

## 生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气内的着火及 反应区扩展特性研究

张磊, 赵潇楠, 陈宁

(中国石油大学(北京)机械与储运工程学院, 北京 102249)

**摘要:** 基于生物柴油真实组分构建其燃烧反应机理, 并与正丁醇燃烧反应机理整合, 获得了一个包括 218 个组分和 856 个反应的联合燃烧反应机理, 用于模拟研究两种燃料组合应用于内燃机先进燃烧方式的基本特征. 利用实验数据对所得联合反应机理进行了验证并将其与大涡模拟模型进行整合, 用于模拟研究生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气的着火及燃烧过程. 基于恒定容积燃烧室的实验数据, 对所得燃烧模型的准确性进行了充分的验证. 利用改进后的燃烧模型, 模拟研究了不同预混氧气浓度、缸内初始温度等参数对着火及反应区扩展特性的影响, 并且获得了碳烟、氮氧化物等主要污染物的排放特性.

**关键词:** 生物柴油; 先进燃烧方式; 正丁醇; 着火及反应区扩展

中图分类号: TK16

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2025)03-0286-11

## Numerical Study on Ignition and Reaction Zone Expansion Characteristics of Biodiesel Injected into n-Butanol-Air Premixed Mixture

Zhang Lei, Zhao Xiaonan, Chen Ning

(College of Mechanical and Transportation Engineering, China University of Petroleum, Beijing 102249, China)

**Abstract:** Based on the real composition of biodiesel, a combustion reaction mechanism is constructed and integrated with the combustion reaction mechanism of n-butanol, resulting in a joint combustion reaction mechanism consisting of 218 species and 856 reactions. This mechanism is employed to simulate the fundamental characteristics of two fuel combinations applied in advanced combustion modes for internal combustion engines. Experimental data are utilized to validate the obtained joint reaction mechanism. The mechanism is integrated with a large eddy simulation model and used to simulate the ignition and combustion processes of biodiesel injected into n-butanol-air premixed mixture. Based on the experimental data from a constant volume combustion chamber, the accuracy of the resulting combustion model is comprehensively validated. Using the combustion model, the present study simulates the effects of different pre-mixed oxygen concentrations, initial cylinder temperatures, and other parameters on the ignition and reaction zone expansion characteristics. Additionally, the emission characteristics of major pollutants such as soot and nitrogen oxides are also obtained.

**Keywords:** biodiesel; advanced combustion methods; n-butanol; ignition and reaction zone expansion

收稿日期: 2024-04-11.

作者简介: 张磊(1983—), 男, 博士, 副教授.

通信作者: 张磊, zlei@cup.edu.cn.

“碳中和”背景下,内燃机基于高效、清洁的先进燃烧模式以及净零碳排放的可再生燃油是其持续得到应用和发展的必要条件<sup>[1-2]</sup>。传统柴油机因直喷压燃的工作方式而具有较高的热效率,但是其本质的氮氧化物和碳烟平衡问题往往需要后处理装置来解决,通常会增加运营成本及燃油消耗。在缸内减排技术方面,均质充量压燃(HCCI)模式因其相对低温、低当量比的均匀预混压缩引燃的燃烧过程,既能实现氮氧化物( $\text{NO}_x$ )和碳颗粒的同步减排,也能降低缸内外温差造成的热损失,进而达到与柴油机直喷压燃模式相当的热效率,是内燃机燃烧技术发展的基本方向。然而,理想的HCCI模式不具备控制混合气着火及燃烧相位的有效机制,高载荷工况下易造成热释放率和压力的过快增长,进而导致严重的压力振荡(oscillation)和燃烧噪音(ringing),以至于稳定运行载荷范围较为狭窄,难以可靠地付诸实际应用。此外,HCCI模式相对低温的整体燃烧过程会造成燃油的氧化不足,造成较高的一氧化碳和未燃烧碳氢化合物排放<sup>[3]</sup>。

为了加强对HCCI着火及燃烧过程的控制,陆续发展出多种HCCI模式,基于不同策略构造燃油-空气的非均匀预混合气,利用主要燃烧参数的分层(梯度)实现混合气的序贯着火。反应活性控制压燃(RCCI)则是由进气道喷入低反应活性燃油并预先形成较为均匀的缸内混合气,接着在压缩行程直接喷入高反应活性燃油,从而在着火前形成介于两种燃油之间的平均反应活性以及反应活性在燃烧室内的分层<sup>[4]</sup>。实验结果表明,RCCI模式所形成反应活性分层可以在不同工况下保持相对稳定的燃烧相位(CA50),从而有效控制发动机在高载荷工况下的热释放速率,稳定运行载荷范围得到了一定的扩展,其相对低的缸内温度可以使RCCI实现超过50%的指示热效率。基于透明气缸的可视化实验则基本揭示了RCCI的着火及反应区的扩展过程,表明缸内反应活性较高的区域会率先出现离散的着火团,反应区此后朝向反应活性减小的方向扩展并发生融合,反应活性分层相对于当量比或温度的分层对于控制燃烧过程有更为关键的作用<sup>[5-6]</sup>。

由内燃机先进燃烧模式的发展规律可以看到,基于两种甚至更多种有明显反应活性差异的燃油,通过恰当构建缸内混合气的反应活性、当量比及温度分层,来加强对混合气着火及燃烧过程的控制,从而提升热效率、降低主要污染物的排放并有效控制高载荷工况下的热释放率和压力振荡,是内燃机先进燃烧模式的必然发展趋势。RCCI作为当前最为复杂的主流

类HCCI燃烧模式,采用低反应活性燃油进气道喷油的方案,形成的缸内的充分预混合气会导致缸壁处较高的燃油浓度以及活塞-气缸间隙内燃油组分的残留,因而易造成较高的一氧化碳和未燃烧碳氢化合物的排放。此外,现有基于柴油和汽油的RCCI实验表明,高载荷工况下对压力振荡的控制仍有较大局限性,一氧化碳和未燃烧碳氢化合物的排放仍较高,需要从燃油特性、混合气制备、喷油方案等方面改进混合气的分层状态。由此可见,在现有RCCI工作的基础上,仍应持续探索改进类HCCI燃烧模式,通过构建更为复杂的混合气分层结构,从根本上拓展能够稳定运行的高载荷工况,降低一氧化碳和未燃烧碳氢化合物的排放<sup>[7-8]</sup>。

现有针对类HCCI燃烧模式的实验或模拟研究工作大多局限于传统的柴油-汽油组合或正庚烷-异辛烷参考燃油组合作为高、低反应活性燃油,而含氧燃油有很大潜力改进类HCCI燃烧模式的整体性能和污染物排放特性。此外,为了促进内燃机的低碳甚至净零碳排放,关键在于使用不含碳元素的燃油或者具备“全生命周期净零碳排放”特征的可再生含氧燃油<sup>[9]</sup>。生物柴油是以植物油或动物脂肪为原料,所含多种脂肪酸在碱类催化剂的作用下与甲醇发生酯交换反应,形成的以脂肪酸甲酯为主要组分的混合燃油。由其主要组分的长碳链分子结构所决定,生物柴油具备近似或稍高于柴油的十六烷值(CN值45~65)及自燃特性,长期以来是最具潜力完全替代柴油的可再生燃油。正丁醇同样是有巨大潜力应用于内燃机的“净零碳”可再生醇类燃料,不仅相对于甲醇和乙醇具有更高的热值和十六烷值,而且挥发性相对较小,极性低易与柴油混合,因而常作为乙醇替代燃料在压燃发动机中与柴油混合使用。此外,正丁醇具有比汽油更高的蒸发潜热,有利于降低燃烧温度,进而减少 $\text{NO}_x$ 的生成<sup>[10-11]</sup>。关于生物柴油和丁醇的混合使用,Liu等<sup>[12]</sup>通过实验和模拟对正丁醇-生物柴油双燃料发动机的燃烧和排放特性进行了研究,正丁醇由进气道喷入并形成预混合气,而生物柴油则直接喷入气缸。该工作重点研究了不同预混比和EGR率的影响,表明可以通过生物柴油喷射正时来控制燃烧相位,增加正丁醇预混比也可以延缓燃烧相位,同时降低缸内压力及其上升速率。Zhao等<sup>[13]</sup>利用实验比较了正丁醇和生物柴油应用于直接混合、RCCI和智能充量压缩点火(ICCI)燃烧模式的燃烧和排放特性。研究表明在低负荷时由于初始缸内条件更好,二者直接混合具有较高的热释放率和缸内压力,表现出比RCCI和ICCI更好的燃烧特性,然而高负荷时

RCCI 和 ICCI 表现出更高的热效率和燃烧稳定性. Zheng 等<sup>[14]</sup>研究了正丁醇、乙醇和 2, 5-dimethylfuran 分别作为低反应活性燃料, 生物柴油作为高反应活性燃料的 RCCI 燃烧, 发现在特定条件下正丁醇会展现出更好的性能, 比其他 RCCI 具有更高的热效率, 但是受到最大压力上升速率的限制, 正丁醇的预混比不能过高.

现有关于生物柴油和正丁醇组合应用于内燃机先进燃烧方式的研究大多基于实际柴油机模型进行实验或模拟, 仅有较少的研究工作着重揭示缸内的基础燃烧过程, 尤其在定量揭示微观的着火及反应区扩展特性方面还有所欠缺. 在相关生物柴油的模拟研究方面, 现有工作大多以正庚烷、癸酸甲酯(MD)、癸烯酸甲酯(MD9D)等短链组分作为替代物构建反应机理, 与生物柴油真实组分的特性有较大的差异. 因此, 本文首先基于生物柴油真实组分构建燃烧反应机理, 从而能够充分地考虑生物柴油本质的多组分属性对其燃烧特性的影响并实现较高的计算精度. 其次, 将生物柴油机理与正丁醇反应机理进行整合并验证所得生物柴油-正丁醇联合反应机理的可靠性, 从而能够用于模拟研究生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气的着火及火焰区扩展特征, 并且定量分析主要污染物的生成特性.

## 1 模型和验证

### 1.1 燃烧反应机理

现有关于生物柴油喷雾燃烧数值模拟的研究工作中, 所用生物柴油燃烧反应机理多使用短链化合物如正庚烷( $n-C_7H_{16}$ )、癸酸甲酯(MD)、癸烯酸甲酯(MD9D)等替代物组分构建, 但是以植物油为原料制成的生物柴油主要成分是 5 种长链甲基酯, 即: 棕榈酸甲酯(MHD)、硬脂酸甲酯(MOD)、油酸甲酯(MOD9D)、亚油酸甲酯(MOD9D12D)和亚麻酸甲酯(MOD9D12D15D). 上述替代物与原本的长链甲基酯物理与化学性质仍然存在着明显的差异, 因此本文使用了基于真实组分的生物柴油机理进行研究, 所用的生物柴油主要组分比例如表 1 所示. 本文基于 Zhang 等<sup>[15]</sup>提出的真实组分生物柴油简化机理和 Mario 等<sup>[16]</sup>提出的正丁醇详细机理, 将二者合并成为生物柴油-正丁醇联合反应机理, 总计包含 218 个组分和 856 个反应. 为了验证所得联合反应机理的准确性, 本文首先基于着火延迟对机理进行验证, 结果如图 1 与图 2 所示. 可以看到, 对于油酸甲酯以及正丁醇, 在大部分所选工况下, 利用所建立的反应机理

计算得到的着火延迟时间可以与实验值较好地吻合.

表 1 典型生物柴油的组成

Tab.1 Composition of typical biodiesel

组分名称	英文名称	化学式	质量百分比/%
棕榈酸甲酯	Methyl Palmate	$C_{17}H_{34}O_2$	11.0
硬脂酸甲酯	Methyl Stearate	$C_{19}H_{38}O_2$	4.0
油酸甲酯	Methyl Oleate	$C_{19}H_{36}O_2$	25.0
亚油酸甲酯	Methyl Linoleate	$C_{19}H_{34}O_2$	53.0
亚麻酸甲酯	Methyl Linolenate	$C_{19}H_{32}O_2$	7.0

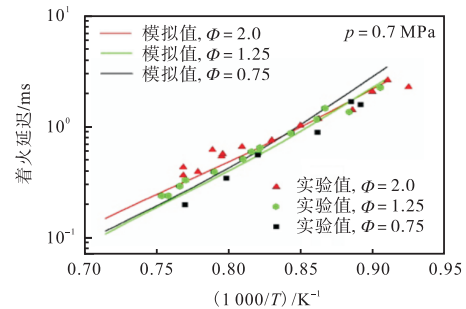


图 1 油酸甲酯在不同当量比下的着火延迟验证  
Fig.1 Ignition delay of MOD9D under different equivalence ratios

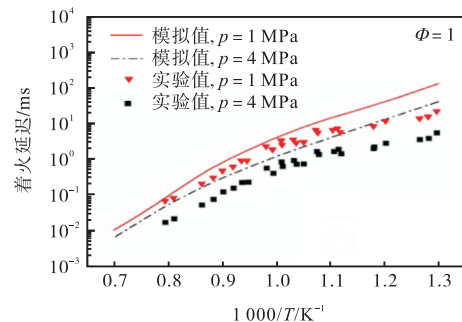


图 2 正丁醇在不同压力条件下的着火延迟验证  
Fig.2 Ignition delay of n-butanol under different pressures

### 1.2 数值计算模型及验证

本文的模拟研究工作全部基于 KIVA-4 程序完成. 计算模型以 Nerva 等<sup>[17]</sup>所开展的边长为 108 mm 的立方体定容燃烧室实验为基础. 为更加符合真实气缸的几何形状, 本文将原实验中的立方体结构的定容燃烧室修正为直径和高度均为 108 mm 的圆柱形定容燃烧室, 修正后的模型和网格如图 3 所示.

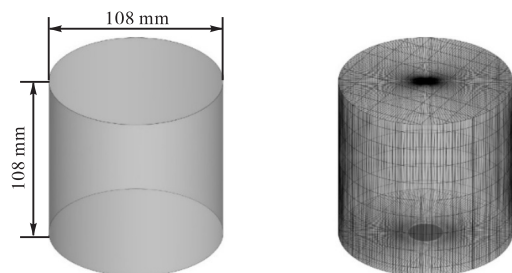


图 3 恒定容积气缸的计算模型及网格  
Fig.3 Combustor geometry and mesh

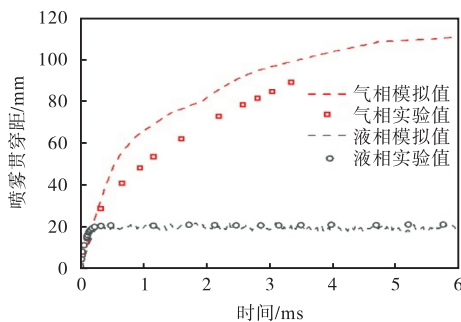
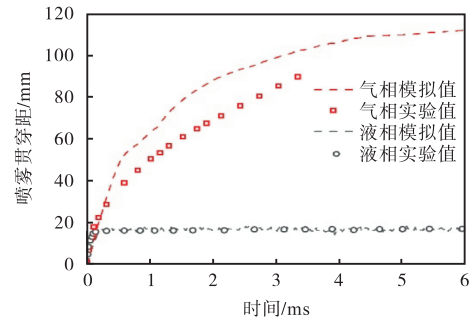
生物柴油由安装在定容燃烧弹顶部的单孔喷油器喷入燃烧室, 喷油器参数以及喷射条件设置如表 2 所示。

表 2 喷油器参数及燃油喷射条件

Tab.2 Injector parameters and injection conditions

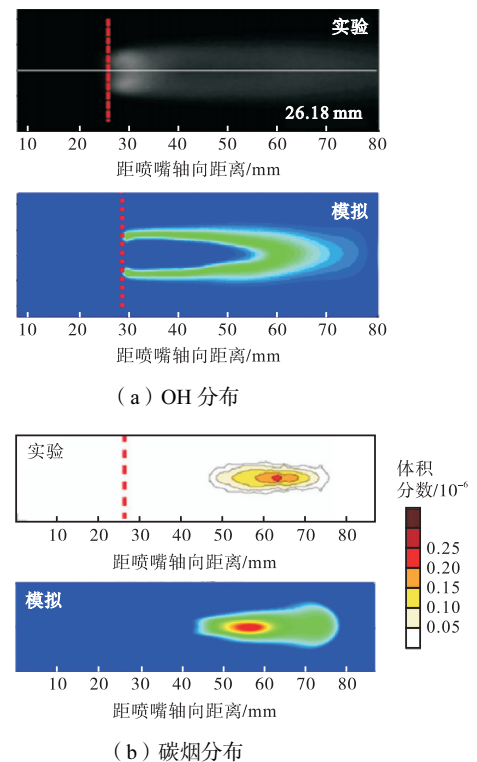
参 数	指 标
喷孔数	单孔
喷孔直径/mm	0.09
喷油压力/MPa	150
燃料温度/K	363
喷油质量/mg	22.7
喷油持续期/ms	7.5

图 3 所示网格为尺寸为 4 mm 的基础计算网格, 初始网格不涉及嵌入式加密和自适应加密, 总网格数量为 15 470. 为了更加准确地捕捉燃油喷雾的动态发展过程, 本文使用大涡模拟的湍流模拟方法. 生物柴油喷雾模型方面, 喷雾破碎基于传统的 KH-RT 模型, 液滴的碰撞使用 NTC 模型, 液滴的撞壁使用 Rebound/slide 模型. 燃烧过程主要基于 SAGE 燃烧模型, 使用 Zeldovich 模型模拟氮氧化物( $\text{NO}_x$ )的生成, 碳烟的生成和消耗则使用 Hiroyasu 模型进行计算. 为了验证模型的可靠性, 本文首先针对生物柴油物理性质的计算进行验证, 即模拟无氧环境下不具备反应活性的生物柴油喷雾. 图 4 和图 5 为模拟所得喷雾贯穿距与实验数据的对比. 液相贯穿距定义为从喷油器到总喷射燃料 95% 处的轴向距离, 气相贯穿距定义为从喷油器到燃料蒸气的质量分数大于 0.001% 位置的最大轴向距离. 喷雾贯穿距是评价喷雾燃烧性能的重要指标, 良好的贯穿距能够提高燃烧室内氧化剂(空气)的利用率, 使燃料与空气混合更充分从而燃烧更充分, 过长的贯穿距会冲击到燃烧室壁面造成湿壁现象, 而过短的贯穿距则会使雾化不充分以及污染物排放增加<sup>[18]</sup>. 从图 4 和图 5 中可以看到, 在喷雾的早期阶段, 气相贯穿距与液相贯穿距保持一致, 此后随着燃油液滴的蒸发很快开始分离, 液相贯

图 4  $T = 900 \text{ K}$  时喷雾贯穿距与实验值对比Fig.4 Penetration length of fuel spray in comparison with experimental data when  $T = 900 \text{ K}$ 图 5  $T = 1000 \text{ K}$  时喷雾贯穿距与实验值对比Fig.5 Penetration length of fuel spray in comparison with experimental data when  $T = 1000 \text{ K}$ 

穿距后续在一个平均值左右波动, 通常被称为液相长度, 超过该距离后, 气缸内再没有液体燃料液滴存在<sup>[19]</sup>. 通过与实验数据的比较, 计算所得生物柴油喷雾在两种温度条件下的液相贯穿距都能与实验数据较好地吻合, 气相贯穿距略有差距但是在合理范围内, 均表明本文所建立模型能较为准确地模拟生物柴油的喷雾特性.

在此基础之上, 本文进一步对生物柴油在含氧环境中的喷雾和燃烧过程进行了模拟计算. 图 6 和图 7 分别表示了初始环境温度为 900 K 和 1000 K 下的模拟结果与实验图像的对比, 红色虚线表示火焰抬升长度(定义为 OH 分布区域边缘到喷嘴之间的稳定距

图 6  $T = 900 \text{ K}$  时模拟所得 OH 和碳烟分布与实验图像的对比Fig.6 Comparison between experimental and predicted distributions of OH and soot when  $T = 900 \text{ K}$

离)。实验和模拟结果均表明,随着温度升高火焰抬升长度缩短,1 000 K 条件下的火焰抬升长度明显短于 900 K 条件,说明环境温度越高燃油喷雾的雾化效果和着火特性越好。模拟所得两种温度下的火焰抬升长度与实验数据吻合,仅略高于实验值。图 6(b)和图 7(b)所示为两种环境温度下的碳烟浓度分布。实验和模拟结果均表明碳烟集中在火焰中心的高当量比区域,模拟结果的碳烟浓度分布情况和轴向位置与实验图像有较好的吻合。图 6 和图 7 所示 OH 和碳烟的实验分布图像是多次实验结果的平均值,因此与之

对照的也是将大涡模拟数据平均后的结果。相比之下,图 8 所示为瞬态模拟结果与相应实验图像(上部分)的对比,选取的 OH 浓度为 1.698 ms 时刻的结果,选取的碳烟分布为 1.878 ms 时刻的结果。可以看到,在所选取的时刻,模拟所得 OH 分布和碳烟分布均与实验图像有较好的吻合。以上多项关于模拟结果的验证结果表明,本文所建立的生物柴油燃烧反应机理以及喷雾燃烧计算模型有较好的准确度,能够用于生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气的着火及火焰区扩展特性的模拟研究。

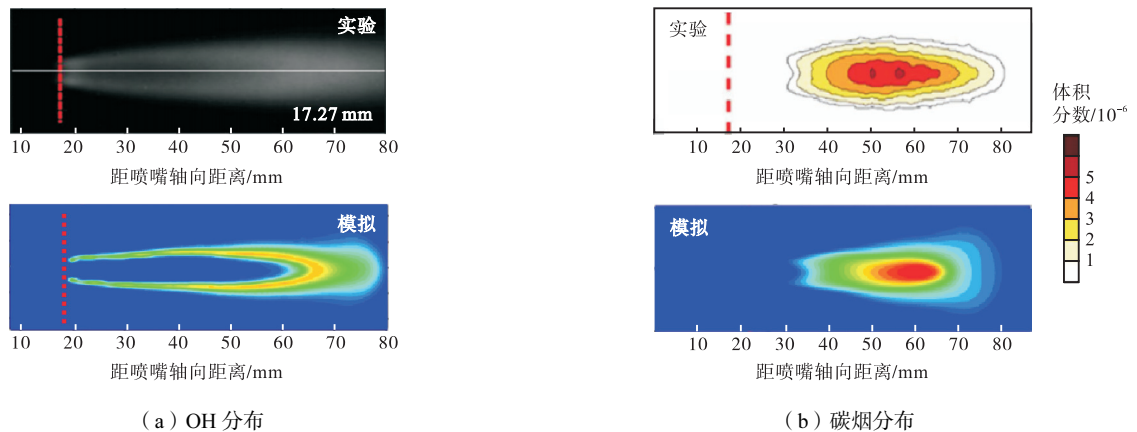


图 7  $T = 1000\text{ K}$  时模拟所得 OH 和碳烟分布与实验图像的对比

Fig.7 Comparison between experimental and predicted distributions of OH and soot when  $T = 1000\text{ K}$

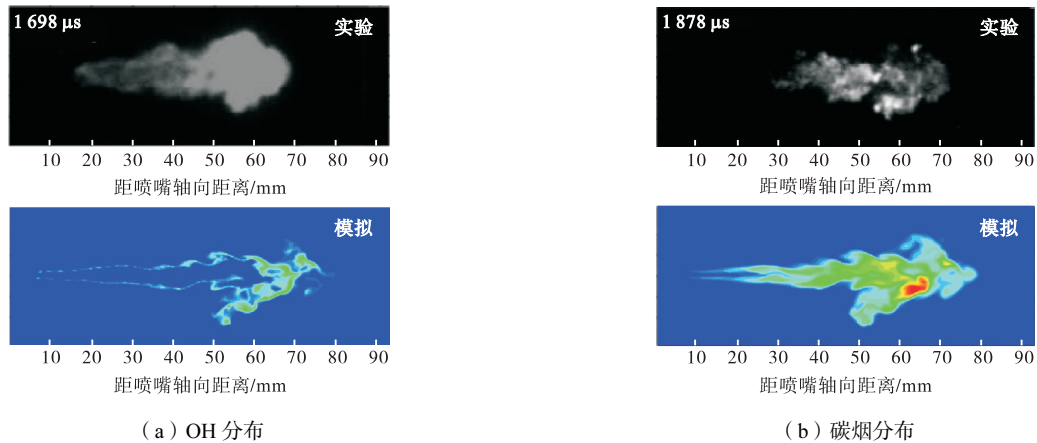


图 8  $T = 1000\text{ K}$  时模拟所得瞬态 OH 和碳烟分布与实验图像的对比

Fig.8 Comparison between transient experimental and predicted distributions of OH and soot when  $T = 1000\text{ K}$

## 2 结果与讨论

如将生物柴油和正丁醇组合应用于 RCCI 燃烧方式,正丁醇将在进气道内与空气形成预混合气后进入气缸,生物柴油则通过燃烧室顶部的喷油器直接喷入气缸。压缩行程内随着活塞上移,缸内压力和温度逐渐增高,反应活性较高的生物柴油首先被压缩点燃,进而引燃正丁醇和空气的混合气。定容燃烧弹是

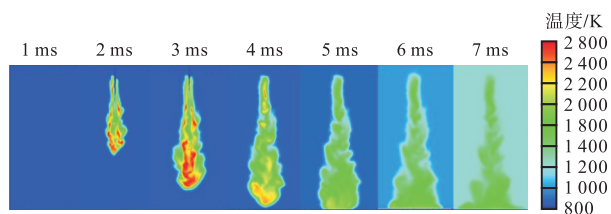
通过构建接近上止点的缸内环境来分析燃油的喷雾、着火及反应区扩展过程。因此,在生物柴油通过喷油器直喷进入气缸之前,在缸内预置完全均质的正丁醇预混气。表 3 所示为喷油参数和缸内的初始条件。所设缸内初始温度和压力不足以使正丁醇预混气着火,而是等到生物柴油从燃烧室顶部的喷油器喷入,高温高压的缸内环境使生物柴油率先着火,进而点燃正丁醇预混合气。图 9 所示为生物柴油喷入后的着火及火焰区扩展过程。可以看到生物柴油喷入后随即在

缸内着火,同时正丁醇-空气预混气被点燃.由OH的分布可以观察到不断扩展的火焰边界,生物柴油燃尽后,代表火焰边界的OH逐渐消失,正丁醇也不断被消耗直至全部耗尽.

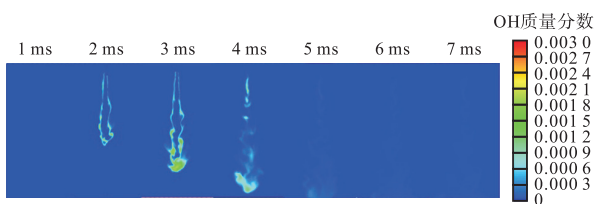
表 3 喷油参数和缸内初始条件

Tab.3 Injection parameters and initial conditions of the combustor

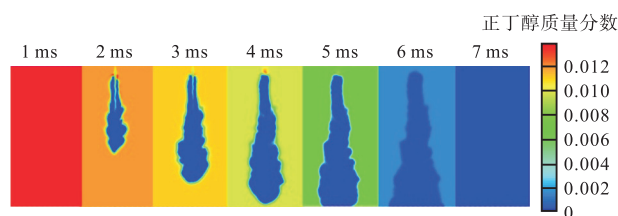
参 数	指 标
初始氧气体积分数/%	21
缸内初始温度/K	850
缸内初始压力/MPa	6
正丁醇当量比	0.15
喷油持续期/ms	2
喷油时刻/ms	1



(a) 温度



(b) OH 质量分数



(c) 正丁醇质量分数

图 9 环境温度 850 K 时生物柴油喷入后的着火及反应区扩展过程

Fig.9 Ignition and expansion of reaction zone after bio-diesel injection when  $T_{amb} = 850$  K

## 2.1 缸内初始温度对生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气燃烧过程的影响

### 2.1.1 缸内初始温度对着火特性的影响

为研究缸内初始温度对于生物柴油喷雾在正丁醇-空气预混合气中着火及燃烧特性的影响,本文选取了 850 K、875 K、900 K 等 3 个缸内初始温度进行计算.本文定义着火时刻为缸内出现大于 2600 K 温度的时刻,从喷油开始时刻到着火时刻的时间段即为滞燃期.图 10 所示为不同缸内初始温度下的着火现

象,从图上可看出,随着温度升高,着火时刻逐渐提前,滞燃期逐渐缩短.初始温度从 850 K 升到 900 K,滞燃期(0.45 ms, 0.35 ms, 0.30 ms)缩短了 0.15 ms,这是由于温度越高生物柴油喷雾蒸发得越快,燃油雾化效果越好,也有更大的燃烧反应速率.图上红色虚线标注的即为着火位置,可发现随着温度升高,着火位置也逐渐接近气缸顶部和喷油器.从图 10 中还可以看出随着缸内初始温度增加,生物柴油液核长度也逐渐缩短,这是由于温度越高,越多的燃油液滴在距离喷嘴越近的区域蒸发.另外,缸内初始温度也会影响火焰抬升长度,图 11 中用红色虚线标注了 2.5 ms 时不同缸内初始温度下的火焰抬升长度.可以看到,随着温度升高,火焰抬升长度逐渐减小,且 OH 分布浓度逐渐增加,表明更为强烈的反应过程.

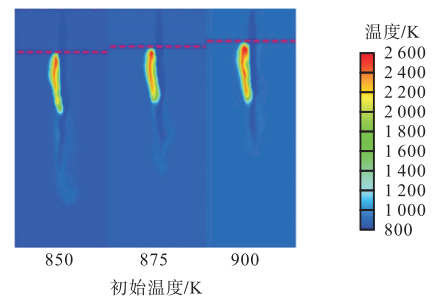


图 10 不同缸内初始温度下的着火

Fig.10 Ignition under different initial cylinder temperatures

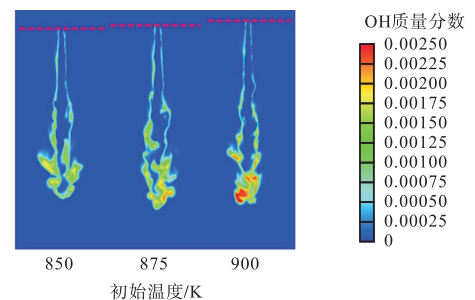
图 11 不同缸内初始温度下的 OH 分布 ( $t = 2.5$  ms)Fig.11 Distribution of OH under different initial cylinder temperatures ( $t = 2.5$  ms)

图 12 所示为不同初始温度条件下的热释放速率曲线.可以看出,每个热释放速率曲线都呈单峰放热.由图可知,随着缸内初始温度升高,峰值热释放速率逐渐增加,且由于滞燃期缩短燃烧相位逐渐提前.由于燃料的总量和热值不变,所以温度越高峰值热释放速率越高,放热持续时间越短,即热量释放更集中,燃烧反应更剧烈.图 13 所示为缸内压力的变化曲线.可以看出,随着缸内初始温度升高,燃烧相位提前,压力急剧上升的趋势同样明显提前,缸压上升速率也逐渐增大.这是由于随着缸内初始温度增

加, 燃烧放热更加集中所致. 此外, 同样由图 13 可以看到, 随着缸内初始温度的增加, 燃料完全燃烧后的最终缸内压力逐渐减小.

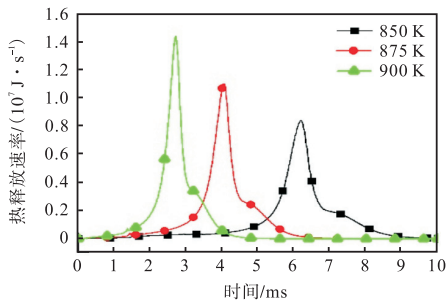


图 12 不同初始温度下的热释放速率曲线

Fig.12 History of heat release rate under different initial temperatures

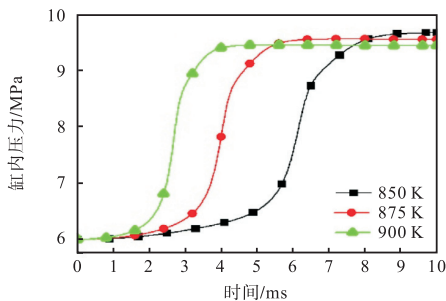


图 13 不同初始温度下的缸内压力变化曲线

Fig.13 History of cylinder pressure under different initial pressures

2.1.2 缸内初始温度对主要污染物排放特性的影响

图 14 反映了 3.5 ms 时刻不同缸内初始温度下的碳烟分布. 从图中可以看出, 随着缸内初始温度升高, 碳烟集中分布区域逐渐缩小, 对于温度最高的 900 K 工况, 碳烟集中分布的区域最小且出现大量碳烟的持续时间最短. 这是由于温度越高碳烟的消耗反应速率越快. 另外, 可以明显地看出随着缸内初始温度升高, 碳烟的生成位置逐渐靠近喷嘴. 可见温度越高燃油液滴在越接近喷嘴的区域蒸发, 使得燃烧也逐渐靠近喷嘴, 而碳烟一般在燃油喷雾的前端生成.

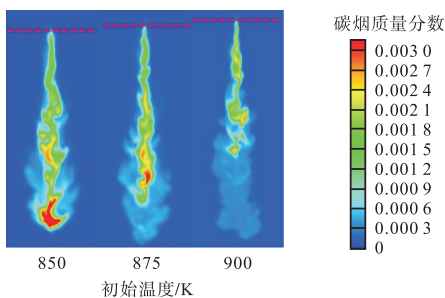


图 14 不同初始温度条件下的碳烟分布 ( $t = 3.5$  ms)

Fig.14 Distributions of soot under different initial temperatures ( $t = 3.5$  ms)

温度是影响氮氧化物生成的最重要参数, 图 15 所示为 3.5 ms 时刻不同缸内初始温度下氮氧化物浓度的分布. 从图中可以看到, 随着缸内初始温度的升高, 该时刻氮氧化物分布集中区域逐渐变大, 浓度也较高. 此外, 可以看到氮氧化物主要出现在生物柴油喷雾前端, 这是由于该位置温度较高且氧气较为充足. 由图 16(a) 可以看到, 在生物柴油喷雾持续期即 1 ~ 3 ms 时间段, 缸内初始温度越高生成的碳烟越多, 但是包括正丁醇在内的所有燃料燃烧完全后, 反而是缸内初始温度越高最终的碳烟总量越少, 这是由于燃烧初期温度越高反应速率越快, 燃料大量燃烧生成碳烟浓度也较高, 但是当生物柴油燃烧完全后, 温度越高同时也能促进碳烟的氧化反应, 所以最终温度越高碳烟的总量越少. 图 16(b) 所示为缸内氮氧化物总量随时间的变化规律. 从图中可以看出随着温度升高, 氮氧化物生成速率逐渐增加, 最终总量也较大. 这是由于缸内初始温度越高, 滞燃期越短, 生物柴油混合不均匀导致局部高温区域增多, 且由于初始温度越高本身就能促进氮氧化物生成, 因此 900 K 初始温度条件下氮氧化物的最终总量最多.

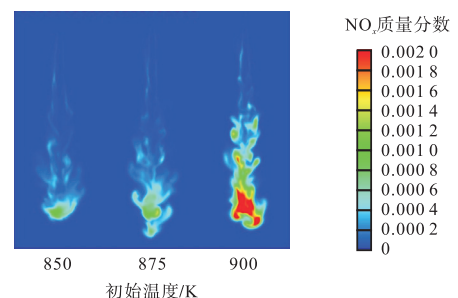


图 15 不同初始温度条件下的氮氧化物分布 ( $t = 3.5$  ms)

Fig.15 Distributions of  $\text{NO}_x$  under different initial temperatures ( $t = 3.5$  ms)

图 16(c) 和图 16(d) 分别展示一氧化碳 (CO) 和未燃烧碳氢化合物的总量随时间的变化规律. 可以看到, 随着缸内初始温度的增加, 由于反应速率加快, 一氧化碳的生成逐渐提前, 但后续较强的氧化作用使得一氧化碳量的峰值质量逐渐减小. 从图 16(d) 可以看出随着缸内初始温度的增加, 由于反应速率加快未燃碳氢化合物急剧减少的时刻也逐渐提前. 表 4 是不同缸内初始温度下主要污染物最终生成质量, 可以看出碳烟、一氧化碳和未燃碳氢化合物的最终排放量都随着缸内初始温度的增加而减少, 这表明缸内初始温度的升高可以促进燃料完全燃烧, 而较高的初始温度会导致较大的氮氧化物最终总量.

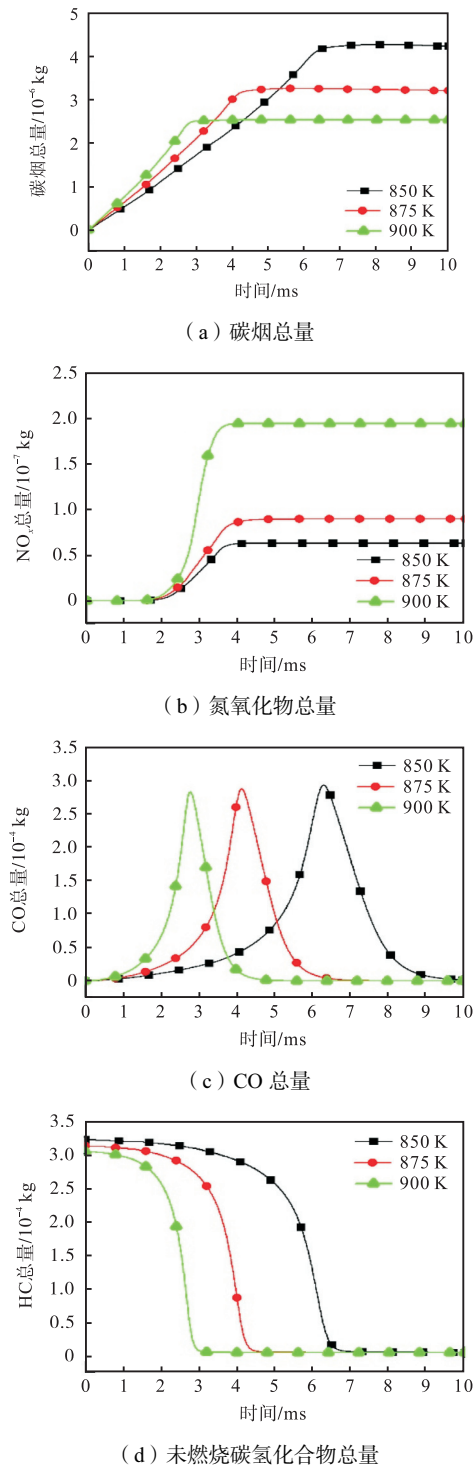


图 16 不同缸内初始温度下主要污染物总量随时间的变化曲线

Fig.16 Transient mass of major pollutants under different initial cylinder temperatures

表 4 不同缸内初始温度下主要污染物最终质量总量

Tab.4 Final mass of major pollutants under different initial temperatures

初始温度/K	碳烟/kg	NO <sub>x</sub> /kg	HC/kg	CO/kg
850	$4.22 \times 10^{-6}$	$6.31 \times 10^{-8}$	$4.69 \times 10^{-6}$	$1.26 \times 10^{-6}$
875	$3.2 \times 10^{-6}$	$8.96 \times 10^{-8}$	$4.57 \times 10^{-6}$	$2.09 \times 10^{-9}$
900	$2.53 \times 10^{-6}$	$1.94 \times 10^{-7}$	$4.46 \times 10^{-6}$	$2.14 \times 10^{-9}$

## 2.2 初始氧气浓度对生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气燃烧过程的影响

### 2.2.1 初始氧气浓度对着火特性的影响

废气再循环 (EGR) 通常被用于降低燃烧温度进而减少氮氧化物的排放. 通过将废气由排气道引入进气道, 大量的二氧化碳作为惰性气体可以降低缸内氧气的浓度, 从而减缓氧化反应的速率并增大滞燃期, 使得燃油与空气有更多的混合时间, 因而对燃烧过程有重要的影响. 为研究 EGR 的程度对着火及燃烧特性的影响, 本文选取了 3 组不同初始缸内氧气摩尔分数, 分别是氧气在缸内的初始摩尔分数分别为 15%、18% 和 21%. 图 17 所示为不同氧气初始摩尔分数下着火时刻的温度分布. 可以看到, 较高的缸内初始氧气摩尔分数会使滞燃期缩短, 缸内初始氧气摩尔分数从 15% 增加到 21%, 滞燃期也从 0.75 ms 大幅减少到 0.50 ms 和 0.45 ms. 随着氧气摩尔分数增加, 着火位置也更靠近气缸顶部, 初始氧气摩尔分数为 21% 时的着火位置已远较 15% 的氧气摩尔分数更接近气缸顶部, 生物柴油喷雾的液核也逐渐缩短. 对于更大的初始氧气摩尔分数, 同一位置的生物柴油喷雾可以与更多的氧气混合, 局部空燃比相对较高, 因此着火时刻提前, 着火位置也更加接近气缸顶部.

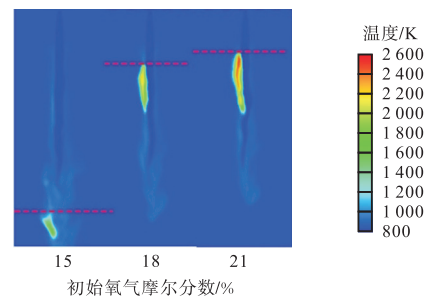


图 17 不同初始氧气摩尔分数下的着火时刻

Fig.17 Ignition timing under different initial oxygen mole fractions

初始氧气摩尔分数同样对火焰抬升长度有重要影响. 氧气摩尔分数不会影响燃油的蒸发雾化以及与空气混合的过程, 但能够促进燃烧反应的加快并缩短燃烧过程. 缸内氧气摩尔分数越高, 能够提升反应速率并缩短滞燃期. 图 18 中红色虚线标注的为 2.5 ms 时刻不同初始氧气摩尔分数下的火焰抬升长度. 随着初始氧气摩尔分数的增加, 火焰抬升长度逐渐减小, 火焰逐渐靠近喷嘴. 此外, OH 质量分数逐渐增加, 表明着火反应更加剧烈, 同时火焰长度也有所增长.

初始氧气摩尔分数对热释放速率的影响与缸内初始温度的影响是类似的. 从图 19 可以看到, 随着

缸内初始氧气摩尔分数的增加,氧化反应速率加快,峰值热释放速率逐渐增大.此外,燃烧持续时间缩短导致放热时段更加集中.由于大量放热时刻提前且放热更加集中,从图 20 可以看出缸内压力的增长速率以及最终缸内压力也随着初始氧气摩尔分数的增加而增大.

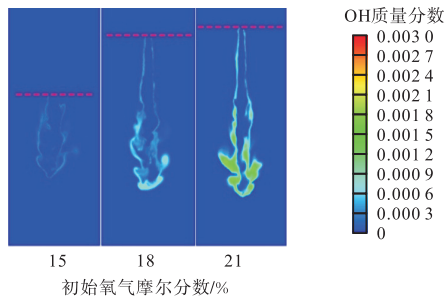


图 18 不同初始氧气摩尔分数下的 OH 分布 ( $t = 2.5$  ms)  
 Fig.18 Distribution of OH under different initial oxygen mole fractions ( $t = 2.5$  ms)

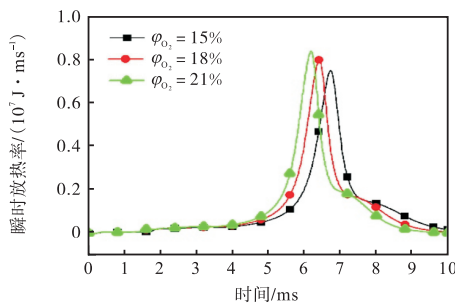


图 19 不同初始氧气摩尔分数下的热释放率变化曲线  
 Fig.19 History of heat release rate under different initial oxygen mole fractions

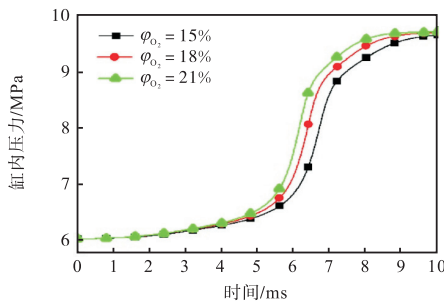


图 20 不同初始氧气摩尔分数下的缸内压力变化曲线  
 Fig.20 History of cylinder pressure under different initial oxygen mole fractions

### 2.2.2 初始氧气摩尔分数对主要污染物排放特性的影响

图 21 所示为 3.5 ms 时刻不同初始氧气摩尔分数下的缸内碳烟浓度分布.由图可以看到,同一时刻下初始氧气摩尔分数更高的情况下所形成的碳烟浓度更低,而碳烟集中分布的区域更接近气缸底部.较高的氧气摩尔分数能够导致碳烟较大的氧化消耗速率,

进而造成更低的碳烟浓度.而生物柴油雾化后形成的高浓度混合气主要集中于喷雾前端,所以碳烟集中分布的区域更接近气缸底部.

图 22 所示为 3.5 ms 时刻不同初始氧气摩尔分数下的氮氧化物分布.从图中可以看到,随着缸内初始氧气摩尔分数的增加,该时刻氮氧化物集中分布的区域也逐渐变大,15%的氧气摩尔分数下,缸内氮氧化物的分布相比几乎可以忽略,说明初始氧气摩尔分数对氮氧化物的生成有较大的影响.氧气摩尔分数低造成较为缓慢的反应速率以及热释放率,均不利于与氮气反应生成氮氧化物.从图 23(a)可以看出,在燃烧前期三种氧气摩尔分数的碳烟生成曲线几乎重合,氧气摩尔分数并没有对缸内碳烟的生成量有显著影响,但是最终生成碳烟的质量随着初始氧气摩尔分数的增加而减少,这是高浓度的氧气强化了碳烟的氧化消耗反应所导致的.图 23(b)为不同初始氧气摩尔分数下的氮氧化物生成曲线,同样说明初始氧气摩尔分数对氮氧化物的生成有重要影响.初始氧气摩尔分数为 21% 的情况下最终氮氧化物的生成量远高于初始氧气摩尔分数为 15% 和 18% 的情况.初始氧气摩尔分数增加导致燃烧反应速率加快,热释放率也随之增大,而根据 Zeldovich 机理,较高的氧气摩尔分数也会直接促进氮氧化物的生成反应.

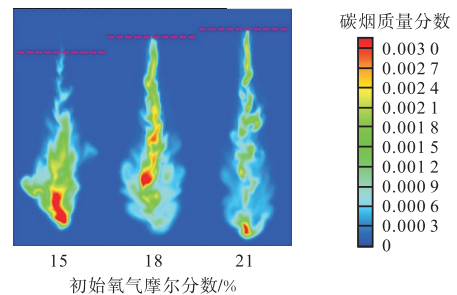


图 21 不同初始氧气摩尔分数下的碳烟分布 ( $t = 3.5$  ms)  
 Fig.21 Soot distribution under different initial oxygen mole fractions when  $t = 3.5$  ms

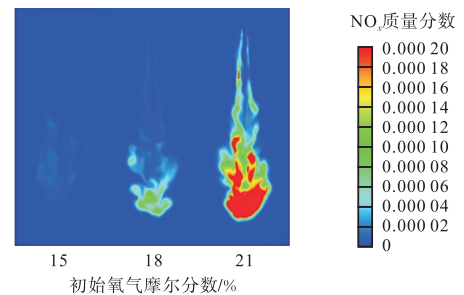


图 22 不同初始氧气摩尔分数下的氮氧化物分布 ( $t = 3.5$  ms)  
 Fig.22  $\text{NO}_x$  distribution under different initial oxygen mole fractions when  $t = 3.5$  ms

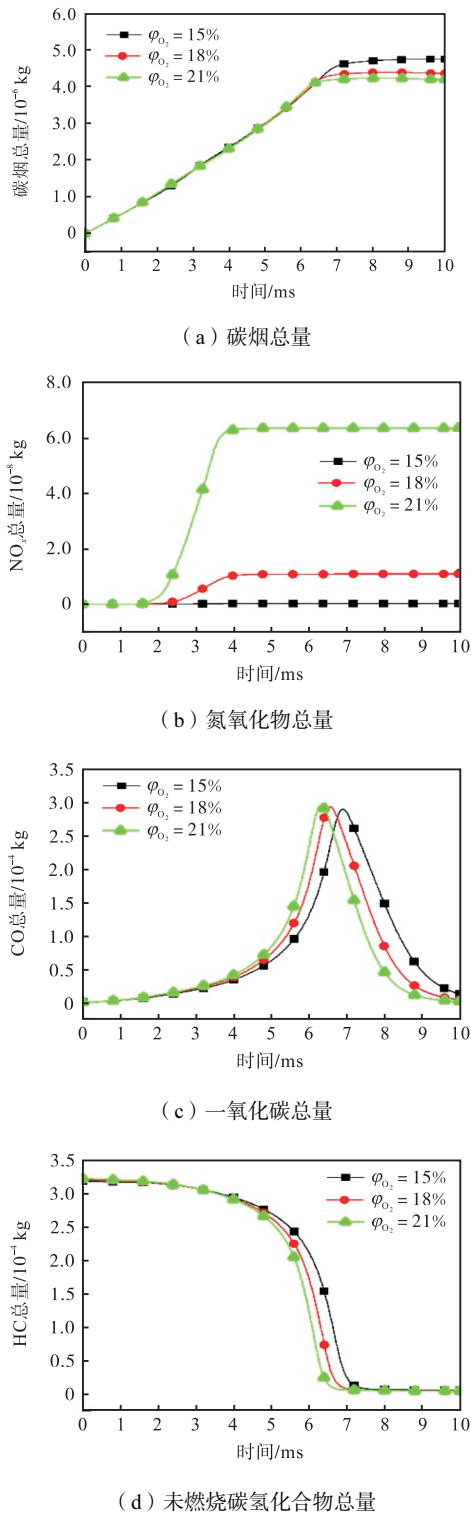


图 23 不同初始氧气摩尔分数下主要污染物总量随时间的变化曲线

Fig.23 Transient mass of major pollutants under different initial oxygen mole fractions.

图 23(c) 所示为缸内一氧化碳总量随时间的变化曲线。可以看到,随着缸内初始氧气摩尔分数的增加,反应速率加快,生成一氧化碳的反应逐渐提前,一氧化碳峰值质量也逐渐增加,但较高的氧气浓度会强化一氧化碳的氧化反应,最终造成更低的一氧化碳

浓度。图 23(d) 所示为缸内未燃烧碳氢化合物总量随时间的变化曲线。随着缸内初始氧气摩尔分数的增加,未燃碳氢化合物被氧化而总量急剧减少的趋势也逐渐提前。表 5 所示为不同缸内初始氧气摩尔分数下主要污染物最终总质量。可以看出碳烟、一氧化碳和未燃碳氢化合物的最终排放量与不同缸内初始温度下的工况类似,都随着初始氧气摩尔分数的增加而减少,这表明缸内初始氧气摩尔分数的增加可以促进燃料的氧化,而氮氧化物的最终总量则随着缸内初始氧气摩尔分数的增加而增加。

表 5 不同初始氧气摩尔分数下主要污染物最终生成量  
Tab.5 Final mass of major pollutants for different initial oxygen concentrations

初始氧气摩尔分数/%	碳烟/kg	NO <sub>x</sub> /kg	HC/kg	CO/kg
15	$4.77 \times 10^{-6}$	$2.11 \times 10^{-10}$	$5.61 \times 10^{-6}$	$1.25 \times 10^{-5}$
18	$4.38 \times 10^{-6}$	$1.08 \times 10^{-8}$	$4.87 \times 10^{-6}$	$3.88 \times 10^{-6}$
21	$4.22 \times 10^{-6}$	$6.31 \times 10^{-8}$	$4.69 \times 10^{-6}$	$1.26 \times 10^{-6}$

### 3 结论

本文基于模拟方法重点研究生物柴油喷入正丁醇-空气预混合气的着火及反应区扩展过程。为有效提升模拟的精度,本文基于生物柴油的 5 种主要组分构建了其燃烧反应机理,可以充分考虑燃油自身多组分特征对其燃烧特性的影响,所得机理的准确性得到了充分的验证。模拟研究工作基于定容燃烧弹模型开展,缸内预置不同初始条件的正丁醇-空气混合气,再喷入生物柴油进而引发着火及燃烧过程。通过分析不同初始条件下燃烧过程的模拟结果,本文主要得到以下的结论:

(1) 缸内初始温度是影响滞燃期的一个重要因素,随着温度升高着火时刻逐渐提前,滞燃期逐渐缩短,火焰抬升长度逐渐减小,OH 分布浓度逐渐增加,着火反应更为剧烈。此外,初始温度的增加使碳烟总量减少并增大氮氧化物的生成量。

(2) 初始氧气浓度同样对燃烧过程有重要影响,较高的缸内初始氧气浓度可以缩短滞燃期,减少火焰抬升长度。此外,较高的缸内初始氧气浓度能够加强碳烟的氧化,造成其总量减少,而氮氧化物的生成量则显著增加。

#### 参考文献:

- [1] 帅石金, 王志, 马 骁, 等. 碳中和背景下内燃机低碳和零碳技术路径及关键技术[J]. 汽车安全与节能学报, 2021, 12: 417-439.

- Shuai Shijin, Wang Zhi, Ma Xiao, et al. Low carbon and zero carbon technology paths and key technologies of ICEs under the background of carbon neutrality[J]. *Automotive Safety and Energy*, 2021, 12: 417-439(in Chinese).
- [2] Reitz R D. Directions in internal combustion engine research[J]. *Combustion & Flame*, 2013, 160(1): 1-8.
- [3] Saxena S, Bedoya I. Fundamental phenomena affecting low temperature combustion and HCCI engines, high load limits and strategies for extending these limits[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2013, 39: 457-488.
- [4] Kokjohn S L, Musculus M, Reitz R D. Evaluating temperature and fuel stratification for heat-release rate control in a reactivity-controlled compression-ignition engine using optical diagnostics and chemical kinetics modeling[J]. *Combustion & Flame*, 2015, 162(6): 2729-2742.
- [5] 刘海峰, 文铭升, 杨智, 等. 发动机缸内自燃着火与火焰传播的调控[J]. *内燃机学报*, 2020, 38: 200-209.
- Liu Haifeng, Wen Mingsheng, Yang Zhi, et al. Optical diagnostics on combustion mode between auto-ignition and flame propagation in engines[J]. *Transactions of CSICE*, 2020, 38: 200-209(in Chinese).
- [6] 刘海峰, 王冠月, 文铭升, 等. 喷油压力和进气温度对氨/正十二烷双燃料发动机燃烧稳定性影响研究[J]. *燃烧科学与技术*, 2024, 30(1): 1-8.
- Liu Haifeng, Wang Guanyue, Wen Mingsheng, et al. Influence of injection pressure and intake temperature on combustion stability of ammonia/n-dodecane dual-fuel engine[J]. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2024, 30(1): 1-8(in Chinese).
- [7] Li Zilong, Huang Guan, Zhao Wenbin, et al. Gasoline-diesel dual fuel intelligent charge compression ignition(ICCI) combustion: Efficient and clean combustion technology for compression ignition engines[J]. *Fuel*, 2020, 279: 121590.
- [8] 王贵龙, 鞠洪玲. DMF/柴油 RCCI 燃烧碳烟生成数值模拟[J]. *燃烧科学与技术*, 2023, 29(2): 235-242.
- Wang Guilong, Ju Hongling. Numerical simulation of soot formation in DMF/diesel RCCI combustion[J]. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2023, 29(2): 235-242(in Chinese).
- [9] Saiteja P, Ashok P. A critical insight review on homogeneous charge compression ignition engine characteristics powered by biofuels[J]. *Fuel*, 2021, 285: 119202.
- [10] No S-Y. Application of biobutanol in advanced CI engines: A review[J]. *Fuel*, 2016, 183: 641-658.
- [11] Trindade W, Santos, R. Review on the characteristics of butanol, its production and use as fuel in internal combustion engines[J]. *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, 2017, 69: 642-651.
- [12] Liu Haifeng, Wang Xin, Zheng Zunqing, et al. Experimental and simulation investigation of the combustion characteristics and emissions using n-butanol/biodiesel dual-fuel injection on a diesel engine[J]. *Energy*, 2014, 74: 741-752.
- [13] Zhao Wenbin, Zhang Yaoyuan, Huang Guan, et al. Experimental investigation on combustion and emission characteristics of butanol/biodiesel under blend fuel mode, dual fuel RCCI and ICCI modes[J]. *Fuel*, 2021, 305: 121590.
- [14] Zheng Zunqing, Xia Mingtao, Liu Haifeng, et al. Experimental study on combustion and emissions of dual fuel RCCI mode fueled with biodiesel/n-butanol, biodiesel/2, 5-dimethylfuran and biodiesel/ethanol[J]. *Energy*, 2018, 148: 824-838.
- [15] Zhang Lei, Qi Qianhui, Wang Zhiguo, et al. Development of a reduced oxidation mechanism with low-temperature chemistry for real biodiesel methyl esters[J]. *Fuel*, 2023, 338: 127289.
- [16] Mario Diaz-Gonzalez, Trevino C, Prince J C, et al. A reduced kinetic mechanism for the combustion of n-butanol[J]. *Energy & Fuels*, 2018, 32: 867-874.
- [17] Nerva J G, Genzale C L, Kook S, et al. Fundamental spray and combustion measurements of soy methyl-ester biodiesel[J]. *International Journal of Engine Research*, 2013, 14(4): 373-390.
- [18] Pickett L M, Genzale C L, Bruneaux G, et al. Comparison of diesel spray combustion in different high-temperature, high-pressure facilities[J]. *SAE International Journal of Engines*, 2010, 3(2): 156-181.
- [19] Zhang Lei, Ren Xiaohua, Lan Zhigang. A reduced reaction mechanism of biodiesel surrogates with low temperature chemistry for multidimensional engine simulation[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 212: 377-387.