

CH₄-H₂ 混合燃料在 HCCI 中燃烧的数值模拟

邓权威^{1,2}, 林其钊¹

(1. 中国科学技术大学热科学和能源工程系, 安徽合肥 230027; 2. 河南理工大学安全科学与工程学院, 河南焦作 454000)

摘要: 为了研究初始参数对不同掺氢比 CH₄-H₂ 混合燃料的均质压燃(HCCI)燃烧性能的影响, 采用燃烧软件包 Chemkin 进行了数值模拟, 并利用生成速率(ROP)分析法研究了掺氢比和过量空气系数对 NO 排放主导机理的影响。研究表明, 掺氢比、压缩比、进气温度、空气过量系数通过影响发动机内的温度继而影响 NO_x 排放; 高掺氢比时可以通过适当降低压缩比和进气温度并增大空气过量系数从而控制 NO_x 的排放。分析表明, 掺氢比增大, 热力型机理贡献率随之增大, 占主导地位; 过量空气系数增大, 热力型机理贡献率减弱, N₂O 中间体机理贡献率增大, 过量空气系数为 2.5 时, 两种机理的主导地位大致相当。

关键词: CH₄-H₂ 混合燃料; 均质压燃发动机; 生成速率(ROP)分析法

中图分类号: TK16 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.0253-2778.2019.06.007

引用格式: 邓权威, 林其钊. CH₄-H₂ 混合燃料在 HCCI 中燃烧的数值模拟[J]. 中国科学技术大学学报, 2019, 49(6):476-486.

DENG Quanwei, LIN Qizhao. Numerical study of combustion in an HCCI fuelled with methane-hydrogen[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2019, 49(6):476-486.

Numerical study of combustion in an HCCI fuelled with methane-hydrogen

DENG Quanwei^{1,2}, LIN Qizhao¹

(1. Department of Thermal Science and Energy Engineering, USTC, Hefei 230027, China;

2. School of Safety Science and Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China)

Abstract: To study the effect of initial parameters on homogeneous charge compression ignition(HCCI) combustion performance of CH₄-H₂ mixtures with different hydrogen ratios, numerical research was carried out through combustion software Chemkin, and the rate of production (ROP) analysis method was used to study the influence of hydrogen mixing ratio and excess air coefficient on the dominant mechanism of NO emission. The result shows that hydrogen ratio, compression ratio, inlet temperature and air excess coefficient affect NO_x emission by affecting the temperature in the engine, and the NO_x emission can be controlled by reducing the compression ratio and inlet temperature properly and increasing the air excess coefficient at high hydrogen ratios. The analysis shows that the contribution rate of thermodynamic mechanism increases with the increase of hydrogen ratios and decreases with the increase of the excess air coefficient, while the contribution rate of N₂O intermediate mechanism increases with the increase of the excess air coefficient. When the excess air coefficient is 2.5, the dominant position of the two mechanisms

收稿日期: 2018-10-07; **修回日期:** 2019-05-06

基金项目: 国家自然科学基金(51376171)资助。

作者简介: 邓权威,男,1979年生,博士生,研究方向:燃烧学。E-mail:qwdeng@hpu.edu.cn

通讯作者: 林其钊,博士/教授。E-mail:qlin@ustc.edu.cn

is approximately the same.

Key words: methane-hydrogen mixed fuel; homogeneous charge compression ignition; rate of production (ROP) analysis

0 引言

当前,高效、低污染已成为燃烧科学中的热点和前沿课题^[1]. 对于内燃机而言,由于石油储量日益减少,环保要求日趋严格,燃油汽车退出已是大势所趋. 发动机清洁替代燃料的研究已受到越来越多人的关注,其中天然气—氢气混合燃料,结合了天然气来源广、热值高、排放低以及氢气燃烧速率快、着火极限宽、可再生等优点,近年来已成为研究热点. 但是天然气—氢气混合燃料作为内燃机的替代燃料也存在一些问题:如氢气的加入容易导致 NO_x 排放较高,此外,还存在着着火时刻控制困难、发动机容易工作粗暴等科学问题. “均质压燃、低温燃烧”历经国内外学者数十年的研究,已经成为一种全新的内燃机燃烧方式. 尧命发等^[2]指出均质压燃、低温燃烧技术的关键是对燃烧过程实行精细化控制. 而实行精细化控制需要对燃烧过程的各种影响因素进行系统、细致的研究.

1999 年, Johansson 等^[3]对均质压燃(HCCI)燃烧的燃料适用性进行了研究,并证明了 HCCI 能够适用于汽油、柴油、天然气等多种燃料. 近来,更多的文献^[4-6]也表明了 HCCI 对燃料具有广泛的适应性. 掺氢天然气混合燃料主要成分为 CH₄-H₂, 作为石油的替代燃料,同样可以作为 HCCI 发动机的燃料.

目前,均质压燃还停留在实验室阶段,数值模拟在研究中发挥着重要作用. 其理论模型主要包括单区模型、多区模型和多维模型^[7]. 其中,单区模型将发动机气缸看作一个温度、压力、组分处处相同的空间,符合 HCCI 预混合燃烧的特点,并且计算所需时间较短,结果精度可以设置较高,可以对大量不同的工况做快速计算,因而得到广泛的应用^[8].

关于天然气掺氢在 HCCI 发动机中的燃烧,有不少学者进行了研究. Wong 等^[9]和 Yap 等^[10]研究发现,天然气掺氢比提高后,可以使着火条件明显改善,并扩展低负荷工作范围. 钟绍华等^[11]和 Elkelawy 等^[12]通过实验得到,天然气掺氢比提高后能使发动机燃烧相位提前,对进气加热的需求减少,稀燃极限增宽. Gupta 等^[13]通过能量效率和焓效率研究表明,掺氢后发动机燃烧和热传导的不可逆率

减小,功率输出增加. 高宏达^[8]和武凯东^[14]分别对掺氢比小于 5%和掺氢比小于 10%时进气温度、压缩比等的影响进行研究,结果表明进气温度和压缩比的提高都能使发动机内温度升高,NO_x 排放浓度升高.

由上所述,部分研究者对天然气固定掺氢比时不同初始参数对 HCCI 发动机的燃烧性能影响进行了研究,也有部分研究者利用固定工况的发动机对不同掺氢比的影响进行了研究,但关于不同初始参数并且较大范围内的不同掺氢比对 HCCI 发动机的影响的研究相对较少. 而研究不同初始参数对不同掺氢比的 HCCI 发动机的影响,有助于对 CH₄-H₂ 混合燃料在 HCCI 燃烧的精细化控制提供理论基础和技术支持. 因而对不同掺氢比 CH₄-H₂ 混合燃料在 HCCI 发动机内不同工况(主要包括压缩比、进气温度、进气压力、过量空气系数)下燃烧特性和排放特性的研究很有必要.

1 模拟方法

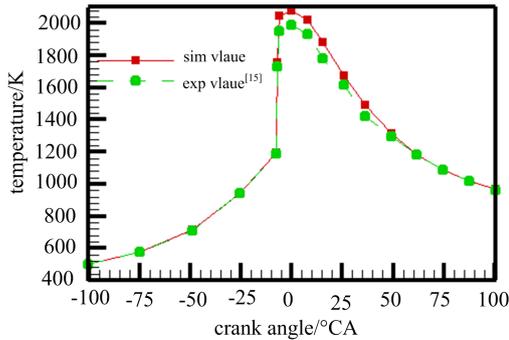
燃烧模型采用一维预混模型,为了简化问题,分析各种因素对发动机的燃烧特性和排放特性的影响,采用绝热方法,即发动机不对外放热. 模型的求解采用燃烧软件包 Chemkin 内自带的 ICE 模块,结合 GRI3.0 机理和热力学数据库进行编译,然后输入发动机参数,主要包括发动机的压缩比、转速、余隙容积、初始曲轴转角、连杆长度与曲轴半径之比以及整个压缩、燃烧至膨胀做功的时间(即进气门关闭到排气门开启). 接着输入燃料和空气的初始条件,包括进气温度、压力、燃料的组分和过量空气系数. 随后调用气相子程序进行计算,选取所需要的数据进行输出,输出数据采用 Tecplot 软件进行后处理和数据分析. 最后,采用生成速率(rate of production, ROP)分析法对不同掺氢比和不同过量空气系数下的 NO 的排放主导机理进行了分析.

为验证模型的可靠性,对天然气 HCCI 内燃机的燃烧情况进行模拟,并将模拟结果与文献中的结果做了比较. 计算的初始时刻是进气门关闭,终止时刻是排气门打开. 发动机的结构参数如表 1 所示. 发动机内的燃料为 90%的甲烷和 10%的乙烷,初始压力为

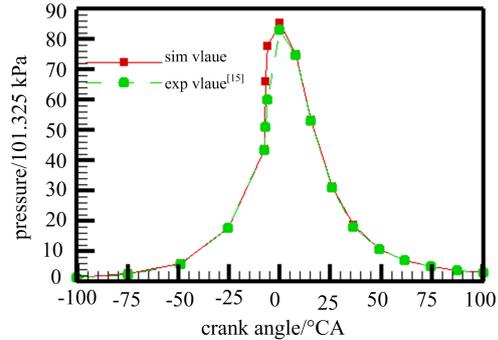
101.325 kPa, 燃料被预热到 442 K, 燃空当量比为 0.3.

表 1 发动机结构参数

项目	缸径	冲程	压缩比	连杆长度	曲轴半径
数值	120.65 mm	140 mm	19.5	260 mm	70 mm



(a) 缸内温度对比



(b) 缸内压力对比

图 1 模拟值与实验值^[15]的对比

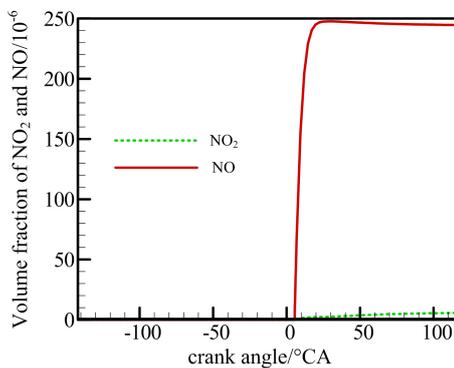
Fig. 1 Comparison of simulated and experimental^[15] values

2 模拟结果及分析

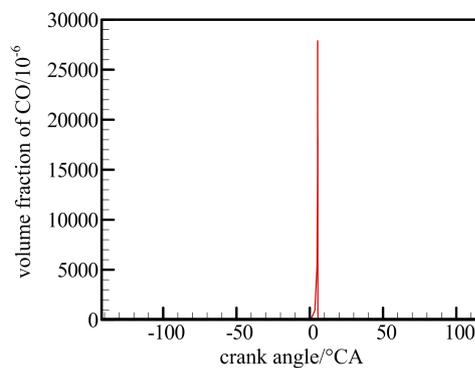
2.1 掺氢比的影响

首先,考虑缸内燃料为 100% 的甲烷,燃空当量比为 0.4,即过量空气系数为 1.5. 此时发动机的参数如下:转速为 2000 r/min,进气温度为 450 K,进气压力为 101.325 kPa,连杆长度与曲轴半径之比为 3.714,起始曲轴转角为 -142° ,压缩比为 18. 图 2 为发动机的排放特性,从图 2(a) 容易看出在天然气 HCCI 内燃机的 NO_x 排放中,NO 占绝大部分,NO 的生成主要集中在高温高压的燃烧瞬间,此后略有下降后基本保持不变, NO_2 生成起始于燃烧的起始

时刻,之后保持缓慢增加. 至发动机排气时,NO 的体积分数 2.5×10^{-4} 要高于 NO_2 的 5.7×10^{-6} 大约两个数量级. 对于 NO_x 的体积分数而言,由于燃烧开始后,NO 缓慢减少, NO_2 缓慢增加,总的 NO_x 基本保持不变. 图 2(b) 为 CO 的排放特性,在上止点附近,CO 浓度在极短时间内迅速增加,达到最高值,而后又迅速下降. CO 浓度迅速升高主要是由于燃料的分解,而 CO 浓度的迅速下降主要是在高温下氧化生成了 CO_2 . 因此在发动机排气中 CO 的摩尔分数接近于 0. 故下面主要研究燃料内的掺氢比对 NO_x 排放的影响.



(a) NO和 NO_2 体积分数



(b) CO体积分数

图 2 发动机的排放特性

Fig. 2 Emission characteristics of engine

保持发动机的参数不变,改变掺氢比,掺氢比从 0%到 50%,图 3 为 3 种不同的过量空气系数下掺氢比对排放特性及发动机内最高温度的影响.由图 3(a)可知,总体而言,随着掺氢比的增加,NO_x 的排放体积分数逐渐增加,当掺氢比为 0%~10%时,NO_x 的排放浓度增加更为显著,此后的增加幅度接近于线性变化.NO_x 的排放浓度增加主要是由于热力 NO 的增加,热力 NO 与发动机内的温度密切相关.随着掺氢比的增加,图 3(b)所示的机内最高燃烧温度也是逐渐增加的,与 NO_x 的增长趋势类似.

此外,由图 3(a)容易得到,过量空气系数对

NO_x 的排放浓度影响是比较大的.掺氢比为 50%时,当过量空气系数 λ=1.0 时,NO_x 的排放体积分数为 1.14967×10⁻²;λ=1.5 时,NO_x 的排放体积分数为 1.9902×10⁻³;当 λ=2.0 时,NO_x 的排放体积分数仅为 2.923×10⁻⁴.即 NO_x 的排放浓度随着过量空气系数的增大显著降低.但是过量空气系数的增加也会使燃料的浓度随之降低,放热量会减少,做功能力减弱.表 2 为指示热效率随掺氢比的变化,在不考虑热损失的情况下,指示热效率随掺氢比的增加先增加后减小,在掺氢比 10%时达到最大值.

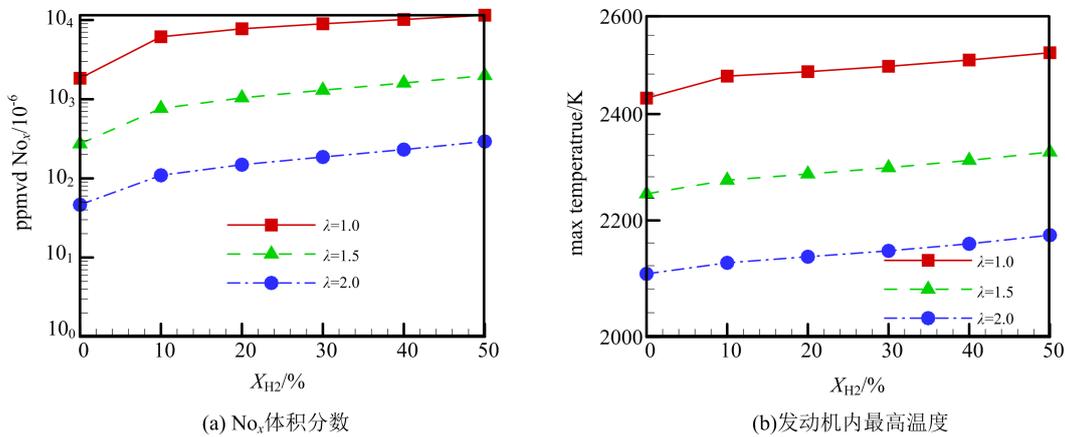


图 3 掺氢比对排放特性及发动机内最高温度的影响

Fig. 3 Influence of hydrogen ratio on emission characteristics and maximum temperature in engine

表 2 指示热效率随掺氢比的变化(λ=1.5)

Tab. 2 The change of indicating thermal efficiency with hydrogen ratio(λ=1.5)

掺氢比	0%	10%	20%	30%	40%	50%
热/J	1503.1	1505.5	1509.1	1513.6	1519.0	1525.5
发动机指示功/J	801.8	808.8	805.7	803.4	801.6	800.0
指示热效率/%	53.3	53.7	53.4	53.1	52.8	52.4

图 4 为掺氢比对着火曲轴转角的影响,从图中可以看出,随着掺氢比的增加,着火起始曲轴转角是减少的,即发动机的着火时刻提前,特别是掺氢比从 0%增加到 10%时,着火提前非常显著,然后随着掺氢比的增加,提前效果减缓.同样地,燃烧结束时刻也随掺氢比的增加而提前.由于氢气的着火能量低,从燃烧后的温度斜率易知,燃烧持续时间随掺氢比的增加是减少的.

2.2 压缩比的影响

固定发动机的进气温度 450 K,进气压力 101.325 kPa,燃料为纯甲烷或甲烷与氢气的混合

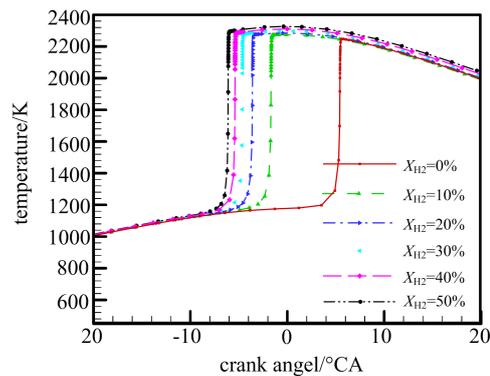


图 4 掺氢比对着火曲轴转角的影响

Fig. 4 Influence of hydrogen ratio on the ignition crank angle

物,过量空气系数 1.5.改变压缩比,从 13 依次增加到 22,探究压缩比对发动机内燃烧温度和 NO_x 的排放的影响.

图 5 为掺氢比从 0%至 50%时,压缩比对发动机最高燃烧温度及 NO_x 排放的影响.由图 5(a)可知,总体而言,在不同的掺氢比下,随着压缩比的增加,最高燃烧温度是逐渐增加的,但是当压缩比较小,燃料是不能被压燃的.纯甲烷时,最低压燃压

缩比为 17,随着掺氢比的增加,最低压燃压缩比降低,掺氢比为 10%时,最低压燃压缩比为 16,当掺氢比为 40%时,最低压燃压缩比为 14. 此外,也很容易知道,不能被压燃时,机内最高燃烧温度均低于 1150 K,能被压燃时,机内最高燃烧温度均高于 2000 K. 图 5(b)为不同压缩比下 NO_x 的排放体积分数,不能被压燃时,NO_x 的排放浓度为 0,当处于最低压燃压缩比时,NO_x 的排放浓度是较低的,

此后随着压缩比的增加,NO_x 的排放浓度显著增加;如掺氢比为 40%时,压缩比为 14 时 NO_x 的排放体积分数为 1.33×10^{-5} ,但压缩比为 22 时 NO_x 的排放体积分数为 5.6189×10^{-3} ,增加了 423 倍. 表 3 为指示热效率随压缩比的变化,由表可知,随着压缩比的增加,发动机缸内温度增加,燃料更充分燃烧,发动机的指示功和燃烧效率都是增加的,但增加幅度逐渐减小.

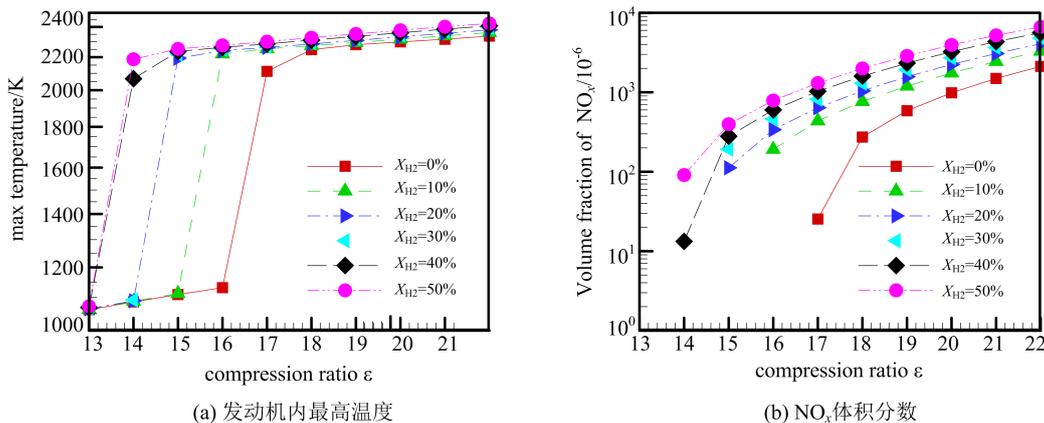


图 5 压缩比对发动机内最高温度及 NO_x 排放浓度的影响

Fig. 5 Effect of compression ratio on maximum temperature and NO_x emission concentration in engine

表 3 指示热效率随压缩比的变化 (X_{H2} = 10%)

Tab. 3 The change of indicating thermal efficiency with compression ratio (X_{H2} = 10%)

压缩比	16	17	18	19	20	21
热/J	1340.2	1423.2	1505.5	1587.2	1668.2	1748.2
发动机指示功/J	693.6	755.0	808.8	859.5	908.7	956.2
指示热效率/%	51.8	53.0	53.7	54.2	54.5	54.7

但是,值得注意的是,虽然最低压缩比时 NO_x 的排放浓度很低,但压缩时的曲轴转角是延后的. 如图 6 所示为掺氢比 40%时压缩比分别为 14 和 16 时发动机内的温度分布,从图中可以看出,压缩比为 14 时,最高温度对应的曲轴转角为 23.11 度,而压缩比为 16 时对应的曲轴转角为 -0.13 度,曲轴转角延后了 23 度多,即发动机的着火时刻显著延后,这是不利于内燃机燃烧的. 因此,为了在上止点(曲轴转角为 0 度)之前被压燃,适当提高压缩比是非常有必要的.

NO_x 的排放. 从表中易得,当掺氢比较大时,通过适当地减少压缩比,依然可以保持较低的 NO_x 排放,如掺氢比从 10%增加到 50%时,通过将压缩比从 18 减少至 16,两者的 NO_x 排放是基本相当的.

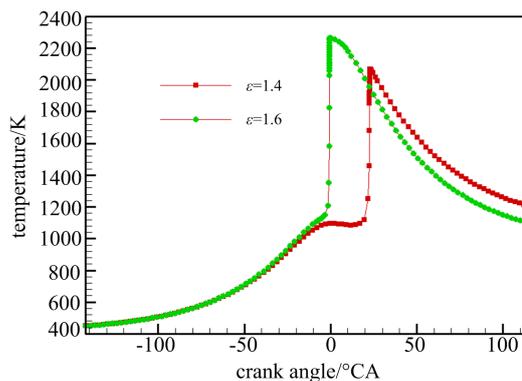


图 6 压缩比对着火曲轴转角的影响

Fig. 6 Effect of compression ratio on the ignition crank angle

表 4 不同掺氢比下合适的压缩比及 NO_x 排放浓度

Tab. 4 Suitable compression ratio and NO_x emission concentration under different hydrogen ratios

掺氢比	0%	10%	20%	30%	40%	50%
合适的压缩比	20	18	17	17	16	16
NO _x 的排放体积分数/10 ⁻⁶	985.8	764.2	639.6	819.3	599.0	786.3

综合考虑,一方面保证燃料在上止点之前压燃,另一方面保证较低的 NO_x 排放,表 3 列出了初始温度为 450 K,初始压力为 101.325 kPa,过量空气系数为 1.5 的情况下不同掺氢比下合适的压缩比及其

2.3 进气温度的影响

固定发动机的进气压力为 101.325 kPa, 压缩比为 18. 燃料为纯甲烷或甲烷与氢气的混合物, 过量空气系数为 1.5. 改变初始的进气温度, 进气温度从 400 K 逐渐增大到 500 K, 探究初始的进气温度对发动机内燃烧温度和 NO_x 排放的影响.

由图 7(a)可知, 总体而言, 在不同的掺氢比下, 发动机内的最高燃烧温度是随着进气温度的增加而增加的, 在进气温度较小时, 燃料是不能被压燃的, 纯甲烷需要最低 440 K 的进气温度才能被压燃, 掺氢比 50% 的甲烷氢气混合物也需要 410 K 才能被压燃, 即燃料需要被预热 100 多度才能被压燃. 与压

缩比的影响结果类似, 不能被压燃时, 机内最高燃烧温度均低于 1110K, 能被压燃时, 机内最高燃烧温度均高于 1900 K. 图 7(b)为不同进气温度下 NO_x 的排放体积分数, 不能被压燃时, NO_x 的排放浓度为 0, 当处于进气温度时, NO_x 的排放浓度是较低的, 此后随着进气温度的增加, NO_x 的排放浓度显著增加; 如掺氢比 40% 时, 进气温度为 410 K 时 NO_x 的排放体积分数为 6.82×10^{-5} , 当进气温度为 500 K 时 NO_x 的排放体积分数为 7.8494×10^{-3} , 增加了 115 倍. 与增加掺氢比类似, 进气温度增加, 发动机的指示热效率略有增加后便减少, 在进气温度为 440K 时热效率最高, 如表 5 所示.

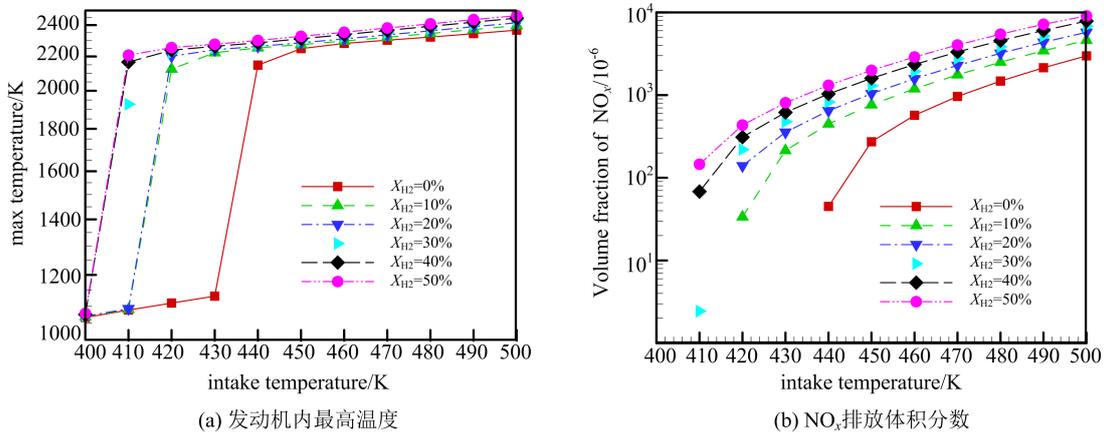


图 7 进气温度对发动机内最高温度及排放特性的影响

Fig. 7 Effect of intake temperature on maximum temperature and emission characteristics of engine

表 5 指示热效率随进气温度的变化 (X_{H2} = 10%)

Tab. 5 The change of indicating thermal efficiency with intake temperature (X_{H2} = 10%)

进气温度/K	430	440	450	460	470	480
热/J	1577.0	1540.7	1505.5	1471.3	1438.0	1405.5
发动机指示功/J	847.2	831.3	808.8	784.5	759.4	734.2
指示热效率/%	53.7	54.0	53.7	53.3	52.8	52.2

同样地, 与压缩比的影响结果类似, 虽然最低进气温度时 NO_x 的排放浓度很低, 但机内着火时的曲轴转角是延后的, 这同样是不利于内燃机燃烧的. 因此, 为了在上止点(曲轴转角为 0 度)之前着火, 适当提高进气温度是非常有必要的. 综合考虑, 一方面保证燃料在上止点之前压燃, 另外一方面保证较低的 NO_x 排放, 表 6 列出了初始压力为 101.325 kPa, 压缩比为 18, 过量空气系数为 1.5 的情况下不同掺氢比下合适的进气温度及其 NO_x 排放. 从表中容易得到, 当掺氢比较大时, 通过适当地减少进气

温度, 依然可以保持较低的 NO_x 排放, 如掺氢比从 0% 增加到 50% 时, 通过将进气温度从 470 K 减少至 430 K, 两者的 NO_x 排放是基本相当的.

表 6 不同掺氢比下合适的进气温度及 NO_x 排放体积分数
Tab. 6 Appropriate inlet temperature and NO_x emission concentration under different hydrogen ratios

掺氢比	0%	10%	20%	30%	40%	50%
合适的进气温度/K	470	450	440	440	430	430
NO _x 的排放体积分 积分数/10 ⁻⁶	962.5	764.2	646.6	824.5	617.1	808.4

2.4 进气压力的影响

固定发动机的进气温度 450K, 压缩比 18. 燃料为纯甲烷或甲烷与氢气的混合物, 过量空气系数为 1.5. 改变进气压力, 从 81.06 kPa 依次增加到 202.65 kPa, 探究进气压力对发动机内燃烧温度和 NO_x 排放的影响.

由图 8(a)易知, 除了纯甲烷之外, 进气压力对温度的影响较小, 当进气压力从 81.06 kPa 增加到

202.65 kPa 时,纯甲烷的最高燃烧温度从 2210 K 增至 2269 K,增加了 59 K,而甲烷与氢气的混合物(掺氢比从 10%至 50%)均大约只增加了 15K 左右,这主要是因为纯甲烷采用的压缩比 18 小于上止点压燃的最小压缩比 20,而甲烷与氢气的混合燃料采用的压缩比均高于各自对应的上止点压燃的最小压缩比,如表 4 所示.由于进气压力对发动机内温度影响较小,而 NO_x 排放体积分数与机内温度密切相关,因此理论上进气压力对 NO_x 排放体积分数

影响较小.图 8(b)所示的 NO_x 排放体积随着进气压力的增大而增大,在上止点前被压燃后(此时纯甲烷对应的进气压力为 182.385 kPa,甲烷与氢气的混合物对应的进气压力为 81.06 kPa),NO_x 的排放与进气压力的关系呈现近似的线性关系,进气压力增加 2.5 倍,NO_x 的排放大约也增加 2~3 倍.表 7 为指示热效率随进气压力的变化,由表可知,进气压力增加,指示热效率略有下降,变化不大.

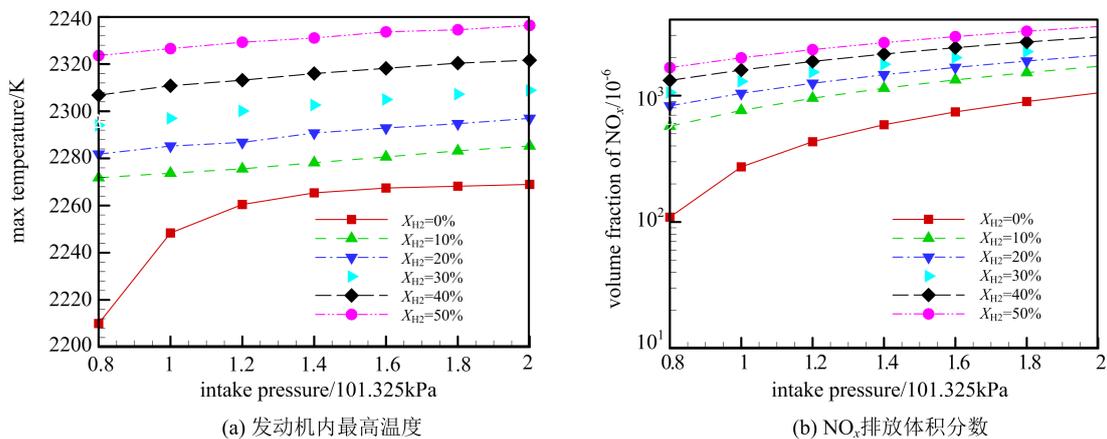


图 8 进气压力对发动机内最高温度及排放特性的影响

Fig. 8 Effect of intake pressure on maximum temperature and emission characteristics of engine

表 7 指示热效率随进气压力的变化 (X_{H2} = 10%)

Tab. 7 The change of indicating thermal efficiency with intake pressure (X_{H2} = 10%)

进气压力/ (101.325 kPa)	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
热/J	1 204.9	1 505.5	1 805.9	2 106.0	2 405.8	2 705.3
发动机 指示功/J	648.2	808.8	968.3	1 127.2	1 285.1	1 442.6
指示热效率/%	53.8	53.7	53.6	53.5	53.4	53.3

表 8 为纯甲烷在压缩比为 20 时机内的最高燃烧温度、最大压力与进气压力的关系.进气压力从 81.06 kPa 增加到 202.65 kPa 时,纯甲烷的最高燃烧温度从 2297K 增至 2312K,增加了 15K,即大约增加了 0.65%,跟甲烷与氢气的混合燃料的规律类似.同样地,进气压力从 81.06 kPa 增加到 202.65 kPa 时,纯甲烷的最高压力从 7639.905 kPa 增至 19221.3525 kPa,增加幅度为 2.5 倍,即机内最高压力与进气压力几乎同步增长.过高的缸内最高压力将对发动机强度提出很高的要求,压力升高率过大时会产生敲缸的现象^[16],致使发动机输出功率不稳定,严重时会造成发动机气缸的损坏.总之,不管是

纯甲烷还是甲烷与氢气的混合物,只要在合适的压缩比下,进气压力主要影响发动机内的压力,而对发动机内温度影响很小.

总之,从稳定燃烧和保证较低的 NO_x 排放两方面综合考虑,进气压力的提高均有害无利,对于 HCCI 均质压燃发动机而言,无需提高进气压力,在正常的一个大气压下即可.

表 8 纯甲烷燃料发动机内的最高燃烧温度、最高压力与进气压力的关系(压缩比为 20)

Tab. 8 Relationships between maximum combustion temperature, maximum pressure and intake pressure in a pure methane fuel engine (compression ratio=20)

进气压力/ (101.325 kPa)	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0
最高燃烧 温度/K	2 297	2 299	2 301	2 304	2 306	2 309	2 312
最大压力/ (101.325 kPa)	75.4	94.4	113.3	132.4	151.5	170.6	189.7

2.5 过量空气系数的影响

固定发动机的压缩比为 18,燃料为温度 450 K、压力 101.325 kPa 的纯甲烷或甲烷与氢气的混合

物. 改变过量空气系数, 将过量空气系数从 1 增加到 3, 探究过量空气系数对发动机内燃烧温度和 NO_x 排放的影响.

由图 9(a) 容易得到, 对于不同掺氢比的 CH₄-H₂, 过量空气系数的增大均使发动机最高燃烧温度显著减小, 过量空气系数为 1 时, 机内最高燃烧温度在 2500K 左右, 过量空气系数为 3 时, 机内最高燃烧温度在 1900K 左右. 由于燃烧温度的大幅降低, 图 9(b) 所示的 NO_x 排放浓度亦随过量空气系数的增大而大幅度降低, 过量空气系数为 1 时, NO_x 排

放体积分数为 6.4412×10^{-3} 左右, 过量空气系数为 3 时, NO_x 排放体积分数为 1.02×10^{-5} 左右. 由此可见, 增大过量空气系数能显著降低 NO_x 的排放. 但是应当指出, 随着过量空气系数的增加, 燃料的放热量将大幅降低, 发动机做功能力也随之降低, 如表 9 所示. 在不考虑热损失的情况下, 指示热效率略有增加, 但实际发动机运行过程中, 过量空气可能会带走燃烧的热量, 从而引起实际热效率的降低. 因而过量空气系数不能无限地增大, 采用废气循环可能是较好的办法.

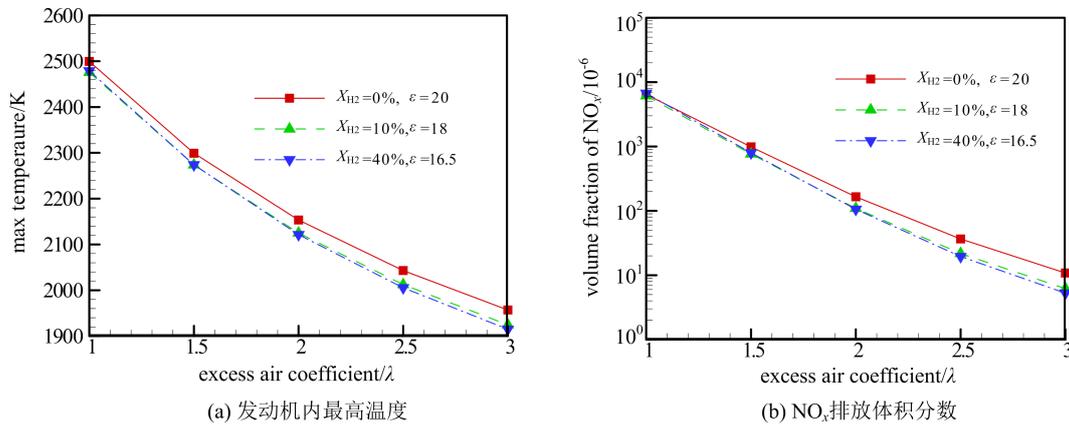


图 9 不同过量空气系数下的发动机最高温度及 NO_x 排放

Fig. 9 Maximum engine temperature and NO_x emission under different excess air coefficients

此外, 从图 9 也可以得出, 对于不同掺氢比的混合燃料, 可以通过改变压缩比改变其燃烧和排放特性. 如压缩比为 20 的纯甲烷、压缩比为 18 的 10% 掺氢气混合物、压缩比为 16.5 的 40% 掺氢气混合物, 这三种情况下的发动机内最高燃烧温度和 NO_x 排放浓度随过量空气系数的变化曲线是非常接近的. 即高掺氢比的混合燃料, 可以通过适当降低压缩比, 达到与纯甲烷具有基本相当的燃烧和排放效果.

表 9 指示热效率随过量空气系数的变化 (X_{H2} = 10%)

Tab. 9 The change of indicating thermal efficiency with excess air coefficient (X_{H2} = 10%)

过量空气系数	1.0	1.5	2	2.5	3
燃料放热/J	1841.5	1505.5	1265.9	1091.2	958.7
发动机指示功/J	977.8	808.8	684.4	591.7	520.5
指示热效率/%	53.1	53.7	54.1	54.2	54.3

3 NO 的 ROP 分析

3.1 不同掺氢比下 NO 的 ROP 分析

由上易知, NO 在 NO_x 排放中基本占据 90% 以上的比重, 因而研究影响 NO 的生成因素便显得非常重要. 本节主要采用生成速率 (ROP) 分析法来

确定基元反应对 NO 生成的影响. ROP 常用来确定不同基元反应对给定组分生成/消耗的贡献率, ROP 系数为正数表示促进组分的生成, 负数表示导致组分的消耗. 本节固定发动机的参数为: 转速为 2000 r/min, 进气温度为 450K, 进气压力 101.325 kPa, 连杆长度与曲轴半径之比为 3.714, 起始曲轴转角为 -142°, 压缩比为 18, 燃料为纯甲烷或甲烷与氢气的混合物. 改变掺氢比 (从 0% 到 50%), 通过 ROP 分析, 找出不同掺氢比下影响 NO 生成的主要基元反应及对 NO 排放的影响.

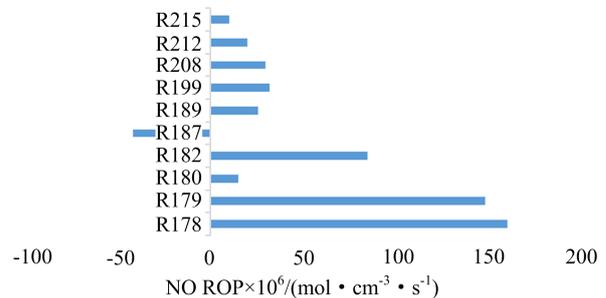
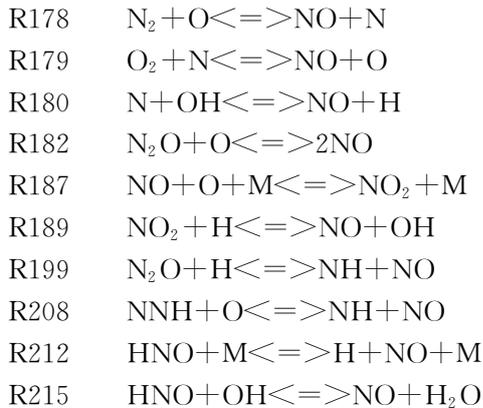


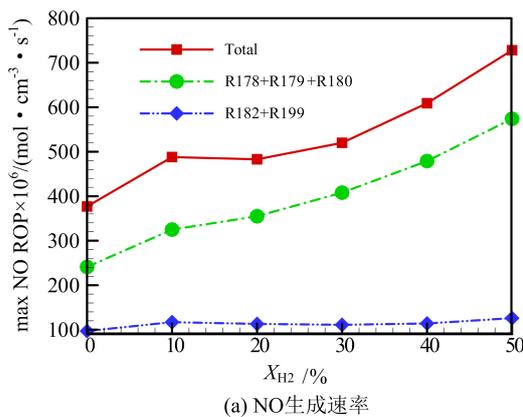
图 10 NO 主要基元反应的最大生成速率 (X_{H2} = 10%, λ = 1.5)

Fig. 10 Maximum generation rate of NO primary reactions (X_{H2} = 10%, λ = 1.5)

图 10 显示了影响 NO 生成速率的主要基元反应,分别是



其中 R178、R179、R182 三个基元反应对 NO 的生成起主导作用,而 R187 主要起消耗作用. R178、R179、R180 属于热力或泽利多维奇机理,在着火时的生成速率分别为 $0.000161 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 $0.000149 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 和 $0.000015 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, 合计占此时 NO 总生成速率 $0.000488 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 的 66.6%; R182 和 R199 属于 N_2O 中间体机理,着火时刻的生成速率分别为 $0.000085 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 和 $0.000032 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, 占 NO 总生成速率的 24.0%. 即



热力型和中间体机理占 NO 总生成速率的 90% 左右,起绝对主导作用.

图 11(a)显示空气过量系数 1.5 的条件下,不同掺氢比的 NO 生成速率的对比.可以看出,随着掺氢比的增大,NO 的总生成速率和热力型 NO 生成速率的最大值均有较显著增加, N_2O 中间体机理的 NO 的生成速率变化很小.小掺氢比时,当掺氢比从 0% 增加到 10% 时,表 10 显示 NO 的排放从 2.661×10^{-4} 增大到 7.482×10^{-4} ,增大了 2.8 倍,而 NO 的总生成速率从 $0.000377 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 增大到 $0.000488 \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$,只增加了 1.29 倍,因而必然还有其他的因素.通过图 11(b)发现,10% 掺氢比条件下的高温区域(取热力型 NO 的生成时刻)驻留时间显著高于 5% 的,前者大约是后者的 1.6 倍.高温区驻留时间增长主要是由于氢气着火所需活化能低,导致着火时刻提前,整体高温着火延续时间增加,继而导致 N_2 有更多的时间与 O 自由基和 O_2 接触,最终使得 NO 的排放浓度增大了 2.8 倍.当掺氢比继续增加时,高温区着火延续时间增加变缓,主要由 NO 的总生成速率的最大值主导 NO 排放浓度的增加.

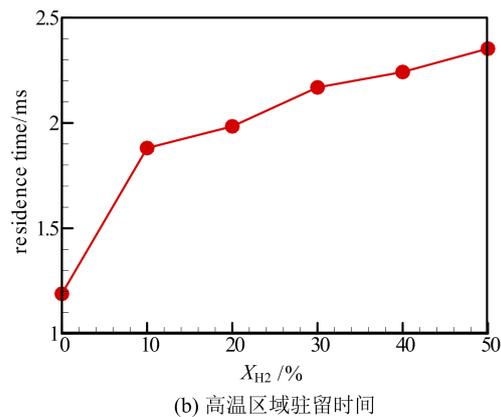


图 11 不同掺氢比下 NO 生成速率和高温区域的驻留时间 ($\lambda = 1.5$)

Fig. 11 NO generation rate and residence time of high temperature region under different hydrogen ratios ($\lambda = 1.5$)

表 10 显示了不同掺氢气比例下的 NO 排放浓度及两种机理的贡献比,其中热力型机理贡献率为 R178+R179+R180 的 NO 生成速率与总 NO 生成速率的比值, N_2O 中间体机理贡献率为 R182+R199 的 NO 生成速率与总 NO 生成速率的比值.从表中得到,随着掺氢比的增大,热力型机理贡献百分

比的趋势是增加的,但 30% 的掺氢比之后贡献率保持高位(78.5% 左右),变化很小.而 N_2O 中间体机理贡献比则随着掺氢比的增大而减小,由 0% 掺氢比时的 25.7% 降低到 50% 掺氢比时的 17.3%. 即随着掺氢比的增大,热力型机理贡献比随之增大,占据的主导地位越发巩固.

表 10 不同掺氢比下的 NO 排放浓度及两种机理的贡献比($\lambda=1.5$)

Tab. 10 NO emission concentration and contribution ratio of two mechanisms under different hydrogen ratios($\lambda=1.5$)

掺氢比例	0%	10%	20%	30%	40%	50%
NO 的排放体积分数/ 10^{-6}	266.1	748.2	1021.5	1272.6	1565.8	1958.1
热力型机理贡献率	63.9%	66.6%	73.5%	78.5%	78.6%	78.8%
N ₂ O 中间体机理贡献率	25.7%	24.0%	23.4%	21.3%	18.7%	17.3%

3.2 不同过量空气系数下 NO 的 ROP 分析

固定发动机的进气温度为 450 K, 进气压力 101.325 kPa, 压缩比为 18, 燃料为纯甲烷或甲烷与氢气的混合物. 改变过量空气系数(从 1.5 到 2.5), 通过 ROP 分析, 找出不同过量空气系数下影响 NO 生成的主要基元反应及对 NO 排放的影响.

图 12 显示了不同掺氢比和不同过量空气系数下热力型机理和 N₂O 中间体机理对 NO 生成速率的贡献率的对比. 容易得到, 过量空气系数的增加导

致热力型机理的贡献率降低, 而 N₂O 中间体机理的贡献率却是增加的, 当过量空气系数为 2.5 时, 0% 掺氢比(纯甲烷)的 N₂O 中间体机理贡献率为 47.8%, 略高于热力型机理的贡献率 43.5%, 10% 和 20% 的掺氢比的 N₂O 中间体机理贡献率等于热力型机理的贡献率, 而 40% 掺氢比的 N₂O 中间体机理贡献率 42.1% 略小于热力型机理的贡献率 46.1%. 即过量空气系数较大时, 两种机理的主导地位是大致相当的.

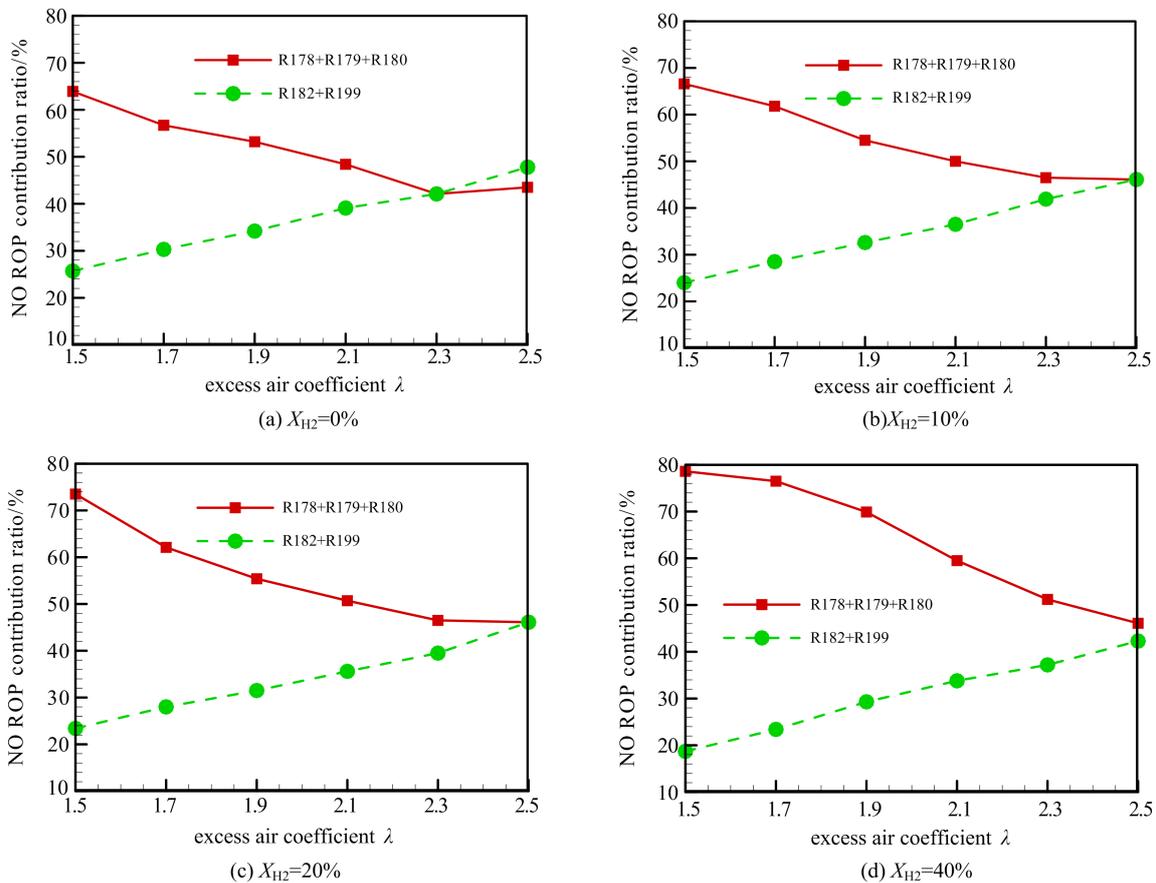


图 12 不同掺氢比、不同过量空气系数下两种机理对 NO 生成速率的贡献率对比

Fig. 12 Contrast of the contribution of the two mechanisms to NO generation rate at different hydrogen ratios and excess air coefficients

4 结论

采用燃烧软件包 Chemkin 对甲烷—氢气在

HCCI 发动机内的燃烧进行了数值模拟, 主要考虑各种因素对发动机内的温度以及发动机的 NO_x 排放浓度的影响, 得到以下结论:

(I) 压缩比、进气温度、掺氢比和空气过量系数的变化都对不同掺氢比时发动机内的温度有较大影响, 继而对 NO_x 排放浓度影响显著. 而进气压力主要影响发动机内的压力, 对发动机内温度影响较小, 进气压力的增大会导致发动机内 NO_x 排放浓度缓慢增加.

(II) 掺氢比增大会导致 NO_x 排放浓度显著增加, 可以通过适当地降低压缩比和进气温度, 并增大空气过量系数, 从而控制 NO_x 达到较低的排放浓度. 如在掺氢比 0% (即纯甲烷) 在压缩比为 20、10% 掺氢混合物在压缩比为 18、40% 掺氢混合物在压缩比为 16.5 这 3 种情况下, 发动机内最高温度、 NO_x 的排放浓度随过量空气系数的变化曲线非常接近. 即高掺氢比的混合燃料, 可以通过适当降低压缩比, 达到与纯甲烷具有基本相当的燃烧和排放效果.

(III) 采用 ROP 分析甲烷—氢气在 HCCI 中燃烧产生的 NO_x , 发现 NO_x 主要受热型机理和 N_2O 中间体机理控制. 随着掺氢比的增大, 热型机理贡献率随之增大, 占据绝对主导地位; 随着过量空气系数的增大, 热型机理贡献率逐渐减弱, N_2O 中间体机理贡献率逐渐增大, 过量空气系数为 2.5 时, 两种机理的主导地位大致相当.

参考文献 (References)

- [1] 周龙宝, 刘忠长, 高宗英, 等. 内燃机学[M]. 3 版. 北京: 机械工业出版社, 2010.
- [2] 尧命发, 刘海峰. 均质压燃与低温燃烧的燃烧技术研究进展与展望[J]. 汽车工程学报, 2012, 2(2): 79-90.
YAO Mingfa, LIU Haifeng. Review and Prospect of the Combustion Technology of Homogeneous Charge Compression Ignition and Low Temperature Combustion [J]. Chinese Journal of Automotive Engineering, 2012, 2(2): 79-90.
- [3] CHRISTENSEN M, HULTQVIST A, JOHANSSON B. Demonstrating the multi fuel capability of a homogeneous charge compression ignition engine with variable compression ratio [J]. SAE Transactions, 1999, 108: 2099-2113.
- [4] BEDOYA I D, SAXENA S, CADAVID F J, et al. Experimental evaluation of strategies to increase the operating range of a biogas-fueled HCCI engine for power generation [J]. Applied Energy, 2012, 97: 618-29.
- [5] FATHI M, SARAY R K, CHECKEL M D. The influence of Exhaust Gas Recirculation (EGR) on combustion and emissions of n-heptane/natural gas fueled Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) engines [J]. Applied Energy, 2011, 88: 4719-4724.
- [6] VIGGIANO A, MAGI V A. Comprehensive investigation on the emissions of ethanol HCCI engines [J]. Applied Energy, 2012, 93: 277-287.
- [7] 文媛媛. 天然气掺氢 HCCI 发动机燃烧与排放物的研究[D]. 武汉: 武汉理工大学, 2011.
- [8] 高宏达. 掺氢天然气 HCCI 发动机燃烧特性模拟研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2013.
- [9] WONG Y K, KARIM G A. An analytical examination of the effects of hydrogen addition on cyclic variations in homogeneously charged compression-ignition engines [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2000, 25: 1217-1224.
- [10] YAP D, PEUCHERET S M, MEGARITIS A, et al. Natural gas HCCI engine operation with exhaust gas fuel reforming [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2006, 31: 587-595.
- [11] 钟绍华, 杨秀林, Mirosław LW, 等. 氢对天然气均质压燃(HCCI)影响的实验研究[J]. 轻型汽车技术, 2007 (9/10): 25-28.
- [12] Elkelawy M, Yu-Sheng Z, El-Din H A, et al. A comprehensive modeling study of natural gas (HCCI) engine combustion enhancement by using hydrogen addition [R]. SAE Technical Paper, 2008: 2008-01-1706.
- [13] GUPTA D K, GOYAL R, KUMAR R, et al. A thermodynamic analysis of a hydrogen enriched compressed natural gas fuelled HCCI engine [J]. International Journal of Applied Engineering Research, 2013, 8(17): 2051-2056.
- [14] 武凯东. 基于化学反应动力学的天然气掺氢发动机均质压燃数值模拟[D]. 武汉: 华中科技大学, 2015.
- [15] Fiveland S B, Agama R, Christensen M, et al. Experiment and simulated results detailing the sensitivity of natural gas HCCI engines to fuel composition [J]. SAE Transactions, 2001, 110: 2123-2134.
- [16] 杨振中, 师素娟, 宋茂江. 基于压力升高率的氢燃料发动机异常燃烧分析与控制[J]. 农业工程学报, 2010(11): 124-129.
YANG Zhenzhong, SHI Sujuan, SONG Maojiang. Analysis and control of abnormal combustion of hydrogen fueled engines based on pressure rise rate[J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2010(11): 124-129.