

DOI: 10.16236/j.cnki.nrxj.202305046

氨/柴油燃烧模型构建及低速机性能优化

刘海峰¹, 宋腾达¹, 黄志雄¹, 毛一玲¹, 赵令猛², 郑尊清¹

(1. 天津大学 内燃机燃烧学国家重点实验室, 天津 300350; 2. 广西玉柴机器股份有限公司, 广西 玉林 537005)

摘要: 基于化学反应动力学及三维计算流体动力学(CFD)耦合开展了低压氨/柴油双燃料低速机的燃烧和排放仿真研究. 构建了氨/柴油双燃料机理, 其滞燃期、层流火焰速度及重要组分浓度的计算结果与试验结果吻合良好; 在 CONVERGE 中建立了低速船机的三维 CFD 模型, 确定了 G 方程模型中 NH_3 燃料层流火焰速度的经验参数, 研究了压缩比和当量比对氨/柴油双燃料低速机性能的影响. 结果表明: 适当提高压缩比可以改善氨着火燃烧的稳定性, 压缩比为 14.5 可获得较高效率并将最大爆发压力控制在合理范围; 氨燃料当量比在 0.410 附近性能达到最优, 当量比更高使着火过于提前、燃烧温度大幅提高, 导致热效率下降和 NO_x 排放明显升高, 而当量比更低时指示热效率降低. 在当量比为 0.410、压缩比为 14.5 时氨/柴油双燃料低速机获得了效率及排放相互折衷下的最优值.

关键词: 低速机; 氨/柴油双燃料; 压缩比; 当量比

中图分类号: TK437

文献标志码: A

文章编号: 1000-0909(2023)05-0395-09

Simulation on Chemical Kinetic Mechanism and Performance Optimization of Ammonia-Diesel Dual Fuel Low-Speed Engine

Liu Haifeng¹, Song Tengda¹, Huang Zhixiong¹, Mao Yiling¹, Zhao Lingmeng², Zheng Zunqing¹

(1. State Key Laboratory of Engines, Tianjin University, Tianjin 300350, China;

2. Guangxi Yuchai Machinery Group Company Limited, Yulin 537005, China)

Abstract: A simulation was carried out based on the coupling of chemical kinetics and computational fluid dynamics (CFD) to investigate the characteristics of combustion and emissions of ammonia-diesel dual fuel low-speed engine. The mechanism of ammonia-diesel dual fuel was proposed and it could predict well with experiment results including ignition delays, laminar flame speeds and important species concentrations. Then, in CONVERGE, a three-dimensional CFD model of a low-speed marine engine was established, and empirical parameters of the ammonia laminar flame speed in the G-equation model were determined. Finally, the influence of compression ratio and equivalence ratio on the ammonia-diesel dual fuel combustion process was studied. The results show that the stability of ammonia ignition combustion can be improved by appropriately increasing the compression ratio. When the compression ratio is 14.5, higher efficiency can be obtained and peak combustion pressure can be controlled within a reasonable range. When the equivalence ratio is around 0.410, the performance is optimal. A higher equivalence ratio will cause the ignition to advance too early and the combustion temperature will increase significantly, resulting in a decrease in thermal efficiency and a significant increase in NO_x , while a lower equivalence ratio will result in a decrease in the indicated thermal efficiency. The comprehensive results show that when the equivalence ratio is 0.410 and the compression ratio is 14.5, the optimal values under the coordination of efficiency and emission can be obtained.

Keywords: low-speed engine; ammonia-diesel dual fuel; compression ratio; equivalence ratio

目前,全球超过五分之四的贸易通过海运进行,大规模航运造成大量的 CO_2 排放. 国际海事组织研

究表明,2012 至 2018 年全球年海运 CO_2 排放从 9.62 亿吨增加到 10.56 亿吨,全球占比从 2.76% 上升至

收稿日期: 2022-09-11; 修回日期: 2022-12-22.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51976134); 天津市杰出青年基金资助项目(20JCJQJC00160).

作者简介: 刘海峰, 博士, 教授, E-mail: haifengliu@tju.edu.cn.

通信作者: 郑尊清, 博士, 研究员, E-mail: zhengzunqing@tju.edu.cn.

2.89%^[1]. 为了有效减少温室气体排放并减少传统化石燃料的使用, 采用低碳或零碳燃料并提高发动机热效率是一条有效的途径. 氨是最具潜力的零碳燃料, 辛烷值高、抗爆性能好, 可采用高压压缩比提高发动机的热效率, 实现高效燃烧. 发动机燃用可再生能源制取氨燃料碳排放仅为 0.065 g/MJ, 降低碳排放效果显著^[2]. 但氨作为燃料也存在着着火温度和可燃下限浓度高、着火困难、火焰传播速度低及燃烧稳定性差等问题.

为解决氨燃料压燃着火困难和燃烧速度慢的问题, 研究人员在压燃式发动机上进行了燃用氨的试验. 由于实现纯氨压燃着火的压缩比过高(需要达到 35), 目前采用双燃料方式. Reiter 等^[3]和 Niki 等^[4]试验表明, 掺混氨会造成滞燃期延长, 热效率下降, 当柴油能量低于 5% 时不足以支持氨稳定燃烧, 当氨的能量比例在 40% ~ 60% 时可以获得最佳发动机热效率. 船用双燃料发动机依据燃气喷射时刻分为低压和高压喷射两种^[5]. 对于高压喷射, 大连理工大学基于 1E-150 柴油机开发了氨/柴油双直喷二冲程发动机原理样机, 全工况下氨替代率为 80% 以上^[6]. 而低压喷射模式排放性能更好, 无需复杂的高压供给及喷射系统. 低压喷射模式即在活塞压缩行程从缸套周向喷入氨气, 活塞上行至上止点附近再喷射少量柴油引燃预混气体, 对应的燃烧过程是预混燃烧, 以区别于高压喷射的扩散燃烧^[5]. 为了提高发动机点火性能, 郑尊清等^[7]研究表明, 预燃室可以增大初始着火区域, 提高点火稳定性, 拓展稀燃极限, 并且缩短燃烧持续期, 提高发动机热效率.

综上所述, 氨作为内燃机燃料的主要问题在于氨的着火稳定性差, 燃烧速度慢导致热效率较低; 尤其对于大缸径船用发动机, 火焰传播需要的时间长, 氨燃烧反应速度慢的问题会更加凸显. 采用预燃室喷射柴油形成射流火焰实现主燃烧室更大点火能量和更大初期火焰面积的氨/柴油双燃料模式, 利于提高点火稳定性, 加快燃烧反应速度, 是船机燃用氨燃料的一种有效途径. 目前对船机大尺度实现氨/柴油双燃料稳定高效燃烧的途径和策略有待探明. 基于此, 笔者首先构建了 G + SAGE 燃烧模型, 进而在预燃室式二冲程低速船机上开展氨/柴油双燃料燃烧过程的三维仿真研究, 分析压缩比和当量比对燃烧稳定性、发动机性能和排放的影响, 为氨/柴油双燃料发动机开发提供参考和依据.

1 氨/柴油双燃料机理构建和验证

采用 Chemkin 软件合并 Otomo 等^[8]的 NH₃ 机理和 Wang 等^[9]的 PRF 机理, 剔除相同组分和反应式,

对相同反应式的不同指前因子保留较大指前因子. 进行温度敏感性分析, 调节敏感性系数较大反应的指前因子, 保证机理对滞燃期的预测, 构建了含有 97 种组分、498 个反应的 NH₃-PRF 机理.

对比 Mathieu 等^[10]的试验结果, 不同当量比和压力条件下对氨滞燃期的验证结果表明, 采用构建的 NH₃-PRF 机理预测结果与试验吻合, 如图 1 所示. 同时也进行了正庚烷滞燃期验证, 如图 2 所示. 在不同

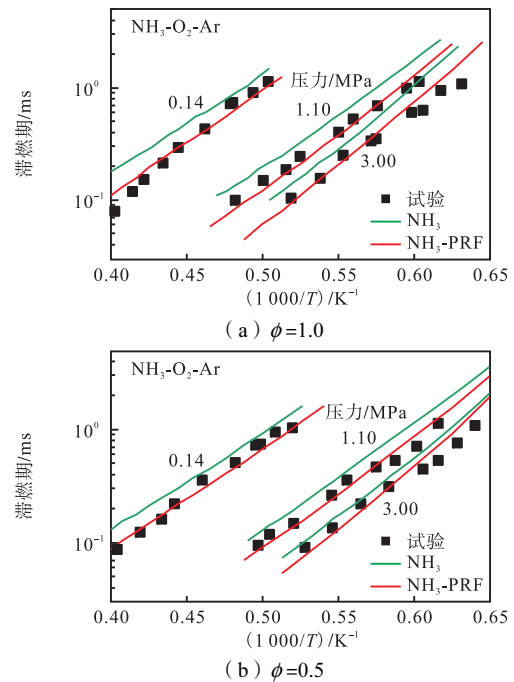


图 1 NH₃ 滞燃期验证

Fig.1 Verification of NH₃ ignition delay period

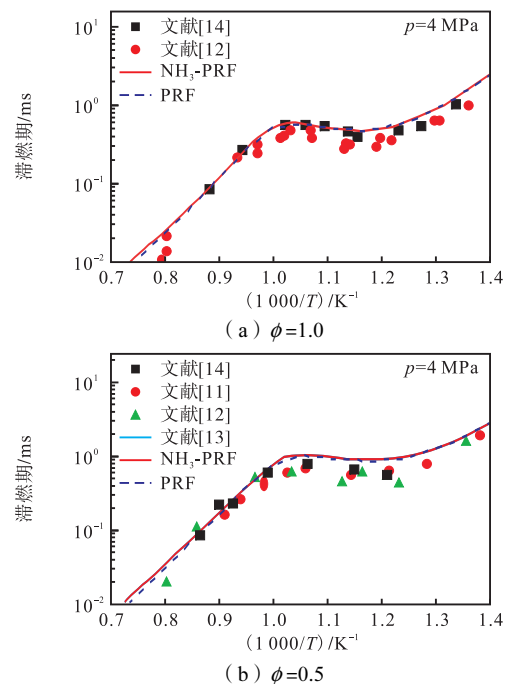


图 2 正庚烷滞燃期验证

Fig.2 Verification of ignition delay period of n-heptane

当量比和压力条件下,机理对正庚烷滞燃期的预测能较好预测文献[11—14]试验结果。

进一步验证 NH₃ 层流火焰速度如图 3 所示。在温度为 298 K 和压力为 0.1 MPa 下,机理可以预测文献[15—23]试验结果。图 4 为正庚烷层流火焰速度的验证。在温度为 298~398 K 和压力为 0.1 MPa 下,模拟值同样可以较好地预测 Dirrenberger 等^[24]测得的正庚烷层流火焰速度。

为了验证 NH₃-PRF 机理对重要组分变化趋势的预测能力,将该机理计算结果与 Dagaut^[25]在射流搅拌反应器(JSR)的试验数据进行对比,燃料与空气组分初始摩尔分数为 98.55% N₂、1.25% O₂、0.1% NH₃ 和 0.1% NO,在当量比为 0.1、压力为 0.1 MPa 及反应滞留时间为 0.1 s 条件下,验证结果如图 5 所示。该机

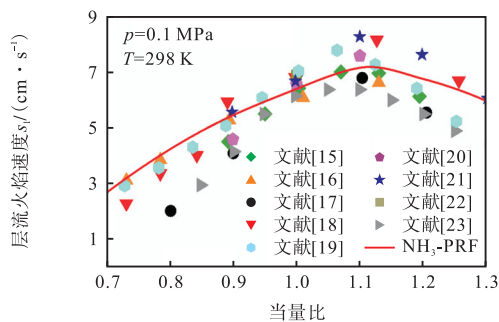


图 3 NH₃ 层流火焰速度验证

Fig.3 Verification of laminar flame velocity of NH₃

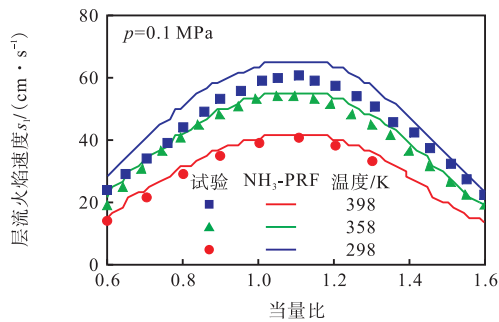


图 4 正庚烷层流火焰速度验证

Fig.4 Verification of laminar flame velocity of *n*-heptane

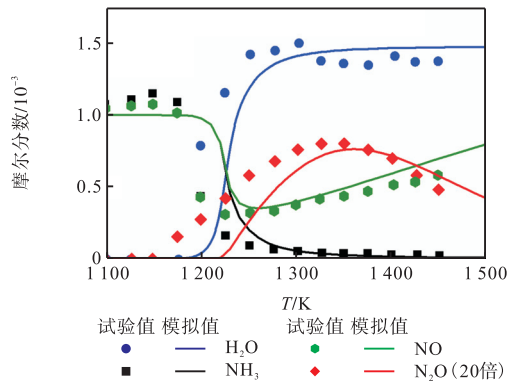


图 5 JSR 组分摩尔分数验证

Fig.5 Verification of JSR component concentration

理可以较准确地预测 NH₃、H₂O、N₂O 和 NO 摩尔分数的变化,表明构建的 NH₃-PRF 机理对反应过程的重要组分具有较好预测能力。

2 三维仿真模型构建与验证

2.1 发动机基本参数和模型验证

三维模拟研究是基于预燃室式双燃料低速机,由于目前没有氨燃料在船用低速机上的试验数据报道,所以模型标定采用天然气作为燃料。事实上,现在双燃料低速机也是在船舶上预留了氨燃料的接入口,为实现未来航运业的碳中和提供了解决方案,国内外正在开发的船用氨燃料低速机也是基于天然气双燃料发动机的二次开发。试验和模拟工况采用低速机运行的典型工况,负荷为 75%,该发动机结构及运行工况参数如表 1 所示。其中,定义 360° CA 为上止点对应的曲轴转角。

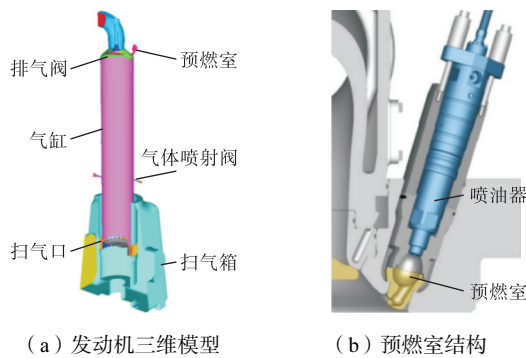
基于三维仿真软件 CONVERGE 建立了船用双燃料发动机的三维计算流体力学模型,包括扫气箱、排气道、气体喷射阀、气缸和预燃室等结构,如图 6a 所示。活塞下行过程,空气经扫气口进入气缸,气体喷射阀位于气缸中下部,分列于缸套两侧,在活塞上行初期将天然气或氨喷入气缸与空气形成预混合气。预燃室结构见图 6b,其中安装了 1 个 3 孔喷油器,喷孔直径为 0.42 mm,当活塞上行至上止点附近时,预燃室容积与上止点时主燃室的容积比为 0.57%,预燃室容积约为 0.157 L。在预燃室内喷射柴油发生自燃,预燃室压力升高,使高温、高活性气体通过连接通孔形成火焰射流,随后引燃主燃烧室内的混合气。模拟计算过程中采用的子模型如表 2 所示,

表 1 发动机结构及运行工况参数

Tab.1 Engine structure and operating condition parameters

参数	数值
冲程	2
缸径/mm	400
活塞行程/mm	2 315
转速/(r·min ⁻¹)	95.6
功率/kW	2 670
压缩比	12
引燃油喷射时刻/(°) CA	352.09
天然气喷射时刻/(°) CA	214
引燃油喷射压力/MPa	80
天然气喷射压力/MPa	0.82
循环喷油量/g	0.122(能量比为 1.56%)
循环喷气量/g	18.40(能量比为 98.44%)
扫气温度/K	308.5
扫气压力/MPa	0.329
排气阀关闭时刻/(°) CA	253.3
指示平均有效压力/MPa	1.50

燃烧模型采用 G 方程模型耦合 SAGE 模型, SAGE 模型采用化学反应动力学机理耦合 CFD 求解器求解的流动输运过程来计算燃烧反应过程. 由于船用发动机的缸径较大, 为了兼顾计算准确性和计算效率, 在分析网格敏感性后, 设置基础网格尺寸为 2 cm, 局部加密最小网格尺寸为 5 mm, 添加了基于速度和温度的自适应加密, 计算最大网格数约为 89 万. 模拟的计算区间设置为排气门开启时刻 (105.4° CA) 至下一循环的排气门开启时刻 (465.4° CA), 计算一个完整的工作循环 (360° CA). 图 7 为试验和模拟计算的缸内压力和放热率对比. 模拟计算的缸内压力和放热率与试验结果吻合较好, 试验缸内压力为 16.04 MPa, 模拟压力为 15.93 MPa, 误差为 0.69%. 表 3 为试验和模拟着火时刻、燃烧持续期和 CA 50 的对比, 上述关键燃烧参数误差都较小, 说明模型能较准确地预测发动机实际的工作过程.



(a) 发动机三维模型 (b) 预燃室结构

图 6 船用发动机三维模型及预燃室结构示意图
Fig.6 Schematic diagram of three-dimensional model and pre-chamber of marine engine

表 2 模拟计算物理模型

Tab.2 Physical model of simulation calculation

参数	模型
湍流模型	RNG $k-\epsilon$ 模型
喷雾撞壁	O'Rourke
喷雾破碎	KH-RT
燃烧模型	G 方程耦合 SAGE 模型
计算起止时刻/(°) CA	105.4 ~ 465.4

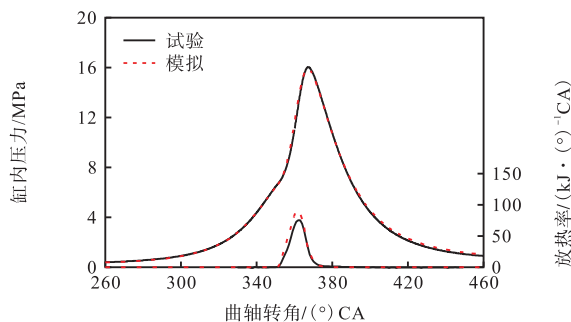


图 7 试验与模拟对比

Fig.7 Comparison between experiment and simulation

表 3 试验与模拟燃烧相关参数对比

Tab.3 Comparison of parameters related to experimental and simulated combustion

参数	着火时刻	CA 50	燃烧持续期
试验值/(°) CA	356.6	361.8	10.1
模拟值/(°) CA	356.1	361.5	10.6
误差/%	0.15	0.11	4.73

2.2 G 方程模型参数确定

为了探究氨/柴油双燃料在船机中的燃烧特性, 后续模拟过程将天然气替换为氨, 将天然气机理用 NH₃-PRF 机理替换. 由于模拟条件下氨气喷射时间早, 上止点附近缸内状态处在一种混合均匀的状态, 故天然气及氨气的物化性质等对燃烧的影响不大, 确保了这种转换方案的可行性. 氨的喷射温度为 310 K、喷射压力为 1.16 MPa. 该模拟方法可以对基于天然气/柴油双燃料低速机进行改装的氨气/柴油低速机正向开发提供可靠的模型参考.

为了节省计算时间, 采用 G 方程定义火焰面. 由于目前 CONVERGE 软件 G 方程模型中没有氨层流火焰速度的参数, 采用 Gulder 提出的经验公式 (1) 先确定 NH₃ 在温度为 298 K 和压力为 0.1 MPa 下的参考层流火焰速度 s_{l_ref} ; 再根据幂级公式 (2) 确定实际温度 T_u 和实际压力 p 下的层流火焰速度 s_l . 式中带有下标 ref 的各参数的温度、压力条件分别为 298 K 和 0.1 MPa; 其中, ϕ 为当量比; ω 、 η 和 ξ 为燃料相关的经验值; γ 、 β 分别为温度指数和压力指数, 其值与燃料类型无关, 不同当量比下的值分别由公式 (3) 和 (4) 确定^[26]. 通过确立 ω 、 η 、 ξ 、 λ_{ref} 和 β_{ref} 参数, 便可在 CONVERGE 软件中进行用户自定义设置, 确定燃料与温度和压力相关的层流火焰速度. 通过确立 ω 、 η 、 ξ 、 γ_{ref} 和 β_{ref} 参数, 便可在 CONVERGE 软件中进行用户自定义设置, 确定任意燃料与温度和压力相关的层流火焰速度, 从而扩大燃烧模型对不同燃料的适用性.

$$s_{l_ref} = \omega \phi^\eta \exp[-\xi(\phi - 1.075)^2] \quad (1)$$

$$s_l = s_{l_ref} \left(\frac{T_u}{T_{u_ref}} \right)^\gamma \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^\beta \quad (2)$$

$$\gamma = \gamma_{ref} - 0.8(\phi - 1) \quad (3)$$

$$\beta = \beta_{ref} + 0.22(\phi - 1) \quad (4)$$

将 ω 确定是温度为 298 K、压力为 0.1 MPa 及当量比为 1 时的 NH₃ 层流火焰速度, 设置为 0.068 m/s; 将 η 、 ξ 分别设置为 0.4 和 5.42, 将 γ_{ref} 、 β_{ref} 分别设置为 2.08 和 -0.16. 利用经验公式计算的不同温度条件下的层流火焰速度与试验拟合的结果如图 8 所示, 在

温度为 298 ~ 473 K、压力为 0.1 ~ 0.5 MPa 条件下, 设定的参数都能使经验公式很好地再现文献[15—23, 27—28]的试验结果。

为了进一步验证动力学机理及氨的层流火焰速度, 对燃用能量分数为 60% NH₃-40% H₂ 的发动机燃烧过程进行了模拟, 试验数据来自文献[29], 发动机为火花点燃式发动机, 混合气当量比为 1, 发动机参数见表 4, 模拟计算结果与试验对比见图 9, 试验与模拟的燃烧压力误差为 0.88%, 说明所采用的 G + SAGE 的燃烧模型具有较高的可靠性。

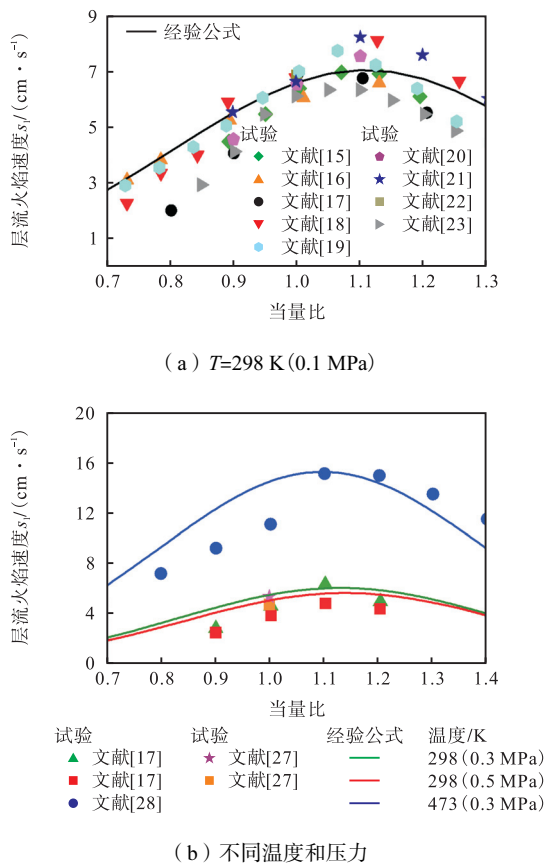


图 8 NH₃ 燃料在不同温度和压力下的层流火焰速度
Fig.8 Laminar flame velocity of NH₃ fuel under different temperature and pressure

表 4 氨-氢发动机参数与边界条件

参数	数值
缸径/mm	77
活塞行程/mm	85.5
转速/(r · min ⁻¹)	1 500
压缩比	10.5
进气门关闭时刻/(° CA)	-98
排气门开启时刻/(° CA)	106
初始温度/K	425
初始压力/MPa	0.161

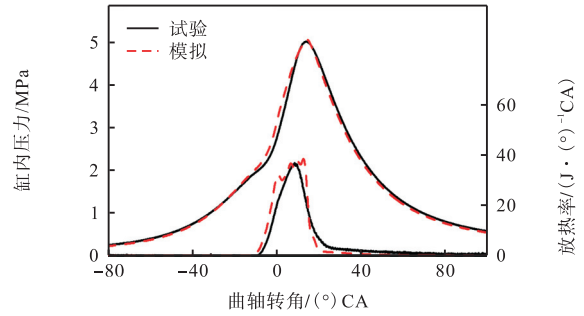


图 9 60% NH₃-40% H₂ 发动机燃烧对比
Fig.9 Verification of engine combustion in the case of 60% NH₃-40% H₂

3 氨/柴油双燃料低速船机燃烧过程计算结果与分析

3.1 压缩比影响

当采用与天然气/柴油双燃料相同的压缩比与引燃柴油油量, 主燃室当量比为 0.368 时, 由于氨自燃温度为 924 K, 高于天然气的 810 K 温度, 在压缩比为 12 的条件下氨未能着火. 考虑提高压缩比有利于提高缸内的温度和压力, 实现氨的稳定燃烧, 因而将压缩比提高到 13.5、14.0、14.5 和 14.8, 研究压缩比对燃烧过程的影响, 如图 10 所示. 在压缩比为 13.5 条件下, 缸内的放热率基本为 0, 说明氨燃料在缸内没有着火. 将压缩比提高到 14.0 后, 氨可以稳定着火, 但燃烧相位滞后, 缸内压力峰值及放热率较低. 压缩比提高到 14.5 和 14.8 时, 放热重心更加接近上止点, 对应的 CA 50 时刻分别为 363.72° CA 和 360.49° CA, 缸内燃烧压力增大。

图 11 为不同压缩比 ϵ 下主-预燃烧室通道方向上射流火焰开始喷入气缸时的温度和当量比分布. 随压缩比增大, 引燃柴油滞燃期缩短, 压缩比为 13.5 时, 在 361° CA 才观察到高温气流喷入气缸, 主-预燃烧室通道内气流的温度较低, 不利于射流火焰的发展. 而且此后活塞处于下行阶段, 由于燃烧室容积增大, 造成缸内的温度和压力损失, 形成的射流火焰的

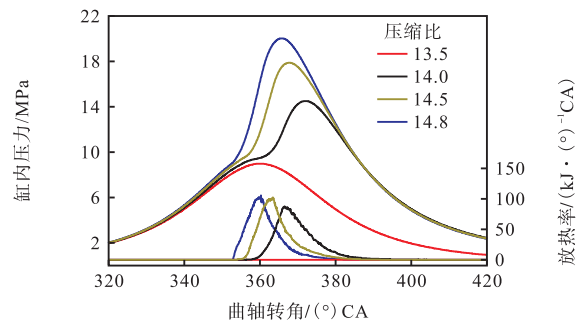


图 10 缸内压力和放热率随压缩比的变化
Fig.10 Variation of cylinder pressure and heat release rate with compression ratio

能量较低. 此外, 在射流火焰发展方向上形成的氨混合气当量比较低, 难以被预燃室射流火焰引燃, 所以压缩比为 13.5 时未能实现着火燃烧, 需要通过增加引燃油量来提高射流火焰能量促进氨的燃烧. 在压缩比提高到 14.0 以上时可在活塞运动到上止点前形成射流火焰, 主要是由于高压压缩比条件下预燃室内的温度压力也更高, 有利于射流火焰的形成. 随着压缩比的增大, 射流火焰的温度提高, 而且主燃室内氨混合气当量比增大, 更有利于射流火焰引燃缸内混合气, 形成氨燃料的稳定火焰传播.

随压缩比增大, 同一时刻下形成的射流火焰面积更大, 可以更大范围地点燃主燃室内的氨混合气, 具有更强的点火能力. 压缩比的提高使火焰发展和传播速度提高, 缸内的燃烧反应速率增大, 导致缸内温度较高且峰值时刻提前, 使放热更加集中在上止点附近, 缩短了燃烧持续期. 图 12 给出了压缩比对燃烧持续期、最高燃烧压力、指示燃油消耗率 (ISFC) 和 NO_x 排放的影响. 压缩比为 14.5 和 14.8 的燃烧持续期分别为 12.17°CA 和 11.45°CA , 相比于压缩比为 14.0 的 13.71°CA 时分别缩短了 1.54°CA 和 2.26°CA . 压缩比提高到 14.8 时, 燃烧反应速率的提高使最大燃烧爆发压力升高, 达到 20.03MPa , 相比于压缩比为 14.0 的 14.50MPa 提高了 5.53MPa , 发动机的机械负荷增大, 需要更强化的发动机结构满足高爆发压力需求.

为了更直观地展示压缩比对 ISFC 的影响, 将氨的 ISFC 根据热值转化为柴油的 ISFC, 随着发动机压缩比增大, 由于燃烧爆发压力升高, 燃烧等容度提高, 发动机 ISFC 降低, 但是温度的升高使 NO_x 排放升高. 在压缩比为 14.5 和 14.8 时, 发动机 ISFC 分别为 $160.66\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$ 和 $159.74\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$, 相比于压缩比为 14.0 的 $165.40\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$ 分别降低了 2.87% 和 3.42% ; 压缩比为 14.5 和 14.8 的 NO_x 排放分别为

$8.06\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$ 和 $8.61\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$, 相比于压缩比为 14.0 的 $6.15\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$ 分别提高了 31.06% 和 40.00% . 在实现稳定着火条件下综合考虑最大爆发压力和热效率, 压缩比为 14.5 可以获得较优的综合性能, 最大爆发压力为 17.69MPa , 指示热效率为 49.87% , NO_x 排放为 $8.06\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$. 需要注意的是, 天然气低压双燃料发动机 NO_x 直接满足 Tier III 限值 ($3.5\text{g}/(\text{kW}\cdot\text{h})$), 氨燃料则产生更高的 NO_x 排放, 其主要来源于燃用氨燃料产生的燃料型 NO_x , 需要采用 SCR 后处理等技术降低 NO_x 排放.

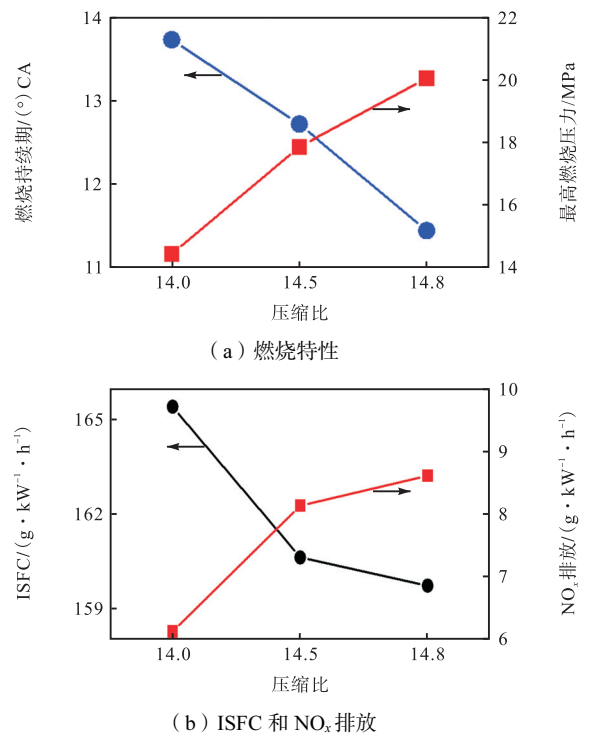


图 12 燃烧特性、ISFC 和 NO_x 排放随压缩比变化
Fig.12 Variations of combustion characteristics, ISFC and NO_x emission with compression ratio

3.2 当量比影响

采用的射流火焰点燃方式有利于扩展氨燃料的稀燃极限, 进一步在压缩比为 14.5 的条件下, 研究了氨燃料不同当量比对燃烧和排放性能的影响. 图 13 所示当量比 ϕ 为 0.351 时燃烧放热缓慢, 燃烧持续期相比于其他当量比条件明显延长, 最高燃烧压力为 13.45MPa , 做功能力下降. 随着氨燃料当量比增大, 火焰传播速度加快, 燃烧集中在上止点附近, 燃烧压力峰值和放热率明显升高. 当量比从 0.351 增加至 0.461 时, 最大燃烧压力由 13.45MPa 增大到 23.71MPa , 提高了 10.26MPa , 燃烧持续期由 18.64°CA 缩短到 6.11°CA , 缩短了 12.53°CA . 随当量比增大, 缸内燃烧温度明显升高, 温度峰值明显提前. 在当量比为 0.351 时, 缸内燃烧温度峰值为 1460K , 而当量比

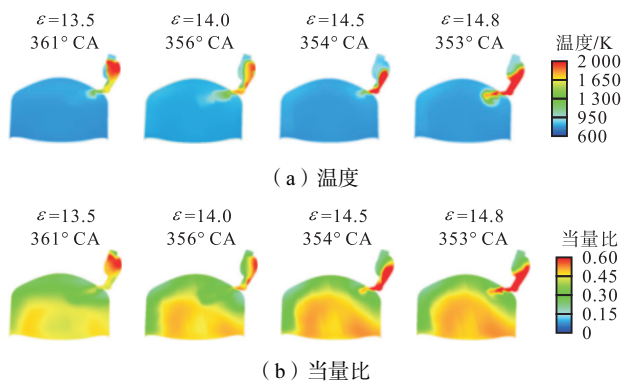
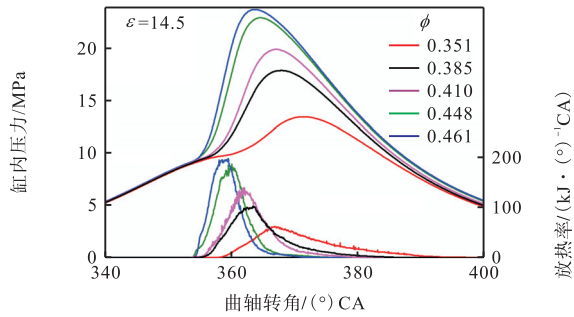


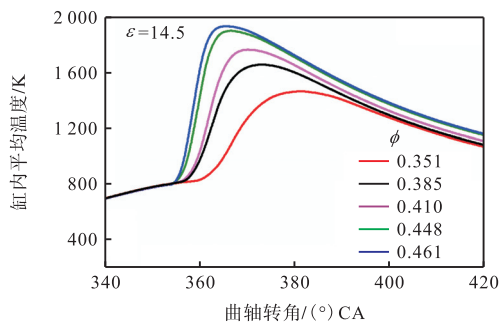
图 11 不同压缩比射流火焰进入气缸时的温度和当量比分布
Fig.11 Distribution of temperature and equivalence ratio when jet flame enters the cylinder with different compression ratios

为 0.385、0.410、0.448 和 0.461 时分别为 1655、1759、1892 和 1926 K, 燃烧反应速率明显加快。

图 14 为不同当量比下 NH₃ 质量分数随曲轴转角变化规律. 随宏观当量比增加, 缸内局部浓混合气区域增大, 射流火焰首先引燃壁面附近的 NH₃, 随后逐渐向气缸中心发展. 整体当量比越大, NH₃ 消耗的时刻越早, 消耗速率越快, 宏观当量比为 0.351 时, 火焰在较稀混合气中的传播速度较慢, 在 360° CA 才能



(a) 缸内压力和放热率



(b) 缸内平均温度

图 13 缸内压力、放热率和缸内平均温度随当量比的变化
Fig.13 Variations of cylinder pressure, heat release rate and average temperature with equivalence ratio

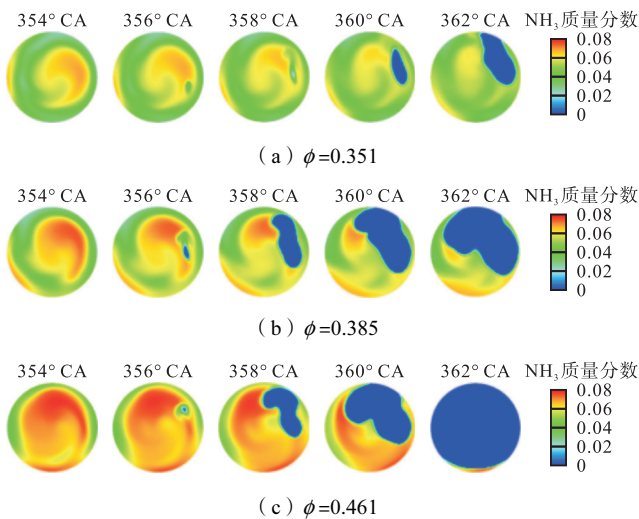


图 14 主燃烧室横截面下不同当量比 NH₃ 质量分数随曲轴转角变化规律
Fig.14 Mass fraction distribution of NH₃ with different equivalence ratio

明显地观察到 NH₃ 消耗, 且消耗区域发展速度较慢. 在当量比为 0.461、362° CA 时刻, NH₃ 已经基本完全消耗。

图 15 为不同宏观当量比下的气流速度和火焰面变化, 图中黑线为 G=0 等值线. 当量比为 0.351 时, 引燃油的着火滞燃期延长, 在 358° CA 时在主-预燃烧室通道附近的高湍动能区域才能观察到射流火焰面. 此时, 由于预燃室燃烧放热导致压力升高, 在压差作用下, 预燃室中的高速气流先于火焰面 (G=0) 进入主燃烧室. 高速气流发展明显早于射流火焰面, 而且高速气流进入主燃室后流速会快速降低, 在火焰发展滞后的情况下气流对火焰面传播的促进作用减弱, 导致低当量比条件下的燃烧持续期延长. 在当量比提高到 0.385 时, 火焰面稍落后于气流速度的发展, 火焰传播明显加快; 而当量比提高到 0.461, 火焰面与气流速度几乎同步发展, 射流火焰具有较大的贯穿距离, 在缸内形成更强的湍流扰动, 提高了火焰传播速度, 使缸内的温度和压力快速升高。

图 16 为不同当量比下 ISFC、NO_x 和 NO 排放的变化. 在当量比为 0.351 时, 较低的燃烧反应速率使燃烧等容度下降, 发动机 ISFC 较高; 而当量比从 0.351 提高到 0.410 时, 燃烧重心逐渐靠近上止点, 燃烧速率增大导致燃烧等容度提高, 发动机燃油经济性改善, 最低 ISFC 为 160.22 g/(kW·h), 指示热效率为 50.01%; 在当量比大于 0.410 时, 由于燃烧相位过早, 压缩过程中做的负功增加, 反而导致 ISFC 增大. 随着当量比的增加, 缸内温度提高, NO_x 排放也大幅度增大. NO 是 NO_x 最主要的成分, 约占 NO_x 排

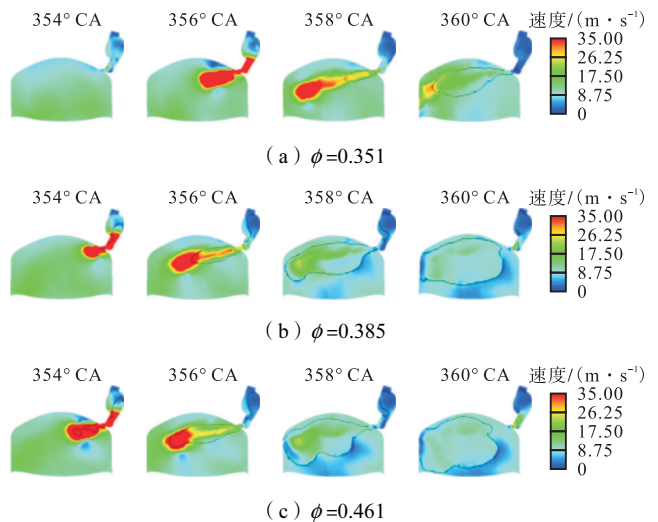


图 15 不同宏观当量比时主-预燃烧室通道方向纵向切面下的气流速度分布和火焰面变化
Fig.15 Air velocity distribution and flame surface in the main and pre-combustion chamber at different macroscopic equivalence ratios

放总量的 90%，在当量比为 0.461 时，NO_x 排放相比于当量比为 0.410 时增加了 86.7%，为 18.53 g/(kW·h)，NO_x 排放显著提高的一个原因是随当量比的增加，喷射更多的氨导致燃料型 NO 增加。NO_x 升高的另一个原因是高温环境的影响，图 17 为 360° CA 不同当量比 NO 质量分数为 0.003 和温度为 1 800 K 等值面的分布。可以看出，NO 的分布和温度分布十分相近，随着当量比提高，1 800 K 的高温区域明显增加，NO 等值面的区域面积也逐渐增大，高温区域增大促进了 NO_x 的生成。综上所述，当量比为 0.410 具有较好的燃料经济性，指示热效率为 50.01%，

进一步提高当量比反而使 ISFC 增大、热效率降低，NO_x 排放大幅增加。

4 结 论

(1) 构建了 NH₃-PRF 双燃料机理，可以较准确地预测 NH₃ 的滞燃期、层流火焰速度以及反应过程中重要组分浓度的变化。

(2) 采用试验数据拟合经验公式的方法确定了 G 方程模型中 NH₃ 燃料层流火焰速度的经验参数，提出了适用于氨/柴油双燃料低速机的 G + SAGE 燃烧模型，具有较好的计算效率和精度。

(3) 提高压缩比有利于射流火焰的发展以及缸内高当量比区域的形成，压缩比为 14.5 时，相比于原机压缩比为 12.0 在相同的条件下可实现稳定着火和较佳的经济、排放性，其 ISFC 为 160.66 g/(kW·h)，NO_x 排放为 8.06 g/(kW·h)，最大爆发压力也在合理范围。

(4) 氨燃料当量比为 0.410 时可获得热效率和排放的综合优化结果；进一步增大当量比导致着火时刻过早，燃烧温度过高，进而热效率降低，NO_x 排放大幅增加，而较低的当量比则会使燃烧速度减慢，热效率下降。

参考文献：

[1] IMO. Fourth greenhouse gas study 2020[EB/OL]. www.imo.org, 2020.

[2] Al-Aboosi F Y, El-Halwagi M M, Moore M, et al. Renewable ammonia as an alternative fuel for the shipping industry[J]. Current Opinion in Chemical Engineering, 2021, 31: 100670.

[3] Reiter A J, Kong S C. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel[J]. Fuel, 2011, 90(1): 87-97.

[4] Niki Y, Nitta Y, Sekiguchi H, et al. Diesel fuel multiple injection effects on emission characteristics of diesel engine mixed ammonia gas into intake air[J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-Transactions of The Asme, 2019, 141(6): 061020.

[5] 郑尊清, 李春雨, 叶映, 等. 低压喷射天然气双燃料船机清洁燃烧策略的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2020, 26(3): 212-218.

[6] 大连理工大学能源与动力学院. 首台氨/柴油双直喷二冲程发动机原理样机开发成功[EB/OL]. http://power.dlut.edu.cn/info/4528/19384.htm, 2022-01-25.

[7] 郑尊清, 毛一玲, 刘腾, 等. 预燃室式柴油-天然气双燃料船用发动机热效率优化燃烧控制策略仿真研究[J]. 内燃机工程, 2020, 41(6): 19-28.

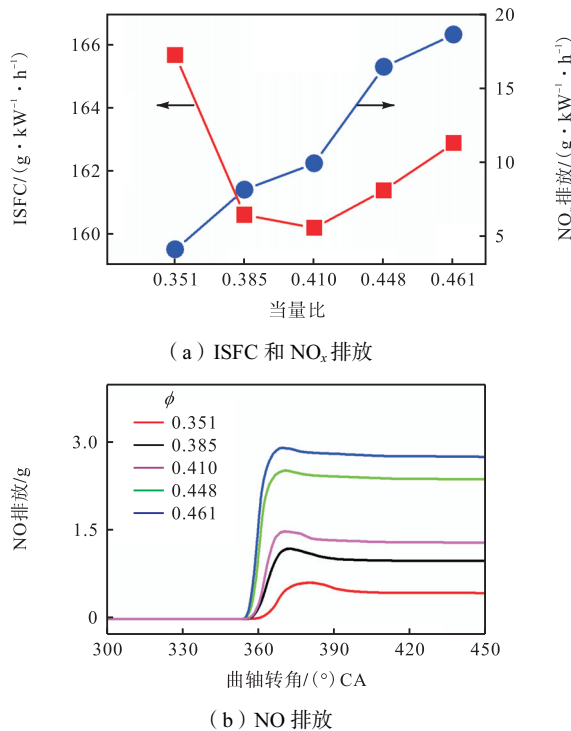


图 16 不同当量比 ISFC、NO_x 及 NO 排放的变化
Fig.16 Changes of ISFC, NO_x and NO with different equivalence ratios

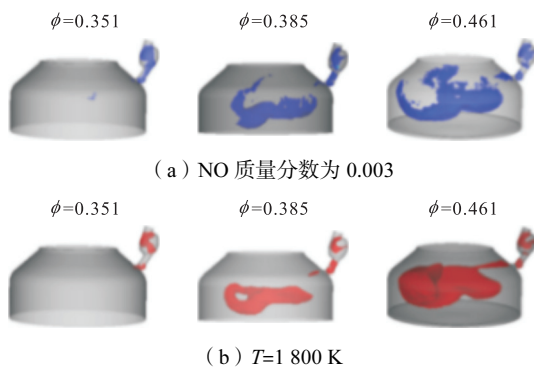


图 17 360° CA 不同当量比 NO 质量分数为 0.003 和 T=1 800 K 等值面分布
Fig.17 Iso-surface distribution of NO mass fraction y = 0.003 and T=1 800 K at different equivalence ratios of 360° CA

- [8] Otomo J, Koshi M, Mitsumori T, et al. Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(5): 3004-3014.
- [9] Wang H, Yao M, Reitz R D. Development of a reduced primary reference fuel mechanism for internal combustion engine combustion simulations[J]. Energy & Fuels, 2013, 27(12): 7843-7853.
- [10] Mathieu O, Petersen E L. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of ammonia and related NO_x chemistry[J]. Combustion and Flame, 2015, 162(3): 554-570.
- [11] Herzler J, Ludger J, Paul R, et al. Shock-tube study of the ignition of propane at intermediate temperatures and high pressures[J]. Combustion Science and Technology, 2004, 176(10): 1627-1637.
- [12] Hartmann M, Gushterova I, Fikri M, et al. Auto-ignition of toluene-doped *n*-heptane and iso-octane/air mixtures: High-pressure shock-tube experiments and kinetics modeling[J]. Combustion and Flame, 2011, 158(1): 172-178.
- [13] Shen H P S, Steinberg J, Vanderover J, et al. A shock tube study of the ignition of *n*-heptane, *n*-decane, *n*-dodecane, and *n*-tetradecane at elevated pressures[J]. Energy & Fuels, 2009, 23(5): 2482-2489.
- [14] Fieweger K, Blumenthal R, Adomeit G. Self-ignition of S. I. engine model fuels: A shock tube investigation at high pressure[J]. Combustion and Flame, 1997, 109(4): 599-619.
- [15] Takizawa K, Takahashi A, Tokuhashi K, et al. Burning velocity measurements of nitrogen-containing compounds[J]. Journal of Hazardous Materials, 2008, 155(1): 144-152.
- [16] Pfahl U J, Ross M C, Shepherd J E, et al. Flammability limits, ignition energy, and flame speeds in H₂-CH₄-NH₃-N₂O-O₂-N₂ mixtures[J]. Combustion and Flame, 2000, 123(1): 140-158.
- [17] Hayakawa A, Goto T, Mimoto R, et al. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures[J]. Fuel, 2015, 159: 98-106.
- [18] Ronney P D. Effect of chemistry and transport properties on near-limit flames at microgravity[J]. Combustion Science and Technology, 1988, 59(1): 123-141.
- [19] Jabbour T, Clodic D F. Burning velocity and refrigerant flammability classification/discussion[J]. Ashrae Transactions, 2004, 110: 522.
- [20] Lhuillier C, Brequigny P, Lamoureux N, et al. Experimental investigation on laminar burning velocities of ammonia/hydrogen/air mixtures at elevated temperatures[J]. Fuel, 2020, 263: 116653.
- [21] Mei B W, Zhang X Y, Ma S Y, et al. Experimental and kinetic modeling investigation on the laminar flame propagation of ammonia under oxygen enrichment and elevated pressure conditions[J]. Combustion and Flame, 2019, 210: 236-246.
- [22] Ichikawa A, Hayakawa A, Kitagawa Y, et al. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/hydrogen/air premixed flames at elevated pressures[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015, 40(30): 9570-9578.
- [23] Han X, Wang Z, Costa M, et al. Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH₃/air, NH₃/H₂/air, NH₃/CO/air and NH₃/CH₄/air premixed flames[J]. Combustion and Flame, 2019, 206: 214-226.
- [24] Dirrenberger P, Glaude P A, Bounaceur R, et al. Laminar burning velocity of gasolines with addition of ethanol[J]. Fuel, 2014, 115: 162-169.
- [25] Dagaut P. On the oxidation of ammonia and mutual sensitization of the oxidation of NO and ammonia: Experimental and kinetic modeling[J]. Combustion Science and Technology, 2022, 194(1): 117-129.
- [26] Amirante R, Distaso E, Tamburrano P, et al. Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations[J]. International Journal of Engine Research, 2017, 18(9): 951-970.
- [27] Wang S X, Wang Z H, Elbaz A M, et al. Experimental study and kinetic analysis of the laminar burning velocity of NH₃/syngas/air, NH₃/CO/air and NH₃/H₂/air premixed flames at elevated pressures[J]. Combustion and Flame, 2020, 221: 270-287.
- [28] Shrestha K P, Lhuillier C, Barbosa A A, et al. An experimental and modeling study of ammonia with enriched oxygen content and ammonia/hydrogen laminar flame speed at elevated pressure and temperature[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2021, 38(2): 2163-2174.
- [29] Lhuillier C, Brequigny P, Contino F, et al. Experimental study on ammonia/hydrogen/air combustion in spark ignition engine conditions[J]. Fuel, 2020, 269: 117448.