

煤基合成柴油燃烧及排放特性的数值模拟研究

林少典¹, 孙万臣¹, 郭亮¹, 张浩¹, 曾文鹏¹, 朱格男¹, 蒋梦奇¹, 于长友¹

(1. 吉林大学 汽车仿真与控制国家重点实验室, 长春 130025)

Numerical study on the combustion and emission characteristics of coal-to-liquid

LIN Shao-dian¹, SUN Wan-chen¹, GUO Liang¹, ZHANG Hao¹, ZENG Wen-peng¹, ZHU Ge-nan¹, JIANG Meng-qi¹, YU Chang-you¹

(1.State Key Laboratory of Automotive Simulation and Control, Jilin University, Changchun 130025, China)

Abstract: Based on a compression ignition engine, a simulation model was established and the combustion processes of diesel/coal-to-liquid (CTL) blends with different CTL mass fractions were studied using the three-dimensional simulation method. The results indicate that as the CTL mass fraction increases, the accumulation of OH radical is accelerated during the low-temperature reaction stage, leading to the accelerated low-temperature reaction process, the earlier ignition and the shortened ignition delay. Fuels with higher CTL mass fractions exhibit less tendencies of premixed combustion, lower combustion speeds and lower combustion temperatures. The influence factors of CTL on soot generation mainly include the fuel component and the premixed combustion ratio. On the one hand, because CTL is free from aromatics, the mass profile of benzene, which is an important soot precursor, shows a single peak feature during the combustion of CTL, rather than the double peak feature when burning diesel. The effect of aromatics on soot formation is weakened as for CTL. Therefore, compared with diesel, CTL significantly reduces soot emissions. On the other hand, more diffusion combustion occurs and more fuel-rich zones are formed after ignition for fuels with higher CTL mass fractions, making the soot emission of the fuel containing 60% CTL by mass higher than that of the fuel with 30% mass fraction. In addition, the lower combustion temperature of CTL helps to reduce NO_x emissions.

摘要: 基于一台压燃式发动机建立了数值模拟平台, 对具有不同煤基合成柴油 (coal-to-liquid, CTL) 质量分数的柴油/CTL 混合燃料燃烧过程进行了三维数值模拟研究。结果表明, 随着 CTL 比例的增加, 燃烧过程中低温反应阶段 OH 质量上升的速度增加, 导致低温反应进程加快, 着火提前, 滞燃期缩短。CTL 比例较高的燃料具有较低的预混燃烧比例、较慢的燃烧速度与较低的燃烧温度。CTL 对碳烟生成的影响机制主要体现在燃料组分和预混合燃烧比例方面。一方面, 由于燃料组分中没有芳香烃, 燃用 CTL 时碳烟前驱物苯随时间的变化规律呈现出单峰特征, 而不是燃用柴油时的双峰特征, 芳香烃在碳烟生成过程中的作用被削弱, 因此与柴油相比, CTL 显著地降低了碳烟排放。另一方面, CTL 比例较高的燃料更多地参与扩散燃烧, 着火发生后缸内存在较多的局部过浓区, 导致在 CTL 质量分数为 60% 情况下的碳烟排放高于质量分数为 30% 时的碳烟排放。此外, CTL 较低的燃烧温度有助于降低 NO_x 排放。

关键词: 煤基合成柴油; 燃烧; 污染物; 数值模拟

Key words: coal-to-liquid; combustion; emission; simulation

收稿日期: xxxx-xx-xx

基金项目: 国家自然科学基金 (52202470); 吉林省自然科学基金 (20220101205JC, 20220101212JC); 吉林省产业技术研发项目 (2020C025-2); 吉林大学 2021 年度学科交叉融合创新项目 (XJRCYB07); 吉林大学长沙汽车创新研究院自由探索项目 (CAIRIZT20220202)

作者简介: 林少典 (1995-), 男, 博士生, 主要研究方向为内燃机工作过程优化与控制, E-mail:1773114174@qq.com;

孙万臣 (通讯作者, 1968-), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为内燃机工作过程优化与控制, E-mail:sunwc@jlu.edu.cn.

0 概述

全球能源与环境形势的日益严峻促使世界各国对其能源结构进行转型升级。我国的化石能源呈现出煤炭储量丰富、石油和天然气储量相对不足的特点,近年来,我国大力推动了煤炭的高效清洁利用,其中,煤制油技术得到了迅速发展^[1, 2]。通过费托合成法这种间接液化工艺获得的煤基合成柴油(coal-to-liquid, CTL),其成份绝大多数为饱和烷烃,几乎不含烯烃、芳香烃和硫,是一种极有应用前景的内燃机清洁代用燃料^[3]。Cai等^[4]的研究发现相比于纯柴油燃烧,发动机燃用柴油/CTL混合燃料及纯CTL时可以获得更低的循环变动以及更低的工作粗暴程度。Yang等^[5]的研究也表明CTL有助于减缓发动机的振动强度。在排放特性方面,与柴油相比,燃用CTL有利于抑制各常规排放物,特别是碳烟和颗粒物的生成^[6, 7]。CTL表现出以上优势的同时也存在一些不足。CTL极好的着火性非常容易造成预混合燃烧量低、燃烧定容性较差的问题^[8]。为此,许多研究人员在CTL燃烧过程中引入反应活性较低的燃料添加剂,获得了比燃用纯CTL时更高的发动机热效率^[9, 10]。目前CTL相关研究多集中在宏观的燃烧与排放特性,但CTL燃烧与污染物生成过程中的关键环节与内在机制仍不明晰,相关燃烧理论有待发展。

为深入探究CTL对压燃式发动机燃烧与污染物生成过程的内在影响机制,本文基于课题组前期构建的柴油/CTL模型燃料简化机理^[11]和一台热力学发动机,建立了燃烧过程三维数值模拟平台。对具有不同掺混比例的柴油/CTL混合燃料燃烧过程进行了数值模拟。分析、比较了不同燃料燃烧过程中关键中间产物以及缸内温度、当量比、污染物分布的演化历程,探索了它们与宏观燃烧及污染物生成特性之间的联系。

1 研究方案与数值模拟平台的建立

本文基于一台由CA4DD1-14E4发动机改造而成的单缸发动机建立数值模拟平台并开展数值模拟研究,发动机的主要技术参数如表1所示。在转速

为1400r/min、50%负荷工况条件下(缸内每循环喷入燃料的热量为1438J),对具有0%、30%、60%和100%4种不同CTL质量分数的柴油/CTL混合燃料燃烧过程进行了数值模拟。为方便表示,将以上4种燃料分别命名为CTL0、CTL30、CTL60和CTL100。其中,两种基础燃料柴油和CTL的理化特性如表2所示。此外,喷油正时和喷油压力分别为-9°CA ATDC和100MPa。

表1 CA4DD1-14E4 主要技术参数

参数名称、单位	参数值
发动机类型	四冲程、四气门、增压中冷
缸径×行程/mm	95.4×104.9
连杆长度/mm	162
压缩比	17.1
额定功率@转速 /(kW@rpm)	103@3200
最大转矩@转速 /(N·m@rpm)	350@1400-2800
喷孔直径/mm	0.12
喷雾锥角/°	12

表2 柴油与CTL主要理化特性

项目	柴油	CTL
十六烷值	52.3	75.4
低热值/(MJ/kg)	42.69	43.07
密度(20°C)/(kg/m ³)	837.5	757
粘度/(mm ² /s)	5.003	2.570
总芳烃含量/%	10.9	0.8
硫含量/10 ⁻⁶	3.7	0.38

由于本文重点研究柴油/CTL的掺混燃烧,不涉及燃料的进气道喷射过程,为简化数值模型,所研究计算域不包括进、排气道,仅考虑封闭的燃烧室空间。又由于压燃式发动机喷油束相对于燃烧室具有对称性,按照实际喷油器喷孔数量7,计算域进一步简化为燃烧室空间的1/7。根据实际发动机燃烧室的凹坑形线和主要技术参数,构建了如图1所示的燃烧室几何模型。



图1 燃烧室三维几何模型

内燃机缸内燃烧过程是一个包含相变、传热、传质、化学反应等多种物理、化学变化的复杂过程,用以描述这些现象的计算模型如表3所示。本文采用了 CONVERGE 提供的 SAGE 详细化学动力学求解器进行燃烧过程中化学反应的模拟,实现了计算流体力学与化学动力学对燃烧过程的耦合计算。采用的化学动力学模型为课题组前期开发的柴油/CTL 模型燃料简化机理^[11]。其中,以质量分数分别为 74.31%、25.69%的正十二烷、间二甲苯表征柴油;以质量分数分别为 88.99%、11.01%的正十二烷、异辛烷表征 CTL。

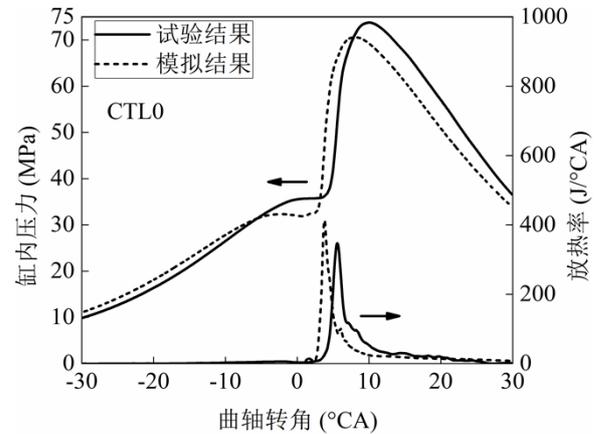
表3 控制方程及计算模型

项目	方程或模型
控制方程	质量守恒方程
	动量守恒方程
	能量守恒方程
湍流模型	RNG k- ϵ 模型
喷雾破碎	KH-RT 模型
湍流扩散	O'Rourke 模型
液滴碰撞	NTC 模型
液滴/壁面相互作用	Wall film 模型
液滴蒸发	Frossling 模型
碰撞结果处理	Post 复合模型
燃烧模型	SAGE 化学反应求解器模型
碳烟模型	Hiroyasu 模型
NO _x 模型	扩展的 Zeldovich 模型

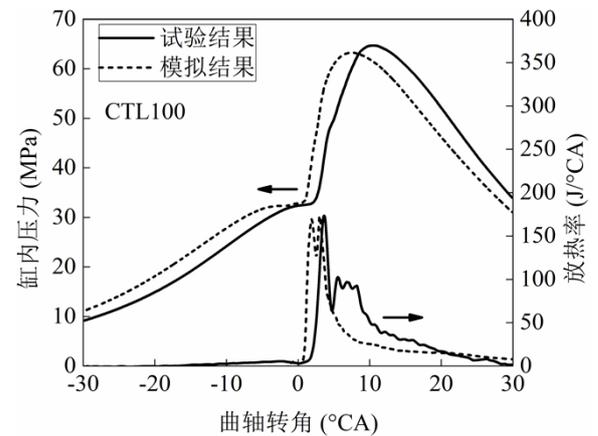
内燃机缸内各种物化参数的变化规律是基于有限元分析方法进行求解的,需要对实际问题进行空间和时间范围内的离散化处理。在本文的几何模型中,基础网格尺寸设置为 2mm,并且分别在计算域和喷嘴附近区域设置了固定加密,加密等级分别为 2 和 3,生效区间为喷油始点到 30°CA ATDC。计算时间步长为可变步长,根据关键参数随时间的变化率在 1.0e-7s 到 5.0e-5s 范围内调整时间步长。

本文数值模型的起始计算时刻设置为 -134°CA ATDC,计算终止时刻设定为 130°CA ATDC。初始时刻缸内组分为纯空气,温度和压力分别为 378K 和

90000Pa。缸盖底部、气缸壁和活塞顶部的表面初始温度分别为 523K, 453K 和 553K。在本文采用的发动机工况条件下,对模拟得到的燃用 CTL0 和 CTL100 时的缸压、放热率与试验结果进行了比较,如图 2 所示。对于柴油燃烧过程,模拟的缸压和放热率峰值的相对误差分别为 4.27%和 24.28%;对于 CTL 燃烧过程,二者分别为 2.21%和 5.08%。此外,模拟得到的主要放热时刻也与试验结果之间具有较好的一致性。因此,三维数值模型可用于本文后续数值模拟研究中。



(a) CTL0



(b) CTL100

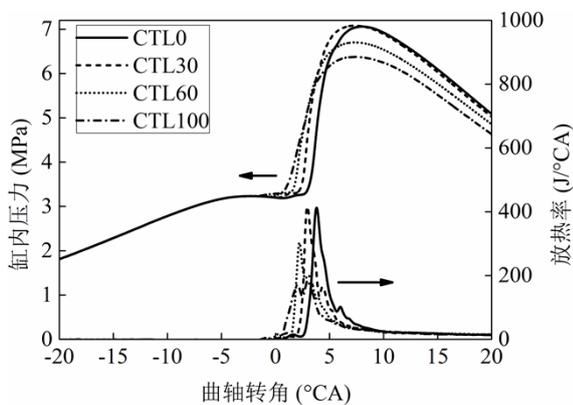
图2 模拟结果与试验结果的对比

2 仿真结果及分析

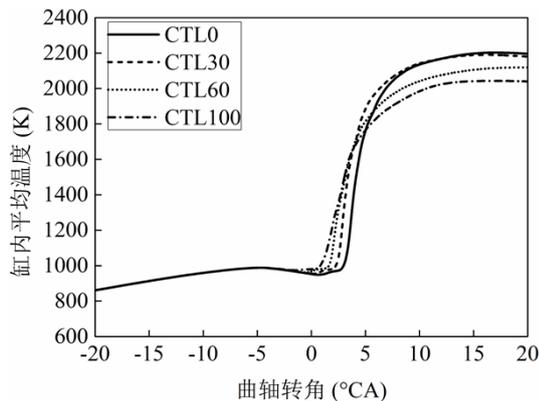
2.1 燃烧特性分析

发动机宏观燃烧特性包括缸内压力、放热率以及滞燃期、燃烧持续期等与放热率相关的参数。本文定义滞燃期为从喷油时刻到累积放热量达到 10% 经历的曲轴转角,定义燃烧持续期为累积放热量从

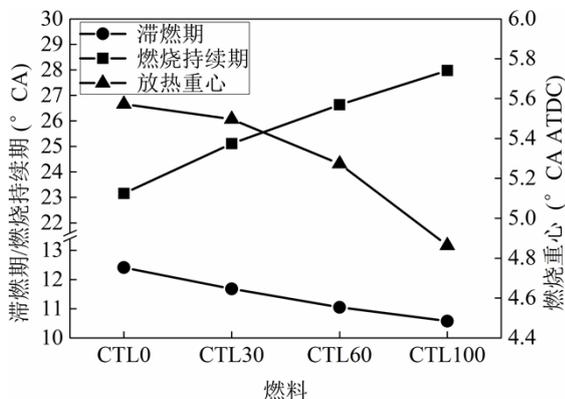
10%到 90%经历的曲轴转角, 定义燃烧重心为累积放热量达到 50%时对应的曲轴转角。燃用不同掺混比例的柴油/CTL 混合燃料时的缸压、放热率和缸内平均温度如图 3 (a) 和图 3 (b) 所示, 燃烧特征参数如图 3 (c) 所示。由图 3 可以看出, 随着混合燃料中 CTL 比例的增加, 由于十六烷值的增加, 着火时刻与放热重心逐渐靠前, 滞燃期逐渐缩短, 进而降低了预混燃烧比例。燃用 CTL 较高比例的 CTL60、CTL100 在着火前形成的可燃混合气数量较少, 燃烧定容性较差, 燃烧速度较慢, 所以 CTL 比例的增加导致缸压峰值、放热率峰值和缸内平均温度逐渐降低, 燃烧持续期逐渐延长。



(a) 缸压与放热率



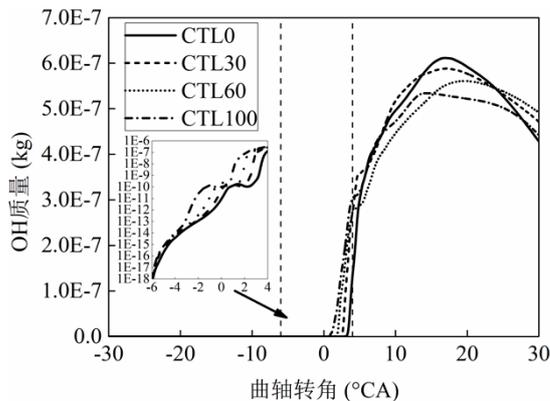
(b) 缸内平均温度



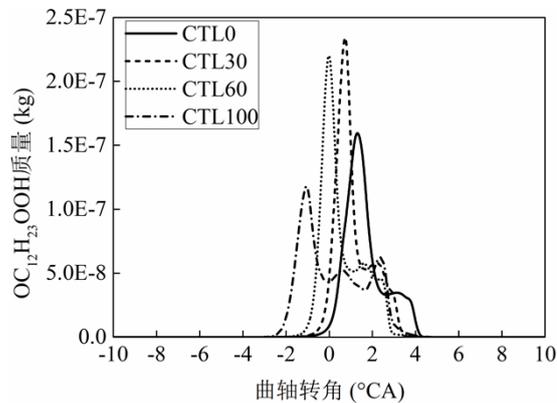
(c) 燃烧特征参数

图 3 不同比例的柴油/CTL 混合燃料宏观燃烧特性

为深入探究不同掺混比例的柴油/CTL 混合燃料的内在燃烧机制, 本文分析了对着火起决定性作用的 OH 自由基以及正十二烷向同碳原子数组分转化过程中最终产物 $OC_{12}H_{23}OOH$ 的变化规律, 如图 4 所示。从图中可以看出, 随着燃料中 CTL 比例的提高, 着火前 OH 自由基累积的速度越快。这主要是因为 CTL 比例的增加将导致混合燃料中间二甲苯比例降低, 间二甲苯在低温反应阶段几乎不向小分子自由基提供 OH, 反而与正十二烷等组分存在对 OH 的竞争关系, 因此燃用 CTL 时, OH 浓度上升的速度最快。着火前较快的 OH 自由基累积速度也有利于促进 CTL 低温反应的进行, 所以随着 CTL 比例的增加, $OC_{12}H_{23}OOH$ 生成和消耗时刻的进程提前, 从而加快了着火过程。此外, 还可以看到燃用大比例 CTL 的混合燃料时燃烧后期 OH 自由基的浓度较低, 这主要是因为此时预混合燃烧比例较低, 低温反应阶段燃料相关组分进行加氧反应的倾向较低。



(a) OH



(b) $OC_{12}H_{23}OOH$

图 4 OH 与 $OC_{12}H_{23}OOH$ 在柴油/CTL 混合燃料燃烧过程中的变化规律

2.2 污染物生成特性分析

燃用不同 CTL 比例的燃料产生的碳烟质量变化规律如图 5 所示。可以看到, 碳烟排放整体上呈现

出随着 CTL 比例的增加而降低的趋势。这主要是因为 CTL 中没有容易生成碳烟前驱物的多环芳香烃。需要注意的是碳烟生成量并不是随 CTL 比例单调变化的, 当 CTL 质量分数为 30% 时, 碳烟生成量反而比 CTL 质量分数为 60% 的情况下碳烟生成量低。这可能是由于与 CTL60 相比, CTL30 这种燃料的预混合燃烧比例较高而扩散燃烧比例较低, 从而减少了缸内局部过浓区。当 CTL 比例从 30% 降至 0%, 燃料中芳香烃组分对碳烟生成的促进作用超过了预混合燃烧对碳烟生成的抑制作用, 所以碳烟生成量重新上升。

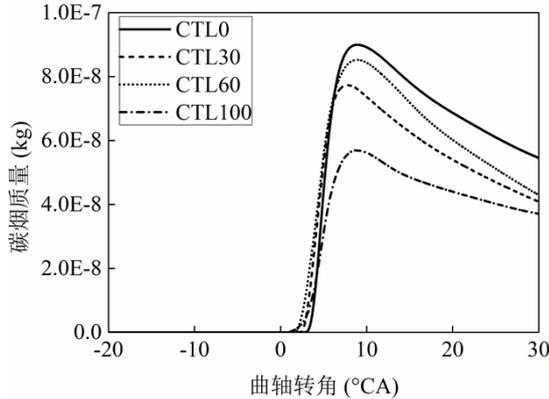
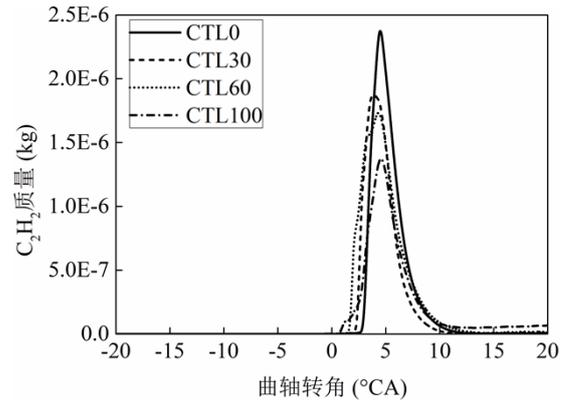
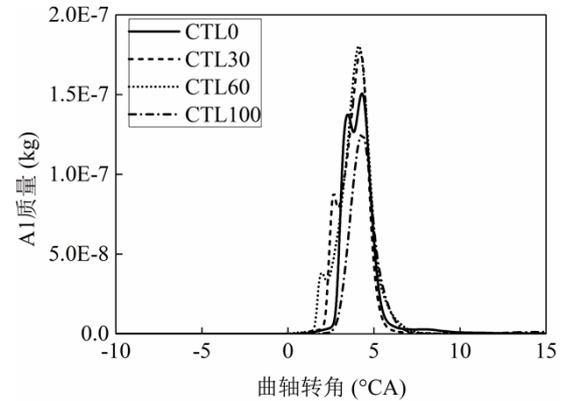


图 5 不同 CTL 比例的柴油/CTL 混合燃料碳烟生成特性

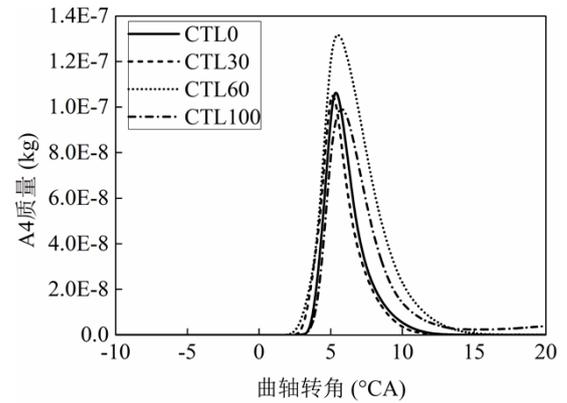
作为重要的碳烟前驱物, C_2H_2 、苯 (A1) 和芘 (A4) 在燃烧过程中的变化规律如图 6 所示。各碳烟前驱物生成量随 CTL 比例的增加大致呈出逐渐减少的趋势。CTL 比例的增加虽然会导致预混燃烧比例有所下降, 但由于间二甲苯氧化过程中生成小分子不饱和物质的倾向远高于正十二烷与异辛烷, 大比例 CTL 混合燃料中间二甲苯含量的下降有利于抑制 C_2H_2 的生成。此外, 在柴油燃烧过程中, 可以看到 A1 质量随时间变化呈现出双峰规律, 表明 A1 在柴油燃烧过程中分别在两个时间段存在很高的生成倾向。第一个峰对应于间二甲苯向碳原子数更小组分转化的反应过程, 其中 A1 是重要的中间产物。第二个峰对应于扩散燃烧阶段各燃料不经过加氧而直接高温裂解成小分子不饱和物质的过程, 小分子不饱和物质随后相互加成生成 A1。随着 CTL 比例的增加和燃料中间二甲苯比例的降低, A1 生成量变化规律的第一个峰逐渐降低, 并且燃用 CTL100 时, A1 生成量呈现出单峰的形状。燃用不同比例柴油/CTL 混合燃料时 A1 生成规律的双峰/单峰形状变化也体现出了碳烟生成量与混合燃料中芳香烃含量之间显著的相关性。



(a) C_2H_2



(b) A1



(c) A4

图 6 不同比例的柴油/CTL 混合燃料燃烧过程中碳烟前驱物的变化规律

各燃料燃烧生成的 NO_x 排放规律如图 7 所示。可以看出, 燃用 CTL60 和 CTL100 有助于降低 NO_x 排放。 NO_x 的生成与温度条件密切相关。从图 3 (b) 可以看到, 由于瞬时燃烧速度较慢, CTL60 和 CTL100 的燃烧温度相对较低, 因此燃用这两种燃料可以获得较低的 NO_x 排放。

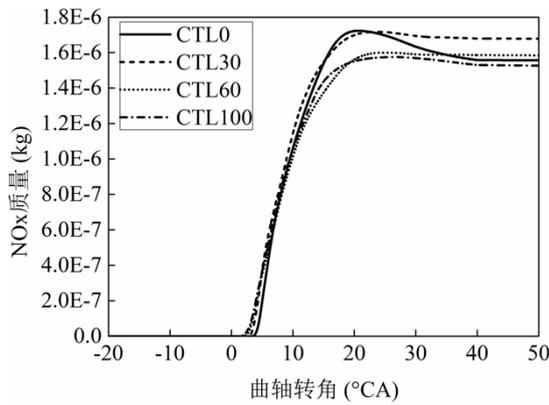


图7 不同比例的柴油/CTL混合燃料NO_x生成特性

2.3 燃烧过程中关键参数时空分布演化历程分析

为更加深入地揭示柴油/CTL混合燃料燃烧过程中主要排放物的演化规律，本文分析了温度、当量比、碳烟及NO_x质量在燃烧室中分布随曲轴转角的变化，如图8-11所示。从图8可以看出，燃用不同燃料时缸内温度位于橙色和红色温度带区域的数量大致接近，但当燃用CTL比例较高的CTL60和CTL100时，位于绿色温度带附近的区域占比明显有所减少，特别是在燃烧室中心以及气缸壁附近的区域中，各燃料燃烧时温度的差异最为明显。以CTL0和CTL100为例，CTL100着火时刻比CTL0靠前，但在5°CA ATDC以后，CTL0燃烧过程中绿色温度带及更高温度所覆盖的区域将大于CTL100燃烧过程中相应的区域。这说明燃用CTL导致燃烧速度有所减缓，从而有助于减少缸内高温区域。从图9所示的当量比分布可以看出，各燃料着火前夕红色部分代表的缸内局部过浓区域占比大致相同，虽然CTL100的滞燃期以及着火前油气混合时间最短，但CTL100较低的粘度有利于油气混合，所以着火之前过浓区域并没有相对于CTL0明显增加。由于更多比例的燃油参与扩散燃烧，在着火发生后CTL100燃烧过程中缸内将形成更多的局部过浓区。因此可以认为CTL30相对于CTL60燃烧产生更少碳烟排放的主要原因在于CTL30的扩散燃烧比例较低。从图10所示的碳烟分布可以看出，随着CTL比例的增加，缸内出现明显碳烟分布的时刻反而有所滞后，这也反映出燃料组分中的芳香烃在碳烟生成过程中的重要作用。此外，还可以看到扩散燃烧阶段碳烟质量较高的区域与当量比较大的区域具有很强的一致性。对于NO_x排放，从图11可以看出，各燃料燃烧生成的NO_x分布与温度与当量比密切相关，但NO_x密集区域与高温区域重合的程度高于其与较低当量比区域重合的程度，说明与局部当量比相比，温度条件对NO_x的生成具

有更加明显的作用。因此随着CTL比例的增加，由于缸内高温区域的减少，NO_x排放有所降低。

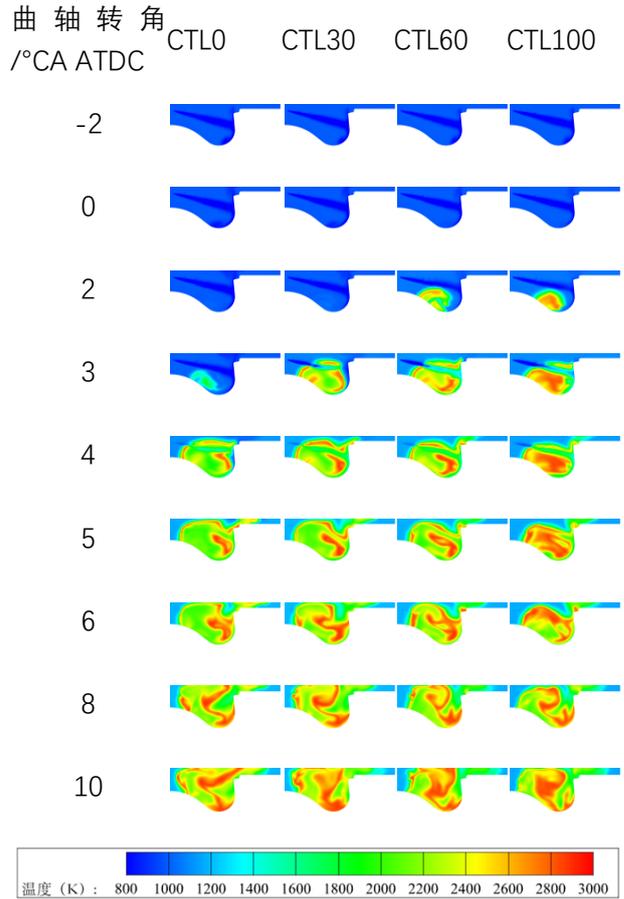
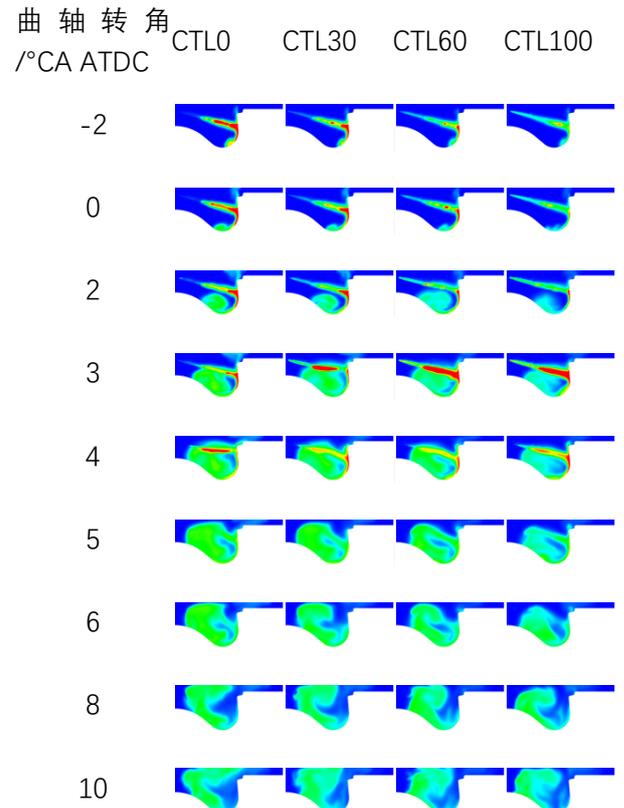


图8 不同比例的柴油/CTL混合燃料燃烧过程中缸内温度分布



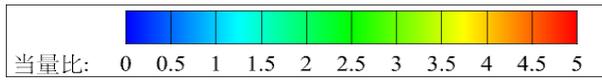


图9 不同比例的柴油/CTL 混合燃料燃烧过程中当量比分布
曲轴转角
/°CA ATDC CTL0 CTL30 CTL60 CTL100

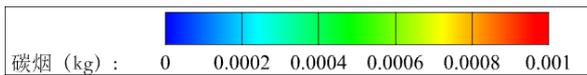
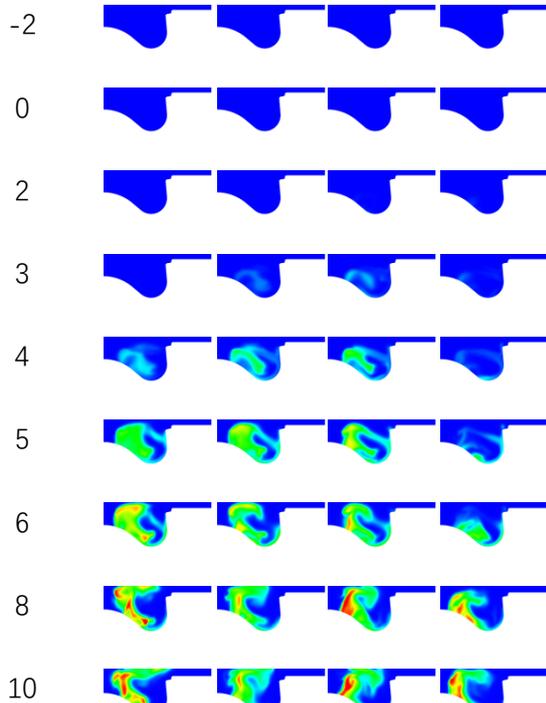


图10 不同比例的柴油/CTL 混合燃料燃烧过程中碳烟质量分布

曲轴转角
/°CA ATDC CTL0 CTL30 CTL60 CTL100

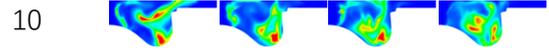
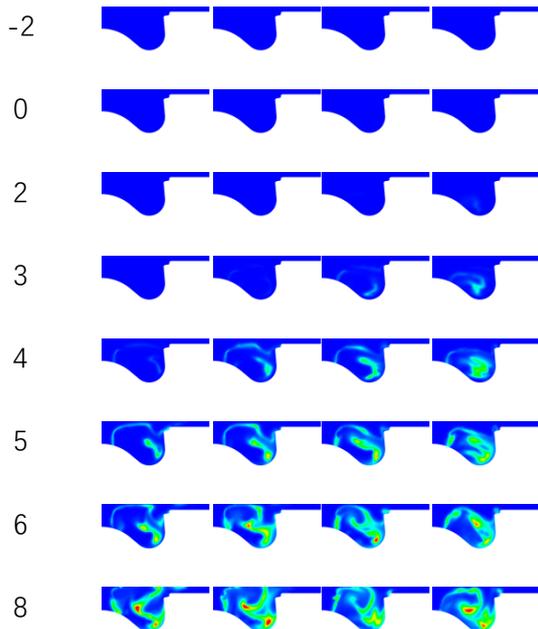


图11 不同比例的柴油/CTL 混合燃料燃烧过程中 NOx 质量分布

3 结论

(1) 由于 CTL 组分中没有间二甲苯, CTL 在低温反应阶段积累 OH 的速度相较于柴油更快, 导致 CTL 低温反应进程加快。与柴油相比, CTL 燃烧过程中着火时刻和放热重心提前, 滞燃期缩短。这导致 CTL 的预混合燃烧比例较低, 进而降低了缸压峰值、放热率峰值和缸内平均温度, 并使燃烧持续期延长。

(2) 随着 CTL 比例的增加, 碳烟及其前驱物生成量大致呈现出逐渐降低的趋势。柴油燃烧过程中 A1 质量随时间变化呈现出双峰规律, 对于 CTL 比例较高的燃料, A1 第一个峰值逐渐降低并最终消失, 体现出燃料组分中的芳香烃在碳烟生成过程中的重要作用。碳烟生成量同时取决于燃料组分以及预混燃烧比例, 相较于 CTL 质量分数为 60% 的混合燃料, 由于预混合燃烧比例更高, CTL30 碳烟生成量有所下降。此外, CTL 较低的燃烧温度有利于抑制 NOx 排放。

(3) 与柴油相比, 燃用 CTL 时, 缸内混合气的燃烧速度有所降低, 从而减少了高温区域。不同 CTL 质量分数的各燃料着火前形成的可燃混合气当量比分布较为一致, 但由于大比例 CTL 混合燃料更多地参与扩散燃烧, 在着火发生后将形成相对较多的局部过浓区。CTL 比例的增加导致碳烟大量生成的时刻滞后, 有助于抑制碳烟生成, 但另一方面, 碳烟质量较高的区域与扩散燃烧阶段当量比较高的区域也具有很高的一致性。各燃料 NOx 排放集中的区域与高温区域重合的程度高于其与燃料过稀区域重合的程度, 因此相较于当量比, 燃烧温度对柴油/CTL 混合燃料燃烧的 NOx 生成量具有更显著的影响。

参考文献:

- [1] Xu J, Yang Y, Li Y. Recent development in converting coal to clean fuels in China[J]. Fuel, 2015, 152(15): 122-130.
- [2] Wang G, Xu Y, Ren H. Intelligent and ecological coal mining as well as clean utilization technology in China: Review and prospects[J]. International

Journal of Mining Science and Technology, 2019, 29(2): 161-169.

- [3] de Klerk A. Fischer-Tropsch Refining[M]. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011.
- [4] Cai P, Zhang C, Jing Z, et al. Effects of Fischer-Tropsch diesel blending in petrochemical diesel on combustion and emissions of a common-rail diesel engine[J]. Fuel, 2021, 305: 121587.
- [5] Yang T, Wang T, Li G, et al. Vibration Characteristics of Compression Ignition Engines Fueled with Blended Petro-Diesel and Fischer-Tropsch Diesel Fuel from Coal Fuels[J]. Energies, 2018, 11(8): 2043.
- [6] 孙万臣, 张曙光, 郭亮, 等. 柴油机燃用F-T合成柴油时的燃烧与排放特性分析[J]. 汽车工程, 2016, 38(10): 1177-1183.
- Sun W, Zhang S, Guo L. An Analysis on Combustion and Emission Characteristics of a Diesel Engine Fuelled with F-T Synthetic Diesel Fuel[J]. Automobile Engineering, 2016, 38(10): 1177-1183.
- [7] 孙万臣, 张曙光, 郭亮, 等. 煤基柴油及其混合燃料对发动机燃烧与排放的影响[J]. 内燃机学报, 2018, 36(5): 393-400.
- Sun W, Zhang S, Guo L. Effect of Coal-to-Oil and Its Blends on Combustion and Emission of Compression Ignition Engine[J]. Transactions of CSICE, 2018, 36(5): 393-400.
- [8] Liu H, Cui Y, Dong F, et al. Effects of Direct or Indirect Coal Liquefaction Fuels on Combustion and Emissions of Heavy-Duty Diesel Engine[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2019, 25(4): 289-296.
- [9] Zhang H, Sun W, Guo L, et al. An experimental study of using coal to liquid (CTL) and diesel as pilot fuels for gasoline dual-fuel combustion[J]. Fuel, 2021, 289: 119962.
- [10] Zhang C, Jing Z, Cai P, et al. Experimental investigation on combustion and emission characteristics of Fischer-Tropsch diesel/gasoline in a multi-cylinder heavy-duty diesel engine under different loads[J]. Fuel, 2022, 324: 124504.
- [11] Lin S, Sun W, Guo L, et al. Development of a reduced mechanism of a three components surrogate fuel for the coal-to-liquid and diesel combustion simulation[J]. Fuel, 2021, 294: 120370.