

不同燃料对压燃发动机燃烧及关键组分的影响

范钱旺, 李理光, 邓俊, 胡宗杰

(同济大学 汽车学院, 上海 201804)

摘要: 采用计算流体力学(CFD)模拟技术研究了直喷式柴油机燃用不同燃料(柴油、甲苯、十二烷、十六烷、正庚烷及异庚烷)的燃烧特性以及燃烧过程中关键反应组分的变化历程, 分析了不同燃料燃烧反应组分与放热率之间的关系. 研究表明: 缸内压力计算值与参考文献中实验值较吻合, 验证了模型的正确性; 燃用甲苯缸内压力、放热率以及累积放热量最大; 燃用甲苯缸内燃烧反应产生的 H, N, OH 与 O 活性基量级最大. 此外, 燃用 6 种不同燃料, 均是 OH 活性基生成较多.

关键词: 柴油机; 数值模拟; 不同燃料; 反应组分

中图分类号: TK 421.2

文献标识码: A

Effect of Various Fuels on Combustion and Key Species for Compression Ignition Engines

FAN Qianwang, LI Liguang, DENG Jun, HU Zongjie

(College of Automotive Studies, Tongji University, Shanghai 201804, China)

Abstract: The combustion characteristics and the variation of in-cylinder reaction species were investigated for DI-diesel engines with various fuels (diesel, toluene, cetane, dodecane, n-heptane and i-heptane) using computational fluid dynamics (CFD) technique. Meanwhile, an analysis was made of the correlation between the rate of heat release and reaction species. The results show that, the model is reasonable and the calculated values of in-cylinder pressure keep in accordance with experimental ones in references. Compared to other fuels, for toluene, four species (H, N, OH and O) generated in combustion process, in-cylinder pressure, rate of heat release and accumulated heat release are the highest. In addition, as to various fuels, the amount of OH species generated is also the highest.

Key words: diesel; numerical simulation; various fuels; reaction species

内燃机的燃烧和排放特性主要取决于燃料雾化、蒸发、混合的物理过程及缸内工质的化学反应动力学过程, 与燃料的理化特性有着密切的关系. 燃用不同类型、不同烃族组分和不同化学成分的燃料, 其燃烧特性及其燃烧过程中关键组分变化不同. 国内外许多学者研究了燃料理化特性对内燃机燃烧和排放的影响. 其中, Singal 等^[1]研究了燃油特性(十六烷值、密度、挥发性等)对排放的影响. 结果表明, 硫含量与燃油密度对颗粒排放有着重要影响. Yoshiyuki 等^[2]研究了燃料特性对直喷柴油机燃烧与排放特性的影响. 结果表明, 在大负荷时, 降低十六烷值导致 NO_x 排放增加而碳烟降低. Tsurutani 等^[3]研究了燃料特性与氧化对排放特性的影响. 结果表明, 增加芳烃含量导致颗粒排放增加. Li^[4], Akasaka^[5]和 Takatori^[6]从燃油燃烧化学过程的角度研究了芬芳烃含量对燃烧与排放特性的影响. 结果表明, 燃油的分子结构对颗粒排放物的生成有着重要影响. 孙万臣等^[7]研究了燃料着火性对小型柴油机稳态及恒转速增转矩瞬态工况下燃烧特性的影响. 结果表明, 在稳态和恒转速增转矩瞬态工况下, 燃料十六烷值对燃烧参数的影响具有类似的规律. 随燃料十六烷值降低, 着火始点延迟, 滞燃期增加, 燃烧速率加快.

鉴于已完成的大部分工作重点是研究了燃料特性对燃烧与排放特性的影响, 而对于不同燃料燃烧过程产生的关键反应组分变化以及反应组分与燃烧特性之间的关系研究甚少. 本文重点是通过文献中的实验数据验证采用 AVL-Fire 三维 CFD(计算流体力学)软件所建模型的正确性, 进而模拟研究了直喷柴油机在喷油提前角 17° CAD(曲轴转角)BTDC(before top dead center)时, 燃用不同种燃料(柴油、甲苯、十二烷、十六烷、正庚烷及异庚烷)的燃烧特性以及燃烧过程关键组分变化, 特别探

收稿日期: 2010-03-22

基金项目: 上海市重点学科建设基金资助项目(B303); 高等学校创新引智计划资助项目(B08019)

第一作者: 范钱旺(1982—)男, 博士生, 主要研究方向为内燃机燃烧与排放控制. E-mail: fanqianwang@126.com

通讯作者: 李理光(1962—), 教授, 博士生导师, 主要研究方向为内燃机燃烧与排放控制, 清洁代用燃料. E-mail: liguang@tongji.edu.cn

讨了不同特性的燃料在燃烧过程中关键组分变化与放热率之间的关系,为直喷柴油机代用燃料的研究以及优化燃烧过程提供依据.

1 计算模型及条件

1.1 发动机参数和模型结构

模拟的发动机为四冲程直喷柴油机,缸径为 100 mm,冲程为 105 mm,压缩比为 18. 本文模拟研究的重点在于直喷柴油机内部的燃烧情况,因此不考虑进排气过程,故在本模型中也就不加入进、排气门.

模拟的区间起于进气门关闭、终止于排气门开启时刻. 为了与柴油机实际工作状态接近,计算过程考虑缸内滞留废气,因此进气门关闭时刻气缸内物质被定义为新鲜空气与上一循环滞留废气(其中,残余废气所占质量分数为 5%).

鉴于模拟的柴油机燃烧室呈轴对称结构,本模型采用 1 : 1 比例选取八分之一结构进行建模计算,其形状及网格划分情况如图 1 所示. 其中,燃烧室的壁面为动网格边界,划分为六面体网格,网格总数为 66 230(进气门关闭时刻).

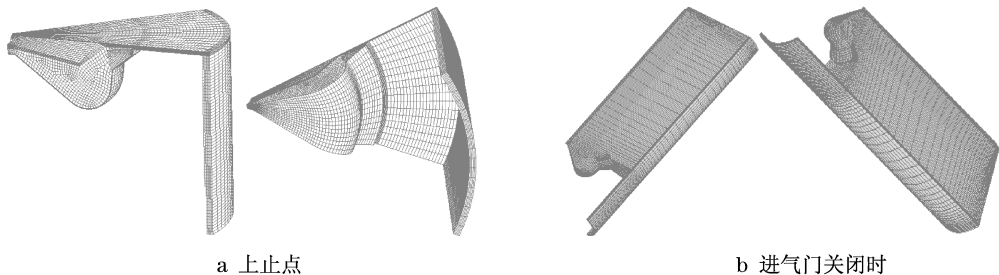


图 1 几何模型
Fig.1 Geometrical model

1.2 计算模型和求解方法

本文湍流模型选取 $k-\xi-f$ 模型^[8],燃烧模型分别选取了相关火焰模型^[8]. 蒸发模型选取 Dukowicz 模型^[8],破碎(break-up)模型选取 Wave 模型^[8],考虑到计算结果精度、稳定性以及收敛性,动量方程采用二阶精度 Minimod Relaxed 格式,连续方程采用中心差分格式,能量方程采用迎风格式. 数值模拟的边界条件和初始条件是保证数值计算有解的前提条

件. 两者与控制方程一起构成了对物理现象的完整数学描述^[9]. 本模型的边界条件主要指物理边界条件,即固壁边界条件,文中采用固定壁面温度的湍流壁面函数作为固壁边界条件. 缸内初始条件对数值模拟计算稳定性和收敛性有着重要影响,本文通过 GT-Power 模型计算取得初始条件值,根据查阅相关文献校核该计算值. 具体边界条件和初始值见表 1.

表 1 计算边界条件和初始值
Tab.1 Calculating boundary conditions and initial values

转速/ ($r \cdot \min^{-1}$)	计算步 长(CAD)/ ($^{\circ}$)	进排气门 关闭时刻 (CAD)/($^{\circ}$)	活塞顶壁 面温度/ K	气缸壁面 温度/ K	气缸盖温 度/K	缸内初始 压力/Pa	缸内初始 温度/K	喷油量/ ($\text{mg} \cdot \text{cycle}^{-1}$)	供油提前角 (CAD BTDC)/ ($^{\circ}$)	喷油持续 期(CAD)/ ($^{\circ}$)
2 200	0.2~0.5	560/850	570	470	570	93 200	340	37.3	17	20

1.3 初始及边界条件确定

初始与边界条件详见表 1. 喷油规律则是基于图 2 中给出喷油规律相似形(其图中数值不代表真实喷油量),结合喷油持续期以及循环喷油量而计算得出.

1.4 燃油理化特性^[10-11]

不同类型、不同烃族组分和不同化学成分的燃料有着不同的物理化学特性,对燃烧过程也有着不同程度的影响,文中所研究的 6 种燃料的部分物理化学特性见表 2.

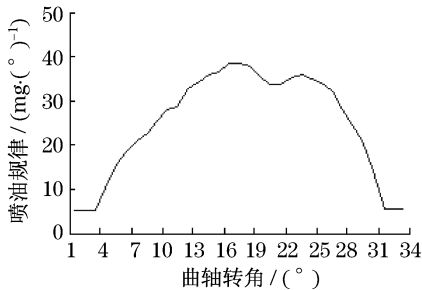


图 2 喷油规律
Fig.2 Fuel injection pattern

表 2 燃料特性
Tab.2 Fuel property

燃料	沸点温度/ ℃	低热值/ (kJ·kg ⁻¹)	计量 空燃比	汽化潜热/ (kJ·kg ⁻¹)
柴油	180~330	42 500	14.3	301
甲苯	110.6	40 528	13.5	362
正庚烷	99	44 925	15.2	317
异庚烷	90	44 587	15.2	289
十二烷	216	44 574	15.0	256
十六烷	287	44 307	15.0	225

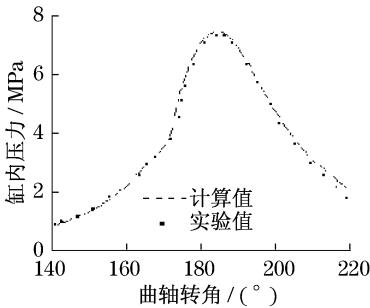


图 3 缸内压力计算值与文献[12]实验值的对比

Fig.3 Comparison between the calculated and experiment values in reference [12]

2 验证计算模型

本文模拟的柴油机工作条件与文献[12]中的实验条件比较接近,即发动机压缩比 18,柴油机单缸排量约为 824.5 mL,传统喷油提前 17° CA,缸内混合气当量比约 0.67.因此,本文采用文献[12]中的进气压力为传统大气压下的缸内燃烧压力实验数据来验证建立模型的正确性.

根据图 3 所示结果可知,模拟计算燃烧始点比发动机实测的略有提前之外,计算的缸内压力在趋势上、最高压力以及相位与文献[12]中标准大气压下缸内压力实验值基本吻合.由此可见,本文所建计算模型是可行且正确的.

3 计算结果与分析

3.1 喷油结束时喷雾形态与混合气空间分布

图 4 比较了不同种燃料在喷油结束时刻(3° CA ATDC(after top dead center)缸内混合气空间分布及喷雾形态.图中数值为燃料量纲一浓度.0~5 表示从稀至浓.由图 4 可知,当燃用异庚烷时,在喷油结束时刻,缸内燃油蒸发最快;其他大约依次是十二烷,正庚烷,甲苯,十六烷以及柴油.其主要原因是燃油沸点以及汽化潜热值大小所致,沸点越低燃油越容易挥发,但是如果汽化潜热高,则导致缸内温度降低也影响后续燃油蒸发,进而影响预混合燃烧.

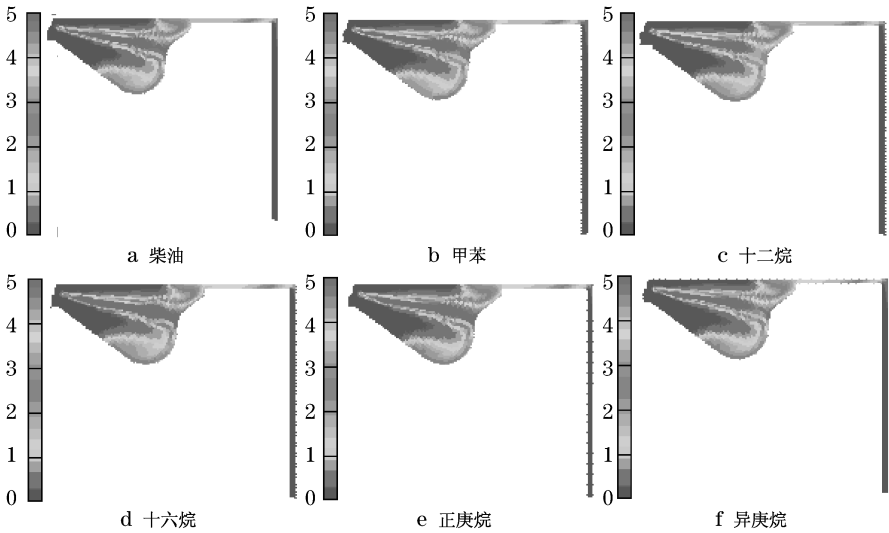


图 4 喷油结束时刻喷雾形态与混合气空间分布

Fig.4 Spray and mixture space distribution at the end of injection

3.2 燃烧特性

图 5 比较了不同燃料燃烧过程中缸内压力的变化.由图 5 可知,燃用甲苯的缸内压力峰值最大,十六烷,十二烷,正庚烷,异庚烷以及柴油依次减小.从

燃料燃烧放热方面分析,相对于甲苯而言,十六烷,十二烷,正庚烷,异庚烷以及柴油虽然热值较高,但是在相同新鲜空气与喷油量下,由于燃料计量空燃比大,缸内混合气更加浓,可能导致局部燃烧不完全

所致.从燃料结构方面分析也可能是由于甲苯的结构中存在的苯环与甲基键在此条件下较容易断裂所致.此外,直链正烷烃链越长也越易断裂.

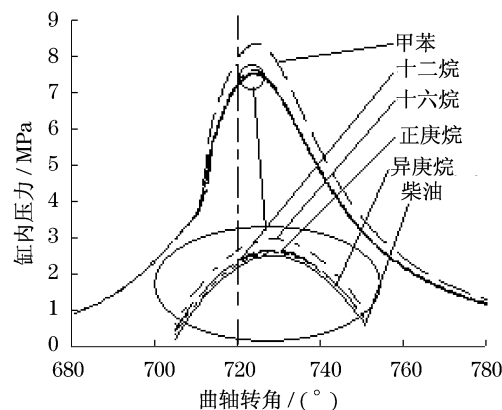


图5 不同燃料压缩燃烧的缸内压力

Fig.5 In-cylinder pressure for compression combustion with various fuels

图6比较了不同燃料燃烧过程中燃烧速率的变化.由图6可知,燃用甲苯、十六烷、柴油、十二烷、正庚烷以及异庚烷,放热率峰值相位依次后移.主要原因可能是,一方面由于滞燃期内形成可燃混合气以及扩散燃烧开始延迟所致;另一方面缸内混合气浓度不同也引起了燃烧速度的差异.此外,从正烷烃来说,碳数愈大,则链愈长,愈容易断裂,燃烧速度也愈快.对于芳香烃而言,苯环结构中存在支链越长则越容易断裂,因此燃烧速率也就更快.

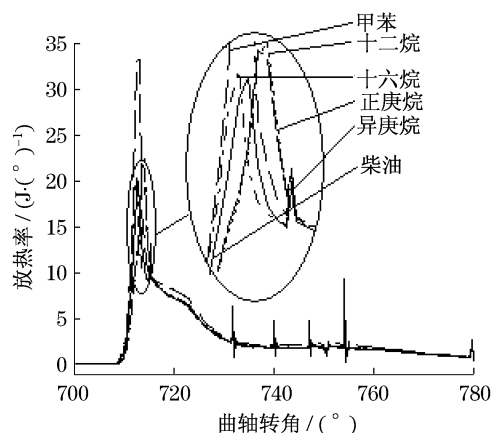


图6 不同燃料压缩燃烧的放热率

Fig.6 Rate of heat release for compression combustion with various fuels

图7比较了不同燃料燃烧过程中累计放热率的变化.由图7可知,燃烧甲苯时,放热量最多,十二烷、正庚烷和异庚烷基本相当,而柴油相对最少.其中,燃用甲苯放热量最多,可能由于甲苯计量空燃比

较低,等量燃料与空气的条件下,燃用甲苯氧气更加充足,进而燃烧更加充分所致^[10].柴油虽然热值较高,但可能由于相对于甲苯,柴油-空气混合气偏浓,局部燃油雾化不良,混合气形成较差,导致局部燃烧不完全的原因.而其他4种燃油计量空燃比基本一致,但是其热值却随碳数增加而降低,因此累积放热量也有差别.

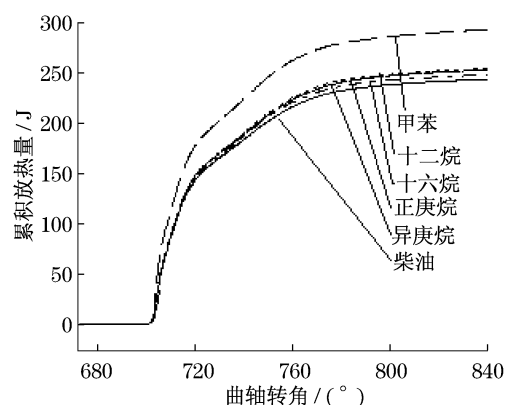


图7 不同燃料压缩燃烧的累计放热量

Fig.7 Accumulated heat release for compression combustion with various fuels

3.3 燃烧过程中关键组分变化

图8~图11分别为不同种燃料压缩燃烧过程中H,N,OH与O活性基的质量分数变化历程.由图可知,4种活性基均存在两个峰值,其中第一个峰值,可能是预混合燃烧所致;第二峰值可能是扩散燃烧所致.其中,就第一个峰值而言,除了甲苯而外,可能是燃油预混合气形成对燃烧过程中的活性基生成起到更加重要的作用.对于第二个峰值而言,燃用甲苯反应过程中的H,N,OH与O活性基质量分数均最大,柴油、十六烷、十二烷以及庚烷,4种活性基均依次减少.一方面可能是由于甲基和苯环相连的C—C键能较低,在能量输入较低的情况下就能够断裂,分解为苯自由基或甲苯自由基,自由基不稳定,容易被降解,因此甲苯中苯环与甲基更加容易破裂^[13];此外,随着碳原子数增加,正烷烃来说,碳数越大,则链越长,越容易断裂,即越容易着火和燃烧^[10].另一方面可能还与参加反应的燃油量有关,在等量的新鲜空气与燃料下,计量空燃比大的燃油缸内混合气偏浓,可能局部燃烧更不完全,进而也导致反应中间组分有所减少.

3.4 不同燃料燃烧中间反应组分与放热率之间关系

图12为不同燃料燃烧过程中反应组分与放热

率之间的对比. 由图 12 可知, 不论燃用那种燃料, 放热率的最高峰值都与 4 种反应活性基的第一个峰值相位一致. 由此可以推测出, 滞燃期形成的预混合气对放热率与 4 种活性基生成有着相同的影响规律. 此外, 对比图 12a~12f 可知, 燃料燃烧过程中放热

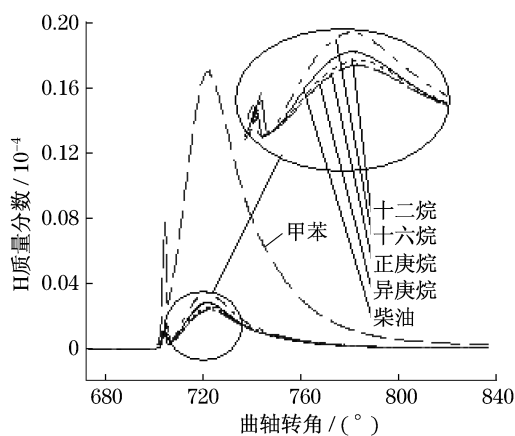


图 8 不同燃料压缩燃烧的 H 活性基的变化
Fig.8 Variation of H specie with various fuels

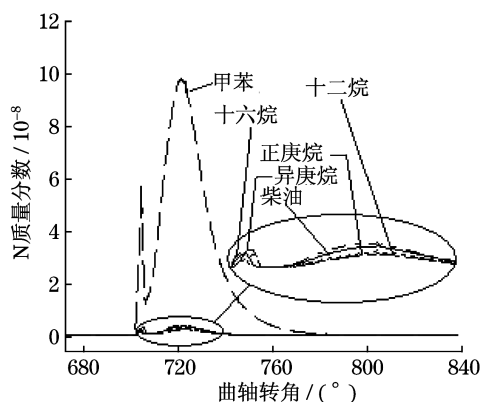


图 9 不同燃料压缩燃烧的 N 活性基的变化
Fig.9 Variation of N specie with various fuels

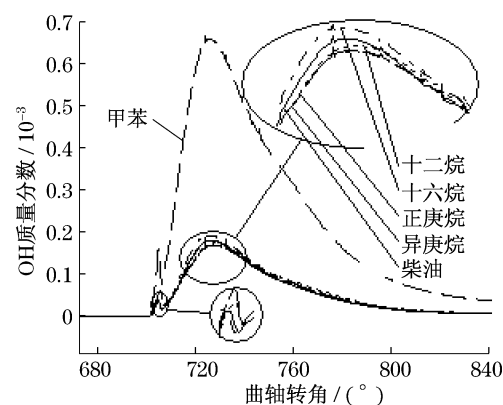


图 10 不同燃料压缩燃烧的 OH 活性基的变化
Fig.10 Variation of OH specie with various fuels

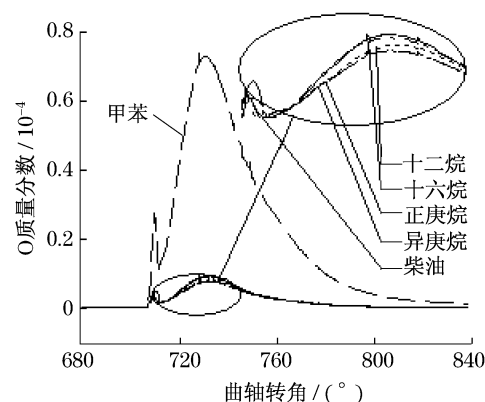
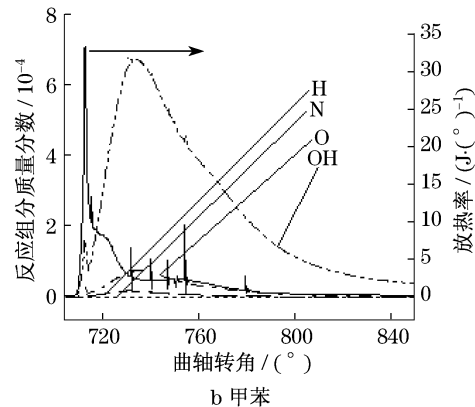
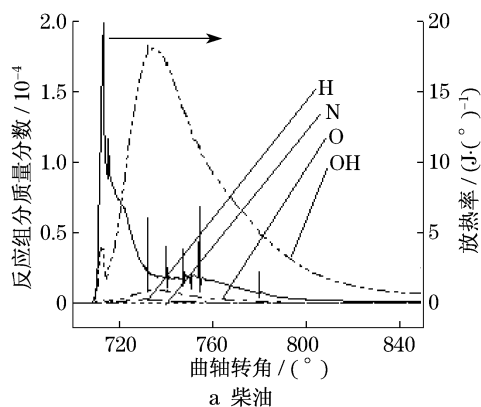


图 11 不同燃料压缩燃烧的 O 活性基的变化
Fig.11 Variation of O specie with various fuels

率较快, 则 OH, O 和 H 活性基质量浓度相应也增大, 而 N 活性基质量浓度变化不明显. 由此推测说明所研究的 6 种燃料中, OH 活性基是燃烧过程中最活跃的关键基团, O 活性基其次, N 活性基最差.



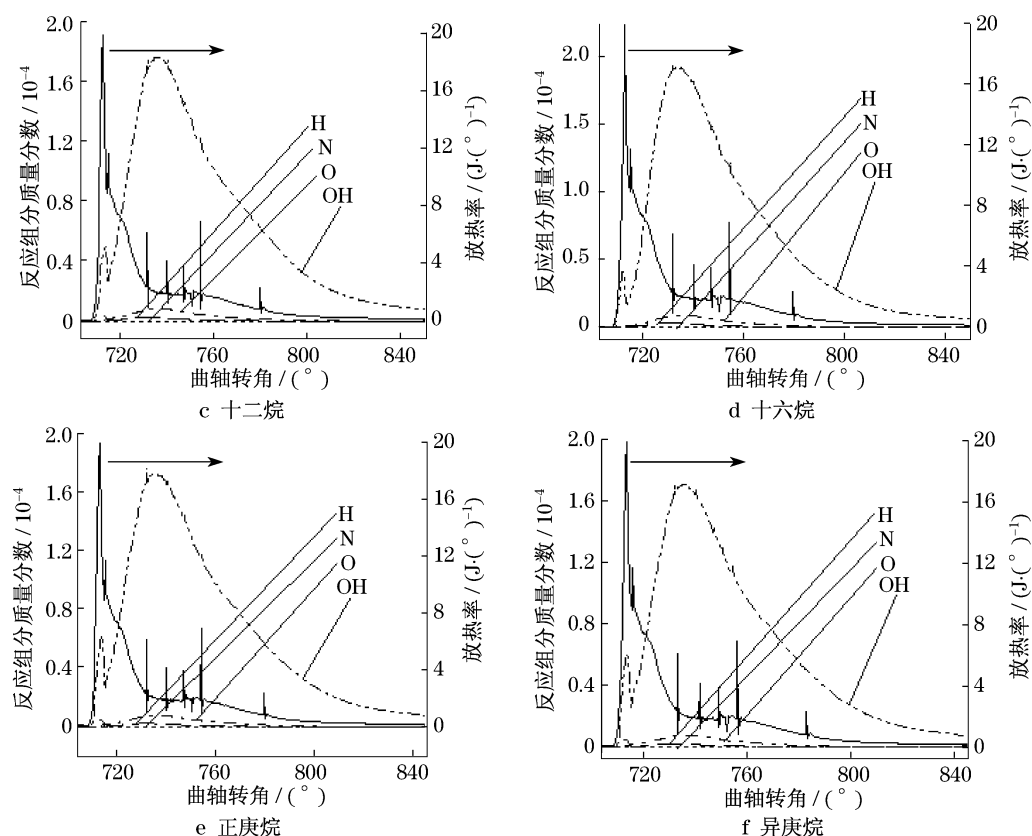


图12 不同燃料燃烧反应组分与放热率的关系

Fig.12 Correlation between combustion reaction species and rate of heat release with various fuels

4 结论

(1) 计算模型是合理的,模拟缸内压力曲线与文献中实验值基本吻合。

(2) 对燃用不同种燃料而言,OH 活性基生成量最大,H 与 O 活性基次之,N 活性基最小.由此可能推论出 4 种活性基在燃烧过程中所起的作用基本不受燃料种类影响。

(3) H,N,OH 与 O 活性基的质量分数按照甲苯、柴油、十六烷、十二烷以及庚烷的顺序依次减小;除了混合物柴油之外,对于单质烷烃燃料而言,4 种活性基有着随碳数减小而减少的趋势。

(4) 燃用 6 种不同的燃料,H,N,OH 与 O 这 4 种活性基均存在两个峰值,其中放热率最大峰值相位与 4 种活性基第一个峰值相位一致.此外,就 4 种活性基而言,OH 活性基与放热率快慢有着更为密切的关系。

参考文献:

[1] Singal S K, Singh I P. Fuel quality requirements for reduction of

diesel emissions[C]//SAE 1999 World Congress & Exhibition. [S. l.]:SAE,1999.1999-01-3592.

[2] Yoshiyuki K, Yang Changlin. Effects of fuel properties on combustion and emission characteristics of a direct injection diesel engine[C]//SAE 2000 World Congress & Exhibition. [S. l.]:SAE,2000.2000-01-1851.

[3] Tsurutani K, Takei Y, Fujimoto Y, et al. The effects of fuel properties and oxygenates on diesel exhaust emissions[C]//SAE 1995 World Congress & Exhibition. [S. l.]:SAE, 1995.952349.

[4] Li X, Chippior W L, Gulder O L. Effects of fuel properties on emissions of a single cylinder DI diesel engine[C]//SAE 1996 World Congress & Exhibition. [S. l.]:SAE,1996.962116.

[5] Akasaka Y, Sakurai Y. Effects of fuel properties on exhaust emission from DI diesel engine [J]. JSME International Journal, Series B, 1998, 41(1):13.

[6] Takatori, Y. Effect of hydrocarbon molecular structure on diesel exhaust emissions part2: effect of branched and ring structures of paraffins on benzene and soot formation [C]//SAE 1998 World Congress & Exhibition. [S. l.]:SAE,1998.982495.

[7] 孙万臣,刘巽俊,宫本登,等.燃料挥发性对柴油机性能及排放的影响[J].内燃机学报,2004,22(4):317.

SUN Wanchen, LIU Xunjun, Miyamoto N, et al. Effects of fuel volatility on performances and emissions of a diesel engine[J]. Transactions of CSICE, 2004, 22 (4): 317.

[8] AVL 公司. AVL Fire_2008_CFD 手册[Z]. Graz: AVL, 2008.

(下转第 929 页)