

文章编号: 1000-582X(2012)06-058-05

## 二异丁烯均质压燃着火与燃烧特性分析

郑朝蕾, 张庆峰, 何祖威, 王 迎

(重庆大学 低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400044)

**摘 要:** 运用数值方法对均质压燃条件下二异丁烯(Diisobutylene, DIB)的着火与燃烧特性进行了研究。数值计算结果与相应实验结果吻合较好,说明数值计算合理可靠。分析了初始压力、当量比、燃料组分对二异丁烯着火特性的影响,以及二异丁烯在 HCCI 发动机条件下的燃烧特征。结果表明,随着初始压力、当量比的增加,二异丁烯着火延迟期缩短;燃烧达到的最高温度随着当量比增加而提高,但不受初始压力变化的影响。在均质压燃条件下,二异丁烯同分异构体 DIB-1 着火先于 DIB-2,二异丁烯混合物燃料着火延迟时间依赖于二异丁烯同分异构体组分的比例关系。二异丁烯是单阶段着火燃料,DIB-2 最大放热率低于 DIB-1,但仍能提供良好的动力性能。

**关键词:** 内燃机;均质压燃;二异丁烯;同分异构体;着火延迟

**中图分类号:** TK464

**文献标志码:** A

## Analysis of the characteristic on HCCI autoignition and combustion process of diisobutylene

ZHENG Zhao-lei, ZHANG Qing-feng, HE Zu-wei, WANG Ying

(Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems,  
Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400044, R. P. China)

**Abstract:** The homogeneous charge compression ignition (HCCI) characteristics of diisobutylene are studied numerically. Numerical results are in accord with the corresponding experimental data. The influence of some key parameters such as initial pressure, equivalence ratio and constituent on autoignition characteristics is discussed and combustion characteristics of diisobutylene in HCCI engine are analyzed. The results indicate that the ignition delay decreases with the increase of pressure and equivalence ratio. The maximum temperature increases with the rise of equivalence ratio, but it does not change with the variation of initial pressure. The 1-pentene isomer ignites significantly faster than the 2-pentene isomer and the ignition delay for the blend directly depends on the proportions of each isomer. It can be found that diisobutylene shows the single-stage autoignition. The maximum heat production rate of the 2-pentene is lower than that of 1-pentene, but the 2-pentene still provides good power performance.

**Key words:** IC engine; homogenous charge compression ignition; diisobutylene; isomer; ignition delay

均质压燃燃烧(HCCI)结合了传统汽油机和柴油机的优点,可以获得较高的燃油经济性及热效率,

同时产生非常低的氮氧化物和颗粒物排放,因此得到了发动机相关领域的广泛关注。HCCI 燃烧是通

收稿日期: 2012-01-22

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51006128)

作者简介: 郑朝蕾(1980-),女,重庆大学副教授,主要研究方向为内燃机燃烧理论,(E-mail)zhengzhaolei2002@yahoo.com.cn。

过压缩缸内均匀燃油和空气的混合气在发动机上止点附近实现自燃。

数值模拟是研究燃烧的重要工具发动机,一般通过计算模型耦合化学动力学机理来研究 HCCI 燃烧,燃料主要集中在甲烷、二甲醚、正庚烷、异辛烷等。汽油作为最重要的内燃机燃料,已经应用到了 HCCI 发动机中,但汽油是由数百种烷烃、环烷烃、烯烃和芳香烃等组成的混合物,故对汽油燃烧模拟非常困难。鉴于此,用具有代表性的替代混合物模型燃料来模拟汽油燃烧过程就成为了一种有效的办法。

为了将替代混合物应用于实际燃料中,需要深入研究每一种替代组分的燃烧特性。汽油中主要组分大致的体积分数比例见文献[1]的汽油重要组分的体积分数示意图,烯烃(Olefins)为汽油重要的组成部分,二异丁烯(DIB)是汽油中烯烃替代最重要的组分,然而对于二异丁烯的燃烧特性的研究鲜有报道。二异丁烯不是单纯的物质,而是异辛烷 2 个共轭烯烃 DIB-1 和 DIB-2 的混合物<sup>[2]</sup>。

Metcalf 等人<sup>[2]</sup>进行了二异丁烯燃料的激波管实验研究,激波管着火延迟结果表明,在较高温度(1 200~1 550 K)条件下,DIB-2 着火快于 DIB-1。Kaiser 等人<sup>[3]</sup>在火花点火式发动机上检测了二异丁烯与汽油混合物的排放情况,结果发现二异丁烯与异辛烷的排放情况是相似的,相比之下,二异丁烯的排放中存在大量的异戊二烯(C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>)。Risberg 等<sup>[4]</sup>利用二异丁烯替代烯烃成分在 HCCI 发动机中研究了诸多燃料混合物的着火特性。Mittal 等人<sup>[5]</sup>在速压机上对实际燃料的替代混合物(异辛烷、甲苯、DIB-1)进行了实验研究。结果表明,相比异辛烷,DIB-1 在较高温度下具有较短的着火延迟时间,然而在温度低于 820 K 条件下,DIB-1 需要的着火延迟时间要长些。目前二异丁烯燃烧研究仅处于初级阶段,国内未见二异丁烯着火燃烧特性方面的研究。

文中应用详细化学反应动力学模型,对二异丁烯均质压燃燃烧过程进行了详细的计算,分析了若干初始条件对二异丁烯着火特性的影响,以及二异丁烯在 HCCI 发动机工况下的燃烧特性。

## 1 计算模型

### 1.1 模型假设

采用美国 Sandia 国家实验室开发的 CHEMKIN 程序<sup>[6]</sup>,其中利用到内燃机燃烧模块,非常适合 HCCI 燃烧的计算模拟。运用该模块结合详细化学反应动力学机理模拟二异丁烯 HCCI 燃

烧过程,计算中对控制方程采取了如下假设:燃烧室内的温度、压力及各组分的浓度分布均匀;整个燃烧室为绝热系统,且室内质量保持不变;所有气体组分均为理想气体,忽略气体的动能和势能。

### 1.2 化学动力学机理

数值计算采用的二异丁烯化学动力学机理来自 Metcalfe 等人<sup>[2]</sup>的研究成果,包含 897 种组分,3 783 个反应。由于二异丁烯的分子结构与异辛烷相似,该详细机理是在 Curran 等人<sup>[7]</sup>异辛烷机理的基础上发展而来,鉴于异丁烯对 DIB-1 燃烧反应的重要作用,更多的 C<sub>4</sub> 的反应被考虑其中。该机理经检验,能较好地与实验结果相吻合。

### 1.3 控制方程

控制方程为

$$\frac{dY_k}{dt} = \nu \dot{\omega}_k W_k, \quad (1)$$

式中: $\frac{dY_k}{dt}$ 为第  $k$  种物质质量分数的变化速率; $\nu$ 为系统容积; $\dot{\omega}_k$ 为基元反应中第  $k$  种物质的摩尔生成速率; $W_k$ 为第  $k$  种物质的摩尔质量。

能量控制方程为

$$c_v \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^k e_k \frac{dY_k}{dt} + p \frac{dv}{dt} = 0, \quad (2)$$

其中, $c_v = \sum_{k=1}^k Y_k c_{v,k}$ 。以上 2 方程,结合状态方程,便可计算出压力、温度以及各物质的反应速率。

## 2 机理验证

Mittal 等人<sup>[5]</sup>在速压机上进行了 DIB-1 的着火延迟的实验。着火延迟期定义为从压缩冲程结束至燃烧压力变化率最大所需用的时间。当量比为 0.75,混合物中燃料摩尔分数保持在 0.008 4,压力为 4.5 MPa。由于计算假定在绝热条件下进行,不考虑压缩过程中的热损失,相比实验值,计算着火延迟会有略微地提前。由图 1 计算与实验结果的比较可以看出,在较高压力下 DIB-1 着火延迟计算结果与实验基本一致。

为了进一步对机理进行验证,考虑到激波管中 DIB 着火延迟的实验研究<sup>[2]</sup>,着火延迟期定义为从激波反射开始到 CH \* 浓度变化率最大所需用的时间。当量比为 0.5,压力为 0.4 MPa。由图 2 不难看出,在较低压力下 DIB-1 着火延迟的计算与实验同样表现出较好的一致性。同时机理对于 DIB-2 预测计算也是令人满意的。上述验证可知,无论是速压机还是激波管,该机理在较为宽泛的相关发动机条件下均表现出很好的预测性能。由此说明,该机理

可以应用于 HCCI 燃烧进行发动机缸内燃烧的预测。值得关注的是,燃料二异丁烯在 HCCI 发动机缸内燃烧情况尚未见报道。

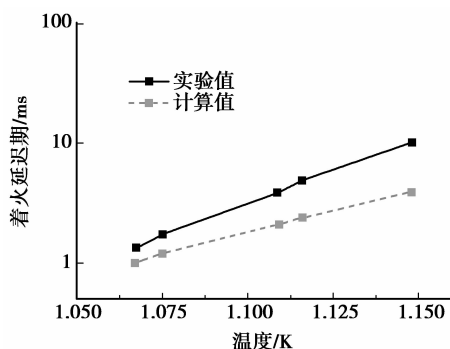


图 1 速压机 DIB-1 着火延迟的计算与实验<sup>[5]</sup>的比较

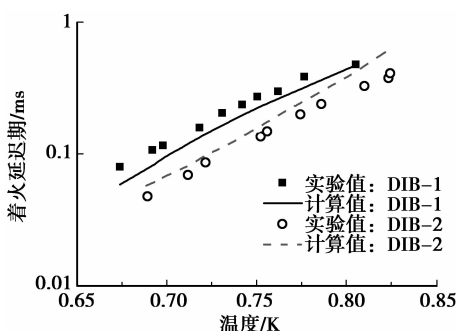


图 2 激波管 DIB 着火延迟的计算与实验<sup>[2]</sup>的比较

### 3 结果分析

#### 3.1 二异丁烯着火特性分析

着火延迟是燃料燃烧研究中最重要参数,选用 HCCI 燃烧情况下的相关条件。针对燃料 DIB-1,考察初始压力变化对于着火延迟期的影响,见图 3 所示。选用条件为初始温度 1 000 K,当量比为 0.5,初始压力分别为 0.2、0.4、0.6 MPa。由图 3 可知,随着初始压力的增加 DIB-1 着火延迟期缩短,然而燃烧能够达到的最高温度不受初始压力变化的影响。当量比变化对着火延迟期的影响见图 4。选用条件为初始温度 1 000 K,压力 0.4 MPa,当量比分别为 0.5、0.75 和 1.0。Metcalf<sup>[2]</sup>等激波管实验中指出,温度在 1 200 K 以上,当量比 1.0 时,DIB 燃料着火延迟期要比当量比为 0.5 时要长。但在 HCCI 发动机相关温度条件(800~1 100 K)下,当量比增大时,DIB-1 的着火延迟期缩短。同时,由于更多燃料加入到燃烧中去,燃烧所能达到的最高温度提高。在高温范围内,着火重要的链分支反应是氢原子与氧气的反应  $H+O_2=O+OH$ ,燃料消耗的反

应并不能起到主要作用。所以更多燃料参与其中,导致着火延迟期增加。然而在较低温度(如 1 000 K)下,燃料的消耗反应与  $H_2O_2$  的分解反应  $H_2O_2+M=OH+OH+M$  是主要的链分支反应。在这种情况下,燃料分子直接参与到链分支反应中。因此,富燃条件下,着火提前。

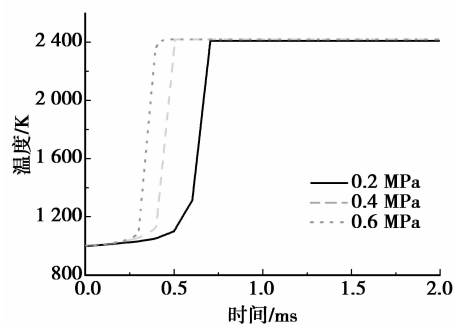


图 3 不同初始压力对 DIB-1 燃烧温度的影响

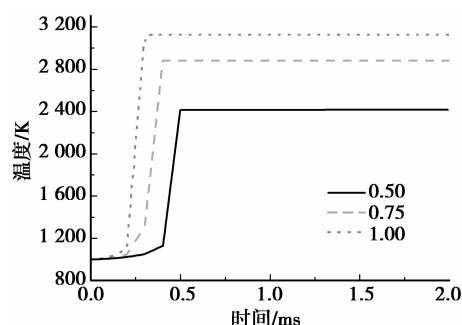


图 4 不同当量比对 DIB-1 燃烧温度的影响

图 5 为压力 0.4 MPa 条件下,当量比为 0.5 时不同组分燃料着火燃烧温度的变化情况。由图 2 可知,高温( $T>1 200$  K)条件下 DIB-2 着火延迟所需的时间要比 DIB-1 短,在相对较低温度下,DIB-1 先于 DIB-2 着火,见图 5。由图 4、图 5 不难看出,随初始温度的提高,DIB 着火延迟期缩短。

图 6 为初始温度 1 000 K、压力为 0.4 MPa 条件下,当量比为 0.5 时不同组分燃料着火燃烧温度的变化情况。该图也证实了在初始温度为 1 000 K 时,DIB-1 着火要先于 DIB-2。2 种含有不同比例同分异构的二异丁烯混合物燃烧温度变化见图 6。相比之下,混合物中 DIB-1 占有较大比例燃料着火较早。由此说明,相同条件下 DIB 混合物燃料着火延迟时间直接依赖于二异丁烯同分异构体组分的比例关系。同图 3,不同 DIB 混合物燃料在同一条件下,燃烧达到的最高温度是相同的。

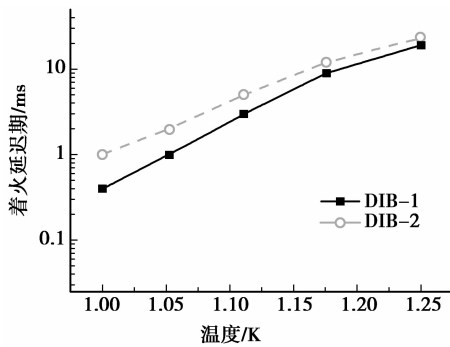


图 5 不同温度 DIB 燃料着火延迟的变化

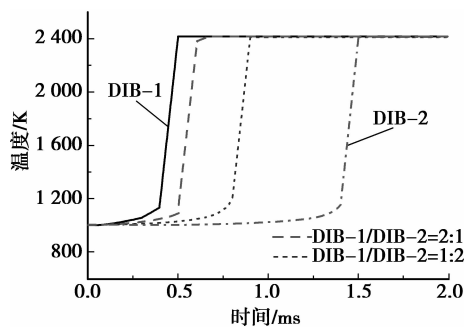


图 6 不同 DIB 燃料燃烧温度变化

### 3.2 二异丁烯 HCCI 燃烧特性分析

数值模拟对象为 1 台单缸水冷式直喷发动机, 主要技术参数如表 1 所示。计算由进气门关闭到排气门打开,同时假定进气门关闭后缸内混合气完全均匀。

文中以当量比为 0.25 为例分析二异丁烯 HCCI 燃烧特性。图 7~9 是初始压力 0.15 MPa 条件下缸内温度、压力与放热率随曲轴转角的变化情况。在 HCCI 发动机条件下,再次印证了 DIB-1 要早于 DIB-2 着火,同时 DIB 混合燃料着火时刻介于中间。与激波管实验结论相同,最高温度、压力不随燃料的变化而改变。由放热率曲线图可以看出,3 种燃料燃烧均为单阶段着火,燃烧过程中放热率的峰值是不同的,分别在曲轴转角上止点前 8.5、7.1、4.3° CA。

气缸内完成一个工作循环,燃气工质对活塞所做的有用功称为指示功。对于同一发动机工况下,它是评定燃气循环质量的重要指标,见图 10。3 种燃料的指示功的差异是很细微的,活塞在上止点前,指示功基本是相同的。上止点后,DIB-1 所做负功大于 DIB-2,然而正功量小于 DIB-2。由此可知,尽管 DIB-2 燃烧放热率较低,但能够提供与 DIB-1 同样的能量供给,对活塞所做有用功要略多用 DIB-1,

能够提供很好的动力性能。

表 1 发动机主要技术参数

参数名	参数值
缸径	112 mm
行程	132 mm
排量	1 300 cm <sup>3</sup>
压缩比	17.5
转速	1 400 r/min
进气门开启时刻	13.5° BTDC
进气门关闭时刻	38.5° ABDC
排气门开启时刻	56.5° BBDC
排气门关闭时刻	11.5° ATDC

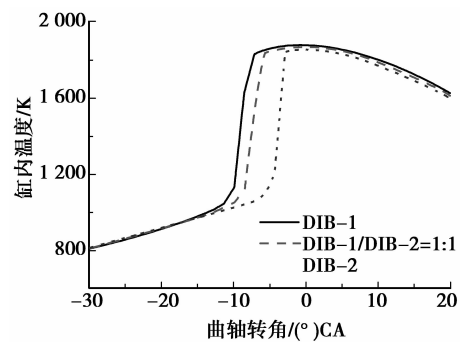


图 7 缸内温度曲线

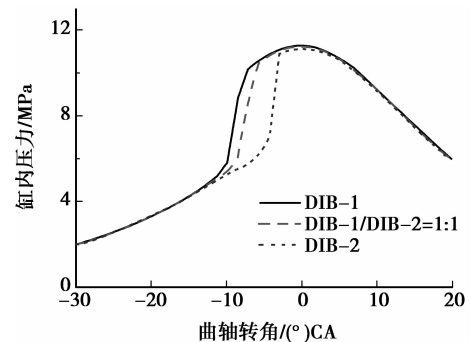


图 8 缸内压力曲线

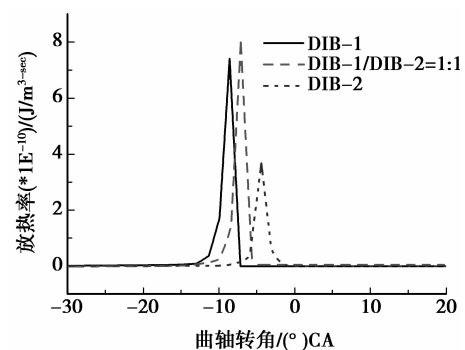


图 9 放热率曲线

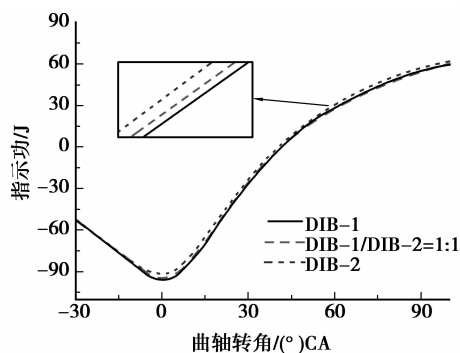


图 10 指示功曲线

## 4 结 论

着重进行了二异丁烯在均质压燃条件下,燃烧特性及其化学动力学的研究,可得出如下结论。

1)随着初始压力、当量比的增加,二异丁烯着火提前;燃烧达到的最高温度随着当量比增加而提高,但不受初始压力变化的影响。

2)二异丁烯为单阶段着火燃料,DIB-1 燃料消耗率高于 DIB-2。DIB-1 先于 DIB-2 着火,DIB 混合物燃料着火延迟时间直接依赖于二异丁烯同分异构体组分比例关系。

3)相比 DIB-1,DIB-2 燃烧放热率较低,但仍然能够提供很好的动力性能。

### 参考文献:

[1] PITZ W J, CERNANSKY N P, DEYER F L, et al. Development of an experimental database and chemical

kinetic models for surrogate gasoline fuels [C] // Proceedings of the SAE World Congress & Exhibition, April 16-19, 2007, Detroit, MI, USA. [S. l.]: SAE International Technical Papers, 2007: 2007-01-0175.

[2] METCALFE W K, PITZ W J, CURRAN H J, et al. The development of a detailed chemical kinetic mechanism for diisobutylene and comparison to shock tube ignition times [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31(1): 377-384.

[3] KAISER E W, SIEGL W O, COTTON D F, et al. Effect of fuel structure on emissions from a spark-ignited engine. 3. olefinic fuels [J]. Environmental Science and Technology, 1993, 27(7): 1440-1447.

[4] RISBERG P, KALGHATGI G, ANGSTROM H. Auto-ignition quality of gasoline-like fuels in HCCI engines[C] // Proceedings of the SAE Powertrain & Fluid Systems Conference & Exhibition, Oct. 27-30, 2003, Pittsburgh, PA, USA. [S. l.]: SAE International Technical Papers, 2003: 2003-01-3215.

[5] MITTAL G, SUNG C J. Homogenous charge compression ignition of binary fuel blends [J]. Combustion and Flame, 2008, 155(3): 431-439.

[6] KEE R J, RUPLEY F M, MILLER J A, et al. CHEMKIN 4. 1 [CP/DK]. San Diego, CA, USA: Reaction Design, 2006.

[7] CURRAN H J, GAFFURI P, PITZ W J, et al. A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation [J]. Combustion and Flame, 2002, 129(3): 253-280.

(编辑 陈移峰)