

内燃兰金循环氨氢发动机热力学特征参数的模拟与分析

张冠宇¹, 于洋¹, 田径², 吴志军¹

(1. 同济大学汽车学院, 上海 201804; 2. 吉林大学汽车工程学院, 吉林 长春 130022)

摘要: 为实现氨氢燃料在内燃机上的应用, 基于 Cantera 平台建立了氨氢燃料内燃兰金循环模型, 进行了不同氨氢掺混比例、过量空气系数和喷水量等条件下内燃兰金循环氨氢燃料发动机燃烧过程数值模拟, 从热力学循环效率和典型污染物排放两方面分析和评价不同边界条件对燃烧特性的影响。结果表明: 过量空气系数和缸内喷水量增加分别提升热力学循环效率 2.66% 和 7.00%, 喷水的作用效果更显著; 氨氢燃料燃烧终了排放污染物 NO_x 主要以 NO 为主; 缸内喷水有利于氨氢发动机氮氧化物排放量降低, 应用喷水技术后, 燃烧产物中 NO 和 NO_2 的排放体积分数降低幅度达到 37%。

关键词: 动力机械工程; 复合燃料; 内燃兰金循环; 热效率; 排放特性

中图分类号: TK464

文献标志码: A

Simulation and Analysis of Thermodynamic Characteristic Parameters of Internal Combustion Rankine Cycle Ammonia Hydrogen Blended Fuel Engine

ZHANG Guanyu¹, YU Yang¹, TIAN Jing², WU Zhijun¹

(1. School of Automotive Studies, Tongji University, Shanghai 201804, China; 2. College of Automotive Engineering, Jilin University, Changchun 130022, China)

Abstract: To realize the application of NH_3/H_2 blended fuel in internal combustion engines, an internal combustion Rankine cycle model of NH_3/H_2 blended fuel was established in this paper based on Cantera. Additionally, the numerical simulation of combustion process of internal combustion Rankine cycle NH_3/H_2 blended fuel engine under the conditions of different ammonia hydrogen mixing ratios, excess air ratios, and water spray volumes was conducted. Finally, the

influence of different boundary conditions on combustion characteristics was analyzed from the perspectives of thermodynamic cycle efficiency and typical pollutant emissions. The results show that the increase of excess air ratio and in cylinder water spray volume improve the thermodynamic cycle efficiency by 2.66% and 7.00% respectively, hence the effect of water spray is more significant. Besides, NO is the main NO_x pollutant emitted at the end of fuel combustion. Water spray in the cylinder is beneficial to the reduction of NO_x emissions. After the application of the water spray technology, the emission of NO and NO_2 in combustion products is reduced by 37%.

Keywords: power machinery engineering; blended fuel; internal combustion Rankine cycle; thermal efficiency; emission characteristics

双碳目标提出以后, 传统碳基燃料在内燃机领域使用受限, 零碳排放内燃机^[1]越来越受到关注。氨作为零碳燃料, 从生产、储运及燃料理化性质^[2]进行分析, 氨具备作为内燃机替代燃料的潜力。然而, 氨燃料燃点与自燃温度及汽化潜热高、燃烧速度缓慢^[3]等特点阻碍了其在内燃机上的应用。氢较低的点火能量、极宽的可燃范围和远高于氨的火焰速度^[4], 弥补了氨燃烧特性上的不足, 使其成为了促进氨燃料燃烧最合适的助燃剂^[5]。

Chen 等^[6]在激波管中测量了氨氢混合燃料化学计量比燃烧条件下的自燃特性, 结果表明氨燃料加氢非线性地缩短了其点火延迟时间; Lee 等^[7]研究了层流预混氨氢火焰的传播特性, 结果显示氢气的添加显著提升了氨火焰的层流燃烧速度; Otomo 等^[8]探究了氨燃烧化学反应动力学机理, 研究发现氨氢

收稿日期: 2022-11-21

第一作者: 张冠宇, 博士生, 主要研究方向为内燃机燃烧与排放控制。E-mail: 2211113@tongji.edu.cn

通信作者: 吴志军, 教授, 博士生导师, 工学博士, 主要研究方向为内燃机燃烧与排放控制。

E-mail: zjwu@tongji.edu.cn



论文
拓展
介绍

燃料燃烧的绝热火焰温度随着氢摩尔分数的增加而增加。由于氢的添加提升氨燃料反应性的同时提升了火焰温度,高温条件又易于热力型 NO_x 的产生,加之氨燃料本身较高的燃料型 NO_x 排放量,使得降低氨燃料内燃机 NO_x 排放问题成为了研究的焦点。

Awad等^[9]和Pugh等^[10]研究了氨氢混合燃料燃烧和排放特性,提出将水引入氨氢燃烧过程,通过降低火焰温度和提高O自由基消耗来有效降低 NO_x 排放,水的加入限制了 N_2 和O自由基的反应,最终减少了NO的产生;Chai等^[11]也提出水的存在促进了氨的分解和NO的消耗。内燃兰金循环(Internal Combustion Rankine Cycle, ICRC)^[12]是一种先进的内燃机缸内喷水理念,循环在燃烧终了时刻向缸内喷入过热水,能够有效地控制缸内温度,同时缸内工质质量增加导致膨胀过程缸内压力提升,进而增加了膨胀功,最终有效地提升了内燃机的热力学循环效率。因此,为实现氨氢燃料在发动机上的使用同时控制污染物排放,提出将氨氢燃料结合内燃兰金循环应用的策略。

当前对ICRC应用的研究主要集中在使用传统含碳燃料的发动机方面。Fu等^[13]基于丙烷燃料计算了ICRC内燃机热效率边界,研究发现压缩比从9.2增加至14.0,热力学循环效率从56%提升至62%;康哲等^[14]基于双缸柴油机探究了不同进气氧浓度对ICRC循环燃烧过程的影响,试验结果表明:进气氧浓度增加通过改变缸内混合气的比热容,进而提升了缸内峰值温度和压力;冯上司等^[15]探究了喷水量对压燃式ICRC发动机燃烧及性能的影响,发现在一定的喷水量工况下,循环平均指示压力和燃烧稳定性均得到改善,试验中实现了46.6%的最佳有效热效率。

结合氨氢燃料性质和传统ICRC发动机燃烧过程影响因素,在Cantera环境下建立内燃兰金理论循环燃烧模型,探究不同掺氢比、压缩比、过量空气系数和喷水量对ICRC循环过程的影响。通过Cantera改变边界条件,从而进行不同工况下氨氢燃料燃烧过程数值模拟,最终从热力学循环效率和典型污染物排放数量两方面分析氨氢燃料结合ICRC应用于发动机的特点,为提升氨氢燃料发动机热效率和降低其 NO_x 排放提供一种参考途径。

1 计算方法

1.1 计算模型建立

建立的计算模型是对金少也等^[16]提出的增强奥

托循环模型(Enhanced Otto Cycle, EOC)的一种改进,如图1。与传统Otto循环不同的是,EOC涉及了循环过程中的化学平衡,即工质组分和比热容比的变化。因此,EOC更加接近发动机的实际循环,能够更精确地确定热力学循环效率上限。此外,在考虑化学平衡的前提下,整个计算过程满足热力学第一、二定律,保证了计算模型热力学上的普适性^[17-18]。在此基础上,基于Cantera建立ICRC理论循环计算模型。ICRC在燃烧终了时刻瞬时向缸内喷入过热水,进而汽化膨胀做功完成整个循环。水的蒸发汽化吸收燃烧释放的热量,降低缸内温度以限制高温条件下热力型 NO_x 的产生。同时,缸内做功工质量的增加引起膨胀过程缸内压力上升,增加了膨胀功,最终提升了热力学循环效率。图1a从示功图的角度展示了ICRC理论循环与传统Otto循环对比示意。Otto循环假定压缩过程和膨胀过程为2个等熵过程,燃烧过程和排气过程为2个定容过程,即1—2—3—4—1过程。ICRC理论循环的工作过程为1—2—5—6—1,循环假设水在定容燃烧过程结束以后瞬间喷入缸内,水的喷射过程、汽化过程及水与缸内工质的混合过程均为瞬态过程,则缸内压力将升高至点5的喷水结束后的缸内压力。如图1所示,在膨胀过程中,由于喷水导致缸内工质量增加,故缸内压力始终高于未喷水循环,终增加了膨胀功。

Wang等^[19]进行了发动机相关工况下预混氨氢燃料燃烧过程的数值研究,图1b从压缩终了时刻缸内温度的角度对比展示了不同工况下本文模型计算结果与该研究结果的差异。在压缩比分别为10和18、不同掺氢比条件下,压缩终了温度 T_2 的模型计算结果与参考数据的变化趋势一致,且不同工况下二者的差值均较小,计算结果相对误差的最大值不超过3.6%,从而验证了压缩终了温度计算的准确性。由于ICRC循环过程是基于压缩终了时刻,通过能量守恒定律和热力学第二定律建立的,则压缩终了温度的准确计算能够验证ICRC模型的合理性。

在ICRC循环中,过程1—2为闭口系统内工质的定熵压缩过程,根据定熵过程特点,热量变化量为零,则1—2过程外界对系统做功 W_{in} 为

$$W_{in} = W_{1-2} = m_1(u_1 - u_2) \quad (1)$$

式中: m_1 为初始状态下即喷水前的混合气质量; u_1 、 u_2 分别为压缩前后混合气的比热力学能。依据等熵过程,可计算压缩终了温度 T_2 和压力 P_2 ,为

$$T_2 = T_1 \cdot C_R^{k-1} \quad (2)$$

$$P_2 = P_1 \cdot C_R^k \quad (3)$$

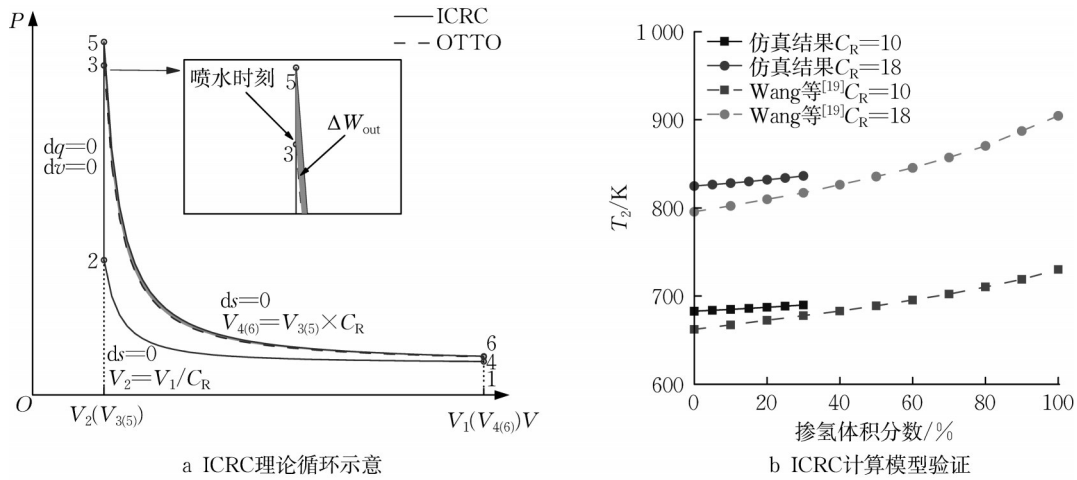


图1 ICRC理论循环计算模型建立与验证

Fig. 1 Establishment and verification of ICRC theoretical cycle model

式中: C_R 为发动机的压缩比; k 为混合气的绝热指数; T_1 和 P_1 分别为混合气的初始温度和压力。

过程2—3为理想的定容燃烧过程, 对外做功为零, 燃料燃烧过程的焓变转换为系统压力的增加, 即

$$m_1(h_3 - h_2) = P_3 V_3 - P_2 V_2 \quad (4)$$

根据理想气体状态方程, 得到燃烧终了温度 T_3 和压力 P_3 , 为

$$T_3 = \frac{m_1(h_3 - h_2)}{n_3 R} + \frac{n_2}{n_3} \cdot T_1 \cdot C_R^{k-1} \quad (5)$$

$$P_3 = \frac{h_3 - h_2}{v_3} + P_1 \cdot C_R^k \quad (6)$$

式中: n_2 、 n_3 分别为点2和点3混合气的物质的量; P_2 为点2的压力; V_2 、 V_3 分别为点2和点3的总体积; h_2 、 h_3 分别为点2和点3的焓值; v_3 为点3的比体积; R 为通用气体常数。

燃烧过程结束后, 循环水在此时瞬间喷入缸内并汽化, 假定喷水及水的汽化过程瞬间完成, 则3—5过程气体总体积未发生变化。因此, 根据压缩终了体积即可确定喷水后平衡时气体总体积。

根据闭口系统能量方程式, 由于系统绝热, 过程3—5有质量为 m_w 的工质水流入系统, 无工质流出, 则

$$m_w h_w = d(mu)_{cv} = m_5 u_5 - m_3 u_3 \quad (7)$$

式中: h_w 为喷入液态水的比焓; m 和 u 分别为任意时刻混合气的质量和比内能; 下标 cv 代表体积恒定; m_3 、 m_5 分别为喷水前后混合气的总质量; u_3 、 u_5 分别为喷水前后混合气的比热力学能。由比热力学能与温度的关系推出真实平衡温度 T_5 的计算式, 为

$$T_5 = \frac{m_3 C_{v3} T_3 + m_w h_w}{m_5 C_{v5}} \quad (8)$$

式中: C_{v3} 和 C_{v5} 分别为喷水前后混合气的定容比热容。采用的计算方法首先假定喷水后至水蒸气蒸发汽化过程结束, 混合气稳定状态下的平衡温度为 T_{eq} , 由该温度读取该状态的定容比热容, 并将其代入式(8)中, 从而计算得到点5的真实温度。若两温度的差值小于一定值, 可以认为该温度是点5的真实平衡温度; 若两者的差距较大, 则通过迭代的方式, 重复增减假设温度, 计算真实温度, 直到两温度的差值小于一定值时, 输出平衡温度 T_5 。

由压缩比和初始状态的比体积确定压缩终了混合气的比体积。因此, 在确定真实的平衡温度以后, 由该温度和点5比体积可以确定点5状态, 即可读取点5平衡状态下的各热力学参数。

过程5—6为等熵膨胀过程, 由于膨胀终了后气体总体积与压缩前相同, 可以确定点6状态, 进而确定其比热力学能 u_6 。则膨胀过程工质对外做功为

$$W_{out} = W_{5-6} = m_5(u_5 - u_6) \quad (9)$$

可以计算循环功、热力学循环效率为

$$W_t = W_{5-6} - W_{1-2} \quad (10)$$

$$\eta_t = W_t / (m_{fuel} H_u) \quad (11)$$

式中: m_{fuel} 为燃料的质量; H_u 为燃料的低热值。

1.2 计算边界条件

通过改变边界条件程序以完成不同工况的设置, 进而模拟氨氢燃料自然进气、压缩、燃烧和排气的全过程。使用 Cantera 计算不同边界条件下氨氢燃料内燃兰金循环过程峰值压力、温度、热力学循环效率和典型污染物的排放量等。设定边界条件如表1。

表 1 Cantera 计算边界条件

Tab. 1 Boundary conditions of calculation in Cantera

气体初始温度/K	气体初始压力/MPa	进气组分及体积分分数	压缩比	喷水温度/K	喷水压力/MPa	掺氢体积分分数/%	过量空气系数	喷水摩尔分分数/%
298	1	O ₂ 21% N ₂ 79%	10, 12, 14, 16, 18, 20	373	20	0~30	1~6	0~60

由于氨氢燃料具有较高的自燃温度和辛烷值,即具有较好的抗爆震能力,则可以适当提升氨氢发动机的压缩比,从而提升发动机的热效率^[20]。因此在初始压缩比的设定上,选择较高的压缩比上限值,将其设置为 20。

掺氢比 (Hydrogen Fraction, H_F) 定义为氢气在燃料混合气中的体积分分数,在相同的环境条件下,等价于氢气在燃料混合气中的物质的量分数,即

$$H_F = \frac{n_{H_2}}{n_{H_2} + n_{O_2}} \times 100\% \quad (12)$$

式中: n_{H_2} 为氢气的物质的量; n_{O_2} 为氧气的物质的量。

Benbellil 等^[21]在双燃料压燃式发动机上研究了高掺氢比和天然气燃料混合物的燃烧实验,结果表明在较高的发动机负载下,燃料混合物中 H_2 的体积分分数不应超过 50%,否则会导致发动机爆震。Medina 等^[22]在旋流燃气轮机燃烧室中探究了氨氢稀薄预混燃烧特性,结果表明在 NH_3 、 H_2 物质的量之比为 50:50 条件下燃料混合物易发生回火,且 NO_x 排放量较高。Mashruk 等^[23]在不同当量比条件下探究了 NH_3 与 H_2 物质的量之比为 70:30 混合气层流预混火焰和湍流旋流火焰,说明了从回火和熄火角度评价,掺氢体积分分数为 30% 的氨氢混合气具有最佳的稳定性。参考以上文献,考虑到本文的研究目标在于使用氨作为未来内燃机主要燃烧的零碳燃料,加氢的目的在于改善氨燃料的燃烧特性,故设定掺氢体积分分数为 0~30%。

过量空气系数 (excess air ratio) 的定义为实际供给的空气量相对于燃料完全燃烧时理论空气量的倍数。Jin 等^[24]在研究不同氧浓度条件下,氢氧混合气在空气氛围和氩气氛围燃烧的自然特性时选择在快速压缩机中过量氧气系数为 1.0、2.0 和 4.0 的条件下进行,测量混合气的点火延迟时间; Jin 等^[17]使用基于 Matlab 的 Cantera 进行了气体燃料内燃机氩气动力循环的热力学分析,计算过程中设定过量氧气系数范围为 $\lambda \sim 6\lambda$ 。考虑到氨燃料不易发生燃烧的化学性质,选择较高的氧气量和较宽泛的氧气量范围,在模拟计算过程中过量空气系数范围设定为 1~6。

喷水摩尔分数 (Water Fraction, W_F) 定义为燃

烧结束时,缸内喷入水的物质的量占混合气总物质的量的分数,即

$$W_F = \frac{n_{H_2O}}{n_{fuel} + n_{air}} \times 100\% \quad (13)$$

式中: n_{H_2O} 为水的物质的量; n_{fuel} 和 n_{air} 分别为燃料与空气的物质的量。

随着缸内喷水量增加,缸内温度逐渐降低,从缸内热力循环角度考虑,喷水量的设定需有上限,该数值由做功冲程结束时缸内温度决定。在程序计算时,将此温度的下限值设置为水的临界温度,从而保证做功结束以后缸内水始终以气态形式存在,水蒸气的液化将导致混合气比体积降低,缸压瞬间下降,进而严重影响循环性能表现;此外,液滴的产生加剧缸内金属部件的腐蚀和润滑油的稀释,最终降低发动机的耐久性。因此,需要保证做功结束后缸内具有一定的温度,以排气温度不低于水的临界温度为限制条件, W_F 的范围为 0~60%。

假设喷水过程、水蒸气的汽化过程以及气体混合过程均为瞬间完成,这些假设虽然不符合物理现实,但该计算方法可以较为直观地研究和分析 ICRC 内燃机的工作过程核心参数,以及各边界条件对热力学循环效率、排放的影响规律,找到氨氢内燃兰金循环发动机的热力学循环效率理论上限,为将来的实机试验开展起到参考和指导作用。对于喷水对发动机实际循环的影响,可以通过改变喷水时刻、喷水压力、喷水脉宽和适当提高燃料中的氢比例等多种方式,实现喷水对发动机工作过程的负面影响最小化,最终降低不稳定燃烧的可能性。

2 结果及分析

2.1 掺氢比的影响

图 2 显示了未喷水工况下过量空气系数为 1 时不同压缩比条件下掺氢比对 ICRC 循环过程的影响,具体表现为压缩终了时刻缸内温度、压力和燃烧终了时刻缸内温度、压力以及热力学循环效率的变化。由图 2a 和 2c 可见:压缩终了温度和压力的增加主要受压缩比增加的影响。同样地,图 2b 和 2d 说明压缩比增加直接导致燃烧终了温度、压力上升,原因在于

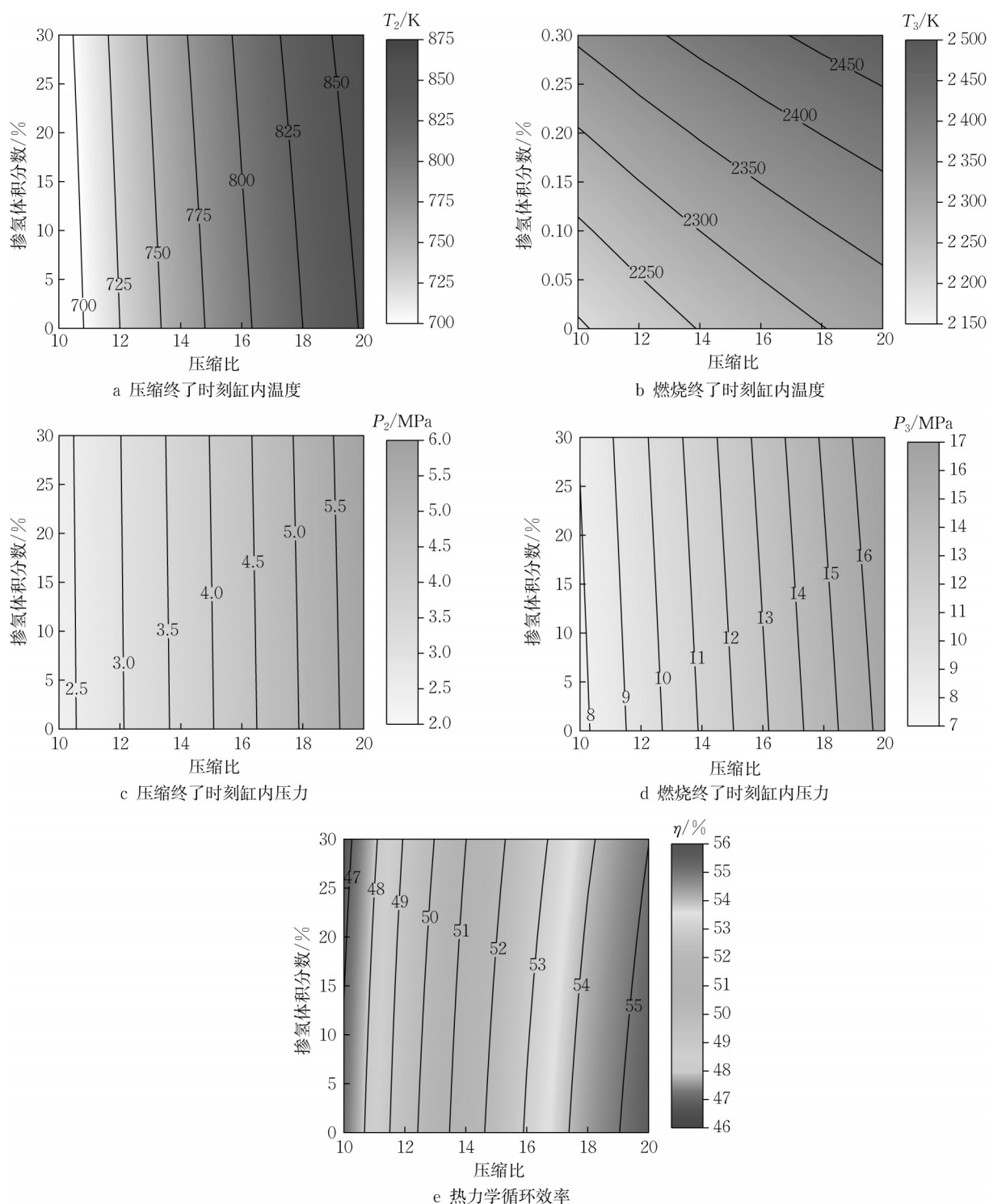


图 2 未喷水工况下过量空气系数为 1 时掺氢比对 ICRC 燃烧过程的影响

Fig. 2 Influence of hydrogen fraction and compression ratio on combustion process of ICRC at a λ of 1, without water spray

氢气热值远大于氨,掺氢比增加会导致混合气总量一定的条件下,氢气的体积分数占比增加,进而引起燃烧过程焓变增加,最终引起 T_3 、 P_3 上升。

如图 2e 所示,在压缩比一定的条件下,随着预混燃料掺氢比的增加,热力学循环效率略有降低。

以压缩比为 20 为例,氧浓度为化学计量比,掺氢比从零增加至 30%,ICRC 热力学循环效率由 55.54% 降低至 54.98%,降低 0.56%。出现此现象的原因在于掺氢比增加提升了燃烧过程缸内温度,进而导致了混合气绝热指数 k 降低,最终导致热力学循环效率

率降低。

图3给出了未喷水工况下压缩比20、过量空气系数为1的条件下掺氢比对ICRC排放的影响。由图可见:掺氢以后,排放物中未燃烧氨的含量始终极低,这与Li等^[25]关于氨燃料燃烧及氮氧化物的排放的研究现象一致,说明将氢气与氨燃料掺混使用时,氢气的加入可以使氨燃料接近完全燃烧;排放物中NO的浓度远远大于N₂O和NO₂,NO_x主要以NO的形式存在。排放物中N₂O体积分数由 5.86×10^{-6} 增

加至 7.27×10^{-6} ;NO体积分数由 8.650×10^{-3} 增加至 10.6×10^{-3} ;NO₂体积分数由 66.7×10^{-6} 降低至 62.8×10^{-6} 。由于掺氢以后提升了火焰温度,而N₂O主要产生于火焰温度较低的贫燃和富燃工况,故N₂O的体积分数始终较低,不超过 7.5×10^{-6} 。此外,掺氢提升了燃烧反应中H、OH自由基浓度,促进了NO₂与H自由基反应转化成NO^[26]。因此,排放物中NO₂的数量随着掺氢比增加而逐渐降低。

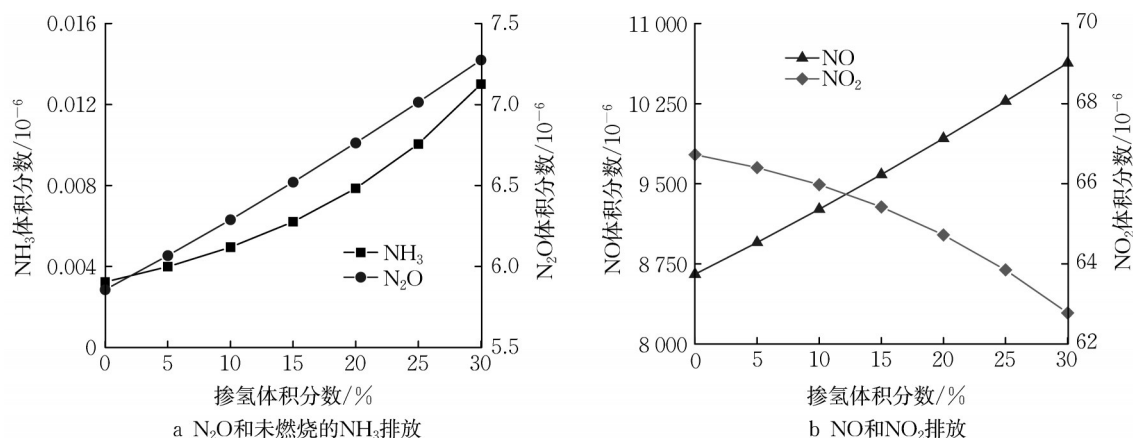


图3 未喷水工况下压缩比为20、过量空气系数为1时掺氢比对ICRC排放的影响

Fig. 3 Influence of hydrogen fraction on emissions of ICRC at a CR of 20 and a λ of 1, without water spray

2.2 过量空气系数的影响

图4展示了未喷水工况掺氢比为15%的不同压缩比条件下过量空气系数对ICRC循环过程的影响。由图4a和4c可见:虽然主要受到压缩比的影响,但压缩比一定时,过量空气系数增加,压缩终了时刻缸内温度、压力均有上升。这是由于氧气是双原子分子,具有更高的绝热指数,故氧浓度增加提升了混合气的平均绝热指数,根据式(2)和(3),绝热指数增加导致 T_2 、 P_2 增加。图4b和4d说明:压缩比一定的条件下,过量空气系数增加使燃烧终了温度 T_3 下降,燃烧终了压力 P_3 下降。考虑缸内温度和压力下降的原因在于:过量空气系数增加,定容燃烧过程焓变($h_3 - h_2$)降低,根据式(5)和(6),降低的焓变导致 T_3 、 P_3 下降。如图4e所示,压缩比和过量空气系数的提升均会导致ICRC热力学循环效率提升,热力学循环效率受到绝热指数的影响,过量空气系数增加后,由于燃烧过程焓变降低,燃烧过程缸内温度降低,较低的缸内温度提升了混合气的平均绝热指数,进而提升了热力学循环效率。在压缩比为20、掺氢体积分数为15%条件下,过量空气系数由1增加到6,热力学循环效率由55.31%增加至57.97%,增加

2.66%。从提升ICRC内燃机热力学循环效率的角度出发,可适当提升过量空气系数,但Li等^[27]的研究表明氨燃料燃烧层流火焰速度随着当量比增加先增加后减小,并在当量比为1.1附近达到峰值。故过度提升过量空气系数将引起燃料燃烧层流火焰速度下降,为保证反应速率和减少反应持续时间,应控制氧浓度在当量比附近合理的范围。

图5展示了未喷水工况时压缩比为20、掺氢比为15%条件下过量空气系数对ICRC排放的影响。不同氧浓度下,未燃烧氨的排放极低,基本可以忽略不计。随着氧浓度增加,N₂O浓度降低,NO和NO₂浓度先增加后减小。由于N₂O主要通过NO与NH自由基和HO₂自由基的反应产生,主要通过H自由基的反应和热分解而消耗^[28]。在掺氢体积分数为15%的条件下,H自由基浓度较高,故不同氧浓度条件下N₂O的排放量均较低。燃料型NO对OH自由基的浓度敏感^[28],贫氧燃烧状态下OH自由基浓度较低,NO排放量较低;随着氧浓度增加,富氧状态下产生更多的N原子,根据扩展的Zeldovich机制, $N_2 + O \leftrightarrow NO + N$ 是还原反应^[11],N原子的产生促进反应朝逆向进行,从而解释了富氧燃烧条件

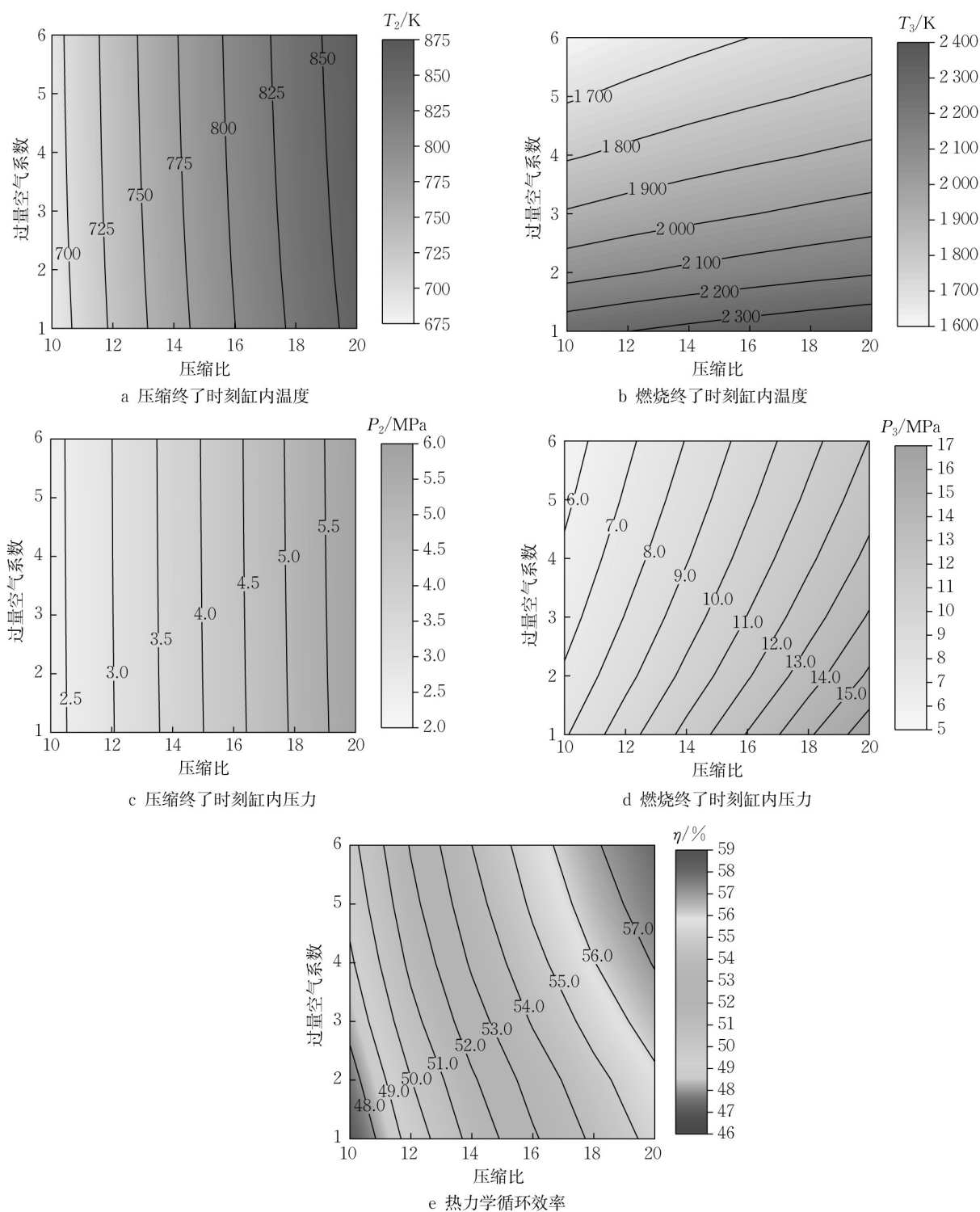


图4 未喷水工况下掺氢比为15%时过量空气系数对ICRC燃烧过程的影响

Fig. 4 Influence of excess air ratio and compression ratio on combustion process of ICRC at an HF of 15%, without water spray

下NO生成量减少。由于NO₂的生成主要来自于NO与HO₂自由基的反应^[29],故随着过量空气系数增加,HO₂自由基浓度增加,当NO排放浓度先增加后降低NO₂排放浓度也表现出先增加后降低的趋势。

2.3 喷水量的影响

在探究喷水量对ICRC燃烧过程参数的影响时,由于假定水在燃烧终了时刻瞬间喷入,压缩及燃烧过程发生在喷水时刻之前,故在压缩比和氧浓度保持不变的条件下,压缩终了温度、压力及燃烧终了温

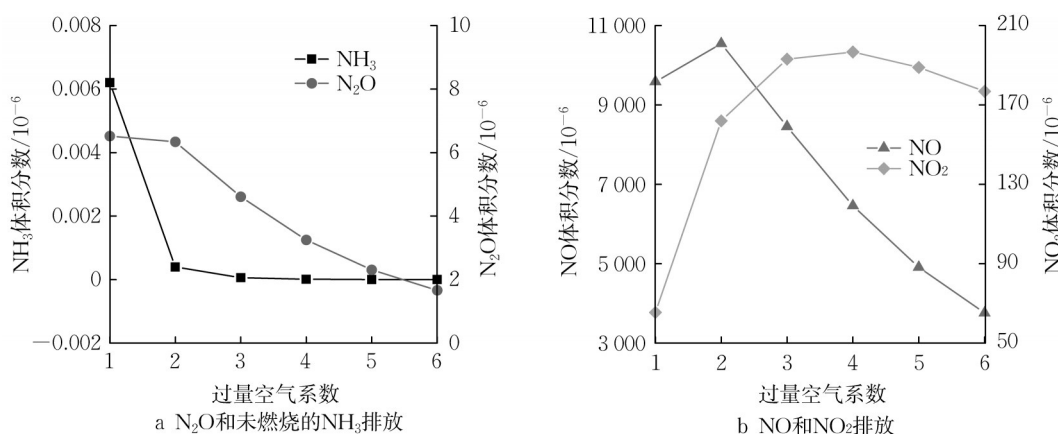


图5 未喷水工况下压缩比为20、掺氢比为15%时过量空气系数对ICRC排放的影响

Fig. 5 Influence of excess air ratio on emissions of ICRC at a CR of 20 and an HF of 15%, without water spray

度、压力均不会发生改变。然而,喷水后水蒸发汽化吸热将导致缸内混合气温度降低、压力上升,当水蒸气与缸内气体充分混合至蒸发汽化过程结束,混合气达到稳定状态时,得到新的缸内温度和压力,将其定义为平衡温度 T_5 和平衡压力 P_5 。图6b、6d分别展示了喷水后平衡状态相比未喷水工况缸内峰值温度、峰值压力的变化量。变化量定义为平衡温度与未喷水工况燃烧终了温度的差值,即

$$\Delta T = T_5 - T_3 \quad (14)$$

$$\Delta P = P_5 - P_3 \quad (15)$$

图6给出了压缩比为20、过量空气系数为1、喷水温度373 K的条件下喷水量和掺氢比对ICRC燃烧过程参数的影响。由图6a和6b可以看出喷水后的降温效果,缸内喷水后水的蒸发汽化吸收燃烧释放的热量,随着喷水量增加,降温效果更加显著,在掺氢体积分数为15%的条件下, W_F 从零增加至60%导致燃烧终了时刻缸内峰值温度降低767 K。图6c和6d分别显示了不同喷水量对平衡压力、压力变化量的影响。喷水以后水的蒸发汽化增加了缸内做功工质的量,在掺氢比一定的条件下喷水量增加提升了平衡压力,使ICRC缸内峰值压力高于传统Otto循环, W_F 为60%、不同掺氢比条件下峰值压力均增加约1.3 MPa。图6e展示了喷水量对ICRC热力学循环效率的影响,由图可见: W_F 一定,由于掺氢比增加提升了燃料单位体积内的热值,导致燃烧过程缸内温度增加,从而引起混合气绝热指数降低,最终降低了热力学循环效率。在掺氢比一定的条件下,由于喷水降低了缸内温度,导致混合气绝热指数上升,故 W_F 增加能够提升ICRC热力学循环效率,在压缩比为20,纯氢工况下,喷水量从零增加至

60%,热力学循环效率从55.54%提升至62.52%,提升了6.98%;在相同压缩比、掺氢体积分数为30%的工况下,热力学循环效率从54.98%提升至61.85%,提升了6.87%。计算结果与ICRC理论示功图的分析一致,喷水使做功过程的缸内压力高于未喷水循环,从而拓宽示功图的面积,在吸热量一定的前提下,喷水后更多的工质量增加了放热量,最终显著提升了热力学循环效率。

图7展示了压缩比为20、掺氢体积分数为15%、过量空气系数为1、喷水温度373 K的条件下不同喷水量对ICRC排放物浓度的影响。其中,未燃烧氨的排放浓度始终极低;随着喷水量增加,3种氮氧化物的排放量显著降低。此外,对比未喷水工况,在其他条件保持不变的前提下,喷水量增加至60%, NO_x 中主要排放物 NO 体积分数由 9.586×10^{-3} 降低至 6.041×10^{-3} , NO_2 体积分数由 65.4×10^{-6} 降低至 41.2×10^{-6} ,均减少了37%。原因在于喷水以后显著降低了缸内峰值温度,低温进而减少了热力型 NO 的排放。此外,水的加入通过 H_2O 与 O 自由基的反应加强了 O 自由基的消耗,从而减少了 O 自由基与 N_2 发生反应生成 NO ,最终减少了 NO 的产生^[10]。在 NH_3 氧化和 NO_x 生成路径中, NO 和 HO_2 自由基的反应和 NO 与 NH 自由基的反应分别决定了 NO_2 和 N_2O 的产生^[29],因此,排放物中 NO 减少会导致最终排放 NO_2 和 N_2O 数量减少。

2.4 内燃机指示热效率理论值的估算

考虑发动机实际工作过程中的各种损失,如散热损失、换气损失和燃烧损失等,可以将内燃机热力学循环效率转换为内燃机的理论指示热效率。内燃机的理论指示热效率和热力学循环效率之间可视为

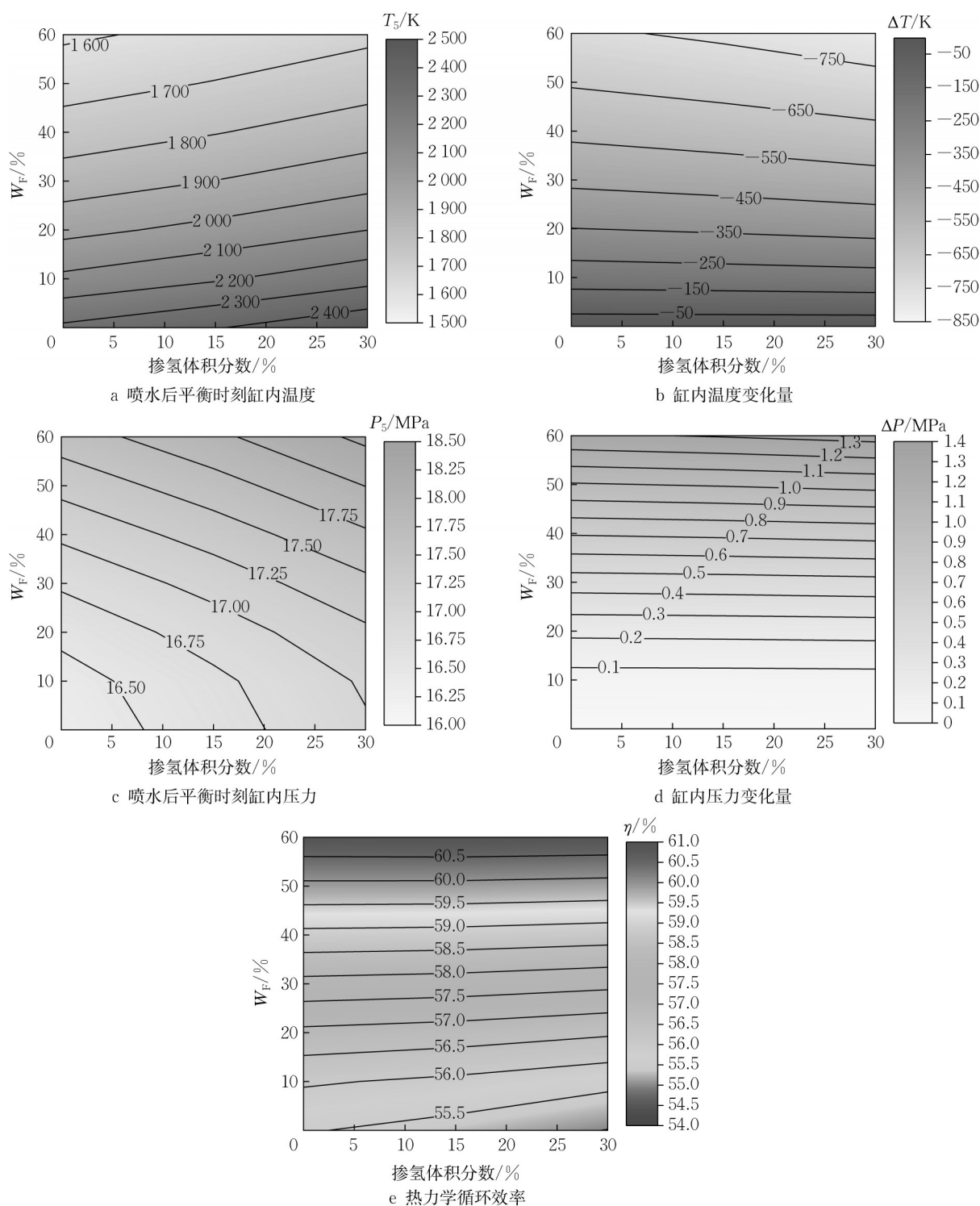


图6 压缩比为20、过量空气系数为1、喷水温度为373 K时喷水量和掺氢比对ICRC燃烧过程的影响

Fig. 6 Influence of water fraction and hydrogen fraction on combustion process of ICRC at a CR of 20, a λ of 1, and a water spray temperature of 373 K

存在线性的转化关系,如式(16):

$$\eta_i = C \times \eta_t \quad (16)$$

式中: η_i 为内燃机的理论指示热效率; η_t 为热力学循环效率; C 为考虑实际工作的损失后2种效率之间的修正系数。由于发动机实际工况的复杂性,很难确

定修正系数的精确值。Killingsworth等^[30]研究了压缩比和比热比对发动机效率的影响,在压缩比为16、当量比0.24的条件下探究了 H_2-O_2 发动机的热转化效率。参考Killingsworth等的的数据,将修正系数设定为60%。

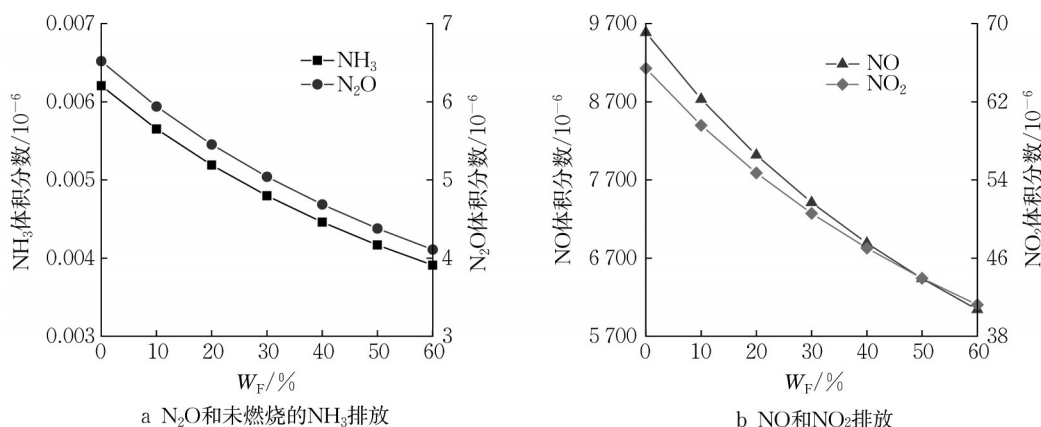


图7 压缩比为20、掺氢比为15%、过量空气系数为1、喷水温度为373 K时喷水量对ICRC排放的影响

Fig. 7 Influence of water fraction on emissions of ICRC at a CR of 20, an HF of 15%, a λ of 1, and a water spray temperature of 373 K

图8给出了压缩比为20、掺氢体积分数为15%的条件下不同过量空气系数和喷水前后内燃机热力学循环效率和理论指示热效率的对比示意图。工况1和工况2分别对应过量空气系数为工况1和工况6的未喷水工况,工况3对应过量空气系数为1、喷水量为60%。过量空气系数增加降低了燃烧过程的焓变,导致燃烧过程温度降低,从而提升了混合气的绝热指数,最终提升了热力学循环效率和理论指示热效率。相比于提升过量空气系数,喷水降低缸内温度的作用更显著,因此缸内喷水在提升内燃机热力学循环效率和理论指示热效率两方面均具有显著的优势。

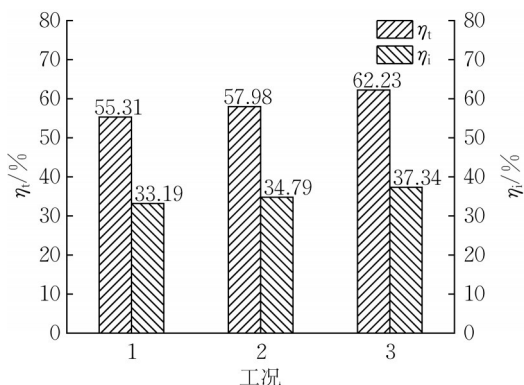


图8 不同工况下内燃机热力学循环效率与理论指示热效率的对比

Fig. 8 Comparison of thermodynamic cycle efficiency and indicated thermal efficiency of ICE under different working conditions

3 结论

基于Cantera平台建立ICRC理论循环计算模

型,进行不同边界条件下氨氢燃料燃烧过程数值模拟,最终从热力学循环效率和 NO_x 排放两方面分析了发动机的燃烧特性,得到结论如下:

(1)对于未喷水工况,增加过量空气系数使热力学循环效率提升。在压缩比为20、掺氢体积分数为15%的工况下,过量空气系数升高6倍,热力学循环效率由55.31%提升至57.97%,增加约2.66%。

(2)燃烧终了时刻向缸内喷射373 K过热水显著提升了热力学循环效率。在压缩比为20、过量空气系数为1、不同掺氢比工况下喷射占混合气总体积60%的过热水,热力学循环效率均提升约7%,以掺氢比30%的工况为例,热力学循环效率由54.98%提升至61.85%。

(3)对于未喷水工况,在不同掺氢比和过量空气系数条件下,使用氨氢燃料的ICRC发动机排放污染物 NO_x 主要以NO为主,其排放数量远高于 N_2O 和 NO_2 ,排放物中未燃烧 NH_3 的数量极低。在喷水工况下, NO_x 排放数量随喷水量增加而降低,喷水以后NO、 NO_2 排放数量降低幅度最高达到37%。

作者贡献声明:

张冠宇:模型建立,数值计算,论文撰写。

于洋:论文思路指导及论文数据分析。

田径:论文统筹、规划。

吴志军:概念提出,研究方法提出,学术指导,论文校阅。

参考文献:

- [1] LI L, GONG Y, DENG J, *et al.* CO₂ reduction request and future high-efficiency zero-emission argon power cycle engine [J]. *Automotive Innovation*, 2018, 1(1): 43.

- [2] 王智化,余作超,陈晨霖,等.新型零碳氨燃料的燃烧特性研究进展[J].华中科技大学学报(自然科学版),2022,50(7):24. DOI:10.13245/j.hust.220703.
WANG Zhihua, YU Zuochao, CHEN Chenlin, *et al.* Research progress on combustion characteristics of new zero carbon ammonia fuel [J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science), 2022, 50(7): 24. DOI:10.13245/j.hust.220703.
- [3] 夏鑫,蔺建民,李妍,等.氨混合燃料体系的性能研究现状[J].化工进展,2022,41(5):2332. DOI:10.16085/j.issn.1000-6613.2021-1131.
XIA Xin, LIN Jianmin, LI Yan, *et al.* Research status of performance of ammonia mixed fuel system [J]. Progress in chemical industry, 2022, 41(5): 2332. DOI:10.16085/j.issn.1000-6613.2021-1131.
- [4] 郭朋彦,刘子川,邵方阁,等.氢氨清洁无污染无碳燃料在发动机上的应用分析[J].汽车实用技术,2016(4):81. DOI:10.16638/j.cnki.1671-7988.2016.04.028.
GUO Pengyan, LIU Zichuan, SHAO Fangge, *et al.* Analysis on the application of hydrogen ammonia clean, pollution-free and carbon free fuel in engines [J]. Automotive practical technology, 2016 (4): 81. DOI: 10.16638/j.cnki.1671-7988.2016.04.028.
- [5] FRIGO S, GENTILI R. Analysis of the behaviour of a 4-stroke Si engine fuelled with ammonia and hydrogen [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, 38(3): 1607.
- [6] CHEN J, JIANG X, QIN X, *et al.* Effect of hydrogen blending on the high temperature auto-ignition of ammonia at elevated pressure[J]. Fuel, 2021, 287: 119563.
- [7] LEE J H, KIM J H, PARK J H, *et al.* Studies on properties of laminar premixed hydrogen-added ammonia/air flames for hydrogen production [J]. international journal of hydrogen energy, 2010, 35(3): 1054.
- [8] OTOMO J, KOSHI M, MITSUMORI T, *et al.* Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(5): 3004.
- [9] AWAD O I, ZHOU B, HARRATH K, *et al.* Characteristics of NH_3/H_2 blend as carbon-free fuels: A review [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 48 (96): 38077.
- [10] PUGH D, BOWEN P, VALERA-MEDINA A, *et al.* Influence of steam addition and elevated ambient conditions on NO_x reduction in a staged premixed swirling NH_3/H_2 flame[J]. Proceedings of the combustion institute, 2019, 37(4): 5401.
- [11] CHAI W S, BAO Y, JIN P, *et al.* A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2021, 147: 111254.
- [12] Bilger, R W. Zero release combustion technologies and the oxygen economy [C]//Fifth International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment. Lisbon: [S.n.], 1999: 1039 - 1046.
- [13] WU Z, FU L, GAO Y, *et al.* Thermal efficiency boundary analysis of an internal combustion rankine cycle engine [J]. Energy, 2016, 94: 38.
- [14] 康哲,陈思远,邓俊,等.柴油机纯氧燃烧过程及缸内喷水影响的模拟研究[J].同济大学学报(自然科学版),2020,48(1):87.
KANG Zhe, CHEN Siyuan, DENG Jun, *et al.* Simulation study on pure oxygen combustion process of diesel engine and effect of in cylinder water injection [J]. Journal of Tongji University (Natural Science), 2020, 48(1): 87.
- [15] 冯上司,康哲,吴志军,等.缸内高温喷水量对压燃式内燃兰金循环发动机燃烧及性能影响的试验研究[J].工程热物理学报,2022,43(4):1123.
FENG Shangsi, KANG Zhe, WU Zhijun, *et al.* Experimental Study on the Influence of High Temperature Water Injection Rate in Cylinder on Combustion and Performance of Compression Ignition Internal Combustion Rankin Cycle Engine [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2022, 43 (4): 1123.
- [16] 金少也,邓俊,龚学海,等.氩气循环发动机热力学循环效率影响因素的热力学分析[J].内燃机学报,2020,38(4):351. DOI: 10.16236/j.cnki.nrjxb.202004046.
JIN Shaoye, DENG Jun, GONG Xuehai, *et al.* Thermodynamic analysis on factors influencing the thermal conversion efficiency of the argon power cycle engine [J]. Transactions of CSICE, 2020, 38(4): 351. DOI:10.16236/j.cnki.nrjxb.202004046.
- [17] JIN S, DENG J, LI L. Thermodynamic and chemical analysis of the effect of working substances on the argon power cycle [C]//SAE WCX Digital Summit. Detroit: [S.n.]: 12-15.
- [18] WANG C, JIN S, DENG J, *et al.* An innovative argon/miller power cycle for internal combustion engine: thermodynamic analysis of its efficiency and power density [J]. Automotive Innovation, 2023, 6(1): 76.
- [19] WANG D, JI C, WANG S, *et al.* Numerical study of the premixed ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(2): 2667.
- [20] DINESH M H, PANDEY J K, KUMAR G N. Study of performance, combustion, and NO_x emission behavior of an SI engine fuelled with ammonia/hydrogen blends at various compression ratio [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(60): 25391.
- [21] BENBELLIL M A, LOUNICI M S, LOUBAR K, *et al.* Investigation of natural gas enrichment with high hydrogen participation in dual fuel diesel engine[J]. Energy, 2022, 243: 122746.
- [22] VALERA-MEDINA A, PUGH D G, MARSH P, *et al.* Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(38): 24495.
- [23] MASHRUK S, ZITOUNI S E, BREQUIGNY P, *et al.*

- Combustion performances of premixed ammonia/hydrogen/air laminar and swirling flames for a wide range of equivalence ratios[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(97): 41170.
- [24] JIN S, SHU B, HE X, *et al.* A study on autoignition characteristics of H_2-O_2 mixtures with diluents of Ar/ N_2 in rapid compression machine for argon power cycle engines [J]. *Fuel*, 2021, 303: 121291.
- [25] LI J, HUANG H, KOBAYASHI N, *et al.* Study on using hydrogen and ammonia as fuels: combustion characteristics and NO_x formation: hydrogen and ammonia as fuels [J]. *International Journal of Energy Research*, 2014, 38(9): 1214.
- [26] MASHRUK S, KOVALEVA M, ALNASIF A, *et al.* Nitrogen oxide emissions analyses in ammonia/hydrogen/air premixed swirling flames[J]. *Energy*, 2022, 260: 125183.
- [27] LI J, HUANG H, KOBAYASHI N, *et al.* Study on using hydrogen and ammonia as fuels: combustion characteristics and NO_x formation[J]. *International Journal of Energy Research*, 2014, 38(9):1214.
- [28] ZHANG M, AN Z, WANG L, *et al.* The regulation effect of methane and hydrogen on the emission characteristics of ammonia/air combustion in a model combustor [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2021, 46(40): 21013.
- [29] ARIEMMA G B, SORRENTINO G, RAGUCCI R, *et al.* Ammonia/methane combustion: stability and NO_x emissions [J]. *Combustion and Flame*, 2022, 241: 112071.
- [30] KILLINGSWORTH N J, RAPP V H, FLOWERS D L, *et al.* Increased efficiency in SI engine with air replaced by oxygen in argon mixture [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 3141.

(上接第1608页)

- [5] 江星雨,李和壁. 铁路集装箱运输服务网络设计优化模型及算法[J]. *兰州交通大学学报*, 2020, 39(5): 31.
JIANG Xingyu, LI Hebi. Optimization model and algorithm of railway container transport service network design [J]. *Journal of Lanzhou Jiaotong University*, 2020, 39(5): 31.
- [6] 兰泽康,何世伟,许琰. 考虑车底和集装箱周转的中欧班列动态服务网络设计研究[J]. *铁道学报*, 2021, 43(4): 25.
LAN Zekang, HE Shiwei, XU Yan. Study on design of dynamic service network for China railway express considering fleet and container circulation [J]. *Journal of the China Railway Society*, 2021, 43(4): 25.
- [7] 闫伟,朱晓宁,邓宇君,等. 中欧班列去程运输组织优化模型[J]. *铁道学报*, 2019, 41(2): 1.
YAN Wei, ZHU Xiaoning, DENG Yujun, *et al.* Optimization model of outbound transportation organization for China railway express [J]. *Journal of the China Railway Society*, 2019, 41(2): 1.
- [8] XIA Y, WANG H X, ZHOU Y, *et al.* A daily container-to-train assignment model based on the passenger transportation-like organization strategy for railway container transportation [J]. *Transportmetrica A: Transport Science*, 2021, 2019(12): 1.
- [9] 魏玉光,苏寅,张超,等. 我国铁路集装箱旅客化快捷运输系统创新[J]. *中国铁路*, 2016, 646(4): 1.
WEI Yuguang, SU Yin, ZHANG Chao, *et al.* Innovation of passenger-like fast transport system of railway container [J]. *Journal of China Railway*, 2016, 646(4): 1.
- [10] 夏阳,魏玉光,赖艺欢,等. 基于运输成本的铁路集装箱旅客化运输系统开行方案[J]. *铁道学报*, 2019, 41(4): 10.
XIA Yang, WEI Yuguang, LAI Yihuan, *et al.* Research on the line plan of passenger-like transport system of railway container based on transportation organization model [J]. *Journal of the China Railway Society*, 2019, 41(4): 10.
- [11] 夏阳,魏玉光,赖艺欢,等. 铁路集装箱旅客化运输系统开行方案分阶段编制方法研究[J]. *铁道学报*, 2019, 41(7): 10.
XIA Yang, WEI Yuguang, LAI Yihuan, *et al.* A phased train plan approach for passenger-like transport system of railway container [J]. *Journal of the China Railway Society*, 2019, 41(7): 10.
- [12] 张小强,刘丹,陈兵,等. 竞争环境下铁路集装箱班列动态定价与开行决策研究[J]. *铁道学报*, 2017, 39(2): 17.
ZHANG Xiaoqiang, LIU Dan, CHEN Bing, *et al.* Dynamic pricing and operation planning of container train in competitive environment [J]. *Journal of the China Railway Society*, 2017, 39(2): 17.
- [13] 计明军,闫妍,祝慧灵. 海铁联运铁路集装箱定价与运营优化[J]. *中国管理科学*, 2018, 26(7): 159.
JI Mingjun, YAN Yan, ZHU Huiling. Railway pricing and operation scheduling in rail-sea intermodal transportation [J]. *Chinese Journal of Management Science*, 2018, 26(7): 159.