

摘 要

能源短缺, 环境污染, 排放法规日益严格, 柴油机的可持续发展面临严峻考验。近年来, 对发动机清洁代用燃料和新型燃烧方式的研究越来越重视, 其中乙醇作为一种可再生含氧生物燃料, 被认为是一种比较有前景的代用燃料, 乙醇 HCCI 发动机以其良好的燃烧和排放性能得到了广泛的研究, 但是目前还存在一些问题, 如着火时刻难以控制、运行工况范围较窄、碳氢(HC)和一氧化碳(CO)的排放较高, 而且还会生成甲醛、乙醛等非常规排放物。

本文首先对乙醇 HCCI 发动机的研究现状、存在的问题以及数值模拟计算进行了综述。根据美国 Lawrence Livermore 实验室提出的乙醇详细化学反应动力学机理, 对乙醇氧化消耗的主要途径以及重要中间产物的生成与消耗进行了详细分析。在乙醇详细化学动力学机理分析的基础上, 基于 CHEMKIN 程序, 采用敏感性分析和反应速率分析方法, 建立了简化的乙醇燃烧反应机理, 由此构建了乙醇 HCCI 燃烧反应动力学简化模型, 该简化模型包括 33 种物质和 52 个基元反应。并将简化模型和其详细机理模型进行对比研究, 计算结果表明, 该简化模型与详细模型具有较好的一致性, 能够在较大的初始条件范围内有效模拟 HCCI 发动机的工作过程, 并且能预测甲醛、乙醛等非常规排放物的变化历程以及 CO、NO 的排放, 较详细化学反应动力学机理能大幅降低计算成本, 为化学反应动力学模型与多维 CFD 模型相耦合的模拟计算提供了可行的途径。

利用计算流体力学软件建立了发动机三维计算模型, 并将其与本文提出的乙醇简化动力学模型相耦合, 对乙醇发动机 HCCI 燃烧过程和排放特性进行了模拟计算, 对乙醇均质压燃燃烧过程和主要排放物 HC、CO、NO 以及甲醛、乙醛等非常规排放物随曲轴转角变化的历程进行了预测分析。并分别讨论了当量燃空比、EGR 率等不同初始条件对燃烧过程和排放物的影响, 为进一步扩展均质压燃燃烧的运行范围, 有效改善乙醇 HCCI 发动机燃烧及排放性能提供了理论基础。

关键词: 乙醇, HCCI, 简化模型, 模拟计算

Abstract

With energy shortage, environment pollution, and increasingly stringent emission regulations, the sustainable development of diesel confronts severe challenges. In recently years, many countries pay more attention to the research of clean alternative fuels and new combustion style. Ethanol, which was an oxygenated renewable biofuel, is considered a more promising alternative fuel. Ethanol Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) engine has been extensively studied because of its good combustion and emission characteristics. But currently there are some problems to be solved, such as the difficulty of ignition control, the narrow range of operating conditions, the highly hydrocarbon (HC) and carbon monoxide (CO) emissions and some unregulated emissions like formaldehyde and acetaldehyde.

Firstly this thesis summarizes the research status, existent problems and numerical simulation of ethanol HCCI engines. According to the detailed chemical kinetic mechanism of ethanol proposed by the U.S. Lawrence Livermore Laboratory, this paper analyzes the main approach of ethanol oxidation, and the production and consumption of important intermediate products. Based on the detailed chemical kinetics mechanism, a simplified chemical reaction mechanism is presented by sensitivity analysis and rate of production analysis. Thus a simplified model is constructed, which consists of 33 species and 52 reactions. And then the comparative studies were given between the simplified model and the detailed model. The simulation results show that simplified model and detailed model have good consistency. This simplified model can effectively simulate HCCI engine working operations in a wide range of initial conditions. It also can predict the variational courses of unregulated emissions such as formaldehyde and acetaldehyde, and the CO, NO emission. Thus provides a feasible way for the simulation of the chemical kinetics model coupled with the CFD multidimensional model.

In addition, this paper builds a three-dimensional model. With this reduced

model coupling with the CFD software FLUENT, then it calculates the combustion and emission characteristics of an ethanol HCCI engine. We analyze the combustion process and formation mechanism of regulated and unregulated emissions. And discuss the influence of different initial conditions on the combustion processes and emissions, such as equivalence ratio and EGR rate. It provides a theoretical basis for further extending the operation range of HCCI combustion and effectively improving the combustion and emissions performance of ethanol HCCI engine.

Key words: Ethanol, HCCI, Simplified Model, Numerical Simulation.

独创性声明

本人声明,所呈交的论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知,除了文中特别加以标注和致谢的地方外,论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果,也不包含为获得武汉理工大学或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

签名: 张素英 日期: 2010.5.26

学位论文使用授权书

本人完全了解武汉理工大学有关保留、使用学位论文的规定,即学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版,允许论文被查阅和借阅。本人授权武汉理工大学可以将本学位论文的全部内容编入有关数据库进行检索,可以采用影印、缩印或其他复制手段保存或汇编本学位论文。同时授权经武汉理工大学认可的国家有关机构或论文数据库使用或收录本学位论文,并向社会公众提供信息服务。

(保密的论文在解密后应遵守此规定)

研究生(签名): 张素英 导师(签名): 杨林 日期: 2010.5.26

第 1 章 绪论

1.1 内燃机代用燃料研究现状

内燃机至今已有一百多年的历史，它广泛应用于人类社会的各个领域，对人类社会的发展产生了深远的影响，是当今用量最大、用途最广、最重要的热能动力机械，成为现代社会不可或缺的动力源。目前，内燃机的可持续发展面临着石油资源的紧缺和石油价格的不断攀升以及不断加剧的环境问题等严峻考验。随着汽车工业的飞速发展，内燃机对石油燃料的需求越来越大，我国的石油资源日趋减少，人均剩余可采储量只有世界石油平均值的 10%。1993 年我国就有石油出口国变成了石油进口国，进口原油以每年 800~1000 万吨的幅度在增加，照此发展趋势，2010 年我国石油总需求的 47%需进口，成为继美国之后的世界第二大石油进口国^[1]。

另一方面，内燃机尾气排放已逐渐成为城市空气的主要污染源。相对汽油机，柴油发动机具有比功率大，经济性好，可靠性高，使用寿命长等优点，使世界范围内车用发动机出现柴油机化的趋势^[2]。但是柴油机的燃料是借助于喷油装置直接喷入气缸，依靠活塞压缩终点时的高温使混合气自行着火，由于喷雾与空气混合的时间很短，燃料与空气混合不均匀，导致碳烟与 NO_x 排放大量生成。

为缓解我国石油资源匮乏和需求之间的矛盾及有利于我国长期可持续发展的发展和环境保护，研究与应用清洁的汽车代用燃料势在必行。

目前，重点研究的车用替代燃料有氢气、液化石油气(LPG)、压缩天然气(CNG)、二甲醚(DME)、甲醇、乙醇等。下面介绍一下这几种代用燃料的发展现状及趋势^[3]：

(1) 氢气被认为是最洁净的内燃机燃料之一，它没有 HC、CO、CO₂ 和碳烟排放，但用作内燃机燃料时有高的 NO_x 排放。由于氢的制备、运输、存储等方面困难，目前尚未获得广泛应用。

(2) 液化石油气(LPG)汽化温度低，与空气混合的均匀性大大优于汽油，有利于燃料的完全燃烧，排放低；LPG 的辛烷值高，允许采用较高的压缩比，有利于提高发动机的热效率，但是汽化的 LPG 对发动机的充量系数有不利影响，

因此改装后的气体燃料发动机的功率会有所下降。

(3) 压缩天然气(CNG)热值很高, 以其为燃料的发动机能够获得很理想的排放指标, 但同时也有很多缺点, 如 CNG 的沸点很低, 能量密度较小, 续驶里程较短, 常温下不易携带。

(4) 二甲醚是一种含氧燃料, 具有广泛的可获得性, 可以从煤炭、天然气、生物质等多种资源中制取, 研究表明, 柴油机燃用二甲醚时可以实现高的功率输出和热效率, 低噪音和无烟燃烧, 是柴油理想的替代燃料。

(5) 甲醇燃料可以提高发动机动力性能、经济性能, 有害排放物低, 是一种清洁代用燃料, 但是甲醇有毒, 排气中有未燃醇和醛有害气体排放物, 同时甲醇对有色金属、橡胶有腐蚀作用。

(6) 乙醇是含氧燃料, 蒸发潜热高, 发动机燃用乙醇可以实现无烟排放, 并能大幅度降低 CO 排放, HC、NO_x 也可以有不同程度的降低。近年来, 美国及巴西等一些国家研究发现, 乙醇作为柴油机的代用燃料, 发动机微粒与 CO 排放显著降低, 上海交通大学内燃机研究所目前也正在进行乙醇柴油发动机的研究工作。由于能源结构的调整 and 环境保护的需要, 乙醇作为一种清洁可再生含氧燃料, 将在柴油发动机中具有很大的实际应用潜力。

1.2 乙醇的理化特性

乙醇的分子式为 C₂H₅OH, 常温常压下是一种无色、透明、有香味、易挥发的可燃液体。乙醇又名酒精, 有强烈的酒精气味, 可饮用。乙醇分子中含氧量为 34.8%, 含氧量高, 热值低, 汽化潜热大, 抗爆性好, 因此乙醇作为柴油机燃料可以减少燃烧过程中产生的碳烟和 NO_x 排放, 同时可以获得良好的雾化效果, 使燃烧更充分, 热效率更高。乙醇和柴油及其它主要代用燃料的理化特性比较如表 1-1 所示^[4,5]。

表 1-1 乙醇和柴油及其它主要代用燃料的理化特性

燃料	乙醇	柴油	甲醇	二甲醚	天然气
化学式	C ₂ H ₅ OH	C ₁₆ ~C ₂₃	CH ₃ OH	CH ₃ OCH ₃	CH ₄
分子量	46	180~200	32	46	16

密度(g/mL)	0.79	0.83	0.796	0.66	—
低热值(MJ/kg)	27.2	43	20.26	27.6	50
十六烷值	8	40~55	3	>55	—
自燃温度(°C)	420	250	470	235	540
理论空燃比	9.98	14.5	6.47	8.98	16.75
沸点(°C)	78.3	180~370	64.8	-24.8	-161.5
动力粘度(mPa·s,20°C)	1.2	3.7	0.6	0.15	—
着火极限(% , V)	4.3~19	0.6~6.5	5.5~30	3.4~19	5~15
汽化潜热(kJ/kg)	904	250	1109	460(-20°C)	506
碳含量(%)	52.2	86~89	37.5	52.2	75.0
氧含量(%)	34.8	0	50.0	34.8	0
氢含量(%)	13.0	11~14	12.5	13.0	25.0

乙醇作为柴油机燃料，具有以下一些特征^[6]：

(1) 乙醇来源较为丰富，且具有一定的可再生性。生成乙醇的原料主要有化工原料（如乙烯）、含糖作物（如甘蔗、甜菜等）、含淀粉作物（木薯、土豆和玉米等）以及纤维类原料（如草木秸秆等）。

(2) 乙醇是含氧燃料，分子中含氧量高达 34.8%，有利于改善燃烧，可以实现无烟排放，并能大幅度降低 CO 排放，同时使用废气再循环（EGR）技术，可以降低 NO_x 排放。

(3) 乙醇的汽化潜热很大，是柴油的 3.6 倍，蒸发吸热可使缸内混合气温度降低，有利抑制 NO_x 的生成。

(4) 乙醇的着火界限宽，火焰传播速度快，适合稀混合气燃烧模式的发动机；同时具有良好的雾化效果，燃烧充分，可进一步提高热效率。

(5) 乙醇的低热值低于柴油，相当于柴油的 63.3%，为了达到原柴油机的动力性，应该增加乙醇的供给量。

(6) 乙醇是一种溶剂，对供油系统中的橡胶密封件有腐蚀作用，因此使用乙

醇时应保证整个燃油供给系统具有良好的密封性，以防止乙醇泄漏。

1.3 均质压燃(HCCI)研究概况

均质充量压缩燃烧(Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI)是在进气过程形成均质的混合气，当压缩到上止点附近时均质混合气自行着火燃烧的一种新型燃烧方式。

1.3.1 HCCI 研究现状

HCCI 燃烧的研究最早是由日本 Onishi^[7]和 Noguchi^[8] 于 1979 年提出的活化热氛围燃烧 (Active Thermo-Atmosphere Combustion, ATAC) 理论，他们是在低压缩比和高 EGR 的二冲程汽油机上进行的，通过研究发现在低负荷、1000~3000r/min 的转速范围内，HCCI 燃烧方式有较好的工作稳定性，燃油经济性和排放也都有显著的改善，当时称之为活化热氛围燃烧。

1983 年，Najt 和 Foster 第一次在四冲程发动机上进行了汽油和异辛烷燃料的 HCCI 燃烧试验研究^[9]。他们认为 HCCI 燃烧过程是受化学动力学控制，并且通过简化的化学反应动力学模型预测出了适当压缩比、高 EGR 与放热率的关系。

1989 年，Thring^[10]等用一台楔形燃烧室、压缩比 8:1 的发动机测出了允许的运行范围，并首次采用两种燃烧模式，即在大负荷使用火花点火方式，在部分负荷采用 HCCI 方式。

1992 年，Stockinger^[11]等人首次在 1.6L VW 发动机上研究 HCCI 燃烧技术，把发动机的负荷范围提高到 34%。

1997 年，Christensen 等人采用异辛烷、酒精和天然气三种燃料进行 HCCI 试验，试验结果表明燃料的辛烷值越高越有利于 HCCI 方式的进行^[12,13]。

1999 年，Christensen 等人的试验又证明，几乎所有的液体燃料都能用于可变压缩比的 HCCI 方式中^[14]。

在国内，近些年也有一些内燃机科研机构开始从事 HCCI 燃烧技术的研究。西安交通大学在 TY1100 单缸柴油机上进行了变压缩比对二甲醚 HCCI 发动机的燃烧特性、排放特性及动力性的试验研究^[15]；天津大学尧命发等人在一台压缩比为 17:1 的单缸卧式水冷直喷柴油机上，以 DME/CNG 双燃料进行了 HCCI 燃烧的试验研究，研究表明 EGR 对 DME/CNG 双燃料 HCCI 燃烧特性有重要影

响^[16]。

目前,天津大学、清华大学、大连理工大学、西安交通大学、华中科技大学以及吉林大学等许多高等院校也都在开展 HCCI 燃烧的研究,取得了许多可喜的阶段性成果,推动和丰富了 HCCI 燃烧技术的进展。

1.3.2 HCCI 燃烧特点及存在的问题

HCCI 燃烧是一种新型燃烧方式,它与传统火花点燃式和压燃式这两种燃烧方式有某些相似之处但又完全不同,在 HCCI 燃烧过程中,空气与燃料混合形成均匀的稀薄混合气,当压缩到上止点附近时均匀混合气自燃着火燃烧。图 1 所示了 HCCI 发动机与传统汽油机、传统柴油机以及缸内直喷汽油机之间的区别和联系。其燃烧主要具有以下几个特点^[17,18]:

(1) NO_x 和碳烟排放低

HCCI 燃烧是均质稀薄燃烧,相对于传统柴油机和汽油机燃烧方式,其燃烧温度明显较低,燃烧室内没有局部高温区的出现,可以大大减少 NO_x 的排放;HCCI 燃烧以预混合为主,燃烧室中燃料和空气混合均匀,不存在缺氧情况,因而可以有效降低碳烟排放。

(2) 燃烧热效率高

由于 HCCI 发动机采用压缩自燃,因而可以大大提高压缩比,从而提高其燃烧效率,均匀混合气多点同时着火,放热率高,最高热效率和柴油机相当,同时自燃温度较低,燃烧产物的离解损失减小,降低了与气缸壁面的传热,一定程度上可以提高热效率。

(3) HC、CO 排放增加

与传统的柴油机燃烧相比,人们普遍认为 HCCI 燃烧排放的 HC 和 CO 较高。主要原因是由于 HCCI 采用较稀的混合气和较强的 EGR,缸内温度较低,最终使得 HC 和 CO 排放稍增加。

(4) HCCI 发动机运行范围较窄

HCCI 发动机在中低负荷可以实现稳定运行,但在高负荷时,压力升高率过大,燃烧剧烈,容易出现爆震现象,并且温度过高 NO_x 排放增加。另外对于高辛烷值燃料,由于 HCCI 燃烧为稀薄燃烧,在小负荷工况下反应速率过慢引起火焰温度过低,容易导致熄火,发动机运行范围比较窄。

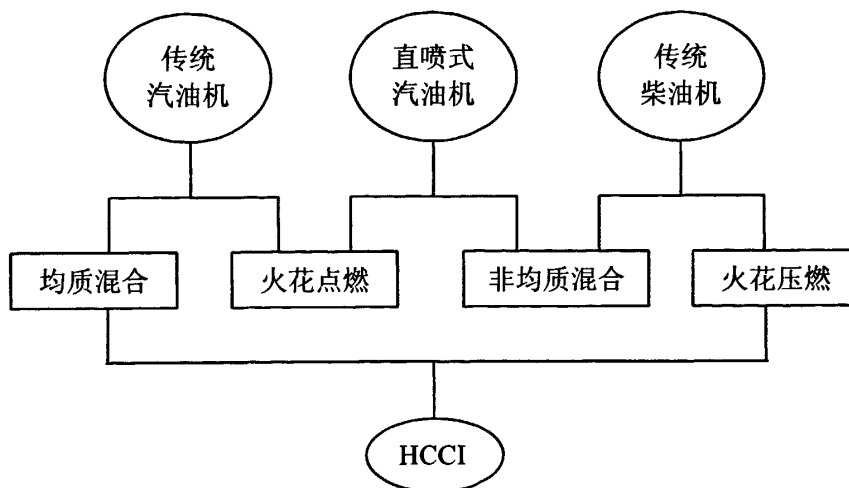


图 1-1 HCCI 和现有内燃机的关系框图

虽然 HCCI 燃烧技术综合了汽油机预混合燃烧技术和柴油机压燃技术的优点，但当前要将 HCCI 发动机实现产业化还存在较大的困难，主要是因为 HCCI 燃烧技术在实用过程中还存在以下方面的问题^[17,19]：

(1) HCCI 燃烧着火时刻的控制问题

在点燃式发动机的燃烧过程中，其着火时刻的控制是通过控制点火时刻来实现的；在压燃式发动机的燃烧过程中，其着火时刻的控制是通过喷油时刻来实现的。而在 HCCI 燃烧过程中，混合气依靠活塞的压缩自燃着火，其着火时刻既不可以像点燃式发动机那样通过发动机的火花点火来控制，也不能像压燃式发动机那样直接通过燃油的喷射来控制，HCCI 的着火时刻是由燃料的化学反应动力学控制，这就使得 HCCI 燃烧的着火时刻主要受进气温度、空燃比、压缩比、发动机转速、缸内残余废气系数、配气相位、燃料成分等因素的影响，不同工况下便会有不同的着火时刻，因此其燃烧的着火时刻较难控制。目前控制 HCCI 着火时刻的主要措施如图 1-2 所示^[20,21,22,23]。

(2) HCCI 发动机运行工况范围的拓展

HCCI 发动机在中低负荷可以很好地运行，但是在小负荷时，对于高辛烷值燃料因燃烧反应速率较慢引起火焰温度较低，使燃烧不充分，形成较多的中间产物和未完全燃烧产物，CO 和 HC 排放增加；在怠速工况还会导致发动机“失火”；在大负荷时，随着混合气加浓，压力升高率过大，燃烧剧烈，容易引起爆

震现象，同时因燃烧温度过高 NO_x 排放升高。HCCI 运行工况范围拓展主要是向低负荷和高负荷范围拓宽，以提高低负荷时 HCCI 燃烧的稳定性、燃油经济性和排放性。目前用于拓宽 HCCI 发动机运行范围的措施主要有：采用可变气门定时技术（VVT）、采用 EGR、缸内喷水^[24]、采用可变压缩比技术、采用增压技术等；在燃烧策略上，目前多采用双模式运行策略，即在中低负荷使用 HCCI 燃烧方式，在启动、怠速阶段和大负荷时采用传统的点燃式或压燃式。虽然这种双模式运行策略充分利用了 HCCI 燃烧的优点，对发动机整机性能有很大改善，但是需要发动机运行工况模式之间的切换，增加了发动机控制系统的复杂性。

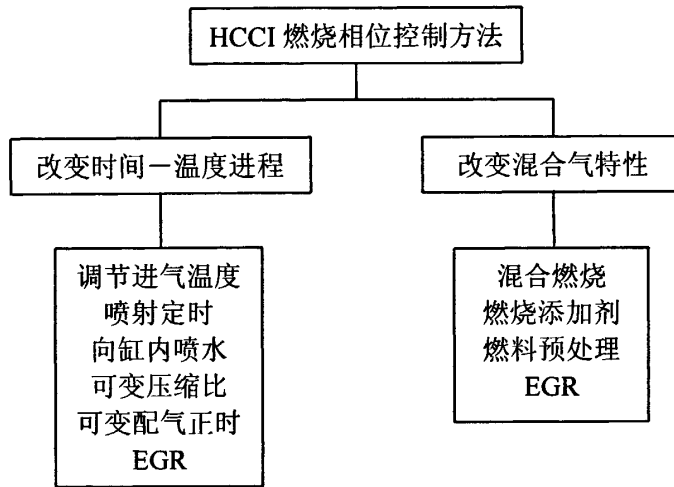


图 1-2 HCCI 着火时刻的控制

1.3.3 乙醇在 HCCI 发动机上的应用

随着国民经济的发展和社会的进步，汽车的使用量不断增长，导致汽车燃料供需矛盾以及汽车排放污染物对生态环境危害的加剧，同时人民生活水平和环境意识逐渐提高，人类对能源的需求日益增长，特别对发动机清洁代用燃料和新型燃烧方式的研究越来越重视。就近些年各国研究的成果来看，乙醇以其良好的燃烧和排放性能，被认为是很有前途的车用替代“清洁燃料”和可再生的“绿色能源”。

首先，乙醇的辛烷值高，其燃料性质和汽油相近，可以作为汽油机的代用燃料或抗爆添加剂。Christensen、Johansson 等人利用异辛烷、乙醇和天然气三

种燃料进行了 HCCI 试验, 试验结果表明, 过量空气系数在较大的范围内, 乙醇燃料都能实现较稳定和有效的 HCCI 燃烧, 同时, 在过量空气系数一定时, 随着进气温度的升高, 乙醇的燃烧效率逐渐升高, 燃烧持续期变短, HC 排放降低, 燃烧效率可以达到 95%, 是三种燃料中最高的^[12]。其次, 我国生产乙醇的主要原料来源于含糖作物、含淀粉作物以及纤维类原料, 来源丰富, 且都是可再生能源, 更具有应用优势。近年来, 我国政府也充分意识到开发使用乙醇这种“绿色能源”的重要性, 加大了对乙醇燃料的研究力度。2001 年 4 月, 国家质量技术监督局颁布了《变性燃料乙醇》国家标准、《车用乙醇汽油》国家标准。2002 年初, 河南省的郑州、洛阳、南阳及黑龙江省的哈尔滨、肇东五个城市成为首批试点使用车用乙醇汽油的城市, 进入了乙醇汽油实际推广阶段^[25,26]。2004 年起, 乙醇汽油已在我国部分地区推广使用。

目前国内一些科研机构, 如天津大学开展柴油醇研究^[27], 已经成功解决柴油和乙醇的互溶性难题, 并取得一定的研究成果, 这为未来柴油醇燃料的推广应用奠定了基础。

由此可见, 从技术上讲, 乙醇燃料在车用发动机上的应用是完全可行的, 同时能够降低有害排放, 提高能源利用率, 节约石油资源, 缓解能源压力, 是符合我国长期可持续稳定发展和环境保护的石油替代燃料。

1.4 HCCI 发动机数值模拟概述

基于先进计算机技术的数值模拟研究在 HCCI 发动机的研究与开发中一直发挥着重要的作用。1983 年 Najt 和 Foster^[9] 首次完成了 HCCI 数值计算和理论分析, 这是零维双区模型对 HCCI 的首例应用。近年来, 数值模拟以其成本低、速度快的优点成为掌握内燃机复杂的物理、化学过程以及指导发动机开发和优化设计不可缺少的工具。一般来说, 关于 HCCI 燃烧的数值模拟研究主要有三种模型: 单区模型、多区模型和多维模型^[29]。

1.4.1 单区模型

单区模型近年来在 HCCI 发动机的研究与开发中得到了广泛的应用, 目前有关 HCCI 数值模拟的研究中, 绝大多数都是基于零维单区和双区模型。根据产物的详细化学动力学模型用化学动力学软件如 Sandia 实验室所开发的

CHEMKIN 和 Lawrence Livermore 实验室的 HCT 来模拟反应过程。单区模型忽略缸内的流场分布，视整个气缸为一个绝热系统，不考虑缸壁传热效应。但也有一些研究者采用 Woschni 经验公式考虑壁面传热损失。

总体上看，单区模型能够很好地预测 HCCI 燃烧过程，特别是能较好地预测着火时刻和 NO_x 的排放。但不能预测 UHC 和 CO 排放，同时对燃烧持续期、燃烧效率预测误差较大。

1.4.2 多区模型

发动机缸内混合气不可能是均匀的，通过对其分区来处理这种不均匀性是一种能兼顾模型的预测能力和计算成本的较好选择，此即多区模型。

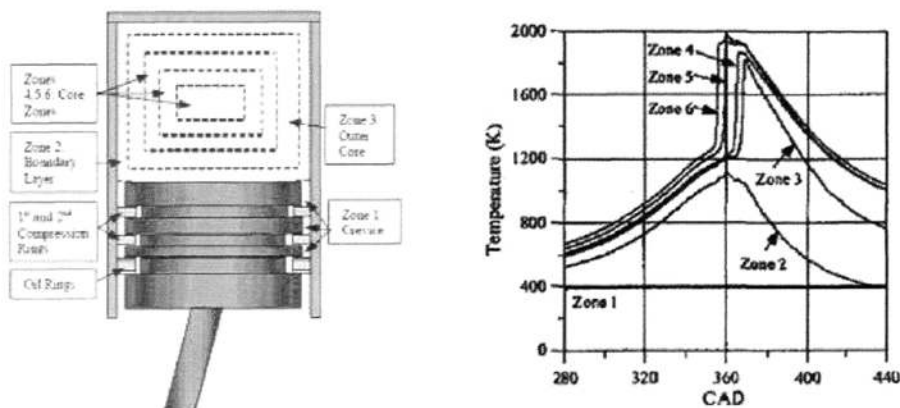


图 1-3 六区模型分区示意图及各区模拟温度

多区模型按照计算的需要，一般情况下可将燃烧室分为若干个区，各区内温度和混合气的组成是均匀的。但对 HCCI 发动机而言，分区模型一般均不超过 10 区。大量计算表明，10 区模型已经得出比较满意的模拟结果，更多的分区对计算结果并没有明显的影响。如图 1-3 所示，多区模型一般包括四种区域即内核区、外区、边界层区以及活塞与缸套之间的缝隙区^[30]。

多区模型可以分析 HCCI 燃烧的着火顺序、着火最先发生部位、各区燃烧程度等等，还可以预测 NO_x 、CO 和 HC 的排放特性。文献[31]和[32]都曾采用多区模型模拟研究了 HCCI 发动机的燃烧及排放特性。计算结果表明，多区模型能够较为准确地预测 HCCI 发动机的各性能参数和 NO_x 排放，但对 HC 和 CO 的预测不够精确，这说明多区模型本身还有不完善之处，还有赖于多维

模型。

1.4.3 多维模型

多区模型考虑了缸内工质非均匀性的影响，但它忽略了气体运动过程，因此无法模拟湍流、化学动力学等一系列因素对燃烧过程的影响。要解决这些问题，只有求助于 CFD 与详细化学反应动力学模型相耦合的多维模型。由于详细模型过于复杂，计算量过大和计算中的刚性问题，HCCI 的多维模型当前仍处于起步阶段。HCCI 多维模拟的主要工作是把内燃机多维模拟的已有成果和详细化学反应动力学机理耦合起来，对 HCCI 燃烧过程和燃烧机理进行更深入的研究。

美国 Wisconsin 大学在 HCCI 多维数值模拟方面做出了一系列开创性的工作^[33,34]。他们将 CHEMKIN 与 KIVA-3V 相耦合进行燃烧模拟计算，计算结果表明，HCCI 的着火同时发生于燃烧室较大的空间范围，并且湍流和化学动力学对燃烧速率的影响不可忽略。其计算结果如图 1-4 所示。

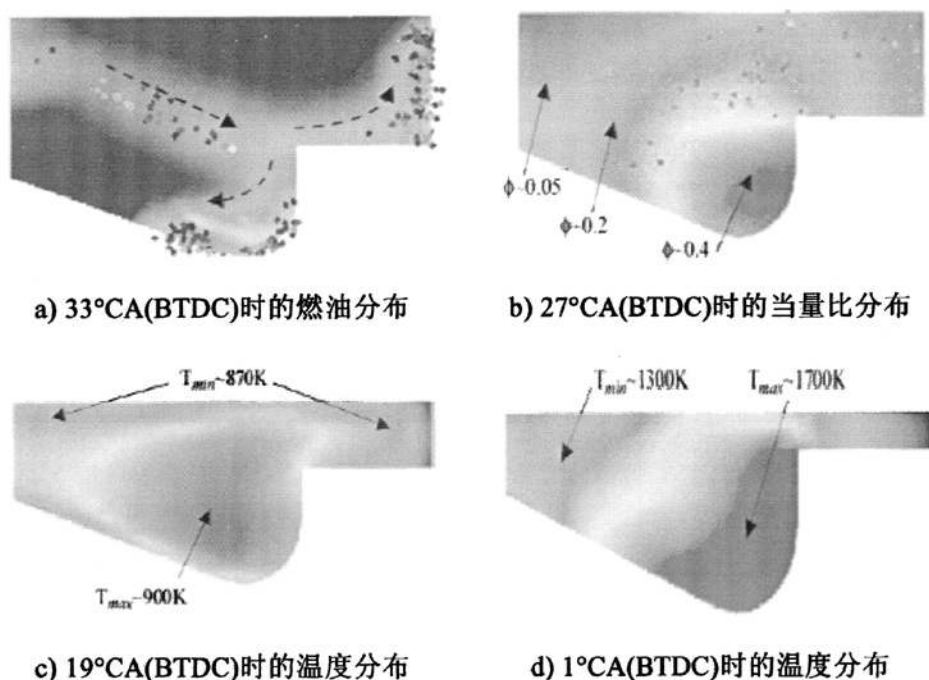


图 1-4 KIVA-3V+CHEMKIN 计算结果

除上述介绍的常规 CFD 与各类化学动力学模型相耦合的多维模型外, 近年来还有人根据湍流燃烧的随机性提出了基于概率密度函数(pdf)的 HCCI 燃烧的随机反应器模型和基于遗传算法的模型。

1.5 本文研究意义及主要内容

随着国民经济的发展和社会的进步, 汽车的使用量不断增长, 导致汽车燃料供需矛盾以及汽车排放污染物对生态环境危害的加剧。近年来, 对发动机清洁代用燃料和新型燃烧方式的研究越来越重视。其中乙醇以其良好的燃烧和排放性能, 被认为是很有前途的车用替代“清洁燃料”和可再生的“绿色能源”。将乙醇应用于 HCCI 燃烧方式, 可以很好地解决传统柴油机碳烟和 NO_x 排放高的问题, 但是还存在一些需要解决的问题, 如着火时间不容易控制、运行范围过窄、HC 和 CO 排放高等。

HCCI 发动机的着火燃烧过程主要受化学反应动力学控制, 因此要模拟计算乙醇 HCCI 燃烧过程, 就必须构建详细可靠的乙醇氧化反应动力学模型。根据美国 Lawrence Livermore 国家实验室研究的乙醇燃烧的详细化学反应动力学模型, 同时添加了扩充的 Zeldovich 机理用于 NO_x 排放的预测, 最终该模型由 64 种组分和 405 个化学反应组成。但是, 由于详细模型过于复杂, 计算量过大和计算中的刚性问题, 使得在当前的计算机资源条件下, 基于 CFD 多维模型相耦合的燃烧计算目前还只能求助于简化的动力学模型。

因此, 有必要建立尽可能详细的预测乙醇燃烧排放的简化化学反应机理, 进而在数据库层面上实现 CHEMKIN 与 FLUENT 的耦合, 同时为发展新型的超低排放发动机燃烧系统提供依据, 对乙醇代用燃料发动机污染物的生成机理及其排放控制进行研究具有重要意义。

本文的主要研究内容包括以下几部分:

(1) 利用气相化学反应动力学软件 CHEMKIN, 在乙醇详细化学反应机理的基础上通过敏感性分析和反应速率分析等方法建立乙醇化学反应动力学简化模型。

(2) 将简化的化学反应模型与 FLUENT 耦合, 对乙醇 HCCI 发动机燃烧及排放进行模拟计算, 分析其燃烧过程和排放物生成机理;

(3) 预测乙醇燃烧过程中 HC、CO、NO_x 等常规排放物及甲醛、乙醛等非

常规排放物的生成浓度，研究影响它们排放的因素；

(4) 考察当量燃空比、废气再循环率对 HCCI 燃烧及排放的影响，得出不同初始条件对 HCCI 燃烧及排放的影响，为乙醇 HCCI 发动机的实用研究提供理论指导。

第 2 章 乙醇简化化学反应动力学模型的研究

HCCI 燃烧方式因其可以大大减少碳烟和 NO_x 排放, 同时提高热效率等优势, 在当前的发动机燃烧研究工作中占据着重要地位。HCCI 燃烧过程主要受燃料的化学反应动力学控制, 在数值模拟计算领域, 详细化学反应机理能够较为全面、精确地描述火焰的某些特征并进行污染物排放方面的预测。但其过于复杂, 计算量太大。因此, 为了提高计算效率和应用范围, 通常是从详细机理中选取一些重要反应, 组成简化机理模型来进行燃烧计算。既可以缩短计算时间, 又可以保证模拟结果具有较高的工程精度, 同时也便于人们更深入地了解化学反应的本质特征, 在工程和理论研究上都具有重要意义。

2.1 建立简化动力学模型的方法

目前建立简化动力学模型的方法, 大体分为两大类。第一类主要是基于数学工具及现代计算机科学技术; 第二类可称为“集总”模型, 带有一定程度的经验性, 是按照化学成分的动力学和热力学性质, 对其进行分门别类的统一处理。以下对当前比较常见的几种简化方法加以介绍^[35]。

1、反应机理的自动生成法

如今, 人们依据长期的研究成果, 制定了许多有关组分构成和反应路径的基本规则, 并给定热力学和动力学数据的算法, 从而得到以计算机软件形成出现的“反应发生器”。目前, 这类软件主要有 EXGAS、NetGen、MAMOX 等。这些软件不仅可以自动生成完整的详细机理, 还可以自动进行简化, 从而得到满足不同要求的简化机理。

反应机理的自动生成法虽然功能强大, 但仍有一定的局限性, 得出的简化机理仍然比较复杂, 还必须借助别的方法进行进一步的简化。

2、敏感度分析

敏感度分析主要是研究系统对小扰动的响应, 类似于非线性动力系统中的稳定性分析。对化学反应动力学而言, 敏感度系数可通过求解一组偏微分方程求出。通过比较各个系数的大小, 即可确定各化学反应的相对重要性, 然后删除那些相对次要的反应, 即可得到简化的反应机理^[36]。

3、准稳态近似法

准稳态近似是在许多领域中研究瞬态过程时常使用的一种方法。就化学动力学领域而言，准稳态近似法假设：各种反应具有不同的时间尺度，并且某些反应进行的速率要远远快于其他反应的速率。因此，那些进行得最快的反应中所涉及的化学组分可以被视为处于稳态。于是，描述这些准稳态组分的微分方程可以用简单的代数方程来代替。这样，原来需求解的微分方程组的阶次可以显著降低，化学上相当于复杂的反应机理得以简化。

4、集总模型

集总的化学动力学简化模型的优点在于不需要了解燃烧过程中每一种组分的详尽演变过程，而只关心反应系统中某些主要组分和总体历程的演变详情。集总模型的基本思想是：就化学结构和动力学特性而言，参与反应的各种组分都可归并到一定的种类，然后针对这些“类”，依靠计算机软件或人工处理生成必要的反应，反应模型中的动力学数据主要依靠与实验数据的拟合来确定。集总模型也称为半经验模型，它在内燃机研究与开发中获得了广泛应用，目前研究的发动机燃烧的各种简化动力学模型如 Shell 模型基本上均属于集总模型。

2.2 乙醇反应动力学简化模型的建立

乙醇在空气中的燃烧属于复杂的化学反应，其化学动力学机理和热力学数据采用美国 Lawrence Livermore 国家实验室公布的数据，包括 57 种组分、383 个基元反应，根据实际的燃烧计算，本文添加了扩充的 Zeldovich 机理，同时在成分中加入了惰性气体 Ar，最终修改后的详细机理包括 64 种组分、405 个基元反应。在当前的计算机资源条件下，此详细机理与 CFD 多维模型相耦合的燃烧计算量太大，目前还只能求助于简化反应机理。因此本节在均质压燃燃烧反应详细动力学研究的基础上，通过对均质压燃燃烧反应途径的分析，结合敏感性分析，建立乙醇均质压燃简化动力学模型。

2.2.1 敏感性分析和反应速率分析方法

敏感性分析方法在许多研究领域都有应用，其目的在于分析出对结果产生较大影响的因素。针对具体的化学反应，主要体现在温度敏感性分析和浓度敏感性分析上。

考虑由 S 种组分和 R 个反应组成的化学系统，对第 i 种组分的反应速率可写为下列一阶常微分方程

$$\begin{aligned} \frac{dc_i}{dt} &= F_i(c_1, \dots, c_s; k_1, \dots, k_R) \\ c_i|_{t=0} &= c_i^0, i=1, 2, \dots, S \end{aligned} \quad (2-1)$$

式中，时间 t 为自变量，浓度 c_i 为因变量，反应率系数 k_r 为系统参数。方程 (2-1) 的解取决于初始条件和系统参数。

在实际应用中，往往很难甚至无法求出敏感度的解析解，因而需要采用数值方法来进行敏感性分析，亦即对方程 (2-1) 取偏微分，得出敏感度系数的一组微分方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_r} \left(\frac{\partial c_i}{\partial t} \right) &= \frac{\partial}{\partial k_r} F_i(c_1, \dots, c_s; k_1, \dots, k_R) \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c_i}{\partial k_r} \right) &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial k_r} \right)_{c_i, k_j \neq r} + \sum_{n=1}^S \left[\left(\frac{\partial F_i}{\partial c_n} \right)_{c_{i \neq n}, k_j} \left(\frac{\partial c_n}{\partial k_r} \right)_{k_{i \neq j}} \right] \\ \frac{\partial}{\partial t} E_{i,r} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial k_r} \right)_{c_i, k_j \neq r} + \sum_{n=1}^S \left[\left(\frac{\partial F_i}{\partial c_n} \right)_{c_{i \neq n}, k_j} E_{n,r} \right] \end{aligned} \quad (2-2)$$

方程 (2-2) 中，偏导数后面的 c_i 表示在微分中 c_i 保持不变， $c_{i \neq n}$ 表示除 c_n 外，所有 c_i 保持不变。该方程组是线性的，可以和方程 (2-1) 联立后进行数值求解。对于给定的反应系统，一旦确定各反应的敏感度系数后，就可以进行量级比较而完成复杂机理的简化。

反应速率分析法 ROP(Rate of Production) 是通过分析各个基元反应对某个组分的净产生速率的大小，来分析反应进行的方向，这种方法在链反应分析中非常有效，通常可以迅速得出链传播过程所经历的反应。

2.2.2 主要组分的确定

主要组分的确定具有非常重要的地位，本文首先通过温度敏感性分析来确定主要组分，依据是这些组分对燃烧温度有重要影响。

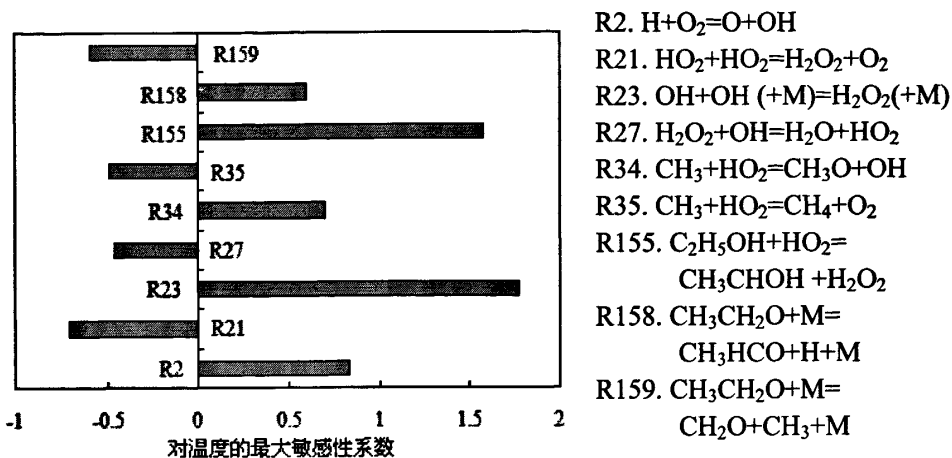


图 2-1 对温度的敏感性系数分析图

图 2-1 为对温度的敏感性系数分析, 得出温度的主要敏感性反应为 R2、R21、R23、R27、R34、R35、R155、R158、R159。从图中还可以看出 R2、R23、R34、R155、R158 对温度的敏感性系数为正, 随着这几个反应的反应速率的增加, 缸内温度将增加, 同时这几个反应将非活性基 H_2O_2 、 HO_2 、 O_2 等转变成了 O、OH 等活性基, 促进了乙醇的氧化进程, 其中在乙醇的氧化过程中主导温度的基元反应为 R23, 其次为 R155 和 R2; 相反地, R21、R27、R35、R159 对温度的敏感性系数为负, 说明增加这些反应的反应速率将使缸内温度降低, 同时这几个反应将活性基 OH、 CH_3 等转化物活性中间产物, 终止了反应链的传播, 抑制了乙醇氧化的进程。

根据上文温度敏感性分析, 我们将上述主要敏感性反应中出现的反应物和产物确定为主要组分, 主要包括 C_2H_5OH 、 CH_3CHOH 、 CH_3CH_2O 、 CH_3HCO 、 CH_2O 、 CH_3O 、 CH_3 、 CH_4 、 HO_2 、 H_2O_2 、OH。

2.2.3 根据主要组分找出链传递过程

确定出主要组分后, 然后再针对主要组分采用反应速率分析法 ROP 进行分析, 得出哪些反应使主组分的净生成速率较大。首先从 C_2H_5OH 开始, 经过 ROP 分析, 得出参与乙醇氧化消耗的主要组分与反应。

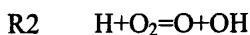
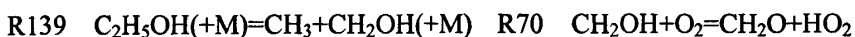
2.2.3.1 乙醇氧化消耗途径分析

乙醇氧化过程主要是以裂解和脱氢两种途径来消耗的。

1) 乙醇裂解反应: $C_2H_5OH(+M) \rightarrow$ 产物

2) 乙醇脱氢反应: $C_2H_5OH+OH \rightarrow$ 产物; $C_2H_5OH+H \rightarrow$ 产物; $C_2H_5OH+O \rightarrow$ 产物; $C_2H_5OH+CH_3 \rightarrow$ 产物; $C_2H_5OH+HO_2 \rightarrow$ 产物

乙醇裂解反应主要是链引发反应, 通过反应链产生大量活性基团。在反应 R139 中, 乙醇 *c-c* 键的分裂引起了着火前活性基的增长。这主要通过下面的链串反应来体现:



由上述的链串反应可知, 首先 C_2H_5OH 裂解生成 CH_3 (甲基) 和 CH_2OH , CH_2OH 再进一步氧化成 CH_2O (甲醛) 和 HO_2 (自由基), 两个自由基 CH_3 、 HO_2 反应生成 CH_3O (甲氧基) 和 OH 基, 然后 CH_3O 分解为 CH_2O 和 H (自由基), 此时和 O_2 发生支链反应, 使反应链进一步增长。此阶段产生的自由基主要有: CH_3 、 HO_2 、 H 、 OH 等, 为 C_2H_5OH 脱氢反应引发其他的各种反应链, 使反应得以进一步延续。脱氢反应则是进一步消耗 C_2H_5OH , 使其氧化成许多中间产物, 从而完成整个燃烧过程。图2-2是乙醇各主要消耗反应的反应速率。

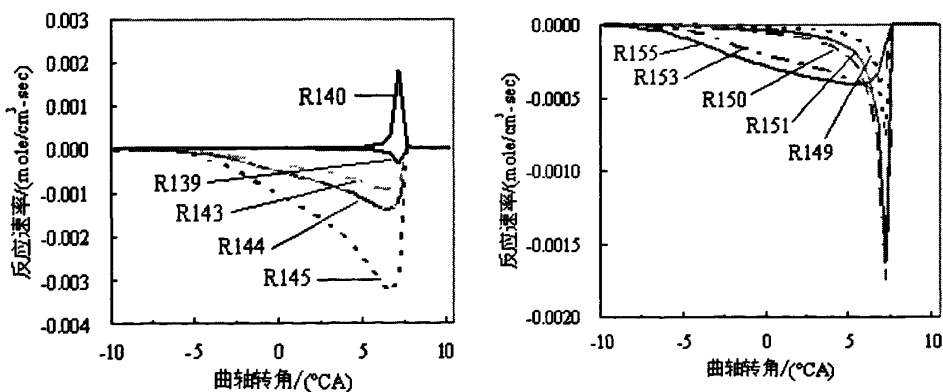


图2-2 乙醇重要氧化消耗反应的反应速率

由图 2-2 可知, R145 的反应速率不管是在反应初期还是后期都是最大的, 在整个燃烧过程中一直占主导地位; 在氧化初期, 除了 R139、R149、R151 外其余反应都明显地参与了氧化过程。乙醇氧化过程中起着重要作用的裂解、脱

氢反应如表 2-1 所示。

表 2-1 乙醇直接参与的重要氧化消耗反应

反应类型	序号	基元反应
裂解反应 $C_2H_5OH(+M) \rightarrow$ 产物	R139	$C_2H_5OH(+M) = CH_3 + CH_2OH(+M)$
	R140	$C_2H_5OH(+M) = C_2H_5 + OH(+M)$
脱氢反应 $C_2H_5OH + OH \rightarrow$ 产物	R143	$C_2H_5OH + OH = C_2H_4OH + H_2O$
	R144	$C_2H_5OH + OH = CH_3CHOH + H_2O$
	R145	$C_2H_5OH + OH = CH_3CH_2O + H_2O$
脱氢反应 $C_2H_5OH + O \rightarrow$ 产物	R149	$C_2H_5OH + O = C_2H_4OH + OH$
	R150	$C_2H_5OH + O = CH_3CHOH + OH$
	R151	$C_2H_5OH + O = CH_3CH_2O + OH$
脱氢反应 $C_2H_5OH + CH_3 / HO_2 \rightarrow$ 产物	R153	$C_2H_5OH + CH_3 = CH_3CHOH + CH_4$
	R155	$C_2H_5OH + HO_2 = CH_3CHOH + H_2O_2$

乙醇脱氢反应主要生成了 CH_3CH_2O 、 CH_3CHOH 等产物，其中 CH_3CH_2O 、 CH_3CHOH 又进一步发生氧化反应， CH_3CH_2O 主要通过 R158、R159 生成 CH_3HCO 、 CH_2O (图 2-3)， CH_3CHOH 通过 R165、 $CH_3CHOH + O_2 = CH_3HCO + HO_2$ 转化为 CH_3HCO (图 2-4)。

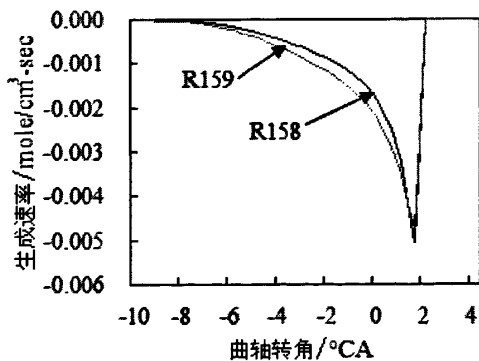


图 2-3 CH_3CH_2O 反应速率

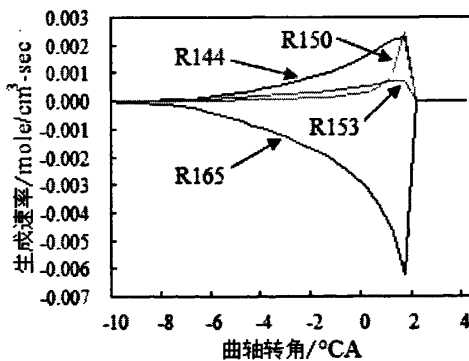


图 2-4 CH_3CHOH 反应速率

2.2.3.2 重要中间产物的分析

在乙醇氧化过程中生成了许多重要的中间产物，主要有： CH_3HCO 、 CH_2O 、 CH_4 、 CO 、 CO_2 、 H_2O_2 、 H_2O 、 HO_2 、 OH 等，分析这些重要中间产物的消耗途径有助于更好地了解乙醇的氧化过程。

图 2-5 为重要中间产物 CH_2O 生成与消耗的反应速率，表明 CH_2O 主要由：
 R59 $\text{CH}_3\text{O}(\text{+M})=\text{CH}_2\text{O}(\text{+M})$ R71 $\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$
 R159 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}+\text{M}=\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3+\text{M}$ R238 $\text{CH}_2\text{CHO}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{CO}+\text{H}$
 等反应生成，通过反应 R125. $\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}=\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$ 和 R126. $\text{CH}_2\text{O}+\text{H}=\text{HCO}+\text{H}_2$
 进一步消耗，氧化成 HCO。

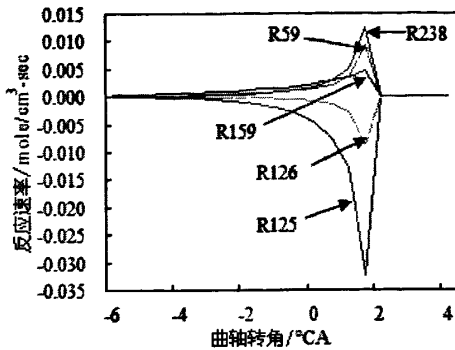


图 2-5 CH_2O 反应速率

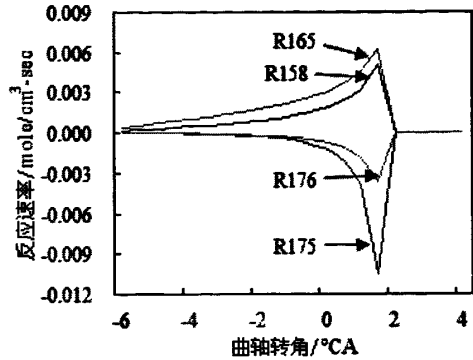


图 2-6 CH_3HCO 反应速率

重要组分之一的 CH_3HCO 在氧化过程中摩尔分数较高，其主要通过反应
 R158. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}+\text{M}=\text{CH}_3\text{HCO}+\text{H}+\text{M}$ 和 R165. $\text{CH}_3\text{CHOH}+\text{O}_2=\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HO}_2$ 生成，
 然后由 R175. $\text{CH}_3\text{HCO}+\text{OH}=\text{CH}_2\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$ 和 R176. $\text{CH}_3\text{HCO}+\text{OH}=\text{CH}_3+\text{HCOOH}$
 发生氧化反应生成 CH_2HCO 和 HCOOH ，进一步消耗。其生成和消耗的反应速率
 见图 2-6。

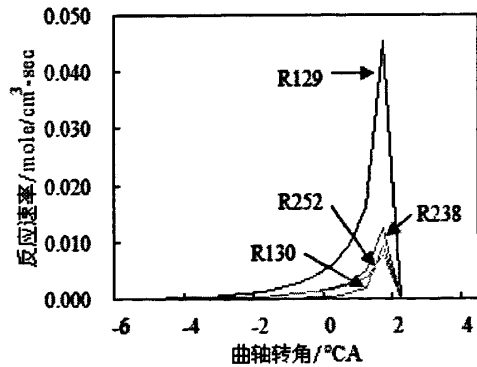
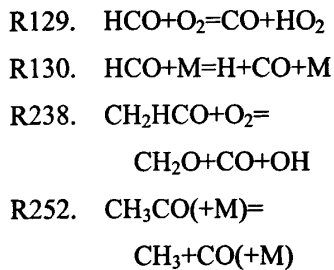


图 2-7 CO 生成速率

CO 作为重要的中间产物之一主要由下列反应得到（主要是由 HCO 进一步
 氧化得到的），图 2-7 为其生成速率。然后 CO 再通过反应 R135. $\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$
 和 R136. $\text{CO}+\text{O}+\text{M}=\text{CO}_2+\text{M}$ 进一步氧化生成最终产物 CO_2 。

对于 CH_4 的生成主要有反应: $\text{R153.C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{CH}_3=\text{CH}_3\text{CHOH}+\text{CH}_4$ 和反应 $\text{R35.CH}_3+\text{HO}_2=\text{CH}_4+\text{O}_2$ 。其中 HO_2 主要通过反应 $\text{R10.H}+\text{HO}_2=\text{OH}+\text{OH}$ 和 $\text{R34.CH}_3+\text{HO}_2=\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$ 转化为活性基加快整体反应速度, 而累积生成的 H_2O_2 主要通过 $\text{R23.H}_2\text{O}_2(+\text{M})=\text{OH}+\text{OH}(+\text{M})$ 转化为活性基。H、OH 等的生成过程已经在上一节中讨论过, 在此不再赘述。

通过乙醇氧化消耗途径和上文各种重要中间产物的分析, 我们可以归纳出乙醇氧化反应的总体流程图如图 2-8 所示。

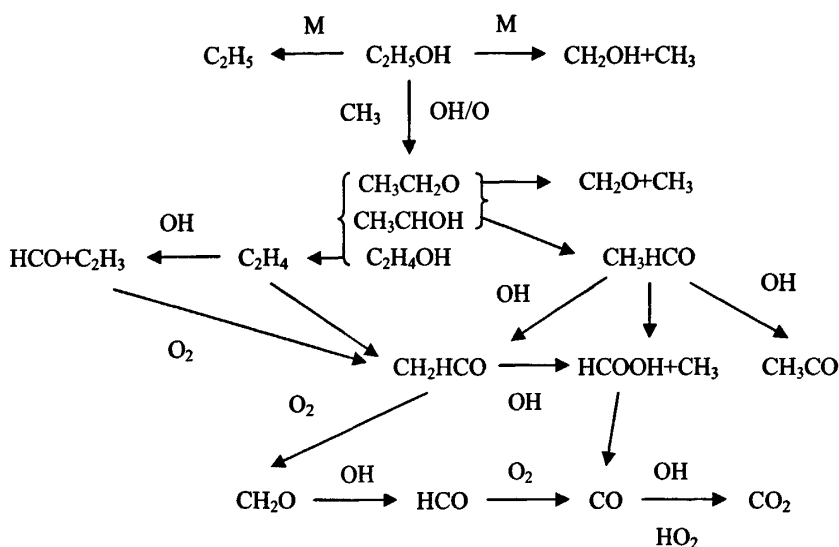


图 2-8 乙醇氧化反应的总体流程图

把上述关键反应组合到一起, 就形成了一个包括 28 种组分和 46 个基元反应的乙醇氧化简化反应机理, 如表 2-2 所示, 在表中

$$k = AT^b \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (2-3)$$

式中, k 为反应速率常数; A 为指前因子; T 为反应温度; b 为温度指数; E 为活化能; R 为普适常量。

表 2-2 乙醇简化动力学模型

编号	反应	A	b	E
1	$\text{O}+\text{OH}=\text{O}_2+\text{H}$	$2.02\text{E}+14$	-0.4	0.0
2	$\text{H}+\text{O}_2(+\text{M})=\text{HO}_2(+\text{M})$	$4.52\text{E}+13$	0.0	0.0

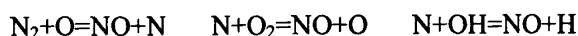
3	$\text{OH}+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$	2.13E+28	-4.827	3500.0
4	$\text{OH}+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$	9.10E+14	0.0	10964.0
5	$\text{OH}+\text{OH}=\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	3.57E+04	2.4	-2112.0
6	$\text{HO}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2$	4.20E+14	0.0	11982.0
7	$\text{HO}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2$	1.30E+11	0.0	-1629.0
8	$\text{OH}+\text{OH} (+\text{M})=\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M})$	1.24E+14	-0.37	0.0
9	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{H}=\text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	3.07E+13	0.0	4217.0
10	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$	2.40E+00	4.042	-2162.0
11	$\text{CH}_4+\text{OH}=\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	4.19E+06	2.0	2547.0
12	$\text{CH}_3+\text{HO}_2=\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$	7.00E+12	0.0	0.0
13	$\text{CH}_3+\text{HO}_2=\text{CH}_4+\text{O}_2$	3.00E+12	0.0	0.0
14	$\text{CH}_2\text{O}+\text{H} (+\text{M})=\text{CH}_3\text{O} (+\text{M})$	5.40E+11	0.454	2600.0
15	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	1.57E+15	-1.0	0.0
16	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	7.23E+13	0.0	3577.0
17	$\text{HCOOH}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}_2\text{O}+\text{H}$	2.62E+6	2.056	916.0
18	$\text{HCOOH}+\text{HO}_2=\text{CO}+\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}$	2.40E+19	-2.2	14030.0
19	$\text{HCOOH}+\text{O}=\text{CO}+\text{OH}+\text{OH}$	1.77E+18	-1.9	2975.0
20	$\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}=\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$	3.43E+09	1.18	-447.0
21	$\text{HCO}+\text{O}_2=\text{CO}+\text{HO}_2$	7.58E+12	0.0	410.0
22	$\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$	9.42E+03	2.25	-2351.0
23	$\text{CO}+\text{O}+\text{M}=\text{CO}_2+\text{M}$	6.17E+14	0.0	3000.0
24	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} (+\text{M})=\text{CH}_3+\text{CH}_2\text{OH} (+\text{M})$	5.94E+23	-1.68	91163.0
25	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} (+\text{M})=\text{C}_2\text{H}_5+\text{OH} (+\text{M})$	1.25E+23	-1.54	96005.0
26	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{OH}=\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	1.74E+11	0.27	600.0
27	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{OH}=\text{CH}_3\text{CHOH}+\text{H}_2\text{O}$	4.64E+11	0.15	0.0
28	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{OH}=\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	7.46E+11	0.30	1634.0
29	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{H}=\text{CH}_3\text{CHOH}+\text{H}_2$	2.58E+07	1.65	2827.0
30	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_4\text{OH}+\text{OH}$	9.41E+07	1.70	5459.0
31	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{O}=\text{CH}_3\text{CHOH}+\text{OH}$	1.88E+07	1.85	1824.0
32	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}+\text{O}=\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}$	1.58E+07	2.00	4448.0

33	$C_2H_5OH+CH_3=CH_3CHOH+CH_4$	7.28E+02	2.99	7948.0
34	$C_2H_5OH+HO_2=CH_3CHOH+H_2O_2$	8.20E+03	2.55	10750.0
35	$C_2H_5OH+HO_2=C_2H_4OH+H_2O_2$	1.23E+04	2.55	15750.0
36	$CH_3CH_2O+M=CH_3HCO+H+M$	1.16E+35	-5.89	25274.0
37	$CH_3CH_2O+M=CH_3+CH_2O+M$	1.35E+38	-6.96	23800.0
38	$CH_3CH_2O+O_2=CH_3HCO+HO_2$	4.00E+10	0.0	1100.0
39	$CH_3CHOH+O_2=CH_3HCO+HO_2$	4.82E+14	0.0	5017.0
40	$CH_3CHOH+O_2=CH_3HCO+HO_2$	8.43E+15	-1.2	0.0
41	$CH_3HCO+OH=CH_2HCO+H_2O$	1.72E+05	2.4	815.0
42	$CH_3HCO+OH=CH_3+HCOOH$	3.00E+15	-1.076	0.0
43	$C_2H_4OH+O_2=HOC_2H_4O_2$	1.00E+12	0.0	-1100.0
44	$HOC_2H_4O_2=CH_2O+CH_2O+OH$	6.00E+10	0.0	24500.0
45	$CH_2HCO+O_2=CH_2O+CO+OH$	3.00E+10	0.0	0.0
46	$CH_3CO(+M)=CH_3+CO(+M)$	3.00E+12	0.0	16722.0

2.2.4 氮氧化物生成模型

氮氧化物 NO_x 包括 NO 和 NO_2 ，但主要是 NO，其主要来源是参与燃烧的空气中的 N_2 ，与燃料（除非本身含氮）组成无关。由于 NO_2 所占质量分数不高，一般计算中只考虑 NO 的生成机理。NO 的生成主要有四种途径^[36]：(1) 高温途径，由空气中的氮在 1800K 以上的高温环境下氧化而产生的 NO，称为热 NO(Thermal NO)或 Zeldovich-NO；(2) 瞬发途径，由空气中的氮与富燃料区中的碳氢组分快速反应生成，称为瞬发 NO(Prompt NO)或 Fenimore-NO；(3) N_2O 途径；(4) 燃料氮途径。

对内燃机而言，NO 的生成主要有(1)和(2)两种途径，第(2)种途径在总的 NO 排放中所占比例不大，且机理较复杂，因此在发动机 NO 计算中，一般均不予考虑；而第(1)种途径的生成机理则是所有污染物中迄今研究得最为深透的，在内燃机典型的燃气温度和接近理论化学当量燃空比的条件下，热 NO 生成服从大家熟知的扩充的 Zeldovich 机理：



扩充的 Zeldovich 机理的温度敏感性较高，当温度较低时，计算结果与试验

结果会有较大差异。但由于其简便实用，而且经过了几十年来无数实践的检验，被证明是一个卓有成效的 NO 模型，至今仍是燃烧界进行排放计算的首选模型。

HCCI 燃烧的发动机，燃烧温度较低，最高温度也只有 1900K 左右，并且不存在扩散燃烧，燃烧速度很快，爆发压力较高。由于低温高压的特点，扩充的 Zeldovich 机理不能很好地预测 NO 的排放。为了得到适用于 HCCI 燃烧方式的 NO 生成机理，P.Mehresh^[40]等人用数值方法模拟了 HCCI 发动机的 NO 排放，他们发现 N₂O 机理的生成条件为低温预混稀燃，对 NO 的生成有很大影响，甚至在某些工况下，N₂O 生成的 NO 超过了 Zeldovich 机理。另外，王志^[41]和黄豪中^[42]的研究也表明在 HCCI 高压低温稀燃的条件下，NO 的生成主要来源于 N₂O 中间产物途径。

因此，为了模拟 HCCI 发动机的 NO 排放，在表 2-2 化学反应机理的基础上添加了 NO 简化模型的 6 步反应机理，见表 2-3。表 2-2 与表 2-3 中的反应就组成了一个包括 33 种组分和 52 个基元反应的乙醇简化动力学模型。

表 2-3 NO 简化模型

编号	反应	A	b	E
47	$N_2+O=N+NO$	3.50E+13	0.00	330.0
48	$N+O_2=NO+O$	2.65E+12	0.00	6400.0
49	$N+OH=NO+H$	7.33E+13	0.00	1120.0
50	$N_2O+O=2NO$	2.90E+13	0.00	23150.0
51	$N_2O(+M)=N_2+O(+M)$	1.30E+11	0.00	59620.0
52	$N_2O+H=NH+NO$	4.16E+14	-450	0.0

2.3 简化模型的验证

为了检验简化模型对燃烧过程预测的准确性，我们以乙醇燃烧反应的详细机理作为判断标准，采用美国 Sandia 国家实验室开发的大型气相化学反应动力学计算软件 CHEMKIN4.0，将乙醇 HCCI 燃烧的简化模型的计算结果与详细化学动力学模型的计算结果进行了对比，对比结果表明，本文的简化模型能预测乙醇发动机 HCCI 燃烧的基本特性，能够对甲醛、乙醛和 NO 的生成和消耗进行较好的预测。

2.3.1 初始参数的设置

数值计算采用美国 Sandia 国家实验室的燃烧研究室开发的一个大型气相化学和等离子体化学动力学计算软件 CHEMKIN4.0。它是一个用来解决复杂化学反应动力学的强大的软件系统，在化工、航天、动力、汽车、国防等领域应用广泛。此外，它还提供了单独的 HCCI 发动机计算模块，内嵌零维单区模型作为发动机物理模型。

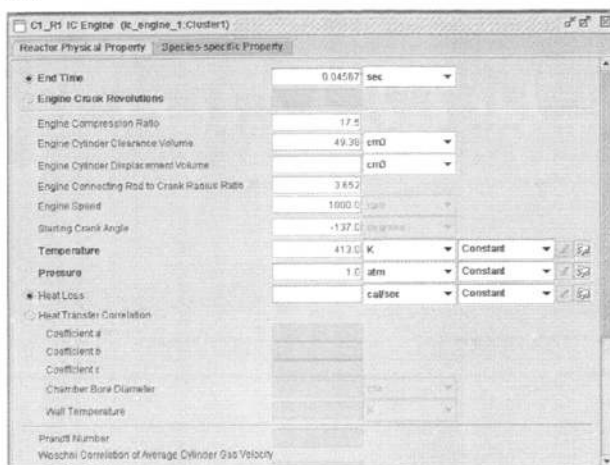


图 2-9 模型初始参数设置

本文以燃用乙醇的 ZS195 非增压水冷直喷式柴油机为研究对象，以其结构参数作为初始输入参数，其中压缩比 17.5，连杆长度与曲柄半径之比为 3.652（连杆长度 210mm，曲柄半径 57.5mm），发动机转速 1000r/min，计算从上止点前 137° CA 开始，计算步长取值 0.5° CA，初始温度和压力分别设为 413K 和 0.1MPa，燃空当量比 $\Phi = 0.2632$ ，不考虑燃烧室壁面的传热。计算所用发动机模型初始参数如图 2-9 所示。

2.3.2 简化模型与详细模型的比较

在 $\varepsilon = 17.5$, $\Phi = 0.2632$, $P_{in} = 0.1MPa$, $T_{in} = 413K$, $n = 1000r/min$ 工况下，简化模型计算出的缸内压力、缸内温度以及重要基元的摩尔分数与详细模型计算结果的比较，见图 2-10。从图 2-10a)、图 2-10b) 中可以看出，简化模型所计算出的缸内压力和温度曲线与详细模型所得的结果一致，预测的着火时刻与详细模型也吻合的较好。

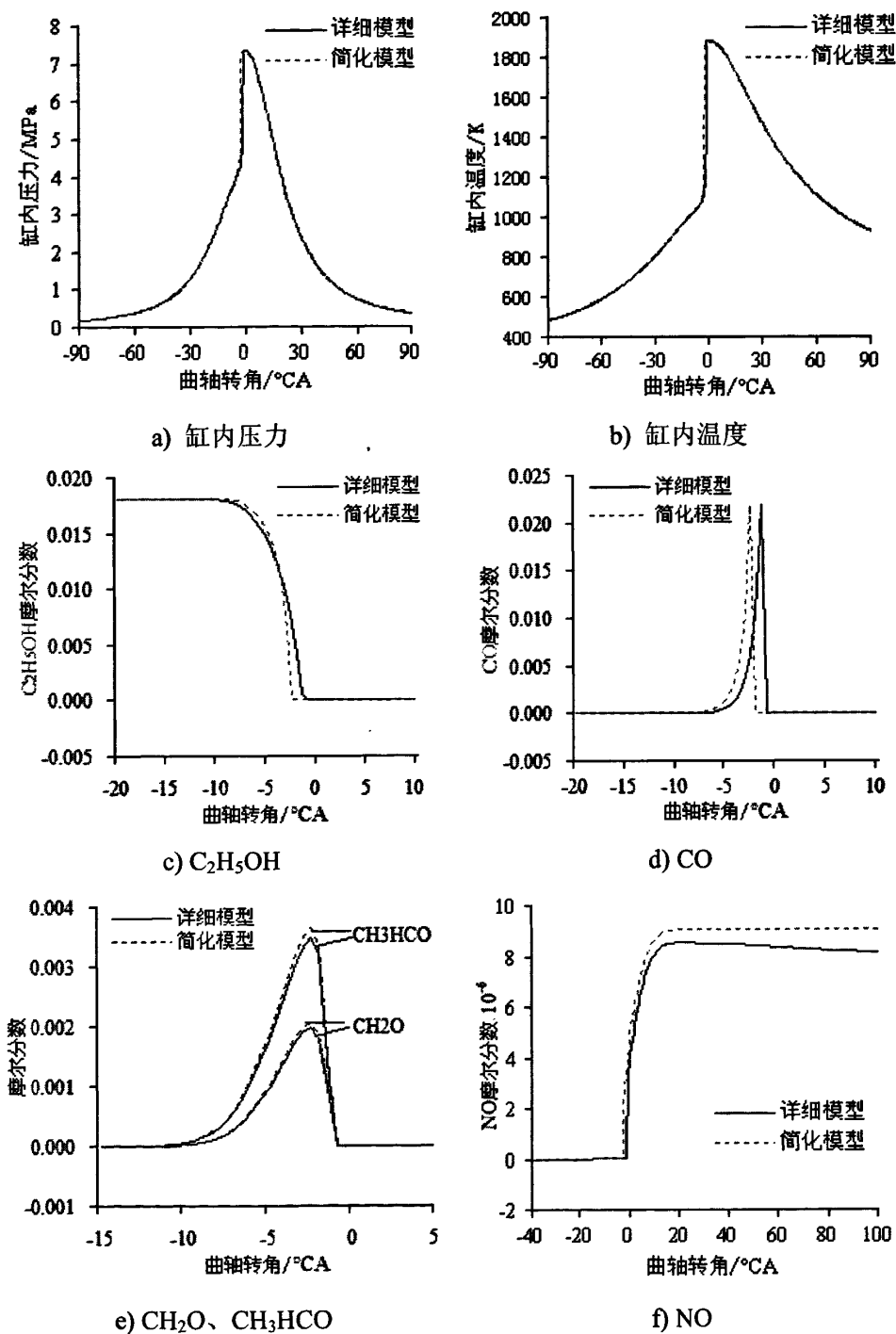


图 2-10 简化模型与详细模型的对比图

图 2-10c) 为简化模型与详细模型计算的乙醇摩尔分数的比较, 两种模型计算所得的乙醇摩尔分数曲线在开始消耗直至完全消耗趋势完全一致, 开始时刻与完全消耗的时刻十分吻合, 只是简化模型计算的着火时刻较详细模型略有提前, 主要是因为简化机理中去掉了一些抑制燃料氧化的反应, 使得 HO_2 、 H_2O_2 提前裂解为 OH 自由基, 引起着火时刻提前。

图 2-10d)、2-10e) 为缸内 CO、甲醛和乙醛摩尔分数变化曲线。它们都是乙醇氧化反应中比较重要的中间产物, 有相似的生成规律。在燃烧初始阶段开始大量生成, 然后逐渐累积达到最大值, 随着燃烧进行, 温度进一步升高, 它们被迅速氧化而消耗, 浓度快速下降。从图 2-10e) 中可以看出, 简化模型和详细模型计算所得的摩尔分数曲线从开始生成时刻直至最终完全消耗时刻总体趋势基本一致, 只是简化模型计算出的摩尔分数略高于详细模型的计算结果, 这是由于简化模型中忽略了几个消耗甲醛和乙醛的基元反应, 而仅选取了几个与甲醛和乙醛生成最主要的反应。

图 2-10f) 为 NO 摩尔分数变化曲线。由前面讨论的缸内温度可知, 在计算工况下, 缸内温度较低, 很少超过 1800K, 所以 NO 的生成量很少, 在 HCCI 高压低温稀燃的条件下, NO 的生成主要来源于 N_2O 中间产物途径。简化模型比详细模型生成的 NO 略高, 但总体趋势基本上一致。

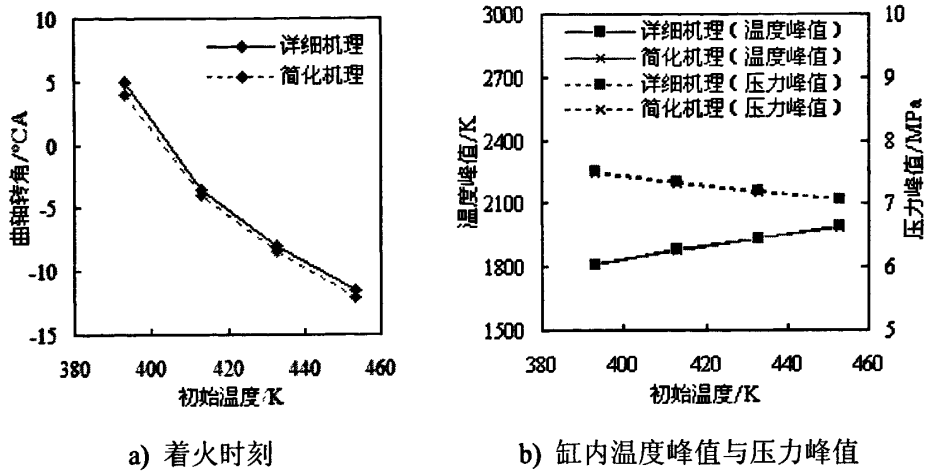
由上述图可见, 虽然一些物种的摩尔分数略有差别, 简化模型需要进一步的完善, 但是简化模型和详细模型得到的计算结果总体趋势基本一致, 因此可以初步证明本文所提出的简化模型基本合理。

2.3.3 不同初始参数对简化模型的影响

2.3.3.1 不同初始温度对简化模型的影响

HCCI 发动机的着火燃烧过程主要受化学反应动力学控制^[9], 对温度非常敏感, 所以当进气温度不同时, 对乙醇 HCCI 的燃烧影响较大。对于简化模型, 为了考察初始温度对简化模型计算结果的影响, 验证简化机理能在更为宽广的初始温度范围内的准确性和有效性, 本节将简化机理与详细机理在不同初始温度条件下进行了对比。在进气压力 $P_{in}=0.1\text{MPa}$ 和当量燃空比 $\Phi=0.2632$ 不变的条件下 (发动机转速 $n=1000r/\text{min}$ 、压缩比 $\varepsilon=17.5$ 保持不变), 图 2-11 为在不同的进气温度 T_{in} (分别取 393K、413K、433K、453K) 下, 简化模型计算的着火

时刻、缸内压力峰值和温度峰值与详细模型计算结果的比较图。



a) 着火时刻

b) 缸内温度峰值与压力峰值

图 2-11 不同初始温度时简化模型与详细模型的对比计算

图 2-11a)为由两种模型计算出的着火时刻的比较,从图中可以看出,随着初始温度的升高,着火时刻提前,这主要是因为温度的升高加剧了氧化过程,提高了反应速率,简化模型的计算结果与详细模型计算结果基本一致。图 2-11b)为两种模型计算出的缸内温度峰值和压力峰值的对比,从图中可以看出,随着初始温度的升高,缸内的压力峰值逐渐减小,而缸内的温度峰值呈增大趋势,这主要是因为,随着初始温度的升高,在保持进气压力和当量比不变时,进入气缸的燃料减少,其简化模型与详细模型的计算结果也比较吻合。可见,对进气温度进行调节,是实现 HCCI 燃烧控制的有效途径之一。

2.3.3.2 不同初始压力对简化模型的影响

为了考察初始压力对简化模型计算结果的影响,验证简化模型在不同初始压力下计算的结果与详细模型计算结果的一致,将简化模型与详细模型在初始温度 $T_{in}=413K$ 、当量燃空比 $\Phi = 0.2632$ 不变的条件下,计算不同初始压力 P_{in} (取 $0.1MPa$ 、 $0.12MPa$ 、 $0.14MPa$ 、 $0.16MPa$) 下的模拟燃烧情况进行了对比。

图 2-12 为不同初始压力时简化模型与详细模型计算的着火时刻、缸内压力峰值和温度峰值的变化图。从图中可以看到,随着进气压力的增加,着火时刻提前,缸内温度峰值略有增加,压力峰值有较大幅度的升高,这主要是因为随着初始压力的增大,使得可燃混合气的密度增大,从而可以产生更多的自由基并加大了自由基的碰撞几率,加速了氧化反应的进行,使得着火提前,并且由

于缸内压力随初始压力的升高，在压缩过程中引起的温升程度会越高，进而加剧了氧化反应的剧烈程度，缩短了燃烧持续期，使缸内压力峰值增加。

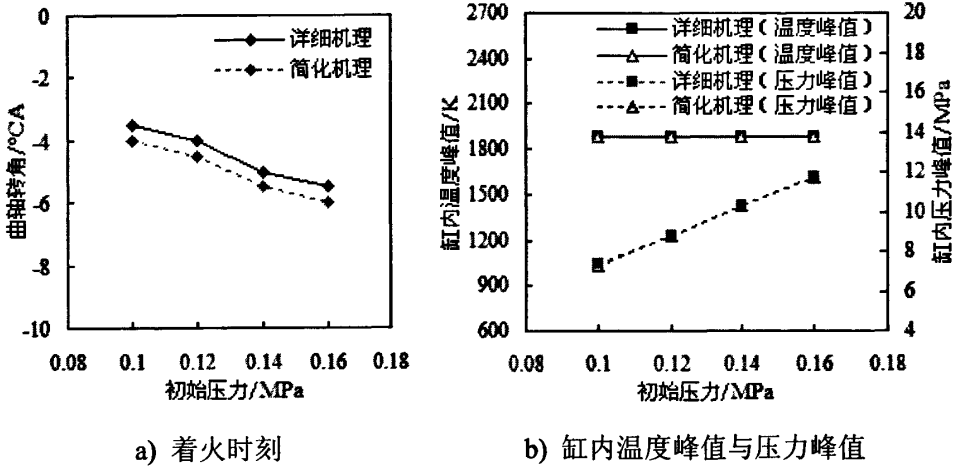


图 2-12 不同初始压力时简化模型与详细模型的对比计算

2.3.3.3 不同燃空当量比对简化模型的影响

HCCI 稀薄燃烧，可以降低燃烧温度，减少 NO_x 的排放，可燃混合气中的燃料的浓度直接影响着燃烧情况。为了考察燃空当量比对简化模型计算结果的影响，验证在不同的燃空当量比下简化模型计算结果，仍然与详细模型计算结果具有一致性，将简化模型与详细模型在不同燃空当量比（取 $\Phi = 0.2632$ 、 $\Phi = 0.22$ 、 $\Phi = 0.17$ ）下的模拟燃烧情况进行了对比，模拟计算选取初始温度 $T_{in}=413K$ ，初始压力 $P_{in}=0.1MPa$ ，发动机转速 $n = 1000r/min$ 、压缩比 $\epsilon = 17.5$ 保持不变。

图 2-13 是不同燃空当量比时，简化模型与详细模型计算的着火时刻、缸内温度峰值和压力峰值。从图中可以看出，随着燃空当量比的增大，燃料浓度增大，加速氧化反应的进行。从图中还可以看出，缸内温度峰值和压力峰值随燃空当量比的增加均有提高，这主要是由于当初始温度和压力一定时，随着燃空当量比的增加，混合气浓度变浓，氧化反应的热量增加，缸内温度增加加快，促进了燃烧反应的进行，使得缸内的温度峰值和压力峰值增加。从图中可以明显看出，简化模型的计算结果与详细模型的计算结果基本一致。

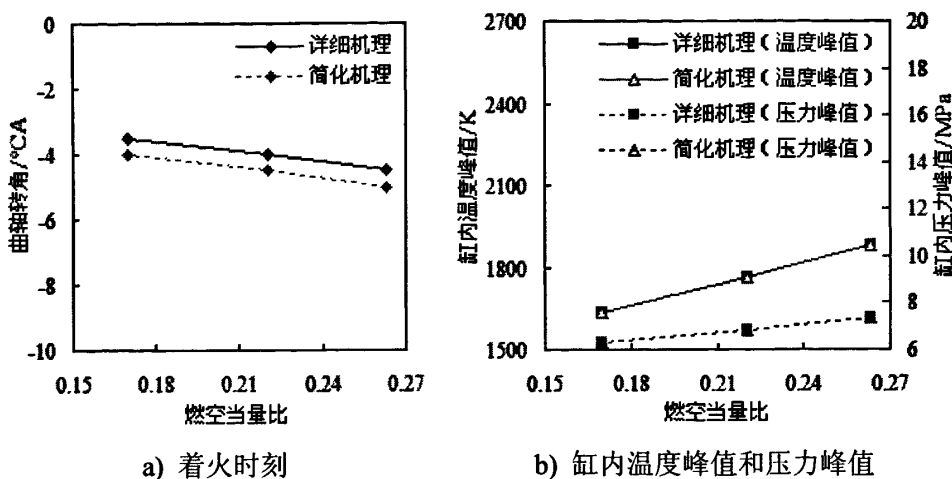


图 2-13 不同燃空当量比时简化模型与详细模型的对比计算

总之，通过改变初始参数，对本文提出的乙醇简化化学反应动力学模型与详细模型进行对比，结果表明，在不同初始参数条件下，简化模型对乙醇 HCCI 燃烧特性及中间产物的预测与详细模型吻合的较好。因此，用简化模型代替详细模型与多维模型相耦合，对乙醇 HCCI 发动机的燃烧和排放特性进行模拟计算是可行的。

2.4 本章小结

本章介绍了构筑简化动力学模型的基本方法，对乙醇 HCCI 燃烧反应途径进行了分析，总结出了基于 CHEMKIN 程序的简化的乙醇燃烧反应机理，由此构建了乙醇 HCCI 燃烧反应简化动力学模型，其中简化模型包括 33 种组分，52 个基元反应。在此基础上，将乙醇 HCCI 燃烧的简化模型的计算结果与详细化学动力学模型的计算结果进行了对比，研究了不同初始参数对简化机理的影响。主要包括以下两方面的工作：

(1) 在乙醇氧化的详细化学反应动力学机理分析的基础上，首先通过温度敏感性分析来确定主要组分，然后再针对主要组分采用反应速率分析法 ROP 进行分析，最后得到乙醇化学反应动力学的简化机理，由此建立乙醇 HCCI 燃烧的简化模型。并将简化模型与详细模型进行了对比计算，计算结果表明，简化模型与详细模型吻合情况较好。

(2) 研究了不同初始参数对乙醇 HCCI 燃烧简化机理的影响，分别讨论了

不同初始温度、不同初始压力、不同燃空当量比下，简化模型与详细模型对乙醇 HCCI 燃烧的着火时刻、缸内温度峰值和压力峰值的影响。结果表明，在各种不同条件下，简化模型与详细模型对乙醇 HCCI 燃烧的预测趋势相同，两种模型计算结果基本一致。

第3章 CFD缸内流动与燃烧模拟理论

计算流体动力学(CFD)是通过计算机数值计算和图像显示,对包含流体流动和热传导等相关物理现象的系统所做的分析。CFD 辅助发动机设计实质就是基于计算机技术、利用 CFD 理论来解决具体发动机内的流动计算问题。目前比较有代表性的内燃机数值模拟计算程序有英国帝国理工学院的 PHOENICS、奥地利 AVL 研究所的 FIRE、英国 Adapco 公司的 STAR-CD、美国 FLUENT 公司的 FLUENT 以及美国 Los Alamos 国家实验室开发的 KIVA 程序等软件^[43]。FLUENT 具有功能全面、适用性强、使用广泛等特点,CFD 耦合化学反应动力学机理可以模拟计算均质压燃发动机的燃烧过程。

3.1 FLUENT 软件介绍

FLUENT 软件是美国 FLUENT 公司推出的大型计算流体动力学软件,是用于模拟具有复杂外形的流体流动以及热传导的 CFD 软件。FLUENT 能够很好地在瞬态与稳态、层流与湍流、传热、化学反应、多相流等领域进行模拟计算^[44]。FLUENT 的软件包主要由:GAMBIT、FLUENT、prePDF、TGrid、Translators 五部分组成。

利用 FLUENT 软件进行求解的步骤如下:

- (1) 确定几何形状,生成计算网格(用 GAMBIT,也可以读入其他指定程序生成的网格);
- (2) 选择求解器(2D、3D、2DDP、3DDP);
- (3) 导入并检查网格;
- (4) 选择求解的方程:层流或湍流,化学组分或化学反应,传热模型等;
- (5) 确定流体的材料物性;
- (6) 确定边界类型及边界条件;
- (7) 条件计算控制参数;
- (8) 流场初始化;
- (9) 求解计算;
- (10) 保存结果,进行后处理等。

利用 FLUENT 软件进行模拟计算的具体流程如图 3-1 所示。

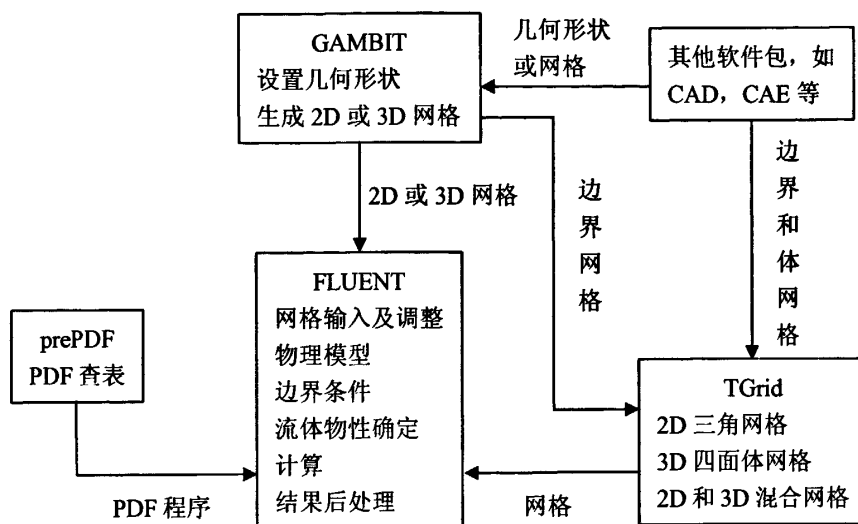


图 3-1 基本程序结构示意图

3.2 流体动力学控制方程

3.2.1 基本控制方程

发动机缸内燃烧过程（化学反应的流动过程）十分复杂，具体表现形式千变万化，但它们都遵循自然界的基本守恒定律：质量守恒定律、动量守恒定律、能量守恒定律，对于多组分化学反应，还需要化学组分平衡方程。这些方程是对流动和燃烧过程进行模拟计算的基础和出发点^[45,46]。

(1) 质量守恒方程

任何流动问题都必须满足质量守恒定律。即单位时间内流体微元体中质量的增加，等于同一时间间隔内流入该微元体的净质量。按照这一定律，质量守恒方程为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (3-1)$$

引入矢量符号 $div(a) = \frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + \frac{\partial a_z}{\partial z}$, 式(3-1)写为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho u) = 0 \quad (3-2)$$

式中, ρ 是流体的密度, t 是时间, u 是速度矢量。

(2) 动量守恒方程

任何流动系统都必须满足动量守恒定律。即: 微元体中流体的动量对时间的变化率等于外界作用在该微元体上的各种力之和。按照这一定律, x 、 y 和 z 三个方向的动量守恒方程为:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + div(\rho u u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + F_x \quad (3-3a)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + div(\rho v u) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + F_y \quad (3-3b)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + div(\rho w u) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + F_z \quad (3-3c)$$

式中, p 是流体微元体上的压力; τ_{xx} 、 τ_{yy} 、 τ_{zz} 等是因分子粘性作用而产生的作用在微元体表面上的粘性应力 τ 的分量; F_x 、 F_y 和 F_z 是微元体上的体力。

式(3-3)是对任何类型的流体均成立的动量守恒方程。对于牛顿流体, 粘性应力 τ 与流体的变形率成正比例, 有:

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda div(u) \\ \tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda div(u) \\ \tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda div(u) \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (3-4)$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)$$

式中, μ 是动力粘度, λ 是第二粘度, 一般可取 $\lambda = -2/3$ 。将式(3-4)代入(3-3), 得:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u u) = \text{div}(\mu \text{grad } u) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (3-5a)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \text{div}(\rho v u) = \text{div}(\mu \text{grad } v) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (3-5b)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \text{div}(\rho \omega u) = \text{div}(\mu \text{grad } \omega) - \frac{\partial p}{\partial z} + S_\omega \quad (3-5c)$$

式中, $\text{grad}() = \partial()/\partial x + \partial()/\partial y + \partial()/\partial z$, 符号 S_u 、 S_v 和 S_ω 是动量守恒方程的广义源项。

式(3-5)是动量守恒方程, 简称动量方程(momentum equations), 也称作运动方程, 还称为 Navier-Stokes 方程。

(3) 能量守恒方程

能量守恒定律是包含有热交换的流动系统必须满足的基本定律。该定律表述为: 微元体中能量的增加率等于进入微元体的净热流量加上体力与面力对微元体所做的功。按照这一定律, 能量守恒方程为:

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \text{div}(\rho u T) = \text{div} \left(\frac{k}{c_p} \text{grad } T \right) + S_T \quad (3-6)$$

该式可写出展开形式:

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v T)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \omega T)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S_T \quad (3-7)$$

式中, c_p 是比热容; T 为温度; k 为流体的传热系数; S_T 为粘性耗散项。

(4) 组分质量守恒方程

对于一个存在多种化学组分的特定系统而言, 每一种组分都遵守组分质量守恒定律。该定律可表述为: 系统内某种化学组分质量对时间的变化率, 等于通过系统界面净扩散流量与通过化学反应产生的该组分的生产率之和。其表达

式为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_l) + \text{div}(\rho u m_l) = \text{div}(\Gamma_l \text{grad } m_l) + R_l \quad (3-8)$$

式中， m_l 为组分 l 的质量分数； Γ_l 为组分 l 的输运系数； R_l 为组分 l 的化学反应生成率。

(5) 守恒方程的通用形式

为了便于对各守恒方程进行分析，并用同一程序对各守恒方程进行求解，现建立各基本守恒方程的通用形式。

如果用 ϕ 表示因变量，则上述各守恒方程都可以表示成以下通用形式：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \text{div}(\rho u \phi) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad } \phi) + S_\phi \quad (3-9)$$

式中，第一项代表瞬态项，第二项代表对流项，第三项代表扩散项，第四项代表源项。

上述质量守恒方程、动量守恒方程、能量守恒方程、组分守恒方程，加上气体混合物的状态方程构成了一个封闭的方程组，然后再赋予合理的初始条件和边界条件，就构成了数学上的定解问题。

3.2.2 湍流模型

没有一个湍流模型对于所有的问题是通用的。一般在解决工程应用问题时，要根据流动中所包括的物理现象、给定的实际情况、精度的要求、计算机的能力、时间的限制而确定选择哪种湍流模型。目前在工程上提出的湍流模型有：湍流粘性系数模型（如零方程模型、单方程模型、双方程模型和多尺度模型）、雷诺应力模型(RSM)、大涡模拟(LES)以及湍流的直接数值模拟(DNS)。这些模型和方法各有其适用范围和优缺点，本文仅列出了应用于内燃机缸内流动数值模拟的双方程湍流模型： $k-\varepsilon$ 模型和 RNG $k-\varepsilon$ 模型。

(1) $k-\varepsilon$ 模型

$k-\varepsilon$ 模型是迄今为止在工程上应用最广泛、积累经验最多的湍流模型。标准的 $k-\varepsilon$ 模型是针对二维不可压缩的稳态流动问题提出的，在用于内燃机缸内湍流时必须经过修正，修正后的 $k-\varepsilon$ 模型的 k 方程和 ε 方程分别为：

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} = -\frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \tau_{xy} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_{eff}}{\text{Pr}_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - \rho \varepsilon \quad (3-10)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \varepsilon)}{\partial x_j} = -\left(\frac{2}{3}C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right)\rho\varepsilon \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_{eff}}{\text{Pr}_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{k}{\varepsilon} \left(C_{\varepsilon 1} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon \right) \quad (3-11)$$

虽然 $k-\varepsilon$ 湍流模型应用最广，但它比较简单，不需要太多的计算时间和内存，计算得到的结果精度较低。 $k-\varepsilon$ 模型在处理内燃机缸内流动中大剪切率所产生的强烈的湍流各向异性效应以及非平衡效应等方面也存在不少问题。

(2) RNG $k-\varepsilon$ 模型

重整化群 (Renormalization Group, RNG) 是一种用于构筑许多物理现象模型的通用方法，为湍流的上述问题提供了解决方法。它的基本思路是通过在空间尺度上的一系列连续的变换，对原本十分复杂的系统或过程实现粗分辨率的或“粗粒化” (coarse grained) 的描述，从而使问题得到简化而易于处理^[29]。

本文中采用的湍流模型是在标准 $k-\varepsilon$ 模型基础上修正后的 RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型。由于内燃机缸内工质有强烈的密度变化，常规的 RNG $k-\varepsilon$ 模型必须作压缩性修正后，才能应用于内燃机。修正后的 RNG $k-\varepsilon$ 模型与标准 $k-\varepsilon$ 模型基本相同，不同之处在于耗散率 ε 方程中增加了一项以考虑平均拉伸应力和流体压缩性的影响。 ε 方程改为如下形式^[47,48]：

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \varepsilon)}{\partial x_j} = -\left(\frac{2}{3}C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} + \frac{2}{3}C_\mu C_\eta \frac{k}{\varepsilon} \frac{\partial u_j}{\partial x_j}\right)\rho\varepsilon \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{u_{eff}}{\text{Pr}_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{k}{\varepsilon} \left((C_{\varepsilon 1} - C_\eta) \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon \right) \quad (3-12)$$

$$\text{式中, } C_{\varepsilon 3} = \frac{-1 + 2C_{\varepsilon 1} - 3m(n-1) + (-1)^\delta \sqrt{6}C_\mu C_\eta}{3}, \quad \delta = \begin{cases} 1 & \nabla \cdot \bar{u} < 0 \\ 0 & \nabla \cdot \bar{u} > 0 \end{cases}$$

$$C_\eta = \frac{\eta(1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta\eta^3}, \quad \eta = S \frac{k}{\varepsilon}, \quad \text{其中 } S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

m 和 n 是与缸内热力学过程有关的常数， $m=0.5$ ， n 是多变指数； C_3 项用于考虑速度扩张项不为零时的影响。RNG $k-\varepsilon$ 模型中常数的取值如下：

$C_\mu = 0.0845$ ， $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ ， $C_{\varepsilon 2} = 1.68$ ， $\text{Pr}_k = \text{Pr}_\varepsilon = 0.719$ ， $\eta_0 = 4.38$ ， $\beta = 0.012$ 。为了便于比较，下面也给出了标准 $k-\varepsilon$ 模型中常数的取值：

$C_\mu = 0.09$ ， $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ ， $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ ， $\text{Pr}_k = 1.0$ ， $\text{Pr}_\varepsilon = 0.769$ 。可见两者之间的

常数取值是有所不同的。

(3) 湍流近壁处理方法

湍流流场在固壁附近，壁面区内的物理量如速度、温度和浓度等参数的输运系数将发生剧烈的变化。这种变化主要是随着壁面的临近，湍流脉动速度减小，而层流输运相对增强，从而引起输运系数的剧烈变化。如果在这种急剧变化的非线性区域仍然使用 FLUENT 默认的壁面函数法，将会引起很大的误差。

为了解决近壁问题，同时考虑发动机缸壁边界层区对缸内 HC 和 CO 排放的较大影响，我们采用另一种近壁处理方法——增强壁面处理法。它是一种近壁面模拟方法，采用这种方法，湍流模型被修正，从而使壁面受粘性力影响的区域也能用网格划分来求解。采用对壁面区划分足够细的网格，来求解粘性底层和过渡层，这样必然会造成计算量增大。因此，在距离壁面一定范围处适当加密网格，然后对这些较密的网格采用增强壁面函数法。

3.3 燃烧模型

化学反应模型，尤其是湍流状态下的化学反应模型自 FLUENT 软件诞生以来一直占有很重要的地位。多年来，FLUENT 强大的化学反应模拟能力完成了对各种复杂燃烧过程的模拟。FLUENT 通过求解每种组成物质的对流、扩散和反应源的守恒方程来模拟混合、输运以及多种同时发生的化学反应。反应速率作为源项出现在物质输运方程中，FLUENT 提供了 4 种计算模型^[49]：(1) 层流有限速率模型(Laminar Finite-Rate)；(2) 涡耗散模型(Eddy-Dissipation)；(3) 有限速率/涡耗散模型(Finite-Rate/Eddy-Dissipation)；(4) 涡耗散概念模型(EDC)。这 4 种模型有不同的适用范围，下面简单介绍一下：

层流有限速率模型(Laminar Finite-Rate)使用 Arrhenius 公式计算化学源项，忽略湍流脉动影响，但它对于湍流火焰中 Arrhenius 化学动力学高度非线性是不精确。涡耗散模型(Eddy-Dissipation)考虑湍流-化学反应相互作用，其化学反应速率由大涡混合时间尺度 k/ε 控制，如同 Spalding 的涡团破碎模型(EBU)一样。只要湍流出现 $k/\varepsilon > 0$ ，燃烧即可进行，通常适用于非预混火焰，但在预混火焰中，反应物一旦进入计算区域就开始燃烧。为了修正这一点，FLUENT 提供了有限速率/涡耗散模型(Finite-Rate/Eddy-Dissipation)，其反应是混合限制的。尽管 FLUENT 允许采用有限速率/涡耗散模型和涡耗散模型的多步反应机理(反应

数>2), 但可能会产生不正确的结果。由于该模型不能预测化学动力学控制的物质, 同时考虑湍流流动中的多步化学动力学机理, Magnussen 等在此基础上提出了一种可同时用于预混和扩散燃烧的模型——涡耗散概念模型(EDC)。

涡耗散概念模型(EDC)的燃烧速率是由两种涡团的破碎率和耗散率所决定, 该模型是在单步化学反应的基础上建立的, 湍流燃烧的化学反应速率可表示为半经验关系式:

$$\bar{R}_\mu = -\frac{B\rho\varepsilon}{k} \min \left\{ \bar{Y}_{fu}, \frac{\bar{Y}_{ox}}{S}, \frac{C\bar{Y}_{pr}}{1+S} \right\} \quad (3-13)$$

式中, B 、 C 均为经验常数, \bar{Y}_{fu} 、 \bar{Y}_{ox} 、 \bar{Y}_{pr} 分别为燃料、氧化剂和燃烧产物的平均质量分数, S 是氧化剂的化学计量系数, \min 表示取括号内三项中最小者。上式的物理意义是燃烧反应只能发生在湍流的微结构上, 即 Kolmogorov 尺度的涡团上。一旦起控制作用的组分(括号内三项中最小者)的化学时间尺度大于 Kolmogorov 时间尺度, 燃烧反应即会淬熄。此公式适用范围较广, 甚至可用于部分预混、部分扩散燃烧的复杂情况, 只需对系数加以调整。

由于本文要模拟发动机 HCCI 燃烧及 HC、CO、NO 的生成, 还要同时考虑化学反应动力学和湍流流动问题, 因此选取 EDC 燃烧模型进行求解。

3.4 动网格问题

周围的世界无时无刻不在运动着, 在 FLUENT 数值模拟中, 有时假设计算区域的几何形状是不变的, 虽然这种假设在某种程度上也能快捷准确地解决大量的实际问题。然而, 对于有些工程问题如活塞的往复运动则不能这样简化, 此时就要考虑计算区域变化的问题。为了解决这种问题, FLUENT 软件中提供了动网格模型, 用来模拟计算区域随时间变化的流动问题。

在内燃机的工作过程中, 随着活塞的往复运动, 气缸的工作容积不断变化, 这就要求我们必须提供随时间变化的计算网格。要运用动网格模型, 首先要提供一个初始网格, 然后再给出运动区域的运动规律。运动规律可以是定义好的轨迹(如定义物体的角速度和线速度), 也可以通过设置软件提供的内置模块参数来自动判断物体的运动轨迹(如专门用于内燃机气缸的动网格模块)。

3.4.1 动网格守恒方程

对于边界运动的任意控制体 V ，通用标量 ϕ 的守恒方程的积分形式如下：

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_{\partial V} \rho \phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_g) \cdot d\mathbf{A} = \int_{\partial V} \Gamma \Delta \phi \cdot d\mathbf{A} + \int_V S_\phi dV \quad (3-14)$$

式中， ρ 为流体的密度； \mathbf{u} 为流体的速度； \mathbf{u}_g 为动网格的运动速度； Γ 为扩散系数； S_ϕ 为源项； ∂V 代表控制体 V 的边界。方程中的时间项用一阶迎风差分格式表示为：

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV = \frac{(\rho \phi V)^{n+1} - (\rho \phi V)^n}{\Delta t} \quad (3-15)$$

其中第 $n+1$ 时间步的控制体 V_{n+1} 体积由下式计算：

$$V_{n+1} = V^n + \frac{dV}{dt} \Delta t \quad (3-16)$$

为了满足单元格的守恒方程，

$$\frac{dV}{dt} = \int_{\partial V} \mathbf{u}_t \cdot d\mathbf{A} = \sum_j^{n_f} \mathbf{u}_{g,j} \cdot \mathbf{A}_j \quad (3-17)$$

其中 \mathbf{A}_j 为第 j 个面的面积矢量， n_f 为控制体中面的数量。

3.4.2 动网格更新方法

FLUENT 提供了三种动网格更新方法^[49]：平顺方法(smoothing methods)；动态层铺方法(dynamic layering)以及网格重新划分法(remeshing methods)。

(1) 平顺方法

当采用平顺方法时，假设任意两个节点之间的网格是相互连接的弹簧网络。在节点运动之前，初始网格处于平衡状态。一旦节点发生运动，所有连接到该节点的弹簧都产生一个应力，从而打破了原有网格平衡状态，这时软件就会根据相应公式计算出各个节点的位移，使网格达到新的平衡状态。

(2) 动态层铺方法

动态层铺方法主要是应用在棱柱形网格区域，它是根据邻近运动面的单元层的高度来决定运动边界处是否添加或删除单元层。当采用动态层铺方法时，事先定义每个运动边界的单元层的理想高度，当超过理想高度时，邻近运动面的单元层就会分裂为两层或者是与相邻的单元层合并。

(3) 网格重新划分法

平顺方法只是对原有网格的压缩或拉伸，如果运动网格位移过大，更新后的单元格就会严重变形，甚至会出现负单元格体积，造成网格质量下降。为了解决这种问题，FLUENT 提供了网格重新划分方法。当采用这种方法时，首先定义单元格的最小长度尺度、最大长度尺度以及单元格的 α 最大尖锐程度，然后 FLUENT 根据事先定义的标准对每个单元格进行检查，融合那些不符合标准的单元格，然后再对融合后的单元格重新局部划分，从而完成网格的更新。

3.4.3 活塞运动参数的设置

由于本文计算的是活塞运动，需要激活 In-Cylinder（活塞）选项（FLUENT 软件中提供的专门用于活塞往复运动的动网格模块），设置好动网格更新方法后，还需要设置活塞运动的相关参数，包括：发动机转速、起始曲轴转角、工作周期、活塞行程、连杆长度等，时间步长取为 1°CA 。设置好的参数界面如图 3-2 所示。

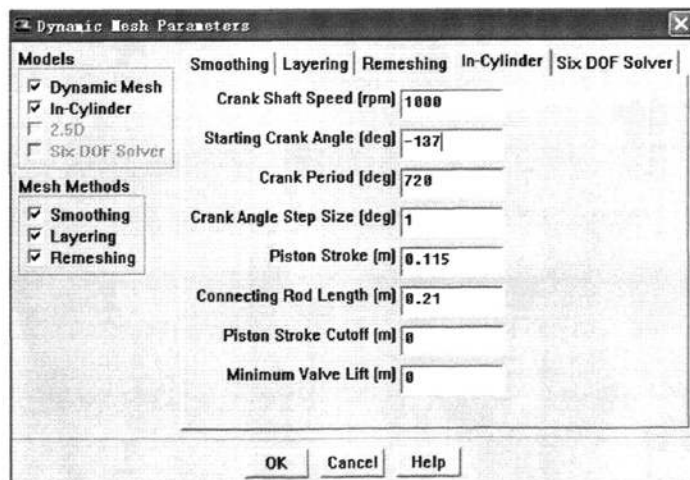


图 3-2 活塞参数设置界面

由于 FLUENT 中内建了活塞位置随曲轴转角变化的函数，只需输入发动机相关结构参数，FLUENT 就会根据这些参数自动计算出活塞运动曲线，在每一个时间步自动更新网格。活塞位置由以下公式计算得到：

$$p_s = L + \frac{A}{2}(1 - \cos \theta_c) - \sqrt{L^2 - \frac{A^2}{4} \sin^2 \theta_c} \quad (3-18)$$

式中, p_s 为活塞位置 (上止点时 p_s 为零); L 为连杆长度; A 为活塞行程; θ_c 为当前的曲轴转角。

3.5 数值求解方法

FLUENT提供了两种数值求解方法^[49]: 分离解法和耦合解法 (耦合解法包括隐式耦合解法和显式耦合解法)。这两种解法都可以在很大流动范围内提供准确的计算结果, 但是也各有优缺点。

分离解法和耦合解法的主要区别在于求解连续性方程、动量方程、能量方程和组元方程的方法有所不同。分离解法是分别求解上面的几个方程, 最后得到全部方程的解, 耦合解法则是用求解方程组的方式, 同时进行计算并最后获得方程的解。两种解法的共同点是: 在求解附带的标量方程时, 比如计算湍流模型时, 都是采用单独求解的方式, 就是先求解控制方程, 再求解湍流模型方程。

3.5.1 两种求解方法的迭代步骤

(1) 分离解法的迭代

分离解法的控制方程是非线性的, 在得到收敛解之前, 必须进行迭代。每一步的迭代步骤如图3-3所示。

(2) 耦合解法的迭代

耦合解法同时解连续性、动量、能量以及组分输运的控制方程, 然后用分离求解器方法中使用的同样的程序解附加的标量控制方程。其迭代步骤如图3-4所示。

考虑到具体问题, 本文选用分离解法。

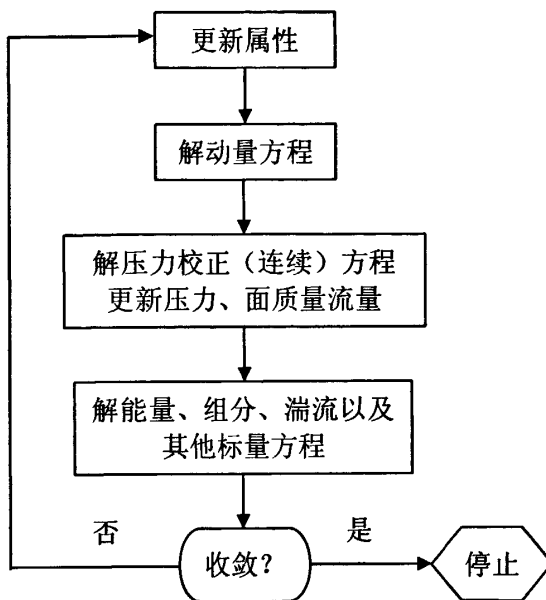


图 3-3 分离解迭代步骤

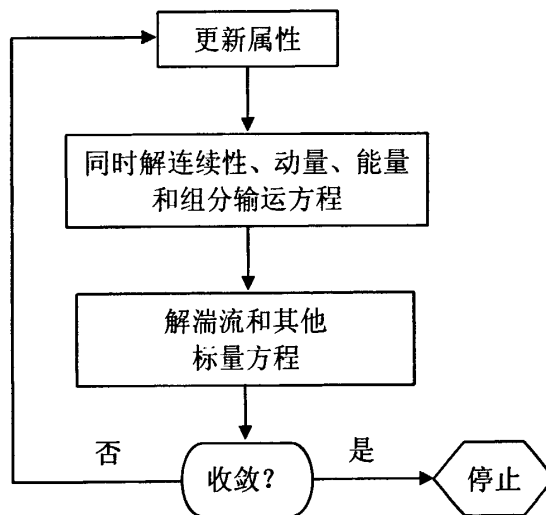


图 3-4 耦合解迭代步骤

3.5.2 求解方法的设置

确定好求解器之后，就可以设定运行连续性方程、动量方程及其能量方程

的具体求解方式。

(1) 选择离散格式，

当使用分离求解器时，FLUENT在默认的情况下，所有的方程都是使用一阶迎风离散格式来解对流问题。

(2) 选择压力速度耦合方法

FLUENT提供了三种压力速度耦合方法：SIMPLE、SIMPLEC、PISO。本文计算使用PISO方法，此方法还可以用于高度倾斜网格的定常状态计算和过渡计算；SIMPLE、SIMPLEC方法一般用于定常状态计算。需要注意的是压力速度耦合只用于分离求解器。

(3) 设定亚松弛因子

分离求解器使用亚松弛来控制每一步迭代中的计算变量的更新。本文使用默认的亚松弛因子开始计算。本文计算中设置好的求解器设置界面如图3-5所示。

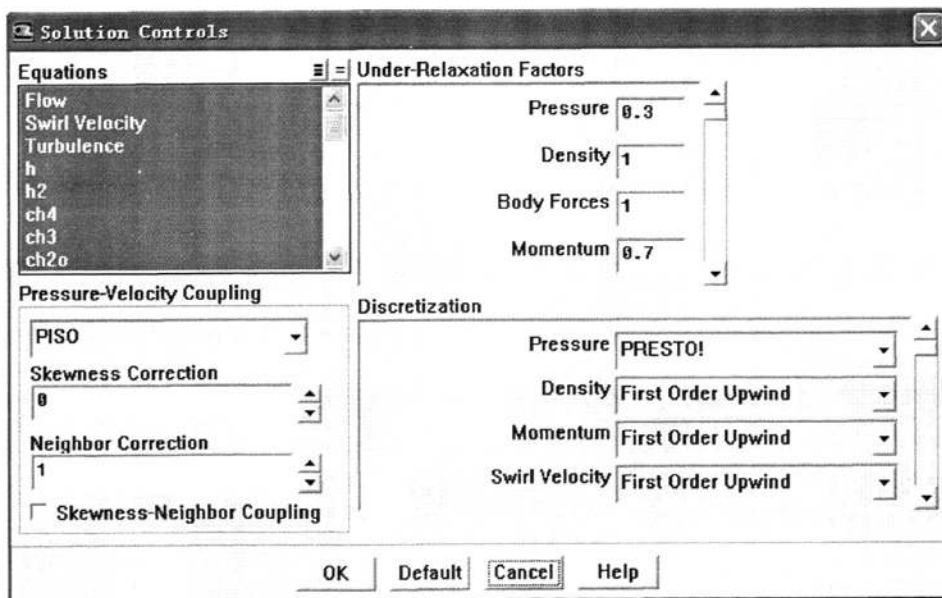


图3-5 求解器设置界面

3.6 本章小结

本章主要介绍了CFD软件FLUENT进行发动机工作过程模拟的数学模型以及求解方法和步骤。综合起来主要有以下内容：

- (1) 介绍了FLUENT软件的组成和求解的一般步骤。
- (2) 介绍了流体动力学控制方程，包括基本控制方程和湍流控制方程。
- (3) 针对本文研究内容，重点分析了计算所选用的RNG $k-\varepsilon$ 湍流模型、涡耗散概念模型(EDC)以及动网格模型，为下文发动机工作过程的模拟计算做好了准备。

第 4 章 乙醇 HCCI 发动机工作过程模拟计算

就传统的柴油机而言，扩散和湍流对整个燃烧过程的影响较大，就 HCCI 发动机而言，化学反应动力学在燃料的自动点火和氧化过程中起着主要的作用。但是，HCCI 发动机实际运行时，缸内并非完全均质混合气，湍流对均质压燃燃烧有一定的影响。CHEMKIN 软件虽然可以准确模拟燃料的化学反应机理，但对流场的模拟具有局限性，考虑到 FLUENT 软件能够较好地模拟流场，因此本章将第二章简化的简化模型耦合到 FLUENT 中对乙醇发动机 HCCI 燃烧过程和排放特性进行模拟计算。

4.1 发动机模型的建立

4.1.1 网格的生成

本文以燃用乙醇的 ZS195 非增压水冷直喷式柴油机为研究对象，在 FLUENT 的前处理软件 GAMBIT 中直接建立几何模型，并划分网格。ZS195 发动机的结构参数如表 4-1 所示。

表 4-1 发动机的结构参数

缸径(mm)	95	排气门开	43°BBDC
行程(mm)	115	排气门关	17°ATDC
连杆长度(mm)	210	进气门开	17°BTDC
排量(L)	0.815	进气门关	43°ABDC
压缩比	17.5:1		

在 GAMBIT 中，划分网格时选用的网格类型、大小、粗细的不同会严重影响模拟结果的准确度和可信度。结合本文要模拟发动机 HC 和 CO 等排放物的生成，我们需要考虑这些排放物的主要生成源，对生成源处进行特殊的网格处理。研究表明^[50,51]，缸内未燃 HC 的主要生成源有四个方面：(1) 燃烧室狭缝间隙处，特别是活塞头部顶岸间隙(Top-land-crevice)；(2) 壁面润滑油膜和沉积物；(3) 燃烧室壁面激冷层；(4) 发动机燃用稀混合气而产生部分燃烧和失火现象。其中，活塞头部与气缸之间形成的顶岸间隙(Top-land-crevice)容积被认为是燃烧室狭缝

容积中的最大一部分。因此，本文在建模的过程中，主要考虑顶岸间隙的影响，而忽略了气缸垫等其他燃烧室间隙。在划分网格时，对顶岸间隙进行加密，同时对壁面划分 3 层 0.1mm 厚的边界层。

结合 ZS195 柴油机的燃烧室尺寸和形状，以气缸中心线为对称轴取一半燃烧室来划分四边形网格。图 4-1 为活塞在上止点时的网格图，图 4-2 为活塞在下止点时的网格图。

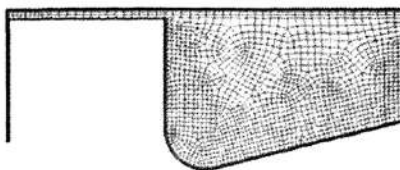


图 4-1 活塞在上止点时的网格图

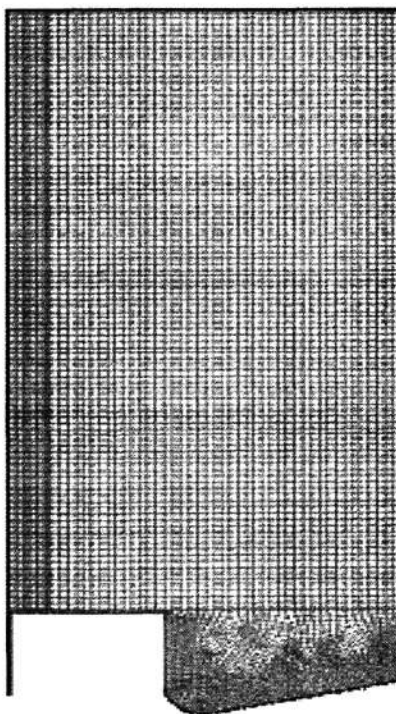


图 4-2 活塞在下止点时的网格图

4.1.2 计算模型的选择

(1) 选择基本求解器

打开“Solver”对话框如图 4-3 所示。在图中依次选取“Axisymmetric Swirl”（轴对称旋转）、“Unsteady”（非定常流动）、“1st-order Implicit”（一阶迎风格式），其它保留缺省设置。

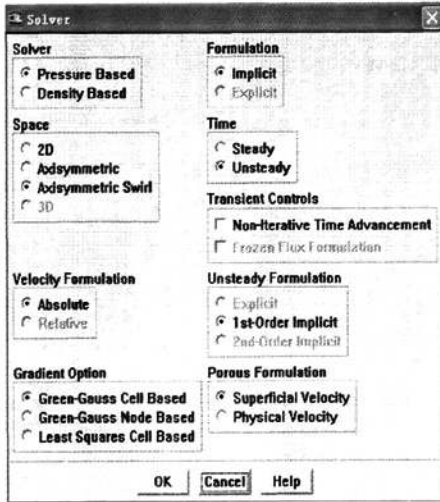


图 4-3 求解器对话框

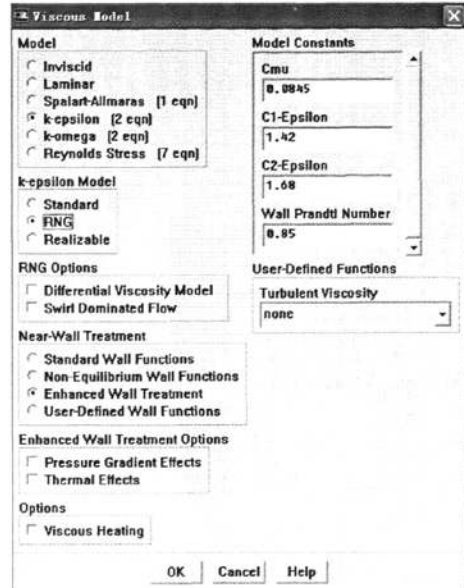


图 4-4 湍流模型对话框

(2) 设置湍流模型

打开“Viscous Model”对话框如图 4-4 所示。在图中选择 k-epsilon (2 eqn)（即 $k-\varepsilon$ 两方程模型），同时选择 RNG(RNG $k-\varepsilon$ 模型)，在近壁处理中选择 Enhanced Wall Treatment（增强壁面处理法），其它保持默认设置。

(3) 定义组分模型

首先导入 CHEMKIN 格式的化学反应机理，这里使用第二章建立的乙醇简化机理，包括 33 种组分和 52 个化学反应。具体过程：

File → Import → CHEMKIN Mechanism，弹出如图 4-5 所示对话框。在 Gas-CHEMKIN Mechanism File 和 Gas-Phase Thermodynamic Database File 中分别输入 chem.inp 和 therm.dat 文件；单击 Import 按钮，并关闭 CHEMKIN Mechanism Import 对话框。

导入化学反应以后，就可以定义组分模型了。打开 Species Model 对话框，如图 4-6 所示，在 Model 列表中选中 Species Transport 单选按钮，在 Reactions

列表中选中 Volumetric 复选框，在 Turbulence-Chemistry Interaction 列表下选择 EDC（涡耗散概念模型）复选框，在 Mixture Material 列表中选择 ethanol-air 项（即导入的乙醇简化机理），单击 OK 按钮，关闭 Species Model 对话框。

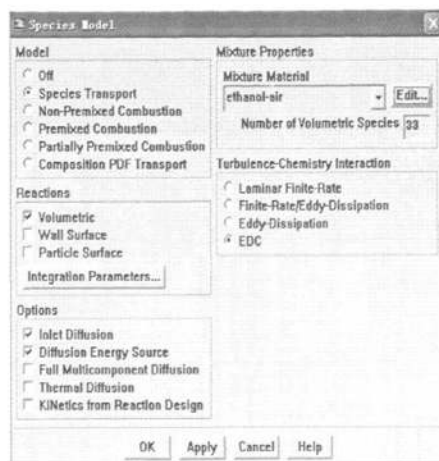
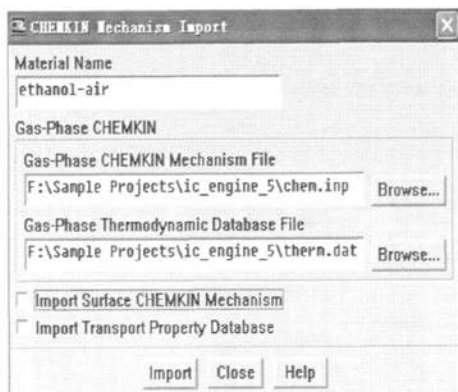


图 4-5 CHEMKIN Mechanism Import 对话框

图 4-6 Species Model 对话框

4.1.3 动网格的设置

FLUENT 软件中提供的专门用于活塞往复运动的动网格模块，有关活塞运动的相关参数设置在第三章中已经给出了详细的介绍，在此不在赘述，如图 3-2 所示。

4.1.4 边界条件和初始条件

本文模拟计算从进气门关闭开始，结束于排气门开启，只考虑发动机压缩和膨胀行程，是一个封闭系统，与外界没有质量交换，边界条件只需定义燃烧室各壁面的温度，气缸盖、活塞顶和气缸壁的温度分别设为 500K、450K 和 420K。

初始条件取进气门关闭时刻缸内充量的状态参数，初始温度 413K，初始压力 0.1MPa，燃空当量比为 0.2632，缸内各组分摩尔百分比根据所计算工况的燃空当量比求得^[52]，并忽略残余废气对充量的影响，只考虑 C₂H₅OH、O₂ 和 N₂。

根据经验公式^[53]可以计算出湍动能和湍流耗散率，进气门关闭时的湍动能 k_{ivc} 为：

$$k_{nc} = 0.9C_m^2 \quad (5-1)$$

式中 C_m 为活塞平均速度,

$$C_m = 2hn/60 \quad (5-2)$$

式中 n 为转速, h 为工作行程。

湍流耗散率 ε 为:

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{l} \quad (5-3)$$

式中 C_μ 为常数, 取 $C_\mu = 0.09$, l 为湍流长度尺度,

$$l = h_v/2 \quad (5-4)$$

其中 h_v 为发动机最大气门升程。

4.2 模拟计算

针对发动机工作过程高压压缩性、强瞬变的特点, 采用 PISO 算法对速度和压力场进行耦合, 由于 PISO 算法适用于非稳态计算, 并且能够处理由网格不正交产生的附加压力梯度项, 校正精度高。

模拟计算从进气门关闭开始, 结束于排气门开启, 计算中曲轴转角的范围为 $-137^\circ\text{CA} \sim 137^\circ\text{CA}$, 因此设置 274 个时间步开始迭代计算。

4.3 燃烧及排放分析

4.3.1 缸内压力和温度

图 4-8、图 4-9 分别为初始温度 $T_{in}=403\text{K}$, 初始压力 $P_{in}=0.1\text{MPa}$, $\Phi = 0.2632$ 时, 缸内压力、温度的模拟计算结果对比曲线。图中 FLUENT (多维模型) 耦合简化机理计算得到的缸内压力、温度较 CHEMKIN (零维模型) 计算结果低, 这主要是由于前者考虑了缸内温度场和压力场的不均匀性, 会影响到化学反应的速率; 同时前者考虑了缸壁及活塞表面的传热, 较后者能更好地符合实际发动机工作过程。通过图中对比曲线还可以看出, 虽然 FLUENT 的计算结果比 CHEMKIN 的计算结果低, 但是预测的着火时刻和温度的变化趋势是一致的。

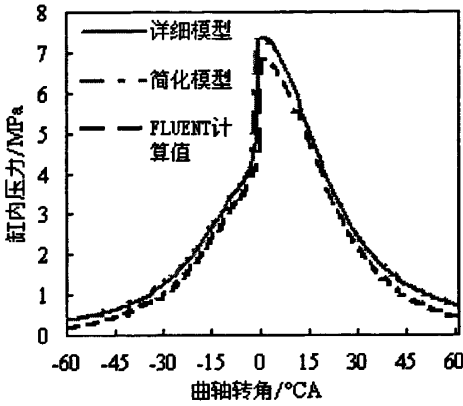


图 4-8 缸内压力曲线

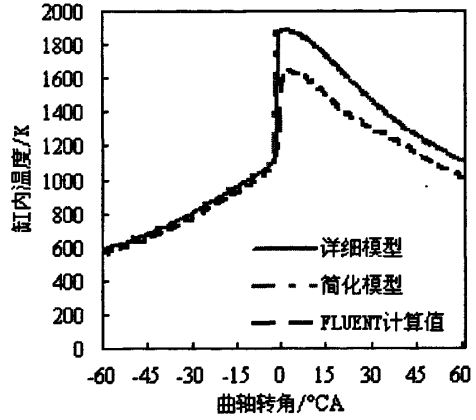


图 4-9 缸内温度曲线

4.3.2 乙醇均质压燃燃烧过程分析

一般认为，HCCI 燃烧是均质混合气多点同时着火，温度场分布较为均匀，但在实际工作过程中，由于湍流扰动及壁面传热等因素的影响，缸内温度场分布不太均匀。图 4-10 为初始温度 $T_{in}=413K$ ，初始压力 $P_{in}=0.1MPa$ ， $\Phi = 0.2632$ 时，模拟的缸内温度场分布情况。

文献认为当缸内温度达到 1100K 时，乙醇开始发生高温燃烧反应。在燃烧开始时刻(5° BTDC)，燃料放热量相对较小，缸壁传热影响增大，使得活塞及缸盖壁面的薄层内温度较低，燃烧室内核区及气缸压缩余隙处温度分布相对较高，此时乙醇在燃烧室内核区浓度降低，同时甲醛浓度升高，见图 4-11。活塞到达上止点附近(3° BTDC)时，燃烧室内核区和气缸压缩余隙处温度继续升高，压力急剧升高，燃料几乎同时发生燃烧，不存在火焰的传播，燃烧速度很快，此时缸内 CO 浓度较高。燃烧反应结束时刻(3° ATDC)缸内温度较高，约为 1645K，同时整个温度场分布在此时刻达到最均匀的状态。此外，在整个燃烧过程中燃烧室侧隙狭缝内温度明显低于缸内温度，这主要是因为此处燃烧不完全，放热不充分，因此此处也是生成排放物的主要区域。

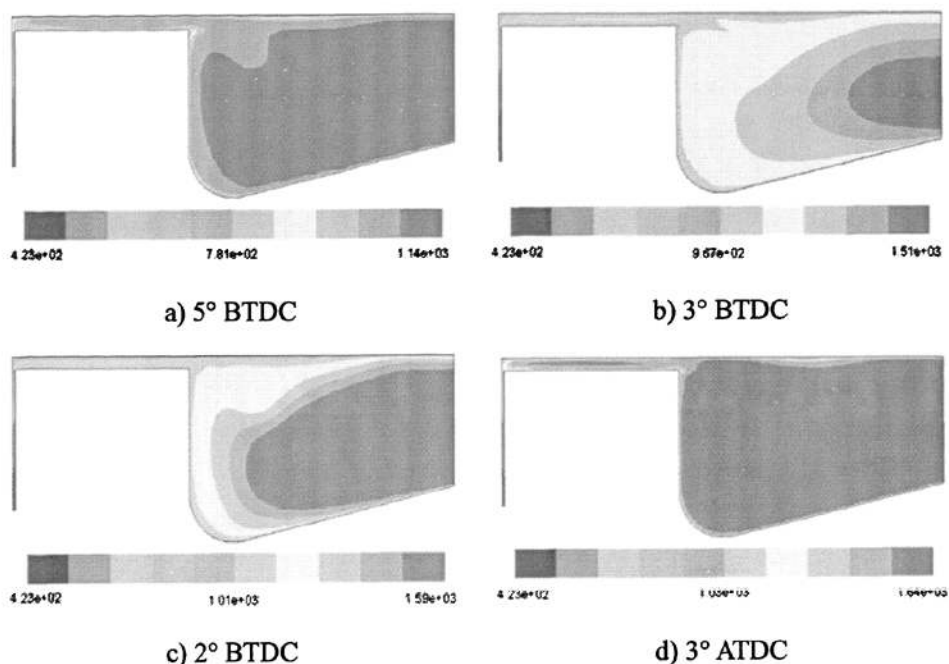
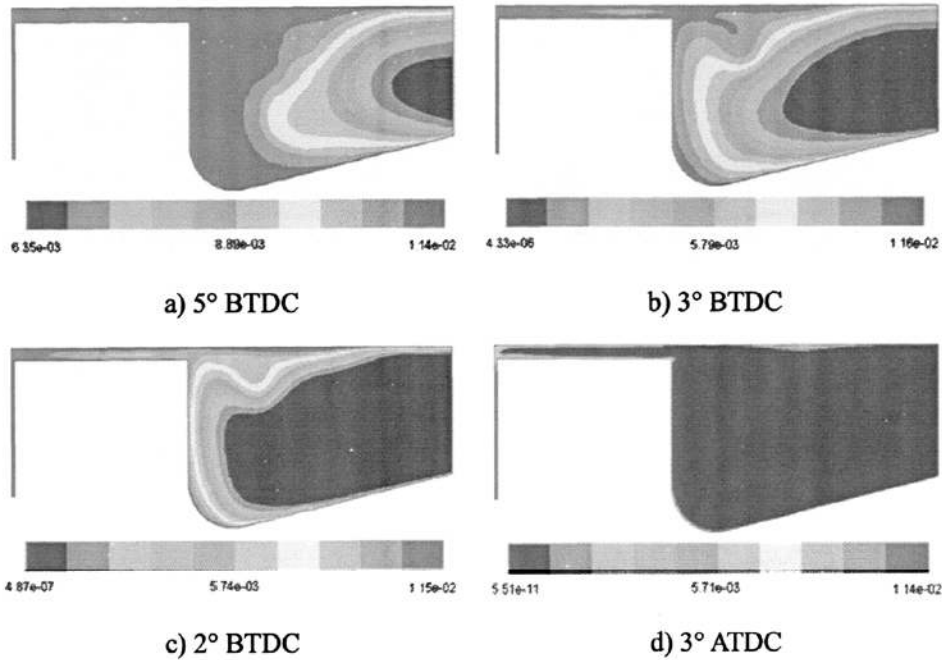


图 4-10 缸内温度场分布

4.3.3 乙醇均质压燃燃烧主要排放物分析

图 4-11 为燃料乙醇(C_2H_5OH)在缸内的分布情况。乙醇首先在温度较高的燃烧室中心区域开始燃烧,然后在整个燃烧室迅速进行,此时位于燃烧室中心区域的乙醇浓度相对较低,表明此处乙醇氧化反应速度快,乙醇消耗较多并放出大量的热量,这与图 4-10c)中温度分布相对应,在上止点后 $3^\circ CA$ 时燃烧基本结束,此时燃烧室内乙醇基本消耗完,乙醇只存在于活塞狭缝和燃烧室上部死角等温度低的区域,这是由于缸壁传热的影响,导致了这一区域壁面附近温度低,乙醇的氧化不完全,使得该处乙醇浓度较高,同时此处也是产生未燃碳氢(UHC)的主要来源。在膨胀行程结束时,缸内乙醇的平均浓度为 100×10^{-6} 。考虑到 CH_4 是乙醇氧化的主要中间产物 HC 来源,最后得到总的 HC 生成约为 170×10^{-6} ,其中主要是未燃的乙醇。


 图 4-11 缸内 C_2H_5OH 浓度场分布

甲醛(CH_2O)和乙醛(CH_3HCO)都是乙醇反应在低温时生成的重要中间产物，也是排放中的主要产物^[54,55]，它们在缸内的分布情况如图 4-12 和 4-13 所示。首先，在燃烧初始阶段，甲醛和乙醛开始大量生成，在 3° BTDC 时刻浓度达到最大值，主要分布在燃烧室中心区域，但在侧隙处甲醛和乙醛浓度较低，由于这一区域温度低，乙醇较难发生脱氢反应，这一区域也是产生未燃乙醇的主要来源。随后温度继续升高，燃烧室中心区域的甲醛和乙醛浓度降低，燃烧反应结束时刻(3° ATDC)，甲醛和乙醛浓度进一步降低，此时缸内温度较高，甲醛和乙醛在高温反应过程中被迅速消耗，只在侧隙残余少量未被氧化的甲醛和乙醛，此处温度较低，不利于过氧化氢(H_2O_2)裂解，没有足够的 OH 自由基与甲醛和乙醛反应。在膨胀行程结束时，缸内甲醛和乙醛的平均浓度分别约为 13.2×10^{-6} 和 27.1×10^{-6} ，见图 4-15(a)和(b)。

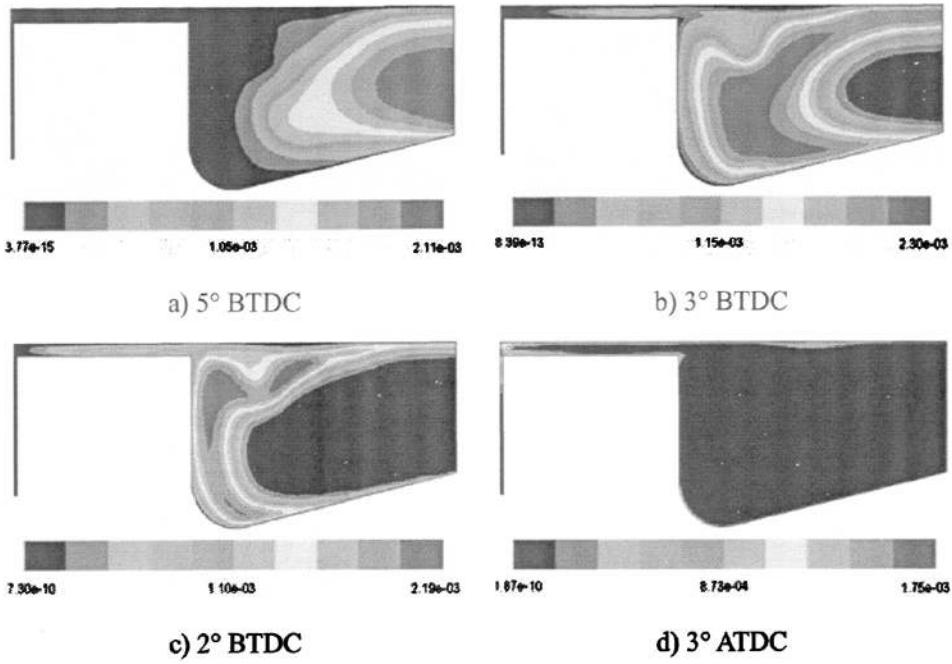


图 4-12 缸内 CH_2O 浓度场分布

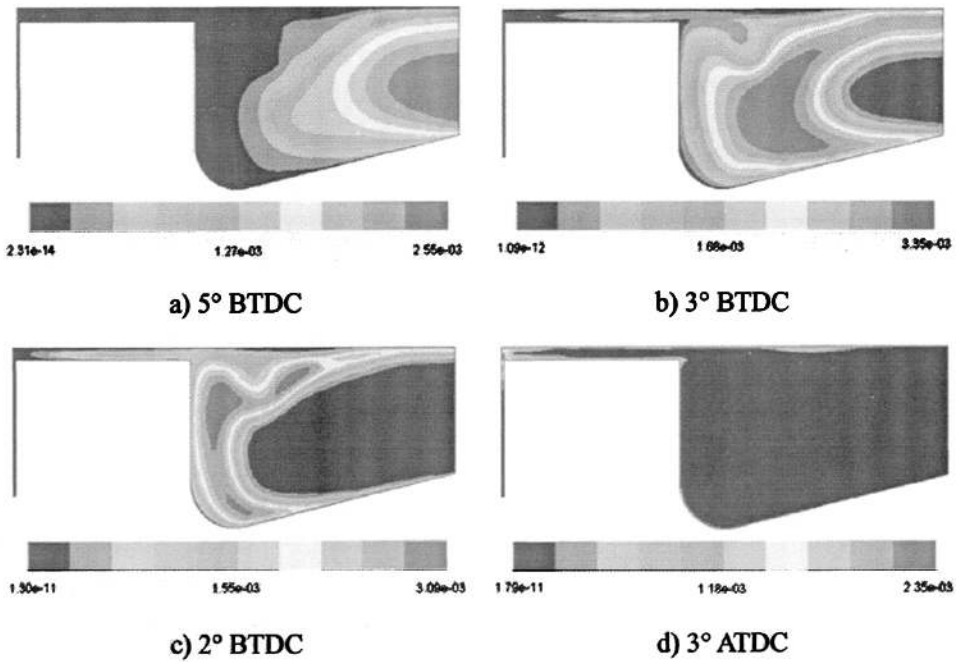


图 4-13 缸内 CH_3HCO 浓度场分布

CO 主要在高温反应中生成，CO 主要被 OH 离子氧化，这部分放热在整个燃料氧化放热中占有较大比重。CO 在缸内的分布情况如图 4-14 所示，在着火燃烧初始阶段，由于甲醛和乙醛的分解，CO 浓度迅速增加，在上止点附近 CO 生成量达到最大值，此时处于燃烧室内核区和气缸压缩余隙的 CO 浓度相对较大，随后温度急剧升高，CO 被剧烈氧化，放出大量的热，在燃烧反应快结束时刻(3° ATDC)，CO 几乎全部被氧化，但在侧隙处有较多一氧化碳，这跟壁面传热以及该处 OH 自由基浓度较少有关。在膨胀行程结束时，缸内 CO 的平均浓度分别为 157×10^{-6} ，见图 4-15(c)。

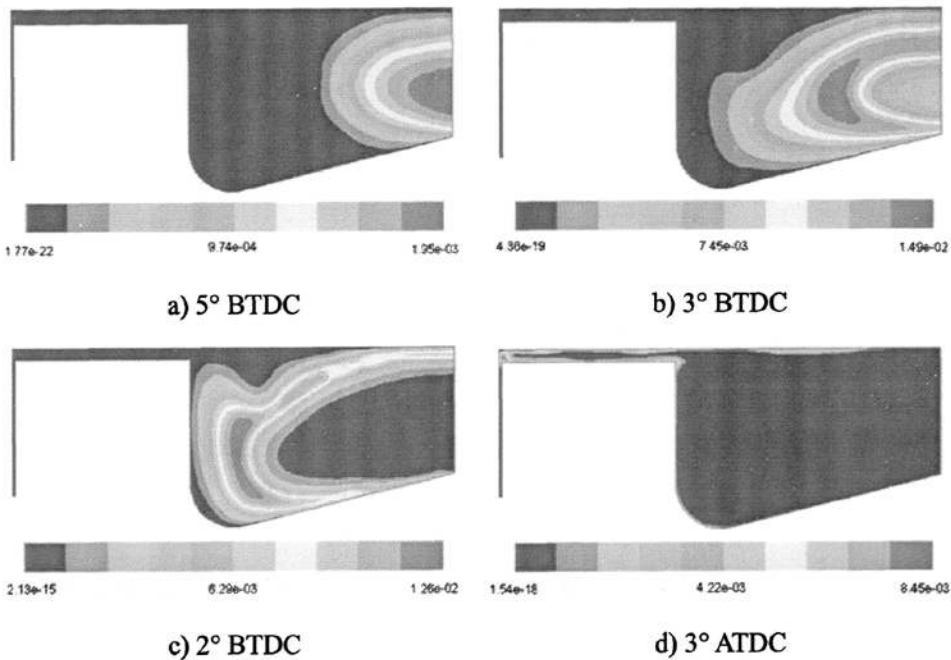


图 4-14 缸内 CO 浓度场分布

乙醇均质压燃燃烧主要受化学动力学控制，燃烧持续时间很短，燃烧温度较低，可以得到极低的 NO 排放。根据 NO 产生机理，大多数 NO 在大于 1800 K 高温区中产生的，由前面讨论的缸内温度可知，在计算工况下，缸内温度较低，很少超过 1800K，所以 NO 的生成量很少，约为 4.07×10^{-6} 。图 4-15(d)为排气门开启时刻缸内 NO 分布情况。

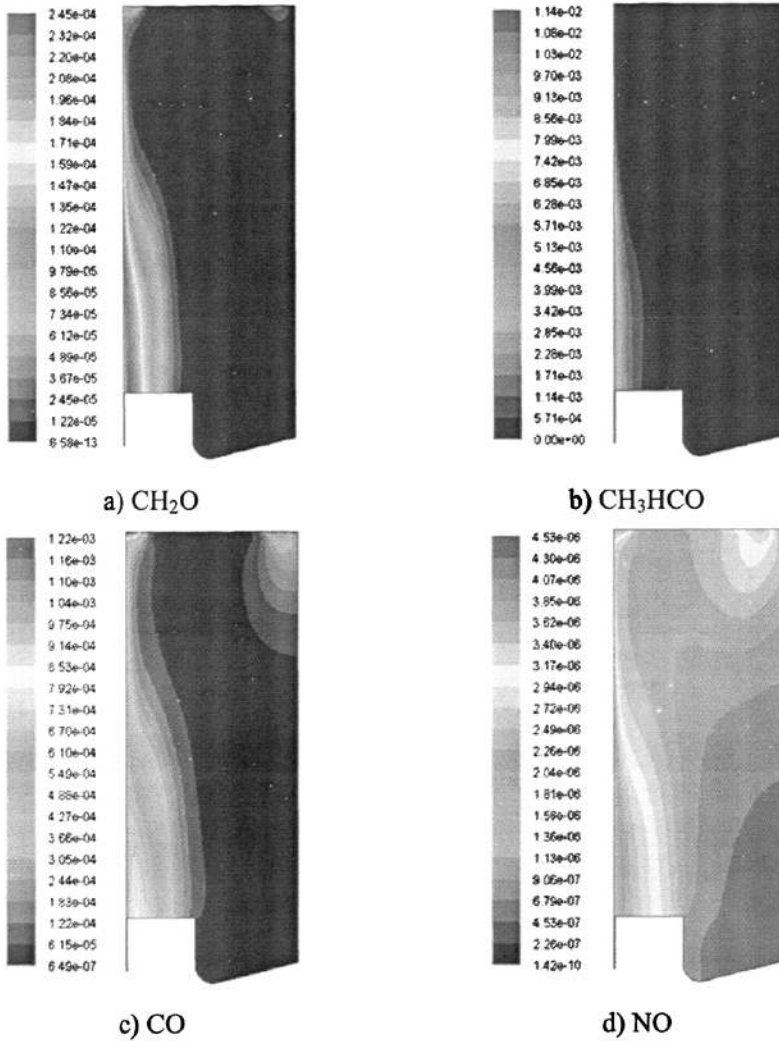


图 4-15 排气门打开时刻缸内组分的浓度场分布

4.4 初始条件对燃烧过程和排放的影响

4.4.1 燃空当量比的影响

为了考察燃空当量比对燃烧过程及排放物的影响，在初始压力 $P_{in}=0.1\text{MPa}$ ，初始温度 $T_{in}=413\text{K}$ 不变的条件下，研究不同燃空当量比对缸内压力、温度和排放物的影响。

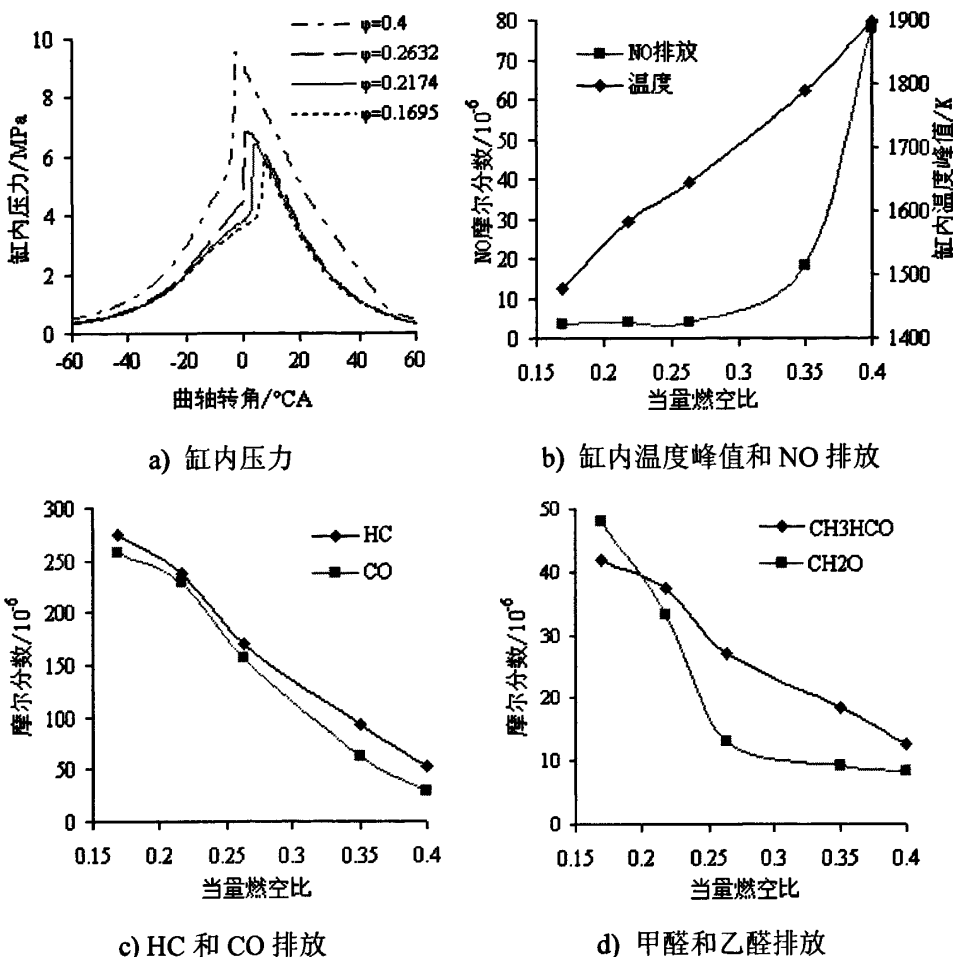


图 4-16 燃空当量比对燃烧和排放的影响

图 4-16 为燃空当量比对燃烧和排放影响的曲线。从图 a)、b)可以看出，随着燃空当量比的增加，燃烧着火始点提前，缸内压力和温度峰值增大，由图 c)、d)可以看到，随着燃空当量比的增大，CO、HC 排放减小，主要有两个方面的原因，一方面随着燃空当量比的增加，缸内温度升高，使得燃烧后期顶岸间隙释放出的燃油更容易发生氧化；另一方面，燃空当量比的增加导致缸内压力升高，火焰更容易传播到顶岸间隙内，消耗间隙内更多的燃油。所以，燃空当量比的增加虽然提高了缸内混合气的浓度，但是 HC 和 CO 的排放却不断减小。同时，甲醛和乙醛的排放也相应减小，但是 NO 排放随燃空当量比的增加而增加，主要是由于温度升高，使得 NO 排放增加。在本文计算工况下，燃空当量比超过 0.33

时, 燃烧反应速度过快, 缸内最大燃烧压力过高, 缸内燃烧趋于爆震, 造成机械负荷和热负荷过高而损坏发动机, 发出较大的噪声, 虽然 HC 和 CO 排放降到很低水平, 而 NO 排放量明显增加, 这限制了 HCCI 发动机向高负荷区的扩展。因此目前研究的 HCCI 发动机大多采用双燃烧模式(SI-HCCI), 即在部分负荷时采用 HCCI 燃烧方式, 在高负荷时采用传统的 SI (点燃) 燃烧方式^[56]。

4.4.2 EGR 率的影响

为了考察EGR率对燃烧过程及排放物的影响, 在初始压力 $P_{in}=0.1\text{MPa}$, 初始温度 $T_{in}=413\text{K}$ 不变的条件下, 研究不同EGR率对缸内压力、温度和排放物的影响。

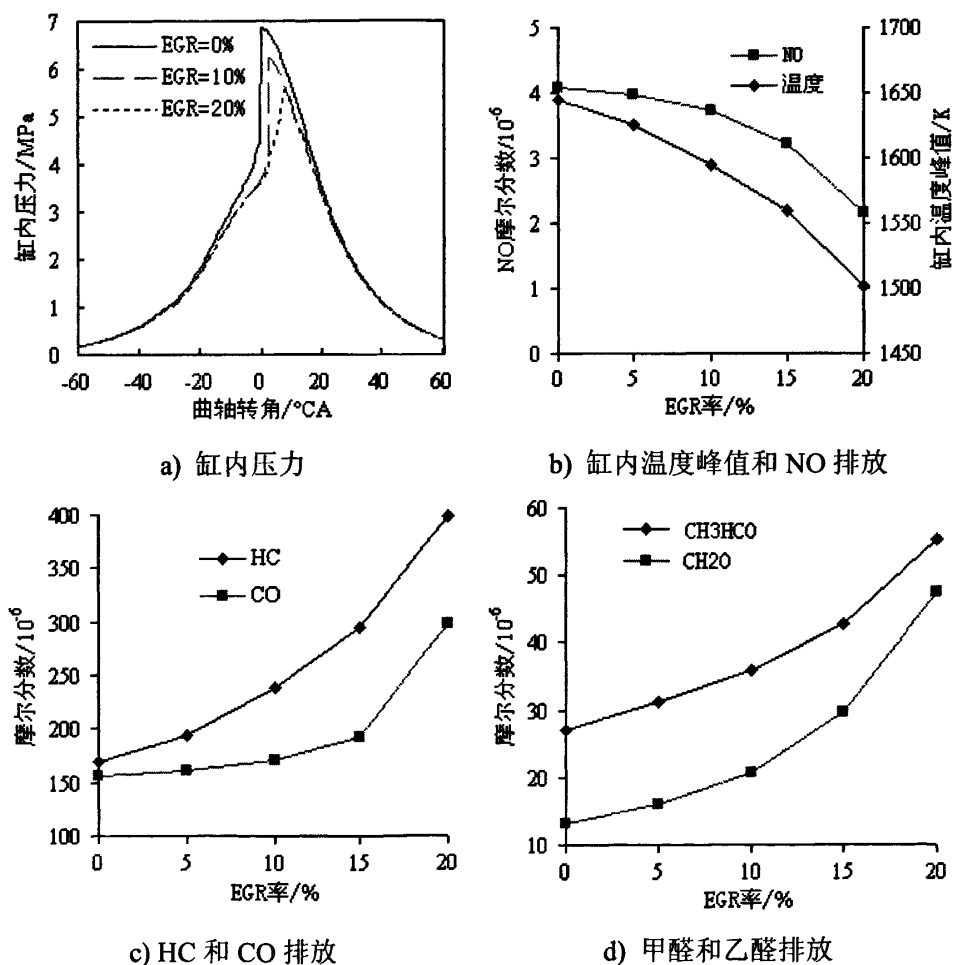


图 4-17 EGR 率对燃烧和排放的影响

图4-17给出了燃空当量比为0.2632时, EGR率对燃烧和排放的影响曲线。从图中可以看出, 当燃空当量比一定时, 随着EGR率的增大, 燃烧着火始点推迟, 缸内压力下降、缸内温度峰值明显降低, HC、CO和甲醛、乙醛的排放不断增加, 而NO排放不断降低。这是因为EGR率的增大, 意味着缸内的CO₂、H₂O等惰性气体浓度增大, 工质的比热容增大, 相应地减少了O₂的浓度, 从而减缓了化学反应速度, 使得燃烧过程变缓, 着火推迟, 最高燃烧温度较低。计算结果还表明, EGR率为5%时, 对发动机的排放影响不大。当EGR率达到20%时, 从图c)可以看出, CO和HC排放明显高于无EGR时的排放, 这是由于加入了EGR气体不但增加了包括CO在内的废气, 而且相当于减少了O₂的量, 使得CO不利于氧化为CO₂, 同时着火时刻过晚, 有可能出现不完全燃烧甚至失火现象, 使得HC排放增加, 燃烧和排放进一步恶化。因此可以合理控制EGR率使得燃烧变缓, 减小爆震倾向, 大幅度抑制NO的生成, 进一步扩展HCCI的运行范围, 有效改善乙醇HCCI发动机燃烧及排放性能。

4.5 本章小结

建立了发动机三维计算模型, 并将第二章提出的简化模型耦合到 FLUENT 中对乙醇发动机 HCCI 燃烧过程和排放特性进行了模拟计算, 分析了乙醇均质压燃燃烧过程和主要排放物 HC、CO、NO 以及甲醛、乙醛等非常规排放物的生成机理。并分别讨论了燃空当量比、EGR 率对燃烧过程和排放物的影响, 为进一步扩展均质压燃燃烧的运行范围, 有效改善乙醇 HCCI 发动机燃烧及排放性能提供了理论基础。

计算结果表明, 该计算模型能够较好地反映发动机燃烧过程, 也能较好地预测排放物的排放特性。缸内 HC 排放主要来自活塞狭缝和燃烧室上部死角等低温区域中未燃的乙醇; 甲醛、乙醛、CO 都是乙醇反应生成的重要中间产物, 有相似的生成规律, 首先, 在燃烧初始阶段, 开始大量生成, 直至达到最大值, 随后温度继续升高, 它们在燃烧室中心区域的浓度降低, 燃烧反应结束时刻, 缸内温度较高, 它们在高温反应过程中被迅速消耗, 浓度进一步降低。

随着燃空当量比的增加, 着火提前, 压力和温度峰值增大, CO、HC、甲醛、乙醛排放减小, NO排放增加, 限制了HCCI发动机向高负荷区的扩展; 随着EGR率的增大, 燃烧着火始点推迟, 缸内压力下降、缸内温度峰值明显降低, HC、

CO和甲醛、乙醛的排放不断增加，而NO排放不断降低，因此可以合理控制EGR率，减小爆震倾向，大幅度抑制NO的生成，进一步扩展HCCI的运行范围，有效改善乙醇HCCI发动机燃烧及排放性能。

第 5 章 全文总结和展望

5.1 全文总结

本文研究了乙醇的化学动力学过程，在详细化学动力学机理基础上采用敏感性分析方法建立了由 33 种物质和 52 个基元反应组成的乙醇化学动力学简化机理，并对简化机理的适用性进行了验证；然后将该简化机理耦合到 FLUENT 中对乙醇均质压燃燃烧过程和排放特性进行了模拟计算。具体研究工作如下：

(1) 本文根据美国 Lawrence Livermore 实验室提出的乙醇详细化学反应动力学机理，对乙醇氧化消耗的主要途径以及重要中间产物的生成与消耗进行了详细分析。在 HCCI 详细反应动力学燃烧反应机理研究的基础上，结合敏感性分析和反应速率分析提出了一种包括 33 种组分，52 个基元反应的新的化学反应动力学简化模型，另外还添加了适用于 HCCI 燃烧方式发动机的 NO 生成子模型。

(2) 通过对不同边界条件下的简化模型和详细模型的对比计算，结果表明，简化模型与详细模型具有较好的一致性，该简化模型能够有效模拟 HCCI 发动机的燃烧过程，并能预测甲醛、乙醛等非常规排放物的变化历程，能够大幅缩短计算时间，为化学反应动力学模型与多维 CFD 模型耦合提供了基础，进而对乙醇 HCCI 发动机燃烧及排放特性进行模拟计算提供了可行的途径。

(3) 利用计算流体力学软件建立了发动机三维计算模型，并将其与本文提出的乙醇简化动力学模型相耦合，对乙醇发动机 HCCI 燃烧过程和排放特性进行了模拟计算，对乙醇均质压燃燃烧过程和主要排放物 HC、CO、NO 以及甲醛、乙醛等非常规排放物随曲轴转角变化的历程进行了预测分析。并分别讨论了当量燃空比、EGR 率对燃烧过程和排放物的影响，为进一步扩展均质压燃燃烧的运行范围，有效改善乙醇 HCCI 发动机燃烧及排放性能提供了理论基础。

5.2 工作展望

(1) 建立尽可能详细的乙醇化学动力学简化机理，以便更全面地反映乙醇均质压燃燃烧放热特性，更好地预测排放物的排放特性。

(2) 建立更完善的发动机多维模型。本文为了简化计算，建立了发动机三维

轴对称计算模型，只模拟计算了从进气门关闭到排气门打开这部分曲轴转角，计算所得的各种物质的摩尔分数均为排气门开启时的值，此时缸内温度为 $400^{\circ}\text{C}\sim 600^{\circ}\text{C}$ ，而实际试验测得的数据为从排气管排出的尾气，温度在 200°C 左右，时间和温度的变化必然对尾气中各种物质的含量产生一定的影响，因此在以后的工作中，应建立带有排气管的三维发动机模型。

(3) 在理论模拟计算的基础上进一步开展试验研究工作，尤其是对乙醇 HCCI 燃烧过程中非常规排放物进行试验测量，深入研究乙醇均质压燃燃烧过程与排放特性。

参考文献

- [1] 景恒, 陈立功, 朱海军. 内燃机代用燃料的发展分析. 能源研究与信息, 2005, 21(1): 55~59
- [2] 刑元, 尧命发, 张福根等. 乙醇与柴油混合燃料燃烧特性及排放特性的试验研究. 内燃机学报, 2007, 25(1): 24~29
- [3] 边归国. 汽车代用清洁燃料的发展现状. 能源与环境, 2006(1): 66~68
- [4] 边耀璋. 汽车新能源技术. 北京: 人民交通出版社, 2003
- [5] 崔心存. 车用替代燃料与生物质能. 北京: 中国石化出版社, 2007
- [6] 李永平. 乙醇燃料特点及使用性能分析. 炼油与化工, 2007, 18 (3): 4~6
- [7] Onishi S et al. Active Thermo-atmosphere Combustion (ATAC) —A New Combustion Process for Internal Combustion Engines. SAE 790501, 1979
- [8] Noguchi et al. A Study on Gasoline Engine Combustion by Observation of Intermediate Reactive Products During Combustion. SAE 790840, 1979
- [9] Najt P.M., Foster D.E. Compression—ignited homogeneous charge combustion. SAE 830264, 1983
- [10] Thring R.E. Homogeneous Charge Combustion Ignition (HCCI) Engines. SAE 892068, 1989
- [11] M. Stockinger, H. Schapertons, P. Kuhlmann. Versuche. An einem Gemischan Sugenden Verbrennungsmotor mit Selbstzündung. Motertechnisches Zeitschrift. 1992 (53): 80~85
- [12] Magnus Christensen, Bengt Johansson and Patrik Einewall. Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Using Isooctane, Ethanol and Natural Gas—A Comparison with Spark Ignition Operation. SAE 972874, 1997
- [13] Magnus Christensen, Bengt Johansson. Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition. SAE 980787, 1998
- [14] Magnus Christensen, Bengt Johansson and Anders Hultq Vist. Demonstrating the Multi Fuel Capability of a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine with Variable Compression ratio. SAE 1999-01-3679
- [15] 刘圣华, 胡铁刚, 李维等. 压缩比对均质压缩着火发动机性能影响的研究. 西安交通大学学报, 2005, 39 (3): 225~228

- [16] 郑尊清, 尧命发. 废气再循环对二甲醚/天然气双燃料均质压燃燃烧过程和排放特性的影响. 燃烧科学与技术, 2004, 10 (3): 260~264
- [17] 方俊华, 黄震, 乔信起. 均质充量压缩着火发动机燃烧的研究与进展. 柴油机, 2002 (6): 12~16
- [18] 张波, 尧命发, 郑尊清等. 燃料辛烷值对均质压燃(HCCI)工况范围和排放特性的实验研究. 自然科学进展, 2006, 16 (1): 78~80
- [19] 汪映, 周龙保, 蒋德明. 均质充量压缩燃烧方式的研究进展及存在问题. 车用发动机, 2002 (5): 8~11
- [20] 尧命发, 张波, 郑尊清等. 废气再循环与燃料辛烷值对均质压燃燃烧特性影响的实验研究. 内燃机学报, 2005, 23(6): 503~509
- [21] 石磊, 邓康耀, 崔毅等. 不同 EGR 方法对柴油燃料 HCCI 燃烧影响的探讨. 内燃机学报, 2005, 23(5): 463~468
- [22] 谢辉, 赵华, 杨林等. 基于可变气门定时策略的 HCCI 汽油机实验研究. 内燃机学报, 2005, 23(6): 510~517
- [23] 沈自友, 何洪, 纪常伟等. 燃料添加剂改善燃料均质自然着火的研究. 燃烧科学与技术, 2006, 12(5): 468~472
- [24] Magnus Christensen, Bengt Johansson. Homogeneous charge compression ignition with water injection. SAE 1999-01-0182
- [25] 邓元望, 刘放浪, 刘学英. 乙醇燃料及其在发动机中的应用. 小型内燃机与摩托车, 2005, 34(1): 28~30
- [26] 汤兆平, 孙剑萍. 乙醇燃料的发展及其在发动机中的应用. 拖拉机与农用运输车, 2008(2): 12~13
- [27] 王建昕, 闫小光, 程勇. 乙醇-柴油混合燃料的燃烧与排放特性. 内燃机学报, 2002, 20(3): 225~229
- [28] Lu J, et al. A preliminary study of chemically enhanced autoignition in a internal combustion engine. SAE Technical Paper 940758, 1994
- [29] 解茂昭. 内燃机计算燃烧学. 大连: 大连理工大学出版社, 2005(9)
- [30] Salvador M. Aceves, Daniel L. Flowers et al. A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions. SAE 2000-01-0327
- [31] Zhi Wang, Shi-jin Shuai et al. Modeling of HCCI Combustion: From 0D to 3D. SAE 2006-01-1364

- [32] 贾明,解茂昭. 均质压燃发动机燃烧与排放的多区模型模拟. 燃烧科学与技术, 2005(3): 261~267
- [33] Kong S C, et al. Modeling and experiments of HCCI engine combustion using detailed chemical kinetics and multidimensional CFD. SAE 2001-01-1026
- [34] Song S C, Reitz R D. Numerical study of premixed HCCI engine combustion and its sensitivity to computational mesh and model uncertainties. Combust. Theory Modeling, 2003(7): 417~433
- [35] 董芳. 内燃机燃烧过程的数值模拟: [硕士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2004
- [36] 蒋德明. 内燃机燃烧与排放学. 西安: 西安交通大学出版社, 2001(7)
- [37] 刘发发. 乙醇燃料均质压燃发动机的模拟研究: [硕士学位论文]. 长春: 吉林大学, 2007
- [38] 刘金山, 黄为钧, 郭英男等. 乙醇燃料均质压燃发动机的试验研究. 吉林大学学报(工学版), 2005, 35(6): 596~600
- [39] 宋丽. 乙醇均质压燃燃烧的数值模拟: [硕士学位论文]. 长春: 吉林大学, 2006
- [40] P. Mehresh, J. Souder, D. Flowers, et al. Combustion Timing in HCCI Engines Determined by Ion-Sensor: Experimental and Kinetic Modeling. Proceedings of the Combustion Institute, Vol.30, 2004: No.29376
- [41] 王志, 帅金石, 王建昕. 高辛烷值燃料 HCCI 燃烧特性的变参数研究. 内燃机学报, 2004, 22(1): 17~26
- [42] 黄豪中, 苏万华. 一个新的用于 HCCI 发动机燃烧研究的正庚烷化学反应动力学简化模型. 内燃机学报, 2005, 23(1): 42~51
- [43] 王瑞金, 张凯, 王刚. FLUENT 技术基础与应用实例. 北京: 清华大学出版社, 2007(2): 1~3
- [44] 韩占忠, 王敬, 兰小平. FLUENT 流体工程仿真计算实例与应用. 北京: 北京理工大学出版社, 2004(6): 19~22
- [45] 范维澄, 万跃鹏. 流动及燃烧的模型与计算. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1992: 14~20
- [46] 张建文, 杨振亚, 张政. 流体流动与传热的数值模拟基础与应用. 北京: 化学工业出版社, 2009: 12~20
- [47] 马贵阳. 内燃机缸内湍流流动的数值模拟-涡粘度模型再研究: [博士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2001
- [48] 马贵阳, 解茂昭. 用 RNG $k-\varepsilon$ 模型计算内燃机缸内湍流流动. 燃烧科学与技术,

2002(8): 171~175

- [49] FLUENT 6.2 User's Guide. Fluent Inc. 2005: 720~770
- [50] 郭海涛, 黄佐华, 周龙保等. 火花点火式发动机未燃碳氢形成机理及影响因素的研究. 内燃机工程, 1996, 17(4): 14~20.
- [51] 黄佐华, 周龙保, 潘克煜等. 火花点火发动机顶岸间隙处未燃碳氢生成和释放过程的数值模拟计算. 西安交通大学学报, 1994, 28(6): 15~22
- [52] 黄为钧, 彭亚平, 郭英男等. 进气温度对乙醇燃料均质压燃燃烧过程的影响. 车用发动机, 2006(4): 13~16
- [53] FIRE Version 8 Examples. AVL FIRE, July 2003, 70~71
- [54] S.G. Pouloupoulos, D.P. Samaras, C.J. Philippopoulos. Regulated and unregulated emissions from an internal combustion engine operating on ethanol-containing fuels. Atmospheric Environment, 2001 (35): 4399~4406
- [55] Xiaobing Pang, Yujing Mu, Juan Yuan, et al. Carbonyls emission from ethanol-blended gasoline and biodiesel-ethanol-diesel used in engines. Atmospheric Environment, 2008(42): 1349~1358
- [56] 李宇. 乙醇燃料 SI/HCCI 燃烧模式转换平顺性研究: [硕士学位论文]. 长春: 吉林大学, 2007

致 谢

本文的研究工作是在我的导师肖合林副教授的悉心指导下完成的。肖老师在研究内容和研究方法的制定、技术路线的实施和论文撰写等方面给予了详细指导，在学习和生活上给予了我很大的关心和帮助，使本文的研究工作能够顺利的完成。肖老师严谨的治学态度和渊博的学识，将使我受益终生，在此对肖老师表示衷心的感谢。

本论文的工作得到了课题组颜伏伍教授、魏明锐教授、罗马吉副教授的帮助，在此表示感谢。感谢华中科技大学能源与动力工程学院的徐波老师、闫妍博士在软件学习上的指导。

在三年的研究生学习过程中，实验室的李祥兵、文媛媛、胡艳、姜涛等众多兄弟姐妹给予了我极大的帮助，在此对他们以及学院其他关心和帮助过我的领导、老师、同学表示衷心的感谢。

最后，感谢我的父母、亲戚和朋友，他们的理解和支持使我能够在学校顺利完成学业。

作者在攻读硕士学位期间发表的学术论文

1. 肖合林, 张素英, 张煜盛. LPG / 柴油混合燃料缸内直喷燃烧的实验研究. 武汉理工大学学报, 2008, 30(12): 137~139
2. 肖合林, 魏明锐, 张素英等. LPG 碰壁喷雾的试验及数值模拟研究. 内燃机工程, 2009, 30(2): 6~10