

氢燃料内燃机 NO_x 排放特性及机理

朱海荣, 耿泽伟, 刘庆刚, 彭培英

(河北科技大学机械工程学院, 河北石家庄 050018)

摘要:为深入研究氢燃料内燃机 NO_x 的生成机理,基于 CONVERGE 软件建立了三维网格耦合详细化学反应机理的氢燃料内燃机 CFD 仿真模型,进行了氢燃料内燃机在不同负荷下的燃烧及排放特性研究。模型的仿真结果和试验数据较为吻合。结果表明,氢气浓度增大有利于提高氢燃料内燃机的效率;NO 的大量生成出现在不断升温的快速燃烧期,快速燃烧结束后 NO 总量不断减少,其缸内平均温度低于 2 200 K 时 NO 总量趋于稳定;热 NO, NNH 和 N₂O 是 NO 生成最主要的途径,其中热 NO 路径产生的 NO 排放最多,其贡献率随着负荷增大而增大。NNH 和 N₂O 路径在较低浓度时有接近 25% 的贡献率,而在燃空当量比为 1.0 时,这 2 种路径对 NO 生成的贡献率之和为负值。采用化学反应动力学方法得到了 3 种路径在不同负荷下对 NO 生成的贡献率,初步揭示了氢燃料内燃机 NO_x 生成的机理,为后续研究提供了理论参考。

关键词:内燃机工程;氢燃料内燃机;详细机理;NO_x 排放;反应路径;贡献率

中图分类号:TK464 文献标志码:A

Characteristics and mechanism of NO_x emission of hydrogen fueled internal combustion engine

ZHU Hairong, GENG Zewei, LIU Qinggang, PENG Peiyang

(School of Mechanical Engineering, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang, Hebei 050018, China)

Abstract: In order to deeply study the NO_x formation mechanism of hydrogen fueled internal combustion engine (HICE), a hydrogen fueled internal combustion engine CFD simulation model including three-dimensional gridding coupling detailed chemical reaction mechanism is built based on CONVERGE software, and the combustion and emission characteristics of hydrogen fueled internal combustion engine under different loads are researched. The simulation result is consistent with the experimental data. The simulation results show that the increasing concentration of hydrogen is beneficial to improving the efficiency of hydrogen fuel internal combustion engine. The large amount of NO generates in the rapid combustion period, the total amount of NO decreases constantly after the rapid combustion period, and the total amount of NO tends to be stable when the average temperature is below 2 200 K. NO is generated mainly through three paths including thermo NO, NNH and N₂O, and the thermo NO path contributes a large proportion of total NO emissions, whose contribution ratio increases with the increase of fuel-air equivalence ratio. NNH and N₂O contribute about 25% of total NO

收稿日期:2017-09-09;修回日期:2017-10-28;责任编辑:冯 民

基金项目:国家自然科学基金(51706058);河北省高等学校科学技术研究项目(QN2016056);河北科技大学五大平台开放基金(PT2015022)

第一作者简介:朱海荣(1979—),女,河北廊坊人,讲师,博士,主要从事内燃机燃烧、热负荷与热疲劳方面的研究。

通信作者:刘庆刚副教授。E-mail:qgliu81@163.com

朱海荣,耿泽伟,刘庆刚,等.氢燃料内燃机 NO_x 排放特性及机理[J].河北科技大学学报,2017,38(6):530-535.

ZHU Hairong, GENG Zewei, LIU Qinggang, et al. Characteristics and mechanism of NO_x emission of hydrogen fueled internal combustion engine[J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2017, 38(6): 530-535.

emissions at lower concentrations, while when fuel-air equivalence ratio is 1.0, the sum of the contributions of these two paths to NO generation is negative. The contribution ratios for NO generation of three paths under different loads are obtained using chemical reaction kinetics method, which can reveal the NO_x generation mechanism of hydrogen fuel internal combustion engine and establish the theoretical foundation for subsequent study.

Keywords: internal combustion engine engineering; hydrogen fueled internal combustion engine; detailed mechanism; NO_x emission; reaction path; contribution ratio

传统内燃机产生大量的温室气体和有害排放,对环境造成不利的影响,因而寻找低碳排放的内燃机替代燃料很有必要^[1-2]。氢气燃烧清洁且可再生,被一些研究者认为是性能较为优越的内燃机替代燃料^[3-5]。一些汽车厂商如宝马、福特、长安分别研发了氢燃料内燃机(HICE),并将其应用于汽车。示范运行的数据表明氢燃料内燃机具有较好的动力性和可靠性,而且几乎没有含碳排放^[6-10]。

NO_x 是氢燃料内燃机主要的有害排放物。研究发现,氢燃料内燃机在高负荷时会产生大量的 NO_x 排放,这是很难避免的;研究者们将 NO_x 排放归结于缸内温度的升高,并发现采用稀薄燃烧、推迟点火、废气再循环等方法都能有效地降低 NO_x 排放^[11-14]。上述研究主要由试验得到了 NO_x 排放随内燃机控制参数变化的规律,但鲜有对其生成机理的研究。

氢气在高温下的氧化是一个复杂的过程,采用化学反应动力学方法分析反应是有效的手段。本文基于已有的氢燃料内燃机试验样机建立三维网格耦合化学反应机理的 CFD 仿真模型,研究缸内燃烧和排放物生成过程,揭示氢燃料内燃机在不同负荷下的燃烧及排放生成规律。

1 方法和模型

1.1 氢燃料内燃机

用于建模的氢燃料内燃机是一台 4 缸 4 冲程自吸式火花点火发动机,每缸排量 0.50 L。内燃机的主要参数见表 1。

采用 Pro-E 软件建立内燃机的三维实体模型。为了简化计算,建模时忽略各缸进气的不一致性,最终三维实体模型仅包含单个汽缸、进排气道、氢气喷阀、气门,如图 1 所示。将实体模型以 STL 文件格式导入 CONVERGE 软件,设定不同区域的边界类型以及基础网格尺寸和加密规则,在进行仿真计算时 CONVERGE 软件会自动生成计算网格。本文设定的基础网格边长为 8 mm。汽缸内部、边界、气门区域和点火区域分别加密 2~4 级。在点火和火焰前锋面等温度压力急剧变化的区域加密 5 级,火焰区的网格边长为 0.5 mm,燃烧模拟时网格总数超过 48 万。

1.2 燃烧模型

本文采用基于仿真初始值引导化学反应机理的 SAGE 模型,燃烧机理文件自主编写并存储在工作目录,在燃烧模拟时随时调用。燃烧机理文件以 CHEMKIN 格式保存。本文选择 GRI 3.0 详细机理并对其进行简化。GRI 3.0 机理包含 69 步 H-O-N 基元反应,被研究者广泛引用并证明具有很高的精度^[15]。基于敏感系数法简化后包含 22 步可逆基元反应,以文本文件存储。其中 N-O 反应机理包含常见的热 NO 路径、NNH-NO 路径和 N₂O-NO 路径,能够较为详尽地揭示 NO 的生成过程。

化学反应机理启动的温度设置为 858 K。点火模型设置为能量释放模式。在开始点火的 0.5 °C A 内将

表 1 氢燃料内燃机主要参数

Tab.1 Main parameters of HICE

参数	取值
燃料种类	氢气
着火方式	火花点火
内燃机排量/L	1.998
燃料供给方式	进气道喷射
汽缸数	4
汽缸直径/mm	86
活塞行程/mm	82
压缩比	9.2 : 1
进气门开启角度/°C A	-368
进气门关闭角度/°C A	-128
排气门开启角度/°C A	-560
排气门关闭角度/°C A	-354

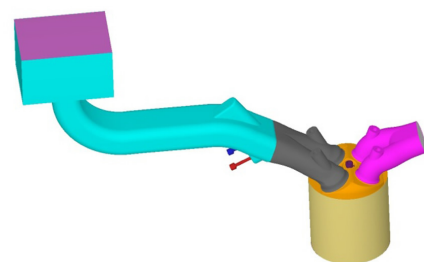


图 1 氢燃料内燃机三维实体模型

Fig.1 3-D solid model of HICE

点火能量(本文设定为 20 mJ)的 60% 释放在火花塞之间狭小区域内。在随后的 2 °CA 释放其余的点火能量,从而在局部产生高温,使化学反应机理顺利启动。软件根据自带的反应物、中间物和生成物热力学参数计算缸内的热力过程。

1.3 流动、传热、喷射模型和仿真参数设定

缸内流动状况影响火焰的传播速度,采用 RANG $k-\epsilon$ 模型计算缸内的湍流,局部流动速度等于平均速度和波动速度的叠加。将氢气的喷射设置为单位质量流量。初始参数依据经验设置,主要边界条件是:活塞温度 550 K,汽缸壁温度 450 K,汽缸盖温度 420 K。仿真步长设置为 0.01 °CA。

仿真时,采用节气门全开的方式,当燃空当量比从 0.6 增大到 1.0,选取转速为 3 000 r/min,点火提前角在 $-14^{\circ}\sim 4^{\circ}$ BTDC(before top dead center),计算热力学参数和反应基元浓度随曲轴转角的变化。

1.4 模型验证

采用仿真模型计算得到的 NO_x 排放数值和试验数据^[16]有较好的吻合度,如图 2 所示。仿真得到的 NO_x 排放略低于试验值,最大误差为 11.06%。仿真得到的燃烧速度比试验的更快,这和国外的研究成果一致,也是造成误差的主要原因。

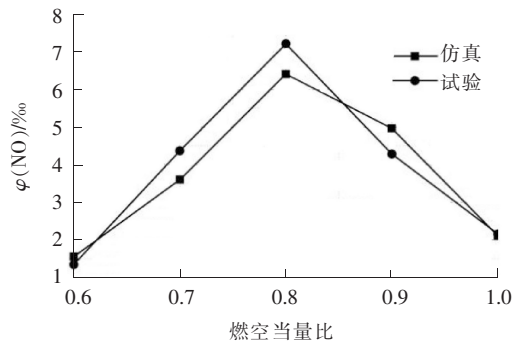


图 2 NO_x 排放仿真值和试验值的对比

Fig.2 Comparison of simulation data and experimental data of NO_x emission

2 结果与讨论

基于上述的仿真模型,仿真研究了不同燃空当量比的燃烧和排放特性。

2.1 缸内压力和温度的变化

图 3 和图 4 是不同燃空当量比下的缸内压力以及缸内平均温度的曲线。由图可知,燃空当量比为 0.6 时,最大爆发压力为 5.08 MPa,最高平均温度为 2 264 K;而燃空当量比为 1.0 时,最大爆发压力为 6.32 MPa,最高平均温度为 2 916 K。

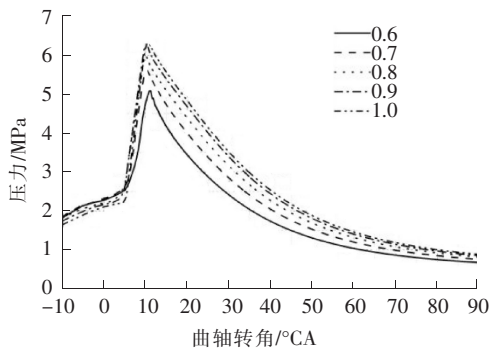


图 3 不同燃空当量比下的缸内压力

Fig.3 Pressures in cylinder at different fuel air equivalence ratios

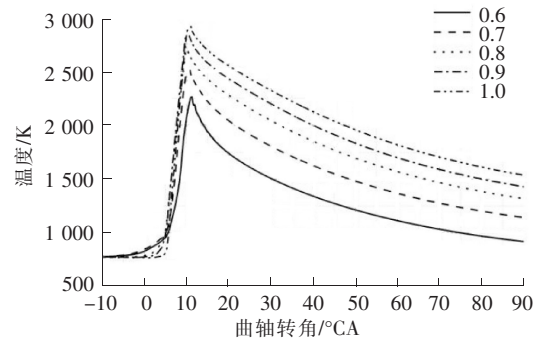


图 4 不同燃空当量比下的缸内平均温度

Fig.4 Average temperatures in cylinder at different fuel air equivalence ratios

随着燃空当量比的增大,缸内最大爆发压力和缸内平均温度的峰值持续增大,最大压力和缸内温度峰值上升也更为迅速。说明氢气浓度增大时滞燃期和燃烧持续期更短,这使得压力升高过程中缸内工质的等容度更高,有利于提高氢燃料内燃机的效率。同时,迅速地燃烧放热产生的缸内高温必然会导致大量的 NO_x 排放。

2.2 NO 的变化规律

NO_x 包含 NO , NO_2 和 N_2O 等成分,其中 NO 占主导地位。研究表明,整个高负荷区, NO 占全部 NO_x 排放的 97% 以上,是氢燃料内燃机 NO_x 排放的主要组成部分^[17]。本文主要分析 NO 的生成规律。以下通过分析火焰传播、温度变化和 NO 分布来揭示 NO 的生成过程以及产生机理。

图 5 给出了汽缸内 OH 分布随曲轴转角的变化规律。云图采用了与活塞平行和垂直的 2 个平面组合,以更好地显示浓度的空间分布。 OH 基是氢氧反应的主要中间基元,根据其浓度可知火焰的位置和强度。

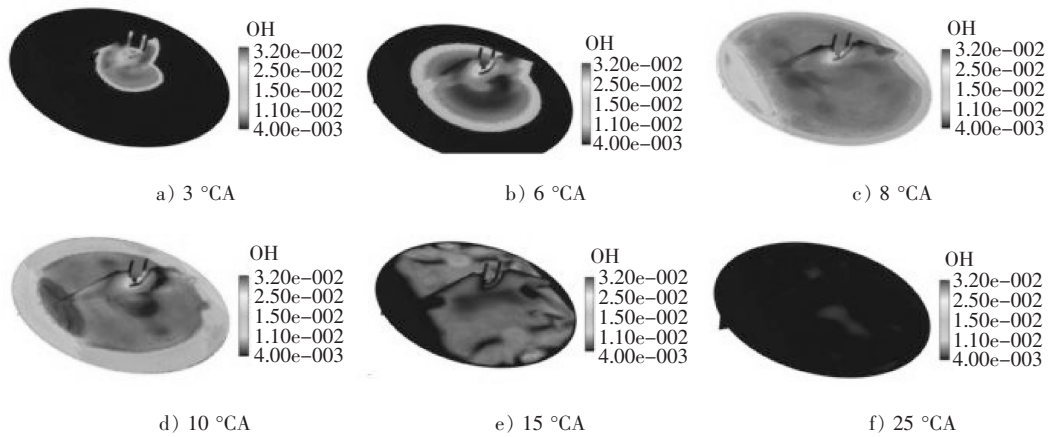


图 5 OH 分布随曲轴转角的变化

Fig.5 Variations of OH with crankshaft angle

由图 5 可知,在火焰迅速发展的快速燃烧期(3~10 °CA),火焰前锋面内的 OH 浓度随着火焰的传播不断增加,体积分数达到 3.6%,远高于其后方的已燃区。

图 6 给出了温度随曲轴转角的变化规律。由于氢气的迅速燃烧和放热,火焰前锋面内的温度也明显高于其后部的已燃区。火焰前锋面局部温度达到 3 500 K,而在其后方的已燃区,由于高温高压气体的膨胀,温度迅速降低到 2 900 K 左右。

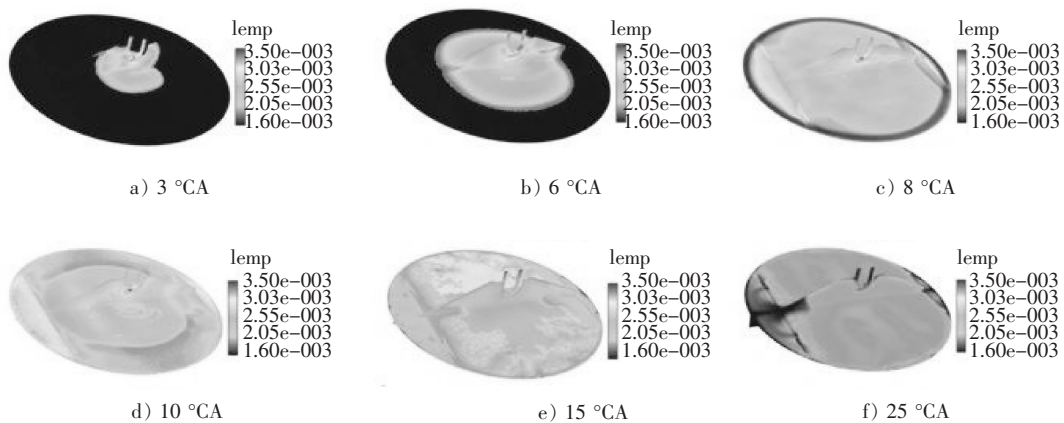


图 6 温度分布随曲轴转角的变化

Fig.6 Variations of temperature with crankshaft angle

图 7 给出了 NO 分布随曲轴转角的变化规律。高温造成了很高浓度的 NO 生成。火焰前锋面内 NO 浓度达到了极高的 9%,而在已燃区内 NO 局部浓度迅速降低至 3%。NO 对温度非常敏感,温度大幅度下降造成已经产生的 NO 部分分解。在快速燃烧结束后(10~15 °CA),由于放热基本结束,整个汽缸内充满了已燃气体,火焰前锋面消失后,极高浓度的 NO 区域消失。整个汽缸内气体逐步膨胀,温度持续降低,由于不同区域的温度差异不断减小,NO 的浓度差异减小,汽缸内各个区域的 NO 浓度都在不断降低,汽缸内的 NO 总量不断减小。

2.3 不同燃空当量比下 NO 浓度随曲轴转角的变化规律

图 8 给出了不同燃空当量比下汽缸内 NO 总体积分数随曲轴转角的变化规律。由图可知,在高负荷区,NO 的最终排放浓度均在 1.5%以上,在燃空当量比为 0.8 时,NO 最终排放浓度出现 6.424%的峰值。高负荷的 NO 排放甚至高于传统内燃机。

由图 8 可知,在不同燃空当量比下 NO 质量随曲轴变化的规律略有不同:燃空当量比为 0.6~0.7 时,汽缸内的 NO 体积分数在快速燃烧期急剧增大,在快速燃烧结束后,NO 体积分数略有下降,这说明缸内温度降低造成的 NO 分解并不显著。燃空当量比为 0.8~1.0 时,汽缸内的 NO 总量随火焰发展而急剧增大,在快

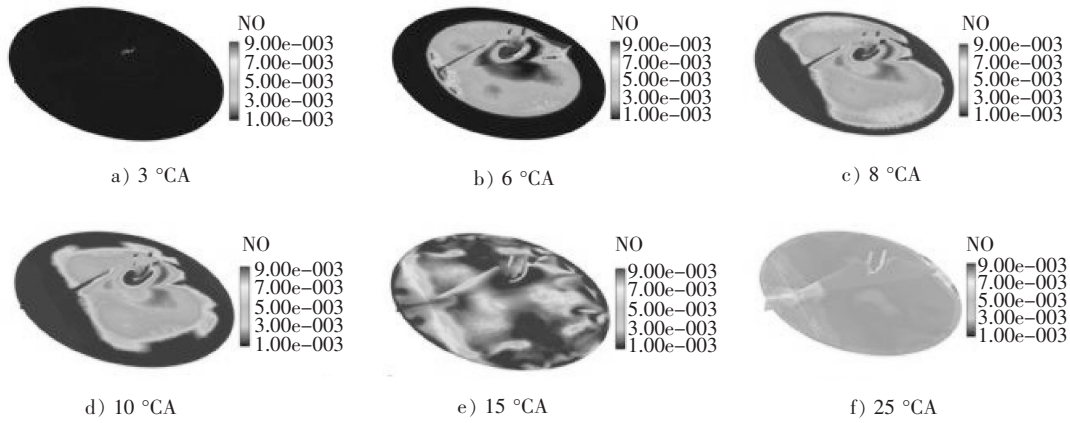


图 7 NO 分布随曲轴转角的变化
Fig.7 Variations of NO with crankshaft angle

速燃烧结束时出现很高的峰值,随即迅速下降,然后 NO 总量的下降趋势变缓,在这个区间内的 NO 分解是显著和无法忽视的。

结合图 4 分析可知,快速燃烧期结束后的 NO 分解和温度的降低紧密相关。在缸内平均温度降低至 2 200 K 时,NO 的分解接近停止,NO 体积分数基本保持不变。高浓度混合气体产生很高的燃烧温度和汽缸内平均温度,2 916 K@燃空当量比 1.0;2 264 K@燃空当量比 0.6。从缸内最高温度降低至 2 200 K 的时间增大,因而 NO 的分解更加显著。这是高负荷时快速燃烧结束后 NO 浓度的下降趋势更为明显的主要原因。

2.4 NO 生成路径及生成率

先前的研究认为,热 NO 路径、NNH-NO 路径、N₂O-NO 路径是氢燃料内燃机 NO 生成的 3 种主要路径^[18-20],在不同燃空当量比时,3 种路径的贡献率如图 9 所示。

由图 9 可知,热 NO 对排放的贡献率最高,在燃空当量比为 0.6 时其贡献率为 75.8%,而燃空当量比为 1.0 时达到了 123.9%;N₂O-NO 和 NNH-NO 的贡献也比较重要,在燃空当量比为 0.6 时,二者的贡献率之和为 24.2%,随着浓度和温度的升高,二者的贡献率降低,在燃空当量比为 1.0 时,二者的贡献率之和为-23.9%。

NO 的最终排放取决于快速燃烧的生成和温度下降的分解两种作用,N₂O-NO 和 NNH-NO 两种路径的反应速率低于热 NO 路径,其逆向反应在燃空当量比为 1.0 时进行的时间很长而逆反应开始时 NO 的浓度很高,这两种路径对 NO 的分解作用大于生成作用,因而对 NO 排放的贡献率为负值。

3 结 论

1)随着燃空当量比的增大,缸内最大爆发压力和缸内平均温度的峰值持续增大,上升也更为迅速,说明氢气浓度增大时滞燃期和燃烧持续期更短,有利于提高氢燃料内燃机的效率。

2)在快速燃烧期(3~10 °CA),火焰前锋面内的 OH 浓度和温度均明显高于其后部的已燃区,高温加快

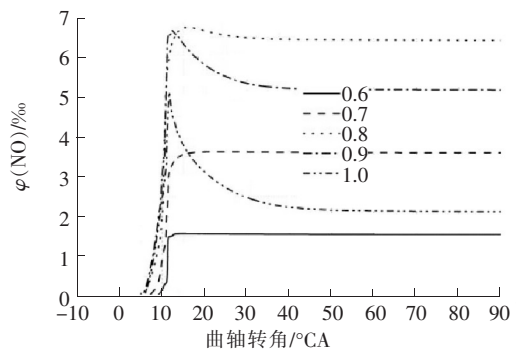


图 8 不同燃空当量比下 NO 浓度随曲轴转角的变化

Fig.8 Variations of NO with crankshaft angle at different fuel air equivalence ratios

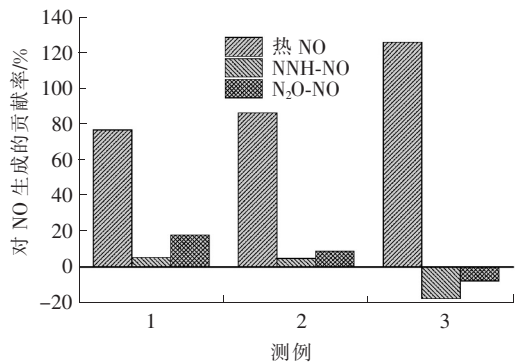


图 9 不同路径的 NO 生成贡献率

Fig.9 Contribution rate of NO generation in different pathes

了 NO 生成,火焰前锋面内 NO 浓度也达到了最大值 9%。在快速燃烧结束后(10~15 °C A),汽缸内气体逐步膨胀,温度持续降低,NO 浓度不断降低。

3)在高负荷区,NO 最终排放浓度均在 1.5%以上,燃空当量比为 0.8 时,NO 最终排放浓度出现 6.424%的峰值量。在火焰前锋面内,NO 具有极高的浓度,随着已燃区气体的膨胀和温度的降低,已燃区内 NO 的浓度也迅速降低,部分 NO 分解,降温过程越长,NO 分解越多。

4)热 NO,NNH-NO 和 N₂O-NO 等 3 种路径对最终 NO 排放的贡献率随负荷变化。热 NO 的贡献率最高,燃空当量比为 0.6 时其贡献率为 75.8%,而燃空当量比为 1.0 时达到了 123.9%,NNH-NO 和 N₂O-NO 在燃空当量比为 0.6 时贡献率之和为 24.2%,但在燃空当量比为 1.0 时的贡献率之和为负值。

本文采用化学反应动力学方法得到了 3 种路径在不同负荷下对 NO 生成的贡献率,初步揭示了氢燃料内燃机 NO_x 生成的机理。后续工作可继续在此化学反应机理下提高模型精度,以便得到更准确的 NO 生成路径及其贡献率。

参考文献/References:

- [1] 李阳阳,袁华智,蹇小平.电控汽油/CNG 两用燃料发动机氧传感器故障模拟实验[J].河北工业科技,2013,30(3):160-168.
LI Yangyang, YUAN Huazhi, JIAN Xiaoping. Simulation tests on the oxygen sensor failures of a electronically controlled gasoline/CNG flexible-fuel engine[J]. Hebei Journal of Industrial Science and Technology, 2013,30(3):160-168.
- [2] 洪汉池,林勇明,黄丁智,等.柴油机排放控制系统耐久性试验前后排放特性分析[J].河北科技大学学报,2013,34(6):584-588.
HONG Hanchi, LIN Yongming, HUANG Dingzhi, et al. Emissions and analysis of emission control system for diesel engine before and after durability test [J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2013,34(6):584-588.
- [3] VERHELST S. Recent progress in the use of hydrogen as a fuel for internal combustion engines[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2014,39:1071-1085.
- [4] 刘福水,郝利君,HEITZ PETER B. 氢燃料内燃机技术现状与发展展望[J].汽车工程,2006,28(7):621-625.
LIU Fushui, HAO Lijun, HEITZ PETER B. Technical status qua and development prospect of hydrogen IC engine [J]. Automotive Engineering, 2006,28(7):621-625.
- [5] 段俊法,刘福水,孙柏刚. PFI 氢内燃机的氢-空气混合特性[J]. 车用发动机,2014,212(3):30-32.
DUAN Junfa, LIU Fushui, SUN Baigang. Hydrogen-air mixture characteristics of PFI hydrogen internal combustion engine [J]. Vehicle Engine, 2014,212(3):30-32.
- [6] SZWABOWSKI S J, HASHEMI S, STOCKHAUSEN W F, et al. Ford hydrogen engine powered P2000 vehicle[C]// SAE 2002 World Congress & Exhibition. [S.l.]:[s.n.], 2002,2002-01-0243.
- [7] KIESGEN G, KLÜTING M, BOCK C, et al. The new 12-cylinder hydrogen engine in the 7 series: The H₂ ICE age has begun[C]// SAE 2006 World Congress & Exhibition. [S.l.]:[s.n.], 2006,2006-01-0431.
- [8] HE Ming, JIA Ziqian, LIU Fushui. Development prospect of hydrogen engine vehicles in China[C]//International Conference on Wireless Communications, Networking and Mobile Computing. [S.l.]: IEEE, 2008:1-6.
- [9] HUYSKENS P, VAN S, GOEMAERE P, et al. The technical implementation of a retrofit hydrogen PFI system on a passenger car[J]. SAE Technical Papers, 2011,2011-01-2004.
- [10] SAINE D, DIEGUEZ P, SOPENA C, et al. Conversion of a commercial gasoline vehicle to run bi-fuel (hydrogen gasoline)[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012,37:1781-1789.
- [11] DAS L M. Near-term introduction of hydrogen engines for automotive and agricultural application [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2002,29(6):479-487.
- [12] VERHELST S. A Study of the Combustion in Hydrogen Fuelled Internal Combustion Engines [D]. Belgium: Ghent University, 2005.
- [13] MA F, LIU H, WANG Y, et al. Combustion and emission characteristics of a port-injection HCNG engine under various ignition timings [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2008,33(2):816-822.
- [14] VERHELST S, VANCOILLIE J, NAGANUMA K, et al. Setting a best practice for determining the EGR rate in hydrogen internal combustion engines [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013,38:2490-2503.
- [15] SMITH G P, GOLEND D M, FRENKLACH M, et al. GRI-Mech 3.0[EB/OL]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2015-05-21.
- [16] 段俊法,刘福水,孙柏刚,等. PFI 氢燃料内燃机 NO_x 排放特性的试验研究[J]. 汽车工程,2014,36(10):1175-1179.
DUAN Junfa, LIU Fushui, SUN Baigang, et al. An experimental study on the NO_x emission characteristics of PFI hydrogen internal combustion engine[J]. Automotive Engineering, 2014,36(10):1175-1179.
- [17] KOSMADAKIS M, RAKOPOILOS D, VERHELST S, et al. CFD modeling and experimental study of combustion and nitric oxide emissions in hydrogen-fueled spark-ignition engine operating in a very wide range of EGR rates [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013,37:10917-10934.
- [18] KOSMADAKIS M, RAKOPOILOS D. Methane/hydrogen fueling a spark-ignition engine for studying NO, CO and HC emissions with a research CFD code [J]. Fuel, 2016,185:903-915.
- [19] KOSMADAKIS M, RAKOPOILOS D. Investigation of nitric oxide emission mechanisms in a SI engine fueled with methane/hydrogen blends using a research CFD code[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015,40:15088-15104.
- [20] KLIPPENSTEIN S J, HARDING L B, GLARBOTG P, et al. The role of NNH in NO formation and control[J]. Combust Flame, 2011,158(4):774-789.