

文章编号: 1000-582X(2012)02-060-05

柴油替代燃料着火过程的动力学特性

王 峰, 郑朝蕾, 何祖威, 张庆峰, 王 迎, 李 燕

(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: 在均质充量压燃着火 (HCCI) 条件下, 对构建的柴油替代燃料化学动力学模型, 应用 CHEMKIN 软件闭式均相反应器模块研究了柴油替代燃料中甲苯的存在以及在不同初始温度下甲苯的含量对柴油替代燃料着火延迟时间的影响, 结果表明: 柴油替代燃料的着火特性主要由正庚烷来控制, 而柴油替代燃料中甲苯缓慢的氧化对着火特性影响不大。在较低的初始温度下, 甲苯的含量对着火时间的影响是明显的。随着甲苯含量的增加, 更多的着火延迟过程会出现。

关键词: 均质充量压燃; 柴油替代燃料; 甲苯; 着火延迟

中图分类号: TK464

文献标志码: A

Kinetic characteristics of ignition process of diesel surrogate fuel

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

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

Abstract: The purpose of this paper is to identify the effects of toluene and the toluene content which is at different initial temperatures on the ignition delay time of diesel surrogate fuel under homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine condition. The CHEMKIN4.1 module (closed homogeneous batch reactor) is used with the constructed diesel surrogate fuel chemical kinetics model to simulate the constant volume. The results show that the ignition property is mainly characterized by n-heptane. The presence of the slowly oxidizing toluene in the surrogate fuel does not affect the auto-ignition time considerably. In addition, the influence of toluene content on the ignition delay time is significant only at low initial temperature. More ignition delayed combustion processes have been found when toluene content is increasing.

Key words: HCCI; diesel surrogate fuel; toluene; ignition delay

柴油机的不均质、异相燃烧, 特别是燃烧时燃料分子往往被高温火焰或燃烧产物包围这一特点, 决定了排气中主要的有害排放物为颗粒物 (PM) 和氮氧化物 (NO_x)。为了满足日益严格的排放法规, 柴油机需要一种有效的技术途径同时降低 PM 和 NO_x 排放。均质充量压燃燃烧 (HCCI) 结合了火花点火

和压缩着火 2 种模式的优点, 实现了低温稀薄燃烧, 部分负荷时燃烧效率高, PM 和 NO_x 排放量低。由于 HCCI 燃烧模式主要受燃料化学动力学控制, 其着火时刻和燃烧速率难以直接控制, 制约了 HCCI 规模化应用。因而, 探索可靠的控制 HCCI 着火时刻的策略是当前研究的热点问题。

收稿日期: 2011-08-13

基金项目: 国家科技支撑计划资助项目 (2009BAG13B01); 国家自然科学基金资助项目 (51006128)

作者简介: 王峰 (1982-), 男, 重庆大学博士研究生, 主要从事内燃机燃烧数值模拟方向研究。

郑朝蕾 (联系人), 女, 重庆大学副教授, (E-mail) zhengzhaolei2002@yahoo.com.cn.

在过去所做的研究中,只是提出了汽油和其它燃料替代物的反应机理,对于 HCCI 条件下柴油燃料的着火特性却很少提及^[1]。因此构建合适的化学动力学模型来研究柴油燃料在 HCCI 条件下的着火特性是非常必要的。

柴油是发动机应用中最为重要的燃料之一,由复杂的碳氢混合物构成,它的组分包括 37% 的链烷烃,34% 的环烷烃和 29% (质量分数) 的芳香烃。基于数值模拟的需要,人们选用具有代表性的柴油替代燃料组分来反映实际柴油燃料的某些特征^[2]。正庚烷由于十六烷值(CN=56)与柴油燃料相近,通常作为柴油燃料替代物^[3-4]。然而 CN 值并不能很好地反映出实际柴油燃料的着火特性^[5]。一些研究者^[6-7]建议选取链烷烃(通常是正庚烷)和芳香烃作为柴油燃料替代物的代表。

在 HCCI 条件下,正庚烷是典型的两阶段燃烧,它的氧化动力学已经在发动机条件下得到广泛的确认。柴油中芳香烃混合物主要是单芳香族化合物,碳原子个数在 9~14 之间^[8]。它们的分子结构可以认为是苯环加上一个或多个烷自由基。然而苯看起来过于简单,且没有分支结构。所以选择甲苯作为柴油中芳香烃的代表。而环烷烃由于缺乏低温反应机理,且为了避免化学动力学模型的复杂性,选择链烷烃的代表正庚烷和芳香烃的代表甲苯作为柴油燃料的替代物。利用选择的柴油燃料替代物来分析 HCCI 条件下实际柴油燃料的着火特性是文中的目标。

1 机理的构建

数值计算采用的正庚烷机理为 PETERS et al 的骨架机理^[9],该机理包括了高温和低温阶段的主要反应。甲苯机理来源于 ANDRAE 等人 2008 年的 TRF 模型^[10],另外还考虑了正庚烷和甲苯的交叉反应^[11],总反应机理共 129 种组分,608 个基元反应。

2 机理验证

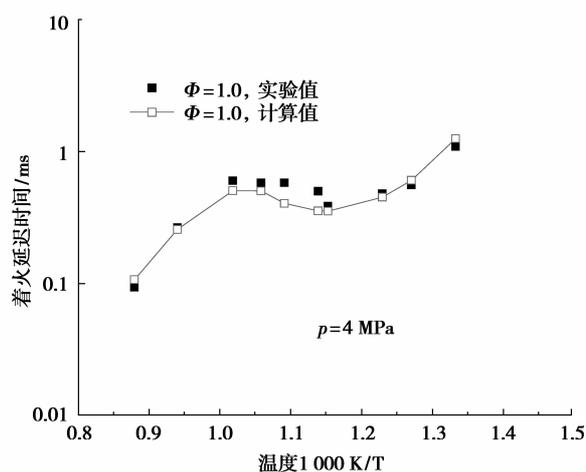
机理的验证主要基于几个与 HCCI 燃烧相关联的实验。对着火延迟的准确预测是检验一个化学动力学机理有效性的重要标志,该部分工作主要在激波管实验中展开。计算使用化学反应动力学程序 CHEMKIN 4.1 的闭式均相反应器模块(closed homogeneous batch reactor),为着重研究反应机理,计算中模型均采用零维,忽略流动等因素的影响,并且假定激波过后激波管内气体的反应在定容、

均质、绝热的环境下进行,计算中的着火延迟时间采用公认的温度变化量识别法,即混合物的温度为初始温度之上 400 K 时为着火点^[12-13]。

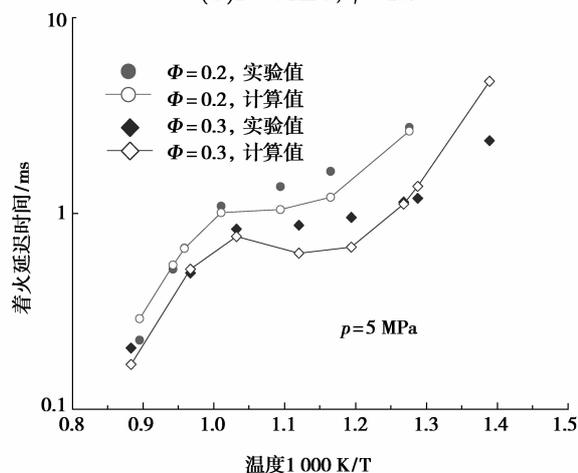
2.1 激波管条件下机理的验证

图 1(a)是模拟计算的正庚烷着火延迟时间和 FIEWEGER et al^[14]的激波管实验数据的比较。计算的初始压力为 4 MPa,当量比为 1.0。从图可以看出,模型对温度的变化非常敏感,能够很好的反映出负温度系数区(NTC)的变化。

图 1(b)是在贫燃预混以及当量比变化的条件下,模拟计算的正庚烷着火延迟时间和 HERZLER et al^[15]的激波管实验数据的比较。初始压力为 5 MPa,当量比分别为 0.2 和 0.3。从图可以看出随着当量比的降低,着火延迟时间增加。这是因为温度的降低导致表观活化能的降低。



(a) $P=4 \text{ MPa}$, $\phi=1.0$



(b) $P=5 \text{ MPa}$, $\phi=0.2, 0.3$

图 1 正庚烷着火延迟时间计算和实验比较

图 2 在不同当量比情况下,对甲苯的着火延迟时间进行了模拟计算,并与 DAVIDSON et al^[16]的

实验数据作对比。实验数据先要通过压力指数进行标准化。其中当量比为 0.5 时,压力指数为-0.5,当量比为 1 时,压力指数为-0.93。从图可以看出,模型能够很好的反映出不同当量比情况下着火延迟时间的不同,也很好的预测了着火延迟时间。

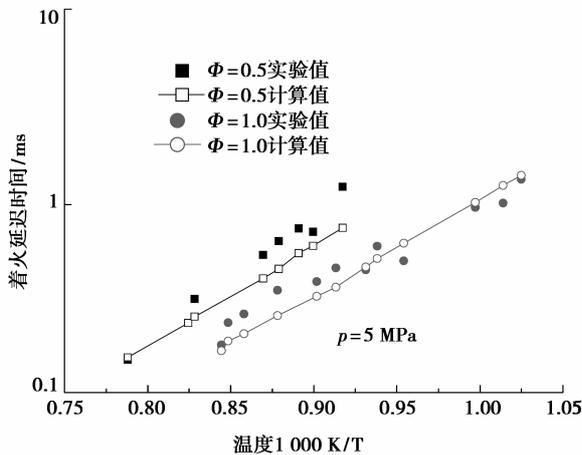
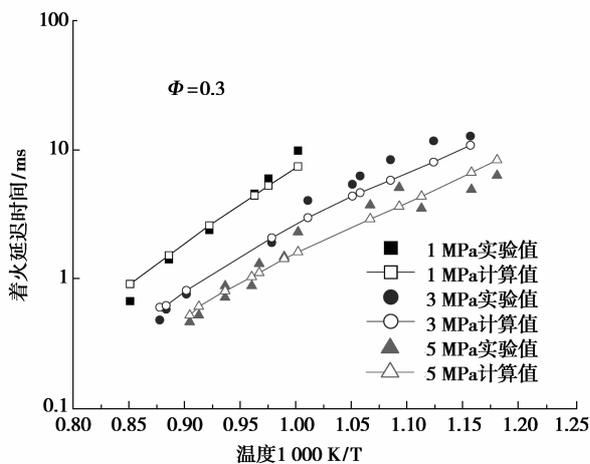
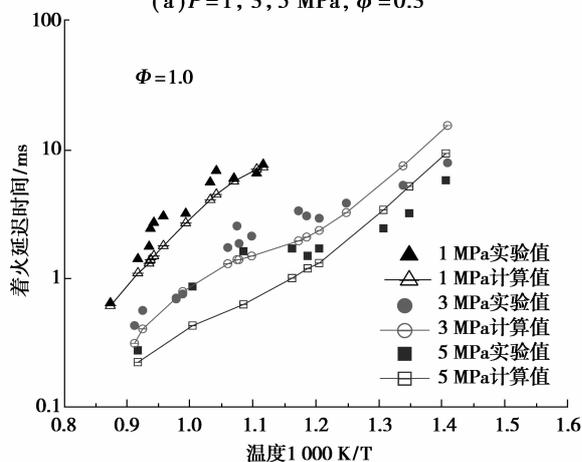


图 2 甲苯着火延迟时间计算和实验比较



(a) $P=1, 3, 5$ MPa, $\phi=0.3$



(b) $P=1, 3, 5$ MPa, $\phi=1.0$

图 3 柴油替代燃料着火延迟时间计算和实验比较

图 3 是对贫预混条件下($\phi=0.3$)和化学计量比条件下($\phi=1.0$),3 种不同压力的柴油替代燃料计算的着火延迟时间与 HERZLER et al^[17]的实验数据作比较。柴油替代燃料正庚烷和甲苯混合物的摩尔百分数分别为 28%和 72%。实验数据通过压力指数进行标准化。当量比为 0.3 和 1.0 时,压力指数分别为-0.883 和-1.06。从图可以看出,化学动力学模型能够很好的反映出随着温度和压力的变化,着火延迟时间的变化趋势。

2.2 HCCI 发动机条件下机理的验证

为了考察所构建的化学动力学模型对 HCCI 发动机的适应性,有必要对其进行验证。计算过程中考虑了完整的压缩和膨胀冲程,并以压缩冲程终点作为曲轴转角的零点。设定计算始点为进气门关闭点,计算终点是排气门开启点。为简化计算,假设内燃机的压缩和膨胀过程均完全绝热,不考虑进、排气门关闭时的气体泄漏,不考虑余隙容积中的残留混合气,使用零维单区模型。

基于以上的模型假设,文中采用了美国 SANDIA 国家实验室的 CHEMKIN4.1 软件中的 IC 模块来进行 HCCI 燃烧的计算,采用了 KTH 实验室的发动机主要结构参数,实验系统详见文献[5]。为和实验作比较,分别对 2 种工况的柴油替代燃料进行分析和比较(见表 1)。

工况 1 计算始点为上止点前 99° ,其所对应的初始温度 426 K,初始压力 0.28 MPa,当量比为 0.25。工况 2 计算始点为上止点前 99° ,其所对应的初始温度 447 K,初始压力 0.16 MPa,当量比为 0.285 7。柴油替代燃料正庚烷和甲苯混合物的摩尔百分数分别为 28%和 72%。

图 4 为柴油替代燃料 2 种工况下压力的计算结果与 KTH 实验室 HCCI 发动机 100 个工作循环的平均压力试验结果作比较。从图 4 可以看出计算的缸内压力比试验结果高,这是由于计算假设缸内温度场、浓度场均匀,忽略了温度、浓度分层对燃烧的影响,此外计算没有考虑传热损失,因此比试验结果偏大,但计算的着火时刻和试验结果基本一致,这表明,该计算模型对着火时刻的预测满足要求。

表 1 HCCI 运行工况

工况	当量比	进气压力 /MPa	进气温度 /K	转速 / ($r \cdot \min^{-1}$)
工况 1	0.25	0.2	313	900
工况 2	0.285 7	0.1	393	900

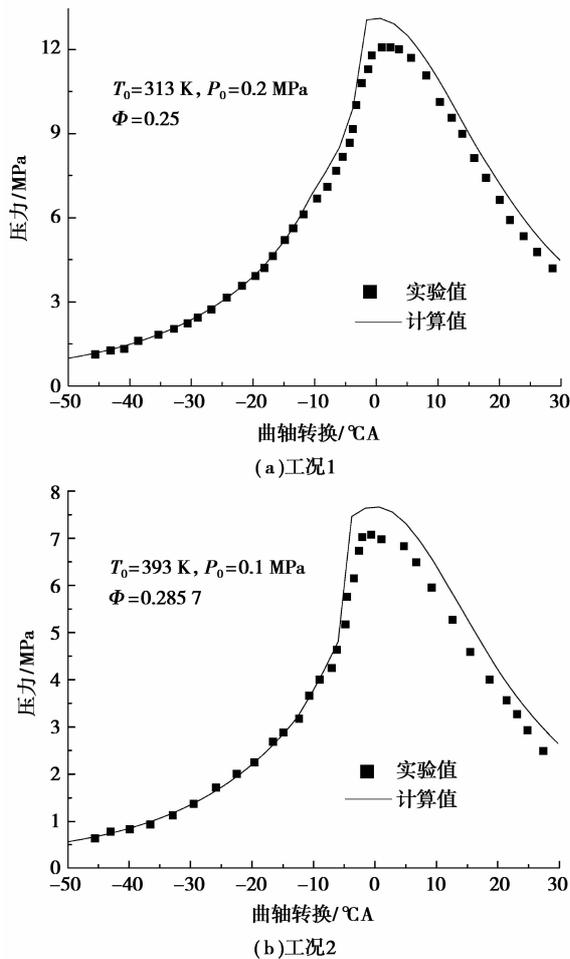


图 4 模型计算结果与实验结果比较

3 甲苯对着火延迟时间的影响

下面利用构建的化学动力学模型分别研究甲苯以及甲苯含量对柴油替代燃料混合物着火延迟时间的影响。选用 CHEMKIN4.1 软件的闭式均相反应器 (closed homogeneous batch reactor) 模块进行研究。

计算中,初始压力为 4 MPa,当量比为 1.0。柴油替代燃料正庚烷和甲苯的摩尔分数比选 7:3。因为 GOLOVITCHEV 认为用 70 mol% 的正庚烷和 30 mol% 的甲苯组成的混合燃料与实际柴油的性能很接近^[18-20]。

从图 5 可以看出,模型预测的柴油替代燃料的着火特性与正庚烷的着火特性相似。在低温和中温区,甲苯的活性远小于正庚烷,因为甲苯并没有表现出负温度系数相关性。柴油替代燃料的着火特性主要由正庚烷来控制。而柴油替代燃料中的甲苯缓慢的氧化对着火特性影响不大,因为正庚烷氧化作用形成的自由基正好加速了甲苯的共氧化过程。然而,甲苯作为柴油燃料中芳香烃的代表,是柴油燃料中的重要组分之一,可以用来更精确的模拟柴油燃

料燃烧以及碳烟的生成过程。

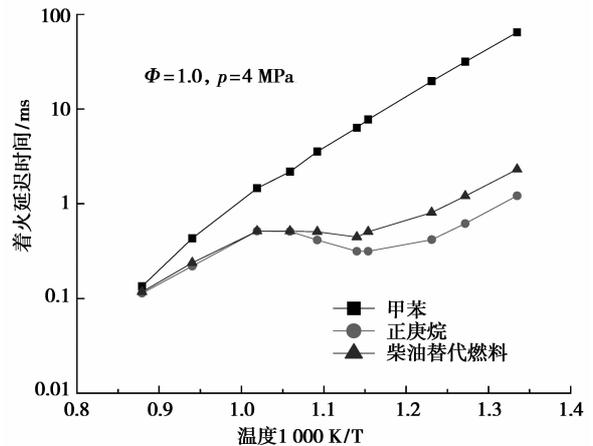
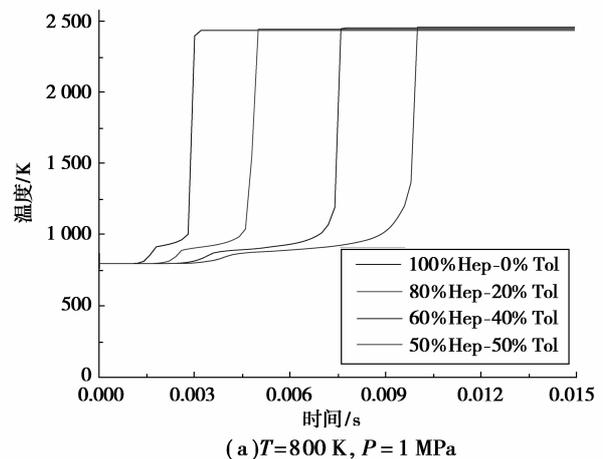


图 5 柴油替代燃料和其组着火延迟时间比较

为了进一步确认柴油替代燃料在 HCCI 条件下,不同温度范围里甲苯的含量对着火延迟时间的影响,图 6 模拟了不同比例(质量百分比)的柴油替代燃料在不同初始温度条件下(800 K、1 500 K、1 800 K)的温度变化曲线图。其中当量比为 0.6。对比 3 种不同情况下的温度曲线,可以明显看出,甲苯的含量对最终的温度没有影响。在低温条件下,甲苯的含量对着火延迟时间的影响非常明显。但是在高温条件下,对着火延迟时间的影响不明显。在 800 K 时,甲苯的加入会引起着火延迟,这是由于低温条件下较低的热释放率所致,低温条件下,甲苯没有冷焰现象发生^[21]。在 800 K 时,甲苯能够快速转化为稳定的中间产物,主要是苯甲醛和苯酚,如图 7 所示。正庚烷和甲苯的比例为 50%:50%(质量百分比)。初始温度为 800 K,初始压力为 1 MPa,当量比为 0.6。它们会和正庚烷低温条件下的产物进行反应,从而降低了混合物的反应速率,进而导致着火延迟明显。

(a) $T=800\text{ K}$, $P=1\text{ MPa}$

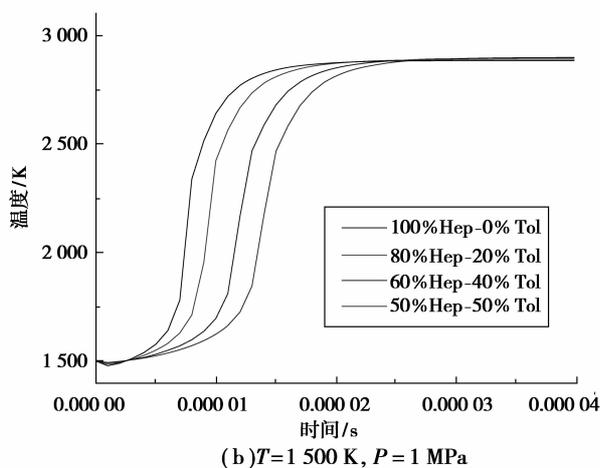
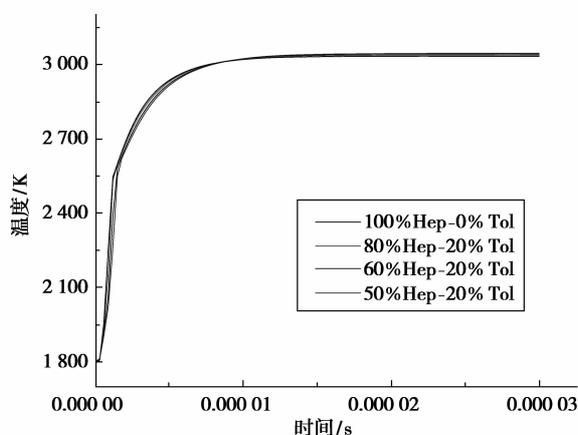
(b) $T=1500\text{ K}$, $P=1\text{ MPa}$ (c) $T=1800\text{ K}$, $P=1\text{ MPa}$

图 6 不同初始温度下的温度曲线

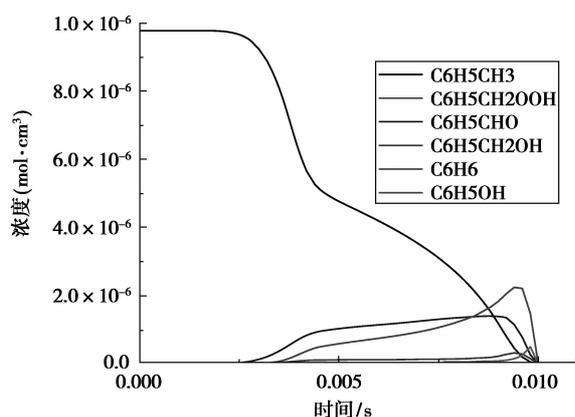


图 7 甲苯中间产物的演变过程

4 结 论

1) 对构建的柴油替代燃料化学反应机理在激波管和 HCCI 发动机实验条件下进行了验证。结果表明构建的机理在 HCCI 燃烧方面的预测性能是可靠的。

2) 柴油替代燃料的着火特性主要由正庚烷来控制。

而柴油替代燃料中甲苯对着火特性影响不大。

3) 在柴油替代燃料 HCCI 低温条件下, 甲苯的含量对着火延迟时间的影响是明显的。随着甲苯含量的增加, 更多的着火延迟会出现。

参考文献:

- [1] HERNANDEZ JJ, SANZ-ARGENT J, BENAJES J, et al. Selection of a diesel fuel surrogate for the prediction of auto-ignition under HCCI engine conditions [J]. *Fuel*, 2008, 87 (6): 655-665.
- [2] FARRELL JT, CERNANSKY NP, DRYER FL, et al. Development of an experimental database and kinetic models for surrogate diesel fuels [C]. SAE2007-01-0201, 2007.
- [3] CURRAN HJ, FISHER EM, GLAUDE PA, et al. Detailed chemical kinetic modeling of diesel combustion with oxygenated fuels [C]. SAE 2001-01-0653, 2001.
- [4] HASEGAWA R, SAKATA I, KOYAMA T, et al. Numerical analysis of ignition control in HCCI engine [C]. SAE 2003-01-1817, 2003.
- [5] KALGHATGI G, RISBERG P, ANGSTROM HE. A method of defining ignition quality of fuels in HCCI engines [C]. SAE2003-01-1816, 2003.
- [6] PITZ WJ, SEISER R, BOZZELLI JW, et al. Chemical kinetic study of toluene oxidation [C]. In: 29th International Symposium on Combustion, 2002, Sapporo, Japan.
- [7] GUSTAVSSON J, GOLOVITCHEV VI, HELMANTEL A. 3-D modelling of conventional and HCCI combustion diesel engines [C]. SAE 2004-01-2964, 2004.
- [8] DAGAUT P. On the kinetics of hydrocarbon oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2002, 4 (11): 2079-2094.
- [9] PETERS N, PACZKO G, SEISER R, et al. Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of n-heptane [J]. *Combustion and Flame*, 2002, 128 (1/2) 38-59.
- [10] ANDRAE JCG, BRINCK T, KALGHATGI GT. HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetained chemical kinetic model [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 155(4): 696-712.
- [11] ANDRAE JCG, BJORNBOOM P, CRACKNELL R F, et al. Autoignition of toluene reference fuels at high pressures modeled with detailed chemical kinetics [J]. *Combustion and Flame*, 2007, 149(1/2)2-24.