

富氧燃烧对柴油机低温燃烧反应 机理影响的数值分析

赵伟¹, 舒歌群¹, 张韦^{1,2}, 梁友才²

(1. 天津大学内燃机燃烧学国家重点实验室, 300072, 天津; 2. 昆明理工大学交通工程学院, 650093, 昆明)

摘要: 从柴油机缸内燃烧反应的化学反应动力学机理出发, 利用 CHEMKIN 软件对富氧燃烧时的低温反应进行了研究, 运用计算流体动力学分析方法, 通过耦合柴油机三维燃烧模型和正庚烷氧化反应动力学模型对低温反应机理中重要的脱氢反应和加氧反应过程进行了数值分析. 对比空气助燃、富氧浓度对脱氢反应和加氧反应的影响发现: 富氧燃烧能够促进脱氢反应, 在压缩的上止点时刻, 氧的体积分数分别为 23%、25% 和 27% 时的缸内脱氢产物 C_7H_{15} 的质量分数最大值分别是空气助燃时的 1.95 倍、4.77 倍和 291.58 倍; 加氧反应的速率随富氧浓度的升高呈线性增长趋势; 富氧燃烧可以提高柴油机的热效率, 使缸内生成更多的 OH 自由基, 从而加快了后续的中温反应和高温反应速度.

关键词: 富氧燃烧; 柴油机; 低温反应机理; 计算流体动力学

中图分类号: TK421 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2012)03-0069-06

Numerical Analysis on Effects of Oxygen-Enriched Combustion on Low-Temperature Reaction Mechanism of Diesel Engine

ZHAO Wei¹, SHU Gequn¹, ZHANG Wei^{1,2}, LIANG Youcai²

(1. State Key Laboratory of Engine, Tianjin University, Tianjin 300072, China; 2. Faculty of Transportation Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China)

Abstract: From the chemical reaction kinetics of diesel engine combustion, the investigation into the low-temperature reaction of oxygen-enriched combustion was done by CHEMKIN. Two important low-temperature reactions, the dehydrogenation reaction and the oxygen-addition reaction, were numerically analyzed by the CFD three-dimensional combustion model coupled with the N-heptane oxidation kinetic model. The results show that oxygen-enriched combustion can promote the dehydrogenation reaction. At the compression TDC, the maximum mass fraction of C_7H_{15} produced by the dehydrogenation reaction in the oxygen-enriched combustion is 1.95 times, 4.77 times and 291.58 times of in the ordinary combustion when the oxygen concentration is 23%, 25% and 27%, respectively. The oxygen-addition reaction rate increases linearly with an increase in the oxygen concentration. In addition, oxygen-enriched combustion enhances the diesel engine thermal efficiency and generates more OH radicals, and accelerating the subsequent reactions at medium temperature and high temperature.

Keywords: oxygen-enriched combustion; diesel engine; low temperature reaction mechanism; computational fluid dynamics

富氧燃烧是通过增加燃烧室中氧的含量来改善燃烧和排放的一种技术手段^[1-2]. 研究发现,柴油机上实现富氧燃烧后提高了缸内燃料和氧气的混合质量,同时火焰传播速度加快、燃烧温度升高、柴油机的热效率提高,使得比油耗降低,HC、CO 和碳烟排放得以改善,但是会导致 NO_x 排放恶化^[3-6]. 目前,对于富氧燃烧的研究主要是总结富氧燃烧对发动机的动力性、经济性和排放性的影响规律,进而试图从温度、当量比等宏观参数的变化上来解释该影响规律. 为解释和解决上述问题提供更加深入的理论指导,必须对柴油机富氧燃烧的微观反应机理进行分析和研究.

柴油机缸内燃烧反应大致分为 3 个阶段,即低温反应阶段、中温反应阶段和高温反应阶段. 低温反应是整个燃烧的初始反应,在 600~800 K 的温度范围内发生,为放热反应,该反应发生后可使整个系统的温度大约上升 200 K. 系统温度升高后,第 1 次加氧反应产物 C₇H₁₅OO 的同分异构物 C₇H₁₄OOH 开始发生分解反应,该反应即为中温反应. 低温反应能够为中温反应创造必须的温度条件,也能够产生初始自由基,形成始发的自由基潭,进而引起后续链锁分支反应^[7]. 因此,低温反应会影响整个燃烧反应.

本文从缸内燃烧反应的化学反应动力学机理出发,利用 CHEMKIN 软件对柴油机富氧燃烧的低温反应机理进行了研究,运用柴油机计算流体力学(CFD)三维燃烧模型,加之耦合化学反应动力学模型,对柴油机富氧燃烧时低温反应机理中重要的脱氢反应和加氧反应过程进行了数值分析.

1 计算模型

1.1 化学反应动力学模型

柴油是一种混合物,在模拟计算时其通常采用一种性质相近的纯净物来代替. 正庚烷(C₇H₁₆)的十六烷值为 56,与柴油的十六烷值相近,所以国内外大都采用正庚烷来代替柴油进行燃烧模拟计算. 本文的化学反应动力学模型采用苏万华提出的 SKLE 正庚烷反应简化模型^[8],该模型能够准确地预测着火、燃烧和主要成分的变化过程.

1.2 柴油机多维燃烧模型

图 1 为柴油机的燃烧室网格划分(TDC)和喷油规律. 网格的位置在压缩上止点. 试验柴油机的燃油喷嘴有 6 个呈轴对称的喷孔,所以计算时仅针对 1/6 模型即可. 为了提高计算精度,网格均为六面体

网格,边长均为 0.001 m. 计算时,动网格的范围是从发动机进气门关闭(IVC)到排气门开启(EVO). 压缩上止点设定为 0°,模拟计算区间为 -132°~-115°. 计算中保持每循环喷油量和喷油规律不变,喷油规律如图 1b 所示. 燃油蒸发模型为 Dukowicz 模型,喷雾破碎模型为 Wave 模型.

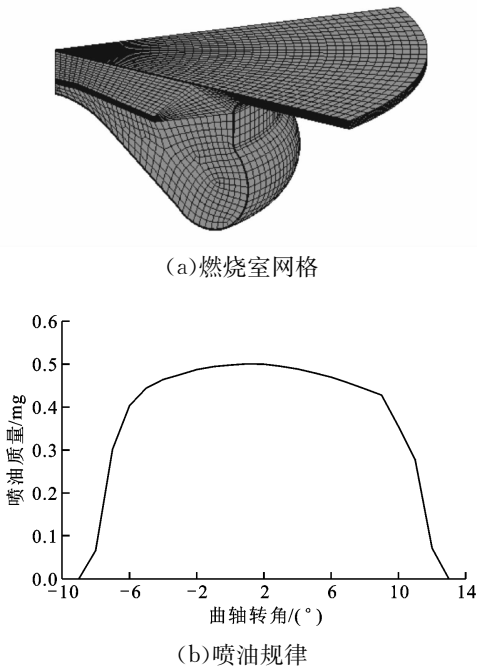


图1 柴油机的燃烧室网格划分和喷油规律

2 模型验证

试验在一台四缸水冷直喷柴油机上进行,工况为:最大扭矩转速 2 000 r/min、全负荷. 表 1 为试验发动机的基本参数. 图 2 是模拟和试验的压力曲线. 从图 2 可以看出,计算值和试验值基本吻合,特别是对于着火时刻的预测,计算值和试验值几乎一致,因此可以认为本文的计算模型是可信的.

表1 试验发动机的基本参数

参数	类型及数值
型式	立式、直列、水冷、四冲程
气缸直径 D/mm	100
活塞行程 S/mm	115
连杆长度/ mm	174
压缩比	17.5
活塞总排量/ L	3.6
气缸数	4
燃烧室类型	ω 型
涡流比	1.5
供油提前角/ $^\circ$	9
供油持续角/ $^\circ$	22
标定功率/ $\text{kW} \cdot \text{r} \cdot \text{min}^{-1}$	80×3 200

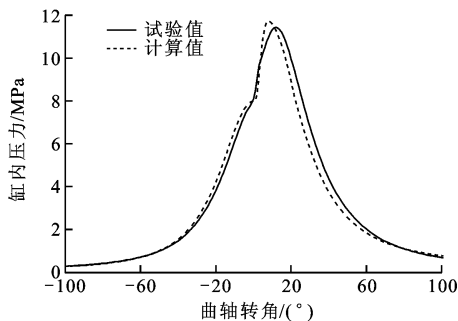


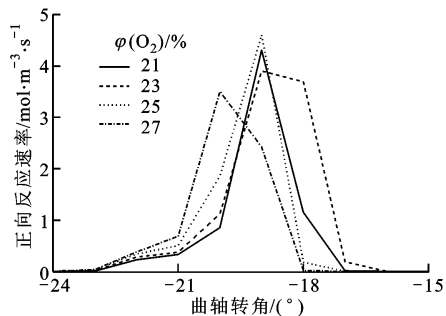
图2 2 000 r/min、全负荷下模拟和试验的压力曲线

3 富氧燃烧对脱氢反应机理的影响

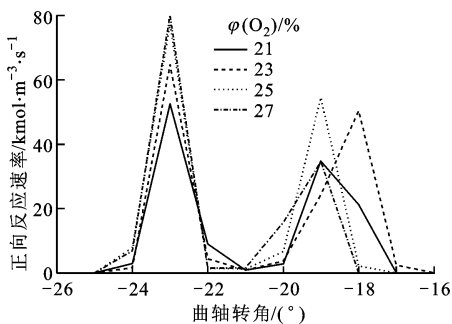
在中、低温反应阶段,正庚烷分子中的氢原子会在反应中脱落,从而生成烷基和另一种含氢小分子。本文脱氢反应涉及到的基元反应如下



图3为运用CHEMKIN软件分析得到的不同的富氧燃烧对R1和R6正向反应速率的影响规律。从图3可以看出,R1的正向反应速率比R6小4个数量级,可以认为该反应对总的脱氢机理贡献不大,因此本文将重点分析不同的富氧燃烧对R6反应机理的影响规律。



(a) R1



(b) R6

图3 2 000 r/min、全负荷下不同的富氧燃烧对R1和R6正向反应速率的影响

R6的反应分为2个阶段:①压缩上止点前 $25^{\circ} \sim 21^{\circ}$,该阶段R6的正向反应速率随富氧浓度的升高不断增大;②阶段①的继续,该阶段R6的正向反应速率呈现出与阶段①相似的变化趋势。由于27%富氧(氧的体积分数为27%)燃烧时,R6在阶段①的反应快速进行,所以反应物的量在该阶段结束时已所剩无几,从而导致R6在阶段②的反应速率下降。总体来说,R6的正向反应速率受富氧浓度的影响较大,随着富氧浓度的升高,反应速率呈现出不断增大的趋势。

图4为富氧燃烧时脱氢反应中主要产物 C_7H_{15} 的平均质量分数 $w(C_7H_{15})$ 随曲轴转角的变化规律。在燃烧反应前期,23%、25%、27%富氧燃烧条件下的 $w(C_7H_{15})$ 大于21%空气(氧的体积分数为21%)助燃条件。这说明,富氧燃烧在正庚烷氧化反应中能够促进脱氢反应,使得在反应初期生成更多的 C_7H_{15} 、 HO_2 和 H_2O 。其中, C_7H_{15} 和 HO_2 是正庚烷氧化反应中非常重要的产物,其大小将对正庚烷在整个氧化过程中产生非常重要的影响^[9]。

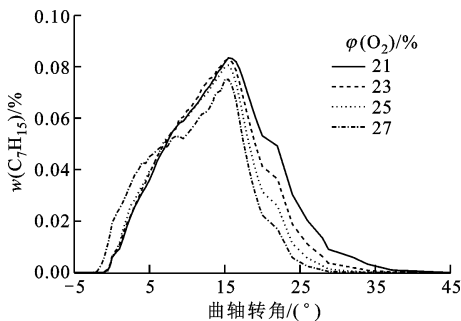


图4 2 000 r/min、全负荷下富氧燃烧时脱氢反应的 $w(C_7H_{15})$ 随曲轴转角的变化规律

图5为压缩上止点时刻缸内 $w(C_7H_{15})$ 在气缸中心线切片上的分布。该时刻是临近燃烧的着火时刻,是研究低温反应程度的最佳时刻。从图5可以看出, C_7H_{15} 主要分布在喷雾末端的燃油和空气的混合气区域,这是由于喷雾末端的燃油雾化程度较高,燃油喷雾的扩散程度达到最大,喷雾末端的燃油与氧气充分混合,也表明脱氢反应发生在喷雾末端的稀混合气区域。随着富氧浓度的升高,缸内 $w(C_7H_{15})$ 的最大值不断增大,高浓度区域范围不断扩大。在压缩上止点时刻,23%、25%、27%富氧燃烧条件下缸内 $w(C_7H_{15})$ 的最大值分别是21%空气助燃条件时的1.95倍、4.77倍、291.58倍。

图6为富氧下 20° 时刻缸内 $w(C_7H_{16})$ 在气缸中心线切片上的分布。该时刻缸内反应即将结束,缸

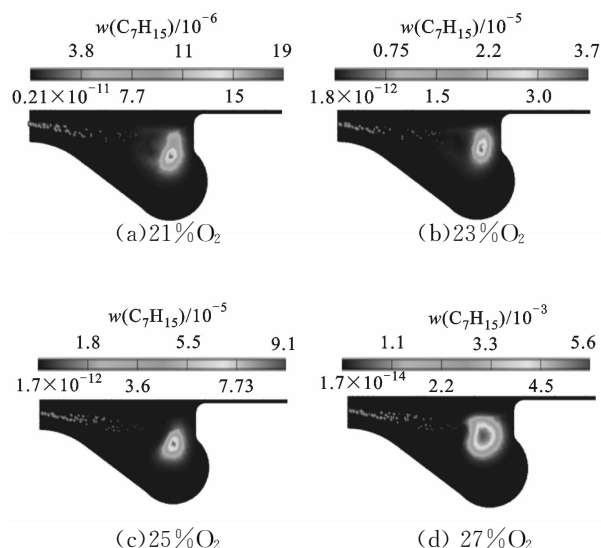


图5 压缩上止点时刻缸内 $w(\text{C}_7\text{H}_{15})$ 在气缸中心线切片上的分布

内某些物质的量能够反映出整个燃烧过程中相关机理反应的程度.从图6可以看出,富氧燃烧时,缸内 $w(\text{C}_7\text{H}_{16})$ 在该时刻的大小和分布范围明显比空气助燃时小,富氧浓度越大, $w(\text{C}_7\text{H}_{16})$ 越小.本文中, C_7H_{16} 的消耗主要是通过脱氢过程实现的,这说明富氧燃烧中 C_7H_{16} 的脱氢反应更为剧烈,有更多的 C_7H_{16} 参与反应.

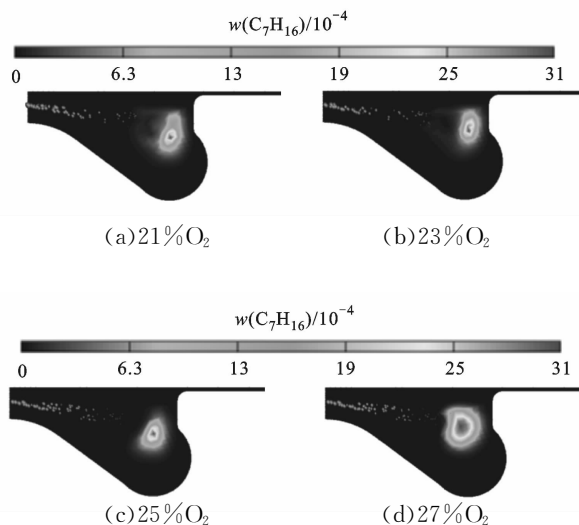
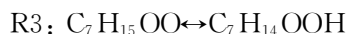
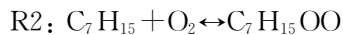


图6 富氧下 20° 时刻缸内 $w(\text{C}_7\text{H}_{16})$ 在气缸中心线切片上的分布

4 富氧燃烧对加氧反应机理的影响

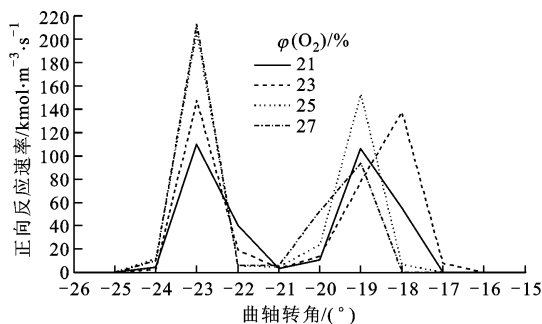
正庚烷脱氢之后,其产物 C_7H_{15} 与 O_2 反应后生成的过氧烷基 $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{OO}$, $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{OO}$ 经过异构反应转变成其同分异构物 $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}$,该异构物将与 O_2 发生二次加氧反应,从而生成过氧化氢烷基

$\text{OOHC}_7\text{H}_{14}\text{OOH}$. 由于 $\text{OOHC}_7\text{H}_{14}\text{OOH}$ 的稳定性较差,所以生成后的它会进一步异构化并离解为相对稳定的过氧化氢酮 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 和 OH 自由基.这一过程涉及到一系列的基元反应如下

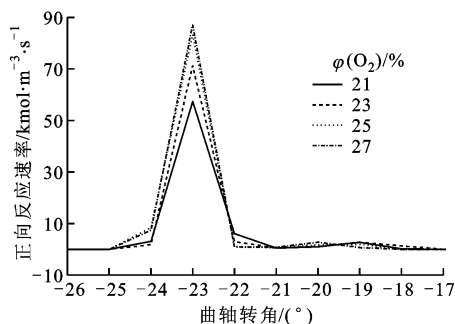


这4个基元反应在正庚烷的氧化中发挥着非常重要的作用,它们是低温反应阶段的主要反应,也是支链反应生成自由基的必经反应.

图7为运用CHEMKIN软件分析得到的富氧燃烧对加氧反应时R2和R4的正向反应速率的影响.第1次加氧反应时R2的正向反应分为2个阶段:①压缩上止点前 $25^\circ \sim 21^\circ$,该阶段中R2的正向反应速率随富氧浓度的升高不断增大;②阶段①的继续,该阶段中R2的正向反应速率呈现出与阶段①相似的变化趋势.由于 27% 富氧燃烧时的R2在阶段①中快速进行,反应物的量在该阶段反应结束时已所剩无几,从而导致R2在阶段②的反应速率下降.当富氧浓度不断升高时,第2次加氧反应R4的正向反应速率逐渐加快.因此,富氧燃烧对2次加氧反应都有促进作用,富氧浓度越高,加氧反应的速率越快.



(a) R2



(b) R4

图7 富氧燃烧对加氧时反应时R2和R4的正向反应速率的影响

2次加氧产物 $\text{OOC}_7\text{H}_{14}\text{OOH}$ 的异构离解产物 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 在 800 K 以下是相对稳定的,该物质的变化趋势可以在一定程度上反映出 2 次加氧反应的变化规律. 富氧下缸内 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 的平均质量分数随曲轴转角的变化如图 8 所示. 在压缩上止点前 $5^\circ \sim 3^\circ$ 时刻, 23%、25%、27% 富氧下 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数均比 21% 空气助燃时大, 富氧浓度越高, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数越大. 根据 R5 知, OH 和 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 是过氧化氢烷基异构离解的 2 种产物, 因此富氧燃烧时 R5 生成的 OH 比空气助燃时多, 富氧浓度越高, OH 的生成量越大. OH 是缸内非常重要的反应产物, 其在反应全过程中发挥着非常重要的作用^[10]. 富氧燃烧时较大的 OH 生成量会促进正庚烷分子脱氢反应加速进行, 这与富氧燃烧能够促进脱氢反应的结论相吻合. 富氧燃烧下, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 的平均质量分数在缸内着火后会迅速下降, 富氧浓度越高, 下降速度越快, 说明富氧浓度越高, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 的离解速率越快, 所以有大量的自由基生成.

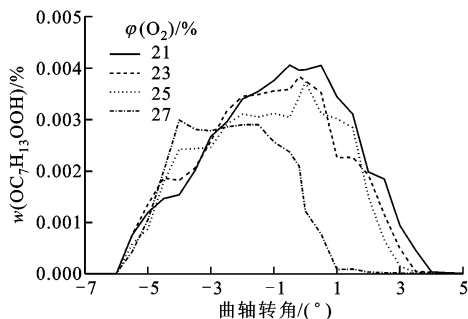


图 8 2 000 r/min、全负荷、富氧下缸内 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数随曲轴转角的变化

图 9 为压缩上止点前 4° 时刻及富氧燃烧下缸内 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数在气缸中心线切片上的分布. 从压缩上止点前 4° 开始, 缸内温度达到 800 K 以上, 此时 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 开始离解为多种自由基, 因此本文选择该时刻对缸内的 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 进行分析. 从图 9 可以看出, 随着富氧浓度的升高, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数逐渐增大, 分布范围逐渐扩大.

图 10 为图 9 切片中 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数随富氧浓度的变化. 很明显, 随着富氧浓度的升高, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 的平均质量分数增大, 并呈现出近似线性的变化.

图 11 为低温反应后期缸内重要组分的平均质量分数随富氧浓度的变化规律. 富氧燃烧能够促进

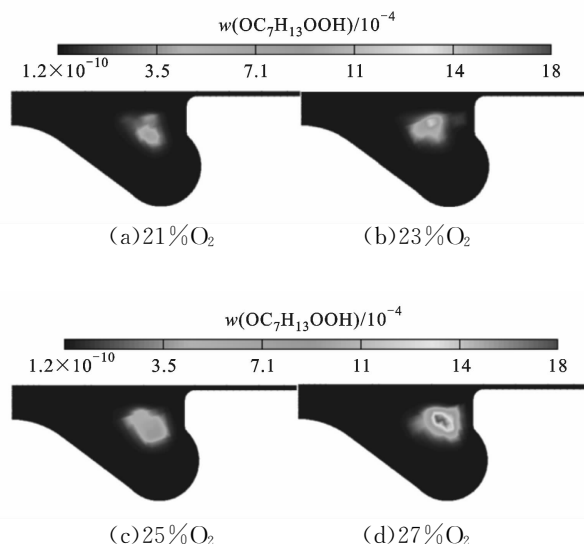


图 9 压缩上止点前 4° 时刻及富氧燃烧下缸内 $w(\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH})$ 在气缸中心线切片上的分布

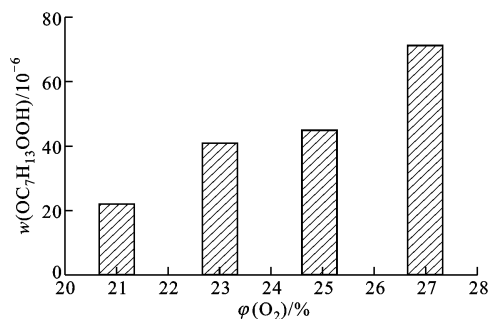


图 10 图 9 切片中 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 平均质量分数随富氧浓度的变化

缸内的脱氢反应, 使更多的 C_7H_{16} 经脱氢反应后生成 C_7H_{15} , 从而提高了发动机的热效率; 富氧燃烧能够加快缸内低温支链反应的速率, 使更多 OH 自由基生成. 燃烧反应中的加氧反应受到富氧燃烧的影响, 缸内在着火前, 存在着更多的 $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 和 OH 自由基, 缸内着火后, $\text{OC}_7\text{H}_{13}\text{OOH}$ 会离解生成 OH 自由基, 大量的 OH 自由基将导致链分支反应快速进行, 从而加快了后续的中温和高温反应.

5 结 论

(1) 正庚烷的脱氢反应主要发生在喷雾末端的稀混合气区域, 富氧燃烧能够促进正庚烷的脱氢反应. 在压缩上止点及 23%、25%、27% 富氧下, 缸内脱氢后的 $w(\text{C}_7\text{H}_{15})$ 最大值分别是 21% 空气助燃时的 1.95 倍、4.77 倍、291.58 倍.

(2) 富氧燃烧能够促进柴油机缸内烷基的 2 次加氧反应, 这种作用随着富氧浓度的升高更为明显,

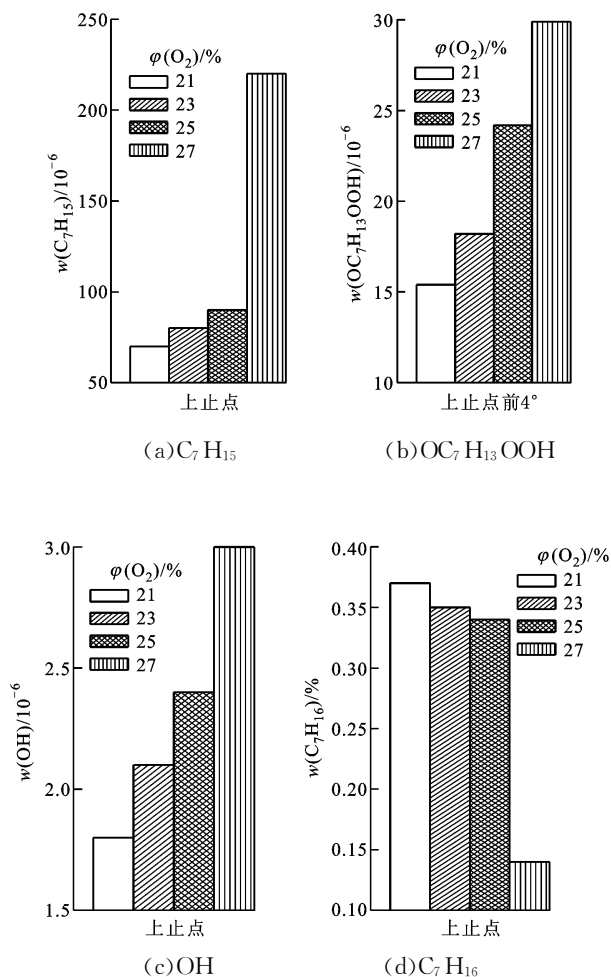


图 11 低温反应后期缸内重要组分的平均质量分数随富氧浓度的变化

并且呈现出近似线性变化的趋势。缸内着火前,剧烈的加氧反应会促使生成更多的 $OC_7H_{13}OOH$,一旦缸内着火, $OC_7H_{13}OOH$ 会迅速分解成大量的 OH 自由基。

(3)在低温反应中,富氧燃烧通过促进脱氢反应和加氧反应提高了发动机的热效率,缸内着火前,剧烈的低温支链反应和加氧反应会生成大量的 OH 自由基,加氧反应使得 $OC_7H_{13}OOH$ 在着火后分解生成大量的 OH 自由基,这些活跃的自由基将导致链分支反应快速进行,从而加快了后续的中温和高温反应。

参考文献:

[1] ARRÈGLE J, LÓPEZ J J, GARCÍA J M, et al. De-

velopment of a zero-dimensional diesel combustion model: part 1 Analysis of the quasi-steady diffusion combustion phase[J]. Appl Thermal Eng, 2003, 23 (11): 1301-1317.

- [2] SONG K H, NAG P, LITZINGER T A, et al. Effects of oxygenated additives on aromatic species in fuel-rich, premixed ethane combustion: a modeling study[J]. Combustion Flame, 2003, 135(3): 341-349.
- [3] MARR W W, SEKAR R R, COLE R L, et al. Oxygen-enriched diesel engine experiments with a low-grade fuel, SAE 932805 [R]. Washington DC, USA: SAE, 1993.
- [4] POOLA R B, SEKAR R. Reduction of NO_x and particulate emissions by using oxygen-enriched combustion air in a locomotive diesel engine [J]. ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2003, 125(2): 524-533.
- [5] PEREZ P L, BOEHMAN A L. Performance of a single-cylinder diesel engine using oxygen-enriched intake air at simulated high-altitude conditions [J]. Aerospace Science and Technology, 2010, 14(2): 83-94.
- [6] UDAYAKUMAR R, MEHER A K. Use of oxygen enriched air in a direct injection diesel engine [J]. Journal of the Institution of Engineers: India Mechanical Engineering Division, 2005, 86(10): 156-159.
- [7] 苏万华, 赵华, 王建昕, 等. 均质压燃低温燃烧技术发动机理论与技术[M]. 北京: 科学出版社, 2010:176.
- [8] 黄豪中, 苏万华. 一个新的用于 HCCI 发动机燃烧研究的正庚烷化学反应动力学简化模型 [J]. 内燃机学报, 2005, 23(1): 42-51.
- HUANG Haozhong, SU Wanghua, A new reduced chemical kinematic model of n-heptane combustion for HCCI Engine Simulations [J]. Transactions of CSICE, 2005, 23(1): 42-51.
- [9] CURRAN H J, GAFFURI P, PITZ W J, et al. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation [J]. Combustion and Flame, 1998, 114 (1/2): 149-177.
- [10] VASU S S, DAVIDSON D F, HANSON R K. OH time-histories during oxidation of n-heptane and methylcyclohexane at high pressure and temperatures [J]. Combustion and Flame, 2009, 156(4): 736-749.

(编辑 苗凌)