

DOI: 10.16236/j.cnki.nrxj.202401004

## 异辛烷燃烧过程的声场激励调控特性

邸立明<sup>1,2</sup>, 欧阳强<sup>1</sup>, 支富祥<sup>1</sup>, 史程<sup>1</sup>

(1. 燕山大学 车辆与能源学院, 河北 秦皇岛 066004;

2. 燕山大学 河北省特种运载装备重点实验室, 河北 秦皇岛 066004)

**摘要:** 从宏观与微观层面分析了超声波对异辛烷燃烧的调控作用机理, 利用发动机台架试验验证了原机三维燃烧数值模拟模型, 基于燃烧室内物理嵌入动网格声源面方法, 实现将 20 kHz 振幅为 300  $\mu\text{m}$  超声波成功馈入燃烧室. 将有、无超声波馈入燃烧室的工作缸压差值作为超声辐射压力扰动, 研究了超声场激励对异辛烷的着火延迟期、中间反应组分及敏感性的影响特性. 通过对比分析超声馈入方案  $S_1 \sim S_3$  及无超声馈入方案  $S_0$ , 结果表明:  $S_1 \sim S_3$  方案均使燃烧相位得以提前,  $S_2$  和  $S_3$  中  $\text{C}_3\text{H}_6$ 、 $\text{IC}_4\text{H}_8$  和  $\text{C}_2\text{H}_4$  的峰值摩尔分数分别提升 42.1%、24.7%、27.5% 和 21.5%、9.6%、5.3%, 且两者异辛烷燃尽时间均提前 0.18 s. 当量比为 1 且初始温度分别为 1300 K 和 1700 K 时, 着火延迟期分别缩短 31.8% 和 6.4%, 且均促进了 OH 自由基的大量生成.

**关键词:** 异辛烷; 燃烧特性; 燃烧调控; 超声场激励; 着火延迟期

中图分类号: TK421

文献标志码: A

文章编号: 1000-0909(2024)01-0026-09

Acoustic Field Excitation and Regulation Characteristics of  
Iso-Octane Combustion ProcessDi Liming<sup>1,2</sup>, Ouyang Qiang<sup>1</sup>, Zhi Fuxiang<sup>1</sup>, Shi Cheng<sup>1</sup>

(1. School of Vehicle and Energy, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China;

2. Hebei Key Laboratory of Special Delivery Equipment, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

**Abstract:** The regulation mechanism of ultrasound on iso-octane combustion was analyzed from the macro and micro levels. The three-dimensional computational fluid dynamics model of the original engine was calibrated using the bench test data. Based on the method of physically embedding the dynamic grid sound source surface in the combustion chamber, the ultrasonic with 20 kHz frequency and 300  $\mu\text{m}$  amplitude was successfully fed into the combustion chamber. Taking the difference between the cylinder pressure with and without ultrasonic wave feeding into the combustion chamber as the ultrasonic radiation pressure disturbance, the effects of ultrasonic field excitation on the ignition delay period, intermediate reaction components and sensitivity analysis of iso-octane were studied. By comparing and analyzing the simulation results of three ultrasonic-fed schemes  $S_1 \sim S_3$  with no ultrasonic-fed scheme  $S_0$ , the results show that the  $S_1 \sim S_3$  schemes can advance the combustion phase, and the peak mole fractions of  $\text{C}_3\text{H}_6$ ,  $\text{IC}_4\text{H}_8$  and  $\text{C}_2\text{H}_4$  in  $S_2$  and  $S_3$  are increased by 42.1%, 24.7%, 27.5% and 21.5%, 9.6%, 5.3%, respectively and the iso-octane burnout time of both schemes are advanced by 0.18 s. When the equivalence ratio is 1 and the initial temperature is 1300 K and 1700 K, the ignition delay period is shortened by 31.8% and 6.4%, respectively and both promote to produce a large number of OH radicals.

**Keywords:** iso-octane; combustion characteristics; combustion regulation; ultrasonic field excitation; ignition delay period

收稿日期: 2022-10-23; 修回日期: 2023-05-19.

基金项目: 教育部“春晖计划”合作科研资助项目(HZKY20220239); 河北省自然科学基金面上资助项目(E2020203127); 河北省高等学校科学技术研究资助项目(QN2023224); 燕山大学基础创新科研培育资助项目(2021LGZD014, 2021LGQN011).

作者简介: 邸立明, 博士, 教授, E-mail: diliming@ysu.edu.cn.

通信作者: 邸立明, 博士, 教授, E-mail: diliming@ysu.edu.cn.

燃烧作为一种剧烈的化学反应过程,其中一般伴随着不同程度的燃烧噪声现象,通过主动控制声波能量馈入燃烧过程,能实现燃烧特性的微观调控<sup>[1]</sup>;而燃烧过程精细化控制已成为实现高效清洁燃烧的有效途径<sup>[2]</sup>.均质压燃(HCCI)、反应活化控制压燃(RCCI)和预混压燃(PCCI)等内燃机先进燃烧技术,其燃烧速率、点火时刻因缺乏对缸内瞬变极端环境的精细调控技术而难以准确控制<sup>[3]</sup>,进而限制了其技术应用工况和产品综合性能.超声波激励能实现从微观到宏观尺度的连续介入,并量化调控缸内辐射区域的燃烧环境,进而满足上述先进燃烧技术对燃烧环境的动态调控需求.目前,关于声波的应用主要集中于超声清洗、材料加工、化工过程、工业除尘和医疗等领域,而针对超声波激励主动调控燃烧过程的研究和应用十分匮乏.

Ivi等<sup>[4]</sup>通过开展超声波对燃气燃烧器火焰声激励试验表明,超声激励可使CO和NO<sub>x</sub>排放下降25.0%,燃烧效率从94.0%提高到96.0%,同时火焰温度分布更均匀.这一结论与Deng等<sup>[5]</sup>通过对声激励下甲烷层流部分预混火焰的NO<sub>x</sub>排放研究结果相一致.许伟龙等<sup>[6]</sup>研究声波作用下煤粉的传热特性得出,当声波频率大于5kHz时,时间-空间平均努塞尔数最大差值比为2.8%,是无声波作用的1.7倍.王瀛洲等<sup>[7]</sup>通过研究声波下的煤粉燃烧特性表明,声波作用可使煤粉燃尽效率提高9.1%,并提升锅炉燃烧效率.沈国清等<sup>[8]</sup>利用声波激励对煤粉燃烧生成NO<sub>x</sub>的研究表明,强声波作用能大幅降低NO<sub>x</sub>生成.计算流体动力学(CFD)和化学动力学已成为内燃机燃烧模拟的主流方法,分别从宏观和微观层面描述其燃烧过程<sup>[9-10]</sup>,Di等<sup>[11]</sup>利用CONVERGE研究了超声波激励对单缸内燃机燃烧与排放的影响,发现超声波激励使得缸内的平均湍动能和缸压峰值提升的同时,CO和碳烟排放分别降低了6.5%和6.1%.

通过向Honda WH125-6汽油机燃烧数值模型物理嵌入声源面,实现将超声波馈入燃烧室,基于3种不同超声馈入区间方案,笔者利用超声波激励分别对异辛烷燃烧过程中的关键组分开展演化历程分析、敏感性分析和反应路径分析,并探究超声波激励对异辛烷着火延迟期的影响规律,为HCCI等内燃机新型高效燃烧技术的实用化探究新的研究途径与方向.

## 1 燃烧室内声波模型建立与声波馈入方法

### 1.1 燃烧室内声波模型建立

为探究超声波激励对内燃机缸内燃烧过程的调控规律,采用CONVERGE和CHEMKIN软件耦合

燃烧数值模拟方法,分析异辛烷可燃混合气在超声波作用下的燃烧特性.相比传统内燃机燃烧数值模拟软件,CONVERGE具有高效准确的网格处理能力和自适应网格加密功能,而CHEMKIN已被广泛应用于模拟燃料在快速压缩机、激波管和射流搅拌反应器中的氧化、热解等过程.

将Honda WH125-6的化油器式供油系统改造为歧管电喷式供油系统,原机主要参数如表1所示.改造后开展2000~6000 r/min、间隔为500 r/min的外特性台架试验,选取其3000 r/min全负荷工况对标开展仿真模拟研究.

表1 Honda WH125-6主要技术参数

Tab.1 Honda WH125-6 main technical parameters	
参数	数值
型式	单缸风冷四冲程
缸径/mm	52.4
活塞行程/mm	57.9
连杆长度/mm	100
压缩比	9.0
排量/mL	124.8
最大功率/kW	6.6(7000 r/min)
最大转矩/(N·m)	9.7(3500 r/min)

利用原机部件特征点云数据,逆向建模得到三维曲面模型,基于STL格式转换导入三维燃烧数值模拟环境.CONVERGE计算模型的选取如表2所示,图1示出3000 r/min全负荷工况下对标台架试验数据优化得到的三维燃烧数值模拟和试验缸内压力.两

表2 计算模型选取

Tab.2 Selection of computational model	
模型名称	参数描述
湍流模型	RNG $\kappa$ - $\epsilon$
蒸发模型	Frossling
破碎模型	KH-RT
拽力模型	Dynamic Drop Drag
碰壁模型	Wall Film-O'Rourke
燃烧模型	SAGE
NO <sub>x</sub> 模型	Extended Zeldovich
碳烟模型	Hiroyasu

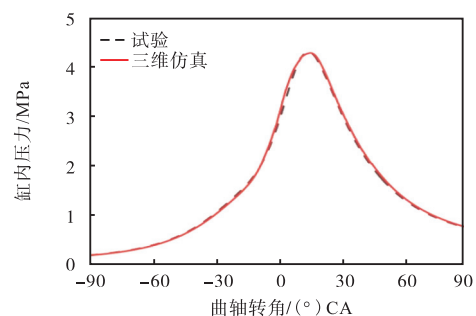


图1 原机三维仿真与台架试验的缸内压力曲线对比  
Fig.1 Comparison of cylinder pressure curves between original machine 3D simulation and bench test

者最大相对误差小于 5%，所建原机三维燃烧数值模拟模型，可用于进一步改造得到超声波馈入燃烧室的燃烧数值模拟模型。

在原机燃烧数值模拟模型的燃烧室中，添加图 2 所示的超声波馈入声源面结构，并使火花塞电极间隙中点在如图 3 所示声源面的中轴线上，并在中心线上等间距设置 15 个数据监测点。

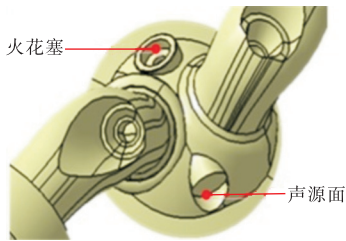


图 2 声源面位置

Fig.2 Location of sound source surface

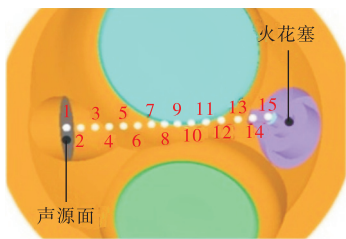


图 3 超声馈入方向监测点

Fig.3 Monitoring points in the direction of ultrasonic feed

### 1.2 燃烧室声波馈入实现方法

根据文献[11]将声波馈入燃烧场的方法表明，超声波激励可由声源面做固定频率的简谐振动产生，其振动方程如式(1)所示。利用 CONVERGE 的动网格设置功能，可实现声源面产生所需要的简谐振动。

$$y = A \sin(2\pi f t) \quad (1)$$

式中： $A$  为振幅； $f$  为频率； $t$  为时间； $y$  为  $t$  时刻的位置。

获取变量  $y$  相对时间  $t$  的数据点  $(t, y)$ ，同时采用式(2)和式(3)将时间  $t$  转化为对应 3 000 r/min 的曲轴转角  $t_{CA}$ ，可得声波馈入时间对应的曲轴转角数据，最终得到数据点  $(t_{CA}, y)$ 。这样在汽油机缸内燃烧循环数值模拟中，可利用曲轴转角  $t_{CA}$  参量同步控制声波馈入起止时刻，以便开展声场耦合燃烧过程的调控特性研究。

$$t_{CA} = \frac{t}{T} T_{CA} + a \quad (2)$$

$$T_{CA} = \frac{n}{60} 2\pi \frac{1}{f} = \frac{\pi n}{30 f} \quad (3)$$

式中： $n$  为发动机转速； $T_{CA}$  为对应声波频率和发动

机转速下的曲轴转角周期； $T$  为声波振动周期； $t_{CA}$  为对应于时间  $t$  的曲轴转角； $a$  为声波开始馈入时刻对应的曲轴转角。

设动网格振幅为 300  $\mu\text{m}$ ，频率为 20 kHz。首先分析超声波馈入区间为  $-134^\circ \text{ CA BTDC} \sim 120^\circ \text{ CA ATDC}$  内发动机纯压缩空气循环工况，通过关闭火花塞模型，得出馈入超声波激励对缸内压力的作用效果。

连续均匀的传声介质可看作为紧密相连微小单元体  $dV$  组成的物质系统，在时间  $t$  内，平衡状态的任意一个单元体内的流入质量等于流出质量。在有声波激励下的传声介质会在自身无规则运动基础上附加一个有规律的简谐振动，即声波激励使单元体内部介质产生稠密和稀疏的交替变化，该过程可用体积元内压强、密度、温度及质点速度的变化来描述<sup>[12]</sup>。姜根山等<sup>[13]</sup>通过研究强声波激励在锅炉燃烧器中的传播特性得出，强声波在传播过程会不断产生畸变，进而产生压力冲击波，图 3 中声源面和监测点 1 的压力波动周期与相位如图 4 所示，图中超声波激励下的压力波形与文献[11]中的压力冲击波波形相似。大量研究人员使用如式(4)所示的声压模型<sup>[14]</sup>来研究超声波对传热传质过程的影响，Abolhasani 等<sup>[15]</sup>利用这种方法模拟了高频超声波对传热速率的影响，其结果与试验吻合较好。因此，选择压力波代替声波介入燃烧场开展耦合调控特性分析具有合理性。

$$p = p_A \cos \left[ 2\pi f \left( t + \frac{Z}{C_1} \right) \right] \quad (4)$$

式中： $p_A$  为声压振幅； $Z$  为空间坐标； $C_1$  为声波在介质中的传播速度。

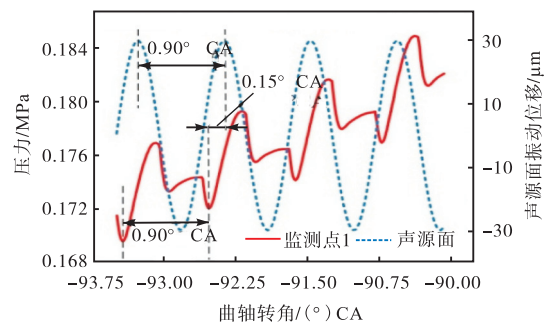


图 4 声源面和监测点 1 的压力波动周期与相位

Fig.4 Pressure fluctuation period and phase of sound source surface and monitoring point 1

一般冲击波具有辐射压力、空化和声流等多方面次级效应，在物质发生化学反应过程中往往具有特殊激励作用。根据文献[13]中声波作用最佳距离的判定依据，选取图 3 中 2 号监测点缸内压力数据作为压力波数据获取来源，并将有、无超声波馈入下 2 号监测

点的缸内压力差值作为基础压力波数据. 因主要探究辐射压力对燃烧过程的调控特性分析, 所以采用压力波代替声波激励馈入燃烧室, 再将压力波数据导入完全搅拌反应器(PSR)模型中进行数值仿真计算, 以便开展超声波对异辛烷燃烧过程重要中间产物的影响特性分析.

## 2 燃烧模型的选取与验证

燃烧模拟选用美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室(LLNL)开发的异辛烷详细反应机理<sup>[16]</sup>, 其包含 874 种组分、3 796 个反应, 能够在较宽温度和压力范围内准确预测关键中间组分的摩尔分数、点火延迟期以及污染物的排放等.

PSR 模型中的物料以稳定流量进入反应器后, 瞬

间就在整个反应器内分散均匀并与原存留物料完全混合, 因而反应物转化为生成物是由化学反应速率控制而非混合过程. 喷射流搅拌器是与 PSR 对应的试验装置, 通常被用于测定燃料氧化过程的重要中间组分及浓度变化趋势<sup>[17]</sup>. 为验证 PSR 模型参数的准确性, 需将详细机理导入 CHEMKIN 开展仿真分析. Dagaut 等<sup>[18]</sup>利用喷射流搅拌器进行试验, 研究了 0.1% 异辛烷从低温到高温氧化过程的重要中间产物浓度变化. 当初始压力和温度分别为 1.01 MPa 和 550 K, 反应停留时间为  $\tau = 1$  s 及当量比  $\phi = 1.0$  时, 试验值与模拟值的对比结果如图 5 所示.  $\phi = 1.0$  时的异辛烷重要中间产物摩尔分数变化趋势与试验值吻合较好, 证明通过合理设置 PSR 参数, 能实现异辛烷氧化过程中重要组分摩尔分数变化的准确预测.

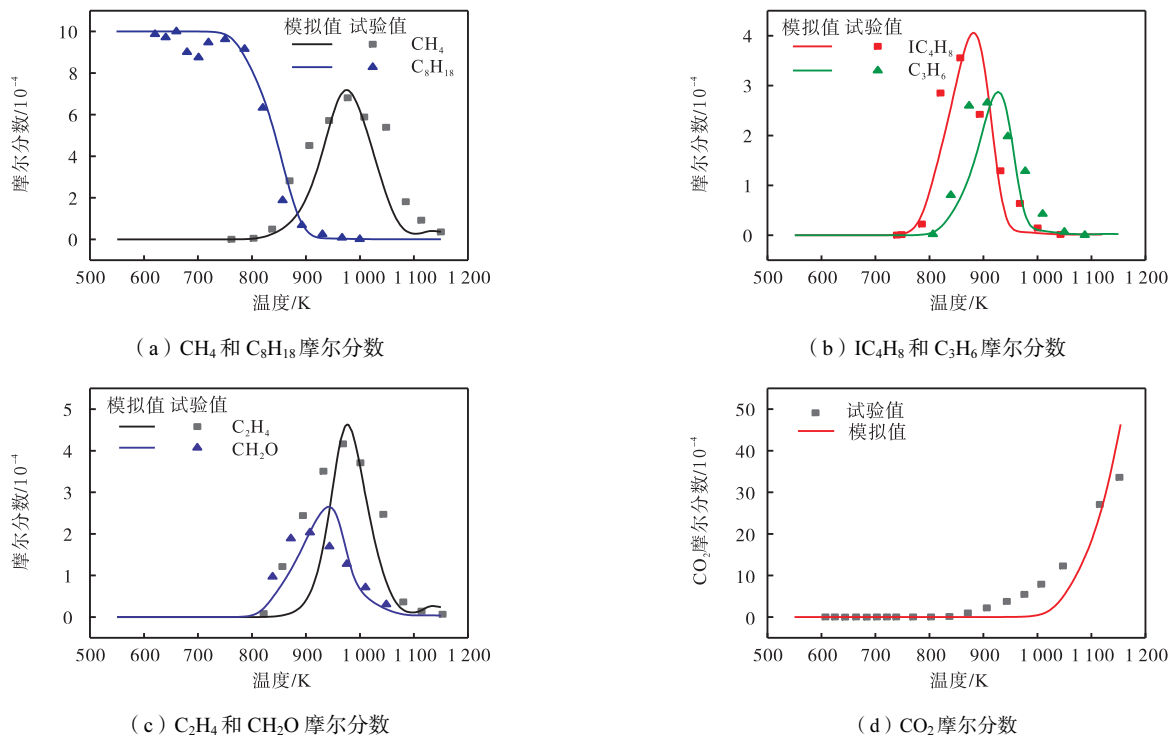


图 5 重要组分随温度变化

Fig.5 Change of important species with temperature

## 3 计算结果分析

### 3.1 超声波激励对中间产物演化历程的影响

PSR 燃烧模型参数设置与文献<sup>[18]</sup>中一致, 并制定  $S_1 \sim S_3$  仅超声馈入区间不同的 3 种方案. 方案  $S_1$  馈入 PSR 模型的区间为 0~1 s,  $S_2$  为 1~2 s, 而  $S_3$  则为覆盖  $S_1$ 、 $S_2$  馈入区间的 0~2 s. 摩尔分数最大时生成速率系数  $S_p$  和消耗速率系数  $S_c$  (生成为正, 消耗为负) 计算式为

$$S = V_i / V_T \quad (5)$$

式中:  $S$  为速率系数;  $V_i$  为第  $i$  个反应速率;  $V_T$  为总

反应速率.

不同方案对异辛烷燃烧过程的影响如图 6a 所示,  $S_0$  为无声波馈入方案, 声波馈入区间最大的方案  $S_3$  的作用效果最为显著, 其燃尽时刻提前了 0.18 s, 明显加速了燃烧进程. 对比方案  $S_1$  与  $S_2$  可知, 馈入区间滞后的方案  $S_2$  作用效果更佳. 尽管方案  $S_2$  在  $t = 1$  s 时刻才开始馈入, 但在  $t = 1$  s 之后的区间对燃烧进程的加速效果与方案  $S_3$  基本一致. 各超声波馈入方案均显著加速了异辛烷氧化反应速率, 其反应加速区间与声波馈入区间相对应, 且滞后馈入区间的加

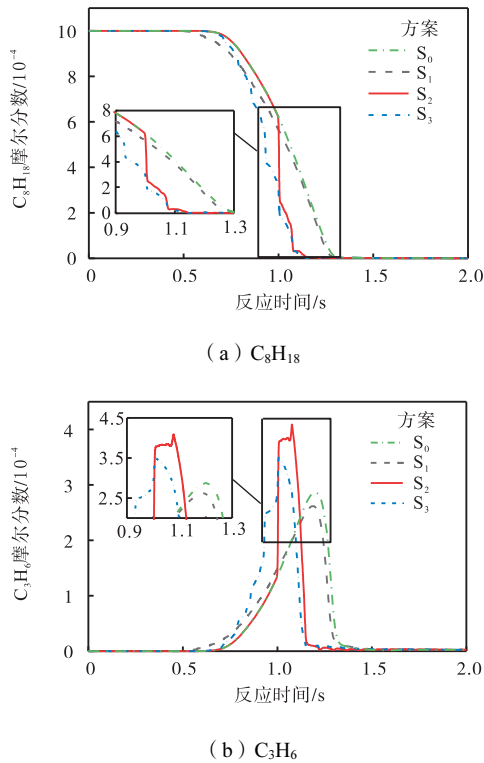


图 6 C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> 和 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 摩尔分数随时间变化  
Fig.6 Change of C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> and C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> with time

速效应强于早期馈入区间。

Curran 等<sup>[19]</sup>研究得出 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 是异辛烷氧化过程中的主要组分。将 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的生成与消耗作为关键反应途径开展不同方案对比分析,以探究超声波激励对异辛烷氧化过程的调控规律。在图 6b 所示的方案 S<sub>1</sub>~S<sub>3</sub> 中,C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的生成和消耗均被不同程度加速。其中,方案 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 的加速效果更为显著,峰值摩尔分数分别提高 42.1% 和 21.5%。由图 7 速率系数分析可知,C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的生成主要由反应 R1057: IC<sub>4</sub>H<sub>9</sub> ⇌ C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+CH<sub>3</sub>、R1234: IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub>+H ⇌ C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+CH<sub>3</sub> 和 R3787: C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>-A+CH<sub>2</sub>O ⇌ C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+HCO 生成,且基元反应 R1234 和 R3787 的生成速率系数在方案 S<sub>2</sub> 中最大,导致其峰值也最大。反应 R449: IC<sub>3</sub>H<sub>7</sub> ⇌ H+C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的速率系数在方案 S<sub>2</sub> 中为正数,使得 R449 对 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 摩尔分数的贡献度增加,而其他方案中 R449 表现为消耗 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>,因此,在 t=1 s 时刻,方案 S<sub>2</sub> 中 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 中摩尔分数急剧上升且峰值高于方案 S<sub>3</sub>。反应 R716: SC<sub>4</sub>H<sub>9</sub> ⇌ C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+CH<sub>3</sub> 的速率系数在 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 中表现为负数,使得 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的消耗速率比 S<sub>0</sub> 和 S<sub>1</sub> 快。方案 S<sub>0</sub> 和 S<sub>1</sub> 中 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的速率系数大小基本一致,所以方案 S<sub>1</sub> 对 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的影响较小。

C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 与 C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>-P 是形成碳烟前驱物 C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 的主要来源<sup>[20]</sup>,研究不同声波馈入方案对 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 生成规律的影响,对基于燃烧过程抑制碳烟排放具有指导意

义。图 8 为各方案下的 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的生成和消耗曲线,其中方案 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 使得 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的峰值摩尔分数分别提升 27.5% 和 5.3%,且峰值时刻燃烧相位分别提前 0.16 s 和 0.18 s。图 9 为 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的生成与消耗速率系数。由图 8 和图 9 分析可知,方案 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 的主要基元反应 R184: C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>+O<sub>2</sub> ⇌ C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub>、R480: C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>+H ⇌ C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub> 均发生快速正向反应,且反应 R480 生成速率系数在方案 S<sub>2</sub> 中最大,表明方案 S<sub>2</sub> 对反应 R480 的正向加速作用更强,最终导致 S<sub>2</sub> 的峰值摩尔分数高于 S<sub>3</sub>。消耗 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的 4 个主要反应为 R251: C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+OH ⇌ C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>+H<sub>2</sub>O、R250: C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+O ⇌ CH<sub>2</sub>CHO+H、R249: C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+O ⇌ CH<sub>3</sub>+HCO 和 R163: C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+H(+M) ⇌ C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>(+M),随着超声波馈入时间的增加,反应 R163 的消耗速率系数增大、R251 的消耗速率系数减小,表明超声波能对 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的消耗进行干涉。由反应 R251 生成的 C<sub>2</sub>H<sub>3</sub> 会转化成 C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>,所以调控 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的生成和消耗能间接影响碳烟前驱物 C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 生成,进而实现碳烟排放的定向调控作用。

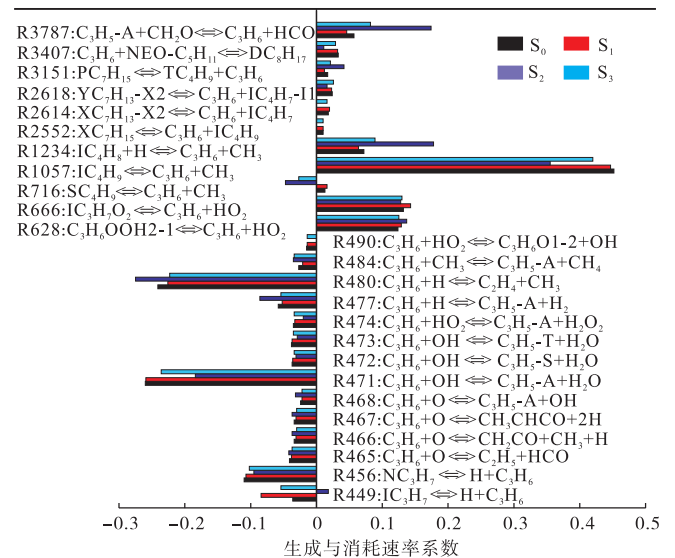


图 7 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 的生成与消耗速率系数  
Fig.7 Production and consumption rate coefficients of C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>

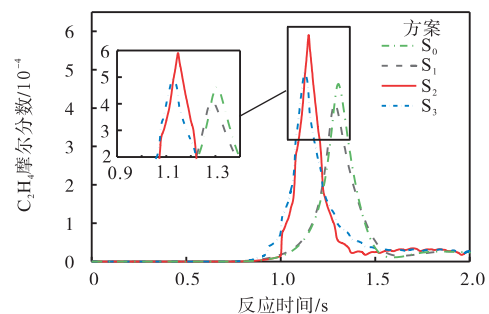


图 8 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 摩尔分数随时间变化  
Fig.8 Change of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> with time

图 10 为各个方案对  $\text{CH}_4$  和  $\text{CH}_2\text{O}$  发展历程的影响曲线, 其中  $\text{CH}_2\text{O}$  是低温反应标志性产物, 也是  $\text{CHO}$  形成的主要来源, 同时  $\text{CHO}$  还是火焰区域热释放的标志物<sup>[20]</sup>. 因此, 探究  $\text{CH}_2\text{O}$  发展历程对燃烧过程的放热控制有重要意义. 方案  $S_1$ 、 $S_2$  和  $S_3$  均在  $t = 0.5$  s 开始生成  $\text{CH}_2\text{O}$ , 并分别在  $t$  为 1.22、1.11 和 1.06 s 达到峰值. 因各方案在  $\text{CH}_2\text{O}$  达到峰值前的反应温度较低, 其生成占主导地位, 而当到达峰值时,  $\text{CH}_2\text{O}$  消耗和生成速率达到平衡, 峰值之后因温度升高, 低温标志性产物  $\text{CH}_2\text{O}$  消耗加剧. 方案  $S_3$  中出现两个  $\text{CH}_2\text{O}$  峰值是因为  $\text{CH}_4$  在 1.06 ~ 1.08 s 氧化生成  $\text{CH}_2\text{O}$  的速率较小, 导致  $\text{CH}_2\text{O}$  的生成量无法弥补其消耗量, 致使其摩尔分数下降. 而  $\text{CH}_2\text{O}$  生成量在 1.08 s 后又再度增加, 并在 1.11 s 时达到第二个峰值, 低于第一峰值是因此时  $\text{OH}$  大量生成, 促进了  $\text{R100}$ :  $\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$  反应的进行, 使  $\text{CH}_4$  转化为  $\text{CH}_2\text{O}$  的量进一步减少. 方案  $S_1$  最早对  $\text{CH}_2\text{O}$  的生成产生影响, 且在各个方案中的峰值摩尔分数最大, 是因  $S_1$  方案中  $\text{OH}$  自由基数量少, 致使  $\text{CH}_4$  被消耗氧化成  $\text{CH}_2\text{O}$  的量增多, 而低温标志物  $\text{CH}_2\text{O}$  的生成大于消耗并快速达到峰值, 且峰值高于方案  $S_2$  和  $S_3$ .

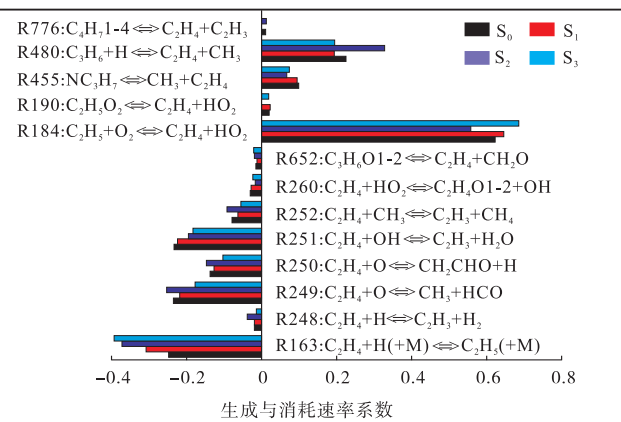
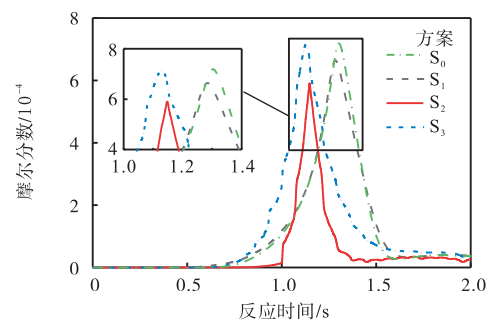
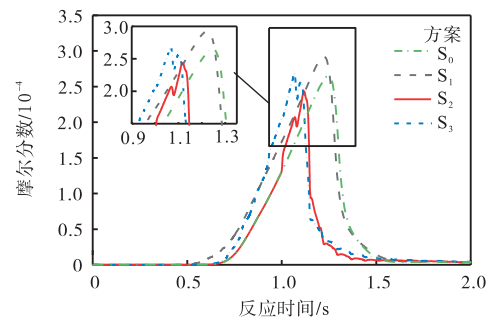
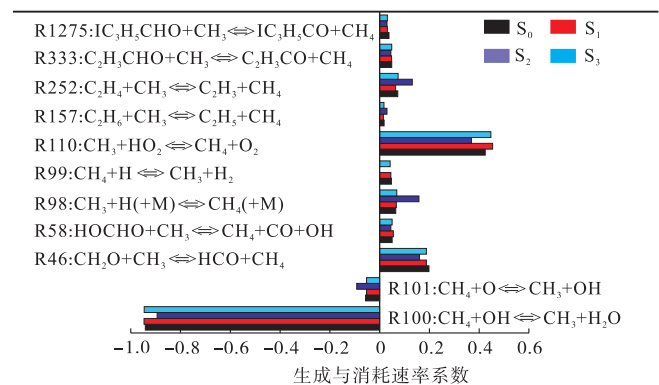
图 9  $\text{C}_2\text{H}_4$  的生成与消耗速率系数Fig.9 Production and consumption rate coefficients of  $\text{C}_2\text{H}_4$ 

图 11 和图 12 分别为  $\text{CH}_4$  和  $\text{CH}_2\text{O}$  的生成与消耗速率系数. 分析可知, 方案  $S_0 \sim S_3$  中  $\text{R100}$ 、 $\text{R110}$ 、 $\text{R46}$  和  $\text{R63}$ 、 $\text{R43}$ 、 $\text{R44}$  和  $\text{R72}$  等各反应的速率系数相差不大, 故可得出超声波对  $\text{CH}_4$ 、 $\text{CH}_2\text{O}$  峰值摩尔分数的速率系数影响较小.

在汽油机内, 燃烧过程中  $\text{IC}_4\text{H}_8$  主要消耗  $\text{OH}$  和  $\text{H}$  自由基生成不活泼的  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CH}_3$  和  $\text{C}_3\text{H}_4$  或者  $\text{H}_2$ 、 $\text{CH}_3$  和  $\text{C}_3\text{H}_4$  自由基<sup>[21]</sup>, 所以  $\text{IC}_4\text{H}_8$  对异辛烷的氧化起阻碍作用. 图 13 为  $\text{IC}_4\text{H}_8$  摩尔分数随时间变化. 可知, 方案  $S_2$  和  $S_3$  分别使其峰值摩尔分数升高 24.7%

和 9.6%, 且两方案开始生成时刻相同, 方案  $S_1$  中  $\text{IC}_4\text{H}_8$  的生成时刻提前, 是因在初始时刻基元反应  $\text{R1058}$ :  $\text{TC}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons \text{H} + \text{IC}_4\text{H}_8$  快速反应, 由图 14 中  $\text{IC}_4\text{H}_8$  的生成与消耗速率系数分析可知,  $\text{R1058}$  的生成速率系数与  $S_3$  相反, 促进了该反应速率, 使得初始时刻  $\text{IC}_4\text{H}_8$  摩尔分数更大. 在方案  $S_2$  和  $S_3$  中, 基元反应  $\text{R2555}$ :  $\text{YC}_7\text{H}_{15} \rightleftharpoons \text{IC}_3\text{H}_7 + \text{IC}_4\text{H}_8$  的生成速率系数大于其余方案, 该反应促进了  $\text{IC}_4\text{H}_8$  摩尔分数达到峰值且大于方案  $S_0$  和  $S_1$ . 在方案  $S_3$  和  $S_2$  中基元反应  $\text{R1389}$ :  $\text{BC}_5\text{H}_{11} \rightleftharpoons \text{IC}_4\text{H}_8 + \text{CH}_3$  的消耗速率系数大于方案  $S_0$ 、 $S_1$ , 表明方案  $S_3$  和  $S_2$  能够促进  $\text{IC}_4\text{H}_8$  的消耗, 使其达到峰值后又迅速减小.

(a)  $\text{CH}_4$ (b)  $\text{CH}_2\text{O}$ 图 10  $\text{CH}_4$  和  $\text{CH}_2\text{O}$  摩尔分数随时间变化Fig.10 Change of  $\text{CH}_4$  and  $\text{CH}_2\text{O}$  with time图 11  $\text{CH}_4$  的生成与消耗速率系数Fig.11 Production and consumption rate coefficients of  $\text{CH}_4$

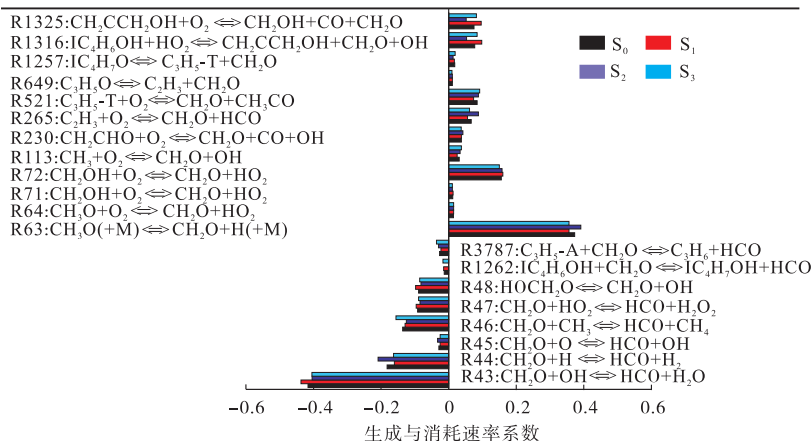


图 12 CH<sub>2</sub>O 的生成与消耗速率系数

Fig.12 Production and consumption rate coefficients of CH<sub>2</sub>O

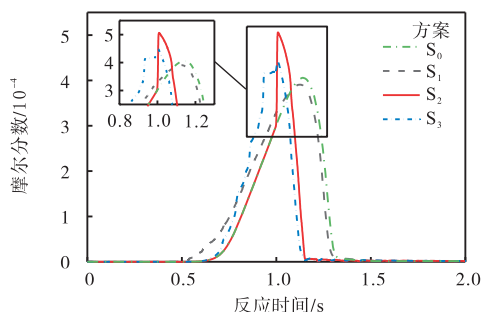


图 13 IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub> 摩尔分数随时间变化

Fig.13 Change of IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub> with time

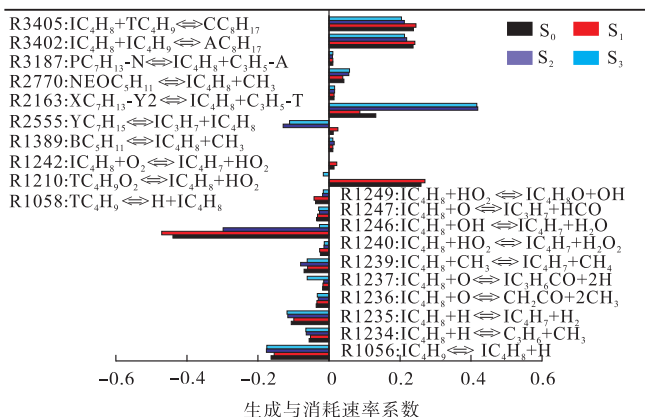


图 14 IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub> 的生成与消耗速率系数

Fig.14 Production and consumption rate coefficients of IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub>

### 3.2 反应路径分析及敏感性分析

图 15 为 4 种方案下异辛烷消耗速率最大时刻的反应路径分析, 图中占比表示该组分对目标产物生成的贡献比例, 占比颜色分别与各方方案图例颜色对应. 异辛烷首先脱 H 生成异辛烷基(AC<sub>8</sub>H<sub>17</sub> 为其中一种), 或直接裂解成 IC<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, 同时生成 CH<sub>3</sub> 自由基和 CH<sub>4</sub>, 与方案 S<sub>0</sub> 对比分析可知, 方案 S<sub>2</sub> 促进了 IC<sub>8</sub>H<sub>18</sub> 对 CH<sub>3</sub> 自由基生成, CH<sub>3</sub> 不仅能促进层流火焰传播速度, 还有利于增加分子间的有效碰撞概率, 使得异辛

烷氧化速率加快. 在超声激励作用下, 由 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 转化为 CH<sub>4</sub> 的路径占比大幅度减小, 而 CH<sub>4</sub> 的消耗主要与 OH 自由基反应生成较为不活泼 CH<sub>3</sub> 和 H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub> 生成量的减少会导致剩余更多的 OH 自由基, 而 OH 自由基对燃料的点火和燃烧具有重要的促进作用. 由 CH<sub>3</sub> 转化为 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> 的路径占比明显下降, 而 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> 经 CH<sub>4</sub> 最终转化为 CH<sub>3</sub>, 这表明超声激励能对反应路径产生一定的调控作用, 使一部分 CH<sub>3</sub> 绕过 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> 直接反应生成 CH<sub>3</sub>O, 有利于加快化学反应速率. 此外, 超声激励还能使 CH<sub>3</sub> 转化为甲醛前驱物 CH<sub>3</sub>O 的路径占比降低, 而甲醛的消耗是由活性的 OH 自由基氧化其生成 HCO 和 H<sub>2</sub>O, 再一次减少了 OH 自由基的消耗和促进点火燃烧过程.

通过对重要中间产物 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>、CH<sub>2</sub>O、IC<sub>4</sub>H<sub>8</sub>、CH<sub>4</sub> 和 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 摩尔分数最大时刻敏感性分析得出: 5 种重要中间产物敏感性系数较大的反应都与活性自由基

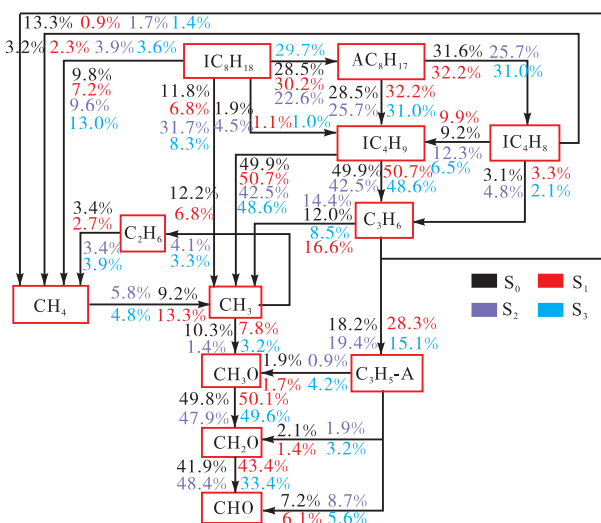


图 15 异辛烷反应路径

Fig.15 Reaction path of iso-octane

$\text{HO}_2$  参与密切相关, 尤其基元反应 R9:  $\text{H} + \text{O}_2(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{HO}_2(+\text{M})$ 、R109:  $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$  和 R110:  $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{O}_2$ , 这些反应对中间产物的敏感性系数影响显著. 上述分析表明, 超声波具有对燃烧过程进行调控的能力.

### 3.3 超声波激励对着火延迟期的影响

着火延迟期是表征燃料着火能力的重要指标, 与发动机的燃烧和排放特性密切相关<sup>[22]</sup>. 采用 CHEMKIN 中的均相反应器模型模拟计算方案 S<sub>3</sub> 的着火延迟期参数<sup>[23]</sup>. 无声波作用下的异辛烷着火延迟期来自 Oehlschlaeger 等<sup>[24]</sup>通过激波管试验获取的数据, 其燃料为 0.25% 异辛烷, 初始压力为 0.14 MPa, 当量比分别为 0.5 和 1.0, 将着火延迟期定义为从初始温度上升 400 K 所需时间<sup>[25]</sup>, 对其预测效果如图 16a 所示, 当量比为 1.0 时的预测效果与试验值吻合较好, 但当量比为 0.5 时预测效果欠佳, 这与文献<sup>[25]</sup>得出低当量比下预测精度低的结论相一致. 由于着火延迟时间尺度小于 14 ms, 所以选择全程超声馈入能覆盖着火延迟区间.

图 16b 为着火延迟期影响, 相同当量比下的声场激励能明显缩短着火延迟期, 且在当量比为 0.5 时的整个温度区间上效果更加显著, 而当量比为 1.0 时, 在低于 1500 K 时缩短着火延迟期的效果更佳, 与无声波方案相比, 当温度接近 1700 K 时, 着火延迟期缩短 6.4%, 在接近 1300 K 时, 能缩短 31.8%,

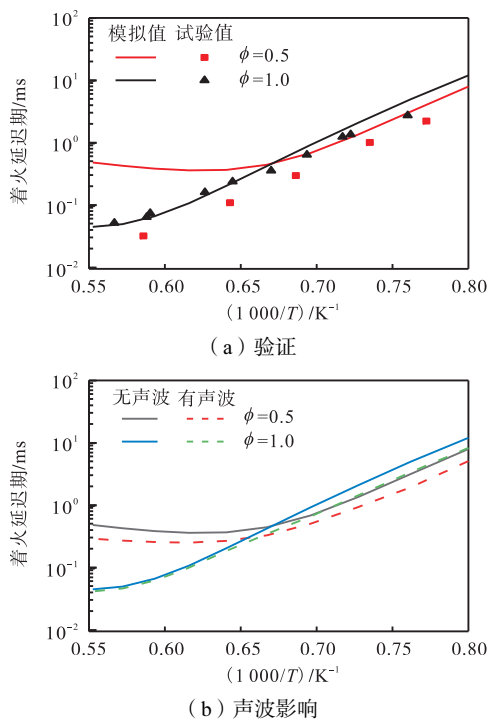


图 16 着火延迟期验证和声波影响

Fig.16 Validation and influence of sound wave on ignition delay period

得到超声波对着火延迟期的缩短区间为 6.4% ~ 31.8%. 表明在超声波声场激励作用下, 能加速异辛烷的低温氧化过程.

碳氢燃料在中、高温度的着火延迟期主要受  $\text{H}_2\text{O}_2$  的分解反应控制, 在 900 ~ 1000 K 时, 发生基元反应 R16:  $\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}(+\text{M})$ , 高温 (大于 1200 K) 着火延迟期主要由 R1:  $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{OH}$  主导<sup>[26]</sup>, 所以将 OH 自由基作为影响着火延迟期的研究对象. 图 17 为不同初始温度下发生高温着火时 OH 自由基的峰值摩尔分数, 可见受超声波馈入的声场激励作用, OH 自由基的峰值摩尔分数显著增加.

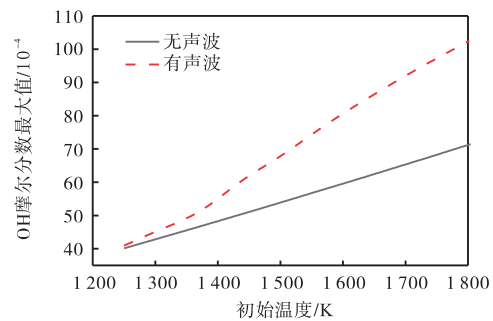


图 17 不同初始温度下 OH 摩尔分数最大值

Fig.17 Maximum OH mole fraction at different initial temperatures

## 4 结论

(1) 在超声波馈入燃烧室的声场激励作用下, 各声波馈入方案均显著加速了异辛烷氧化反应速率, 其反应加速区间与声波馈入区间相对应, 且滞后馈入区间方案的声波加速效应强于早期馈入区间; 中间产物的演化进程也均得以提前, 方案 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 使异辛烷的燃尽时刻均提前了 0.18 s, 方案 S<sub>2</sub> 使关键中间产物  $\text{C}_3\text{H}_6$  和  $\text{IC}_4\text{H}_8$  的峰值摩尔分数分别提高 42.1% 和 24.7%, S<sub>3</sub> 使两者分别提高 21.5% 和 9.6%.

(2)  $\text{C}_2\text{H}_4$  作为碳烟前驱物  $\text{C}_2\text{H}_2$  形成的主要来源, 方案 S<sub>2</sub> 和 S<sub>3</sub> 使其峰值摩尔分数分别提高 27.5% 和 5.3%, 且峰值时刻燃烧相位分别提前 0.16 s 和 0.18 s; 表明通过馈入超声波激励来调控  $\text{C}_2\text{H}_4$  的生成和消耗, 以间接控制碳烟前驱物  $\text{C}_2\text{H}_2$  的演化进程, 进而实现碳烟排放的定向调控.

(3) 超声波激励对  $\text{CH}_2\text{O}$ 、 $\text{CH}_4$  峰值摩尔分数的速率系数影响较小, 但对其他中间产物的速率系数影响较大; 当量比为 1 时, 超声激励方案与无声波方案相比, 对低于 1500 K 条件下着火延迟期的缩短效果更为显著, 当温度接近 1700 K 时, 着火延迟期缩短 6.4%, 在接近 1300 K 时, 能缩短 31.8%, 得到超声波对着火延迟期的缩短区间为 6.4% ~ 31.8%; 超声波的

声场激励作用能大大促进 OH 自由基的生成, 进而加速了低温反应速率。

#### 参考文献:

- [1] 邸立明, 孙万千, 孙涛, 等. 基于球面聚焦超声可燃工质空间定位着火研究[J]. 燃烧科学与技术, 2021, 27(5): 493-500.
- [2] 杨志伟, 谢辉, 陈韬, 等. PFI/DI 喷射对米勒循环汽油机燃烧特性的影响[J]. 燃烧科学与技术, 2019, 25(1): 52-59.
- [3] 赵岩, 王谦, 吴凡, 等. CO<sub>2</sub> 掺混比对甲烷 HCCI 燃烧特性的影响[J]. 内燃机学报, 2019, 37(5): 385-392.
- [4] Ivi A, Ed A, Fp A, et al. Investigation of flame acoustic excitation of a gas burner[J]. Energy Report, 2022, 8: 263-269.
- [5] Deng K, Shen Z, Wang M, et al. Acoustic excitation effect on NO reduction in a laminar methane-air flame[J]. Energy Procedia, 2014, 61: 2890-2893.
- [6] 许伟龙, 姜根山, 安连锁, 等. 强声波作用下烟气中滑移单颗粒煤粉传热传质特性[J]. 计算物理, 2018, 35(3): 303-312.
- [7] 王瀛洲, 韩璞. 声场强化煤粉燃烧的试验研究[J]. 动力工程学报, 2014, 34(4): 271-274.
- [8] 沈国清, 师云泽, 王彦博, 等. 声波激励对煤粉燃烧 NO<sub>x</sub> 生成的影响[J]. 燃烧科学与技术, 2015, 21(6): 506-510.
- [9] 张志强, 刘一泽, 邬斌扬, 等. 喷孔直径对重型柴油机燃烧和排放的影响[J]. 内燃机学报, 2022, 40(2): 97-105.
- [10] 张韦, 常少月, 陈朝辉, 等. DN 双燃料发动机掺 H<sub>2</sub> 燃烧的化学动力学分析[J]. 内燃机学报, 2020, 38(1): 34-41.
- [11] Di L, Zhang S, Shi C, et al. Effect of ultrasonic-fed time on combustion and emissions performance in a single-cylinder engine[J]. Chemosphere, 2022, 302: 134924.
- [12] 许肖梅. 声学基础[M]. 南京: 南京大学出版, 2001: 165-166.
- [13] 姜根山, 许伟龙, 孔倩, 等. 强声波在电站锅炉中传播特性的研究[J]. 动力工程学报, 2016, 36(9): 683-689.
- [14] Tamidi A M, Lau K K, Khalit S H. A review of recent development in numerical simulation of ultrasonic-assisted gas-liquid mass transfer process[J]. Computers & Chemical Engineering, 2021, 155: 107498.
- [15] Abolhasani M, Rahimi M, Dehbani M, et al. CFD modeling of heat transfer by 1.7 MHz ultrasound waves[J]. Numerical Heat Transfer, 2012, 62(10): 822-841.
- [16] Mehl M, Curran H J, Pitz W J, et al. Chemical kinetic modeling of component mixtures relevant to gasoline. [C]// European Combustion Meeting, Vienna, Austria, 2009.
- [17] Chen W Y, Xu Q, Lou H, et al. Variable pressure JSR study of low temperature oxidation chemistry of *n*-heptane by synchrotron photoionization mass spectrometry[J]. Combustion and Flame, 2022, 240: 111946.
- [18] Dagaut P, Reuillon M, Cathonnet M, et al. High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature 1: *n*-Heptane and iso-octane[J]. Combustion Science & Technology, 2012, 95(1/6): 233-260.
- [19] Curran H J, Gaffuri P, Pitz W J, et al. A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation[J]. Combustion and Flame, 2002, 129(3): 253-280.
- [20] Selim H, Mohamed S Y, Dawood A E, et al. Understanding premixed flame chemistry of gasoline fuels by comparing quantities of interest[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2016, 36(1): 1203-1211.
- [21] Brezinsky K, Dryer F L. A flow reactor study of the oxidation of iso-butylene and an iso-butylene/n-octane mixture[J]. Combustion Science and Technology, 2007, 45(5/6): 225-232.
- [22] Burden S, Tekawade A, Oehlschlaeger M A. Ignition delay times for jet and diesel fuels: Constant volume spray and gas-phase shock tube measurements[J]. Fuel, 2018, 219: 312-319.
- [23] Bai Y Q, Wang Y, Wang X C, et al. Development of a skeletal mechanism for tri-component diesel surrogate fuel: *n*-Hexa-decane/iso-cetane/1-methylnaphthalene [J]. Fuel, 2020, 259: 116217.
- [24] Oehlschlaeger M A, Davidson D F, Herbon J T, et al. Shock tube measurements of branched alkane ignition times and OH concentration time histories[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2003, 36(2): 67-78.
- [25] Zhang W, Chang S Y, Wu W, et al. A diesel/natural gas dual fuel mechanism constructed to reveal combustion and emission characteristics[J]. Energy, 2019, 179(15): 59-75.
- [26] Yu L, Qiu Y, Mao Y, et al. A study on the low-to-intermediate temperature ignition delays of long chain branched paraffin: Iso-cetane[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2019, 37(1): 631-638.