

缸内燃油喷射发动机碳烟生成机理特征分析

刘永峰^{1,2}, 裴普成¹, 田洪森²

(1. 清华大学 汽车安全与节能国家重点实验室, 100084 北京; 2. 北京建筑工程学院 机电与汽车工程学院, 100044 北京)

摘要: 为精确计算压燃式缸内燃油喷射发动机中的碳烟生成, 提出了新的计算模型. 不同的燃烧室区域应用不同的计算模型, 当区域温度 $T < 1500$ K, 只计算气体状态下生成的碳烟前驱物 PAHs; 当区域温度 $T \geq 1500$ K, 碳烟前驱物 PAHs 和源项均进行计算. 计算前驱物 PAHs 利用修改的 F-M 模型, 碳烟源项的生成包括碳烟的起始、生长、氧化以及聚合. 同时认为温度和过量空气系数是影响碳烟生成的最主要因素, 即在温度 $T > 1500$ K, 过量空气系数 $\Phi < 0.6$ 才能产生碳烟. 新的计算模型移植在 KIVA-3V 源代码中, 计算了直喷式发动机在不同喷射时间、不同轨压下的碳烟瞬态值, 并用试验验证了该模型. 给计算直喷式柴油机生成的碳烟提供了新的方法.

关键词: 直喷式柴油机; 多环芳香烃; 碳烟

中图分类号: U464.1

文献标志码: A

文章编号: 0367-6234(2012)07-0102-06

Analysis on soot formation mechanism in direct-injection fuel engine

LIU Yong-feng^{1,2}, PEI Pu-cheng¹, TIAN Hong-sen²

(1. State Key Laboratory of Automotive Safety and Energy, Tsinghua University, 100084 Beijing, China; 2. School of Mechanical and Electronic and Automobile Engineering, Beijing Institute of Civil Engineering and Architecture, 100044 Beijing, China)

Abstract: To calculate soot source terms the new model is presented according to recent literature data. Different models are used in different temperature zones in combustion chamber. When zone temperature $T < 1500$ K, gas-phase kinetics is considered and the soot precursors -PAHs (Polycyclic aromatic hydrocarbons) is calculated. When zone temperature $T \geq 1500$ K, the gas-phase chemistry and soot source terms are calculated. PAHs model is the modified Frenklach-Ma model which includes formation and oxidation of PAHs. The formation of soot can be subdivided into the process of particle inception, surface growth and oxidation, particle coagulation. Temperature and excess air coefficient are the most important parameters in the new model. The soot is created only when temperature $T \geq 1500$ K and excess air coefficient $\Phi < 0.6$. The new model is implemented into the KIVA-3V code and the results of soot with variation of injection time and variation of rail pressure between simulation and experimental data are analyzed. It gives a new way to predict soot for direct-injection diesel engine.

Key words: direct-injection diesel engine; polycyclic aromatic hydrocarbons; soot

碳烟(soot),也称碳黑或碳粒,是压燃式缸内燃油喷射发动机最重要的有害排放物之一. 尽管经历了一个多世纪的研究,但目前对它生成机理

的研究仍然是一项挑战性的工作^[1]. 如 K. Nishida 等^[2]基于此提出了一个两步模型,该模型由于易于移植而被广泛的应用在工程计算领域. 但该模型仅对碳烟的生成和氧化做了计算,并没有计算碳烟的前驱物——多环芳香烃(PAH). H. Bockhorn^[3]提出了详细化学模型(F-M模型),但该模型未考虑 PAH 的计算^[4]; T. Kamimoto 等^[5]在理论上发现同时降低碳烟和 NO_x 的温度通道; T. Jacobs 等^[6]在现实的发动机上验证了文献^[5]理

收稿日期: 2011-10-30.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51176082);北京市人才强教资助项目(PHR(IHLB)201008370,201106125).

作者简介: 刘永峰(1973—),男,教授,博士;

裴普成(1965—)男,教授,博士生导师.

通信作者: 裴普成, pchpei@mail.tsinghua.edu.cn.

论的正确性,同时,F-M模型中的PAH计算包括63种组分和268个反应,至少目前的计算机速度而言,非常困难移植在三维湍流运动计算中^[7]. KIVA源代码碳烟计算模型是建立在Surovikin-Nagle模型基础上,构成简单实用的计算模型,但KIVA源代码中的碳烟计算模型分布简单两步模型,没有考虑温度和组分变化对碳烟生成的影响.近年来有很多成果^[8-10],证实其计算的简单化,如文献[9]从计算碳烟前驱物-多环芳香烃(PAH)入手,分析了PAH的具体形成过程,得到了PAH在生成过程的浓度变化.本文正是针对KIVA原模型的不足提出了改进的计算模型,利用温度作为控制计算碳烟的基本标准,同时利用稳定状态法缩减了F-M模型中PAH的计算,编制新的计算程序并移植在大型三维湍流源代码程序KIVA-3V中,并用试验验证分析了该模型.

1 改进模型的建立

本文改进模型分为:1) PAH的计算;2) 碳烟的计算.其总体结构和计算流程如图1所示.

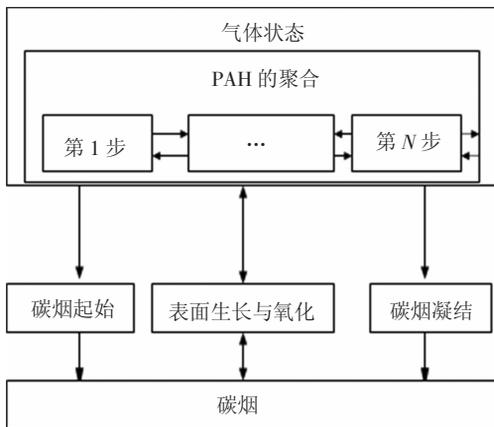


图1 碳烟改进模型结构图

1.1 PAH的计算

对碳烟的前驱物PAH采用“骨架”反应机理,根据最近文献[11]将其中起主要作用的物质(C_2H_2 和 C_4H_2)作为反应的基础,形成第1个苯环,通过“脱氢加乙炔”机理形成PAH的代表性组分 $C_{10}H_8$, $C_{10}H_8$ 氧化反应的产物不是 CO_2 ,而是CO和HC的基团.PAH模型的计算修改了F-M模型,由燃料热解、第1个苯环形成、环化反应、氧化反应组成,其计算单位为:秒(s)、厘米(cm)、卡(K)、摩尔(mol).

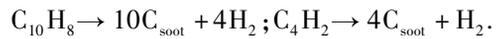
1.2 碳烟的计算

本文计算碳烟源项的生成包括:碳烟的起始、生长、氧化以及聚合.

1.2.1 碳烟的起始

碳烟的起始过程不仅与烃燃料的热解有关,

而且也有与其特定的前驱物相关的化学过程.试验表明,火焰中与碳粒相关的中间组分主要有PAH和聚炔烃,PAH和聚炔烃对碳烟粒子的成核起着同等重要的作用,并采用这两类烃中最简单的:萘($C_{10}H_8$,简记为 A_2 ,表示含两个苯环的芳香烃)和联乙炔(C_4H_2),作为碳粒成核过程中的代表性组分.这样就可写出其反应式为



其反应率常数为: $k_{A_2} = k_{C_4H_2} = 1.0 \times 10^7 \exp(-5000/RT)$,这两个总包反应消除了大量的中间组分及反应细节,可大大节省计算时间,而且还提供了一条确定碳粒初始质量和表面积的简捷途径,以便于后续的表面生长和粒子初始数密度的计算.基于这两个反应,很容易得出碳烟成核率的计算式

$$\omega_{Nu} = 10k_{A_2}[A_2] + 4k_{C_4H_2}[C_4H_2].$$

1.2.2 碳烟的生长

碳烟的生长模型是在Frenklach模型的基础上修改而得出的,表面生长反应对碳粒质量变化率的贡献为

$$\omega_{SG} = k_{s4,f} P_{C_2H_2} \left(a \frac{x_{soot}^*}{N_A} A_{soot} \right).$$

式中: $k_{s4,f}$ 为反应的正向反应率系数; $P_{C_2H_2}$ 为乙炔的分压; a 为位阻因子,代表碳粒可用于进行表面生长反应的表面积所占总表面积的比例; A_{soot} 为单位容积中全部碳粒的总表面积.

a 的取值为

$$a = \frac{1}{2} \left[\tan \left(\frac{8.168}{T} - 4.57 \right) + 1 \right].$$

x_{soot}^* 、 x_{soot}^* 分别为 $C_{soot}H$ 和 C_{soot}^* 的数密度,它们之间的关系为

$$x_{soot}^* = x_{soot} (k_{s1,f}[H] + k_{s2,f}[OH] \times k_{s1,b}[H_2] + k_{s2,b}[H_2O] + k_{s3,f}[H] + k_{s4,f}[C_2H_2])^{-1}.$$

式中: k_{si} ($i=1, \dots, 4$)为各反应率系数;下标 f 和 b 分别为正反应和逆反应.

1.2.3 碳烟的氧化

碳烟的氧化作用仍然采用了著名的Nagle模型,OH的氧化作用其反应率可写为

$$\omega_{OH} = r_{OH} \frac{3n_{OH}}{N_A} \left(\frac{8RT}{\pi M_{OH}} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

式中: n_{OH} 、 M_{OH} 分别为OH基的数密度和相对分子质量; r_{OH} 为OH基与碳粒表面的碰撞效率,取值为0.13.

1.2.4 碳烟的聚合

碳烟的相互碰撞可借助分子动力论中著名的Smoluchowski方程来描述.为简单起见,假定碳粒

尺寸均一,于是碳烟凝结所引起的数密度 n 的变化率可表示为

$$\omega_{\text{CO}} = \frac{5}{6} k_{\text{CO}} f_v^{\frac{1}{3}} n^{\frac{11}{6}}$$

式中: f_v 、 n 分别为碳烟的体积分数和数密度. 反应率系数计算为

$$k_{\text{CO}} = \frac{5}{12} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{6k_B T}{\rho_{\text{soot}}} \right)^{\frac{1}{2}} G \cdot G_a$$

式中: k_B 为玻尔兹曼常数 ($1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$); G 为量级为 2 的系数(对球形颗粒); 常数 $G_a = 6.55$.

1.2.5 碳烟的计算方法

用数理统计方法计算碳烟分布,碳粒的起始认为由两个 PAH 分子聚合而成,粒子聚合由 Smoluchowski's 方程进行计算.

2 KIVA 源代码中的实现

若实现计算描述的碳烟模型,需要进行的工作为:1) 编制碳烟子程序;2) 将碳烟子程序替代 KIVA-3V 源代码中碳烟子程序. 将改进的碳烟子

程序与 KIVA-3V 湍流喷雾程序、燃烧子程序等结合在一起,方可计算本碳烟模型.

2.1 碳烟子程序结构

将改进的碳烟模型编制成一个子程序,其包括两部分:1) 计算碳烟的前驱物 PAH;2) 计算碳烟颗粒的起始、生长、氧化和聚合,每一次燃烧开始,便开始执行此子程序,其结构如图 2 所示,在编制程序时对每个网格考虑温度和过量空气系数对碳烟生成的影响,即在温度 $T > 1500 \text{ K}$, 过量空气系数 $\Phi < 0.6$ 才能产生碳烟,因此提高了计算效率,并对每一次计算循环均输出碳烟颗粒的瞬时值,有利于检查碳烟颗粒的生成曲线. 由于在计算表面反应率时,已经用到了碳粒直径 d_p , 因此在实际计算中,须先假定一个 d_p , 待经过一个时间步的计算后,解出 d_p 后再更新之. 随着计算的推进,最后 d_p 可收敛到正确值. 同时,在编制碳烟子程序时,增加程序自检查与输出程序,实现程序的实时监控,以避免因某些计算变量发散,程序中中止而找不到原因,进而提高调试子程序的效率.

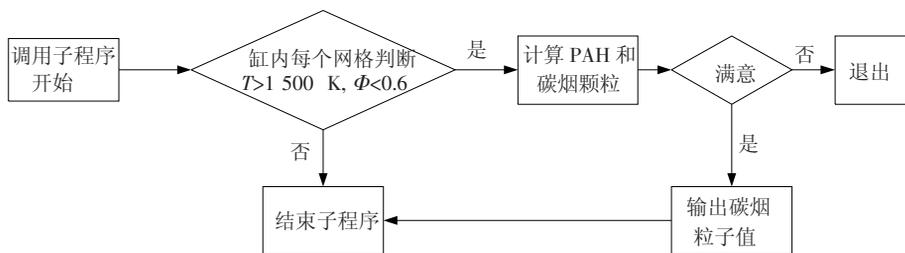


图 2 碳烟子程序结构图

2.2 碳烟子程序与 KIVA 源代码的关系

若将子程序耦合在标准 KIVA-3V 源代码中,位置需放在燃烧子程序之后,碳烟子程序与 KIVA 源代码主程序关系如图 3 所示,计算的基础是喷雾和燃烧能够顺利算通,在实际计算中,由于燃烧子程序和碳烟子程序分别独立,KIVA 源代码中燃烧子程序比较简单,可先用 KIVA 源代码中燃烧子程序耦合改进碳烟子程序,以确保碳烟子程序能在整个计算程序中能算通,同时记录碳烟计算历程,与 KIVA-3V 碳烟原模型进行比较. 结果满意后再耦合燃烧模型,待燃烧模型和改进的碳烟模型这两个子程序全部能和整个计算程序调通后,再输出碳烟计算数值作为碳烟最终值. 如果遇到碳烟子程序中途中退出,需要检验缸内燃烧后温度、燃烧后组分浓度、瞬时缸压、放热量等相关输出数据,具体内容在 OTAPE12 文件中,尤其是计算温度和组分浓度,是影响碳烟生成的最重要因

素,需要逐步检查,根据碳烟子程序结构中的实时监控程序,确定各组分的正常生成,否则碳烟的生成会自动停止,计算程序也就会自动退出,得不到想要的结果. 此外,需要先按照 KIVA-3V 网格建立规则,建立尽量少的计算网格,以实现快速调试改进碳烟计算模型的目的. 随着网格数量的增加,计算结果有可能出现一定的不同,但总的趋势不会变化,要在满足精确性的前提下考虑计算成本,不是网格越多计算越精确,而是网格越多计算时间越长,计算成本也会相应增加,所以根据试验数值选择合适的计算网格非常重要.

3 试验

本研究基于对福田 4JB1 柴油机燃油系统的改进工作进行,该发动机的 ECU 由本试验室自行设计,并将原来分配泵供油改成高压共轨系统供油,同时修改了原燃烧室结构,重新进行了标定,

由原来的欧 II 标准已经提升到欧 III 环保标准,试验柴油机所用的燃料为北京市市售满足国 3 的

(硫含量 < 50 ppm(或称 10 - 6))标准柴油^[12]。

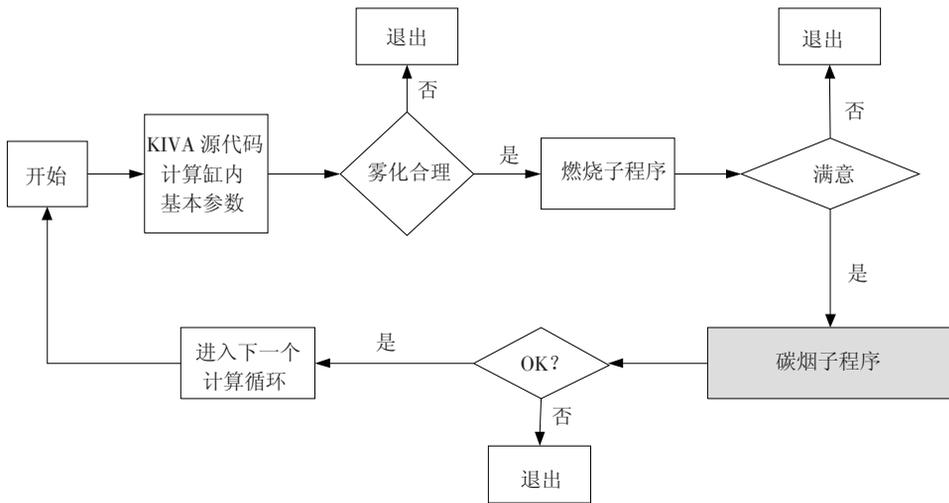


图 3 碳烟计算子程序与 KIVA 源代码的关系

试验系统分为:颗粒气溶胶发生系统、颗粒荷电系统、气溶胶采样系统、ELPI (Electrical Low-Pressure Impaction) 测量系统^[13]。颗粒气溶胶发生系统主要由一台颗粒发生器、一台空气压缩机、一台质量流量计与一台中和器组成。颗粒发生器以一定速度产生颗粒,颗粒被空气压缩机产生的气流带出形成气溶胶,由于摩擦会使颗粒荷电,为了消除这些电荷对测量的影响,让气溶胶通过一个中和器,然后气溶胶进入荷电系统,以此来实现

颗粒的不同荷电工况;此外,ELPI 要求气溶胶流量为 10 L/min,所以设置一个等速采样系统,通过采样系统把气溶胶引入 ELPI 测量系统。

4 计算与试验结果比较分析

因为只有在大的转速下才用一次喷射,所测试的发动机转速是 3 295 r/min,有两种轨压:106、120 MPa;其基本数据如表 2 所示。

表 2 一次喷射测试点基本数据

功率/ kW	转矩/ (N · m)	轨压/ MPa	主提前角/ °CA	油量/ (mg · inj ⁻¹)	油耗量/ (kg · h ⁻¹)	进气压力/ MPa
21(A 工况)	61	106	10	19.7	26.1	0.031
42(B 工况)	120	120	10	30.7	40.2	0.047

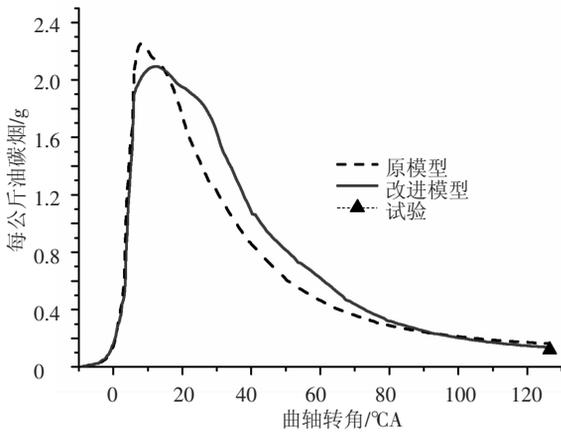
4.1 微粒的测定

如图 4 所示碳烟在原有模型和改进模型的缸内发展历程比较。每公斤油 A 工况的改进模型最大值 2.1 g,原模型的最大值 2.25 g,时间差基本吻合;利用改进模型每公斤油计算得到碳烟 0.137 g,利用原模型计算得到每公斤油 0.164 g,试验测得每公斤油 0.12 g,改进模型比原模型计算准确度提高 50% 以上。B 工况主喷在上止点后 4 °CA 结束,利用原模型计算碳烟峰值发生在上止点后 16 °CA,其值为每公斤油 1.8 g,改进模型计算碳烟峰值发生在上止点后 10 °CA,与主喷结束时间有一定的时间差 6 °CA,其值为每公斤油 1.6 g。原模型的峰值时间远远偏离主喷时间约

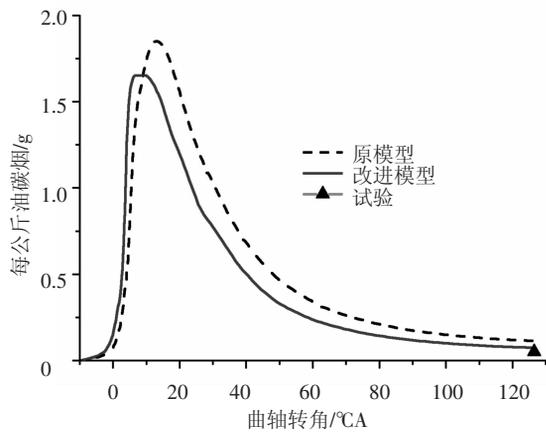
12 °CA,与很多文献叙述不相符^[14-15]。

4.2 不同工况的总结

本文研究的两种工况下碳烟的计算值比较如图 5 所示,利用改进模型计算每公斤油 B 工况的碳烟瞬态最高值最小 1.6 g,最后生成量每公斤油最低 0.077 g,试验值 0.05 g;每公斤油 A 工况的碳烟瞬态值最大值 2.1 g,生成量最大 0.137 g,尽管在小负荷(A 工况)喷射油量较少,但生成的碳烟相对量并不少,在中负荷(B 工况)生成的相对碳烟值反而少,这是由于在中负荷时氧化反而好所造成,碳烟的生成与喷油量有一定的关系,喷油量越大,碳烟的生成量也就越大,但不成正比关系。



(a) A 工况



(b) B 工况

图4 碳烟的发展

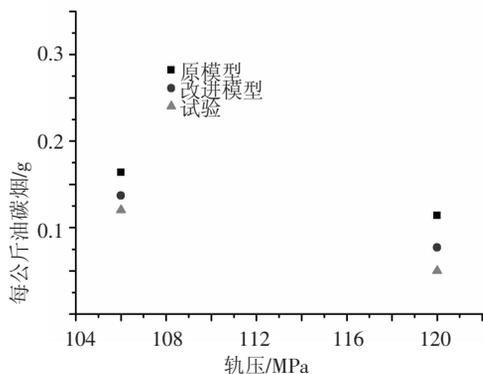
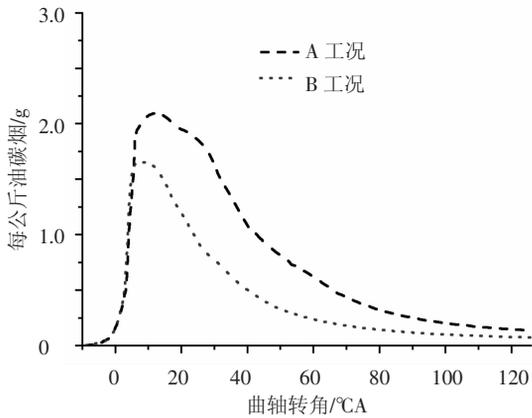


图5 不同工况碳烟比较

5 结论

1) 本文改进碳烟模型认为 PAH(C₁₀H₈) 和聚炔烃(C₄H₂) 对碳烟粒子的成核起着同等重要的作用,PAH 氧化反应的产物不是 CO₂, 而是 CO 和 HC 的基团;用数理统计方法计算碳烟分布,得到了碳烟粒子的数密度,构建了新的 PAH“骨架”反应机理.

2) KIVA-3V 原碳烟模型没能计算碳烟的前驱物 PAH,没能考虑 PAH 的后续生长和粒子初始密度,不能提供有关碳粒尺寸的任何信息,因此在碳烟的生成历程上不能真实反映实际情况,修改的碳烟模型考虑了上述因素,使得最终计算结果和试验较接近,比利用原 KIVA-3V 碳烟模型计算的结果精确程度提高约 50%.

参考文献:

- [1] MA Fanhua, WANG Junjun, WANG Yu, *et al.* Influence of different volume percent hydrogen/natural gas mixtures on idle performance of a CNG engine[J]. *Energy & Fuels*, 2008, 22(3): 1880 - 1887.
- [2] NISHIDA K, HIROYASU H. Simplified three-dimensional modeling of mixture formation and combustion in a DI diesel engine [J]. *Oil & Gas Science and Technology*, 1989, 54 (2):53 - 70.
- [3] BOCKHORN H. Soot formation in combustion: mechanisms and models [M]. Heidelberg, Berlin: Springer-Verlag, 1994: 6 - 9.
- [4] MA Fanhua, WANG Yu, LIU Haiquan, *et al.* Effects of hydrogen addition on cycle-by-cycle variations in a lean burn natural gas spark-ignition engine[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33(3): 823 - 831.
- [5] KAMIMOTO T, BAE M H. High combustion temperature for the reduction of particulate in diesel engines [J]. *SAE Technical Paper 880423*, 1988. doi: 10.4271/880423.
- [6] JACOBS T, ASSANIS D. The attainment of premixed compression ignition low-temperature combustion in a compression ignition direct injection engine [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 31 (2): 2913 - 2920.
- [7] MA Fanhua, WANG Yu, LIU Haiquan, *et al.* Experimental study on thermal efficiency and emission characteristics of a lean burn hydrogen enriched natural gas engine [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2007, 32(18): 5067 - 5075.
- [8] DECOSTER J, ERGUT A, LEVENDIS Y A, *et al.* PAH emissions from high-temperature oxidation of vaporized anthracene[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*

- te, 2007, 31(1): 491 - 499.
- [9] SOMERS M, MCCLAIN J, WORNAT M. The formation of polycyclic aromatic hydrocarbons from the supercritical pyrolysis of 1-methylnaphthalene [J]. *Proceeding of the Combustion Institute*, 2007, 31(1): 501 - 509.
- [10] LIAO Shuhang, YEN Chuanyu, WEN Cheng Chif, *et al.* Preparation and properties of carbon nanotube polypropylene nanocomposite bipolar plates for polymer electrolyte membrane fuel cells [J]. *Journal of Power Sources*, 2008, 185(1): 1225 - 1232.
- [11] MA Fanhua, WANG Yu. Study on the extension of lean operation limit through hydrogen enrichment in a natural gas spark ignition engine [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33(2): 1416 - 1424.
- [12] SHANG Yuming, XIE Xiaofeng, JIN Hao, *et al.* Synthesis and characterization of novel sulfonated naphthalenic polyimides as proton conductive membrane for DMFC applications [J]. *European Polymer Journal*, 2006, 42(2): 2987 - 2993.
- [13] MA Funhua, LIU Haiquan, WANG Yu, *et al.* Combustion and emission characteristics of a port-injection HCNG engine under various ignition timings [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33(3): 816 - 822.
- [14] YANG Zhenzhong, WEI Jianqin, FAN Zhuoyi, *et al.* An investigation of optimum control of ignition timing and injection system in an in-cylinder injection type hydrogen fueled engine [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2002, 27(2): 213 - 217.
- [15] GAO Dawei, JIN Zhenhua, LU Qingchun. Energy management strategy based on fuzzy logic for a fuel cell hybrid bus [J]. *Journal of Power Sources*, 2008, 185(2): 311 - 317.

(编辑 张 红)

(上接第 101 页)

- [2] EBERSOBACH S, PENG Z, KESSISSOGLU N J. The investigation of the condition and faults of a spur gearbox using vibration and wear debris analysis techniques [J]. *Wear*, 2006, 260(1/2): 16 - 24.
- [3] 林腾蛟, 蒋仁科, 李润方, 等. 船用齿轮箱动态响应及抗冲击性能数值仿真 [J]. *振动与冲击*, 2007, 12(26): 14 - 17.
- [4] CHOY F K, QAIN W. Vibration and noise analysis of a gear transmission system [R]. California: National Aeronautics and Space Administration, 1993.
- [5] SELLGREN U, ÅKERBLUM M. A model-based design study of gearbox induced noise [C] // *Proceedings of the International Design Conference*. Dubrovnik: Inderscience Publishers, 2004: 1337 - 1342.
- [6] ABBES M S, BOUAZIZ S. An acoustic-structural interaction modelling for the evaluation of a gearbox-radiated noise [J]. *Mechanical Sciences*, 2005, 50(3): 569 - 577.
- [7] KATO M, INOUE K, SHIBATA K, *et al.* Evaluation of sound power radiated by a gearbox [C] // *Proceedings of the International Gearing Conference*. Newcastle: J N Fawcett, 1994: 69 - 74.
- [8] 李润方, 王建军. 齿轮系统动力学——振动、冲击、噪声 [M]. 北京: 科学出版社, 1997: 353 - 354.
- [9] 卜忠红, 刘更, 吴立言, 等. 斜齿轮啮合刚度变化规律研究 [J]. *航空动力学报*, 2010, 25(4): 957 - 962.
- [10] 盛美萍, 王敏庆, 孙进才, 等. 噪声与振动控制技术基础 [M]. 北京: 科学出版社, 2001: 92 - 95.

(编辑 杨 波)