

二甲醚层流预混双火焰熵损特性分析

米晓庆, 李格升, 米肖雄, 周梦妮, 刘彪, 豆晓宇, 张尊华

(武汉理工大学船海与能源动力工程学院, 430063, 武汉)

摘要: 为研究发动机先进燃烧模式中的低温燃烧过程, 解析二甲醚(DME)低温燃烧过程中的能质转换机制, 针对不同当量比、氮气摩尔分数、初始压力和初始温度条件下 DME/O₂/N₂ 混合物层流预混双火焰的产生条件、双火焰结构、化学反应路径以及熵产特性的进行了研究, 进一步解析了不同初始工况下双火焰的熵损特性, 揭示了低温燃烧双火焰阶段能量损失的关键因素。结果表明: 低压、低温和富燃工况下二甲醚层流预混双火焰特征显著, 该工况下火焰结构和熵产率沿火焰轴向距离均呈现“双峰”的变化趋势, 即具有两个峰值; CH₃OCH₂O₂ 和 HO₂ 自由基摩尔分数升高, 双火焰反应熵产率及总熵产率增大; 当压力为 0.2 MPa、N₂ 摩尔分数为 30%、温度从 300 K 增加至 450 K 时, 当量比为 5 时的传热熵损率降低了 41.2%, 当量比为 10 时的传热熵损率降低了 52.4%。该研究可为调控发动机低温燃烧过程、优化发动机燃烧策略提供参考。

关键词: 二甲醚; 层流预混双火焰; 双火焰; 熵产; 熵损分析

中图分类号: TK16 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202603008 **文章编号:** 0253-987X(2026)03-0077-09

Analysis of Exergy Destruction Characteristics in Laminar Premixed Dual Flames of Dimethyl Ether

MI Xiaoqing, LI Gesheng, MI Xiaoxiong, ZHOU Mengni, LIU Biao,

DOU Xiaoyu, ZHANG Zunhua

(School of Marine and Energy Power Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430063, China)

Abstract: To investigate the low-temperature combustion process in advanced engine combustion modes and analyze the energy-mass conversion mechanism during the low-temperature combustion process of dimethyl ether (DME), this study systematically examines the generation conditions, double flame structure, chemical reaction pathways, and entropy production characteristics of laminar premixed double flame in DME/O₂/N₂ mixtures under varying equivalence ratios, nitrogen mole fractions, initial pressures, and initial temperatures. The exergy destruction characteristics of double flame under different initial operating conditions are further analyzed, revealing the key sources of energy loss during the double-flame stage of low-temperature combustion. The results indicate that double flame characteristics are most pronounced under low-pressure, low-temperature, and fuel-rich conditions, with both flame structure and entropy production rate exhibiting a “double peak” trend along the axial flame direction, characterized by two distinct peaks. Elevated mole fractions of CH₃OCH₂O₂ and HO₂ radicals enhance the reaction

收稿日期: 2025-03-19。 作者简介: 米晓庆(2001—),女,硕士生;周梦妮(通信作者),女,副教授,博士生导师。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52306160)。

网络出版时间: 2025-08-28

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.t.20250828.1420.002>

entropy production rate and total entropy production rate in double flames. When pressure is 0.2 MPa and N_2 mole fraction is 30%, increasing the temperature from 300 K to 450 K reduces the heat transfer exergy destruction rate by 41.2% for an equivalence ratio of 5 and by 52.4% for an equivalence ratio of 10. This study provides valuable insights for regulating low-temperature combustion processes in engines and optimizing engine combustion strategies.

Keywords: dimethyl ether; laminar premixed dual flame; double flame; entropy generation; exergic analysis

为降低发动机污染物排放,提高发动机燃油效率,近年来研究人员提出了不同的新型高压低温燃烧策略,例如均质压燃(HCCI)^[1]、部分预混压燃(PPCI)^[2-3]以及火花辅助压燃(SACI)^[4]等。在这些燃烧模式中,不仅存在冷火焰和温火焰为主的低温燃烧过程,也存在具有2个相互耦合火焰锋面的双火焰结构,其特点是存在2个放热峰值^[5-6]。低温燃烧的研究对提高新型发动机性能、降低发动机排放起着至关重要的作用。

二甲醚(DME)^[7]具有辛烷值高、沸点低、氧含量高、无C—C键、自燃温度低等特点,其热值为柴油的64.7%,燃烧时基本无碳烟产生,具有和柴油相似的负温度系数(NTC)^[8],燃烧过程中有冷火焰产生,可由生物质生产,有望成为替代柴油、燃油等的新型清洁能源,具有广阔的应用前景^[9-10]。对于能够产生冷火焰的燃料,冷火焰速度是其燃烧过程中的一个重要参数^[11]。Ju等^[12]较全面地研究了高压条件下二甲醚层流预混火焰结构,明确了二甲醚低温燃烧过程中冷火焰向热火焰转变的过程。二甲醚是具有负温度系数效应的最小分子燃料之一,对其进行低温燃烧的化学动力学研究有助于解析发动机“敲缸”和“爆震”机制^[13],提升二甲醚在发动机中的应用。

二甲醚具有低温燃烧放热弱的性质,在其低温燃烧过程中存在放热引燃、维持火焰稳定传播机制不清晰等问题^[14]。孙国军等^[15-16]基于热力学第二定律开展了二甲醚、氨气以及甲烷混合燃料层流预混火焰熵损特性分析,得出了不同温度、掺混比、当量比和压力等工况对混合燃料熵损特性的影响规律,从热传导熵损、质量扩散熵损、化学反应熵损和排气熵损4个方面阐述了不同工况下层流预混火焰的熵损特性。Liu等^[17]分析甲烷/氢层流预混熵损特性时发现,当量比从0.6增加至1.5的过程中,熵损率先增加后减少,在当量比为0.9时达到最大值。同时,该研究解析了熵损率随当量比先增后减的原因,即不完全燃烧导致在“熵产减少”和“熵损增加”之间存在权衡关系。Zhang等^[18-19]研究了不同试验

工况下正庚烷-异辛烷燃烧过程中的熵特性,研究发现燃料掺混比对热能损失没有影响,但会影响其低温燃烧过程;该团队基于熵分析的方法研究了正庚烷-异辛烷的当量比与喷射策略对热效率的影响,解析了熵损与热效率的热力学关系,指出降低熵损有助于提高内燃机热效率。Li等^[20]研究了类发动机条件下甲烷/甲醇/氢气-正庚烷混合燃料燃烧的熵特性,研究发现低碳零碳燃料可通过影响低温氧化及高温反应来降低熵损,且在低温条件下效果尤其显著。Liu等^[21]研究发现,初始温度为低温和负温度系数区域时,二甲醚低温反应路径产生了大部分熵产。熵产反映了燃烧系统的不可逆性和能量损失,熵产越大,能量利用效率越低。研究二甲醚的熵产可以解析其燃烧过程中火焰结构、反应物摩尔分数等变化,有助于提高二甲醚的利用率。这些研究借助热力学第二定律的熵损分析方法,为解析二甲醚低温燃烧的能质转换过程提供了思路^[22]。

本文以二甲醚为研究对象,采用Liu等^[23]开发的二甲醚化学反应动力学机理,该机理包含了二甲醚的低温、中温、高温化学反应路径,已被广泛验证和使用^[24-25]。本文应用化学反应动力学开源软件Cantera对不同氮气摩尔分数、初始压力和初始温度条件下的二甲醚层流预混火焰进行模拟。研究发现,在特定工况下能够产生一种具有两个火焰锋面的层流预混双火焰。之后,进一步对该种特殊低温火焰结构(双火焰)的产生条件、火焰结构、反应路径、熵产及熵损特性进行了研究。本文的创新性及优势体现在以下几个方面。

(1)现有的二甲醚研究多集中于常温、常压和化学计量比附近的工况,缺乏对宽工况下燃烧特性的深入研究,难以满足实际发动机的复杂工况需求;而本研究则聚焦于宽工况下的燃烧特性,有助于拓宽二甲醚在发动机中的应用范围,并为相关研究提供参考依据。

(2)熵损是发动机热力学效率的重要指标,反映了系统中不可逆过程的程度。通过优化燃烧过程等

策略,能够有效减少烟损,提升发动机性能。

然而,现有关于烟损与熵产的研究多集中于热火焰和冷火焰,针对双火焰燃烧及其烟损特性的研究尚显不足。对此,本研究建立了宽工况下双火焰的形成边界,并将二甲醚双火焰的低温燃烧路径与熵产和烟损特性耦合,深入研究了双火焰阶段能量损失的关键因素。通过这一创新性研究,本文丰富了二甲醚低温燃烧理论,为解决双火焰传播机制不明确和发动机低温燃烧过程能量损失的问题提供了理论依据,为提高发动机效率提供了参考,同时助力“双碳”目标的实现。

1 数值模拟方法

1.1 数值模拟工具

本研究采用化学反应动力学开源软件 Cantera 2.5.1 中 FreeFlame 程序^[26](类似于 Chemkin 中的 PREMIX 模块)对 DME/O₂/N₂ 在不同工况下层流预混火焰进行模拟。计算模型参数如下:使用混合平均输运模型;计算域长度设置为 0.2 m;梯度和曲率设置为 0.05,以确保火焰锋面网格间距小于 0.1 mm;最大网格数设置为 5 000,以确保精确计算自由基浓度分布。本研究中具有双火焰特征的层流预混火焰模型及结构示意图如图 1 所示,其中 ρ_u 、 T_u 和 S_u 表示未燃气体的密度、初始温度和层流燃烧速度, ρ_b 、 T_b 和 S_b 表示已燃气体对应的参数。

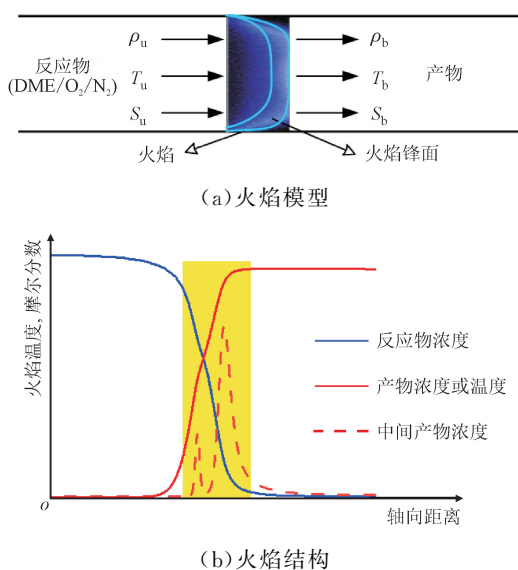


图1 层流预混火焰模型及结构示意图

Fig. 1 Laminar premixed flame model and structure diagram

本文中,使用的预混气体为 DME/O₂/N₂ 预混气,当量比 Φ 是指 DME 与 O₂ 的实际燃氧比与化学

计量比的比值,表其表达式如下

$$\Phi = \frac{x_{\text{DME}}/x(\text{O}_2)}{(x_{\text{DME}}/x(\text{O}_2))_{\text{st}}} \quad (1)$$

式中: x_{DME} 、 $x(\text{O}_2)$ 分别表示 DME、O₂ 的摩尔分数。 $x_{\text{DME}}/x(\text{O}_2)$ 表示 DME 与 O₂ 的实际燃氧比, $(x_{\text{DME}}/x(\text{O}_2))_{\text{st}}$ 表示 DME 与 O₂ 的化学计量比。本文中,氮气摩尔分数 $x(\text{N}_2)$ 为 N₂ 在 DME/O₂/N₂ 预混气体中物质的量的占比,表达式如下

$$x(\text{N}_2) = \frac{n_{\text{N}_2}}{n_{\text{N}_2} + n_{\text{DME}} + n_{\text{O}_2}} \quad (2)$$

式中: n_{N_2} 、 n_{DME} 、 n_{O_2} 分别表示 N₂、DME、O₂ 的物质的量。

解析二甲醚消耗反应路径及化学反应动力学特性,需对 DME/O₂/N₂ 预混气在不同工况下产生的双火焰进行瞬态全局化学反应路径分析。在分析时,需要计算出整个火焰区域内二甲醚等组分通过基元反应生成或消耗的物质的量 ΔN_A , 表达式如下

$$\Delta N_A = v_{k,i} \omega_i V \Delta t \quad (3)$$

式中: $v_{k,i}$ 为组分 k 在第 i 个基元反应中的化学计量系数; ω_i 为基元反应 i 的反应速率; V 和 Δt 分别为反应空间体积和反应时间。

计算二甲醚层流预混火焰时主要做出以下假设^[15,27]:①理想气体混合物模型;②一维、稳态的平面火焰;③Soret 效应不显著,忽略压力扩散的影响^[28-29];④整个流场中压力恒定;⑤忽略黏性效应带来的影响^[28-31]。基于以上假设,局部熵产率可根据下式^[28]计算

$$\gamma = \frac{\lambda}{T^2} \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^N \mu_k \omega_k + \rho \sum_{k=1}^N \left[\frac{D_k R_k}{x_k} \left(\frac{d\omega_k}{dx} \right) \left(\frac{dx_k}{dx} \right) \right] \quad (4)$$

式中: γ 为传热、质量扩散和化学反应造成的局部熵产率;式(4)右边的第1项为传热熵产率,第2项为反应熵产率,第3项为扩散熵产率; λ 和 ρ 分别代表平均导热系数和密度; T 为局部温度; dT/dx 为温度在轴向距离变化的梯度; μ_k 、 ω_k 分别为组分 k 的化学势和单位体积生成速率; D_k 、 R_k 、 x_k 、 ω_k 分别为组分 k 的混合物平均扩散系数、比气体常数、摩尔分数和质量分数,其中 $R_k = R_u/M_k$, $R_u = 8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$, M_k 为组分 k 的摩尔质量; x 为火焰传播方向的轴向距离。

1.2 烟损数值计算方法

烟损反映了燃烧系统的效率损失,烟损越大,系统的能量转换效率越低,研究烟损有助于解析二甲醚燃烧过程的能量转换效率。根据 Gouy-Stodla 方

程^[29]计算燃烧过程中熵产引起的熵损率,表达式如下

$$E_{\text{loss}} = \frac{T_0 \int \gamma dx}{e_u \rho_u S_L} \quad (5)$$

式中: E_{loss} 表示熵产形成的全局熵损率; T_0 、 e_u 、 ρ_u 、 S_L 分别表示环境温度、未燃混合物总焓、未燃混合物密度、混合物层流燃烧速度; $\int \gamma dx$ 表示对局部熵产率沿火焰传播方向进行积分。

熵损率表示全局熵损占初始燃料携带总焓的比例。初始燃料携带的总焓可由未燃混合物总焓、未燃混合物密度、混合物层流燃烧速度求积计算。燃烧产物中各组分对于废气熵损的相对贡献度也具有探讨价值,因此为了计算总废气熵损,有必要对燃烧产物中各组分的标准摩尔化学焓^[15]进行计算。对于燃烧产物中的任意组分的标准摩尔化学焓 $\bar{e}_k$ 可由下式^[28-32]计算

$$\bar{e}_{\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d} = g_{\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d} + \left(a + \frac{b}{4} - \frac{c}{2}\right)(g_{\text{O}_2} - \bar{e}_{\text{O}_2}) - a(g_{\text{CO}_2} - \bar{e}_{\text{CO}_2}) - \frac{b}{2}(g_{\text{H}_2\text{O}} - \bar{e}_{\text{H}_2\text{O}}) - \frac{d}{2}(g_{\text{N}_2} - \bar{e}_{\text{N}_2}) \quad (6)$$

式中: g_k 为组分 k 的比摩尔吉布斯自由能; a 、 b 、 c 、 d 分别为组分 k 中含有 a 个 C 原子、 b 个 H 原子、 c 个 O 原子和 d 个 N 原子。预混气的总摩尔化学焓 $\bar{e}_{\text{mix}}$ 可由各组分对预混气的贡献计算得到

$$\bar{e}_{\text{mix}} = \sum_{k=1}^N x_k \bar{e}_k + RT_{\text{env}} \sum_{k=1}^N x_k \ln(x_k) \quad (7)$$

式中: x_k 为组分 k 的摩尔分数; $\bar{e}_k$ 为组分 k 的标准摩尔化学焓; R 为理想气体常数; T_{env} 为参考环境的温度。详细计算过程及符号说明可以参考文献^[15]和^[16]。本文主要针对表 1 中的工况开展模拟。

表 1 二甲醚层流预混火焰模拟工况

工况参数	数值范围
初始温度/K	300~550
初始压力 p /MPa	0.1~5.0
当量比	1~10
氮气摩尔分数/%	5~80

2 结果和讨论

2.1 不同工况对双火焰的影响

Ju^[12]研究发现,低温火焰的存在扩展了二甲醚的燃烧极限。本研究首先对二甲醚层流预混双火焰的产生工况进行了讨论。在 $x(\text{N}_2) = 30\%$ 、 $T = 300 \text{ K}$ 、

$p = 0.2 \text{ MPa}$ 、不同当量比的工况条件下,二甲醚层流预混火焰的层流燃烧速度和火焰双峰特征如图 2、图 3 所示。

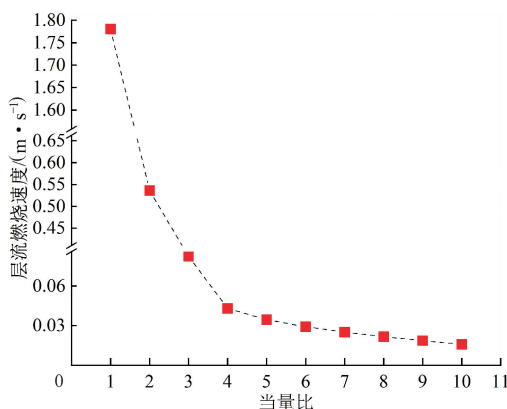


图 2 不同当量比下 DME/O₂/N₂ 层流燃烧速度

Fig. 2 Laminar burning velocity and flame structure of DME/O₂/N₂ at different equivalence ratios

分析图 2 发现,二甲醚当量比从 1 增加至 10 的过程中,DME/O₂/N₂ 混合物层流燃烧速度不断减小。这是因为当量比增大,混合物中氧气摩尔分数减小,燃料着火和传播变得困难,层流燃烧速度减小。

图 3 中蓝色的线条给出了当量比分别为 1、5、8、10 时的火焰结构,可以发现当量比在从 1 变化到 10 的过程中,火焰“双峰”特征逐渐增强。本研究选取当量比为 1、5 和 10 的工况,讨论不同氮气摩尔分数 ($T = 300 \text{ K}$, $p = 0.2 \text{ MPa}$)、不同初始温度 ($x(\text{N}_2) = 30\%$, $p = 0.2 \text{ MPa}$)、不同初始压力 ($x(\text{N}_2) = 30\%$, $T = 300 \text{ K}$) 下双火焰的产生条件。同时,根据火焰的双峰特征来判断双火焰是否产生,结果如图 4 所示。

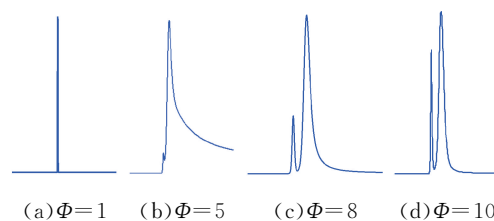


图 3 不同当量比下的火焰结构

Fig. 3 Flame structure at different equivalence ratios

分析图 4 发现,当量比为 5 和 10 条件下,氮气摩尔分数在 5%~70% 范围内,均可产生二甲醚层流预混双火焰的稳态解;压力在 0.1~5.0 MPa 范围内 ($T = 300 \text{ K}$, $x(\text{N}_2) = 30\%$),当量比为 10 均存在显著的双火焰结构,而对于当量比为 5 时,只有 0.1、0.2、0.5 和 1.0 MPa 有明显的双火焰结构;升高初

始温度($p=2\text{ MPa}$, $x(\text{N}_2)=30\%$), 在 $300\sim 450\text{ K}$ 范围内, 当量比为 5 和 10 时均存在显著的双火焰结构。在所有工况中, 当量比为 1 时均没有发现明显的双火焰特性。通过分析不同工况可以得出, 二甲醚产生双火焰的工况主要集中在当量比为 5 和 10、温度为 $300\sim 450\text{ K}$ 以及压力为 $0.1\sim 1.0\text{ MPa}$ 范围内。因此, 本研究主要针对具有明显双火焰结构的工况开展二甲醚层流预混双火焰燃烧特性分析。

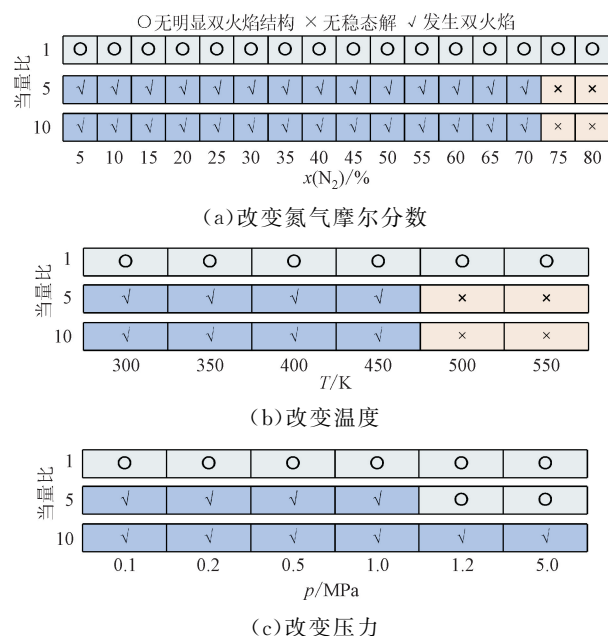


图4 双火焰发生工况

Fig. 4 Double flame generation condition

2.2 双火焰的火焰结构及反应路径

为了进一步解析二甲醚的双火焰特性, 本节对双火焰结构进行分析。选取 Φ 为 5 和 10、 $T=300\text{ K}$ 、 $p=0.2\text{ MPa}$ 、 $x(\text{N}_2)=30\%$ 作为研究工况, 对主要自由基($\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 、 HO_2 、 OH 和 CH_2O) 的摩尔分数、绝热火焰温度随火焰轴向距离的变化进行了计算, 结果如图 5 所示。

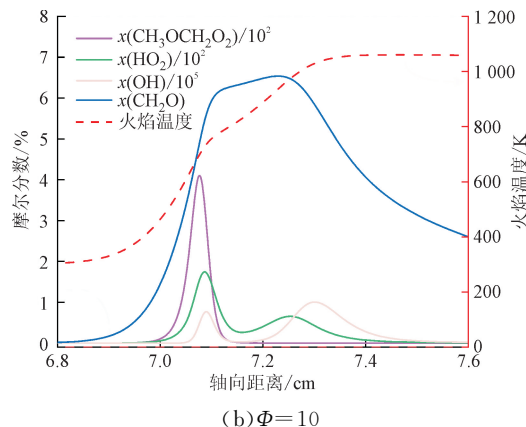
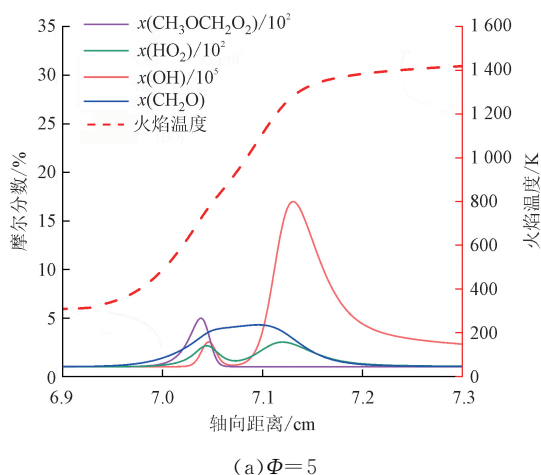
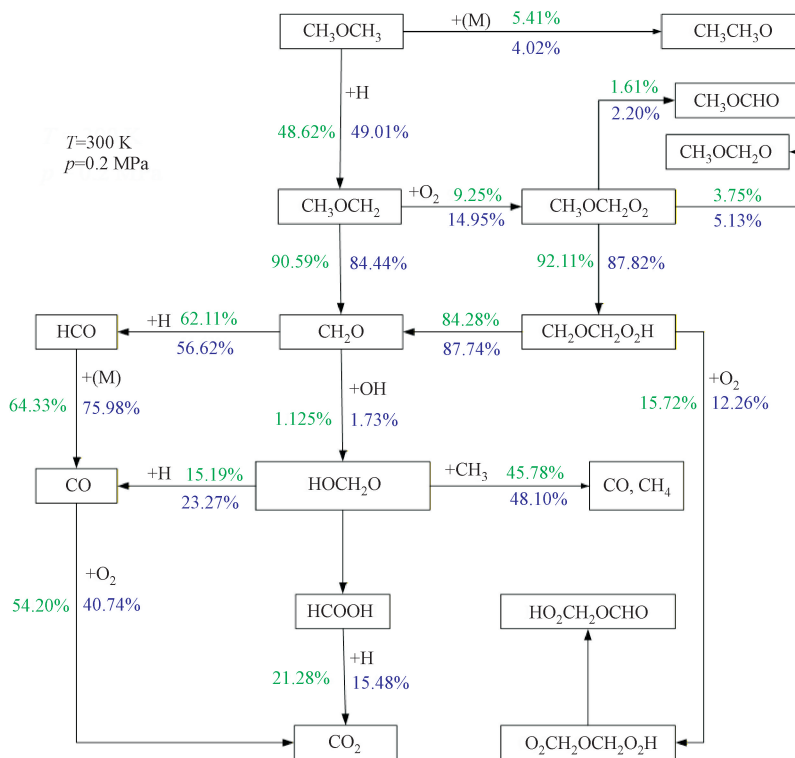


图5 当量比为 5 和 10 的火焰结构

Fig. 5 Flame mole fraction and temperature distribution at equivalence ratios of 5 and 10

参考 Ju 等^[6]对火焰温度的分段区间, 下文中定义低温为 $T<750\text{ K}$, 中温为 $750\sim 1050\text{ K}$, 高温为 $T>1050\text{ K}$ 。图 5 中 OH 的第一个锋面(左侧锋面)是冷火焰锋面, OH 的第二个锋面(右侧锋面)是热火焰锋面。在图 5(a)中, 在低温条件下, 轴向距离为 7.0 cm 处, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 、 HO_2 以及 OH 快速积累, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 自由基浓度达到峰值, 反应体系温度上升约 400 K (反应体系温度达到 1200 K), 这一过程为双火焰中“冷火焰锋面”的产生创造了条件。在此之后, 随着 CH_2O 等自由基不断积累, 未燃反应物继续反应, 反应体系温度不断上升, OH 摩尔分数达到第二个峰值时(约 700 K), 在反应体系中形成“热火焰锋面”。图 4(b)和图 4(a)有所不同, 在图 4(b)中, 第一个火焰中 CH_2O 和 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 自由基摩尔分数相对较高, 第二个火焰中 OH 浓度峰值相对较低, 并且反应体系温度也较低。对于中温和低温反应, 低温燃烧链分支反应主要为 $\text{RH}-\text{R}-\text{RO}_2$ 以及 $\text{R}-\text{HO}_2$ (R 为烷基自由基)^[13], 此反应过程为本文分析 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 等自由基摩尔分数的变化提供了参考。本研究进一步分析了二甲醚层流预混双火焰的化学反应路径, 如图 6 所示。

当量比为 5 和 10、初始温度为 300 K 、初始压力为 0.2 MPa 工况下, $\text{DME}/\text{O}_2/\text{N}_2$ 主要反应路径为 $\text{CH}_3\text{OCH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} \rightarrow \text{HCO} \rightarrow \text{CO} \rightarrow \text{CO}_2$ 。此外, 可以发现不同当量比下, 反应路径差异不明显。反应路径分析结果和火焰结构基本对应, 即低温时 $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$ 、 HO_2 和 CH_2O 自由基积累, 高温时这些自由基被消耗。解析以上自由基的产生及消耗过程为分析预混双火焰的熵产及熵损特性奠定了基础。



绿色、蓝色的百分数分别对应 $\Phi=5, 10$ 条件下反应在此路径中的消耗占比

图 6 二甲醚层流预混双火焰反应路径

Fig. 6 Reaction path diagram of dimethyl ether laminar premixed double flame

2.3 双火焰熵产分析

在双火焰中,热传导、质量扩散以及化学反应会影响预混火焰的熵产率。因此,本节对熵产率随火

焰轴向距离变化关系进行了分析,选取和 2.2 节相同的工况 (Φ 为 5 和 10, $T=300$ K, $p=0.2$ MPa, $x(\text{N}_2)=30\%$), 计算结果如图 7 所示。

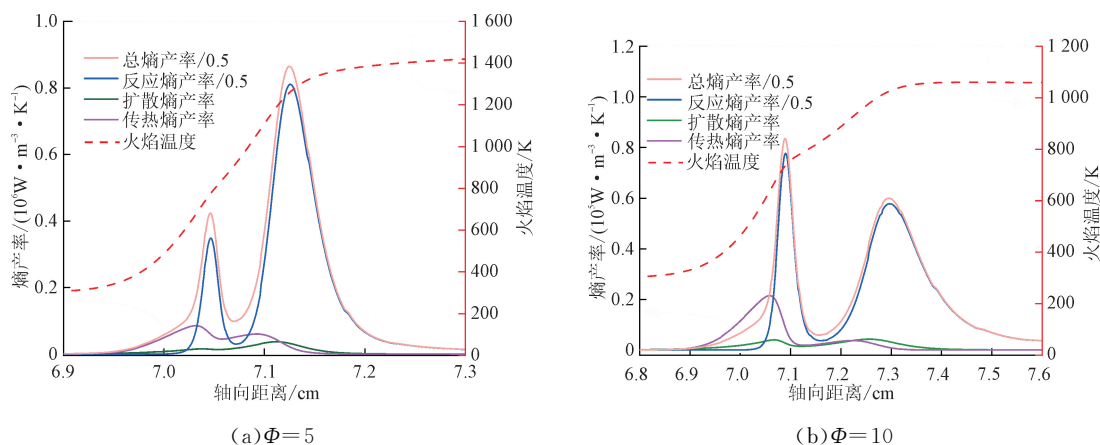


图 7 当量比为 5 和 10 时的火焰熵产率和温度分布

Fig. 7 Flame entropy generation rate and temperature distribution at equivalence ratios of 5 and 10

图 7 中,熵产率随火焰轴向距离变化趋势和图 5 中火焰结构基本对应。在 $\Phi=5$ 时,如图 7(a)所示,第一个火焰锋面总熵产率明显低于第二个火焰锋面,且火焰位置越过第二个火焰锋面后,火焰温度达

到最大值。此外,双火焰总熵产率的变化趋势和 OH 摩尔分数的变化趋势一致。对于 $\Phi=10$,如图 7(b)所示,总熵产率和图 5(b)中 CH_2O 自由基随火焰位置变化趋势不一致。图 7(b)中总熵产率先高后低,而

图5(b)中 CH_2O 摩尔分数变化趋势不同。进一步分析发现,第一个峰的传热熵产率、反应熵产率和扩散熵产率明显高于第二个峰,由于3种熵产率分布的差异导致了总熵产率的不同。由此得出,混合物总熵产率主要由反应熵产率构成,而相对于反应熵产率,传热熵产率和扩散熵产率对总熵产率贡献率较小。 $\Phi=10$ 工况下两峰变化高度相反主要是因为第一个峰位置反应熵产率和传热熵产率贡献率增大,引起第二个峰值减小。

2.4 不同工况对双火焰炯损的影响

通过分析双火焰熵产率分布图和火焰结构图可以得出,双火焰熵产率和重要组分摩尔分数随火焰轴向距离的变化规律相同。然而,从以上结果中无法获取二甲醚层流预混双火焰的炯损特性。因此,本节对不同初始温度、压力和氮气摩尔分数下双火焰的炯损特性进行分析,固定当量比为5和10,结果如图8和图9所示。

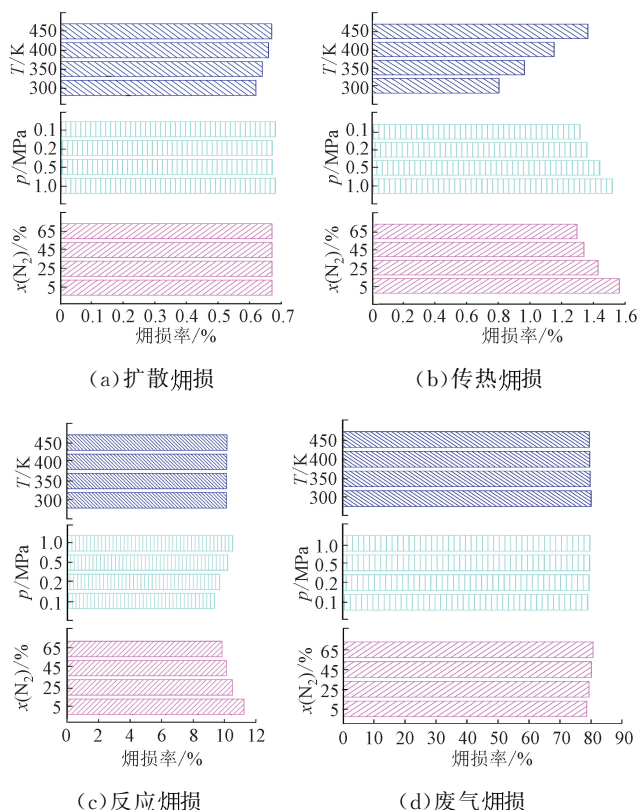


图8 不同工况对当量比为5时双火焰炯损的影响

Fig. 8 Influence of different working conditions on the exergy loss of double flame with equivalence ratio of 5

由图8可见,当量比为5时,废气炯损率占比最高约为80%,其次是反应炯损率约为10%,传热炯损率与扩散炯损率占比较少。值得注意的是,传热

炯损率对压力、温度以及 N_2 摩尔分数的变化较为敏感。初始温度从300 K增大至450 K时,传热炯损率从1.53%降低为0.9%,降低了41.2%。由此发现,升高初始温度可以提高传热对总熵产的贡献;压力和 N_2 摩尔分数升高,则造成传热炯损率升高,传热对总熵产贡献降低。

由图9可见,当量比为10时,二甲醚预混双火焰中扩散炯损率随着温度、压力以及 N_2 摩尔分数的增加而减少。 N_2 摩尔分数对扩散炯损率的影响更加显著, N_2 摩尔分数从5%增加到65%,炯损从0.39%降低到0.32%,降低了17.9%。对于传热炯损,温度从300 K增大至450 K时,传热炯损率从0.82%降低为0.39%,降低了52.4%。废气炯损率在分析工况中仍然是最高的,均超过了85%;扩散炯损率最低,在0.3%~0.4%之间。

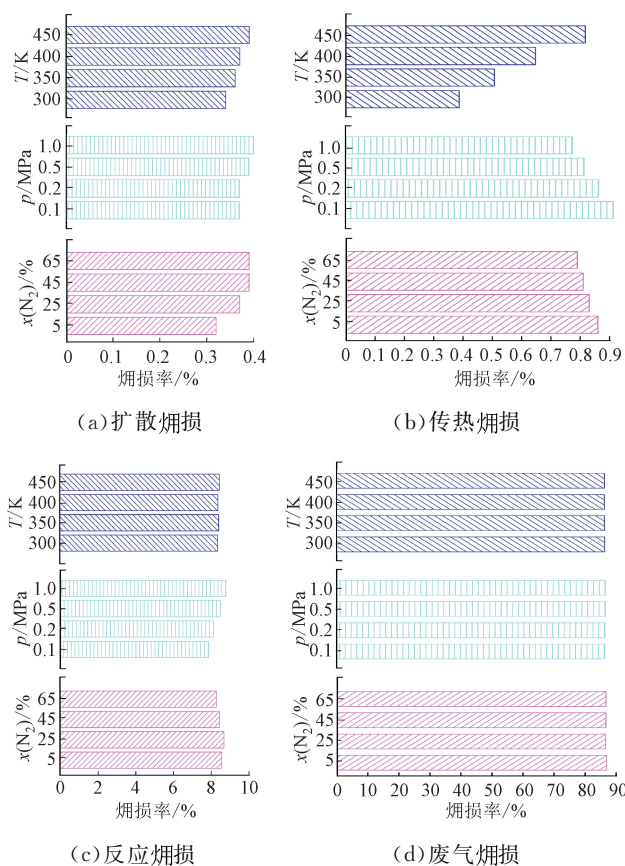


图9 不同工况对当量比为10时双火焰炯损的影响

Fig. 9 Influence of different working conditions on the exergy loss of double flame with equivalence ratio of 10

结合当量比为5和10两种工况下的双火焰结构可以发现,当量比为10工况下关键自由基浓度比当量比为5时降低了大约一个数量级。相关研究发现, OH 摩尔分数的降低对火焰炯损起着至关重要

的作用^[12]。对于本研究,当量比为10时,OH自由基摩尔浓度的第二峰值为第一峰值的1.3倍,而当量比为5时为6.5倍,此分析结果进一步说明本文用OH摩尔分数表征双火焰的合理性,同时也从侧面反映出OH自由基对预混双火焰熵产及熵损的影响程度。

3 结 论

本文用数值模拟的方法研究了二甲醚层流预混双火焰特征、熵产特性、熵损特性,确定了二甲醚双火焰产生工况,对当量比为5和10、初始温度为300 K、初始压力为0.2 MPa的火焰结构、反应路径及熵产率进行了分析,得出了不同工况下二甲醚层流预混双火焰特征及熵损特性,具体结论如下。

(1)随着当量比的增加,层流预混双火焰特征逐渐明显。 N_2 摩尔分数在5%~70%范围内(Φ 为5和10, $T=300\text{ K}$, $p=0.2\text{ MPa}$)、初始压力为0.5~1.0 MPa($\Phi=5$, $T=300\text{ K}$, $x(N_2)=30\%$)和0.1~5.0 MPa($\Phi=10$, $T=300\text{ K}$, $x(N_2)=30\%$)、初始温度为300~450 K($p=0.2\text{ MPa}$, $x(N_2)=30\%$)时,二甲醚层流预混双火焰特征明显。

(2)双火焰中第一火焰的形成促进了第二火焰的产生。在第一火焰中, $CH_3OCH_2O_2$ 和 HO_2 自由基快速积累,导致反应体系温度上升了400 K。当OH摩尔分数达到最大值,第二火焰温度快速上升。当量比为5和10、初始温度为300 K、初始压力为0.2 MPa工况下,DME/ O_2 / N_2 主要反应路径为 $CH_3OCH_3 \rightarrow CH_3OCH_2 \rightarrow CH_2O \rightarrow HCO \rightarrow CO \rightarrow CO_2$ 。

(3)二甲醚熵产率分布图和火焰结构图呈现规律基本相同。 $CH_3OCH_2O_2$ 和 HO_2 自由基摩尔分数越高,反应熵产率和总熵产率越大。熵产率沿轴向距离变化也呈现出“双峰”的变化趋势。在双火焰中,反应熵产对总熵产贡献最大。

(4)在所有熵损率中,废气熵损率占比最大。温度从300 K增大至450 K过程中,传热熵损率逐渐降低;当量比从5增大至10,扩散熵损率随温度、压力和 N_2 摩尔分数的增大而降低。在所有熵损率中,废气熵损率最高。

参考文献:

[1] LU Xingcai, HAN Dong, HUANG Zhen. Fuel design and management for the control of advanced compression-ignition combustion modes [J]. Progress in Ener-

gy and Combustion Science, 2011, 37(6): 741-783.

[2] 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[J].西安交通大学学报,2013,47(3):48-52.

LI Dongchang, WANG Ying, MENG Qingbin, et al. Experimental study on the effect of dimethyl ether premixed ratio on the performance of premixed compression ignition engine [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2013, 47(3): 48-52.

[3] SPLITTER D, REITZ R D, Hanson R. High efficiency, low emissions RCCI combustion by use of a fuel additive [J]. SAE International Journal of Fuels and Lubricants, 2010, 3(2): 742-756.

[4] MANOFSKY L, VAVRA J, ASSANIS D N, et al. Bridging the gap between HCCI and SI: spark-assisted compression ignition [C]//SAE 2011 World Congress and Exhibition. Warrendale, PA, USA: SAE International, 2011: 10.4271/2011-01-1179.

[5] 张帆,钟生辉.内燃机条件下湍流燃烧高精度数值模拟[J].工程热物理学报,2024,45(12):3876-3898. ZHANG Fan, ZHONG Shenghui. High-precision numerical simulation of turbulent combustion under internal combustion engine conditions [J]. Engineering Thermophysics, 2024, 45(12): 3876-3898.

[6] JU Y, REUTER C B, YEHIA O R, et al. Dynamics of cool flames [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2019, 75: 100787.

[7] 宋钰,张尊华,周梦妮,等.二甲醚/氨对冲扩散火焰熄灭特性及动力学分析[J].工程热物理学报,2024,45(9):2867-2875.

SONG Yu, ZHANG Zunhua, ZHOU Mengni, et al. Quenching characteristics and kinetic analysis of dimethyl ether/ammonia counterflow diffusion flame [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2024, 45(9): 2867-2875.

[8] 南天天,肖红亮,张海涛,等.二甲醚和甲醇双直喷喷雾燃烧特性的光学研究[J].西安交通大学学报,2024,58(6):153-161.

NAN Tiantian, XIAO Hongliang, ZHANG Haitao, et al. Optical study on combustion characteristics of dimethyl ether and methanol double direct injection spray [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2024, 58(6): 153-161.

[9] 吕恩雨,马志豪,王鑫,等.乙醇和二甲醚在激波管内的裂解试验与动力学研究[J].西安交通大学学报,2021,55(11):77-86.

LÜ Enyu, MA Zhihao, WANG Xin, et al. Pyrolysis test and kinetic study of ethanol and dimethyl ether in

- shock tube [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2021, 55(11): 77-86.
- [10] ARCOUMANIS C, BAE C, CROOKES R, et al. The potential of di-methyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: a review [J]. Fuel, 2008, 87(7): 1014-1030.
- [11] WANG Yiqing, GUAN Xuefeng, XIE Shuming, et al. Numerical studies on the ignition and propagation for spherically expanding premixed cool flames under gravitational conditions [J]. Combustion and Flame, 2024, 259: 113194.
- [12] JU Yiguang. On the propagation limits and speeds of premixed cool flames at elevated pressures [J]. Combustion and Flame, 2017, 178: 61-69.
- [13] JU Yiguang. Understanding cool flames and warm flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2021, 38 (1): 83-119.
- [14] ZHAO Peng, LIANG Wenkai, DENG Sili, et al. Initiation and propagation of laminar premixed cool flames [J]. Fuel, 2016, 166: 477-487.
- [15] 孙国军, 付忠广, 卢茂奇. 二甲醚、氨气和甲烷混合燃料的层流预混火焰炯损特性研究 [J]. 燃烧科学与技术, 2022, 28(3): 271-282.
- SUN Guojun, FU Zhongguang, LU Maoqi. Study on laminar premixed flame exergy destruction characteristics of dimethyl ether, ammonia and methane mixed fuel [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2022, 28(3): 271-282.
- [16] 孙国军. 二甲醚/氨气作为燃气轮机组替代燃料的基础燃烧特性研究 [D]. 北京: 华北电力大学, 2022.
- [17] LIU Yusen, ZHANG Jiabo, JU Dehao, et al. Analysis of exergy losses in laminar premixed flames of methane/hydrogen blends [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(43): 24043-24053.
- [18] ZHANG Xuan, WEI Jianan, LIU Haifeng, et al. The thermodynamic relationship between reducing exergy destruction and improving thermal efficiency in internal combustion engines [J]. Applied Thermal Engineering, 2025, 268: 125875.
- [19] ZHANG Xuan, WEI Jianan, LIU Haifeng, et al. The relationship between fuel reactivity and exergy features in combustion process [J]. Energy, 2024, 288: 129843.
- [20] LI Linpeng, WEI Jianan, LIU Haifeng, et al. The exergy analysis of low carbon or carbon free fuels: methane, methanol, and hydrogen under engine like conditions [J]. Fuel Processing Technology, 2023, 252: 107975.
- [21] LIU Daojian, WANG Hu, ZHANG Yan, et al. On the entropy generation and exergy loss of laminar premixed flame under engine-relevant conditions [J]. Fuel, 2021, 283: 119245.
- [22] 肖波, 殷阁媛, 胡二江, 等. 氨气掺混二甲醚燃料层流的燃烧特性研究 [J]. 工程热物理学报, 2022, 43(8): 2249-2255.
- XIAO Bo, YIN Geyuan, HU Erjiang, et al. Study on laminar combustion characteristics of ammonia mixed with dimethyl ether fuel [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2022, 43(8): 2249-2255.
- [23] LIU D, SANTNER J, TOGBÉ C, et al. Flame structure and kinetic studies of carbon dioxide-diluted dimethyl ether flames at reduced and elevated pressures [J]. Combustion and Flame, 2013, 160(12): 2654-2668.
- [24] SHU Zhimei, XU Tingting, XIAO Jiayi, et al. Comprehensive kinetic study on ammonia/ethylene counter-flow diffusion flames: influences of diluents [J]. International Journal of Coal Science & Technology, 2024, 11(1): 15.
- [25] MENDIBURU A Z, CARVALHO Jr J A, JU Y. Flammability limits: a comprehensive review of theory, experiments, and estimation methods [J]. Energy & Fuels, 2023, 37(6): 4151-4197.
- [26] CHEN X, BÖTTTLER H, SCHOLTISSEK A, et al. Effects of stretch-chemistry interaction on chemical pathways for strained and curved hydrogen/air premixed flames [J]. Combustion and Flame, 2021, 232: 111532.
- [27] WILLIAMS F A. Combustion Theory [M]. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 1985.
- [28] TURNS S. An introduction to combustion: concepts and applications [M]. New York, USA: McGraw-Hill; 2000.
- [29] ACAMPORA L, MARRA F S. Second law thermodynamic analysis of syngas premixed flames [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45 (21): 12185-12202.
- [30] NISHIDA K, TAKAGI T, KINOSHITA S. Analysis of entropy generation and exergy loss during combustion [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2002, 29(1): 869-874.
- [31] BEJAN A. Advanced Engineering Thermodynamics [M]. 4th Edition. New York: John Wiley & Sons, 2016.
- [32] MOHEBBI M, REYHANIANey M, GHOFRANI I, et al. Availability analysis on combustion of n-heptane and isooctane blends in a reactivity controlled compression ignition engine [J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Part D Journal of Automobile Engineering, 2018, 232(11): 1501-1515.

(编辑 刘杨 武红江)