

文章编号:1000-582X(2010)06-025-06

# 中介尺度活塞式内燃机氢氧燃烧过程的数值模拟

张 力,王英章

(重庆大学 机械传动国家重点实验室,重庆 400044)

**摘 要:**中介尺度条件下的氢氧预混燃烧,其燃烧速率主要由化学反应速度决定。于是采用层流有限速率模型,运用详细氢氧 19 步基元反应化学动力学机理和动态网格数值方法,对中介尺度准气体动力循环活塞式热力发动机超高燃烧负荷率氢氧预混燃烧过程进行了模拟。研究表明:中介尺度移动边界微小封闭空间的氢氧预混燃烧具有稳定性;采用表面炽热点火形式的中介尺度准气体动力循环的活塞式内燃机,能够实现工质高温吸热、内能增加和对外做功的完整热力学过程;而循环周期、初始压力、相对燃空比等运行参数对移动边界微小封闭空间的氢氧燃烧过程具有复杂的影响。

**关键词:**Power MEMS;燃烧;微型发动机;化学动力学;数值模拟

**中图分类号:**TK417.4

**文献标志码:**A

## Numerical simulation of hydrogen-air combustion in meso-scale IC engine

ZHANG Li, WANG Ying-zhang

(State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chongqing University, Chongqing, 400044, P. R. China)

**Abstract:** The burning rate of hydrogen-air pre-mixture on meso-scale is mainly determined by its chemical reaction rate. So a Laminar Finite Rate Model, the gas phase reaction mechanism for the combustion of hydrogen-air mixture which consists of 19 reversible elementary reactions and the dynamic mesh method are adopted to simulate the combustion of hydrogen-air mixture in a meso-scale IC engine which operates a quasi gas power cycle under ultrahigh combustion load. The combustion of hydrogen-air mixture on meso-scale in the micro combustion chamber with moving boundary can be stable. The complete thermodynamic process of heat addition, internal energy increasing, and a boundary work output producing during expansion can be perfectly achieved in the closed combustion system of the meso-scaled IC engine igniting the hydrogen-air mixture by wire surface of high temperature. However, running parameters such as cycle period, initial pressure and fuel/air ratio have complex effects on the hydrogen-air combustion of micro closed container with moving boundary.

**Key words:** power MEMS; combustion; micro engine; chemical kinetics; numerical simulation

中介尺度热机在 MAV(micro air vehicles)、UAVs(micro-unmanned aerial vehicles)、可携带能源、未来战争等方面具有重要的应用前景。典型的

中介尺度热机包括:MIT 的微型涡轮发动机、University of California Berkeley 的微型转子发动机、Honeywell International 和 Georgia Tech 的微

收稿日期:2009-12-30

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50575231);中国博士后科学基金资助项目(20060400713)

作者简介:张力(1968-),男,重庆大学教授、博士,主要从事微机电动力系统研究方向研究,(E-mail)zhangli20@cqu.edu.cn.

型自由活塞式发动机等<sup>[1-4]</sup>。近年,作者提出了准气体动力循环的热力学原理,以此发展超高能量密度的准气体动力循环中介尺度热机<sup>[5]</sup>。

然而,由于缺乏相关的理论基础以及所存在的微细尺度限制,加上微制造技术的限制,中介尺度热机的国际研究进展仍然体现在如何证实其构想系统是否可行。其中,微小空间条件下高燃烧负荷率的燃烧是中介尺度热机研究中的关键问题,目前研究主要针对中介尺度叶轮式热力发动机的开口燃烧系统<sup>[6-8]</sup>。

针对准气体动力循环中介尺度活塞式内燃机的构造<sup>[9]</sup>,采用层流有限速率模型(the laminar finite-rate model)对其微小空间闭口热力系统中的预混燃烧层流火焰燃烧过程进行数值模拟,对中介尺度准气体动力循环活塞式内燃机带移动边界闭口热力系统的氢氧燃烧过程的成立性及运行参数的影响等问题进行了分析。

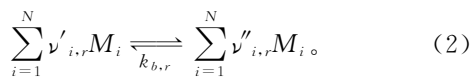
## 1 氢氧燃烧的层流有限速率模型

宏观尺度大量运用的汽油机、轻度预混燃气轮机均采用预混燃烧方式,其特征呈紊流火焰;而中介尺度条件下的预混燃烧,受尺度效应的影响,其流动为层流状态,燃烧反应速率主要受到化学反应速度的影响<sup>[5-7]</sup>。因此,将层流有限速率模型应用于微小封闭空间氢氧预混燃烧过程的数值模拟。

层流有限速率模型采用 Arrhenius 公式计算化学源项,忽略紊流脉动的影响。化学物质  $i$  的化学反应净源项通过有其参加的  $N_R$  个化学反应的 Arrhenius 反应源的和计算得到

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (1)$$

式中: $M_{w,i}$ 是第  $i$  种物质的分子量, $\hat{R}_{i,r}$ 为第  $i$  种物质在第  $r$  个反应中的产生或分解速率。反应可能发生在连续相反应的连续相之间,或是在表面沉积的壁面处,或是发生在一种连续相物质的演化中。考虑以如下形式写出的第  $r$  个反应



式中: $N$ 为系统中化学物质数目; $\nu'_{i,r}$ 为反应  $r$  中反应物  $i$  的化学计量系数; $\nu''_{i,r}$ 为反应  $r$  中生成物  $i$  的化学计量系数; $M_i$ 为第  $i$  种物质的符号; $k_{f,r}$ 为反应  $r$  的正向速率常数; $k_{b,r}$ 为反应  $r$  的逆向速率常数。

第  $r$  个反应中,物质  $i$  的产生或分解摩尔速度以如下公式给出

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) (k_{f,r} \prod_{j=1}^{N_r} [C_{j,r}] \eta'_{j,r} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{N_r} [C_{j,r}] \eta''_{j,r}) \quad (3)$$

式中: $N_r$ 为反应  $r$  的化学物质数目; $C_{j,r}$ 为反应  $r$  中每种反应物或生成物  $j$  的摩尔浓度; $\eta'_{j,r}$ 为反应  $r$  中每种反应物或生成物  $j$  的正向反应速度指数; $\eta''_{j,r}$ 为反应  $r$  中每种反应物或生成物  $j$  的逆向反应速度指数; $\Gamma$ 为第三体对反应速率的净影响。

$\Gamma$  的计算由下式给出

$$\Gamma = \sum_j \gamma_{j,r} C_j \quad (4)$$

式中  $\gamma_{j,r}$  为第  $r$  个反应中第  $j$  种物质的第三体影响。反应  $r$  的前向速率常数  $k_{f,r}$  通过 Arrhenius 公式计算

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_r}{RT}} \quad (5)$$

式中: $A_r$ 为指数前因子; $\beta_r$ 为温度指数; $E_r$ 为反应活化能; $R$ 为气体常数。

氢氧燃烧是一个复杂的链分支化学反应过程。目前根据试验和理论分析给出的层流有限速率化学反应模型有 1 步总包、2 步总包、7 方程、8 方程、20 方程等,不同文献上各种参数也不完全相同。在此采用 Tien 和 Stalker 等提出的氢气与氧气空间反应的 19 步详细反应机理,其中涉及到 9 种气体组分,包括: $O_2$ 、 $H_2$ 、 $OH$ 、 $H_2O$ 、 $H_2O_2$ 、 $HO_2$ 、 $O$ 、 $H$ 、 $N_2$ , 所涉及的基元反应如表 1 所示<sup>[7-10]</sup>。

表 1 氢氧 19 步基元化学反应

基元反应	$A_r$	$\beta_r$	$E_r$ Cal/mol
$H_2 + O_2 \rightarrow H + HO_2$	$1.73 \times 10^{12}$	0.468	55 050
$H + HO_2 \rightarrow H_2 + O_2$	$2.50 \times 10^{13}$	0.0	693
$H + O_2 \rightarrow OH + O$	$1.86 \times 10^{16}$	-0.61	16 899
$OH + O \rightarrow H + O_2$	$4.20 \times 10^{13}$	-0.189	-409
$H_2 + O \rightarrow OH + H$	$5.06 \times 10^{04}$	2.67	6 290
$OH + H \rightarrow H_2 + O$	$3.87 \times 10^{04}$	2.604	4 481
$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	$2.16 \times 10^{08}$	1.51	3 340
$H_2O + H \rightarrow H_2 + OH$	$1.36 \times 10^{10}$	1.192	19 357
$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	$1.50 \times 10^{09}$	1.14	0
$H_2O + O \rightarrow OH + OH$	$1.24 \times 10^{11}$	0.888	17 826
$H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	$8.62 \times 10^{21}$	-2.0	0
$H_2O + M \rightarrow H + OH + M$	$7.91 \times 10^{23}$	-2.192	120 083
$H + H + M \rightarrow H_2 + M$	$7.30 \times 10^{17}$	-1.0	0
$H_2 + M \rightarrow H + H$	$1.06 \times 10^{18}$	-0.874	104 066

续表 1

基元反应	$A_r$	$\beta_r$	$E_r$ Cal/mol
H+O+M→OH+M	$2.60 \times 10^{16}$	-0.6	0
OH+M→H+O	$2.89 \times 10^{16}$	-0.54	102 256
O+O+M→O <sub>2</sub> +M	$1.10 \times 10^{17}$	-1.0	0
O <sub>2</sub> +M→O+O	$5.42 \times 10^{19}$	-1.361	119 565
H+O <sub>2</sub> +M→HO <sub>2</sub> +M	$2.23 \times 10^{15}$	0.0	-500
HO <sub>2</sub> +M→H+O <sub>2</sub>	$5.71 \times 10^{16}$	-0.365	49 282
H+HO <sub>2</sub> →OH+OH	$1.50 \times 10^{14}$	0.0	1 000
OH+OH→H+HO <sub>2</sub>	$1.47 \times 10^{10}$	0.846	36 164
O+HO <sub>2</sub> →O <sub>2</sub> +OH	$2.00 \times 10^{13}$	0.0	0
O <sub>2</sub> +OH→O+HO <sub>2</sub>	$8.70 \times 10^{11}$	0.425	52 474
OH+HO <sub>2</sub> →O <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	$2.00 \times 10^{13}$	0.0	0
O <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O→OH+HO <sub>2</sub>	$7.16 \times 10^{13}$	0.173	38 443
HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> →O <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$2.00 \times 10^{12}$	0.0	0
O <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> →HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	$5.33 \times 10^{13}$	-0.173	38 443
H+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> →H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	$1.70 \times 10^{12}$	0.0	3 780
H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> →H+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$3.63 \times 10^{09}$	0.664	19 620
H+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> →OH+H <sub>2</sub> O	$1.00 \times 10^{13}$	0.0	3 580
OH+H <sub>2</sub> O→H+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$1.32 \times 10^{08}$	1.192	70 602
O+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> →OH+HO <sub>2</sub>	$2.80 \times 10^{13}$	0.0	6 400
OH+HO <sub>2</sub> →O+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$4.57 \times 10^{10}$	0.598	20 431
OH+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> →H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	$7.00 \times 10^{12}$	0.0	1 430
H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub> →OH+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$9.41 \times 10^{11}$	0.346	33 287
OH+OH+M→H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M	$4.73 \times 10^{11}$	1.0	-6 370
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M→OH+OH+M	$3.29 \times 10^{18}$	-0.384	46 691

说明:反应速率常数的单位依具体反应级数而定

所涉及问题的几何结构特征长度远远大于分子

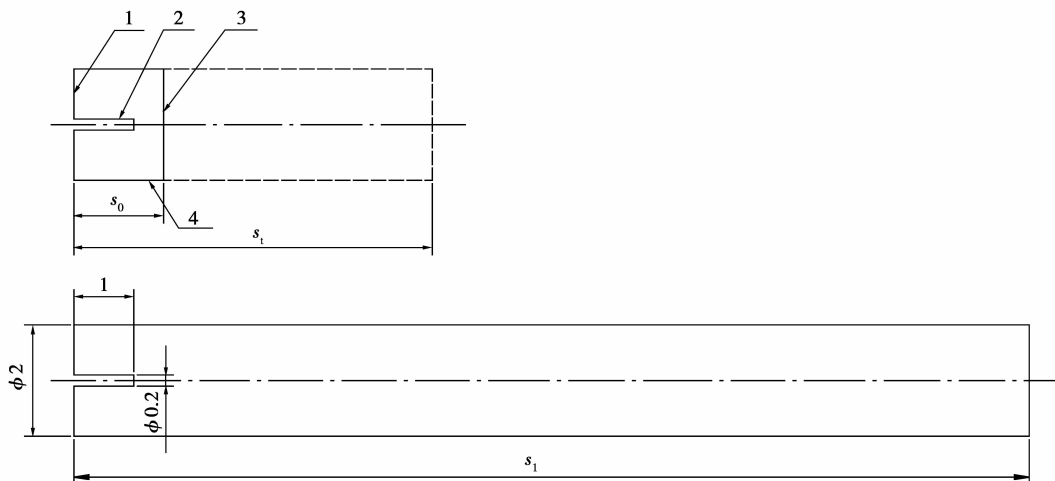


图 1 带移动边界封闭空间的微型燃烧室几何结构

平均自由程, Navier-Stokes 方程和非滑移边界条件仍然适用于流动域的数学描述。于是,将层流有限速率模型导入常规的流动域数值方法,用以模拟微小封闭空间氢氧预混燃烧过程中的化学反应以及多种化学组分的传输现象。为检验和验证所述数值方法,对文献[7]和文献[11]的问题进行了数值模拟,证实可获得与文献相当接近的结果<sup>[11-12]</sup>。

## 2 氢氧微燃烧过程的模拟

图 1 为带移动边界封闭空间的微型燃烧室几何结构,几何尺寸取自于正在发展的采用表面炽热点火形式的中介尺度准气体动力循环微型发动机的结构参数<sup>[9,13]</sup>。微型燃烧室几何空间由顶面 1、铂丝热火头 2、壁面 3 和表现为可移动边界的活塞 4 构成,初始状态活塞 4 距顶面距离为  $s_0$ ,终止状态为  $s_1$ ,对于任一时刻  $t$ ,活塞行程  $s_t$  由式(6)确定

$$s_t - s_0 = L + \frac{L}{2}(1 - \cos(\theta_t)) - \sqrt{L^2 - \frac{L^2}{4}\sin^2(\theta_t)}, \quad (6)$$

式中:冲程  $L = s_1 - s_0$ ;无量纲时间  $\theta_t = \frac{\pi t}{t_c}$ ;  $t_c$  为初状态到终状态的过程时间。

由于控制域几何空间随时间变化,动态分层的动态网格划分方法应用于燃烧过程流动域网格的划分,动态分层分割因子取为 0.5,初始状态网格单元设为  $25 \mu\text{m}$ 。采用 FLURNT 对流动域的控制方程进行求解,利用所定义の詳細化学动力学机理(考虑封闭空间的高压条件而计及反应速率常数受表观压力影响的修正),进行层流有限速率模型的计算。经验证,网格划分与计算结果具有无关性。

图 2 为计算得到的燃烧过程状态参数及质量组分的变化,其中  $s_0$  取 1.1 mm,  $s_1$  取 14.9 mm,  $t_c$  为 0.6 ms。初始状态氢氧混合物压力  $p_0 = 0.4053$  MPa, 初始温度 600 K,  $H_2$  质量分数 0.028 6,  $O_2$  质量分数为 0.228 6; 铂丝热火头表面温度 1 600 K, 外壁面考虑自然对流和热辐射的等效传热效果, 取其表面换热系数为  $10 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ , 厚度 2 mm。可见, 氢氧燃烧最高温度达到 3 000 K 以上, 能够实现稳定燃烧; 随着移动边界的向外运动, 工质温度逐渐降低, 工质内能转化为对外界输出的机械功, 表明在所述微小

空间条件下能够实现工质高温吸热、内能增加和对外做功的完整热力学过程; 在经历 0.3 ms 之后,  $H_2O$  的质量分数基本保持恒定, 在整个封闭燃烧室空间的分布已经相当均匀, 表明燃烧过程已基本完成; 而沿轴向速度分布反映出燃烧过程中流动的规律性、层次性和稳定性。因此, 在中介尺度微小空间条件下, 表面炽热点火氢氧预混燃烧活塞式内燃机能够实现工质高温吸热、内能增加和对外做功的完整热力学过程。所述观点和现象可以在最近 Suzuki 的实验研究中得到证实<sup>[14]</sup>。

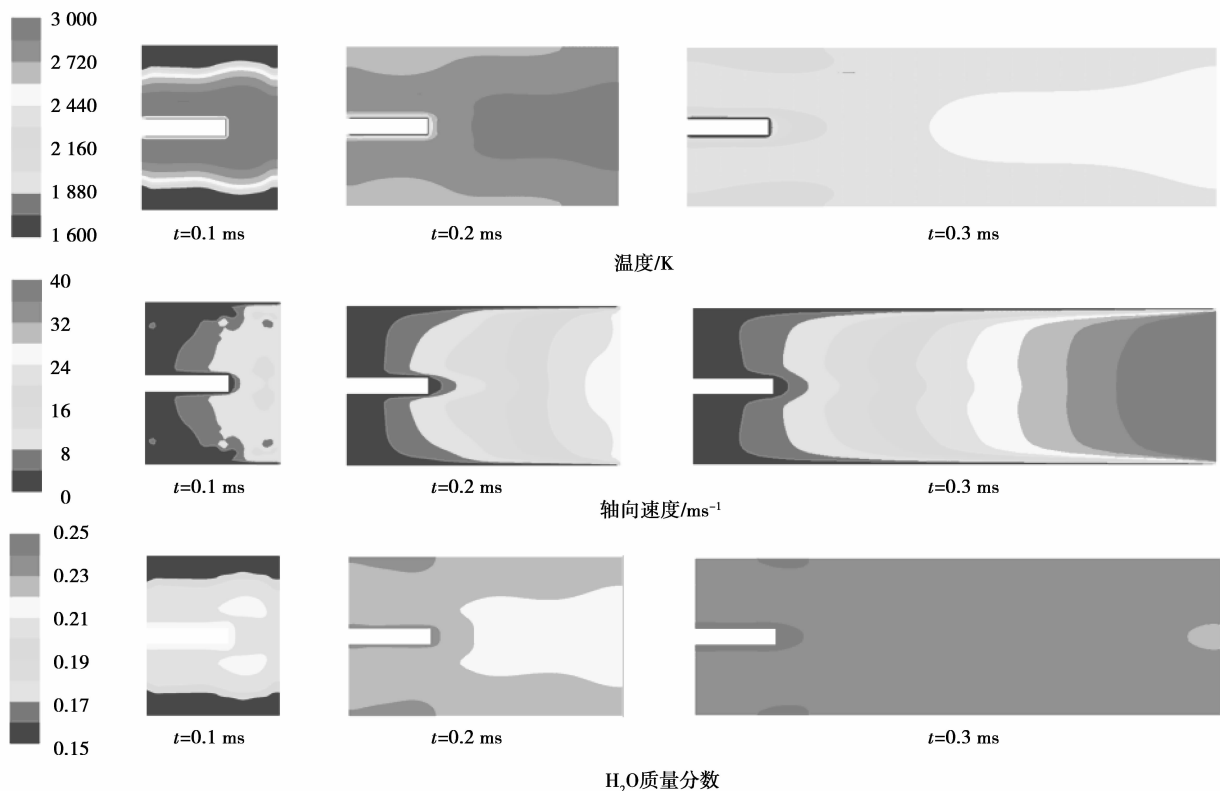


图 2 燃烧过程状态参数及质量组分的变化

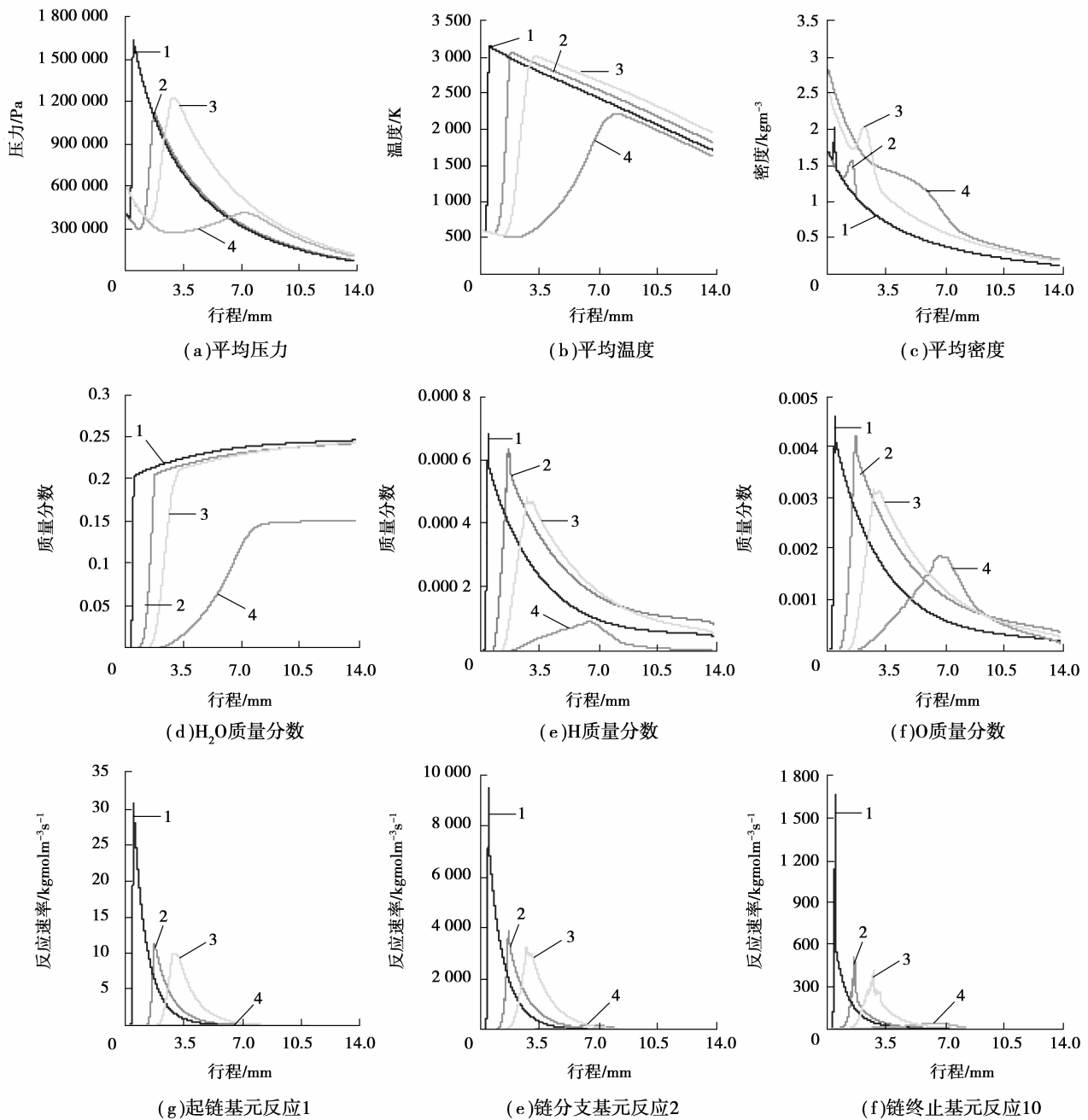
### 3 运行条件对微燃烧过程的影响

运行条件对中介尺度氢氧微燃烧过程的成立性具有影响。图 3 代表性例举了部分运行参数条件下移动边界封闭空间微型燃烧室的质量平均状态参数、质量分数和基元反应 Arrhenius 反应速度(正向反应速度)及其沿行程的变化。大量模拟计算表明, 周期  $t_c$ 、初始压力  $p_0$ 、相对燃空比等运行参数对移动边界微小封闭空间燃烧过程及特性具有重要影响。

在其它运行参数保持相同的情况下, 随  $t_c$  的增加, 边界移动速度增加, 但着火滞后时间受移动边界速度的影响不大, 故在行程坐标上的起燃位置后移,

化学反应速率降低、峰值燃烧压力、工质做功能力下降, 燃烧持续期缩短。在行程结束时刻, 工质温度相对增高, 最终生成物  $H_2O$  质量分数降低, 活性中间体 H、O 质量分数增大,  $t_c$  的增加将影响微小封闭空间氢氧燃烧的充分性。不过,  $t_c$  的增加可直接提高单位时间的动力输出性能。

在其它运行参数保持相同而初始压力  $p_0$  增加的情况下, 起链基元反应、链分支基元反应和链终止基元反应的反应初始发生位置在行程坐标上后移, 着火滞后时间、燃烧持续时间增加; 其可能的原因在于压力的增加有助于链终止基元反应的主导作用, 此时  $HO_2$  链载体的稳定性被影响, 其它的活性中间



1— $t_c=1$  ms,  $p_0=0.4053$  MPa, 相对燃空比 1; 2— $t_c=0.6$  ms,  $p_0=0.4053$  MPa, 相对燃空比 1;  
 3— $t_c=0.6$  ms,  $p_0=0.6080$  MPa, 相对燃空比 1; 4— $t_c=0.6$  ms,  $p_0=0.6080$  MPa, 相对燃空比 0.6

图 3 各种运行参数条件下的燃烧过程及其特性

体的作用使反应缓慢。不过,随着初始压力  $p_0$  的提高,闭口热力系统工质质量及单位质量工质做功能力提高,能量密度明显加大;同时,从最终生成物 H<sub>2</sub>O、活性中间体 H、O 质量分数来看,  $p_0$  的适当提高,有助于微小封闭空间氢氧燃烧的充分性。

另外,在稀混合气情况下,氢氧在移动边界微小封闭空间燃烧具有稳定性。此时,着火滞后时间明

显延长,基元反应的反应速率大幅降低,峰值压力和峰值温度较低,工质做功能力很弱。不过,稀混合气情况下燃烧持续时间的缩短,能够保证氢氧燃烧的充分性,在行程结束时刻,最终生成物 H<sub>2</sub>O 质量分数几乎不再变化,活性中间体 H 的质量分数已相当低。

## 4 结 论

将层流有限速率模型和动态网格方法应用于控制质量的微小尺度封闭空间预混燃烧层流火焰燃烧过程的数值模拟,可见:中介尺度移动边界封闭空间条件下可以实现稳定的氢氧燃烧过程;采用表面炽热点火形式的中介尺度准气体动力循环活塞式内燃机能够完成工质高温吸热、内能增加和对外做功的完整热力学过程。

诸如周期  $t_c$ 、初始压力  $p_0$ 、相对燃空比等运行参数对中介尺度移动边界微小封闭空间氢氧预混燃烧具有复杂影响。因此,通过几何结构、热力参数和运行条件的系统综合有助于实现中介尺度稳定氢氧燃烧,应当成为设计优化超高能量密度中介尺度准气体动力循环活塞式内燃机的重要途径。

### 参考文献:

- [1] JACOBSON S A, EPSTEIN A H. An informal survey of Power MEMS[C]//The International Symposium on Micro-mechanical Engineering, December 1-3, 2003, Chicago, IL, USA. Chicago, IL: [s. n.], 2003: 513-519.
- [2] EPSTEIN A H. Millimeter-scale, micro-electromechanical systems gas turbine engines[J]. Transactions of the ASME. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2004, 126(2): 205-226.
- [3] FERNANDEZ-PELLO A C, PISANO A P, FU K. MEMS rotary engine power system[J]. Transactions of the Institute of Electrical Engineers of Japan, 2003, 123(9): 326-330.
- [4] 吉識晴夫. ? ガスタービンの超小型化に関する調査研究委員会? 発足にあたって[J]. 日本ガスタービン学会誌, 2001, 29(4): 228.
- [5] ZHANG L, CHEN W J, DENG D Q. Research on principle of quasi gas power cycle for Power MEMS[C] // Proceedings of the international conference on mechanical transmissions, Sept. 26-30, 2006, Beijing, China. Beijing, China: Science Press, 2006: 1120-1126.
- [6] SPADACCINI C M, MEHRA A, LEE J, et al. High power density silicon combustion systems for micro gas turbine engines[J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2003, 125(3): 709-719.
- [7] HUA J S, WU M, KUMAR K. Numerical simulation of the combustion of hydrogen-air mixture in micro-scaled chambers, Part I: Fundamental study [J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60 ( 13 ): 3497-3506.
- [8] VICAN J, GAJDECZKO B F, DRYER F L, et al. Development of a micro reactor as a thermal source for micro electromechanical systems power generation[C] // Proceedings of the Combustion Institute, March 25-26, 2002, San Diego, CA. San Diego, CA: [s. n.], 2002: 909-916.
- [9] 张力, 陈卫军. 微型发动机: 中国, ZL2006100540043 [P]. 2006-08-09.
- [10] TIEN J H, STALKER R J. Release of chemical energy by combustion in a supersonic mixing layer of hydrogen and air[J]. Combustion and Flame, 2002, 130(3): 329-348.
- [11] HUA J S, WU M, KUMAR K. Numerical simulation of the combustion of hydrogen-air mixture in micro-scaled chambers. Part II: CFD analysis for a micro-combustor[J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60(13): 3507-3515.
- [12] 王婧. Power MEMS 氢气微燃烧过程的数值模拟[D]. 重庆:重庆大学, 2007.
- [13] 陈卫军. Power MEMS 准气体动力循环发动机的原理研究[D]. 重庆:重庆大学, 2008.
- [14] SUZUKI Y, OKADA Y, OGAWA J, et al. Experimental study on mechanical power generation from MEMS internal combustion engine[J]. Sensors and Actuators, A: Physical, 2008, 141(2): 654-661.

(编辑 张小强)