

HCCI 发动机催化燃烧多维数值模拟

曾文^{*1,2}, 解茂昭¹, 贾明¹

(1. 大连理工大学 动力工程系, 辽宁 大连 116024;

2. 沈阳航空工业学院 飞行器动力与能源工程学院, 辽宁 沈阳 110136)

摘要: 将发动机三维 CFD 程序 KIVA-3V 与化学动力学程序 CHEMKIN III 及 DETCHEM 相耦合, 模拟了催化燃烧对均质压燃(HCCI)发动机燃烧过程及排放的影响. 发动机以甲烷为燃料, 其表面和空间氧化反应采用了详细的动力学机理. 利用此模型分析了活塞顶催化剂铂(Pt)或铑(Rh)涂层对 HCCI 发动机着火时刻、缸内温度场及 HC、CO、NO_x 排放的影响, 结果表明催化燃烧会使 HCCI 发动机着火时刻提前, 同时能降低 HC、CO 的排放, 但会提高 NO_x 的排放; 在相同工况下, 相比催化剂 Pt, 催化剂 Rh 使 HCCI 发动机着火时刻提前的幅度要大, 同时 HC 的排放要低, 但 CO 及 NO_x 的排放要高.

关键词: 催化燃烧; 均质压燃; 化学动力学模型; 数值模拟; 甲烷; CFD 模型

中图分类号: TK401 **文献标志码:** A

0 引言

由于全球经济的飞速发展, 能源危机和环境污染问题日益严重, 而汽车作为能源消耗和环境污染的主要来源得到了全世界研究者广泛重视. 其中均质压燃(HCCI)发动机以其高经济性、低 NO_x 和微粒排放的突出优越性成为目前发动机研究的主要方向之一. 但 HCCI 过程还存在许多问题有待解决: 其适用的工况范围较窄, 着火时间、燃烧速率不易控制, HC 及 CO 的排放有待降低^[1]等. 由于 HCCI 发动机的排放温度较低, 尾气后处理(三元催化)效果不好, 可以考虑在内燃机的预燃室、活塞顶和汽缸盖、汽缸壁上涂加催化剂, 改变缸内的燃烧过程和内燃机燃烧特性, 降低 CO 及未燃 HC 的排放并扩展燃烧极限^[2].

但是, 催化燃烧是一个复杂的物理和化学过程, 包括表面反应动力学、气相反应动力学和质量、动量与能量的输运过程, 同时内燃机中的燃烧过程和流动过程又是极其复杂的, 因此对此燃烧过程进行计算机模拟需要巨大的计算机资源. 但计算机性能的提高, 新的数值方法、新的燃烧模式的提出和详细反应机理的建立, 使对此过程进行

计算机模拟变为可能. Hu 等对活塞顶和活塞冠上涂 Pt-Rh 催化剂的汽油发动机的燃烧过程与排放进行了实验与模拟计算^[3,4], 但在国内尚无类似研究. 同时 HCCI 发动机的概念在 20 世纪 70 年代才得以提出, 其燃烧过程的数学模拟在 90 年代末才逐渐活跃起来, 因此关于催化燃烧对 HCCI 发动机燃烧和排放特性影响的数值模拟研究迄今国内外尚无报道.

作者在文献[5、6]中建立了催化燃烧应用于 HCCI 发动机的单区模型及多区模型. 单区模型把整个汽缸假定为温度、压力和组分均匀的反应器, 通过纳入详细气相反应动力学及表面反应动力学机理来计算 HCCI 发动机的燃烧过程. 此模型可以精确预测出催化燃烧对 HCCI 发动机着火时刻的影响, 但模型中不计入燃烧室内温度和组分的变化, 所以存在很大的局限性, 同时不能预测催化燃烧对 HCCI 发动机 HC 和 CO 排放的影响.

多区模型把整个汽缸划分为若干温度不同的区间, 同时假定各个区间的压力相等, 通过采用详细化学动力学机理并计入各个区间的相互作用来计算整个发动机的燃烧过程. 多区模型由于计入了各个区间温度梯度及能很好地划分催化剂所在

收稿日期: 2006-05-20; 修回日期: 2007-08-23.

基金项目: 国家“八六三”基础研究重点规划资助项目(2001CB209201).

作者简介: 曾文*(1977-), 男, 博士生, E-mail: zengwen928@sohu.com; 解茂昭(1944-), 男, 教授, 博士生导师.

区间,可以比单区模型更为真实准确地模拟出催化燃烧对 HCCI 发动机燃烧过程及排放的影响.但是由于各区间初始温度和质量需要通过一定的假设给定、区间的质量交换模型很难精确建立等问题,多区模型的应用受到了一定限制.

在以上两模型中都把化学动力学作为缸内燃烧的主要控制因素,没有考虑缸内湍流对燃烧过程的影响,因此与实际情况不相吻合.多维模型^[7]是把计算流体力学(CFD)及详细化学反应动力学完全耦合起来,CFD通过精细的多维网格来计算缸内流场以及温度和组分的输运变化;与此同时化学反应动力学使用详细气相及表面反应动力学机理计算各个网格单元在指定温度、压力和组分下的气相与表面反应情况,从而可以精确地模拟催化燃烧对 HCCI 发动机燃烧特性及排放的影响.

本文通过耦合 DETCHEM 软件包^[8]及 CHEMKIN 软件包^[9]以及 KIVA-3V^[10]程序,建立将催化燃烧应用于 HCCI 发动机的多维 CFD 及详细化学动力学耦合模型,利用此模型详细分析缸内催化燃烧对 HCCI 发动机的燃烧特性和排放特性的影响.

1 物理模型

物理模型如图 1 所示,考虑到如果在汽缸盖上涂催化剂,工艺上很难实现,同时由于存在进、排气阀及喷油嘴等,其表面积也难确定,在模型中仅在活塞顶上均匀涂有催化剂.

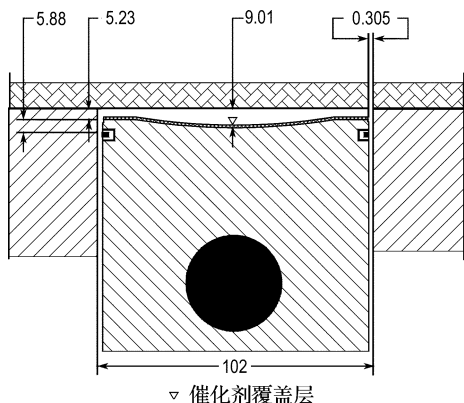


图 1 活塞示意图

Fig. 1 Schematic of the piston

2 化学动力学模型

2.1 表面反应机理分析

甲烷在催化剂 Rh 表面的详细反应机理包括

6 个反应物在催化剂表面的吸附反应、6 个反应产物的解吸反应以及 26 个吸附在催化剂表面上的反应物之间的反应.此反应机理经过了众多研究者的验证,基本与实验结果相吻合^[11].因此,本文仅对甲烷在催化剂 Pt 表面的详细反应机理进行分析,以验证此机理的正确性.

甲烷在催化剂 Pt 表面的详细反应机理如表 1 所示^[12].它包括 17 种气体组分、12 种表面组分及 26 个反应.

在数值模拟中,采用了截面为正方形的微元管模型;长度为 1 cm,截面为 1 mm×1 mm,为了消除入口边界的影响,在入口后 0.1 cm 不涂催化剂.入口气体为甲烷和氧气的混合气,用 75% 的氩稀释.混合气入口速度为 0.25 m/s,入口温度为 300 K,入口压力为 1.1×10^5 Pa.

微元管中催化燃烧的数值模拟,可以采用 N-S 方程组^[13]进行计算. N-S 方程虽然可以获得很高的计算精度,但其需要极大的计算资源.实际上在微元管中,靠近微元管壁面即边界层内,对流主要发生在平行于管壁方向上,在此方向上的质量与能量的扩散相对于垂直于壁面方向可以忽略,同时此效应随着轴向气体流速的增加而增强,即对于高雷诺数液体的流动,此方向上质量与能量的扩散可完全忽略. N-S 方程就可以简化成一种近似边界层模型^[14].

由于本文采用的微元管截面较小,同时气体入口流速较大,可采用边界层模型来代替 N-S 方程.

连续性方程

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

动量方程

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

组分方程

$$\rho u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial Y_i}{\partial y} = \frac{\partial J_{i,y}}{\partial y} + \dot{w}_i W_i \quad (4)$$

$$\dot{w}_i W_i = J_{i,y} + \rho Y_i v_{st} \quad (i=1, \dots, k_g) \quad (5)$$

能量方程

$$\rho c_p \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \sum_{i=1}^{k_g} c_{pi} J_{i,y} \frac{\partial T}{\partial y} - \sum_{i=1}^{k_g} h_i \dot{w}_i W_i \quad (6)$$

式中： x, y 为轴向、纵向坐标； u, v, v_{st} 和 T 分别为轴向速度、径向速度、Stefan 流速和温度； ρ, p, μ 和 λ 分别为密度、压力、黏度系数和导热系数； Y_i, W_i, h_i 和 c_{pi} 分别为第 i 种组分的质量分数、相对

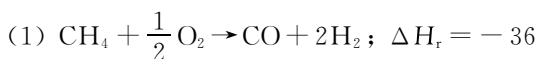
分子质量、焓和定压比热容； $\dot{\omega}_i, \dot{s}_i$ 分别为第 i 种组分的气相反应速率、表面反应速率； $J_{i,y}, k_g$ 分别为第 i 种组分纵向质量流量、组分总数。

表 1 甲烷在催化剂 Pt 表面的催化反应机理

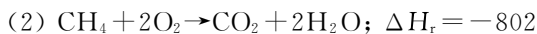
Tab. 1 Surface reaction mechanism of methane on Pt surface

反应	$A/(\text{mol}\cdot\text{cm}\cdot\text{s})$	$E_a/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
吸附：		
$\text{H}_2 + \text{Pt}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}(\text{s}) + \text{H}(\text{s})$	0.046	0
$\text{H} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}(\text{s})$	1.000	0
$\text{O}_2 + \text{Pt}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{O}(\text{s}) + \text{O}(\text{s})$	2.300×10^{-2}	0
$\text{CH}_4 + \text{Pt}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{CH}_3(\text{s}) + \text{H}(\text{s})$	1.000×10^{-2}	0
$\text{O} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{O}(\text{s})$	1.000	0
$\text{H}_2\text{O} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s})$	0.750	0
$\text{CO} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{CO}(\text{s})$	0.840	0
$\text{OH} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{OH}(\text{s})$	1.000	0
表面反应：		
$\text{O}(\text{s}) + \text{H}(\text{s}) \rightarrow \text{OH}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$	3.700×10^{21}	11.5
$\text{H}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$	3.700×10^{21}	17.4
$\text{OH}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{O}(\text{s})$	3.700×10^{21}	48.2
$\text{CO}(\text{s}) + \text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$	3.700×10^{21}	105.0
$\text{C}(\text{s}) + \text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{CO}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$	3.700×10^{21}	62.8
$\text{CO}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{C}(\text{s}) + \text{O}(\text{s})$	1.000×10^{18}	184.0
$\text{CH}_3(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{CH}_2(\text{s}) + \text{H}(\text{s})$	3.700×10^{21}	20.0
$\text{CH}_2(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{CH}(\text{s}) + \text{H}(\text{s})$	3.700×10^{21}	20.0
$\text{CH}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{C}(\text{s}) + \text{H}(\text{s})$	3.700×10^{21}	20.0
解吸：		
$\text{H}(\text{s}) + \text{H}(\text{s}) \rightarrow \text{Pt}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) + \text{H}_2$	3.700×10^{21}	67.4
$\text{O}(\text{s}) + \text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{Pt}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) + \text{O}_2$	3.700×10^{21}	213.0
$\text{H}_2\text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{Pt}(\text{s})$	1.000×10^{13}	40.3
$\text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{OH} + \text{Pt}(\text{s})$	1.000×10^{13}	192.8
$\text{CO}(\text{s}) \rightarrow \text{CO} + \text{Pt}(\text{s})$	1.000×10^{13}	125.5
$\text{CO}_2(\text{s}) \rightarrow \text{CO}_2 + \text{Pt}(\text{s})$	1.000×10^{13}	20.5

甲烷的催化反应过程如下：



kg/mol (部分氧化)



kg/mol (完全氧化)

从甲烷的催化反应过程可以看出，甲烷的催化反应分为两个过程，即部分氧化过程和完全氧化过程，而据本文选择性的定义：反应物沿某一途径进行反应的程度与沿其余途径进行反应的程度比较，CO 的选择性应是在微元管出口处 CO 的物质的量占 CO 与 CO₂ 物质的量总和的百分数，H₂ 的选择性应是在微元管出口处 H₂ 的物质的量占 H₂ 与 H₂O 物质的量总和的百分数。

在入口混合气中甲烷与氧气不同的物质的量比下，CO₂ 的选择性 (S) 及 CH₄ 与 O₂ 的转化率

(T) 的数值模拟结果与实验结果^[15] 的比较如图 2 所示。

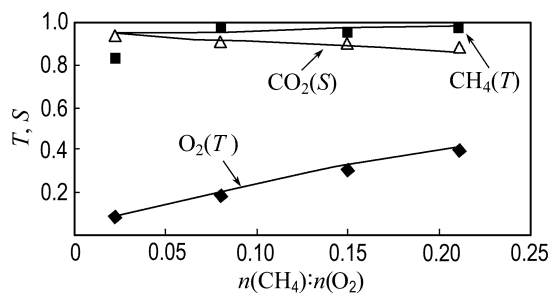
图 2 不同 CH₄ 与 O₂ 物质的量比对选择性与转化率的影响

Fig. 2 Effects of methane and oxygen ratio on selectivity and conversion

从图 2 可以看出，在入口混合气中甲烷与氧气的不同物质的量比下，数值模拟结果与实验数

据基本吻合,因此该反应机理能很好地反映甲烷在催化剂 Pt 表面的反应历程.

2.2 气相反应动力学模型

采用甲烷的气相反应详细机理,同时向其中加入了氮氧化物的反应机理,因此甲烷的气相反应详细机理由 53 种组分和 325 个气相反应构成.该机理经过了大量研究者的检验,基本与实验结果相符合^[16].

3 计算模型

由于 HCCI 发动机缸内同时多点着火,着火过程主要受化学动力学控制,为准确预测 HCCI 着火和燃烧过程,本文采用了详细气相及表面化学反应机理(见化学动力学模型).同时缸内流场对缸内温度、组分浓度及边界传热有重要影响,因此本文将计算流体动力学(CFD)程序 KIVA-3V 与气相反应动力学程序 CHEMKIN III 及表面反应动力学程序 DETCHEM 结合起来,具体流程如图 3 所示.

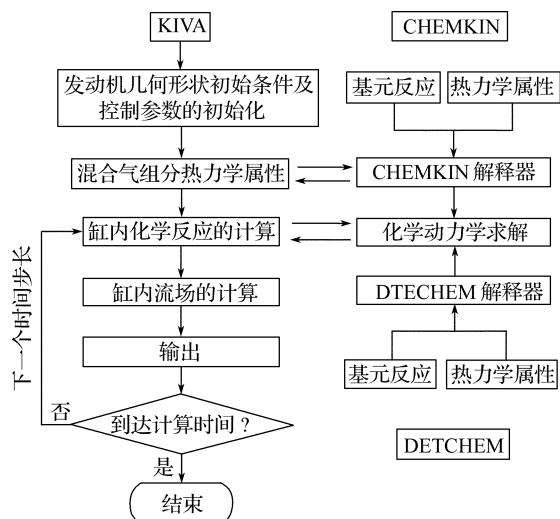


图 3 KIVA、CHEMKIN 及 DETCHEM 结合示意图

Fig. 3 The combination of KIVA code, CHEMKIN and DETCHEM solver

首先 KIVA 进行初始化的工作,由于 KIVA 缺少详细反应机理中所包含的中间组分的热力学

数据,程序首先通过 CHEMKIN 及 DETCHEM 读入相关的气相及表面反应机理和组分的热力学数据,并把所有组分的热力学数据由 NASA 格式转换为 KIVA 的 JANAF 格式.在进行缸内的流动和燃烧计算过程中,KIVA 向 CHEMKIN 及 DETCHEM 提供各个单元的温度、压力和组分,CHEMKIN 及 DETCHEM 调用求解器计算经 δt 时间的化学反应后每个单元的组分和放热率,并返回至 KIVA 中进行流场的计算.

计算中采用的发动机是 Cummins B-系列柴油机改造的 HCCI 发动机,许多研究者在该系列发动机上做了关于 HCCI 方面的实验,具体参数如表 2 所示.计算从进气门关闭 25° ABDC(下止点后)开始至排气门开启 120° ATDC,并假定进气门关闭后缸内的温度、压力和组分均匀分布.进气门关闭 25° ABDC 时计算网格如图 4 所示,由于催化剂涂加在活塞顶上,为了能精确地计算出催化燃烧对 HCCI 燃烧过程的影响,在计算中设定表面反应仅在活塞顶层网格中进行,在其余网格中没有表面反应的发生.

在活塞顶层网格中:

组分方程

$$\frac{dY_i}{dt} = v_i W_i \dot{w}_i + \frac{A_s}{m} \dot{s}_i W_i \quad (7)$$

在其他网格中:

组分方程

$$\frac{dY_i}{dt} = v_i W_i \dot{w}_i \quad (8)$$

各网格中放热率

$$q = - \sum_{i=1}^K u_i \frac{dY_i}{dt} \quad (9)$$

式中: K 为各网格中的组分总数; v_i 为各网格中的比容; A_s 、 m 为活塞顶层各网格中单面表面积、气体质量; $\dot{w}_i$ 、 W_i 、 u_i 和 Y_i 分别为各网格中的第 i 种组分的气相化学反应速率、相对分子质量、内能和质量分数, $\dot{w}_i$ 可由 CHEMKIN 程序计算得到; $\dot{s}_i$ 为活塞顶层网格中第 i 种组分的表面反应速率,可由 DETCHEM 程序计算得到.

表 2 Cummins B-系列发动机基本参数和初始条件

Tab. 2 Specifications of the Cummins B-series engine

缸径/mm	冲程/mm	连杆长度/mm	转速/(r·min ⁻¹)	活塞形状	压缩比	进气温度/K	进气压力/kPa	λ	缸壁温度/K	燃料
102	120	192	1 200	碗状	17.0	470	101.325	3.0	400	CH ₄

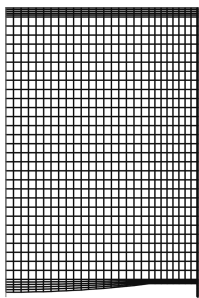


图4 25°ABDC 时计算网格

Fig. 4 The computing mesh of 25° ABDC

4 计算结果与讨论

4.1 催化燃烧对 HCCI 发动机着火时刻影响

从图5可以看出,当活塞顶涂有催化剂涂层时,着火时刻得到提前. 活塞顶无催化剂涂层时,着火时刻为1°BTDC(上止点前),当有催化剂 Pt、Rh 时,着火时刻分别为4°BTDC、5°BTDC,着火时刻分别提前了3、4 °CA;同时,随着着火时刻的提前,压力峰值同时上升,活塞顶无催化剂涂层时,缸内压力峰值为7.2 MPa,有催化剂 Rh 时,缸内压力峰值为7.4 MPa,压力峰值升高了0.2 MPa.

对于 HCCI 发动机来说,最主要的问题是着火时刻的控制. 着火时刻过于靠前,会增加缸内温度峰值,可能会产生严重的敲缸现象,损坏发动机,同时会使 NO_x 的排放增加;着火时刻过于靠后,缸内燃料燃烧不充分,会使未燃 HC 的排放增加. 从图5可以看出,当活塞顶有催化剂涂层时,

着火时刻向前移动的幅度较大,但缸内压力峰值升高的幅度很小,因此催化燃烧对于 HCCI 发动机着火时刻的控制有着其他方法所没有的优势.

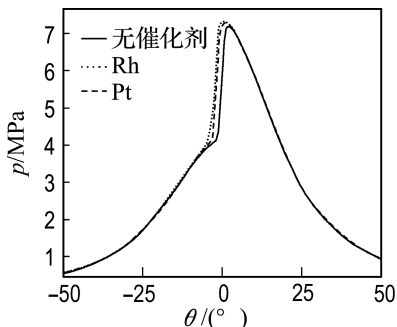


图5 催化燃烧对缸内压力的影响

Fig. 5 Effects of catalytic combustion on pressure in cylinder

4.2 催化燃烧对 HCCI 发动机缸内温度场影响

图6显示了催化燃烧对缸内温度场的影响. 由图可以看出,在5°BTDC时,活塞顶无催化剂涂层、有 Pt 涂层时汽缸内混合气几乎没有着火(见图5),仅在汽缸中心处形成高温区,在缝隙区形成低温区. 活塞顶有 Pt 涂层时,缸内温度场跟无催化剂涂层时差别很微小,只是汽缸中心区温度峰值略有升高. 但当活塞顶有 Rh 涂层时,催化燃烧对缸内温度场影响较大,从图6(a3)可以看出,在活塞顶附近,气体温度已达到1800 K 左右,形成了局部高温区,同时在缸内其他位置,混合气已陆续着火. 在0°BTDC时,上述3种情况下,缸内混合气正处于着火持续期,如图6(b1)~(b3)所

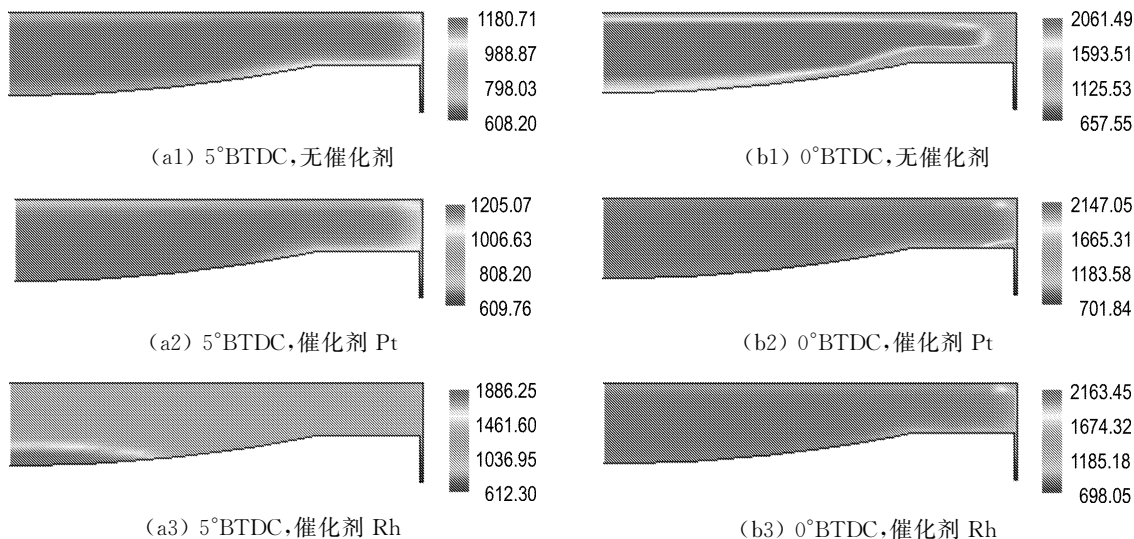


图6 催化燃烧对缸内温度场的影响

Fig. 6 Effects of catalytic combustion on temperature field in cylinder

示,活塞顶无催化剂涂层时,在汽缸中心区域形成明显的高温区,而在边界层及缝隙区气体温度相对较低,缸内温度场较不均匀,中心高温区域与边界层存在温度梯度;当活塞顶有 Pt、Rh 催化剂时,缸内温度场已处于较均匀状态,仅在边界层与缝隙区交接处及缝隙区内存在小块低温区,同时边界层、缝隙区的温度及缸内温度峰值也相应得到提升.

由于催化剂仅涂在活塞顶上层,催化燃烧须

通过活塞顶上层表面边界层温度场来影响整个缸内温度场. 虽然在整個燃烧过程中,缝隙区的温度能随缸内温度的提升而略为升高,但升高的幅度不大,如果要想改变缝隙区温度场,大幅度提升此区间的温度,进一步降低 HC 的排放,可考虑在边界层及缝隙区同时涂加催化剂涂层.

4.3 催化燃烧对 HCCI 发动机排放影响

图 7 显示了催化燃烧对缸内 CO 浓度场的影响.

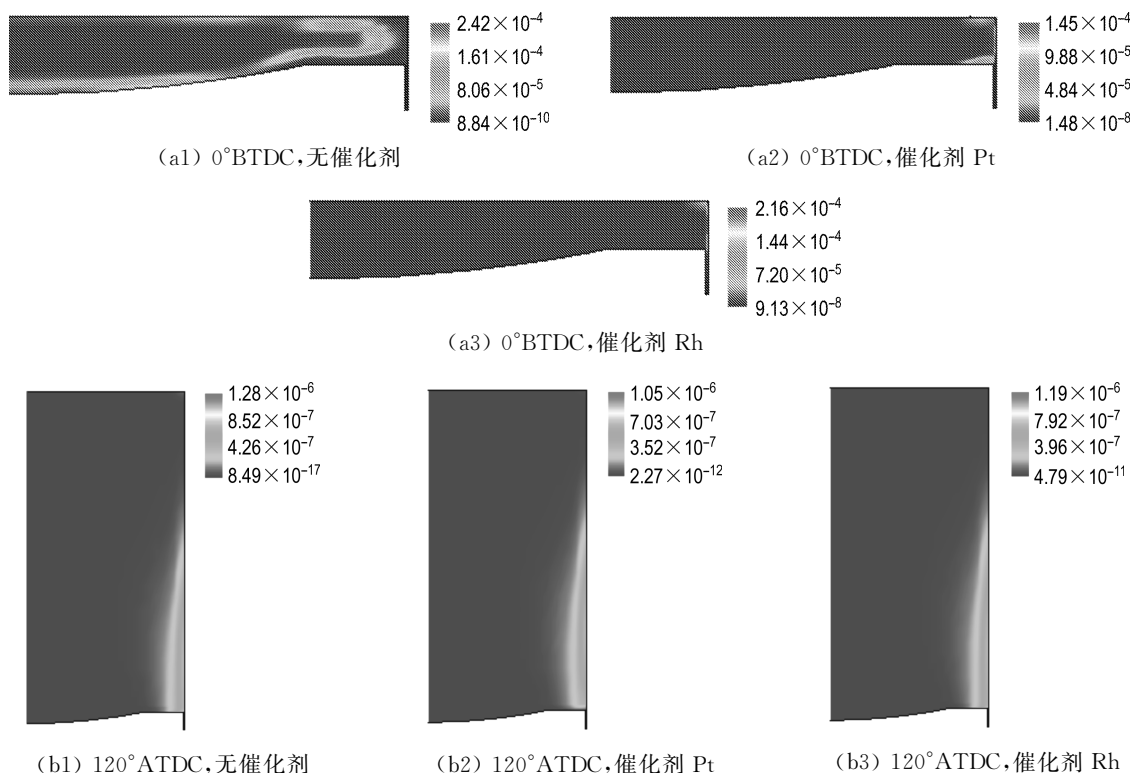


图 7 催化燃烧对 CO 浓度场的影响

Fig. 7 Effects of catalytic combustion on CO concentration field in cylinder

在 0° BTDC 时,活塞顶无催化剂时汽缸中心区域温度较高,由混合气氧化生成的 CO 基本上进一步氧化成 CO₂;缝隙区温度很低,其中的混合气基本上没有发生氧化反应,仅以未燃 HC 的形式存在,因此这两个区域 CO 浓度很低. 在边界层中,由于温度不是很高,由混合气氧化生成的 CO 只有部分进一步氧化成 CO₂,CO 浓度相对较大;当活塞顶有 Pt 催化剂时,汽缸内温度场较均匀且温度较高,整个汽缸内 CO 浓度较低且浓度场较均匀,只有边界层区内有两小区 CO 的浓度较大. 活塞顶有 Rh 催化剂时,由于整个汽缸内温度场相对上述两种情况要更均匀,CO 浓度场也更均匀,不过相对活塞顶有 Pt 催化剂时,边界层区的 CO 浓度峰值要有所升高. 在 120° ATDC 时

(排气阀开启前),虽然在上述 3 种情况下汽缸内 CO 浓度场差异不大,但是 CO 浓度峰值还是有所差别,其中活塞顶无催化剂时 CO 浓度峰值最大,其次是活塞顶有 Rh 催化剂涂层时,活塞顶有 Pt 催化剂涂层时最小.

与使用 Pt 为催化剂相比,使用 Rh 为催化剂时虽然使缸内温度场更均匀,缸内温度峰值更高,但由于甲烷在 Rh 表面进行催化氧化时,CO 的选择性要高于在 Pt 表面,即在相同的工况下,以 Rh 为催化剂时 CO 的含量要高于以 Pt 为催化剂时,使用这两种催化剂时 CO 浓度值的高低主要看上述两种效果的对冲结果(温度升高,CO 浓度降低,同时在 Rh 表面 CO 的选择性要高于在 Pt 表面). 在本文中,当使用 Rh 为催化剂时 CO 的排

放要高于使用 Pt 为催化剂时。

图 8 显示了与活塞顶无催化剂涂层相比,催化燃烧对排放的影响(图中纵坐标为存在催化剂涂层时的排放与无催化剂涂层时的排放之间的比值 R)。

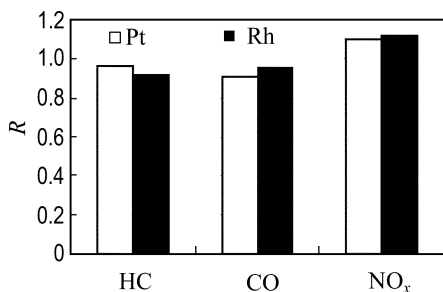


图 8 相比无催化剂涂层时催化燃烧对排放的影响

Fig. 8 Emissions of HC, CO and NO_x (comparison between without catalyst coatings and with catalyst coatings)

当活塞顶存在催化剂 Pt 涂层时,在相同的工作下比活塞顶无催化剂时 HC、CO 的排放分别降低 4%、9%,NO_x 的排放则升高了 10%。当活塞顶涂有催化剂 Rh 时,HC、CO 的排放分别降低 8%、5%,NO_x 的排放升高了 12%。由于 HCCI 发动机比传统的柴油机或汽油机在 NO_x 的排放方面得到了大幅降低,当活塞顶涂有催化剂时,NO_x 排放的略有增加并不影响 HCCI 发动机这一优越性,同时,如果采用催化剂涂层,则 HC、CO 分别得到了降低,这正是 HCCI 发动机目前所急需解决的问题。

5 结 论

(1) 本文采用的甲烷在催化剂 Pt 表面的表面反应详细机理能很好地体现反应历程;

(2) 当活塞顶存在催化剂涂层时,HCCI 发动机着火时刻会大幅提前,且压力峰值有小幅上升;

(3) 当活塞顶存在催化剂涂层时,HC、CO 的总排放有所降低,但 NO_x 的总排放会有所升高;

(4) 当活塞顶存在催化剂 Rh 涂层时,HC 的排放比以 Pt 为催化剂时要低,但 NO_x、CO 的排放要高。

对比催化剂 Pt,虽然催化剂 Rh 降低 HC 排放的幅度要大于 Pt,但会使 CO 排放升高,因此应用中可根据实际需要来选用催化剂。同时可以

考虑采用 Pt-Rh 混合催化剂,利用这两种催化剂同时存在时相互影响的表面反应机理,来达到相比采用单纯的 Pt 或 Rh 时所得不到的效果。

参考文献:

- [1] 解茂昭. 均质压燃(HCCI)发动机数学模拟:进展与挑战[J]. 大连理工大学学报, 2004, **44**(2): 157-165 (XIE Mao-zhao. Mathematical modeling of HCCI engines: progress and challenge [J]. *J Dalian Univ Technol*, 2004, **44** (2):157-165)
- [2] JONES R L. Catalytic combustion effects in internal combustion engines [J]. *Combust Sci Tech*, 1997, **129**(2): 185-195
- [3] HU Z Y, LADOMMATOS N. In-cylinder catalysts-a novel approach to reduce hydrocarbon emissions from spark-ignition engines [R]// SAE Paper 952419. Fuels and Lubricants Meeting and Exposition. Toronto: SAE, 1995:145-151
- [4] HU Z Y. A mathematical model for in-cylinder catalytic oxidation of hydrocarbons in spark-ignition engines [R]// SAE Paper 961196. International Spring Fuels and Lubricants Meeting Dearborn. Michigan: SAE, 1996:192-203
- [5] 曾文,解茂昭,贾明. 催化燃烧对均质压燃发动机燃烧特性影响的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2006, **12**(3): 281-287
- [6] 曾文,解茂昭,贾明. 催化燃烧对均质压燃发动机排放的影响[J]. 燃烧科学与技术, 2007, **13**(1): 55-62
- [7] KONG S C, REITZ R D. Numerical study of premixed HCCI engine combustion and its sensitivity to computational mesh and model uncertainties [J]. *Combust Theory Modeling*, 2003, **7**(3): 417-433
- [8] DEUTSCHMANN O, TISCHER S, KLEDITZSCH S, et al. DETCHEM-Package1.5.4 [R]. Heidelberg: Steinbeis-Transferzentrum-Simulation Reaktiver Stromungen, 2003
- [9] LUTZ A E, KEE R J, MILLER J A. Senkin: a fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis [R]// Technical Report SAND 87-8248. USA: Sandia National Laboratory, 1987
- [10] ALAMOS L. KIVA-3V: A block-structured KIVA program for engines with vertical or canted valves [R]// Los Alamos National Laboratory LA-18818-MS. USA:Los Alamos National Laboratory, 1997
- [11] DEUTSCHMANN O, SCHWIEDERNOCH R,

- MAIER L I, *et al.* Natural gas conversion in monolithic catalysts: interaction of chemical reactions and transport phenomena[J]. **Studies in Surf Sci Catal**, 2001, **136**(2): 251-258
- [12] DOGWILER U, BENZ P, MANTZARAS J. Two-dimensional modelling for catalytically stabilized combustion of a lean methane-air mixture with elementary homogeneous and heterogeneous chemical reactions [J]. **Combust and Flame**, 1991, **16**(2): 243-258
- [13] RAJA L L, KEE R J, DEUTSCHMANN O. A critical evaluation of Navier-Stokes, boundary-layer, and plug-flow models of the flow and chemistry in a catalytic-combustion monolith [J]. **Catal Today**, 2000, **59**(1):47-60
- [14] 曾文,解茂昭. 烷烃催化燃烧的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2005, **11**(6):499-505
- [15] SCHWIEDERNOCH R, TISCHER S, DEUTSCHMANN O, *et al.* Experimental and numerical investigation of the ignition of methane combustion in a platinum-coated honeycomb monolith [J]. **Proc Combust Inst**, 2002, **29**(5): 1005-1011
- [16] SERAUSK B, MICHAEL F. Gri-Mech 3.0 [EB/OL]. [2005-08-24]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mesh/version30/text30.html, 2000

Multidimensional numerical simulation of catalytic combustion in a HCCI engine

ZENG Wen^{*1,2}, XIE Mao-zhao¹, JIA Ming¹

(1. Dept. of Power Eng., Dalian Univ. of Technol., Dalian 116024, China;

2. School of Aero-Engine and Energy Eng., Shenyang Inst. of Aeronaut. Eng., Shenyang 110136, China)

Abstract: By coupling the KIVA-3V engine computational fluid dynamic(CFD) package with the CHEMKIN III and DETCHEM chemical kinetics packages, the effects of catalytic combustion on the combustion process and emissions of homogeneous charge compression ignition(HCCI) engine were simulated. Methane was used as fuel and the detailed surface and gas reaction mechanisms were adopted. The effects of catalytic combustion on the ignition timing, temperature field and HC, CO and NO_x emissions of a HCCI engine whose piston surface was coated with catalyst (rhodium or platinum) were discussed. The results show that the ignition timing is advanced and the emissions of HC and CO are decreased, but the NO_x emission is increased slightly by using catalyst coating on the piston surface. In the same conditions, compared with catalyst Pt, the ignition timing is more advanced, and the emissions of HC are lower, but the emissions of CO and NO_x are higher with catalyst Rh on the piston surface.

Key words: catalytic combustion; homogeneous charge compression ignition (HCCI); chemical kinetics model; numerical simulation; methane;CFD model