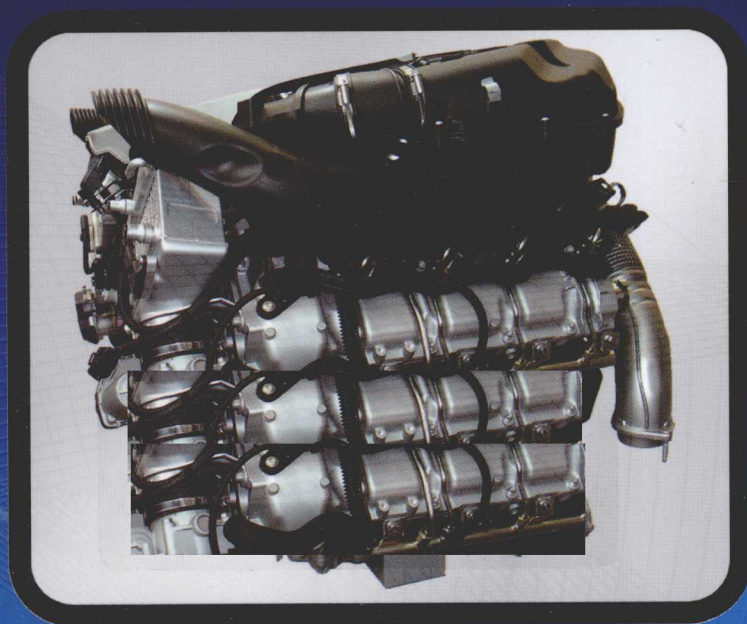


● 21 世纪重要学术专著 ●

北京建筑工程学院学术著作出版基金资助出版

电控缸内直喷发动机 着火与碳烟生成机理

刘永峰 著



 机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



21 世纪重要学术专著

北京建筑工程学院学术著作出版基金资助出版

电控缸内直喷发动机着火与 碳烟生成机理

刘永峰 著



机械工业出版社

本书首先研究了缸内直喷柴油机工作过程的计算模型,结合结构化网格的规则以及改进的4JB1柴油发动机活塞形状,建立了本书的计算网格;分析了正庚烷的详细化学反应机理,并采用准稳态近似法对正庚烷的详细化学反应机理进行了简化研究,提出了以温度为主要参数的改进模型;提出了改进燃烧模型子程序的基本结构,以及子程序如何在整个程序中实现的途径;对标准KIVA-3V源代码的碳烟生成机理进行了分析,在结合近几年国内外试验研究成果的基础上,作者提出了新的碳烟生成机理,并给出了在标准KIVA-3V源代码中实现的途径。最后,通过发动机台架试验结果验证本书修正的燃烧和碳烟模型。

本书主要适合在车辆工程、发动机等领域学习和工作的大学生、研究生及相关研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

电控缸内直喷发动机着火与碳烟生成机理/刘永峰著. —北京:机械工业出版社, 2011. 1

ISBN 978-7-111-32484-3

I. ①电… II. ①刘… III. ①柴油机—原理 IV. ①TK42

中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第221165号

机械工业出版社(北京市百万庄大街22号 邮政编码100037)

策划编辑:罗莉 责任编辑:罗莉

版式设计:张世琴 责任校对:陈立辉

封面设计:陈沛 责任印制:李妍

北京富生印刷厂印刷

2011年1月第1版第1次印刷

184mm×260mm·8.5印张·2插页·176千字

0001—2000册

标准书号:ISBN 978-7-111-32484-3

定价:38.00元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

电话服务

网络服务

社服务中心:(010)88361066

门户网:<http://www.cmpbook.com>

销售一部:(010)68326294

教材网:<http://www.cmpedu.com>

销售二部:(010)88379649

读者服务部:(010)68993821

封面无防伪标均为盗版

北京建筑工程学院学术著作 出版基金委员会

主任：郑文堂

副主任：朱 光 宋国华

委员：张大玉 吴海燕 陈静勇 吴 徽

李德英 陈志新 何佰洲 王晏民

陈宝江 刘临安 高春花 崔景安

前 言

由于具有较高的热效率和更低的二氧化碳排放率,电控缸内直喷式发动机被认为是很有发展前景的轻型货车和载重汽车的动力源。对电控缸内直喷式柴油机而言,液体燃油的燃烧及碳烟生成被认为是最重要的过程之一。虽然人们对碳烟机理进行了长期的研究,但由于问题的复杂性,人们对碳烟机理的认识至今仍不全面,尤其是关于碳烟前驱物 PAH 的生成机理。开展直喷式柴油机着火机理的研究有助于加深对碳烟生成机理的认识,丰富和发展燃油燃烧相关基础理论,因此具有重要的理论意义和工程实用价值。

基于上述认识,本书尝试将 KIVA 辅助发动机设计的理论与应用进行系统的总结,其内容包括:在综述 KIVA 数值计算方法的基础上,对电控直喷式柴油机的着火边界进行理论分析,在分析 KIVA 原有湍流燃烧模型和碳烟生成模型的基础上,结合最近研究成果,对其进行了修改。并结合 4JB1 柴油机进行了试验,最后对修改的模型、原有模型和试验结果进行了分析比较,得出了本书的结论。

本书内容主要是我近十年来在国外访学、博士论文以及博士后研究工作报告期间部分研究成果的总结,同时还包括十余年来在学习和工作期间与导师和课题组研究生们在该领域共同探讨得出的一些研究成果。编写本书的目的:一是为了总结这些年来在该领域所完成的工作,与更多的同行交流研究成果;二是为了在进行发动机研究及其新产品的研发过程中,探讨一条结合现代设计理念、运用现代设计方法的新优化思路。

本书的成稿首先感谢美国工程院外籍院士、德国工程院院士、德国亚琛工业大学 (RWTH-Aachen) Nobert Peters 教授对我燃烧学的启蒙指导,通过聆听了他的两门燃烧课程 (层流燃烧和湍流燃烧),并应用他的 RIF 小火焰模型对 AUDI TDI 1.9L 发动机进行了计算和试验,使得我对发动机燃烧与排放优化产生浓厚兴趣并准备进行执著研究,同时还有德国同事 Güther Pazko 博士和 Carl Hasse 博士、清华大学帅石金教授、陈虎博士、虞育松博士后以及北京交通大学李国岫教授对我仿真计算的前期帮助。其次感谢我的博士研究生导师——北京理工大学张幽彤教授多年来对我在学业方面的悉心指导和

生活上的关怀,导师在博士论文的选题、理论和试验研究及撰写过程中倾注了大量的时间和精力,导师敏锐的学术视野、渊博的学识、勤奋的工作作风和严谨求实的科学态度给我留下了深刻的印象;感谢北京理工大学马朝臣教授、王尚勇教授、张卫正教授、葛蕴珊教授、杨策教授、刘福水教授、李向荣副教授、孙柏刚副教授、谭建伟博士后、姜磊博士、李铁栓工程师在计算和试验中的支持和关心;感谢我的博士后合作导师——清华大学汽车工程系裴普成教授,在课题研究过程中给我提供了学术气息浓厚但又宽松的氛围,使我能够踏实而富有效率地从事学习和科研工作。在本书修改过程还得到了北京航空航天大学李兴虎教授以及北京工业大学仇滔副教授的支持和帮助。最后感谢我在英国 Glamorgen 大学访学的英文老师们,有了她们的帮助使得我多篇论文在高 SCI 影响因子的英文刊物上得以顺利发表。并且可以用流利的英语在重要国际会议上发言以及和国际同行进行讨论;同济大学留德预备部的许晴老师和 Richter 女士等多名德语老师,是她们使我掌握了又一门新的语言,为我的学术研究打开了另外一扇窗口,使我能够应用另一门语言去直接获取知识。

我的母校,现今的工作单位——北京建筑工程学院一直对我的成长给予莫大的关怀,尤其是最近一届的校领导,对于青年教师的发展给予极大的空间,我也深深地爱着母校,时时和她同呼吸、共命运、心连心!

由于本书涉及面较广,我深感自己理论水平和经验不足,错误和不严谨之处恳请广大同行批评指正。

谨以本书献给我的领导、老师、父母和所有帮助我的人们。

刘永峰

2010 年 9 月于北京清华园

目 录

前言

第1章 绪论	1
1.1 研究背景和意义	1
1.2 柴油机湍流扩散燃烧的国内外研究现状	1
1.3 柴油机碳烟生成机理和控制措施	4
1.4 本书的主要研究工作	6
第2章 数值计算研究	9
2.1 工作过程的计算模型	9
2.1.1 控制方程组	9
2.1.2 湍流模型	12
2.1.3 燃油喷雾模型	13
2.1.4 燃烧化学反应模型	20
2.2 数值计算方法	21
2.2.1 计算网格	22
2.2.2 时间差分	27
2.2.3 空间差分	27
2.2.4 喷雾方程的离散计算	31
2.2.5 第一阶段(A阶段)——显式拉格朗日计算	31
2.2.6 第二阶段(B阶段)——压力的迭代求解	34
2.2.7 第三阶段(C阶段)——网格移动及对流项计算	36
2.2.8 稳定性约束和自动时间步长的控制	37
2.3 计算程序分析	39
2.3.1 源代码程序分析	39
2.3.2 KIVA-3V各主要子程序及其相互关系(按主程序调用顺序)	42
2.3.3 本书计算方案	43
2.4 本章小结	44
第3章 柴油机着火边界分析	45
3.1 柴油计算模型的确定	45
3.2 封闭体系下组分和温度方程	46
3.3 连续流动控制体下的组分和温度方程	48

3.4	正庚烷的着火延迟时间	50
3.5	讨论	51
3.5.1	温度的两个解	51
3.5.2	E 的两种情况	52
3.5.3	温度波动	53
3.6	本章小结	54
第4章	柴油机湍流扩散燃烧模型的改进	55
4.1	KIVA 原模型的分析	55
4.2	改进模型的建立	58
4.2.1	详细化学反应机理	58
4.2.2	准稳态近似法 (QSSA)	60
4.2.3	改进的燃烧计算模型	63
4.3	KIVA 源代码中的实现	64
4.4	本章小结	66
第5章	碳烟模型的改进	67
5.1	KIVA 源代码碳烟模型的分析	67
5.2	改进模型的建立	70
5.3	KIVA 源代码中的实现	74
5.4	本章小结	76
第6章	模型的验证	78
6.1	试验内容及装置	78
6.2	一次喷射	84
6.2.1	喷油规律的测定	84
6.2.2	缸压与瞬时放热率	85
6.2.3	温度分析	86
6.2.4	碳烟分析	89
6.2.5	不同工况总结	89
6.3	两次喷射	90
6.3.1	喷油规律的测定	90
6.3.2	缸压与瞬时放热率	91
6.3.3	温度分析	93
6.3.4	碳烟分析	96
6.3.5	不同工况总结	101
6.4	本章小结	102

第7章 全书总结	104
7.1 本书的主要工作及结论	104
7.2 本书的主要创新点	106
7.3 今后工作展望	106
附录	108
附录 A iprep. dat 网格文件说明	108
附录 B itape5. dat 数据文件说明	112
参考文献	118

第1章 绪论

1.1 研究背景和意义

柴油机发明一百多年来,由于其优越的经济性和耐久可靠性,作为汽车以及工程机械的主要动力源得到广泛应用。特别是近年来地球温暖化已成为全球关注问题的时候,柴油机因 CO_2 排放量少等优点备受青睐。但是柴油机的碳烟(微粒)和氮氧化物(NO_x)排放较为严重,成为大气环境的主要污染物之一^[1]。随着排气净化、低油耗、高功率以及低噪声、高行驶性能的要求,柴油机已全面向电控化发展,使得柴油机混合气形成及燃烧控制技术得到迅速的发展,大大改善了柴油机的排放特性和整机性能,极大程度地满足了社会环境及用户的需求^[2]。尽管如此,随着环境污染及能源资源问题的日趋严峻,在世界各国对车辆的节能与排放控制法规日趋严格的条件下,柴油机所面临的课题依然是在改善其动力性和经济性的前提下,进一步净化排气的问题。

近年来对柴油机排放的模拟研究,主要集中在碳烟(微粒)和氮氧化物(NO_x),特别是碳烟的生成机理,引起国内外专家学者的广泛重视。碳烟是柴油机排放微粒(Particulate Matter, PM)的主要组成部分,占微粒总量的50%~80%之多,碳烟是燃料在缺氧条件下燃烧时形成的,其主要成分是碳。与其他气相污染物不同,碳烟是一种固体微粒。它的形成不仅要经历十分复杂的气相反应,还要经历从气态到固态的相变过程以及后续颗粒的生长和发展过程,从而涉及颗粒动力学等相关领域。此外,碳烟生成之后,还会重新氧化。由此可见,建立碳烟形成、发展和氧化全过程的物理、化学模型及其数值模拟较之其他燃烧污染物是一项难度更大、更具挑战性的工作。也正因为如此,碳烟的计算模拟吸引了众多的研究者,使该领域成为计算燃烧学和热力发动机近年来最为活跃的研究领域之一^[3]。目前,各发达国家和包括我国在内的若干发展中国家都已经形成了从事柴油机碳烟排放机理和控制技术研究的专业队伍,并正在不断地取得新的成果。代表该领域最新研究成果和水平的每两年一次的国际燃烧大会(ISC)已经举行了32届,并且每次大会都出版相关的论文集以及专著^[4]。因此,在这样的形势下,我国及时开展柴油机碳烟排放机理和控制技术的研究,长期在该领域逐步走向繁荣并赶超世界先进水平是十分必要的,也是很有意义的。

1.2 柴油机湍流扩散燃烧的国内外研究现状

湍流扩散燃烧的复杂性导致目前人们对其本身机理的认识还相当不完善,再加上燃

油喷雾过程的微尺度、强瞬态以及燃油温度场的非均一性干扰试验研究,燃烧过程和燃烧生成烟目前仍无法轻易获得。人们对这一机理的认识至今仍处在相当肤浅的阶段,只能定性地加以描述。定性地看,燃烧化学反应可通过多种渠道影响湍流特性。首先,燃烧放出的热量使流场中各处流体发生不同程度的膨胀。从而引起密度变化,甚至产生显著的密度梯度。另一方面,燃烧引起的温度升高,会使流体的输运系数随之变化,从而影响湍流的输运特性。迄今为止,有化学反应湍流的模型方程和封闭假设多数是从等密度无反应湍流理论中照搬过来的,而后者基本上是基于简单的量纲分析,因此照搬过来是缺乏理论根据的。因为燃烧又引入了新的无量纲量,如密度比,而且在其未封闭的精确方程中,还含有若干在等密度情况下不存在的量。与经典的无反应、不可压流体的湍流流动问题相比,湍流燃烧问题的复杂和困难度都大大增加,以致在目前知识水平上,还难以建立起完善的湍流燃烧理论。可行的途径只能是借助一定的简化假设和数学工具,并或多或少地依靠试验数据,建立各种湍流燃烧模型。

研究湍流扩散燃烧离不开对湍流燃烧模型的研究,目前,国内外湍流扩散燃烧模型大致分为零维模型、准维模型和多维模型。零维模型和准维模型并不注重其模拟方法能否如实反映缸内真实的物理化学机理。其目的仅在于通过经验系数的调整而能在一定实用范围内对发动机的燃烧作出精度可满足工程需要的分析和预测。与此相反,多维模型力图摆脱经验性的因素,而立足于各有关学科最新理论成就,对缸内过程进行全面深入的模拟。它不但能重现缸内过程宏观的表面特征,而且能揭示并反映其微观机理。因而,它是一种纯理论模型。当然,在现阶段,多维模型还不能完全摆脱经验的成分。例如,湍流模型和化学反应模型中的经验常数仍是必不可少的,但这些经验常数却是零维和准维模型中那些随机型而变的常数所不能与之相提并论的。它们已经具有相当大的通用性,只是不能单纯依据理论来确定而已。自20世纪90年代以来,由于多维模型的蓬勃兴起,柴油机零维模型和准维模型不再是研究热点,但其作为相关研究和工程开发重要工具的地位并未改变,参考文献[5-7]是其近年来有代表性的应用实例。迄今所提出的湍流扩散多维模型,按其所采用的模拟假设和数学方法,大致分为四大类,即相关矩封闭法、基于湍流火焰结构几何描述的方法、基于湍流混合速率的方法(包括EDC模型)和统计分析法(包括概率密度函数和条件矩等方法)。目前研究和应用较多的是后两种方法,这里对前两种方法仅作简要介绍。相关矩封闭法是用传统的雷诺分解法,即把湍流瞬时量分解为平均量和脉动量,再代入瞬时反应方程中,并须将其中指数项按平均温度的泰勒级数展开,它对预混燃烧和扩散燃烧均适用,但它有两个缺点:第一,需要求解许多输运方程,工作量太大;第二,此方法是以Arrhenius反应率公式中指数项的级数展开为基础的,故存在由非线性引起的收敛性问题。基于湍流火焰结构几何描述的方法就是对火焰面进行几何分析,有两种途径:一种是沿火焰面的切向进行,即把火焰面视为等值面,对扩散燃烧,是混合分数 Z 为常数的面;另一种是从火焰面的法向进行分析,研究在垂直火焰的方向,亦即随着到火焰面的距离,流场的燃烧特性是

如何演变的。由这两种途径可得出湍流扩散燃烧的火焰密度模型,它的基本假设是,在达姆科勒数很高的情况下,反应区变得很薄,化学反应尺度小于湍流最小涡的尺度。该方法中包含了若干经验常数,其数值需要通过数值试验来确定,而且其对机型和工况的普适性较差^[9]。基于湍流混合速率的方法就是将湍流反应率认为由湍流混合起着主导作用,忽略分子扩散和化学动力学的因素。Magnussen 提出了同时用于预混和扩散燃烧的涡团耗散概念 (Eddy Dissipation Conception, EDC) 模型,其基本思想是燃烧率是由燃料和氧化剂在分子尺度水平上相互混合的速率所决定的,即由两种涡团的破碎率和耗散率所决定。对扩散燃烧,燃料和氧化剂分别形成两种涡团,燃烧总是在两种涡团的界面上进行。此模型公式的特点是,只含组分的平均浓度而不涉及其脉动浓度,故无需求解脉动浓度的输运方程,但其中系数的选取仍是经验性的,并非通用的常数。概率密度函数 (Probability Density Function, PDF) 方法的着眼点并非寻求随机量在空间任一点的瞬时值随时间变化的严格规律,而是求出它取某一值的可能性,即概率。确定 PDF 有两种方法。第一是根据经验预先假定 PDF 的分布形状;第二是建立 PDF 的精确输运方程,利用适当假设对其中一些项加以模拟后,直接求解。随着电子计算机的飞速发展,可以预料,这种方法是很有潜力的。但目前一般仍限于用有限差分法求解二维流单变量的 PDF,并已获得一些有用的结果^[10]。对于多变量 PDF,由于受计算机存储和速度限制,有限差分法不适用,一般用 Monte Carlo 法求解。Johns 尝试通过求解联合概率密度函数的输运方程来模拟柴油机的燃烧过程,对于有燃料、氧化剂和燃烧产物共存的非预混合燃烧系统,欲描述其混合物的组成状态至少需要两个变量,其中一个为燃料与氧化剂的混合分数 Z ,另一个是以同样方式定义的燃烧产物与氧化剂的混合分数 c (当然也可以是产物与燃料的混合分数)。条件矩封闭模型 (Conditional Moment Closure, CMC) 是由 Klimenko^[11] 和 Bilger^[12] 于 20 世纪 90 年代初期独立提出的。此模型认为,在湍流燃烧过程中,许多湍流参数的脉动都与某一个关键标量 (对扩散燃烧为混合分数 Z) 的脉动相联系。因此,在对湍流随机量进行统计平均分析时,如果限定该关键标量取某一特定值,即取条件平均,则有条件的脉动方均根值将远小于无条件的平均值。该模型在理论上是很严格的,其基本方程的导出没有采用任何简化假设,因而适用于各种燃烧过程,但其计算量较大。为了把化学动力学问题和湍流问题分开处理,即成功地实现两者的解耦,美国工程院院士 Williams 于 1975 年提出了层流小火焰的概念,其含义是在 Kolmogorov 尺度下的火焰实质上是受分子扩散和输运控制的层流小火焰 (Flamelet),而湍流火焰可以视为嵌入湍流场内的具有一维结构的层流小火焰的集合或系综。稍后, Peters 提出了代表性互动小火焰模型 (Representative Interactive Flamelet, RIF),并成功地应用在湍流扩散燃烧领域^[13],并成为目前最著名的湍流燃烧模型之一。RIF 模型采用流体力学中的 Crocco 坐标变换,引入新的坐标系,将其原点置于火焰中心面 ($Z = Z_{st}$) 上,并用混合分数 Z 取代 x 坐标,即 Z 坐标垂直于化学当量比表面,其他两个坐标与之正交,如图 1-1 所示。经过坐标变换后,物理空间中的组分和能量平衡方程在混合分数空间中转化

为一维形式。该模型方程中不含对流项，其原因是所有标量在物理空间中都经受同一速度场引起的对流输运，因而在由标量组合而成的混合分数空间中不再存在彼此之间的对流效应，这是引入混合分数空间坐标变换的主要好处之一，同时在理想混合坐标下推导了温度和组分的新公式，对于计算后续的缸内各种参数以及污染物的生成提供了坚实的基础。

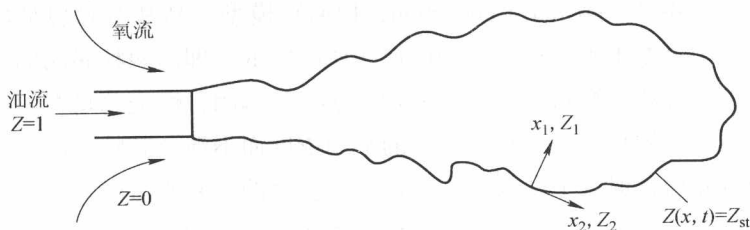


图 1-1 湍流喷射的理想混合配比表面空间

国内对柴油机燃烧模型的研究比国外落后，但近年来许多科研人员做出很多研究成果，与国外的差距在逐步缩小。何旭等^[61]应用 Shell 模型对自行设计的 TR 燃烧系统进行了计算，重点研究喷雾速度场和混合气形成状况，并与传统燃烧室进行比较，分析 TR 燃烧系统的工作特点，探索气流运动和混合气形成规律，并通过一台 135 发动机验证了该系统，结果表明，采用合适的喷油器，并增加柱塞直径提高供油速率，可将 TR 着火点控制在上止点附近，同时减小着火后的燃油喷射量，采用了导向圆弧和中孔喷射，燃烧室内气流运动剧烈，燃油的空间分布更为合理，空气利用充分，减少壁面散热损失，实现 TR 燃烧系统的“快速燃油喷射、快速混合气形成和快速燃烧”设计思想，并具有良好的冷启动性能。苏万华等在 2006 年^[70]对自己以前提出的模型进行了改进，提出了一个新的正庚烷化学反应动力学简化模型，包含 40 种组分和 62 个反应。同时，采用遗传算法和化学动力学软件对其动力学参数进行优化。新模型由三个子模型组成。低温反应和负温度系数子模型是在 LiGriffiths 模型的基础上，定义了具体的醛类和小分子碳氢产物，去除了无关的基元反应，增加了两个关于醛的氧化反应而构建的计算结果，表明新模型能够模拟正庚烷燃烧冷焰反应和热焰反应的全过程，优化后的新模型预测着火时刻的精度更高，与详细模型的计算结果吻合更好，为多维模型与化学反应动力学模型相耦合的燃烧计算提供了可行的途径。另外，采用遗传优化技术对模型动力学参数进行调整计算表明，新模型能够在当量比为 0.2 ~ 1.2，温度在 300 ~ 3000K 的范围内精确模拟正庚烷燃烧时冷焰和热焰反应过程，与详细模型 544 种组分和 2446 个反应计算结果吻合较好。

1.3 柴油机碳烟生成机理和控制措施

内燃机燃烧是一个涉及多学科的复杂化学反应和能量转换过程，内燃机燃烧过程还

有很多方面没有被人们完全把握,特别是缸内复杂燃烧过程中化学反应机理和碳粒的生成。我们知道,燃烧模型中有关燃料氧化和燃烧部分通常都避开详细的化学反应动力学机理,以便把重点置于详细的计算流体运动和输运方程。但是对污染物排放模拟而言,目标是预测发动机所排废气中有关化学成分的浓度,通常这些浓度都是受化学动力学机理和反应速率的控制。也正是这一点,排放模型的发展遭遇到很大的困难。碳烟(Soot)是燃料在缺氧条件下燃烧形成的,其主要成分是碳,迄今提出的模型大体上可分为三类,即经验模型、半经验模型和详细模型。经验模型代表人物是 Tesner,他认为,由于燃烧区的高温,分子发生离解的概率远远大于其聚合概率,因此会有大量的自由基产生,这些自由基引起一系列链分枝反应和链终止反应,最后以这些基团为核心而形成碳烟微粒。半经验模型代表人物是 Fusco^[15],其基本思想是应用尽可能少的反应步骤而又尽可能全面地描述碳烟生成的全过程,即通过总包反应以及相应的反应速率表达式模拟燃料的热解、碳粒成核、表面生长、凝结核氧化等这些基本环节。详细模型也取得一系列进展,其中 Frenklach^[16]和 Mauss^[17]领导的两个研究组的成果具有代表性,两者在理论和模型上都十分接近,因此我们将其合称为 F-M 模型。模型的总体结构由 8 个主要环节组成:

- 1) 燃料热解及第一个苯环的形成;
- 2) 芳香烃的组合及 PAH 的初步形成;
- 3) PAH 在 HACA 机理连续作用下的生长;
- 4) PAH 的快速聚合;
- 5) PAH 的氧化;
- 6) 碳粒的成核;
- 7) 碳粒的表面生长;
- 8) 碳粒的氧化。

实际上,对其中每一个环节,特别是涉及气相反应动力学的前 6 个环节,都包含着为数可观的化学组分合反应,在实际应用中,还可以根据具体问题的不同,对反应机理进行调整。Tao、Golovitchev 和 Chomiak^[110]吸收了 Leung 和 Lindstedt 模型^[111,112]的基本步骤,将碳烟的生成分为四步:粒子凝结、表面生长、表面氧化和粒子聚合。专门针对柴油机高温高压环境和扩散燃烧的特点,提出了一个较上述 F-M 模型简单一些的碳粒排放模型。此模型仍由气相化学和颗粒动力学两部分组成,对前者,采用了详细的反应机理;后者则用唯象的半经验方法加以模拟。由于该模型是专门针对柴油机的喷雾燃烧,因而压燃着火现象对后续燃烧和污染物形成的影响不可忽略。为了避免正庚烷详细着火机理(550 种组分,2450 个反应)的过分复杂性,采用了集总的方法,通过敏感度分析构造了一个简化机理,只保留了若干重要的组分和关键反应,但能较好地反映正庚烷从低温到高温的两级着火过程。小分子烃的氧化和 NO 形成机理均直接取自文献。PAH 的形成及氧化机理也是取自 Frenklach 的模型,但作了简化,例如,形成两个环以

上的长链烃,如萘和聚炔烃的反应都被删去,总的气相机理包括 65 种组分和 268 个反应。

国内对缸内碳烟生成机理和控制的研究比国外落后,但近年来许多科研人员做出很多研究成果,主要集中在对降低碳烟的控制技术上。罗福强、高宗英^[18]等多缸柴油机产生缸间差异的原因,提出了采用统计学 STUDENT 试验方法判别多缸发动机缸间差异产生的原因。实测了一台四缸直喷式柴油机气缸压力,分析其平均指示压力、燃烧始点、最大气缸压力和最大压力升高率及对应相位等参数的波动与缸间差异,并对平均指示压力缸间差异进行统计分析。李兴虎和蒋德明、沈惠贤等^[19]分析比较了火花着火发电机循环变动的评价方法,并提出了用各个曲轴转角下的压力变动率曲线表示压力循环变动的方法。其结果表明,平均指示压力的标准差及变动率是评定内燃机压力循环变动的最佳参数;各个曲轴下的压力标准差及变动率曲线可以清楚地表示出发动机工作过程中各个曲轴转角下的压力变动情况;进气过程中也存在压力变动,其压力变动率高于燃烧过程;燃烧过程的压力变动率存在一个峰值。尧命发^[20]等人研究了不同柴油机在不同工况下颗粒中碳粒所占的百分比,并得到了描述这种关系的数学表达式。刘巽俊等^[21]采用自行设计的柴油机排气微粒袋式采样系统,试验研究了 6110 型柴油机的微粒排放。其结果表明,在相同的运行工况下,袋式采样系统和分流稀释部分采样系统对柴油机排气微粒的测量结果具有较好的一致性,袋式采样系统可以实现分流稀释部分采样系统难以实现的变工况下排气微粒的测量。对于柴油机恒转速增转矩的变工况过程,随着转矩变化率的增大,微粒排放量逐渐增加,并且转速越低,转矩变化率对微粒排放量的影响越大。使微粒排放增加的主要因素是可溶性有机组分的增加,转矩变化率对不可溶组分的影响不明显。刘金武等^[22]提出了研究碳烟的生成和氧化历程及工作条件影响的方法。将 Surovikin 碳烟生成模型和 Nagle 碳烟氧化模型集成在 ICFDCN 源程序中构建多维模型,采用数值循环模拟的方法,根据不同的工作条件计算碳烟的生成和氧化历程。结合试验数据分析和比较进气温度、空燃比、负荷、转速和喷油提前角对碳烟生成和氧化历程的影响。其研究表明,用数值模拟的方法反映了 1137 柴油机碳烟的生成和氧化历程以及设计参数对碳烟的生成和氧化的影响规律,对柴油机的设计具有参考价值。黄荣华等^[23]在一台单缸柴油机上用 SMPS 微粒测量装置测量了不同运转条件(如转速、负荷变动、怠速运行、燃油喷射定时等)下柴油机排放微粒尺寸与浓度分布,分析了柴油机微粒排放尺寸分布和数量浓度的特征及其主要影响因素。结果表明,发动机负荷变化对微粒排放的影响较大,在各种负荷下大部分排放微粒都是碳核模式的超细或纳米尺寸微粒,而质量上以累积模式颗粒占主要部分,发动机冷机起动和怠速运行时产生的大部分排放微粒是碳核模式粒子,喷油提前角对排放微粒浓度和尺寸分布有显著影响。

1.4 本书的主要研究工作

柴油机缸内燃烧过程分析的常用数值模拟工具主要有 FIRE、Star-CD 和 KIVA。不

同的软件在不同应用领域有各自的优势,其燃烧和碳烟模型比较见表 1-1,目前 FIRE/Star-CD 自燃用 SHELL 模型,对自燃着火过程细节的描述不足,适用温度范围和当量比范围窄^[145]。KIVA 最新版本 KIVA-4 是在网格处理上有所改进,对其中的模型没有变化。2007 年 Peters 等人^[158]将 RIF 小火焰燃烧模型移植在 KIVA-3V 中,小火焰概念认为组分的数量与混合比例和耗散速率有关,但碳烟的形成速率不是混合比例和耗散的函数,所以其在计算碳烟方面有很大缺陷^[146]。2007 年 Reitz 等^[147]以 KIVA-3V 为平台,利用 SHELL 着火模型,将多步碳烟模型(MSP)移植进去,计算了碳烟的生成,但未考虑聚炔烃(C_4H_2)对碳烟的影响,PAH 氧化反应的产物是 CO_2 ,与最近试验是 CO 和 HC 的基团相矛盾。本书以 KIVA-3V 模型为基础,建立全温度范围的着火模型,全面解释柴油机着火的“S”曲线;提出新的碳烟生成机理,认为火焰中与碳粒相关的中间组分主要有 PAH($C_{10}H_8$)和聚炔烃(C_4H_2),PAH 和聚炔烃对碳烟粒子的成核起着同等重要的作用,而是 CO 和 HC 的基团。将自己的模型嵌入到 KIVA-3V 源代码中实现,为目前柴油机电控标定提供详细的预测数据。

表 1-1 目前几种 CFD 软件的燃烧和碳烟模型比较

分类 \ 软件	FIRE/Star-CD	KIVA-3V	其他人对 KIVA-3V 的改进
燃烧模型	自燃模型用 8 步反应 SHELL 模型,燃烧用一步化学反应	自燃和燃烧用一步化学反应	Peters 等的 RIF 模型
碳烟模型	FIRE 用 Magnussen-Nagle 经验模型,Star-CD 用 Tesner 的经验模型	Surovikin-Nagle 经验模型	Reitz 等的 MSP 模型

本实验室在前期对于柴油机的仿真控制进行了大量研究^[153-155],特别是对于 KIVA-3V 的源代码分析^[156],用 KIVA-3V 对 150 柴油机工作过程进行了深入的模拟计算,研究了该型号柴油机在特定工况下燃油喷射和燃烧的特性,并通过与相关试验结果对比,探讨了模拟中存在的问题及可能的原因。针对 KIVA-3V 仿真过程中复杂流场网格模型难以建立的问题,创造性地结合了 K3PREP 和 ICEM CFD 两种方法的优点,找到了无需修改 KIVA-3V 主程序源代码的通用建模方法,建立了“双卷流”燃烧系统的计算网格,解决了这一瓶颈。在后处理过程中,在探索中形成了运用 FIELDVIEW 和 TECPLOT 对 KIVA-3V 程序计算结果进行分析的成熟方法,方便地实现了计算结果的可视化,有利于对计算结果的分析理解。本人也曾在德国亚琛工业大学的工程燃烧研究所对 KIVA-3V 进行过研究,将 RIF 模型结合 KIVA-3V 程序计算过 AUDI TDI 1.9L 柴油机的多种工况燃烧以及氢气燃烧,发表过相关论文^[59,157],本书正是沿着前人的足迹,将从以下几个方面展开研究:

1) 为了实现对柴油机缸内燃烧的三维仿真,本书首先研究了其工作工程的计算模型,对缸内数值计算方法进行了分类和比较,结合结构化网格的规则以及准备计算的发

动机活塞形状,建立了本书的计算网格。详细分析了 KIVA-3V 源代码程序以及其各主要程序的调用关系,为下一步移植修改的计算模型奠定了基础。

2) 为了深入研究柴油机的着火和燃烧模型,确定了柴油的计算模型,研究重点是通过推导公式以及分析机理,计算柴油机燃烧的着火边界。通过研究,获得影响柴油机着火延迟的主要原因,探讨了柴油在初燃到稳定燃烧之间的基本路径以及相对应的计算模型,推导了着火延迟时间,分析了温度的多个解以及温度波动对燃烧过程的影响,为计算真实柴油机的着火和燃烧提供依据。本书分析了 KIVA-3V 的原计算模型,并采用准稳态近似法对柴油的湍流扩散燃烧的详细化学反应进行了简化研究;提出了以温度为主要参数的改进模型,对于不同温度阶段采用不同的化学反应机理。

3) 由于实际的碳烟生成受到空气动力学和化学动力学等因素的综合作用,为了建立更加合理、准确的计算模型就需要全面考虑各种影响因素。本书将首先分析 KIVA-3V 原计算模型,针对 KIVA-3V 原计算模型的一些不足,并结合影响 PAH 生成的最重要因素,对现有 PAH 的计算进行了修正,提出新的碳烟计算模型。

4) 为了检验修改模型的正确性,利用柴油发动机台架试验装置,并结合燃烧分析仪、碳烟粒径测试仪。利用发动机动态试验台和粒径分析系统对柴油在不同工况下微粒排放的粒径分布特征进行试验研究,通过台架试验结果验证本书修正的燃烧和碳烟模型。

第2章对用于本书的数值计算方法以及 KIVA-3V 计算软件结构进行了分析,建立了计算网格和初始边界条件。第3章首先确定柴油计算模型,对不同体系下的组分和温度方程以及着火延迟时间公式进行了推导,对不同的活化能以及温度波动进行了分析。第4章对 KIVA-3V 的原有燃烧计算模型进行了分析,提出了改进的燃烧计算模型。第5章对 KIVA-3V 原有碳烟模型进行了分析,并对其进行修正,提出了改进的碳烟计算模型。第6章对在本书中修改的计算模型和数值计算方法进行综合分析,并通过多种试验设备对所计算的发动机进行试验研究,利用试验结果对第3~5章修正的模型进行验证分析。