

FIE Research：新型OME1-6燃料燃烧反应动力学机理和在变环境条件下喷雾燃烧模拟研究

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/28611.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

FIE

Research：

新型OME1-6燃料燃

烧反应动力学机理和在变环境条件下喷雾燃烧模拟研究。论文标题：Numerical study of novel OME1 – 6 combustion mechanism and spray combustion at changed ambient environments

期刊：Frontiers in Energy

作者：Frederik WIESMANN, Dong HAN, Zeyan QIU, Lukas STRAUß, Sebastian RIEß, Michael WENSING, Thomas LAUER

发表时间：30 Nov 2023

DOI：10.1007/s11708-024-0926-8

微信链接：点击此处阅读微信文章

Front. Energy >> DOI: 10.1007/s11708-024-0926-8

RESEARCH ARTICLE

Numerical study of novel OME₁₋₆ combustion mechanism and spray combustion at changed ambient environments

Frederik WIESMANN¹, Dong HAN², Zeyan QIU², Lukas STRAUß³, Sebastian RIEß³, Michael WENSING³, Thomas LAUER¹

Author information

¹, Institute of Powertrains and Automotive Technology, TU Wien, 1060 Vienna, Austria

², Key Laboratory for Power Machinery and Engineering of Ministry of Education, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

³, Professorship for Fluid Systems Technology, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 91058 Erlangen, Germany

研究亮点

本文开发了一个适用于三维CFD计算的聚甲氧基二甲醚（OME1-6）燃料的反应动力学机理，同时阐明了环境温度、含氧量变化对OME燃烧特性的影响，为低碳燃料发动机技术的发展提供了重要的理论基础。

研究背景及意义

为应对全球气候变化和能源危机的双重挑战，使用新型低碳零碳燃料可有效实现交通运输领域的碳减排并且提高能源利用效率。聚甲氧基二甲醚（OME）作为高含氧量的低碳燃料，可显著减少燃烧过程中碳烟和二氧化碳的排放，因此具备未来作为清洁燃料而广泛使用的潜力。尽管OME燃料在理论上具有显著的碳减排优势，其在实际发动机应用中的燃烧特性和机制尚需深入研究。当前，对于OME燃料在不同工况下的燃烧特性，包括点火延迟、火焰传播和混合气形成等关键过程的理解还不够全面，阻碍了OME燃料在发动机技术中的实际应用。

随着全球范围内对于可持续发展和环境保护要求的提高，使用低碳燃料作为能源供给的清洁发动机研究十分关键。因此，开发能够准确预测OME燃料燃烧特性的反应动力学模型变得尤为重要。这些模型将为发动机设计提供重要的理论指导，可以通过三维CFD仿真优化燃烧过程，减少排放，并提高燃油经济性。

本研究旨在开发适用于三维CFD仿真的OME燃料反应动力学机理，为低碳燃料发动机燃烧技术的发展提供科学依据。通过追踪OH自由基，在CFD仿真中验证了本研究开发的OME反应机理的预测性能。此外，本研究系统分析了OME燃料在不同环境温度和氧含量条件下的喷雾燃烧特性，阐明了通过高瞬态短预喷射的多点喷射模式对火焰结构的影响。本研究为OME燃料在未来能源市场中的应用提供了重要理论基础，为实现绿色、高效的交通运输系统做出贡献。

主要研究内容

本文首先论述了OME燃料作为潜在的碳中和燃料在现代发动机技术中的应用价值和可行性。由于OME燃料中仅包含C-O键，因此可降低碳烟前驱体乙炔的生成。同时，燃料中丰富的氧元素，也使燃烧过程中碳烟的排放显著降低。

其次，本文基于射流搅拌反应器（JSR）实验装置，探究了真实OME燃油的氧化特性随温度和当量比的变化规律。通过物种信息测量和文献中着火延迟实验数据，构建了适用于三维CFD仿真的OME燃油反应动力学机理。通过可视化的高温高压定容燃烧装置，研究了OME燃油的喷雾特性。通过光学手段高速成像技术，捕捉燃油喷雾侧方视图。通过 307 ± 25 nm的带通滤光片，从火焰图像中获得OH*自由基的信号变化，从而确定燃油的着火延迟时间。

随后，本文使用实验测量的OH*化学发光实验得到的点火延迟时间和火焰升举长度数据来验证CFD模型。基于新开发的OME反应动力学模型，通过CFD模拟研究了不同环境温度、氧含量和多次喷射模式对OME燃油自燃过程的影响。研究了低温和高温反应的分布，特别通过甲醛（CH₂O）和羟基（OH）来表征的反应区域。研究结果发现：SJTU机理对于着火延迟预测能力在800-1000 K的温度范围和15%和21%的含氧量下显著改善。

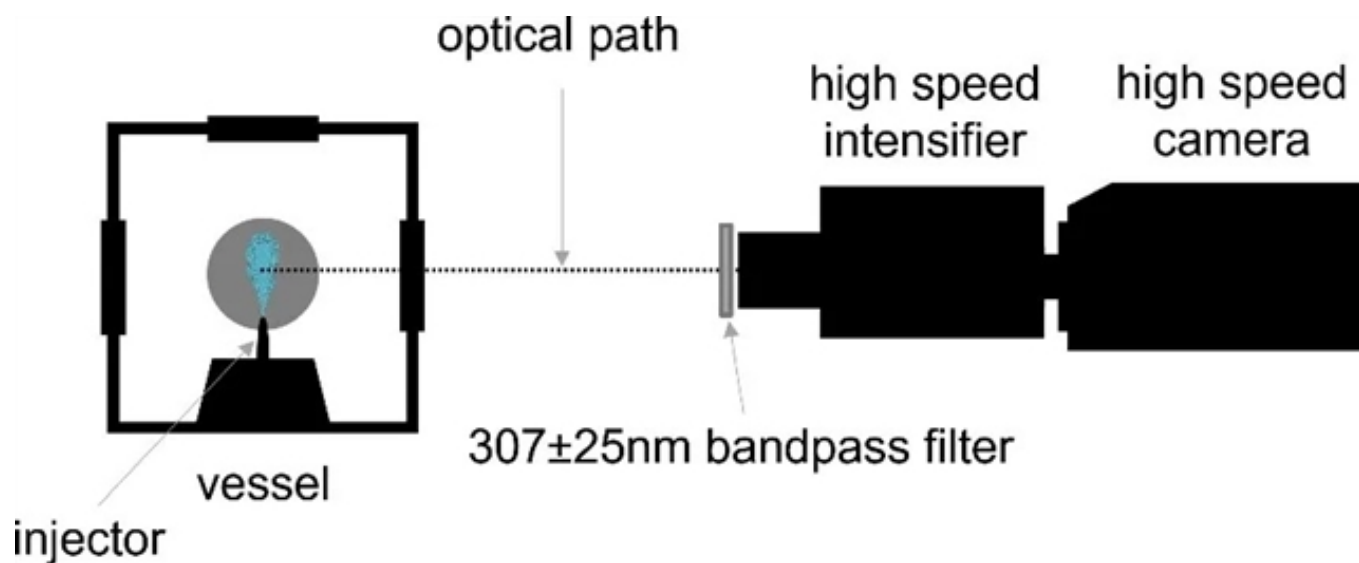


图1 OH*发光法容弹实验装置图

同时，三维CFD仿真结果还表明：低温下CH₂O浓度增加，并集中于喷雾的中心轴线上。且离喷嘴越近，CH₂O浓度越高。在喷雾轴线上，高温下OH和OH*反应活性略有增加。但是，当前OME机理还无法完全复现实验观察到的OH*在喷雾轴附近的高浓度。此外，在单次喷射模式下，喷雾混合区域受新OME机理的影响，向更稀燃混合的状态发展。在多次喷射模式下，新机理预测的点火延迟影响了高温混合区域。

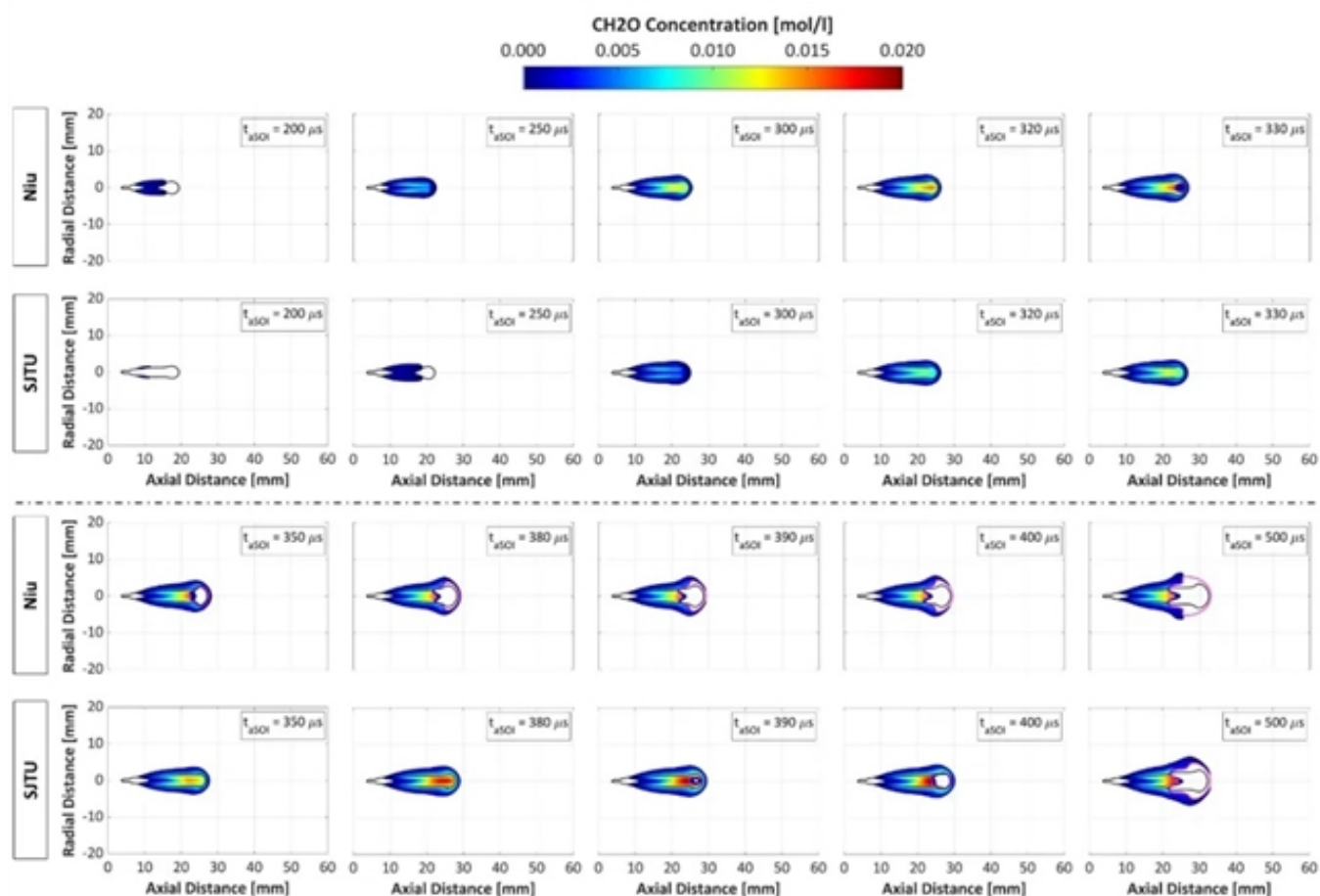


图2 单次喷射中心平面上CH₂O的摩尔浓度等值线

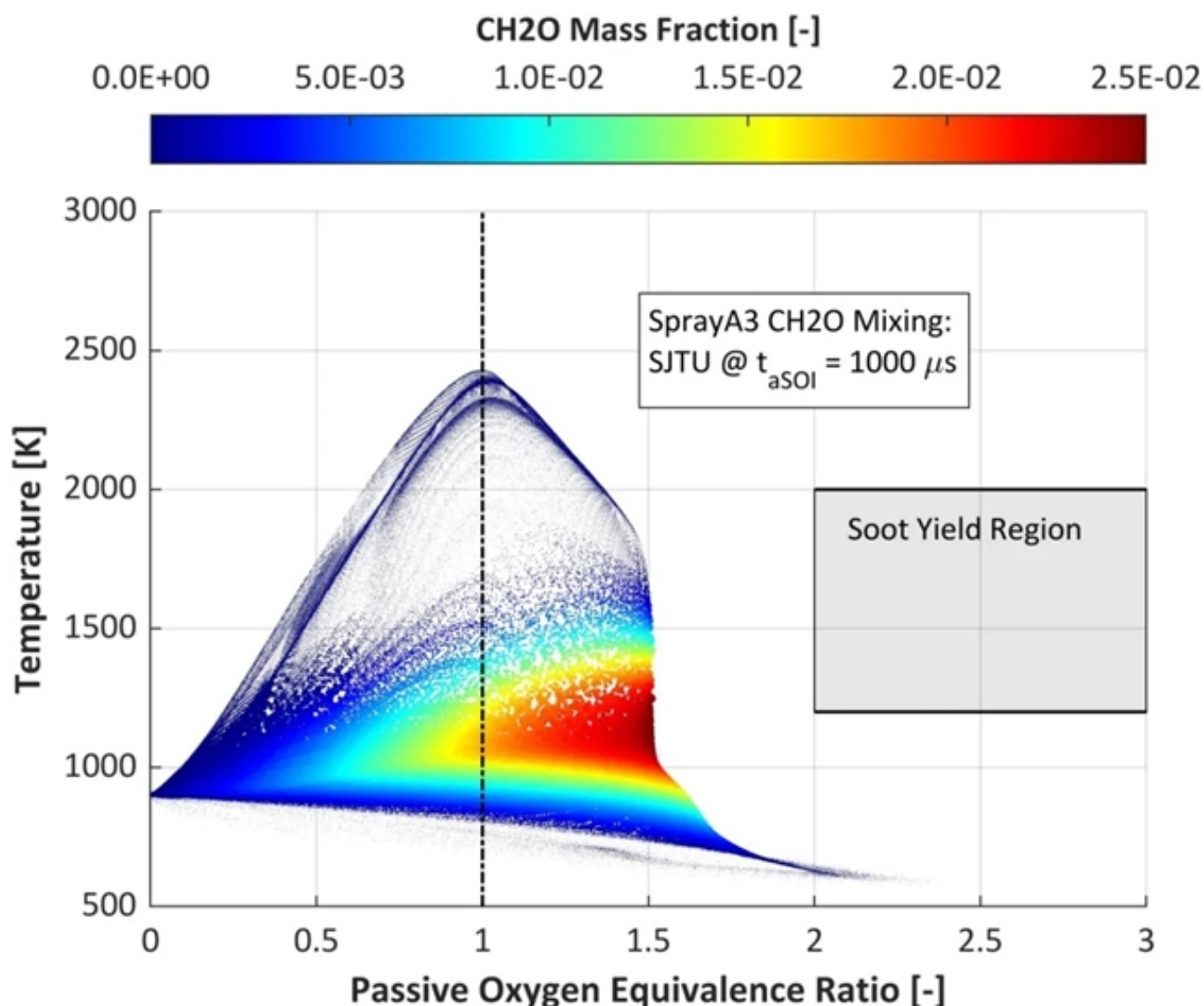


图3 在900 K and 15 % O₂环境下，温度与当量比的关系。

（采用SJTU机理模型。左图：OH质量分数变化；右图：CH₂O质量分数变化。）

最后，本文提出了未来研究的主要重点是比较RANS和大涡模拟（LES）两种模拟在湍流建模时对火焰形态的影响，以及对点火位置和高温反应区的影响。同时，光学实验中观测到OME喷雾在喷嘴附近有非常强烈的OH信号。而这一现象无法通过当前机理再现。之后的研究可以通过在机理中合并激发态的OH*基反应路径来进一步优化OME反应机理。

原文信息

Numerical study of novel OME1 – 6 combustion mechanism and spray combustion at changed ambient environments

Frederik WIESMANN¹, Dong HAN², Zeyan QIU², Lukas STRAU^{β 3}, Sebastian RIE^{β 3}, Michael

Author information :

1. Institute of Powertrains and Automotive Technology, TU Wien, 1060 Vienna, Austria
2. Key Laboratory for Power Machinery and Engineering of Ministry of Education, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China
3. Professorship for Fluid Systems Technology, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 91058 Erlangen, Germany

Abstract :

For a climate-neutral future mobility, the so-called e-fuels can play an essential part. Especially, oxygenated e-fuels containing oxygen in their chemical formula have the additional potential to burn with significantly lower soot levels. In particular, polyoxymethylene dimethyl ethers or oxymethylene ethers (PODEs or OMEs) do not contain carbon-carbon bonds, prohibiting the production of soot precursors like acetylene (C_2H_2). These properties make OMEs a highly interesting candidate for future climate-neutral compression-ignition engines. However, to fully leverage their potential, the auto-ignition process, flame propagation, and mixing regimes of the combustion need to be understood. To achieve this, efficient oxidation mechanisms suitable for computational fluid dynamics (CFD) calculations must be developed and validated. The present work aims to highlight the improvements made by developing an adapted oxidation mechanism for OME1 – 6 and introducing it into a validated spray combustion CFD model for OMEs. The simulations were conducted for single- and multi-injection patterns, changing ambient temperatures, and oxygen contents. The results were validated against high-pressure and high-temperature constant-pressure chamber experiments. OH^* -chemiluminescence measurements accomplished the characterization of the auto-ignition process. Both experiments and simulations were conducted for two different injectors. Significant improvements concerning the prediction of the ignition delay time were accomplished while also retaining an excellent agreement for the flame lift-off length. The spatial zones of high-temperature reaction activity were also affected by the adaption of the reaction kinetics. They showed a greater tendency to form OH^* radicals within the center of the spray in accordance with the experiments.

Keywords :

oxygenated fuels, reaction kinetics, oxidation mechanisms, computational fluid dynamics (CFD), oxymethylene ethers (OME), e-fuels, multi-injection, spray-combustion

Cite this article

Frederik WIESMANN, Dong HAN, Zeyan QIU, Lukas STRAUß, Sebastian RIEß, Michael WENSING, Thomas LAUER. Numerical study of novel OME1 – 6 combustion mechanism and spray combustion at changed ambient environments. *Front. Energy*, <https://doi.org/10.1007/s11708-024-0926-8>



Frontiers *in* Energy

- 中国工程院院刊
- 国际化投审稿和发布平台
- 免费语言润色, 无版面费
- 在线优先出版, 快速进入SCI数据库
- 全方位宣传推广, 提升论文可见度

欢迎了解期刊更多信息

主编团队

主 编



黄 震
中国工程院院士
上海交通大学



周守为
中国工程院院士
中海油集团



苏义脑
中国工程院院士
中石油集团工程
技术研究院



彭苏萍
中国工程院院士
中国矿业大学

副 主 编



张久俊
加拿大三院院士
福州大学



Radenka Maric
美国科学促进会会士
美国康涅狄格大学



Nicolas Alonso-Vante
法国普瓦捷大学



巨永林
上海交通大学

期刊特点

1. 国际化投审稿平台ScholarOne方便快捷。
2. 严格的同行评议(Peer Review)。
3. 免费语言润色，有力保障出版质量。
4. 不收取作者任何费用。
5. 不限文章长度。
6. 审稿周期：第一轮平均30。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发