



上海科技大学
ShanghaiTech University

本科毕业论文（设计）

题 目: _____

学生姓名: _____

学 号: _____

入学年份: _____

所在学院: _____

攻读专业: _____

指导教师: _____

上海科技大学

年 月

二甲醚清洁燃料均质压燃燃烧数值模拟研究

摘要

均质充量压缩着火 (HCCI) 燃烧，作为一种能有效实现高效低污染的燃烧方式，能够使发动机同时保持较高的燃油经济性和动力性能，而且能有效降低发动机的 NOx 和碳烟排放。此外 HCCI 燃烧的一个显著特点是燃料的着火时刻和燃烧过程主要受化学动力学控制，基于这个特点，发动机结构参数和工况的改变将显著地影响着 HCCI 发动机的着火和燃烧过程。本文以新型发动机代用燃料二甲醚 (DME) 为例，对 HCCI 发动机燃用 DME 的着火和燃烧过程进行了研究。研究采用由美国 Lawrence Livermore 国家实验室提出的 DME 详细化学动力学反应机理及其开发的 HCT 化学动力学程序，且 DME 的详细氧化机理包括 399 个基元反应，涉及 79 个组分。为考虑壁面传热的影响，在 HCT 程序中增加了壁面传热子模型。采用该方法研究了压缩比、燃空当量比、进气充量加热、发动机转速、EGR 和燃料添加剂等因素对 HCCI 着火和燃烧的影响。结果表明，DME 的 HCCI 燃烧过程有明显的低温反应放热和高温反应放热两阶段；增大压缩比、燃空当量比、提高进气充量温度、添加 H₂O₂、H₂、CO 使着火提前；提高发动机转速、采用冷却 EGR、添加 CH₄、CH₃OH 使着火滞后。

关键词： 均质充量压缩着火，化学动力学，数值模拟，二甲醚，EGR

NUMERICAL SIMULATION OF HOMOGENEOUS CHARGE COMPRESSION IGNITION COMBUSTION USING DIMETHYL ETHER AS CLEAN FUEL

ABSTRACT

Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) combustion, as an effective combustion method to achieve high efficiency and low pollution, can enable engines to maintain high fuel economy and power performance while effectively reducing NOx and soot emissions. A significant characteristic of HCCI combustion is that the ignition timing and combustion process are primarily controlled by chemical kinetics. Based on this characteristic, changes in engine structural parameters and operating conditions significantly affect the ignition and combustion processes of HCCI engines. This paper takes the new engine alternative fuel dimethyl ether (DME) as an example to study the ignition and combustion processes of HCCI engines using DME. The research employs the detailed chemical kinetic reaction mechanism of DME proposed by the Lawrence Livermore National Laboratory in the United States and the HCT chemical kinetics program developed by them. The detailed oxidation mechanism of DME includes 399 elementary reactions involving 79 species. To account for the influence of wall heat transfer, a wall heat transfer sub-model was added to the HCT program. This method was used to study the effects of compression ratio, fuel-air equivalence ratio, intake charge heating, engine speed, EGR, and fuel additives on HCCI ignition and combustion. The results show that the HCCI combustion process of DME has two distinct stages: low-temperature reaction heat release and high-temperature reaction heat release. Increasing the compression ratio, fuel-air equivalence ratio, intake charge temperature, and adding H₂O₂, H₂, and CO advance the ignition timing; while increasing engine speed, using cooled EGR, and adding CH₄ and CH₃OH retard the ignition timing.

Key words: Homogeneous Charge Compression Ignition, chemical kinetics, numerical simulation, dimethyl ether, EGR

目 录

目录	III
第一章 绪论	1
1.1 HCCI 的数值模拟研究现状	1
1.1.1 HCCI 数值模拟模型	2
第二章 DME 均质充量压燃着火的数值模拟方法	3
2.1 数值模型构建基础	3
2.1.1 湍流燃烧建模方法	3
2.1.2 二甲醚热力学参数	3
2.1.3 网格无关性验证	4
2.1.4 气缸压力随曲轴转角变化曲线	4
2.1.5 边界层处理策略	5

第一章 绪论

随着汽车工业的发展和汽车保有量的增加, 汽车在大量消耗石油燃料的同时, 尾气排出的有害气体还严重地污染了人们赖以生存的大气环境, 实现能源与环境长期可持续发展是摆在汽车和内燃机工作者面前的重大课题。环保和能源是发动机工业需要解决的两个主要问题。目前, 随着人们对环境污染重视程度的日益提高, 各国越来越重视环境保护, 现在已制定了将 NO_x 和 PM 视为大气污染源的强化法规, 如美国加州在 1998 年生效的一项超低排放汽车法规规定汽车的 NO_x+HC 排放 <2.5g/bph-hr, PM 排放 <0.05g/bph-hr。为满足严格的排放要求, 研究人员在各个相关领域进行了大量的研究工作, 改进发动机的燃烧系统作为一个重要解决途径, 也取得了一定进展¹。

传统汽油机均质混合气, 尾气排放污染物主要包括氮氧化物 (NO_x)、碳氢化合物 (HC)、一氧化碳 (CO), 可以通过三效催化后处理加以解决, 但要达到欧 IV 及其以上标准仍存在较大困难, 且汽油机的热效率低, 在中低负荷工作时还有较大的泵气损失。柴油机热效率高, 但排气中的 NO_x 和碳烟微粒排放物 (PM) 却难以折中, 使用一种排放物减少的措施, 往往导致另一排放物的增加。由于柴油机总体上富氧燃烧, NO_x 的催化处理技术尚未成熟。汽油机和柴油机的燃烧方式都不能解决碳烟和氮氧化物生成的 trade-off 关系, 因而很难在这两种燃烧模式下通过改进燃烧来同时大量降低碳烟和氮氧化物的生成。

1.1 HCCI 的数值模拟研究现状

HCCI 发动机的着火与燃烧过程与传统的火花塞点火式和压燃式发动机有着本质的区别, 在 HCCI 发动机的着火燃烧过程中, 燃料的化学反应动力学起着至关重要的作用。因此, 相对于传统发动机数值模拟研究主要侧重于湍流混合与燃烧模型而言, HCCI 发动机燃烧模拟的焦点主要集中在燃料的反应机理和化学动力学模型上。

1.1.1 HCCI 数值模拟模型

目前 HCCI 数值模拟研究主要集中在单区、多区和多维模型上²。本节将从这三个方面分别予以介绍：

(1) 单区模型

单区模型是最简单的 HCCI 燃烧模型，它假设燃烧室内各点具有相同的热力学状态，不考虑温度、压力和组分浓度的空间分布。该模型将整个燃烧室视为一个均匀的热力学系统，通过求解质量、能量和组分守恒方程来预测燃烧过程。单区模型计算效率高，适用于参数化研究和燃烧特性分析，但由于忽略了燃烧室内温度、浓度和流动的不均匀性，无法准确预测点火时刻、燃烧持续期和排放生成。

.....

(2) 双区和多区模型

双区和多区模型在单区模型基础上发展而来，旨在考虑燃烧室内温度、浓度和反应速率的非均匀性。双区模型将燃烧室划分为未燃区和已燃区，多区模型则进一步将燃烧室划分为多个区域。这些模型通过考虑不同区域之间的质量、能量和组分交换，能够更准确地描述 HCCI 燃烧过程中的温度梯度和反应速率差异，从而提高燃烧参数预测精度。

.....

(3) 多维模型

多维模型（如 CFD 模型）是 HCCI 燃烧模拟中最详细的模型，它通过求解三维 Navier-Stokes 方程、能量方程、组分输运方程和湍流模型，能够完整描述燃烧室内流动、传热、传质和化学反应过程。多维模型可以考虑燃烧室几何形状、进气流动、湍流混合、壁面传热等复杂因素，提供最全面的燃烧信息，但计算成本极高，通常用于机理研究和特定工况分析。

.....

第二章 DME 均质充量压燃着火的数值模拟方法

2.1 数值模型构建基础

本文采用化学反应动力学与 CFD 耦合框架，基于 OpenFOAM 平台实现多维数值模拟。计算域采用轴向长度 120mm、径向直径 60mm 的圆柱形燃烧室结构，网格划分满足 $dy/dx < 0.5$ 的亚网格精度要求。壁面采用无滑移边界条件，入口速度设置为 5m/s 对应湍流强度 $Tu = 2.5\%$ 。化学反应机理选用 San Diego 详细甲烷氧化机理，包含 54 组元与 325 步基元反应。

2.1.1 湍流燃烧建模方法

采用涡耗散概念 (EDC) 模型处理湍流火焰面，结合有限速率/漩涡耗散 (FRFM) 方法实现化学时间尺度与湍流涡团寿命的动态耦合。着火延迟期通过 Arrhenius 公式预测：

$$\tau_{ign} = A \exp \left(\frac{E_a}{RT} \right) \quad (2.1)$$

其中指前因子 $A = 1.2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, 活化能 $E_a = 58.7 \text{ kJ/mol}$, 气体常数 $R = 8.314 \text{ J/(mol \cdot K)}$ 。

2.1.2 二甲醚热力学参数

本文中涉及二甲醚的部分热力学参数如下表所示。若表题允许下页接写，接写时表题省略，表头应重复书写，并在右上方写“续表 xx”。

表 2.1 二甲醚相关热力学参数

组分	$H_f(\text{kcal/mol})$	$S_f(\text{kcal/mol})$	$C_p(\text{kcal/mol})$
A1	100	100	100
A2	100	100	100
A3	100	100	100
A4	100	100	100

接下页...

续表 2.1

组分	H_f (kcal/mol)	S_f (kcal/mol)	C_p (kcal/mol)
A5			
A6			
A7			
A8			

2.1.3 网格无关性验证

通过对比 3 套不同密度的非结构化网格（粗网格：45 万单元，中网格：120 万单元，细网格：300 万单元），发现当量比分布的相对误差在 $\Delta\phi < 0.015$ 范围内保持稳定。最终选择中网格方案，在保持计算效率的同时确保湍流涡团结构的准确捕捉。

2.1.4 气缸压力随曲轴转角变化曲线

每幅插图应有图序和图题，全文插图可以统一编序，也可以逐章单独编序，图序必须连续，不得重复或跳缺。图序和图题写在图的下方居中，五号宋体加黑居中。

下面展示一张气缸压力随曲轴转角变化的曲线图（图2.1）：

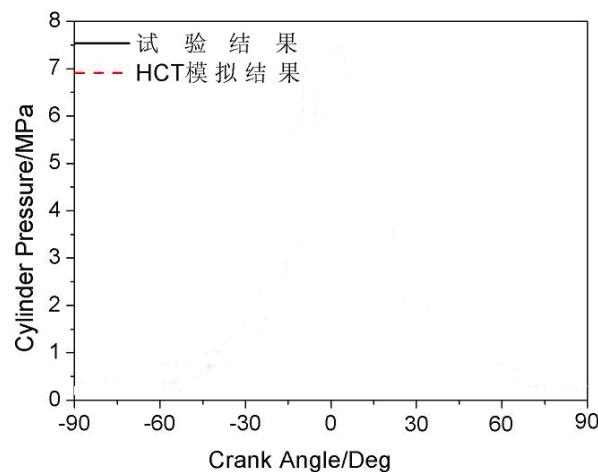


图 2.1 气缸压力随曲轴转角变化的曲线

注：黑色实线-实验测量值；红色虚线-EDC 模型预测；蓝色点线-FRFM 模型预测。

此图展示了试验结果与 HCT 模拟结果的对比，横坐标为曲轴转角（单位： $^{\circ}$ CA），纵坐标为气缸压力（单位：MPa）。从图中可以看出，当 $\phi = 0.4$ 时最大爆发压力达到 4.2MPa，较柴油机典型值降低约 18%。

2.1.5 边界层处理策略

采用增强壁面函数法(EWF)处理近壁面流动，设置 y^+ 值小于5的粘性底层区域。表2.2列出了关键边界参数，其中壁面温度采用绝热边界条件 $T_w = 600K$ ，进气温度设定为320K以满足自燃条件。

表 2.2 主要计算边界条件

参数	数值	单位	备注
气缸直径	60	mm	直喷式燃烧室
压缩比	18:1	-	高增压设计
喷射压力	60	MPa	共轨喷射系统
环境压力	95	kPa	海拔 2000m 工况

参考文献

- [1] 陈登原. 国史旧闻: 第 1 卷[M]. 北京: 中华书局, 2000: 29.
- [2] 李炳穆. 理想的图书馆员和信息专家的素质与形象[J]. 图书情报工作, 2000(2): 5-8.

致谢

（正文内容）