

基于详细化学反应动力学的汽油机缸内燃烧分析

袁园, 施军, 郑建军, 罗招, 曾庆强

(长安汽车动力研究院, 重庆 401120)

摘要: 汽车排放法规越来越严苛, 各大车企全力开发高效清洁的燃烧系统。本文基于 Converge 软件耦合详细化学反应机理对汽油机缸内燃烧过程进行了分析, 主要研究了点火模型的直径、能量及点火时刻对缸内压力的影响, 分析了 SAGE 模型中的化学反应速率系数 (Reaction multiplier) 及不同化学反应机理对缸内燃烧的影响。研究表明: 缸内压力随点火直径和能量的增大变化不明显, 而选择适当的点火提前角、化学反应速率系数对缸内燃烧过程影响明显。反应机理对缸内燃烧影响明显, 采用长安开发的 CA-mech02 机理, 吻合性良好。通过采用合理的反应机理并调节明显影响缸内燃烧的参数可快速实现汽油机缸内准确的燃烧分析, 模拟缸内原始排放形成过程, 对清洁高效发动机开发有重要意义。

关键词: Converge; 缸内燃烧; 化学反应机理; 长安 CA-mech02 机理

1 引言

随着经济的不断发展, 人们的生活水平日益提高, 但随之带来的环境污染问题也日趋严峻, 汽车尾气作为环境污染来源之一, 解决汽车排尾气放问题迫在眉睫。我国出台的国六法规正逐步实施, 这对汽车排放提出了更为严苛的要求^[1,2]。因此, 各大车企需要加快汽车节能减排技术的研发及推广, 重点从降低发动机原始排放和高效的尾气后处理环保技术等两方面着手, 降低汽车尾气排放, 达到减少环境污染的目的。尾气后处理环保技术主要是通过提高三元催化剂处理效率, 并增加颗粒捕集器处理尾气中的颗粒物, 但单纯地采用该方法去降低尾气排放不仅会大幅增加成本, 且无法满足要求, 而降低发动机原始排放的成本相对较小, 被广泛采用。所以, 降低发动机原始排放成为降低汽车尾气排放的关键, 它主要是通过优化发动机燃烧系统, 提高油气混合均匀性, 提高燃烧效率, 从而改善缸内的原始排放。

随着计算机仿真技术的快速发展, 国内外各大企业纷纷采用 CFD 仿真技术模拟发动机缸内流动、喷雾及燃烧等过程, 设计并逐步优化发动机燃烧系统。基于详细化学反应机理的缸内燃烧再现了燃料在缸内发生化学反应的全过程, 可以准确预测缸内压力变化和温度分布, 尤其是能够了解到排放物质的生成过程和分布情况, 这有利于通过对排放物质的分析, 提高燃烧效率, 优化燃烧系统设计, 降低发动机原始排放。

传统的发动机缸内 CFD 分析中, 网格建模技术一直是限制工作效率和计算精度的瓶颈, 但 Converge 软件进行了网格技术的创造性革新, 改变了传统的先准备网格再进行计算的做法, 基于输入的几何模型在计算过程中实时自动地生成正交网格, 并可进行自适应加密等网格控制, 大大提高了工作效率和计算精度。

关于汽油燃烧化学反应机理的研究有很多, 反应机理对于汽油燃烧至关重要[3, 4]。WH-mech 代表天津大学 2015 年在已有的 PRF[5] 机理上添加了甲苯来替代汽油当中的芳香烃类物质构成的甲苯参比燃料 (TRF, 异辛烷、正庚烷和甲苯) 反应机理[6]。长安通过整合简化 DIB 机理[7]和 MTBE 机理[8] (包括 70 种物质, 256 个基元反应), 再将合成机理与 TRF 反应机理整合, 开发出了 92#汽油替代燃料反应机理 (CA-mech01), 包

括 135 种物质，635 个基元反应，除了碳氢燃烧排放物，还能计算 NO_x 和 Soot 的排放，并在反应机理 CA-mech01 的基础上对部分反应的速率常数进行修正，最终形成了反应机理 CA-mech02。

目前，采用 Converge 软件计算时影响汽油机缸内燃烧的因子很多，不利于进行燃烧标定分析，且反应机理对燃烧的影响有待进一步研究。因此，本文利用 Converge 软件对长安某直喷汽油机特定工况下的基于详细化学反应机理的缸内燃烧进行了 CFD 仿真分析，研究了不同点火模型、SAGE 模型及化学反应机理等对缸内燃烧的影响，有利于汽油机缸内燃烧标定分析。

2 计算模型及边界条件

2.1 计算模型

本文计算内容基于长安某款发动机几何模型，如图 1 所示，发动机的主要参数如表 1 所示，发动机的工况为 3000rpm@10Bar。本文 CFD 仿真主要包括了缸内流动、缸内喷雾以及缸内燃烧仿真，主要使用连续性方程、能量方程、动量方程以及 RNG k- ϵ 湍流模型，喷雾模型主要使用适合汽油机的 KH-ACT+RT 模型，燃烧过程使用 SAGE 模型耦合详细化学反应机理。计算过程中充分利用 Converge 软件的自适应加密、边界加密及局部任意加密功能，对发动机燃烧室及进气道进行了网格加密处理，提高计算精度。计算过程中最大网格数量约为 500 万。

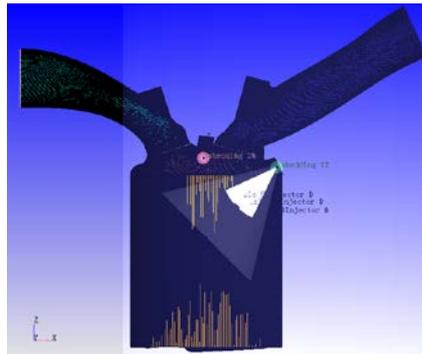


图 1 发动机几何模型

表 1 发动机基本参数

发动机参数	数值
缸径	72 mm
冲程	81.8 mm
连杆长	137 mm
压缩比	~10
喷油策略	一喷（405deg.）/二喷（590.5deg.）
喷油量	一喷（16.8mg）/二喷（7.2mg）
点火时刻	702.76deg.
运行工况	3000rpm@10barBMEP

2.2 边界条件

计算采用的边界条件值均由根据试验结果标定的 GT-Power 模型计算得到。壁面边界给定为温度边界，采用固定经验值。计算周期从 300° CA 到 1080° CA（包括一个循环周期）。

3 计算结果分析

在进行发动机缸内燃烧计算之前先进行流动计算及喷雾模型标定和计算，然后再进行燃烧分析。本文先对喷雾计算的喷雾模型进行标定，得到的贯穿距离如图 2 所示，仿真的贯穿距离与试验值吻合，且喷雾仿真的宏观形态与试验值相同，保证喷雾计算的准确性。通过缸内的喷雾仿真计算得到点火时刻缸内当量比，如图 3 所示。在燃烧计算过程中，通过将燃烧计算得到的缸内压力变化曲线与试验测试后采用 GT-SUITE 软件标定得到的缸内压力曲线对比，标定缸内燃烧过程。

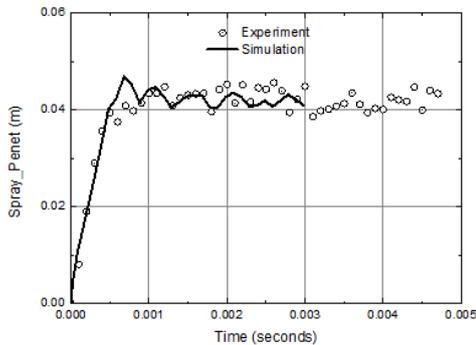


图 2 喷雾贯穿距离对比

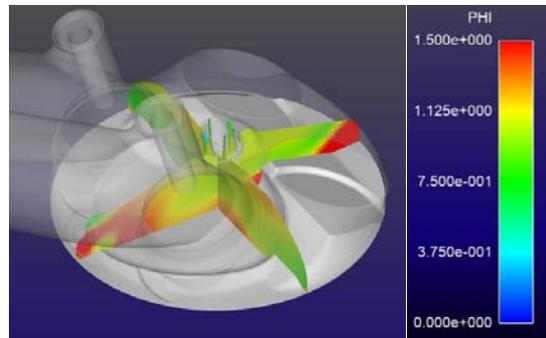


图 3 点火时刻当量比分布

3.1 点火模型对燃烧的影响

在准确的喷雾仿真计算结果基础之上，本文研究的点火模型包括点火源直径（点火形状定义为球形）、能量以及点火时刻等点火因素，分析这些点火因素分别对缸内燃烧的影响。通过该分析可以得知哪些点火因素对燃烧分析影响较大，在进行燃烧标定工作时可着重调整这些参数，有利于燃烧模型标定分析。

3.1.1 点火直径的影响

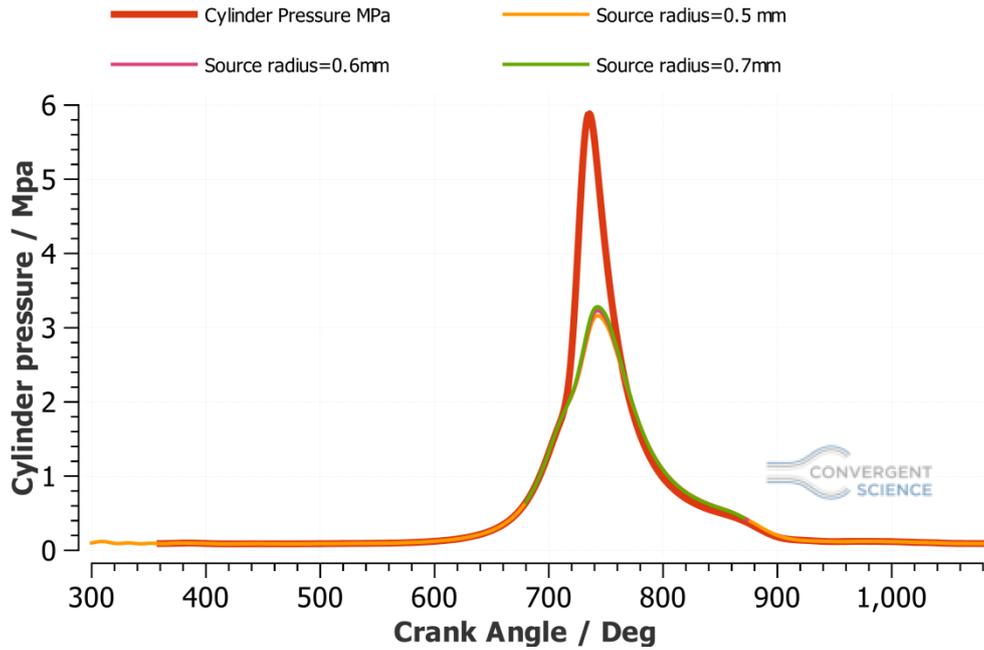


图 4 不同点火直径缸内压力变化

由图 4 可知，点火源直径分别为 0.5mm、0.6mm 和 0.7mm 时，压力变化曲线仅在最大压力处略有不同，在其他阶段基本重合，点火前，压力变化曲线与给定边界缸内压力曲线吻合良好。随着点火源直径的逐渐增大，缸内燃烧最大压力也逐渐增大，但增大并不明显，点火源直径对缸内压力影响较小。因此，点火源直径对缸内燃烧的影响很小。

3.1.2 点火能量的影响

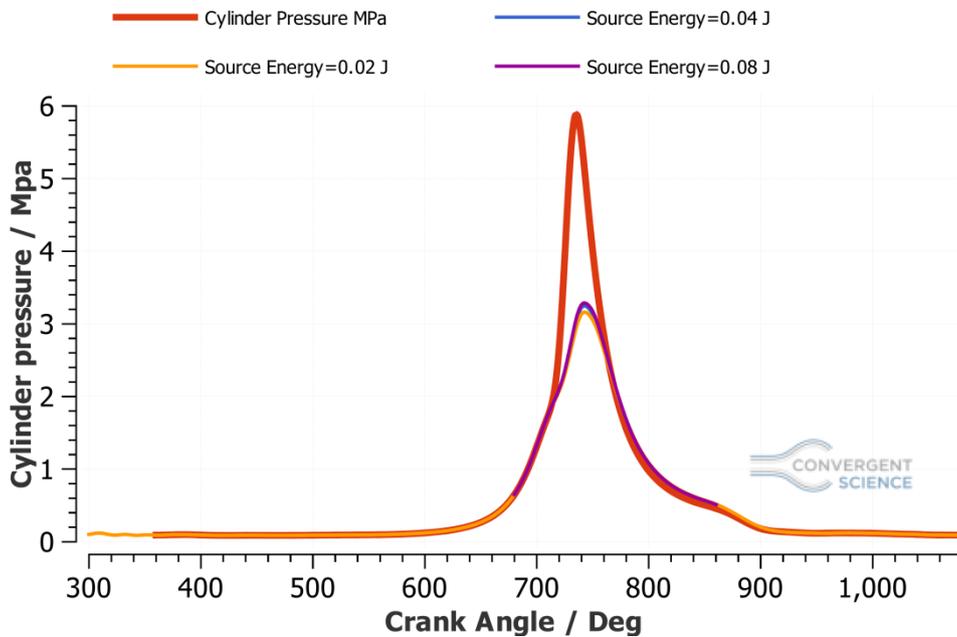


图 5 不同点火能量缸内压力变化

由图 5 可知，与点火直径对缸内压力的影响相似，点火能量分别为 0.02J、0.04J 和 0.08J 时，缸内压力变化曲线仅在最大压力处略微有所不同，在其他阶段基本吻合。同样，仅在点火前阶段，压力变化曲线与给定边界缸内压力曲线吻合良好。随着点火能量的逐渐增大，缸

内燃烧最大压力也逐渐增大，但增大并不明显，因此，点火能量对缸内燃烧的影响也很小，在进行燃烧模型标定分析时点火直径和能量可以保持不变，通过调节其他因素进行分析。

3.1.3 点火时刻的影响

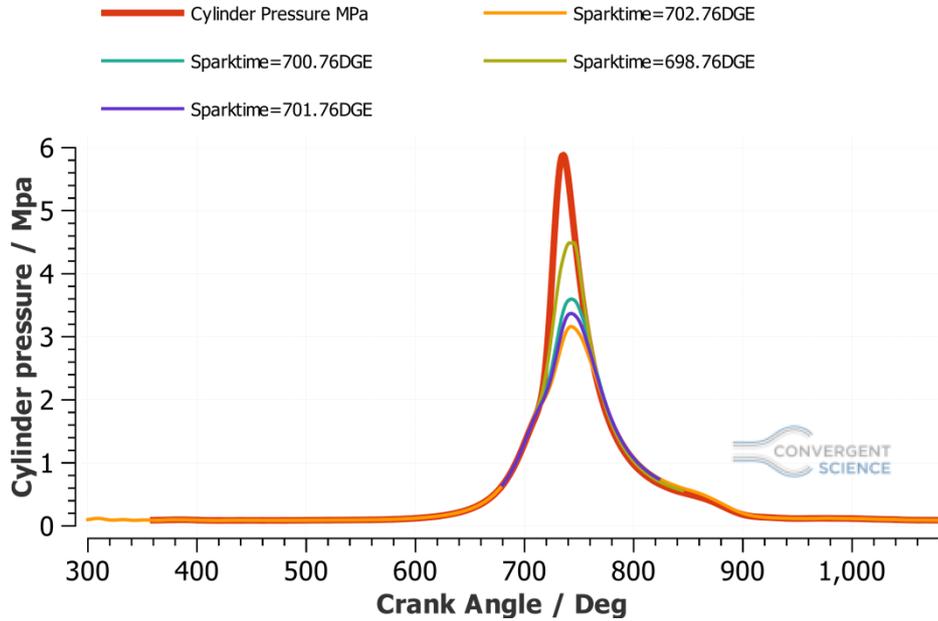


图 6 不同点火时刻缸内压力变化

由图 6 可知，点火时刻分别为 689.76° CA、 700.76° CA、 701.76° CA 和 702.76° CA 时，也就是点火角提前分别为 30.24° CA、 19.24° CA、 18.24° CA 和 17.24° CA 时，缸内最大压力明显降低。所以，点火提前角越大，缸内压力越大，越接近给定的缸内压力曲线。但是，点火提前角使最高燃烧压力位于上止点 (720° CA) 后 $10^\circ \sim 15^\circ$ CA 时为最佳^[9]，因此点火提前角不能过大，尽量接近最佳点火提前角，保证汽油机热效率。

3.2 SAGE 模型对燃烧的影响

本文研究 SAGE 燃烧模型对燃烧的影响，主要针对参数 Reaction multiplier 对缸内压力的影响进行分析，如图 7 所示。Reaction multiplier 参数反映燃烧反应的速率，其值越大，反应速率越大。

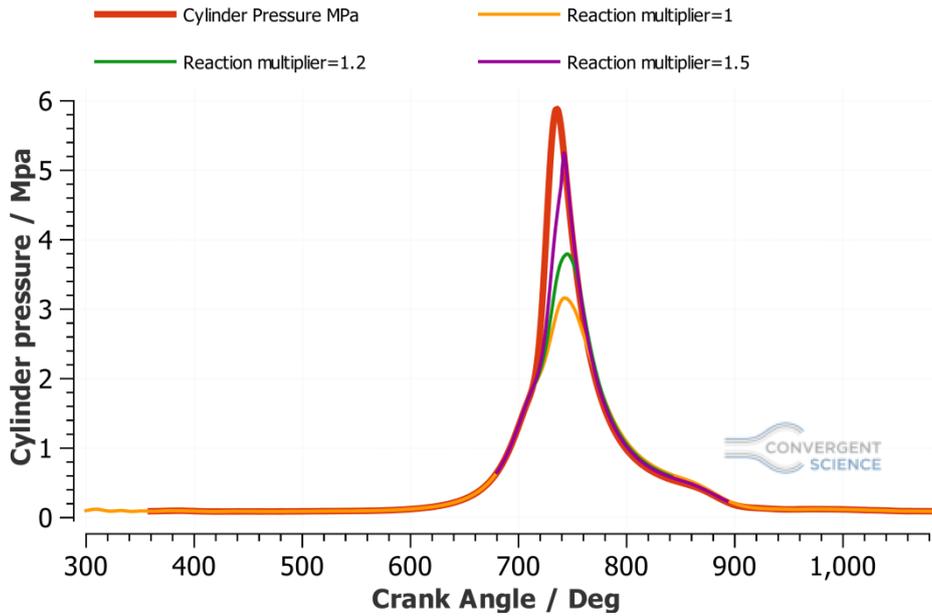


图 7 不同 Reaction multiplier 参数值缸内压力变化

由图 7 可知，Reaction multiplier 参数值分别为 1、1.2 和 1.5 逐渐增大时，缸内最大压力也明显地逐渐增大，其他反应阶段与给定缸内压力基本吻合，仅在最大压力阶段低于给定边界的最大压力，可通过调整该参数，使燃烧缸内压力变化曲线与给定边界压力曲线基本吻合，有利于燃烧模型标定分析。

3.3 反应机理对燃烧的影响

缸内燃烧发生化学反应的过程通过化学反应机理来反映，因此，化学反应机理对于缸内燃烧计算分析具有重大的意义。本文研究了几种不同反应机理对于缸内压力的影响，改善缸内燃烧过程。

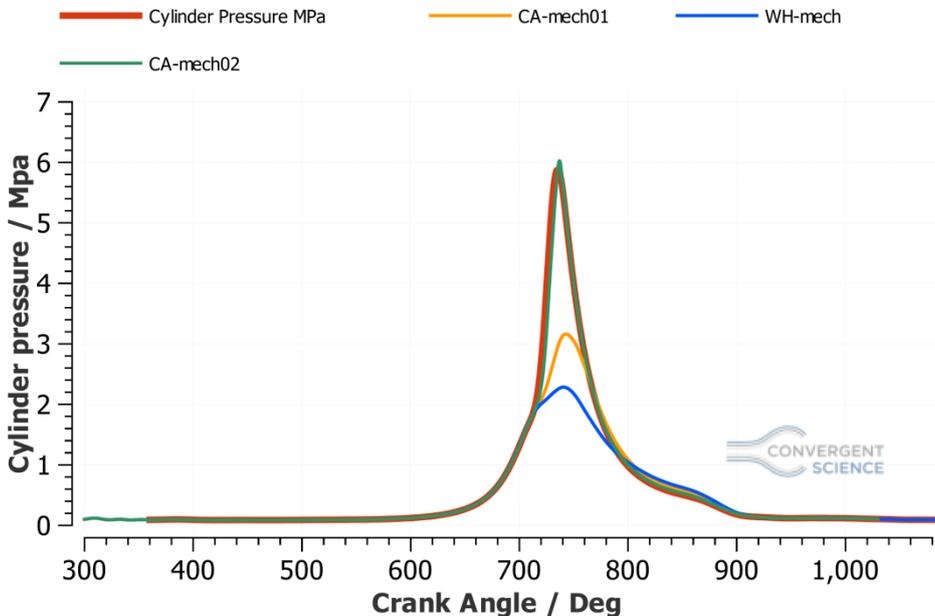


图 8 不同反应机理燃烧缸内压力变化

由图 8 可知，点火前，基于三种反应机理的燃烧缸内压力与给定边界缸内压力吻合都很好，CA-mech02 机理在缸内各个阶段压力曲线均吻合良好，而 CA-mech01 机理和 WH-mech 机理不管是最大压力还是点火后缸内压力吻合均较差。由此可知，化学反应机理对缸内燃烧

有很大影响,恰当的化学反应机理能够使缸内燃烧与实际更为吻合,寻求合适的化学反应机理对于燃烧分析十分重要。

4 结论

本文基于 Converge 软件利用详细化学反应动力学对长安某直喷汽油机进行了缸内燃烧 CFD 仿真分析,研究了基于同一化学反应机理时点火模型(包括点火直径、能量及点火时刻)和 SAGE 燃烧模型参数对缸内压力的影响,并分析了不同化学反应机理对缸内燃烧的影响,由此得出不同因素对燃烧反应的影响程度,有利于汽油机燃烧模型标定分析。本文通过分析得到以下结论:

- (1) 随着点火直径和能量的逐渐增大,缸内压力有所增大,但增大并不明显,其对缸内燃烧的影响可忽略。点火时刻对缸内压力的影响较大,随着点火时刻的提前,缸内压力明显增大。
- (2) 随着 Reaction multiplier 参数值的逐渐增大,缸内压力明显增大,该参数对缸内燃烧的影响较大。
- (3) 化学反应机理对缸内燃烧有很大影响,选择合适的详细化学反应机理可有效改善缸内燃烧情况,有利于降低发动机原始排放。
- (4) 通过调整 SAGE 燃烧模型参数并寻求合理的化学反应机理,快速准确地进行汽油机燃烧模型标定分析。

5 参考文献

- [1] J. Kim, N. Kim, K. Min, Numerical Investigation of Soot Emission in Direct-Injection Spark-Ignition Engines Using a Detailed Soot Model Framework, SAE, 1 (2016).
- [2] G. P. L. de Francqueville, Investigation of particle formation processes in a GDI engine in catalyst heating operation, SIA International Conference, 2011.
- [3] E. Ranzi, T. Faravelli, P. Gaffuri, A. Sogaro, A. D'Anna, A. Ciajolo, A wide-range modeling study of iso-octane oxidation, Combustion & Flame, 108 (1997) 24-42.
- [4] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, G. K. Westbrook, A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation, Combustion & Flame, 129 (2002) 253-280.
- [5] M. Y. Hu Wang, Rolf D. Reitz, Development of a Reduced Primary Reference Fuel Mechanism for Internal Combustion Engine Combustion Simulations, Energy Fuels, 27 (12) (2013) 7843-7853.
- [6] H. Wang, M. Yao, Z. Yue, M. Jia, R. D. Reitz, A reduced toluene reference fuel chemical kinetic mechanism for combustion and polycyclic-aromatic hydrocarbon predictions, Combustion and Flame, 162 (2015) 2390-2404.
- [7] Metcalfe WK, Pitz WJ, Curran HJ, Simmie JM, Westbrook CK. The development of a detailed chemical kinetic mechanism for diisobutylene and comparison to shock tube ignition times. Proceedings of the Combustion Institute. 2007;31:377-84.
- [8] Yasunaga K, Simmie JM, Curran HJ, Koike T, Takahashi O, Kuraguchi Y, et al. Detailed chemical kinetic mechanisms of ethyl methyl, methyl tert-butyl and ethyl tert-butyl ethers: The importance of uni-molecular elimination reactions. Combustion and Flame. 2011;158:1032-6.
- [9] 刘圣华, 周龙保. 内燃机学[M]. 4版. 北京: 机械工业出版社, 2017.