

稀燃氛围下低碳醇汽油燃烧及爆震特性模拟研究

马睿修, 冯洪庆, 牛振泽

(中国石油大学(华东) 能源与动力工程系, 青岛 266580)

Simulation Study on Combustion and Knock Characteristics of Low-Carbon Alcohol Gasoline Under Lean-Burn Atmosphere

Ma Ruixiu, Feng Hongqing, Niu Zhenze

(Department of Energy and Power Engineering, China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

Abstract: A simplified five-component mechanism of TRF/ethanol/n-butanol was constructed based on the idea of semi-decoupling, and the combustion process and knock characteristics of a boosted direct injection gasoline engine burning low-carbon alcohol gasoline under a lean-burn combustion atmosphere were simulated and studied. The results show that lean-burn combustion is conducive to reducing the knock intensity, blending n-butanol in a lean-burn atmosphere increases the knock tendency, and different field distributions such as temperature field, free radical field and velocity field are reflected in the knock combustion process, but the change in knock intensity is closely related to the blending ratio, and the physicochemical role of n-butanol occupies different positions under different blending ratios. In addition, lean-burn combustion and doping n-butanol are conducive to improving thermal efficiency and accelerating flame propagation speed, the earliest moment of knock at 15% doping ratio but the intensity of the knock is more moderate, should be based on this use of different strategies to optimize its combustion process to further enhance thermal efficiency.

摘要: 基于半解耦思想构建了 TRF/乙醇/正丁醇五组分简化机理, 模拟研究了稀燃氛围下增压直喷汽油机燃用低碳醇汽油的燃烧过程及爆震特性。结果表明, 稀燃有利于降低爆震强度, 在稀燃氛围下掺混正丁醇增加了爆震趋势, 温度场、自由基场、速度场等不同场分布均对爆震燃烧过程有所体现, 但爆震强度变化与掺混比例密切相关, 不同掺混比下正丁醇的物理化学作用所占据的地位不同。此外, 稀燃与掺混正丁醇均有利于提升热效率, 加快火焰传播速度, 在 15% 掺混比下爆震时刻最早但爆震强度较为温和, 应在此基础上利用不同策略优化其燃烧过程以进一步提升热效率。

关键词: 低碳醇; 稀薄燃烧; 爆震; 数值模拟

Key words: low-carbon alcohol; lean-burn combustion; knock; numerical simulation

中图分类号: TK401

文献标识码: A

0 概述

现如今汽油机朝着高压比、高增压比以及高功率密度方向发展, 而实现高强度性能所对应的必然是燃用拥有高性能、高可靠性并且低污染的高品

收稿日期: xxxx-xx-xx

基金项目: 国家自然科学基金项目 (51976236); 中国内燃机学会油机协同研发专项 (CSICE-K202205)

作者简介: 马睿修 (1999-), 男, 硕士生, 主要研究方向为热能工程, E-mail: z21150066@s.upc.edu.cn;

通讯作者: 冯洪庆 (1977-), 男, 博士, 教授, E-mail: fenghongqing@upc.edu.cn。

质燃料。燃用可再生和碳中和的生物燃料是环境和经济可持续性所必需的，以正丁醇为代表的第二代生物燃料凭借其广泛的来源和优异的性能有着充分的研究价值^[1]。与乙醇相比，正丁醇拥有更高的能量密度及低热值，腐蚀性小，二者均不易与水互溶，容易与汽油混合，同时二者有着较高的辛烷值和沸点，挥发性小，不容易在输油管路内产生气阻现象，可以在不改变发动机自身结构的情况下应用，汽油和两种低碳醇的理化特性参数如表 1 所示。Sandu 等人^[2]的报道中提及丁醇有着较高含氧量，并且还具有较高的燃烧速度，有利于缩短燃烧持续时间，改善燃烧过程并减少排放。

表 1 乙醇、正丁醇与汽油的理化性质

性质	乙醇	正丁醇	汽油
分子式	C ₂ H ₆ O	C ₄ H ₁₀ O	C ₄ -C ₁₂
分子量	46	74	95~120
含氧量/%	34.78	21.62	0
低热值/(MJ·kg ⁻¹)	26.8	33.1	42.7
化学空燃比	8.95	11.19	14.7
汽化潜热/(KJ·kg ⁻¹)	910	582	351
能量密度/(MJ·L ⁻¹)	17.9~21.4	29.2	32~34.8
沸点/°C	74	117	27~225
密度/(kg·m ⁻³)	795	810	745
RON	110	98	90~100

爆震即由于汽油机热力学条件变化等各因素影响，缸内燃烧变为不正常燃烧，火焰传播速度和火焰前锋形状发生急剧变化，产生强烈的压力冲击波和高频的压力震荡，从而引发气缸内发出尖锐敲击声的现象^[3]。对于爆震燃烧机理的研究前人已做了大量工作，目前，自燃理论^[4]和爆燃理论^[5]等均为爆震发生的主流学说，其中末端混合气自燃理论因得到大量实验验证而被广泛接受和应用。自燃过程中，末端混合气区域内的快速热释放引起压力波的传播，压力波与火焰的相互作用也是爆震演化的重要组成部分。Terashima 等人^[6]通过数值模拟研究了压力波扰动对末端混合气自燃特性的影响，由于壁面的波反射作用导致壁面位置成为自燃发生的主要位置，更强的压力波扰动则会加快壁面的自燃进程，进而产生更强的压力波和更大的爆震强度。Wei 等人^[7]在燃料异常燃烧行为研究中进一步分析了爆震强度增大的原因，并引入一个新参数来衡量火焰核心与压

力波的相互作用强度，其研究发现热释放和压力波传播之间的耦合效应是爆震发生后爆震发展的主导因素，火焰核心与压力波的强相互作用更易增强压力震荡。Shi 等人^[8]通过建立多元线性回归模型来预测不同影响因素下的压力震荡最大幅值 (Maximum Amplitude of Pressure Oscillation, MAPO)，利用 Wiebe 函数和曲线拟合技术估计各循环自燃释放的能量，并评估了其与爆震强度的关系。火焰传播速度的增加缩短了爆震燃烧持续时间，使自燃放热分数降低，从而压力波动更为温和，爆震强度得以减弱。

缸内直喷技术的发展突破了传统 PFI 汽油机的预混均质燃烧模式，燃油直接喷入气缸雾化蒸发能够降低缸内温度，利于采用更高的压缩比。在部分负荷下利用燃料自身特性降低爆震倾向，进一步提升热效率是 GDI 汽油机的重要研究方向，稀薄燃烧是 GDI 汽油机改善燃烧过程，提升热效率，提高燃油经济性的燃烧模式^[9]。因此本文结合低碳醇自身优势，在稀薄燃烧氛围下探究低碳醇掺混汽油在增压直喷汽油机的爆震燃烧情况。

1 模拟方法

本文基于 Chemkin-Pro 软件构建低碳醇/汽油表征燃料的动力学机理，并利用 CONVERGE 软件建立增压直喷汽油机模型，通过发动机数值模拟来研究低碳醇在不同条件下对发动机燃烧及爆震特性的影响。

1.1 动力学模拟理论

通过 Chemkin-Pro 软件可对复杂燃烧化学反应动力学问题进行计算求解，对激波管燃烧、射流搅拌反应器、层流预混燃烧等不同燃烧反应过程及相关敏感性分析均可进行研究。Chemkin-Pro 中的封闭式均相反应器 (Closed Homogenous Batch Reactor, CHBR) 模块可以模拟定压或定容条件下封闭均相同性反应器内的燃烧情况，本文使用此模块来模拟激波管中的燃烧。对于燃烧过程中典型中间组分的浓度变化，使用完美搅拌反应器 (Perfectly Stirred Reactor, PSR) 模块来进行模拟，该模块可以求解稳态或瞬态下不同燃料充分混合的反应器中各组分的

浓度变化趋势。除此以外, 使用预混层流燃烧反应器模型来进行层流燃烧速度的模拟计算。

1.2 增压汽油机模型建立

在本文研究中, 通过 CONVERGE 软件构建增压直喷汽油机模型, 按照真实发动机进行几何结构的设置与修复, 通过不同的模型来对发动机初始条件、控制参数以及模拟过程需求进行设定。图 1 即所建立的增压汽油机三维模型, 增压直喷汽油机的相关结构参数如表 2 所示。模型采用篷顶形燃烧室, 火花塞位于气缸中心位置, 喷油器设置于气缸盖上两个进气门的中间位置, 采用高压七孔喷嘴型式, 喷射轴线与气缸轴线成一定锥角。发动机的燃烧过程包含了温度、压力、反应物浓度及化学反应等的复杂变化, CONVERGE 内置的 SAGE 详细化学反应动力学求解器可以通过自定义机理来反映相关燃烧化学反应, 因此选用 SAGE 燃烧模型来对缸内燃烧过程进行模拟计算。发动机运行过程中燃油喷射、混合气形成及燃烧均涉及到十分复杂的湍流运动, 湍流预混燃烧模拟中对湍流输运与平均湍流反应速率的求解是重要的部分^[10], 遵循双方程框架, 利用重整化群理论 (Re-Normalization Group, RNG) 建立流体流动基本控制方程, 由雷诺平均数值模拟 (Reynolds-Averaged Navier-Stokes, RANS) 方法发展而来的 RNG $k-\epsilon$ 模型在湍流建模中被广泛使用, 其模型常数均可基于假设和数学发展理论求出, 对于各向异性及快速变形的复杂湍流能够更为准确的预测^[11], 并且计算求解所需时间更少, 适用的雷诺数范围更广, 因此本文选用此种模型来对缸内湍流运动进行模拟计算。对于液滴破碎的模拟, 本文采用 KH-RT (Kelvin Helmholtz-Rayleigh Taylor) 模型, 其可以更为准确地模拟燃油液滴破碎过程^[12,13]。并选用其自带的 wall film 碰壁模型来模拟燃油碰壁过程, O'Rourke 模型模拟湍流扩散过程, 调用 Frossling 模型模拟液滴蒸发过程。

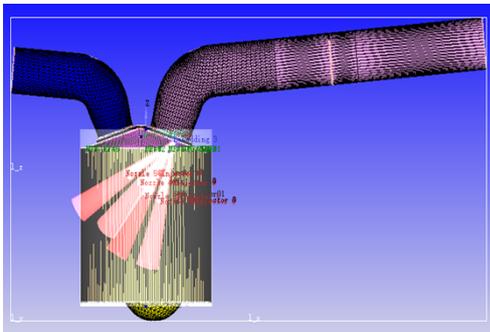


图 1 增压直喷汽油机结构模型
汽油机数值模拟计算中的初始条件和边界条件

参考 Wang 等人^[14]在试验中设置的条件参数, 如表 3 所示, 整体模拟计算区域设置为进气上止点前 5 °CA 到燃烧上止点后 100 °CA, 包含了汽油机整个进气、压缩及燃烧过程。本文研究中, 燃油喷射时刻设置为 -320 °CA ATDC, 喷油脉宽为 80 deg, 喷油质量 40 mg。

表 2 增压直喷汽油机主要结构参数

名称及单位	数值
排量/L	1.5
缸径/mm	78.5
冲程/mm	77.5
连杆长度/mm	144
压缩比	10
气缸数	4
每缸气门数/个	4
增压比	1.8

表 3 数值计算的边界和初始条件

名称及单位	数值
转速/($r \cdot \min^{-1}$)	2000
负荷/($N \cdot m$)	214
点火能量/mJ	40
喷油压力/MPa	4~15
进气压力/MPa	0.18
进气道初始温度/K	312
进气道初始压力/MPa	0.18
排气温度/K	400
缸内初始温度/K	543
缸内初始压力/MPa	0.2
气缸壁面温度/K	433
进气温度/K	293

1.3 汽油机模型验证

在计算过程中, CONVERGE 基于改良的笛卡尔网格生成方法自动生成高质量的正交六面体计算网格。在指定的时间和空间对网格进行加密或粗化, 其中, 进排气通道采用粗网格, 进排气阀门、活塞、火花塞、气缸盖等均采用细网格, 并对整个气缸的流量和温度进行自适应加密。当缸内温度和压力梯度超过极限值时, 该区域自动对网格进行加密。首先通过网格独立性考核确定基础网格大小, 最终确定基础网格大小为 2 mm。

Wang 等人^[14]在化学当量比条件下对该增压直喷发动机进行了爆震工况和正常燃烧工况的实验和模拟, 两者点火时刻分别设定为 -4 °CA 和 1 °CA。本

文在与其实验工况相同条件下, 采用正庚烷、异辛烷和甲苯等组成的 95#汽油表征燃料, 模拟-4 °CA 和 1 °CA 点火时刻下缸内压力变化, 并与 Wang 等人测定的缸压实验数据进行对比, 结果如图 2 所示, 对比满足误差要求表明该模型可用。

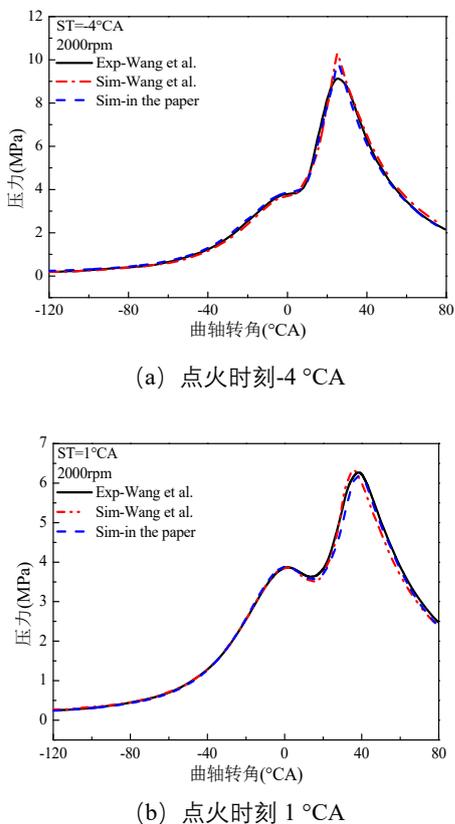


图 2 不同工况下模拟与实验值对比

2 低碳醇/汽油表征燃料机理构建

2.1 低碳醇/TRF 机理建立

不同燃料燃烧特性与化学反应动力学描述密切相关, 近年来国内外研究人员也已提出较为完善的低碳醇、基础参考燃料 (Primary Reference Fuel, PRF)、甲苯参考燃料 (Toluene Reference Fuel, TRF) 等组分与汽油表征燃料的化学反应动力学机理。

汽油本身包含了烯烃、烷烃、芳烃等数千种碳氢化合物, 逐一研究各组分对汽油自身性质的影响将十分冗杂, TRF 中包含了汽油中占比相对较大的直链烷烃、支链烷烃和芳香烃代表性组分, 能够较高程度的表征汽油物理和化学特性。长期以来研究人员也一直致力于提出适用工况范围更宽同时更为简化的 TRF 动力学机理。Andrae 等人^[15]在美国劳伦斯实验室 (Lawrence Livermore National Lab, LLNL)

提供的 PRF 详细机理^[16]基础上, 添加了修正后的甲苯化学机理, 构建了一个包括 1083 种组分、4635 个反应的 TRF 详细机理。进一步通过使用 PRF 骨架机理并对高温贫燃阶段下的正庚烷机理部分进行改进, 发展了一个 137 种组分、633 个反应的 TRF 半详细机理^[17], 该机理考虑了苯氧基自由基与 PRF 之间交叉反应的影响, 并基于密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 进行了量子化学计算分析, 其针对滞燃期和层流燃烧速度的验证均能较好的预测实验结果。Liu 等人^[18]首次利用半解耦方法简化烷烃氧化过程中的大分子反应以描述燃料点火特性, 保留详细核心机理来控制火焰传播特性, 在先前建立的 PRF 骨架模型^[19]基础上加入经过反应路径分析 (Reaction Pathway Analysis, RPA) 和敏感性分析后的甲苯骨架机理, 建立了包括 56 种组分、168 个反应的 TRF 骨架模型。Sarathy 等人^[20]同样基于半解耦方法来开发 PRF 骨架模型, 其中通过直接关系图法对 C2~C3 子模型进行优化, 并结合 Liu 等人^[18]提出的甲苯燃烧反应路径, 更新了相关反应的速率参数, 最终提出了包括 76 种组分和 401 个反应的 TRF 骨架模型。在此基础上, Li 等人^[21]利用两轮直接关系图法进行物种简化, 保留 C0~C1 和小自由基的相关机理, 删除对主要反应路径贡献比例较小的部分物种, 并基于计算奇异摄动方法对模型进行刚度分析, 另外还添加了乙醇反应相关物种, 最终开发了包括 59 种组分、270 个反应的 TRF/乙醇动力学简化模型。

综合考虑各机理的适用工况范围及计算时间成本, 最终选择 Li 等人^[21]的 TRF 机理作为主机理, Feng 等人^[22]构建的正丁醇简化机理作为副机理, 基于半解耦思想, 保留包括 C0~C2 及其他小分子物种的核心机理, 并基于温度敏感性分析对大分子反应模型进行简化, 优化相关反应的速率参数, 最终构建出包括 102 种组分、415 个反应的 TRF/乙醇/正丁醇五组分机理。

2.2 低碳醇/TRF 机理验证

对于上述构建的五组分简化机理, 通过各组分及混合物在不同工况下的实验数据进行验证。首先对 PRF、TRF、正丁醇和乙醇等进行了点火延迟时间验证, 验证结果如图 3~图 6 所示, 验证实验数据来源如下:

- (1) 不同压力下的 PRF91^[23];

- (2) 不同条件下的 TRF97.1、TRF60^[24,25];
- (3) 不同压力下的正丁醇^[26,27];
- (4) 不同当量比、压力下的乙醇^[28,29];

由图可以看出当前机理对于 PRF91 和 TRF97.5 点火延迟时间的模拟相较于原机理有所下降, 但与实验数据的拟合更优。对于正丁醇及乙醇的点火延迟时间模拟结果与原机理差别不大, 与不同条件下的实验数据均有较好的拟合趋势。

除此以外, 对 TRFs 混合物、甲苯、正庚烷及乙醇等进行了层流燃烧速度验证, 与实验数据对比结

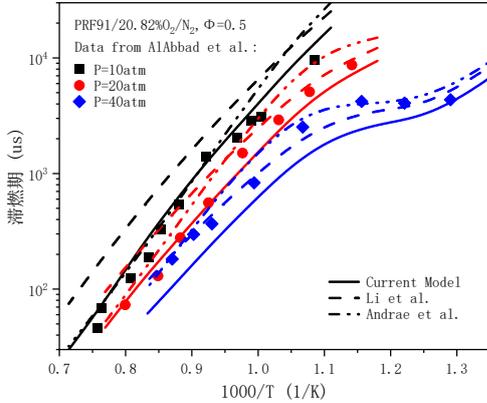


图3 PRF91的点火延迟时间验证

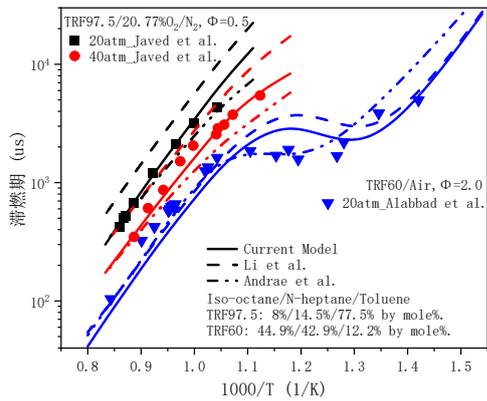


图4 TRF97.5和TRF60的点火延迟时间验证

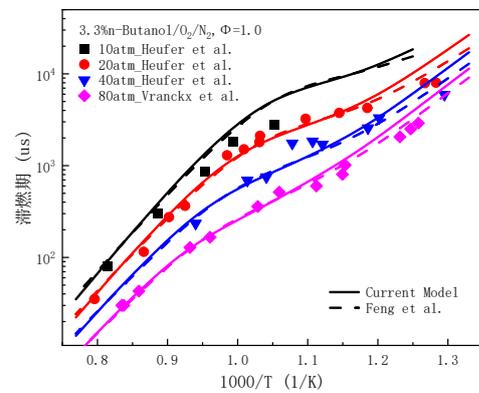


图5 正丁醇的点火延迟时间验证

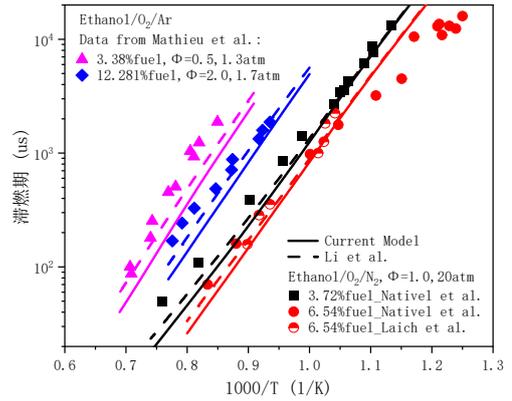


图6 乙醇的点火延迟时间验证

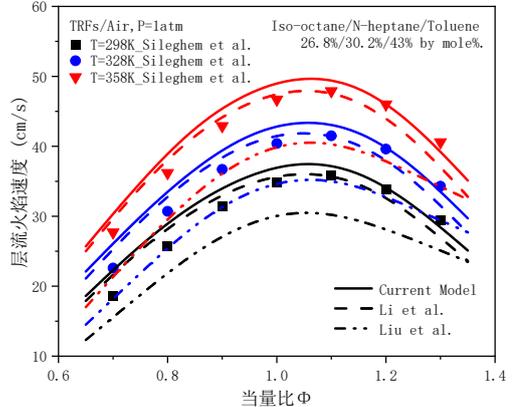


图7 TRFs的层流燃烧速度验证

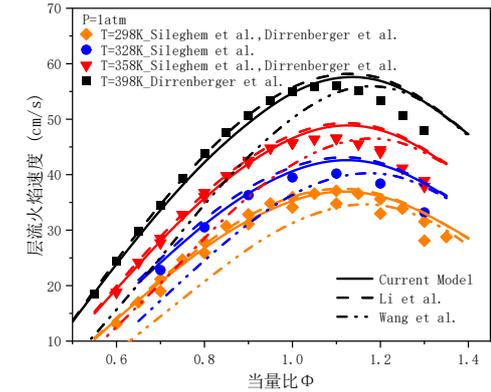


图8 甲苯的层流燃烧速度验证

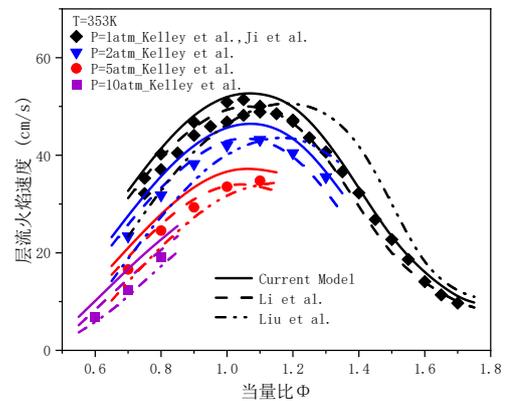


图9 正庚烷的层流燃烧速度验证

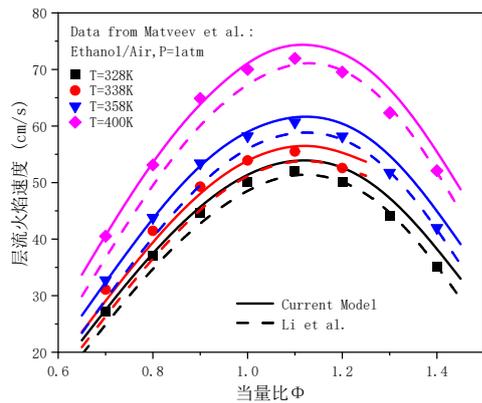


图 10 乙醇的层流燃烧速度验证

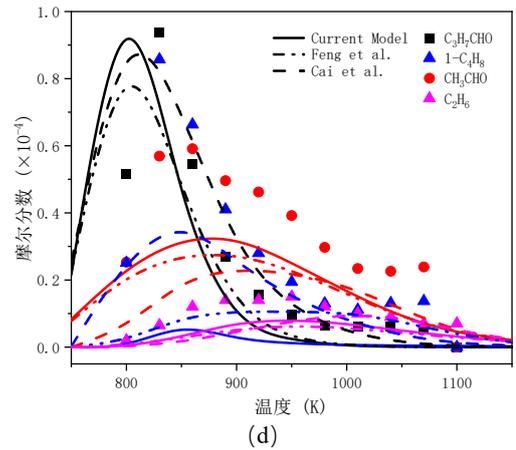
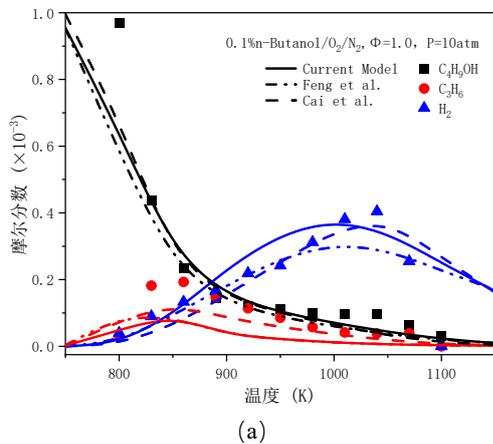
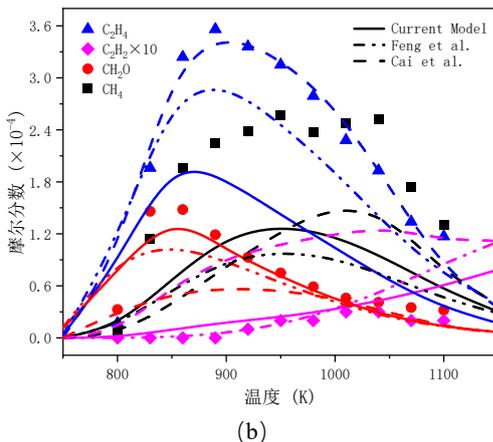


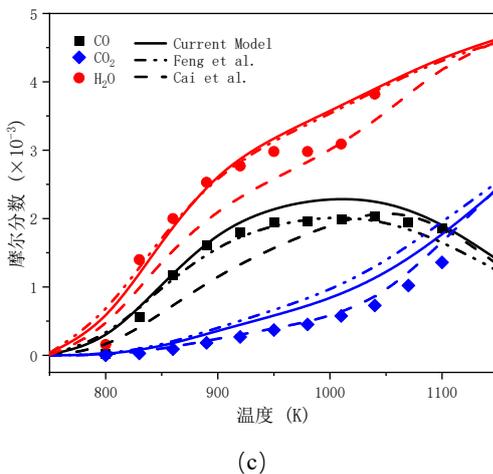
图 11 正丁醇的重要组分浓度验证



(a)



(b)



(c)

果如图 7~图 10 所示，验证实验数据来源如下：

- (1) 不同初始温度下的 TRFs^[30];
- (2) 不同初始温度下的甲苯^[30,31];
- (3) 不同初始压力下的正庚烷^[32,33];
- (4) 不同初始温度下的乙醇^[34];

当前机理对于 TRFs、正庚烷及乙醇的层流燃烧速度预测值相较于原机理均有所升高，但与实验数据的拟合趋势良好，当前机理与原机理对于甲苯的层流燃烧速度预测，在浓燃条件下均偏高。并且在同一工况下，层流燃烧速度与温度大小成正比，与压力大小成反比。

除此以外，Dagaut 等人^[35]在 10 个大气压下利用均质射流搅拌反应器测定了的正丁醇重要反应组分浓度，停留时间为 0.7 s，本文同样与之进行了对比，验证结果如图 11 所示。结果表明当前机理对大多数中间组分浓度曲线均能够进行较好的预测，但某些物种的预测存在差距，比如乙烯，对初始反应物消耗与最终生成物的预测十分准确，总体预测效果优于原机理。

结合以上三部分实验数据验证，表明本文所建立的 TRF/正丁醇/乙醇五组分简化机理在不同当量比、压力和温度范围内，均与实验数据有着良好的一致性，能够较好的预测所包含的不同单质、混合物的燃烧过程。

3 结果分析

结合前人对于稀薄燃烧相关研究结果，当过量空气系数为 1.2 左右时，结合使用含氧燃料不仅能够有效抑制爆震，还能够提高热效率^[36]，因此本文研究中对于不同燃料的使用保持总体当量比为 0.8，在此基础上探究不同低碳醇掺混比对燃烧及爆震特性的影响。

现如今基于爆震燃烧的典型特征，已经发展出了不同的爆震检测方法，但对于某一工况爆震强度的评价，还未有明确统一的评价标准。OH、HCO、HO₂、H₂O₂和CH₂O是爆震燃烧相关的重要自由基和中间物质，其浓度变化严重影响缸内反应活性^[36]。OH自由基既可以作为正常燃烧和燃烧区域的标记，又可以表示爆震的持续时间，而HO₂自由基作为中间转换型物质，是OH自由基的前驱物^[7]。HCO自由基作为自燃前低温反应的中间物质，在火焰未到达的末端混合气中出现，可作为自燃和爆震燃烧的标记。H₂O₂可用于判断火焰前沿和自燃点的位置，CH₂O属于初始自燃反应物，也可作为爆震前驱物。

燃烧室内产生高频压力振荡同样是爆震燃烧的显著特征，因此基于缸内压力变化得到的MAPO被广泛用于判断爆震发生和评价爆震强度^[7,37]，当某一工况下MAPO值大于0.1 MPa时则表明存在爆震发生，而其值大小代表了爆震严重程度。针对某一监测点得到的缸压变化曲线，在计算窗口内对其进行快速傅里叶变换并利用带通滤波器对4~25 KHz的爆震频率进行滤波，即可得到对应的缸内压力振荡曲线，其中压力振荡最大值为对应工况下的MAPO，其可表达为：

$$MAPO = \max \left(\left| \hat{P} \right|_{\theta_0}^{\theta_0 + \xi} \right) \quad (1)$$

式中， \hat{P} 为经滤波后的压力值，MPa； θ_0 表示计算开始时曲轴转角位置，°CA； ξ 表示计算窗口经过的曲轴转角度数，°CA。

在此基础上，还存在由压力振荡与其他燃烧信息联合得出的KI%，其能够更加准确的表征爆震强度大小，并且其能够帮助确定爆震发生时刻^[37]。爆震开始时往往表现出压力振荡幅值的突然增大，此计算过程中通过对燃烧前部阶段的压力振荡表征阈值和后燃阶段的压力振荡进行比较，以判断爆震是否发生。

此处压力振荡阈值定义为：

$$MAPO_{th} = k \cdot \max \left(\left| \hat{P}_{knock}(\theta) \right|_{\theta_{SA}}^{\theta_{60\%}} \right) \quad (2)$$

式中，k为经验常数2； θ_{SA} 表示点火时刻角度，°CA； $\theta_{60\%}$ 表示燃烧质量分数为60%时对应的曲轴转角，°CA。

其值等于从点火时刻到燃烧质量分数为60%时间间隔内的压力振荡最大幅值的两倍，并进一步引出KI%计算表达式：

$$KI\% = \frac{\max \left[\left(\left| \hat{P}_{knock}(\theta) \right|_{\theta_{60\%}}^{\theta_{99\%}} - MAPO_{th} \right), 0 \right]}{MAPO_{th}} \quad (3)$$

式中， $\theta_{99\%}$ 表示燃烧结束时对应的曲轴转角，°CA。

当KI%大于0时则表示存在爆震发生，并且如式(4)所示，当后燃阶段中某一压力振荡幅值等于MAPO_{th}时则表示爆震开始， θ_k 即爆震开始时的曲轴转角。

$$\left| \hat{P}_{knock}(\theta_k) \right| = MAPO_{th} \quad (4)$$

使用TRF92混合物来模拟92#汽油，其中正庚烷、异辛烷和甲苯的体积占比为19.31%、36.58%和44.1%，在此基础上掺混不同比例正丁醇观察其对缸内火焰传播及爆震燃烧的影响情况。图12为不同掺混比条件下缸内爆震的起始时刻及爆震严重程度表征，稀燃相比于当量比燃烧，爆震时刻有所提前但MAPO及爆震指数KI均有所降低。随着正丁醇掺混比增加，爆震时刻先提前而后滞后，爆震强度总体呈现先降低后升高的趋势，当掺混比为15%时，所得到的MAPO值最小，而在掺混比为5%时，所得到的KI值最小，其展现出来的滞后性是因为与前期燃烧过程有关。由此也看出小比例掺混正丁醇有促进爆震的趋势，但缸内整体的爆震强度有所降低，而当掺混比例较大时，爆震强度反而增大。

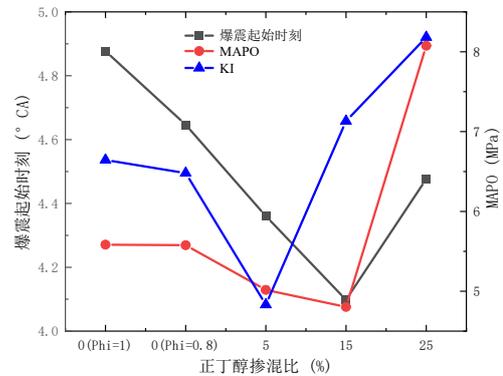
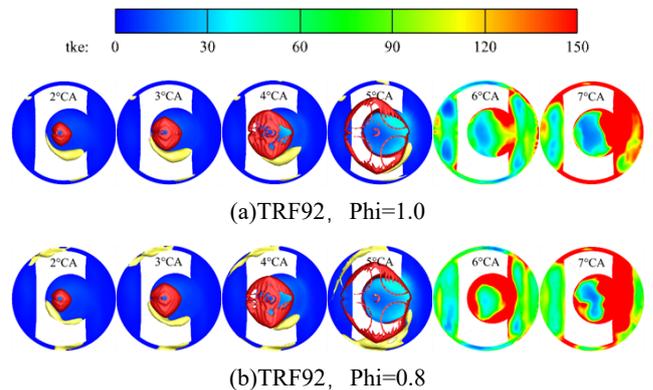


图12 不同掺混比下的爆震起始时刻、MAPO及KI



(a)TRF92, Phi=1.0

(b)TRF92, Phi=0.8

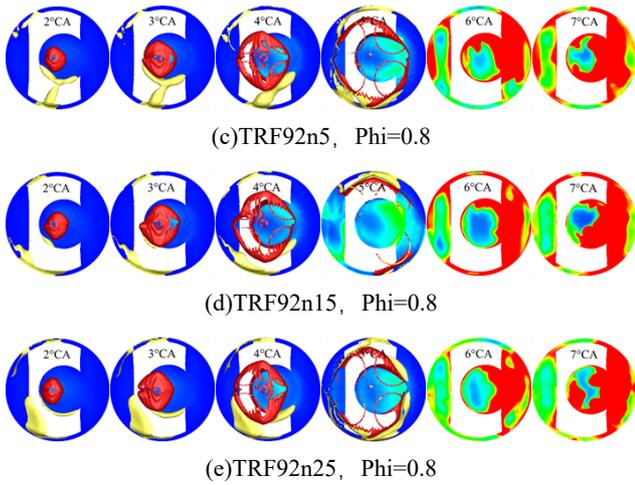


图 13 不同掺混比下的湍动能、火焰面及甲醛面分布

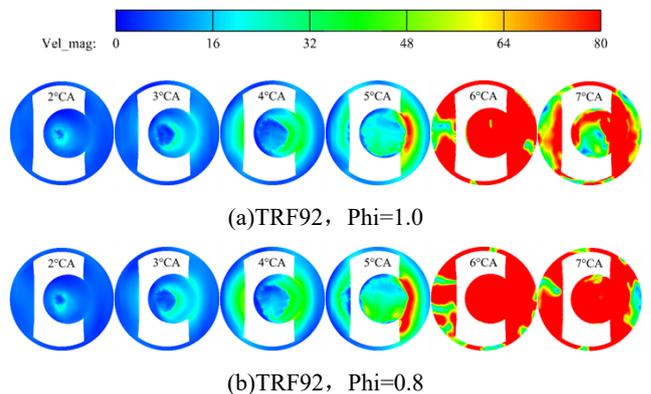
图 13 为不同掺混比下缸内湍动能、火焰面及甲醛浓度 0.01 等值面的 Z 方向截面分布，其中红色等值面为火焰锋面，黄色等值面为甲醛面。由图可看出稀燃加快了火焰传播，缸内湍动能降低，甲醛等值面增加表明爆震前驱物堆积，导致爆震有提前趋势但爆震强度降低。掺混正丁醇后随着掺混比增加火焰传播速度先增大后减小，湍动能先升高后降低，这是因为正丁醇小比例掺混时，其化学特性影响占据主导作用，使火焰锋面传播加快，末端混合气在火焰锋面的压缩下自燃进程加快，对应甲醛等值面增加，爆震时刻提前，因为火焰快速传播导致末端混合气自燃过程变短，与正常燃烧的相互作用减弱，爆震强度降低。爆震不仅由自燃诱导，其更是压力波耦合火焰发展并伴有剧烈能量释放的复杂异常燃烧。而当正丁醇较大比例掺混时，其物理特性占据主导作用，在缸内的蒸发吸热导致缸内温度降低，燃烧过程减缓，火焰锋面传播速度降低，最终导致爆震相对滞后，但爆震强度增加。图 14 为对应的缸内温度场分布，由图可以看出温度场变化与火焰前锋面的移动轨迹类似，稀燃氛围下火焰传播加快，与当量比条件下相比温度变化更快。同样，稀燃下随着正丁醇掺混比例升高，火焰传播速度先升高后降低，同一角度下对应的高温区域先增大后减小，但因为缸内放热率峰值呈现先降低后升高的趋势，缸内最高温度对应先降低后升高。末端混合气自燃前先出现热点，之后自燃则会导致缸壁附近温度升高，图中较难看出缸壁附近自燃点，但掺混比为 15% 时在 5°CA 时缸壁就出现了温度升高的区域，证明已经发生爆震，但对于爆震的具体情况还需要结合其他场分布来进行分析。

缸内速度场的变化也能够直接反映缸内的燃烧情况和爆震的剧烈程度。图 15 为不同工况下缸内的速度场分布云图，可看出爆震发生前，缸内流体速

度大都随着火焰锋面传播而逐渐增加，并且为对称分布。同时稀燃氛围下缸内流体流速增加，由截面看出高速区域所占面积增加。掺混正丁醇后，缸内速度最大出现时刻提前，在 25%掺混比下最大速度出现时刻滞后，这也表明缸内燃烧速度的加快后转慢的趋势。随着掺混比增加，爆震发生前缸内最大速度由 30 m/s 逐渐增加到 80 m/s，当掺混比例较大时，爆震前缸内速度减小。在爆震发生后，缸内速度场变为不对称分布，并且流体大都为爆震发生点向气缸中心方向流动或沿缸壁流动，这也导致爆震发生后缸壁附近速度急剧升高，并且受到压力波、自燃锋面及正常火焰锋面相互作用，逐渐出现缸壁多点向内流动、继而转为中心向外流动的速度波动。



图 14 不同掺混比下的温度场分布



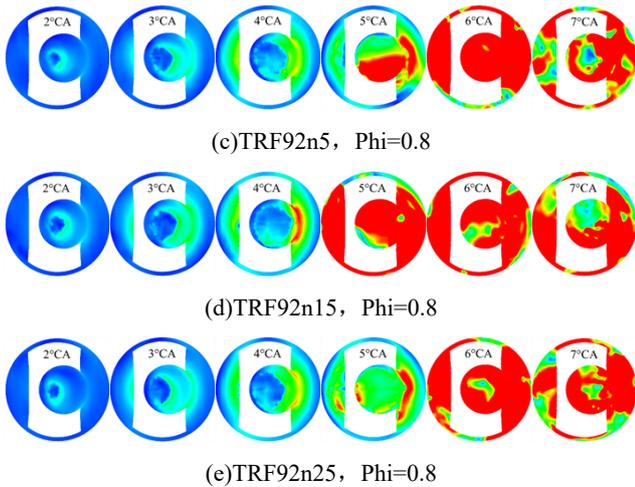


图 15 不同掺混比下的速度场分布

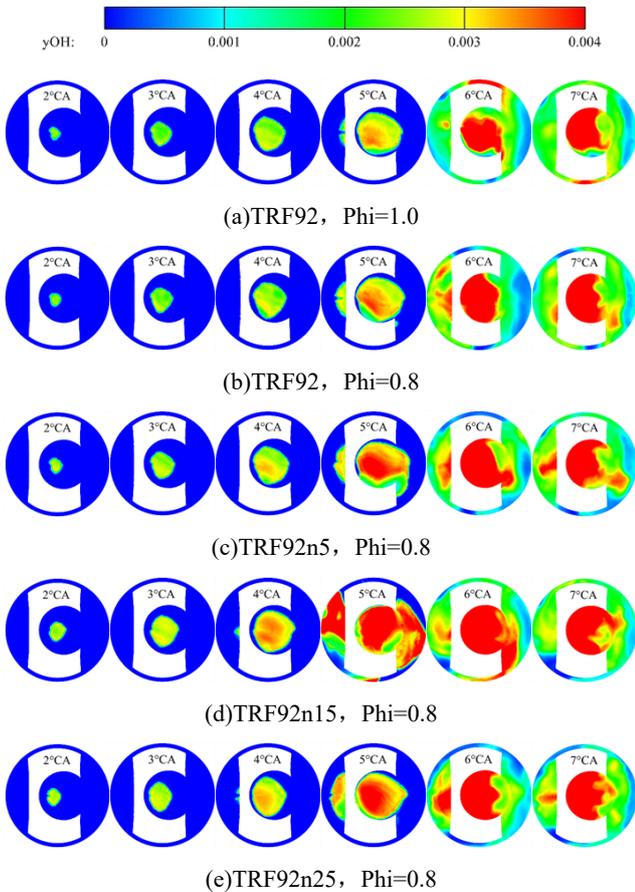


图 16 不同掺混比下的 OH 自由基分布

根据重要自由基的产生和消耗情况同样是研究爆震发生机理的重要方法。图 16 为不同工况下对应的 OH 自由基分布图，OH 自由基作为正常燃烧区域的标记，随着火焰传播，高浓度区逐渐由中心向四周扩散，其高浓度区域出现在缸壁附近时说明该位置已经发生燃烧，侧面说明了爆震发生。稀燃状态下随着正丁醇掺混比例升高，OH 高浓度区先增大后减小，同时也反映出 15%掺混比例下在快速火焰传播压缩与压力波多方作用下爆震发生时刻最早。图

17 为不同工况下对应的 HCO 自由基分布图，由图可以看出 HCO 的产生位置正常先跟随火焰前锋移动，火焰蔓延至缸壁后其主要集中分布在气缸中心及缸壁附近区域，表明发生持续燃烧反应。因此与火焰前锋面规律类似，随着正丁醇掺混比例上升，同一角度下 HCO 面移动速度先加快后减慢，作为末端混合气自燃的标记物，在掺混 5%和 25%正丁醇 5°CA 时，火焰面未到达前分别在缸壁下缘及左上角壁面处存在明显升高，表示该点位置的末端混合气自燃进而导致爆震发生。在 15%掺混比条件下，5°CA 时 HCO 已到达缸壁面，并且其浓度较高，同样说明了该工况下爆震发生时刻较早。

作为宏观对比，利用三维结果中的每循环所做

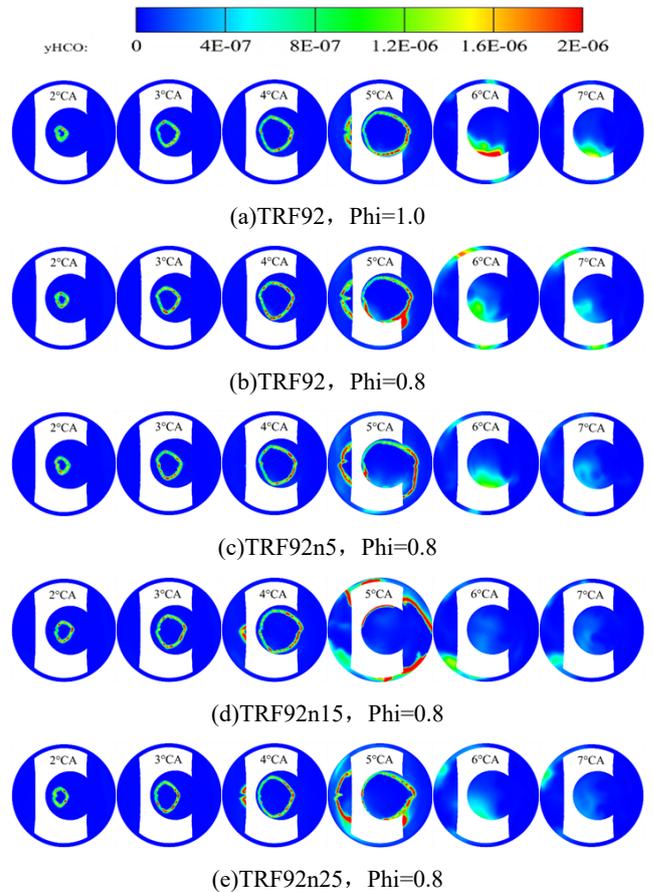


图 17 不同掺混比下的 HCO 自由基分布

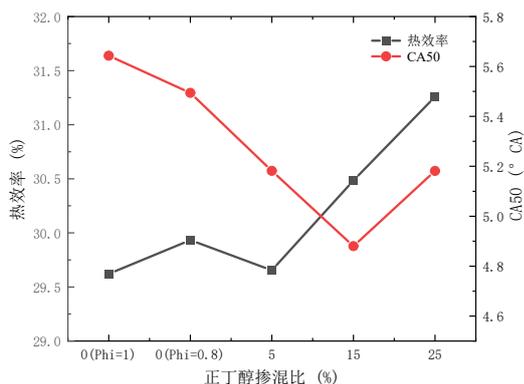


图 18 不同工况下的热效率及 CA50

总功与对应燃用燃料的总热值，计算得到每个工况下的热效率，图 18 表示了不同条件下的热效率与放热重心 CA50。相比于均质当量比燃烧，稀薄燃烧状态下放热重心更接近上止点，更有利于推动活塞做功，对应的热效率也存在一定提升。稀燃氛围下掺混正丁醇后热效率呈现先下降后增加的趋势，在 5% 掺混比时低于不掺混稀燃工况，但总体均比当量比工况热效率高，同时在 15% 掺混比下燃烧重心最为提前，而热效率反而比 25% 掺混比条件下相对较低，这是因为其火焰传播速度过快，爆震时刻最早，虽然 MAPO 值较小但其 KI 值较大，爆震燃烧的过早发生对做功产生负面影响，应该在此基础上结合其他策略对其燃烧过程进行优化以提高其热效率。

4 结论

(1) 稀薄混合气有利于加快火焰传播，降低爆震强度，稀燃氛围下掺混正丁醇能够进一步加快燃烧速度，但掺混比例较大后缸内温度降低，燃烧速度呈现降低趋势。

(2) 掺混正丁醇使爆震发生时刻提前，但爆震强度随着掺混比增加先降低后升高，爆震不仅由自燃诱导，其更是压力波耦合火焰发展并伴有剧烈能量释放的复杂异常燃烧，爆震强度与火焰传播速度、自燃程度及压力波相互作用均有关系。

(3) 稀薄燃烧与掺烧正丁醇均有利于提升热效率，稀燃氛围下热效率随正丁醇掺混比增加呈现先降低后增加的趋势，应对 15% 掺混比例下的燃烧过程进一步优化以提高热效率。

致谢

研究受到国家自然科学基金项目 (51976236)、

中国内燃机学会“京博吉大专用油品研发联合实验室”油机协同研发专项 (CSICE-K202205) 资助。

参考文献:

- [1] Atmanli A, Yilmaz N. A comparative analysis of n-butanol/diesel and 1-pentanol/diesel blends in a compression ignition engine[J]. Fuel, 2018, 234: 161-169.
- [2] Sandu C, Pană C, Negurescu N, et al. The study on the influence of utilizing n-butanol at fuelling spark ignition engines[C]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2022, 1220(1): 012004.
- [3] 冯洪庆, 马永. 内燃机构造与原理[M]. 青岛: 中国石油大学出版社, 2015.
- [4] Kawahara N, Tomita E. Visualization of auto-ignition and pressure wave during knocking in a hydrogen spark-ignition engine[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(7): 3156-3163.
- [5] Fieweger K, Blumenthal R, Adomeit G. Self-ignition of SI engine model fuels: a shock tube investigation at high pressure[J]. Combustion and Flame, 1997, 109(4): 599-619.
- [6] Terashima H, Matsugi A, Koshi M. End-gas autoignition behaviors under pressure wave disturbance[J]. Combustion and Flame, 2019, 203: 204-216.
- [7] Wei J, Feng H, Liu H, et al. Analysis of knocking combustion with methanol/iso-octane and ethanol/iso-octane blends in a spark-ignition engine[J]. Fuel, 2021, 284: 118979.
- [8] Shi H, Uddeen K, An Y, et al. Statistical study on engine knock oscillation and heat release using multiple spark plugs and pressure sensors[J]. Fuel, 2021, 297(6): 120746.
- [9] Hong B, Lius A, Mahendar S K, et al. Energy and exergy characteristics of an ethanol-fueled heavy-duty SI engine at high-load operation using lean-burn combustion[J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 224: 120063.
- [10] Abu-Orf G M, Cant R S. A turbulent reaction rate model for premixed turbulent combustion in spark-ignition engines[J]. Combustion and flame, 2000, 122(3): 233-252.
- [11] Han Z, Reitz R D. Turbulence modeling of internal combustion engines using RNG κ - ϵ models[J]. Combustion science and technology, 1995, 106(4-6): 267-295.
- [12] Reitz R D, Diwakar R. Structure of high-pressure fuel sprays[J]. SAE transactions, 1987, 96: 492-509.
- [13] Reitz R D, Diwakar R. Effect of drop breakup on fuel sprays[J]. SAE transactions, 1986, 95: 218-227.
- [14] 王方. 直喷增压汽油机火焰传播及爆震燃烧过程的多维数值模拟[D]. 北京: 清华大学, 2015.

- [15] Andrae J C G, Björnbohm P, Cracknell R F, et al. Autoignition of toluene reference fuels at high pressures modeled with detailed chemical kinetics[J]. *Combustion and Flame*, 2007, 149(1-2): 2-24.
- [16] Curran H J, Pitz W J, Westbrook C K, et al. Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated pressures[C]. *Symposium (International) on Combustion*. Elsevier, 1998, 27(1): 379-387.
- [17] Andrae J C G, Brinck T, Kalghatgi G T. HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model[J]. *Combustion and Flame*, 2008, 155(4): 696-712.
- [18] Liu YD, Jia M, Xie MZ, et al. Development of a new skeletal chemical kinetic model of toluene reference fuel with application to gasoline surrogate fuels for computational fluid dynamics engine simulation[J]. *Energy & fuels*, 2013, 27(8): 4899-4909.
- [19] Liu YD, Jia M, Xie MZ, et al. Enhancement on a Skeletal Kinetic Model for Primary Reference Fuel Oxidation by Using a Semidecoupling Methodology[J]. *Energy & Fuels*, 2012, 26(12): 7069-7083.
- [20] Sarathy M, Atef N, Alfazazi A, et al. Reduced Gasoline Surrogate (Toluene/n-Heptane/iso-Octane) Chemical Kinetic Model for Compression Ignition Simulations[C]. *SAE Technical Paper*, 2018-01-0191.
- [21] Li Y, Alfazazi A, Mohan B, et al. Development of a reduced four-component (toluene/n-heptane/iso-octane/ethanol) gasoline surrogate model[J]. *Fuel*, 2019, 247: 164-178.
- [22] Feng H, Zhang J, Liu D, et al. Development of a reduced n-butanol mechanism with combined reduction methods[J]. *Fuel*, 2017, 187: 403-416.
- [23] AlAbbad M, Javed T, Khaled F, et al. Ignition delay time measurements of primary reference fuel blends[J]. *Combustion and Flame*, 2017, 178: 205-216.
- [24] Javed T, Lee C, AlAbbad M, et al. Ignition studies of n-heptane/iso-octane/toluene blends[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 171: 223-233.
- [25] Alabbad M, Issayev G, Badra J, et al. Autoignition of straight-run naphtha: A promising fuel for advanced compression ignition engines[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 189: 337-346.
- [26] Vranckx S, Heufer K A, Lee C, et al. Role of peroxy chemistry in the high-pressure ignition of n-butanol—Experiments and detailed kinetic modelling[J]. *combustion and flame*, 2011, 158(8): 1444-1455.
- [27] Heufer K A, Fernandes R X, Olivier H, et al. Shock tube investigations of ignition delays of n-butanol at elevated pressures between 770 and 1250 K[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(1): 359-366.
- [28] Nativel D, Niegemann P, Herzler J, et al. Ethanol ignition in a high-pressure shock tube: Ignition delay time and high-repetition-rate imaging measurements[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38(1): 901-909.
- [29] Mathieu O, Pinzón L T, Atherley T M, et al. Experimental study of ethanol oxidation behind reflected shock waves: Ignition delay time and H₂O laser-absorption measurements[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 208: 313-326.
- [30] Sileghem L, Alekseev V A, Vancoillie J, et al. Laminar burning velocity of gasoline and the gasoline surrogate components iso-octane, n-heptane and toluene[J]. *Fuel*, 2013, 112: 355-365.
- [31] Dirrenberger P, Glaude P A, Bounaceur R, et al. Laminar burning velocity of gasolines with addition of ethanol[J]. *Fuel*, 2014, 115: 162-169.
- [32] Kelley A P, Smallbone A J, Zhu D L, et al. Laminar flame speeds of C₅ to C₈ n-alkanes at elevated pressures: Experimental determination, fuel similarity, and stretch sensitivity[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(1): 963-970.
- [33] Ji C, Dames E, Wang Y L, et al. Propagation and extinction of premixed C₅–C₁₂ n-alkane flames[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(2): 277-287.
- [34] Matveev S S, Idrisov D V, Matveev S G, et al. Laminar burning velocities of surrogate components blended with ethanol[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 209: 389-393.
- [35] Dagaut P, Sarathy S M, Thomson M J. A chemical kinetic study of n-butanol oxidation at elevated pressure in a jet stirred reactor[J]. *Proceedings of the combustion Institute*, 2009, 32(1): 229-237.
- [36] Feng H, Suo X, Xiao S, et al. Numerical simulation on the effects of n-butanol combined with intake dilution on engine knock[J]. *Energy*, 2023, 271: 126918.
- [37] Galloni E. Dynamic knock detection and quantification in a spark ignition engine by means of a pressure based method[J]. *Energy Conversion and Management*, 2012, 64: 256-262.