

缸内流场扰动对快速压缩机着火中间物种采样测量影响的数值研究

武颖韬, 饶伯暄, 汤成龙, 黄佐华

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 针对燃料自燃活性表现出负温度系数(NTC)效应时的快速压缩机缸内流场扰动对物种采样精度影响不明的问题,建立了燃料自燃过程物种采样的数值模型,通过控制活塞缝隙容积在燃烧缸内产生了不同强度的气流扰动,探究了 NTC 及气流扰动共同作用对正丁烷混合气自燃过程物种采样精度的影响规律。研究表明:受燃料 NTC 效应的影响,两种典型的物种采样方法均出现了反向稀释现象,即燃料的采样浓度偏低,中间产物的采样浓度偏高。反向稀释与采样方法的系统误差产生抵消,导致 NTC 区域内物种采样精度受气流扰动的敏感性降低。抑制燃烧缸内的气流扰动有利于提高采样精度,然而在绝对无扰动的流场下,整体冻结法的采样误差受热边界层作用反而会略微提高。该研究为燃料自燃过程中物种采样实验的设计及数据不确定性分析提供了有价值的参考。

关键词: 物种采样;气流扰动;负温度系数;着火延迟时间;快速压缩机

中图分类号: TK16 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202408007 **文章编号:** 0253-987X(2024)08-0060-09

Numerical Study of the Effect of In-Cylinder Airflow Disturbances on Intermediate Species Sampling in the Rapid Compression Machine

WU Yingtao, RAO Boxuan, TANG Chenglong, HUANG Zuohua

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

Abstract: The effect of in-cylinder airflow disturbances in the rapid compression machine on the species sampling accuracy remains unclear when fuel autoignition exhibits a negative temperature coefficient (NTC) effect. To solve this problem, this study establishes a numerical model for species sampling during fuel autoignition, and delves into the combined effect of NTC and airflow disturbances on the species sampling accuracy during the autoignition of a n-butane mixture, by controlling different piston crevice volumes to generate airflow disturbances of different intensities within the combustion chamber. The results show that due to the NTC effect of the fuel, both of the typical sampling methods exhibit a reverse dilution phenomenon, where the sampling concentration of the fuel is lower than expected, while that of intermediate species is higher than expected. This reverse dilution offsets the systematic errors of the sampling methods, resulting in a reduced sensitivity of the species sampling accuracy to airflow disturbances in the NTC

收稿日期: 2024-01-03。 作者简介: 武颖韬(1993—),男,讲师;汤成龙(通信作者),男,教授,博士生导师。 基金项目:国家自然科学基金资助项目(52206168);陕西省自然科学基金基础研究计划资助项目(2022JQ-470);航空发动机及燃气轮机基础科学中心资助项目(P2022-C-II-004-001)。

网络出版时间: 2024-04-17

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.T.20240416.1042.004>

region. Suppressing airflow disturbances within the combustion chamber is generally beneficial to the increase in the sampling accuracy. However, in an absolutely undisturbed flow field, the sampling error of the whole quenching method may even increase slightly due to the effect of the thermal boundary layer. This study provides valuable reference for the design of species sampling experiments and the uncertainty analysis of experimental data during fuel autoignition.

Keywords: species sampling; airflow disturbance; negative temperature coefficient; ignition delay time; rapid compression machine

发动机不断朝着高燃烧效率 and 低污染排放的方向发展,涌现出均质充量压燃(HCCI)^[1]和燃油反应活性控制压燃(RCCI)^[2]等先进燃烧技术。HCCI、RCCI 技术下的燃料着火主要由于其化学反应过程主导,因此深入认识燃料的化学反应动力学机制成为发动机燃烧组织和调控的关键。同时,先进的发动机燃烧仿真设计依赖于准确的燃料化学反应机理。

燃料的基础燃烧特性实验是构建和验证其化学反应动力学机理的主要方式。燃料的基础燃烧特性参数包括着火延迟期(τ_{IDT})^[3]、反应中间产物浓度^[4]、层流火焰传播速度^[5]及自由基浓度^[6]等。其中 τ_{IDT} 可以表征燃料的总体反应活性,是化学反应动力学机理验证的重要宏观参数。反应中间产物浓度是验证燃料化学反应机理的微观数据,反映燃料化学反应和能量转化的内在过程。在诸多基础燃烧实验装置中,快速压缩机(RCM)与发动机的运行原理最为接近。RCM 模拟发动机单次压缩冲程,通过活塞的快速压缩在燃烧缸内形成高温高压的热力学环境,进而使燃料发生自着火。RCM 燃烧缸内的有效热力学环境可达 200 ms 以上^[7],十分适用于研究燃料在中低温工况下的反应动力学过程。

目前,使用 RCM 进行燃料化学反应动力研究主要集中在 τ_{IDT} 的测量^[7],得益于 RCM 较长的测量时间尺度,在燃烧缸壁安装采样装置还可获得燃料自着火过程中的反应中间物种信息。He 等^[8]率先在 RCM 上开发了快速采样技术:通过将采样探针连接一个快速响应的电磁阀(响应时间小于 3 ms),在燃料混合气滞燃阶段的特定时刻触发阀门开启-关闭,抽取小部分混合气进入采样罐中。进入采样罐的气体由于体积膨胀而使化学反应迅速冻结,随后输入气相色谱(GC)或气相色谱质谱联用仪(GCMS)进行分析。在多次实验中改变采样时刻,即可获得燃料混合气滞燃过程中完整的中间产物变化历史。考虑到多次实验中着火时刻可能出现的变动,物种采样的时间通常会通过 τ_{IDT} 进行归一化,进而验证动力学模型的预测性能。另一种物理采样方

法(整体冻结法)^[9]通过在燃烧缸和采样罐之间设置一层隔膜,在特定的采样时刻刺穿隔膜。相比于快速采样抽取一小部分混合气,这种采样方法将整个燃烧缸内的反应气体冻结,因此可供分析的气体体积量更大,在 RCM 早期的采样研究中^[10-11]使用较多。

RCM 采样为研究燃料中低温化学反应动力学机理提供了宝贵的实验数据,然而 RCM 采样方法系统误差相关的研究却十分稀少。RCM 采样实验的一个重要系统误差来自于非理想气体的稀释,即采样过程一部分未经理想热力学条件下化学反应的气体进入采样罐,造成测量组分偏差。现有研究^[8,12-13]认为,非理想气体主要来自于采样系统的余隙容积,由于散热面积较大,余隙容积内的气体温度较低,难以发生明显的化学反应,其组分通常认为与初始状态一致。因此,余隙容积气体的稀释会导致燃料浓度测量值偏高而反应中间产物测量值偏低(正向稀释),采样实验结果通过定义的稀释比(余隙容积的气体体积与采样罐中气体体积的比值)进行修正。

另一部分来自于热边界层的非理想气体的稀释效应则通常被忽略。即使将采样探针设置于燃烧缸的核心区,其壁面本身也会产生一定的热边界层,对于较长滞燃时间的工况,散热导致的热边界层影响将更为显著。此外,由于活塞的运动,燃烧缸壁面的热边界层气体会随气流扰动到达采样区域,热边界层内的气体温度介于壁面温度和核心区理想温度之间,通常情况下造成的稀释气体效应与余隙容积相同。然而,当其温度处于燃料的负温度系数(NTC)温度区域时,较低温度的热边界层气体反而具有更高的反应活性,导致稀释效应发生反转^[14]。RCM 通常采用头部带有缝隙的活塞结构来抑制燃烧缸内的气流扰动^[15],但缸内的气流扰动无法在所有研究工况下被完全去除^[16]。前期的研究工作^[17]表明,非 NTC 工况下的采样结果对缸内气流扰动十分敏感,采样 5 ms 后的稀释比可达 98%,造成物种浓度测量结果偏差 50% 以上。NTC 工况下,缸内的燃料反应活性分布发生了明显变化,气流扰动甚至会带来局部

反应活性的增加,RCM 采样方法受气流扰动的敏感性及其带来的物种浓度测量误差有待评估。

因此,本文采用数值模拟的方法对不同缸内气流扰动下的 RCM 着火及中间产物采样过程进行研究。使用零维均质反应器(0D)计算燃料在理想状态下的着火及物种转化过程;使用计算流体力学(CFD)耦合燃料化学反应机理模拟自着火实验中可能存在的热边界层、气流扰动及物种输运等多维影响;CFD 及 0D 模拟方法计算耦合相同的化学反应机理,进而抵消燃料化学反应机理本身的误差。将 0D 方法计算结果作为标准,评估 CFD 方法模拟中散热及气流扰动等多维因素带来的系统偏差。

1 研究方法

1.1 反应动力学机理及 0D 模拟方法

本文使用正丁烷(C_4H_{10})作为具有 NTC 特性的代表燃料,混合气组分为质量分数 4%的 C_4H_{10} 、11%的 O_2 和 85%的 N_2 。燃料混合气在压缩上止点的热力学工况约为 670~910 K、2 MPa,通过 0D、CFD 分别计算燃料混合气的 τ_{IDT} 和着火过程中的物种采样浓度。0D、CFD 模拟方法计算均采用前期工作得到的正丁烷简化反应机理^[14],共包含 42 个物种和 138 步反应。

0D 模拟方法采用 CHEMKIN PRO 中的零维均质反应器,控制反应器的体积并求解能量方程。为考虑燃烧缸内气体的散热及压缩过程中可能存在的化学反应,0D 模拟使用 RCM 研究中普遍采用的等效体积方法^[18],即将 RCM 的压缩、散热等效为等效压缩和膨胀过程。等效体积 V 的计算式为

$$V = V_0 \left(\frac{p_0}{p} \right)^{1/\gamma} \quad (1)$$

式中: p 为 CFD 计算得到的无反应条件下的缸内压力; V_0 、 p_0 分别为初始时刻缸内体积、压力; γ 为混合气随温度变化的绝热指数。

1.2 CFD 模拟方法

RCM 燃烧缸内的燃料自燃及采样过程使用 ANSYS FLUENT 软件进行仿真,详细的模拟方法可参考文献[15,17]。RCM 燃烧缸及采样装置的几何结构均来自于西安交通大学 RCM^[15],可简化为二维轴对称特的计算域,如图 1 所示。压缩上止点后的燃烧缸长度约为 30 mm,通过一个内径为 1 mm 的采样探针与采样罐相连,采样探针深入燃烧缸内 10 mm。在燃烧缸和采样罐之间设置有一个虚拟的采样阀,分隔两个计算域,采样时将其由壁面

改为内部边界和模拟采样时两计算域间的传质过程。

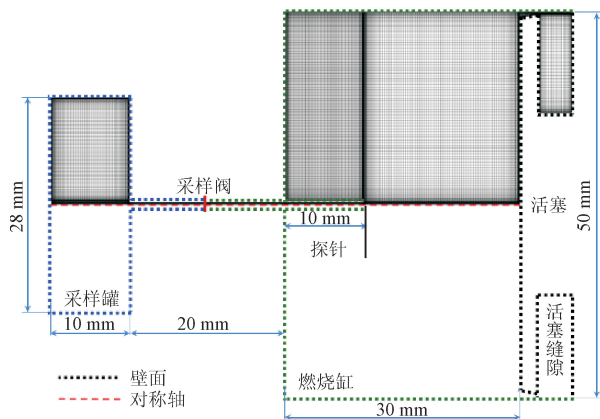


图 1 RCM 燃烧缸和采样装置几何结构及网格划分

Fig. 1 Geometry and computational mesh of the combustion chamber and sampling setups

计算域采用结构化网格划分,不同活塞结构对应计算域网格数为 74 375~77 327,其中燃烧缸内的最大网格尺寸为 0.3 mm,通过在壁面附近进行加密提高热边界层的分辨率(最小尺寸为 0.02 mm)。由于采样时燃烧缸与采样罐间存在极大的压力梯度,采样阀附近的网格进行了额外的加密(最小尺寸为 0.001 mm)。活塞的压缩行程为 300 mm,并在 25 ms 内完成压缩。压缩行程的最大网格尺寸扩大到 0.5 mm,使用层铺的动网格方法实现活塞边界的运动。为保证压缩过程中的库朗特数(局部速度 $\times$ 时间步长/网格尺寸)小于 1,设置的时间步长小于 7 μ s;而采样过程的计算时间步长则设置为 0.2~0.5 μ s,防止计算发散。本文 CFD 模拟使用的空间和时间分辨率与相关文献中的设置一致或更优,Mittal 等^[19]的模拟中使用了网格数 14 000 和时间步长 56 μ s,而 Yousefian 等^[20]的模拟中使用了网格数 39 019 和时间步长 4 μ s,CFD 使用的网格及时间步长的无关性均进行了验证。

CFD 化学反应流中的物种方程通过 CHEMKIN-CFD 求解器计算,同时考虑物种扩散所导致的能量扩散。混合气的密度通过理想气体状态方程求解,比热、导热系数、黏度及质量扩散系数均基于混合平均公式进行计算,计算所需参数来自于化学反应机理的热力学和输运文件^[14]。无化学反应的 CFD 计算除不求解物种方程外,其他设置保持一致。本文使用二维层流进行模拟,已有文献^[21]研究表明,二维层流可以较好地模拟 RCM 燃烧缸内的流动,且与三维大涡模拟得到的温度和速度场十分接近。

1.3 工况设置及数据处理

RCM 活塞缝隙容积的大小直接影响缸内的气流扰动及温度均匀性^[15],因此本文选取前期工作中优化得到的缝隙活塞(缝隙容积 7 435 mm³,缝隙活塞 2)、缝隙容积减半的活塞(缝隙容积 3 703 mm³,缝隙活塞 1)以及平头活塞(缝隙容积 0 mm³),定性地燃烧缸内分别制造低扰动的均匀温度场、中等扰动的半均匀温度场及强扰动的非均匀温度场。而绝对无扰动的温度场则通过不考虑压缩过程,直接在上止点后的定容腔体内设置指定温度、压力和混合气组分,具体工况设置如表 1 所示。工况 1~4 代表的气流扰动程度逐渐减小,对应压缩上止点 0 时核心区最大涡量为 12 500~0 s⁻¹。

0D 和 CFD 方法计算得到的着火时刻均定义为上止点后因燃烧放热导致的压力升高率的最大值处,着火时刻和 0 时刻的时间间隔即为 τ_{IDT} ,如图 2 所示。实际物种采样研究中,为消除重复实验中 τ_{IDT} 波动造成的采样持续期偏差,定义无量纲时间 τ 为上止点后时间与 τ_{IDT} 的比值。在物种采样模拟中,本文针对所述的两种采样结果采取了与实际采样研究一致的数据处理方法:对于快速采样方法,物种的采样结果取自一定采样持续期(采样阀门开启时间)后采样罐内的平均值;对于整体冻结方法,采样结果定义为采样阀门不开启下,整个燃烧缸腔体内的组分平均值。由于 CFD 在绝热壁面、无流动的条件下可以得到与 0D 完全一致的结果^[22],因此本研究二者间计算结果(τ_{IDT} 和物种浓度)的偏差均可归结于多维因素的影响。

表 1 不同模拟工况下对应的活塞

Table 1 Corresponding pistons in different simulation cases

工况	活塞	最大涡量/s ⁻¹	扰动强度
1	平头活塞	12 500	强
2	缝隙活塞 1	3 570	中等
3	缝隙活塞 2	70	弱
4	平头活塞无压缩	0	无

本文选取着火延迟期中间阶段和临近着火阶段两个典型时间 $\tau=0.5,0.8$ 进行快速采样。为定量描述采样结果,选择 C₄H₁₀ 与 CH₂O 作为检测物种,分别代表燃料与反应中间物。为保证良好的时间分辨率,文献[12,23]对于 10~20 ms 范围内的快速采样实验,设置其采样持续期约为 1.5~2.5 ms。而对于长 τ_{IDT} (100 ms 左右)的工况,边界层厚度增加,延长采样持续期可以增大来自核心区气体进入采样

罐的比例。考虑结果的准确性和采样时间分辨率,快速采样持续期最佳范围为 2~3 ms,最大不应超过 5 ms^[17]。因此,本文设置快速采样持续期为 2、5 ms,对比不同采样持续期对气流扰动作用下燃料 NTC 区域内快速采样结果的影响。

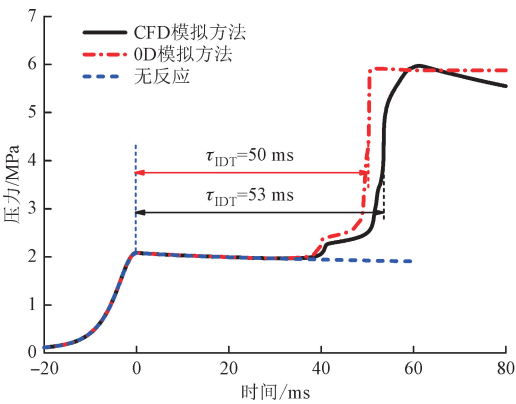


图 2 工况 3($p_c=2\text{ MPa},T_c=692\text{ K}$)着火过程典型压力曲线及 τ_{IDT} 定义

Fig. 2 Typical pressure traces and τ_{IDT} definitions for auto-ignition processes for case 3($p_c=2\text{ MPa},T_c=692\text{ K}$)

2 结果与讨论

2.1 流场扰动对温度分布及 τ_{IDT} 的影响

工况 1~4 在无反应条件下的缸内温度场分布如图 3 所示,同时也反映了缸内的流场扰动。压缩过程中平头活塞的头部形成了一个大的涡旋,并在活塞的推动下向前移动。压缩上止点 $\tau=0$ 时,在燃烧缸中心形成了一条冷气塞,缸内的初始扰动随时间逐渐扩展了燃烧缸内的其他部分, $\tau=0.7$ 时已覆盖至整个燃烧缸腔体。当使用缝隙容积为 3 703 mm³ 的缝隙活塞 1 时,上止点时的缸内气流扰动被极大抑制,仅在活塞头部的外侧形成了一个小尺度的涡旋, $\tau=0.7$ 时燃烧缸轴线附近区域仍未受到冷气流干扰。而当使用缝隙活塞 2 时,上止点处的燃烧缸内温度分布非常均匀,即使到 $\tau=0.7$ 时大部分区域气体仍未受扰动,仅在活塞缝隙的入口处形成了一个较小的涡旋。工况 4 为平头活塞且无压缩过程,气流扰动被消除,仅存在热边界层影响。上述结果表明,所选的活塞构型定性地实现了不同气流扰动和温度场分布的目的,从平头活塞到无压缩的 4 种工况分别对应上述强扰动非均匀温度场到无扰动均匀温度场的工况。

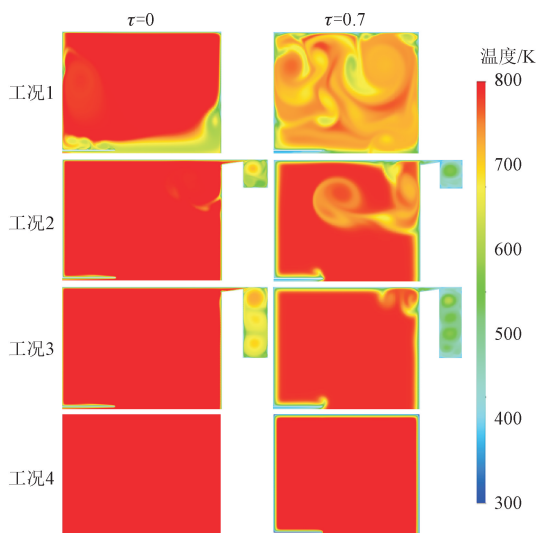


图3 无反应条件下4种工况的燃烧缸温度分布

Fig. 3 Temperature distribution of the combustion chamber under non-reactive conditions for case 1 to 4

RCM缸内温度均匀性直接影响其 τ_{IDT} 数据的有效性,通常认为均匀的温度分布使RCM绝热核心假设^[7]成立,燃料经历的温度可以被0D反应器模拟,进而可以结合“准确”的化学反应动力学机理对 τ_{IDT} 进行预测。由于获得的物种浓度数据是燃料自着火过程时间的函数,因此准确的 τ_{IDT} 测量也是RCM物种采样的前提。为探究气流扰动对 τ_{IDT} 结果的影响,本文选取宽温度范围内工况1~3获得的CFD及0D的 τ_{IDT} 结果进行了比较,如图4所示。图4中压缩终点压力为2 MPa,温度为663~910 K,散点为CFD模拟结果,曲线为0D模拟结果,0D模拟和CFD仿真得到的 τ_{IDT} 均表现出NTC效应,3种工况下0D模拟得到的 τ_{IDT} 曲线基本一致,而强扰动工况1对应的CFD模拟结果在低温范围内出现了较大的偏差。

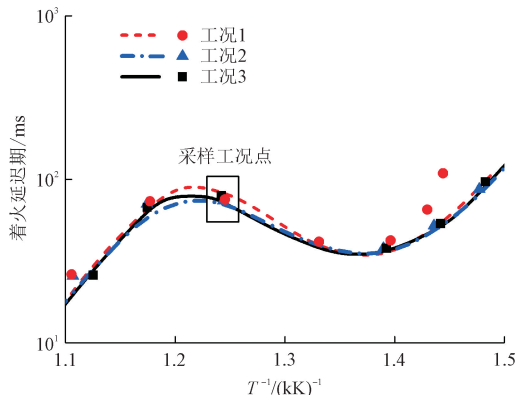


图4 工况1~3 C_4H_{10} 混合气的 τ_{IDT}

Fig. 4 τ_{IDT} s of C_4H_{10} mixtures in case 1~3

工况1~3 τ_{IDT} 测量误差随温度的分布曲线如图5所示,低温区中 τ_{IDT} 对气流扰动较为敏感。工况1(强扰动作用下)燃烧缸内平均温度低于理想绝热温度,导致混合气的 τ_{IDT} 大幅延长。工况2存在中等扰动,但是CFD预测的 τ_{IDT} 误差与工况3接近。这是因为,尽管出现了冷气流扰动,燃烧缸内仍存在明显的绝热核心区域,核心区域温度变化与理论绝热值吻合。工况3中存在明显绝热核心, τ_{IDT} 也与0D结果十分吻合;NTC区域中核心区部分气体温度小幅降低反而会导致局部反应活性的增强,与更低温度气体造成的活性削弱作用相抵消,因此 τ_{IDT} 受气流扰动影响的敏感性降低,不同扰动工况的 τ_{IDT} 与0D结果均较为接近;高温区中 τ_{IDT} 对气流扰动敏感性相较于NTC区域有所提高,工况1、2的 τ_{IDT} 误差高于NTC区,但相较于低温区,误差仍处于较小水平。这主要是由于燃烧缸内仍有部分气体温度处于NTC温度范围,其活性抵消作用依然存在。对于绝对无扰动的工况4,文献[17,22]研究表明, τ_{IDT} 误差仅约为2%。

NTC上限温度处(采样工况点),工况3的 τ_{IDT} 的相对误差为正(CFD方法高于0D方法),工况1的相对误差为负,而具有中等气流扰动的工况2的相对误差反而最小。这是因为一阶段放热后,燃烧缸核心区的压力升高会驱动部分气体进入活塞缝隙中,导致实际温度、压力的增加较0D减少,如图2所示,因此,与0D模拟相比,工况3中CFD得到的主着火时间被推迟, τ_{IDT} 增大。对于工况1,强扰动造成燃烧缸内低温区域增加,受NTC效应的影响,这些低温区域的化学反应活性增强, τ_{IDT} 减小,因此表现为负偏差。工况2的活塞缝隙容积及气流扰动程度均介于工况1、3之间,在二者共同作用下,误差相互抵消,因此在采样处表现出最小的相对误差。

2.2 流场扰动对物种浓度分布及采样影响

为探究NTC区域内流场扰动对采样结果的影响,本文设置NTC温度上限处为采样工况点,如图5所示。由于热边界层及冷气流扰动区域的气体温度均低于绝热核心温度,因此在NTC温度上限进行采样,可以最大程度体现NTC效应对采样结果的影响,同时保证 τ_{IDT} 数据的有效性。

$\tau=0.5, 0.8$ 时,不同工况下燃烧缸内的 C_4H_{10} 与 CH_2O 分布如图6所示。工况1强烈的气流扰动加剧了物种分布的不均匀性。受NTC效应的影响,燃烧缸中低温扰动区域的燃料(C_4H_{10})浓度偏低,而中间产物(CH_2O)浓度偏高,这与非NTC工况下气流扰动的影响规律相反。工况2中,气流扰动强度降低,扰动区出现与工况1类似的情况。燃烧

缸其余部分不存在气流扰动,热边界层中局部在 NTC 效应的影响下出现偏高的燃料消耗及中间产物生成。工况 3、4 气流扰动被极大程度的抑制,NTC 的影响集中在热边界层,绝热核心区物种分布均匀。

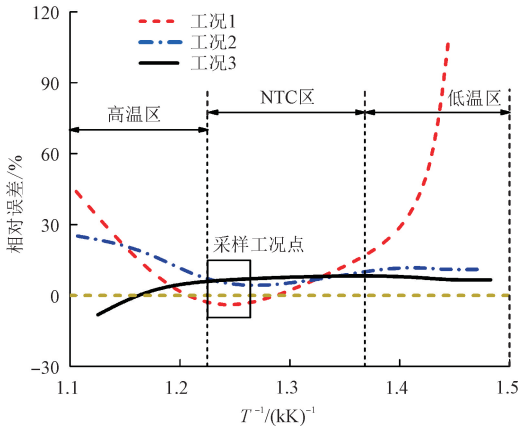


图 5 工况 1~3 的 τ_{IDT} 相对误差

Fig. 5 The relative errors of τ_{IDT} s for case 1~3

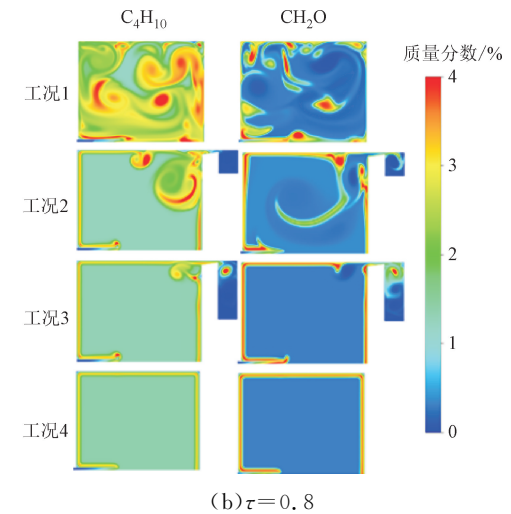
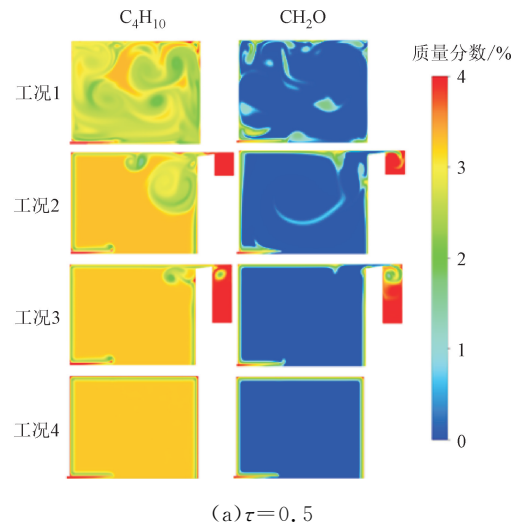
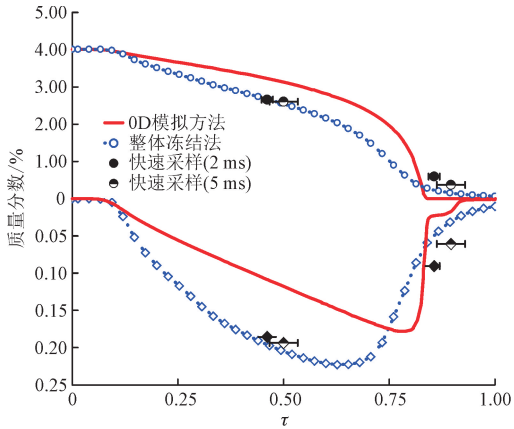


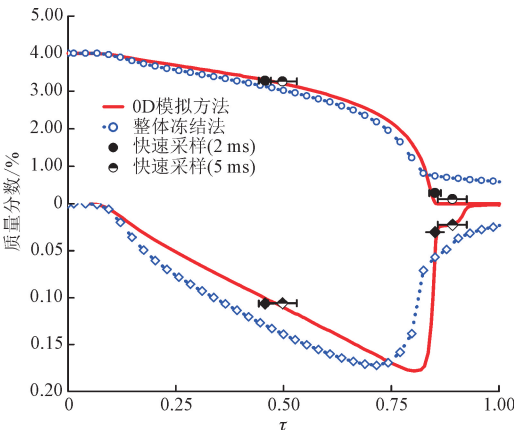
图 6 4 种工况下 C_4H_{10} 与 CH_2O 分布

Fig. 6 Distribution of C_4H_{10} and CH_2O in four cases

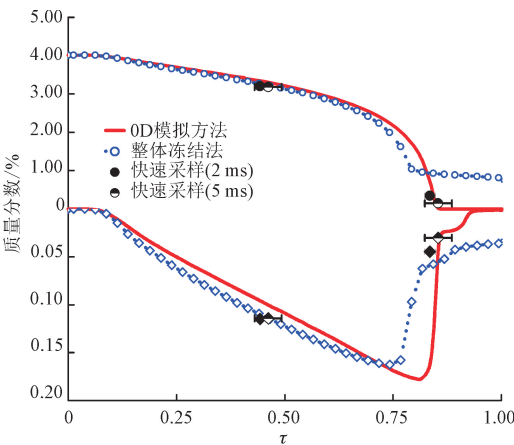
本文探究了快速采样法和整体冻结法 2 种典型采样方法受流场扰动的影响,如图 7 所示,图中上半部分表示燃料,下半部分表示中间产物。快速采样结果绘制在采样持续期中点,水平方向的误差棒设置为持续时间的一半($\pm 1\text{ ms}$, $\pm 2.5\text{ ms}$),与文献[23-24]所采用的方法相同。整体冻结法和 0D 模拟结果在整个 τ_{IDT} 范围内绘制。



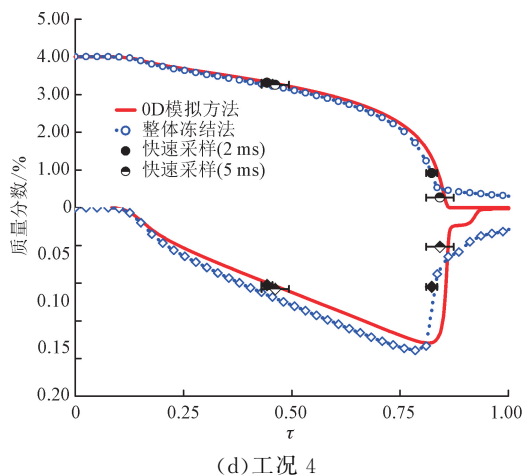
(a) 工况 1



(b) 工况 2



(c) 工况 3



(d) 工况 4

图7 工况1~4两种采样方法的CFD与0D方法模拟结果
Fig.7 Results of two sampling methods from CFD and 0D for cases 1 to 4

2.2.1 整体冻结法

整体冻结法与0D模拟方法结果变化趋势相似:初始阶段, C_4H_{10} 质量分数下降缓慢, $\tau=0.75$ 之后,下降速度增大;中间产物 CH_2O 的物种质量分数在初始阶段均接近0%;随后 CH_2O 质量分数逐渐上升,在 $\tau=0.8$ 附近达到最大值后快速降低。

反应中前期,即 $\tau < 0.7$ 时,4种工况下整体冻结法的采样结果均呈现燃料偏低,而中间产物偏高的现象,与非NTC工况下采样结果被稀释的规律相反^[17]。这是由于气流扰动导致燃烧缸内出现局部的低温区域,在NTC效应的作用下局部 C_4H_{10} 消耗速率及 CH_2O 生成速率增高,导致采样结果中 C_4H_{10} 质量分数低于准确值, CH_2O 高于准确值,即反向稀释。从工况1到工况4,随着气流扰动的降低,整体冻结法的采样误差逐渐减小。热边界层及活塞缝隙中还存在少部分温度更低(NTC温度下限至壁温)的气体,仍会产生一定的正向稀释,与反向稀释效应相抵消。总体而言,气流扰动带来的反向稀释效应产生的误差更大,采用缝隙活塞抑制气流扰动能够有效提高整体冻结采样结果的准确性。反应末期,即 $\tau > 0.8$ 时,0D模拟结果中的 C_4H_{10} 、 CH_2O 质量分数均逐渐下降到0%,而整体冻结采样结果中的 C_4H_{10} 、 CH_2O 均存在一定量的残余,这主要是由于散热导致的热边界层内燃料及中间组分无法完全反应的结果,特别是当活塞缝隙存在时,缝隙中高速的气流运动使其散热更为严重,进入活塞缝隙中的反应物及中间产物更难以发生后续的反应。对于工况2、3,随着活塞缝隙容积的增加,反应末期残留的燃料和中间产物浓度也逐渐增多,而工

况1(无活塞缝隙)强扰动的存在会破坏稳定的热边界层,加剧了热边界层和内部气体组分的扩散,因此其组分残余量最少。

采用合适的活塞缝隙可有效抑制气流扰动,此时整体冻结的采样误差主要来源于热边界层和活塞缝隙中较低温度的气体。整体冻结采样的研究中^[14]可以引入稀释比对活塞缝隙产生的稀释效应进行修正,而热边界层的存在对整体冻结采样结果影响同样显著。当前燃烧缸尺寸下,热边界层厚度为1 mm时,其总体积约为8 635 mm³,甚至略大于与工况3活塞缝隙容积7 435 mm³,且随着散热的持续时间增加,热边界层厚度越大,造成的影响也越大。

2.2.2 快速采样法

由快速采样法的结果可知,随着气流扰动程度的减小,采样结果与0D结果的偏差呈减小趋势。特别的,当采样持续期为2 ms、 $\tau=0.5$ 时工况1中的快速采样结果与整体冻结法基本一致,这是因为强扰动削弱燃烧缸内的物种浓度梯度,进入采样探针的混合气成分接近于燃烧缸内的平均水平。而工况2中,快速采样得到的两物种质量分数与0D模拟的结果相对更为接近,这是因为采样探针附近存在较强程度的气流扰动,气体温度下降程度较大,NTC作用下的反向稀释与更低温度气体的正向稀释相抵消的结果。工况3、4中的气流扰动程度更小,采样结果的误差主要来源于探针表面形成的热边界层的反向稀释作用,因此其采样结果均呈现燃料浓度略微偏低而中间产物略微偏高的现象。

探针内固有气体与其壁面热边界层气体在采样初始阶段被采集,之后核心区气体进入采样罐。延长采样持续期可以增加来自核心区气体的比例,因此本文还探究了采样持续期为5 ms时的采样精度。结果表明: $\tau=0.5$ 时,延长快速采样持续期对结果影响很小,两种持续期的结果基本处于同一趋势;当 $\tau=0.8$ 时,持续期5 ms的采样结果更接近于标准值。这是因为反应中期混合气的温度处于NTC范围,热边界层及探针内部分气体(高温部分)的反向稀释效应与另一部分气体(低温部分)产生的正向稀释相抵消,采样精度随核心区气体比例的增加变化不明显;而接近着火时,受一阶段反应放热的影响,燃烧缸内气体的温度已升高至NTC范围外,且物种浓度变化剧烈,较长的采样持续期使更多反应后期的气体组分进入,抵消了热边界层及探针内固有气体的稀释作用,因而精度提高明显。

2.3 不同采样方法适用性分析

反应中期,两种采样方法在不同扰动工况下采样结果的相对误差如图 8 所示。随着燃烧缸内气流扰动的减小,两种方法的采样误差总体呈现减小趋势。工况 1~3,整体冻结法的采样误差单调降低,工况 4 的误差略有提升,而快速采样法在工况 2 下出现了明显的局部偏差较小的现象,这是由于前文提及的正反向稀释效应抵消的结果。NTC 范围内,当燃烧缸内的强气流扰动得到抑制时,快速采样法的精度提高更为明显,而进一步降低气流扰动对两种方法采样精度的提升作用均有限。

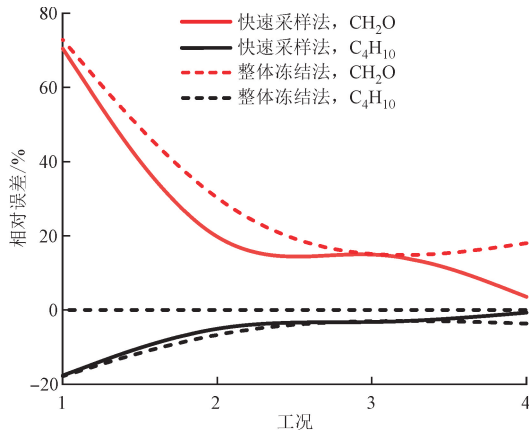


图 8 $\tau=0.5$ 时的两种采样方法在不同扰动工况下采样结果的相对误差

Fig. 8 The relative errors of the results using two sampling methods at $\tau=0.5$

以上研究表明,NTC 范围内快速采样法的结果具有更强的鲁棒性,实验中即使燃烧缸内存在一定程度的气流扰动,其采样结果的准确性依然能够得到保证。整体冻结法适用于反应中前期的采样,且需保证燃烧缸内具有较为均匀的流场分布,其采样精度与快速采样法相当。反应后期接近着火时,整体冻结的采样方法由于受到燃烧缸壁面热边界层和活塞缝隙中残余气体的影响,采样结果的偏差较大,实际研究应用中需进行修正。快速采样法在临近着火时刻仍可以得到较为准确的结果,此时应主要考虑时间方向的误差。

3 结 论

本文基于 RCM 反应器,采用 CFD 与 0D 数值模拟方法,对 C₄H₁₀ 混合物在 NTC 区域自燃过程的物种采样不确定度进行了研究,对比了不同气流扰动情况下混合气 τ_{IDT} 以及两种典型采样方法的物种浓度结果。以 0D 模拟结果为基准,获得了燃烧缸内气流扰动程度对 τ_{IDT} 和不同采样方法物种浓度结

果准确性的影响规律。

(1)低温区中 τ_{IDT} 对气流扰动较为敏感,强气流扰动下,燃烧缸内平均温度低于理想绝热温度,混合气的 τ_{IDT} 大幅延长,而当燃烧缸内存在明显绝热核心时,即使存在一定程度的气流扰动, τ_{IDT} 与 0D 结果仍十分吻合;NTC 区域中 τ_{IDT} 对气流扰动敏感性较低,不同扰动工况的 τ_{IDT} 与 0D 结果均较为接近;高温区中 τ_{IDT} 对气流扰动敏感性相较于 NTC 区域有所提高,气流扰动带来的 τ_{IDT} 误差高于 NTC 区,但相较于低温区,误差仍处于较小水平。

(2)整体冻结法与 0D 模拟的物种浓度结果变化趋势相似。反应中前期,不同气流扰动工况下的采样结果均呈现燃料偏低,而中间产物偏高的现象;反应末期,由于散热导致的热边界层内燃料及中间组分无法完全反应消耗,0D 模拟结果中的燃料和中间产物质量分数均逐渐下降到 0%,而整体冻结采样结果中的燃料和中间产物均存在一定量的残余。

(3)对于快速采样法,随着气流扰动程度的减小,采样结果与 0D 结果的偏差呈减小趋势。燃料 NTC 效应的影响下,气流扰动带来的反向稀释与采样的系统误差存在抵消现象。反应中前期,不同持续期的结果基本处于同一趋势;反应后期,较长持续期的采样结果更接近于标准值。

整体而言,NTC 范围内的快速采样结果具有更强的鲁棒性,实验中即使燃烧缸内存在一定程度的气流扰动,其采样结果的准确性依然能够得到保证。整体冻结法适用于反应中前期的采样,且需保证燃烧缸内具有较为均匀的流场分布,其采样精度与快速采样法相当。

参考文献:

- [1] 常国峰. 快速压缩机的开发及其在 HCCI 燃烧研究中的应用 [D]. 长春: 吉林大学, 2006.
- [2] 缪雪龙. RCCI 新燃烧技术综述 [J]. 现代车用动力, 2014(1): 6-13.
MIAO Xuelong. RCCI combustion review [J]. Modern Vehicle Power, 2014(1): 6-13.
- [3] 张齐英, 姜雪, 刘曦宇, 等. 二甲醚掺混对氨高温着火延迟期的影响 [J]. 西安交通大学学报, 2023, 57(9): 79-86.
ZHANG Qiying, JIANG Xue, LIU Xiyu, et al. Effects of dimethyl ether addition on the high temperature ignition delays of ammonia [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2023, 57(9): 79-86.
- [4] 张鹏. 基于快速压缩机的燃烧基元反应速率测量 [D]. 北京: 清华大学, 2018.
- [5] 刘兵, 李春艳, 孙天旗, 等. 离子电流法测量 CH₄/H₂

- 混合气燃烧火焰传播速度的实验研究[J]. 西安交通大学学报, 2015, 49(1): 40-45.
- LIU Bing, LI Chunyan, SUN Tianqi, et al. Measurement for speed of CH_4/H_2 blends with ionic current method [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2015, 49(1): 40-45.
- [6] 吴君军, KHALED F, FAROOQ A, 等. 甲酸乙酯与羟基自由基提取反应速率常数的量化计算与激波管实验[J]. 气体物理, 2018, 3(6): 9-15.
- WU Junjun, KHALED F, FAROOQ A, et al. A combined theoretical and experimental study on the reaction kinetics of ethyl formate with the hydroxyl radical [J]. Physics of Gases, 2018, 3(6): 9-15.
- [7] SUNG C J, CURRAN H J. Using rapid compression machines for chemical kinetics studies [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2014, 44: 1-18.
- [8] HE X, WALTON S M, ZIGLER B T, et al. Experimental investigation of the intermediates of isooctane during ignition [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2007, 39(9): 498-517.
- [9] FENARD Y, BOUMEHDI M A, VANHOVE G. Experimental and kinetic modeling study of 2-methyltetrahydrofuran oxidation under engine-relevant conditions [J]. Combustion and Flame, 2017, 178: 168-181.
- [10] MARTINENGO A, MELCZER J, SCHLIMME E. Analytical investigations of stable products during reaction of adiabatically compressed hydrocarbon air mixtures [J]. Symposium International on Combustion, 1965, 10(1): 323-330.
- [11] COX A, GRIFFITHS J F, MOHAMED C, et al. Extents of alkane combustion during rapid compression leading to single-and two-stage ignition [J]. Symposium International on Combustion, 1996, 26(2): 2685-2692.
- [12] KARWAT D M A, WAGNON S W, TEINI P D, et al. On the chemical kinetics of n-butanol: ignition and speciation studies [J]. The Journal of Physical Chemistry, 2011, 115(19): 4909-4921.
- [13] RAMALINGAM A, FENARD Y, HEUFER A. Ignition delay time and species measurement in a rapid compression machine: a case study on high-pressure oxidation of propane [J]. Combustion and Flame, 2020, 211: 392-405.
- [14] WU Y, MAI Z, RAO B, et al. Understanding the reversal dilution effect of the species sampling in the negative temperature coefficient region [J]. Fuel, 2023: 129443.
- [15] WU Y, YANG M, TANG C, et al. Promoting "adiabatic core" approximation in a rapid compression machine by an optimized creviced piston design [J]. Fuel, 2019, 251: 328-340.
- [16] MOLANA M, GOYAL T, SAMIMI A O. Measurement and simulation of n-Heptane mixture autoignition [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2021, 60(38): 13859-13868.
- [17] WU Y, KONG X, FEI L, et al. Numerical study toward fast intermediate species sampling with high accuracy in a rapid compression machine [J]. Energy & Fuels, 2022, 36(23): 14361-14370.
- [18] SARATHY S M, PARK S, WEBER B W, et al. A comprehensive experimental and modeling study of isopentanol combustion [J]. Combustion and Flame, 2013, 160(12): 2712-2728.
- [19] MITTAL G, SUNG C J. Aerodynamics inside a rapid compression machine [J]. Combustion & Flame, 2006, 145(1/2): 160-180.
- [20] YOUSEFIAN S, GAUTHIER F, MORÁNGUERRERO A, et al. A simplified approach to the prediction and analysis of temperature inhomogeneity in rapid compression machines [J]. Energy & Fuels, 2015, 29: 8216-8225.
- [21] YOUSEFIAN S, QUINLAN N J, MONAGHAN R F D. Simulation of turbulent flow in a rapid compression machine; large eddy simulation and computationally efficient alternatives for the design of ignition delay time experiments [J]. Fuel, 2018, 234: 30-47.
- [22] WU Y, TANG C, YANG M, et al. Evaluation of non-ideal piston stopping effects on the "adiabatic core" and ignition delay time simulation in rapid compression machines [J]. Combustion and Flame, 2020, 218: 229-233.
- [23] ZHANG P, LI S, WANG Y, et al. Measurement of reaction rate constants using RCM: a case study of decomposition of dimethyl carbonate to dimethyl ether [J]. Combustion and Flame, 2017, 183: 30-38.
- [24] WAGNON S W, KARWAT D M A, WOOLDRIDGE M S, et al. Experimental and modeling study of methyl trans-3-Hexenoate autoignition [J]. Energy & Fuels, 2014, 28(11): 7227-7234.

(编辑 赵炜)