

生物柴油

DOI: 10.19902/j.cnki.zgyz.1003-7969.210805

生物柴油掺氨对均质压燃发动机燃烧及排放性能的影响

丘 焯, 魏海军, 魏立江, 李精明, 周大平, 吴 刚, 李长熊

(上海海事大学 商船学院, 上海 201306)

摘要:为提升燃料的综合燃烧品质和性能,进一步降低有害物质排放和缓解温室效应,以燃烧动力学和化学反应机制作为理论基础,采用 Chemkin 软件将生物柴油替代物和氨气充分融合,模拟并计算氨气掺混比例分别为 0、5%、10%、15%、20% 的 5 组燃料在均质压燃发动机模式下燃烧和排放指标的数值,对比分析得到不同掺混比例对发动机燃烧和排放的影响和变化规律。结果表明:随着氨气掺混比例增加,燃料的点火滞燃期有所缩短,缸内燃烧最高温度升高,排温降低;排放方面,NO_x的排放升高,CO₂、CO 和总碳氢化合物(THC)的排放均明显降低;生物柴油掺混氨气的最佳比例为 20%,此时发动机功率下降 12 个百分点,NO 的单位功率排放升高了 0.003 kW⁻¹,而 CO₂和 THC 的单位功率排放分别降低了 0.01 kW⁻¹和 0.001 3 kW⁻¹。综上,生物柴油掺混氨气后改善了燃烧性能,降低了排放量,具有良好的应用前景。

关键词:生物柴油;氨气;均质压燃;燃烧;排放

中图分类号:TK421+.5;TQ517 文献标识码:A 文章编号:1003-7969(2023)02-0065-05

Effect of biodiesel mixed with ammonia on the combustion and emission performance of homogeneous charge compression ignition engine

QIU Ye, WEI Haijun, WEI Lijiang, LI Jingming, ZHOU Daping,
WU Gang, LI Changxiong

(Merchant Marine College, Shanghai Maritime University, Shanghai 201306, China)

Abstract: In order to improve the comprehensive combustion quality and performance of the fuel, further reduce the emission of harmful substances and mitigate the greenhouse effect, based on the theoretical basis of combustion kinetics and chemical reaction mechanism, the Chemkin software was used to fully integrate the mechanism of biodiesel substitute and ammonia gas, simulate and calculate the combustion and emission values of 5 groups of fuels with the ammonia gas molar ratio of 0, 5%, 10%, 15% and 20% respectively in homogeneous charge compression ignition engine mode. The effects and change rule of different mixing ratio on engine combustion and emission were compared and analysed. The results showed that with the increase of ammonia gas ratio, the ignition delay period of fuel was shortened, the maximum combustion temperature in the cylinder increased, and the exhaust temperature decreased. In terms of emission, NO_x emission increased, while CO₂, CO and total hydrocarbon (THC) emissions decreased significantly. The optimal ratio of biodiesel blended with ammonia gas was 20%, and under this condition, the engine power decreased by 12 percentage, and the unit power emission ratio of NO increased by 0.003 kW⁻¹, while the unit power emission ratios of CO₂ and THC decreased significantly,

which were 0.01 kW⁻¹ and 0.001 3 kW⁻¹ respectively. In conclusion, biodiesel blended with ammonia gas significantly improves combustion and reduces emissions, and has good application prospect.

Key words: biodiesel; ammonia gas; homogeneous charge compression ignition; combustion; emission

收稿日期:2021-12-27;修回日期:2022-11-03

基金项目:国家自然科学基金(61403250);上海市科技计划(20DZ2252300)

作者简介:丘 焯(1985),男,讲师,博士,研究方向为船舶动力装置技术及节能减排(E-mail)yeqiu@shmtu.edu.cn。

通信作者:魏海军,教授,博士生导师,博士(E-mail)hjwei@shmtu.edu.cn。

当前,全球能源消耗持续增长,导致传统石油资源濒临枯竭。寻找清洁有效、可持续再生的替代燃料已经成为当今世界的焦点。生物柴油是一种潜在的可持续再生燃料,其开发和利用引起人们的普遍关注。有研究表明,船舶燃用生物柴油可以有效地减少硫氧化物(SO_x)、一氧化碳(CO)、颗粒物(PM)以及总碳氢化合物(THC)等有害物质的排放^[1]。然而,生物柴油属于碳基燃料,在燃烧过程中不可避免地排放二氧化碳(CO₂),CO₂是导致全球气候变暖的典型温室气体,当今温室效应问题受到国际广泛关注。为进一步减少碳排放和缓解温室效应,根据巴黎气候协议,我国提出在2030年之前实现碳达峰,到2060年实现碳中和的具体目标^[2]。

根据国际海事组织(International Maritime Organization, IMO)设定的相应目标,到2050年全球航运业温室气体年排放量将控制到2008年的50%以下。为确保全球脱碳目标,低碳/零碳燃料的开发刻不容缓。氨气(NH₃)作为一种零碳燃料,其完全燃烧产物只有氮气和氮化物,前者对大气不造成污染而后者可用选择性催化还原技术(SCR)进行处理还原成氮气,大大降低了尾气处理成本。并且氨气常温下的液化压力远低于氢气(H₂),可以作为氢能的优良载体,通过合成氨方法能实现氢的全球运输^[3-4],因此氨气在船舶上的应用受到广泛关注。

国内外学者做了类似的研究:Reiter等^[5]将氨燃料和柴油以不同组合来实现恒定的发动机功率,结果发现,氨燃料在40%~60%时效果好,另外通过改变氨燃料的用量研究了发动机可变功率与排放的关系发现,发动机的可变功率导致相对较差的燃油效率和较高的废氨排放;Yapicioglu等^[6]在汽油发电机中掺混氨气发现,当氨气比例从60%提高到80%时,发电机功率从3.69 kW下降到3.57 kW,总效率从35.7%下降到28.74%;钟绍华等^[7]通过改变压缩比、进气温度、过量空气等参数研究了氨燃料在内燃机缸内的燃烧性能和正庚烷对氨燃料燃烧性能的提升作用,结果表明,使用正庚烷引燃燃料可以显著降低氨燃料压燃对进气温度和压缩比的要求。然而针对生物柴油和氨气混合燃烧的研究还相对较少,Sivasubramanian等^[8]初步探索发现,生物柴油和氨气混合燃料在柴油机内燃烧具有可行性,但只是对燃烧产物进行了简单的对比,缺少变化的过程。

本文提出将生物柴油和氨气这两种可再生燃料混合以提升燃料综合燃烧品质和燃烧性能,进一步降低有害物质排放和缓解温室效应,结合均质压燃(Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI)发

动机高效率低排放的特点,重点探索研究HCCI燃烧模型下生物柴油掺氨对HCCI发动机燃烧及排放性能的影响。利用Chemkin软件将生物柴油替代物和氨气充分融合,模拟并计算氨气物质的量占比分别为0、5%、10%、15%和20%的5组燃料在HCCI发动机模式下燃烧和排放指标的数值,分析得到不同掺混比例对柴油机燃烧和排放的影响和变化规律,以期研究燃用生物柴油和氨气的混合双燃料对船用发动机的应用提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 发动机参数及反应机制

以上海柴油机厂生产的6135Aca型船用柴油机作为研究对象,该发动机为直列六缸、四冲程、直喷、水冷型,在中国内河小型船舶中有广泛应用,具有典型性,其主要技术参数如表1所示。

表1 6135Aca型船用柴油机参数

项目	参数
功率/kW	162
缸数	6
冲程/mm	150
缸径/mm	135
压缩比	17
连杆长度/mm	270
排量/L	12.88
转速/(r/min)	1500

生物柴油本质上是一种长链脂肪酸基酯,通常与烷烃类燃料混合使用^[9]。由于混合燃料成分复杂,若要构建包含所有组分的化学动力学模型,计算难度很大,因此在模拟计算过程中以替代混合物表征实际燃料。参考裴毅强等^[10]的方法,采用等物质的量的癸酸甲酯(Methyl decanoate, MD)和正庚烷(*n*C₇H₁₆)混合物建立表征生物柴油的着火和燃烧反应机制。癸酸甲酯和正庚烷的化学反应机制参照美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)的使用机制,氨气的化学反应机制则参照Stagni^[11]、Song^[12]等的研究机制。测试获得癸酸甲酯、正庚烷和氨气的物性参数对比,如表2所示。

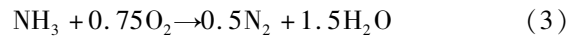
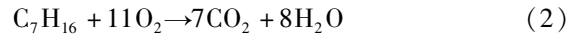
表2 癸酸甲酯、正庚烷、氨气的物性参数对比

参数	癸酸甲酯	正庚烷	氨气
分子式	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	<i>n</i> C ₇ H ₁₆	NH ₃
分子质量/Da	186	100	17
辛烷值		15~25	110
低热值/(MJ/kg)	34	44.93	18.8
密度(20℃)	0.873 g/cm ³	0.684 g/cm ³	0.707 g/L
运动黏度(40℃)/(m ² /s)	1.72	0.511	
沸点/℃	94	98.5	-33.4

1.2 模型参数与模拟计算

化学反应计算采用 Chemkin 软件,选择 HCCI Engine Simulator 反应器,发动机输入表 1 的参数,保持转速 1 500 r/min,为保证燃料充分燃烧,采用实际空气量为理论空气量的 2 倍(即当量比为 0.5)。钟绍华^[7]、王时野^[13]等的研究表明,一定条件下癸酸甲酯和氨气压燃的理论初始温度的参考值分别为 177 °C 和 127 °C,因此选取初始温度为 147 °C。另外,选取初始压力为 0.22 MPa。为了便于计算,以等物质的量的癸酸甲酯和正庚烷代表生物柴油,并分别与掺混比例为 0、5%、10%、15% 和 20% (以癸酸甲酯、正庚烷和氨气总物质的量计)的氨气混合得到 5 组燃料,模拟并计算各组 HCCI 发动机的燃

烧和排放指标的数值。其中癸酸甲酯、正庚烷和氨气三者完全燃烧的化学反应式分别如公式(1)~公式(3)所示。



依据化学反应式和当量比为 0.5 确定各组所需的空气量。为便于比较,保持各掺混组总物质的量一定。随着氨气掺混比例的增大,所需的空气量减少,氩气(Ar)是惰性气体,不影响燃烧反应结果,因此减少的量用氩气进行填充以保持各组总物质的量一定。各组混合物质的物质的量见表 3。

表 3 各组混合物质的物质的量

组别	MD	$n\text{C}_7\text{H}_{16}$	NH_3	O_2	N_2	Ar	合计
1	0.500	0.500	0	26.50	99.64	0.86	128
2	0.475	0.475	0.05	25.25	94.94	6.81	128
3	0.450	0.450	0.10	24.00	90.24	12.76	128
4	0.425	0.425	0.15	22.75	85.54	18.71	128
5	0.400	0.400	0.20	21.50	80.84	24.66	128

2 结果与讨论

2.1 不同燃料混合比例对滞燃期的影响

为了更准确判断燃料着火时刻,在 Chemkin 软件中同时设置反应温度超过 127 °C 和缸内羟自由基初次达到峰值这两个参数。图 1 表示不同氨气掺混比例的燃料点火延迟时间,即滞燃期。由图 1 可知,燃料的滞燃期随着氨气掺混比例增加而缩短,这是由于在该条件下生物柴油因黏度高、碳链长等因素分解缓慢,点火时间较氨气长。因此,向生物柴油中掺混氨气可以减少燃烧延迟,提高燃烧性能。

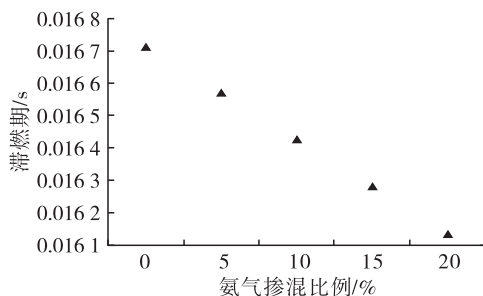


图 1 不同氨气掺混比例下的滞燃期对比

2.2 不同燃料混合比例对缸内温度的影响

图 2 为不同氨气掺混比例的燃料缸内温度随曲轴转角变化的情况对比。由图 2 可知,随着氨气掺混比例增加,滞燃期缩短,燃料点燃时刻也分

别相对提前了 2°~5° 曲轴转角,缸内最高温度也随之升高。这是由于氨气在高温高压下与空气发生剧烈的燃烧反应时,部分氨气分解成氢气,氢气的存在加剧了燃烧反应的程度且伴随更多的热量释放,并且氨气增加的同时癸酸甲酯和正庚烷混合燃料的物质的量相应减小,汽化潜热减小,从而导致缸内温度升高。

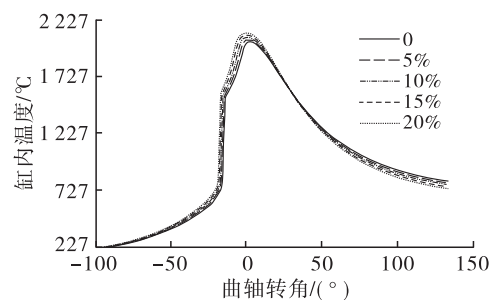


图 2 不同氨气掺混比例下的缸内温度对比

2.3 不同燃料混合比例对 NO_x 排放的影响

图 3~图 5 分别为不同氨气掺混比例的燃料 NO、N₂O 和 NO₂ 的排放对比。由图 3 可知,NO 的排放随着氨气掺混比例增加而增加,这是由于氨气属于高含氮型燃料,氨气的加入相当于氮含量增加,同时缸内温度升高(见图 2),NO 排放增加。N₂O 和 NO₂ 是 NO 进一步发生氧化还原反应的产物,它们的变化趋势与 NO 的密切相关,N₂O 和 NO₂ 的排放也

随氨气掺混比例增加而增大。尽管氨气的加入导致 NO_x 排放增加,但各组 NO_x 排放的总占比较小,并且在发动机实际应用中,可通过氨燃料与尾气中的 NO_x 进行氧化还原等后处理降低 NO_x 排放。

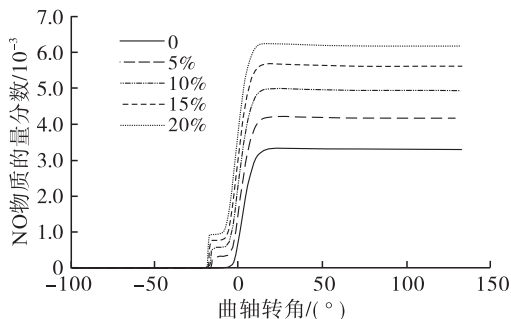


图3 不同氨气掺混比例下 NO 排放对比

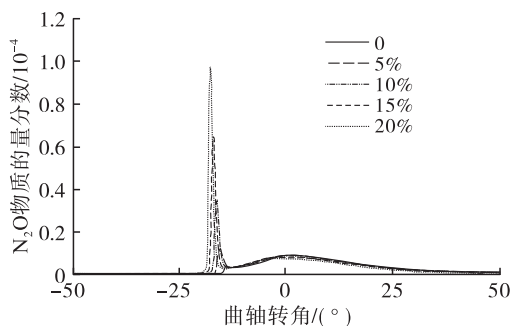


图4 不同氨气掺混比例下 N_2O 排放对比

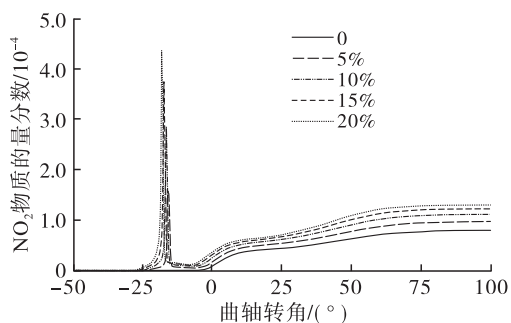


图5 不同氨气掺混比例下 NO_2 排放对比

2.4 不同燃料混合比例对 CO_x 排放的影响

图6和图7分别为不同氨气掺混比例的燃料 CO_2 和 CO 排放对比。由图6和图7可知, CO_2 和 CO 排放都随着氨气掺混比例增加而降低,且降碳效果非常显著。由于氨气不含碳,燃烧过程中无 CO_x 生成,因此理论上 CO_x 的减少量应与生物柴油的被替代量相等。当量比为0.5属于稀薄燃烧,氧气充足,上止点附近虽产生 CO 较多,但最后大部分 CO 均已转化为 CO_2 ,因此 CO_x 排放以 CO_2 为主。从图6可以看出,随着氨气掺混比例增加, CO_2 排放的最大减少量达20%,模拟结果和理论保持一致。 CO 生成机制和 NO 相反,即高温环境下会减少 CO 生成,加入氨气导致缸内温度较高(见图2),一定程度上抑制

了 CO 的生成。

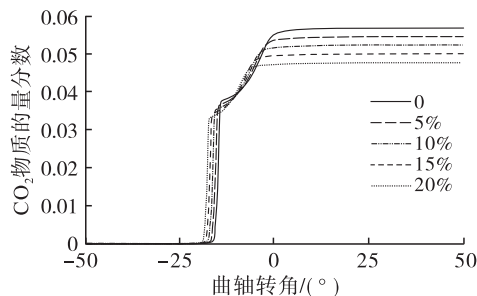


图6 不同氨气掺混比例下 CO_2 排放对比

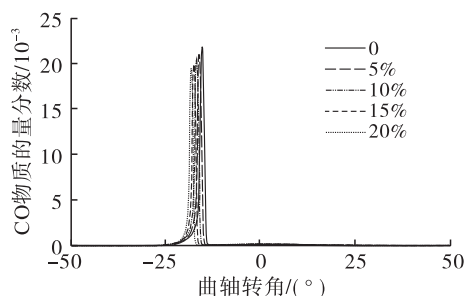


图7 不同氨气掺混比例下 CO 排放对比

2.5 不同燃料混合比例对总碳氢化合物(THC)排放的影响

不同氨气掺混比例的燃料 THC 排放对比如图8所示。由图8可知,随着氨气的加入,THC 排放迅速减少,并随着氨气等量增加的同时 THC 相应等量地减少,这是由于氨气不含碳,燃烧过程和燃烧产物均无 THC。此外,氨气的加入营造了更高温的燃烧环境,促使发动机更完全燃烧,也是导致 THC 降低的原因之一。

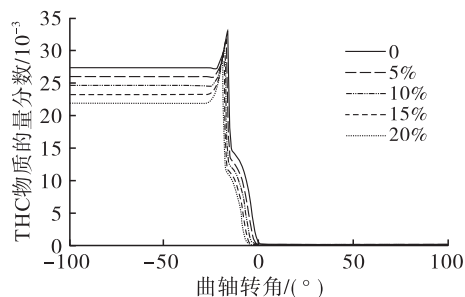


图8 不同氨气掺混比例下 THC 排放对比

2.6 功率输出的变化和单位功率排放的对比

图9是以氨气掺混比例为0时功率输出100%作为基准,对不同比例氨气掺混后燃料的功率输出降低值对比。由图9可知,生物柴油掺混氨气后的功率输出随着氨气掺混比例增加略有下降,这是由于氨气热值低于生物柴油。当氨气掺混比例达到20%时,发动机功率下降12个百分点,能满足大部分工况。

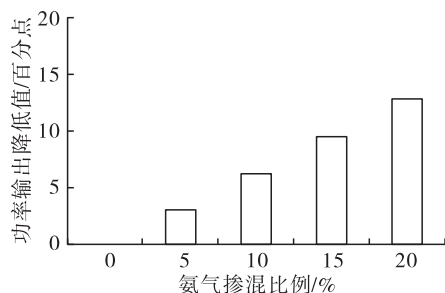


图9 不同氨气掺混比例下功率输出变化对比

图10是不同氨气掺混比例下各物质单位功率排放对比。从图10可以看出:氨气掺混比例增大时,THC的单位功率排放有微小的减幅,NO的单位功率排放略有增加,而CO₂的单位功率排放明显降低;与未掺混氨气相比,氨气掺混比例在20%时,NO的单位功率排放升高0.003 kW⁻¹,而CO₂和THC的单位功率排放分别降低0.01 kW⁻¹和0.001 3 kW⁻¹。

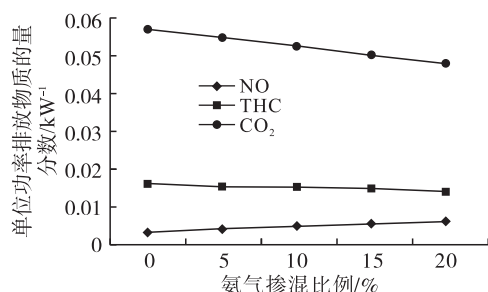


图10 不同氨气掺混比例下NO、CO₂和THC的单位功率排放对比

3 结论

本文研究了生物柴油掺混不同比例氨气在HCCI发动机模式下的燃烧及排放的主要指标,对其进行模拟计算和数值对比分析,得到以下结论:

(1) 燃用生物柴油发动机掺入一定量的氨气能提高燃料燃烧品质,可促进燃烧、缩短燃料滞燃期,有利于提高机械效率和提升发动机性能,减少有害物质的排放。

(2) 生物柴油掺混氨气后NO_x排放略有升高,但对CO₂、CO和THC的减排效果十分显著。NO_x的新增量远小于CO₂、CO和THC的减少量,且NO_x可在后期进行还原处理。因此,生物柴油掺混氨气对发动机降低碳排放具有积极的意义。

(3) 发动机输出功率随氨气掺混比例的增加略有降低,当氨气掺混比例为20%时,输出功率下降

12个百分点。在单位功率排放方面,与掺混前相比,氨气掺混比例在20%时NO的排放升高了0.003 kW⁻¹,CO₂和THC的排放分别降低了0.01 kW⁻¹和0.001 3 kW⁻¹。生物柴油和氨气的组合在发动机尤其在船舶双燃料方面具有良好应用前景。

参考文献:

- [1] 吴刚,江国和,杨智远,等. 燃用生物柴油对柴油机颗粒生成和排放特性研究进展[J]. 环境科学研究, 2019, 32(11): 1809-1817.
- [2] 赵睿,许乐平,冯是全,等. 燃料掺氢对船用天然气发动机燃烧和排放的影响[J]. 推进技术, 2020, 41(11): 2549-2557.
- [3] 陈达南,李军,黄宏宇,等. 氨燃烧及反应机理研究进展[J]. 化学通报, 2020, 83(6): 508-515.
- [4] 周上坤,杨文俊,谭厚章,等. 氨燃烧研究进展[J]. 中国电机工程学报, 2021, 41(12): 4164-4182.
- [5] REITER A J, KONG S C. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel[J]. Fuel, 2011, 90(1): 87-97.
- [6] YAPICIOGLUY A, DINCER I. Experimental investigation and evaluation of using ammonia and gasoline fuel blends for power generators[J]. Appl Therm Eng, 2019, 154: 1-8.
- [7] 钟绍华,万桂芹,严利群. 氨燃料燃烧性能数值模拟与分析[J]. 内燃机工程, 2014, 35(3): 46-51.
- [8] SIVASUBRAMANIAN R, SAJIN J B, PIILLAI G O. Effect of ammonia to reduce emission from biodiesel fuelled diesel engine[J]. Int J Ambient Energ, 2022, 43(1): 661-665.
- [9] 吴刚,江国和,杨智远,等. DICI发动机燃用生物柴油振荡特性研究[J]. 中国油脂, 2019, 44(1): 148-152.
- [10] 裴毅强,郑朝蕾,张博. 生物柴油替代混合物化学动力学模型构建及路径分析[J]. 物理化学学报, 2014, 30(2): 217-226.
- [11] STAGNI A, CAVALLOTTI C, ARUNTHANAYOTHIN S, et al. An experimental theoretical and kinetic-modeling study of the gas-phase oxidation of ammonia[J]. React Chem Eng, 2020, 5: 696-711.
- [12] SONG Y, MARRODAN L, VIN N, et al. The sensitizing effects of NO₂ and NO on methane low temperature oxidation in a jet stirred reactor[J]. P Combust Inst, 2019, 37(1): 667-675.
- [13] 王时野,姚丽,张均东. 癸酸甲酯与正丁醇在低速柴油机中均质压燃燃烧与排放[J]. 推进技术, 2020, 41(11): 2558-2565.