

doi: 10.11835/j.issn.1000-582X.2024.210

引用格式:姚宁一, 钟绍华. 氨氢混合均质压燃内燃机燃烧特性研究[J]. 重庆大学学报, 2025, 48(11): 41-53.



# 氨氢混合均质压燃内燃机燃烧特性研究

姚宁一, 钟绍华

(武汉理工大学 汽车工程学院, 武汉 430070)

**摘要:** 基于 CHEMKIN 软件, 建立均质压燃 (homogeneous charge compression ignition, HCCI) 内燃机仿真模型, 分析了掺氢比  $\alpha$ 、进气温度、当量比  $\varphi$  等各个参数对内燃机燃烧性能的影响, 主要是对内燃机缸内温度、压力、放热率和 NO 排放的影响。结果表明, 缸内温度、压力和放热率随着  $\alpha$  和进气温度的增大而增大, 着火时刻提前;  $\varphi$  达到 1 附近时, 缸内温度、压力和放热率峰值达到最大, 随着  $\varphi$  的降低, 着火时刻提前; 缸内 NO 的生成量受  $\alpha$  的影响较小, 缸内 NO 摩尔分数峰值随着  $\alpha$  的增加而升高; 随着缸内燃烧的结束, NO 的排放量都大幅度降低;  $\alpha$  从 0 增加到 0.2, NO 的主要基元反应种类不变, 总反应速率提高, 且缸内的 NO 主要来自 HNO, NH 则主要起到消耗 NO 的作用。为未来氨氢 HCCI 内燃机燃烧及排放性能的改善提供了理论参考。

**关键词:** HCCI 内燃机; 氨氢混合; 仿真模型; 燃烧性能

中图分类号: TK464

文献标志码: A

文章编号: 1000-582X(2025)11-041-13

## Combustion characterization of an ammonia-hydrogen hybrid homogeneous charge compression ignition internal combustion engine

YAO Ningyi, ZHONG Shaohua

(School of Automotive Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, P. R. China)

**Abstract:** A simulation model of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) internal combustion engine was developed using the CHEMKIN software to investigate the effects of key parameters, including hydrogen doping ratio ( $\alpha$ ), inlet temperature, and equivalence ratio ( $\varphi$ ), on combustion performance. The study focused on in-cylinder temperature and pressure, heat release rate and NO emissions. Results reveal that increases in  $\alpha$  and inlet temperature lead to higher in-cylinder temperature, pressure, and heat release rate, as well as earlier ignition timing. When  $\varphi$  approaches 1, peak values of in-cylinder temperature, pressure, and heat release rate are maximized, while the ignition timing advances as  $\varphi$  decreases. In-cylinder NO formation is only slightly affected by  $\alpha$ ; however, the peak mole fraction of NO rises with increasing  $\alpha$ . As the in-cylinder combustion concludes, NO emissions decrease significantly. Increasing  $\alpha$  from 0 to 0.2 considerably reduces NO emission. Although the main NO formation pathways remains unchanged, the total reaction rate increases. NO in the cylinder primarily originates from HNO, while NH primarily consumes NO. These findings provide feasibility evidence for

收稿日期: 2023-11-13 网络出版日期: 2024-04-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(21805217)。

Supported by the National Natural Science Foundation of China (21805217).

作者简介: 姚宁一(1999—), 男, 硕士研究生, 主要从事汽车节能与净化研究, (E-mail)1050169426@qq.com。

通信作者: 钟绍华, 男, 教授, 硕士生导师, (E-mail) szhong@whut.edu.cn。

improving combustion efficiency and emission performance in future ammonia-hydrogen HCCI engines.

**Keywords:** HCCI internal combustion engine; ammonia-hydrogen mixture; simulation modeling; combustion performance

近年来,随着国家人口的不断增多和经济的快速发展,对能源的需求量在逐渐增长。国家正推动能源向清洁能源的转型,但是目前化石能源仍占有主要地位。化石能源燃烧会排放出大量的二氧化碳等污染物,造成环境的大量污染。在此背景下,氢气和氨气开始进入人类的视野。氢气具有高效、无碳、质量能量密度高等特点,燃烧性能良好,可以实现清洁燃烧。利用氢气的特性是碳达峰和碳中和高效的途径之一,大力发展氢能源势在必行。除了氢之外,氨气的发展也备受关注,氨气完全燃烧生成氮气和水,自身便于储存和运输,具有高辛烷值、高热值等优点。目前无碳燃料的典型代表有氢和氨,将氢和氨作为动力燃料应用于新能源汽车可能是未来的一个重要方向<sup>[1-3]</sup>。

许多学者对于氨燃烧和氨氢混合燃烧作了广泛研究。Lee 等<sup>[4]</sup>提出将氨作为压燃发动机燃料,把氨气和空气的混合物注入发动机实现自动点火,发现引起氨喷雾燃烧需要足够高的温度和压力条件。Wang 等<sup>[5]</sup>利用一维层流平面火焰模拟,对氨氢及空气混合物的燃烧特性进行了研究,发现氨氢混合物的理想工作条件为当量比 1.00~1.05, 氢摩尔分数为 40%~60%, 且具有较高的抗爆能力,更适合于高压缩比条件下燃烧。Lhuillier 等<sup>[6-7]</sup>对预混氨/氢/空气混合燃料的单缸点燃式发动机的燃烧特性与排放特性进行了分析。研究表明,在低加氢和中等加氢条件下,分别在略微富燃和略微稀燃的条件下,可获得发动机的最高指示压力和效率。

均质压燃(homogeneous charge compression ignition, HCCI)内燃机的燃烧方式已成为研究热点并逐渐成熟。HCCI内燃机是通过压缩均匀分布在气缸内的可燃气体使其温度达到自燃温度进而引起燃料燃烧的一种内燃机,与传统内燃机相比,HCCI内燃机可以很大程度上提高燃料的利用率、降低燃烧生产的污染物的排放。Maurya 等<sup>[8]</sup>采取随机反应器模型(stochastic reactor model, SRM)对 15 种氢气燃烧机制进行模拟,评估 HCCI 内燃机的燃烧参数,结果表明 Oconaire-2004 机制能够准确地预测氢气 HCCI 燃烧的特性。Kale 等<sup>[9]</sup>通过实验研究发现在汽油中掺混二异丙醚和添加剂能够扩大 HCCI 内燃机的运行范围,同时能够降低氮氧化物和碳烟的排放量。Feroskhan 等<sup>[10]</sup>分析了不同工况,以及掺混甲烷条件下沼气燃料 HCCI 发动机的燃烧及排放性能,结果表明沼气流量对发动机的输出参数影响较大,且掺入的甲烷含量与燃烧指标有很大的相关性。

迄今为止,对于氨氢混合 HCCI 内燃机的研究较少。Pochet 等<sup>[11-12]</sup>在 HCCI 内燃机对氨氢混合进行实验研究,结果表明氨在内燃机中燃烧需要非常高的进气温度,加入氢气可以很好地提高发动机功率和降低进气温度的要求,同时提高 EGR 率可以有效地降低 NO 的排放。阿俊利<sup>[13]</sup>对氨 HCCI 内燃机的各项性能进行了仿真研究,确定了常压情况下氨可以被压燃的进气温度和所需掺氢比。

目前,对氨氢在 HCCI 内燃机的燃烧性能与排放性能的研究仍不充分,本文通过建立 HCCI 内燃机仿真模型与反应机理耦合,分析不同运转参数下,内燃机各性能的变化,为氨氢内燃机燃烧性能和污染物的排放提供理论依据。

## 1 模型建立与验证

### 1.1 反应机理

从 20 世纪开始,诸多学者就对氨燃烧的路径展开了研究,并且开发了很多氨的反应机理。1977 年,Fisher<sup>[14]</sup>对富燃条件下  $\text{NH}_3/\text{O}_2/\text{N}_2$  火焰中  $\text{NH}_3$ 、 $\text{NH}_2$ 、 $\text{NH}$ 、 $\text{OH}$  和气体温度的测定,确定了  $\text{NH}_3$  和  $\text{OH}/\text{H}$  反应生成  $\text{NH}_2$  和  $\text{NH}$  这一路径。1986 年,Bian 等<sup>[15]</sup>通过分子束采样技术和质谱仪对  $\text{NH}_3/\text{O}_2$  混合物的燃烧进行了研究,发现  $\text{NH}$  与  $\text{O}_2$  是 NO 生成的主要步骤。2000 年,Konnov 等<sup>[16]</sup>研究得出一种碳氢化合物的反应机理,去除掉反应机理中和碳有关的组分和基元反应后,得到由 31 种组分和 241 种反应组成的动力学模型,该模型可以很好

地预测氨的燃烧过程和火焰结构。2012年,Duynslaegher等<sup>[17]</sup>在Konnov模型的基础上,对NH、N<sub>2</sub>O的模拟进行了改进,随后对改进的机理进行了简化,使其能够更好地针对SI发动机模拟,模型包括19种组分和80种反应,其可以更好地理解氮氧化物的生成路径。2015年, Nozari等<sup>[18]</sup>研究了NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>/空气混合物在高压和稀薄条件下的燃烧特性,并且采用层流预混自由传播火焰模型计算燃烧属性,随后考虑压力、燃料混合物和当量比等条件,开发了基于Konnov的简化机理,该机理与Konnov机理相比,预测精度几乎相同,且计算时间减少了大约4/5。本次研究采用Nozari等开发的基于Konnov的简化机理。

氢气的反应机理较为简单,采用Ó Conaire等<sup>[19]</sup>于2004年研究出的氢氧化机理,该机理涉及温度范围298~2 700 K,压力范围为0.005~8.82 MPa,当量比为0.2~6.0。

将以上2种机理进行耦合得到一个具有23个组分和100个基元反应的氨氢混合反应机理,将其导入CHEMKIN中与建立的内燃机模型相耦合。

## 1.2 模型建立

研究将YANMAR L100V风冷单缸发动机作为研究对象,发动机参数如表1所示。在CHEMKIN中,有一个用于HCCI内燃机模拟的预定义模型,该模型称为HCCI内燃机模拟器。将内燃机参数、反应机理和该模型耦合,建立内燃机仿真模型<sup>[20]</sup>。

表1 内燃机主要参数

Table 1 Main parameters of internal combustion engine

名称	参数	名称	参数
排量/L	0.436	压缩比	23:1
缸径/mm	86	进气门关闭时刻/(°)	-127
冲程/mm	75	排气门开启时刻/(°)	127
连杆长/mm	145		

内燃机的几何模型建立基于Heywood建立的方程<sup>[21]</sup>,将内燃机中各个参数的变化看作时间的函数,其方程如下:

$$\frac{V(t)}{V_e} = 1 + \frac{C-1}{2} \left[ R + 1 - \cos \theta - \sqrt{R^2 - \sin^2 \theta} \right]. \quad (1)$$

对上述方程进行微分得

$$\frac{d(V/V_e)}{dt} = \Omega \left( \frac{C-1}{2} \right) \sin \theta \left[ \frac{1 + \cos \theta}{\sqrt{R^2 - \sin^2 \theta}} \right], \quad (2)$$

式中:C为压缩比;V(t)为t时刻的气缸容积;V<sub>e</sub>为气缸余隙容积;θ为曲轴转角;Ω为角速度,R为连杆比,Ω =  $\frac{d\theta}{dt}$ ,R =  $\frac{L_e}{L_A}$ ,L<sub>e</sub>表示连杆长,L<sub>A</sub>表示曲柄半径。

除此之外,还需要定义内燃机传热模型,研究选用Woschni<sup>[22]</sup>半经验传热模型,该模型可以更加准确地预测用于计算雷诺系数的特征速度。该模型提出

$$Nu = 0.035 Re^{0.8}, \quad (3)$$

式中:Nu为无量纲准则的努塞尓数;Re为雷诺数,计算雷诺数的特征速度取为影响传热过程的平均气体速度,对不同阶段有不同取值。特征速度v, m/s,可表示为

$$v = C_1 v_m + C_2 \frac{V_s T_1}{p_1 V_1} (p - p_0), \quad (4)$$

式中:p为缸内气体压力;p<sub>0</sub>为发动机反拖时的压力,MPa;V<sub>s</sub>为气缸的工作容积,m<sup>3</sup>;v<sub>m</sub>为活塞的平均速度,m/s;带下标1的变量则表示进气阀关闭至燃烧始点前工质在任一时刻的状态。本次计算只考虑压缩、燃烧

和膨胀过程,取  $C_1=2.28, C_2=3.24\times 10^{-3}$ 。

研究中的掺氢比  $\alpha$  为

$$\alpha = \frac{X_{\text{H}_2}}{X_{\text{H}_2} + X_{\text{NH}_3}}, \quad (5)$$

式中:  $X_{\text{H}_2}, X_{\text{NH}_3}$  分别为  $\text{H}_2$  和  $\text{NH}_3$  的摩尔分数。

当量比  $\varphi$  定义为

$$\varphi = \frac{(F/A)}{(F/A)_{\text{stoic}}} \quad (6)$$

式中:  $F, A$  分别代表燃料和空气的质量;  $(F/A)$  表示实际的燃空比;  $(F/A)_{\text{stoic}}$  表示化学当量下的燃空比。

### 1.3 机理验证

对于氨氢混合的机理验证,主要从层流燃烧速度以各组分浓度等方面来验证机理的可预测性。参照文献<sup>[23]</sup>中的实验数据对该机理进行层流火焰燃烧速度的验证。所验证的工况主要是  $\varphi$  为 0.6~1.3, 进气压力为 0.1、0.3 MPa,  $\alpha$  为 0.6。实验与模拟结果对比如图 1 和图 2 所示。可以看出该机理对层流火焰速度的预测与实验值较为符合,且变化趋势与实验结果较为对应。

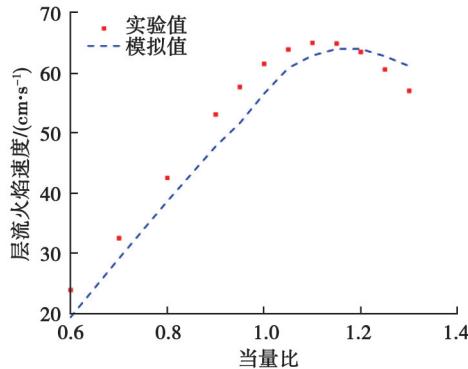


图 1 0.1 MPa 下  $\alpha=0.6$  的层流火焰速度曲线

Fig. 1 Laminar flame velocity curve with  $\alpha=0.6$  at 0.1 MPa

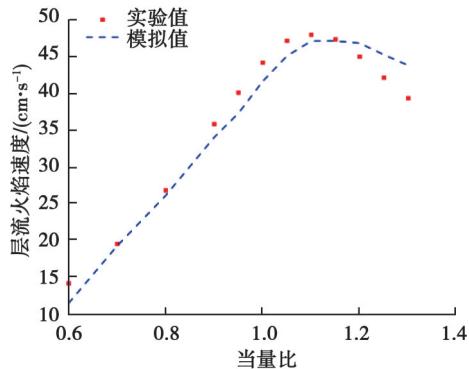


图 2 0.3 MPa 下  $\alpha=0.6$  的层流火焰速度曲线

Fig. 2 Laminar flame velocity curve with  $\alpha=0.6$  at 0.3 MPa

组分浓度的验证则使用文献[24]中的实验数据。实验工况设定  $\varphi$  为 0.25、1, 初始温度 900~1 250 K,  $\alpha$  为 0.3, 主要对  $\text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}$  的浓度进行比较, 结果如图 3~6 所示。可以得出, 模拟值对实验结果的预测比较准确, 在温度为 1 120 K 时, 与实验值略有差距, 但是总体变化趋势与实验值吻合较好。

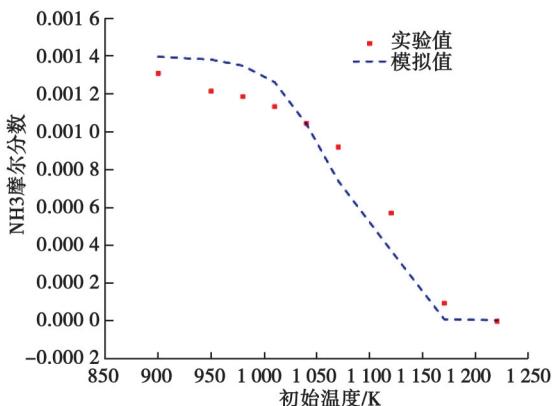


图 3  $\varphi=0.25, \alpha=0.3$  的  $\text{NH}_3$  摩尔分数变化曲线

Fig. 3 Variation curve of  $\text{NH}_3$  mole fraction

for  $\varphi=0.25 \alpha=0.3$

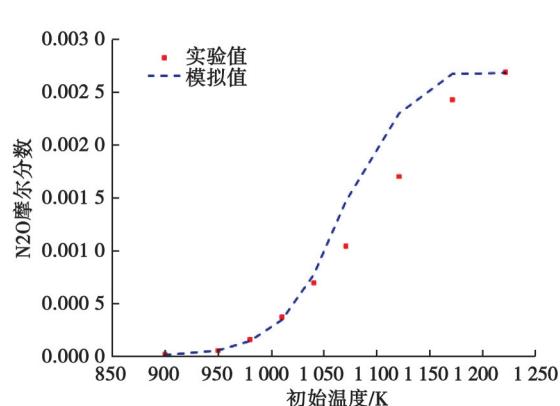
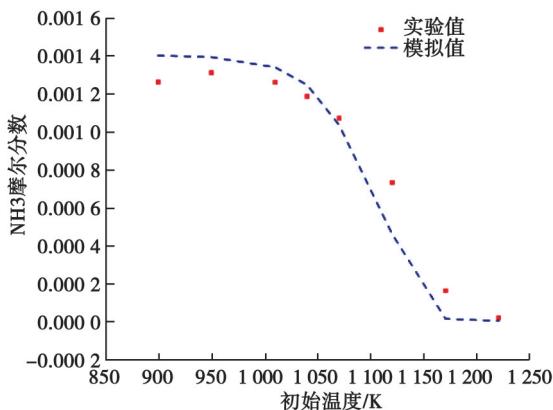
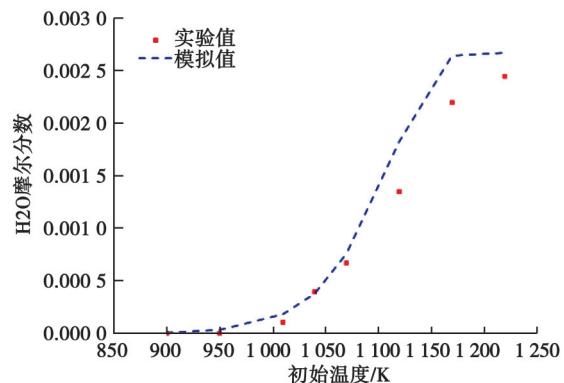


图 4  $\varphi=0.25, \alpha=0.3$  的  $\text{H}_2\text{O}$  摩尔分数变化曲线

Fig. 4 Variation curve of molar fraction

of  $\text{H}_2\text{O}$  for  $\varphi=0.25 \alpha=0.3$

图 5  $\varphi=1, \alpha=0.3$  的  $\text{NH}_3$  摩尔分数变化曲线Fig. 5 Variation curve of  $\text{NH}_3$  mole fraction for  $\varphi=1 \alpha=0.3$ 图 6  $\varphi=1, \alpha=0.3$  的  $\text{H}_2\text{O}$  摩尔分数变化曲线Fig. 6 Variation curve of molar fraction of  $\text{H}_2\text{O}$  for  $\varphi=1 \alpha=0.3$ 

#### 1.4 内燃机模型验证

为了验证所建立的内燃机仿真模型, 设定工况为  $\varphi=0.22$ , 内燃机转速 1 500 r/min, 初始压力 0.1 MPa, 进气温度 448 K,  $\alpha$  分别为 0.63、0.43、0.30、0.23。对其进行数值模拟, 缸内压力随曲轴转角变化的模拟值和实验结果<sup>[12]</sup>的对比如图 7 所示。

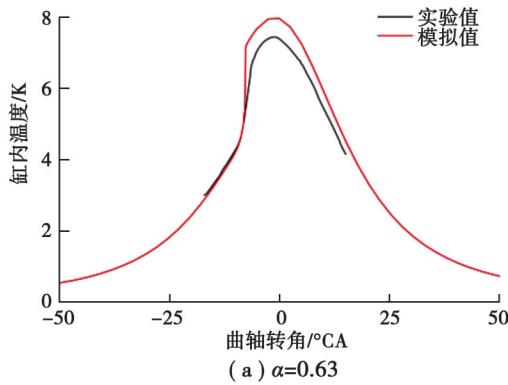
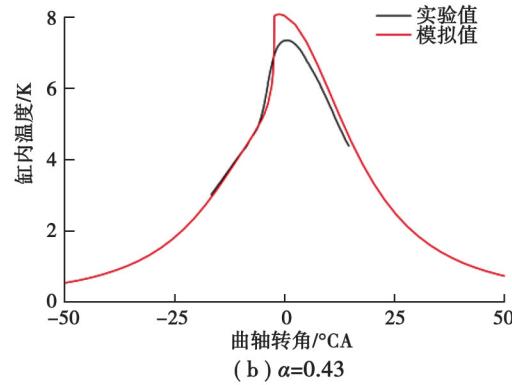
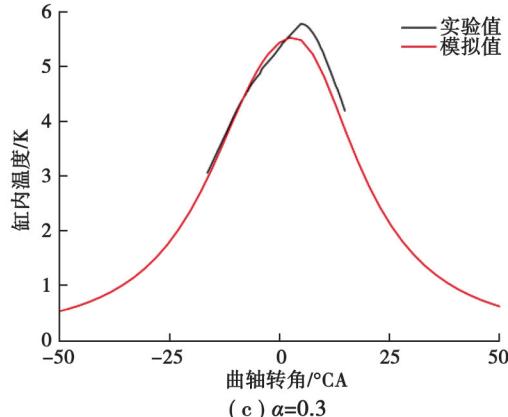
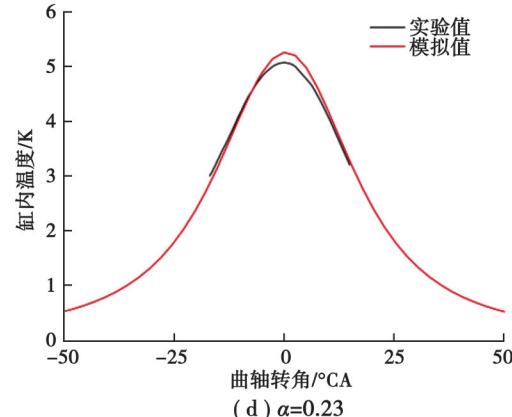
(a)  $\alpha=0.63$ (b)  $\alpha=0.43$ (c)  $\alpha=0.3$ (d)  $\alpha=0.23$ 

图 7 缸内压力的模拟值与实验值随曲轴转角的变化曲线

Fig. 7 Variation curve of simulated and experimental values of the pressure in the cylinder with crankshaft angle

从图 7 中可以看出, 模拟值得到的缸内压力曲线与实验值的趋势大致相同, 模拟得到的缸内压力峰值与实验值略有差距, 分析原因是在数值模拟中考虑的热损失相比于实验较小, 且仿真模型中工质被认为是分布均匀的, 而在实际的内燃机中会出现局部温度和压力过高的情况。从整体看, 该模型对 HCCI 内燃机预测较为准确。

## 2 模拟结果分析

### 2.1 掺氢比对燃烧性能的影响

研究掺入氢气后内燃机的燃烧性能,设定温度为450 K,  $\varphi=1$ ,在内燃机转速1 500 r/min、进气压力为0.1 MPa的情况下,分别设置 $\alpha$ 为0、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5,缸内温度和缸内压力随着曲轴转角的变化如图8和图9所示。可以看到,在设定的条件下, $\alpha$ 低于0.3时,缸内温度和压力没有发生急剧变化,表明此时内燃机内部未发生大规模燃烧,随着 $\alpha$ 到达0.3,缸内温度和压力都出现急剧上升,温度和压力峰值达到3 067 K和13.29 MPa,说明此时氨氢混合燃料发生燃烧,该燃烧分为2个过程,首先是温度达到氢气的燃点,缸内的氢气开始燃烧,缸内的温度迅速上升,达到氨气的燃点,此时氨气发生燃烧,缸内温度继续急剧上升。 $\alpha$ 从0.3增加到0.5,缸内温度峰值略微增大,缸内压力峰值呈非单调变化。除此之外, $\alpha$ 增高到0.5,着火时刻也发生了提前,其原因是氢气含量增多,第一阶段的燃烧提前,导致整体燃烧的发生时刻提前。

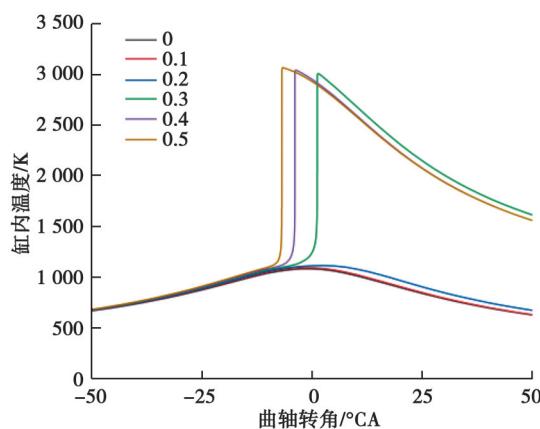


图8 不同 $\alpha$ 下缸内温度变化曲线

Fig. 8 Variation curve of temperature in cylinder under different  $\alpha$

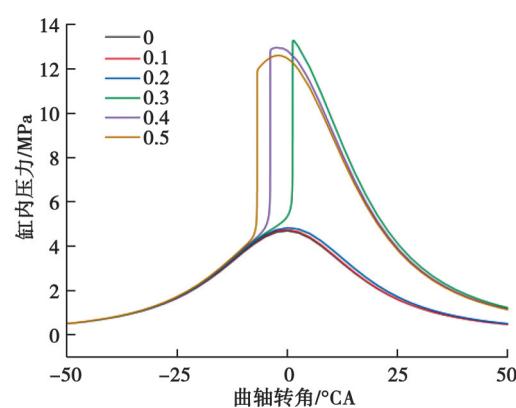
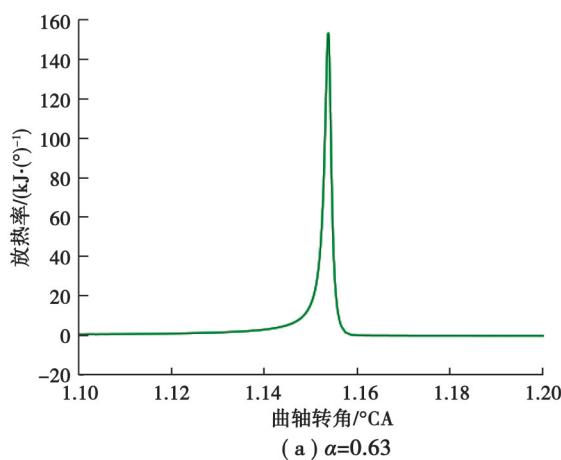


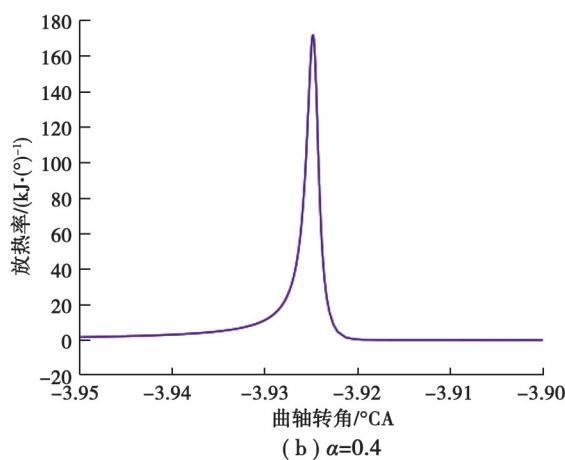
图9 不同 $\alpha$ 下缸内压力变化曲线

Fig. 9 Variation curve of cylinder pressure under different  $\alpha$

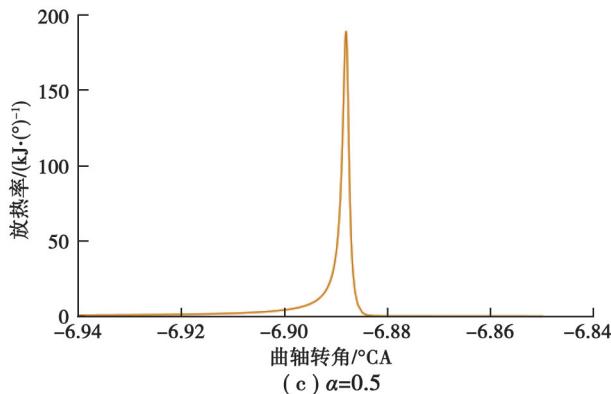
放热率指混合气在单位时间或单位曲轴转角的燃烧放热量。图10是在上述内燃机参数条件下, $\alpha$ 为0.3、0.4、0.5时内燃机的热释放率。可以看出,随着 $\alpha$ 的增大,放热率峰值也在逐步增大,且放热率的变化速度较快,这是由于氨氢混合气体具有很高的热值,在缸内迅速燃烧,放出大量热量,随之缸内温度和压力迅速升高。在 $\alpha$ 为0.5时,放热率峰值达到最高,为189 kJ/(°)。



(a)  $\alpha=0.63$



(b)  $\alpha=0.4$

图 10 不同  $\alpha$  下的放热率曲线Fig. 10 Heat release rates under different  $\alpha$ 

## 2.2 进气温度对燃烧性能的影响

图 11 和图 12 表示在  $\alpha=0.2$  的混合燃料,  $\varphi=1$ , 内燃机转速为 1 500 r/min, 进气压力为 0.1 MPa 的条件下, 不同进气温度下的内燃机缸内温度和缸内压力随曲轴转角变化曲线。在进气温度为 460 K 时, 缸内温度及压力都出现了略微增长, 增大幅度不大, 说明缸内的燃料并未发生完全燃烧。进气温度达到 470 K 及以上时, 缸内发生完全燃烧。缸内温度峰值在进气温度为 490 K 时达到最大, 缸内压力峰值则在进气温度 480 K 时达到最大。进气温度由 470 K 增大到 490 K, 缸内温度峰值增大了 37.9 K, 缸内压力峰值增大了 0.2 MPa。较高的进气温度可以更容易更快地达到缸内混合燃料的燃点, 使缸内着火时刻提前, 燃烧更充分。

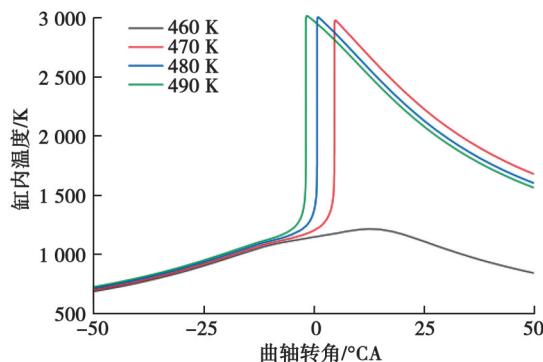


图 11 不同进气温度下缸内温度变化曲线

Fig. 11 Variation curve of temperature in cylinder under different intake temperature

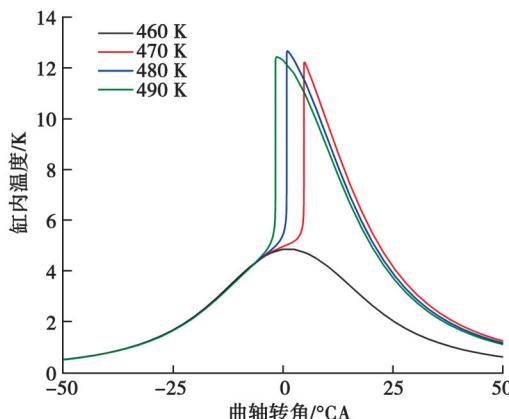


图 12 不同进气温度下缸内压力变化曲线

Fig. 12 Variation curve of cylinder pressure under different intake air temperatures

图 13 为内燃机不同进气温度下的放热率变化。可以看出,进气温度从 470 K 升高到 490 K,缸内放热率逐渐增大,且放热率峰值也随之增大,由 129.16 kJ/(°) 增大到 142.96 kJ/(°),放热率峰值时刻也提前 6.47 CA。这是因为随着进气温度的增大,缸内燃烧发生时刻提前,并且燃烧程度更加激烈,从而造成放热率增大。

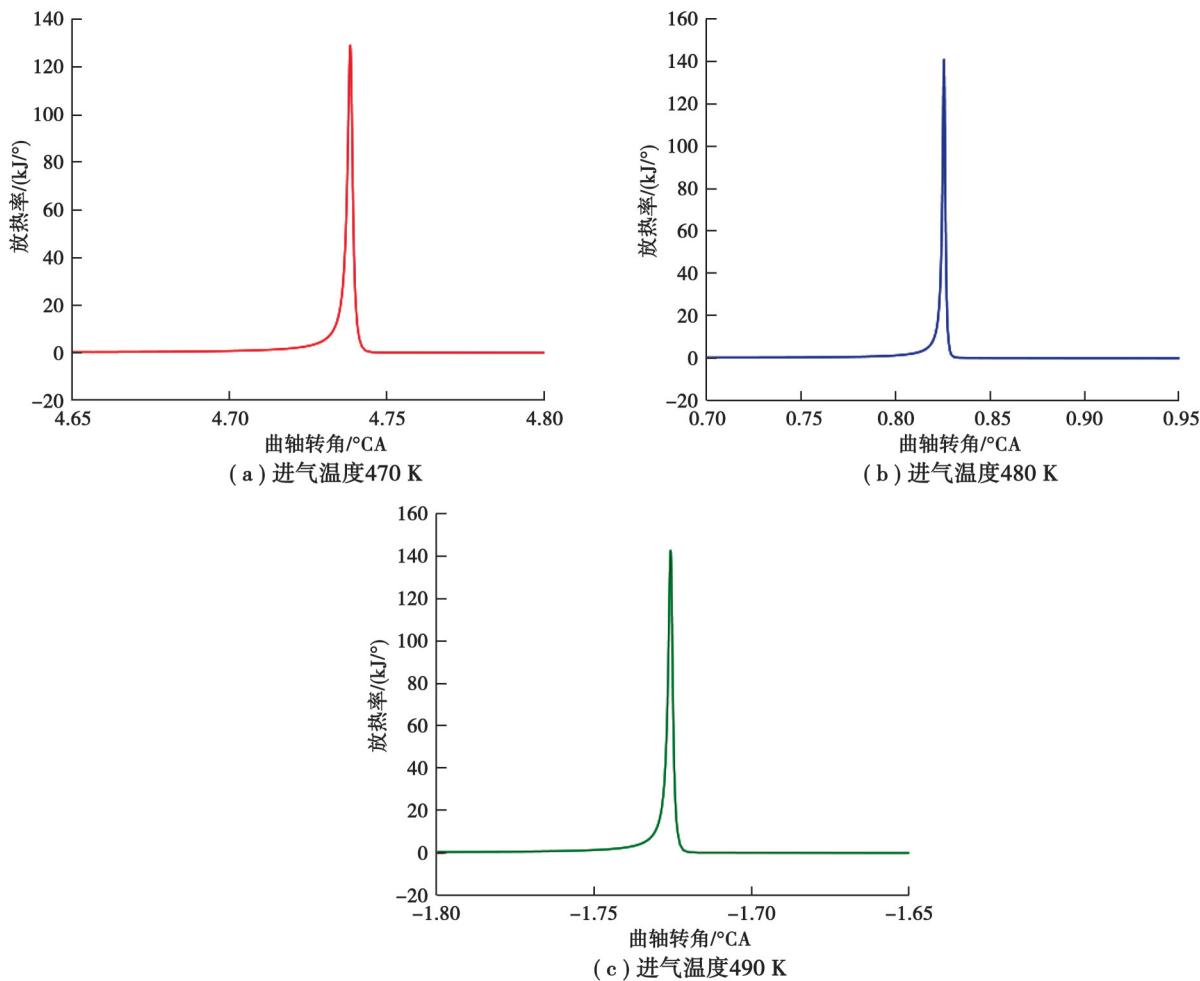


图 13 不同进气温度下的放热率曲线

Fig. 13 Heat release rates at different intake air temperatures

### 2.3 当量比对燃烧性能的影响

设置  $\varphi$  为 0.8、1.0、1.2、 $\alpha$  为 0.2, 进气温度为 470 K, 保持其他参数条件不变, 研究不同  $\varphi$  对内燃机燃烧性能的影响, 缸内温度及压力随着曲轴转角的变化曲线如图 14 和图 15 所示。随着  $\varphi$  的增大, 缸内压力和温度都产生了不同程度的变化, 在  $\varphi=1$  时, 缸内压力和温度峰值达到最高, 且随着  $\varphi$  的减小, 内燃机点火时刻提前,

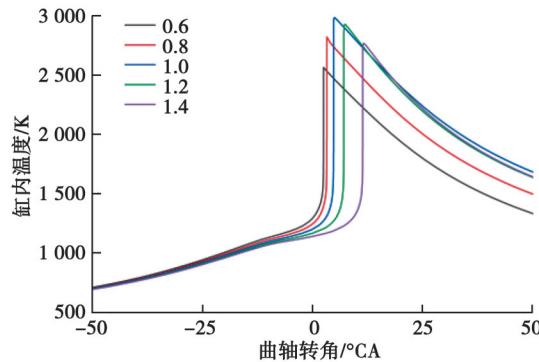


图 14 不同  $\varphi$  时缸内温度变化曲线

Fig. 14 Variation curve of temperature in cylinder under different  $\varphi$

原因是  $\varphi$  越大, 意味着缸内氨气浓度会更高, 从而导致火焰传播速度变慢, 点火时刻延迟,  $\varphi$  过大还会发生失火的现象。相反, 如果燃料中氨气浓度过低, 则会造成燃烧释放的能量减少, 缸内温度和压力峰值明显下降。

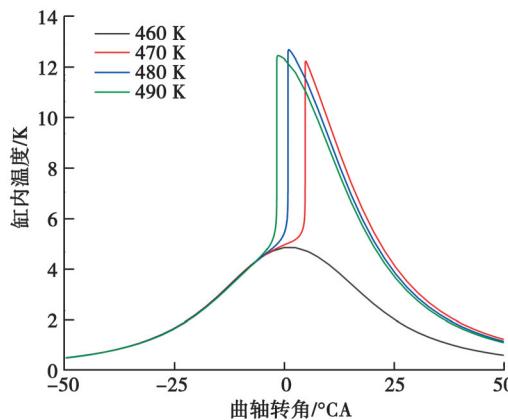


图 15 不同  $\varphi$  时缸内压力变化曲线

Fig. 15 Variation curve of cylinder pressure under different  $\varphi$

不同  $\varphi$  时的放热率变化如图 16 所示。图中的放热率峰值变化和上述的缸内温度及压力峰值变化一样, 随着  $\varphi$  的增加进行非单调变化, 放热率峰值在  $\varphi=1$  时达到最大, 为  $129.16 \text{ kJ/}^{\circ}$ 。分析原因是当  $\varphi < 1$  时, 混合燃料浓度降低, 热值降低, 燃烧释放的热量降低; 当  $\varphi > 1$  时, 混合燃料浓度增大, 导致混合气体的比热容增大, 绝热系数变小, 缸内温度峰值降低, 反应速率降低, 反应释放的热量减小。

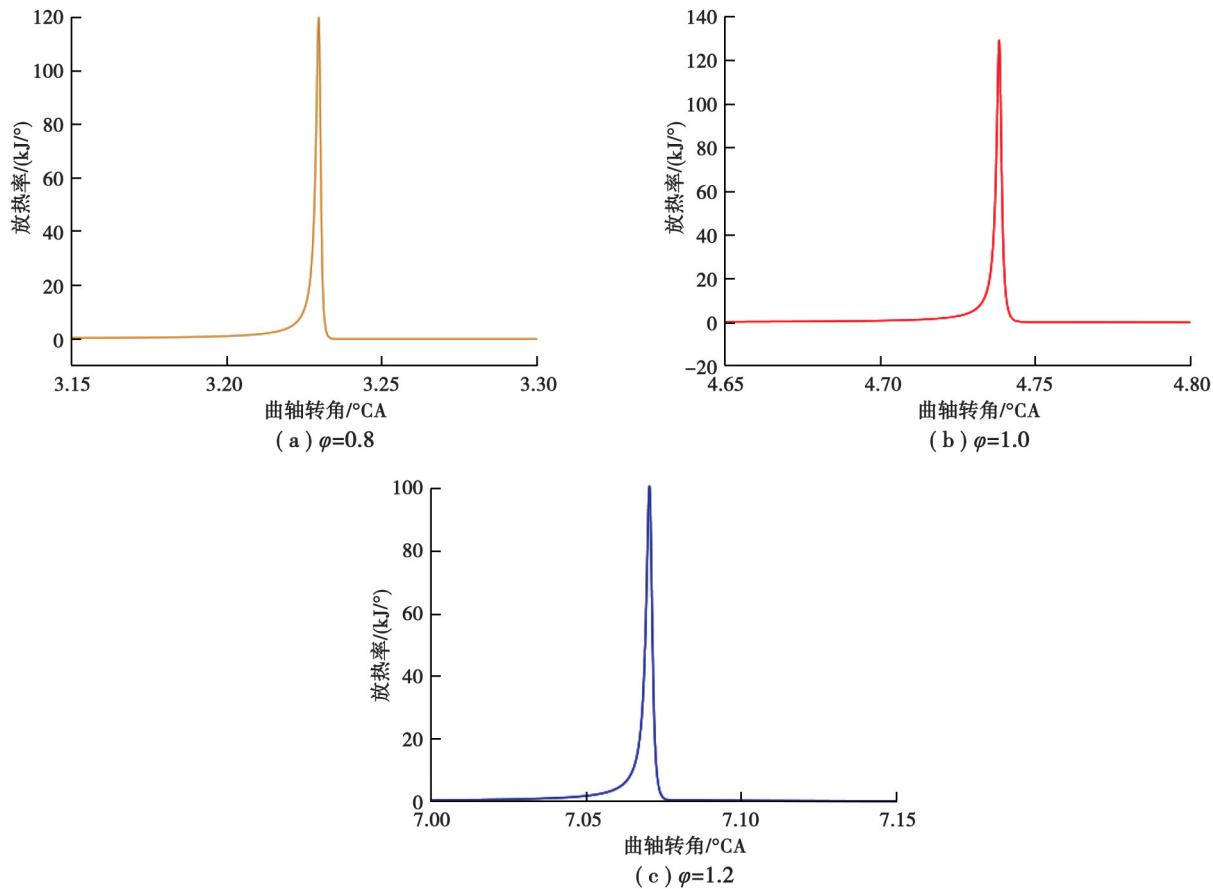


图 16 不同  $\varphi$  时的放热率曲线

Fig. 16 Heat release rates under different  $\varphi$

## 2.4 掺氢比对排放性能的影响

$\text{NH}_3$ 燃烧会生成氮氧化物,主要包括NO、 $\text{NO}_2$ ,其中排放生成的NO含量远大于 $\text{NO}_2$ 含量,所以本次主要分析氨气燃烧生成的NO,重点研究掺氢比 $\alpha$ 对NO生成的影响。NO主要有2种生成途径,一种主要是混合气体中的氮气在高温下被氧化生成的NO,称为热力型NO,另一种是混合气体中的氨气被氧化生成得到的,称为燃料型NO<sup>[25]</sup>。

接下来设定进气温度为450 K,  $\varphi=1$ , 内燃机转速为1 500 r/min, 进气压力为0.1 MPa, 继续设置 $\alpha$ 为0、0.1、0.2、0.3、0.4、0.5, NO摩尔分数随着曲轴转角的变化如图17所示。当 $\alpha$ 低于0.3时, 缸内未发生完全燃烧, NO的摩尔分数几乎为0。随着 $\alpha$ 的增大, 缸内燃烧产生的NO摩尔分数峰值增大, 最高可达到0.022, 此时混合燃料燃烧会消耗大部分NO, NO含量会急剧下降, 最后NO的生成量会随着温度的降低而降低。可以看出,  $\alpha$ 对最后NO的排放量影响相对较小, 缸内的NO含量主要是燃料型NO。另外分析可知, NO产量受缸内温度影响较大, 在内燃机的燃烧过程中可以通过控制高温持续时间来减少NO的含量。

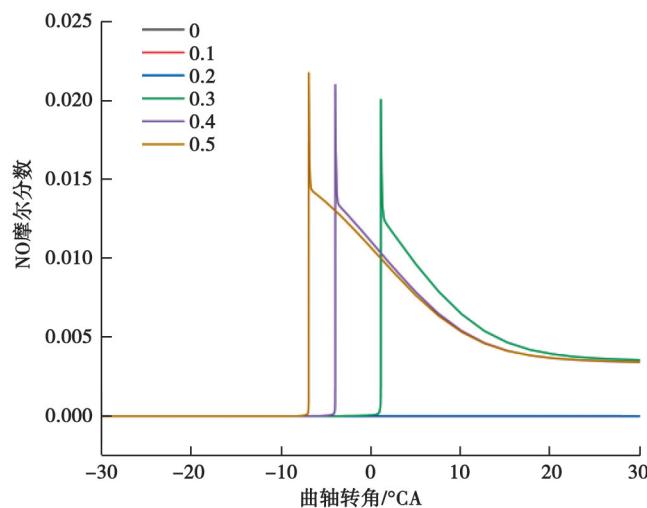


图17 不同 $\alpha$ 下NO摩尔分数随曲轴转角的变化曲线

Fig. 17 Variation curve of NO mole fraction with crank angle under different  $\alpha$

进一步分析氨氢内燃机燃烧生成的NO, 设定 $\alpha$ 为0、0.2, 进气温度为600 K, 保持其他初始参数不变, 通过数值模拟得出在不同 $\alpha$ 下NO参与主要基元反应的反应速率和总反应速率随曲轴转角变化的曲线, 如图18和图19所示。表3为NO参与的主要基元反应。从图中可以看出, 随着 $\alpha$ 从0增加到0.2, NO参与的主要基元反应种类并无明显变化, 但是各个基元反应的反应速率发生了变化。 $\alpha$ 增大, NO主要基元反应的反应速率峰值在增大, 且NO总反应速率也在增高。

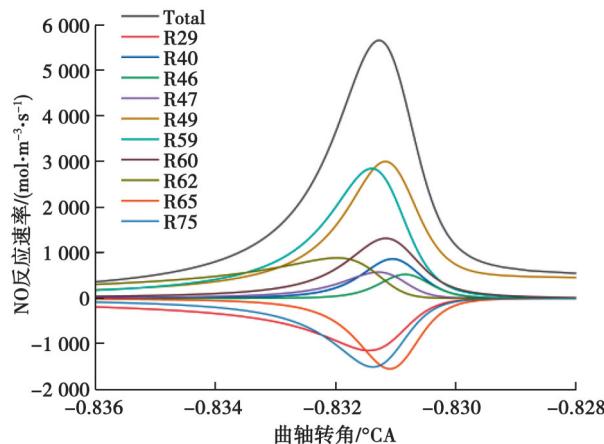


图18  $\alpha=0$ 时NO参与的主要基元反应及总反应速率曲线

Fig. 18 Main elementary reaction and total reaction rate curve of NO participation when  $\alpha=0$

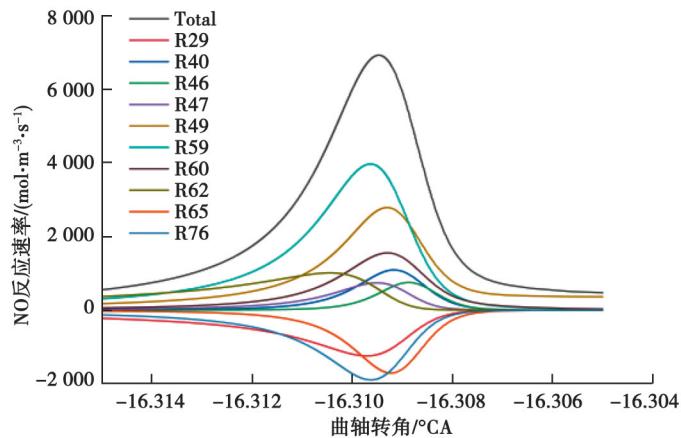
图 19  $\alpha=0.2$  时 NO 参与的主要基元反应及总反应速率曲线Fig. 19 Main elementary reactions and total reaction rate curves of NO participation when  $\alpha=0.2$ 

表 3 NO 参与的主要基元反应

Table 3 Main elementary reactions in which NO participated

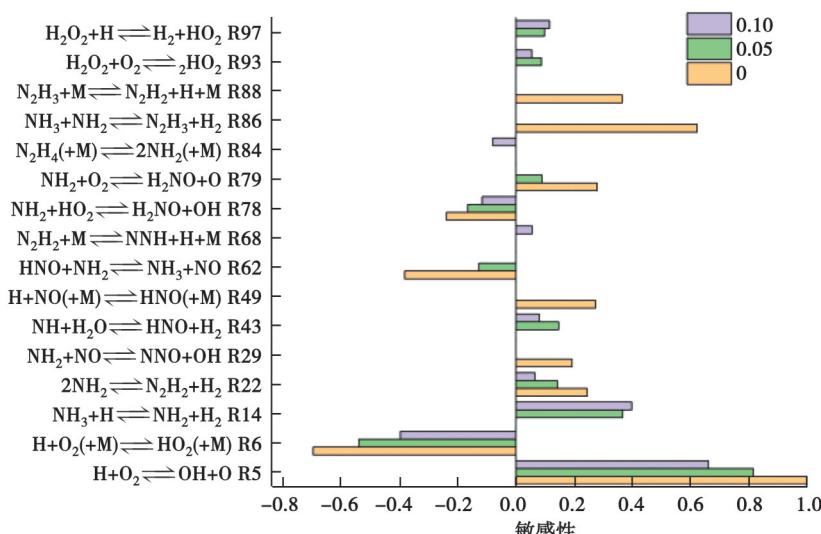
基元反应式	反应编号	基元反应式	反应编号
$\text{NH}_2+\text{NO} \rightleftharpoons \text{NNH}+\text{OH}$	R29	$\text{HNO}+\text{H} \rightleftharpoons \text{NO}+\text{H}_2$	R59
$\text{NH}+\text{OH} \rightleftharpoons \text{NO}+\text{H}_2$	R40	$\text{HNO}+\text{OH} \rightleftharpoons \text{NO}+\text{H}_2\text{O}$	R60
$\text{N}+\text{OH} \rightleftharpoons \text{NO}+\text{H}$	R46	$\text{HNO}+\text{NH}_2 \rightleftharpoons \text{NO}+\text{NH}_3$	R62
$\text{N}+\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO}+\text{O}$	R47	$\text{NNH}+\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}+\text{NO}$	R65
$\text{H}+\text{NO}(\text{+M}) \rightleftharpoons \text{HNO}(\text{+M})$	R49	$\text{N}_2\text{O}+\text{H} \rightleftharpoons \text{NH}+\text{NO}$	R76

在 NO 的基元反应中, R49、R59、R60 是造成 NO 生成的主要基元反应, R29、R65、R76 对 NO 在内燃机中的消耗有重要意义。可以看出, HNO 作为中间产物对 NO 的生成占有主要作用, HNO 产生的主要路径是  $\text{NH}_2+\text{O}_2$  生成  $\text{HNO}+\text{NH}$ 。由图 17 可知, 燃烧最终排放出的 NO 很少, 这是因为中间产物 NH 在燃烧过程中消耗了大部分 NO, 这也说明了 NO 含量出现急剧上升随后又急剧下降的现象。此外, NO 有关的主要基元反应中, R46、R47 为热力型 NO 的生成机理, R49、R59、R60 说明一部分 NO 主要来自于  $\text{NH}_3$  中的 N, 这也证实了燃烧产生的 NO 一部分来自于  $\text{N}_2$ , 另一部分来自于  $\text{NH}_3$ 。

## 2.5 NO 敏感性分析

保持上述条件不变, 研究  $\alpha$  分别为 0、0.05、0.1 下 NO 的敏感性分析。由于敏感性在反应过程中是一直变化的, 取各个基元反应过程中敏感性的极值, 此时敏感性最能反映出燃烧过程中的影响因素。敏感性分析结果如图 20 所示。

图中敏感性正值代表该反应对 NO 生成有着推进作用, 负值则代表反应对 NO 的产生有抑制作用。该图可以看出,  $\alpha=0$  时, 对 NO 的生成有促进作用的主要基元反应为 R5、R49、R79、R86、R88, 有抑制作用的主要基元反应为 R6、R62。加入氢

图 20 不同  $\alpha$  下的 NO 敏感性分析Fig. 20 Sensitivity analysis of NO at different  $\alpha$

气后, R5、R14则成为促进NO生成的主要基元反应,而R6依旧对NO的生成有很大的抑制作用。

对NO生成最重要的基元反应为R5,  $\text{H}+\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH}+\text{O}$ ,这是因为该反应中的OH在氨的脱氢反应中作为非常重要的角色,能加快大部分反应正向进行。该反应的敏感性随着 $\text{H}_2$ 的加入而降低。其次还有反应R14,  $\text{NH}_3+\text{H} \rightleftharpoons \text{NH}_2+\text{H}_2$ ,该反应在加入氢气后对NO生成变得重要,且敏感性随着 $\alpha$ 的增大而增强,因为反应产生的 $\text{NH}_2$ 是NO生成的重要中间产物。

### 3 结 论

通过使用Chemkin仿真软件,以化学动力学为基础,建立HCCI内燃机模型,将其与反应机理相耦合,并对机理及模型进行了相关验证,随后分析氨氢混合在内燃机中的燃烧与排放性能,主要结论如下:

1)内燃机的燃烧性能受进气温度、当量比 $\varphi$ 等参数影响,随着进气温度的增大,混合燃料着火时刻提前,且缸内的峰值温度、压力和放热率变大; $\varphi$ 减小,缸内着火时刻提前, $\varphi$ 在1附近时,缸内温度、压力及放热率峰值达到最高。

2)掺氢比 $\alpha$ 对内燃机的燃烧和排放性能都有影响, $\alpha$ 越大,缸内温度和压力的峰值就越大,且随着 $\alpha$ 的增大,混合燃料的着火时刻提前,放热率也随之增加,提高了内燃机的性能。 $\alpha$ 增大,缸内产生的NO的峰值摩尔分数变大,但随着温度的下降,最后内燃机排出的NO的量会大幅度减小,且差别不大。

3)随着 $\alpha$ 从0增大到0.2,NO主要基元反应种类不变,总反应速率提高。在NO的生成路径中,HNO占据着主要作用,燃烧过程的大部分NO由HNO生成,随后产生的NO主要由NH来反映消耗。

### 参 考 文 献

- [1] 高虎, 刘凡, 李海. 碳中和目标下氨燃料的机遇、挑战及应用前景[J]. 发电技术, 2022, 43(3): 462-467.  
Gao H, Liu F, Li H. Opportunities, challenges and application prospects of ammonia fuel under the target of carbon neutrality [J]. Power Generation Technology, 2022, 43(3): 462-467. (in Chinese)
- [2] 丁颖, 韩东, 黄震. 氨燃料汽车发动机燃烧技术研究进展[J]. 汽车工程学报, 2023, 13(4): 437-443.  
Ding Y, Han D, Huang Z. Research progress on combustion technology for ammonia-fueled automotive engines[J]. Chinese Journal of Automotive Engineering, 2023, 13(4): 437-443. (in Chinese)
- [3] 王鑫, 谈岭, 陈朝阳. 二甲醚/甲醇混合燃料HCCI燃烧特性数值模拟[J]. 重庆大学学报, 2024, 47(1): 1-8.  
Wang X, Tan L, Chen Z Y. Simulation study on HCCI combustion of DME/methanol fueled engine[J]. Journal of Chongqing University, 2024, 47(1): 1-8. (in Chinese)
- [4] Lee D, Song H H. Development of combustion strategy for the internal combustion engine fueled by ammonia and its operating characteristics[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2018, 32(4): 1905-1925.
- [5] Wang D, Ji C W, Wang S F, et al. Numerical study of the premixed ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(2): 2667-2683.
- [6] Lhuillier C, Brequigny P, Contino F, et al. Performance and emissions of an ammonia-fueled SI engine with hydrogen enrichment[C]//SAE Technical Paper Series. United States: SAE International, 2019.
- [7] Lhuillier C, Brequigny P, Contino F, et al. Experimental study on ammonia/hydrogen/air combustion in spark ignition engine conditions[J]. Fuel, 2020, 269: 117448.
- [8] Maurya R K, Akhil N. Comparative study of the simulation ability of various recent hydrogen combustion mechanisms in HCCI engines using stochastic reactor model[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(16): 11911-11925.
- [9] Kale A V, Krishnasamy A. Investigations on load range extension of a homogeneous charge compression ignited light-duty diesel engine operated with diisopropyl ether and gasoline blends[J]. Fuel, 2022, 314: 122856.
- [10] Feroskhan M, Thangavel V, Subramanian B, et al. Effects of operating parameters on the performance, emission and combustion indices of a biogas fuelled HCCI engine[J]. Fuel, 2021, 298: 120799.

- [11] Pochet M, Truedsson I, Foucher F, et al. Ammonia-hydrogen blends in homogeneous-charge compression-ignition engine[C]// SAE Technical Paper Series. United States: SAE International, 2017.
- [12] Pochet M, Jeanmart H, Contino F. A 22: 1 compression ratio ammonia-hydrogen HCCI engine: combustion, load, and emission performances[J]. Frontiers in Mechanical Engineering, 2020, 6: 43.
- [13] 阿俊利. 氨燃料燃烧过程数值模拟研究[D]. 郑州: 华北水利水电大学, 2018.
- A J L. Numerical simulation of ammonia fuel combustion process[D]. Zhengzhou: North China University of Water Resources and Electric Power, 2018. (in Chinese)
- [14] Fisher C J. A study of rich ammonia/oxygen/nitrogen flames[J]. Combustion and Flame, 1977, 30: 143-149.
- [15] Bian J, Vandooren J, Van Tiggelen P J. Experimental study of the structure of an ammonia-oxygen flame[J]. Symposium (International) on Combustion, 1988, 21(1): 953-963.
- [16] Konnov A A, De Ruyck J. Kinetic modeling of the thermal decomposition of ammonia[J]. Combustion Science and Technology, 2000, 152(1): 23-37.
- [17] Duynslaegher C, Contino F, Vandooren J, et al. Modeling of ammonia combustion at low pressure[J]. Combustion and Flame, 2012, 159(9): 2799-2805.
- [18] Nozari H, Karabeyoğlu A. Numerical study of combustion characteristics of ammonia as a renewable fuel and establishment of reduced reaction mechanisms[J]. Fuel, 2015, 159: 223-233.
- [19] Conaire MÓ, Curran H J, Simmie J M, et al. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2004, 36(11): 603-622.
- [20] Wang Y, Zhou X H, Liu L. Theoretical investigation of the combustion performance of ammonia/hydrogen mixtures on a marine diesel engine[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(27): 14805-14812.
- [21] 许多. 天然气 HCCI 发动机燃烧特性模拟研究[D]. 沈阳: 沈阳航空航天大学, 2022.
- Xu D. Simulation study on combustion characteristics of natural gas HCCI engine[D]. Shenyang: Shenyang Aerospace University, 2022. (in Chinese)
- [22] Woschni G. A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine [C]// SAE Technical Paper Series. United States: SAE International, 1967.
- [23] Wang S X, Wang Z H, Elbaz A M, et al. Experimental study and kinetic analysis of the laminar burning velocity of  $\text{NH}_3$ /syngas/air,  $\text{NH}_3/\text{CO}$ /air and  $\text{NH}_3/\text{H}_2$ /air premixed flames at elevated pressures[J]. Combustion and Flame, 2020, 221: 270-287.
- [24] Zhang X Y, Moosakutty S P, Rajan R P, et al. Combustion chemistry of ammonia/hydrogen mixtures: jet-stirred reactor measurements and comprehensive kinetic modeling[J]. Combustion and Flame, 2021, 234: 111653.
- [25] Liu L, Wu Y, Wang Y. Numerical investigation on the combustion and emission characteristics of ammonia in a low-speed two-stroke marine engine[J]. Fuel, 2022, 314: 122727.

(编辑 詹燕平)