船用柴油 / 天然气双燃料发动机 着火过程解耦分析

袁宁辛.舒阳.陈彪

(长江航道测量中心,湖北武汉 430010)

摘 要:天然气因其储量丰富、热值高、经济性好、C/H 比低等优点被视为一种理想的替代燃料,压燃式天然气发动 机的着火过程对发动机后续着火过程有显著影响。本文通过同位素标记法解耦分析了船用柴油/天然气发动机中柴油着 火产生的热作用和化学作用对天然气着火过程的影响。结果表明, 热作用是促进天然气着火的主要因素, 化学作用对甲 烷着火过程的影响较小; 在低温条件下, 化学作用影响较大, 随着温度升高, 化学作用的影响降低; 随初始压力升高, 化学作用在中温条件下对天然气着火过程的影响增强;随当量比升高,化学作用在中低温条件下对天然气着火过程的影 响增大。

关键词: 天然气/柴油; 滞燃期; 热作用; 化学作用; 解耦分析

中图分类号: U66 文献标识码: A 文章编号: 1006-7973 (2022) 03-0116-04

1 引言

船舶柴油机因其热效率高、可靠性好、功率范围 宽等优点而成为船舶的主要动力装置。然而, 自 20 世 纪70年代能源危机以来,国际原油价格日益上涨,且 随着环境污染问题和温室效应日益加重,降低污染物和 碳排放的呼声日益高涨。而传统的降低排放的后处理措 施成本较高,且不能降低碳排放。燃用替代燃料是一种 理想的降低污染物和碳排放以及节省石油燃料的技术方 案。天然气因其储量丰富、热值高、经济性好、C/H 比 低等优点被视为一种理想的替代燃料。天然气的主要成 分是甲烷,通常碳氢比在0.3左右,而汽油和柴油的碳 氢比都在 0.5 左右, 因此天然气发动机的碳排放低于汽 油机和柴油机。天然气是一种气体燃料,几乎不含硫, 燃烧温度低于汽油和柴油, NOx 和 SOx 排放较低。天然 气辛烷值高、抗爆性好,因此天然气发动机可以在较高 的压缩比下运行,热效率也相应较高。但天然气十六烷 值低,难以被压燃,在用作发动机燃料时需要额外的能 量引燃。

船用天然气发动机按照其点火方式可以分为火花引 燃天然气发动机和双燃料发动机, 火花引燃天然气发动 机是通过缸内布置的火花塞引燃预混或直喷的天然气, 通常这样类型的发动机受到爆震和稀燃极限的限制, 压 缩比不宜过高,热效率也通常较低,火花引燃天然气发 动机受限于天然气较慢的火焰传播速度,通常不适用于 大缸径的船舶发动机; 双燃料发动机是通过直喷的高活

性柴油引燃预混或直喷天然气,这种类型的发动机着火 和燃烧都较为稳定,可以在更高的压缩比下运行,因此 通常热效率较高,适用于大缸径的船舶发动机。

滞燃期是对于发动机燃烧过程至关重要,它会影响 发动机的输出功、燃烧效率和排放性能。因此,研究柴 油和天然气的着火过程对于提高双燃料发动机的性能和 降低排放具有重要指导意义。然而,实际的柴油由上百 种组分构成,包括烷烃、环烷烃、烯烃、环烯烃和芳香 烃等,且产地不同也会导致柴油组分出现差异,难以直 接用研究实际柴油的着火特性,通常是以十六烷值与柴 油接近的正庚烷表示柴油的着火特性。天然气主要成分 是甲烷,还包含少量乙烷、丙烷、丁烷、氢气和氮气等 组分,天然气的来源不同会导致其成分出现差异,因此, 国际上通常是以其主要成分甲烷表示其着火特性。本文 以甲烷/正庚烷双燃料表示柴油和天然气的着火特性。

在过去几十年中,国内外学者们对甲烷/正庚烷混 合燃料的着火特性开展了大量的试验研究。Liang 等在 激波管中测量了不同甲烷摩尔分数的甲烷 / 正庚烷混合 燃料的滯燃期。研究表明,即使少量的正庚烷也能显著 缩短甲烷的滞燃期,甲烷/正庚烷混合燃料的滞燃期与 甲烷含量变化是非线性关系。Schlatter等在快速压缩机 中研究了正庚烷喷雾在甲烷/空气混合气中的着火特性。 研究发现,随甲烷含量增加,正庚烷滞燃期增长,预混 燃烧阶段的放热率升高。Polk 等在一台四冲程单缸机中 研究了当量比、柴油质量、气体燃料能量替代比和平均

有效压力对滞燃期的影响,但他们的数据受到测量方法的限制。Zhang等在一台射流搅拌反应器中研究了正庚烷的添加对甲烷低温和高温氧化过程的影响。研究表明,随正庚烷含量增大,甲烷的起始氧化温度降低,即使少量的正庚烷也能使甲烷的高温氧化温度显著向低温区偏移。

模拟研究对认识甲烷/正庚烷混合燃料着火过程也 十分重要, 国内外学者对甲烷/正庚烷双燃料的着火特 性也开展了一些模拟研究。Aggarwal 等用一个简化机理 模拟研究了甲烷/正庚烷混合燃料的滞燃期。研究发现, 甲烷的添加对正庚烷着火几乎没有影响, 而即使少量正 庚烷的添加也能显著缩短甲烷滞燃期。Wei 等通过模拟 研究了甲烷/正庚烷混合燃料的着火特性。他们发现, 温度和当量比在所有研究条件下对甲烷/正庚烷混合燃 料滞燃期都有显著影响,而压力和甲烷质量分数仅在部 分条件下对甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期有显著影响。 Li 等通过模拟研究了正庚烷着火过程中产生的高活性中 间产物对甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期的影响。研究表 明,即使少量中间产物对甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期 也有显著影响,随着中间产物浓度增大,影响增大;中 间产物主要影响甲烷和正庚烷低温阶段的反应来加速着 火。

综上所述,国内外学者对甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期开展了大量研究,研究集中在正庚烷对甲烷着火影响的宏观效应,Li等人探究了正庚烷着火过程中产生的中间产物对甲烷/正庚烷混合燃料的影响,关于正庚烷着火对甲烷着火影响的内在机制未见报道。正庚烷着火过程中会使反应系统温度升高,温度升高会加速甲烷着火,这即是正庚烷着火对甲烷着火影响的热效应;此外,正庚烷着火过程中还会产生高活性中间产物和活性基,也会加速甲烷着火,这即是正庚烷着火对甲烷着火影响的化学效应。因此,本文旨在探究正庚烷着火的热效应和化学效应对甲烷着火的影响,并探究热作用和热作用+化学作用条件下甲烷反应动力学差异。

2 模型和研究方法

本文是利用开源软件 Cantera 中的零维定容绝热模型开展的模拟研究。该模型假设燃料在一个封闭的空间内反应,和外界无物质和热量交换。采用的机理是 NUI 的正庚烷详细机理,该机理采用了分层结构,底层是

C1-C0 的详细机理,包含甲烷的详细氧化机理,该机理已经得到了广泛验证,在此无需进一步验证。

正庚烷着火对甲烷着火的影响分为热效应和化学效应,为了解耦热作用和化学作用,本文利用同位素标记法,将正庚烷的 H 标记为 D,正庚烷即为 NC₇D₁₆,NC₇D₁₆不会与 CH₄ 发生任何反应,但产生的热量会使反应系统温度升高,即可解耦出正庚烷着火的热作用对甲烷着火的影响。NC₇H₁₆/CH₄ 混合燃料着火过程既有正庚烷着火过程的热作用也有化学作用对甲烷着火的影响,通过热作用得到的甲烷滞燃期减去热作用和化学作用共同作用的甲烷滞燃期即是化学作用影响的甲烷滞燃期。

在零维滯燃期模拟中,通常以 OH 浓度最大值所在时刻或温度升高 400K 作为着火时刻。在本文研究中,当只考虑正庚烷的热作用时,正庚烷着火也会使反应系统温度升高,如图 1 所示,当以温度升高 400K 作为着火标志时,正庚烷着火导致的温度升高会对甲烷着火判定造成干扰,因此,本文以 OH 浓度最大时刻作为着火标志。

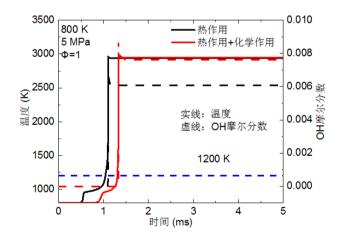


图 1 初始温度为 800 K、初始压力为 5 MPa、当量比为 1、甲烷摩尔分数为 90% 条件下甲烷 / 正庚烷混合燃料着火过程中温度和 oh 浓度随时间变化历程

3 结果与讨论

为了探究热作用和化学作用对甲烷滞燃期的影响,并分析造成影响的内在因素,本文通过研究压力为1~10MPa,温度为800~1200K、当量比为0.5~2.0和正庚烷质量分数为10~30%范围内甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期变化,并通过敏感性分析和产率分析探究热作用和化学作用对甲烷滞燃期造成影响的内在原因。

3.1 热作用和化学作用对甲烷滞燃期的影响

图 2 是不同压力条件下甲烷 / 正庚烷混合燃料滞燃期随温度变化关系,图中表明,在三个不同压力条件下热作用对甲烷滞燃期有显著影响,且在中高温条件下影响更大;而热作用+化学作用影响的甲烷滞燃期与单独热作用影响的滞燃期差异不大,且随着温度变化,热作用+化学作用影响的甲烷滞燃期与热作用单独影响的滞燃期也并未发生显著变化。

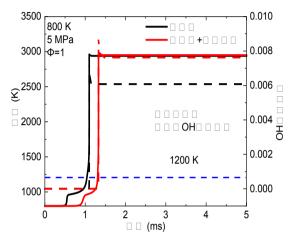


图 2 当量比为 1、甲烷摩尔分数为 90% 条件下 热作用和化学作用对甲烷滞燃期的影响

图 3 是温度为 800 K、压力为 5 MPa、当量比为 1 条件下甲烷在不同作用下的羟基随时间变化关系。单独 热作用条件下羟基更快达到峰值,且 OH 和 OD 同时达到峰值,这表明正庚烷和甲烷是同时着火的。而热作用 + 化学作用工况下 OH 达到峰值时刻反而晚于单独热作用条件下,这表明,在工况下化学作用对甲烷着火的影响是负作用。在初始压力为 1 MPa 时,化学作用对甲烷 滞燃期几乎没有影响,但随初始压力升高,中温条件下 化学作用的影响增大。

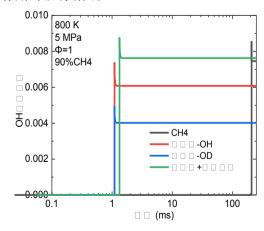


图 3 初始温度为 800 K、初始压力为 5 MPa、当量比为 1、甲烷质量分数为 90% 条件下热作用和化学作用对 OH 浓度变化的影响

图 4 是不同当量比条件下甲烷正庚烷 / 混合燃料滞

燃期随温度变化关系。图中表明,在不同当量比条件下,仍然是热作用对甲烷着火影响更大,化学作用对甲烷滞燃期几乎没有影响;随着当量比的增大,化学作用在中低温条件下对甲烷着火的抑制作用增大。图 5 是不同甲烷质量分数条件下甲烷/正庚烷混合燃料滞燃期随温度变化关系。在不同甲烷质量分数条件,仍然是热作用对甲烷滞燃期的影响占主导作用。随着甲烷质量分数增大,化学作用在中低温条件下对甲烷着火的抑制作用被削弱。

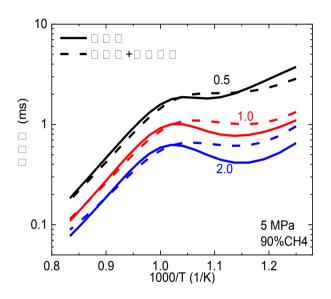


图 4 初始压力为 5 MPa、甲烷质量分数为 90% 条件下 热作用和化学作用对甲烷滞燃期的影响

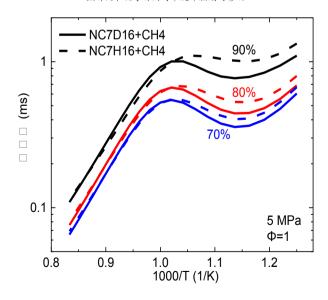


图 5 初始压力为 5 MPa、当量比为 1 条件下 热作用和化学作用对甲烷滞燃期的影响

4 结论

- (1)正庚烷着火过程中产生的热作用是促进甲烷 着火的主要因素,化学作用对甲烷着火的影响较小。在 不同压力、温度、当量比和甲烷质量分数条件下,热作 用均是促进甲烷着火的主要因素。
- (2)在中低温条件下,化学作用对甲烷着火的抑制作用更大,且随当量比的增大和甲烷质量分数升高,抑制作用增大。

参考文献:

- [1] Liu H, Li J, Wang J, et al. Effects of injection strategies on low speed marine engines using the dual fuel of high pressure 说 direct - injection natural gas and diesel [J]. Energy Science & Engineering, 2019, 7(5): 1994–2010.
- [2] Liang J, Zhang Z, Li G, et al. Experimental and kinetic studies of ignition processes of the methane n–heptane mixtures [J]. Fuel, 2019, 235: 522–529.
- [3] Li J, Liu H, Liu X, et al. Investigation of the combustion kinetics process in a high-pressure direct injection natural gas marine engine [J]. Energy & Fuels, 2021, 35(8): 6785–6797.
- [4] Li J, Wang J, Liu T, et al. An investigation of the influence of gas injection rate shape on high-pressure direct-injection natural gas marine engines [J]. Energies, 2019, 12(13): 2571.
- [5] Li M, Zhang Q, Li G, et al. Effects of hydrogen addition on the performance of a pilot-ignition direct-injection natural gas engine: A numerical study [J]. Energy & Fuels, 2017, 31(4): 4407–4423.
- [6] Li M, Zhang Q, Li G, et al. Experimental investigation on performance and heat release analysis of a pilot ignited direct injection natural gas engine [J]. Energy, 2015, 90: 1251–1260.
- [7] Curran H J, Gaffuri P, Pitz W J, et al. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation [J]. Combustion and Flame, 1998, 114(1-2): 149-177.
- [8] Li J, Liu X, Liu H, et al. Kinetic study of the ignition process of methane/n-heptane fuel blends under high-pressure direct-injection natural gas engine conditions [J]. Energy & Fuels, 2020, 34(11): 14796–14813.
- [9] Schlatter S, Schneider B, Wright Y M, et al. N-heptane micro pilot assisted methane combustion in a rapid compression expansion machine [J]. Fuel, 2016, 179: 339–352.

- [10] Polk A C, Gibson C M, Shoemaker N T, et al. Detailed characterization of diesel-ignited propane and methane dual-fuel combustion in a turbocharged direct-injection diesel engine [J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, 2013, 227(9): 1255–1272.
- [11] Zhang Z, Zhao H, Cao L, et al. Kinetic effects of n-heptane addition on low and high temperature oxidation of methane in a jet-stirred reactor [J]. Energy & Fuels, 2018, 32(11): 11970–11978.
- [12] Aggarwal S K, Awomolo O, Akber K. Ignition characteristics of heptane hydrogen and heptane methane fuel blends at elevated pressures [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2011, 36(23): 15392–15402.
- [13] Wei H, Qi J, Zhou L, et al. Ignition characteristics of methane/n-heptane fuel blends under engine-like conditions [J]. Energy & Fuels, 2018, 32(5): 6264–6277.
- [14] Zhang K, Banyon C, Bugler J, et al. An updated experimental and kinetic modeling study of n- heptane oxidation [J]. Combustion and Flame, 2016, 172: 116–135.

