

临界温度区域内柴油喷雾燃烧特性模拟

包堂堂, 邓 俊, 吴志军

(同济大学 汽车学院, 上海 200092)

摘要: 采用条件矩封闭模型(CMC)与三维计算流体力学(CFD)软件相耦合,建立了活化热氛围中的柴油喷雾燃烧模型,分析了燃料自燃临界温度随环境压力的变化,并对临界温度附近区域的柴油喷雾燃烧特性进行了研究.结果表明,随着环境压力的增加,自燃临界温度基本维持在 1 048 K 附近.在模拟条件下,当协流温度接近临界温度时,2K 的协流温度变化即可引起火焰温度及 OH、H、HO₂ 等中间组分的分布产生较大变化,进而对燃烧过程产生较大影响.

关键词: 活化热氛围; 柴油喷雾; 燃烧特性; 模拟研究

中图分类号: TK428.9

文献标志码: A

Numerical Study on Combustion Characteristics of Diesel Spray Crossing Critical Temperature Range

BAO Tangtang, DENG Jun, WU Zhijun

(College of Automotive Studies, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: Conditional moment closure (CMC) model was coupled with the computer fluid dynamics (CFD) software to establish the combustion model of diesel spray in active thermo-atmosphere, the effect of ambient pressure on auto-ignition critical temperature was analyzed, meanwhile the combustion characteristics of diesel spray crossing the critical temperature range were studied. The results show that as the ambient pressure increases, the critical temperature remains around 1 048 K, in simulation conditions, when the co-flow temperature gets close to 1 048 K, 2 K's co-flow temperature changes can greatly influence the flame temperature and the distribution of active components such as OH, H, HO₂ and so on.

Key words: active thermo-atmosphere; diesel spray; combustion characteristics; simulation study

自燃是指燃料与氧化剂混合发生化学反应而引发发热爆炸的现象,它伴随有由于燃料与氧化剂混合过程所导致的物理延迟及由于化学反应引起起始火焰的化学延迟,而湍流反应流中的自燃更是一个非常重要的、国际前沿的燃烧基础研究方向之一;是柴油机扩散燃烧研究中的关键内容.然而由于对实际发动机内部燃烧的试验测量非常困难,目前对湍流反应流中的自燃研究大多是采用数值模拟的方法来研究湍流反应流中自燃的发生条件、反应机理以及采用不同燃烧模型对自燃进行预测等^[1-2].可控活化热氛围燃烧器^[3]能够方便地通过改变协流混合气的当量比,提供 700~1 500 K 的稳定的热氛围及 10%~19% 的氧氛围^[4].从而可以详细地研究气体及液体燃料的自燃着火规律及影响其稳定燃烧的主要因素,进而为实际发动机燃烧控制提供理论依据,可控活化热氛围燃烧器示意图及实物图如图 1—2 所示.

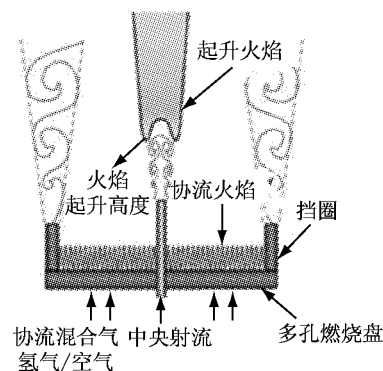


图 1 可控活化热氛围燃烧器示意图

Fig.1 Sketch of the controllable active thermo-atmosphere burner

美国加州大学 Berkeley 分校燃烧分析实验室利用该燃烧装置研究了 H₂/N₂ 湍流喷射火焰以及低

收稿日期: 2012-08-15

基金项目: 国家自然科学基金(51006075, 51076118, 51106113); 新世纪优秀人才支持计划(NCET-10-0605); 上海市青年科技启明星计划(跟踪)(11QH1402500)

第一作者: 包堂堂(1986—), 男, 博士生, 主要研究方向为基础燃烧. E-mail: 0910180033@tongji.edu.cn

通讯作者: 吴志军(1972—), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为内燃机喷雾光学诊断技术、湍流燃烧. E-mail: zjwu@tongji.edu.cn

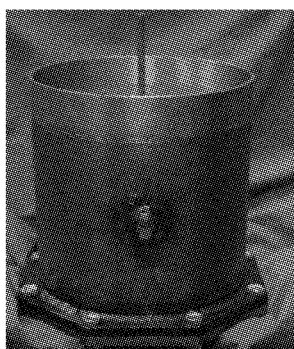


图 2 可控活化热氛围燃烧器实物图

Fig.2 Picture of the controllable active thermo-atmosphere burner

压下的甲醇喷雾燃烧^[5],并且利用概率密度函数(PDF)的方法对射流火焰进行模拟^[6],澳大利亚悉尼大学燃烧实验室在该燃烧器所提供的活化热氛围内研究了不同气体的喷射起升火焰^[7],并且采用两种不同的氢气的化学反应机理来研究参数的变化对模型预测结果的影响^[8].英国剑桥大学在小型的活化热氛围燃烧上进行了 H_2 以及乙炔的湍流自燃研究^[9].在国内,华中科技大学王海峰等^[10]利用 PDF 方法模拟了热协流中的 H_2/N_2 起升火焰,计算了火焰的温度场,并将结果与国外的实验数据进行比较.上海交通大学的冯威等^[11-12]对该燃烧器的温度场和速度场进行了仿真,其结果与悉尼大学的实验数据相吻合.

本课题组邓俊等^[13-14]对热氛围中柴油喷雾自燃现象进行了大量的试验和模拟研究,并且在柴油喷雾试验中发现了影响燃料自燃稳定性的临界温度的客观存在,协流温度在此临界温度两侧对喷雾燃烧影响呈现不同的效果.低于此温度时着火滞燃期较长,而且不同温度下的滞燃期时间变化较大,由自燃引发的射流火焰并不稳定,在火焰基部不断有新的自燃现象产生,火焰的稳定受控于燃料的自燃,而自燃的时刻和位置并没有很强的规律性,因此火焰稳定不易控制.高于临界温度时,着火滞燃期较短,且不同温度引起的变化不大,同时由自燃引发的火焰受火焰传播的控制而比较稳定,且易于控制.由于试验研究中对协流温度调节间隔较大(20~25 K),无法精确研究临界温度附近区域的柴油喷雾自燃特性.因此在上述研究的基础上,本文采用条件矩封闭模型(CMC)与三维计算流体动力学(CFD)软件相耦合,建立了可控热氛围下柴油喷雾在常压下的燃烧模型,与试验结果进行对比验证后,将该模型拓展到高压区域,计算了不同环境压力下的柴油喷雾滞燃期与火焰起升高度,研究了环境压力变化对临界温

度所在区域的影响,并深入地分析了较高环境背压下临界温度附近区域内协流温度变化对火焰温度以及中间组分的影响.

1 计算模型及其验证

图 3 是计算所采用过的网格模型,为缩短计算时间,模型取整个圆周的 1/8. 流体计算部分使用商业流体软件 STAR-CD,计算模型选取情况见表 1.

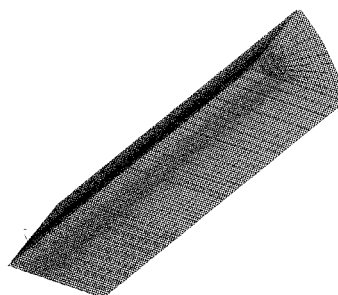


图 3 计算所用网格模型

Fig.3 The mesh model

表 1 计算选用模型说明

Tab.1 Specification of numerical models			
湍流模型	喷雾模型	破碎模型	燃烧模型
$k-\epsilon$ 高雷诺数模型	拉格朗日两相流模型	Reitz 模型	CMC 模型

图 4 为条件矩封闭(CMC)模型和 STAR-CD 联合运算的示意图,图中 \tilde{h} 为平均条件焓; $h_i(T)$ 为各组分在温度 T 下的焓值; \tilde{w}_i 为各组分的品均质量分数; \tilde{u}_i 为各组分平均速度; \tilde{k} 为平均湍动能; $\tilde{\epsilon}$ 为平均耗散率; D_i 为温度 T 下的概率密度; P 为概率值; $\tilde{\chi}$ 为平均统计量; $\tilde{\xi}$ 为平均混合分数; $\tilde{\xi}^2$ 为平均混合分数方差; η 为混合分数 $\tilde{\xi}$ 的样本空间变量; $w_i(\eta)$ 为空间变量 η 处的各组分的质量分数; $\tilde{P}(\eta)$ 为空间变量 η 处的平均概率分布. STAR-CD 将 Favre 平均速度,湍流耗散率以及混合分数的均值和方差等参数传递给 CMC,CMC 模型中耦合了 CHEMKIN 程序计算化学反应,CMC 计算出 Favre 平均组分及

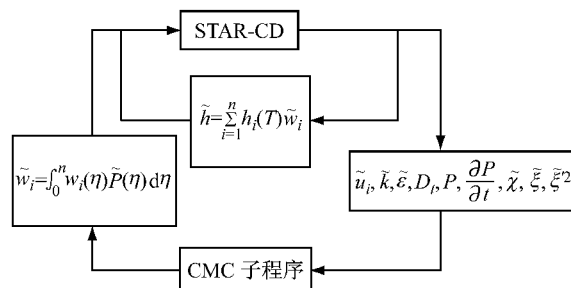


图 4 CMC 与 STAR-CD 的耦合流程图

Fig.4 Coupling flow chart between CMC and STAR-CD

Favre 平均焓,再返回给 STAR-CD. 本文用正庚烷($n\text{-C}_7\text{H}_{16}$)代替柴油,反应机理采用 Hewson 32 步简化机理.

图 5 和图 6 分别为柴油喷雾在热氛围中的着火滞燃期和起升高度随协流温度的变化曲线,实线为计算结果曲线,虚线为试验结果曲线.

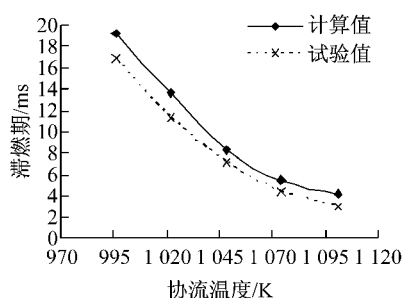


图 5 着火滞燃期试验及计算值对比图

Fig. 5 Comparison between the experimental and Calculated value of autoignition delay

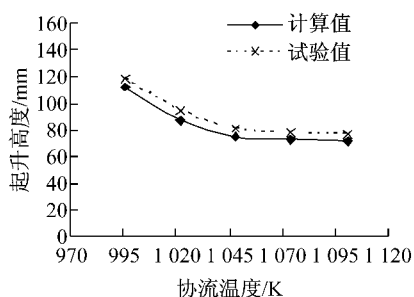


图 6 起升高度试验及计算值对比图

Fig. 6 Comparison between the experimental and calculated value of lifted height

计算以及实验初始条件设定如下:协流速度为 $4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,环境压力为标准大气压,喷孔直径为 0.15 mm ,喷油器启喷压力为 20 MPa ,喷射压力设置为 25 MPa ,喷雾持续期为 1.5 ms ,可以看到,着火滞燃期的计算值略高于试验值,起升高度计算值略低于试验值,最大相对误差都出现在协流温度为 1022 K 时,分别为 9.3% , 8.4% ,相对误差最大值不超过 10% ,认为计算结果在可接受误差范围内.从图上可以看出在 1048 K 两侧,滞燃期及起升高度随协流温度变化呈现了阶段变化规律,低于此温度时着火滞燃期较长,而且不同温度下的滞燃期时间变化较大,高于临界温度时,着火滞燃期较短,且不同温度引起的变化不大,同时由自燃引发的火焰受火焰传播的控制而比较稳定,这与试验结果相符^[14].

2 环境压力变化对柴油喷雾燃烧特性的影响

图 7 是不同环境压力下,热氛围中柴油喷雾滞

燃期随协流温度的变化情况,图 8 是热氛围中柴油喷雾自燃火焰的起升高度随协流温度的变化情况,可见,环境压力变化对滞燃期影响很大.随着环境压力增加,柴油喷雾的滞燃期明显缩短,起升高度明显降低.分析认为,随着环境压力的升高,空气密度增加,柴油喷雾和空气分子的碰撞几率增加,雾化效果增强,可燃混合气的形成速率增加,导致柴油喷雾的滞燃期也相应减小,另外环境压力升高导致喷雾较难往轴向发展,喷雾贯穿距减小,适合着火的柴油喷雾区域形成在靠近喷嘴端,使喷雾火焰起升高度下降.热氛围中的自燃临界温度区域并没有随着环境压力的变化而产生较大影响,还是出现在 1048 K 附近区域.

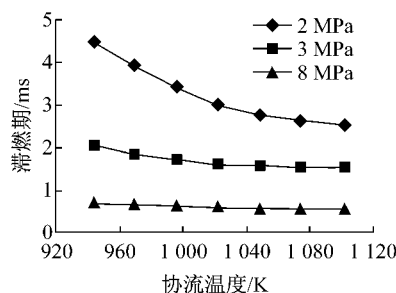


图 7 不同环境压力下着火滞燃期随温度的变化曲线

Fig. 7 Curves of autoignition delay variation with coflow temperature under different ambient pressures

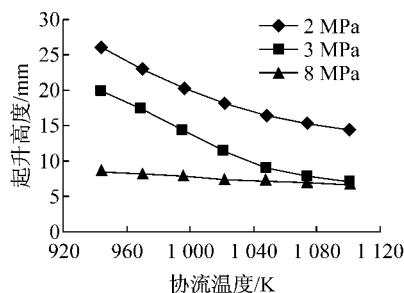


图 8 不同环境压力下起升高度随协流温度的变化曲线

Fig. 8 Curves of lifted height variation with coflow temperature under different ambient pressures

3 临界温度区域内温度及中间组分分布

由于 OH 是化学反应链传播的重要活性组分,因此自燃一旦开始,OH 的生成量会大幅度增加,通常可以将 OH 大量出现的高度定义为火焰的起升高度,用这种定义得到的起升高度和用温度定义的起

升高度几乎完全一致^[15]. 本节就协流温度在临界温度附近区域时,热氛围中柴油喷雾自燃过程中产生的OH,以及与其产生密切相关的 HO_2 、H、O等活性组分的分布情况展开研究. 图9是不同协流温度下,喷雾开始后2.985 ms时刻,火焰温度 T ,以及H、OH、O、 HO_2 等活性基团的质量分数的径向分布(从左到右三列温度分别为1 046,1 048,1 050 K),由于各组分质量分数数量级相差较大,为了在同一图中进行比较,将各组分质量分数数量级分别设置为

$w_{\text{H}} \times 10^{-4}$, $w_{\text{OH}} \times 10^{-3}$, $w_{\text{O}} \times 10^{-4}$, $w_{\text{HO}_2} \times 10^{-3}$. 可以看出,协流温度从1 046 K增加到1 048 K时,温度 T 以及OH等活性基的质量分数并没有明显增加,增幅在10%左右,当协流温度从1 048 K增加到1 050 K时,各组分质量分数明显增加,火焰温度也明显升高,尤其是在火焰往轴向发展以后,随着燃料和空气混合更加充分,各组分的变化更加明显,在高度 $H=32$ mm处,OH、O等组分以及场内最高温度的增幅均超过了100%. 并且,在协流温度为1 046 K

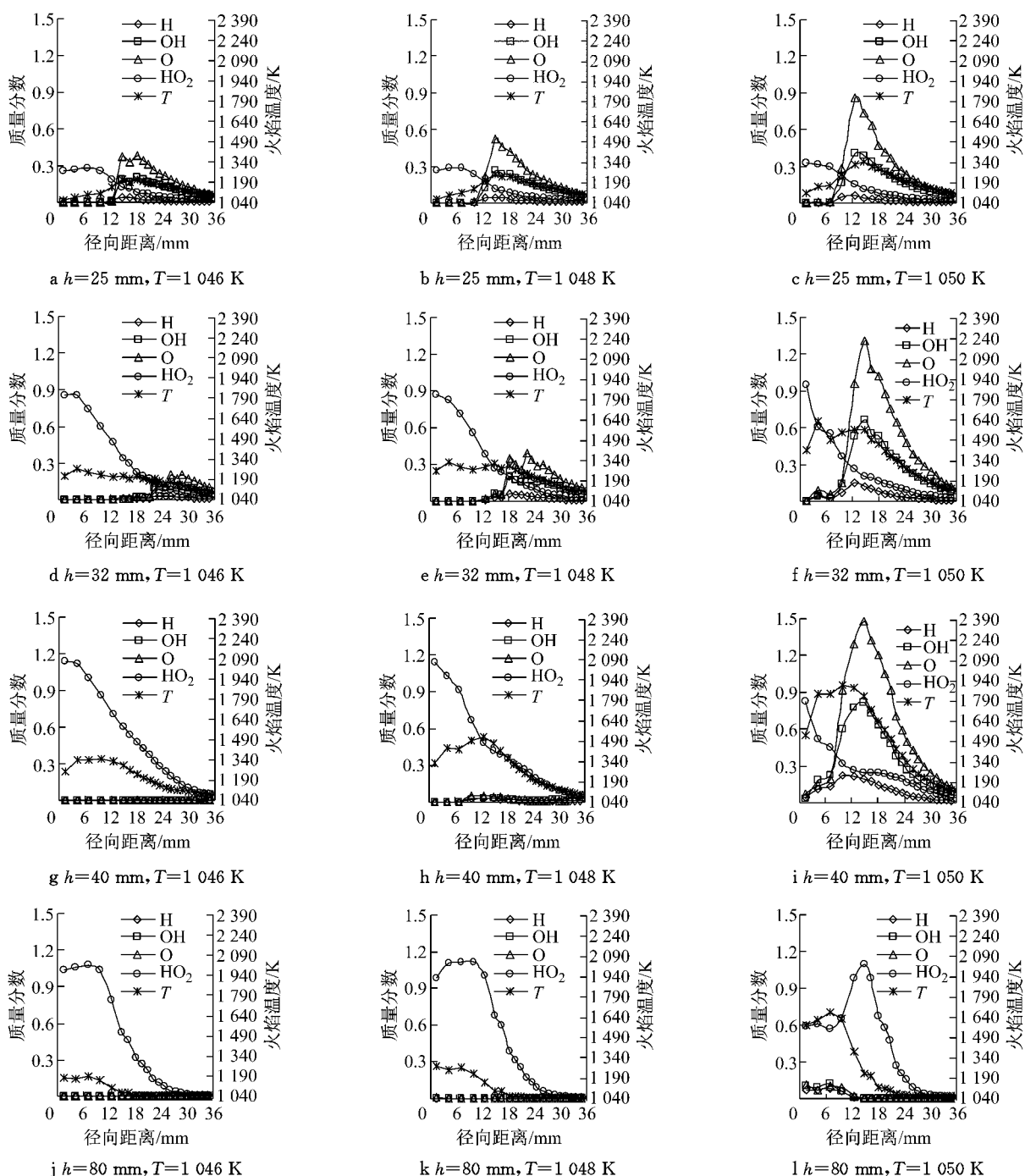


图9 火焰温度 T 和H、OH、O、 HO_2 质量分数的径向分布

Fig.9 Radial distribution of mass fraction of flame temperature T and H, OH, O as well as HO_2

和 1 048 K 时,高度 $H=40$ mm 处,活性组分质量分数相比于前一个高度已开始下降,说明火焰发展到此高度时化学反应的剧烈程度已经开始下降,但是,在协流温度为 1 050 K 时,同一高度 ($H=40$ mm) 下,活性组分的质量分数并没有出现下降,而是继续

上升,场内最高温度也持续升高,这一现象从微观层面证明了 1 048 K 附近区域确实是热氛围中柴油喷雾稳定自燃的临界温度区域。

图 10 和图 11 分别为协流温度在 1 048 K 时和不同协流温度下,温度和 OH 活性基关于混合分数

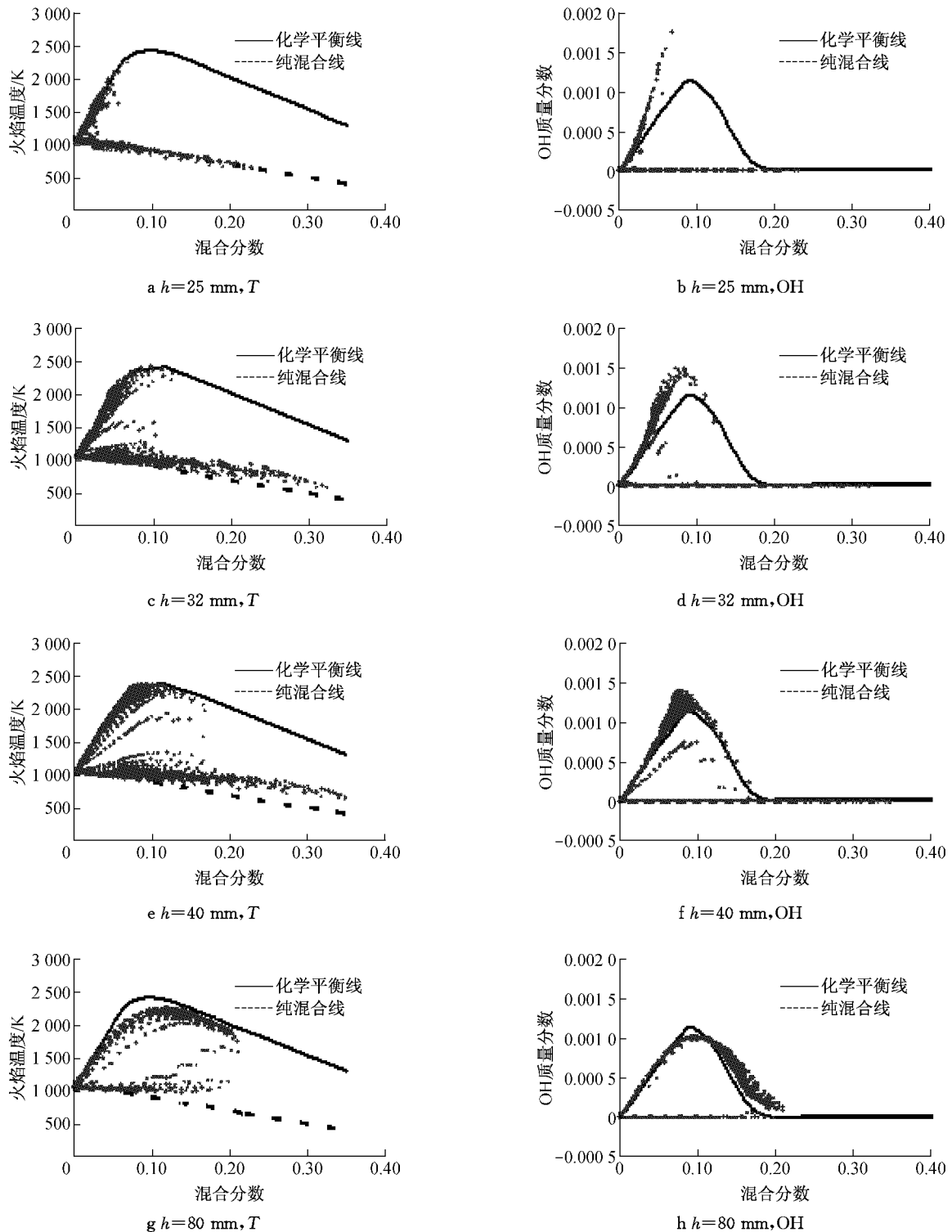
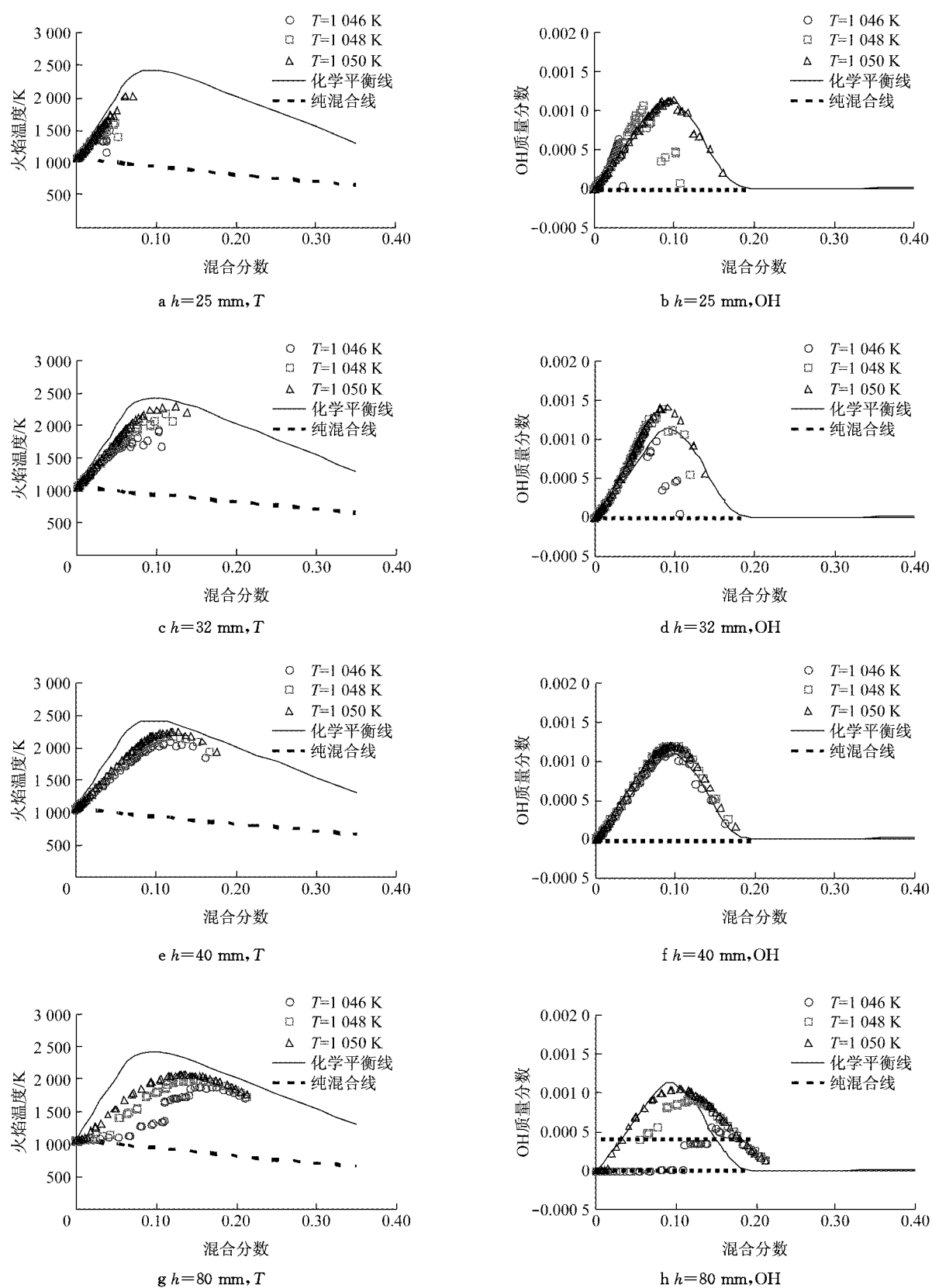


图 10 协流温度为 1 048 K 时火焰温度 T 和 OH 基关于混合分数 f 的样本颗粒分散图

Fig. 10 The sample particles scatter diagram of flame temperature T and OH with the mixture fraction when coflow temperature is 1 048 K

图 11 不同协流温度下火焰温度 T 和 OH 基关于混合分数 f 的样本颗粒分散图Fig. 11 The sample particles scatter diagram of flame temperature T and OH with mixture fraction at different coflow temperatures

f 的样本颗粒分散图,混合分数 f 是研究非预混燃烧所应用的一个重要参数,在化学反应尺度下 f 也是一个守恒标量,标量耗散率和化学反应速率等重要参数都可以与混合分数 f 建立关系.对于由一股燃料流和一股氧化剂流组成的简单燃烧系统来说,混合分数计算采用公式如下^[15]:

$$f = \frac{w - w_2}{w_1 - w_2}$$

其中,下标 1 代表燃料端,2 代表氧化剂端, w 代表任意元素的质量分数,可以看到,在燃料端 $w = w_1$,故 $f = 1$;在氧化剂端 $w = w_2$,故 $f = 0$.

本文中计算燃料为正庚烷(碳氢燃料),混合分数计算公式如下,其中 Y 表示原子量:

$$f = \frac{\frac{0.5(w_H - w_{H,2})}{Y_H} + \frac{2(w_C - w_{C,2})}{Y_C} - \frac{(w_O - w_{O,2})}{Y_O}}{\frac{0.5(w_{H,1} - w_{H,2})}{Y_H} + \frac{2(w_{C,1} - w_{C,2})}{Y_C} - \frac{(w_{O,1} - w_{O,2})}{Y_O}}$$

式中 w_H 为氢原子总质量分数; $w_{H,1}$ 为燃料端氢原子质量分数; $w_{H,2}$ 为氧化剂端氢原子质量分数; w_C 为碳原子总质量分数; $w_{C,1}$ 为燃料端碳原子质量分数; $w_{C,2}$ 为氧化剂端碳原子质量分数; Y_H, Y_C, Y_O 分别为氢原子、碳原子及氧原子的原子量.

从图 10 中可以清楚地看到柴油喷雾在热氛围中的点火过程和分区特性,在 $H = 25$ mm 的位置处,绝大多数颗粒集中在纯混合直线附近,有一小部分开始偏离纯混合线,往绝热反应线(化学平衡反应线)附近移动,说明在这个位置已经有部分颗粒开始点火,这与图 8 中起升高度的计算结果也是相符的.随着高度的向上发展,到 $H = 32$ mm 处,更多的颗粒偏离了纯混合曲线开始点火,在 $H = 40$ mm 处,大部分颗粒集中到了绝热反应线附近,说明火焰发展到该位置处时,燃烧已经比较充分,在 OH 的样本颗粒分散图上也可以得到类似的分析结果.图 11 取某特定时刻来分析不同协流温度对燃烧特性的影响,所选时间点与图 9 的时间点相同,即为喷雾开始后 2.985 ms 时刻.在该时刻,在所选的三个温度点 1 046、1 048、1 050 K 下,颗粒开始往绝热反应线附近移动,说明在该时刻颗粒已经开始点火,但在各个高度下都可以看到,协流温度为 1 046 K 时,颗粒偏离绝热反应线较远,而协流温度为 1 048 K 和 1 050 K 时颗粒较为接近绝热反应线,并且两者颗粒分布位置较为接近,这与图 6 的分析结果也相符.

4 结论

本文采用数值模拟的方法,将 CMC 模型与三维 CFD 软件相耦合,对可控活化热氛围燃烧器下柴油喷雾燃烧现象进行了研究,建立了热氛围下的柴油喷雾燃烧模型,分析了不同环境压力下的临界温度变化情况,并对临界温度附近区域的柴油喷雾燃烧特性进行了研究,得出以下结论:

(1) 本文建立的热氛围下柴油喷雾燃烧模型可以较好地模拟实际的燃烧情况,对滞燃期、起升高度等参数的计算结果与试验值稍有误差,误差在可接受范围之内.

(2) 随着环境压力的增加(从 2 MPa 增加到 8 MPa),临界温度维持在 1 048 K 附近,说明环境压力并不是影响临界温度的关键因素.

(3) 2 MPa 环境压力下,协流温度超过临界温度以后,热氛围中相同时刻,相同位置的温度以及中间组分变化较大,协流温度从 1 048 K 增加到 1 050 K,热氛围场内各组分以及温度的最大值增幅均超过 100%.

(4) 在协流温度为 1 046、1 048、1 050 K 三个温度点下,对热氛围中的温度以及 OH 基相对于混合分数 f 的样本颗粒分散图进行了研究,结果显示协流温度超过 1 048 K 以后样本颗粒明显更加靠近绝热反应线.

参考文献:

- [1] Mastorakos E, Baritaud T A, Poinot T J. Numerical simulations of auto-ignition in turbulent mixing flows[J]. Combustion and Flame, 1997, 109: 198.
- [2] Mastorakos E, Bilger R W. Second-order conditional moment closure for the auto-ignition of turbulent flows[J]. Physical Fluids, 1998, 10: 1246.
- [3] Wu Z J, Deng J, Li L G. Study on characteristics of controllable active thermo-atmosphere of a vitiated co-flow combustor[J]. Chinese Science Bulletin, 2005, 50(7): 704.
- [4] 邓俊, 吴志军, 李理光. 可控活化热氛围燃烧试验系统的研发[J]. 吉林大学学报: 工学版, 2007, 37(2): 307.
DENG Jun, WU Zhijun, LI Liguang. Development of experimental system of novel controllable active thermo-atmosphere combustor [J]. Journal of Jilin University: Engineering and Technology Edition, 2007, 37(2): 307.
- [5] Ricardo C. Turbulent jet flames into a vitiated coflow[D]. Berkeley: Department of Mechanical Engineering University of California, Berkeley, 2003.
- [6] Cabra R, Myhrvold T, Dibble R W, et al. Simultaneous laser raman-rayleigh-LIF measurements and numerical modeling

- results of a lifted turbulent H_2/N_2 jet flame in a vitiated co-flow[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2002, 29: 1881.
- [7] Wu Z J, Starner S H, Bilger R W. Lift-off heights of turbulent H_2/N_2 jet flames in a vitiated co-flow[C]//2003 Australian Flames Days. Melbourne: [s. n.], 2003: 142-147.
- [8] Masril A R, Cao R, Pope S B, et al. PDF calculations of turbulent lifted flames of H_2/N_2 fuel issuing into a vitiated co-flow[J]. Combustion Theory and Modelling, 2004, 8: 1.
- [9] Mastorakos E, Markides C, Wright Y M. Hydrogen auto-ignition in a turbulent duct flow: experiments and modelling[C]//The 12th International Conference on Fluid Flow Technologies. Budapest: [s. n.], 2003: 56-62.
- [10] Wang H F, Chen Y L. A PDF simulation of the lifted turbulent H_2/N_2 jet flame[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2006, 23(1): 73.
- [11] 冯威, 吴志军, 邓俊, 等. 可控活化热氛围燃烧器温度场的模拟研究[J]. 吉林大学学报: 工学版, 2007, 37(3): 513.
FENG Wei, WU Zhijun, DENG Jun, et al. Numerical simulation of temperature field in controllable combustor[J]. Journal of Jilin University: Engineering and Technology Edition, 2007, 37(3): 513.
- [12] Feng W, Deng J, WU Z J, et al. A simulation of the flow field of a controllable active thermo-atmosphere combustor [C]//Proceedins of the 2nd International Symposium on Clean and High-Efficiency Combustion in Engines. Tianjin: [s. n.], 2006: 19-25.
- [13] 邓俊, 吴志军, 冯威, 等. 活化热氛围下柴油喷雾燃烧特性试验[J]. 上海交通大学学报: 自然科学版, 2007(3): 384.
DENG Jun, WU Zhijun, FENG Wei, et al. An experimental study of diesel spray combustion characteristics in active thermo-atmosphere [J]. Journal of Shanghai Jiaotong University: Natural Science Edition, 2007(3): 384.
- [14] 邓俊, 可控热氛围下柴油喷雾自燃及燃烧特性的研究[D]. 上海: 上海交通大学机械与动力工程学院, 2007.
DENG Jun. Diesel spray autoignition and combustion characteristics in a controllable thermo-atmosphere [D]. Shanghai: School of Mechanic and Power Engineering of Shanghai Jiaotong University, 2007.
- [15] Bilger R W. Turbulent jet diffusion flames[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1976, 1(2/3): 87.

(上接第 1224 页)

- GU Anquan. Investigation of the vertical earth pressure on projecting conduit and underground chamber under a high embankment[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 1981, 3(1): 3.
- [4] 折学森, 顾安全. 高填土下管道土压力的分析[J]. 西安公路学院学报, 1992, 12(4): 27.
SHE Xuesen, GU Anquan. Study of the earth pressure on conduit under the deeper earth[J]. Journal of Xi'an University of Highway, 1992, 12(4): 27.
- [5] 折学森. 路基涵洞的土压力计算[J]. 中国公路学报, 1992, 5(3): 72.
SHE Xuesen. The calculation of vertical earth pressure on buried conduit under roadbed[J]. China Journal of Highway and Transport, 1992, 5(3): 72.
- [6] 中华人民共和国建设部. GB 50332—2002 给水排水工程管道结构设计规范[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2002.
Ministry of Construction of the P R China. GB 50332—2002 Structural design code for pipeline water supply and waste water engineering [S]. Beijing: China Architecture and Building Press, 2002.
- [7] Munaz A. Noor, Ashutosh S Dhar. Three-dimensional response of buried pipe under vehicle loads [C]//New Pipeline Technologies, Security and Safety. Baltimore: ASCE, 2003: 658-665.
- [8] 刘全林. 埋地管道与土相互作用分析及其计算方法的研究[D]. 上海: 同济大学土木工程学院, 2002.
LIU Quanlin. Soil-structure interaction analysis of buried pipelines and study of its stress & deformation calculating Method[D]. Shanghai: College of Civil Engineering of Tongji University, 2002.
- [9] 王直民. 交通荷载作用下埋地管道的力学性状研究[D]. 杭州: 浙江大学建筑工程学院, 2006.
WANG Zhimin. Study on mechanical behaviors of buried pipelines under traffic loads[D]. Hangzhou: College of Civil Engineering and Architecture of Zhejiang University, 2006.
- [10] 中国工程建设标准化协会标准. CECS 141—2002 给水排水工程埋地钢管管道结构设计规程[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2002.
China Association for Engineering Construction Standardization. CECS 141—2002 Specification for structural design of buried steel pipeline of water supply and sewerage engineering [S]. Beijing: China Architecture and Building Press, 2002.
- [11] 支喜兰, 江晓霞, 沙爱民. 路面基层振动压实作用下的底基层应力[J]. 长安大学学报: 自然科学版. 2003, 23(3): 33.
ZHI Xilan, JIANG Xiaoxia, SHA Aimin. Pavement subbase course stress by vibrating compaction on course[J]. Journal of Chang'an University: Natural Science Edition, 2003, 23(3): 33.