

微型动力装置内掺氢甲烷燃烧特性

禹莉莉,王 谦,黄 蓉,赵 岩,柏 金

(江苏大学 能源与动力工程学院,江苏 镇江 212013)

摘要:针对微型动力装置存在的燃烧不稳定问题,研究了甲烷掺氢在圆柱型微燃烧室内的燃烧特性。确定了甲烷掺氢燃烧的空间气相化学反应机理,建立了自由活塞动力装置三维立体模型。在试验基础上,基于Fluent软件,数值模拟了甲烷掺混氢气和空气的燃烧过程,研究了掺氢比对微压燃着火界限、着火时刻、着火燃烧过程以及临界压燃初动能等的影响,分析了不同掺氢比条件下混合燃料的燃烧特性。研究表明:当物质的量比为0.5时,掺入氢气可拓宽压燃气体着火界限,提高着火燃烧可靠性,使着火时刻提前。因氢气热值远低于甲烷热值,随掺氢比增大,活塞做功能力减小。当掺氢比为10%~20%时,装置具有稳定的燃烧性能和高做功能力。

关键词:掺氢甲烷;微燃烧室;均质压燃;掺氢比;数值模拟;燃烧特性

中图分类号:TK46*3;TK431

文献标志码:A

0 引言

随着传感器、微小型飞行器以及各种便携式装置不断发展,作为其动力源的微型动力装置也逐渐成为国内外研究热点。与传统的锂电池相比,燃用碳氢燃料的微型动力装置不但体积小、质量轻、可以长时间持续供能,而且在高能量密度方面表现突出,其能量密度有望突破100 kW/kg,因此,被称作动力机械发展的第4个里程碑^[1]。微型动力装置作为微机电系统和便携式移动装置的核心部件,其关键问题是如何实现其内部高效稳定的燃烧过程。

文献[2-3]最早提出了微型自由活塞发动机的概念,对微型自由活塞发动机单次压缩着火进行了试验研究。文献[4-5]以试验为基础,建立了自由活塞动力装置单次冲击压缩着火模型,并在此模型基础上进行了相关参数研究,获得了影响均质预混合气燃烧特性的主要因素。但上述研究中所建模型为零维模型。

目前,对常规尺度燃烧过程的研究表明:燃料的相互掺混可以大大改善碳氢燃料的燃烧特性,实现稳定燃烧。文献[6]通过对甲烷、氧气、空气的混合燃烧数值模拟得出:当增加氢气浓度时,H、O、OH这3种中间自由基所占的百分比会随之升高,而甲烷的中间产物CH₂O、CH₃CHO却逐渐减少,甲烷的氧化反应向低碳反应方向进行。文献[7]利用化学反应动力学机理,研究了甲烷-空气预混火焰添加氢气的着火和燃烬特性,得出甲烷火焰中少量氢气的存在不仅可降低甲烷的着火温度,而且可以显著增大燃烧速率,缩短燃烬时间。因此,对混合燃料燃烧过程的研究具有重要的理论价值和应用价值。文献[8]通过试验和数值模拟,研究了加氢和蒸汽对甲烷-空气预混火焰层流燃烧速度的影响。在微尺度燃烧领域,文献[9-12]对微型圆管内低浓度氢气甲烷混合气在铂表面的催化氧化进行了数值分析,发现掺入氢气可降低甲烷氧化反应的起始温度和着火温度,而且由于氢气在燃烧过程中消耗氧气,可为甲烷的反应提供必需的空位活性中心,促进甲烷的催化氧化。文献[13]发现氢气的加入可以明显提高甲烷的层流燃烧速度。文献[14]则对平板式微型直通道内掺氢甲烷的催化燃烧进行了二维数值模拟,模拟结果表明:加入氢气可减少着火时间,提高燃烧稳定性,并且伴随氢气的增多,H、OH、C(s)的物质的量分数增加。但以上对于掺氢甲烷的燃烧性能研究都是稳态研究,并没有进行瞬态研究。

基金项目:国家自然科学基金项目(51476071)

作者简介:禹莉莉(1987-),女,山东寿光人,硕士生;王谦(1968-),男,江苏镇江人,教授,博士,博士生导师,主要研究方向为热力机械燃烧理论与技术、微尺度燃烧与微动力系统、新能源利用等。

收稿日期:2018-01-09

因此,本文建立自由活塞动力装置的三维立体模型,对微燃烧室掺氢甲烷的燃烧过程进行瞬态研究。与常规尺度的燃烧状况不同,微型动力装置的发展面临一些问题^[15]:燃烧室体积急剧减小,面容比急剧增大,燃烧条件受限制;微燃烧室预混合气体驻留时间短,燃烧不充分以及微小型燃烧室内燃烧不稳定。碳氢燃料中掺氢是改善其燃烧性能的一种方法,因此,本文采用数值模拟的方法,对微型均质充量压燃(homogeneous charge compression ignition, HCCI)自由活塞动力装置内甲烷掺氢的燃烧过程进行研究,分析不同掺氢比对微压燃着火界限、着火时刻、着火燃烧过程以及临界压燃初动能等的影响,从而为微型动力系统实现稳定的燃烧性能和高动力输出性能提供理论依据。

1 计算模型的建立与验证

1.1 计算对象及网格划分

与传统发动机不同,微自由活塞动力装置在工作时,自由活塞依靠微燃烧室内气体燃烧特性进行控制。本文将微自由活塞动力装置计算区域简化为一个圆柱体,主要由自由活塞和微燃烧室组成,物理模型如图 1 所示。图 1 中: m 为自由活塞质量; $T_i(x, y, z)$ 、 $P_i(x, y, z)$ 、 $Y_{ni}(x, y, z)$ 和 V_i 分别是微燃烧室内温度、压力、各组分浓度以及微燃烧室体积; P_∞ 、 T_∞ 分别为环境压力和环境温度。模拟自由活塞压缩缸内混合气着火燃烧膨胀过程。为简化整个运动过程,自由活塞受大气压力与燃气压力作用,忽略摩擦力。自由活塞运动方程^[16]为:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = (p - P_\infty) A, \quad (1)$$

其中: p 为燃烧室内气体绝对压力; A 为活塞横截面积。

计算中,采用 Fluent 前处理软件 Gambit 对图 1 所示的计算对象进行网格划分,由于其结构简单,故采用结构化网格。考虑到微型燃烧室的结构对称性,本文模型对 1/36 网格进行模拟计算。计算区域初始网格模型如图 2 所示,在靠近微燃烧室底部位置对网格进行加密处理(微燃烧室底部为化学反应的主要发生区域)。

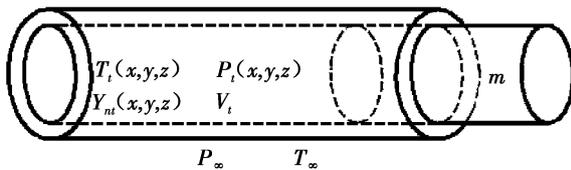


图 1 微自由活塞动力装置物理模型

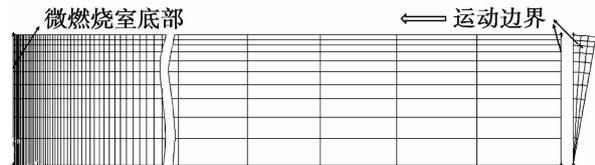


图 2 计算区域初始网格模型

微自由活塞动力装置中燃烧室底部不施加任何机械载荷及约束,自由活塞的运动过程只由微燃烧室内混合气燃烧状态及其自身惯性决定。活塞运动边界不施加任何外力,只有摩擦力,但由于摩擦力相对较小,在计算过程中可以忽略不计。由于活塞的运动规律难以预先给出,要想获得自由活塞的运动规律,必须通过每一步获取此步运算之后的缸内压力,然后根据缸内压力数据算出作用在自由活塞上面的力,并预测下一步活塞运动。因此,选择 Dynamic Layering 方式实现本文模型动网格的计算,并且通过编译用户自定义 UDF 文件定义了自由活塞(运动边界)的运动规律。

1.2 模型建立的方法

上述物理模型未考虑壁面传热的影响,以及自由活塞与微燃烧室壁面间隙混合气的影响。计算时的基本控制方程如下:

质量守恒方程,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = s_m, \quad (2)$$

其中: t 为时间; x_i 为笛卡尔坐标($i = 1, 2, 3$); u_i 为流体在 x_i 方向的绝对速率; ρ 为流体密度; s_m 为质量产生源。

动量守恒方程,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i - \tau_{ij}) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + s_i, \quad (3)$$

其中: τ_{ij} 为应力张量; s_i 为动量产生源相。

能量守恒方程,

$$\rho \frac{de}{dt} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + s_h, \quad (4)$$

其中: e 为单位质量流体所具内能; q_i 为 x_i 方向的能量通量; s_h 为能量产生源。

考虑到微燃烧室内压力、温度以及自由活塞运动边界的相互耦合, 本文采用动网格外部导入自定义UDF的方式。将反应机理通过 import 接口导入, 与压缩着火燃烧过程相耦合。湍流模型采用重整化群(re-normalization-group, RNG) $k-\varepsilon$ 模型和压力的隐式分割算法(pressure implicit split operator, PISO)。为了保证计算精度, 计算时间步长设为 0.000 2 ms。

1.3 甲烷掺氢燃烧反应机理

气相反应机理采用文献[17]中甲烷掺氢燃烧的详细化学反应机理, 包括 16 种组分和 35 个化学反应, 与本研究中的化学反应吻合。

1.4 模型验证

为验证本模型的正确性, 将数值模拟结果与试验结果进行了对比分析。图 3 为微自由活塞动力装置试验示意图。

图 4 为由该试验装置拍摄得到的一组气体完全燃烧的试验图像, 压缩比为 40.7, 燃烧室直径为 (3.000 ± 0.002) mm, 自由活塞长度为 (15.000 ± 0.005) mm, 自由活塞质量为 0.83 g, 自由活塞可压缩行程约为 6.6 mm。自由活塞和微燃烧室内壁面配合间隙小于 $5 \mu\text{m}$ 。燃料二甲醚和氧气均匀混合后充入微燃烧室, 二甲醚与氧气物质的量比为 0.2, 微燃烧室预热初始温度 300 K, 自由活塞初始速度为 26.1 m/s, 对应的压缩比为 40.7。

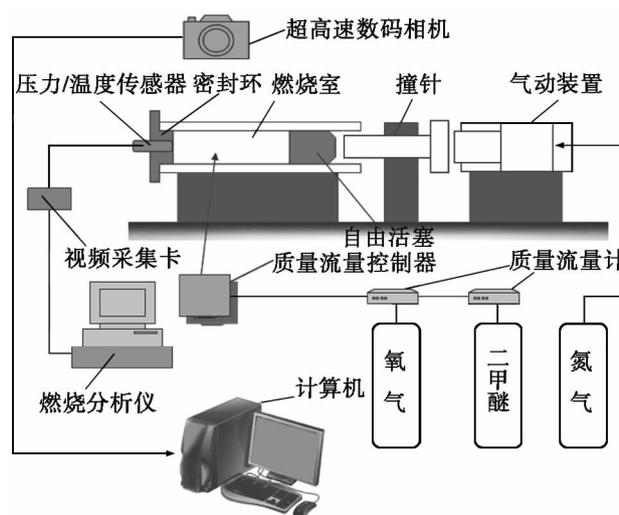


图 3 微自由活塞动力装置试验示意图



图 4 气体压缩着火试验图像(压缩比为 40.7)

数值模拟工况与试验工况初始条件相同, 微燃烧室长度为 35 mm, 直径为 3 mm, 微燃烧室内初始温度 300 K, 初始压力 0.1 MPa, 物质的量比为 0.5, 自由活塞初始速度 30 m/s, 微燃烧室内发生了压缩着火现象。试验情况、数值模拟无泄漏情况以及数值模拟泄漏情况的自由活塞位移曲线对比如图 5 所示, 试验情况自由活塞位移曲线由试验照片计算处理而得, 另外两条曲线基于本模型计算而得。

通过对图 5 中的自由活塞位移曲线对比分析可得:试验情况与数值模拟泄漏情况吻合良好,而对于数值模拟无泄漏情况,由于微燃烧室内壁面与自由活塞之间不考虑泄漏的影响,因此,自由活塞返回末速度较大,数值模拟位移曲线斜率变陡。图 5 从试验角度验证了本模型的正确性,为后续掺氢甲烷燃烧特性的数值模拟奠定了理论基础。

1.5 微型动力装置几何参数与数值计算初始条件

微型动力装置几何参数与数值计算初始条件如表 1 所示。假定自由活塞与微燃烧室之间没有泄漏间隙。

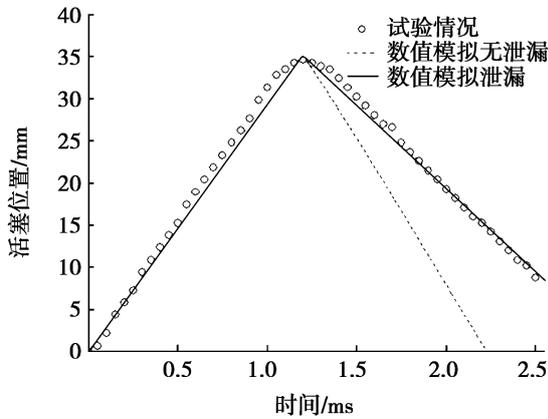


图 5 3 种情况自由活塞位移曲线对比

表 1 微型动力装置几何参数与数值计算初始条件

参数	数值
初始温度 T_0 / K	300
初始压力 P_0 / Pa	101 325
自由活塞质量 m / g	1
自由活塞初始速度 $v_0 / (m/s)$	16, 17
燃料	CH_4, H_2
燃烧室底面初始温度 T_0 / K	300
物质的量比 ϕ	0.5
燃烧室长度 L / mm	20
自由活塞直径 d_1 / mm	3
计算步长 h / ms	0.000 2

2 计算结果与分析

为方便讨论,将甲烷燃料的掺氢比定义为:

$$\alpha = \frac{v_{H_2}}{v_{H_2} + v_{CH_4}}, \quad (5)$$

其中: α 为掺氢比; v_{H_2} 为混合燃料中氢气的体积; v_{CH_4} 为混合燃料中甲烷的体积。

从式(5)可以看出:掺氢比为氢气在混合燃料中的体积分数。实际操作时,将部分甲烷替换成相同体积的氢气,故燃料的总体积保持不变,考虑到同等体积的氢气与甲烷相比只消耗一半的氧气,因此,燃料替换之后仍能保证混合燃料得到充分的燃烧。

2.1 甲烷掺氢对压燃着火界限的影响

图 6 为不同掺氢比下压缩过程中 H_2O_2 摩尔分数变化曲线,自由活塞初始速度为 16 m/s。根据文献[18]提出的方法, H_2O_2 浓度达到最大时可以作为碳氢燃料的着火点。图 7 为不同掺氢比下压缩过程中 CH_4 摩尔分数变化曲线。由图 6 和图 7 可知:掺氢比 α 为 0% 时, H_2O_2 摩尔分数只是升高, H_2O_2 并未分解, CH_4 几乎未被分解,完全着火现象并未发生。而在相同初始条件下,当掺氢比分别为 10%、20% 和 30% 时, H_2O_2 摩尔分数都呈现出先升高后立即下降的趋势,说明这 3 种情况下都发生了着火现象。这是因为氢气 H—H 共价键的键能远远小于甲烷 C—H 键的键能,氢气的点火能量小,在同等条件下比甲烷更容易着火。一方面,氢气着火后火焰传播速度快,可点燃未燃烧的甲烷;另一方面,氢气迅速燃烧放出的热量又可以加速未燃甲烷的着火和燃烧。随着掺氢比的增大,氢气体积分数增加,反应过程中 H^+ 增多,促进了 H_2O_2 的生成, H_2O_2 摩尔分数最大值提前,即 CH_4 燃烧时间提前。综上所述:甲烷中添加氢气,可降

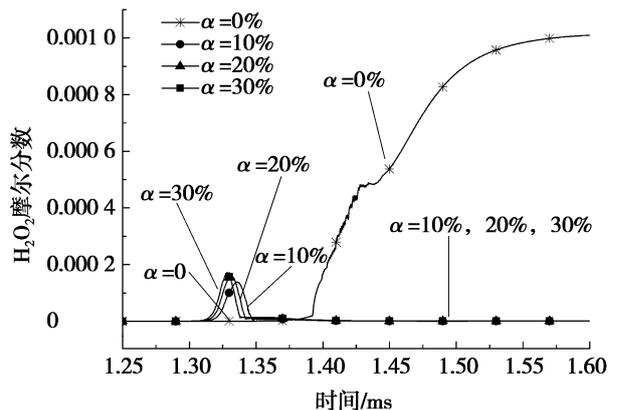


图 6 不同掺氢比下压缩过程中 H_2O_2 摩尔分数变化曲线

低混合燃料的压燃着火界限,使着火时刻提前,是一种有效提高着火性能的方法。

2.2 甲烷掺氢对着火燃烧过程的影响

根据前面的分析,加入一定量的氢气可大大改善燃烧性能。为进一步分析掺氢的实际效果,对不同掺氢比混合燃料的燃烧过程进行了对比,分析了甲烷加氢对压缩着火过程微燃烧室内温度、压力、压缩比、自由活塞末速度变化等的影响。计算时,初始物质的量比设定为 0.5,自由活塞初始速度为 17 m/s,掺氢比为 0% ~ 30%,计算过程中也保证了甲烷和氢气的充分燃烧。

图 8 为不同掺氢比下压缩过程中微燃烧室内温度变化曲线。从图 8 中可以看出:当掺氢比分别为 0%、10%、20% 和 30% 时,温度都有一个急剧升高然后下降的过程,发生了着火燃烧^[19]。随着掺氢比的增大,微燃烧室内最高温度略有下降,燃烧过程最高温度持续时间有所增加,这是因为氢气的热值低于甲烷的热值,燃烧相同体积的氢气比燃烧相同体积的甲烷放出的热量少。

图 9 为不同掺氢比下压缩过程中微燃烧室内压力变化曲线。由图 9 可知:当掺氢比分别为 0%、10%、20% 和 30% 时,微燃烧室内压力变化都呈现了陡升过程,发生了压缩着火现象。甲烷中加入氢气以后,达到最高压力的持续时间有所增加,即甲烷中掺入氢气可以缓和气体着火燃烧的爆震现象,使得压缩着火燃烧变得更稳定可靠。同时,微燃烧室内压燃着火的时刻明显提前,这也与前面得出的结论一致。

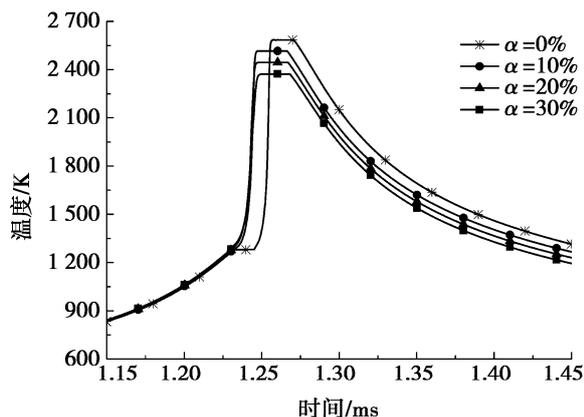


图 8 不同掺氢比下压缩过程中微燃烧室内温度变化曲线

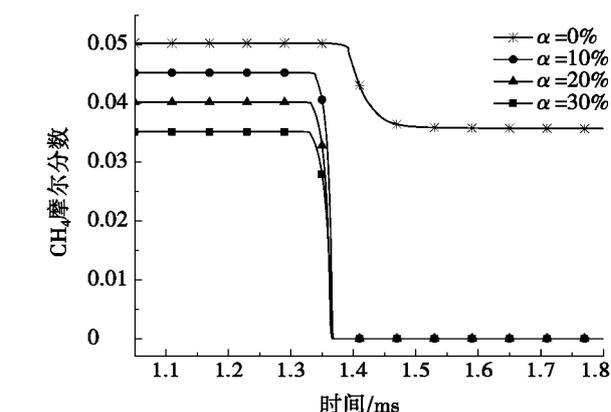


图 7 不同掺氢比下压缩过程中 CH_4 摩尔分数变化曲线

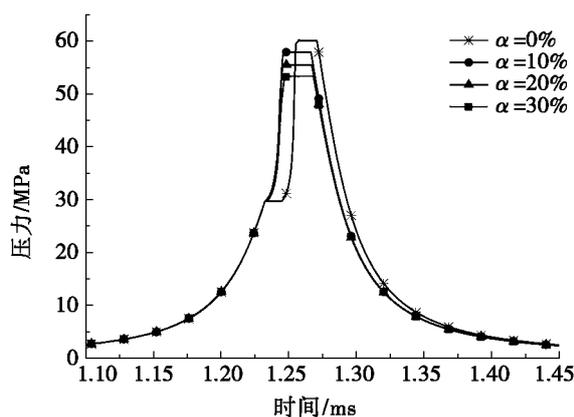


图 9 不同掺氢比下压缩过程中微燃烧室内压力变化曲线

图 10 为不同掺氢比下自由活塞速度变化曲线。当掺氢比分别为 0%、10%、20% 和 30% 时,自由活塞的返回速度比初始速度均有明显增大,说明都发生了着火燃烧。随着掺氢比的增大,活塞返回末速度逐渐减小,这是因为氢气的热值只有甲烷热值的 1/3,燃烧过程中放出的热量较少。

图 11 为不同掺氢比下 $\cdot\text{OH}$ 摩尔分数变化曲线。无论掺氢比大小, $\cdot\text{OH}$ 的摩尔分数变化趋势是一致的,在化学反应均未进行时, $\cdot\text{OH}$ 的摩尔分数都为 0。而一旦混合燃料着火燃烧,伴随着一系列基元反应的发生, $\cdot\text{OH}$ 的摩尔分数开始发生剧烈变化,在较小的范围内达到最高值。随着反应的进行, $\cdot\text{OH}$ 与其他中间产物继续反应,并最终生成 H_2O ,其摩尔分数随后逐渐降低,直至反应结束。而且随着掺氢比的增大, $\cdot\text{OH}$ 摩尔分数的最大值不断减小,但达到最大值的持续时间有所增加。结合图 8 可知:大量 $\cdot\text{OH}$ 参与的反应释放的热量导致燃烧室内的温度迅速达到最高值。 $\cdot\text{OH}$ 具有稳定火焰的作用^[20-21],结合前面的分析得出:甲烷中掺入一定比例的氢气可使燃烧火焰更加稳定。

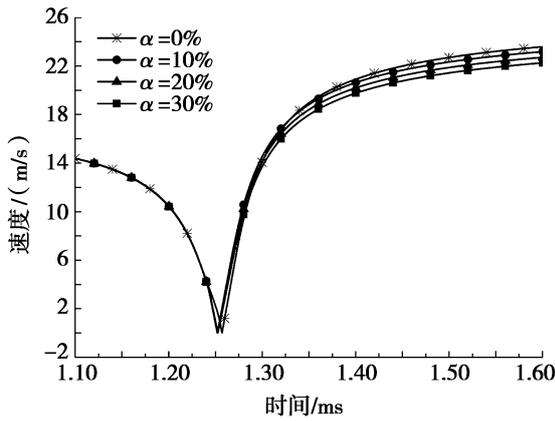


图 10 不同掺氢比下自由活塞速度变化曲线

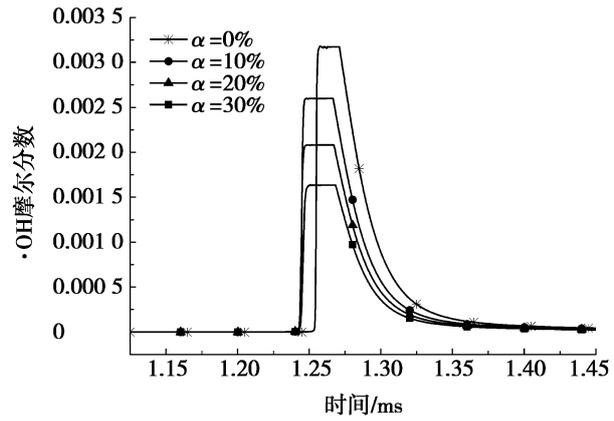


图 11 不同掺氢比下 ·OH 摩尔分数变化曲线

2.3 甲烷掺氢对做功能力的影响

表 2 为不同掺氢比下自由活塞单次循环可对外输出的功。掺氢比为 0% 时,自由活塞单次循环可对外输出 0.174 5 J 的功。随着掺氢比的增大,自由活塞对外所做的功略有减小,当掺氢比为 30% 时,自由活塞单次循环可对外输出的功只有 0.138 3 J。另外,掺氢比为 0%、10%、20% 和 30% 时,对应的活塞单次压缩冲程时间分别为 2.009 ms、2.024 ms、2.040 ms 和 2.056 ms,随着掺氢比的增大,活塞单次压缩冲程需要的时间有所增加,即掺氢不利于微自由活塞动力装置做功能力的提高。

表 2 不同掺氢比下自由活塞单次循环可对外输出的功

掺氢比 $\alpha/\%$	0	10	20	30
可输出功率 W/J	0.174 5	0.162 1	0.150 1	0.138 3

由以上分析可知:在保证甲烷和氢气充分燃烧的情况下,甲烷中加入一定量的氢气可以拓宽混合燃料的压燃着火界限,改善着火性能,提高着火燃烧的稳定性,但由于氢气的热值远低于甲烷的热值,导致活塞做功能力降低。因此,只有选择恰当的掺氢比,才能有利于微型 HCCI 自由活塞动力装置的工作过程。在本研究中,当掺氢比为 10%~20% 时,既能优化装置燃烧性能,又不会导致做功能力太低,此时系统性能最优。

3 结论

在微型 HCCI 自由活塞动力装置内,氢气的加入具有拓宽混合燃料的压燃着火界限的作用,并可改善着火性能,提高着火燃烧的稳定性。随着掺氢比的增大,掺氢甲烷燃烧提前,燃烧过程更稳定可靠;但因氢气热值远低于甲烷热值,导致掺氢后活塞做功能力降低,所以只有恰当的掺氢比才能在拓宽燃烧界限和提高燃烧过程可靠性的同时,保证微动力装置的做功能力要求。

参考文献:

[1] SHARMA T K, RAO G A P, MURTHY K M. Homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines; a review[J]. Archives of computational methods in engineering, 2016, 23(4): 623 - 657.

[2] AICHLMAYR H T, KITTELSON D B, ZACHARIAH M R, et al. Miniature free-piston homogeneous charge compression ignition engine-compressor concept-part I: performance estimation and design considerations unique to small-dimensions [J]. Chemical engineering science, 2002, 57(19): 4161 - 4171.

[3] AICHLMAYR H T, KITTELSON D B, ZACHARIAH M R, et al. Miniature free-piston homogeneous charge compression ignition engine-compressor concept-part II: modeling HCCI combustion in small scales with detailed homogeneous gas phase chemical kinetics[J]. Chemical engineering science, 2002, 57(19): 4173 - 4186.

[4] AICHLMAYR H T, KITTELSON D B, ZACHARIAH M R. Micro-HCCI combustion; experimental characterization and development of a detailed chemical kinetic model with coupled piston motion[J]. Combustion and flame, 2003, 135(3): 227 - 248.

- [5] YAN Y F, TANG W M, ZHANG L, et al. Thermal and chemical effects of hydrogen addition on catalytic micro-combustion of methane-air[J]. *International journal of hydrogen energy*, 2014, 39(4):1864 – 1873.
- [6] WANG J H, HUANG Z H, TANG C L, et al. Numerical study of the effect of hydrogen addition on methane-air mixtures combustion[J]. *International journal of hydrogen energy*, 2009, 34(2):1084 – 1096.
- [7] 钟北京, 傅维标. 甲烷火焰中氢气对着火与燃尽的影响[J]. *燃烧科学与技术*, 2001, 7(2):194 – 198.
- [8] BOUSHAK I T, DHU Y, SELLE L, et al. Effects of hydrogen and steam addition on laminar burning velocity of methane-air premixed flame; experimental and numerical analysis[J]. *International journal of hydrogen energy*, 2012, 37(11):9412 – 9422.
- [9] 吴晟. 微细尺度下甲烷催化着火及部分氧化特性研究分析[D]. 重庆:重庆大学, 2013.
- [10] WANG R R, RAN J Y, DU X S, et al. The influence of slight protuberances in a micro-tube reactor on methane/moist air catalytic combustion[J]. *Energies*, 2016, 9(6):421.
- [11] 唐玮旻. 微细尺度下掺氢对甲烷燃烧及熄火特性影响的数值研究[D]. 重庆:重庆大学, 2015.
- [12] 陈俊杰, 王华, 刘志超, 等. 微型自由活塞发动机发电系统催化燃烧特性研究[J]. *中国电机工程学报*, 2014, 34(8):1268 – 1275.
- [13] RIDHA E, MERYEM A, RACHID S. Numerical study of laminar flame velocity of hydrogen-enriched methane flames using several detailed reaction mechanisms[J]. *Arabian journal for science and engineering*, 2017, 42(5):1707 – 1713.
- [14] YAN Y F, TANG W M, ZHANG L, et al. Numerical simulation of the effect of hydrogen addition fraction on catalytic micro-combustion characteristics of methane-air[J]. *International journal of hydrogen energy*, 2014, 39(4):1864 – 1873.
- [15] SHARMA T K, RAO G A P, MURTHY K M. Homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines; a review[J]. *Archives of computational methods in engineering*, 2016, 23(4):623 – 657.
- [16] 林继铭, 徐照平, 闫皓. 自由活塞发动机的活塞运动规律优化与试验[J]. *农业工程学报*, 2015, 31(6):82 – 88.
- [17] LI J, CHOU S K, YANG W M, et al. A numerical study on premixed micro-combustion of CH₄-air mixture; effects of combustor size, geometry and boundary conditions on flame temperature[J]. *Chemical engineering journal*, 2009, 150:213 – 222.
- [18] CURRAN H J, GAFFURI P, PITZ W J, et al. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation[J]. *Combustion and flame*, 1998, 114(1/2):149 – 177.
- [19] WANG Q, DAI L M, WU K, et al. Study on the combustion process and work capacity of a micro free-piston engine[J]. *Journal of mechanical science and technology*, 2015, 29(11):4993 – 5000.
- [20] ZARVANDI J, TABEJAMAAT S, BAIGMOHAMMADI M. Numerical study of the effects of heat transfer methods on CH₄/(CH₄ + H₂)-AIR pre-mixed flames in a micro-stepped tube[J]. *Energy*, 2012, 44(1):396 – 409.
- [21] BAIGMOHAMMADI M, SADEGHI S S, TABEJAMAAT S, et al. Numerical study of the effects of wire insertion on CH₄ (methane)/AIR pre-mixed flame in a micro combustor[J]. *Energy*, 2013, 54(5):271 – 284.