

文章编号: 2095-560X (2016) 05-0399-05

微型内燃机工况下 C1–C4 烷烃着火延迟数值模拟*

张云路^{1,2,3,4}, 霍杰鹏^{1,3,4}, 蒋利桥^{1,3,4†}, 李星^{1,3,4}, 赵黛青^{1,3,4}

(1. 中国科学院广州能源研究所, 广州 510640; 2. 中国科学院大学, 北京 100049;

3. 中国科学院可再生能源重点实验室, 广州 510640; 4. 广东省新能源和可再生能源研究开发与应用重点实验室, 广州 510640)

摘要: 燃料着火延迟时间对采用蓄热自着火方式的微型内燃机非常重要。利用 Chemkin-Pro 软件, 分别对甲烷、乙烷、丙烷和正丁烷空气混合气在微型内燃机运行工况下进行着火延迟时间模拟计算, 探究初始温度 (500 K ~ 1 000 K)、压力 (1 ~ 10 atm) 和当量比 (0.6 ~ 1.2) 对着火延迟时间的影响。同时分析了微型内燃机扫气不尽的尾气残留组分 (N₂、CO₂ 和 H₂O) 对正丁烷着火延迟时间的影响。结果表明: 在四种燃料中, 正丁烷的低温着火延迟特性最佳, 是一种适合于采用蓄热自着火方式的微型内燃机燃料; 初始温度、压力的提高和当量比的增大有利于燃料着火延迟时间的缩短; 尾气残留使得燃料着火延迟时间变长, 着火延迟特性变差, 尾气各组分的热效应和基元反应对燃料着火延迟有着不同的影响机制。

关键词: 着火延迟时间; 微型内燃机; C1–C4 烷烃; 尾气残留

中图分类号: TK4

文献标志码: A

doi: 10.3969/j.issn.2095-560X.2016.05.010

Auto-Ignition Delay Time of C1–C4 Alkanes under Micro-Internal Combustion Engine Operative Conditions

ZHANG Yun-lu^{1,2,3,4}, HUO Jie-peng^{1,3,4}, JIANG Li-qiao^{1,3,4}, LI Xing^{1,3,4}, ZHAO Dai-qing^{1,3,4}

(1. Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. Key Laboratory of Renewable Energy, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China;

4. Guangdong Provincial Key Laboratory of New and Renewable Energy Research and Development, Guangzhou 510640, China)

Abstract: The ignition delay time is a crucial parameter in the glow plug ignition of micro-internal combustion engine (MICE). The effects of important operating parameters, such as the fuel species (methane, ethane, propane and n-butane), the initial temperature (500 K ~ 1 000 K), the initial pressure (1 ~ 10 atm) and equivalence ratio (0.6 ~ 1.2), on the ignition delay times were carried out via numerical simulation with Chemkin-Pro software. In addition, the effects of the residual exhaust gas caused by halfway scavenging on the ignition delay times of n-butane/air mixtures were investigated. The result shows that n-butane is a suitable fuel for MICE with glow plug ignition because of its short ignition delay time. Meanwhile, the ignition delay time decreases with the increase of the initial temperature, pressure and equivalence ratio. Moreover, the residual exhaust gas causes an increase of the ignition delay time of n-butane/air mixtures, and components of the exhaust have separated influence on the ignition delay time due to their different thermal and the chemical kinetic effects.

Key words: ignition delay time; micro-internal combustion engine; C1–C4 alkanes; residual exhaust

0 引 言

厘米特征尺度的微型内燃机具有质量轻、体积小、效率高和输出能的形式多样等优点, 可以作为微型供能系统灵活应用于不同的机电产品中^[1-3]。微

型内燃机工作原理具有间歇着火特性, 所以探究燃料着火特性及其着火方式是微型内燃机研制的关键技术之一。为了达到高的输出功率, 微型内燃机的设计运行频率较高。相比常规尺度的内燃机, 燃料在燃烧室的停留时间短, 因此对着火方式要求更高,

* 收稿日期: 2016-07-05 修订日期: 2016-08-27

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (2014CB239600); 国家自然科学基金 (51336010)

† 通信作者: 蒋利桥, E-mail: jianglq@ms.giec.ac.cn

同时也要求燃料具有较短的着火延迟时间。随着内燃机的微型化,传统内燃机的电火花着火控制系统由于体积庞大且消耗能量,实现控制精确的集成微型电火花着火系统困难,不利于内燃机系统的微型化。此外,由于微型内燃机泄漏、摩擦和散热的影响,纯压燃自燃着火也不易实现。采用蓄热辅助自热着火是一种比较适合于微型内燃机的着火方式,该着火方式结合了自燃和强制着火的优点,通过利用上一循环中燃烧产生的热量使得蓄热元件温度高于新鲜混合气自燃温度实现着火。辅助自热着火温度与燃料着火延迟密切相关,因此,掌握微型内燃机运行工况下燃料的着火延迟时间特性是研发适合微型内燃机的蓄热自热着火技术的基础。

决定微型内燃机内预混气着火延迟时间的主要因素包含燃料类别、混合气成分和着火时刻压力与温度等条件。从燃料能量密度和燃烧特性的角度出发,已研发的微型内燃机的燃料种类多样。如 FU 等^[4]研发的微型汪克尔发动机中使用了氢气作为燃料; DAHM 等^[1]研发输出功率为 20 W 的微型摆式内燃机,使用丁烷作为燃料; LIU 等^[5]在微型摆式内燃机燃烧室内的间歇着火和火焰传播特性实验研究中采用正丁烷; MIJIT 等^[6]在对微型摆式内燃机速度和燃烧过程温度收集和测试中分别使用氢气和甲烷; 郭志平等^[7]在二冲程微型摆式内燃机设计中则使用了汽油; 而常见的航模发动机大多使用甲醇作为燃料^[8]。

由于尺度的缩小,散热、摩擦和泄漏等的影响,导致微型内燃机压缩终时刻燃烧室内压力降低,微尺度下换热增强,导致预混气温度变化范围更广,因此,微型内燃机运行工况下着火时刻的压力与温度跟常规尺度内燃机存在较大差别。典型微型内燃机燃烧室内燃料着火时刻的温度范围一般在 500 K ~ 1 000 K,压力在 10 atm 以下,甚至 2 ~ 3 atm。目前主要的实验装置快压机和激波管均无法同时实现此工况下燃料着火延迟的实验测量,因此需要通过模拟得到。本研究利用数值模拟的方法,通过比较,考察上述温度和压力条件下甲烷、乙烷、丙烷和正丁烷四种燃料的着火延迟特性;同时模拟尾气中残留的 H₂O、CO₂ 和 N₂ 对正丁烷着火延迟的影响规律,期望能为燃料选择和改进微型内燃机着火方式提供参考。

1 计算模型

模拟采用软件 Chemkin-Pro^[9],利用其中的均质

零维反应器模型,反应条件为零维、均相、等容、绝热,并忽略壁面反应带来的影响。在设定的初始温度和压力条件下,燃料经过一个诱导期后链反应形成并完成着火过程。反应计算时间设置为 10 s,如果超过时间,认为未能实现着火。判定着火延迟时间 τ_i 的方法由于实验测量方法的不同可以有多种选择,本文以 OH 的峰值作为判定的依据,同时以温度梯度的最大值 $(dT/d\tau)_{\max}$ 作为辅助参考。模拟使用的化学反应动力学机理为 AramcoMech-1.3^[10],共包含有 346 种组分,1542 步详细的基元反应,该反应动力学模型机理在模拟低碳燃料氧化着火延迟特性时已经被大量可靠的基础燃烧数据所验证。

2 结果与讨论

2.1 燃料着火延迟基本特性

首先模拟了甲烷、乙烷、丙烷和正丁烷四种燃料分别与空气预混在当量比 $\phi = 1.0$ 、初始温度范围 $T = 500 \text{ K} \sim 1\,000 \text{ K}$ 、初始压力 $p = 5 \text{ atm}$ 下的着火延迟特性,空气中 O₂ 与 N₂ 的摩尔分数比为 $\chi(\text{O}_2) : \chi(\text{N}_2) = 1 : 3.76$,模拟结果如图 1 所示。在计算温度和压力条件下,甲烷、乙烷、丙烷和正丁烷的着火延迟时间依次缩短;正丁烷的最低着火温度值最小;随温度的降低,丙烷和正丁烷的着火延迟时间在低温段出现随温度上升,着火延迟时间先降低后升高的负温度效应(negative temperature coefficient, NTC),其中丙烷出现 NTC 温度是在 675 K 左右,丁烷是在 725 K 左右。在 NTC 温度区间之外的温度段,反应基元 HO₂ 对燃料的影响逐渐变大,反应 $\text{RH} + \text{HO}_2 = \text{sR} + \text{H}_2\text{O}_2$ 对燃料 H 的剥离以及 $\text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{OH}$ 对

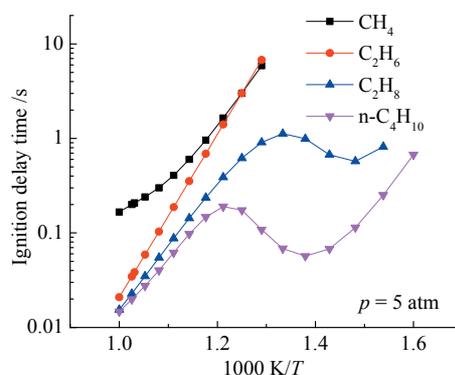


图 1 甲烷、乙烷、丙烷和正丁烷分别与空气预混后的着火延迟特性 ($\phi = 1.0$, $T = 500 \text{ K} \sim 1\,000 \text{ K}$, $p = 5 \text{ atm}$)

Fig. 1 Ignition delay times of methane, ethane, propane or n-butane/air mixtures under the initial condition: $\phi = 1.0$, $T = 500 \text{ K} \sim 1\,000 \text{ K}$, $p = 5 \text{ atm}$

火过程有促进作用^[11-12]；在 NTC 的温度区段，烷烃燃料脱氢生成了烷基 R，通过低温加氧歧化反应 $R+O_2=RO_2$ 以及反应 $RO_2=alkene+HO_2$ 导致 NTC 效应的产生^[13]。

总体来看，正丁烷的着火延迟时间最短，着火温度最低，有利于在微型内燃机实现快速、间歇热着火。

2.2 初始压力对正丁烷着火延迟的影响

在当量比 $\Phi = 1.0$ ，初始压力分别为 1 atm、2 atm、5 atm 和 10 atm，正丁烷着火延迟时间随压力的变化如图 2 所示。初始压力的升高有利于燃料着火延迟时间缩短。随压力增大，正丁烷的着火延迟时间将显著缩短；正丁烷的负温度效应减弱，且负温度效应所在温度区间向高温方向移动。可以看出，压力的增大导致反应速率加快，着火延迟时间因此缩短。

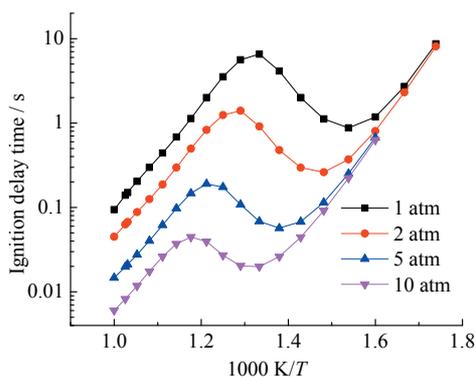


图 2 初始压力对正丁烷与空气预混气着火延迟特性的影响 ($\Phi = 1.0$, $T = 500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$, $p = 1, 2, 5, 10\text{ atm}$)

Fig. 2 Ignition delay times of n-butane/air mixtures under the initial condition: $\Phi = 1.0$; $T = 500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$; $p = 1, 2, 5, 10\text{ atm}$

2.3 当量比对正丁烷着火延迟的影响

在 $p = 5\text{ atm}$ ，初始温度 $T = 500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$ 时，图 3 是当量比 $\Phi = 0.6, 1.0$ 和 1.2 下正丁烷/空气的着火延迟特性的模拟结果。初始温度为 $500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$ 时，随着当量比的增加，正丁烷/空气预混气的着火延迟缩短，当量比对 NTC 效应温度区间的着火延迟影响明显，随着温度的升高，三条曲线之间的距离变小，说明当量比对着火延迟时间的影响降低。因此适当增加正丁烷/空气的当量比有利于在微型内燃机内实现快速、间歇热着火。

在模拟温度下，反应主要从燃料侧的链反应开始，燃料反应链产生的自由基主导了反应的进行，因此富燃有利于降低着火延迟时间；而随着温度的

升高， $H+O_2$ 反应的影响逐渐增大，燃料侧自由基的主导性减弱，因此随着温度的升高，当量比对燃料着火延迟时间的影响降低^[11,14]。

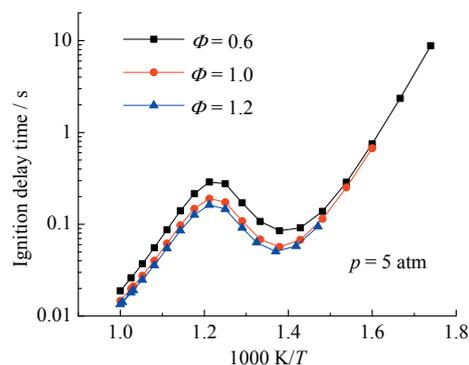


图 3 当量比对正丁烷与空气预混气着火延迟特性的影响 ($\Phi = 0.6, 1.0, 1.2$, $T = 500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$, $p = 5\text{ atm}$)

Fig. 3 Ignition delay times of n-butane/air mixtures under the initial condition: $\Phi = 0.6, 1.0, 1.2$; $T = 500\text{ K} \sim 1\ 000\text{ K}$; $p = 5\text{ atm}$

2.4 残留尾气对正丁烷着火延迟的影响

微型内燃机在排气过程中残留的尾气会导致燃料/空气预混气的进气量减少，同时尾气掺混改变了反应开始前的燃料浓度。模拟中假设整个腔室内残留了 0~30% 的尾气，尾气的主要成分为 CO_2 、 H_2O 和 N_2 ；为了简化分析，假设尾气残留物的组分是单一的，正丁烷与空气以当量比为 1 预混后跟 CO_2 、 H_2O 或 N_2 按照一定的比例混合均匀。初始温度为 700 K ，压力为 5 atm 。三种尾气残留物对着火延迟的影响结果如图 4 所示。尾气掺混导致了正丁烷/空气的着火延迟时间变长，随着各尾气组分 ($CO_2/N_2/H_2O$) 浓度的增加，着火延迟时间变长；相同尾气组分浓度下 CO_2 导致着火延迟时间增长最大，其次为 N_2 ，最后为 H_2O 。

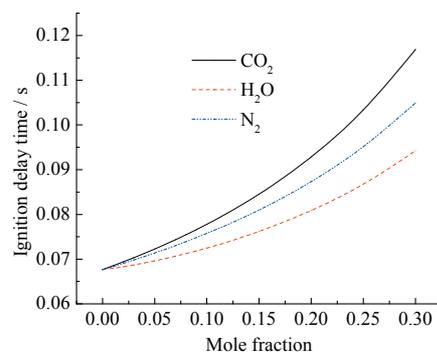


图 4 正丁烷-空气-尾气组分 ($CO_2/H_2O/N_2$) 预混着火延迟特性 ($\Phi = 1.0$, $T = 700\text{ K}$, $p = 5\text{ atm}$)

Fig. 4 Ignition delay times of n-butane/air/exhaust component ($CO_2/H_2O/N_2$) mixtures under the initial condition $\Phi = 1.0$, $T = 700\text{ K}$, $p = 5\text{ atm}$

着火延迟时间方程的基本形式为^[12]:

$$\tau_i = A[\text{FUEL}]^x [\text{AIR}]^y \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (1)$$

其中, τ_i 表示着火延迟时间, [FUEL]和[AIR]分别表示燃料和空气的浓度, E 、 A 、 x 和 y 为常数。从公式中可以看出, 着火延迟会受到温度、燃料和空气浓度等的影响。因此, 浓度降低会导致着火延迟时间的增加, 尾气残留会导致燃料和空气的浓度同时下降, 进而降低总体燃烧反应的速率, 使得着火延迟时间变长。

除了浓度稀释的负面影响外, 即使在相同的尾气浓度下, 不同尾气气体组分对着火延迟时间的影响也存在差别, 差别产生的原因主要有两个^[16]:

(1) 由于尾气各组分的摩尔比热容不同, 导致混合气温度上升速率和最高绝热温度不同, 着火延迟时间不同, 这种现象称为气体的热效应;

(2) CO_2 和 H_2O 均参与了着火过程中的化学基元反应, 因此基元反应也是影响着火延迟的重要因素之一。

从热效应的角度出发进行分析。以 N_2 作为参考, 分析 CO_2 和 H_2O 对正丁烷着火延迟时间的影响。从图 4 可看出, 相比较 N_2 , 相同横坐标 (尾气各组分摩尔浓度相同) 时, CO_2 会导致着火延迟时间相对变长, H_2O 则会使得该浓度下的着火延迟时间相

对缩短。图 5 为三种尾气组分的摩尔比热容与温度的关系, $c_p(\text{N}_2) < c_p(\text{H}_2\text{O}) < c_p(\text{CO}_2)$, CO_2 导致混合气体的总体平均摩尔比热容变大, 气体升温吸收热量更多, 进而使反应速率下降, 着火延迟时间因此变长。

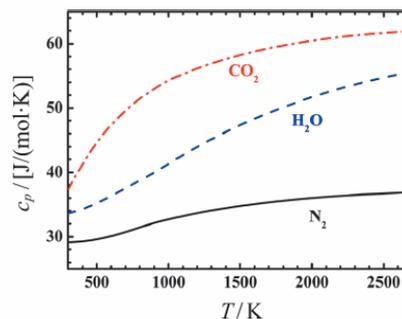


图 5 N_2 、 CO_2 和 H_2O 在不同温度下的摩尔比热容^[16]

Fig. 5 Specific heat capacity of N_2 , CO_2 , and H_2O under different temperatures

基元反应也是影响着火延迟的重要因素。本文选择尾气各个组分浓度为 30% 作为初始条件, 通过对基元反应进行敏感性分析找到 H_2O 和 CO_2 影响着火延迟的主要反应。敏感性分析的计算公式为^[17]:

$$R_s = \frac{\tau_i(2k_i) - \tau_i(0.5k_i)}{1.5\tau_i(k_i)} \quad (2)$$

式中, k_i 表示基元反应 i 的反应速率。

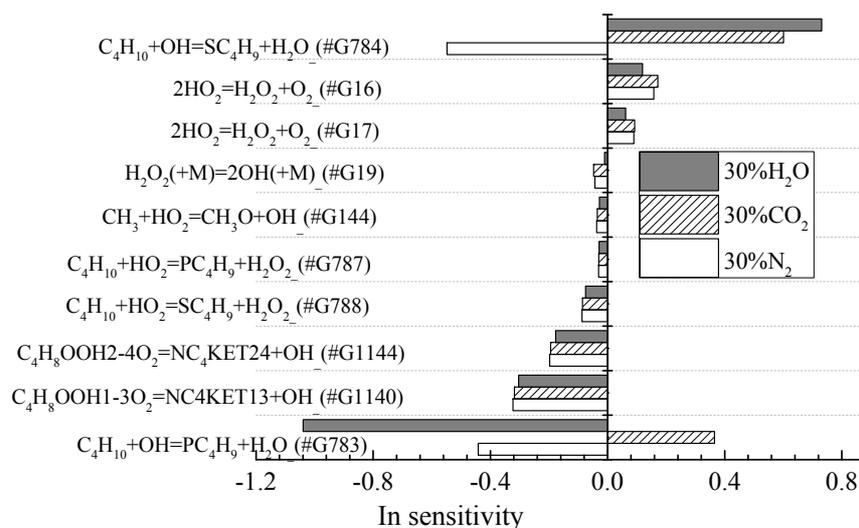
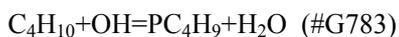


图 6 不同尾气组分对正丁烷着火延迟影响的敏感性分析 ($\Phi = 1.0$, $T = 700 \text{ K}$, $p = 5 \text{ atm}$)

Fig. 6 Sensitivity coefficients showing the effects of exhaust component on n-butane ignition delay times, $\Phi = 1.0$, $T = 700 \text{ K}$, $p = 5 \text{ atm}$

分析结果如图 6 所示。可以看出, 在 700 K 下, 与氧气侧的小分子反应相比较, 正丁烷燃料侧的链

反应对着火延迟的影响更大, 其中尾气不同组分对基元反应影响最为明显的反应为:



其中, #G783 对 H_2O 初始浓度的增加敏感, 并且明显地促进了着火延迟时间的缩短, 而#G783 和#G784 共同导致了掺混 CO_2 使得着火延迟时间延长。

综上所述, 尾气的存在“冲淡”了燃料和空气, 导致其浓度下降, 着火延迟时间变长; CO_2 的热效应以及对基元反应的影响导致其着火延迟时间相比 N_2 进一步增长; 而 H_2O 对基元反应的促进是导致其着火延迟时间相对缩短的主要因素。

3 结 论

微型内燃机内着火前预混气温度和压力低于传统内燃机, 同时扫气不完全导致尾气掺混在预混气中, 通过对微型内燃机运行工况下不同燃料的着火延迟特性模拟可以得出以下结论:

(1) 甲烷、乙烷、丙烷、正丁烷四种燃料中, 正丁烷是着火延迟时间最短的燃料, 是适合蓄热自燃着火方式的微型内燃机的燃料。同时, 温度和压力的升高, 当量比的增大均有利于燃料着火延迟时间的缩短。

(2) 残留的尾气成分会导致燃料着火延迟时间变长, 尾气浓度越高, 燃料着火延迟时间越长。相同摩尔浓度的尾气各组分中 CO_2 对着火延迟时间的增长影响最大, 其次是 N_2 , 最后是 H_2O 。 CO_2 的热效应显著, 吸热多导致基元反应的总体反应速率下降, 同时抑制了部分重要的燃料链反应, 导致总体的着火延迟时间增加; H_2O 对基元反应#G783 的影响明显, 促进了初始阶段正丁烷的分解和燃烧反应, 缩短了着火延迟时间。

参考文献:

- [1] DAHM W J A, NI J, MIJIT K, et al. Micro internal combustion swing engine (MICSE) for portable power generation systems[C]//DAHM W, UNIV M, ARBOR A. 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Aerospace Sciences Meetings. Reno, NV, U.S.A: AIAA, 2001, 1050: 48109-2140. DOI: 10.2514/6.2002-722.
- [2] JU Y, MARUTA K. Microscale combustion: technology development and fundamental research[J]. Progress in energy and combustion science, 2011, 37(6): 669-715. DOI: 10.1016/j.peccs.2011.03.001
- [3] 曹海亮. 微尺度燃烧特性及微能源系统的研制[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2006.
- [4] FU K, KNOBLOCH A J, MARTINEZ F C, et al. Design and fabrication of a silicon-based MEMS rotary engine[C]//Proceedings of ASME 2011 International

- Mechanical Engineering Congress and Exposition. Denver, Colorado, USA: ASME, 2001: 875-880.
- [5] LIU Q F, JIANG L Q, YANG W B, et al. Experimental study of flame propagation in single chamber of MICSE[C]//Proceedings of the 10th Asia-Pacific Conference on Combustion, ASPACC 2015. Beijing, China: ASPACC, 2015.
- [6] MIJIT K. Design, analysis, and experimentation of a micro internal combustion swing engine[M]. Ann Arbor, US: University of Michigan, 2000.
- [7] 郭志平, 张仕民. 新型二冲程微型摆式内燃机的设计方法[M]. 北京: 国防工业出版社, 2013.
- [8] POMPA J, KARNANI S, DUNN-RANKIN D. Performance characterization and combustion analysis of a centimeter-scale internal combustion engine[J]. Journal of aeronautics, astronautics and aviation. series a, 2008, 40(4): 205-216.
- [9] DESIGN R. Chemkin-Pro 15101[CP]. San Diego, CA: Reaction Design, 2010.
- [10] METCALFE W K, BURKE S M, AHMED S S, et al. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C_1 - C_2 hydrocarbon and oxygenated fuels[J]. International journal of chemical kinetics, 2013, 45(10): 638-675. DOI: 10.1002/kin.20802.
- [11] HEALY D, DONATO N S, AUL C J, et al. *n*-Butane: Ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations[J]. Combustion and flame, 2010, 157(8): 1526-1539. DOI:10.1016/j.combustflame.2010.01.016.
- [12] SABIA P, DE JOANNON M, LAVADERA M L, et al. Autoignition delay times of propane mixtures under MILD conditions at atmospheric pressure[J]. Combustion and flame, 2014, 161(12): 3022-3030. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.06.006
- [13] DE SAIN J D, KLIPPENSTEIN S J, MILLER J A, et al. Measurements, theory, and modeling of OH formation in ethyl+ O_2 and propyl+ O_2 reactions[J]. The journal of physical chemistry a, 2003, 107(22): 4415-4427. DOI: 10.1021/jp0221946.
- [14] HEALY D, KOPP M M, POLLEY N L, et al. Methane/*n*-butane ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations[J]. Energy & fuels, 2010, 24(3): 1617-1627. DOI: 10.1021/ef901292j.
- [15] SABIA P, LAVADERA M L, GIUDICIANNI P, et al. CO_2 and H_2O effect on propane auto-ignition delay times under mild combustion operative conditions[J]. Combustion and flame, 2015, 162(3): 533-543. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.08.009
- [16] WANG L, LIU Z H, CHEN S, et al. Physical and chemical effects of CO_2 and H_2O additives on counterflow diffusion flame burning methane[J]. Energy & fuels, 2013, 27(12): 7602-7611. DOI: 10.1021/ef401559r.
- [17] ZHANG Y J, HUANG Z H, WEI L J, et al. Experimental and modeling study on ignition delays of lean mixtures of methane, hydrogen, oxygen, and argon at elevated pressures[J]. Combustion and flame, 2012, 159(3): 918-931. DOI: 10.1016/j.combustflame.2011.09.010

作者简介:

张云路 (1991-), 女, 硕士研究生, 从事微尺度燃烧研究。

蒋利桥 (1974-), 男, 博士, 研究员, 硕士生导师, 主要从事微尺度燃烧、基于燃烧的微型能源动力系统、含氧替代燃料燃烧、燃烧新概念及其技术等研究。