因并不是乙醇添加带来的具体反应机理活性上的增强,而是乙醇的替代作用,即随着乙醇添加的增多,异辛烷的占比下降,反应速度更为迅速的乙醇对混合燃料的层流火焰速率起到了决定性作用。



无下划线、带下划线和加括号值分别为

$f_{ve} = 0.2, 0.5, 0.8$ 条件下的值

图 7 不同乙醇体积掺混比下乙醇的反应路径对比图

4 结 论

(1) 本文利用定容燃烧弹和高速摄像纹影系统,得到了异辛烷/乙醇混合气在初始压力为 0.1、0.5 MPa 时宽范围乙醇体积掺混比下的层流燃烧速率,结果显示, S_u^0 随初始压力的增加而降低,随乙醇掺混比的增加而增加。

(2) 本文基于一总反应假设理论,发现乙醇掺混比增加时,影响 S_u^0 上升的主要原因是化学反应动力学方面的问题。

(3) 利用实验数据对现有的 CRECK 和 Dagaut 两个模型进行了验证,发现 Dagaut 模型的机理预测效果优于 CRECK 模型的。

(4) 通过火焰结构分析和路径分析发现,随乙醇体积掺混比的增加,异辛烷/乙醇混合气 S_u^0 增加的主要原因是乙醇的替代作用。

参考文献:

[1] 董素荣, 宋崇林, 赵昌普, 等. 乙醇-汽油燃料汽油机非常规污染物的排放特性 [J]. 天津大学学报(自然科学与工程技术版), 2006, 39(1): 68-72.

DONG Surong, SONG Chonglin, ZHAO Changpu, et al. The emission characteristics of the unconventional pollutant of ethanol-gasoline gasoline engine [J]. Journal of Tianjin University (Natural Science and Engineering), 2006, 39(1): 68-72.

[2] SARATHY S M, WALD P O, HANSEN N, et al. Alcohol combustion chemistry [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2014, 44: 40-102.

[3] DEMIRBAS A. Biofuels sources, biofuel policy, biofuel economy and global biofuel projections [J]. Energy Conversion and Management, 2008, 49(8): 2106-2116.

[4] WANG S, JI C, ZHANG B. Effect of hydrogen addition on combustion and emissions performance of a spark-ignited ethanol engine at idle and stoichiometric conditions [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2010, 35(17): 9205-9213.

[5] ANDERSON J E, DICICCO D M, GINDER J M, et al. High octane number ethanol-gasoline blends: quantifying the potential benefits in the United States [J]. Fuel, 2012, 97: 585-594.

[6] 张庆峰, 郑朝蕾, 何祖威, 等. 基于响应曲面法的汽油替代混合物辛烷值的预测 [J]. 内燃机学报, 2011, 29(5): 427-430.

ZHANG Qingfeng, ZHENG Chaolei, HE Zuwei, et al. Prediction of octane number of gasoline substitute mixtures based on response surface method [J]. Journal of Internal Combustion Engine 2011, 29(5): 427-430.

[7] BROUSTAIL G, SEERS P, HALTER F, et al. Experimental determination of laminar burning velocity for butanol and ethanol iso-octane blends [J]. Fuel, 2011, 90(1): 1-6.

[8] VAN LIPZIG J P J, NILSSON E J K, DE GOEY L P H, et al. Laminar burning velocities of n-heptane, iso-octane, ethanol and their binary and tertiary mixtures [J]. Fuel, 2011, 90(8): 2773-2781.

[9] VAREA E, MODICA V, RENOU B, et al. Pressure effects on laminar burning velocities and Markstein lengths for isooctane-ethanol-air mixtures [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2013, 34(1): 735-744.

[10] FRASSOLDATI A, CUOCI A, FARAVELLI T, et al. Kinetic modeling of the oxidation of ethanol and gasoline surrogate mixtures [J]. Combustion Science & Technology, 2010, 182(4/5/6): 653-667.

(下转第 100 页)