

正庚烷液滴在惰性多孔介质内的燃烧

林博颖, 陈义良, 刘明侯

(中国科学技术大学热科学与能源工程系, 安徽合肥 230027)

摘要: 多孔介质内燃机具有高效、低污染而且实用的潜在优点. 我们用零维模型加详细化学反应机理来模拟正庚烷(C₇H₁₆)液滴在惰性多孔介质内的定容点火过程. 气固、气液之间的对流换热系数, 气液之间的对流传质系数均由经验公式给出; 液滴表面的化学平衡服从 Raoult 定律; 假定多孔介质内为均匀各向同性黑体辐射场. 研究表明, 正常工况下多孔介质(PIM)可看作恒温热源, PIM能大大缩短点火延迟期, 有利于内燃机的点火控制; 同时能大大降低点火阶段的压升速率, 减轻噪音. 总体上污染物浓度较低.

关键词: 惰性多孔介质; 内燃机; 正庚烷; 点火延迟期; 污染物

中图分类号: TK401 **文献标识码:** A

Combustion of n-heptane in porous inert medium

LIN Bo-ying, CHEN Yi-liang, LIU Ming-hou

(Department of Thermal Science and Energy Engineering of University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: Application of porous inert medium (PIM) to internal combustion engines (ICE) promises high efficiency, low emissions and general practicability. The constant volume ignition of n-heptane droplets in PIM was simulated by a zero dimensional model using detailed chemical kinetics. Empirical relations for heat and mass transfer coefficients were used in the model, and Raoult's law was employed to account for chemical equilibrium at the droplet surface. A homogeneous isotropic black-body radiation was assumed within PIM. Under normal conditions, PIM remained at a nearly constant temperature. Results show that PIM can drastically reduce the ignition delay time. This is of great benefit to ignition control of ICEs. Rate-of-pressure-rise can also be reduced, leading to a relatively low noise level. Emissions are, in general, relatively low.

Key words: porous inert medium; internal combustion engines; n-heptane; ignition delay; emissions

0 引言

柴油机因其功率大、效率高, 是当前应用范围很广的内燃机, 但污染物排放相对较多. 随着环境问题日益受到重视, 污染排放标准日益严格, 高污染的传

统柴油机势必要进行改造或被新型内燃机取代.

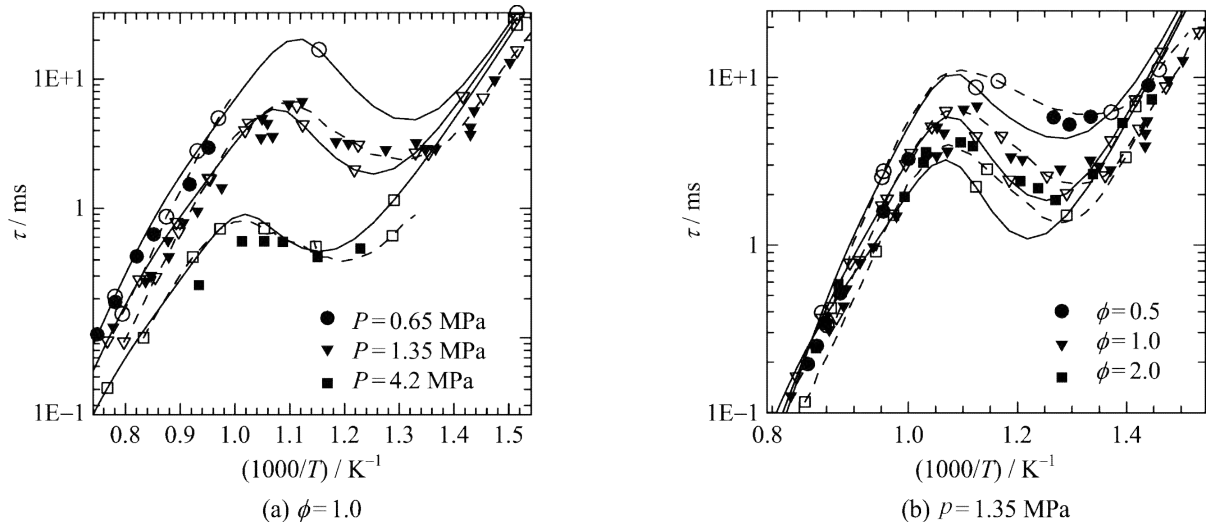
均质压燃(HCCI)内燃机以其高效(接近 Otto 循环)、低污染(很少量的 NO_x, 没有烟黑)备受国内外关注. 但从实用角度看, HCCI 只适于低负荷运行(稀燃料燃烧, 从而产生较多的 CO). 这是因为这种

收稿日期: 2007-01-08; 修回日期: 2008-04-07

基金项目: 国家自然科学基金(10372099, 50376060)资助.

作者简介: 林博颖, 男, 1978年生, 博士生. 研究方向: 惰性多孔介质内的燃烧. E-mail: bylin@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 陈义良, 教授. E-mail: ylchen@ustc.edu.cn



实心符号:实验^[5] 虚线+空心符号:Curran^[3] 实线+空心符号:本文采用的 $C_7H_{16} + NO_x$ 混合机理

图 1 反射激波后正庚烷/空气的点火延迟期

Fig. 1 Ignition delay of n-heptane/air behind reflected shock wave

燃烧方式在高负荷时会产生很大的压升速率,造成很大的噪音;同时高负荷带来的高温也会产生较多的 NO_x . 另外,随着负荷范围加大,对着火和燃烧速率的控制也就更加困难. 鉴于此, Weclas 等^[1] 提出将惰性多孔介质(PIM)用于内燃机,有望解决柴油机和 HCCI 所面临的这些问题.

固体导热率大、辐射特性好,不会有局部的过冷或过热,所以多孔介质能消除局部淬熄产生的 CO、HC 和局部高温产生的 NO_x . 固体比热远大于气体,在内燃机工作循环中其温度不会有较大变化,点火阶段多孔介质对燃料的加热会缩短点火迟滞期,这一方面使内燃机的点火更容易控制,从而提高效率,另一方面使得更少的燃料在预混段(柴油机内燃烧分着火(延迟期)、预混燃烧和扩散燃烧三个阶段)燃烧,其结果是更低的噪音和更少的 NO_x 排放^[2].

本文用正庚烷液滴在多孔介质内的定容绝热燃烧来模拟这种内燃机的点火过程,分析点火延迟期、污染物排放和压升速率等问题.

1 正庚烷化学反应机理

本文用的是文献^[3]给出的正庚烷详细化学反应机理. 由于此机理不含氮,本文加入 Leeds 氮氧化机理^[4]来计算 NO_x 的生成情况. 整个机理一共 582 个组分,2 703 个基元反应.

图 1 是用本文机理算得的正庚烷点火延迟期和实验结果^[5]以及另一计算结果^[3]的比较. 图中 τ 为点火延迟期, ϕ 是燃料/空气当量比. 从图中可看出

本文混合机理很好地反映了正庚烷的点火延迟期,正庚烷氧化机理的可靠性并未因氮机理的加入而改变.

图 2 是对本文混合机理中氮机理部分的验证. 由于没找到合适的正庚烷火焰中 NO_x 浓度的实验结果,本文用的是甲烷的实验结果^[6]. 图中虚线是 $CH_4 + NO_x$ 详细机理的计算结果,实线是本文 $nC_7H_{16} + NO_x$ 混合机理的计算结果. 尽管本文混合机理计算的 NO_x 浓度和实验结果有一定偏差,但定性上仍很好地反映了 NO_x 浓度和温度的关系,这对本文的目的来说足够了.

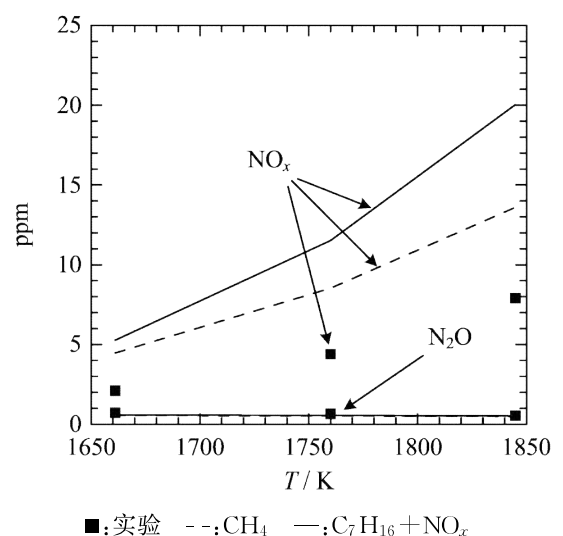


图 2 甲烷/空气在射流搅拌反应器中 NO_x 的浓度
Fig. 2 NO_x in CH_4 /air flame in Jet-Stirred Reactor

2 数学模型

液滴在多孔介质内的燃烧是十分复杂的过程,为便于数值模拟,作以下假定:所有物理量在空间上

均匀分布,包括液滴的分布和大小;液滴内部没有温度梯度;多孔介质内为均匀各向同性的黑体辐射场,气体是透明的;忽略液滴与多孔介质之间的接触传热;忽略临界和超临界蒸发的影响,只考虑亚临界蒸发.

液相质量的方程(液滴直径方程)

$$\frac{d(\varepsilon\langle\rho\rangle_l)}{dt} = -\dot{m}_f \quad (1)$$

式中, ε 是多孔介质的孔隙率; $\langle\rho\rangle_l \equiv n\rho_l(\pi d^3/6)$ 为单位流体体积内的液相质量; ρ_l 是液态正庚烷的材料密度; n 是流体相内的液滴数密度; d 是液滴直径; $\dot{m}_f = W_f h_m (C_{fs} - C_f) \cdot \pi d^2 \cdot n\varepsilon$ 是单位体积的蒸发速率, W_f 是正庚烷分子量, C_{fs} 是利用 Raoult 定律算出的液滴表面正庚烷摩尔浓度, C_f 是气相中正庚烷摩尔浓度, $h_m = 2\bar{D}_f/d^{[7]}$ 为对流传质系数, \bar{D}_f 为正庚烷在气相中的平均扩散系数.

组分质量分数方程

$$\varepsilon\rho_g \frac{dY_i}{dt} = \varepsilon\omega_i W_i - Y_i \dot{m}_f + \delta_{if} \dot{m}_f \quad (2)$$

式中, ρ_g 是气相混合物的密度; Y_i 为组分 i 的质量分数; ω_i 单位气相体积内组分 i 的摩尔生成速率; W_i 组分 i 的分子量. $\delta_{if} = 0, i \neq f; \delta_{if} = 1, i = f, f$ 代表燃料,即正庚烷.

液相能量方程

$$\varepsilon\langle\rho\rangle_l c_l \frac{dT_l}{dt} = \varepsilon n \cdot \pi d^2 \cdot \alpha\sigma(T_s^4 - T_l^4) + \gamma_{gl}(T_g - T_l) - \Delta H_v \dot{m}_f \quad (3)$$

式中, ΔH_v 是正庚烷的蒸发焓; c_l 是液态正庚烷的比热; α 为液滴对黑体辐射的平均吸收率; σ 为 Stephan-Boltzman 常数; T_s, T_l 和 T_g 分别为固相、液相和气相的温度; $\gamma_{gl} = \varepsilon n h_{gl} \pi d^2$ 是气液之间的体积换热系数; $h_{gl} = 2\bar{k}_g/d^{[7]}$ 为气液之间对流传热系数; \bar{k}_g 为气相混合物平均导热系数.

气相能量方程

$$\varepsilon\rho_g \bar{c}_{vg} \frac{dT_g}{dt} = - \sum_{k=1}^{KK} \varepsilon\omega_k \cdot W_k \cdot e_k + \gamma_{gs}(T_s - T_g) - \gamma_{gl}(T_g - T_l) + e_{vpr}(T_l)\dot{m}_f - e_g \dot{m}_f \quad (4)$$

式中, \bar{c}_{vg} 为气相平均比定容热容; KK 是组分总数; e_k 是组分 k 的比内能; e_g 是气相混合物平均比内

能; $e_{vpr}(T_l)$ 为正庚烷蒸气在温度为 T_l 时的比内能. $\gamma_{gs} = Nu_v \bar{k}_g / D^2$ 是气固之间的体积换热系数.采用多孔介质材料 SiC,努塞尔数的计算式采用 $Nu_v = CRe^m$ ^[8], $C = 0.187, m = 1.10, Re$ 为缸内湍流雷诺数.

固相能量方程

$$(1 - \varepsilon)\rho_s c_s \frac{dT_s}{dt} = -\gamma_{gs}(T_s - T_g) - \varepsilon n \cdot \pi d^2 \cdot \alpha\sigma(T_s^4 - T_l^4) \quad (5)$$

式中, ρ_s 是多孔介质的材料密度; c_s 是其比热; α 为液滴平均吸收率,其计算采用 Tseng 等^[9] 给出的公式和 Tuntomo A 等^[10] 给出的正庚烷折射率的实验数据.

另外还要用到理想气体状态方程.

3 计算结果

上述方程组是用 CHEMKIN III 软件包求解的.所需物性参数取自文献[8]、[11].

3.1 小液滴燃烧

为确定气相的初始温度和压力,假定气缸进口温度和压力分别为 350 K 和 0.1 MPa,经过绝热压缩到上止点时的温度和压力就取为本文算例计算点火过程时气相的初始温度和压力.表 1 给出了压比和温度、压力之间的对应关系.多孔介质初温取为 1 200 K,液滴初始温度取为 300 K,液滴初始直径为 4 μm .

图 3(a)是压比 $\lambda = 12$ 时不同当量比下的气相和固相温度曲线.线条+符号表示没有多孔介质参与的情况,其中最下面一条线由于其点火延迟期太长而没有完全在图中显示出来.图中有三点值得指出:

(I) 固相多孔介质的温度(T_s)变化非常小,这是因为固相的比热比气相的大得多,所以可以把多孔介质近似看作一个恒温热源.

(II) 有多孔介质时,气相温度在点火后下降得很快,气相的能量很快地传给了多孔介质.如果多孔介质腔体能够做到绝热,这对内燃机的效率不会有太大影响;但实际上由于材料的温度限制,冷却总是

表 1 压比与气相初始温度、压力之间的对应

Tab. 1 Compression ratios and the corresponding temperature and pressure

λ	5	8	10	12	15
$(T_0/\text{K}, p_0/\text{MPa})$	(652, 0.94)	(775, 1.79)	(838, 2.43)	(894, 3.10)	(965, 4.19)

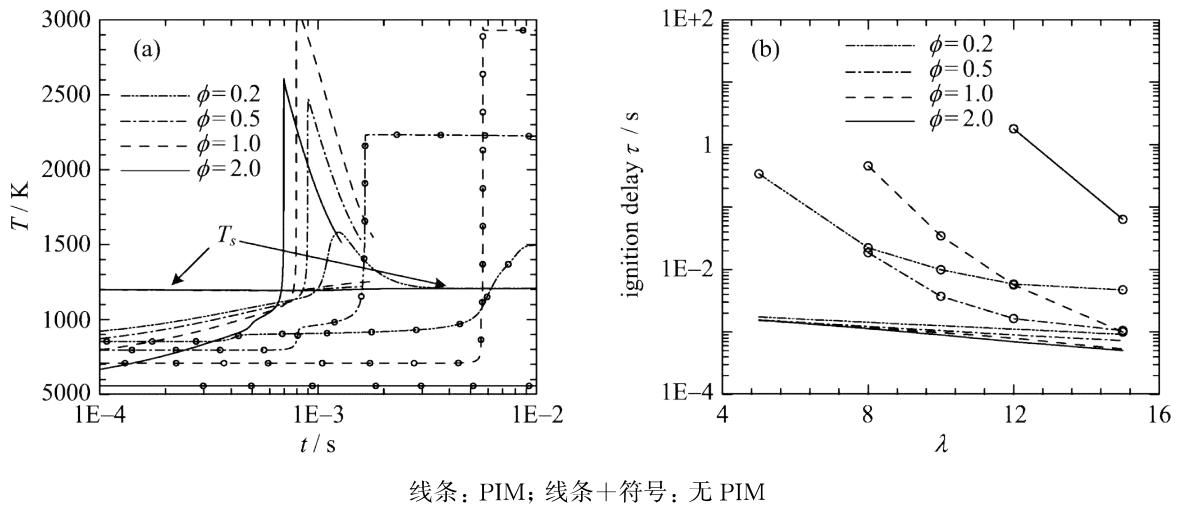
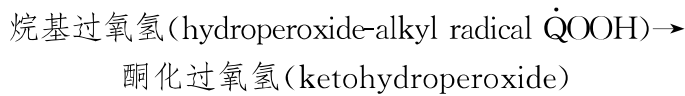


图 3 多孔介质内正庚烷液滴燃烧的气相和固相温度($\lambda=12$) (a) 与点火延迟期 (b)

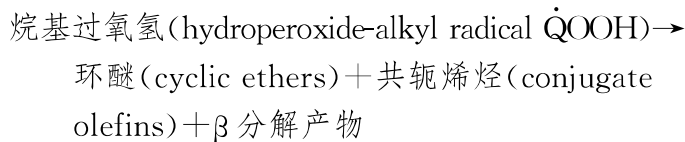
Fig. 3 Temperatures of gas and PIM for n-heptane drop combustion in PIM ($\lambda=12$) (a) and ignition delay (b)

必须的,所以如果大量的能量通过多孔介质传给了外界,那将会大大降低内燃机的效率。

(Ⅲ) 相比于无多孔介质的情况,多孔介质内的燃烧并没有二次点火现象.这可能是多孔介质的预热改变了正庚烷的低温化学反应途径,使其由原来的



变为



后者使得整个体系化学反应活性降低^[3],但由于固相对气相的持续加热,体系很快就达到了高温化学反应条件,使得点火过程比没有多孔介质时快很多。

点火控制是内燃机设计的关键技术,关系到燃油效率、污染控制等诸多方面.燃料的点火延迟期越短,点火控制就越容易.图 3(b)是在不同压比、不同当量比下液滴在有多孔介质和无多孔介质两种情况下点火延迟期的对比.这里点火延迟期取为初始时刻与温升速率最大时刻之时间差.可以看到有多孔介质的点火延迟期要比无多孔介质短一到两个量级左右,而且是随当量比单调递减,随工况(当量比、压比)的变化很小,这对于内燃机的点火控制是非常有利的。

内燃机排放的污染物主要有碳氢化合物(HC)、一氧化碳(CO)、氮氧化物(NO_x)和醛类(HCO).图 4 中纵轴是摩尔分数,横轴是用点火延

延迟期(τ)标定了的时间。

图 4(a)显示的是一氧化碳的摩尔分数,小图是 $t/\tau=1$ 附近的放大.图 4(b)是碳氢化合物.图 4(c)是醛类.对于富燃情况($\phi=2.0$),三者的摩尔分数都是相对较高的,多孔介质也不能同时减少这三者.因为燃料是过量的,而碳元素是守恒的,某一组分的减少必然导致另一组分的增加.对于贫燃和较低的初始温度、压力($\phi=0.2, \lambda=5$),也即较差的燃烧条件下,多孔介质对于减少这三类污染物的作用非常明显.从图中可看出 PIM 的存在使这三类污染物在着火点后比没有 PIM 时下降了好几个量级.这是因为有多孔介质存在时燃烧条件好,燃料燃烧完全.图 4(b)与(c)中,工况 $\phi=0.5, \lambda=8$ 时,HC 与 HCO 的摩尔分数在有多孔介质的工况下比无多孔介质时要高.这是由于气体与多孔介质换热,温度很快下降,致使化学反应速率变慢,所以 HC 和 HCO 浓度偏高;而无多孔介质时,气体在点火之后即维持绝热火焰温度不变,HC 和 HCO 很快被氧化,浓度较低。

图 4(d)是氮氧化物(NO, NO_2 和 N_2O)在着火点附近的变化.富燃($\phi=2.0$)时由于氧原子很少,热机理受到抑制,而快(prompt)机理的作用远小于热机理,所以氮氧化物浓度很低.在当量比为 1 时 NO_x 的浓度最高,因为这时温度也最高.总体的趋势是:刚过着火点后有多孔介质时 NO_x 浓度要高于没有 PIM 的情况,这是和气相温度相对应的;但随后很快 PIM 中 NO_x 的浓度就降到低于没有 PIM 的情况,这是因为气体和 PIM 之间的换热使气体的温度很快下降.工况 $\phi=0.2, \lambda=5$ 时, NO_x 的摩尔分数在有多孔介质的工况下比无多孔介质时

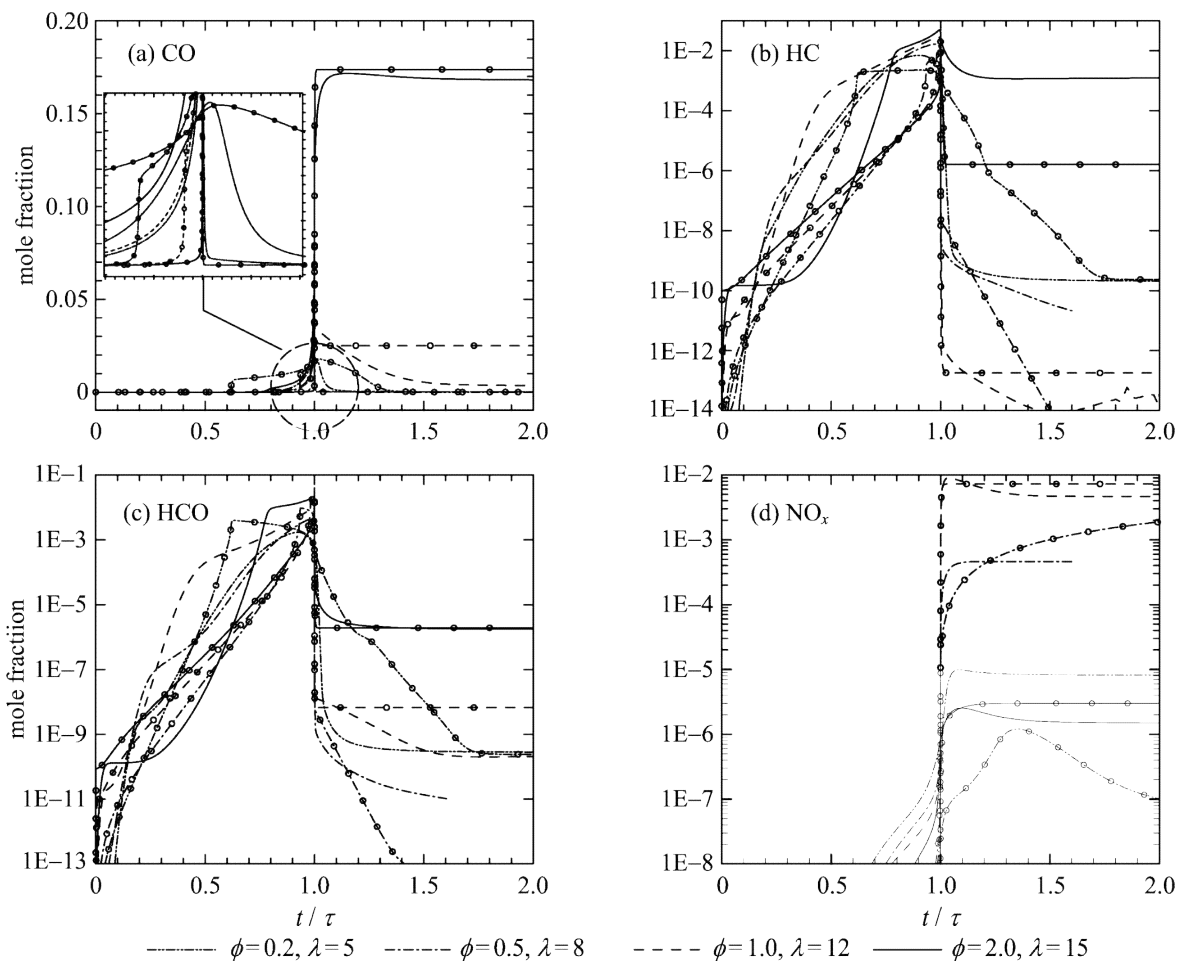


图 4 正庚烷液滴点火过程中的污染物生成情况

Fig. 4 Emissions of n-heptane droplet ignition

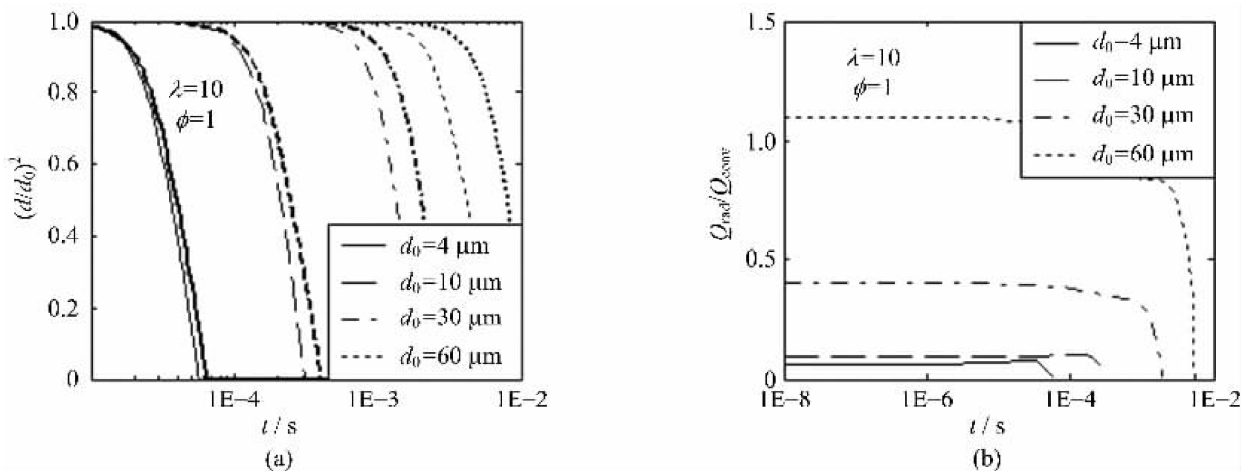
高. 这是因为此工况下, 无多孔介质时燃烧很不完全, 温度很低, NO_x 生成很少; 而有多孔介质时大大改善了燃烧条件, 反应较完全, 温度高, NO_x 相应较高.

3.2 较大液滴的燃烧

上面算例中液滴初始直径很小, 在点火前就完

全蒸发了. 要看预混段燃烧在整个燃烧过程中的比重则须用较大的液滴. 这里对于大液滴和小液滴区分的标准为: 在点火前就已完全蒸发的为小液滴, 点火时还未完全蒸发的为大液滴.

图 5(a) 是不同初始直径液滴的蒸发情况. 可看出多孔介质会显著加速大液滴的蒸发过程, 而对小



细线: PIM 粗线: 无 PIM

图 5 不同初始直径液滴的蒸发过程

Fig. 5 Vaporization of droplets with different initial diameters

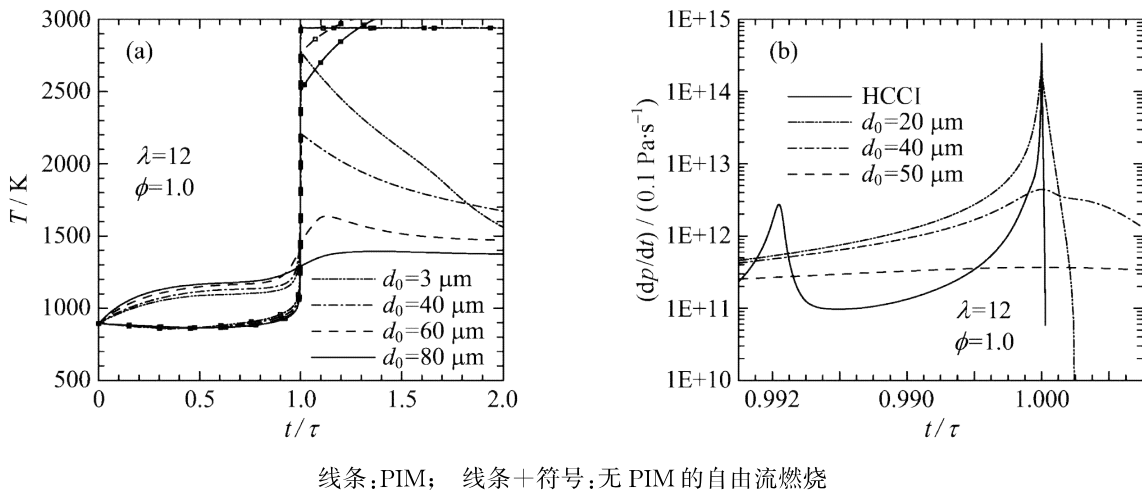


图 6 压比 $\lambda=12$ 当量比 $\phi=1.0$ 时不同初始直径液滴燃烧的气相温度和压升速率

Fig. 6 Gas phase temperature and rate of pressure rise for varying size drops at $\lambda=12$ and $\phi=1.0$

液滴的影响较小. 这是因为辐射换热在大液滴的蒸发过程中起了很大作用. 图 5(b) 是液滴与多孔介质之间的辐射换热和气液对流换热之比. 当 $d_0 = 60 \mu\text{m}$ 时辐射换热已经超过了对流换热, 但随着蒸发不断地进行, 液滴直径越来越小, 这个比值最后趋于零.

图 6 是气相温度和压升速率的变化情况. 图 6(a) 中随液滴初始直径变大, 多孔介质内的气相温度下降很多, 这是因为液滴越大扩散段燃烧所占比重越大(见后面图 7), 而扩散燃烧的放热率较低, 气固之间的换热导致气相温度降低. 图 6(b) 是不同初始直径时的压升速率及其与 HCCI 的对比. HCCI 是用最简单的单区模型来模拟的, 图中的两个峰值代表了二次点火过程. 当燃烧过程完全是预混燃烧时 ($d_0 = 20 \mu\text{m}$), 二者的压升速率峰值是差不多的, 随着液滴初始直径变大, 扩散段燃烧比重加大, 多孔介质内的压升速率峰值随之降低.

图 7 展示了多孔介质对预混段燃烧分数的影响, 以及与之相关的 NO_x 浓度和压升速率. 这里定义预混段燃烧分数为预混段燃烧在整个燃烧过程中的比重为点火时已蒸发的燃料分数, 即

$$R_{\text{premix}} \equiv 1 - \left(\frac{d_{\text{ig}}}{d_0}\right)^3 \quad (6)$$

d_0 为液滴初始直径, d_{ig} 为点火直径, 即温升速率最大时刻的液滴直径. 从图 7 可看出多孔介质的存在会显著降低预混燃烧比重. 而图 8 则显示了 NO_x 浓度和压升速率是和预混段燃烧分数有正相关关系的. $\text{NO}_{x,\text{ig}}$ 和 dp/dt_{ig} 分别为着火点时的 NO_x 和压升速率. 所以相比于传统柴油机, 多孔介质内燃机在点火过程中会产生较少的 NO_x 和噪音.

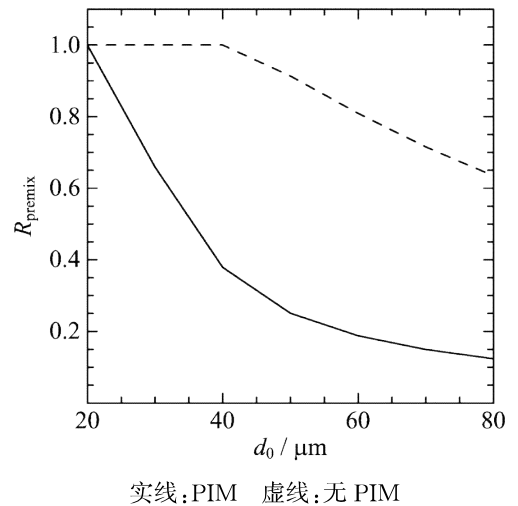


图 7 $\lambda=12, \phi=1.0$ 时不同初始直径液滴燃烧时预混段燃烧所占比例

Fig. 7 Relative magnitude of pre-mixed burning of varying size drops at $\lambda=12$ and $\phi=1.0$

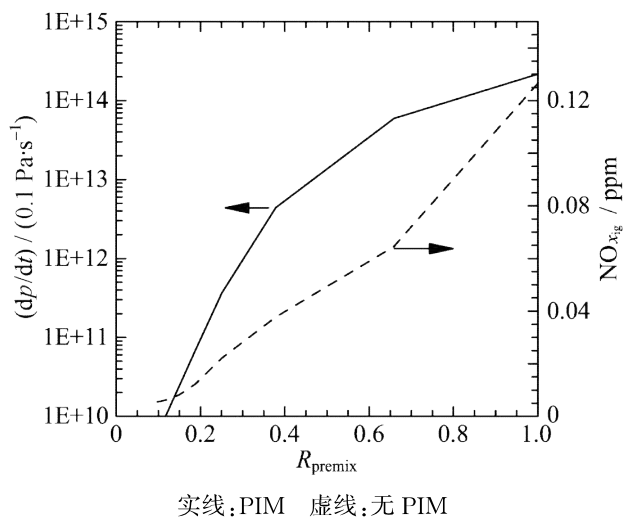


图 8 着火点时的压升速率、 NO_x 浓度和预混段燃烧分数之间的关系

Fig. 8 Relation between rate of pressure rise, NO_x concentration and relative magnitude of pre-mixed burning

4 结论

本文用零维模型和详细化学反应机理模拟了正庚烷液滴在惰性多孔介质内的点火过程. 通过分析计算结果得到以下结论:

(I) 正常工况下多孔介质可看作恒温热源. 多孔介质内燃机的点火延迟期会比传统柴油机显著缩短, 而且受工况影响很小, 有利于内燃机的点火控制.

(II) 相对常规内燃机内的燃烧, 多孔介质内燃机高负荷时 NO_x 浓度较低. 低负荷(贫燃、低压比)时碳氢化合物和一氧化碳等不完全燃烧产物浓度也较低.

(III) 能降低预混段燃烧比重, 从而降低压升速率和 NO_x 浓度, 具有克服 HCCI 和传统柴油机缺陷的潜力.

参考文献 (References)

- [1] Durst F, Weclas M. A new type of internal combustion engine based on the porous-medium combustion technique [J]. *Journal of Automobile Engineering*, IMechE, 2001, 215:63-81.
- [2] Mellor A M, Russell S C, Humer S, et al. Thermal ignition theory applied to diesel engine autoignition [J]. *International Journal of Engine Research*, 2004, 5(2): 193-204.
- [3] Curran H J, Gaffuri P, Pittz W J, et al. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation [J]. *Combustion and Flame*, 1998, 114: 149-177.
- [4] Combustion simulations [EB/ol]. [2002-02-15]. <http://www.chem.leeds.ac.uk/Combustion/Combustion.html>.
- [5] Ciezki H K, Adomeit G. Shock-tube investigation of self-ignition of n-heptane-air mixtures under engine relevant conditions [J]. *Combustion and Flame*, 1993, 93: 421-433.
- [6] Steele R C, Malte P C, Nicol D G, et al. NO_x and N_2O in lean-premixed jet-stirred flames [J]. *Combustion and Flame*, 1995, 100: 440.
- [7] Sazhin S S, Feng G, Heikal M R. Thermal ignition analysis of a monodisperse spray with radiation [J]. *Combustion and Flame*, 2001, 124: 684-701.
- [8] Fu X, Viskanta R, Gore J P. Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficients of cellular ceramics [J]. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 1998, 17: 285-293.
- [9] Tseng C C, Viskanta R. Effect of radiation absorption on fuel droplet evaporation [J]. *Combustion Science and Technology*, 2005, 177: 1 511-1 542.
- [10] Tuntomo A, Tien C L, Park S H. Optical constants of liquid hydrocarbon fuels [J]. *Combustion Science and Technology*, 1992, 84: 133-140.
- [11] Poling B E, Prausnitz J M, O'Connell J P. The properties of gases and liquids [M]. New York : McGraw-Hill, 2001.