



申请上海交通大学博士学位论文

# 柴油模型燃料的构建及其在新型燃烧模式 中的基础研究

国家杰出青年科学基金项目（51425602）

973 重大基础研究项目（2013CB228405）

**专 业：** 动力机械及工程

**博士生：** 钱 勇

**导 师：** 吕兴才 教授

上海交通大学机械与动力工程学院

2017 年 12 月



15001080



**Ph.D. Dissertation Submitted to Shanghai Jiao Tong University**

**A New Methodology for Diesel Surrogate Fuel Formulation and its Basic  
Researches in New Combustion Mode**

**National Science Fund for Distinguished Young Scholars (51425602)**

**National Basic Research Program (2013CB228405)**

**Author:** Yong Qian

**Advisor:** Prof. Xingcai Lu

**Specialty:** Power Machinery and Engineering

School of Mechanical Engineering

Shanghai Jiao Tong University

December 2017



15001080



# 上海交通大学

## 学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权上海交通大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

保密 ，在\_\_\_\_年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密 。

(请在以上方框内打“√”)

学位论文作者签名：

指导教师签名：

日期： 年 月 日

日期： 年 月 日



15001080



# 上海交通大学

## 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：

日期：        年    月    日



15001080





# 柴油模型燃料的构建及其在新型燃烧模式中的基础研究

## 摘要

随着对内燃机超效率和近零排放的不断追求,迫切需要人们准确掌握实际燃料在发动机缸内的精准物理化学过程。但实际柴油组分十分复杂,一般包含上百种甚至上千种组分,且组分及其比例均存在不确定性。针对实际柴油组分的复杂性、波动性,采用有限组分且比例确定的混合物构建合理的柴油模型燃料,使其理化性质、应用性能与实际柴油相同或接近,对柴油燃烧基础理论研究以及实际应用研究均有重要意义。目前已有的柴油模型燃料构建方法更多是从燃料本身的物理化学特性以及官能团和碳原子分布角度出发,无法真正反映柴油在实际发动机的运行性能。

基于上述观点,本文立足于实际柴油理化性质以及柴油在发动机中的燃烧和排放性质,提出构建柴油模型燃料的新方法。本文首先测量与分析了柴油中的主要碳族组分及其质量分数;在此基础上,在柴油中添加高比例模型燃料的主要候选单体(包括四种直链烷烃、三种支链烷烃、两种环烷烃、四种芳香烃),从而调制柴油的物理化学特性,精确计算和测量混合燃料的密度、黏度、表面张力、十六烷指数、馏程曲线等主要理化参数。为了尽可能探明每一种成分的理化特性参数对发动机性能与排放的影响,在一台改造的单缸发动机上开展了发动机试验,并且针对每一种燃料在同一工况下分别进行了相同喷射时刻以及相同着火时刻(CA10)的两组试验。通过对实际柴油理化性质的测定以及柴油添加不同模型燃料组分在发动机上的燃烧排放性质,本文以实际柴油密度、表面张力、不饱和度以及十六烷指数为关键参数,提出构建柴油模型燃料数学模型,并分别构建三组分、五组分以及七组分柴油模型燃料。

考虑到实际发动机运行过程中参数的多样性(包括负荷、喷油策略、废气再循环等)以及实际柴油组分的复杂性,本文进一步在不同发动机运行工况对模型燃料进行验证。研究结果表明:本文所构建的多组分模型燃料均可以精确复现实际发动机不同负荷条件下缸内燃烧过程;在排放特性方面,氮氧化物的吻合非常好,CO在中等负荷下与柴油存在较小的偏差。在全负荷范围内,五组分模型燃料各种气态排放物的累计偏差最小;三组分、五组分模型燃料在较宽的直喷正时条件下均能准确再现柴油燃烧过程;在不同直喷正时条件下,模型燃料与柴油CO、NO<sub>x</sub>排放均十分接近,五组分模型燃料HC排放及颗粒物总目排放较三组分模型燃料更接近柴油;采用两段喷射模式时,模型燃料能再现缸内柴油早喷引起的低温放热现象。在预喷时刻较早时,模型燃料CO排放较柴油高,且这种差异随着预喷时刻的推迟而降低。模型燃料HC排放不同预喷时刻下均较柴油高,NO<sub>x</sub>排放与柴油在不同预喷时刻条件下均十分接近。在预喷时刻较早时,模型燃料由于产生大量核膜态颗粒物,导致颗粒物总目较柴油高,随着预



喷时刻的推迟, 颗粒物总数目与柴油大致相同; 在 EGR 率低于 60% 时, 模型燃料与柴油缸内压力曲线和燃烧历程均十分吻合, 但 EGR 率为 60% 时, 模型燃料燃烧相位较柴油推迟约  $0.5^{\circ}\text{CA}$ 。与之对应的是, CO 排放在低 EGR 率时与柴油十分接近, 但当 EGR 率达到 60% 时, 模型燃料 CO 排放高于柴油。在不同 EGR 率条件下, 模型燃料 HC 排放均略高于柴油, NO<sub>x</sub> 排放与柴油十分接近; 模型燃料中分别添加甲基壬基甲酮、菲时, 在中小负荷下 CO 略有升高, 添加氯代十二烷、1-十四烯会改善颗粒物排放, 添加甲基壬基甲酮对颗粒物总数目排放影响不大, 添加三环芳香烃菲会导致颗粒物排放急剧增大。

预混合压缩燃烧模式 (Premixed Charge Compression ignition: PCCI) 采用高 EGR 率结合缸内多段喷射的可燃混合气组织模式, 燃料的反应活性对预喷柴油的缸内活化过程以及主喷柴油的燃烧滞燃期都具有重要影响; 燃料的挥发性对缓解缸内预喷柴油的碰壁以及燃油在缸内整体分布规律十分关键。因此, 在前文构建模型燃料的基础上, 进一步通过调制五组分柴油模型燃料的成分及其比例, 分别控制燃料的十六烷值和挥发性, 对比研究了 PCCI 模式下燃料十六烷值及挥发性对燃烧和排放的影响。研究表明: 在相同直喷正时下, 燃料十六烷值对燃烧相位起主导作用; 低十六烷值燃料有助于抑制 PCCI 模式下预喷燃料的过早燃烧, 且随着直喷燃料十六烷值的降低, 燃烧持续期不断缩短, 放热更集中, 但会导致较高的压力升高率; 排放方面, 降低直喷燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放增大, 直喷不同十六烷值燃料颗粒物粒径峰值大小关系不固定, 但降低燃料十六烷值对抑制粒径大于 20nm 颗粒物排放效果显著。单喷策略下, 提高燃料挥发性可降低 CO 排放; 在预喷比较低时, 改善燃油的挥发性可有效降低预喷柴油导致的较高 CO 排放, 但随着预喷比的增大, 提高燃油挥发性对 CO 排放改善作用被弱化; 在预喷时刻较早时, 燃料挥发性对 CO 排放改善作用明显, 但预喷时刻晚于  $40^{\circ}\text{CA}$ , 提高燃料挥发性对 CO 排放的抑制能力下降; 在不同的预喷时刻下, 提高燃料的挥发性均使得粒径介于 20nm 至 200nm 的颗粒物数目浓度降低。通过归一化分析发现, 提高燃油挥发性在不同的喷油控制条件下均能改善 CO、HC 排放及指示油耗, 降低燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放及指示油耗升高; 在试验工况条件下, 通过调整喷油策略, 可实现低 NO<sub>x</sub>、低油耗工况, 其中在保证 NO<sub>x</sub> 排放低于 200ppm 前提下, 提高燃油挥发性更具降低指示油耗潜力, 在优化喷油策略的基础上, 通过调制燃料理化性质可使得指示油耗低于 180g/kWh。

化学反应动力学控制压缩燃烧模式 (Reactivity Control Compression Ignition: RCCI) 由于采用气道喷射加缸内直喷的双喷油策略, 对燃油种类的适应性更好, 成为国际研究热点。本文基于提出的柴油模型燃料并结合三组分汽油模型燃料 (TRF), 通过调制柴油模型燃料十六烷值、汽油模型燃料辛烷值, 系统的研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性 (气道喷射燃料比例) 对燃烧过程的影响。主要结论如下: 气道喷射高辛烷值燃料时, 缸内直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧相位起主导作用; 随着气道喷射燃料辛烷值降低, 燃烧相位不断提前, 燃烧持续期逐渐缩短。在低预混合率下, 随着气道喷辛烷值的增大, CO 排放逐渐降低; 在预混合率为 0.6 时, 辛烷值在 80 左右时, CO 排放最低, 辛烷值的升高及降低, 均会使得 CO 排放升高; 在预混合率较高时, 随着辛烷值的增大, CO 排



放不断增大。HC 排放与气道燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值间关系复杂，在低预混合率时，HC 排放在低 RON 低 CN 区域排放较高，随着 RON 的降低、CN 的增大，HC 排放逐渐降低；在预混合率为 0.6、0.8 时，分别存在一个高 HC 排放区域，在该区域的两侧，HC 排放逐渐降低。预混合率的增大可有效抑制 NO<sub>x</sub> 排放及颗粒物排放，且使得颗粒物几何平均直径下降；通过系统研究直喷燃料十六烷值、气道喷射燃料辛烷值以及预混合率，发现在有效着火范围内，预混合率 0.8、CN30 配合 TRF70 时，NO<sub>x</sub> 排放较低。非常规排放方面，RCCI 模式烃类氧化物排放和烯炔烃排放主要受预混合率控制，在低预混合率时，烃类氧化物排放较低，随着预混合率的增大，烃类氧化物排放不断增大，且在燃烧恶化区域，烃类氧化物排放急剧增大。RCCI 模式指示油耗随着预混合率的增大有下降的趋势。在预混合率为 0.4、0.6 时，指示油耗随着缸内燃料反应活性增大而不断降低；在预混合率 0.8 时，气道喷 TRF70 结合缸内直喷 CN30，指示油耗降至 185g/kWh，且此时 NO<sub>x</sub> 排放也低至 250ppm，据此提出气道喷低辛烷值燃料（Low RON fuel）、缸内直喷低十六烷值燃料（Low CN fuel）的 LLRCCI 模式。与 DI、PCCI 模式对比发现，LLRCCI 模式 NO<sub>x</sub> 排放最低，且能改善 DI 模式颗粒物排放，指示油耗介于 DI 模式与 PCCI 模式之间，但 LLRCCI 模式 HC、CO 及有害非常规排放较高。

**关键词：**柴油模型燃料；燃烧及排放；高压共轨；燃油与发动机相互作用；预混合压缩燃烧；  
化学反应动力学控制压缩燃烧



15001080



# A New Methodology for Diesel Surrogate Fuel Formulation and its Basic Researches in New Combustion Mode

## ABSTRACT

In the continuous pursuit of internal combustion engines with high efficiency and near-zero emissions, it is necessary to comprehensively understand the physical and chemical processes of the in-cylinder combustion. However, fossil fuels (including gasoline, diesel and kerosene) are of complex compositions, including hundreds or even thousands of hydrocarbon components. Given the complexity and uncertainty of diesel compositions, studying the fundamental combustion processes and mechanism of diesel fuel presents a great challenge, in particular the gaseous and particulate pollutant formation mechanisms. A reasonably designed diesel surrogate is proved to be an effective way to study the fundamental combustion mechanism of diesel fuel. However, most existing diesel surrogates mainly adopt light hydrocarbon components, increasing the difficulty of accurately reflecting the physical and chemical properties of the commercial diesel fuel or the combustion and emissions characteristics of diesel engines.

Therefore, in this study, a methodology to construct diesel surrogates with  $C_{10} \sim C_{18}$  hydrocarbon components based on fuel properties and engine combustion and emissions characteristics was proposed. First, the key physical and chemical fuel properties that affect fuel injection, atomization, ignition, combustion, engine efficiency and emissions were discussed in detail. Second, 13 candidate components were chosen to represent n-alkanes, iso-alkanes, cycloparaffins and aromatics and blended with commercial diesel fuel in different proportions. Fuel injection, spray, ignition and combustion phase, engine efficiency and emissions versus changed blending component and proportion were systematically investigated. In particular, the effects of the cetane number and fuel volatility on combustion and emissions were investigated under fixed injection timing and fixed ignition timing conditions, respectively. Afterward, the key physical and chemical parameters of the surrogate fuels were defined, and the constraint equations were constructed for different parameters. Finally, three diesel surrogates were proposed, including a 3-Components surrogate (41.3% n-hexadecane, 36.8% 2,2,4,4,6,8,8-heptamethylnonane (HMN), 21.9% 1-methylnaphthalene, by mol.), a 5-Components surrogate (21.6% n-hexadecane, 15.5% n-octadecane, 26.0% HMN, 20.7% 1-methylnaphthalene, 16.2% decalin, by mol.) and a 7-Components surrogate (21.5% n-hexadecane, 15.4% n-octadecane, 25.8% HMN, 13.7% 1-methylnaphthalene, 8.1% decalin, 8.1% n-butylbenzene, 7.4% n-butylcyclohexane, by mol.).

Considering the diversity of parameters during the actual engine operation (including engine loads, fuel injection strategies, exhaust gas recirculation, etc.) and the complexity of the actual diesel components, this paper further validates the surrogate fuels under different engine operating conditions, and compares the combustion process and main exhaust emissions of diesel and multi-component surrogates. In addition, considering the effects of trace components in diesel fuel including olefins, halogenated hydrocarbons, polycyclic aromatic hydrocarbons and hydrocarbon oxygenates on the combustion characteristics of diesel fuel, the above components were blended into the surrogate fuel in a certain proportion to study the effect on surrogate fuel combustion and emissions. The results show



that the three-component surrogate fuel and the five-component surrogate fuel can accurately reproduce the diesel combustion process under the wide range of engine load and direct injection timing. Under different direct injection timings, the CO and NO<sub>x</sub> emissions of surrogate fuels and diesel are all very close. The HC emissions and the total number of particulate emissions of five-component surrogate fuel are closer to diesel than those of three-component fuel. The surrogate fuel can also reproduce the low-temperature combustion phenomenon caused by the early injection of diesel as the two-stage injection strategy is used. The CO emissions of surrogate fuel are higher than those of diesel when the pilot injection is earlier, but this difference is reduced with the delay of pilot injection timing. The HC emissions of surrogate fuels are higher than those of diesel under different pilot injection timings, while the NO<sub>x</sub> emissions are very close to each other. As the earlier pilot injection timing, the surrogate fuels produce a large number of nucleation mode particles, resulting in the total particle number larger than that of diesel, but with the delay of pilot injection timing, the total particle number concentrations of surrogate fuels and diesel are roughly the same. When the EGR rate is less than 60%, the pressure curve and combustion process of surrogate fuels are in good agreement with diesel. However, the surrogate fuel combustion phase is delayed by about 0.5°CA. Correspondingly, CO emissions are very close to diesel at low EGR rates, but when the EGR rate reaches 60%, the surrogate fuel CO emissions are higher than those of diesel. At different EGR rates, HC emissions of surrogate fuels are slightly higher than those of diesel fuel, and NO<sub>x</sub> emissions are very close. Blending the five-component surrogate fuel with trace-components in diesel have trivial effect on the in-cylinder pressure and combustion process. Only when methyl nonyl ketone and phenanthrene are blended into surrogate fuel, the CO emissions are slightly higher in the small and medium load. Blending dodecane, and 1-tetradecene with surrogate fuel will improve the particulate matter emissions, and adding methyl nonyl ketone has little effect on the total number of particulate matter, but the addition of phenanthrene will lead to a sharp increase in particulate emissions.

Premixed Charge Compression Ignition (PCCI) mode adopts high EGR ratio combined with in-cylinder multi-stage injection to form the combustible mixture. The reactivity of fuel is important for the in-cylinder activation process of pilot-injected diesel and the combustion delay of main-injected diesel. The volatility of the fuel is very critical to mitigate the impingement of the pilot-injected diesel fuel and the overall distribution of the fuel in the cylinder. Therefore, based on the previous constructed surrogate fuel, the effects of fuel cetane number and volatility on combustion and emissions are further investigated by modulating the composition and ratio of the five-component diesel surrogate fuel in the PCCI mode. The results show that the cetane number of the fuel plays a decisive role in the combustion phase at the same direct injection timing. Low cetane number fuel helps to prevent premature combustion of pilot injection fuel in PCCI mode, and with the decrease of cetane number of direct injection fuel, the combustion duration is shortened and the heat release process is more concentrated, which results in a higher pressure rise rate. In the aspect of emissions, reducing the cetane number of the direct injection fuel will result in an increase in CO and HC emissions. The relationship between the cetane number of direct injection fuel and the peak value of particle size distribution is not fixed, however, the reduction of fuel cetane number has a significant effect on the inhibition of particles greater than 20nm. Under the single injection strategy, improving fuel volatility only has an inhibitory effect on CO emissions and has minor impact on HC emissions and NO<sub>x</sub> emissions. When the pilot injection ratio is low, improving the volatility can effectively inhibit CO emissions resulting from the pilot injection fuel. However, with the increase of the pilot injection ratio, the effect of improving fuel volatility on CO emission improvement is weakened. When the pilot injection timing



is earlier, the effect of fuel volatility on CO emission is obvious, but when the pilot injection timing is later than  $40^{\circ}\text{CA}$ , the ability of fuel volatility to reduce CO emission is decreased. At different pilot injection timings, the improvement of fuel volatility decreases the number concentration of particles with the diameter between 20nm to 200nm. The normalization analysis reveals that the improvement of fuel volatility can decrease CO and HC emissions and reduce indicated fuel consumption, while the reduction of fuel cetane number will lead to the increase of CO and HC emissions and indicated fuel consumption. Under the test conditions, adjusting the fuel injection strategy can achieve low NOx emissions and low fuel consumption. Under the premise that NOx emission is lower than 200ppm, improving fuel volatility has a great potential for reducing fuel consumption.

Reactivity Control Compression Ignition (RCCI) has become an international research hotspot because of the dual fuel injection strategy of injection in both cylinder and inlet port, which is more adaptable to the fuel type. Based on the proposed diesel surrogate fuel combined with the three-component gasoline surrogate fuel (TRF), the effects of the reactivity of port-injected fuel, direct-injected fuel and the in-cylinder mixture (the ratio of port-injected fuel) on the combustion process in RCCI mode were systematically studied by modulating the cetane number of diesel surrogate fuel and the octane number of gasoline surrogate fuel. The main conclusions are as follows: When the octane number of the port-injected fuel is high, the cetane number of direct-injected fuel plays a dominant role in the combustion phase of RCCI mode. As the octane number of port-injected fuel decreases, the combustion phase is gradually advanced and the combustion duration is gradually shortened. With the same premixed ratio, the octane number of port-injected fuel plays a leading role in CO emissions. When the premixed ratio is low, the CO emissions gradually decrease as the octane number increases. When the premixed ratio is 0.6 and the octane number is about 80, CO emissions are the lowest, and both the increase and decrease in octane number result in the increase of CO emissions. When the premixed ratio is high, the CO emissions gradually increase with the increase of octane number. The octane number of port-injected fuel and cetane number of direct-injected fuel have complex effects on HC emissions. When the premixed ratio is low, HC emissions are higher under both low octane number and low cetane number conditions. As the octane number decreases and cetane number increases, the HC emissions gradually decrease. When the premixed ratio is 0.6 and 0.8, there is a high HC emissions region, respectively. On both sides of the region, HC emissions gradually reduce towards the low fuel reactivity direction, which is mainly due to the lower combustion temperature in the cylinder and fuel is converted to CO emissions. The increase in the premixed ratio will increase the CO and HC emissions, at the same time suppress the NOx and particulate matter emissions and reduce the particulate matter geometric mean diameter. In terms of the un-regulated emissions, hydrocarbon oxygenates, alkenes and alkynes are primarily controlled by premixed ratio in RCCI mode. The hydrocarbon oxygenates emissions are lower at low premixed ratio. With the increase of premixed ratio, the hydrocarbon oxygenates emissions gradually increase, and in the combustion deterioration area, the hydrocarbon oxygenates emissions increase sharply. The indicated fuel consumption has a decreasing trend as the premixed ratio increases in RCCI mode. At the premixed ratio of 0.4 and 0.6, the indicated fuel consumption decreases as the in-cylinder fuel reactivity increases. At the premixed ratio of 0.8, port injection with RON70 and direct injection with CN30, the indicated fuel consumption decreases to 185g/kWh and NOx emissions decrease to 250ppm. The LLRCCI mode, port injection with low RON fuel and direct injection with low CN fuel, is expected to achieve efficient clean combustion. Compared to DI and PCCI modes, LLRCCI mode has the lowest NOx emissions and can improve the particulate matter emissions of DI mode. Besides, the indicated fuel consumption of



LLRCCI mode is between DI mode and PCCI mode, while HC, CO and harmful un-regulated emissions of LLRCCI mode are higher.

**Keywords:** Diesel surrogate; Combustion and emissions; Common rail diesel engine; Fuel and engine interaction; Premixed Charge Compression ignition (PCCI); Reactivity Control Compression Ignition (RCCI)





# 目录

摘 要.....	I
ABSTRACT .....	V
目录 .....	IX
<b>第一章 绪论.....</b>	<b>1</b>
1.1 引言 .....	1
1.2 模型燃料构建方法.....	2
1.2.1 柴油模型燃料的喷雾研究.....	4
1.2.2 柴油模型燃料着火与燃烧机理 .....	5
1.2.3 柴油模型燃料在压燃式发动机上燃烧排放特性.....	9
1.3 采用模型燃料研究新型燃烧模式燃烧特性.....	10
1.3.1 HCCI 燃烧模式.....	11
1.3.2 PCCI 燃烧模式.....	11
1.3.3 RCCI 燃烧模式.....	12
1.4 课题研究目的、意义和主要工作内容 .....	14
1.4.1 课题的目的和意义 .....	14
1.4.2 课题的主要工作内容.....	14
<b>第二章 试验系统和研究方法.....</b>	<b>17</b>
2.1 概述 .....	17
2.2 试验系统.....	17
2.2.1 试验台架.....	17
2.2.2 试验用发动机.....	18
2.2.3 试验仪器.....	18
2.3 研究方法.....	19
2.3.1 柴油模型燃料构建与验证方法 .....	20
2.3.2 基于模型燃料的新型燃烧模式影响因素的研究.....	21
2.4 排放测试设备 .....	21
2.5 主要参数定义.....	24
2.6 本章小结.....	25
<b>第三章 模型燃料候选组分对发动机燃烧及排放的影响.....</b>	<b>27</b>
3.1 概述 .....	27
3.1.1 实际柴油的组分分析.....	27
3.1.2 候选组分的选取及其主要理化性质 .....	28
3.1.3 测试燃料及其理化性质 .....	29
3.2 正构烷烃对燃烧和排放的影响 .....	31
3.3 异构烷烃、环烷烃对燃烧及排放影响的对比研究.....	36
3.5 芳香烃对燃烧和排放的影响 .....	41
3.6 本章小结 .....	46
<b>第四章 基于实际发动机性能与排放构建柴油模型燃料.....</b>	<b>49</b>
4.1 概述 .....	49



9 787030 500108

4.2 影响发动机性能的主要燃料参数.....	49
4.3 相同喷射时刻与相同着火时刻对比.....	51
4.4 燃油理化参数对燃烧和排放的影响.....	55
4.4.1 馏程特性的影响.....	55
4.4.2 十六烷指数的影响.....	58
4.4.3 组分 H/C 比的影响.....	60
4.5 柴油多组分模型燃料的构建.....	62
4.6 本章小结.....	64
<b>第五章 柴油模型燃料工况及组分验证.....</b>	<b>67</b>
5.1 概述.....	67
5.2 模型燃料负荷验证.....	68
5.3 模型燃料喷油策略验证.....	71
5.3.1 不同直喷时刻下, 模型燃料与柴油燃烧和排放对比.....	71
5.3.2 不同预喷时刻下, 模型燃料与柴油燃烧和排放对比.....	73
5.4 EGR 率对模型燃料燃烧和排放性质的影响.....	76
5.5 微量组分对模型燃料燃烧和排放的影响.....	78
5.6 本章小结.....	80
<b>第六章 基于模型燃料的 PCCI 模式影响因素研究.....</b>	<b>83</b>
6.1 概述.....	83
6.2 喷油策略、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响.....	84
6.2.1 直喷时刻、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响.....	87
6.2.2 预喷比、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响.....	90
6.2.3 预喷时刻、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响.....	94
6.3 喷油策略、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响.....	99
6.3.1 预喷比、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响.....	100
6.3.2 预喷时刻、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响.....	102
6.4 燃料十六烷值、挥发性对 PCCI 模式影响的归一化分析.....	104
6.5 本章小结.....	106
<b>第七章 基于模型燃料的 RCCI 模式燃烧影响因素研究.....</b>	<b>109</b>
7.1 概述.....	109
7.2 直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧和排放的影响.....	109
7.3 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式燃烧和排放的影响.....	115
7.4 RCCI 模式燃烧排放影响的综合分析.....	120
7.5 LLRCCI 与 DI、PCCI 燃烧模式的对比.....	126
7.6 本章小结.....	130
<b>第八章 全文总结及展望.....</b>	<b>133</b>
8.1 全文总结.....	133
8.2 工作展望.....	136
<b>创新点说明.....</b>	<b>138</b>
<b>参考文献.....</b>	<b>139</b>
<b>符号与缩写.....</b>	<b>149</b>
<b>致谢.....</b>	<b>153</b>



15001080

攻读博士学位期间发表的学术论文 .....	155
攻读博士学位期间所获奖励 .....	157
攻读博士学位期间参与的科研项目 .....	157



15001080



# 第一章 绪论

## 1.1 引言

自第二次工业革命以来,石化能源的消耗速率呈爆发式增长,其中尤以内燃机的发明以及采用内燃机为动力的汽车产业的大规模增长,消耗了大量的石油资源。二十世纪70年代左右相继爆发的石油危机,使人们充分意识到石油资源弥足珍贵[1]。另一方面,虽然汽车工业给人们带来了极大的便利,但由于以往人们忽视汽车尾气排放对环境的危害,大量的有害气体释放到环境中去,进而引起了一系列的环境污染问题,如洛杉矶光化学烟雾事件、东京光化学烟雾事件等。随着全球范围内对环境污染问题的重视,至上世纪七十年代末期,人们开始对汽车尾气排放建立严格的法规制度。随着时间的推移,排放法规也不断严苛,如欧洲排放法规从欧一逐步发展到欧六法规[2]。中国从1983年开始颁布第一部汽车排放法规至今,国五排放法规已逐步开始实施。

为应对不断增加的燃油需求以及日益严格的排放法规,内燃机工业领域相继开发了一系列革新技术。在点燃式发动机方面,可变气门技术、缸内直喷分层稀薄燃烧技术、涡轮增压技术以及进排气热管理策略等技术手段有效提高了燃油经济性[3-6];与此同时,传统点燃式发动机中三元催化器的使用很好的解决了有害气体排放问题[7,8]。而在压燃式发动机方面,由于采用较高的压缩比以及无节气门等特点,燃油经济性较高[9],但采用上止点附近高压喷入燃油的油气混合方式,燃油没有足够的时间与缸内空气混合,从而导致燃烧过程中局部浓区和局部稀区的出现,进而导致颗粒物排放和氮氧化物排放较高[10]。

为破解柴油机高颗粒物排放及高氮氧化物排放的困局,很多学者探索了包括更高的燃油喷射压力、废气再循环(EGR)、发动机替代燃料、先进动力循环、高效后处理等多种技术手段,以寻求在保证燃油较高经济性的同时降低压燃式发动机有害排放[11-15]。其中,燃油品质的提升,也是改善压燃式发动机燃烧的一个极其重要环节。基于对柴油理化性质的充分认知,优化燃油在内燃机中的燃烧过程,以提高燃油经济性,同时抑制有害气体排放,这对缓解巨额能源消耗困局以及环境污染问题都具有重要意义。

燃油品质标准与排放法规相伴发展。表1以0#柴油为例,给出了国二柴油国家标准颁布以来主要改进的物性指标。从表1中可以看到,柴油油品的改善首先是从限制硫含量开始的。这是因为含硫量较高的柴油一方面会产生较高的硫氧化物排放,且会进一步造成二次环境污染;另一方面硫含量较高会导致柴油车后处理模块失效,也会导致较高的污染物排放[16,17]。针对柴油油品的改善还包括密度的降低、十六烷值的提高以及芳香烃含量的降低[18,19]。事实上,在柴油制备过程中,需要人为添加十六烷值改进剂的方式控制十六烷值并通过催化加氢等方式控制芳香烃含量。由于原料来源以及制备工艺的特征,针对十六烷值的提升以及芳香烃含量的控制需要较高的成本。而随着排放法规的日益严格,针对车用柴油品质的要求也越来越高[20]。



优化柴油油品改进的成本控制与发动机油品需求之间的关系，需要深入了解柴油各组分在燃烧过程中的作用，尤其是芳香烃含量对颗粒物排放改善的作用关系。

表 1-1 国家标准中 0#柴油主要改进指标

Table 1-1 The main improvement index of 0 # light diesel fuel in China national standards

改进项目	国二	国三	国四	国五
	GB252-2000	GB19147-2009	GB19147-2013	GB19147-2013
硫含量/(mg/kg)	2000	350	50	10
多环芳香烃/ wt%	-	11	11	11
十六烷值	45	49	49	51
十六烷指数	-	46	46	46
密度(@20°C)/(kg/m <sup>3</sup> )	820~860	810~850	810~850	810~850

随着对发动机超高效率、近零排放的不断追求，研究者先后提出一系列新型燃烧模式，包括均质压缩燃烧模式（HCCI）、预混合压缩燃烧模式（PCCI）以及反应动力学控制压缩燃烧模式（RCCI）。与传统压缩燃烧模式燃油混合速率决定燃烧速率不同，新型燃烧模式均加强了缸内燃油的混合过程，燃油在缸内化学反应动力学特征与燃油的物理特性对缸内燃烧过程及污染物生成同等重要，因而，针对新型燃烧模式的研究要求进一步掌握燃油在缸内流动、混合过程以及化学反应特性。与此同时，计算机技术的飞速进步以及流动、燃烧计算理论不断发展，数值计算在内燃机设计领域的应用越来越广泛[21-23]，尤其近几年来数值计算在新燃烧模式发展中的重要探索作用，也要求进一步掌握柴油在缸内的燃烧化学动力学机理[23-26]。

与之矛盾的是，柴油一般是由几百种甚至上千种碳氢化合物组成的混合物，其具体的化学成分随着制备原料来源、制备工艺等多种因素的改变而改变[27]。柴油的综合理化性质是复杂组分的统计属性，基于柴油组分波动较大的自然属性以及较为宽泛的组分种类，建立详细的柴油燃烧过程仿真计算模型具有极大的挑战。事实上，针对复杂燃油组分的简化工作由来已久[28]。建立一种由三元、四元或多元组分的柴油模型燃料，在能较为准确的模拟出柴油宏观理化参数的同时，并能准确预测出柴油在不同燃烧模式下的排放产物，对计算过程的简化具有较高的现实意义，这对发动机结构设计、燃烧过程设计都具有重要意义[29]。

## 1.2 模型燃料构建方法

由于计算资源和计算效率的局限性以及实际成品燃料的复杂性，在燃料科学领域经常使用模型燃料来代替目标商业燃料[30]。而模型燃料的构建通常是为了复现特定属性，即要满足实际燃料的物理化学特性参数。Edwards 和 Maurice[31]认为模型燃料的构建可以分为两类：基于物理特性的模型燃料，主要复现商用燃料物理特性；基于化学特性的模型燃料，通常要包含商用燃料主要成分的化学分子类型。事实上，实际燃料的每一项物理特性、化学特性都可能会对燃烧过程以及整机性能产生一定影响。因此，准确的模型燃料要能够复现目标燃料的主要特性，



包括：燃料特性（化学组分、碳氢比、密度、分子量、蒸发特性、碳烟生成趋势、反应活性、绝热火焰温度、燃烧速度等）、发动机特性（着火、放热、性能、排放）[32]。而模型燃料的验证一方面可以通过标准燃烧设备（预混火焰、激波管、快速压缩机、射流搅拌反应器、流动反应器、烟点仪等）对他们的产物历程、着火特性、火焰特性（熄火界限、层流火焰、湍流火焰）等进行比较。然而，最重要的一方面是模型燃料与实际发动机性能进行直接比较。

对于汽油而言，通常是采用气道喷射或者缸内较早时刻直接喷射的方式来形成可燃混合气，在火花点火之前，大部分燃料已经与空气充分混合，燃料的物理特性（如馏程、密度、黏度、表面张力等）不会对着火相位、燃烧过程、排放物生成产生重要影响，反而是化学特性、分子结构起决定性影响，因此在汽油模型燃料的构建方面，人们广泛采用基于化学特性（官能团法）的方法准确复现燃料的辛烷值、烷烃/烯烃/芳烃比例、烟点等，从而建立多组分汽油模型燃料。如 Pera 等人[33]重点关注氢碳比（H/C）和辛烷值这两项指标，使用 13.7%正庚烷、42.8%异辛烷、43.5%甲苯（摩尔比）的混合物构建了欧洲 95 号无铅汽油的模型燃料。Morgan 等人[34]利用正庚烷、异辛烷、甲苯分析了研究法辛烷值和马达法辛烷值的三维势能面，以此作为构建汽油模型燃料的基础。Li 等人[35]考虑到中国汽油中芳烃比例的限制，控制 H/C 和研究法辛烷值相同，发展了正庚烷、异辛烷、甲苯的三组分模型燃料。Mehl 等人[36]强调了 H/C 对火焰传播速度的影响，同时考虑到燃料辛烷值和辛烷值敏感系数（RON-MON），据此提出了正庚烷、异辛烷、甲苯、2-戊烯组成的四组分模型燃料。Perez 等人[37]采用正庚烷、异辛烷、甲苯、甲基环己烷（MCH）、1-己烯构建了汽油模型燃料，运用点火质量测试仪（IQT）测量了燃料的着火延迟，同时利用一台 CFR（Cooperative Fuels Research）发动机测量了 HCCI 的着火延迟与燃烧速率。Naik 等人[38]选取十六烷值、辛烷值、低热值、沸点、以及反映碳烟生成的 H/C 等参数为主要目标，同时结合实际汽油各成分的比例，构建了八组分模型燃料来复现美国汽油。

对于柴油以及航空燃料，其在发动机上的燃烧过程是混合速率控制燃烧速率，燃料的物理特性直接决定喷射雾化特性、燃空混合过程、燃烧室内油气分布，而燃料的化学特性主要决定着着火时刻、碳烟生成、燃烧速率和持续时间、效率与排放等。很显然，针对柴油/航空燃料这类燃料构建多组分模型燃料，仅仅关注化学特性和燃料中官能团族类分布很难满足要求。针对航空燃料，Dooley 等人[39, 40]提出了基于官能团理论来构建模型燃料的方法，在满足平均分子量、H/C、十六烷值、碳烟生成门限值（TSI）四个指标的基础上，提出了针对 POSD4658 的三组分和四组分模型燃料，而四组分燃料更能够复现目标燃料的一些主要特性[41]。考虑到馏程的准确性对燃空混合过程有十分重要的影响，Bruno 等人[42]提出了改进的馏程测量方法，并进一步研究了模型燃料的密度、声速、黏度等物理指标，据此提出的三组分模型燃料与实际燃料密度、馏程、黏度吻合很好[43]。Violi 等人[44]将燃料的十六烷值、热值、H/C 比、分子量、密度、黏度、表面张力、馏程作为目标值，采用加权方法获取相关参数，构建了航空煤油多组分模型燃料[45]，而 Schulz 等人[46]为了兼顾航空燃料的物理特性和化学特性，更是提出了航空燃料的十二组分模型燃料。



针对柴油模型燃料构建, Mueller 等人[47]认为模型燃料复现柴油馏程特性对燃料蒸发混合和燃烧过程的准确模拟至关重要。因此, 他们详细分析了柴油理化特性, 并采用 13 种组分的混合燃料准确复现柴油的馏程特性, 且比较了混合燃料与柴油着火特性、密度、黏度、烟点等多种性质[48]。Reiter 等人[49]基于柴油不同碳族组分密度、黏度、十六烷值、十六烷值四参数耦合关系, 提出构建模型燃料的算法。通过该算法, 他们发展出十组分模型燃料能准确复现柴油的馏程、芳烃含量、闪点、热值、黏度等理化参数。Pitz 等人[50]则从柴油组分分子官能团特征角度, 系统的总结了不同组分对构建柴油模型燃料的重要性。由于柴油组分比较复杂, 他们将柴油分为直链烷烃、支链烷烃、环烷烃、烯烃、单环芳香烃以及多环芳香烃。直链烷烃中, 他们认为正庚烷、正十烷、正十二烷、正十四烷、正十六烷是柴油的重要组成成分; 支链烷烃中七甲基壬烷较为重要; 环烷烃中重要的有乙基环己烷、丙基环己烷、丁基环己烷以及十氢化萘; 单环芳香烃重要的有甲基苯、乙基苯、丙基苯、丁基苯、二甲苯以及癸基苯; 多环芳香烃则是 1-甲基萘。Farrell 等人[51]详细分析了柴油模型燃料。他们认为除癸烷、异辛烷、甲基环己烷以及甲苯外, 十六烷、七甲基壬烷、癸基苯以及 1-甲基萘也是重要的柴油模型燃料。

柴油是一种具备上百种甚至上千种组分的碳氢混合物, 其中链烷烃约占 50~65%, 环烷烃约占 20~30%, 芳香烃约占 10~30%[52]。柴油在压燃式发动机上的燃烧是喷雾、流动以及化学动力学高度耦合的多维问题。尤其是近年来先进燃烧模式的提出, 燃料的物理性质、化学性质与发动机燃烧和排放耦合密切。构建柴油模型燃料, 模型燃料与柴油在挥发性、分子官能团分布、化学反应动力学机理、实际发动机中燃烧排放特性等方面的差异均需充分考虑。Su 等人[53]总结分析柴油模型燃料构建时指出: 燃油的挥发性、密度、黏度、低热值、化学组分、氢碳比、着火特性(十六烷值)等性质对模型燃料准确再现燃油燃烧过程影响较大。由于柴油组分的不确定性, 以及包含众多  $C_{10}\sim C_{26}$  的分子, 并且由于  $C_{10}$  以上分子难于开展气相燃烧的研究, 最近国际上针对柴油模型燃料的构建进行了大量的探索[54]。

## 1.2.1 柴油模型燃料的喷雾研究

缸内直喷压燃式发动机运行过程中, 燃油的喷雾对燃料浓度场的形成以及对后续化学反应进程至关重要[55-57], 针对柴油复杂组分的喷雾、蒸发以及燃烧详细化学动力学过程的模型研究具有较大的挑战性, 采用模型燃料研究柴油缸内混合、蒸发及燃烧特性由来已久[58, 59]。正庚烷、异辛烷等轻质组分混合物首先被选作参比燃料。Perini 等人[60]采用数值计算的方法研究了 75%正庚烷及 25%异辛烷作为模型燃料时, 涡流比及喷射压力对混合气以及缸内传热的影响。Golovitchev 等人[61]采用 70%正庚烷和 30%甲苯作为模型燃料, 并采用 KIVA-3V 软件分别针对重型柴油机和轻型柴油机压燃式发动机喷雾燃烧进行研究。研究发现提高喷射压力会增大喷油贯穿距及喷雾锥角, 同时也会降低油雾的平均粒径, 这有利于油气的充分混合。此外, 多段喷射可以避免燃油碰壁。

考虑到轻质组分与柴油物性差异较大, Myong 等人[62, 63]研究正辛烷、正十二烷、正十





六烷三种烷烃及其三组分混合燃料的喷雾特性时发现，油束液相长度受燃料特性的影响较大，高沸点燃料在多组分燃料喷雾过程中控制液相贯穿距长度。Zhang 等人[64]研究了多组分燃料雾化及燃烧过程，发现轻质组分在喷雾过程中较早气化，重质成分在喷雾油束的外围分布比例较高。Siebers 等人[65, 66]在研究柴油缸内贯穿距时，采用七甲基壬烷、正十六烷分别作为液相燃料模拟柴油并与柴油进行对比。研究发现在大致相同条件下，柴油贯穿距较七甲基壬烷和正十六烷大。这主要是由于柴油挥发性弱于七甲基壬烷及正十六烷，这种差异在低温时（低于 700K）尤为明显，但在高温条件下（高于 1300K）差别不大。Aye 等人[67]采用不同比例的正癸烷以及 1-甲基萘作为柴油模型燃料，比较了不同配比的正癸烷/1-甲基萘模型燃料对喷雾贯穿距的影响。研究发现添加饱和蒸汽压较低的正癸烷会导致贯穿距下降，喷雾锥角增大。

Som 等人[68]在比较不同数值计算软件模拟柴油喷雾及燃烧特性时，分别采用正庚烷和正十二烷为模型燃料。Neroorkar 等人[69]采用 70%的正癸烷和 30%1-甲基苯作为柴油模型燃料研究了燃油在喷口内的流动问题，发现由于模型燃料与实际柴油理化性质的差异，导致在高压条件下，模拟结果与试验测得值有一定偏差。Iyengar 等人[70]系统的研究了燃油物理性质对喷雾的影响。他们分别采用正十四烷、正十四烷/正癸烷/1-甲基萘的混合物作为模型燃料。研究发现具有低挥发性的正癸烷使得三组分混合模型燃料较正十四烷提前蒸发。Srivastava 等人[71]采用数值模拟的方式研究了多组分模型燃料湍流喷雾。他们对比了由正癸烷/1-甲基萘二元模型燃料以及正癸烷/正十二烷/正十四烷/正十六烷/甲苯组成的六元模型燃料的喷油贯穿距的差异。研究发现在大致相同的条件下，六元模型燃料相较于二元模型燃料有更高的贯穿距。Schihl 等人[72]采用正十二烷、正十四烷以及正十六烷作为模型燃料来研究柴油蒸发速率及十六烷值对发动机的影响。他们发现正十二烷沸点接近柴油 5%蒸馏点；七甲基壬烷沸点接近柴油 30%蒸馏点；正十四烷沸点接近柴油 50%蒸馏点；正十六烷沸点接近柴油 80%蒸馏点；正十七烷沸点接近柴油 90%蒸馏点。通过对比柴油及正十六烷在不同温度压力条件下的贯穿距，发现正十六烷与柴油最为接近。

上述研究发现，构建准确的柴油模型燃料必须考虑燃油物理性质对喷雾、蒸发、混合的影响。但仅简单的将模型燃料组分混合或基于目前提出的模型燃料，由于燃料物理性质与柴油存在较大差异，很难准确复现喷射燃料在缸内喷雾、混合过程。模型燃料准确复现柴油喷雾、混合过程还需深入研究。

## 1.2.2 柴油模型燃料着火与燃烧机理

柴油是由正构烷烃、异构烷烃、环烷烃以及芳香烃等不同结构特征的碳氢化合物组成的混合物，其化学动力学特征由各组分的化学性质共同决定。目前，燃料燃烧化学动力学研究发现，即使单组分高链烷烃或具有复杂结构的单组分烷烃，其详细化学动力学机理就已经包含上千种甚至上万种中间反应物质，基元反应也会达到上万步[73]，建立详细的实际柴油燃烧化学动力学机理难度由此可见[74]。因此，在模型燃料的基础上，构建模型燃料燃烧化学动力学机理是



解决柴油燃烧动力学应用的有效方法。

## (1) 正构烷烃着火与燃烧机理

正构烷烃在柴油中占有较高比例，一般的，正构烷烃具有较高的反应活性。在早期柴油模型燃料研究时，正庚烷被广泛用来代表柴油[75]，其滞燃期、层流火焰速度、反应中间产物等得到广泛研究[76-78]。早在 1998 年，Curran 等人[79]就提出了正庚烷的详细反应机理，其主要反应机理包括九类高温反应和十六类低温反应。由于详细机理难于应用到发动机数值计算中，Huang 等人[80]提出正庚烷的简化机理研究 HCCI 燃烧特征，该简化机理包括 41 种物质 63 步反应。Kelley 等人[81]研究了较高压力条件下 C<sub>5</sub> 到 C<sub>8</sub> 正构烷烃的层流火焰速度，研究发现压力的升高会导致层流火焰速度降低；C<sub>5</sub> 到 C<sub>8</sub> 正构烷烃的层流火焰速度在较宽的压力范围内基本一致。

由于正庚烷与实际柴油理化性质有较大差异，因此学者开始研究大分子链烷烃着火与燃烧机理。Wang 等人[82]采用分子反应动力学 (ReaxFF MD) 以及化学动力学模型模拟正十二烷的热解过程，研究发现碳碳键的断裂以及脱氢反应是生成自由基的主要来源。Vasu 等人[83]采用高压、加热激波管首次测量了正十二烷的着火延迟以及 OH 基浓度历程。Ji 等人[84]研究了 C<sub>5</sub> 到 C<sub>12</sub> 的正构烷烃常压下层流预混火焰的传播和熄灭过程。研究发现在较宽的当量比范围内，C<sub>5</sub> 到 C<sub>12</sub> 的正构烷烃的层流火焰速度高度一致，但随着碳链长度的增大，火焰更易熄灭。Shen 等人[85]采用激波管在较高的压力条件下测量首次测量了正十四烷的在不同当量比及温度下的着火延迟，并与正庚烷、正癸烷以及正十二烷试验结果进行比较。他们发现在较宽的压力以及温度范围内，所研究的正构烷烃着火延迟的差异较小。针对长链正构烷烃化学动力学机理，Ranzi 等人[86]试图通过正戊烷、正庚烷机理构建正癸烷、正十二烷以及正十六烷燃烧化学动力学机理，所构建的机理与试验结果符合的很好，他们从而认为长链正构烷烃与短链正构烷烃有类似的化学动力学反应特征。目前针对长链烷烃包括正十四烷、正十六烷等着火、燃烧特性研究较少，化学反应动力学机理还需进一步验证。

## (2) 异构烷烃着火与燃烧机理

相较于正构烷烃，异构烷烃由于分子结构中叔碳的存在，其着火特征以及化学动力学机理与正构烷烃有较大差异[87-89]。研究表明，由于异构烷烃较低的十六烷值，燃油中异构烷烃的比例对燃料着火特性有较大影响[90,91]。其中，异辛烷作为汽油反应活性参比燃料，化学动力学机理被较早关注。Curran 等人[92]基于射流搅拌反应器 (JSR)、流动反应器、激波管以及发动机上的实验研究，建立了异辛烷详细反应动力学模型。研究发现，与正庚烷反应机理相比[79]，在 600 到 770K 温度区间， $RO_2$  自由基、 $O_2QOOH$  自由基异构化速率均有所降低。Ji 等人[93]研究了 2-甲基庚烷、3-甲基庚烷、2,5-二甲基己烷以及异辛烷等同分异构体中支链结构对层流火焰速度的影响。研究表明，随着支链数的增加，层流火焰传播速度逐渐降低；相比于正构烷烃，



异构烷烃较低的反应速率是由于燃烧初期更易生成相对稳定的烯烃类中间产物。Li 等人[94]研究了 2,5-二甲基辛烷的热解和氧化特性。在温度 800K 附近发现了 2,5-二甲基辛烷的负温度梯度 (NTC) 现象。

在长链异构烷烃方面, Won 等人[95]研究了 2,6,10-三甲基十二烷的燃烧性质, 包括其层流扩散火焰熄火极限以及采用激波管测量着火延迟, 并与正十二烷/异十六烷、正十六烷/异十六烷混合燃料着火性质对比。Oehlschlaeger 等人[96]采用激波管研究了中高温下七甲基壬烷的着火特性并建立了机理模型。他们发现在 900K 以下, 七甲基壬烷与异辛烷着火延迟差异明显, 分析认为这主要是由于七甲基壬烷烷基过氧化自由基异构化 ( $RO_2 \leftrightarrow QOOH$ ) 反应速率较异辛烷高。Dagaut 等人[97]采用 JSR 研究了七甲基壬烷在压力 10atm、温度 770 到 1070K 时的氧化中间产物历程, 研究发现在 770K 以下, 七甲基壬烷没有低温反应。Sarathy 等人[98]研究了  $C_7$  到  $C_{20}$  的 2-甲基烷烃化学反应机理。研究发现, 相同的碳链长度时, 异构烷烃滞燃期较正构烷烃长; 在反应过程中, 2-甲基烯烃类中间产物对反应进程很重要。

### (3) 环烷烃着火与燃烧机理

在柴油制备过程中, 尤其是裂化、加氢等工艺, 会使得多环环烷烃、多环芳香烃转变为单环烷烃或双环烷烃。此外, 在燃料燃烧过程中, 环烷烃类组分在某些条件下通过脱氢作用会转变为颗粒物前驱物[99]。因而, 环烷烃的着火与燃烧机理研究对深入把握模型燃料在发动机上的燃烧性质十分必要。

针对环烷烃, Sivaramakrishnan 等人[100]采用激波管测量了环戊烷、环己烷以及甲基环戊烷、甲基环己烷的反应速率常数。研究发现, 甲基环戊烷与甲基环己烷反应速率常数略高。Li 等人[101]研究了环烷烃当量比及富燃条件下的苯的生成路径。研究发现, 在当量比条件下, 苯的形成主要是六元环逐步脱氢, 最终通过环己二烯基苯加氢生成苯; 在富燃条件下, 1,3-环己二烯的脱氢反应是生成苯的重要反应。Natelson 等人[102]通过在流动反应器中测量正丁基环己烷低温氧化反应的中间产物及其消耗速率, 证实了丁基环己烷氧化过程中存在 NTC 现象。Kang 等人[103]研究了环烷烃上支链结构对环烷烃燃烧动力学的影响。通过对比甲基环己烷与乙基环己烷的反应特性, 他们发现较长的取代基会促进环烷烃的氧化。Ji 等人[104]通过研究环己烷和烷基环己烷的层流火焰速度发现环己烷和烷基环己烷层流火焰速度没有明显差异。Zhang 等人[105]研究了甲基环己烷的热解过程, 通过量子化学计算, 脱甲基与脱氢路径具有显著的温度和压力的依赖关系。

除单环烷烃外, 柴油中还包含一定比例的双环烷烃。Zhu 等人[106]通过激波管研究十氢萘的热解及氧化机理。他们首次在 920K 以下的温度区间观察到了十氢萘氧化过程中的 NTC 现象; 在夺氢反应后, 碳碳键的断裂使得双环烷基转化为单环烷基。由于十氢萘较高的饱和度, 反应过程中更易转化为单环芳香烃而不易形成多环芳香烃。Dagaut 等人[107]通过 JSR 分析了十氢萘的反应中间产物, 提出了一个半详细机理。Li 等人[108]通过研究非预混火焰中十氢萘



的中间产物，他们发现十氢萘通过环裂解及异构反应后很快转化为  $C_1\sim C_4$  的小分子碳氢化合物。

#### (4) 芳香烃着火与燃烧机理

芳香烃由于较高的不饱和度，是柴油类燃料燃烧过程碳烟前驱物的主要来源[109, 110]。在早期的模型燃料构建过程中，正构烷烃以及异构烷烃的比例被用来控制燃料的着火特性。事实上两者之间的简单组合无法全面反映燃料的燃烧特性，尤其是燃料的碳氢比。因此，芳香烃是柴油模型燃料不可或缺的组分。Davis等人[111]对比研究了苯以及甲苯层流火焰速度，研究发现甲苯的层流火焰速度小于苯。Zhang等人[112]研究了低压条件下甲苯热解动力学模型，通过建立详细的甲苯热解反应机理发现，甲苯反应过程中甲基夺H反应是主要反应路径，主要反应路径为 $C_6H_5CH_3 \rightarrow C_6H_5CH_2 \rightarrow C_7H_6 \rightarrow c-C_5H_5 \rightarrow C_3H_3$ 。与此同时，Oehlschlaeger等人[113]采用激波管在高温条件下详细分析了甲苯反应过程中甲基夺氢反应速率常数与甲基与苯环间碳碳键断裂反应速率常数。他们发现在相同试验条件下，甲苯反应过程中甲基夺氢反应速率常数比甲基与苯环间碳碳键断裂反应速率常数高。

在多环芳香烃研究方面，Dagaut等人[114]采用JSR研究了四氢萘的氧化过程并建立了相应的热解及氧化机理。Kukkadapu等人[115]在一台快压机上研究了四氢萘中低温反应特性。Wang等人[116]在激波管上研究了四氢萘在高温条件下的着火延迟并与甲苯、十氢萘以及环己烷对比。他们发现在高温条件下，四氢萘基本通过脱氢反应生成四氢萘基基团。Kukkadapu等人[117]在一台快速压缩机上测量了温度837至980K、压力介于15至40bar下的1-甲基萘着火延迟。他们发现1-甲基萘着火延迟在试验温度范围内呈现单峰模式，没有出现NTC现象。通过试验结果与Wang等人[118]、Narayanaswamy等人[119]构建的化学反应机理计算结果进行对比，发现试验结果与计算结果之间存在一定差异，这可能是由于目前提出的机理缺少一些重要的反应。Sun等人[120]在一台快压机上测量了1-甲基萘着火延迟并建立了包含196种物质、1330步反应的半详细机理。他们发现1-甲基萘的主要反应路径为1-甲基萘 $\rightarrow$ 萘基 $\rightarrow$ 萘氧基 $\rightarrow$ 茚基。

#### (5) 多组分柴油模型燃料着火与燃烧机理

为准确再现柴油在压燃式发动机上的燃烧性质，柴油模型燃料通常由不同分子结构的典型组分混合而成。最早被认可且被广泛研究的模型燃烧是 PRF 以及 TRF[121, 122]。Curran 等人[123]研究了高压条件下的 PRF 氧化特征。Ra 等人[124]基于 PRF 简化化学动力学机理模拟了压燃式发动机燃烧化学动力学过程。研究发现，CHEMKIN 结合 KIVA-3V 进行缸内化学动力学计算时，需要重新优化简化机理，尤其是当量比高于 2.0 富燃条件下的燃烧动力学过程。Andra 等人[125]基于试验结果以及量子化学计算的方法提出了一个包含 137 种物质、635 步反应的 TRF 机理。Sakai 等人[126]建立了 TRF 的氧化动力学模型。该机理包括三个部分：PRF 机理、甲苯子机理以及甲苯与 PRF 的交叉反应。



为研究具备大分子烃类组分的模型燃料化学反应动力学, Ra 等人[26]以 PRF 简化机理为基础,建立了包含正十四烷、甲苯、环己烷、二甲醚、乙醇以及丁酸甲脂的多组分化学动力学机理,该多组分机理(MultiChem)包含 113 种反应物 487 步反应。Stein 等人[127]采用正十六烷、萘烷以及 1-甲基萘三组分模型燃料,在可变流动反应器上研究该模型燃料的自燃特性。他们发现随着模型燃料十六烷值的升高,低温及中温化学反应速率不断加快。Chang 等人[128]采用正癸烷、异辛烷、甲基环己烷、甲苯分别代表柴油中的正构烷烃、异构烷烃、环烷烃和芳香烃,建立了包含 70 种组分、220 步反应的模型燃料简化机理。

Poon 等人[129]采用正十六烷、七甲基壬烷、环己烷、甲苯分别作为柴油中的直链烷烃、支链烷烃、环烷烃和芳香族化合物构建柴油模型燃料。通过提出的五阶段机理简化方法简化了七甲基壬烷、环己烷的机理,并验证了简化机理的准确性。结合正十六烷简化机理[130],Poon 等人[131]提出了两组分柴油模型燃料(正十六烷、七甲基壬烷)以及四组分模型燃料(正十六烷、七甲基壬烷、环己烷、甲苯)化学动力学机理。研究发现正十六烷与七甲基壬烷比例可有效控制模型燃料反应活性,芳烃和环烷烃组分的添加会导致燃烧过程中碳烟前驱物的增加。Liang 等人[132]通过优化柴油模型燃料并简化一个包含 26 种组分的模型燃料详细机理来尝试高效计算柴油燃烧过程。他们在计算过程中尝试采用正十四烷物性参数代替模型燃料计算喷雾过程,而化学动力学机理则采用比较成熟的正庚烷机理的复合计算方式。结果表明采用正十四烷代替模型燃料计算喷雾并结合正十四烷或正庚烷的机理时,模拟结果与试验结果符合的都较好。他们发现基于现有计算技术,包含 437 种物质以及 4000 个计算网格可以实现高效计算。但为了使得模拟结果与试验结果吻合,他们在计算过程中采用十六烷值 70 的模型燃料模拟美国柴油(十六烷约 46),这表明模型燃料及其化学动力学机理还存在缺陷。针对模型燃料的构建及其化学反应动力学机理的建立还需深入研究。

### 1.2.3 柴油模型燃料在压燃式发动机上燃烧排放特性

燃料在实际发动机上的应用是流动、蒸发、燃烧等多维问题的高度耦合。仅在激波管、快压机、流动反应器等设备中测量模型燃料或其组分燃烧特征参数无法全面反映模型燃料的性质,尤其是在发动机中污染物生成机制。很多学者认为构建模型燃料时,应当考虑模型燃料与发动机的相互作用关系。

为系统研究燃料在压燃式发动机上的自燃特性,Kirchen 等人[90]提出基于单区热力学模型结合 PRF 化学动力学机理的方法研究发动机 HCCI 模式下的着火特性,经验证,该方法可有效预测 HCCI 模式燃烧历程。Puduppakkam 等人[133]采用详细的化学动力学机理和数值模拟的方法研究了汽柴油双燃料发动机的燃烧过程及排放特性。其中汽油采用五组分的模型燃料,分别是甲苯、1-己烯、异己烷、异辛烷、正庚烷,柴油采用正庚烷为模型燃料。Bergman 等人[134]采用一个包含 70 种组分 305 步反应的正庚烷/甲苯机理并基于 KIVA-3V 软件建立 CFD 模型研究两冲程自由活塞燃烧和排放特性。Fredriksson 等人[135]也采用正庚烷/甲苯作为模型燃



料研究了自由活塞发动机喷油时刻对燃烧和排放的影响。Imren 等人[136]采用 70%正庚烷、30% 甲苯作为柴油模型燃料并使用 KIVA-4 模拟了重型柴油机的燃烧过程。

考虑到正庚烷、异辛烷等短链组分与柴油理化性质差异较大，Zama 等人[137]采用不同比例的正癸烷及、1-甲基萘作为不同十六烷值柴油模型燃料，并向其中添加一定比例的 Thiophene 控制硫含量研究硫含量对微细颗粒物生成的研究。Mathes 等人[138]在一台单缸柴油机上研究了直链/支链烷烃以及直链烷烃/芳香烃二元混合燃料作为柴油模型燃料时的燃烧和排放特性。其中直链烷烃采用的是正十四烷，支链烷烃选择的是异十二烷，芳香烃采用的是甲苯。研究发现低十六烷值燃料会导致油耗增大，燃烧相位推迟，最大放热速率增大。

在研究模型燃料研究过程中，70%正癸烷/30%1-甲基萘（体积分数）混合燃料作为模型燃料在数值计算中应用广泛，该混合燃料定义为 IDEA 燃料[139, 140]。Hasse 等人[141]采用 IDEA 计算了柴油模型燃料的燃烧及污染物形成机制。Felsch 等人[142]采用 IDEA 作为模型燃料并通过仿真的方法研究不同直喷正时对柴油机 NO<sub>x</sub> 排放的影响。Luckhchoura 等人[143]采用 IDEA 作为柴油模型燃料研究了直喷正时对混合气形成进而对柴油燃烧过程中噪音的影响。Weber 等人[144]尝试采用柴油乳化的方式增强缸内燃油空气混合，探究同时抑制 NO<sub>x</sub> 和颗粒物的方法。他们采用 KIV-3V 建立三维模型并采用 IDEA 作为柴油模型燃料研究柴油机烟度及 NO<sub>x</sub> 排放。研究发现，模型燃料乳化的方式会有效降低颗粒物排放，主要是乳化油中水的增加使得反应过程中 OH 基团量增大，从而使得氧化反应速率加快。此外，Weber 等人[145]对比不同模型燃料对燃烧历程的影响时发现，采用 IDEA 模型燃料时缸内压力和放热率曲线与柴油吻合的很好，但主要排放产物仍有偏差。

研究表明，目前提出的模型燃料在发动机上的应用由于未全面考虑燃料理化性质与发动机相互作用关系，仅选取特定组分复现柴油十六烷值、碳族组分等主要指标，无法全面反映柴油燃烧和排放性质。只有通过系统的结合实际发动机性能与排放特征、柴油物理化学参数、组分碳族分布等性质，才能构建出满足实际发动机运行需求、准确复现发动机燃烧排放特征的柴油模型燃料。

### 1.3 采用模型燃料研究新型燃烧模式燃烧特性

随着对内燃机超高效率和近零排放的不断追求，学者们先后提出 HCCI[146, 147]、PCCI[148]以及 RCCI[149]等一系列新型燃烧模式。新型燃烧模式有望实现发动机的清洁燃烧，同时维持较高的热效率，但均存在运行范围拓展、燃烧污染物生成机制等研究难点。基于实际燃料复杂的组分特征研究燃料理化性质与燃烧模式间相互作用关系难度较大，因而模型燃料被广泛用来研究新型燃烧模式[150]。



### 1.3.1 HCCI 燃烧模式

HCCI 模式采用气道喷射燃油或缸内早喷燃油的方式实现燃料的均质混合,在燃烧过程中,燃料的化学特性主导燃烧过程及排放产物生成,因而可选用与实际燃油燃烧特性接近的轻质烷烃作为模型燃料,忽略燃料的物理性质的差异。在 HCCI 模式研究过程中,正庚烷具有与柴油接近的十六烷值,成为早期在 HCCI 模式中应用较广的模型燃料[151, 152]。Mehl 等人[153]分析了正庚烷、异辛烷不同温度区间的滞燃期,通过建立 PRF 燃烧机理详细分析了 HCCI 低温燃烧过程。Corcione 等人[154]采用正庚烷/甲苯作为模型燃料,并采用其详细化学动力学机理研究发动机喷油及燃烧过程,并与光学发动机试验结果对比。Zheng 等人[155]采用正庚烷作为模型燃料,研究柴油在均质压缩燃烧模式下包括外部 EGR、进气氧浓度以及发动机转速等因素对燃烧过程的影响。

Tanaka 等人[156]采用包含 32 种反应物 55 步反应的 PRF 简化机理研究 HCCI 模式燃烧特性。他们发现反应过程中二次加氧与形成烯烃的反应之间的竞争决定着 HCCI 低温阶段的放热量;低温反应阶段末期温度随着辛烷值的增大而降低,高温阶段烷基的生成以及烯烃的氧化对反应速率影响较大。Bergman 等人[157]采用三维 CFD 计算的方式对比了 HCCI 模式下体积比 2:1 正庚烷/甲苯混合燃料与柴油的着火延迟,发现其着火延迟在低温区域较柴油长但在中温及高温区域又较柴油短。Zhou 等人[158]建立了一个包含 46 种反应物 144 步反应的 PRF 机理并采用 KIVA4-CHEMKIN 软件对 HCCI 燃烧过程进行计算,研究发现优化过的机理可准确再现缸内燃烧过程。

Dubreuil 等人[159]研究了 HCCI 模式下 EGR 率、进气温度以及 EGR 中气体成分对燃料燃烧的影响。试验中燃料包括 100%正庚烷 (Fuel A)、75%正庚烷/25%异辛烷 (Fuel B)、80%正庚烷/20%甲苯 (Fuel C)。研究发现,在不采用 EGR 时, Fuel A 由于十六烷值高于 Fuel B、Fuel C,其低温燃烧及高温燃烧均较早; Fuel B 十六烷值与 Fuel C 接近,两者滞燃期差异较小。Lu 等人[160]采用正庚烷/异辛烷作为模型燃料,研究发现可通过不同工况下对正庚烷/异辛烷比例的调节,从而改变燃料十六烷值,实现对 HCCI 着火时刻及燃烧相位的有效控制。进一步研究表明,通过对正庚烷/异辛烷比例的优化,可以实现优化燃烧,抑制发动机爆震,拓展发动机负荷范围[161]。

### 1.3.2 PCCI 燃烧模式

HCCI 燃烧模式能实现较高的效率和较低的颗粒物、氮氧化物排放,但在现有的技术条件和控制手段下,全负荷范围内以及变工况条件下实现 HCCI 燃烧仍然相当困难[162, 163]。预混合压缩燃烧 (PCCI) 是一种先进的燃烧模式,该模式通过缸内多段喷射、高比例废气再循环等多种方式控制滞燃期,从而实现较好的油气混合,因而 PCCI 模式具备同时降低 NO<sub>x</sub> 排放和碳烟排放的潜力[164, 165]。PCCI 模式通过压缩燃烧的方式,在实现较低排放的同时还能维持较高



的热效率[166, 167]。显然, 在PCCI模式中, 燃油的物理性质、化学性质对燃烧过程及排放产物生成同等重要, 研究PCCI模式燃烧特征, 必须同时考察燃料物理性质和化学性质的影响。

PCCI模式中喷射策略对缸内燃烧历程影响较大。Kiplimo等人[168]分别使用热力学单缸机和光学发动机研究了燃油雾化碰壁、喷油参数以及EGR率对PCCI模式燃烧和排放特性的影响。研究发现较高的喷射压力导致较低的烟度、碳氢化合物(HC)和氮氧化物(NO<sub>x</sub>)排放。相比传统柴油燃烧, PCCI模式下较高的EGR速率会同时减少NO<sub>x</sub>和烟度排放。但由于采用缸内较早喷射加强燃油预混合的目的, HC和CO排放有所增加。Parks等人[169]研究了PCCI燃烧模式下的排放特性。研究发现, 相对于传统柴油机模式, PCCI模式可大幅降低NO<sub>x</sub>排放以及颗粒物排放, 但会导致CO排放大幅增大, HC排放中甲醛和乙醛排放也相应增大。

在关注喷油策略对 PCCI 模式的影响时[170, 171], 学者们还研究了不同燃料理化性质对 PCCI 模式的影响。Jung 等人发现[172]柴油中添加乙醇导致燃料反应活性的降低以及燃料挥发性的提高是优化缸内混合的重要原因之一。Leermakers 等人系统的研究了燃料物性对 PCCI 燃烧模式的影响[173]。通过对比柴油、生物柴油/柴油以及不同十六烷值燃料试验结果, 他们发现在中低负荷下通过控制燃料的十六烷值以及应用生物柴油、醇类等可再生燃料, 可以实现较高的效率, 但 PCCI 模式运行范围很难覆盖大负荷工况。

考虑到实际燃油理化性质十分复杂以及 PCCI 模式的燃烧过程与排放物生成与燃油物理性质、化学性质密切相关, 研究者采用模型燃料研究 PCCI 燃烧性质。Boot 等人[174]采用正十二烷以及正十七烷分别作为低沸点、高沸点模型燃料, 研究了在 PCCI 模式下燃料挥发性对早喷油束贯穿距的影响。Weber 等人[145]对比了柴油、IDEA、正癸烷、正庚烷 PCCI 模式下的燃烧和排放性质。他们发现在 PCCI 模式下, IDEA 燃烧性质更接近柴油。Kerschgens 等人[175]采用包含正庚烷、异辛烷、甲苯以及乙醇的四组分化学动力学机理研究燃用汽油/柴油混合燃料 PCCI 模式碳烟及 NO<sub>x</sub> 生成机制。Zehni 等人[176]采用 KIVA 结合 CHEMKIN 的方法对比研究了 PCCI 模式下生物柴油与柴油的性能。其中, 生物柴油采用癸酸甲酯作为模型燃料, 柴油采用正庚烷作为模型燃料。研究发现提高生物柴油比例可以抑制 CO、HC 以及 NO<sub>x</sub> 排放, 但油耗会略有增大。

上述研究表明, 在 PCCI 模式中, 采用缸内多段喷射结合高 EGR 率的燃烧控制模式, 燃油的喷雾特性、燃料的低温化学反应过程对燃烧和排放均有重要影响。然而实际柴油组分十分复杂性, 构建更为准确的柴油模型燃料是解析燃料理化性质与 PCCI 模式燃烧排放关系的重要方法。

### 1.3.3 RCCI 燃烧模式

作为一种高效低排放的新型燃烧模式, PCCI 能在维持较高热效率时达到较低的烟度及 NO<sub>x</sub> 排放[168], 但同时面临着难于向大负荷扩展运行范围的难题[177]。Reitz 等人研究如何拓





展 PCCI 运行负荷范围时, 在一台重型柴油机上采用气道喷射汽油、缸内直喷柴油的双燃料的双喷油器的可燃混合气组织方式[178, 179]。通过这种气道喷射高辛烷值燃料、缸内直喷高十六烷值燃料的喷油策略, 结合较高的 EGR 率, 在 BMEP9bar 时, 指示热效率能达到 53%。在此基础上, 通过进一步优化缸内直喷策略以及 EGR 策略, Reitz 等人提出了 RCCI 模式[180-182]。为配合气道喷低反应活性燃料燃烧, RCCI 缸内直喷燃油采用两段喷模式, 喷油策略如图 1-1 所示[149]。RCCI 模式的缸内混合气组织模式可实现工质的活性分层和浓度分层, 通过对混合气活性、浓度的控制以及高比例 EGR 的使用, 可有效控制燃烧最大压力升高率和燃烧相位, 从而可以有效拓展运行范围。

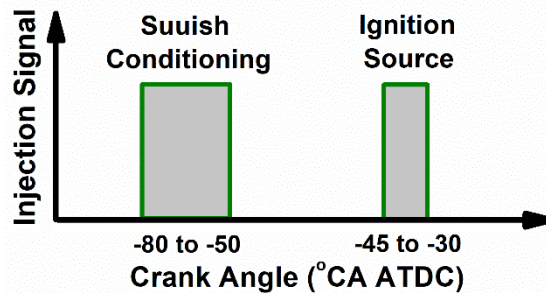


图 1-1 RCCI 缸内直喷喷油策略

Fig. 1-1 Fuel injection strategy of RCCI

RCCI 模式由于采用了两套喷油系统, 对燃油种类的适应性很强, 目前被广泛研究的燃料方案有汽油/柴油组合。其中汽油可以采用 E85 (85%乙醇和 15%汽油混合) 来代替[183], 或者是采用醇类直接代替汽油[184-186]。而柴油的替代燃料往往是同样高十六烷值的正庚烷、生物柴油等, 或者添加了 DTBP (二叔丁基过氧化物, 可提高燃料的十六烷值) 的汽油。Derek Splitter 等人在汽油中直接添加 DTBP 作为直喷高十六烷燃料[187]。Soloiu 等人研究了直喷生物柴油, 气道喷射正丁醇的 RCCI 模式[188]。

在 RCCI 模式研究过程中, 正庚烷作为柴油模型燃料在该模式相关的数值计算过程中起到至关重要的作用[189, 190]。Splitter 等人在研究中高负荷下 RCCI 模式时, 采用正庚烷作为柴油模型燃料结合 KIVA 进行数值计算[191]。Li 等人采用正庚烷以及 PRF 的简化机理, 研究 RCCI 模式中缸内混合气燃烧活性梯度分布特性[108]。前文分析可知, 正庚烷与实际柴油理化性质差异较大, 不能准确反映柴油在缸内喷雾、燃烧、污染物生成特征。构建更为准确的柴油模型燃料, 并建立相应的燃烧化学动力学机理, 对 RCCI 模式 CFD 计算意义重大。此外, 考虑到直喷燃料反应活性、气道喷射燃料反应活性以及缸内混合气反应活性 (气道喷燃料比例) 对燃烧过程的影响, 采用更为准确的柴油模型燃料研究上述参数对 RCCI 模式的影响, 对进一步拓展 RCCI 模式燃料选择范围, 优化不同燃料在 RCCI 模式下的燃烧过程及排放产物均有重要意义。



## 1.4 课题研究目的、意义和主要工作内容

### 1.4.1 课题的目的和意义

为实现内燃机超高效率、清洁燃烧的目标，学者们提出 PCCI、RCCI 等新型燃烧模式。其中，PCCI 模式采用缸内多段喷射结合高 EGR 率的混合气组织方式，燃料的物理特性、化学特性均会对燃烧和排放产生重要影响。而在 RCCI 模式中，缸内燃烧特性由气道喷射低活性燃料以及缸内喷射高活性燃料共同决定，气道喷射燃料活性、缸内直喷燃料活性以及气道喷射燃料比例成为主导燃烧进程的重要参数。基于柴油复杂组分特征研究燃油与 PCCI、RCCI 模式相互作用关系十分困难，构建准确的柴油模型燃料对研究新型燃烧模式燃烧和排放特征意义重大。

然而，以正庚烷、PRF、TRF 等为代表的早期模型燃料，虽然成分、化学反应动力学机理相对简单，但其理化性质（包括挥发性、黏度、密度、碳族分布、H/C 等）与实际柴油差异较大。为构建更为准确的柴油模型燃料，目前已经有很多研究人员从燃料本身的物理特性以及官能团和碳原子分布角度出发，构建出包括 IDEA 等柴油模型燃料。但由于实际燃料组分非常复杂，不同组分的燃料对发动机的性能与排放影响是不相同的，目前所构建的模型燃料均未考虑发动机的影响，导致模型燃料在缸内的喷雾、燃烧与柴油仍有差距。因此，构建柴油模型燃料应当从实际发动机着火、燃烧、排放等角度出发，结合燃料的物理化学特性、分子官能团特征，构建能够满足各方面需求的模型燃料。

为系统研究新型燃烧模式（具体为 PCCI、RCCI 模式）燃烧控制影响参数，本文首先基于实际发动机性能及排放构建了多组分柴油模型燃料，并系统性的验证了所提出模型燃料的准确性；然后基于构建的模型燃料，调制燃料理化参数研究了燃料挥发性、十六烷值对 PCCI 模式的影响；最后，通过调制柴油模型燃料十六烷值结合三组分汽油模型燃料，研究了直喷燃料十六烷值、气道喷燃料辛烷值、气道喷燃料比例三参数对 RCCI 模式燃烧及排放的影响。

### 1.4.2 课题的主要工作内容

如图 1-2，本文主要工作分为两部分，首先是构建三到七组分的柴油模型燃料，使之能够较为准确的反映柴油基本燃烧和排放性质；然后，在构建模型燃料基础上，研究燃油理化关键参数对 PCCI、RCCI 燃烧模式的影响。具体为，调制模型燃料十六烷值及挥发性，研究上述两个参数在 PCCI 模式中对缸内燃烧进程和污染物排放的影响；通过调制柴油模型燃料十六烷值并结合三组分汽油模型燃料，研究了气道喷射燃料活性、缸内直喷燃料活性以及气道燃料喷射比例对 RCCI 模式燃烧和排放的影响。上述工作具体内容如下：

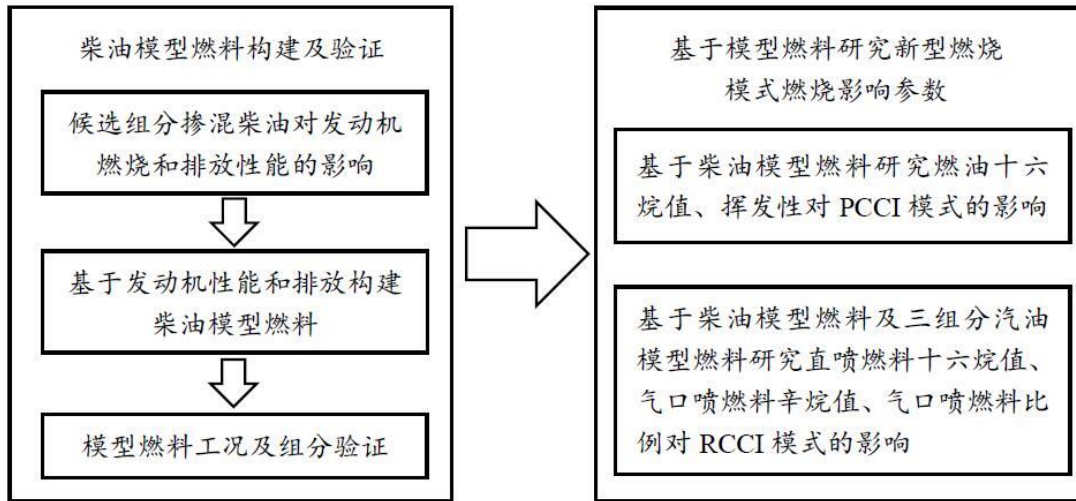


图 1-2 本文主要工作内容  
Fig. 1-2 The main contents in this paper

### 1. 模型燃料构建

在构建柴油模型燃料时，本文首先测量与分析了柴油中的主要组分及其质量分数分布；在此基础上，在柴油中添加高比例模型燃料的主要候选组分（包括四种直链烷烃、三种支链烷烃、两种环烷烃、四种芳香烃），从而调制燃料的物理化学特性，精确计算和测量混合燃料的密度、黏度、表面张力、十六烷指数、馏程曲线、H/C 等主要理化参数。为了尽可能探明每一种组分引起的燃料的理化特性参数的改变对发动机性能与排放的影响，在一台改造的单缸发动机上开展了发动机试验，并且针对每一种燃料在同一工况下分别进行了相同喷射时刻以及相同着火时刻（CA10）的两组试验，从而可以考察由于燃料调制引起的十六烷值改变以及燃料除十六烷值以为的理化性质对发动机的影响。

基于上述实验，分析了影响发动机效率和常规排放的主要因素（如喷射时刻、十六烷值、燃料挥发性、分子饱和度、碳链长度等），详细研究了燃料成分改变对发动机燃烧过程的影响，系统分析了发动机效率和排放与上述主要因素的关系。据此，得到了模型燃料能够复现实际燃料的发动机性能指标的约束条件，构建了多组分柴油模型燃料。

### 2. 模型燃料验证

考虑到实际发动机运行过程中参数的多样性（包括负荷、喷油策略、废气再循环等），需进一步在不同发动机运行工况范围内对上述构建的柴油模型燃料进行验证，包括不同负荷、直喷正时、预喷时刻以及 EGR 率条件下燃烧和排放验证。此外，考虑到实际柴油组分的复杂性，同时为研究柴油中占比较低的微量组分对燃烧和排放的影响，向模型燃料中添加一定比例的烯烃、卤代烃、多环芳香烃、烃类氧化物等代表柴油中典型的微量组分，以进行模型燃料的组分验证。



### 3. 燃料十六烷值与挥发性对 PCCI 模式燃烧及排放的影响

PCCI 模式由于仅采用简单的喷油控制策略以及 EGR 策略,对发动机整体改动较小,因而具有较高的应用前景。基于前文构建的柴油模型燃料,在五组分模型燃料基础上调制七甲基壬烷与正十六烷比例可有效改变燃料的压燃活性,从而研究不同十六烷值燃料对 PCCI 模式的影响;而从燃料化学动力学角度分析发现,碳十到碳十六的正构烷烃之间包括着火延迟、火焰传播速度、化学反应主要路径等均十分接近,因此选择沸点较低的正十二烷烃部分代替五组分模型燃料中的正十六烷以及正十八烷烃,在保证燃料十六烷值大致相同条件下,可改变燃料挥发性,从而研究不同挥发性燃料对 PCCI 模式燃烧和排放的影响。

### 4. 气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值以及气道喷射燃料比例对 RCCI 模式燃烧及排放的影响

RCCI 模式由于采用气道喷加缸内直喷的双喷油策略,对燃油种类的适应性更好。系统的研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性(气道喷燃料比例)对燃烧过程的影响,对进一步拓展 RCCI 模式燃料选择范围,优化不同燃料在 RCCI 模式下的燃烧过程及排放产物均有重要意义。因此,在前文调制五组分模型燃料十六烷值的基础上,结合三组分 TRF,调制其中正庚烷与异辛烷的比例控制 TRF 辛烷值,进而在一台单缸发动机上研究了气道喷射不同辛烷值燃料、缸内直喷不同十六烷值燃料对 RCCI 模式燃烧和排放的影响。



## 第二章 试验系统和研究方法

### 2.1 概述

为构建合理的柴油模型燃料，一方面需要对候选组分在发动机上燃烧性质有全面认知；另一方面，多组分模型燃料组分与组分之间在物理、化学特性的相互影响也需要深入研究。为此，本文在一台单缸发动机上进行了一系列针对性的试验。本章首先介绍了整个试验系统、测试方法、测试设备以及各个参数的测量误差；然后针对不同试验目标下的具体试验条件以及研究方法进行详细阐述；最后对试验结果分析过程中使用的主要参数进行了定义。

### 2.2 试验系统

#### 2.2.1 试验台架

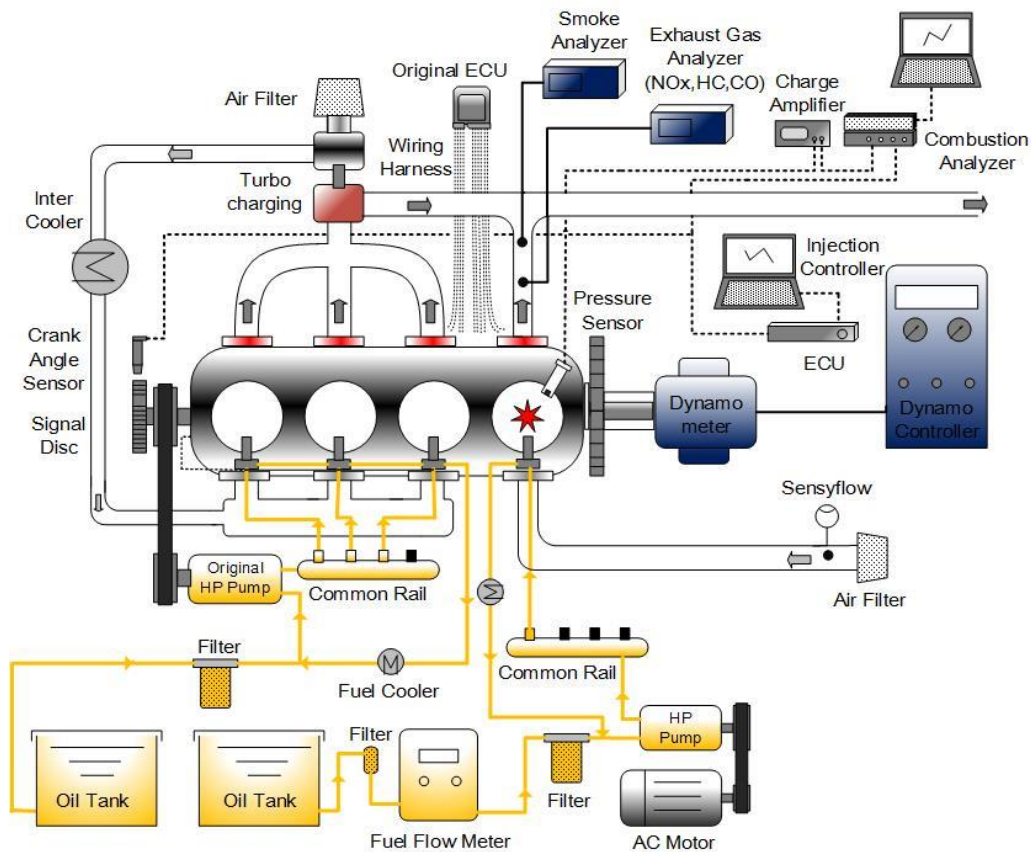


图 2-1 发动机试验台架示意图

Fig. 2-1 Schematic of test engine system

本文采用的试验系统如图 2-1 所示，整个试验装置示意图包括测功机、经过改造的单缸发动机、油耗仪、针对试验缸建立的高压共轨系统、燃油喷射控制系统、缸内压力采集及分析系统、排放测试设备等部门。



## 2.2.2 试验用发动机

本文选用一台四缸两气门、增压中冷、电控高压共轨柴油机为原型机，该原型机满足国 IV 排放法规。通过一系列改装将第四缸作为试验缸，使其拥有独立的进排气系统，其余三缸仍按照柴油直喷压缩燃烧模式运行。同时，为灵活改变第四缸的燃油种类，建立了独立的电控高压共轨系统，并采用自主开发的控制单元控制直喷喷射时刻以及喷油量。表 2-1 为原型机的主要特征参数。

表 2-1 试验发动机的主要结构参数

发动机参数	参数值
缸径/mm	114
冲程/mm	130
连杆长度/mm	216
排量/L	1.325
压缩比	18
喷孔数	7
孔径/mm	0.176
进气门开启/ $^{\circ}$ CA ATDC	338
进气门关闭/ $^{\circ}$ CA ATDC	145
排气门开启/ $^{\circ}$ CA ATDC	112
排气门关闭/ $^{\circ}$ CA ATDC	335

第四缸采用的高压共轨系统核心是电装公司生产的高压共轨系统，共轨泵由西门子 11kW 电机直接驱动。试验过程中，燃油最高喷油压力可以达到 180MPa，自主开发的控制单元可灵活控制喷油时刻以及喷油持续期，可以实现多次喷射，包括两段预喷、主喷以及两段后喷，喷射时刻控制精度 $\pm 0.1^{\circ}$ CA。

## 2.2.3 试验仪器

发动机台架测试设备主要包括：发动机控制系统、燃料消耗测试系统、缸内燃烧分析测试系统、排放测试系统以及发动机冷却液温度、机油温度控制系统。发动机控制系统为湘仪动力测试提供的测功机及控制柜，燃料消耗测试系统采用的是湘仪动力测试系统的油耗仪，缸内燃烧分析测试系统主要由 Kistler 缸内压力传感器及信号放大器以及 D2T 公司的燃烧分析仪组成，发动机冷却液温度控制系统主要采用南通力达公司生产的冷却液温度控制器，机油温度控制系统采用湘仪动力测试系统的生产的机油温度控制器。所采用的测试设备的信息如表 2-2 所示，测试系统的误差信息如表 2-3 所示。



表 2-2 试验用主要设备

Table 2-2 Experimental apparatus

仪表名称	型号	生产厂商
电涡流测功机	GW160	湘仪动力测试仪器有限公司
测控柜	FC2010	湘仪动力测试仪器有限公司
油耗仪	FC2010	湘仪动力测试仪器有限公司
缸压传感器	6125B	瑞士奇石乐 (Kistler) 有限公司
进气温度压力传感器	4005B	瑞士奇石乐 (Kistler) 有限公司
电荷放大器 (进气压力)	4624A	瑞士奇石乐 (Kistler) 有限公司
电荷放大器 (缸压)	5015A	瑞士奇石乐 (Kistler) 有限公司
排气温度传感器	K 型	美国 OMEGA 公司
排气压力传感器	MBS3000	丹麦 Danfoss 公司
冷却水温度传感器	PT100	美国 OMEGA 公司
燃烧分析仪	Orisis	法国 D2T 有限公司
排放分析仪	CAI	美国加州仪器有限公司
快速颗粒物分析仪	DMS500	英国 Cambustion 有限公司

表 2-3 测试设备的测量范围和精度

Tab. 2-3 Test range and accuracy of measured instruments

测量参数	单位	测量范围	测量误差
转速	r/min	0~10000	$\pm 2$
扭矩	Nm	0~600	$\pm 0.1$
缸内压力	MPa	0~25	$\pm 0.0005$
油耗	Kg/h	0~10	$\pm 1\%$
进气温度	$^{\circ}\text{C}$	-40~125	$\pm 0.1$
进气压力	bar	0~5	$\pm 0.13$
排气温度	$^{\circ}\text{C}$	0~1000	$\pm 0.1$
排气压力	bar	0~3	0.5%
冷却水温度	$^{\circ}\text{C}$	0~150	$\pm 0.1$

## 2.3 研究方法

本文研究目标主要分为两个部分，首先基于燃油理化性质以及燃料在发动机燃烧和排放特性建立三到七组分的柴油模型燃料；采用模型燃料进一步研究包括预混合压缩燃烧 (PCCI)、反应活性控制压缩燃烧 (RCCI) 等先进燃烧模式燃烧和排放特性。主要研究方法如下：



### 2.3.1 柴油模型燃料构建与验证方法

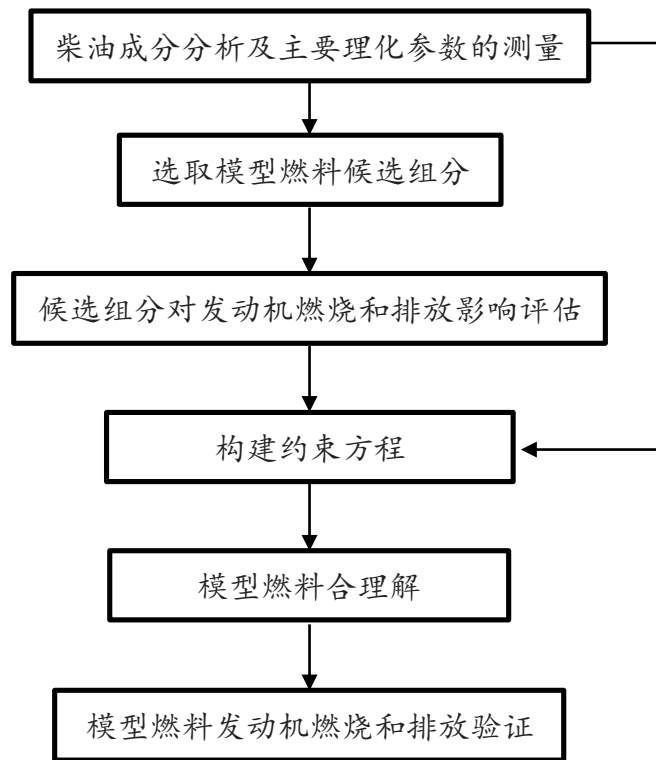


图 2-2 柴油模型燃料构建理论

Figure 2-2 The main research strategy for diesel surrogate fuel formulation

前文讨论发现，基于柴油成分复杂、分子量大的事实，以及大分子碳氢燃料难于开展气相燃烧研究的困境，国际上针对柴油模型燃料的构建受到很大的局限性。构建合理的柴油模型燃料，必须建立在对柴油理化性质的充分认知上。因此，本文首先针对中国 0#轻柴油开展了详细的组分分析，选择了十三种候选组分分别代表直链烷烃、支链烷烃、环烷烃、芳烃成分，来试图构建多组分柴油模型燃料。

传统的模型燃料构建方法都是首先确定实际目标燃料的关键理化参数，如平均分子量、密度、黏度、十六烷值/辛烷值、H/C 等，选取合适的组分及其比例来构建新的混合燃料，力图使得混合燃料的关键性质能够复现目标燃料。事实上，燃料的物理化学参数十分庞杂，而且不同的理化参数对发动机的燃烧与排放有不同的影响，而模型燃料复现的参数有限，因此构建的模型燃料是否能够复现实际发动机的燃烧和排放性能不得而知。为此，本文提出了基于实际发动机燃烧和排放性能的模型燃料构建方法，不仅将实际燃料的关键理化参数作为目标参数，同时将实际发动机的着火、燃烧和排放作为目标参数。

考虑到很多组分无法直接应用于压燃式发动机，将这些候选组分以较高体积百分比（50%的直链烷烃，30%异构烷烃、环烷烃、芳香烃）添加到柴油中，使其成为混合燃料的主导成分，从而主导实际发动机的燃烧过程。详细探讨了影响燃料的喷射与雾化、着火与燃烧相位、效率





与排放水平的关键理化参数,在单缸发动机上考察了每一种组分对发动机的燃烧和排放特性的影响规律,并针对每一种燃料分别采用相同喷射时刻和相同着火时刻的负荷特性来隔离十六烷值和燃料挥发性的影响,界定了模型燃料关键理化参数的取值,构建了相关约束方程,获取了柴油的三组分、五组分、七组分模型燃料。开展了多组分模型燃料的发动机试验研究,比较了各个模型燃料与柴油在气缸压力、放热率、气态排放和超细微粒排放上的差异。

### 2.3.2 基于模型燃料的新型燃烧模式影响因素的研究

随着对先进燃烧模式研究的不断深入,学者们得出一个比较统一的结论:一种燃烧模式覆盖发动机所有工况是不切实际的,每种燃烧模式都有其适用范围,合理的全工况高效清洁燃烧应该是不同负荷下采用相应的燃烧模式。近期研究表明,PCCI 模式比较适合发动机中小负荷,而 RCCI 模式在中高负荷能维持较低的排放以及较高的效率。

一系列研究表明,PCCI 燃烧模中燃油十六烷值与挥发性对燃烧和排放均有重要影响。在上述构建的模型燃料基础上,分别调制模型燃料的十六烷值、挥发性,研究两者在缸内早喷的 PCCI 模式中燃烧和排放的影响。而 RCCI 模式混合气由气道喷射低反应活性燃料以及缸内直喷高反应活性燃料组成,在燃烧过程中,气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及气道喷射燃料比例对燃烧进程以及污染物生成至关重要。因此,本课题在构建模型燃料的基础上,调制燃料十六烷值,配合气道喷射不同辛烷值 TRF 燃料,研究气道喷射燃料活性、直喷燃料活性以及气道喷燃料比例对 RCCI 燃烧模式的影响。

## 2.4 排放测试设备

本文常规气体排放采用美国加州分析仪器有限公司(CAI)系列的排放仪进行测定,其中 CO 和 CO<sub>2</sub> 浓度由非扩散红外分析仪(NDIR, CAI 602P)测定,NO<sub>x</sub> 由化学发光分析仪(HCLD-C, CAI 600)测定,HC 由火焰离子检测器(HFID, CAI 600)进行测定。HCLD 测量的 NO<sub>x</sub> 是 NO 和 NO<sub>2</sub> 的总和,其中样气中的 NO<sub>2</sub> 需要在 CLD 中转化为 NO,再进行测量。HC 的测量原理是利用 HC 在氢气 2000°C 左右的高温火焰中燃烧时可离子化成电子和自由离子,其离子数目基本上与碳原子数成正比。在 HFID 中,待测样气经很长的毛细管稳压后与氢气混合进入燃烧器入口,并经喷嘴进入燃烧室,助燃空气经空气扩散器后与可燃气体混合,火焰由点火器引发。HC 在缺氧的氢扩散火焰中分解出离子,在离子收集板之间 100-300 V 电压作用下形成离子电流,离子电流的大小就代表样气中的碳原子浓度[192]。

根据各气体成分的测定方法不同,NDIR 样气需经多级除水器去除排气中的水分,而 HCLD 和 HFID 的样气则分别需要加热至 50°C 和 150°C。最终测得的实时排放数据通过数据采集卡传输至电脑,并利用自行编制的 Labview 程序进行存储记录。试验过程中,测试数据连续记录 5 min,以确保试验结果准确性。烟度采用 AVL 公司的烟度计进行测量。常规气体排放测试设备误差信息如表 2-4 所示。



表 2-4 常规气体排放测量范围和精度

Tab. 2-4 Test range and accuracy of measured instruments

测量参数	单位	测量范围	测量误差
CO	ppm	0~1000	±1
CO <sub>2</sub>	%	0~10	±0.1
NO <sub>x</sub>	ppm	0~3000	±1
HC	ppm	0~1000	±1
烟度	m <sup>-1</sup>	0~99.99	±0.01

发动机尾气中的颗粒物数量和粒径分布特性采用英国 Cambustion 公司的 DMS500 颗粒物快速分析仪测量。DMS500 关键部件主要包括真空泵、加热采样管、稀释器（一级和二级）、旋风分离器、分级器、静电计等。图 2-3 和图 2-4 分别显示了 DMS500 采样原理示意图以及分级器原理图。其基本工作原理如下：发动机尾气首先被稀释气体进行一级稀释，然后经过旋风分离器以去除 1000nm 以上的颗粒物，通过一段温度可控的采样管之后进入二级稀释器进行稀释，稀释后的气体进入充电器利用电晕放电原理使每个粒子带上预定的电荷。然后将带电颗粒子导入一个内部存在强电场的分级器圆柱中，并根据电子迁移率对带电的颗粒物进行分级，分级后颗粒物将在静电计中产生相应的电流，通过测定相应的电流值从而确定颗粒物的粒径和数量密度。

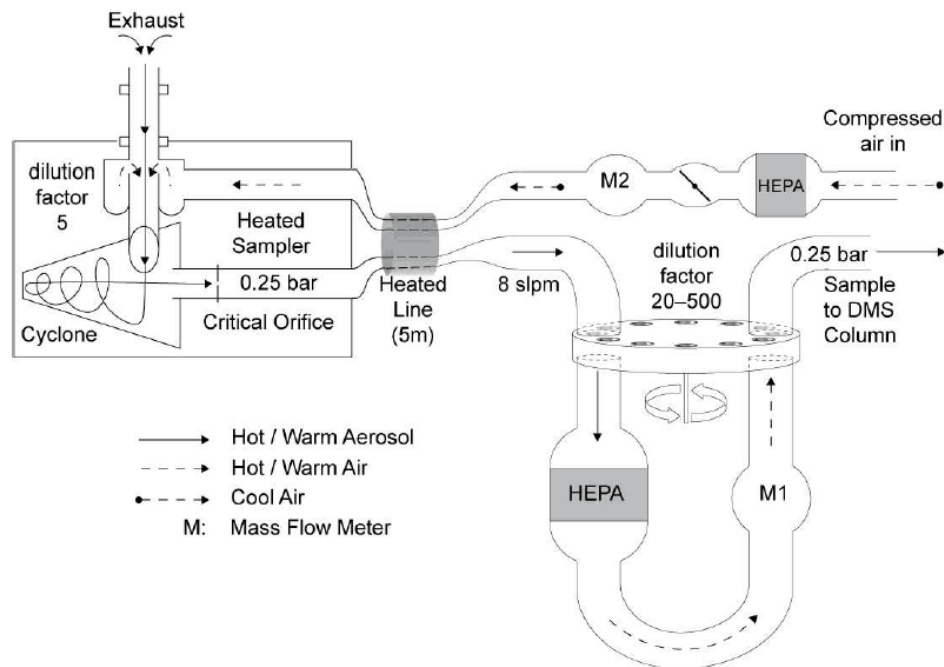


图 2-3 快速颗粒物分析仪采样原理示意图

Figure 2-3 Sample path for DMS500 with heated sample line

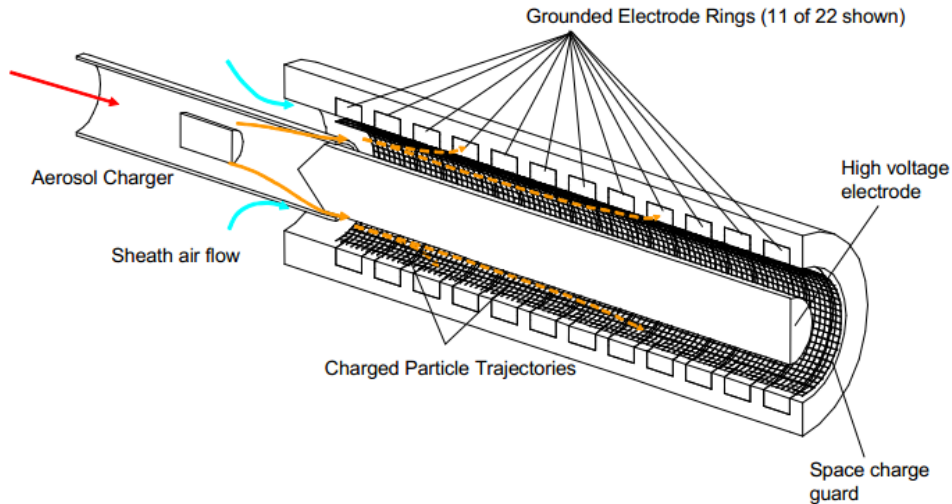


图 2-4 快速颗粒物分析仪测量原理

Figure 2-4 The theory of DMS500 classifier

DMS500 颗粒物粒径测量范围为 5~1000nm，响应时间为 200ms，可以对颗粒物进行在线连续测量。本试验中采用纯氮气体作为稀释气体，一级稀释比设置为 5:1；二级稀释器稀释比在 50:1~200:1 之间调节，以确保较好的信噪比。试验中数据采集频率设置为 10Hz，每次采样时间为 1min。

在试验过程中，每次试验测试前，首先对加州排放仪进行热机以及标定，同时进行颗粒物测试仪的热机，并开启 AVL 不透光烟度计进行热机，使测量设备均能达到最佳测试状态。随后，进行发动机热机，使冷却水温以及机油温度均达到 85℃，视作热机结束。在进行试验时，所有的测试点都是稳定工况测试点。测试时，发动机冷却水温及机油温度均通过温度控制设备保持为 85±1℃。

表 2-5 FTIR 测量范围和精度

Table 2-5 Test range and accuracy of FTIR

测量参数	单位	测量范围	测量误差
CO	ppm	0~200000	±0.01
NOx	ppm	0~4000	±0.01
THC	ppm	0~10000	±0.01
甲烷	ppm	0~250	±0.01
乙烷	ppm	0~1000	±0.01
乙烯	ppm	0~3000	±0.01
乙炔	ppm	0~1000	±0.01
丙烯	ppm	0~1000	±0.01
甲醛	ppm	0~500	±0.01
乙醛	ppm	0~1000	±0.01



考虑到在 RCCI 模式中，采用气道喷射加缸内直喷的缸内可燃混合气组织形式，发动机排放具备均质混合汽油机的部分特征以及缸内直喷柴油机的部分特征。在点燃式汽油机中，由于燃油在进气行程中喷入缸内或随新鲜空气进入缸内，在压缩行程中，部分燃料会进入缸内边界层，在边界层较低的温度环境中，该部分燃料无法充分氧化，形成较高的非常规排放。在 RCCI 模式中，同样存在均质混合燃料进入边界层的问题，因而 RCCI 模式非常规排放不容忽视，为此本文借助一台傅里叶变换红外光谱测量技术（FTIR）测量发动机尾气中的常规与非常规排放。本文采用美国 MKS 公司生产的 MultiGas 6030 气体分析仪对发动机尾气进行测量。MultiGas 6030 由一个高速的、具有  $0.5\text{cm}^{-1}$  分辨率的加强型 FITR 分光计、气体光学取样室、分析软件 and 光谱数据库组成，是一种高分辨率的气体分析仪，能在 5Hz 取样频率下快速测试 20 多种气体的含量，所测量的组分及其误差见表 2-5。

## 2.5 主要参数定义

为便于分析试验结果，对分析过程中的主要参数进行了定义：

1. 平均指示压力（IMEP）：单位气缸容积一个循环所做的指示功。在本课题研究过程中，第四缸作为试验测试缸，其燃烧和排放与其他三缸相互独立，无法用整机曲轴扭矩大小衡量实验工况，故采用测试缸平均指示压力值表征试验工况点负荷。根据缸内压力计算平均指示压力有两种方式：由压缩和膨胀两冲程计算出的 IMEP<sub>gross</sub> 和根据四冲程缸内压力历程计算出的 IMEP<sub>net</sub>。本文中，在不涉及进气增压以及排气背压变动的试验工况时，均采用 IMEP<sub>net</sub>；

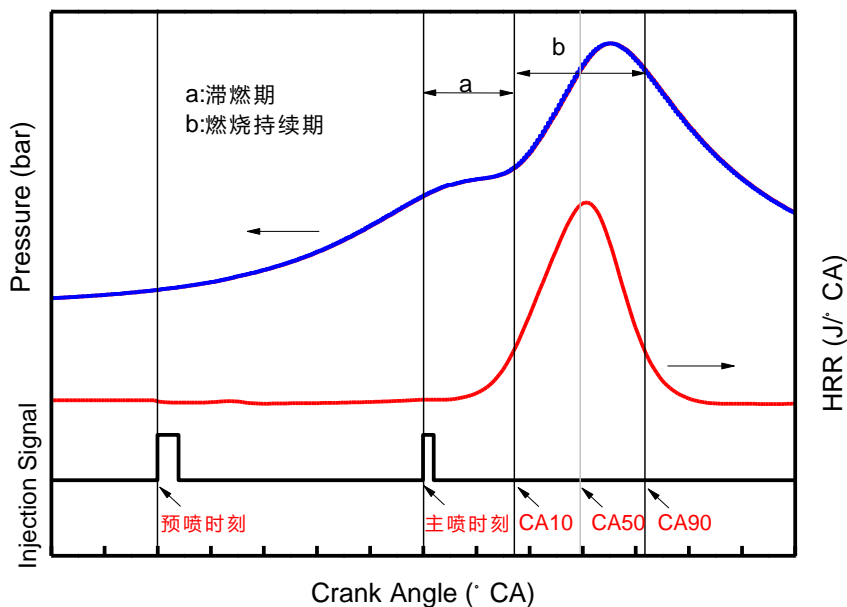


图 2-5 燃烧参数的定义

Figure 2-5 The definition of combustion parameters

2. 滞燃期：从喷油时刻至燃烧始点之间的曲轴转角，用  $^{\circ}\text{CA}$  表示，如图 2-5 中 a；



3. 燃烧始点（着火时刻）：燃烧累计放热 10%所对应的曲轴转角，用 CA10 表示；
4. 燃烧中值时刻：燃烧累计放热 50%所对应的曲轴转角，用 CA50 表示；
5. 燃烧终值时刻：燃烧累计放热 90%所对应的曲轴转角，用 CA90 表示；
6. 燃烧持续期：从燃烧始点（CA10）至燃烧终值时刻（CA90）之间的曲轴转角，单位为 °CA，如图 2-5 中 b；
7. 预喷比：预喷柴油占缸内柴油总喷油量的质量分数；
8. 预喷时刻：预喷柴油喷油控制信号上升沿对应的曲轴转角；
9. 预混合率 RP 被定义为气道喷燃料的热值比上循环燃料的总热值：

$$RP = \frac{Q_{PI}}{Q} = \frac{m_{PI} \times H_{u,PI}}{m_{PI} \times H_{u,PI} + m_{DI} \times H_{u,DI}}$$

其中： $Q_{PI}$ 为预喷燃料的热值； $Q$ 为循环燃料的总热值； $m_{PI}$ 为进气道喷射燃料的循环喷射量； $m_{DI}$ 为缸内直喷燃料的循环喷射量； $H_{u,PI}$ 为预喷燃料的低热值； $H_{u,DI}$ 为缸内直喷燃料的低热值。

10. EGR 率由进气和排气中的 CO<sub>2</sub> 浓度计算得出：

$$EGR\% = \frac{CO_2 \text{ int} - CO_2 \text{ ambient}}{CO_2 \text{ ext} - CO_2 \text{ ambient}}$$

其中： $CO_2 \text{ int}$ 为进气管中 CO<sub>2</sub> 的体积分数； $CO_2 \text{ ext}$ 为排气管中 CO<sub>2</sub> 的体积分数； $CO_2 \text{ ambient}$ 为空气中的 CO<sub>2</sub> 体积分数， $CO_2 \text{ ambient}$ 在计算中该项约为 0。

11. 模型燃料十六烷值（CN）由各组分十六烷值以及体积分数计算得出：

$$CN = \sum CN_i v_i$$

其中： $CN_i$ 为第  $i$  种烃类的十六烷值； $v_i$ 为第  $i$  种烃类的体积分数。

12. 三组分汽油模型燃料辛烷值（RON）由各组分辛烷值以及体积分数计算得出：

$$RON = \sum RON_i v_i$$

其中： $RON_i$ 为第  $i$  种烃类的辛烷值； $v_i$ 为第  $i$  种烃类的体积分数。

## 2.6 本章小结

针对面向实际发动机燃烧排放特征构建合理的柴油模型燃料，本文建立了一套发动机测试系统。本章首先介绍了整个试验系统，包括发动机以及台架控制系统；之后介绍了试验设备以及试验方法，详细的交代了测试设备精度以及试验流程；其后，介绍了本文模型燃料构建方法及其在低温燃烧模式中的应用研究策略；最后介绍了本文中一些参数的定义、计算方法。



15001080



## 第三章 模型燃料候选组分对发动机燃烧及排放的影响

### 3.1 概述

构建模型燃料的主要目标是以有限的化学组分准确复现实际柴油的理化性质，尤其是柴油在发动机上的燃烧和排放性质。构建合理的柴油模型燃料，模型燃料组分选择至关重要，需要在详细分析柴油主要碳族化合物分布特征的基础上，选取典型组分并在发动机上评价候选组分对发动机燃烧和排放性质的影响。因此，本章首先对柴油主要理化性质进行详细分析，主要包括柴油的碳族组分、馏程、密度、黏度等性质。然后，将柴油中不同类型的烃类分为正构烷烃、异构烷烃、环烷烃以及芳香烃四个主要类别，并按照类别分别选取代表性碳氢燃料，按一定比例添加到柴油中进行试验研究，通过监测燃烧过程以及测量排放产物，详细分析了不同典型碳氢组分理化特性对发动机燃烧和排放性质的影响。

#### 3.1.1 实际柴油的组分分析

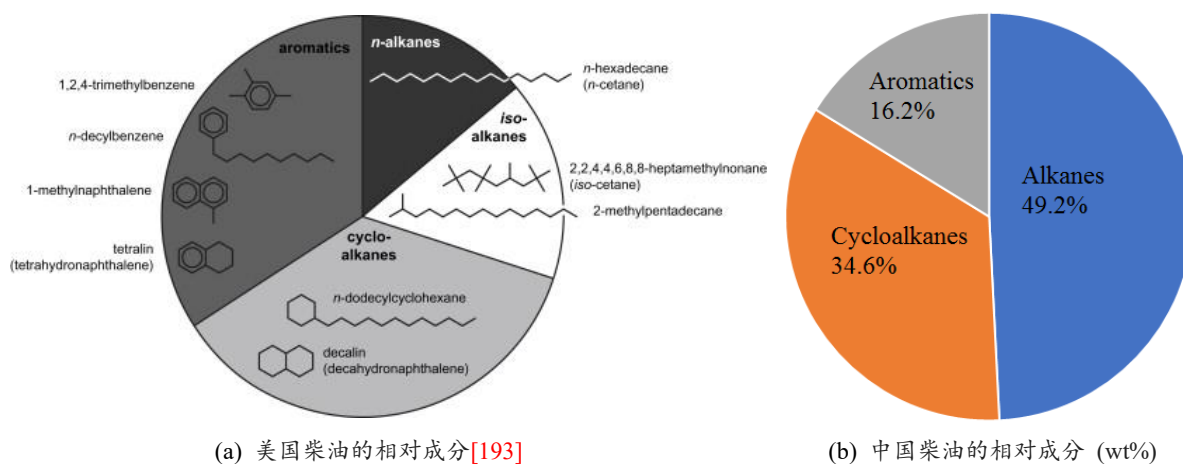


图 3-1 不同柴油成分的比较  
Figure 3-1 Comparison of the components in diesel fuel from different countries

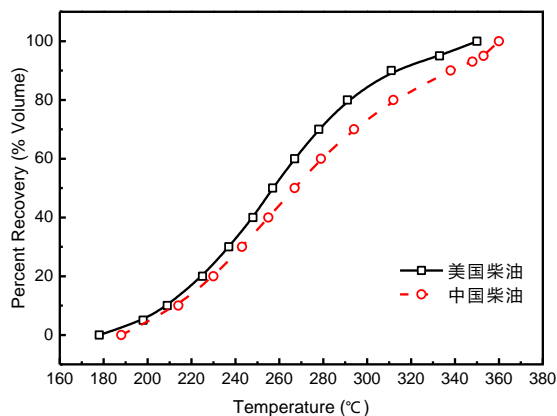


图 3-2 不同柴油馏程曲线对比  
Figure 3-2 Comparison of the distillate curves of different diesel fuels



构建模型燃料的主要难点在于，不管是汽油、柴油还是航空煤油，其具体成分、以及每种成分的比例都不是固定的，不同国家和地区、不同生产厂家，甚至不同原油产地、不同生产季节、不同生产标准炼制出来的燃料组分都不相同。这给准确把握实际燃料的燃烧化学动力学特性和排放物生成特性，详细阐明燃料和发动机的精准关系造成的很大的障碍。图 3-1 所示为美国和中国的柴油主要成分比较，从图 3-1 中可以看到，两者的共同点是柴油均主要由链烷烃（正构烷烃、异构烷烃）、环烷烃以及芳香烃构成；两者显著的差别在于无论是烷烃、烯烃、还是芳烃，其比例均显著不同。成分的不同会导致宏观理化参数的变化，如图 3-2 对比了不同柴油的馏程曲线，不同馏程对应温度有所差异，但柴油整体馏程对应温度分布区间均介于 170°C 至 370°C 之间。

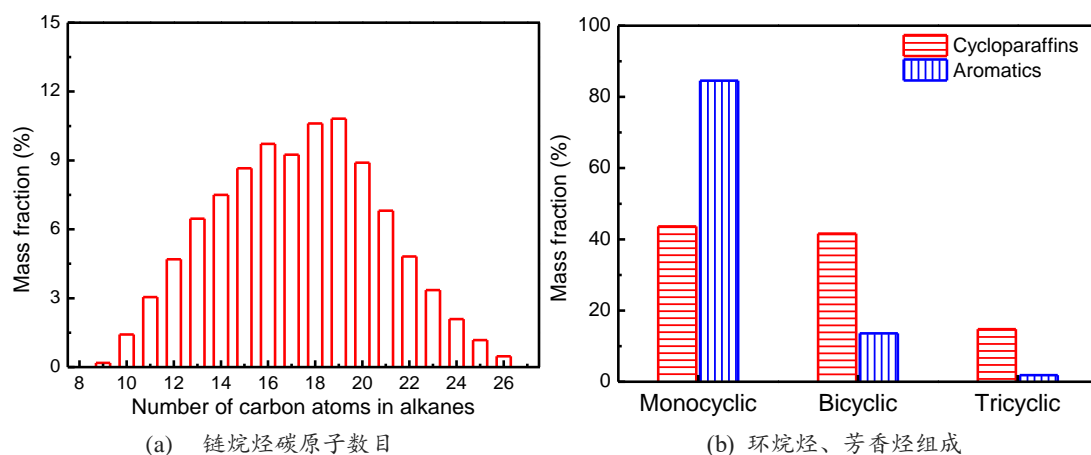


图 3-3 柴油组分的详细分析

Figure 3-3 A detailed analysis of diesel components

图 3-3 进一步对各个族的物质进行了分析，从图 3-3 (a) 中可以看出，柴油中链烷烃的碳原子数目分布在 C<sub>9</sub>-C<sub>26</sub> 的区间，其中碳链长度介于 C<sub>11</sub>-C<sub>24</sub> 的正构烷烃占 95wt%。图 3-3 (b) 中分析了环烷烃、芳香烃结构分布特征，对于环烷烃，单环烷烃占 43.6wt%、双环烷烃占 41.6 wt%，三环烷烃占比较少；芳香烃中，单环芳香烃占 84.6wt%，双环芳香烃占 13.6 wt%，三环芳香烃含量极少。

### 3.1.2 候选组分的选取及其主要理化性质

针对柴油模型燃料的构建，碳原子数介于 C<sub>10</sub>-C<sub>20</sub> 的组分可更为准确的复现柴油理化性质[50, 51]。在模型燃料的构建过程中，各个候选组分的机理可获取性是一个重要的考虑因素[195]；此外，还需考量候选组分能否获取大量高纯度单体以用于发动机试验。为此，本文在直链烷烃中选取正癸烷、正十二烷、正十四烷和正十六烷为候选组分；支链烷烃中选取异辛烷、异十二烷、和异十六烷为候选组分；环烷烃方面主要考察了甲基环己烷和十氢萘对发动机性能和排放的影响；芳香族选取甲苯、正丁基苯、四氢萘和 1-甲基萘作为候选组分。本文测试的十三种组分的分子结构和主要的理化性质如表 3-1 所示，除十六烷值外主要参数取自于文献[196]。





表 3-1 柴油候选组分分子结构及其主要理化性质

Table 3-1 Molecular structure and the main physicochemical properties of surrogate candidates

Name	Molecular structure	Molar Weight	Density g/cm <sup>3</sup>	Cetane Number	ST 10 <sup>-3</sup> N/m @25 °C	BP (°C) @101kPa	LHV MJ/kg	H/C ratio
n-Decane		142.29	0.732	76	23.89	174	44.236	2.20
n-Dodecane		170.34	0.748	80	25.40	216	43.949	2.17
n-Tetradecane		198.39	0.761	95	26.61	253	44.020	2.14
n-Hexadecane		226.45	0.773	100	27.53	287	43.952	2.13
iso-Octane		114.23	0.695	14	18.32	99	44.342	2.25
iso-Dodecane		170.34	0.750	-	-	170	46.1	2.17
HMN		226.45	0.793	15	-	240	43.4	2.13
Methylcyclohexane		98.19	0.77	20	23.88	101	43.356	2.00
Decalin		138.25	0.886	48	32.17	192	42.618	1.80
Toluene		92.14	0.87	9	28.52	111	40.523	1.14
n-Butylbenzene		134.22	0.860	-	29.17	183.1	41.457	1.40
1-Methylnaphthalene		142.20	1.02	0	40.27	240	39.259	0.91
Tetralin		132.21	0.970	36	33.64	207.2	40.524	1.20

### 3.1.3 测试燃料及其理化性质

由于选取的候选组分物理性质、化学性质与柴油存在较大差异，无法在直喷压燃式发动机上直接使用，为此本文在原柴油中加入较高比例的各种单体成分，使得该组分在混合燃料中占据主导地位，从而实现对燃料物理化学特性的调控，进而在发动机上开展试验，通过对比该组分添加前后的燃烧与排放特性，得出该组分对发动机的影响。为便于表述，候选组分/柴油混合燃料在图中均标记为该候选组分名称。

根据对柴油的分析结果（见图 3-1 和图 3-2），柴油中链烷烃的比例大约为 45~50%，环烷烃比例为 30~35%，芳烃比例约为 15%。因此，为突出每种组分在柴油燃烧过程中的作用，在本章试验中，分别在柴油中添加 50% 的直链烷烃和 30% 的支链、环烷烃和芳烃，形成十三种混合燃料。对于多组分模型燃料的理化性质，很多研究人员对某些参数采用线性加权的方法来进行预测，如 Kim 等[197]计算十六烷值、低热值、密度、表面张力、馏程曲线；Narayanaswamy 等[198]计算混合燃料中的 H/C 比例、十六烷值、以及烟点等参数。事实上，多组分混合燃料的理化性质很难用线性加权的方法来预测[199, 200]，特别是十六烷值、馏程、烟点等参数。为



此, 本文对密度、黏度、表面张力、馏程曲线等参数进行了测量, 但是对低热值、混合燃料中 H/C、以及官能团仍然按照加权方法进行计算[197, 198]。即:

$$(H / C)_{mix} = \frac{n_{mix}^H}{n_{mix}^C} = \frac{\sum_1^N X_i n_i^H}{\sum_1^N X_i n_i^C} \quad (3-1)$$

$$LHV_{mix} = \sum_1^N X_i LHV_i \quad (3-2)$$

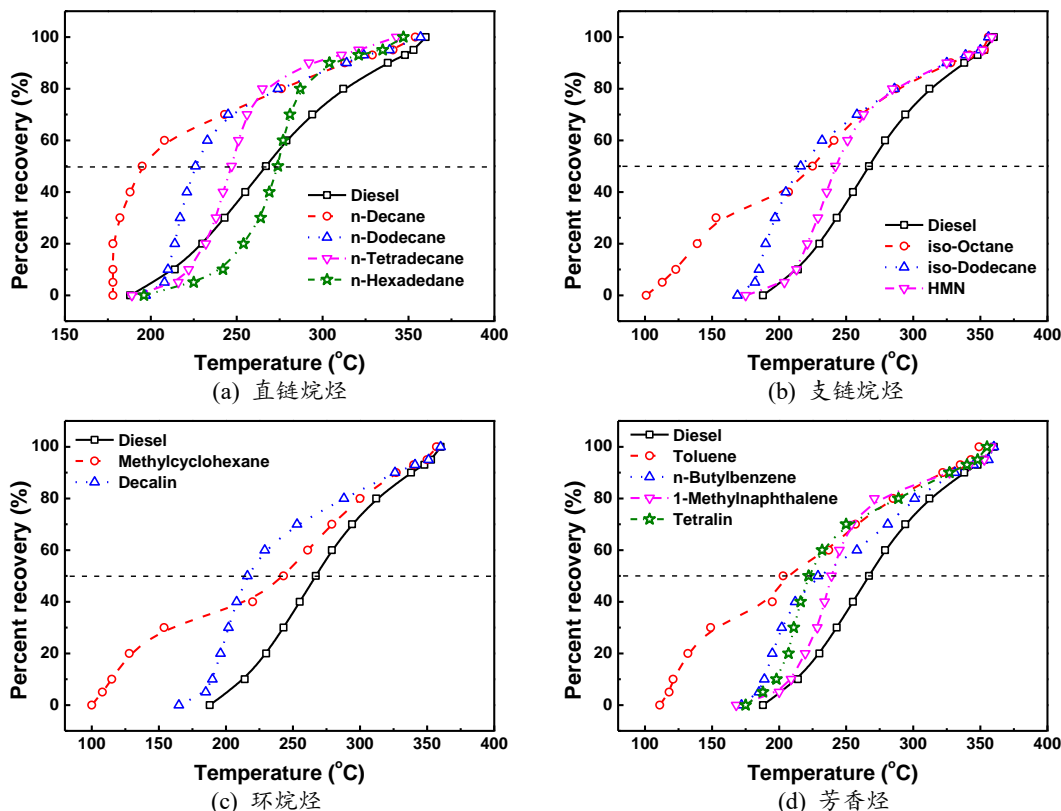


图 3-4 十三种燃料的馏程曲线与柴油的比较

Figure 3-4 Comparison of the distillation curves of the thirteen mixed fuels

对于使用直接喷射燃烧方式的燃料, 特别是柴油类高沸点高黏度的燃料, 燃料的馏程曲线对混合气形成与分布、着火时刻与燃烧相位、排放物生成与演化、发动机性能都有明显的影响。表征燃料挥发性的有三个指标, 分别是 T10、T50、T90。一般来说, T10 影响发动机的冷起动性能、着火时刻、预混合燃烧比例、燃烧相位、燃烧噪声、HC 排放等, T50 影响发动机的加速性、燃烧速率、中值放热时刻、效率、氮氧化物排放、CO 排放等, 而 T90 主要影响发动机的碳烟排放和超细微粒数目。本文对柴油以及十三种燃料的馏程曲线进行了测量, 结果如图 3-4 所示。

从馏程曲线的测量结果可以看出: (1) 沸点较低的模型燃料会导致 T10 的偏差较大; (2) 正十六烷沸点与柴油 T50 接近, 从而使得添加 50%正十六烷后 T50 差异不大; (3) 添加 30%体积分数异构烷烃、环烷烃、芳香烃, 对 T90 影响不大; (4) 某些成分的极性作用导致混合燃



料的馏程曲线会出现非线性特性。对于十六烷指数，可以通过测定燃料馏程以及密度，再根据经验公式进行估算[201]。表 3-2 所示为本文测试的混合燃料及其主要理化性质。

表 3-2 本文测试燃料及其主要特性参数

Table 3-2 Test fuels and their main characteristic parameters

Components	Blending Ratio with diesel (vol %)	Viscosity mm <sup>2</sup> /s @20°C	Cetane index	Density g/cm <sup>3</sup>	LHV MJ/kg	Distillation curves (°C)			
						T10	T30	T50	T90
Diesel	-	4.22	52.8	0.830	42.5	214	243	267	338
n-Decane	50	2.11	48.8	0.781	43.3	175	182	195	329
n-Dodecane	50	2.74	56.6	0.790	43.1	210	217	226	314
n-Tetradecane	50	3.21	61.9	0.793	43.4	222	238	247	292
n-Hexadecane	50	4.17	65.0	0.801	43.2	225	264	274	304
iso-Octane	30	2.06	-	0.787	43.1	123	153	225	328
iso-Dodecane	30	2.84	48.5	0.802	43.7	185	197	216	325
HMN	30	3.84	50.4	0.819	42.8	213	229	242	325
Methylcyclohexane	30	2.42	-	0.812	42.7	115	154	243	327
Decalin	30	3.18	-	0.839	42.9	190	202	216	326
Toluene	30	1.66	32.5	0.832	42.4	121	149	203	322
n-Butylbenzene	30	2.56	40.0	0.838	42.2	189	202	229	331
1-Methylnaphthalene	30	3.06	29.73	0.882	41.6	209	228	239	327
Tetralin	30	2.9	29.2	0.865	42.2	198	211	222	327

### 3.2 正构烷烃对燃烧和排放的影响

燃料化学动力学机理对发动机燃烧排放特性影响很大。为此，图 3-5 给出了正构烷烃的化学反应动力学主要路径及着火延迟特征。从图 3-5(a)中可以看到，正构烷烃燃料分子在低温下受活性基 ( $\dot{O}$ 、 $\dot{H}$ 、 $\dot{OH}$ 、 $\dot{C}H_3$ ) 等的攻击，首先发生脱氢反应，生成燃料基团；之后，燃料基团与氧气发生加成、异构化反应，生成 $R\dot{O}_2$ 和 $\dot{Q}OOH$ ，在低温下 $\dot{Q}OOH$ 可再次与氧气发生加成反应生成 $\dot{O}_2\dot{Q}OOH$ ， $\dot{O}_2\dot{Q}OOH$ 进一步异构并裂解生成酮类及两个 $\dot{OH}$ 基， $\dot{OH}$ 基具有很强的反应活性，从而加快了低温反应速率。随着温度的上升， $\dot{Q}OOH$ 可发生三种反应，即 $\dot{Q}OOH \rightarrow olefin + H\dot{O}_2$ 、 $\dot{Q}OOH \rightarrow epoxide + \dot{OH}$ 、 $\dot{Q}OOH$ 的 $\beta$ 裂解反应，这降低了 $\dot{Q}OOH + O_2 \rightarrow \dot{O}_2\dot{Q}OOH$ 反应速率，抑制了 $\dot{OH}$ 生成浓度，使得反应活性下降，这导致化学反应速率随着温度的升高而下降，这一现象被称为 NTC 现象。随着温度的进一步上升，燃料基团发生 $\beta$ 裂解反应，迅速转化成小分子。图 3-5(b)



为不同链长正构烷烃在较宽的温度区间内的着火延迟对比，从图中可以看出，碳链分布在 C<sub>7</sub>~C<sub>16</sub> 的正构烷烃，其着火延迟在较宽的温度范围内变化趋势接近，但 NTC 发生的区间和强度有所差异。此外，上述采用的计算燃烧模型均通过 C<sub>7</sub> 机理推广获得，尚未得到试验的广泛验证。

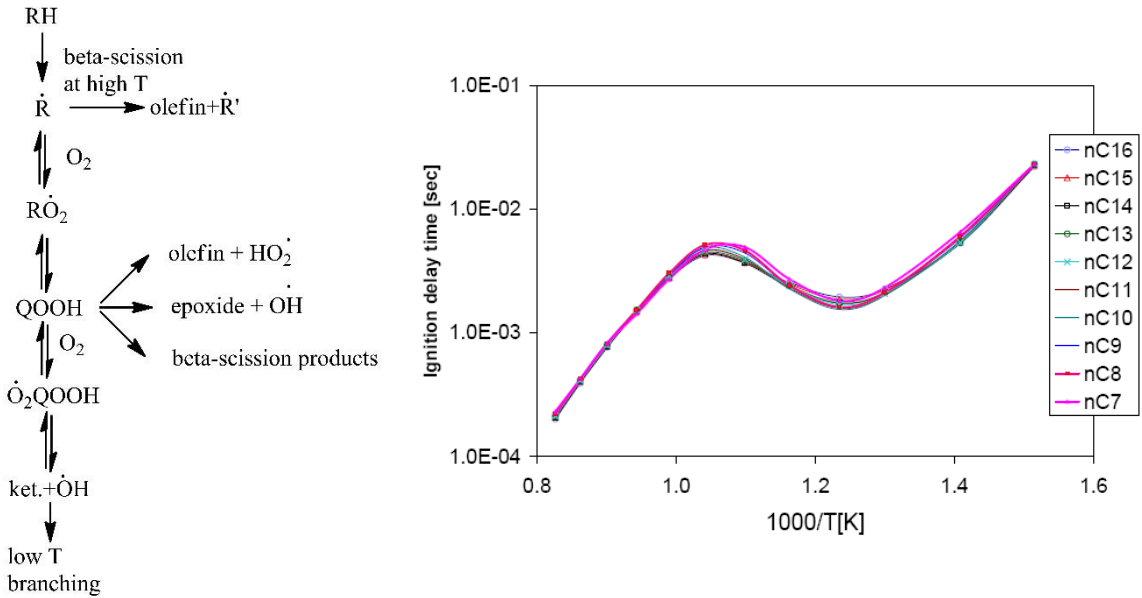


图 3-5 正构烷烃化学反应动力学特征对比

Figure 3-5 Comparison of chemical reaction characteristics of different n-alkanes

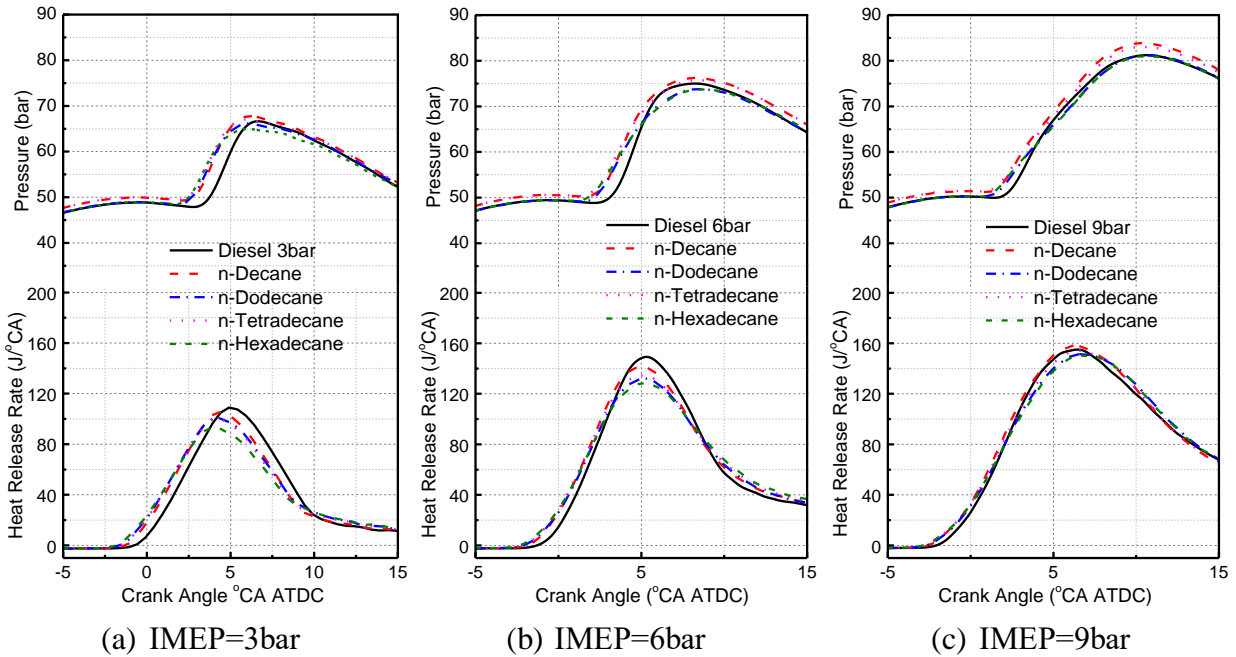


图 3-6 正构烷烃对缸内压力及放热率的影响

Figure 3-6 Effects of n-alkanes blended with diesel on the in-cylinder pressure and heat release rate

柴油中添加 50%体积分数正构烷烃，不仅对燃料馏程、密度等物理性质有较大影响，还导



致燃料组分碳族分布的变化，其中环烷烃体积分数降低至 20%以下、芳香烃体积分数降低至 10%以下。图 3-6 给出了柴油添加 50%正构烷烃在不同负荷下缸内压力及放热率曲线。从图中可以看到，在 IMEP=3bar 时，添加正构烷烃使得燃烧相位提前约 1°CA，这主要是由于添加正构烷烃时（除正十六烷），混合燃料轻质组分比例增大，燃油挥发性的增强促进了缸内油气混合；此外，添加正十二烷、正十四烷以及正十六烷时，燃料十六烷指数增大，有利于提高燃油反应活性。随着负荷的增大，上述燃烧相位间的差异逐渐减少。这可能是由于随着负荷的增大，缸内温度升高，弱化了燃料十六烷值、挥发性等差异导致的燃烧相位的差异，从而使得随着负荷的增大，燃烧相位的差异逐渐减少。

在小负荷下，添加正构烷烃会使得放热率峰值略低于柴油。这主要是由于小负荷时，添加正构烷烃会使得燃烧相位略有提前，滞燃期相较于柴油短，不利于直喷燃料与缸内空气混合，降低了预混合燃烧比例，从而使得放热率峰值降低。混合燃料中，放热峰值高低顺序为正癸烷(105.5J/°CA)>正十二烷(100.8J/°CA)≈正十四烷(99.7J/°CA)>正十六烷(93.1J/°CA)。这主要是由于碳链较短的正构烷烃沸点较低，添加后会提高燃油挥发性，从而使得预混合燃烧比例增大，进一步使得放热峰值增大。

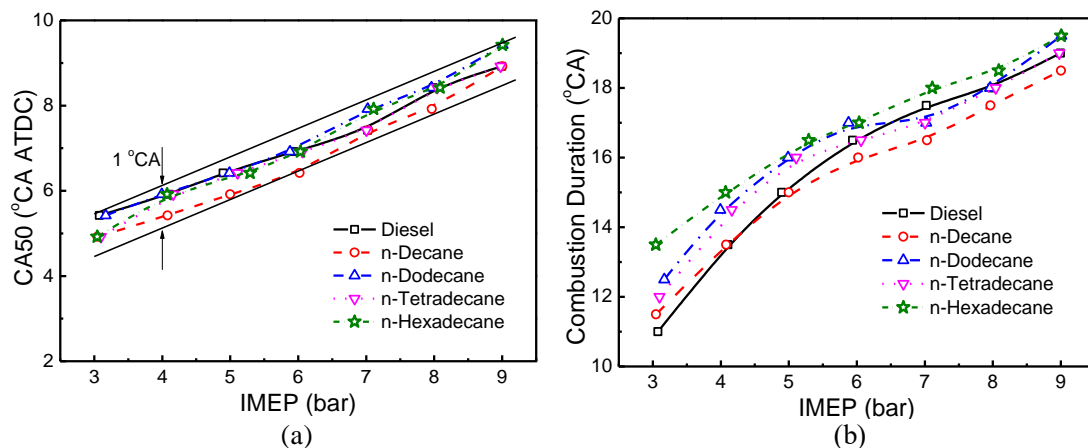


图 3-7 正构烷烃对 CA50 及燃烧持续期的影响

Figure 3-7 Effects of n-alkanes blended with diesel on CA50 and combustion duration

图 3-7 给出了柴油添加正构烷烃对 CA50 及燃烧持续期的影响。从图 3-7(a)中可以看到，在全负荷范围内，添加正构烷烃后与柴油 CA50 的差异均保持在 1°CA 以内，且均随着负荷的增大不断推迟。这表明燃料十六烷指数介于 48 至 65，对放热中值时刻影响有限。在图 3-7(b)中，小负荷时，添加正构烷烃会使得燃烧持续期增大，这可能是由于在该燃烧相位区间，添加正构烷烃后燃烧相位的提前，会使得燃烧后期温度降低，燃烧速率下降，从而使得燃烧持续期反而增大。随着负荷的增大，添加正构烷烃与柴油燃烧持续期差异降低至 1°CA 左右，这可能是由于负荷增大使得缸内温度升高，促进了燃料的燃烧，使得燃油理化性质对燃烧持续期影响下降。

在全负荷范围内，添加正十六烷燃烧持续期均较柴油长，在小负荷时燃烧持续期增大约 2.5°CA；添加正癸烷、正十二烷、正十四烷燃烧持续期与柴油关系复杂：在小负荷下较柴油长，



在中高负荷下与柴油接近或较柴油短。这可能是由于燃油挥发性对缸内喷雾、油气混合的影响。对比添加不同正构烷烃，燃烧始点接近，添加相对轻质组分会提高燃油挥发性，加强燃油在缸内混合，燃烧速率加快，燃烧持续期缩短；添加高沸点组分，燃油挥发性降低，喷入缸内后蒸发、混合程度下降，从而导致燃烧速率下降，燃烧持续期增大。

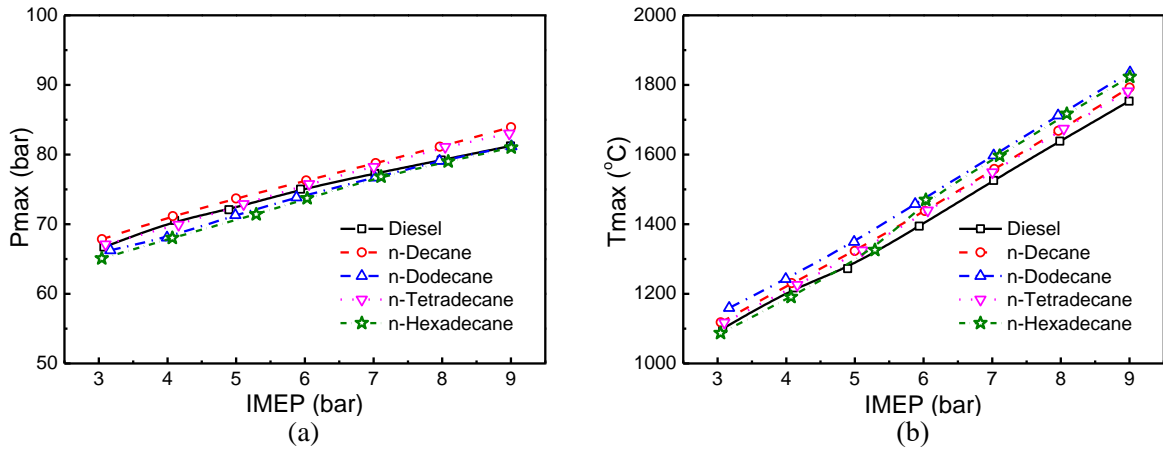


图 3-8 正构烷烃对缸内最高压力和最高气体平均温度的影响  
Figure 3-8 Effects of n-alkanes blended with diesel on the in-cylinder Pmax and Tmax

图 3-8 给出了柴油添加正构烷烃对缸内最高压力和最高气体平均温度的影响。从图 3-8(a)中可以看到，添加正构烷烃后，缸内最高压力与柴油差异较小，全负荷范围内差异均在 2% 以内（约 3bar）。由图 3-6 及 3-7 中可以看到，添加正构烷烃后，中、小负荷下，虽然燃烧相位提前，但燃烧速率略有下降；大负荷下，整体放热速率接近，缸内压力历程接近，这使得在全负荷范围内缸内最高压力差异较小。在图 3-8(b)中，添加正构烷烃使得缸内最高气体平均温度升高，仅在小负荷下添加正十六烷使得缸内最高气体平均温度略低于柴油。缸内最高气体平均温度主要由燃烧相位、速率决定，添加正构烷烃后，燃烧相位略有提前，配合活塞上行使得缸内温度更高。小负荷下，虽然添加正十六烷使得燃烧相位提前，但燃料挥发性降低，预混合燃烧比例下降，燃烧速率的降低使得缸内最高温度较柴油低。

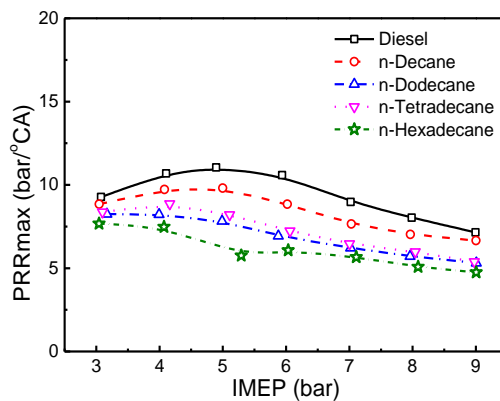


图 3-9 正构烷烃对缸内最高压力升高率的影响

Figure 3-9 Effects of n-alkanes blended with diesel on the in-cylinder PRRmax

图 3-9 给出了正构烷烃对缸内最高压力升高率的影响。从图中可以看出，添加正构烷烃后



缸内最高压力升高率降低。其中添加正十六烷缸内最高压力升高率在全负荷范围内均最低。缸内最高压力升高率主要由燃烧相位、燃烧速率以及缸内整体混合均匀程度共同决定。从图 3-6 可以看到，添加正构烷烃后，在中小负荷时燃烧相位会略有提前，这会使得直喷柴油时会有更长的雾化混合时间，从而使得最高压力升高率略高。

对比添加不同正构烷烃，在全负荷范围内，缸内最大压力升高率排序为正癸烷>正十二烷≈正十四烷>正十六烷。添加 50%体积分数正构烷烃后，混合燃料燃烧相位大致相同，缸内燃油混合气均匀性成为主导最大压力升高率的因素，随着正构烷烃碳链长度的增大，燃油挥发性的降低使得混合气均匀性下降，导致了预混合燃烧比例下降，从而使得最高压力升高率随着添加正构烷烃链长的增大有所下降的趋势。

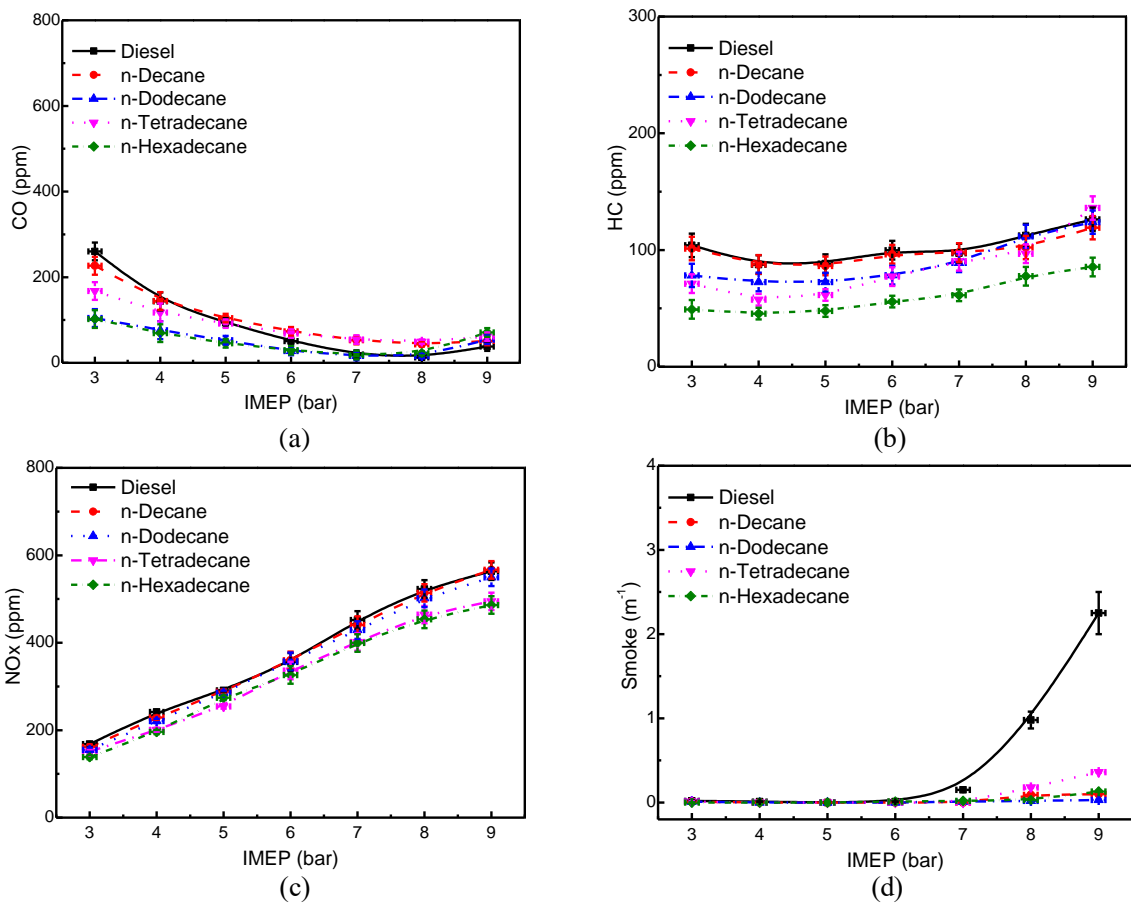


图 3-10 正构烷烃对主要气体排放的影响

Figure 3-10 Effects of n-alkanes blended with diesel on the gas emissions

图 3-10 给出了柴油添加正构烷烃对主要气体排放的影响。图 3-10 (a) 为柴油添加正构烷烃对 CO 排放的影响，从图中可以看到，添加正构烷烃后在小负荷时 CO 排放略有降低，但随着负荷的增大，这种差异逐渐减小。CO 排放主要受当量比及燃烧温度共同决定。从上述分析可以发现，添加正构烷烃后，缸内燃烧温度略有增大，这有利于 CO 的氧化。此外，正构烷烃比例的增大会稀释缸内芳香烃的比例，芳香烃含量降低至 10% 以下，燃料饱和度的增加也有利于抑制 CO 的生成。



图 3-10 (b) 给出了不同负荷下，柴油添加 50%体积分数正构烷烃对 HC 排放的影响。从图 3-10 (b) 中可以看到，添加正癸烷与柴油 HC 排放接近；添加正十二烷在中小负荷下略低于柴油，在大负荷下与柴油接近；添加正十四以及正十六烷 HC 排放在全负荷范围内均降低。添加正构烷烃后，尤其在中小负荷下，HC 排放顺序为正癸烷>正十二烷>正十四烷>正十六烷。添加正癸烷、正十二烷时，虽然燃料挥发性的改善有利于降低 HC 排放，但燃烧相位的提前不利于燃油与缸内空气的混合，使得 HC 排放与柴油差异较小；添加正十四烷、正十六烷时，燃烧温度的升高（如图 3-8 (b)）、中小负荷下燃烧持续期的增大如图 3-7 (b)，均会使得燃烧后期温度略高，从而促进了 HC 排放的氧化。

图 3-10 (c) 给出了柴油添加正构烷烃对 NO<sub>x</sub> 排放的影响。在全负荷范围内，添加正构烷烃 NO<sub>x</sub> 排放略有下降。NO<sub>x</sub> 排放主要是缸内高温区域氮气被氧化的产物。添加正构烷烃后，燃烧相位略有提前，从而不利于缸内燃油的混合，预混合燃烧比例下降，有利于减少局部高温区的比例，从而抑制了 NO<sub>x</sub> 排放。添加正构烷烃后，NO<sub>x</sub> 排放高低顺序为正癸烷>正十二烷>正十四烷>正十六烷，从图 3-6 中可以看到，添加正构烷烃后，燃料燃烧相位基本相同，此时短链正构烷烃较高的挥发性使得预混合燃烧比例较高，燃烧最高放热速率较长链正构烷烃高，从而使得 NO<sub>x</sub> 排放较高。

图 3-10 (d) 为柴油添加正构烷烃对碳烟排放的影响。从图 3-10 (d) 中可以看到，随着负荷的增大，直喷柴油时，在高负荷时碳烟排放急剧增大。但添加正构烷烃后，全负荷范围内碳烟排放均维持在较低的水平。这主要是由于添加正构烷烃后，会使得柴油中重质烃类（碳数高于 C<sub>16</sub> 的烃类成分）体积分数的下降，燃油黏度会有所下降，有利于燃油喷雾后的蒸发、混合，对碳烟排放有抑制作用。

### 3.3 异构烷烃、环烷烃对燃烧及排放影响的对比研究

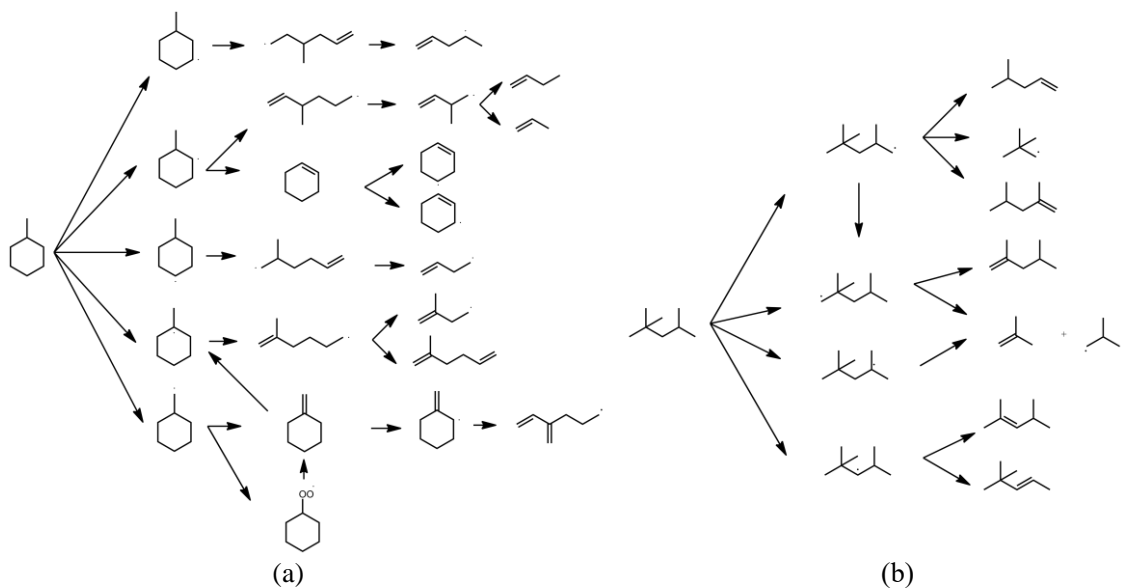


图 3-11 甲基环己烷与异辛烷主要氧化反应路径 (1200K, 40bar)

Figure 3-11 The reaction process and intermediate products of methylcyclohexane and isooctane (1200K, 40bar)





图 3-11 给出了 1200k、40bar 时甲基环己烷以及异辛烷在 1200k、40bar 条件下的主要氧化反应路径。从图 3-11 (a) 中可以看到，甲基环己烷高温条件下初始反应包括环上脱氢、环上甲基脱氢，环上脱氢之后会发生开环反应生成烯烃类中间产物，后续反应为 C-C 键逐渐断裂形成小分子为主。异辛烷在高温条件下第一步反应也是在不同位置的脱氢反应；第二步反应主要遵循  $\beta$  裂解原则， $\beta$  位的 C-C 键断裂形成支链烯烃和小分子，后续反应也以 C-C 键逐渐断裂形成小分子为主。甲基环己烷、异辛烷在反应过程中均会生成烯烃类中间产物。

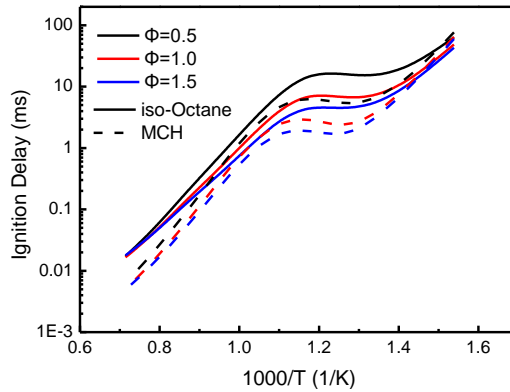


图 3-12 甲基环己烷与异辛烷的 40bar 下着火延迟特性

Figure 3-12 Comparison of the ignition delay of methylcyclohexane and iso-octane (40bar)

图 3-12 给出了 40bar 下甲基环己烷以及异辛烷着火延迟的对比。图中着火延迟均采用 LLNL 实验室提出的机理进行计算获得，该机理在较宽的温度当量比范围内与试验值进行了对比，具有较高的可靠性。采用该机理计算可以发现，甲基环己烷与异辛烷均存在明显 NTC 现象，其中异辛烷 NTC 起始温度和结束温度均较甲基环己烷低；相同当量比条件下，异辛烷着火延迟较甲基环己烷长。

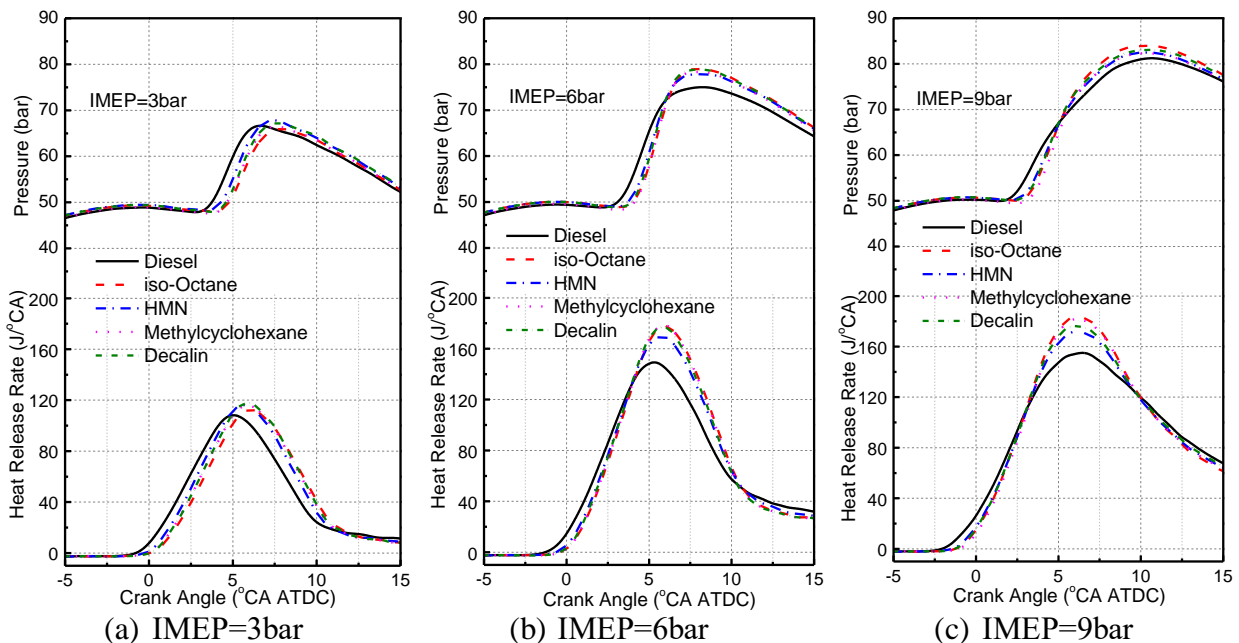


图 3-13 添加异构烷烃、环烷烃对缸内压力及放热率的影响

Figure 3-13 In-cylinder pressure and heat release rate of iso-alkane/diesel and cycloparaffin/diesel under different loads



柴油中添加 30%异构烷烃、环烷烃，混合燃料中异构烷烃、环烷烃体积分数约会超过 50%，成为主要碳族组分，同时会导致燃油理化性质包括十六烷值、密度、黏度发生改变（如表 3-2 所示）。图 3-13 对比了不同负荷下，柴油中分别添加异构烷烃、环烷烃对缸内压力及放热率曲线影响。从图中可以看到，在不同负荷下，添加异构烷烃、环烷烃均使得燃烧相位略有推迟，这主要是由于所选用的异构烷烃、环烷烃十六烷值均较柴油低，以 30%体积添加到柴油中后导致燃料反应活性下降，从而使得燃烧相位略有推迟。此外，添加异构烷烃以及环烷烃会使得缸内放热率曲线峰值增大：一方面，燃料十六烷值的降低使得着火延迟增大，从而促进了燃油的混合，增大了预混合燃烧比例；此外，异构烷烃及环烷烃有较低的黏度及沸点，有助于直喷燃料的雾化，从而促进了燃料与空气混合的均匀性，有利于放热速率的增大。

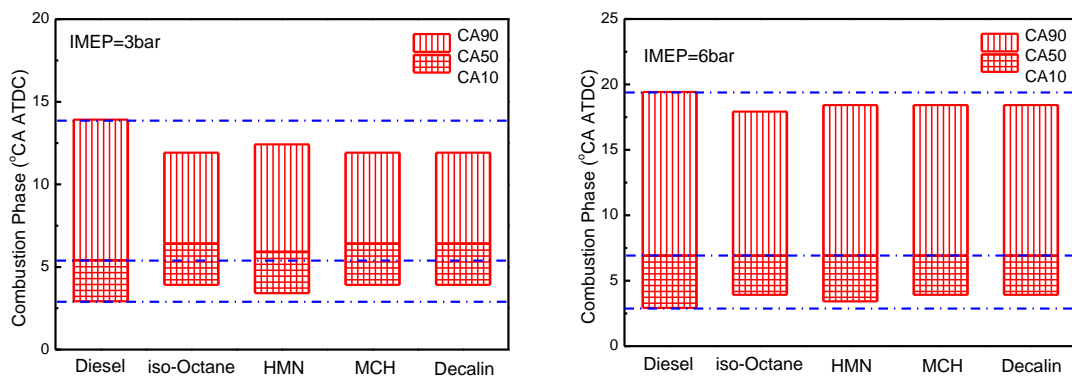


图 3-14 相同直喷正时燃烧相位的对比

Figure 3-14 Comparison of the combustion phase of iso-alkane/diesel and cycloparaffin/diesel under different loads

为进一步厘清柴油中添加不同结构异构烷烃、环烷烃对燃烧过程的影响，图 3-14 给出了相同直喷正时下，IMEP 分别为 3bar 和 6bar 时，柴油分别添加 30%体积分数的异构烷烃、环烷烃对 CA10、CA50 以及 CA90 的影响。从图中可以看到，在 IMEP 分别为 3bar 及 6bar 时，添加异构烷烃和环烷烃均使得 CA10 推迟 1°CA 左右，这主要是由于异构烷烃、环烷烃较低的十六烷值，添加到柴油中导致燃油反应活性降低。在 IMEP 为 3bar 时，添加异构烷烃和环烷烃均使 CA90 提前，在 IMEP 为 6bar 时，添加异构烷烃和环烷烃使 CA50 及 CA90 均提前。这是由于添加异构烷烃和环烷烃后，滞燃期增大，促进了燃料与空气的混合，使得燃烧速率加快；此外异构烷烃、环烷烃燃料挥发性加强，也会促进燃油混合，提高预混合比例，从而使得在 CA10 略有推迟的情况下，燃烧相位仍略有提前。

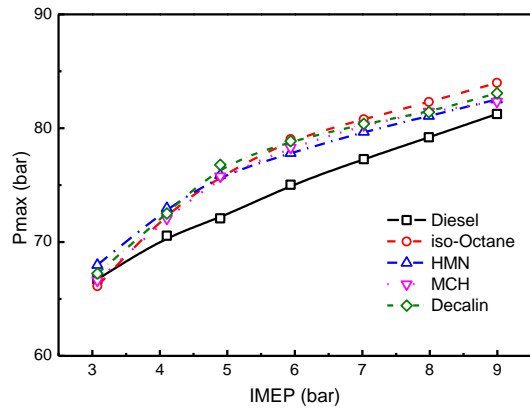


图 3-15 添加异构烷烃、环烷烃对缸内最高压力的影响

Figure 3-15 Comparison of the Pmax of diesel blending isoparaffins and naphthenes under fixed injection timing

图 3-15 给出了柴油中分别添加异构烷烃、环烷烃对缸内最高压力的影响。从图中可以看到，在小负荷下，添加异构烷烃、环烷烃对缸内最高压力影响较小，增加 1bar 左右；随着负荷的增大，这种差异逐渐被放大，尤其在中等负荷下，添加异构烷烃、环烷烃会使得缸内最高压力增大 4bar 左右；但在高负荷时，这种差异又减小至 2bar 左右。这主要是由于添加异构烷烃、环烷烃后，滞燃期的增大、燃料挥发性的提高促进了缸内油气的混合，从而提高了预混合燃烧比例，进一步使得缸内最高压力增大。在小负荷下，燃烧相位过于推迟，放热速率与柴油接近，导致缸内压力峰值与柴油接近；在中、高负荷下，添加异构烷烃、环烷烃使得放热速率增大，从而使得缸内压力峰值较高。

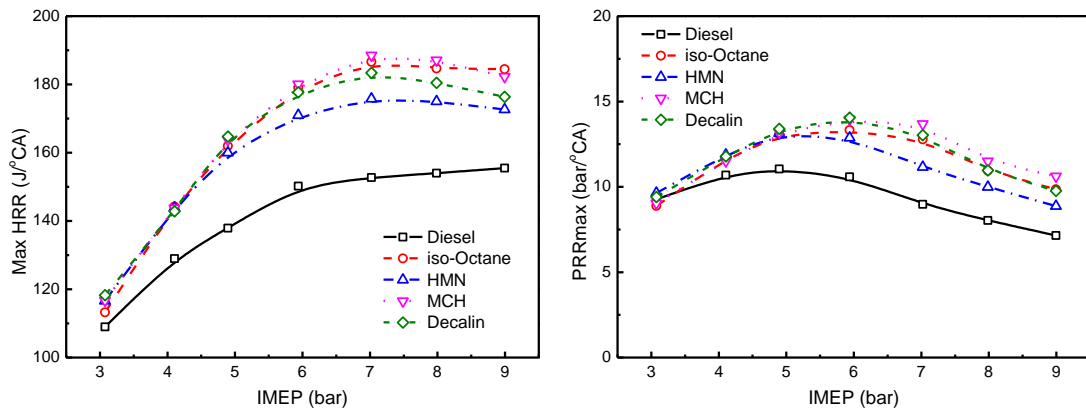


图 3-16 添加异构烷烃、环烷烃对最大压力升高率及放热速率峰值的影响

Figure 3-16 Comparison of the PRR.max and the Max HRR of diesel blending isoparaffins and naphthenes, respectively

图 3-16 比较了相同直喷正时下，柴油中分别添加 30%体积分数异构烷烃、环烷烃对缸内最大压力升高率以及放热速率峰值的影响。与添加正构烷烃不同的是，柴油中添加异构烷烃、环烷烃后，燃烧放热速率峰值在全负荷范围内均较柴油高、缸内最大压力升高率在中高负荷下较柴油高。燃烧放热速率峰值主要取决于燃烧相位、混合气均匀程度，添加异构烷烃、环烷烃一方面使得燃烧相位略有推迟，另一方面燃油挥发性的改善也有利于燃料的蒸发、混合，这都有利于提高预混合燃烧比例，使得燃烧放热峰值提高。在小负荷时，添加异构烷烃、环烷烃使



得放热速率增大  $5\sim 15\text{J}/^\circ\text{CA}$  左右；在中高负荷下，放热速率增大至  $20\sim 30\text{J}/^\circ\text{CA}$ 。这主要是由于负荷的增大，缸内当量比增大，燃油挥发性的差异导致雾化、混合差异增大，即添加异构烷烃、环烷烃后，燃烧过程中预混合燃烧规模增大且较柴油更高。从而使得放热速率较柴油更高。在中高负荷下，添加异构烷烃、环烷烃放热速率峰值高低顺序为：异辛烷 $\approx$ 甲基环己烷 $>$ 十氢萘 $>$ 异十六烷，与之对应的添加组分沸点高低顺序为：异辛烷 ( $99^\circ\text{C}$ )  $<$  甲基环己烷 ( $101^\circ\text{C}$ )  $<$  十氢萘 ( $192^\circ\text{C}$ )  $<$  异十六烷 ( $240^\circ\text{C}$ )。这表明，燃烧相位大致相同时，组分沸点差异导致燃料挥发性的差异对中高负荷下燃烧速率影响较大。

缸内最大压力升高率在小负荷下与柴油十分接近，这是由于在小负荷下，添加异构烷烃、环烷烃后导致燃烧相位的推迟，尽管此时燃烧速率略有增加 ( $5\text{J}/^\circ\text{CA}$  左右)，但活塞下行对最大压力升高率有抑制作用，从而导致最大压力升高率与柴油接近。随着负荷的增大，添加异构烷烃、环烷烃使得放热速率远高于柴油，更高的预混合燃烧比例使得缸内压力升高较快，从而使得最大压力升高率较柴油高。

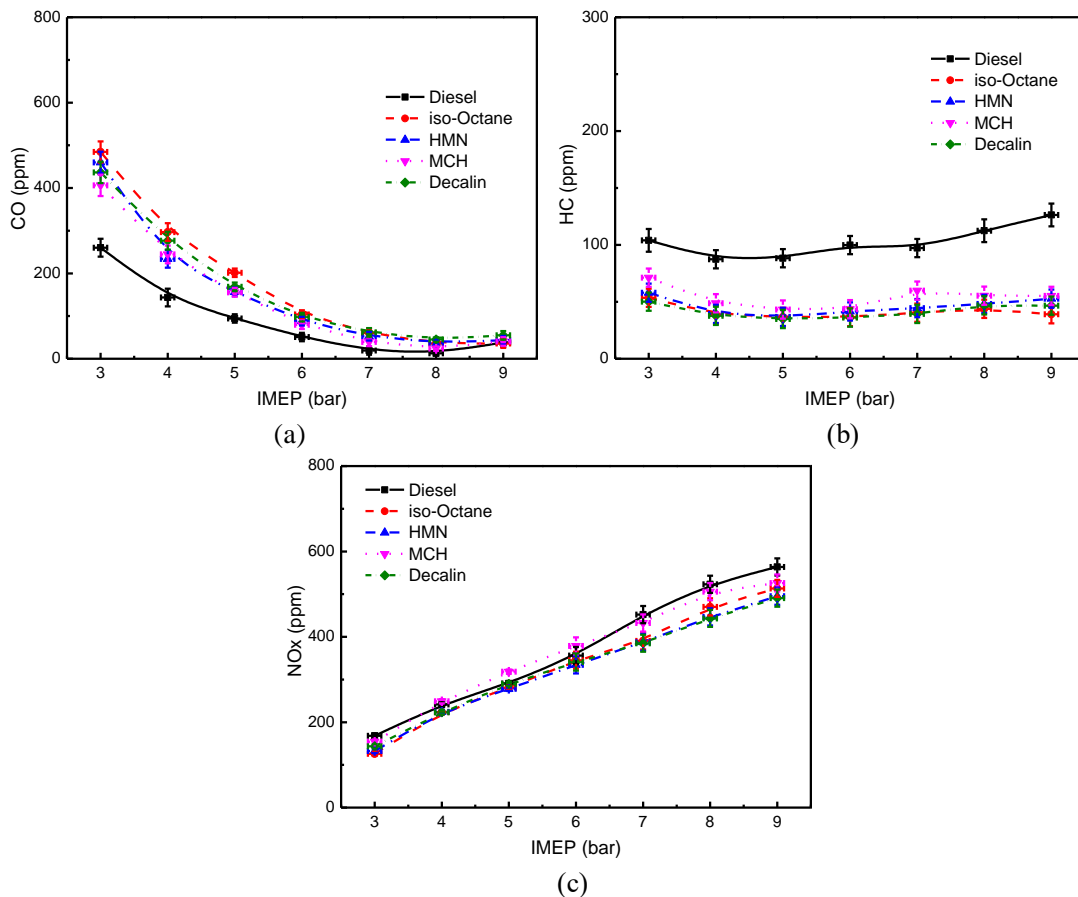


图 3-17 柴油中添加异构烷烃、环烷烃对主要气体排放的影响

Figure 3-17 Effects of iso-alkanes and cyclanes blended with diesel on the gas emissions

上述研究发现，添加异构烷烃、环烷烃对燃烧相位、燃烧速率均有较大影响，图 3-17 进一步讨论了添加异构烷烃、环烷烃对主要气体排放的影响。图 3-17 (a) 中，添加异构烷烃、环烷烃在中小负荷下会导致 CO 排放增大，但随着负荷的增大，这种差异逐渐减小。根据前文分析可以发现，添加异构烷烃、环烷烃后，燃油挥发性加强、燃烧滞燃期增大，这均会有利于



燃料的雾化进而抑制 CO 的排放。添加异构烷烃、环烷烃后，燃烧持续期缩短（2°CA 左右），这一方面使得缸内高温持续时间缩短、燃烧后期温度下降，从而使得 CO 不易氧化，导致 CO 排放较高。此外，从异构烷烃、环烷烃化学反应动力学主要反应路径（如图 3-11）可以看出，异构烷烃及环烷烃在反应过程中更易生成不饱和双键结构，从而造成燃料充分氧化难度增大，这也会导致 CO 排放的增大。而在高负荷条件下，由于较高的缸内温度，CO 排放均较低。

图 3-17 (b) 对比了不同负荷下，柴油中分别添加 30%体积分数异构烷烃、环烷烃对 HC 排放的影响。从图 3-17 (b) 中可以看到，HC 排放在不同负荷下均保持较为稳定，且添加异构烷烃、环烷烃后，HC 排放均有所下降（降低约 50%左右）。添加异构烷烃、环烷烃后，由于异构烷烃、环烷烃较低的黏度、沸点会使得油束更易破碎、蒸发，这有可能使得喷油贯穿距下降，进而有利于降低边界层内燃料浓度，从而有利于抑制 HC 排放。

图 3-17 (c) 为分别添加 30%异构烷烃、环烷烃对 NOx 排放的影响。从图中可以看到，向柴油中分别添加 30%体积分数异构烷烃、环烷烃在中低负荷下对 NOx 排放影响有限（10~40ppm）；在高负荷下，添加异构烷烃、环烷烃会导致 NOx 排放略有下降（降低 50~80ppm）。在中低负荷下，添加异构烷烃及环烷烃会使得滞燃期增大 1°CA、峰值燃烧速率增大约 5~15J°CA，从而使得缸内峰值燃烧温度增大，但同时使得高温持续期略有缩短（2°CA 左右），从而使得 NOx 排放在中小负荷下差异较小。在高负荷下，柴油与混合燃料燃烧均达到很高的温度，均超过 NOx 生成的阈值温度，此时缸内高温持续时间成为主导 NOx 排放的因素，添加异构烷烃、环烷烃使得燃烧持续期缩短，从而缸内高温时间缩短，进一步导致 NOx 的降低。

### 3.5 芳香烃对燃烧和排放的影响

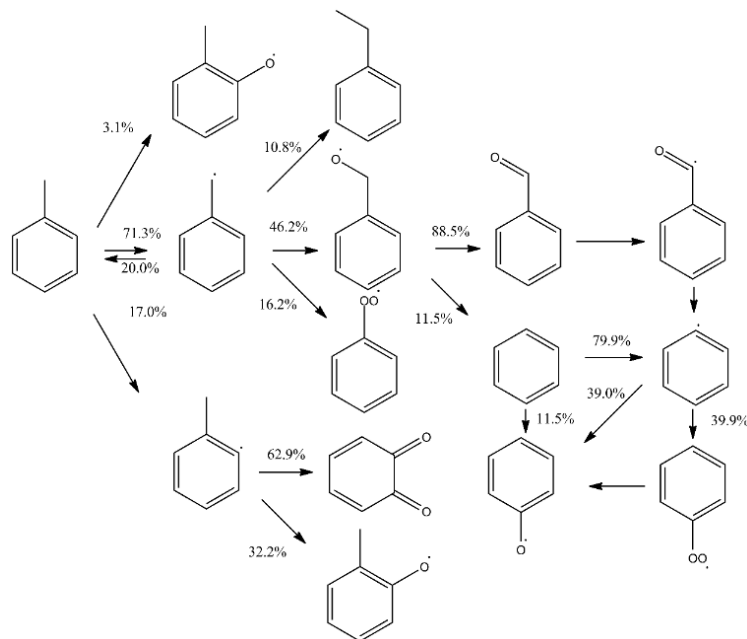


图 3-18 甲苯主要氧化反应化学动力学路径[204, 205]  
Figure 3-18 The main oxidation chemical reaction path of toluene



芳香烃被认为是柴油机碳烟前驱物主要来源。深入研究不同芳香烃对柴油燃烧过程的影响对解析柴油颗粒物生成路径有重要作用。图 3-18 为甲苯燃烧化学反应动力学主要反应路径 (40bar, 1200K)。从图中可以看到甲苯的初始反应路径主要分为环上脱氢、环上加氧以及环上取代基脱氢, 其中环上取代基脱氢为主要反应路径, 这表明芳香烃的化学动力学特征主要由芳香环以及环上取代基共同决定。因此, 本部分选择具备不同环上取代基的苯类芳香烃从而对比取代基在燃烧过程中的作用, 具体为甲苯、丁基苯。此外, 芳香烃环结构的改变会导致环上 C-H 键键能改变, 从而使得反应过程中脱氢反应的难易程度改变。为此, 本部分选取四氢萘、1-甲基萘等多环芳香烃, 从而研究柴油中添加不同结构芳香环的芳香烃对燃烧和排放的影响。

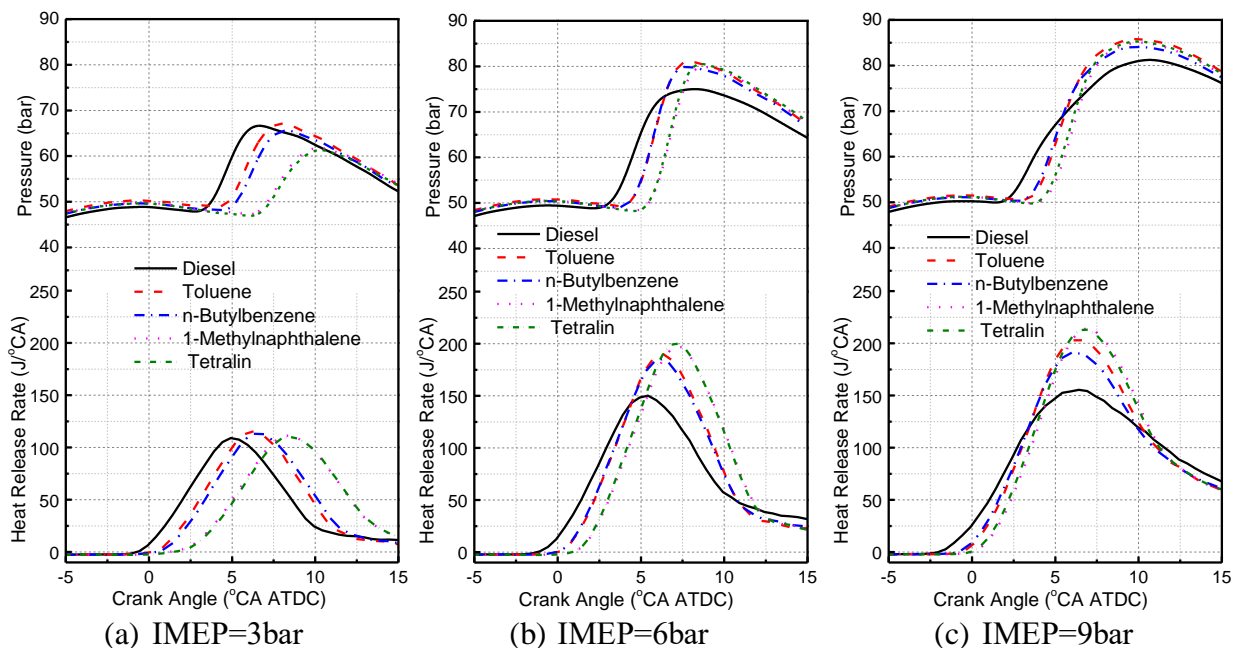


图 3-19 柴油中添加 30%芳香烃对缸内压力及放热率的影响

Figure 3-19 Effects of 30% aromatics blended with diesel on the in-cylinder pressure and heat release rate under different loads

图 3-19 给出了不同负荷下, 柴油中添加芳香烃对缸内压力及放热率的影响。从图中可以看到, 柴油中添加 30%体积分数芳香烃会使得放热相位推迟, 其中小负荷下添加单环芳香烃使得燃烧相位推迟 2°CA 左右, 添加多环芳香烃使得燃烧相位推迟 4°CA 左右; 中高负荷下, 添加单环芳香烃使得燃烧相位推迟 1°CA 左右, 添加多环芳香烃使得燃烧相位推迟 2°CA 左右。燃烧相位的推迟主要是由于添加芳香烃使得燃料十六烷指数的降低 (甲苯 32.5、丁基苯 40.0、1-甲基萘 29.7、四氢萘 29.2), 燃料反应活性降低使得缸内燃烧相位相应推迟。此外, 多环芳香烃由于更低的十六烷指数, 燃烧相位较单环芳香烃推迟更多。从分子结构角度甲苯和丁基苯的苯环取代基有较大差异, 但两者燃烧相位仅在小负荷下放热相位略有差异 (甲苯略早于正丁基苯 0.5°CA); 多环芳香烃中 1-甲基萘和四氢萘分子结构也有较大差异, 但两者燃烧相位在不同负荷下十分接近。这表明在实际发动机缸内燃烧过程中, 缸内燃烧速率、燃烧相位等宏观参数主要受芳香烃分子结构中芳香环结构特征主导。进一步比较放热率曲线可以发现, 添加芳香烃后, 在中高负荷下, 放热率曲线峰值会有所增大, 且添加多环芳香烃较单环芳香烃放热率曲



线峰值更高，这是由于添加芳香烃会使得滞燃期增大，且选取的芳香烃组分沸点较低，可改善燃油挥发性，从而促进燃料混合，使得放热率曲线峰值增大，而多环芳香烃的相位更为推迟，放热率曲线峰值更高。

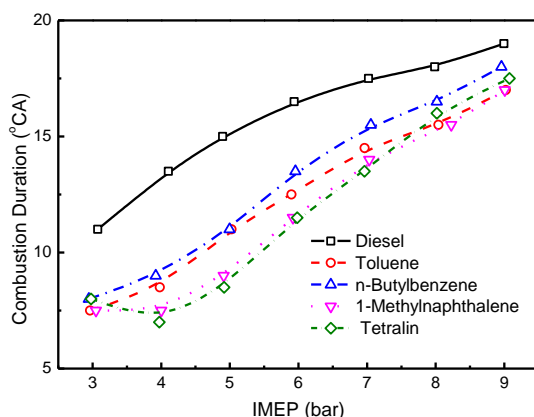


图 3-20 柴油中添加 30% 不同分子结构芳香烃对燃烧持续期的影响

Figure 3-20 Effects of 30% aromatics blended with diesel on the combustion duration under different loads

图 3-20 给出了柴油添加不同结构芳香烃对燃烧持续期的影响。从图中可以看到，添加芳香烃会使得燃烧持续期缩短。这是由于添加芳香烃会使得滞燃期增大，燃料更充分的与缸内空气混合，从而使得放热更集中，燃烧持续期更短。添加多环芳香烃时，燃烧持续期在小负荷时与添加单环芳香烃接近，均较柴油缩短 2.5°CA 左右，约 8°CA；但随着负荷的增加，两者差异先增大后减小。造成这种差异的主要原因有两点：首先单环芳烃较多环芳香烃十六烷指数略高，从而导致添加多环芳香烃时，滞燃期更长，放热更集中，燃烧持续期更短；其次，缸内整体热氛围对燃烧持续期影响也较大，在小负荷时，添加多环芳香烃使得燃烧相位推迟较多，虽然燃料与空气获得了更多的混合时间，但燃烧整体处于活塞下行阶段，缸内温度不能达到很高，从而使得燃烧速率不够快，进一步导致燃烧持续期在小负荷时比较接近；而在大负荷条件下，缸内较强的热氛围使得燃烧持续期受燃料混合的影响弱化，从而也导致高负荷下差异减小。

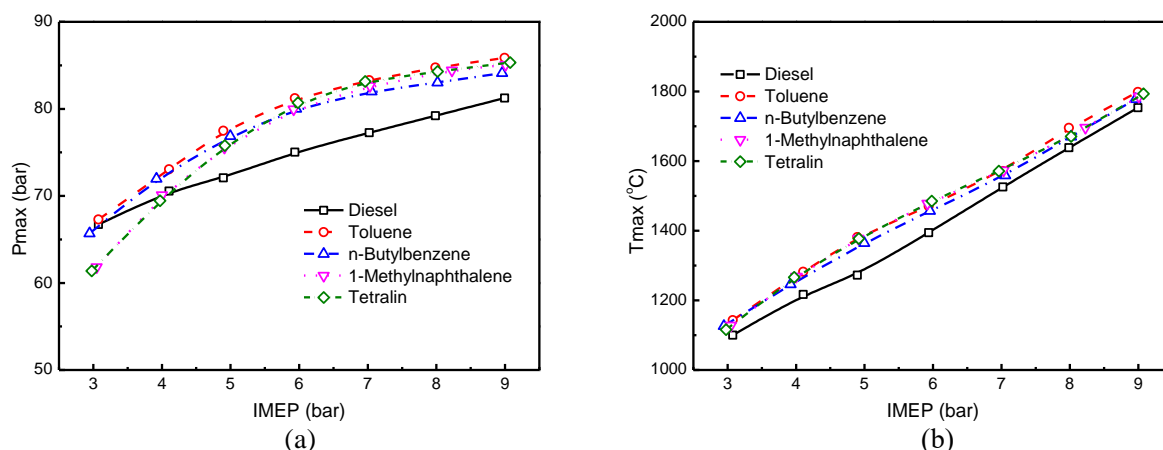


图 3-21 添加 30% 体积分数芳香烃对缸内最高压力及最高气体平均温度的影响

Figure 3-21 Effects of 30% aromatics blended with diesel on the Pmax and Tmax

图 3-21 给出了柴油中添加不同结构芳香烃对缸内最高压力以及最高气体平均温度的影响。



从图 3-21 (a) 中可以看到, 添加 30% 体积分数芳香烃后, 在中高负荷下会使得缸内压力升高约 4~6bar; 在小负荷下添加单环芳香烃缸内最大压力与直喷柴油时接近, 添加多环芳香烃会使得缸内最高压力减小约 5bar, 这主要是由于燃烧相位及燃烧速率的差异。在直喷正时相同时, 添加芳香烃会使得滞燃期增大, 在小负荷时, 添加单环芳香烃使得燃烧相位略有推迟, 但燃烧速率的加快对缸内压力的上升有促进作用, 从而使得缸内最高压力差异较小; 添加多环芳香烃时, 燃烧相位推迟较多, 放热集中程度下降, 从而使得缸内最高压力下降。随着负荷的增大, 缸内热氛围加强, 滞燃期的差异减小, 但添加芳香烃使得燃油挥发性加强, 预混合燃烧规模增大, 放热更集中, 从而使得缸内最高压力升高。图 3-21 (b) 给出了柴油添加芳香烃对缸内最高气体平均温度的影响。从图中可以看到柴油中添加高比例芳香烃会使得缸内最高温度升高约 4~5%。缸内最高温度由燃烧速率及燃烧相位共同决定, 柴油添加芳香烃会使得燃烧相位推迟, 但燃烧速率会有所增大, 更多的燃料在短时间内燃烧释放热量提高了缸内温度, 从而使得柴油添加芳香烃后缸内最高温度略有增大。

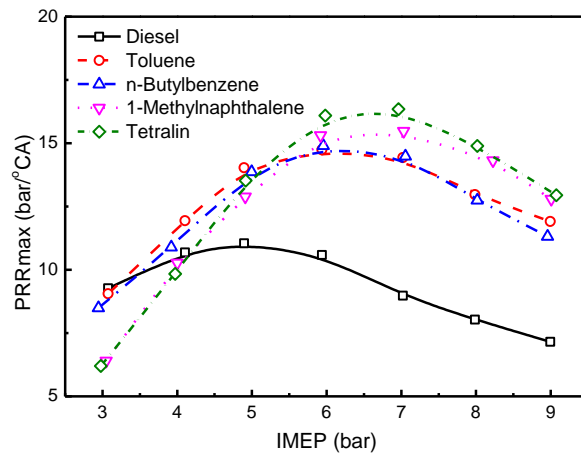


图 3-22 添加 30% 芳香烃对缸内最高压力升高率的影响  
Figure 3-22 Effects of 30% aromatics blended with diesel on the PRR.max

图 3-22 给出了柴油中添加 30% 体积分数芳香烃对缸内最大压力升高率的影响。从图中可以看到, 随着负荷的增大, 缸内最大压力升高率先增大后减小。随着负荷的增大, 缸内喷入柴油量增加, 更多的燃油同时燃烧从而使得最高压力升高率增大; 随着负荷的进一步增大, 在直喷正时一定且直喷压力相同时, 喷油持续期增大, 喷油结束时刻更接近上止点, 燃油实际混合时间缩短, 从而导致最大压力升高率降低。柴油添加芳香烃燃料后, 在中高负荷下会使得最大压力升高率增大约 4~7bar, 这主要是由于添加芳香烃使得滞燃期增大, 预混合燃烧比例增大, 从而使得缸内最大压力升高率增大。在小负荷时, 由于添加多环芳香烃使得燃烧相位推迟很多, 燃烧处于膨胀行程, 活塞开始下行, 从而使得缸内最高压力升高率较柴油低约 3bar; 添加单环芳香烃时, 燃烧相位仅略有推迟, 此时燃料混合均匀性加强, 这两者共同作用下使得最高压力升高率与柴油十分接近。



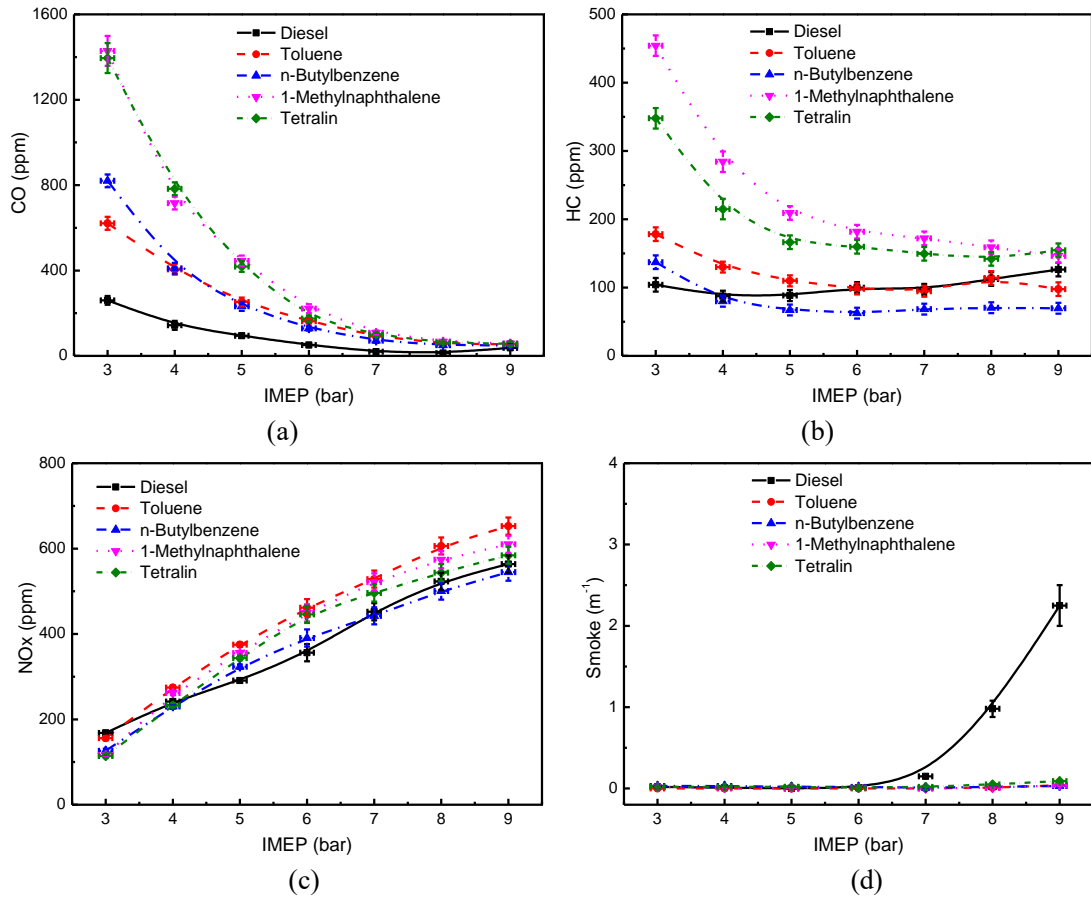


图 3-23 添加 30% 芳香烃对主要气体排放的影响  
Figure 3-23 Effects of 30% aromatics blended with diesel on the gas emissions

图 3-23 给出了柴油中添加 30% 体积分数芳香烃对主要气体排放的影响。从图 3-23 (a) 中可以看到, 随着负荷的增大, CO 排放逐渐降低。这主要是由于随着负荷的增大, 缸内热氛围逐渐增大, 这有助于 CO 的氧化。在小负荷时, 添加芳香烃后导致 CO 排放增大, 其中添加单环芳香烃 CO 升高 361ppm (甲苯)、560ppm (正丁基苯); 添加多环芳香烃升高 1168ppm (1-甲基萘)、1135ppm (四氢萘)。这主要是由于两个方面的原因: 首先添加芳香烃后会导致燃油不饱和度增加, 燃料不易充分燃烧, 从而使得 CO 排放增大; 此外, 在小负荷时, 柴油添加芳香烃使得燃烧相位略有推迟, 更多燃烧在膨胀行程中发生, 这不利于 CO 的氧化。随着负荷的增大, 添加芳香烃 CO 排放与柴油之间差异逐渐减小, 这主要是由于随着负荷的增大, 缸内温度逐渐增高, 这有利于 CO 排放的氧化, 弱化了组分差异对 CO 排放的影响。此外, 添加多环芳香烃较单环芳香烃在小负荷时会产生更高的 CO 排放, 这主要是由于多环芳香烃导致更高的燃料不饱和度以及更为推迟的燃烧相位。

图 3-23 (b) 给出了柴油添加芳香烃对 HC 排放的影响。从图中可以看到, 添加芳香烃对 HC 排放的影响与 CO 排放类似, 即在中小负荷下添加芳香烃使得 HC 排放高于柴油, 在高负荷下差异较小。HC 排放主要受缸内边界层燃料浓度影响。在小负荷的时候, 添加芳香烃会使得燃料密度增大, 这会使得喷雾过程中贯穿距增大, 从而使得边界层中燃料浓度增大, 进一步导致 HC 排放增大。随着负荷的增大, 缸内燃烧温度逐渐升高, 这有利于 HC 排放的氧化, 从



而弱化了边界层燃料浓度对 HC 排放的影响,这使得添加芳香烃在高负荷下 HC 排放与柴油差异减小。添加单环芳香烃尤其是甲苯时, HC 排放差异与柴油较小,这主要是由于甲苯、丁基苯沸点较低,这使得添加两种单环芳烃后燃料馏程曲线向低温方向偏移,提高了燃油的挥发性,燃料更易雾化,可能使得喷雾贯穿距减少,从而抑制了 HC 排放。

图 3-23 (c) 给出了柴油中添加 30% 体积分数芳香烃对 NO<sub>x</sub> 排放的影响。从图中可以看到,随着负荷的增大,NO<sub>x</sub> 排放均不断增大,这是由于负荷的增大,缸内高温区增多,从而使得 NO<sub>x</sub> 排放增大。添加芳香烃后在中高负荷下会使得 NO<sub>x</sub> 排放略有增大,这主要是由于添加芳香烃后,燃油蒸发、雾化以及燃烧相位均发生改变。添加甲苯时,甲苯沸点较低,使得喷雾油束更易气化,这一定程度上提高预混合区燃油雾化质量,从而易导致局部高温区的出现,进一步导致 NO<sub>x</sub> 排放增高。添加丁基苯、四氢萘以及 1-甲基萘时,燃油整体馏程曲线与柴油接近,此时密度等因素成为影响雾化过程的主要参数,其中 1-甲基萘密度较高,丁基苯最低。较高的密度会增大燃油贯穿距,促进油气混合,这使得预混合燃烧区域增大,也会导致较高的 NO<sub>x</sub> 排放。图 3-23 (d) 给出了柴油添加 30% 体积分数不同结构芳香烃对碳烟排放的影响。从图中可以看到,添加芳香烃后在中小负荷下对碳烟排放影响有限。在高负荷下,直喷柴油时烟度会显著上升,而添加芳香烃后由于滞燃期的增大会有利于燃油的混合,碳烟排放较低。

### 3.6 本章小结

基于石化柴油成分复杂、分子量大的事实,以及大分子碳氢燃料难于开展气相燃烧研究的困境,国际上针对柴油模型燃料的构建受到很大的局限性。本章针对中国 0# 轻柴油开展了详细的组分分析,选择了十三种候选组分分别代表直链烷烃、支链烷烃、环烷烃、芳烃成分,试图构建多组分柴油模型燃料。为构建合理的柴油模型燃料,本章首先考察了不同结构烃类组分添加到柴油中对发动机燃烧过程和排放的影响。具体为在一台经过改造的单缸机上研究了柴油中分别添加四种正构烷烃、三种异构烷烃、两种环烷烃以及四种芳香烃对燃油理化性质、发动机燃烧及排放的影响。通过上述研究可以得到以下的结论:

- 1) 本章首先解析了柴油主要碳族组分,测定了柴油主要理化参数。通过分析柴油组分发现,柴油中链烷烃的碳原子数目分布在 C<sub>9</sub>-C<sub>26</sub> 的区间,其中碳链长度介于 C<sub>11</sub>-C<sub>24</sub> 的正构烷烃占 95wt%。环烷烃中,单环烷烃占 43.6wt%、双环烷烃占 41.6 wt%,三环烷烃占比较少;芳烃中,单环芳香烃占 84.6wt%,双环芳香烃占 13.6 wt%,三环芳香烃含量极少。
- 2) 基于柴油组分分析,选取了四种正构烷烃、三种异构烷烃、两种环烷烃以及四种芳香烃代表柴油中主要碳族组分。其中,正构烷烃选择了正癸烷、正十二烷、正十四烷和正十六烷;异构烷烃选取异辛烷、异十二烷和七甲基壬烷;环烷烃选取甲基环己烷和十氢萘;芳香烃选择了具有典型结构的单环芳香烃甲苯、丁基苯以及多环芳香烃四氢萘、1-甲基萘。试验过程中,为使得每种组分在燃烧过程中起主导作用,正构烷烃添加比例为 50%、异构烷烃、环烷烃、芳香烃以 30% 体积分数添加到柴油中。



- 3) 添加 50% 体积分数正构烷烃，燃料反应活性会增大，导致燃烧相位略有提前，缸内最大压力升高率降低，CO 排放、HC 排放略有改善。对比添加不同正构烷烃，十六烷指数介于 48.8 至 65.0，燃烧相位没有明显变化，但对放热速率峰值、气态排放物有一定的影响，这主要是因为随着碳链长度的增加，燃料的挥发性有所降低。
- 4) 通过分析异构烷烃和环烷烃氧化反应动力学机理发现，上述两类组分在燃烧过程中均会产生烯烃类中间产物。柴油添加异构烷烃、环烷烃后会使得燃烧相位推迟，缸内最大压力升高率增大，放热率曲线峰值升高。在排放方面，添加异构烷烃、环烷烃均会使得 CO 排放会增大，HC 排放有所降低。
- 5) 柴油添加芳香烃会导致燃油物性发生较大改变，具体为燃油密度增大、黏度及十六烷指数降低，其中添加甲苯由于沸点较低，会使得燃油馏程曲线严重偏离原柴油；由于芳香烃较低的十六烷值，柴油添加芳香烃后使得燃烧滞燃期增大，放热率峰值增大，其中添加多环芳香烃滞燃期较单环芳香烃滞燃期更长，放热率峰值更高；添加芳香烃会使得燃烧持续期缩短，多环芳香烃较单环芳香烃燃烧持续期更短；此外，添加芳香烃会使得缸内最大压力升高率在中高负荷下显著增大；排放方面，添加芳香烃后会使得 CO、HC 排放在小负荷增大，NO<sub>x</sub> 排放在中高负荷下增大。
- 6) 燃烧相位的改变是柴油添加上述候选组分对燃烧过程、排放产物的产生影响的主要因素，具体为添加高十六烷值燃料会使得燃烧相位提前、缸内最高压力及最高压力升高率下降、放热率峰值下降，而添加候选组分十六烷值低于柴油时，燃烧特征参数恰恰相反。因此，控制相同直喷时刻无法单独分析燃油十六烷值、挥发性等理化参数对燃烧和排放的影响，为着重研究燃料挥发性对燃烧和排放的影响，必须弱化反应活性对燃烧和排放的影响。



5001080



## 第四章 基于实际发动机性能与排放构建柴油模型燃料

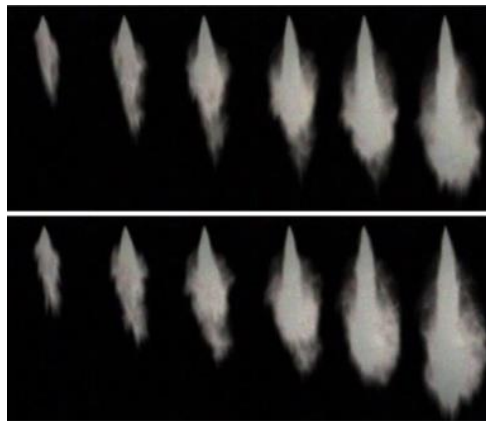
### 4.1 概述

柴油中添加不同分子结构模型燃料候选组分会使得发动机燃烧和排放特性发生较大改变,其中尤以添加异构烷烃、环烷烃以及芳香烃对燃烧过程以及排放产物的影响较大。由于不同模型燃料组分十六烷值存在较大差异,添加候选组分会直接导致燃料反应活性的改变,从而导致燃烧相位发生改变,进一步导致排放产物的较大差异。为构建合理的柴油模型燃料,本章进一步控制燃烧始点(CA10)相同,以突出候选组分除十六烷值以外的理化性质对燃烧及排放的影响,结合直喷时刻相同时混合燃料的燃烧与排放特性,参数化的研究柴油中添加不同分子结构模型燃料候选组分对燃烧和排放的影响。最后,根据候选组分添加到柴油中对发动机燃烧和排放的影响以及柴油自身理化参数,提出构建模型燃料约束关系,通过求解约束方程得到了三组分、五组分以及七组分模型燃料。

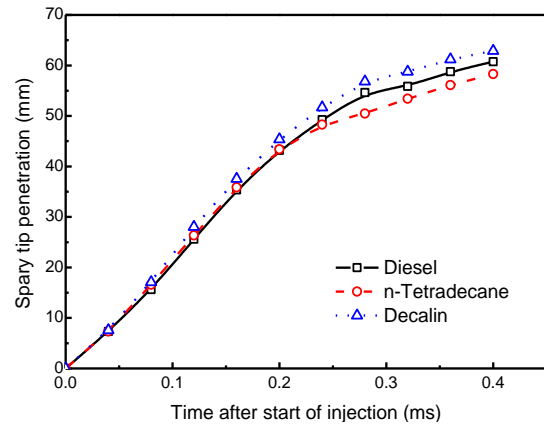
### 4.2 影响发动机性能的主要燃料参数

对内燃机而言,人们主要关注其效率( $\eta$ )和常规排放物(CO、HC、NO<sub>x</sub>、PM)这五个指标。而燃料的物理特性(密度、黏度、表面张力、馏程)、化学特性(辛烷值/十六烷值、绝热火焰温度、火焰速度)、分子结构(碳链长度、饱和度、环烷数、芳烃环数)与这五个参数之间存在复杂的耦合关系,无法厘清每一个燃料参数和控制标识之间的精确关系。在发动机转速和负荷一定的情况下,喷射雾化特性、液滴蒸发与燃空混合特性、燃料着火与燃烧特性是影响这几个目标参数的核心。

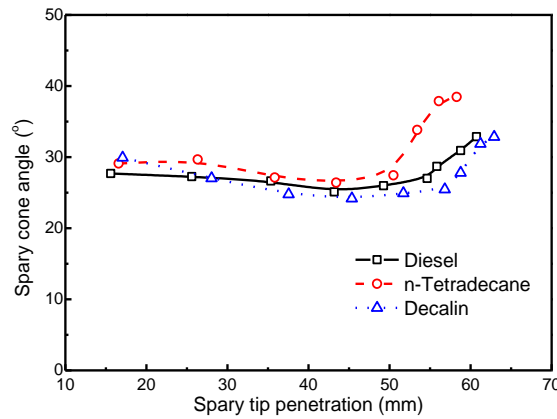
燃料的喷射特性主要是指喷雾锥角、液滴直径、贯穿距离。图 4-1 比较了柴油以及柴油中添加高比例的候选组分后燃油喷雾形态与特征参数的变化。从图中可以看到,由于燃料物理参数的变化喷雾形态和参数发生一些较为明显的变化。根据表 3-2 所示:在密度方面,十氢萘/柴油 $\approx$ 柴油 $>$ 正十四烷/柴油;而在黏度方面,柴油 $>>$ 十氢萘/柴油 $=$ 正十四烷/柴油。但是实际的喷雾贯穿度十氢萘/柴油 $>$ 柴油 $>$ 正十四烷/柴油,喷雾锥度角正十四烷/柴油 $>$ 柴油 $>$ 十氢萘/柴油。但是根据射流雾化的经验公式[206, 207]:



(a) 柴油 (上) 与正十四烷/柴油 (下) 喷雾比较



(b) 柴油、正十四烷/柴油、十氢萘/柴油喷雾贯穿距比较



(c) 柴油与正十四烷/柴油、十氢萘/柴油的喷雾锥角比较

图 4-1 柴油中添加高比例候选组分后的喷雾形态的喷雾参数比较

Figure 4-1 Spray properties of diesel and the mixed fuels

$$\theta = \alpha(\rho_a/\rho_l)^{0.26} \quad (4-1)$$

$$SMD = \beta Re^{0.25} We^{-0.32} (\rho_a/\rho_l)^{-0.47} (u_l/u_a)^{0.26} \quad (4-2)$$

$$S = \gamma(\Delta P/\rho_a)^{-0.25} \quad (4-3)$$

其中， $\theta$ 、SMD、S分别为喷雾锥角、Sauter 平均直径、完全发展的喷雾贯穿距离； $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 分别为与喷嘴结构参数相关的常数； $Re$ 、 $We$ 分别为雷诺数和韦伯数； $\rho_a$ 、 $u_a$ 、 $\rho_l$ 、 $u_l$ 分别为环境空气的密度和黏度以及液体的密度和黏度； $\Delta P$ 为喷雾压差。

根据经验公式和实际喷雾参数可以看出，影响贯穿度的主要参数是液体密度，主导喷雾锥角的是黏度，而影响液滴平均直径的主要是黏度和表面张力。为此，决定喷雾的关键物理参数指标有密度、黏度、表面张力这三个关键参数。



发动机效率和排放完全取决于混合气及其着火与燃烧过程。其中影响效率的主要因素是 CA50 和缸内气体平均温度，而 CA50 受十六烷值（决定 CA10）、燃料挥发性或馏程特性、绝热火焰温度（H/C）、以及燃料喷射时刻和当量比的影响，因此：

$$\eta = f(CA50, T_{max}, ) = f\left(CN, Dist, \frac{H}{C}, \theta, \phi\right) \quad (4-4)$$

CO 排放主要决定于当量比和燃烧温度[208]；HC 排放取决于混合气的反应活性、燃料挥发性或馏程特性、分子结构（饱和度）；氮氧化物排放决定于最高燃烧温度、高温持续时间、以及氧浓度；碳烟排放主要与当量比、燃料挥发性、分子结构（饱和度）等有关。因此几种排放物质可以表示成：

$$CO = f(\phi, T_{max}) = f\left(\phi, CN, Dist, \frac{H}{C}\right) \quad (4-5)$$

$$HC = f(CN, \frac{H}{C}, Dist) \quad (4-6)$$

$$Soot = f\left(\phi, Dist, \frac{H}{C}\right) \quad (4-7)$$

$$NO_x = f(T_{max}, \Delta T_{1800}, [O]) = f\left(CN, Dist, \frac{H}{C}\right) \quad (4-8)$$

从上述公式可以看出，十六烷值、H/C、密度、黏度、表面张力、馏程特性是决定整个发动机性能和排放的主要参数。

### 4.3 相同喷射时刻与相同着火时刻对比

鉴于前文研究向柴油中添加不同结构烃类组分过程中，各组分十六烷值对缸内燃烧进程和污染物生成均有重要影响，为隔离十六烷值对燃烧相位的影响，进一步对比柴油中添加不同结构烃类组分在大致相同的燃烧相位下的燃烧和排放性质，凸显燃料除十六烷值之外的理化参数对燃烧和排放的影响，对构建合理柴油模型燃料至关重要。为此本章控制 CA10 相同，研究在相同燃烧始点条件下，柴油中添加不同结构烃类燃烧和排放性质。

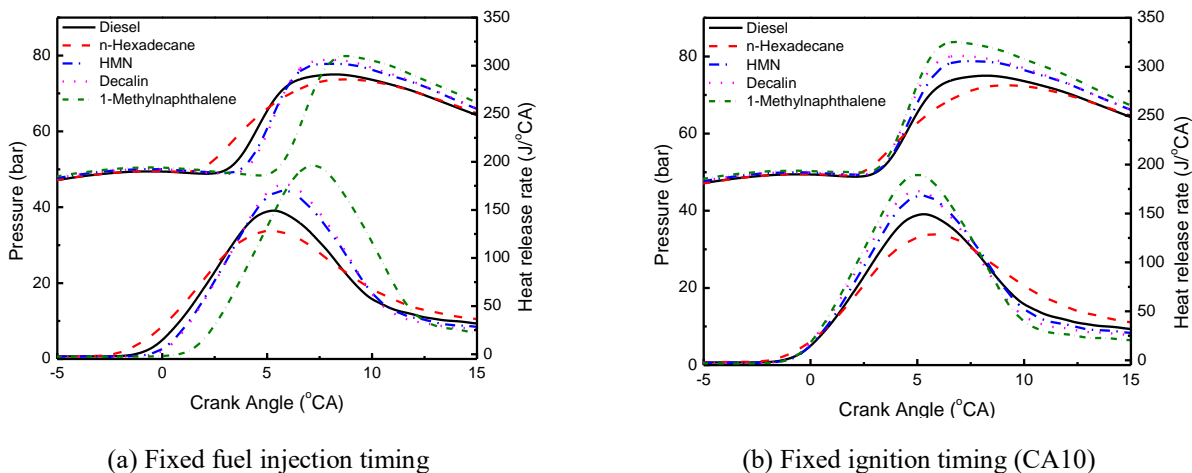
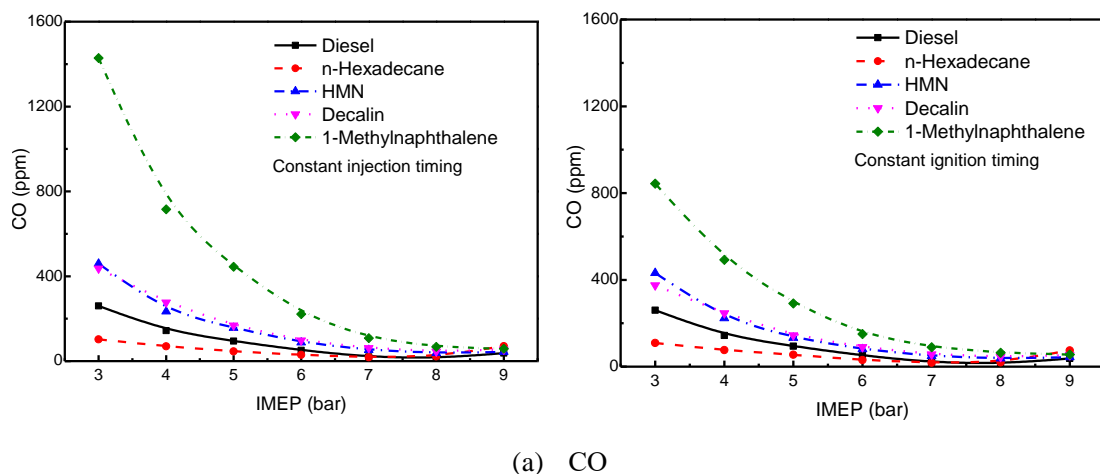


图 4-2 柴油中添加高比例烃类组分对燃烧室压力和放热率的影响 (1500rpm, IMEP=6bar)  
 Fig. 4-2 Effects of blending different hydrocarbon components in diesel fuel on in-cylinder pressure and heat release rate (1500rpm, IMEP=6bar)

图 4-2 首先比较了几种燃料在相同转速和负荷下的气缸压力和放热率曲线,其中图 4-2(a) 为相同喷射时刻,而图 4-2 (b) 为着火时刻相同。在直喷时刻相同情况下,燃烧过程受到十六烷值和物理特性(馏程或挥发性)的共同影响:十六烷值过高,着火时刻更早,但是峰值气缸压力和最大放热率却降低;添加低十六烷值燃料(甲基萘),着火时刻明显推迟,但是峰值放热率明显高于其他燃料。通过喷射时刻的调整使得每种燃料的着火时刻相同后,弱化了十六烷值对着火时刻的影响,气缸最大压力、峰值放热率、燃烧持续时间则主要取决于燃料的挥发性。根据表 3-2 所示,就 T50 而言,正十六烷>柴油>七甲基壬烷>1-甲基萘>十氢萘,因此在燃烧速率方面正十六烷<柴油<七甲基壬烷<十氢萘<1-甲基萘,由于 1-甲基萘的十六烷值最低,为了保证 CA10 相同,喷射时刻最早,在滞燃期内形成的可燃混合气最多,因此峰值放热率和最大压力最高。



(a) CO



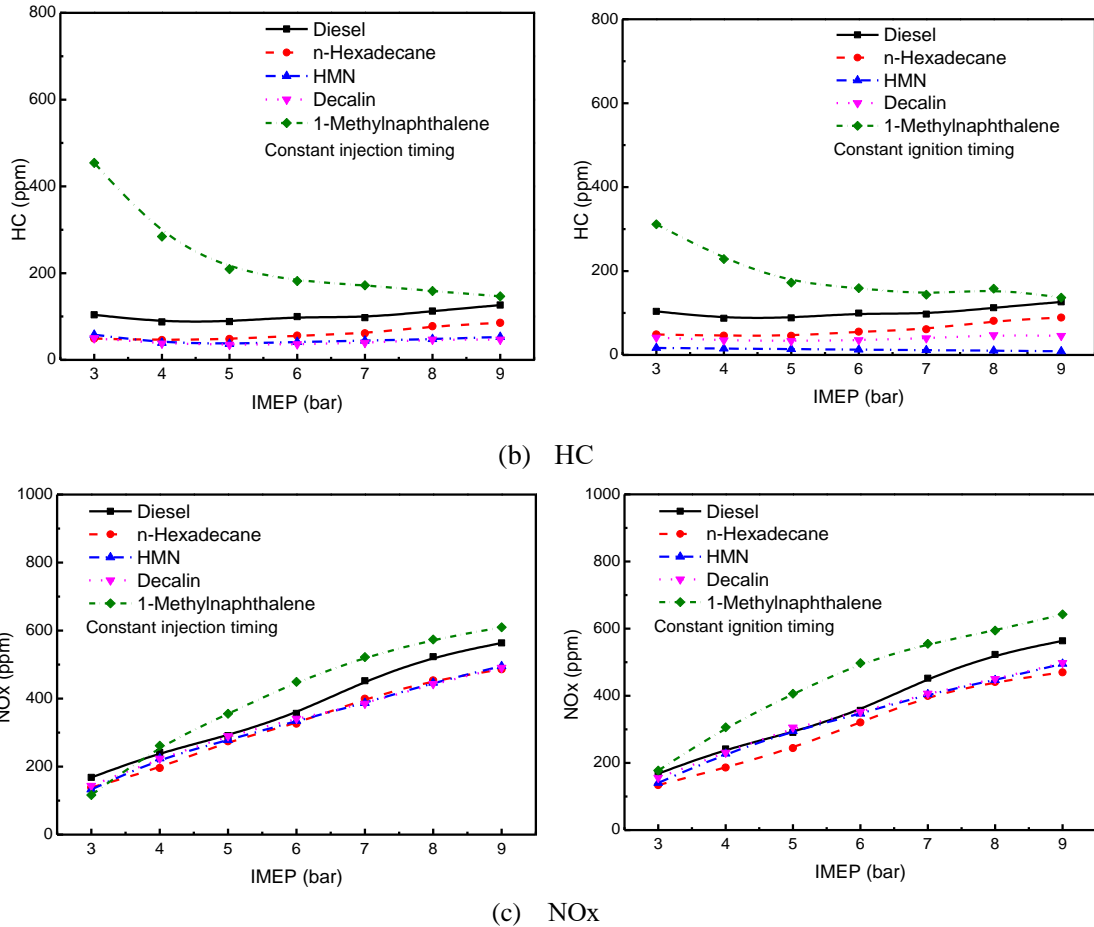


图 4-3 柴油中添加高比例候选组分对气体排放浓度的影响 (1500rpm)  
Figure 4-3 The gas emissions of mixed fuels under different loads (1500rpm)

图 4-3 比较了不同直喷时刻、不同燃烧始点条件下，柴油中添加高比例的单体组分后在各种负荷下的几种气态排放物。图 4-3 (a) 中，CO 排放均随着负荷的增加而快速降低至一个较低的水平；图 4-3 (b) 中，对于 HC 排放，无论是固定喷射时刻还是固定着火时刻，除 1-甲基萘之外，各种燃料的 HC 排放在整个负荷范围内变化较小，但是不同燃料之间有一定差别；而添加 1-甲基萘时，在低负荷下 HC 排放较高，并随着负荷的增加而快速降低。图 4-3 (c) 中，氮氧化物排放虽然总体上随着负荷增加而增加，但是燃料特性的不同使得排放水平存在一定的差别。

进一步比较图 4-3 中的同一种排放物质可以发现：除 1-甲基萘之外，同一燃料在相同负荷下的气体排放差别较小，也就是说十六烷值对气体排放影响不大，燃料的挥发性影响气体排放。此外，1-甲基萘 HC 和 CO 排放明显高于其它燃料，特别是中低负荷下。另外一点可以发现的是，在中低负荷下固定着火时刻的 CO 和 HC 排放要明显低于固定喷射时刻的 CO 和 HC 排放。对于氮氧化物排放，1-甲基萘在整个负荷范围内要明显高于柴油和其他燃料。

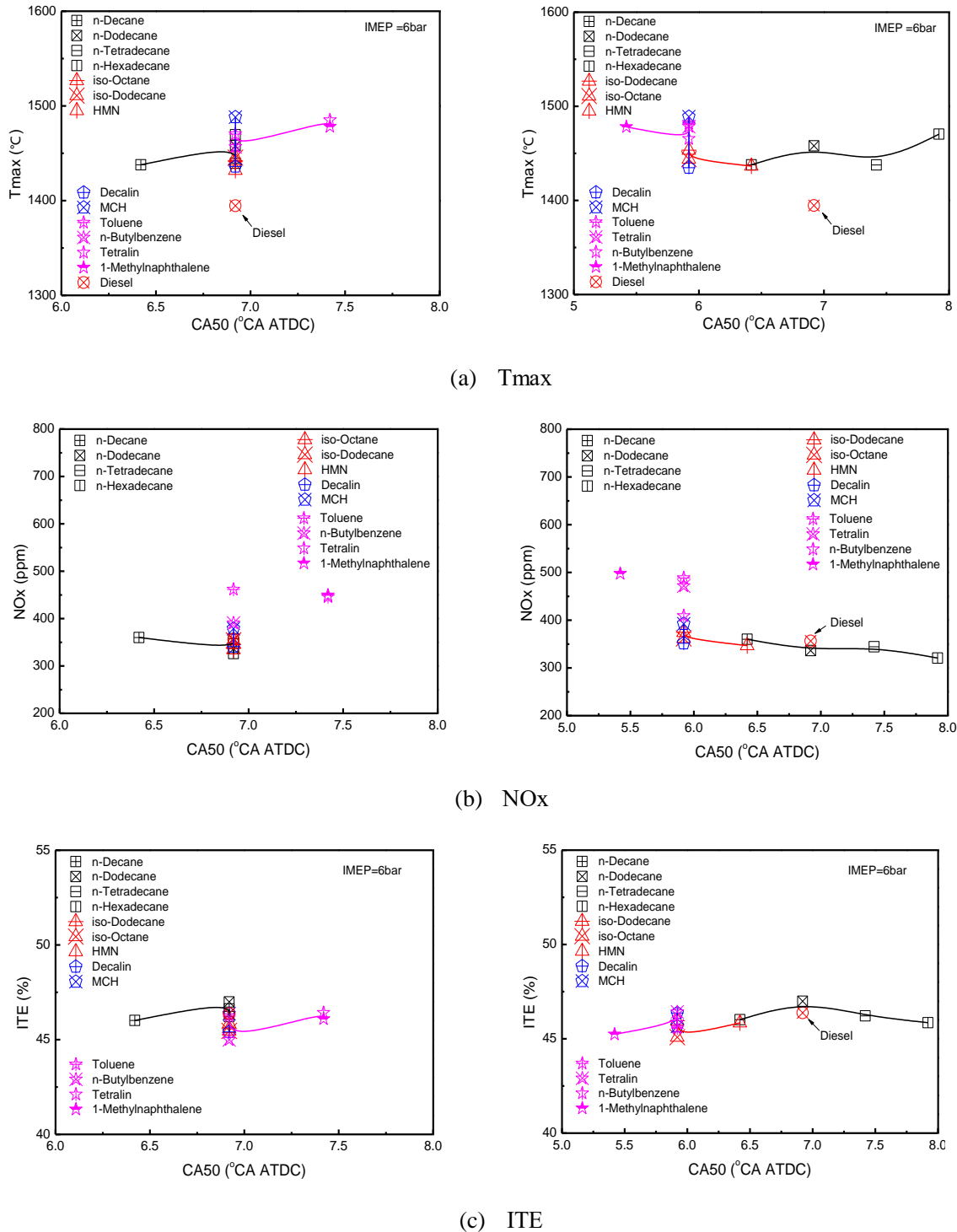


图 4-4 燃烧温度、氮氧化物、指示效率与 CA50 的关系 (1500rpm, IMEP=6bar)

Figure 4-4 The relationship of combustion temperature,  $NO_x$  and indicated thermal efficiency to CA50 (1500rpm, IMEP=6bar)

由于 CA50 是反映发动机效率的一个关键因素，图 4-4 列出了各种燃料在中等负荷下最高缸内气体平均温度、氮氧化物排放浓度、指示热效率在相同喷射时刻和相同着火时刻下随 CA50 的变化关系。就最高缸内气体平均温度而言，添加高比例候选成分使得缸内气体温度相对柴油明显升高。在固定喷射时刻下，各种燃料的 CA50 集中在 6.5~7.5°CA ATDC；而在固定 CA10



时, CA50 分布范围相当宽, 在  $5.5\sim 8.0^\circ\text{CA ATDC}$  之间, 特别是几种直链烷烃的 CA50 时刻较为滞后, 这说明燃料的挥发性对燃烧速率和放热中值时刻影响相当显著。此外, 相同喷射时刻下尽管四氢萘和甲基萘的 CA50 相对其他燃料要晚  $0.5\sim 1^\circ\text{CA}$ , 但是最高温度与 MCH 一样都维持在较高水平; 着火时刻相同下萘烷 CA50 较早, 最高温度与 MCH 相当。

对于氮氧化物排放, 无论是固定喷射时刻还是固定着火时刻, 苯类物质特别是萘烷的氮氧化物排放明显要高于其他物质。根据氮氧化物的产生原理, 这一方面是较早的 CA50 时刻使得高温反应时间较长所致, 另一方面很可能是物质特性所致。此外, 在相同着火时刻下, 氮氧化物排放随着 CA50 的推迟有降低的趋势。从最高气体平均温度曲线发现温度没有降低, 因此这可能是高温持续时间缩短所致。

对于指示热效率, 在相同喷射时刻下大部分燃料的 CA50 集中在  $7^\circ\text{CA ATDC}$ , 只有正癸烷 CA50 较早, 四氢萘和甲基萘较晚, 因此热效率随 CA50 的变化趋势不明显。在固定 CA10 的情况下, 可以发现指示热效率与 CA50 有明显的关系, CA50 在  $7^\circ\text{CA ATDC}$  达到最大, 过早或者过晚都会导致热效率有所降低。

从前面的分析来看, 通过对比分析固定喷射时刻和固定着火时刻的示功图、放热率、气体排放和关键燃烧参数, 采用固定着火时刻的方式可以初步隔离十六烷值对燃烧过程的影响, 而主要体现燃料的物理特性特别是挥发性对燃烧过程和排放物生成的影响规律。因此可通过控制相同直喷时刻、相同燃烧始点的研究策略和分析方法进一步单独研究十六烷指数、碳链长度、馏程对发动机燃烧和排放的影响。

## 4.4 燃油理化参数对燃烧和排放的影响

基于上述分析, 通过采用相同直喷时刻以及相同着火时刻的控制方式, 可以初步隔离十六烷值对燃烧相位的影响, 从而突出燃油其他理化参数对燃烧和排放的影响。为此, 我们采用相同直喷时刻和相同着火时刻两套控制策略, 分别研究了燃料馏程特性 (相同燃烧始点)、燃料十六烷指数 (相同直喷时刻)、候选组分 H/C 比 (相同燃烧始点) 对发动机燃烧和排放的影响, 从而确立柴油理化参数与发动机燃烧排放直接的关系。

### 4.4.1 馏程特性的影响

燃料的挥发性很难用某一个具体指标来衡量, 通常表征的有 T10、T50 和 T90。不同指标对发动机的影响规律和影响效果也不相同。为了考察燃料挥发性和馏程的影响, 本节主要对比了在相同着火时刻下馏程参数与燃烧参数之间的关系。对于图 4-2 中的几种燃料, 除了添加七甲基壬烷和 1-甲基萘后与柴油的 T10 相当, 而添加正十六烷则使得 T10 升高, 而加十氢萘使得 T10 显著降低, 但是可以发现各种燃料的燃烧速率 (从最大气缸压力和最大放热率来反映) 与 T10 没有很强的关系。由于 T90 更多的反映终值放热以及碳烟排放, 为此图 4-5 分别比较



了具有相近的 T30、T50、T70 的几组燃料的示功图和放热率。

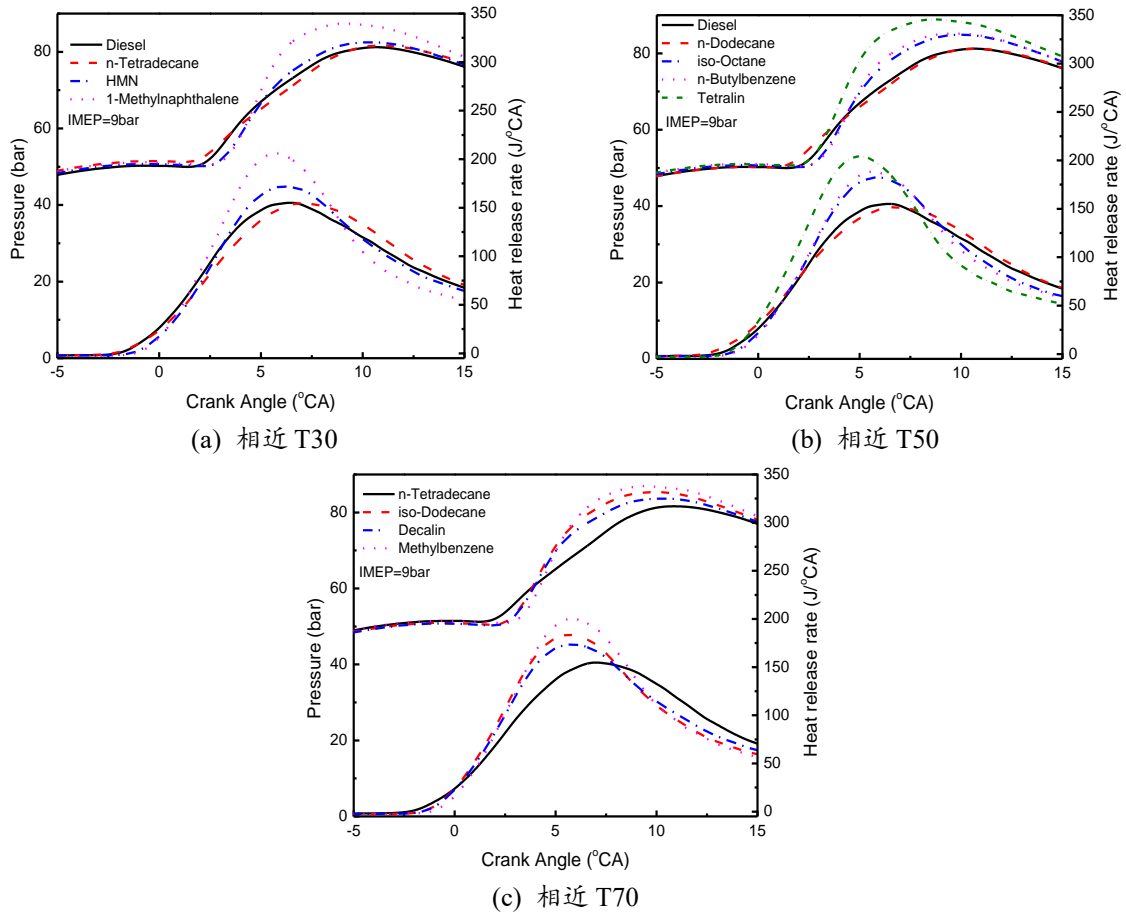


图 4-5 相近 T30、T50、T70 的示功图和放热率比较 (1500rpm, IMEP=9bar, CA10 相同)

Figure 4-5 The in-cylinder pressure and heat release rate in similar T30, T50, T70 (1500rpm, IMEP=9bar, constant CA10)

在图 4-5 (a) 中, 几种燃料的 T30 分别为柴油 (243°C) > 正十四烷/柴油 (238°C) > HMN/柴油 (229°C) > 1-甲基萘/柴油 (228°C), 而最大气缸压力和峰值放热率与 T30 的趋势完全一致。而在图 4-5 (b) 中, 几种燃料的 T50 分别为柴油 (267°C) >> 正丁苯/柴油 (229°C) > 正十二烷/柴油 (226°C) > 异辛烷/柴油 (225°C) > 四氢萘/柴油 (222°C), 但是最大气缸压力和峰值放热率的趋势是四氢萘/柴油 > 正十二烷/柴油 > 异辛烷/柴油 > 正丁苯/柴油 = 柴油, 即 T50 的规律与燃烧速率的规律吻合度不高。在图 4-5 (c) 中, 几种燃料的 T70 分别为: 柴油 (294°C) > 异十二烷/柴油 (258°C) > 甲苯/柴油 (257°C) > 正十四烷/柴油 (256°C) > 十氢化萘/柴油 (253°C), 但是无论最大气缸压力还是峰值放热率的趋势都是: 甲苯/柴油 > 异十二烷/柴油 > 十氢化萘/柴油 > 正十四烷/柴油, 且差别明显, 因此 T70 无法反映燃料挥发性对燃烧速率的影响。从上述分析可以发现, T30 可以反映燃料挥发性对燃烧速率的 (反映在发动机燃烧参数则为最大气缸压力和峰值放热率) 宏观规律。

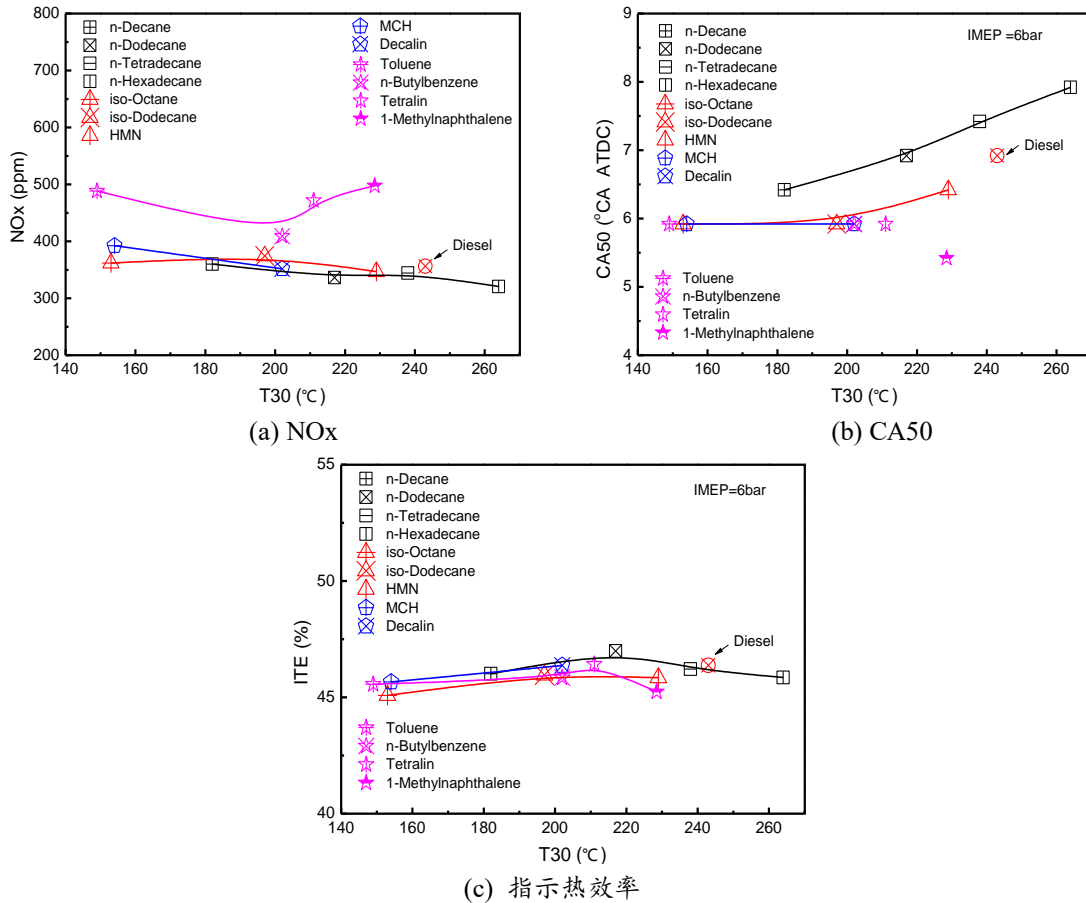


图 4-6 氮氧化物、CA50、指示热效率在中等负荷下随 T30 的变化关系 (1500rpm, IMEP=6bar, CA10 相同)

Figure 4-6 NOx, CA50, indicated thermal efficiency (ITE) changing with T30 under medium load (1500 rpm, IMEP=6 bar, constant CA10)

图 4-6 所示为相同着火时刻下，几个关键性能和排放参数随着 T30 的变化关系。相同燃烧始点 (CA10 相同)，已经初步排除了十六烷值的影响，主要是燃料的挥发性起到主要影响。在图 4-6 (a) 中，氮氧排放随 T30 升高而明显下降；但是添加苯类物质和萘的氮氧化物排放明显高于其他燃料，这主要是萘烷的热解温度较高，释热速率很快，导致缸内气体温度较高。在图 4-6 (b) 中，除添加 1-甲基萘外其他燃料的 CA50 随着 T30 升高而明显推迟，而添加直链烷烃的着火时刻相对其他燃料的 CA50 更推迟 0.5°CA，其原因在于直链烷烃的比例略高于其他候选组分。图 4-6 (c) 反映了指示热效率与 T30 的关系，可以发现热效率的最高点出现在 T30 为 220°C 左右，过高或者过低都使效率降低。

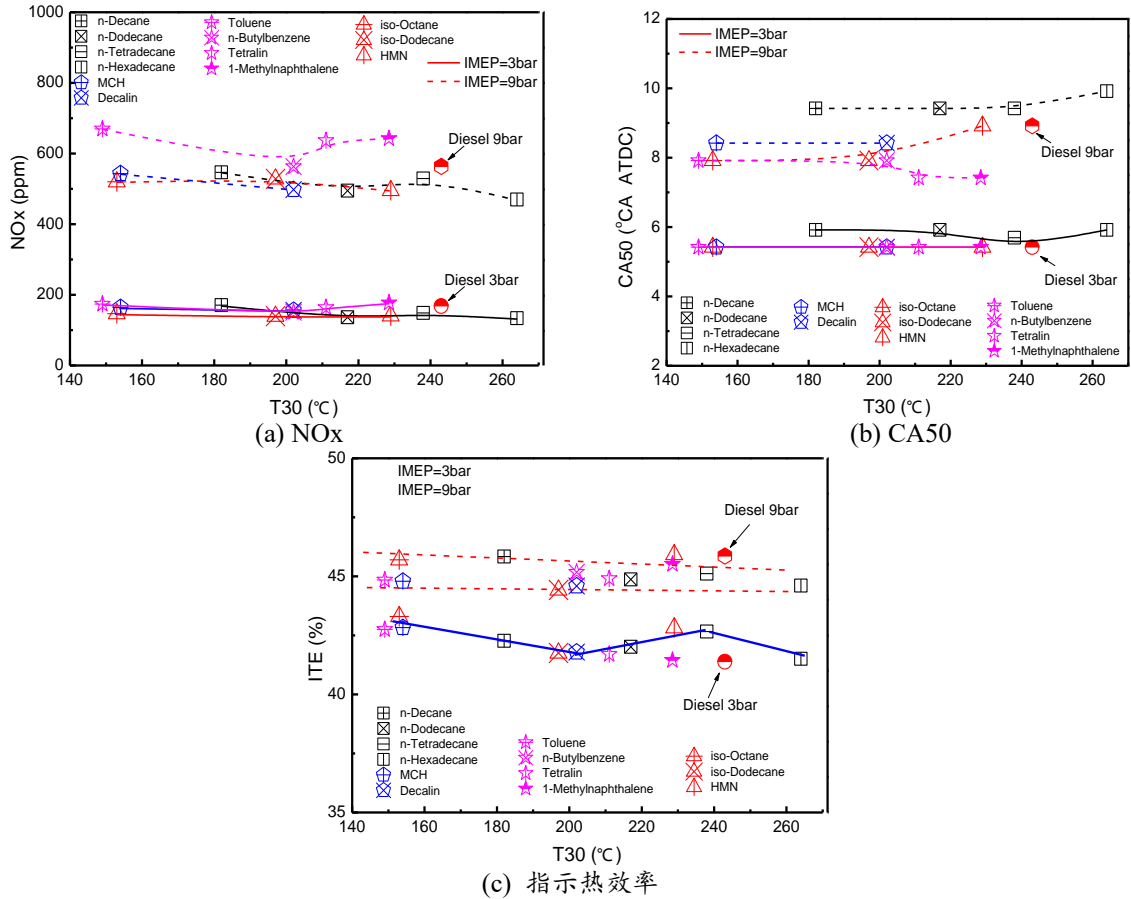


图 4-7 氮氧化物、CA50、指示热效率在小负荷和大负荷（3、9 bar）下随 T30 的变化关系（1500rpm,CA10 相同）

Figure 4-7 NOx, CA50, ITE with T30 under low and high loads (1500 rpm, constant CA10)

图 4-7 为小负荷以及大负荷的情况下，燃烧中值放热时刻、氮氧化物排放、指示热效率与 T30 的关系。图 4-7(a)中可见，氮氧排在总体上都是随着 T30 升高而降低；但在大负荷下添加萘烷的排放较高。图 4-7(b)中，在小负荷下 CA50 变化范围非常小；在大负荷下，CA50 随着 T30 的升高有所推迟，但是添加萘烷略有提前。图 4-7(c)中，小负荷下的热效率在 T30 很低和 240°C 的时候较高；大负荷下热效率受 T30 的影响不大。从这些分析来看，在发动机全工况负荷范围内，T30 可以作为反映燃料挥发性的指标来表征其对燃烧、效率、排放的影响。

#### 4.4.2 十六烷指数的影响

十六烷值是影响着火时刻的重要因素，同时它对最大气缸压力、峰值放热率等也有间接的影响，进一步也影响着 CO 和 HC 排放。如上节所示，能够反映燃料挥发性对燃烧过程影响的主要参数是 T30。因此本节选取了 T30 相近的几类物质，在相同喷射时刻下，考察十六烷值对燃烧的影响。根据上面的研究，T30 在 220°C 左右可以得到较高的指示热效率，为此选取正十二烷/柴油（217°C）、异十六烷/柴油（229°C）、正丁苯/柴油（202°C）、四氢萘/柴油（211°C），他们的 T30 介于 202-229°C 之间，对应的十六烷指数分别是正十二烷/柴油（56.6）、七甲基壬



烷/柴油 (50.4)、正丁苯/柴油 (40)、四氢萘/柴油 (29.2)，并与柴油试验结果进行对比。

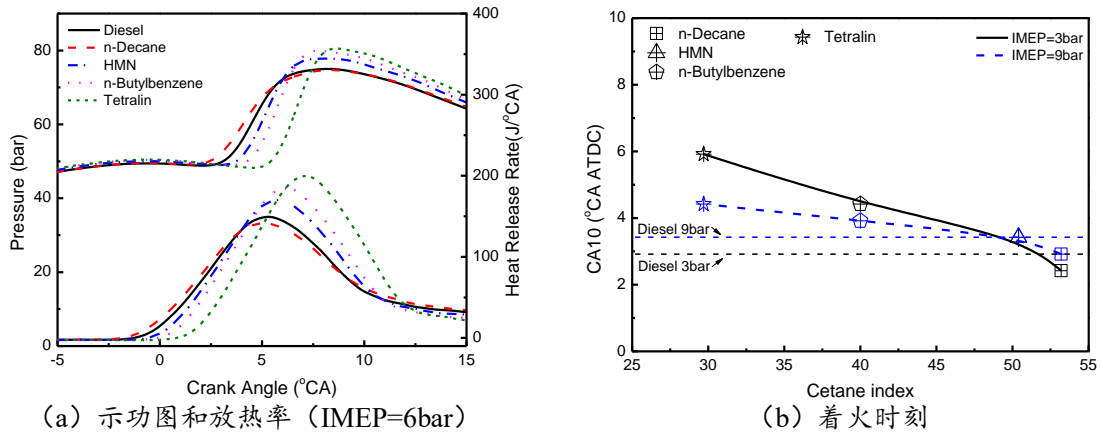


图 4-8 十六烷指数对气缸压力、放热率和着火时刻的影响 (1500rpm)

Figure 4-8 The effects of cetane index on in-cylinder pressure, heat release rate and ignition timing (1500 rpm)

图 4-8(a)比较了上述燃料的气缸压力历程和放热率曲线，对于最大气缸压力，四氢萘/柴油与正丁苯/柴油相差不大，大于其他燃料，而柴油和正十二烷/柴油相当。而在最大放热率方面，四氢萘/柴油>正丁苯/柴油>七甲基壬烷/柴油>柴油>正十二烷/柴油。图 4-8(b)为几种燃料的CA10 在不同负荷下随着十六烷指数的变化关系。从图中可以看出，当十六烷指数大于 50 以后，他们对着火延迟的影响就非常小，燃烧相位仅较柴油提前 1°CA。

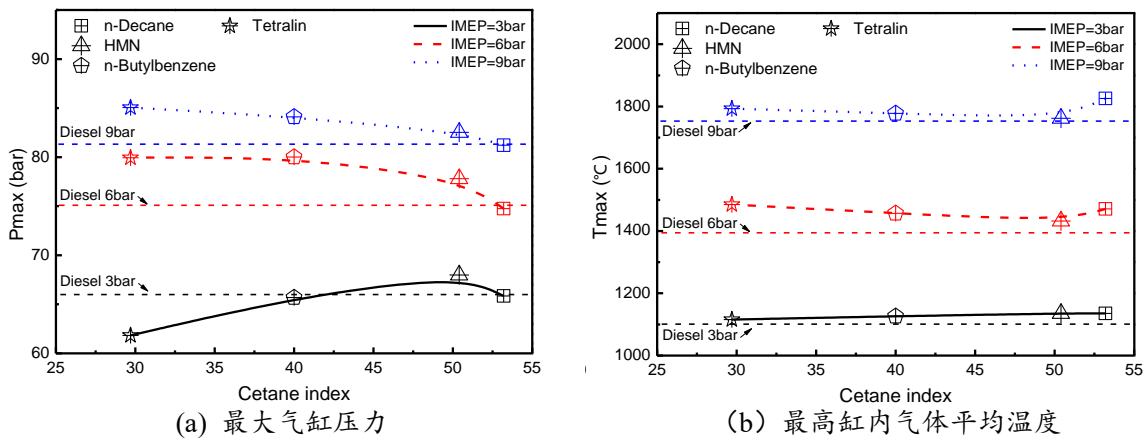


图 4-9 十六烷指数对最大气缸压力和缸内气体平均温度的影响 (1500rpm)

Figure 4-9 The effects of cetane index on maximum in-cylinder pressure and peak value of in-cylinder average temperature (1500 rpm)

图 4-9 为十六烷指数对最大气缸压力和缸内气体温度的影响。在图 4-9(a)中，十六烷指数低于 50 时，在小负荷条件下，随十六烷指数的增加，最大气缸压力逐渐增加，而在中大负荷下则随着十六烷指数的增加而减小。但当十六烷指数大于 50 以后，在三种负荷下，缸内最高压力均接近于柴油水平。在图 4-9(b)中，十六烷指数对平均温度没有明显影响，主要受到负荷的影响。

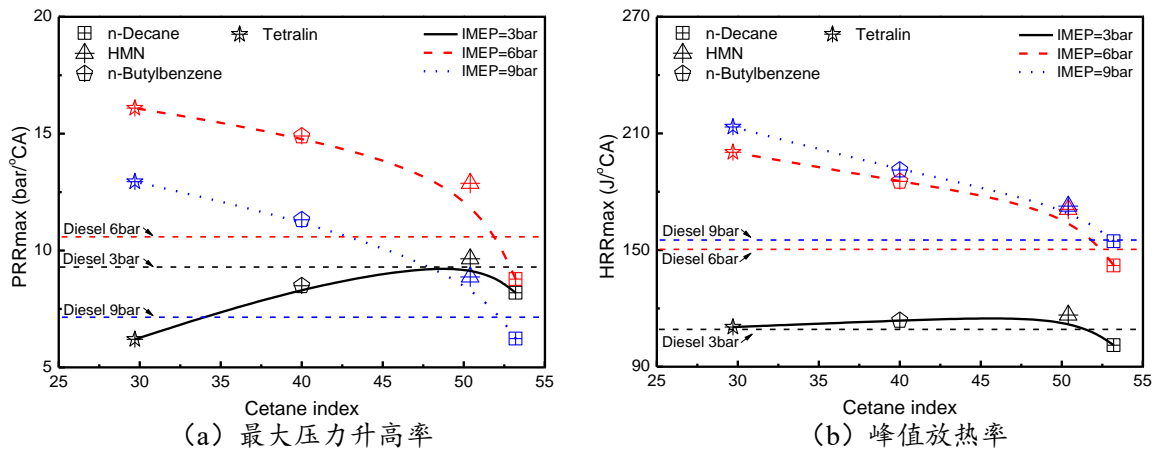


图 4-10 十六烷指数对最大压力升高率和最大放热率的影响 (1500rpm)

Figure 4-10 The effects of cetane index on peak pressure rise rate and peak heat release rate (1500rpm)

图 4-10 为最大压力升高率以及最大放热率与十六烷指数之间的关系。最大压力升高率在中高负荷随十六烷指数升高而降低，但是在小负荷下则先增大后减小。最大放热速率中高负荷随十六烷指数升高而降低，但是在小负荷下变化不大；在中高负荷下，当十六烷指数大于 50 以后，则差别不大。

### 4.4.3 组分 H/C 比的影响

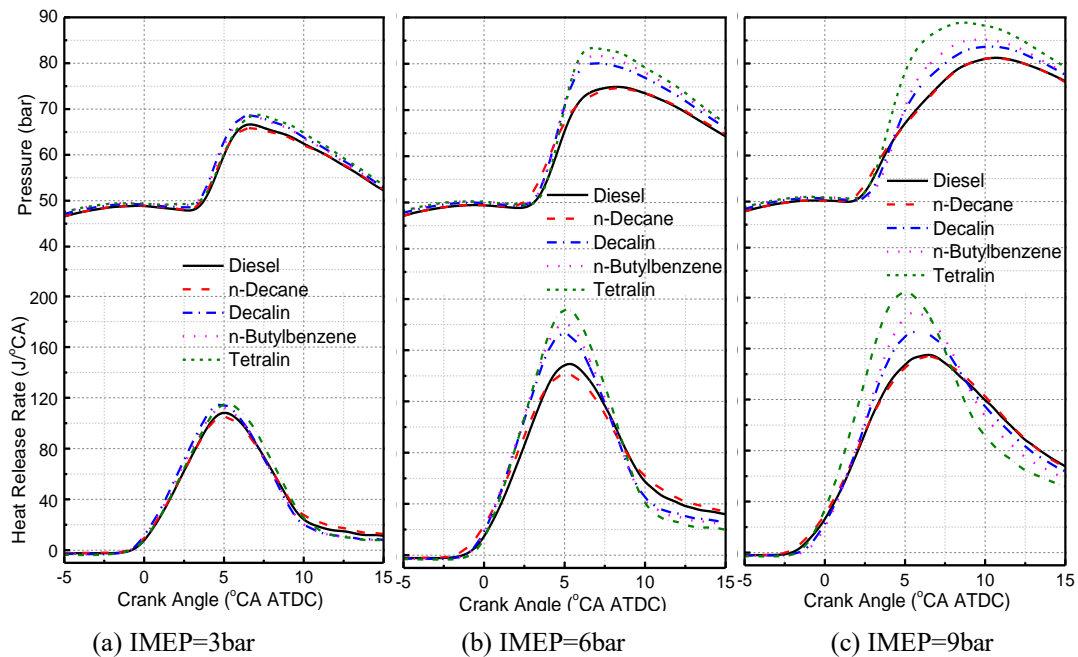


图 4-11 不同饱和度候选组分的燃烧特性比较 (1500rpm, CA10 相同)

Figure 4-11 Combustion characteristics with mixed fuels which blended with candidates of different H/C ratios (1500 rpm, constant CA10)

燃料氢碳比 (H/C) 不仅反映分子结构饱和度，同时也直接或者间接的决定了燃料的物理 (馏程) 和化学特性 (十六烷值/着火延迟)，此外也对燃烧排放产物产生重要影响。下面选取几种 H/C 比存在较大差异的候选组分添加柴油中，在着火时刻 (CA10) 相同的情况下，研究





分子饱和度对燃烧和排放的影响。所选择的几种物质的 H/C 分别是：正癸烷（2.2）、十氢化萘（1.8）、正丁苯（1.4）、四氢化萘（1.2）。

图 4-11 比较了添加不同 H/C 比候选组分在小负荷(3bar)、中等负荷(6bar)、大负荷(9bar)下的气缸压力和放热率曲线。从图中可以发现，小负荷下各种物质的最大气缸压力和峰值放热率相差很小，但是在中大负荷下，随着分子不饱和程度的增加，峰值放热率和气缸压力差距越明显，即不饱和度越大，燃烧速率越快，最大气缸压力和放热率越大。

图 4-12 所示为几种常规的气态排放物随着分子饱和度的变化关系。对于 CO 排放，在各种负荷下都随着分子饱和度的增加而快速减小，特别是在小负荷下尤其明显，且当 H/C 达到 2.0 以后，CO 排放达到原柴油机的水平。在图 4-12(b)中，HC 排放随着添加组分饱和度的变化趋势与 CO 排放类似，但是在 H/C 比为 1.8 的时候，各种负荷下的 HC 排放达到极低值，但是在 H/C 比为 2.0 时恢复到原机水平。在图 4-12(c)中，在小负荷时添加不同 H/C 比候选组分的混合燃料 NO<sub>x</sub> 排放与相同负荷下柴油差别不大；在中高负荷下，添加候选组分 H/C 比介于 1.8~2.2 之间的混合燃料与柴油机同负荷下的 NO<sub>x</sub> 排放水平差别不大；且在中高负荷下，随着饱和度的增加氮氧化物降低，在较高饱和度下氮氧化物排放与原机存在一定的差距。上述分析表明，分子饱和度对 CO 和 HC 排放有严格的影响规律，但是与氮氧化物的关系不确定。

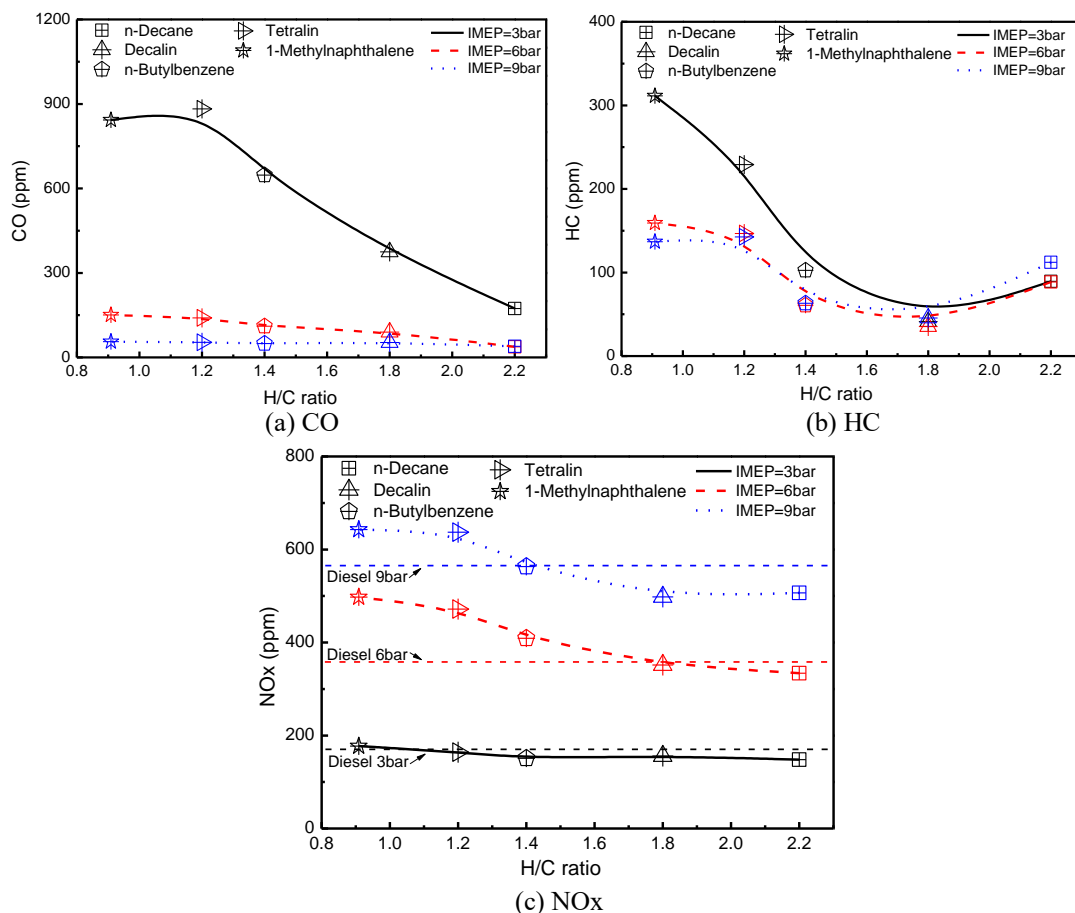


图 4-12 气体排放与 H/C 比的关系 (1500rpm, CA10 相同)

Figure 4-12 Effects of H/C ratio on gas emissions (1500 rpm, constant CA10)



## 4.5 柴油多组分模型燃料的构建

柴油模型燃料的构建是为了更加准确的复现目标燃料的关键理化特性。根据前面的分析，十六烷值、不饱和度、密度、黏度、表面张力、馏程特性是柴油的核心关键参数。理论上，为了更加准确的复现实际燃料的挥发性（馏程特性），组分数目越多越能够精准复现（如图 4-13 所示）。三组分模型燃料很难复现实际柴油的挥发性，四组分可以大致复现馏程特性，更多组分可以实现精准复现。考虑到多组分模型燃料的机理复杂性和计算资源及其成本，通常模型燃料包含 3~7 组分比较合适。

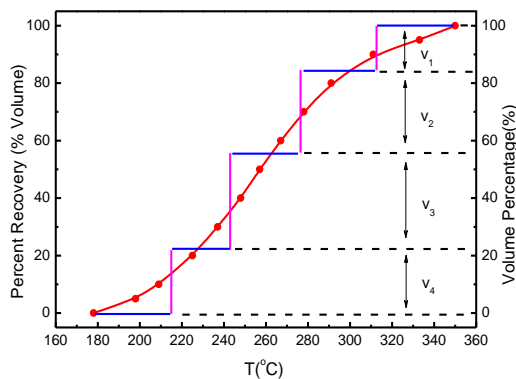


图 4-13 模型燃料组分数目与馏程复现的关系

Figure 4-13 The relationship of the number of components and distillation range

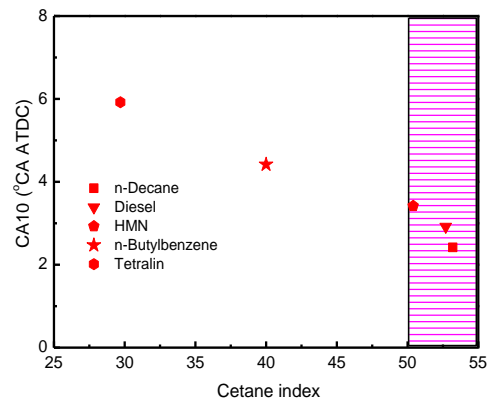


图 4-14 着火时刻与十六烷指数的关系

Figure 4-14 The relationship of ignition timing and cetane index

前面的研究表明，当十六烷指数大于某一数值（本文为 50）以后，着火时刻 CA10 差别不大。根据图 4-14，柴油模型燃料的十六烷值在一定范围内即可，如  $50 \leq CN \leq 54$ （原柴油为 51）。此外，由于分子饱和度对 HC 和 CO 排放有明显的影响，为了确保模型燃料的这两种气体排放与原发动机相当，根据图 4-15，H/C 比在 1.8~2.2 之间。此外，多组分模型燃料的其他物理性质如密度、黏度、表面张力可以根据加权法计算。其中：

$$\rho = \sum \rho_i v_i \quad (4-9)$$

$$H/C = \frac{\sum m_i x_i}{\sum n_i x_i} \quad (4-10)$$

$$ST = \sum x_i ST_i \quad (4-11)$$

$$CN = \sum CN_i v_i \quad (4-12)$$

上式中： $v_i$ 为第  $i$  种烃类的体积分数；



$\rho_i$ 为第  $i$  种烃类的密度;

$m_i$ 为第  $i$  种烃类分子中氢原子个数;

$n_i$ 为第  $i$  种烃类分子中碳原子个数;

$x_i$ 为第  $i$  种烃类摩尔分数;

$ST_i$ 为第  $i$  种烃类表面张力;

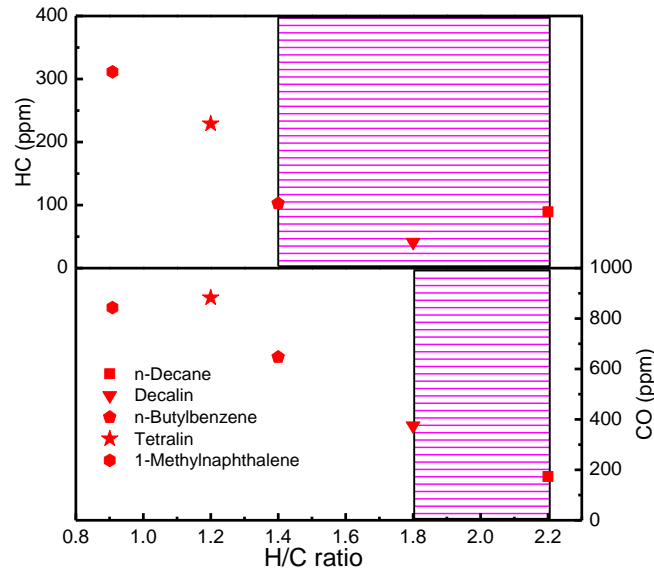


图 4-15 基于 CO 和 HC 排放的模型燃料饱和度

Figure 4-15 Relationship between hydrogen mole fraction and CO, HC emissions

另外,前面的研究表明,芳烃对氮氧化物排放有明显的影响,当然其比例和芳烃环数目对碳烟排放也有重要影响。因此,相关燃料标准中限定了芳烃的比例,在模型燃料的构建中需要将其作为一个约束条件。

针对三组分模型燃料,本文直链烷烃选择正十六烷,支链烷烃选取七甲基壬烷,芳烃选取 1-甲基萘为候选组分;在柴油中环烷烃是非常重要的组分,为此在五组分模型燃料选择十氢萘为环烷烃的代表,而为了考虑直链烷烃中的大分子组分以及模型燃料中十氢萘引起的挥发性和馏程曲线的差别,直链烷烃选择正十六烷和正十八烷烃,支链烷烃和芳烃依然是七甲基壬烷和 1-甲基萘。此外,为了考虑环烷烃和芳烃的碳原子分布数目,本文构建了七组分模型燃料,环烷烃选取丁基环己烷和十氢萘为候选组分,芳烃选取正丁苯和 1-甲基萘为候选组分,十六烷和正十八烷烃、七甲基壬烷仍然作为直链烷烃、支链烷烃的候选组分。根据前面的约束方程,构建的 3、5、7 组分柴油模型燃料如表 4-1 所示。



表 4-1 柴油多组分模型燃料

Table 4-1 Compositions of multicomponent surrogate fuels

Diesel surrogates	Components	Mole Fraction %
3-Components surrogate fuel	n-Hexadecane	41.3
	HMN	36.8
	1-Methylnaphthalene	21.9
5-Components surrogate fuel	n-Hexadecane	21.6
	HMN	26.0
	1-Methylnaphthalene	20.7
	Decalin	16.2
	n-Octadecane	15.5
7-Components surrogate fuel	n-Hexadecane	21.5
	HMN	25.8
	1-Methylnaphthalene	13.7
	Decalin	8.1
	n-Octadecane	15.4
	n-Butylbenzene	8.1
	n-Butylcyclohexane	7.4

## 4.6 本章小结

传统的模型燃料构建方法都是首先确定实际目标燃料的关键理化参数，如平均分子量、密度、黏度、十六烷值/辛烷值、H/C 等，选取合适的组分及其比例来构建新的混合燃料，力图使得混合燃料的关键性质能够复现目标燃料性质。事实上，燃料的物理化学参数十分庞杂，而且不同的理化参数对发动机的燃烧与排放有不同的影响，而模型燃料复现的参数有限，因此构建的模型燃料是否能够复现实际发动机的燃烧和排放性能不得而知。为此，本章提出了基于实际发动机燃烧和排放性能模型燃料构建方法，不仅将实际燃料的关键理化参数作为目标参数，同时将实际发动机的着火、燃烧和排放作为目标参数。

为此，本章详细探讨了影响燃料的喷射与雾化、着火与燃烧相位、效率与排放水平的关键理化参数，在单缸发动机上考察了每一种候选组分对发动机的燃烧和排放特性的影响规律，并针对每一种燃料进一步采用相同着火时刻的负荷特性来隔离十六烷值和燃料挥发性的影响，界定了模型燃料关键理化参数的取值，构建了相关约束方程，获取了柴油的三组分、五组分、七组分模型燃料。通过上述研究，可以得到以下结论：

- 1) 燃料的密度、黏度、表面张力是影响直喷压燃式发动机喷雾特性的关键参数，馏程（挥发性）是决定燃空混合以及燃烧速率的核心参数，十六烷值决定着火延迟，而分子饱和度是主导 CO 和 HC 排放的主要因素。上述六个参数是柴油模型燃料构建过程中的关键指标。
- 2) 对同一种燃料，分别采用相同喷射时刻和相同着火时刻下的负荷特性，从而可以隔离十六



烷值和燃料的挥发性这两个参数对发动机燃烧和排放的影响。此外，无论何种喷射策略，尽管添加萘烷的 CA50 可能比其他燃料晚一些，但是其氮氧化物排放明显高于其他燃料。此外，指示热效率在 CA50 为 7.5°CA 左右时达到最高值。

- 3) T30 从总体上能够反映各种负荷下燃料馏程（挥发性）对发动机燃烧过程的影响规律。除添加萘烷以外，CA50 随着 T30 的升高而推迟；对于氮氧化物排放，除添加苯和萘具有较高的排放水平，其他物质的氮氧化物排放随着 T30 的升高而降低；发动机的指示热效率与 T30 有明显的关系，在中小负荷下 T30 为 220-230°C 之间能够得到最高值。
- 4) 十六烷值大于某一数值（本文推荐 50）以后，继续增加十六烷值，其对着火时刻的影响非常微小，几乎可以忽略。
- 5) 燃料分子饱和度对发动机的燃烧过程和排放水平有明显的影响。随着分子饱和度的降低，燃烧速率增加，最大气缸压力和峰值放热率升高。至于排放方面，随着分子饱和程度增加，HC 和 CO 排放显著降低（特别是小负荷下）；当 H/C 大于 1.8 以后，各种负荷下的 CO 和 HC 排放接近于原柴油机水平。分子饱和度对氮氧化物排放也有明显影响，特别是在中高负荷下，随着分子不饱和程度的增加，氮氧化物排放明显升高。
- 6) 根据所选定的实际燃料关键理化参数，以及各个候选成分对实际发动机燃烧和排放的影响规律，确定了模型燃料理化参数的取值范围，构建了多组分模型燃料：三组分模型燃料（41.3% 正十六烷+36.8% 异十六烷+21.9%  $\alpha$ -甲基萘）；五组分模型燃料（21.6% 正十六烷+15.5% 正十八烷+26.0% 异十六烷+20.7%  $\alpha$ -甲基萘+16.2% 四氢萘）；七组分模型燃料（21.5% 正十六烷+15.4% 正十八烷+25.8% 异十六烷+13.7%  $\alpha$ -甲基萘+8.1% 四氢萘+8.1% 正丁苯+7.4% 丁基环己烷）。



15001080



## 第五章 柴油模型燃料工况及组分验证

### 5.1 概述

通过前文分析燃料与发动机的相互作用关系并结合燃料自身理化性质,界定了模型燃料关键理化参数的取值,构建了相关约束方程,确定了三组分、五组分、七组分模型燃料组分及其比例。考虑到发动机运行工况的多样性,本章进一步在不同发动机运行工况条件下对模型燃料进行验证,包括在不同负荷、不同喷射策略以及不同 EGR 率条件下对比模型燃料与柴油燃烧和排放特性。最后,鉴于实际柴油组分的复杂性,同时为研究柴油中占比较低的微量组分对燃烧和排放的影响,向模型燃料中添加一定比例的烯烃、卤代烃、多环芳香烃、烃类氧化物等代表柴油中典型的微量组分,以进行模型燃料的组分验证。

在本章试验过程中,首先控制直喷时刻为上止点前  $7^{\circ}\text{CA}$ ,在  $3\sim 9\text{bar}$  的负荷条件下对比了柴油与模型燃料燃烧排放特征;其后,控制直喷循环喷油量为  $40\text{mg}/\text{cycle}$ ,调节缸内燃油直喷正时分别为上止点前  $3^{\circ}\text{CA}$ 、 $5^{\circ}\text{CA}$ 、 $7^{\circ}\text{CA}$ 、 $9^{\circ}\text{CA}$ 、 $11^{\circ}\text{CA}$ 、 $13^{\circ}\text{CA}$ ,对比不同直喷正时条件下模型燃料与柴油燃烧过程及排放产物;考虑到目前电控高压共轨发动机可能会在某些工况下采用缸内多段喷射策略,本章进一步在缸内循环喷油量  $40\text{mg}/\text{cycle}$  的基础上,控制预喷比为  $20\%$ ,改变预喷时刻为上止点前  $60^{\circ}\text{CA}$ 、 $50^{\circ}\text{CA}$ 、 $40^{\circ}\text{CA}$ 、 $30^{\circ}\text{CA}$ 、 $20^{\circ}\text{CA}$ ,对比模型燃料与柴油在两段喷射策略下的燃烧过程及排放产物;此外,考虑到废气再循环对燃烧和排放的较大影响,采用进气添加  $\text{CO}_2$  的方式模拟废气再循环,比较了 EGR 率分别为  $20\%$ 、 $40\%$  以及  $60\%$  条件下的模型燃料与柴油燃烧历程和污染物排放。

表 5-1 选取的微量模型组分及其主要理化特性参数

Table 5-1 The selected trace components and their main characteristic parameters

Name	Molecular structure	Mole Weight	Density g/cm <sup>3</sup>	BP (°C) @ 101kPa
1-Tetradecene		196.37	0.775	251
2-Undecanone		170.29	0.826	231
1-Chlorododecane		204.78	0.869	260
Phenanthrene		178.23	1.179	340

在实际柴油中,由于原料来源以及工艺过程等因素,除模型燃料中包含的正构烷烃、异构烷烃、环烷烃以及单环、双环芳香烃外,还存在微量的烯炔烃、烃类氧化物、烃类卤化物、三环及三环以上多环芳香烃。为此,本文在上述构建模型燃料的基础上,选取 1-十四烯、甲基壬基甲酮、氯代十二烷、菲等组分,分别代表柴油中烯烃类、烃类氧化物、烃类卤化物、三环芳



香烃添加到五组分柴油模型燃料中,研究模型燃料中添加上述组分后对缸内燃烧及排放产物的影响。在实际柴油中,上述组分含量较低,为突出选定组分在缸内燃烧和排放作用,将常温下为液态的 1-十四烯、甲基壬基甲酮、氯代十二烷,按照 10%体积分数添加到五组分模型燃料,菲由于沸点较高,常温下是固态,按照 5%摩尔分数折合质量称重添加到五组分模型燃料中。燃料的分子结构及主要性质见表 5-1。

## 5.2 模型燃料负荷验证

在构建柴油模型燃料时,通过控制燃料密度、H/C 比、表面张力以及十六烷值求解出各组分比例,但由于仅采用有限的组分复现柴油理化性质,模型燃料与柴油挥发性(馏程)还存在较大差异。图 5-1 比较了柴油、三组分模型燃料、五组分模型燃料以及七组分模型燃料馏程曲线,从图中可以看到,三组分、五组分模型燃料比柴油缺少轻质组分和重质组分,具体为 20vol% 以下的馏分蒸馏温度较柴油高,40vol% 以上馏分的蒸馏温度又明显低于柴油。七组分模型燃料 20vol% 以下的馏分蒸馏温度略低于柴油,但由于同样缺乏 C<sub>20</sub> 以上组分,40% 以上馏分也明显低于柴油,且与五组分模型燃料蒸馏温度接近,这主要是由于七组分中正十六烷、正十八烷烃摩尔分数大致相同。此外,五组分模型燃料较三组分模型燃料馏程更接近柴油。

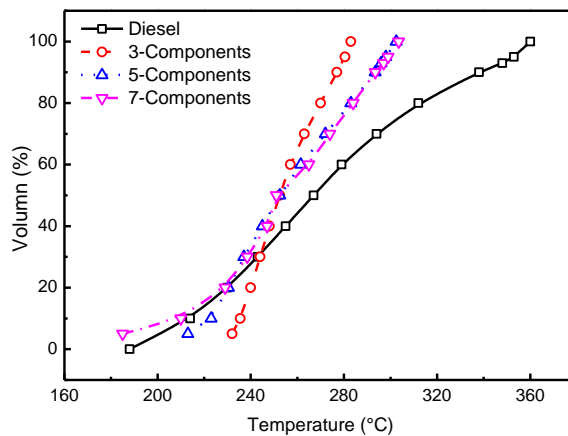


图 5-1 多组分模型燃料与柴油馏程的比较

Figure 5-1 Comparison of the distillation curves of surrogates and diesel fuels

缸内温度环境随着负荷的变化而波动,且燃油在缸内的整体当量比也随着负荷的变化而改变,上述参数都会对效率以及排放产生较大影响。为此,首先比较了不同负荷下,模型燃料与柴油缸内燃烧和排放性质。图 5-2 为三组分/五组分/七组分模型燃料分别在大、中、小负荷下的缸内压力和放热率历程与柴油的比较。从图中可以看出,本文所构建的多组分模型燃料与柴油的燃烧特性在较宽的负荷范围内均非常吻合。但是也可以发现,七组分模型燃料在中等负荷下、三组分模型燃料在大负荷下与实际柴油的燃烧速率有微小的差别。



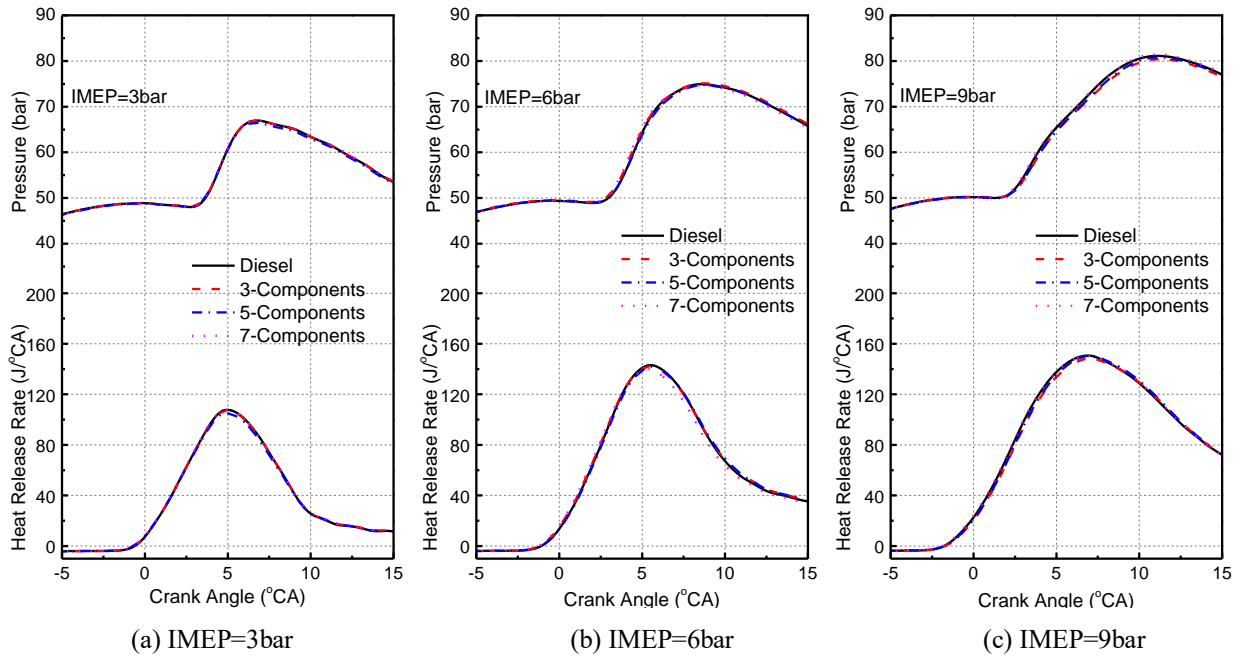


图 5-2 多组分模型燃料的燃烧过程气缸压力和放热率与柴油的比较 (1500rpm)  
 Figure 5-2 In-cylinder pressure and heat release rate of surrogates and diesel fuel (1500 rpm)

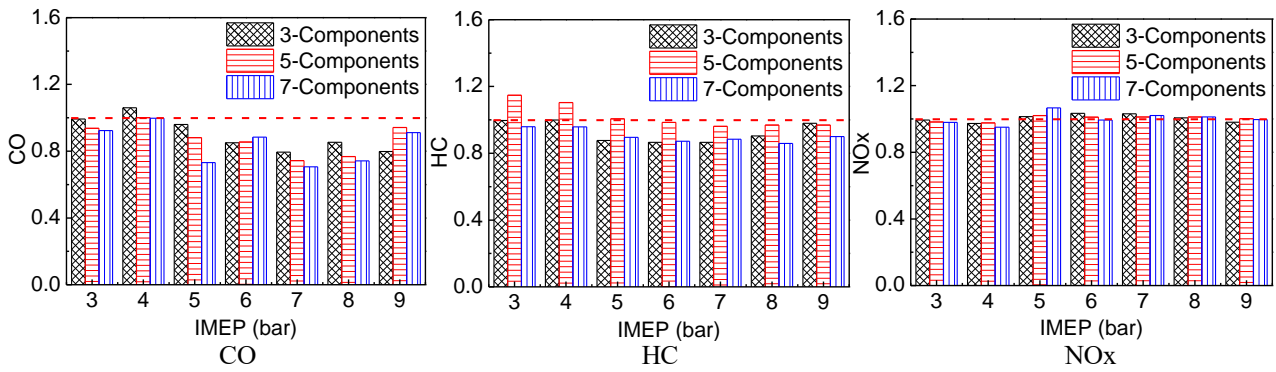


图 5-3 多组分模型燃料的排放特性与柴油的比较 (1500rpm)  
 Figure 5-3 Comparison of gas emissions of surrogates and diesel fuel (1500 rpm)

图 5-3 所示为多组分模型燃料在不同负荷下的气态排放与柴油的比较。在图中，每一个负荷下的柴油排放归一化为 1，模型燃料的排放则是相对柴油的变化。从总体上看，模型燃料的氮氧化物排放各种负荷下与柴油都相当吻合，而 CO 排放在中高负荷下与柴油存在一定的偏差。为了综合评价多组分模型燃料，定义模型燃料在发动机全负荷范围内气态排放物相对原柴油的累计偏差：

$$\Delta_{CO} = \sum_{i=3}^9 \left| \frac{CO_{sur,i}}{CO_{dies,i}} - 1 \right| \quad (5-1)$$

$$\Delta_{HC} = \sum_{i=3}^9 \left| \frac{HC_{sur,i}}{HC_{dies,i}} - 1 \right| \quad (5-2)$$

$$\Delta_{NOx} = \sum_{i=3}^9 \left| \frac{NOx_{sur,i}}{NOx_{dies,i}} - 1 \right| \quad (5-3)$$



其中： $\Delta_{CO}$ ， $\Delta_{HC}$ ， $\Delta_{NOx}$ 分别为某一模型燃料的CO、HC、NO<sub>x</sub>在全负荷范围内的累计偏差； $CO_{sur,i}$ ， $HC_{sur,i}$ ， $NOx_{sur,i}$ 分别为模型燃料在某一平均指示压力下的CO、HC、NO<sub>x</sub>排放； $CO_{dies,i}$ ， $HC_{dies,i}$ ， $NOx_{dies,i}$ 分别为柴油在某一平均指示压力下的CO、HC、NO<sub>x</sub>排； $i$ 为发动机的指示平均有效压力，单位为bar。根据上述定义，得到三组分、五组分、七组分模型燃料的各种气态排放的累计偏差，如表5-2所示。从表中可以看出，各种模型燃料在CO方面的偏差较大一些，而氮氧化物较小。此外，总体上来看，五组分模型燃料在各种排放都与柴油最接近。

表5-2 柴油多组分模型燃料气态排放物的累计偏差

Table 5-2 Accumulation deviations of emissions for different surrogate fuels

Fuel	$\Delta_{CO}$	$\Delta_{HC}$	$\Delta_{NOx}$
3-Components surrogate fuel	0.811	0.514	0.140
5-Components surrogate fuel	0.872	0.373	0.099
7-Components surrogate fuel	1.104	0.672	0.178

由于本文采用的原型柴油机可以满足国四标准，结合设定的120MPa喷油压力，在大部分负荷条件下，烟度排放几乎为0，但是超细微粒排放仍然存在。因此，本文全面比较了多组分模型燃料和柴油在多种负荷条件下的超细微粒分布规律，如图5-4所示。发动机的超细微粒的生成与演化过程十分复杂[209]，其影响因素也相当众多，包括燃料的分子结构、含氧量、挥发性、燃烧模式、喷油策略、运行工况（转速与负荷）、燃空当量比、各种燃烧技术、后处理策略等[210, 211]。

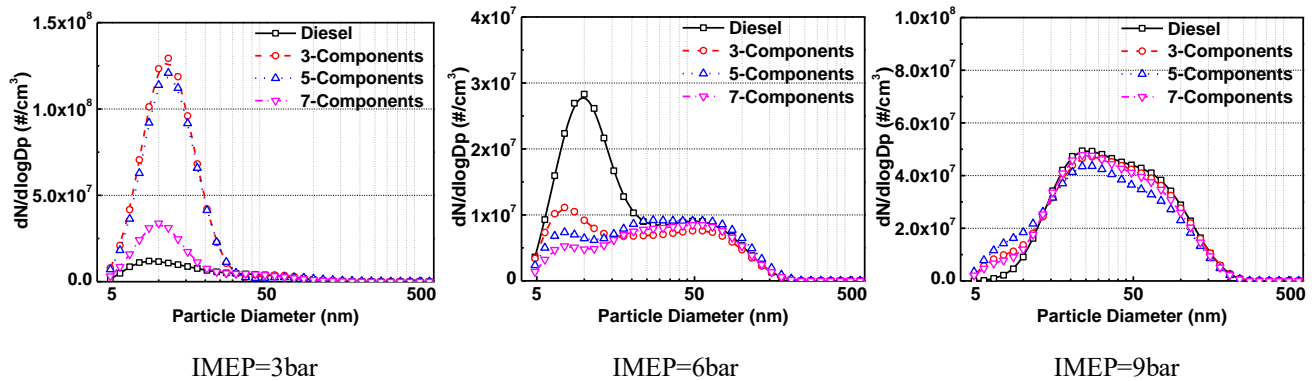


图5-4 多组分模型燃料的超细微粒排放与柴油的比较（1500rpm）

Figure 5-4 Particle size distributions of surrogates and diesel fuel (1500 rpm)

图5-4中，发动机在小负荷下微粒数目-粒径成单峰状态，即核膜态态，峰值粒径在10nm；在中等负荷下，超细微粒呈双峰分布——核膜态和积聚态，对应的峰值粒径分别在10nm和50-60nm左右；而发动机在大负荷状态，超细微粒呈单峰分布——积聚态显著，但是峰值粒径迁移到40nm左右。对于多组分模型燃料，小负荷的核膜态峰值浓度明显增加，特别是三组分和五组分模型燃料增加了一个数量级；在中等负荷下（IMEP=6bar），模型燃料的核膜态峰值浓度相对柴油削减了60%以上，且模型燃料组分数目越多峰值浓度降低越显著，但是积聚态颗粒物



分布差别不大；在大负荷（IMEP=9bar），柴油以及各种模型燃料的微粒分布规律非常接近。

## 5.3 模型燃料喷油策略验证

### 5.3.1 不同直喷时刻下，模型燃料与柴油燃烧和排放对比

缸内直喷时刻决定着柴油进入缸内时缸内整体的温度、压力环境，对柴油的雾化、蒸发以及后续燃烧过程至关重要，对比不同的直喷时刻下模型燃料与柴油的燃烧历程能充分反映模型燃料与柴油的滞燃期、燃烧速率等差异。

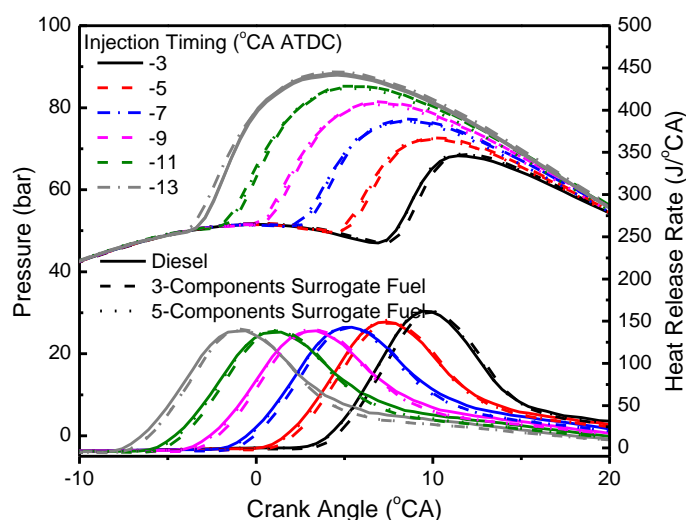


图 5-5 不同直喷时刻下柴油及模型燃料缸内压力曲线及放热率曲线的对比

Figure 5-5 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate between diesel and surrogate fuels at different direct injection timings

图 5-5 对比了不同直喷时刻下柴油与三组分、五组分模型燃料缸内压力及放热率曲线。从图中可以看到，在较宽的直喷时刻范围内，模型燃料均能较好的再现缸内压力历程及放热过程。此外，与三组分模型燃料相比，五组分模型燃料与柴油燃烧相位更为接近，这可能是五组分模型燃料具备一定比例的轻质组分，燃油挥发性更接近柴油。

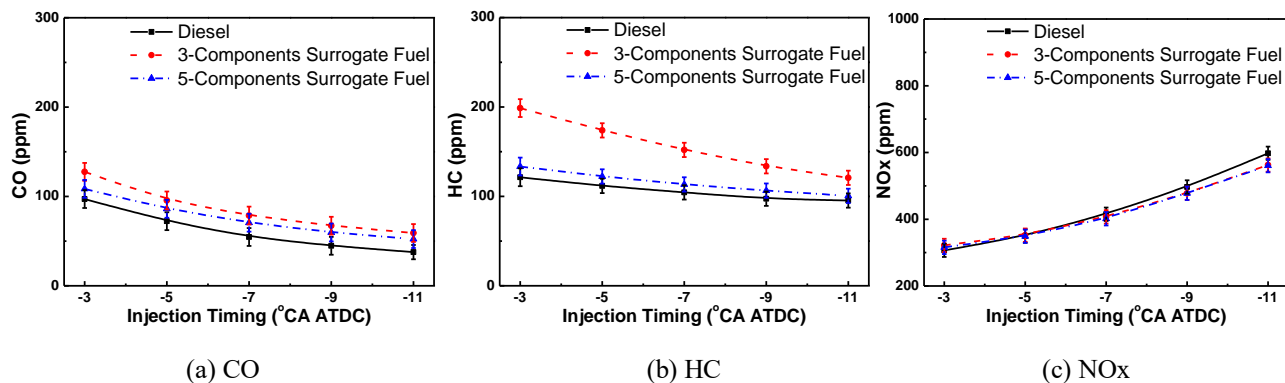


图 5-6 不同直喷时刻下模型燃料与柴油主要气体排放的对比

Figure 5-6 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different direct injection timings



图 5-6 进一步对比了不同直喷时刻下,多组分模型燃料与柴油气体排放的对比。图 5-6 中,随着直喷时刻的提前,CO 排放及 HC 排放逐渐降低,NO<sub>x</sub> 排放逐渐升高。这主要是由于随着直喷时刻的提前,燃烧相位逐渐提前,配合活塞上行的压缩行程,缸内温度逐渐升高,从而有利于 CO 和 HC 的氧化,导致较高的 NO<sub>x</sub> 排放;此外,直喷时刻提前,滞燃期逐渐增大,这有利于缸内油气混合,从而抑制 CO 和 HC 排放的生成。

对比不同模型燃料与柴油气体排放时可以发现,在相同的直喷时刻下,三组分模型燃料 CO 排放略高于五组分模型燃料以及柴油(三组分比柴油高约 20~30ppm、五组分比柴油高约 10~16ppm)。模型燃料 HC 排放略高于柴油,其中三组分模型燃料 HC 排放最高,五组分模型燃料与柴油较为接近,且 HC 排放的差异随着直喷正时的提前逐渐减小。HC 排放主要受边界层燃料浓度以及缸内温度共同决定,在相同直喷正时条件下,缸内燃烧温度大致相同,相对于五组分模型燃料,三组分由于缺少轻质组分,喷雾过程中燃油不易破碎蒸发,从而使得贯穿距增大,进一步使得边界层燃料浓度升高,从而使得直喷三组分模型燃料时,HC 排放最高。随着直喷正时的提前,缸内燃烧温度升高,这促进了 HC 排放的氧化,从而使得直喷不同燃料 HC 排放均有下降,进一步缩小了不同燃料间 HC 排放的差异。三组分与五组分模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放在不同直喷正时下与柴油均十分接近,仅在直喷正时较为提前时略低于柴油。NO<sub>x</sub> 排放与缸内燃烧温度耦合密切,在几乎相同的放热速率和放热相位条件下,缸内燃烧温度十分接近,从而使得 NO<sub>x</sub> 排放较为接近。

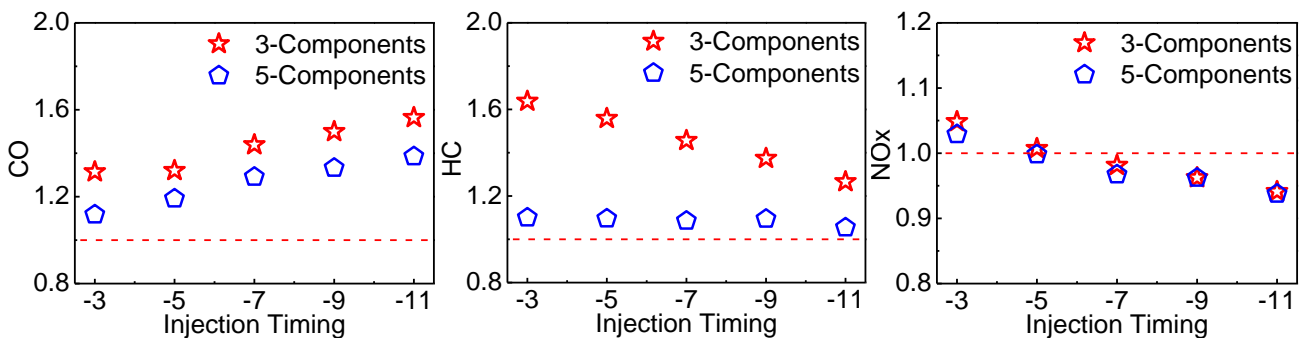


图 5-7 不同直喷时刻下模型燃料与柴油主要气体排放相对值的对比

Figure 5-7 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different direct injection timings

图 5-7 进一步将不同直喷时刻下柴油排放归一化为 1, 模型燃料的排放则是相对柴油的变化。从图中可以看到,在直喷时刻较为推迟时,模型燃料与柴油 CO 排放更为接近;随着直喷时刻的提前,模型燃料 CO 排放相对值偏离柴油更多。结合图 5-6 可知,模型燃料与柴油 CO 排放绝对值差异较为稳定,随着直喷时刻的提前,柴油 CO 排放迅速降低,这导致随着柴油 CO 排放的降低,模型燃料 CO 排放相对值较柴油越来越高。此外,在所研究的直喷时刻范围内,五组分模型燃料比三组分模型燃料 CO 排放更接近柴油。HC 排放方面,随着直喷时刻的提前,三组分模型燃料 HC 排放相对值逐渐接近柴油,且与 CO 排放类似;五组分模型燃料 HC 排放较三组分在不同直喷时刻下均更接近柴油。NO<sub>x</sub> 排放方面,在直喷较为推迟时,模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放比柴油高,在直喷时刻为上至点前 5°CA 时,模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放与柴油基本一致;随着直



喷时刻的进一步提前，模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放逐渐低于柴油；三组分与五组分间 NO<sub>x</sub> 排放十分接近。结合图 5-6 分析可以发现，五组分排放与柴油 CO 排放绝对值在不同直喷时刻下差值均保持在 16ppm 以内；HC 排放差异小于 10%，均较三组分更接近柴油；NO<sub>x</sub> 排放方面，五组分与三组分 NO<sub>x</sub> 排放与柴油差异均小于 10%，这均表明在不同直喷正时条件下，五组分模型燃料更为准确的复现了柴油气体排放性质。

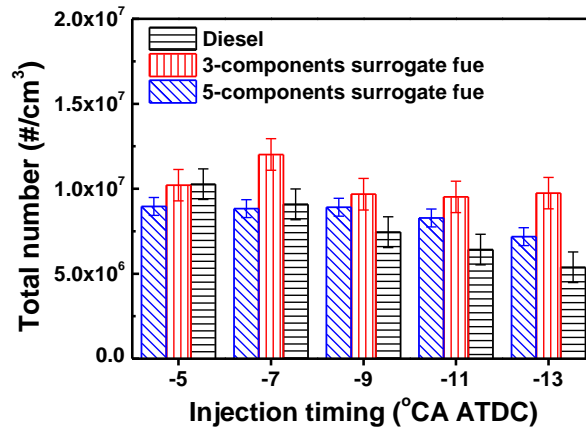


图 5-8 不同直喷时刻下模型燃料与柴油颗粒物总数排放的对比

Figure 5-8 Comparison of the total number of particles between diesel and surrogate fuels at different direct injection timings

图 5-8 对比了三组分、五组分模型燃料以及柴油在不同直喷正时下的颗粒物总数排放。从图中可以看到，在直喷时刻较为提前时，模型燃料总颗粒物数目较柴油高，当直喷时刻推迟至上止点前 5°CA 时，直喷柴油颗粒物排放总数目与三组分模型燃料相当，略高于五组分模型燃料。五组分模型燃料与柴油颗粒物总数目排放随着直喷时刻的推迟均不断增大，从而造成较高的颗粒物排放。而三组分模型燃料随着直喷正时的变化规律较为复杂，随着直喷正时的推迟，三组分模型燃料颗粒物排放先稳定后增大，在直喷正时推迟至上止点前 5°CA 时又降低至与柴油接近的水平，且在直喷正时为 7~13°CA 区间，三组分模型燃料颗粒物总数目均高于五组分以及柴油。这可能是由于三组分中缺乏沸点较低的成分，使得燃油喷雾过程中的油束不易蒸发，从而造成较高的颗粒物排放。

### 5.3.2 不同预喷时刻下，模型燃料与柴油燃烧和排放对比

为优化缸内燃烧，在某些负荷下高压共轨柴油机会使用两段喷射甚至是多段喷射策略。多段喷射策略会直接影响燃料混合过程及后续燃烧历程，尤其是缸内早喷导致的低温燃烧过程受燃料化学反应动力学特性影响较大。因此，本文进一步对比研究了预喷时刻对柴油及多组分模型燃料燃烧和排放特性的影响。

图 5-9 对比了不同预喷时刻下，柴油及多组分模型燃料缸内压力曲线及放热率曲线。从图中可以看到，在预喷时刻为上止点前 20°CA 时，柴油及多组分模型燃料均发生明显的两阶段燃烧，分别为预喷燃料的低温燃烧过程以及主喷燃料的主燃烧过程。从图中可以看到，多组分



模型燃料与柴油两阶段放热相位及幅值均十分接近。随着预喷时刻的提前，低温燃烧放热幅值逐渐下降，此时，多组分模型燃料仍能反映缸内压力及放热历程。在不同的预喷时刻下，五组分模型燃料低温反应放热速率均略高于柴油及三组分，导致缸内压力曲线略高于柴油，这可能是由于五组分具备三组分没有的轻质组分，而又缺乏柴油含有的重质成分，因此五组分挥发性更好，从而使得早喷燃油更好的蒸发，进而使得低温反应放热速率较高。

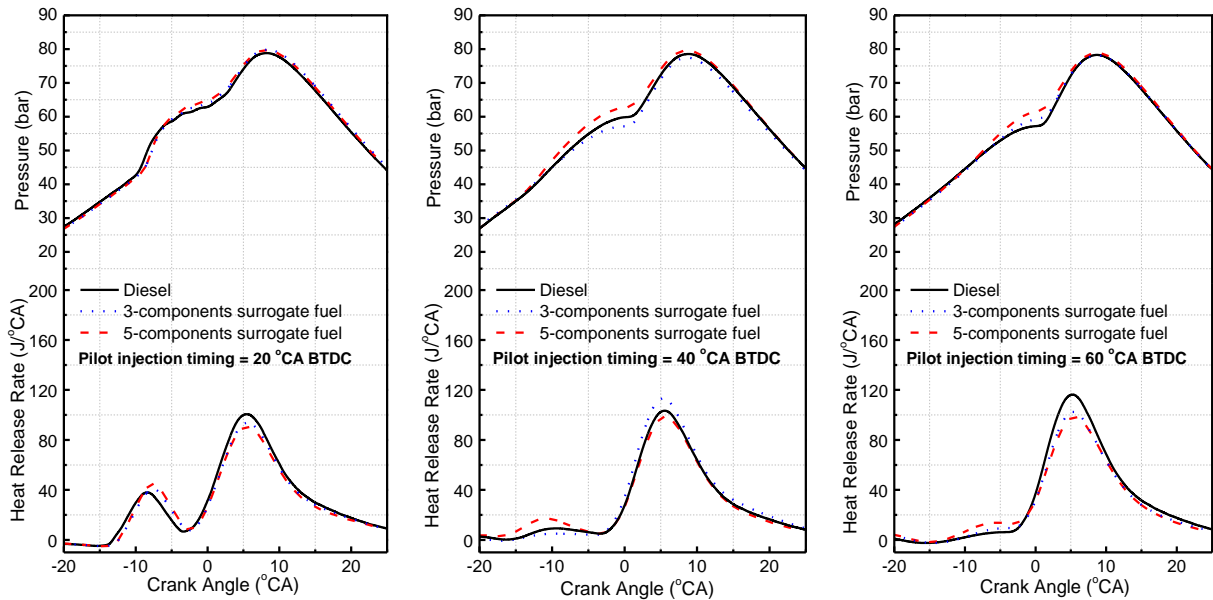


图 5-9 不同预喷时刻下柴油及其模型燃料缸内压力曲线及放热率曲线的对比

Figure 5-9 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate between diesel and surrogate fuels at different pilot injection timings

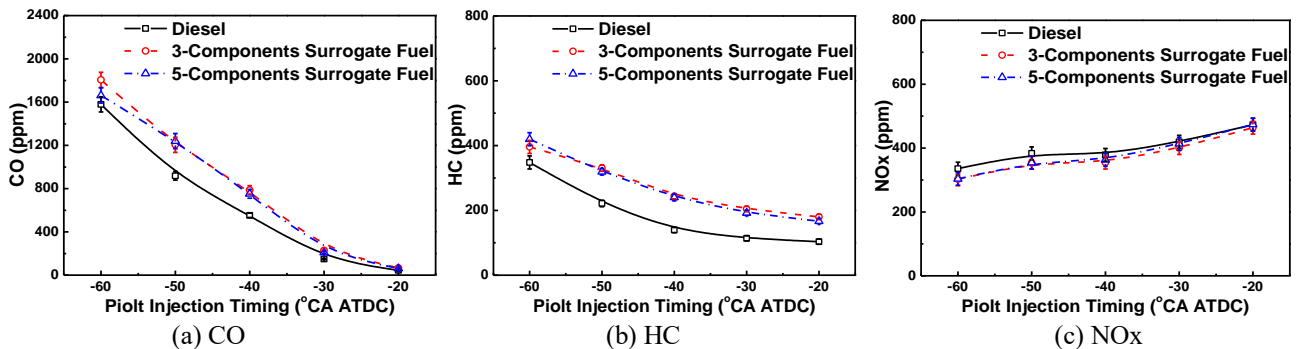


图 5-10 不同预喷时刻柴油及其模型燃料气体排放的对比

Figure 5-10 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different pilot injection timings

图 5-10 对比了不同预喷时刻下，柴油及其多组分模型燃料的主要气体排放。从图中可以看到，直喷柴油及多组分模型燃料时，随着预喷时刻的推迟，CO 排放及 HC 排放均不断降低，NOx 排放略有增大。结合图 5-9 可知，随着预喷时刻的推迟，预喷柴油在接近上止点附近喷入缸内，直接燃烧，从而造成缸内较好的缸内热氛围，有利于 CO 及 HC 排放的氧化，同时也导致 NOx 排放略有增大。在预喷时刻较为提前时，模型燃料 CO、HC 排放较柴油高。缸内早喷条件下，CO 和 HC 排放主要为预喷燃油碰壁导致，燃油附壁后蒸发直接决定边界层碳氢浓度、壁面附近燃油扩散燃烧规模。相对于柴油，模型燃料缺乏更为轻质组分，从而使得碰壁后蒸发



雾化困难，造成较高的 CO、HC 排放。

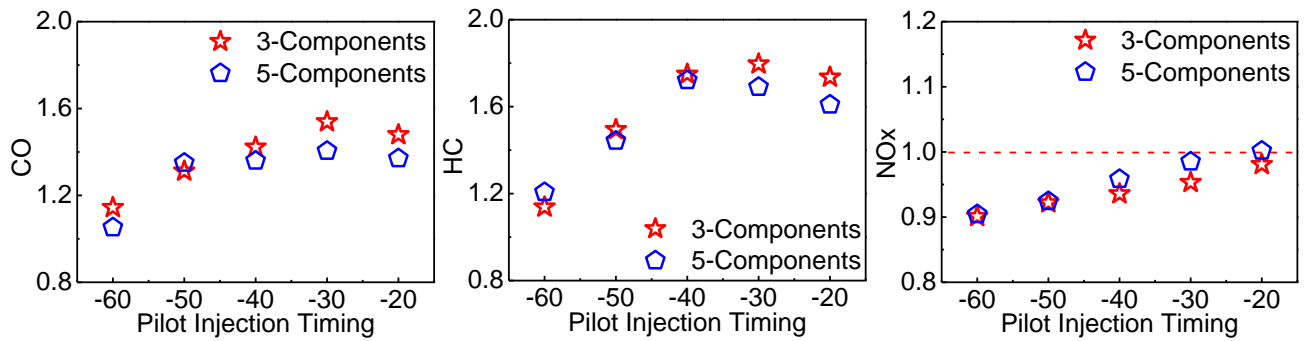


图 5-11 不同预喷时刻下模型燃料与柴油主要气体排放相对值的对比

Figure 5-11 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different direct injection timings

类似的，图 5-11 将不同预喷时刻下柴油排放归一化为 1，模型燃料的排放则是相对柴油的变化。从图中可以看到，随着预喷时刻的推迟，模型燃料 CO、HC 排放相对柴油偏离更多（CO 排放高约 40%、HC 排放高约 60~80%），结合图 5-10 可知，模型燃料与柴油 CO、HC 排放绝对值差异随着预喷时刻的推迟呈下降趋势，但随着预喷时刻的推迟，柴油 CO、HC 排放降低更多，导致模型燃料 CO 排放相对值较柴油升高。在所研究的预喷策略下，五组分总体上比三组分 CO、HC 排放更接近柴油。NOx 排放方面，在预喷较为提前时，模型燃料 NOx 排放比柴油低 5%至 10%，在预喷时刻推迟至上止点前 30°CA 时，五组分模型燃料 NOx 排放与柴油基本一致。

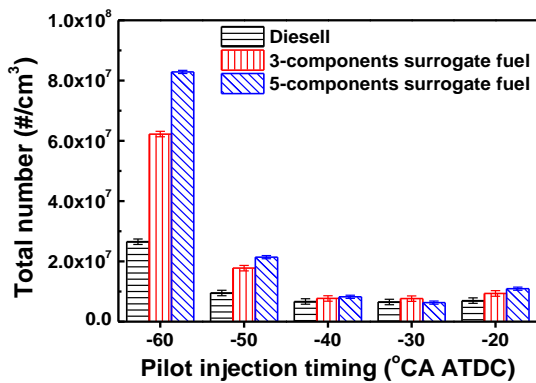


图 5-12 不同预喷时刻柴油及其模型燃料颗粒物总数目排放的对比

Figure 5-12 Comparison of the total number of particles between diesel and surrogates at different pilot injection timings

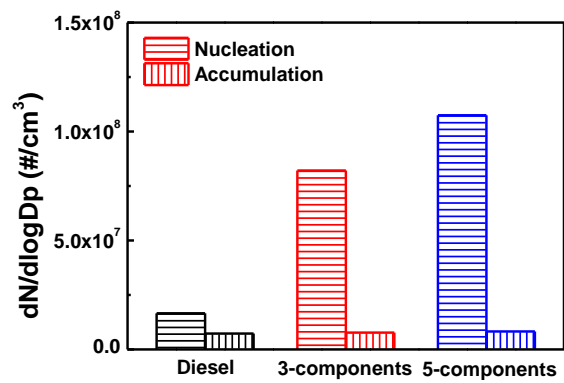


图 5-13 预喷时刻 60°CA BTDC，柴油及其模型燃料核膜态与积聚态颗粒物数目对比

Figure 5-13 Comparison of the nucleation and accumulation mode particles between diesel and surrogates at pilot injection timing of 60°CA BTDC

图 5-12 对比了不同预喷时刻时，模型燃料与柴油颗粒物总数目排放。从图中可以看到，随着预喷时刻的推迟，颗粒物总数大幅降低。这表明采用多段喷射时，推迟预喷正时对抑制颗粒物排放效果显著。对比模型燃料与柴油颗粒物数目，可以看到在预喷时刻为上止点前 60°CA 时，模型燃料颗粒物总数显著大于柴油。这可能是由于在预喷时刻较早时，燃油碰壁主要为过早喷射的燃油喷到气缸壁面，由于气缸壁面更低的温度，从而使得碰壁燃油蒸发困难，燃油挥发性的差异此时对雾化过程更为重要，模型燃料相对于柴油缺乏轻质组分，从而使得雾化困难，



造成更多的颗粒物排放；而随着预喷时刻的推迟，燃料碰壁逐渐转化为燃料喷射到活塞表面，相较于气缸壁面，活塞端面温度更高，从而由于燃料蒸发，降低了颗粒物生成，且此时预喷柴油低温放热逐渐加强，缸内高温持续期增大，从而有利于燃油充分燃烧，使得预喷时刻推迟后，模型燃料颗粒物总数目排放与柴油十分接近。

为进一步分析预喷时刻为 60°CA 时模型燃料颗粒物急剧增大的原因，图 5-13 分析了该条件下，缸内直喷柴油及其模型燃料核膜态与积聚态数目浓度。从图中可以看到，在预喷时刻较为提前时，直喷不同燃料核膜态颗粒物均较积聚态颗粒物数目浓度高，这可能是由于采用较高的燃油喷射压力以及燃油碰壁。模型燃料核膜态颗粒物数目浓度远高于柴油，其中，五组分模型燃料核膜态颗粒物数目浓度最高，其次是三组分，柴油核膜态颗粒物数目浓度最低，模型燃料核膜态颗粒物数目浓度的急剧增大导致了该条件下颗粒物总数目浓度较柴油高(如图 5-11)。造成核膜态颗粒物数目浓度较高的原因可能是由于模型燃料中缺乏轻质组分，燃料在雾化碰壁过程中不易挥发，从而导致较高的核膜态颗粒物排放。此外，进一步对比积聚态颗粒物数目排放，发现直喷不同燃料时，积聚态颗粒物数目差异不大。

### 5.4 EGR 率对模型燃料燃烧和排放性质的影响

废气再循环 (EGR) 策略由于可降低缸内氧浓度、压缩上止点温度，对燃料的着火延迟、缸内燃烧预混合比例、峰值放热速率产生重要影响。新型燃烧模式包括 HCCI、PCCI、RCCI 均通过一定比例的 EGR 实现对燃烧历程、排放产物的控制。为此，进一步比较了模型燃料与柴油在不同 EGR 率下的燃烧排放性质。

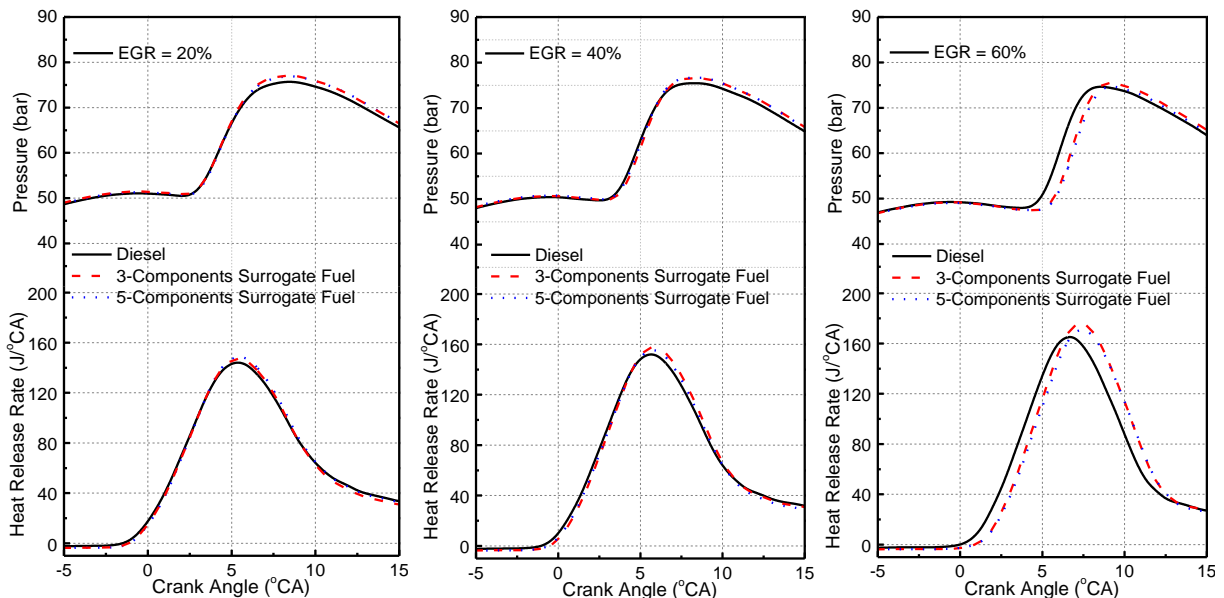


图 5-14 不同 EGR 率下模型燃料与柴油缸内压力及放热率对比

Figure 5-14 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate between diesel and surrogate fuels at different EGR ratios

图 5-14 给出了不同 EGR 率下多组分柴油模型燃料与柴油缸内压力及放热率的对比。从图





中可以看到，在 EGR 率低于 40% 时，多组分模型燃料与柴油缸内压力及放热率均十分接近，随着 EGR 率增大至 60%，三多组分及五组分柴油模型燃料燃烧相位略晚于柴油 0.5 度曲轴转角左右，但三组分及五组分之间燃烧相位和缸压曲线没有明显差异。这表明在较高 EGR 率下，模型燃料与实际柴油之间燃烧性质还有一定差异。

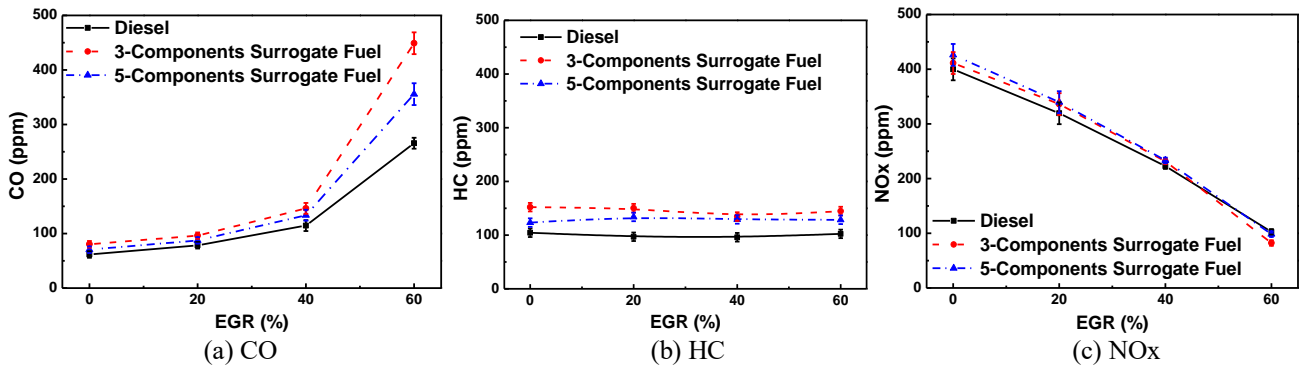


图 5-15 不同 EGR 率下模型燃料与柴油气体排放的对比

Figure 5-15 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different EGR ratios

图 5-15 给出了不同 EGR 率下，缸内分别直喷模型燃料与柴油时气体排放的对比。从图中可以看到，随着 EGR 率的增大，CO 排放逐渐增大，HC 排放较为稳定，NO<sub>x</sub> 排放不断降低。这主要是由于 EGR 率的增大导致缸内温度降低，从而使得 CO 排放不能被充分氧化，而较低的缸内温度又能抑制 NO<sub>x</sub> 排放。

从图中可以看到，在 EGR 低于 40% 时，模型燃料 CO 排放与柴油十分接近，其中三组分模型燃料与柴油 CO 排放差异在 31ppm 以内，五组分模型燃料与柴油 CO 排放差异在 19ppm 以内。但当 EGR 率达到 60% 时，模型燃料 CO 排放显著高于柴油，三组分 (449ppm) > 五组分 (356ppm) > 柴油 (266ppm)。这主要是由于随着 EGR 率的增大，直喷模型燃料时燃烧相位略有推迟。在高 EGR 率下，五组分模型燃料较三组分模型燃料更接近柴油 CO 排放。模型燃料 HC 排放略高于柴油，NO<sub>x</sub> 排放与柴油在较宽的 EGR 范围内均很接近。

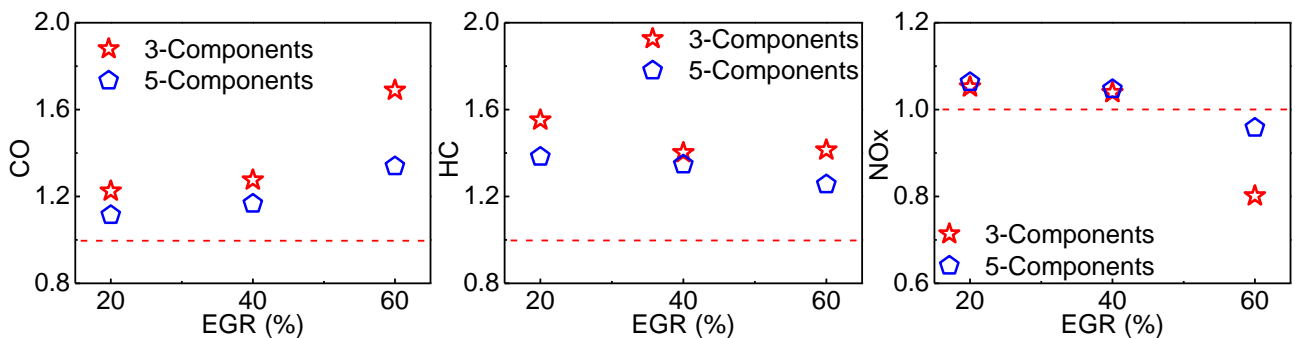


图 5-16 不同 EGR 率下模型燃料与柴油气体排放相对值的对比

Figure 5-16 Comparison of the gas emissions between diesel and surrogate fuels at different EGR ratios

图 5-16 将不同 EGR 率下柴油排放归一化为 1，模型燃料的排放则是相对柴油的变化。从图中可以看到，在 EGR 率低于 40% 时，模型燃料 CO 排放略高于柴油 (20% 以内)，但 EGR 率达到 60% 时，五组分模型燃料 CO 排放高于柴油 35% 左右，三组分模型燃料 CO 排放高于柴油



70%左右。HC 排放方面，在采用 EGR 后，模型燃料 HC 排放均较柴油高，其中五组分模型燃料 HC 排放不高于柴油 40%，而三组分模型燃料 HC 排在 EGR 率 20% 时，超过柴油排放 50% 以上。NO<sub>x</sub> 排放方面，在 EGR 率低于 40% 时，模型燃料与柴油排放差异小于 10%，但当 EGR 率达到 60% 时，三组分模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放低于柴油 20% 左右，五组分模型燃料 NO<sub>x</sub> 排放与柴油差异仍小于 10%。上述研究表明，在不同的 EGR 率条件下，五组分模型燃料较三组分气体排放更接近柴油。

## 5.5 微量组分对模型燃料燃烧和排放的影响

柴油中不仅包含正构烷烃、异构烷烃、环烷烃、单环、双环芳香烃等主要成分，还包含一定比例的烯炔烃、三环芳香烃、卤代烃、烃类氧化物等组分。为验证模型燃料组分的合理性以及进一步研究上述微量组分对柴油缸内燃烧和排放的影响，将上述组分以体积分数 10% 的比例添加到五组分模型燃料（其中三环芳香烃菲在常温下为固态，同时考虑到菲在有机溶剂中溶解度，以摩尔分数 5% 的比例添加到模型燃料中）。

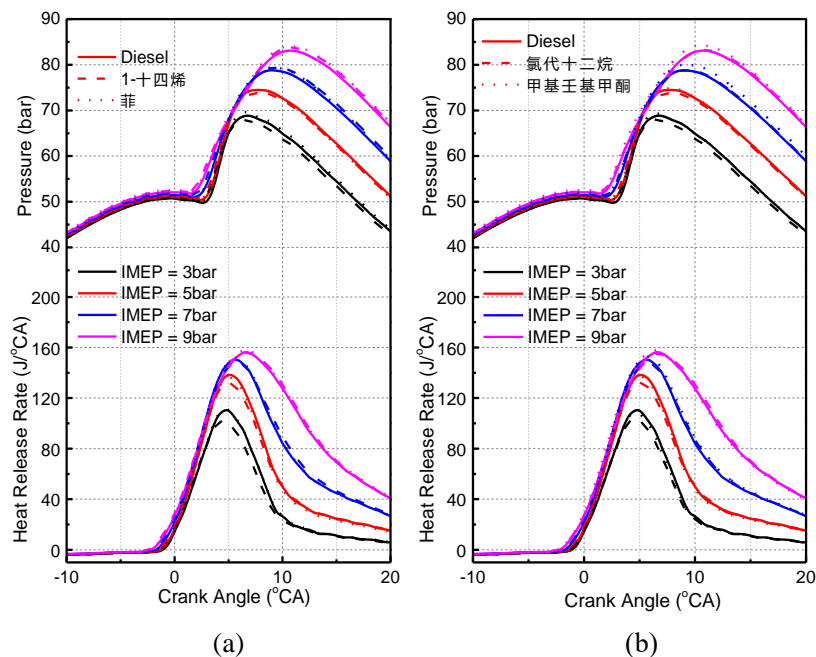


图 5-17 模型燃料添加柴油中微量组分对缸内压力和放热率曲线的影响

Figure 5-17 Effects of the trace components of diesel on the pressure and heat release rate

图 5-17 给出了不同负荷下，模型燃料添加柴油中微量组分对缸内压力和放热率曲线的影响。从图中可以看到，在较宽的负荷范围内，将柴油中微量元素体积分数放大到 10% 时（多环芳香烃菲摩尔分数放大到 5%），对五组分模型燃料的缸内压力历程及燃烧历程影响较小，仅在中小负荷下，添加 1-十四烯、氯代十二烷、甲基壬基甲酮时，放热速率峰值略低于五组分模型燃料（低于 5J/°CA 以内），添加菲缸压及放热速率与柴油几乎一致。这可能是由于在试验条件设定的体积分数下，菲、卤代烃、烃类氧化物、烯炔等组分官能团化学反应特征不能充分体现，对燃烧进程不能起主导作用。尤其是选取的卤代烃、烃类氧化物、烯炔，其在化学反应



过程中，官能团反应特征可能也会被自身主碳链反应特征弱化，从而与结构类似的正构、异构烷烃反应特性趋同。

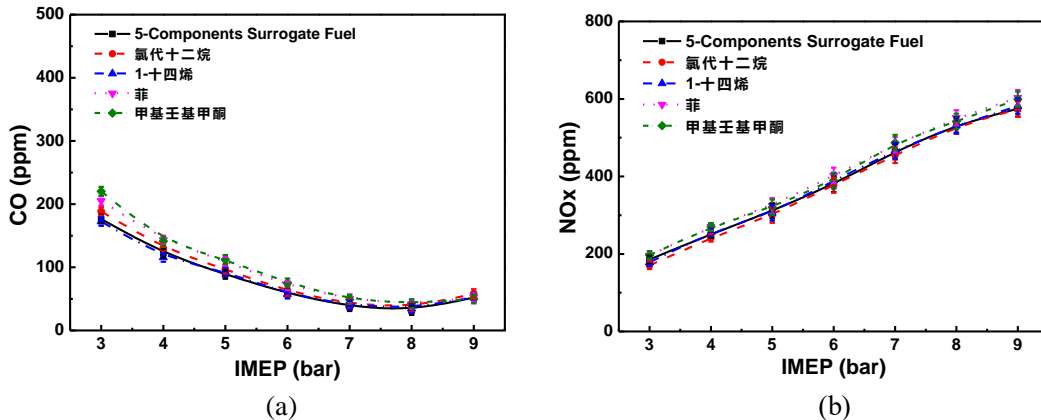


图 5-18 模型燃料添加柴油中微量组分对气体排放的影响

Figure 5-18 Effects of the trace components of diesel blended with surrogate fuel on gas emissions

图 5-18 比较了五组分模型燃料中添加柴油中微量组分对 CO 排放及 NO<sub>x</sub> 排放的影响。从图中可以看到，添加菲以及甲基壬基甲酮会导致 CO 在中小负荷时较五组分模型燃料高；添加烯烃、氯代十二烷对 CO 排放影响不大。添加柴油中微量组分对 NO<sub>x</sub> 排放几乎没有影响，这主要是由于添加上述组分对缸内放热过程影响不大，NO<sub>x</sub> 由缸内燃烧温度主导，在大致相同的放热过程下，NO<sub>x</sub> 排放也大致相同。

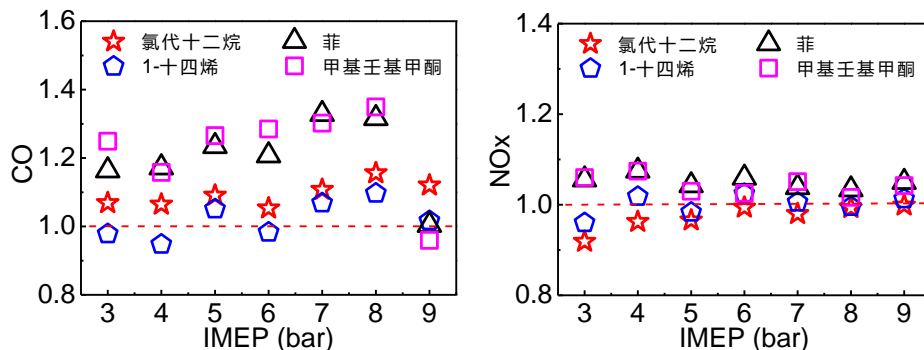


图 5-19 模型燃料中添加柴油中微量组分对气体排放的影响

Figure 5-19 Effects of the trace components of diesel blended with surrogate fuel on gas emissions

采用类似方法将柴油排放归一化为 1，图 5-19 比较了模型燃料添加不同结构微量组分的排放变化。从图中可以看到，在 IMEP 低于 9bar 时，添加菲、甲基壬基甲酮时，CO 排放高于五组分模型燃料 20% 左右；添加氯代十二烷、1-十四烯 CO 排放与五组分模型燃料差异在 10% 以内。在 IMEP=9bar 时，添加不同分子结构微量组分与柴油 CO 排放差异均较小。NO<sub>x</sub> 排放方面，五组分模型燃料中添加不同微量组分对 NO<sub>x</sub> 排放影响均较小，差异均低于 10%。

图 5-20 对比了 IMEP 为 8bar 条件下，添加不同微量组分对颗粒物数目浓度的影响。从图中可以看到，添加氯代十二烷、1-十四烯会导致颗粒物总数目排放略有降低；添加甲基壬基甲酮对颗粒物影响不大；添加菲会使得颗粒物数目急剧增大。这主要是由于菲较高的沸点以及自



身较高的不饱和度，一方面会使得燃油蒸发困难，另一方面，菲自身也是较为重要的颗粒物先驱物，从而会造成较高的颗粒物排放。

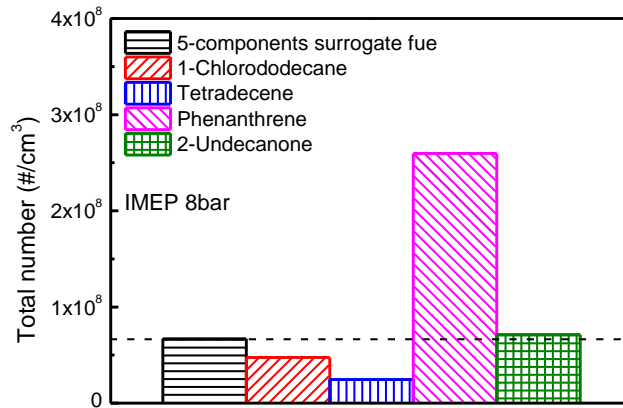


图 5-20 模型燃料中添加柴油中微量组分对颗粒物排放的影响

Figure 5-20 Effects of the trace components of diesel blended with surrogate fuel on particle emissions

## 5.6 本章小结

基于前文构建的多组分柴油模型燃料，考虑到实际发动机运行过程中参数的多样性（包括负荷、喷油策略、废气再循环等）以及实际柴油组分的复杂性，本章进一步在不同发动机运行工况下对模型燃料进行验证。具体为在包括不同负荷、喷油策略、EGR 率等条件下，对比了柴油与多组分燃料缸内燃烧历程和主要排放产物；此外，综合考虑柴油中微量组分，包括烯烃、卤代烃、多环芳香烃、烃类氧化物等对柴油燃烧特性的影响，选取 1-十四烯、氯代十二烷、菲、甲基壬基甲酮代表上述组分，并按一定比例添加到五组分模型燃料中，研究其对模型燃料燃烧及排放的影响。通过上述研究，主要结论如下：

- 1) 本文所构建的多组分模型燃料均可以精确复现不同负荷下实际发动机燃烧过程；在排放特性方面，氮氧化物的吻合非常好，CO 在中等负荷下与柴油存在较小的偏差。在全负荷范围内，五组分模型燃料各种气态排放物的累计偏差最小。
- 2) 基于前文提出的三组分模型燃料、五组分模型燃料在较宽的直喷正时条件下均能准确再现柴油燃烧过程；在不同直喷正时条件下，模型燃料与柴油 CO 排放、NO<sub>x</sub> 排放均十分接近，五组分模型燃料 HC 排放及颗粒物总数目排放较三组分模型燃料更接近柴油。
- 3) 采用两段喷射模式时，模型燃料能再现缸内柴油早喷引起的低温燃烧现象。在预喷时刻较早时，模型燃料 CO 排放较柴油高，且这种差异随着预喷时刻的推迟而降低。模型燃料 HC 排放在不同预喷时刻下均较柴油高，NO<sub>x</sub> 排放与柴油在不同预喷时刻条件下均十分接近。在预喷时刻较早时，模型燃料由于产生大量核膜态颗粒物，导致颗粒物总数目较柴油高，随着预喷时刻的推迟，颗粒物总数目与柴油大致相同。
- 4) 在 EGR 率低于 60%时，模型燃料与柴油缸内压力曲线和燃烧历程均十分吻合，但 EGR 率



为 60% 时，模型燃料燃烧相位较柴油推迟约  $0.5^{\circ}\text{CA}$ 。与之对应的是，CO 排放在低 EGR 率时与柴油十分接近，但当 EGR 率达到 60% 时，模型燃料 CO 排放高于柴油。在不同 EGR 率条件下，模型燃料 HC 排放均略高于柴油，NO<sub>x</sub> 排放与柴油十分接近。

- 5) 在所验证的工况范围内，三组分、五组分模型燃料均能准确复现柴油的缸内压力历程和燃烧速率；排放方面，在所验证的工况范围内，五组分模型燃料的 CO、HC、NO<sub>x</sub> 排放均较三组分模型燃料更接近柴油排放。
- 6) 五组分模型燃料中添加柴油中典型微量组分对缸内压力及燃烧进程影响有限。仅在添加甲基壬基甲酮和菲时，在中小负荷下 CO 略高，添加其他微量组分对 CO 排放影响不大。添加微量组分对 NO<sub>x</sub> 排放影响不大。氯代十二烷、1-十四烯会改善颗粒物排放，甲基壬基甲酮对颗粒物总数目排放影响不大，但添加三环芳香烃菲会导致颗粒物排放急剧增大。



15001080



## 第六章 基于模型燃料的 PCCI 模式影响因素研究

### 6.1 概述

预混合压缩燃烧模式 (Premixed Charge Compression ignition: PCCI) 采用缸内多段喷射并结合较高 EGR 率以实现燃油与缸内空气充分混合的目的, 从而抑制碳烟排放; 同时高 EGR 率的使用还能有效抑制氮氧化物排放。PCCI 模式由于仅采用简单的喷油控制策略以及 EGR 策略, 对发动机整体改动较小, 因而具有较高的应用前景[212, 213]。

由于 PCCI 模式通过控制缸内燃料浓度分布、进气组分以实现对着火延迟、放热相位、峰值放热速率、有害气体排放的控制, 因此, 燃料的物理特性、化学特性均十分重要。目前, 国际上 PCCI 燃烧模式研究难点、焦点在于如何通过燃油喷射策略的调制实现混合气浓度在空间上的准确分布, 以及如何通过喷射策略的调整结合燃油的物理化学特性控制燃烧速率、抑制有害气体排放、拓展 PCCI 模式的运行范围。为此, 本章基于前文提出的五组分模型燃料, 通过调制燃料的理化性质参数结合不同喷油策略, 研究上述参数对 PCCI 模式燃烧和排放的影响。

本章首先调制五组分模型燃料中七甲基壬烷与正十六烷比例改变燃料反应活性, 从而研究不同十六烷值燃料对 PCCI 模式的影响; 而从燃料化学动力学角度分析发现, C<sub>10</sub> 到 C<sub>16</sub> 的正构烷烃包括着火延迟、火焰传播速度、化学动力学反应主要路径等均十分接近, 因此选择沸点较低的正十二烷 (沸点 216°C) 部分代替五组分模型燃料中的正十六烷 (沸点 287°C) 以及正十八烷 (沸点 316°C), 在保证燃料十六烷值大致相同条件下 (CN=51), 可改变燃料挥发性, 从而研究不同挥发性燃料对 PCCI 模式燃烧和排放的影响。同时, 结合发动机不同喷油策略, 包括单喷、两段喷 (不同预喷时刻、预喷比), 研究喷油策略、燃料十六烷值、燃料挥发性对 PCCI 模式燃烧和排放的影响。燃料组分见表 6-1、6-2, 试验过程中喷油策略见表 6-3。此外, 在本章节中, 控制循环喷油量为 40mg/cycle, 且通过控制进气二氧化碳浓度, 控制 EGR 率保持在 50%左右。

表 6-1 不同十六烷值模型燃料组分

Table 6-1 Compositions of multicomponent surrogate fuels with different cetane number

Components	Volume Fraction %		
	CN51	CN40	CN30
n-Hexadecane	25	10	0
HMN	30	45	55
1-Methylnaphthalene	15	15	15
Decalin	10	10	10
n-Octadecane	20	20	20



表 6-2 不同挥发性模型燃料组分

Table 6-2 Compositions of multicomponent surrogate fuels with different volatility

Components	Volume Fraction %		
	Fuel 1#	Fuel 2#	Fuel 3#
n-Hexadecane	25	25	0
HMN	30	25	15
1-Methylnaphthalene	15	15	15
Decalin	10	10	10
n-Octadecane	20	0	0
n-Dodecane	0	25	60

表 6-3 燃油喷射策略

Table 6-3 Fuel injection strategies

喷油策略	控制参数		
	预喷时刻 (°CA BTDC)	预喷比 (%)	主喷时刻 (°CA BTDC)
单喷	-	-	3 5 7 9 11 13
两段喷	预喷时刻	60 50 40 30	30 7
	预喷比例	50	20 30 40 7

## 6.2 喷油策略、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响

燃料反应活性主要由其十六烷值决定。在喷油相位相同时，十六烷值的高低对燃烧相位起决定作用，尤其在 PCCI 模式下，燃料十六烷值对缸内预喷燃料的燃烧至关重要。因此，为简化问题，本章首先研究了单喷模式下，比较缸内直喷不同十六烷值燃料对燃烧和排放特性的影响。

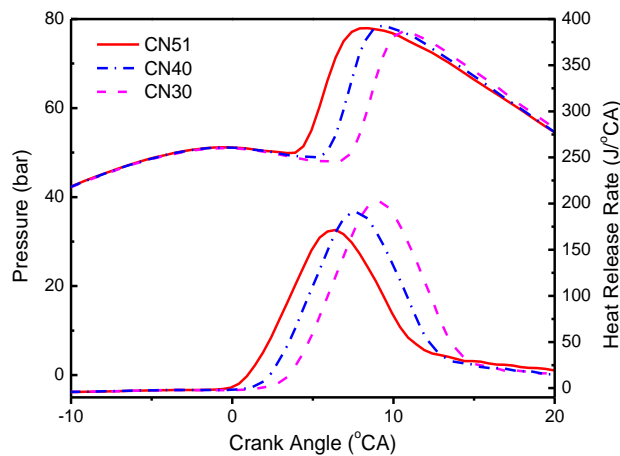


图 6-1 不同十六烷值燃料 PCCI 模式缸内压力及放热率对比

Figure 6-1 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate in PCCI mode with different cetane number fuels





图 6-1 给出了 EGR 率 50%条件下,直喷时刻上止点前 5°CA 时,不同十六烷值燃料缸内压力及放热率曲线。从图中可以看到,十六烷值的降低导致燃烧相位推迟。在直喷时刻为上止点前 5°CA 时,十六烷值每降低 10 个单位,燃烧相位大致推迟 1.5 度曲轴转角左右。此外,随着十六烷值的降低,放热率曲线峰值不断增大,这主要是由于随着燃料十六烷值的降低,燃烧滞燃期的增大,缸内油气混合更均匀,放热率峰值因此增大。

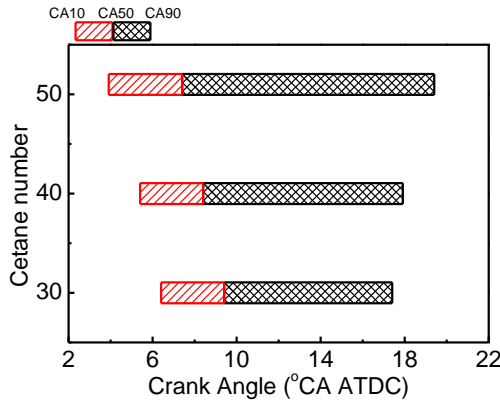


图 6-2 不同十六烷值燃料燃烧相位对比  
Figure 6-2 Comparison of the combustion phase with different cetane number fuels in PCCI mode

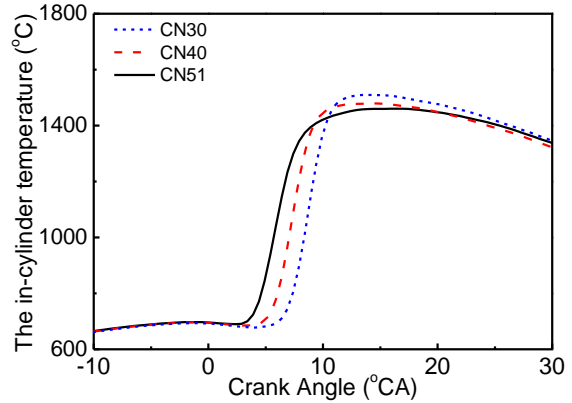


图 6-3 不同十六烷值燃料燃烧温度对比  
Figure 6-3 Comparison of the in-cylinder temperature with different cetane number fuels in PCCI mode

图 6-2 比较了直喷时刻为上止点前 5°CA 时,缸内直喷不同十六烷值燃料燃烧相位的差异。从图中可以看到,随着十六烷值的降低,CA10 及 CA50 均不断推迟,CA10 的推迟主要是由于随着燃料十六烷值的降低,燃料反应活性下降,CA50 的推迟主要是由于 CA10 的推迟。图 6-2 中,CA90 不断提前,这主要是由于随着十六烷值的降低,滞燃期增大,燃料与缸内空气混合充分,从而使得更多的燃料同时燃烧。上述现象表明直喷燃料的十六烷值的降低,会使得燃烧持续期缩短,提高燃料放热速率,从而提高燃料放热的等容度,这具有极高的潜力提高指示热效率。

图 6-3 比较了直喷时刻为上止点前 5°CA 时,缸内直喷不同十六烷值燃料燃烧温度历程的差异。从图中可以看到,随着十六烷值的降低,燃烧相位的推迟导致缸内温度的升高随之推迟。但缸内温度峰值会略有提高,这主要是由于缸内放热峰值增大,导致缸内温度升高更快,从而达到更高的峰值温度。此外,随着活塞的下行,缸内温度均相继降低,燃烧相位的推迟导致缸内高温持续时间缩短。

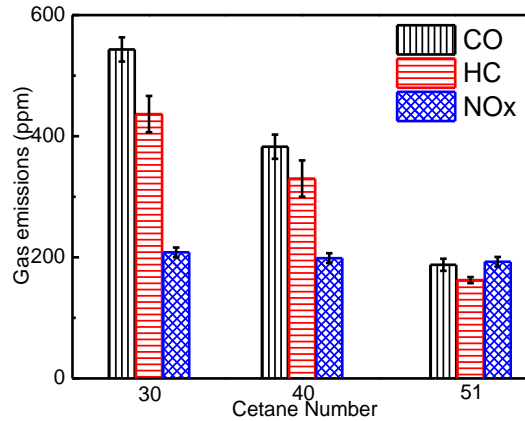


图 6-4 不同十六烷值燃料 PCCI 模式主要气体排放对比

Figure 6-4 Comparison of the gas emissions with different cetane number fuels in PCCI mode

图 6-4 比较了燃料十六烷值对主要气体排放的影响。从图中可以看到，随着十六烷值的升高，CO、HC 排放会不断降低。CO 排放主要受缸内油气混合质量以及燃烧温度决定，HC 排放主要受边界层燃料浓度以及缸内温度影响。相较于高十六烷值燃料，较低十六烷值的燃料有较长的滞燃期，更利于缸内燃油与空气混合，但由于燃烧相位的推迟，随着活塞下行缸内温度下降较快，缸内高温持续时间缩短，不能充分氧化 CO 以及边界层 HC 排放。此外，低十六烷值模型燃料中含有更多的异构烷烃，燃烧过程中易于生成不饱和中间产物，这可能也会导致 CO 排放的增大。

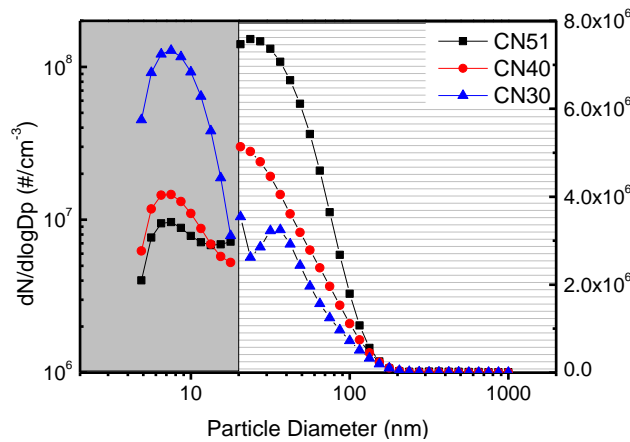


图 6-5 不同十六烷值燃料 PCCI 模式颗粒物排放对比

Figure 6-5 Comparison of the particle size distributions with different cetane number fuels in PCCI mode

图 6-5 比较了直喷时刻上止点前 5°CA，缸内喷射不同十六烷值燃料颗粒物粒径分布的对比。从图中可以看到，随着直喷燃料十六烷值的降低，粒径小于 20nm 的颗粒物数目浓度峰值逐渐增大，粒径大于 20nm 颗粒物数目浓度逐渐下降。造成这种差异的原因是随着直喷燃料十六烷值的降低，滞燃期增大，这一方面有利于燃料挥发、气化，有利于抑制颗粒物的生成。但较长滞燃期会使得喷雾液滴在缸内高温高压环境中发生裂解，从而导致碳烟前驱物的生成，进一步使得小颗粒物数目浓度增大。此外，在较长的滞燃期内，雾化的小液滴可能更易逃逸至边界层，直接形成核膜态颗粒物；而针对粒径大于 20nm 的颗粒物，由于滞燃期的增大，燃油破碎蒸发更为充分，与缸内空气混合更为均匀，颗粒物不易积聚，从而使得粒径大于 20nm 的颗



颗粒物排放降低。

## 6.2.1 直喷时刻、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响

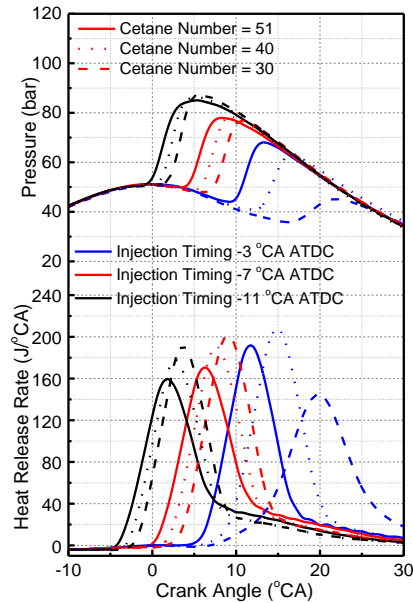


图 6-6 不同十六烷值燃料随直喷时刻变化 PCCI 模式下缸内压力放热率曲线的对比

Figure 6-6 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate with different cetane number fuels under different injection timing in PCCI mode

图 6-6 对比了 50% EGR 率下，直喷时刻、燃料十六烷值对缸内压力及放热率曲线的影响。从图中可以看到，十六烷值的降低会导致放热相位推迟，在直喷时刻较为提前时，十六烷值每降低 10 个单位，燃烧相位约推迟  $1^{\circ}\text{CA}$ ；随着直喷时刻的推迟，燃烧相位的差异逐渐增大，直喷时刻推迟至上止点前  $3^{\circ}\text{CA}$  时，CN30 燃烧相位推迟至上止点后  $10^{\circ}\text{CA}$  左右。在相同直喷时刻下，低十六烷值燃料燃烧相位的推迟会导致放热速率升高。但是，直喷时刻推迟至上止点前  $3^{\circ}\text{CA}$ ，CN30 由于燃烧相位严重推迟，导致燃烧主要发生在膨胀行程，放热速率随之下降，燃烧速率峰值也随之下降。上述研究表明，采用低十六烷值燃料时（十六烷值低于 40），直喷时刻不能晚于上止点前  $5^{\circ}\text{CA}$ ，否则会导致燃烧恶化。

图 6-7 进一步比较了直喷时刻、十六烷值对燃烧滞燃期以及燃烧持续期的影响。从图 6-7(a) 中可以看到，随着燃料十六烷值的降低，滞燃期逐渐增大，具体为在直喷时刻较为提前时，十六烷值每降低 10 个单位，滞燃期增加约  $1^{\circ}\text{CA}$ ；随着直喷正时的推迟至上止点前  $3^{\circ}\text{CA}$ ，十六烷值每降低 10 个单位，滞燃期增大至  $3^{\circ}\text{CA}$ 。从图 6-7(b) 中可以看到，随着燃料十六烷值的降低，燃烧持续期逐渐缩短。这主要是由于滞燃期的增大会使得缸内燃油混合更均匀，燃烧速率加快，缩短了燃烧持续期（十六烷值为 30，且直喷正时为上止点前  $3^{\circ}\text{CA}$  时除外）。

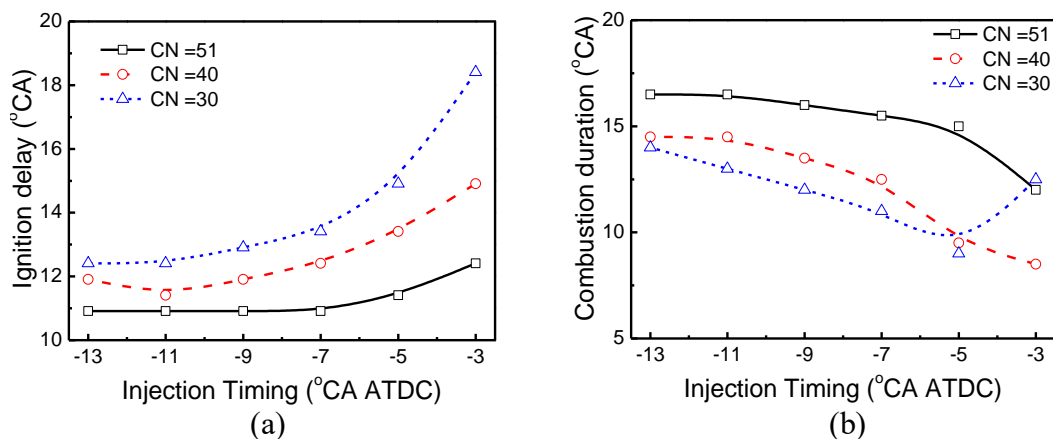


图 6-7 不同十六烷值燃料随直喷时刻变化燃烧相位的对比

Figure 6-7 Comparison of the combustion parameters with different cetane number fuels under different injection timing in PCCI mode

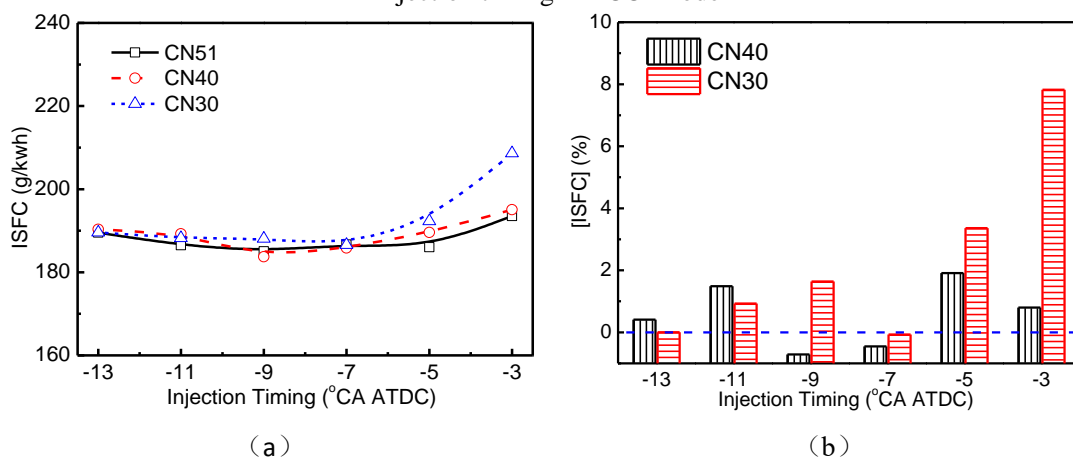


图 6-8 不同十六烷值燃料随直喷时刻变化指示油耗的对比

Figure 6-8 Comparison of the ISFC with different CN fuels under different injection timings

燃烧相位的差异以及燃烧持续期的变化还会导致燃烧效率的变化。图 6-8 对比了直喷时刻、燃料十六烷值对指示油耗的影响。图 6-8 (a) 中, 在直喷时刻早于上止点前  $7^{\circ}\text{CA}$  时, 指示油耗差异较小, 这主要是由于虽然降低十六烷值会使得燃烧相位推迟, 使得燃烧做功不充分; 但此时燃烧持续期缩短, 有利于增大燃烧等容度, 提高做功效率。在上述两个条件的耦合作用下, 指示油耗差异不大。随着直喷时刻的进一步推迟, 采用低十六烷值燃料尤其是直喷 CN30 时燃烧相位过于推迟, 燃烧相位的推迟同时伴随着燃烧持续期的增大, 从而使得效率降低, 指示油耗增大。图 6-8 (b) 将五组分模型燃料指示油耗归化为 100%, 比较了直喷时刻、燃料十六烷值对指示油耗的影响。从图中可以看到, 在直喷时刻早于上止点前  $7^{\circ}\text{CA}$  时, 十六烷值的降低导致油耗变化较小, 均在 2% 以内; 但当直喷时刻推迟至上止点前  $5^{\circ}\text{CA}$ , 十六烷值的降低使得油耗显著增大。从油耗角度出发, 直喷低十六烷值燃料, 直喷时刻不能晚于上止点前  $7^{\circ}\text{CA}$ , 以避免油耗的恶化。

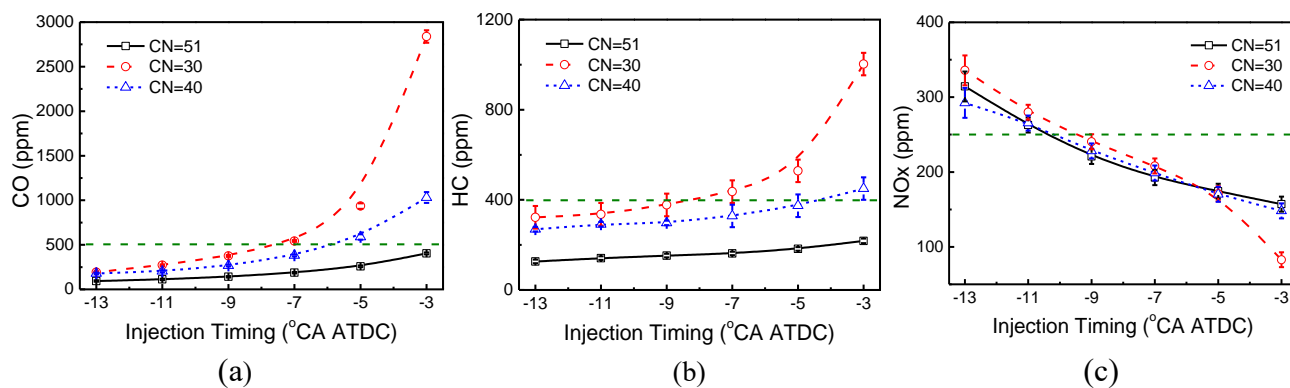


图 6-9 直喷时刻、燃料十六烷值对主要气体排放的影响

Figure 6-9 Effects of fuels with different cetane number on gas emissions under different direct injection timing

图 6-9 对比了直喷时刻、燃料十六烷值对主要气体排放的影响。从图 6-9(a)中可以看到，在直喷时刻较为提前时，不同十六烷值燃料 CO 排放差异较小，CN40、CN30 的 CO 排放较 CN51 高 100ppm 左右。随着直喷正时的推迟，不同十六烷值燃料 CO 排放差异逐渐增大，且 CO 排放随着十六烷值的降低而增大。这主要是由于两个方面的原因，CO 排放主要受缸内温度及可燃混合气均匀程度共同决定，在直喷时刻较早时，缸内燃烧配合活塞上行，能达到更高的温度、压力条件，从而有利于 CO 氧化，使得该直喷时刻下，燃料组分的差异对 CO 排放影响较小；随着直喷时刻的推迟，缸内燃烧逐渐处于活塞下行阶段，高温持续时间缩短，不利于 CO 氧化，且此时低十六烷值燃料燃烧相位由于较低的压燃活性更为推迟。此外，低十六烷值燃料由于具有高比例的异构烷烃成分，在燃烧过程中更易生成不饱和中间产物，最终使得采用低十六烷值燃料产生更高的 CO 排放。以 500ppm 为限值，直喷 CN40 时刻不能晚于上止点前 5°CA、直喷 CN30 时刻不能晚于上止点前 7°CA，以保持 CO 排放低于 500ppm。

图 6-9(b)比较了直喷时刻、燃料十六烷值对 HC 排放的影响。从图中可以看到 HC 排放随着直喷时刻的变化规律与 CO 大致相同，即随着直喷时刻的推迟，HC 排放差异逐渐增大；随着直喷燃料十六烷值的降低，HC 排放逐渐增大。HC 排放主要受缸内燃烧温度、边界层燃料浓度决定，在挥发性大致相同的条件下，十六烷值较低的燃料燃烧相位较为推迟，缸内高温持续时间缩短，从而导致较高的 HC 排放。此外，直喷 CN40、CN51 时，HC 排放在不同的直喷正时下均维持在相对稳定的水平，而燃料十六烷值为 30 时，在直喷时刻较为推迟条件下，HC 排放迅速增大，这主要是由于此时低十六烷值燃料燃烧相位过于推迟，缸内燃烧温度较低，这都使得 HC 排放增大。从图 6-9(b)还可以看到，为使得 HC 排放低于 400ppm，直喷 CN40 时刻不能晚于上止点前 5°CA，直喷 CN30 时刻不能晚于上止点前 9°CA。

图 6-9(c)比较了直喷时刻、燃料十六烷值对 NOx 排放的影响。从图中可以看到，在直喷时刻早于上止点前 5°CA 时，直喷不同十六烷值燃料 NOx 排放差异不大（40ppm 以内），只在直喷 CN30 且直喷时刻较为推迟时，NOx 排放较低，这主要是由于此时缸内燃烧相位过于推迟，燃烧温度大幅降低，从而使得 NOx 排放较低。为有效控制 NOx 排放，直喷不同十六烷值燃料时刻不能早于上止点前 11°CA。

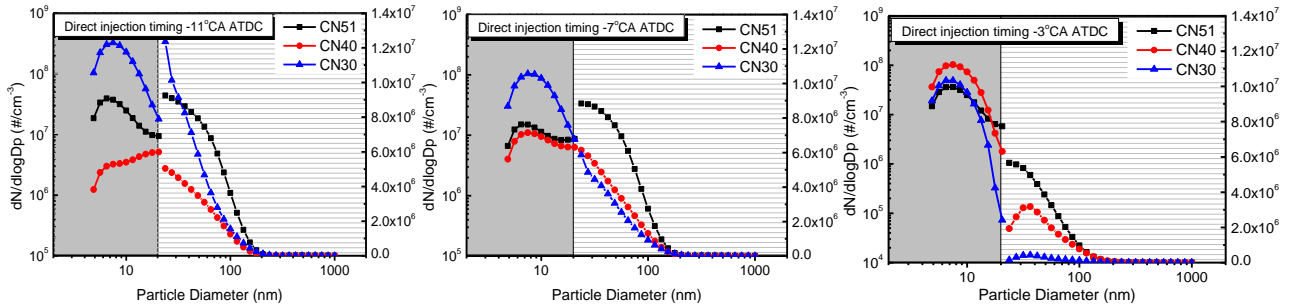


图 6-10 不同直喷时刻下，缸内直喷不同十六烷值燃料对颗粒物排放的影响

Figure 6-10 Effects of fuels with different cetane number on the particle size distributions under different direct injection timing

图 6-10 给出了直喷时刻、燃料十六烷值对颗粒物粒径分布的影响。从图中可以看到，粒径低于 20nm 颗粒物数目浓度随着直喷时刻的变化规律十分复杂，在直喷时刻为上止点前 11°C、7°C，CN30 粒径峰值最高，CN51 次之，CN40 最低；直喷时刻推迟至上止点前 3°C 时，直喷不同十六烷值燃料粒径峰值均较高，且彼此间差异缩小。超细颗粒物受缸内燃油喷雾、缸内燃烧温度历程控制，一方面，燃油缸内喷雾雾化过程存在波动性；另一方面，不同直喷时刻下，滞燃期大小顺序为 CN30>CN40>CN51，低十六烷值燃料更易于与缸内空气混合均匀，但同时由于滞燃期的增大，导致缸内燃烧相位推迟，高温持续时间缩短，从而不利于超细颗粒物的氧化，这尤其导致了在燃烧相位较为推迟，滞燃期较长时，直喷不同十六烷值燃料细颗粒物浓度均较高。

对于粒径大于 20nm 颗粒物，在直喷时刻为上止点前 11°C 时，直喷 CN30 颗粒物数目浓度在粒径低于 50nm 时较高，在粒径高于 50nm 时，CN51 颗粒物数目浓度最高，其次 CN30，CN40 颗粒物数目浓度最低；直喷时刻推迟至上止点前 7°C，粒径大于 20nm 的颗粒物数目浓度随十六烷值变化的趋势均为：CN51>CN40>CN30。上述结果表面，降低燃料十六烷值可有效改善粒径大于 20nm 的颗粒物排放。从图 6-10 中可以发现，直喷时刻为上止点前 7°C 时，可以使得颗粒物峰值较低。

## 6.2.2 预喷比、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响

在采用较高 EGR 率以增大滞燃期从而促进燃油混合的同时，为进一步提高缸内燃油与空气混合质量，学者广泛采用多段喷射实现 PCCI 燃烧优化。多段喷射模式下，缸内燃烧过程是预喷柴油与主喷柴油甚至是后喷柴油燃烧的耦合作用。燃料的燃烧活性以及燃料物化特性对预喷柴油的混合、燃烧以及对后续主喷燃油的雾化、燃烧均至关重要。本部分进一步讨论燃料燃料活性（十六烷值）、预喷燃油比例对采用两段喷 PCCI 模式燃烧和排放特性的影响。前文研究结果表明，直喷时刻为上止点前 7°C 时，排放均在合理范围内，因此在本部分主喷时刻控制为上止点前 7°C，而预喷时刻控制为上止点前 50°C，通过改变预喷比研究不同预喷比条件下，燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响。

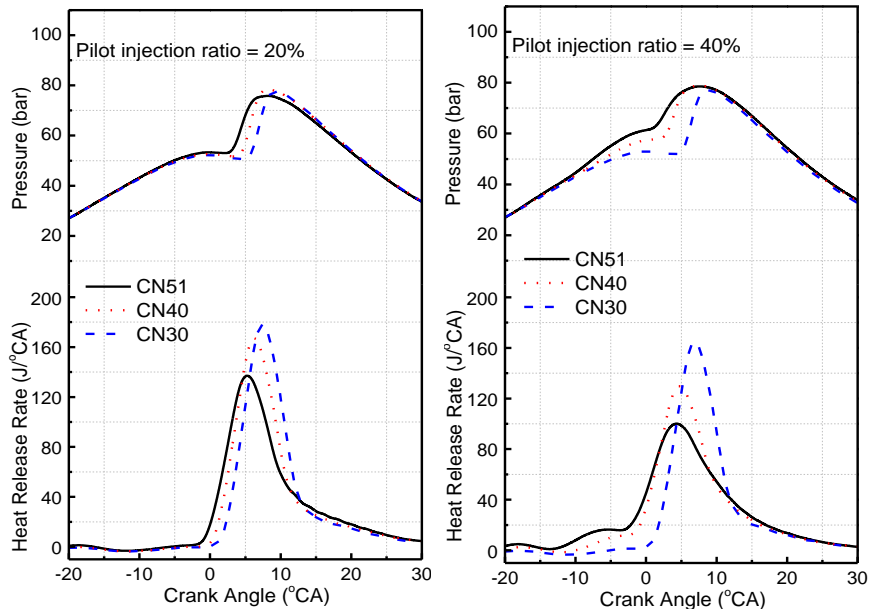


图 6-11 预喷比、燃料十六烷值对缸内压力及放热率曲线的影响

Figure 6-11 Effects of pilot injection ratio on in-cylinder pressure and heat release rate with different cetane number fuels

图 6-11 给出了预喷比、燃料十六烷值对缸内压力及放热率曲线的影响。从图中可以看到，预喷比较低时，预喷燃料量较少，受燃料浓度限制，预喷燃料低温燃烧过程不明显；随着预喷比的增大，预喷燃料低温燃烧放热量增大，而缸内最高放热速率峰值降低。造成缸内最高放热峰值降低的主要原因是主喷油量降低，以及预喷燃油燃烧过于严重，从而造成燃烧集中程度下降。直喷 CN30、预喷比达到 40% 左右时，预喷柴油依然没有出现明显的低温燃烧，这表明降低直喷燃料的十六烷值对抑制预喷燃料的过早燃烧至关重要。

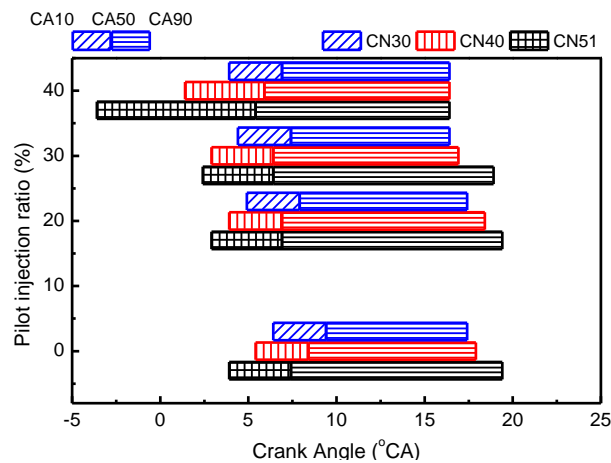


图 6-12 缸内直喷不同十六烷值燃料，预喷比对燃烧相位的影响

Fig. 6-12 Effects of pilot injection ratio on the combustion phase with different cetane number fuels

图 6-12 比较了预喷比、燃料十六烷值对燃烧相位的影响。从图中可以看到，在不同预喷比下，随着十六烷值的降低，CA10 不断推迟，这主要是由于十六烷值表征燃料反应活性，随着十六烷值的降低，燃料反应活性随着下降，从而使得 CA10 推迟。CA10 的推迟导致 CA50



略有推迟，但在预喷比低于 30%时，CA90 不断提前，这主要得益于滞燃期的增大促进了缸内燃料的混合，从而使得燃烧更为集中。

从图 6-12 还可以看到，随着预喷比的增大，CA10 逐渐提前，这表明滞燃期逐渐缩短。这主要是由于预喷柴油量的增大会强化缸内燃烧氛围，在主喷柴油喷入缸内后，主喷柴油的预混合部分会与预喷柴油叠加，形成反应活性更强的浓度分布，从而使得滞燃期缩短。在预喷比达到 40%，直喷 CN51 时，预喷燃料由于浓度而直接燃烧，从而使得 CA10 大幅提前；降低燃料十六烷值至 40 即可有效抑制由于较高预喷柴油量导致的预喷柴油的直接燃烧。对比预喷比及十六烷值可以发现，预喷比的提高、十六烷值的增大均会使得燃烧相位提前，其中在本试验条件下，十六烷值对燃烧相位影响更大。

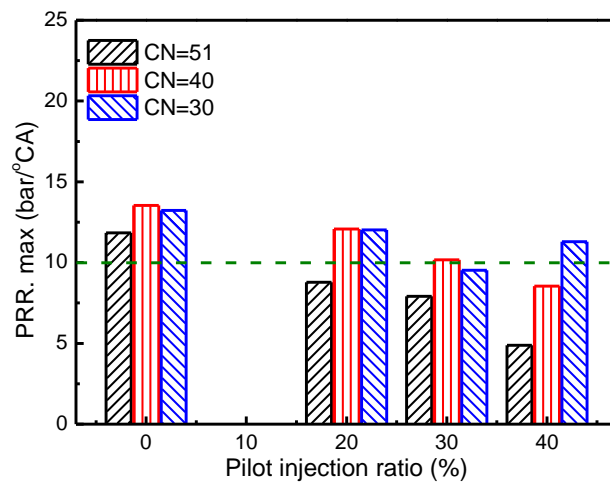


图 6-13 预喷比、十六烷值对缸内最大压力升高率的影响

Fig. 6-13 Effects of pilot injection ratio on maximum pressure rise rate with different cetane number fuels

图 6-13 给出了预喷比、燃料十六烷值对缸内最大压力升高率的影响。从图中可以看到，直喷 CN40、CN51 时，缸内最大压力升高率随着预喷比的增大而逐渐降低，这主要是由于预喷十六烷值较高的燃料时，随着预喷比的增大，燃料放热曲线峰值逐渐降低，从而使得缸内最高压力升高率逐渐降低。而直喷低十六烷值燃料时（CN30），缸内最高压力升高率先降低后增大。最大压力升高率的降低主要是由于滞燃期的缩短，不利于燃料与空气的混合。而 CN30 最高压力升高率先降低后升高主要是由于在随着预喷比达到 40%，CN30 燃烧相位没有过于提前，此时预喷柴油量的增大促进了燃料的混合，从而使得最高压力升高率增大。从图中还可以看到，采用预喷比为 30%时，直喷不同十六烷值燃料缸内最大压力升高率均保持在 10bar/°CA 以下。



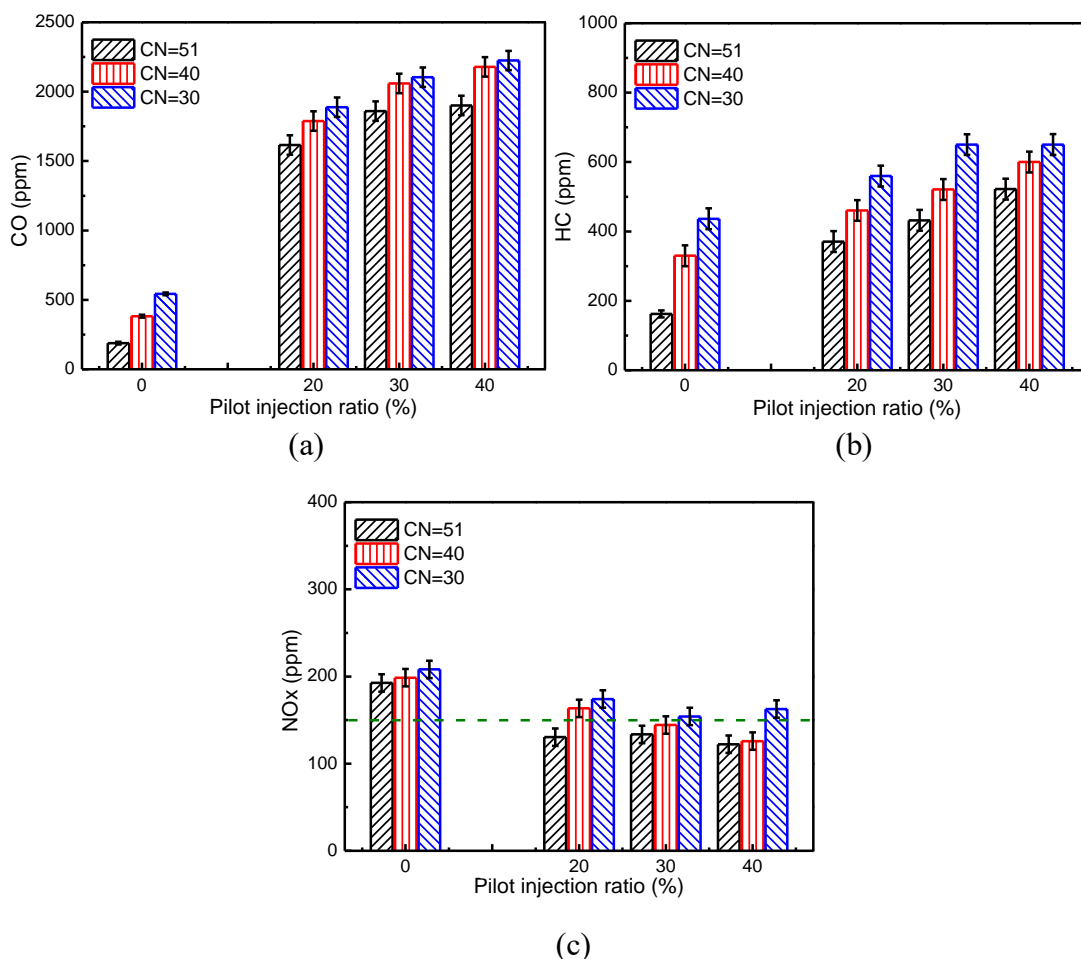


图 6-14 预喷比、燃料十六烷值对气体排放的影响

Fig. 6-14 Effects of fuel cetane number on gas emissions under different pilot injection ratios

图 6-14 对比了预喷比、燃料十六烷值对气体排放的影响。图 6-14 (a) 中, 随着预喷比的增大, CO 排放不断增大。这主要是由于预喷比的增大会导致预喷燃料量增大, 燃油喷入缸内后碰壁燃油量增加, 进一步导致随着预喷比的增大 CO 排放增大。对比直喷不同十六烷值燃料, 随着十六烷值的降低, 在不同预喷比下, CO 排放均不断增大。这主要是由于十六烷值的降低, 导致缸内燃烧相位推迟, 缸内高温持续时间缩短, 不利于 CO 的氧化, 从而使得随着十六烷值的降低, CO 排放逐渐增大。此外, 低十六烷值燃料中, 异构烷烃比例的增大会导致烯烃类燃烧中间产物的生成, 不利于燃油的充分氧化, 从而使得 CO 排放升高。此外, 采用预喷策略是 CO 排放的主要生成源。

图 6-14 (b) 给出了预喷比、燃料十六烷值对 HC 排放的影响。从图中可以看到, HC 排放随着燃料十六烷值以及预喷比变化的趋势与 CO 大致相同, 即 HC 排放随着预喷比的增大也不断增大, 且随着十六烷值的降低, HC 排放逐渐增大。随着预喷比的增大, 燃油碰壁量增加, 从而导致边界层内燃料量增加, 使得 HC 排放随着预喷比的增大不断增大。十六烷值的降低会导致缸内高温持续时间缩短, 从而不利于 HC 排放的充分氧化。

图 6-14 (c) 对比了预喷比、燃料十六烷值对 NOx 排放的影响。随着预喷比的增大, NOx



排放逐渐降低。这主要是由于预喷比的增大会使得主放热峰值降低，从而使得缸内温度降低，进一步导致 NO<sub>x</sub> 排放降低。对比直喷不同十六烷值燃料，随着十六烷值的降低，NO<sub>x</sub> 排放略有增大，这主要是由于低十六烷值燃料能降低并推迟预喷燃烧相位，使得主燃烧峰值更高，从而使得缸内温度达到更高，导致 NO<sub>x</sub> 排放较高。

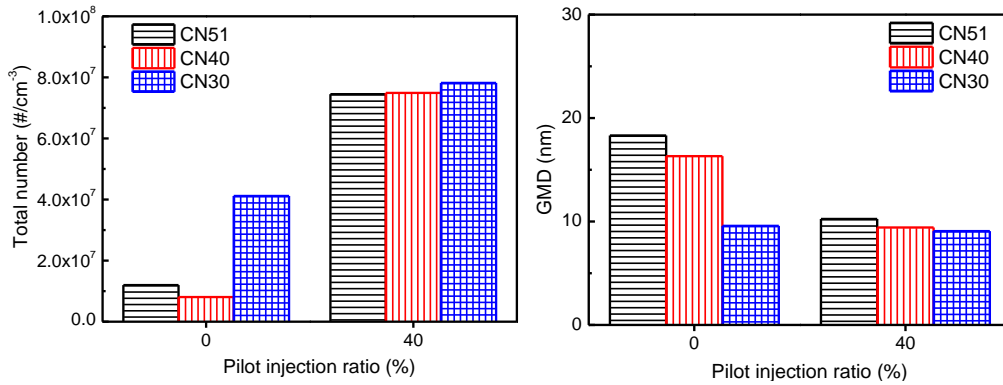


图 6-15 预喷比、燃料十六烷值对颗粒物排放的影响

Fig. 6-15 Effects of fuel cetane number on the particle size distributions under different pilot injection ratio

图 6-15 给出了预喷比、燃料十六烷值对颗粒物排放的影响。从图中可以看到，采用多段喷时颗粒物数目浓度较高，其中直喷 CN51、CN40 颗粒物数目浓度是单喷模式下的 8 倍；直喷 CN30 颗粒物数目浓度是单喷模式下的 2 倍，这是由于多段喷射模式时，第一段和第二段喷均会发生雾化碰壁现象，且预喷燃料由于较长的时间未发生燃烧，液相油滴会逃逸至边界层，造成更高的核膜态颗粒物。此外，对比 CN51、CN40 可以发现，多段喷射模式下颗粒物几何平均直径会下降 50% 左右，这主要是由于燃料在缸内破碎雾化产生更多的小液滴，导致生成更高比例的核膜态颗粒物，从而使得颗粒物粒径减小。

### 6.2.3 预喷时刻、燃料十六烷值对 PCCI 模式的影响

上述研究发现，采用 30% 预喷比时，NO<sub>x</sub> 排放较单喷策略下降 25% 左右（约 50ppm），但此时 CO 排放增大至单喷策略下 4 倍、HC 排放增大至单喷策略时 2 倍。这可能是由于预喷时刻较早，预喷燃料逃逸至边界层，针对 PCCI 模式预喷时刻还需进一步优化。

图 6-16 给出了预喷时刻分别为上止点前 60°CA、30°CA 时，直喷燃料十六烷值对缸内压力及放热率的影响。从图中可以看到，在预喷时刻较早时，预喷燃油低温放热不明显，放热速率低于 10J/°CA；预喷时刻推迟至上止点前 30°CA 时，预喷燃油喷入缸内后发生燃烧，且燃烧放热速率峰值达到 20J/°CA。在预喷时刻较早时，随着燃料十六烷值的降低，主放热相位逐渐推迟（约 1.5°CA），在预喷比推迟至上止点前 30°CA 时随着直喷燃料十六烷值的降低，低温放热相位逐渐推迟（约 2~3°CA），但主放热相位大致相同，放热峰值逐渐增大，其中 CN30 放热峰值升高明显，约 10J/°CA。从图 6-16 可以发现，预喷时刻的推迟会使得预喷柴油在上止点前 20°CA 开始发生燃烧，一方面使得燃烧集中程度下降，放热峰值降低，但同时也会使得缸内高



温持续期会显著增大。

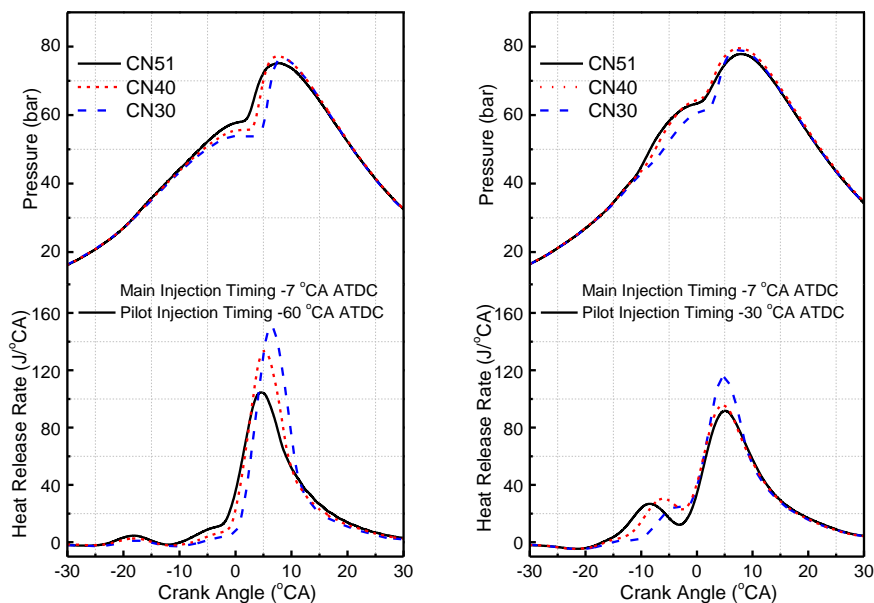


图 6-16 预喷时刻、燃料十六烷值对缸内压力及放热率的影响

Fig. 6-16 Effects of fuel cetane number on in-cylinder pressure and heat release rate under different pilot injection timing

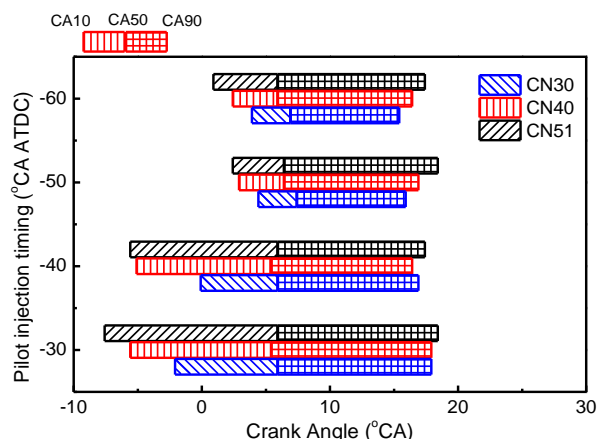


图 6-17 预喷时刻、燃料十六烷值对燃烧相位的影响

Fig. 6-17 Effects of CN and pilot injection timing on the combustion phase

图 6-17 进一步对比了预喷时刻、燃料十六烷值对燃烧相位的影响。从图中可以看到当预喷时刻为上止点前  $60^{\circ}\text{CA}$ 、 $50^{\circ}\text{CA}$  时， $\text{CA}_{10}$  受主喷时刻控制，且燃料十六烷值每降低 10 个单位， $\text{CA}_{10}$  推迟  $1^{\circ}\text{CA}$  左右；当预喷时刻推迟至上止点前  $40^{\circ}\text{CA}$ 、 $30^{\circ}\text{CA}$  时，直喷不同十六烷值燃料  $\text{CA}_{10}$  均提前至上止点前，这主要是由于预喷时刻推迟到上止点前  $40^{\circ}\text{CA}$  后，预喷柴油发生低温放热，导致  $\text{CA}_{10}$  较为提前。且此时直喷 CN51、CN40 时， $\text{CA}_{10}$  差异在  $1\sim 2^{\circ}\text{CA}$  左右（上止点前  $5\sim 7^{\circ}\text{CA}$ ），而直喷 CN30 时， $\text{CA}_{10}$  推迟  $4\sim 6^{\circ}\text{CA}$  左右（上止点前  $1\sim 2^{\circ}\text{CA}$ ）。此外，燃烧中值时刻方面，在采用不同预喷时刻、不同十六烷值燃料时， $\text{CA}_{50}$  的差异在  $1^{\circ}\text{CA}$  以内。燃烧终值时刻方面：在预喷时刻较早时， $\text{CA}_{90}$  随着十六烷值的降低而提前；在预喷时



刻推迟时,不同十六烷值燃料对 CA90 影响不大。在不同的预喷时刻下,随着十六烷值的降低,燃烧持续期均不断缩短。

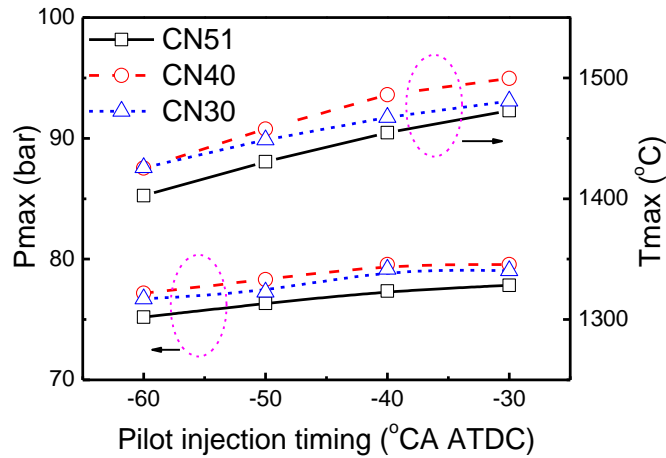


图 6-18 预喷时刻、燃料十六烷值对缸内最高压力和最高气体平均温度的影响

Fig. 6-18 Effects of fuel cetane number and pilot injection timing on the Pmax and Tmax

图 6-18 对比了不同预喷时刻下,直喷不同十六烷值燃料对缸内最高压力及最高温度的影响。从图 6-18a 可以看到,随着预喷时刻的推迟,缸内最高压力及最高温度均不断增大。其中,缸内最高压力、最高温度的高低顺序为 CN40>CN30>CN51。缸内峰值压力、温度主要由缸内燃烧相位、燃烧速率共同决定的。燃烧相位较为提前,会使得缸内压力较早提高,从而使得缸内峰值压力更高,配合活塞上行的压缩作用,也会使得缸内峰值温度升高;燃烧速率较快,会使得放热更为集中,缸内的温度压力上升更快,从而使得缸内最高温度和最高压力较高。在预喷时刻较为提前时,燃烧主放热峰值受燃料十六烷值决定,直喷 CN51 时燃烧相位较早,受混合主喷燃料混合时间限制,燃烧速度不高;而直喷 CN30 时滞燃期较长,燃烧相位较为推迟,此时活塞下行,缸内压力、温度随之下降,从而导致最高压力、温度不会很高。从而使得 CN40 最高压力和温度较高, CN30 次之, CN51 最低。

在预喷时刻推迟至上止点前 40°CA 时,缸内燃烧分为两个阶段即以预喷燃料燃烧为主的低温放热区间和以主喷燃料燃烧为主的主放热区间。此时,缸内最高压力、温度受低温燃烧相位以及主燃烧速率共同控制。直喷 CN51 时,由于燃料十六烷值较高,低温放热相位较早,导致燃烧持续期较长,且此时主放热峰值较低,从而导致缸内最高压力、温度不高;直喷 CN40 时,低温燃烧相位略有推迟,但仍能使得缸内压力较早提高,而主喷燃料燃烧与 CN51 差异不大,但由于此时燃烧较于 CN51 更集中,从而使得缸内峰值温度、压力更高;直喷 CN30 时,低温燃烧相位进一步推迟,导致缸内压力曲线抬升推迟,不利于燃烧获得更高的温度压力,但此时主喷柴油燃烧速率较 CN40、CN51 较高,放热更为集中,从而使得缸内峰值温度介于 CN40 和 CN51 之间。

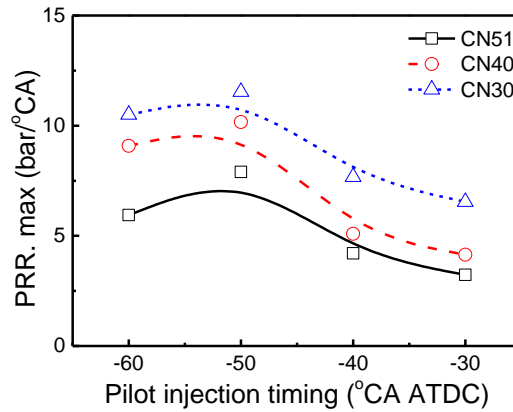


图 6-19 不同预喷时刻下，直喷不同十六烷值燃料对最高压力升高率的影响

Fig. 6-19 Effects of fuel cetane number on the maximum pressure rise rate under different pilot injection timing

图 6-19 对比了不同预喷时刻下，直喷不同十六烷值燃料对缸内最高压力升高率的影响。从图 6-19 可以看到，随着预喷时刻的推迟，缸内最高压力升高率先增大后减小。最大压力升高率主要取决于缸内可燃混合气均匀程度以及燃烧相位。在预喷时刻较早时，放热处于单峰状态，随着预喷时刻的推迟，燃烧相位略有推迟，从而使得缸内最高压力升高率有所上升；随着预喷时刻推迟至上止点前 40°CA，燃烧模式转化为包括预喷燃料燃烧的低温燃烧阶段和主喷燃料燃烧的主燃阶段的两阶段燃烧，预喷燃料的早燃导致燃烧滞燃期较短，主喷燃料不能与缸内空气充分混合，且随着预喷时刻的进一步推迟，预喷燃料燃烧相位提前，这导致在预喷时刻推迟至上止点前 40°CA 时，随着预喷时刻的推迟，缸内最高压力升高率逐渐降低。

对比不同十六烷值燃料，随着十六烷值的降低，缸内最大压力升高率逐渐升高。这主要是由于，无论是在预喷较早的单峰燃烧状态，还是由于预喷推迟导致的缸内两阶段燃烧，低十六烷值的燃烧相位均较高十六烷燃料推迟，在主喷时刻均为上止点前 7°CA 的条件下，滞燃期的增大有利于燃油的混合，提高缸内油气混合均匀程度，从而使得最高压力升高率随着十六烷值的降低而升高。

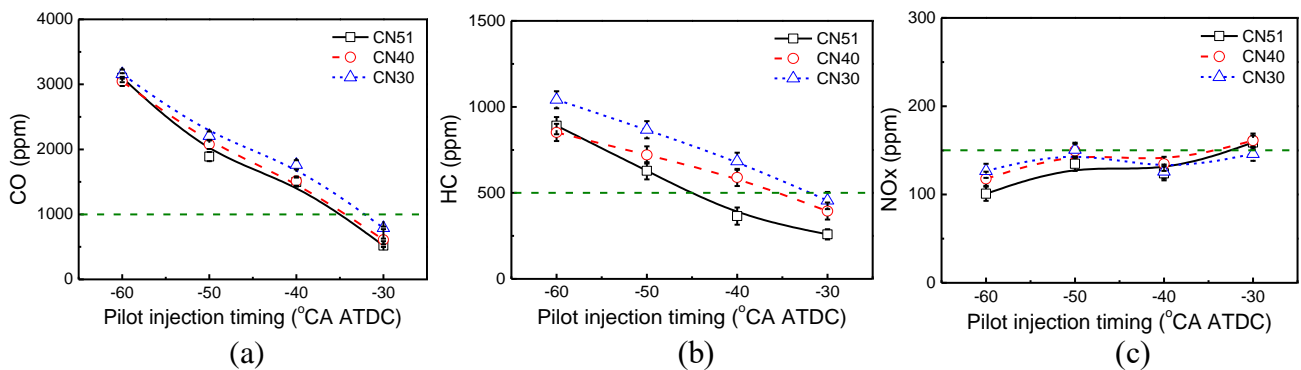


图 6-20 预喷时刻、燃料十六烷值对气体排放的影响

Fig. 6-20 Effects of fuel cetane number and pilot injection timing on the gas emissions

图 6-20 给出了预喷时刻、燃料十六烷值对气体排放的影响。图 6-20 (a) 中，CO 排放随着预喷时刻的推迟而迅速降低，这可能是由于燃油与气缸及活塞壁面相互作用决定的。在预喷较早时，预喷燃油更多的直接喷到缸壁上，由于缸壁温度较低，造成燃油挥发困难，且伴随活



塞运动，更多的碰壁的燃油被挤进活塞环、活塞、气缸盖三者之间的低温区间，从而导致该部分燃料在膨胀形成中虽被释放，但仍不易充分燃烧，导致较高的 CO 排放；随着预喷时刻的推迟，燃油碰壁逐渐转变为喷到活塞上端面，活塞较高的温度有利于燃油的气化，减少了进入低温区间的燃油浓度，从而抑制了 CO 排放的生成。此外，随着预喷时刻的推迟，缸内燃烧温度逐渐升高，且尤其是预喷时刻推迟至上止点前  $40^{\circ}\text{CA}$  时，预喷燃油的早燃使得缸内高温持续时间显著延长，从而使得 CO 排放迅速降低。预喷时刻推迟至上止点前  $30^{\circ}\text{CA}$ ，CO 排放降低至  $1000\text{ppm}$  以下，其中直喷 CN51 时，CO 排放低至  $500\text{ppm}$  左右。

图 6-20 (b) 中 HC 排放变化规律与 CO 类似，随着预喷时刻的推迟不断降低。燃油碰壁从较低温度的气缸壁面转变为温度略高的活塞端面，配合较长的滞燃期以及缸内工质运动，从而有利于预喷燃料蒸发，有效抑制 HC 排放；此外，在预喷时刻较为推迟时，缸内预喷燃油的燃烧使得缸内高温持续时间较长，这也有利于边界层中燃料的氧化，降低 HC 排放。预喷时刻推迟至上止点前  $30^{\circ}\text{CA}$ ，HC 排放低至  $500\text{ppm}$  以下。

图 6-20 (c) 比较了预喷时刻、燃料十六烷值对  $\text{NO}_x$  排放的影响。在较宽的预喷时刻范围内， $\text{NO}_x$  排放均保持稳定。虽然预喷时刻的改变导致燃烧从单峰模式转化为双峰燃烧模式，缸内最高温度也略有上升，但在双峰模式中，低温放热阶段整体温度较低， $\text{NO}_x$  排放较少， $\text{NO}_x$  主要生成应该在主喷柴油燃烧阶段，但此时由于放热集中程度下降，主放热峰值下降，从而使得  $\text{NO}_x$  排放不能达到很高。预喷时刻、燃料十六烷值对  $\text{NO}_x$  影响有限， $\text{NO}_x$  排放整体稳定在  $100$  至  $150\text{ppm}$  左右。

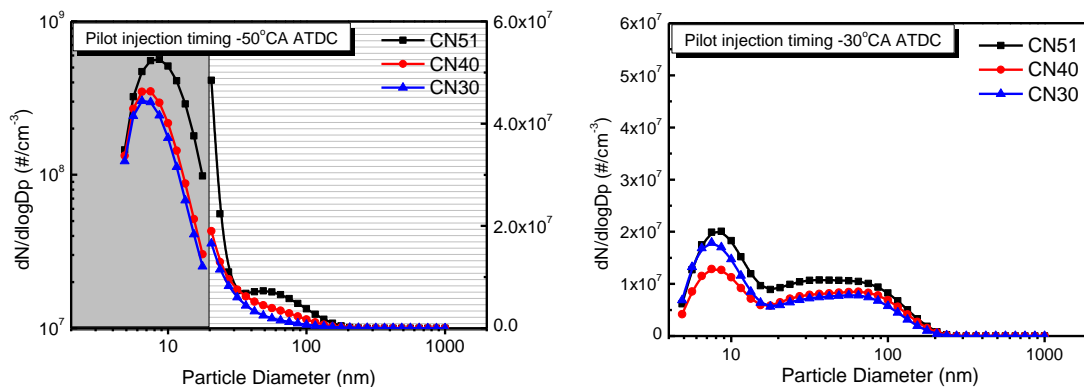


图 6-21 预喷时刻、燃料十六烷值对颗粒物排放的影响

Fig. 6-21 Effects of fuel cetane number and pilot injection timing on the particle size distributions

图 6-21 给出了不同预喷时刻下，缸内直喷不同十六烷值燃料对颗粒物排放的影响。从图中可以看到，随着预喷时刻的推迟， $20\text{nm}$  以下粒径的颗粒物粒径峰值大幅降低，在预喷时刻为上止点前  $50^{\circ}\text{CA}$  时，颗粒物粒径峰值介于  $2 \times 10^8$  与  $5 \times 10^8$  之间，随着预喷时刻推迟至上止点前  $30^{\circ}\text{CA}$ ，颗粒物粒径峰值降低至  $1.2 \times 10^7$  与  $2 \times 10^7$  之间。这主要是由于预喷时刻较早时，燃油喷射至温度更低的气缸壁面，造成较该部分燃油蒸发雾化困难；而预喷时刻推迟至上止点前  $30^{\circ}\text{CA}$  时，燃油碰壁主要为喷射至温度略高的活塞端面，这有利于燃油的蒸发，且此时缸内燃烧相位提前、燃烧温度更高、高温持续时间更长，从而使得小颗粒物被充分氧化燃烧。



从图 6-21 可知，推迟预喷时刻可有效降低颗粒物排放。

### 6.3 喷油策略、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响

燃料的挥发性对缸内直喷压燃发动机中燃料的破碎、雾化、蒸发等过程影响较大。尤其在采用多段喷射 PCCI 模式下，降低早喷燃油的贯穿距、减少燃油碰壁对抑制 CO、HC 排放至关重要。上述研究表明，PCCI 模式会有效抑制 NO<sub>x</sub> 排放至 150ppm 左右，但由于采用缸内早喷的模式，CO 排放较高。为此，本部分基于五组分模型燃料，采用更为轻质的正十二烷部分代替五组分中的十六烷、十八烷来调制燃料挥发性，在保证燃料十六烷值为 51 的条件下，重点考察燃料挥发性对 PCCI 模式燃烧和排放的影响，同时结合燃料挥发性、喷油策略进一步优化 PCCI 模式燃烧。

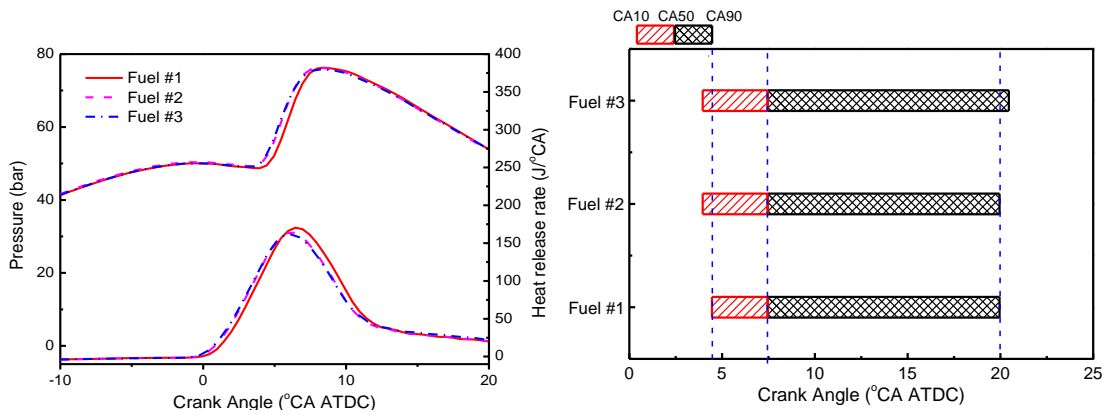


图 6-22 不同挥发性燃料 PCCI 模式缸内压力、放热率曲线及燃烧相位的对比

Figure 6-22 Effects of the volatility of fuels on the in-cylinder pressure, heat release rate and combustion phase in PCCI mode

图 6-22 给出了直喷时刻为上止点前 7°CA 时，燃料挥发性对缸内压力、放热速率及燃烧相位的影响。从图 6-22 可以看到，挥发性较高的 Fuel #2 及 Fuel #3 较 Fuel #1 燃烧始点略提前 0.5°CA，放热峰值略低于 Fuel #1。这可能是由于随着燃料挥发性的提高，燃料在缸内更易雾化、蒸发，从而更快形成可燃混合气浓度分布，使得燃烧相位略有提前，但同时由于滞燃期的减短，导致燃料与缸内空气混合时间尺度降低，预混合燃烧比例下降，从而使得放热峰值降低。

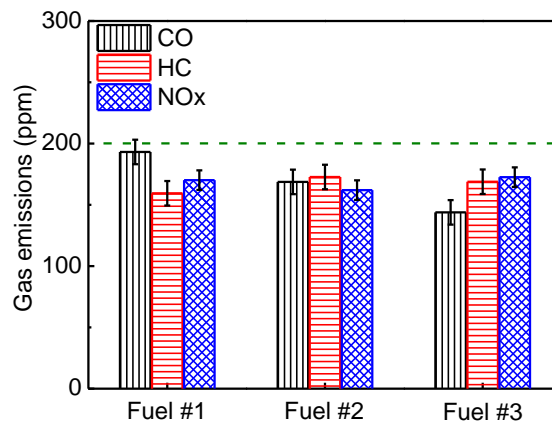


图 6-23 不同挥发性燃料对 PCCI 模式下主要气体排放的影响

Figure 6-23 Effects of the volatility of fuels on the gas emissions in PCCI mode



图 6-23 对比了不同挥发性燃料在 EGR 率 50%、直喷时刻为上止点前 7°CA 时主要气体排放。从图中可以看到，在单喷策略下，加强燃油挥发性会使得 CO 排放降低，这主要是由于燃油的挥发性提高后，会有利于燃油在喷雾过程中的气化过程，促进燃油与空气的混合，从而使得 CO 排放降低。但直喷不同燃油挥发性燃料，HC、NO<sub>x</sub> 排放稳定在 160~170ppm 之间。

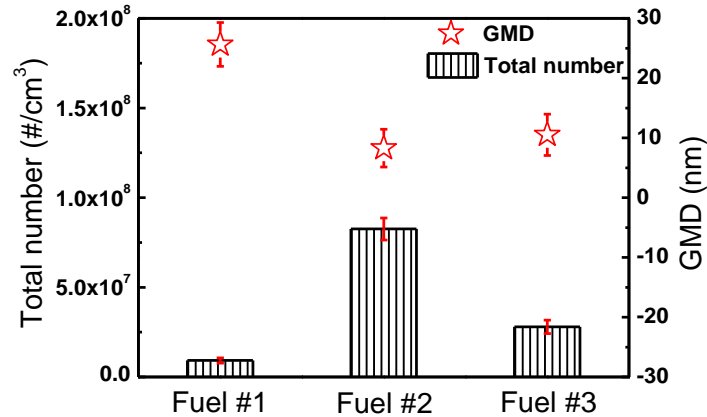


图 6-24 不同挥发性燃料对 PCCI 模式下颗粒物总数目及几何平均直径的影响

Figure 6-24 Effects of the volatility of fuels on the total number and GMD of the particles in PCCI mode

图 6-24 对比了不同挥发性燃料在 EGR 率 50%、直喷时刻为上止点前 7°CA 时颗粒物总数目及几何平均直径。从图中可以看到，颗粒物数目排放高低顺序为 Fuel#2> Fuel#3 Fuel#1。提高燃油的挥发性，燃油的更易破碎，从而形成更多的小液滴，从而使得颗粒物总数增加；进一步提高燃油挥发性，燃油的蒸发特性被加强，从而促进了破碎后的燃油液滴蒸发，进而降低了小颗粒物数目，导致 Fuel #3 颗粒物数目浓度下降。与之对应的是，颗粒物平均几何直径大小顺序为 Fuel#2> Fuel#3 Fuel#1，这也佐证了 Fuel#2 中生成的颗粒物主要为小粒径核膜态。

### 6.3.1 预喷比、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响

上述研究发现，单喷模式下燃料挥发性的提高在有助于抑制 CO 排放，直喷 Fuel#3 时 CO 排放较 Fuel#1 下降 25%左右（降低约 50ppm）。为进一步研究燃料挥发性对 PCCI 模式燃烧和排放的影响，本节进一步分析了预喷比、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响。

图 6-25 对比了预喷比、燃料挥发性对缸内压力和放热率曲线。从图中可以看到，在控制燃料十六烷值相同时，调制燃料轻重质成分比例，改变燃料挥发性对缸内燃烧历程影响有限。尤其在预喷比较低时（20%），表征燃料挥发性由弱到强的 Fuel #1、Fuel #2、Fuel #3 缸内压力及放热率曲线均基本一致。但在预喷比较高时，挥发性较强的 Fuel #3 低温放热速率略低于 Fuel #1 和 Fuel #2，这可能是由于挥发性高的 Fuel #3 在喷雾过程中更易气化、混合，低温燃烧核心区燃料浓度降低，从而使得放热速率略有降低，这同时也导致低温燃烧区曲轴转角对应的缸内压力值略低。此外，在预喷比为 40%时，缸内放热峰值高低为 Fuel #3> Fuel #2> Fuel #1。这一方面是由于预喷燃料放热速率降低，更多的预喷燃料与主喷柴油一起燃烧；燃料挥发性的提高，促进了燃料缸内蒸发，从而提高了预混合的燃烧比例。上述两因素均会使得放热峰值提高。



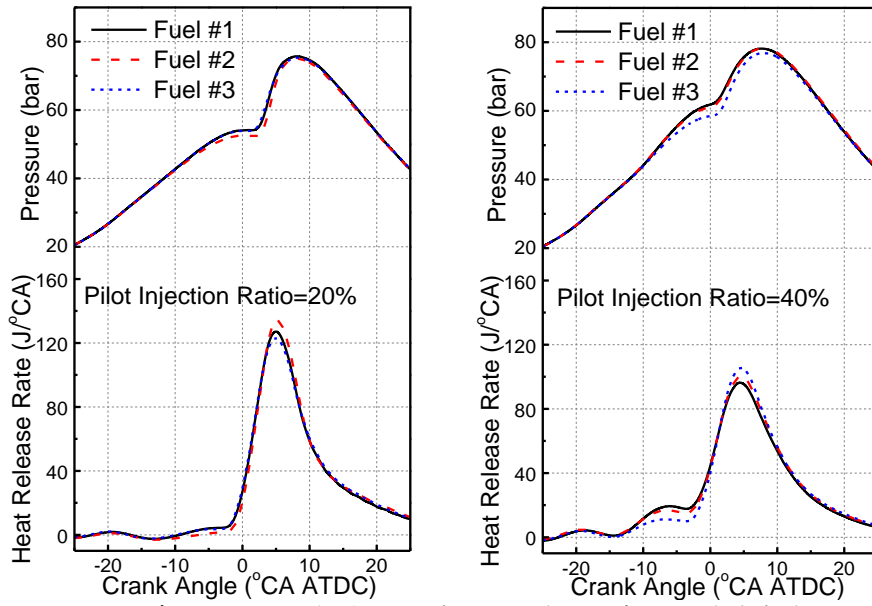


图 6-25 不同预喷比下，不同挥发性燃料 PCCI 模式缸内压力放热率曲线的对比

Figure 6-25 Effects of the volatility of fuels on the in-cylinder pressure and heat release rate in PCCI mode under different pilot injection ratio

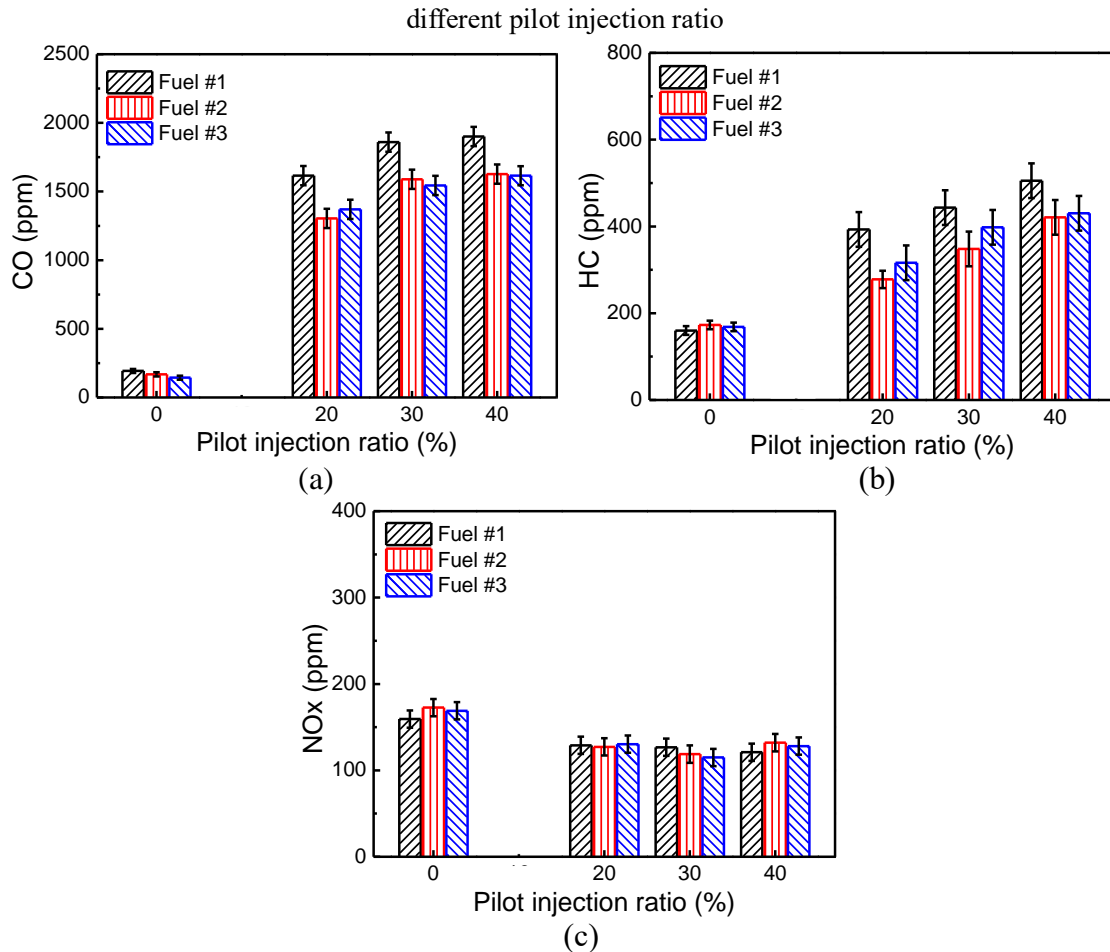


图 6-26 预喷比、燃料挥发性对 PCCI 模式气体排放影响的对比

Figure 6-26 Effects of the volatility of fuels and pilot injection ratio on the gas emissions in PCCI mode

图 6-26 给出了预喷比、燃料挥发性对气体排放的影响。从图 6-26 (a) 可以看到，直喷挥



发性较高的燃料可以有效改善 CO 排放。在 PCCI 模式中,燃油的过早预喷会导致油束喷壁面,尤其在直喷压力 120MPa 条件下。通过调制燃料挥发性可以改善燃油碰壁及后续附壁燃油的挥发,但无法从根本解决碰壁后燃油雾化问题,尤其随着预喷比的增大,更多的燃料会发生碰壁,这弱化了燃油挥发性对 CO 的改善作用,从而导致 CO 排放随着预喷比的增大而不断升高。

在缸内早喷模式下,燃料挥发性的改变对 HC 排放也有改善作用。如前文所述, PCCI 模式 HC 排放的主要来源是预喷燃油碰壁后导致边界层燃料浓度增加。采用高挥发性燃料会促进碰壁燃油的蒸发,从而有利于燃油随着活塞运动与缸内空气掺混,抑制 HC 排放。NO<sub>x</sub> 排放方面,在不同预喷比下,三种挥发性燃料 NO<sub>x</sub> 排放差异均在 15ppm 以内。正如上文讨论,本部分控制燃料挥发性不同,燃料十六烷值相同,在此条件下,燃料缸内燃烧相位、速率接近,缸内温度历程基本一致,导致 NO<sub>x</sub> 排放均在同一水平(120~180ppm 左右)。采用预喷策略会使得 NO<sub>x</sub> 降低 40ppm 左右。

### 6.3.2 预喷时刻、燃料挥发性对 PCCI 模式的影响

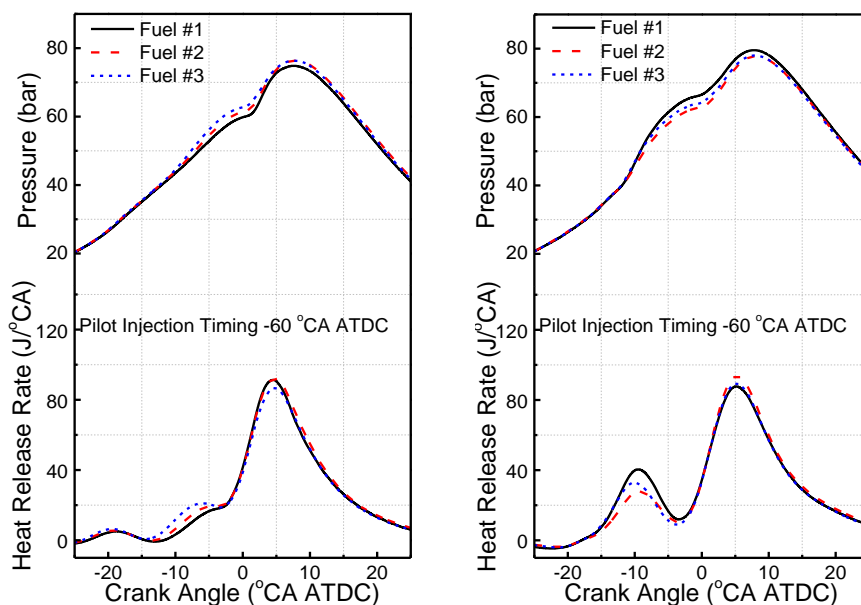


图 6-27 预喷时刻、燃料挥发性对 PCCI 模式缸内压力放热率曲线影响的对比

Figure 6-27 Effects of the volatility of fuels and pilot injection timing on the in-cylinder pressure and heat release rate in PCCI mode

图 6-27 给出了预喷比 30%时,预喷时刻、燃料挥发性对缸内压力及放热历程的影响。从图中可以看到,在不同的预喷时刻下,保持燃料十六烷值相同,直喷不同挥发性燃料缸内压力及放热率特征基本一致。在预喷时刻为上止点前 60°CA 时,缸内燃烧放热呈现三阶段过程,即预喷燃油第一阶段燃烧、第二阶段燃烧以及主喷燃油的燃烧。其中直喷不同燃油第一阶段燃烧过程基本一致;第二阶段燃烧在曲轴转角介于上止点前 15~5°CA 区间,高挥发性燃料放热速率略高于低挥发性燃料;主喷燃料燃烧仅放热峰值略有差异,其中挥发性较高的 Fuel#3 放热



峰值略低,这可能是由于直喷 Fuel#3 时,第二阶段燃烧放热较多,消耗了更多的燃料,从而使得第三阶段燃烧量略有下降,从而导致放热峰值略有下降。

在预喷时刻为上止点前 30°CA 时,由于预喷时刻较为推迟,预喷燃料未发生两阶段燃烧,放热率曲线为两阶段燃烧,即预喷燃料的燃烧以及主喷燃油的燃烧。其中,预喷燃料放热速率峰值高低顺序为 Fuel#1>Fuel#3>Fuel#2。在预喷时刻推迟至上止点前 30°CA 时,燃料碰壁转变为撞击活塞端面,在喷雾过程中,挥发性差的重质组分相对轻质组分有更大的运动惯量,在较短的撞击雾化过程中,挥发性作用被弱化,取而代之的是撞击惯量对燃油碰撞、飞溅的雾化作用加强,从而导致该曲轴转角区间,挥发性最差的 Fuel#1 放热速率反而得到加强。

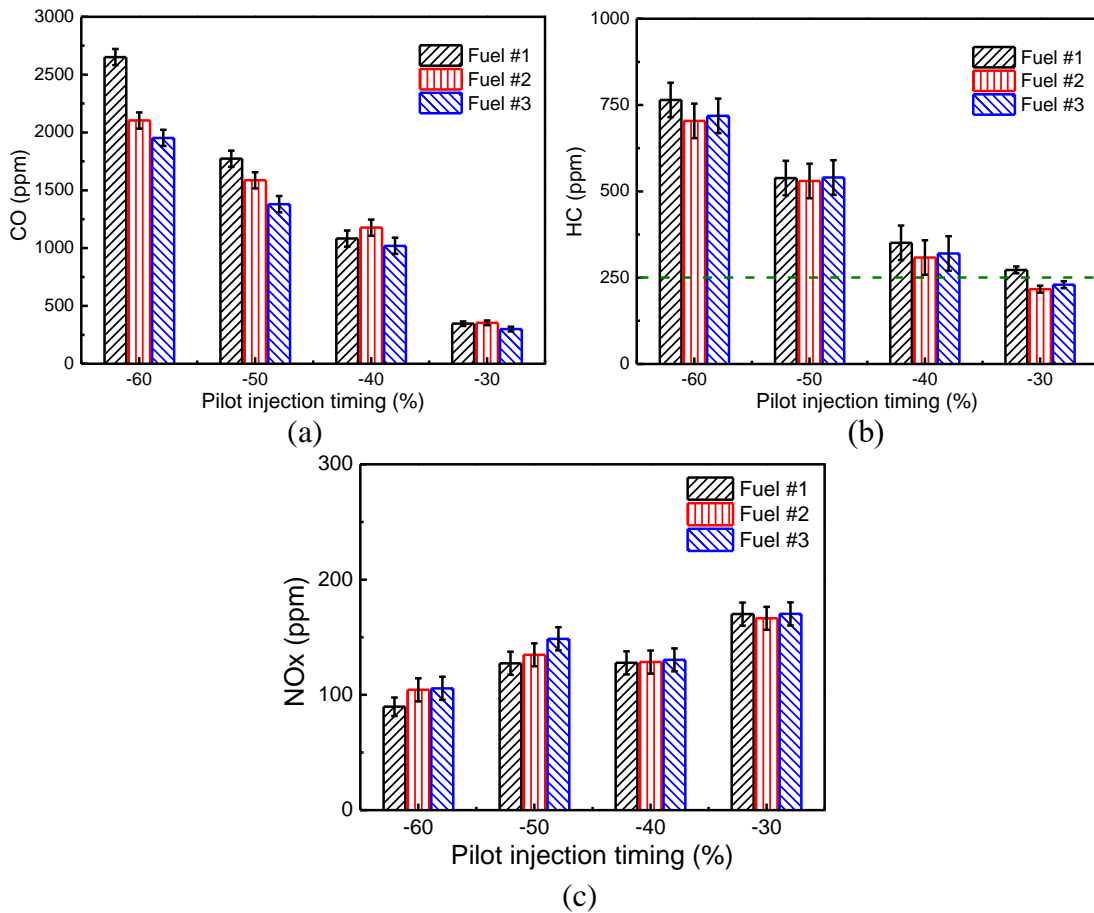


图 6-28 预喷时刻、燃料挥发性对 PCCI 模式气体排放的影响

Figure 6-28 Effects of the volatility of fuels and pilot injection timing on the gas emissions in PCCI mode

图 6-28 给出了预喷时刻、燃料挥发性对主要气体排放的影响。从图 6-28 中可以看到,对比不同挥发性燃料,发现在预喷时刻早于上止点前 40°CA 时,直喷挥发性较高的燃料可有效降低 CO 排放,但随着预喷时刻的推迟,这种 CO 排放差异减小。这主要是由于预喷时刻较为提前时,燃料碰壁以碰撞气缸壁面为主,气缸壁面较低的温度不利于燃料挥发,且此时缸内温度、压力条件不足以支持预喷燃料自燃,从而使得预喷燃料有较长的蒸发时间,这使得挥发性较强的燃料更易气化、燃烧,从而对 CO 排放抑制作用明显。随着预喷时刻的推迟,缸内预喷燃油的碰壁逐渐转变为撞击活塞端面,且此时缸内温压条件具备燃料自燃条件,预喷柴油直喷



后会直接燃烧，此时燃油挥发性对燃料混合的作用被弱化。

HC 排放方面，随着预喷时刻的推迟，HC 排放迅速降低。且在预喷时刻为上止点前 30°CA 时，直喷 Fuel#2、Fuel#3 的 HC 排放略低于 Fuel#1，其中 Fuel#2、Fuel#3 中 HC 排放低于 250ppm，接近单喷模式 HC 排放水平。NO<sub>x</sub> 排放随着预喷时刻的推迟有增大的趋势。这主要是由于预喷时刻的推迟导致预喷燃料喷入后不久燃烧，使得缸内高温持续时间增多，从而使得 NO<sub>x</sub> 排放略有升高。

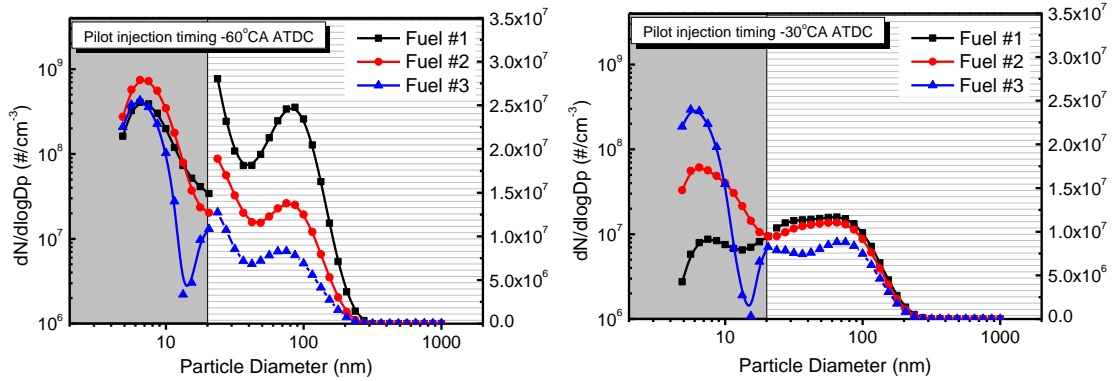


图 6-29 预喷时刻、燃料挥发性对 PCCI 模式颗粒物粒径分布的影响

Figure 6-29 Effects of the volatility of fuels on the particle size distribution in PCCI mode under different pilot injection timing

图 6-29 研究了预喷时刻、燃料挥发性对颗粒物粒径分布的影响。从图 6-29 中可以看到，燃油挥发性与颗粒物排放关系复杂，在预喷时刻为上止点前 60°CA 时，直喷不同挥发性燃料粒径小于 20nm 的颗粒物浓度峰值接近，预喷时刻推迟至上止点前 30°CA 时，粒径小于 20nm 的颗粒物浓度峰值随着燃料挥发性的提高而不断增大，为 Fuel#3> Fuel#2> Fuel#1；在不同的预喷时刻下，提高燃料的挥发性均使得粒径介于 20nm 至 200nm 的颗粒物数目浓度降低，这主要是由于燃油挥发性的增强，促进了喷雾过程燃料的雾化，进而促进燃油空气混合，颗粒物数目浓度因此下降。

## 6.4 燃料十六烷值、挥发性对 PCCI 模式影响的归一化分析

考虑到前文调制燃料十六烷值、挥发性时，均是基于构建的五组分柴油模型燃料。为进一步解析燃料十六烷值以及挥发性对燃烧和排放的影响，将不同工况条件下排放及油耗参数无量纲化，以 CO 为例，定义无量纲参数 [CO]，针对不同十六烷值研究结果：

$$[CO] = \left( \frac{CO_i}{CO_{CN51}} - 1 \right) \times 100\%$$

类似的，针对不同挥发性试验结果：

$$[CO] = \left( \frac{CO_i}{CO_{Fuel\#1}} - 1 \right) \times 100\%$$



在实际研究过程中，CN51、Fuel #1 实质上是前文提出的五组分模型燃料，通过上两式计算，可将不同工况条件下燃烧及排放以五组分柴油模型燃料为基准，进行参数归一化分析，直观比较燃料十六烷值及挥发性对燃烧及排放的影响。

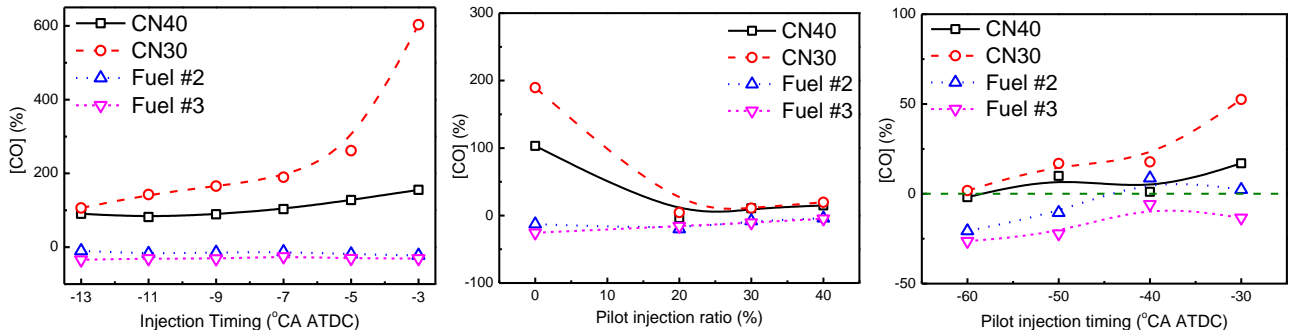


图 6-30 喷油策略、燃料十六烷值及挥发性对 CO 排放影响的归一化对比

Figure 6-30 Comparison of the effects of fuel injection strategies, cetane number and fuel volatility on CO emissions

图 6-30 对比了 PCCI 模式下，燃油喷射策略、燃料十六烷值以及挥发性对 CO 排放的影响。从图中可以看到，降低燃料十六烷值会使得 CO 排放增大，这尤其在缸内单喷模式下极为明显，其中在直喷 CN30 时，喷油时刻推迟至上止点前 3°CA，CO 排放会严重恶化，高于 CN51 达 600%。而提高挥发性，会使得 CO 排放略有降低，但这种降低有限，大部分条件下，提高燃料挥发性 CO 排放能降低 10%左右，在某些工况下，会改善 20%左右。

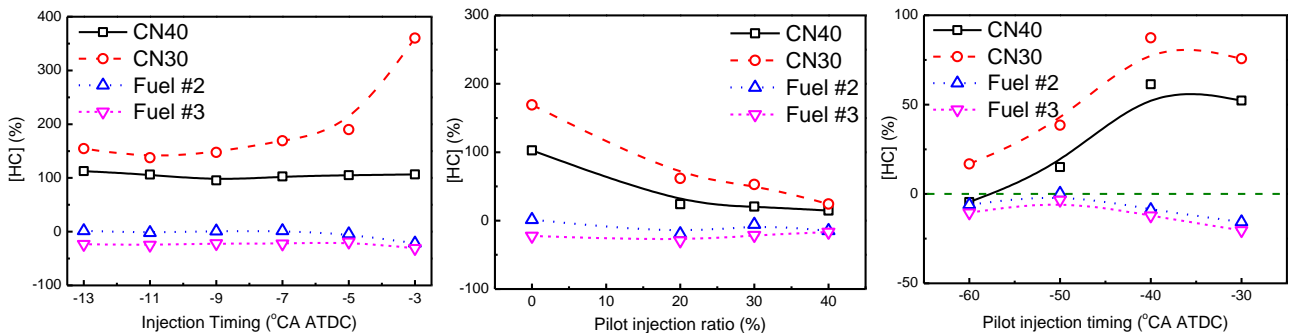


图 6-31 喷油策略、燃料十六烷值及挥发性对 HC 排放影响的归一化对比

Figure 6-31 Comparison of the effects of fuel injection strategies, cetane number and volatility on HC emissions

图 6-31 归一化比较了 PCCI 模式下，燃油喷射策略、燃料十六烷值以及挥发性对 HC 排放的影响。从图中可以看到，与 CO 排放类似，在单喷模式下，降低燃料十六烷值会使得 HC 排放显著增大，在直喷 CN30 时，直喷较为推迟条件下，HC 排放也会严重恶化，高达 CN51 的 4 倍多；在多段喷射模式下，十六烷值的降低也是导致 HC 排放增大的主要因素。提高燃油挥发性，会使得 HC 排放略有降低，与 CO 排放类似，大部分条件下，提高燃料挥发性 HC 排放可降低 10%左右，在某些工况下，会改善 20%左右。

图 6-32 对比了 PCCI 模式下，燃油喷射策略、燃料十六烷值以及挥发性对 NO<sub>x</sub> 排放的影响。燃料的十六烷值对 NO<sub>x</sub> 排放的影响有限，仅在单直喷、低十六烷值燃料晚喷条件下，NO<sub>x</sub> 会由于燃烧相位推迟，燃烧恶化导致 NO<sub>x</sub> 大幅降低；在其余控制条件下，NO<sub>x</sub> 排放差异在 15% 以内。此外，在多段预喷条件下，低十六烷值燃料（CN30）会导致 NO<sub>x</sub> 排放略有增大。相较于十六烷值，喷射不同挥发性燃料，NO<sub>x</sub> 排放无明显变化；仅在预喷时刻较为提前时，会使得



NO<sub>x</sub> 略有增大（20%左右），随着预喷时刻的推迟，NO<sub>x</sub> 排放逐渐接近柴油模型燃料。

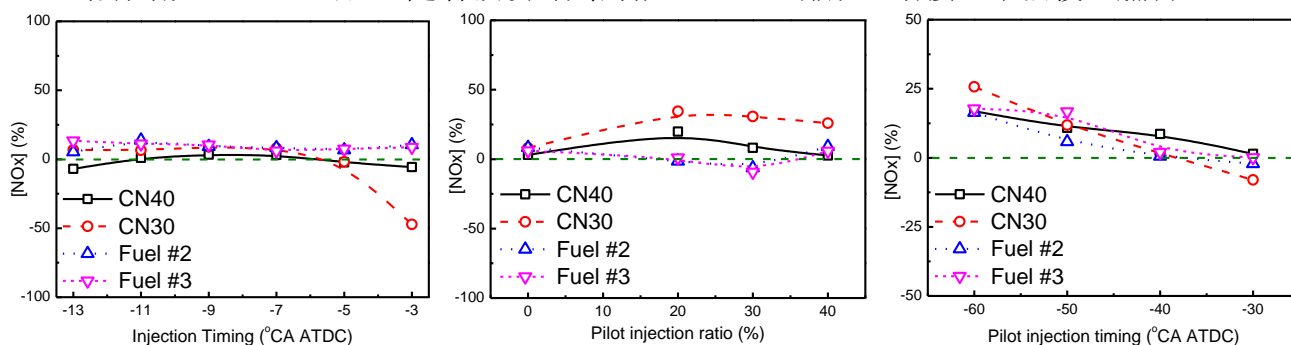


图 6-32 喷油策略、燃料十六烷值及挥发性对 NO<sub>x</sub> 排放影响的归一化对比

Figure 6-32 Comparison of the effects of injection strategies, cetane number and volatility on NO<sub>x</sub> emissions

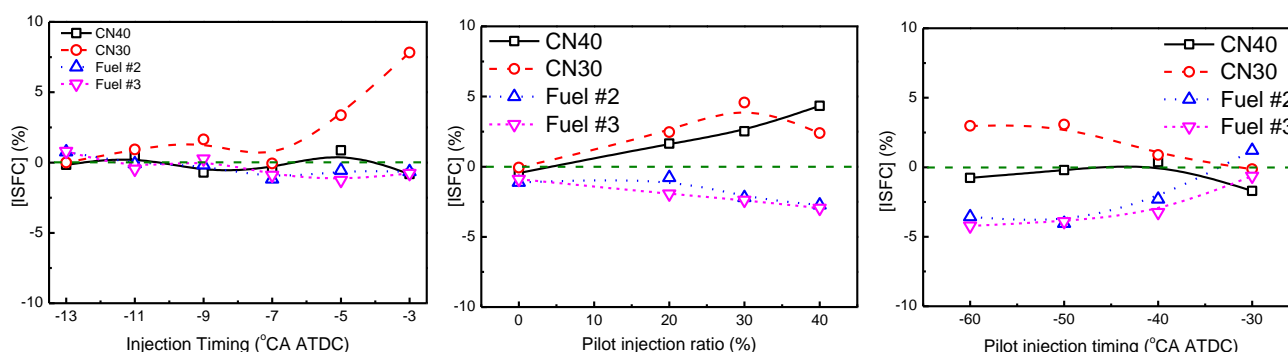


图 6-33 喷油策略、燃料十六烷值及挥发性对指示油耗影响的归一化比较

Figure 6-33 Comparison of the effects of injection strategies, cetane number and volatility on ISFC

图 6-33 给出了 PCCI 模式下，燃油喷射策略、燃料十六烷值以及挥发性对指示油耗影响的归一化比较。从图中可以看出，在单喷条件下燃料十六烷值、挥发性对指示油耗影响有限，差异均在 2% 以内，只在直喷 CN30 时，由于直喷时刻推迟到 5°CA 以后，由于燃烧恶化导致油耗升高。在不同预喷比下，随着预喷比的增大，降低燃料十六烷值会使得指示油耗增大，提高燃油挥发性会降低指示油耗，尤其在预喷比达到 30% 后，相同喷油策略下指示油耗会降低 2.5% 左右。不同预喷时刻下，在预喷较早时，直喷 CN30 会使得指示油耗增大 2.5% 左右；Fuel#2、Fuel#3 会降低指示油耗 3.5~4%。随着预喷时刻的推迟，指示油耗差异逐渐减小。

## 6.5 本章小结

PCCI 模式采用高 EGR 率结合缸内多段喷射的可燃混合气组织模式，燃料的反应活性对预喷柴油的缸内活化过程以及主喷柴油的燃烧滞燃期都具有重要影响；燃料的挥发性对缓解缸内预喷柴油的碰壁以及燃油在缸内整体分布规律十分关键。因此，在前文构建模型燃料的基础上，本章通过调制五组分柴油模型燃料的组分比例及成分，分别控制燃料的十六烷值和挥发性，对比研究了 PCCI 模式下燃料十六烷值及挥发性对燃烧和排放的影响。通过上述研究可得到以下结论：

- 1) 在相同直喷正时下，燃料十六烷值对燃烧相位起主导作用，改变燃料的挥发性，对燃烧相位和燃烧速率作用有限；降低直喷燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放增大；低十六烷值燃



料有助于抑制 PCCI 模式下预喷燃料的过早燃烧，且随着直喷燃料十六烷值的降低，燃烧持续期不断缩短，放热更集中，但会导致较高的压力升高率；

- 2) 燃料十六烷值与颗粒物粒径分布关系复杂，具体为在不同的直喷正时条件下，直喷不同十六烷值燃料颗粒物粒径峰值大小关系不固定，但降低燃料十六烷值对抑制粒径大于 20nm 颗粒物排放效果显著；
- 3) 单喷策略下，提高燃料挥发性可降低 CO 排放；在预喷比较低时，改善燃油的挥发性可有效降低预喷柴油导致的较高 CO 排放，但随着预喷比的增大，提高燃油挥发性对 CO 排放改善作用被弱化。在预喷时刻较早时，燃料挥发性对 CO 排放改善作用明显，但预喷时刻晚于 40°CA，提高燃料挥发性对 CO 排放的抑制能力下降；
- 4) 燃油挥发性与颗粒物排放关系复杂，在不同的预喷时刻下，提高燃料的挥发性均使得粒径介于 20nm 至 200nm 的颗粒物数目浓度降低；但在预喷时刻为上止点前 30°CA 时，粒径小于 20nm 的颗粒物浓度峰值随着燃料挥发性的提高而不断增大，为 Fuel#3> Fuel#2> Fuel#1。
- 5) 通过归一化分析发现，提高燃油挥发性在不同的喷油控制条件下均能改善 CO、HC 排放及指示油耗，降低燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放及指示油耗升高。在试验工况条件下，通过调整喷油策略，可实现低 NO<sub>x</sub>、低油耗工况，其中在保证 NO<sub>x</sub> 排放低于 200ppm 前提下，提高燃油挥发性更具降低指示油耗潜力。
- 6) 相对于传统压缩燃烧模式，采用 50%EGR 的单喷 PCCI 模式会有效抑制 NO<sub>x</sub> 排放，但会导致油耗有所增大；通过进一步采用两段喷射策略，可使得指示油耗低于 DI 模式，其中预喷比例、时刻的优化十分关键；在优化喷油策略的基础上，通过调制燃料十六烷值可使得低指示油耗低于 180g/kWh。



15001080





## 第七章 基于模型燃料的 RCCI 模式燃烧影响因素研究

### 7.1 概述

PCCI 模式由于采用缸内两段喷模式，对预喷柴油量的控制很难覆盖发动机全负荷范围。因而，基于两段喷的 PCCI 模式很难向大负荷扩展。在 2010 年左右，国际上提出了基于气道喷加缸内直喷的双喷油策略的化学反应动力学控制压缩燃烧模式（Reactivity Control Compression Ignition: RCCI）。RCCI 模式采用较高的 EGR 率（50%左右），同时结合气道喷射低反应活性燃料（如汽油），以抑制缸内相对均质燃料的早燃，缸内直喷高反应活性燃料（如柴油）控制燃烧相位。由于采用气道喷加缸内直喷的双喷油策略，RCCI 模式对燃油种类的适应性更好，系统地研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性（气道喷燃料比例）对燃烧过程的影响，对进一步拓展 RCCI 模式燃料选择范围，优化不同燃料在 RCCI 模式下的燃烧过程及排放产物均有重要意义。在本章试验过程中，气道喷射燃料成分见表 7-1，气道喷射压力 4bar，同时控制循环总喷油量为 45mg/cycle，EGR 率为 50%，缸内直喷压力 120MPa。

表 7-1 气道喷射汽油模型燃料组分  
Table 7-1 Compositions of port injected gasoline surrogate fuel

Components	Volume Fraction %			
	TRF95	TRF90	TRF80	TRF70
n-Heptane	10.8	15.7	25.7	35.7
iso-Octane	80.6	75.7	65.7	55.7
Toluene	8.6	8.6	8.6	8.6

### 7.2 直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧和排放的影响

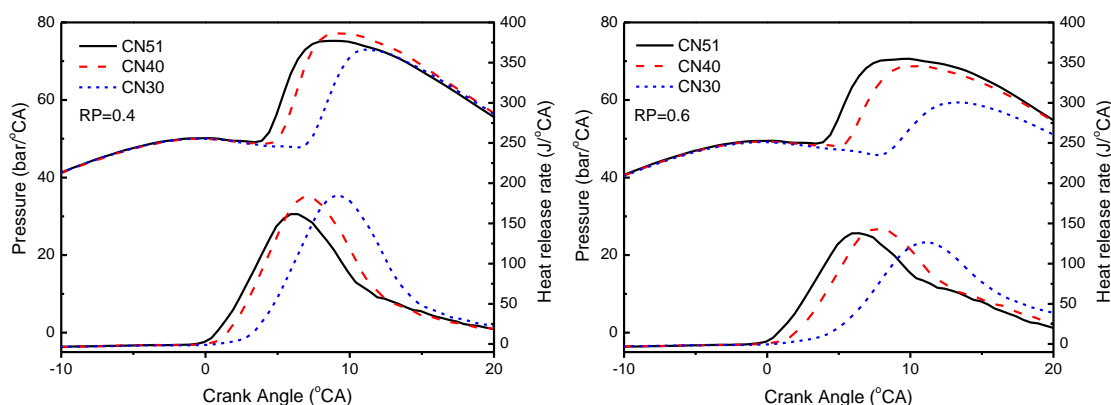


图 7-1 直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式缸内压力、放热速率的影响

Figure 7-1 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the in-cylinder pressure and heat release rate in RCCI mode

图 7-1 对比了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射 TRF95、直喷不同十六烷值燃料 RCCI 模式缸内压力及放热率曲线。从图中可以看到，随着十六烷值的降低，燃烧相位不断推迟。这



主要是由于随着直喷燃料反应活性的降低，缸内整体反应活性随之降低，从而使得燃烧相位不断推迟。在预混合率为 0.4 时，直喷燃料十六烷值的降低导致了放热率峰值的增大，这主要是由于滞燃期增大，促进了缸内可燃混合气的混合，提高预混合燃烧比例，从而使得放热率曲线峰值增大，尤其是直喷 CN40 时，放热速率的增大还导致了缸内压力上升更快，导致缸内峰值压力的升高。但随着预混合率上升到 0.6 时，直喷十六烷值较低的燃料并未使得放热率曲线峰值有明显的升高。这可能是由于燃烧相位较为推迟的原因，活塞下行，工质膨胀导致温度压力条件不能达到很高，使得放热速率随之下降。

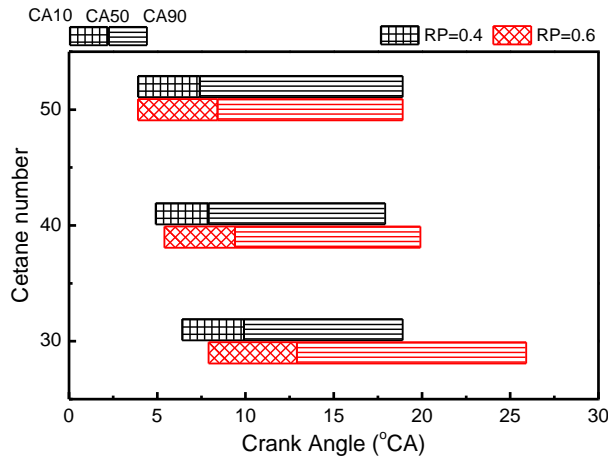


图 7-2 燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧相位的影响

Figure 7-2 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the combustion phase in RCCI mode

图 7-2 给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射 TRF95、缸内直喷不同十六烷值燃料 RCCI 模式下燃烧相位的对比。从图中可以看到，直喷燃料十六烷值的降低会使得 CA10 不断推迟，其中在预混合率为 0.4 时，十六烷值每下降 10 个单位，CA10 推迟 1°CA 左右；预混合率为 0.6 时，十六烷值每下降 10 个单位，CA10 推迟 2°CA 左右。在直喷 CN51 时，预混合率的增大对 CA10 几乎没有影响，但使得 CA50 略有推迟，而直喷 CN40、CN30 时，均使得 CA10、CA50 以及 CA90 推迟。随着十六烷值的降低，燃烧持续期逐渐增大，这表明燃烧速率下降。

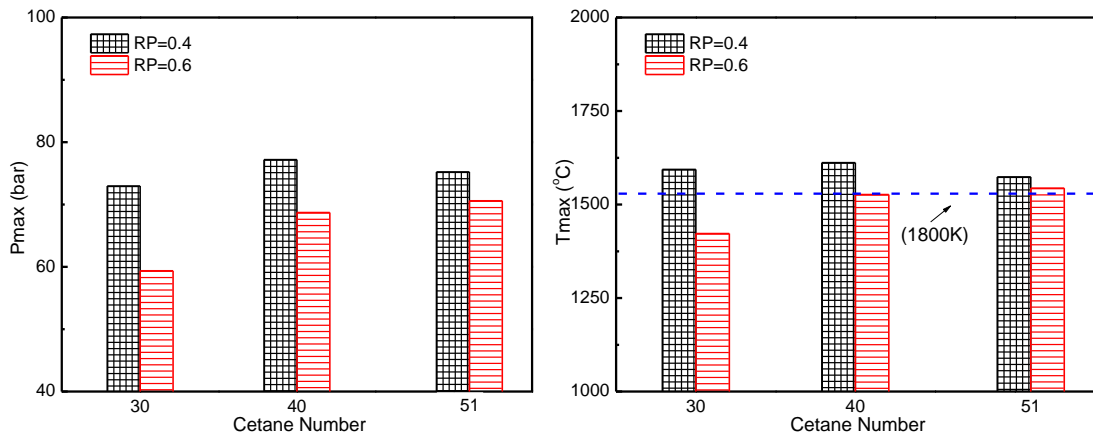


图 7-3 燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧缸内最高压力和最高气体平均温度的影响

Figure 7-3 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the Pmax and Tmax in RCCI mode

图 7-3 给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射 TRF95、直喷不同十六烷值燃料，



RCCI 模式下缸内最高压力及最高平均温度的对比。在图 7-3 中，在预混合率为 0.4 时，缸内最高压力及最高气体平均温度十分接近（缸内最高压力差异在 4bar 左右、最高气体平均温度差异在 40°C 左右）；而在预混合率为 0.6 时，随着十六烷值的增大，缸内最高压力及最高气体平均温度均不断增大。图 7-3 中还可以看到，相较于预混合率 0.4 时，直喷相同十六烷值燃料时，缸内最高压力、温度均较直喷预混合率 0.6 时高。对比图 7-2 时可知，随着预混合率的增大，CA10 到 CA50 间隔曲轴转角增大，且燃烧持续期也相应增大，这表明随着预混合率的增大，燃烧集中程度下降，放热速率下降，从而使得缸内最高压力、温度降低。此外，在预混合率为 0.6 时，缸内最高温度可控制在 1800K 以下。

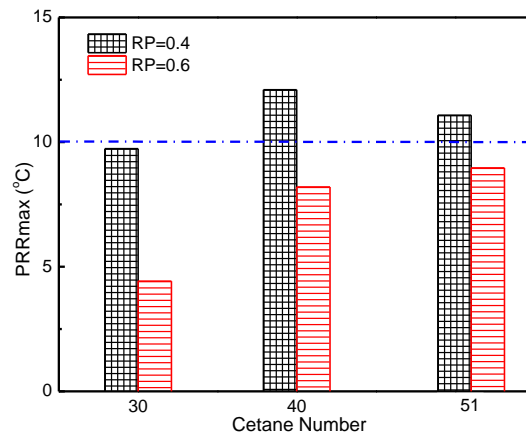


图 7-4 燃料十六烷值对 RCCI 模式缸内最高压力升高率的影响

Figure 7-4 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the PRRmax in RCCI mode

图 7-4 进一步给出了气道喷射 TRF95、缸内直喷不同十六烷值燃料，预混合率分别为 0.4、0.6 时，缸内最高压力升高率的对比。从图中可以看到，缸内最高压力升高率与缸内最高压力、温度趋势大致相同。缸内最大压力升高率受燃料混合均匀程度以及燃烧相位共同决定，在控制燃料挥发性大致相同以及相同直喷正时、喷油压力条件下，燃料混合均匀程度与滞燃期耦合密切。如前所述，预混合率为 0.4 时，随着直喷十六烷值的降低，缸内反应活性下降，滞燃期增大，有利于燃料混合，从而使得缸内最高压力升高率增大；随着直喷十六烷值的进一步增大，燃烧相位过于推迟，缸内温压条件下降，从而使得燃烧速率下降，缸内最高压力升高率下降。

预混合率为 0.6 时，缸内最大压力升高率随着十六烷值的降低不断降低，这主要是由于相对于预混合率为 0.4 时，预混合率为 0.6 会使得燃烧相位略推迟，而随着十六烷值的降低，燃烧相位会进一步推迟，从而使得燃烧更偏向于发生在膨胀行程中，从而使得缸内最高压力升高率降低。通过控制直喷燃料十六烷值、预混合率可控制缸内最大压力升高率低于 10bar/°CA。

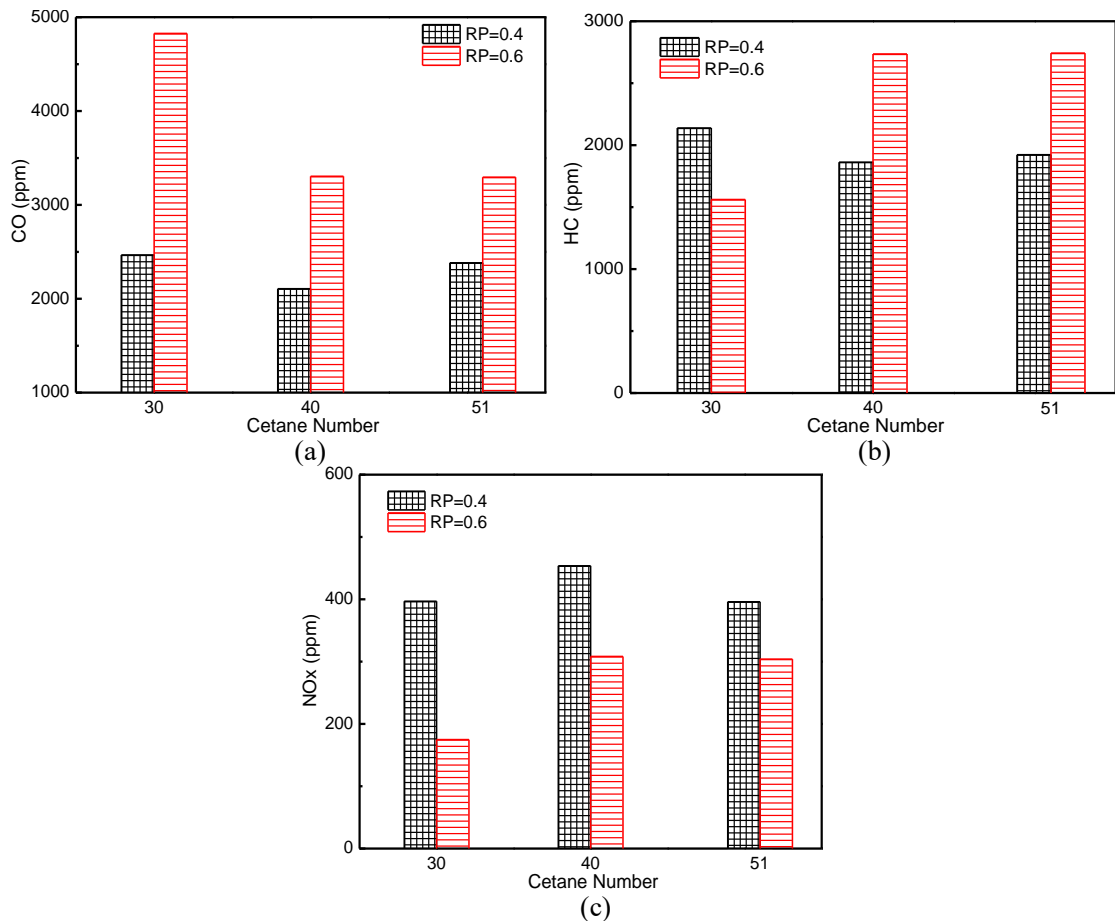


图 7-5 燃料十六烷值对 RCCI 模式主要气体排放的影响

Figure 7-5 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the main gas emissions in RCCI mode

图 7-5 为预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射 TRF95、缸内直喷燃料十六烷值对主要气体排放的影响。从图 7-5 (a) 中可以看到，预混合率为 0.4 时，CO 排放高低顺序为 CN30>CN51>CN40。预混合率较低时，随着十六烷值的降低燃烧相位不断推迟，但总体处于上止点附近，尤其是直喷 CN40 时，较长的滞燃期促进了后续的燃烧速率，使得缸内温度更高，从而使得 CO 排放较低。而直喷 CN30 时，较为推迟的燃烧相位导致缸内燃烧温度降低，不利于 CO 的氧化；此外，CN30 中较高的异构烷烃比例，使得其在燃烧过程中易于生成烯烃类中间产物，燃料不易充分氧化，从而使得 CO 排放最高。预混合率为 0.6 时，随着十六烷值的降低，CO 排放逐渐升高。一方面，预混合率较高时，使得缸内边界层燃料浓度增大；另一方面，预混合率较高时，燃烧相位的推迟导致缸内燃烧温度、高温持续时间逐渐下降，这都会导致 CO 的增大。从图 7-5 (a) 可知，预混合率对 CO 排放起主导作用。

图 7-5 (b) 中，在预混合率为 0.4 时，HC 排放随着十六烷值的增大略有下降，这主要是由于十六烷值的增大使得缸内燃烧温度升高，有利于 HC 的氧化。预混合率为 0.6 时，直喷 CN30 时 HC 排放最低，直喷 CN40 及 CN51 时，HC 排放较高。在直喷 CN30 时，较为推迟的燃烧相位虽然使得缸内燃烧温度总体不高，但在活塞下行阶段，尤其是边界层中 HC 被释放出来时，缸内仍然在燃烧，维持一定的燃烧温度，有利于边界层燃料的氧化，从而导致 HC 排放



最低。直喷 CN40 及 CN51 时，缸内燃烧温度由于燃烧相位的推迟，伴随活塞下行而降低，但缺乏 CN30 后燃过程，从而导致更高的 HC 排放。

图 7-5(c) 给出了不同预混合率下，燃料十六烷值对 NO<sub>x</sub> 排放的影响。从图中可以看到，在预混合率为 0.4 时，NO<sub>x</sub> 排放 CN40>CN30≈CN51。如图 7-1，在预混合率较低时，直喷 CN40 缸内燃烧温度较高，从而导致了更高的 NO<sub>x</sub> 排放；直喷 CN51 由于滞燃期缩短，预混合燃烧比例下降，燃烧温度略低，NO<sub>x</sub> 排放也略低；直喷 CN30 时，由于燃烧相位的推迟以及燃烧过程中活塞下行作用，缸内燃烧温度最低，且高温持续时间缩短，从而使得其 NO<sub>x</sub> 排放最低。当预混合率增大到 0.6 时，NO<sub>x</sub> 排放为 CN51≈CN40>CN30。如图 7-3 所示，直喷 CN30 时，缸内温度较低。图 7-5 (c) 中还可以看到，增大预混合率会使得 NO<sub>x</sub> 排放显著降低。

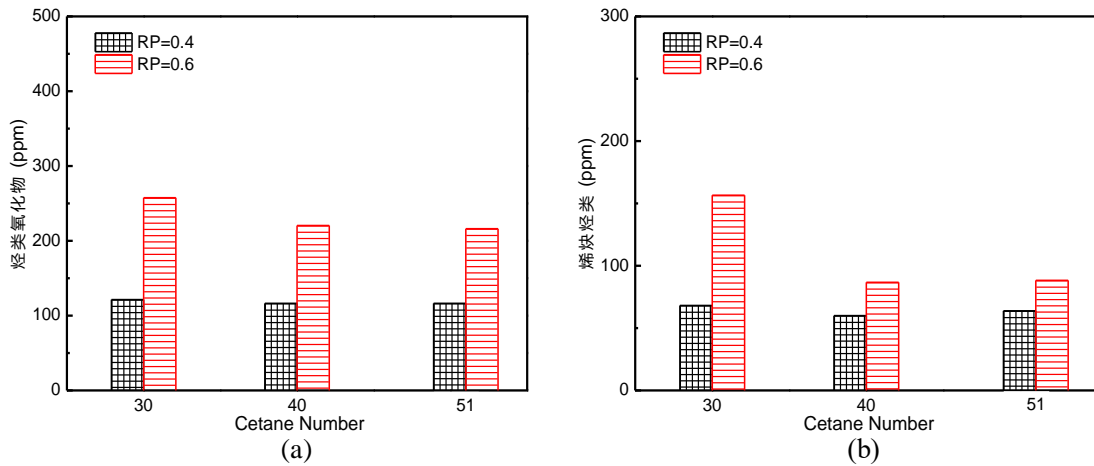


图 7-6 燃料十六烷值对 RCCI 模式非常规气体排放的影响

Figure 7-6 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the irregular gas emissions in RCCI mode

图 7-6 给出了不同预混合率下，直喷燃料十六烷值对非常规排放的影响。其中，烃类氧化物排放为排气中甲醛乙醛浓度之和，烯炔烃类排放为乙烯、乙炔、丙烯排放之和。从图中可以看到，在预混合率为 0.4 时，烃类氧化物排放及烯炔烃类排放均分别在 115ppm 及 60ppm 左右。这主要是由于预混合率较低时，直喷燃料量较高，缸内峰值温度约 1600°C，较高的缸内燃烧温度使得非常规排放较低。

随着预混合率的升高，缸内直喷燃料量降低，燃烧相位随着十六烷值的降低不断推迟，且此时气道喷燃料量增大，边界层中燃料浓度增大，使得更多燃料在边界层中难于氧化，从而造成相对于 RP0.4 时更高的非常规气体排放，尤其是直喷 CN30 时，缸内燃烧温度由于燃烧相位的推迟而下降，从而使得非常规排放不能被充分氧化，使得烃类氧化物排放、烯炔烃类排放均有所增大。

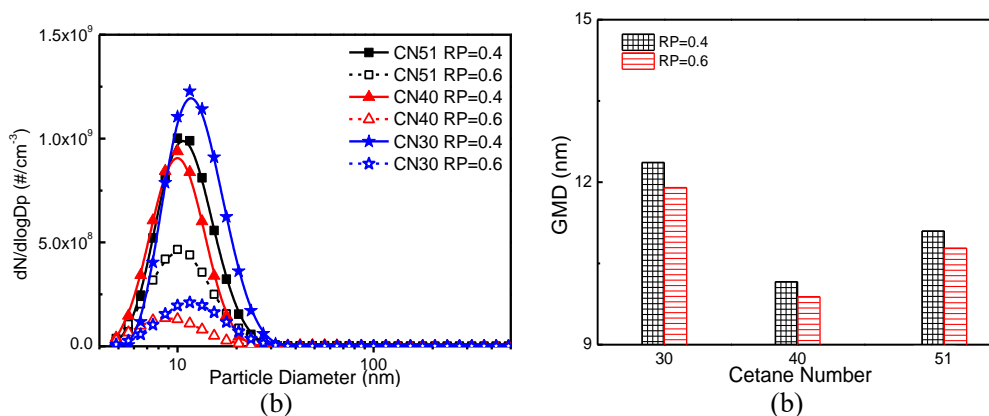


图 7-7 燃料十六烷值对 RCCI 模式颗粒物排放的影响

Figure 7-7 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the particle matter emissions in RCCI mode

图 7-7 给出了不同预混合率下，燃料十六烷值对颗粒物排放的影响。图 7-7 (a) 中，预混合率相同时，颗粒物粒径分布峰值均在直喷 CN40 时达到最低；随着预混合率的增大，颗粒物粒径分布峰值大幅下降。十六烷值的降低会导致缸内燃烧相位推迟，这一方面会增大缸内滞燃期，有利于喷雾过程中破碎后的燃料挥发，从而使得颗粒物排放降低；另一方面，燃烧相位的推迟，更多的燃烧发生在膨胀行程中，活塞下行会使得缸内温度降低，从而使得缸内高温持续期缩短，不利于颗粒物的氧化，从而使得颗粒物分布曲线峰值增大。预混合率的增大，缸内燃料混合更均匀，同时直喷燃料量降低，从根源上减少了燃料破碎、雾化的小液滴数量，从而降低了核膜态颗粒物排放，使得颗粒物数目浓度峰值大幅下降。

图 7-7 (b) 中给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，燃料十六烷值对颗粒物几何平均直径的影响。从图中可以看到，随着缸内十六烷值的增大，在不同的预混合率下，直喷 CN40 颗粒物粒径最低。如上述分析可知，十六烷值对缸内燃烧相位及温度历程影响较大，直喷 CN40 时缸内较好的温度条件以及较长滞燃期对燃料雾化的促进作用使得此时颗粒物几何平均直径较低。此外，预混合率的增大，会使得颗粒物几何平均直径略有下降，这主要是由于直喷燃料量的降低，提高了缸内燃料混合均匀程度，使得颗粒物几何平均直径有所下降。

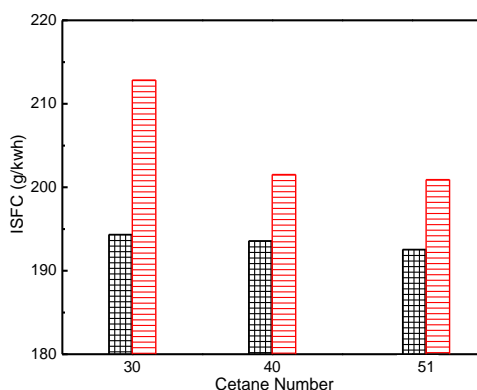


图 7-8 燃料十六烷值对 RCCI 模式指示油耗的影响

Figure 7-8 Effects of the cetane number of directly injected fuels on the indicated specific fuel consumption in RCCI mode

图 7-8 给出了不同预混合率下，燃料十六烷值对指示油耗的影响。在图 7-8 中，预混合率



为 0.4 时，随着直喷十六烷值的降低，指示油耗先增大后减小；预混合率为 0.6 时，随着十六烷值的降低，指示油耗先稳定后增大；预混合率的增大会导致指示油耗增大。在预混合率较低时，缸内燃烧特性是直喷燃料燃烧主导，指示油耗差异不大；预混合率为 0.6 时，直喷燃料十六烷值从 51 降低到 40 时，指示油耗差异不大，但直喷燃料十六烷值降低到 30 时，指示油耗急剧增大，这主要是由于气道喷燃料辛烷值 95，结合直喷燃料十六烷值降至 30 以及较高的预混合率，使得缸内压缩燃烧活性较低，燃烧相位推迟，从而使得缸内工质做功不充分，指示油耗增大。

### 7.3 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式燃烧和排放的影响

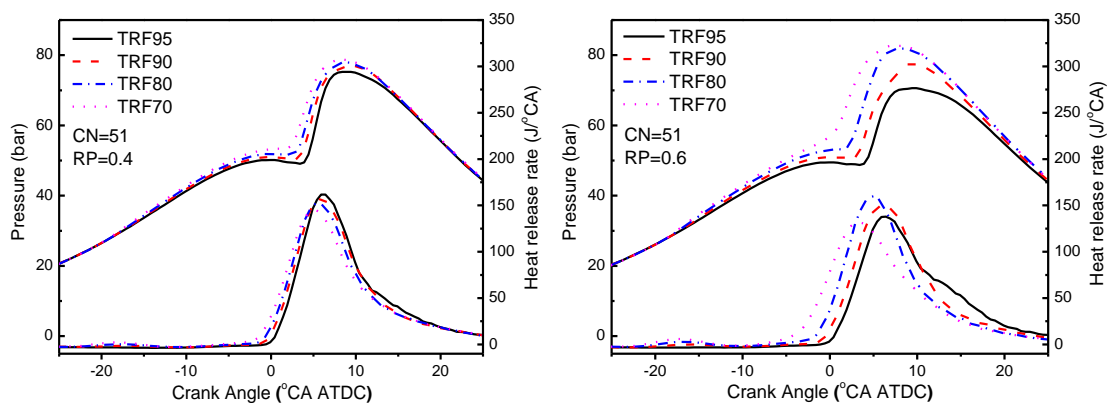


图 7-9 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式缸内压力及放热率的影响

Figure 7-9 Effects of the RON of port injected fuels on the in-cylinder pressure and heat release rate of RCCI mode

图 7-9 给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式缸内压力及放热率的影响。从图中可以看到，随着气道喷射辛烷值的降低，燃烧相位逐渐提前。这主要是由于辛烷值的降低一定程度上表征着气道喷燃料十六烷值的增大，从而提高了缸内整体反应活性，进一步使得燃烧相位逐渐提前。在预混合率较高时，降低气道喷射辛烷值，燃烧相位提前更多，这主要是由于随着预混合率的增大，气道喷射燃料比例相应升高，对整体燃烧作用加强，从而使得燃烧相位提前更多。此外，在预混合率为 0.4 时，气道喷射燃料低温放热现象不明显，随着预混合率增大至 0.6，气道喷射低辛烷值燃料低温反应放热速率有所增大。

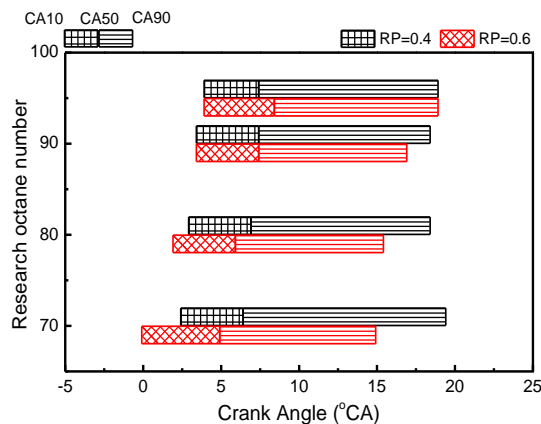


图 7-10 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式燃烧相位的影响

Figure 7-10 Effects of the RON of port injected fuels on the combustion phase of RCCI mode



图 7-10 给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式燃烧相位的影响。从图中可以看到，随着气道喷射燃料辛烷值的降低，CA10 不断提前，这主要是随着辛烷值的降低，缸内可燃混合气压燃活性提高，从而使得燃料更早的燃烧。对比不同预混合率，气道喷射 TRF95 时，随着预混合率的增大，CA10、CA90 不变，CA50 推迟；而气道喷 TRF90 时，CA10、CA50 均不随预混合率变化，CA90 略有提前；气道喷燃料辛烷值低于 90 时，随着预混合率增大，CA10、CA50、CA90 均不断提前。造成上述差异的原因主要是缸内反应活性以及气道喷射燃料混合程度。在气道喷射高辛烷值燃料时，随着预混合率的增大，缸内反应活性降低，但此时均质预混的气道喷燃料浓度增大，促进了燃料与缸内空气的混合，从而有利于燃烧速率的提高；气道喷射低辛烷值燃料时，缸内混合气反应活性加强，且此时燃料混合均匀性随着预混合率的增大而加强，从而使得此时燃烧速率加快，尤其是气道喷 TRF80、TRF70 时，CA10、CA50 以及 CA90 均不断提前。

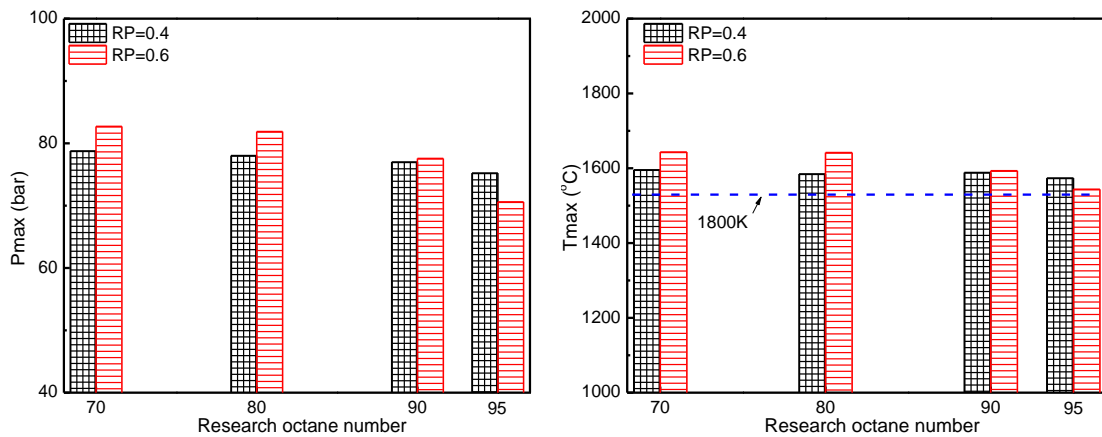


图 7-11 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式缸内最高压力和最高气体平均温度的影响  
Figure 7-11 Effects of the RON of port injected fuels on the Pmax and Tmax of RCCI mode

图 7-11 给出了气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式下缸内最高压力及最高气体平均温度的影响。从图中可以看到，随着辛烷值的降低，缸内最高压力及最高气体平均温度均不断升高。气道喷射低辛烷值燃料时，在高预混合率下最高压力及最高气体平均温度均有所升高，而气道喷射 TRF90 时，缸内最高温度及压力随着预混合率的增大不变；气道喷射 TRF95 时，随着预混合率的增大，缸内最高温度及压力均略有下降。造成上述差异的原因主要是燃烧相位及燃烧速率的变化。随着气道喷射燃料辛烷值的降低，燃烧相位逐渐提前，尤其是气道喷 TRF80、TRF70 时，缸内压力升高较早，从而使得缸内温度压力上升得更高。相对于低预混合率时，当预混合率达到 0.6 时，气道喷射 TRF95 使得缸内反应活性降低，燃烧速率降低，从而使得缸内温度压力较低；喷射 TRF90 时，CA10 与 CA50 随预混合率变化不大，从而使得缸内最高温度、压力差异不大。而随着气道喷射燃料辛烷值进一步降低，由于气道喷射燃料反应活性增强，使得燃烧相位提前，从而使得缸内最高压力、温度升高。

图 7-12 给出了气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式下缸内最高压力升高率的影响。从图中可以看到，随着气道喷射燃料辛烷值的降低，缸内最高压力升高率逐渐降低；且随着预混合率的升高，缸内最高压力升高率也有所下降。最大压力升高率主要受缸内混合气均匀程度及燃烧





相位共同决定。随着气道喷射燃料辛烷值的降低，导致缸内燃烧相位提前，滞燃期缩短，从而使得最大压力升高率增大；在气道喷射低辛烷值燃料时，随着预混合率的增大，燃烧滞燃期也会缩短，从而使得最大压力升高率降低；在气道喷射高辛烷值燃料时，由于预混合率的增大，直喷燃料量降低，直喷燃料与气道喷燃料叠加燃烧区域下降，从使得缸内最大压力升高率有所降低。

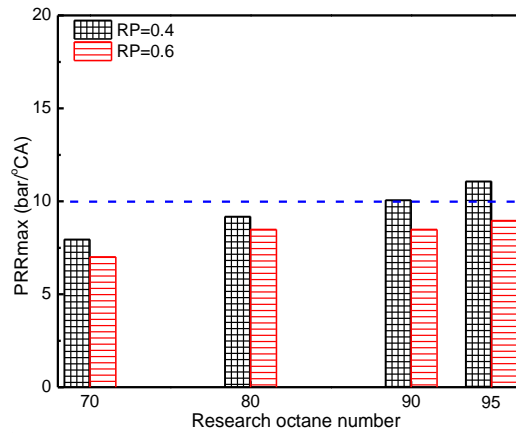


图 7-12 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式缸内最大压力升高率的影响

Figure 7-12 Effects of the research octane number of port injected fuels on the PRRmax of RCCI mode

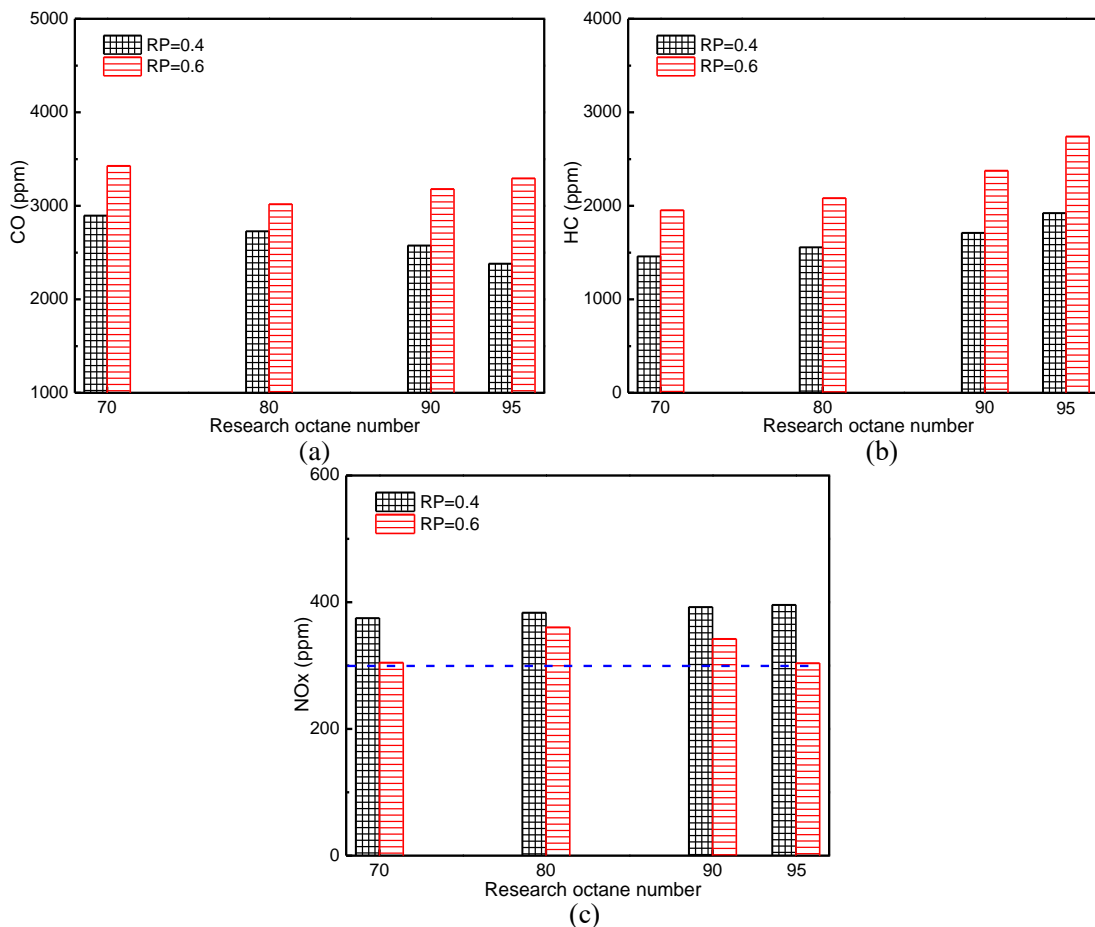


图 7-13 气道喷射不同辛烷值燃料对 RCCI 模式缸内主要气体排放的影响

Figure 7-13 Effects of the research octane number of port injected fuels on the main gas emissions of RCCI mode



图 7-13 给出了气道喷射不同辛烷值燃料对 RCCI 模式主要气体排放的影响。从图 7-13(a) 可以看到, 预混合率为 0.4 时, 随着气道喷射燃料辛烷值的增大, CO 排放逐渐降低; 预混合率为 0.6 时, 随着气道喷射燃料辛烷值的增大, CO 排放先减小后增大; 预混合率的增大会导致 CO 排放的增大。预混合率为 0.4 时, 气道喷射低辛烷值燃料使得燃烧相位略有提前, 但缸内燃烧温度差异不大, 较短的滞燃期不利于燃油混合, 从而使得 CO 排放增大。预混合率为 0.6 时, 燃烧相位的差异导致气道喷低辛烷值燃料缸内温度较高, 但滞燃期较短, 这使得气道喷 TRF70 时由于滞燃期较短, 从而使得此时 CO 排放较高; 随着气道喷燃料辛烷值的增大, 燃烧相位略有推迟, 但此时缸内仍有较高的燃烧温度, 从而使得 CO 排放降低, 随着气道喷射燃料辛烷值进一步增大, 燃烧相位的推迟有利于燃料混合, 但此时缸内温度下降, 从而使得 CO 排放再次增大。HC 排放随着气道喷燃料辛烷值的增大而不断升高, 且随着预混合率的升高, HC 排放明显增大。由于气道喷燃料辛烷值的升高, 导致缸内燃烧相位推迟, 燃烧温度降低, 不利于 HC 排放氧化; 随着预混合率的增大, 均质混合气浓度增大, 压缩过程中进入边界层的燃料量增加, 也使得 HC 排放增大。

NO<sub>x</sub> 排放方面, 在预混合率为 0.4 时, NO<sub>x</sub> 排放随着气道喷射燃料辛烷值的增大而略有增大, 但整体差异在 20ppm 以内。这主要是由于此时缸内燃烧温度随着辛烷值的增大略有增大, 但此时燃烧历程接近, 高温持续期大致相同, 从而使得 NO<sub>x</sub> 排放略有增大, 但差异不大。而在预混合率为 0.6 时, NO<sub>x</sub> 排放先增大后减小。这与该条件下缸内温度及燃烧速率有关, 相对于 TRF70, 气道喷 TRF80 时, 由于此时直喷燃料滞燃期增大, 燃烧速率加快, 从而使得缸内局部高温区扩大, 导致此时较高的 NO<sub>x</sub> 排放; 随着气道喷燃料辛烷值的进一步增大, 缸内燃烧相位进一步推迟, 燃烧温度降低, 从而使得 NO<sub>x</sub> 排放降低。此外, 只在气道分别喷射 TRF70 及 TRF95 时, NO<sub>x</sub> 排放控制在 300ppm 以下。

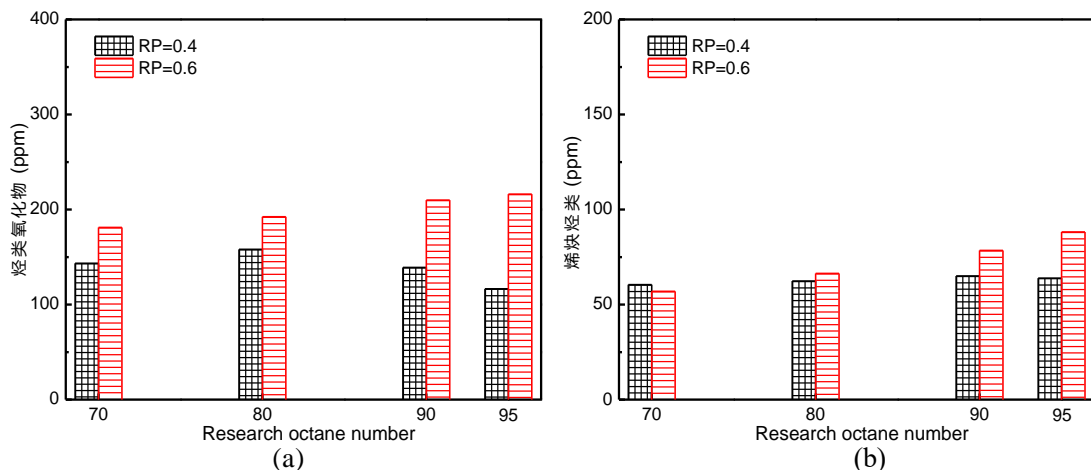


图 7-14 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式非常规气体排放的影响

Figure 7-14 Effects of the RON of port injected fuels on the unconventional gas emissions in RCCI mode

图 7-14 给出了不同预混合率下, 气道喷射燃料辛烷值对非常规排放的影响。从图 7-14(a) 中可以看到, 在预混合率为 0.4 时, 烃类氧化物排放随着辛烷值的增大先升高后降低; 在预混合率为 0.6 时, 烃类氧化物排放随着辛烷值的增大不断增大。图 7-14(b)中, 在预混合率为 0.4



时，烯炔烃排放在气道喷射不同辛烷值燃料条件下均保持在相对稳定的水平，约 60~65ppm；在预混合率为 0.6 时，烯炔烃排放随着气道喷射燃料辛烷值的增大而不断升高。

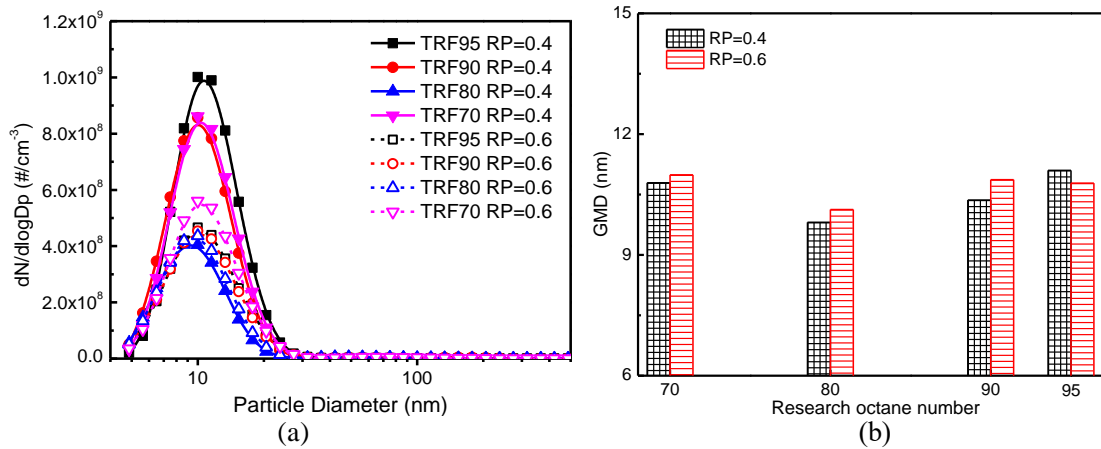


图 7-15 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式颗粒物排放的影响

Figure 7-15 Effects of the RON of port injected fuels on the particle matter emissions of RCCI mode

图 7-15 给出了不同预混合率下，气道喷射燃料辛烷值对颗粒物排放的影响。从图 7-15(a) 中可以看到，气道喷辛烷值的降低会使得颗粒物粒径分布曲线峰值不断降低，但气道喷 TRF70 时，颗粒物粒径分布曲线峰值又有所增大。这主要是由于随着气道喷燃料辛烷值的降低，燃烧相位不断提前，这使得缸内高温持续时间增大，有利于雾化的燃油蒸发，从而降低了颗粒物排放中液相油滴的数量，从而使得颗粒物数目排放浓度降低。而随着气道喷射辛烷值降低至 70 时，燃烧相位过于提前，不利于直喷燃油在缸内的雾化，使得此时缸内颗粒物粒径数目浓度分布升高。相较于预混合率为 0.4，预混合率为 0.6 时，预喷燃料辛烷值对颗粒物粒径分布影响降低，这主要是由于高预混合率条件下，直喷燃料量降低，而颗粒物排放生成主要由直喷燃料控制，使得该条件下气道喷射燃料性质对颗粒物排放影响降低。

图 7-15 (b) 中给出了预混合率分别为 0.4、0.6 时，气道喷射不同辛烷值燃料对颗粒物几何平均直径的影响。从图中可以看到，随着气道喷辛烷值的降低，颗粒物几何平均直径先减小后增大，这主要是由于缸内燃烧相位的差异导致温度历程的变化，气道喷燃料辛烷值的降低，缸内整体压燃活性增大，使得燃烧相位不断提前，缸内高温历程加强，从而使得雾化液滴更易蒸发燃烧。但燃烧相位的提前不利于直喷燃油的雾化，从而使得在气道喷辛烷值 70 时，颗粒物几何平均直径有所增大。此外，预混合率为 0.6 时，气道喷辛烷值低于 90 时，颗粒物几何平均直径较预混合 0.4 时略有增大，这主要是由于预混合率的增大使得缸内压燃活性加强，燃烧相位提前、燃烧速率加快，从而使得颗粒物不能充分氧化，进一步使得颗粒物几何平均直径增大。

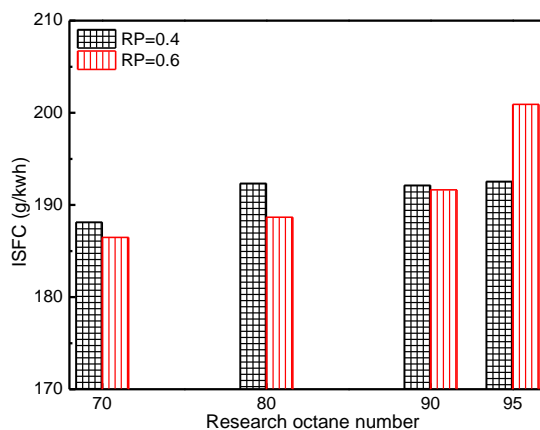


图 7-16 气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式指示油耗的影响

Figure 7-16 Effects of the RON of port injected fuels on the indicated specific fuel consumption of RCCI mode

图 7-16 给出了气道喷射燃料辛烷值对 RCCI 模式指示油耗的影响。在预混合率为 0.4 时，气道喷射 TRF70 时指示油耗最低；预混合率为 0.6 时，指示油耗随着气道喷燃料辛烷值的降低而不断降低。在 RCCI 模式下，缸内燃烧受气道喷射燃料反应活性、浓度以及直喷燃料燃烧共同控制，在预混合率较低时，气道喷燃料浓度较低，部分区域存在稀燃极限，但此时直喷油量较高，从而使得缸内温度、压力条件较好，促进了气道喷燃料的燃烧，尤其是气道喷 TRF70 时，气道喷燃料较高的反应活性进一步促进了燃料燃烧，使得指示油耗下降；在预混合率较高时，气道喷射燃料浓度增大，尤其是气道喷射低辛烷值燃料时，燃料自身较高的反应活性使得气道喷射燃料在压缩过程中发生低温燃烧，从而促进直喷燃料的燃烧，这使得指示油耗降低。此外，RP 为 0.6 且气道喷燃料 TRF95 时，指示油耗较高，这是由于此时气道喷燃料辛烷值较高，燃料反应活性较低，在远离直喷燃料燃烧区域的气道喷燃料难于燃烧，从而使得此时指示油耗较高。

### 7.4 RCCI 模式燃烧排放影响的综合分析

上述研究表明，RCCI 模式燃烧和排放特性受缸内燃烧历程控制，而缸内燃烧历程取决于气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值以及二者在缸内掺混比例。因此，本部分综合讨论上述三参数对 RCCI 模式燃烧和排放的影响。

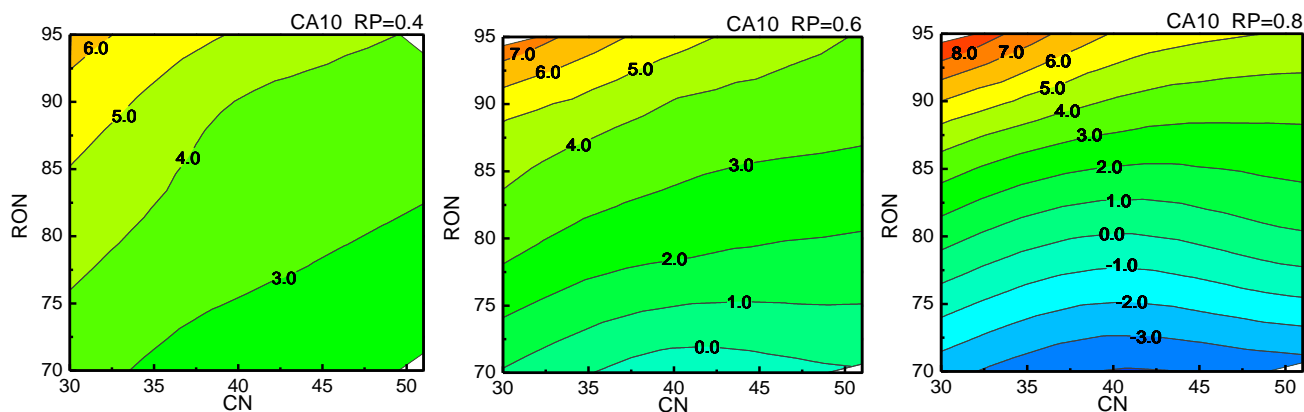


图 7-17 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式燃烧始点的影响

Figure 7-17 Effects of the RON, CN and RP on the CA10 of RCCI mode



图 7-17 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对缸内燃烧始点的影响。从图中可以看到，在预混合为 0.4 时，缸内燃烧始点对燃料反应活性变化不敏感，基本限于上止点后 2~6°CA 区间。随着预混合率的增大，燃烧始点对燃料反应活性变化敏感性提高，具体为在高预混合率且气道喷射高辛烷值、缸内直喷低十六烷值时燃烧始点逐渐推迟至上止点后 8°CA；在气道喷射低辛烷值燃料、缸内直喷高十六烷值燃料时燃烧始点不断提前，直至提前至上止点前 3°CA 左右。

造成 CA10 差异的主要原因是预混合率的改变导致燃烧特点的转变。在预混合率较低时，气道均质混合燃料量浓度较低，缸内直喷燃料量较高，从而使得此时缸内燃烧受直喷燃烧控制，前文研究表明，直喷燃料十六烷值的降低导致 CA10 会推迟 2 至 3°CA，此时通过改变气道喷射燃料活性，使得 CA10 变化不大，总体变动在 4°CA 以内。随着预混合率的增大，气道喷射燃料燃烧特性对缸内着火特性影响增大，尤其在缸内直喷低十六烷值燃料、气道喷射高辛烷值燃料时，缸内燃烧活性下降，从而使得缸内压燃活性降低，燃烧始点大为推迟；而在气道喷射低辛烷值燃料时，气道喷射燃料的低温燃烧释放出大量的活性自由基，对缸内燃烧过程有较大的促进作用，从而使得此时燃烧始点提前。

此外，在低预混合率时，CA10 的梯度基本与燃料反应活性梯度一致，这表明低预混合率时，CA10 的变化受气道喷燃料反应活性、直喷燃料反应活性共同控制；在高预混合率时，尤其在直喷燃料十六烷值大于 40、气道喷燃料辛烷值低于 90 时，CA10 梯度方向与气道喷射辛烷值降低方向基本一致，这表明在该条件下，缸内燃烧始点主要受气道喷燃料活性控制。

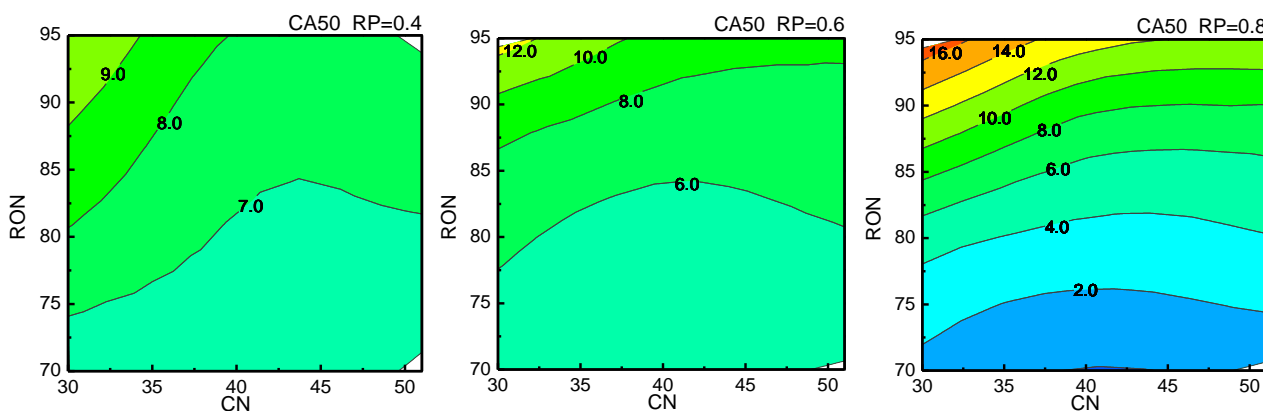


图 7-18 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式 CA50 的影响  
Figure 7-18 Effects of the RON, CN and RP on the CA50 in the RCCI mode

图 7-18 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对缸内燃烧 CA50 的影响。从图中可以看到，与 CA10 类似，在预混合为 0.4 时，CA50 变化范围较小，介于上止点后 6~9°CA，且 CA50 梯度较小。随着预混合率的增大，CA50 变化范围也随之变大，梯度也随之增大。这表明在高预混合率下，CA50 随 RON、CN 变化的敏感性加强。CA50 主要受 CA10 以及缸内燃烧速率共同决定，尤其在预混合率达 0.8 时，在缸内直喷低十六烷值燃料、气道喷射高辛烷值燃料条件下，由于此时缸内燃烧活性降低，燃烧速率下降，从而使得 CA50 过于推迟。与 CA10 类似，在高预混合率时，尤其在直喷燃料十六烷值



大于 40、气道喷燃料辛烷值低于 90 时，CA50 梯度方向与气道喷辛烷值降低方向基本一致，这表明在该条件下，缸内燃烧始点主要受气道喷燃料活性控制。

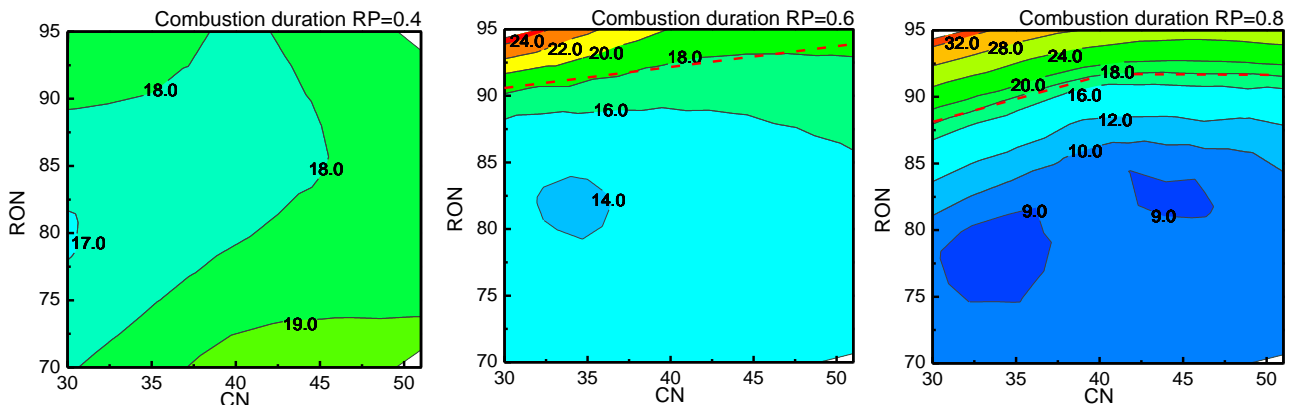


图 7-19 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式燃烧持续期的影响

Figure 7-19 Effects of the RON, CN and RP on the combustion duration in the RCCI mode

图 7-19 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对缸内燃烧持续期的影响。燃烧持续期表征缸内放热集中程度，对燃油经济性有重要影响。从图中可以看到，在预混合率较低时，燃烧持续期介于 17~19°CA 左右，随着预混合率的增大，燃烧持续期向两个方向发展，即气道喷射燃料辛烷值低于 90 时，燃烧持续期逐渐缩短，气道喷射燃料辛烷值高于 90 时（包括 TRF90），燃烧持续期逐渐增大。造成上述现象的原因是辛烷值低于 90 时，气道喷燃料低温反应过程由于其反应活性的增大而加强，低温燃烧过程释放的自由基加速了燃烧过程，从而使得燃烧持续期缩短；而气道喷射燃料辛烷值高于 90 时，随着预混合率的增大，缸内反应活性降低，燃烧相位推迟导致燃烧多发生在膨胀行程，从而使得燃烧速率下降，进一步导致燃烧持续期增大。在图 7-19 中还可发现，为保证较为集中的放热过程（燃烧持续期低于 18°CA），随着预混合率的提高，需降低气道喷射燃烧辛烷值；在预混合率 0.8 时，存在燃烧持续期小于 10°CA 的运行工况。

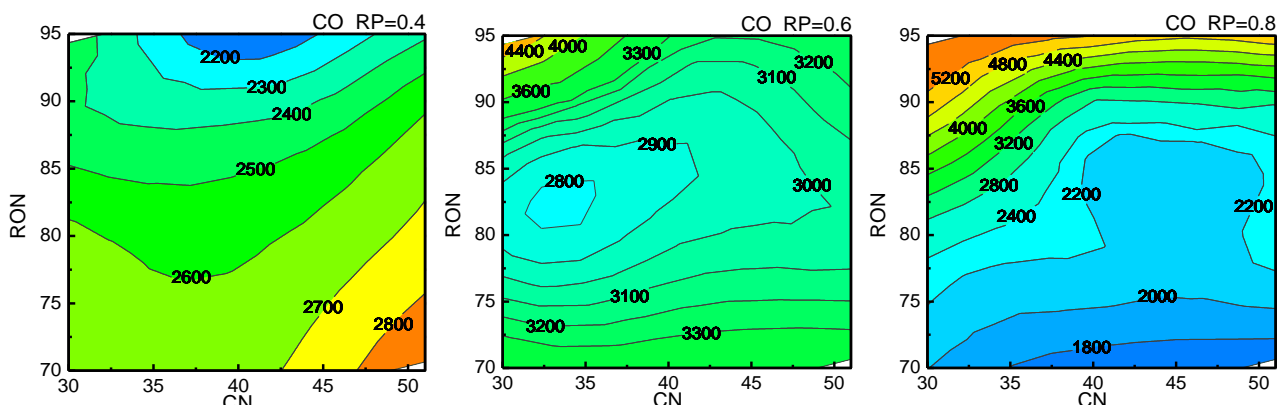


图 7-20 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式 CO 排放的影响

Figure 7-20 Effects of the RON, CN and RP on the CO emissions in the RCCI mode

图 7-20 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对 RCCI 模式 CO 排放的影响。图 7-20 中，在预混合率较低时，直喷燃料的混合对 CO

形成至关重要,在缸内直喷高十六烷值燃料,气道喷射低辛烷值燃料时,由于较为提前的 CA10,使得直喷燃料无法与缸内空气充分混合,造成较高的 CO 排放;随着预混合率的增大,气道均质预混燃油量增大,缸内直喷燃油量减少,提高了油气混合均匀性。但在缸内直喷低十六烷值燃料、气道喷射高辛烷值燃料时,由于缸内反应活性较低,燃烧相位较为推迟,使得燃烧温度降低,从而导致 CO 不能充分氧化,造成较高的 CO 排放。而在气道喷射低辛烷值燃料时,一方面随着预混合率的增大改善了燃料混合状态,另一方面缸内较高反应活性使得燃烧相位提前,保证了缸内的燃烧温度,从而对 CO 排放有改善作用。

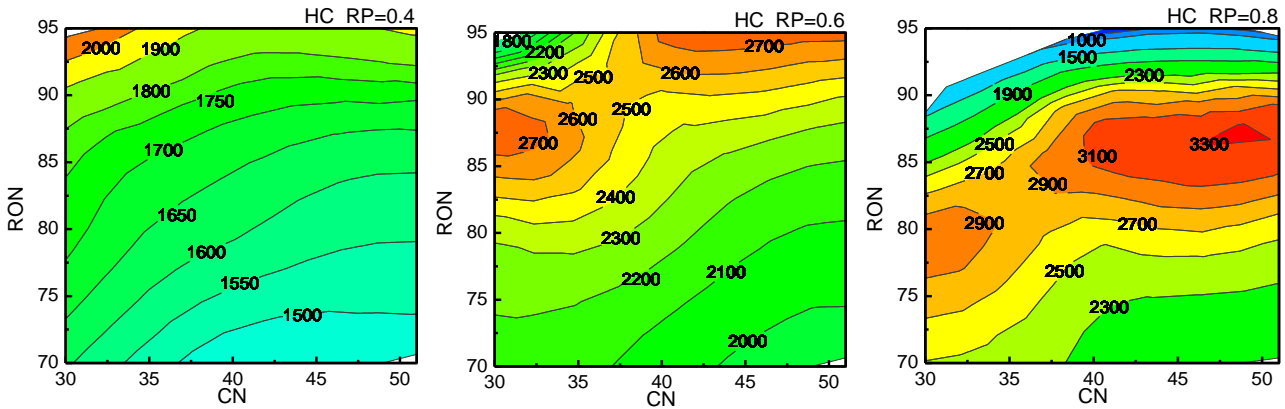


图 7-21 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式 HC 排放的影响

Figure 7-21 Effects of the RON, CN and RP on the HC emissions in the RCCI mode

图 7-21 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时,对 RCCI 模式 HC 排放的影响。在预混合率为 0.4 时,缸内边界层均质预混燃料浓度较低,HC 排放主要受燃烧温度决定。仅在气道喷射高辛烷值燃料、缸内直喷低十六烷值燃料条件下 HC 排放较高,这主要是由于缸内较为推迟的燃烧相位导致较低的燃烧温度。随着预混合率的升高,缸内均质预混燃料浓度增大,这导致在压缩行程中进入边界层的燃料量增加,从而导致相同条件下 HC 排放逐渐增大。在预混合率为 0.6、0.8 时,分别存在高 HC 排放区域。在该区域的两侧,HC 排放均不断下降,其中向燃料活性增强的方向,HC 排放的降低主要是由于缸内燃烧加强,温度升高,有利于燃料的充分氧化;而向燃料活性减弱的方向,即气道喷射高辛烷值燃料,缸内直喷低十六烷值燃料时,HC 排放的降低主要是由于此时缸内燃烧相位较为推迟,后燃温度会有利于 HC 氧化。但此时缸内温度整体偏低,HC 排放大部分转化为 CO 排放。结合图 7-20,为提高燃尽率,降低预混合率,在高预混合率时,气道喷燃料辛烷值不能高于 80。

图 7-22 给出了气道喷射燃料辛烷值、直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时,对 RCCI 模式 NO<sub>x</sub> 排放的影响。NO<sub>x</sub> 排在预混合率为 0.4 时介于 400ppm 至 450ppm 左右,此时缸内燃烧主要受直喷燃料燃烧控制,存在局部高温区,使得 NO<sub>x</sub> 排放较高。随着预混合率的增大,NO<sub>x</sub> 排放不断下降,且在气道喷射低辛烷值燃料、缸内直喷低十六烷值燃料时,NO<sub>x</sub> 排放可降低至 225ppm 左右。此时,直喷燃料量的降低配合较高的气道喷射燃料量,缸内燃烧偏向于 HCCI 式的均质低温燃烧,从而使得 NO<sub>x</sub> 排放较低。此外,在预混合率为 0.6、

0.8 时, RON 高于 90、CN 低于 40 时, 存在 NO<sub>x</sub> 较低的运行工况, 结合图 7-20、7-21, 此时 NO<sub>x</sub> 排放较低是由于缸内反应活性较差, 燃烧不充分, 造成较高的 HC、CO 排放。

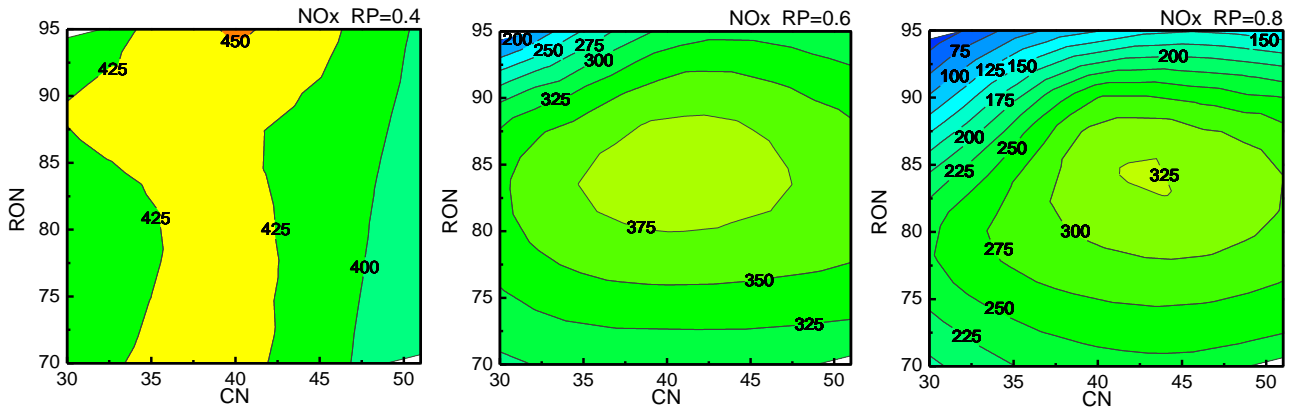


图 7-22 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式 NO<sub>x</sub> 排放的影响

Figure 7-22 Effects of the RON, CN and RP on the NO<sub>x</sub> emissions in the RCCI mode

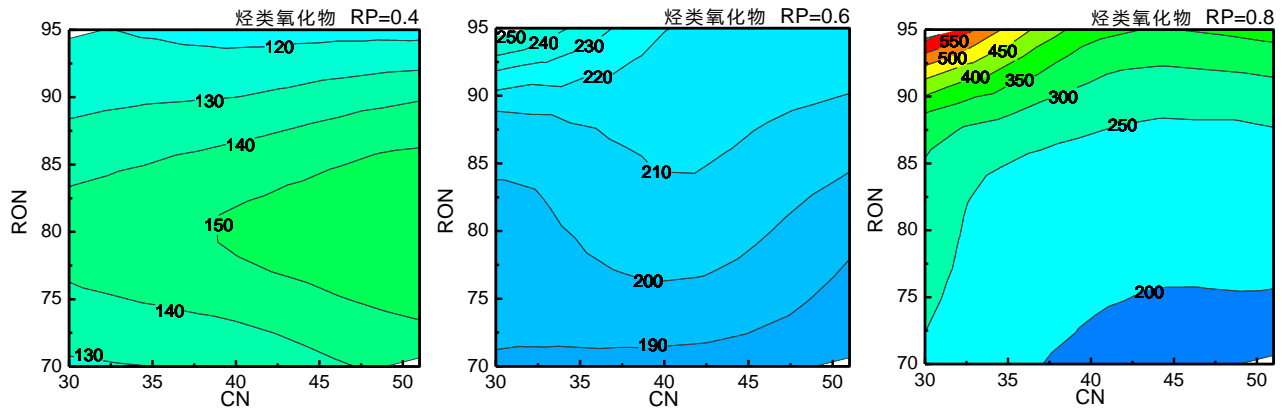


图 7-23 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式烃类氧化物排放的影响

Figure 7-23 Effects of the RON, CN and RP on the hydrocarbon oxides in the RCCI mode

图 7-23 给出了气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时, 对 RCCI 模式烃类氧化物排放的影响。从图中可以看到, 在预混合率较低时, 缸内烃类氧化物排放较低, 总体约 120~150ppm。随着预混合率的增大, 烃类氧化物排放逐渐升高, 且在气道喷射高辛烷值燃料、缸内直喷低十六烷值燃料时较高。这主要是由于此时缸内较低的燃烧温度, 且边界层中均质混合的气道喷射燃料浓度随着预混合率的升高而增大, 从而导致燃料难于充分氧化, 进一步导致烃类氧化物排放随着预混合率以及缸内压燃活性的降低而升高。此外, 保持燃料反应活性相同时, 烃类氧化物排放随着预混合率的增大有上升的趋势, 这表明预混合的升高导致的边界层燃料浓度增大是烯烃类排放生成的重要因素之一。



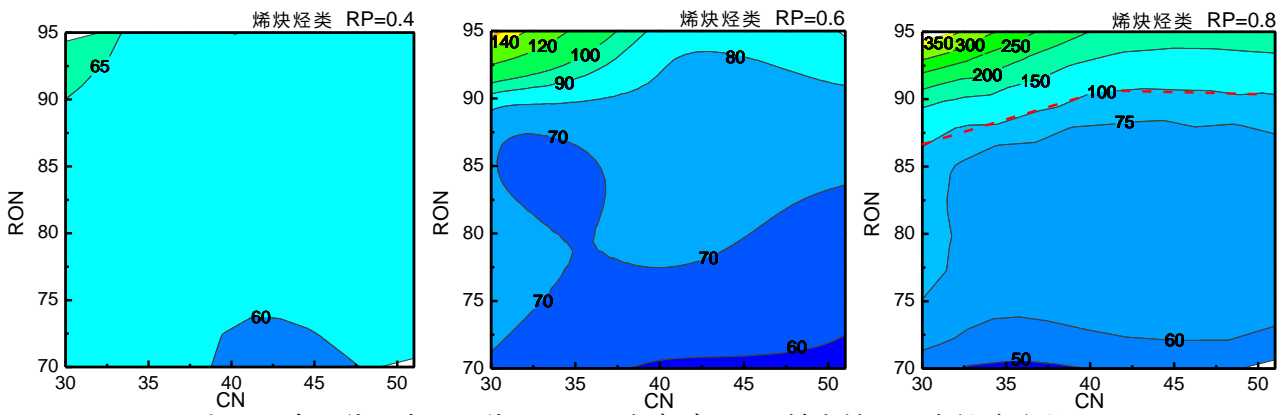


图 7-24 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式烯炔烃类排放的影响

Figure 7-24 Effects of the RON, CN and RP on the unsaturated hydrocarbon emissions in the RCCI mode

图 7-24 给出了气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对 RCCI 模式烯炔烃类排放的影响。从图中可以看到，烯炔烃类不饱和产物排放与烃类氧化物排放随预混合率及缸内反应活性变化趋势大致相同，均为在低预混合率时排放值较低，而随着预混合率的增大而增大；随着缸内反应活性的降低，排放值也随之增大。在预混合率为 0.8、缸内直喷低十六烷值燃料、气道喷射高辛烷值燃料时，燃料反应活性较低，燃烧温度下降，燃料燃烧过程中热解产生的烯炔烃中间产物无法进一步氧化，从而使得不饱和排放增大。为控制烯炔烃类排放 100ppm 一下，在预混合率为 0.8 时，RON 需低于 90。

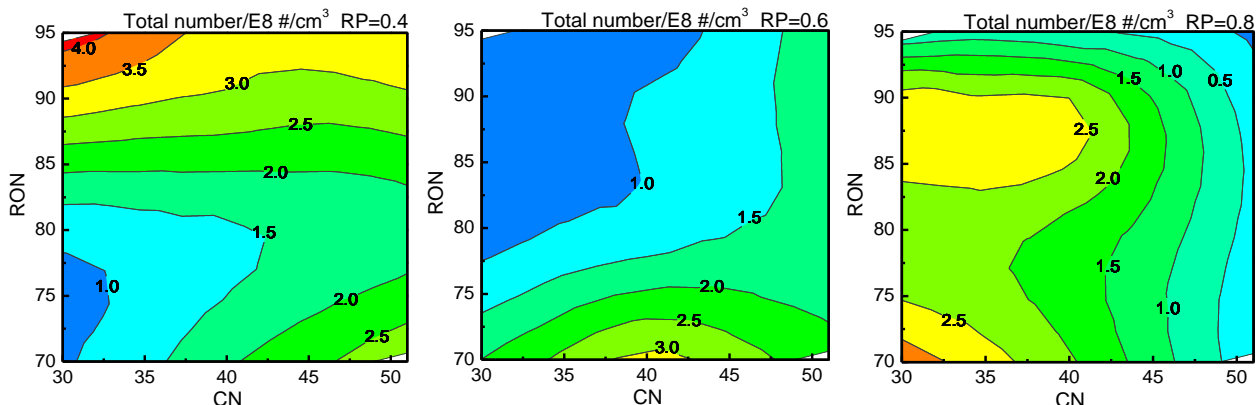


图 7-25 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式颗粒物总数目排放的影响

Figure 7-25 Effects of the RON, CN and RP on the total particle number emissions in the RCCI mode

图 7-25 给出了气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对 RCCI 模式颗粒物总数目排放的影响。颗粒物总数目排放与辛烷值、十六烷值、预混合率关系复杂。颗粒物排放的复杂性主要是由于三个方面的原因，包括：直喷燃料量、滞燃期、缸内燃烧温度。其中直喷燃料量、滞燃期决定缸内混合气均匀程度，决定颗粒物的生成浓度；缸内燃烧温度峰值、历程决定后期颗粒物的氧化、消耗。上述原因导致在预混合率为 0.4 时，低十六烷值燃料配合低辛烷值燃料会使得颗粒物排放较低；在预混合率为 0.6 时，低十六烷值燃料配合中高辛烷值燃料会使得颗粒物排放较低；在预混合率为 0.8 时，直喷高十六烷值燃料会使得颗粒物排放较低。

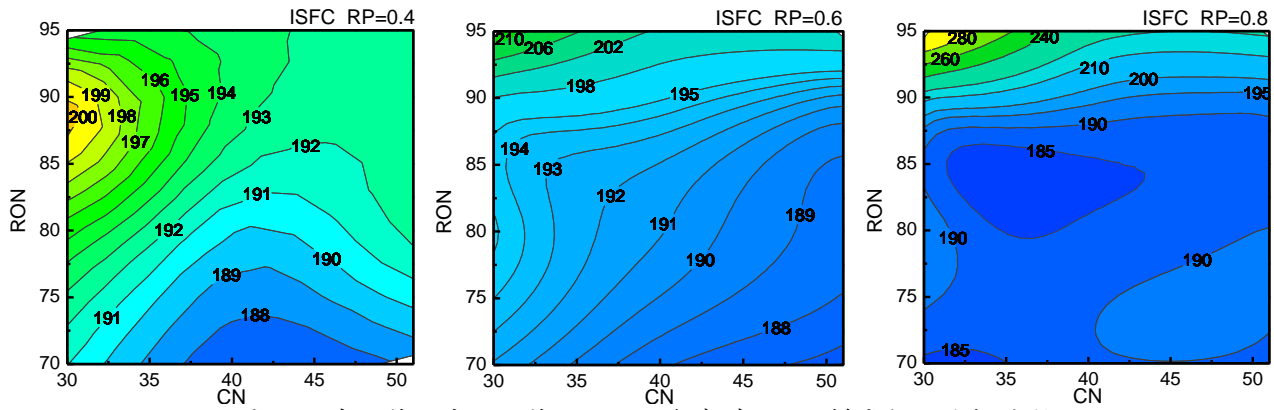


图 7-26 辛烷值、十六烷值以及预混合率对 RCCI 模式指示油耗的影响  
Figure 7-26 Effects of the RON, CN and RP on the ISFC in the RCCI mode

图 7-26 给出了气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值在预混合率分别为 0.4、0.6 以及 0.8 时，对 RCCI 模式指示油耗的影响。从图中可以看到，在预混合率较低时，指示油耗随在较宽的运行范围内均超过 190g/kWh，仅在气道喷射燃料辛烷值低于 80、缸内直喷燃料十六烷值高于 35 时，指示油耗低至 188g/kWh；随着预混合率增大至 0.6 时，指示油耗低于 190g/kWh 运行范围被拓宽；随着预混合率增大至 0.8，指示油耗呈现两极化发展，在气道喷高辛烷值燃料时，指示油耗随着直喷十六烷值的降低迅速增大，而在气道喷射辛烷值低于 90 时，存在某些运行工况指示油耗达到 185g/kWh。上述研究表明，通过优化气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值以及气道喷燃料比例，可优化燃烧，降低指示油耗至 185g/kWh。

## 7.5 LLRCCI 与 DI、PCCI 燃烧模式的对比

表 7-2 不同燃烧模式主要控制参数  
Table 7-2 The main control parameters for different combustion modes

Control parameters	LLRCCI	DI	PCCI
CN of DI fuel	30	51	51
RON of PI fuel	70	-	-
EGR (%)	50	0	50
Main injection timing (°CA ATDC)	-7	-7	-7
Pilot injection timing (°CA ATDC)	-	-	-50
Pilot injection ratio (%)	-	-	30
Port injection timing (°CA ATDC)	-350	-	-
RP (%)	80	-	-

上述研究发现，直喷低十六烷值燃料时，会有效增大直喷燃料缸内燃烧滞燃期，气道喷射低辛烷值燃料可使得缸内燃料在压缩冲程发生一定的低温反应，释放大量的活性自由基，加快缸内燃烧进程，提高燃烧等容度。此外，在气道喷射低辛烷值燃料，缸内直喷低十六烷值燃料时，配合较高的 EGR 率，NO<sub>x</sub> 排放也会略有改善，因而气道喷射低辛烷值燃料（Low octane number fuel）、缸内直喷低十六烷值燃料（Low cetane number fuel）RCCI 模式（LLRCCI）具



有抑制 NO<sub>x</sub> 排放、降低油耗的潜力。因此本部分选择循环油耗 45mg，对比了 LLRCCI、DI、PCCI 燃烧和排放特性，各模式控制参数见表 7-2。

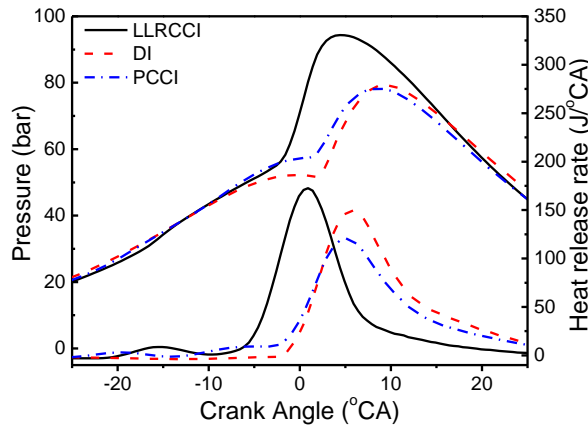


图 7-27 LLRCCI 与 DI、PCCI 模式缸内压力及放热速率的对比

Figure 7-27 Comparison of the in-cylinder pressure and heat release rate between DI, PCCI and LLRCCI mode

图 7-27 对比了 LLRCCI、DI 以及 PCCI 模式缸内压力及放热率曲线。从图中可以看到，LLRCCI 模式缸内峰值压力较高，约 94bar，DI 与 PCCI 模式缸内峰值压力远低于 LLRCCI，约 78~79bar；LLRCCI 模式燃烧相位较 DI、PCCI 提前，放热峰值方面 LLRCCI > DI > PCCI，且 LLRCCI 放热有较为明显的低温反应阶段。相较于 DI、PCCI 模式，LLRCCI 采用气道喷结合缸内直喷的模式，缸内混合气浓度更加可控，且气道喷射 TRF70 时，在压缩行程后期（上止点前 20°CA）发生低温反应，生成大量活性自由基，直喷 CN30 喷入缸内后，气道喷燃料与直喷燃料同时燃烧，放热速率加快，从而使得放热峰值较高。

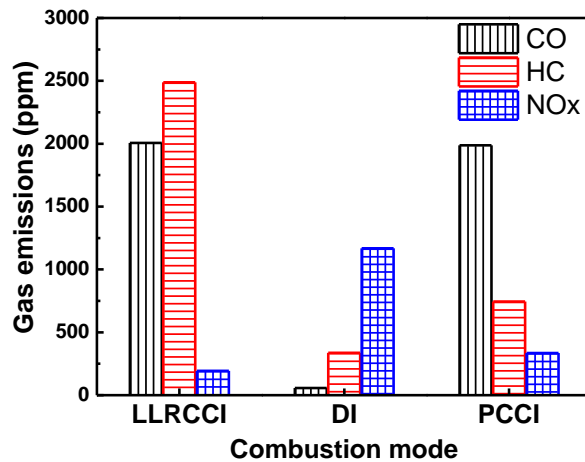


图 7-28 LLRCCI 与 DI、PCCI 模式主要气体排放的对比

Figure 7-28 Comparison of the main gas emissions between DI, PCCI and LLRCCI mode

图 7-28 对比了 DI、PCCI 及 LLRCCI 模式下的主要气体排放。从图中可以看到，LLRCCI 模式 CO 排放与 PCCI 模式相当，远高于 DI 燃烧模式。这主要是由于 LLRCCI 采用了气道喷射加缸内直喷的双喷油器供油模式，该模式下气道喷射燃料易于进入缸内边界层，难于充分燃烧；PCCI 模式由于采用两段喷，其中过早的预喷会导致直喷燃油碰壁，从而使得该部分燃料也不能充分燃烧。上述原因导致了 LLRCCI 与 PCCI 模式较高的 CO 排放。



HC 排放方面，不同燃烧模式下，HC 排放高低顺序为 LLRCCI > PCCI > DI。HC 排放主要受边界层燃料浓度决定，LLRCCI 由于气道喷射了低辛烷值燃料，该部分燃料在压缩冲程中进入缸内缝隙，在膨胀行程后期被释放出来，从而造成了较高的 HC 排放；PCCI 模式早喷柴油进入边界层，从而使得 HC 排放高；DI 模式由于采用上止点附近缸内直喷的方式，HC 排放最低。

NO<sub>x</sub> 排放大小顺序为 DI > PCCI > LLRCCI。DI 模式采用缸内直喷压缩燃烧的方式，燃烧过程中存在局部高温区，使得 NO<sub>x</sub> 排放较高；PCCI 模式由于采用了较高的 EGR 率，降低了缸内氧气浓度，从而抑制 NO<sub>x</sub> 排放，使得 NO<sub>x</sub> 大幅下降；进一步的，LLRCCI 采用气道喷低辛烷值燃料、缸内直喷低十六烷值燃料，该模式下燃油与空气充分混合，整体燃烧接近均质压缩燃烧，尽管缸内平均温度较高，但不存在较多的缸内局部高温区，从而进一步抑制了 NO<sub>x</sub> 排放。

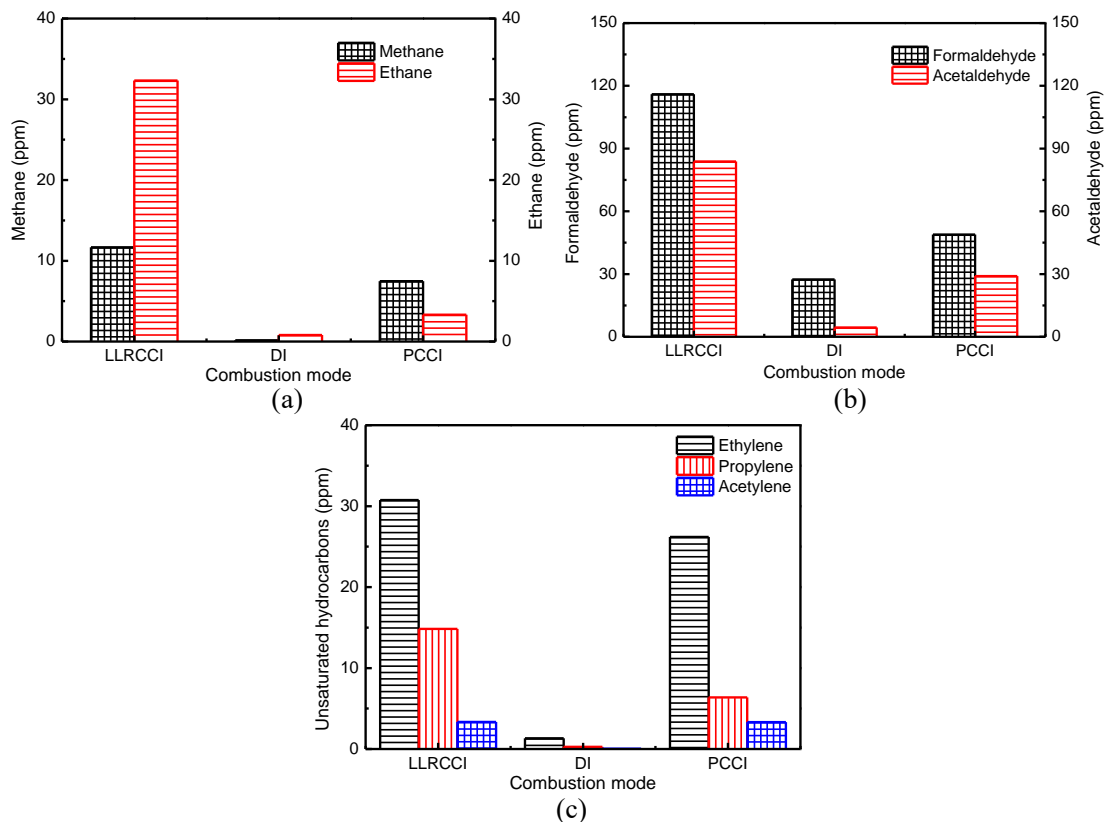


图 7-29 LLRCCI 与 DI、PCCI 模式非常规排放的对比

Figure 7-29 Comparison of the non-regulated emissions between DI, PCCI and LLRCCI mode

图 7-29 对比了 DI、PCCI 及 LLRCCI 模式下的非常规气体排放。从图 7-29 中可以看到，甲烷、乙烷、甲醛、乙醛、乙烯、丙烯排放均为 LLRCCI > PCCI > DI；丙烯排放为 LLRCCI ≈ PCCI > DI。对于 LLRCCI 模式的非常规排放，醛类排放物最高，甲醛接近 120ppm，乙醛排放超过 80ppm；其次是乙烷排放约 30ppm，乙烯排放也达到了 30ppm 左右。造成 LLRCCI 模式非常规排放较高的原因是气道喷燃料进入缸内边界层，该部分燃料在发动机工作过程中难于燃烧，只能发生低温氧化反应，造成较高的非常规气体排放。

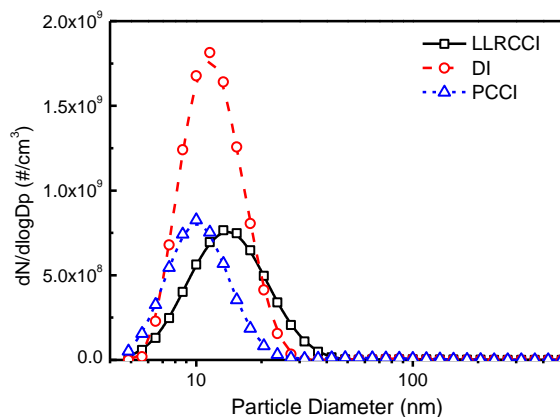


图 7-30 LLRCCI 与 DI、PCCI 模式颗粒物排放的对比

Figure 7-30 Comparison of the particle matter emission between DI, PCCI and LLRCCI mode

图 7-30 对比了 DI、PCCI 及 LLRCCI 模式下的颗粒物排放。从图中可以看到，DI 模式颗粒物峰值远高于 PCCI 及 LLRCCI。这主要是由于 DI 模式下，燃油喷入缸内后边扩散边燃烧，从而使得燃油不能与缸内空气充分混合，造成较高的颗粒物排放，而 PCCI 模式及 RCCI 模式分别通过缸内两段喷及气道喷结合缸内直喷的可燃混合气组织方式，从而优化了燃油与缸内空气的混合，进一步降低了颗粒物排放。LLRCCI 模式整体粒径分布相对于 PCCI 模式向粒径增大的方向偏移，这可能是由于 LLRCCI 模式下，气道喷射燃料在较长的压缩及低温反应阶段更易于裂解，尤其气道喷射燃料中高比例异构烷烃在裂解过程中会生成烯烃类中间产物。此外，LLRCCI 模式相对均匀的燃油空气混合，导致燃烧速率较快，不利于颗粒物的氧化，且类似于 HCCI 模式的均相压缩低温燃烧，可能会促进颗粒物的积聚，从而使得颗粒物粒径增大。

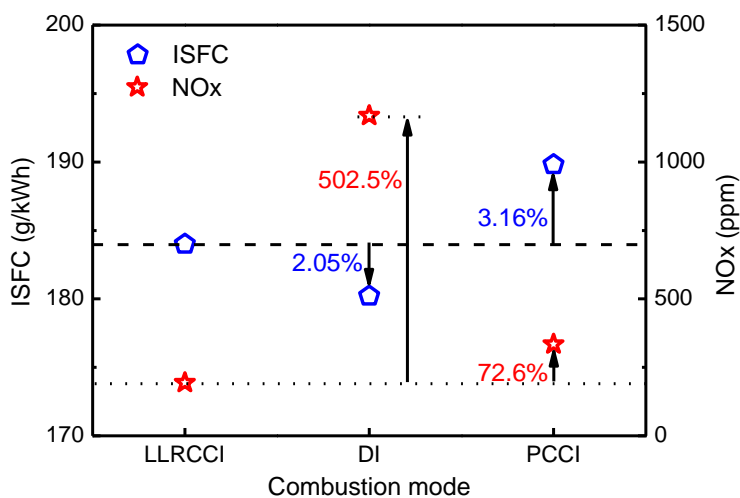


图 7-31 LLRCCI 与 DI、PCCI 模式指示油耗的对比

Figure 7-31 Comparison of the ISFC between DI, PCCI and LLRCCI mode

图 7-31 比较了 DI、PCCI 及 LLRCCI 模式下的指示油耗及 NOx 排放。从图中可以看到，DI 模式指示油耗最低，较 LLRCCI 降低 2.05%，PCCI 模式指示油耗最高，较 LLRCCI 升高 3.16%。LLRCCI 模式油耗较 DI 高的主要原因可能是过早的燃烧相位导致燃烧过程中负功较高，边界层中燃料难于燃烧，导致较高的 CO 和 HC 排放，从而使得燃烧效率不高，进一步导致指示油耗增大。进一步提高 LLRCCI 模式可从优化缸内气道喷燃料浓度分布以及进一步降



低直喷燃料十六烷值推迟燃烧相位。结合 NO<sub>x</sub> 排放，LLRCCI 在有效抑制 NO<sub>x</sub> 排放的基础上保持较低的指示油耗。

## 7.6 本章小结

基于前文提出的柴油模型燃料并结合三组分汽油模型燃料 (TRF)，通过调制柴油模型燃料十六烷值、汽油模型燃料辛烷值，本章系统地研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性 (气道喷燃料比例) 对燃烧过程的影响，在一台单缸发动机上研究了气道喷射不同辛烷值燃料、缸内直喷不同十六烷值燃料对 RCCI 模式燃烧和排放的影响。主要结论如下：

- 1) 气道喷射燃料辛烷值较高时，直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧相位起主导作用。随着气道喷射燃料辛烷值降低，燃烧相位不断提前，燃烧持续期逐渐缩短；
- 2) 在相同预混合率下，气道喷射燃料辛烷值对 CO 排放起主导作用。且在低预混合率下，随着气道喷辛烷值的增大，CO 排放逐渐降低。在预混合率为 0.6 时，辛烷值在 80 左右时，CO 排放最低，辛烷值的升高及降低，均会使得 CO 排放升高。在预混合率较高时，随着辛烷值的增大，CO 排放不断增大；
- 3) HC 排放与气道燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值间关系复杂。在低预混合率时，HC 排放在低 TRF 低 CN 区域排放较高，随着 TRF 的降低、CN 的增大，HC 排放逐渐降低。在预混合率为 0.6、0.8 时，分别存在一个高 HC 排放区域，在该区域的两侧，HC 排放逐渐降低，其中向燃料反应活性低方向，HC 排放降低主要是由于缸内燃烧温度降低，燃料转化为 CO 排放，向燃料反应活性高方向，HC 排放降低主要是由于缸内燃烧强化，被充分氧化所致；
- 4) 预混合率的增大会使得 CO、HC 排放升高，同时抑制 NO<sub>x</sub> 排放及颗粒物排放，且使得颗粒物几何平均直径下降。在有效着火范围内，预混合率 0.8、CN30 配合 TRF70 时，NO<sub>x</sub> 排放较低；
- 5) 非常规排放方面，RCCI 模式烃类氧化物排放和烯炔烃排放主要受预混合率控制，在低预混合率时，烃类氧化物排放较低，随着预混合率的增大，烃类氧化物排放不断增大，且在燃烧恶化区域，烃类氧化物排放急剧增大；
- 6) RCCI 模式指示油耗随着预混合率的增大有下降的趋势。在预混合率为 0.4、0.6 时，指示油耗随着缸内燃料反应活性增大而不断降低；在预混合率 0.8 时，气道喷 TRF70 结合缸内直喷 CN30，指示油耗降至 185g/kWh，且此时 NO<sub>x</sub> 排放也低至 250ppm。气道喷低辛烷值燃料 (Low RON fuel)、缸内直喷低十六烷值燃料 (Low CN fuel) 的 LLRCCI 模式有望实现高效清洁燃烧。



- 7) 对比 DI 与 PCCI 模式，LLRCCI 模式  $\text{NO}_x$  排放最低，且能改善 DI 模式颗粒物排放，指示油耗介于 DI 模式与 PCCI 模式之间。但 LLRCCI 模式 HC、CO 及有害非常规排放较高。



5001080





## 第八章 全文总结及展望

### 8.1 全文总结

为了实现发动机超高效率和近零排放,迫切需要人们掌握柴油模型燃料的构建方法及其基本燃烧特性。基于石化柴油成分复杂、分子量大的事实,以及大分子碳氢燃料难于开展气相燃烧研究的困境,国际上针对柴油模型燃料的构建受到很大的局限性。本文针对中国 0#轻柴油开展了详细的组分分析,选择了十三种候选组分分别代表直链烷烃、支链烷烃、环烷烃、芳香烃成分,来试图构建多组分柴油模型燃料。传统的模型燃料构建方法都是首先确定实际目标燃料的关键理化参数,如平均分子量、密度、黏度、十六烷值/辛烷值、氢碳比等,选取合适的组分及其比例来构建模型燃料,力图使得模型燃料的关键性质能够复现目标燃料。事实上,燃料的物理化学参数十分庞杂,而且不同的理化参数对发动机的燃烧与排放有不同的影响,而模型燃料复现的参数有限,因此构建的模型燃料是否能够复现实际发动机的燃烧和排放性能不得而知。为此,本文提出了基于实际发动机燃烧和排放性能的模型燃料构建方法,不仅将实际燃料的关键理化参数作为目标参数,同时将实际发动机的着火、燃烧和排放作为目标参数。

PCCI 模式采用高 EGR 率结合缸内多段喷射的可燃混合气组织模式,燃料的反应活性(十六烷值)对预喷柴油的缸内活化过程以及主喷柴油的燃烧滞燃期都具有重要影响;燃料的挥发性对缓解缸内预喷柴油的碰壁以及燃油在缸内整体分布规律十分关键。因此,在前文构建模型燃料的基础上,进一步通过调制五组分柴油模型燃料的组分比例及成分,分别控制燃料的十六烷值和挥发性,对比研究了 PCCI 模式下燃料十六烷值及挥发性对燃烧和排放的影响。

RCCI 模式由于采用气道喷加缸内直喷的双喷油策略,对燃油种类的适应性更好。系统的研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性(气道喷燃料比例)对燃烧过程的影响,对进一步拓展 RCCI 模式燃料选择范围,优化不同燃料在 RCCI 模式下的燃烧过程及排放产物均有重要意义。基于前文提出的柴油模型燃料并结合三组分汽油模型燃料(TRF),通过调制柴油模型燃料十六烷值、汽油模型燃料辛烷值,在一台单缸发动机上系统的研究了气道喷射燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值以及气道喷射燃料比例对 RCCI 模式燃烧和排放的影响。

通过上述研究得出如下主要结论:

1. 通过分析柴油组分发现,柴油中链烷烃的碳原子数目分布在 C<sub>9</sub>-C<sub>26</sub> 的区间,其中碳链长度介于 C<sub>11</sub>-C<sub>24</sub> 的正构烷烃占 95wt%。环烷烃中,单环烷烃占 43.6wt%、双环烷烃占 41.6 wt%,三环烷烃占比较少;芳烃中,单环芳香烃占 84.6wt%,双环芳香烃占 13.6 wt%,三环芳香烃含量极少。基于柴油组分分析,选取了四种正构烷烃、三种异构烷烃、两种环烷烃以及四种芳香烃代表柴油中主要碳族组分。其中,正构烷烃选择了正癸烷、正十二烷、正十四烷、正十六烷;异构烷烃选取异辛烷、异十二烷、七甲基壬烷;环烷烃选取甲基环己烷、



十氢萘；芳香烃选择了具有典型结构的单环芳香烃甲苯、丁基苯以及多环芳香烃四氢萘、1-甲基萘。试验过程中，为使得每种组分在燃烧过程中起主导作用，正构烷烃添加比例为 50%、异构烷烃、环烷烃、芳香烃以 30% 体积分数添加到柴油中。通过研究柴油中添加上述组分发现：（a）添加 50% 体积分数正构烷烃，燃料反应活性会增大，导致燃烧相位略有提前，缸内最大压力升功率降低，CO 排放、HC 排放略有改善。对比添加不同正构烷烃，十六烷指数介于 48.8 至 65.0，燃烧相位没有明显变化；（b）通过分析异构烷烃和环烷烃氧化反应动力学机理发现，上述两类组分在燃烧过程中均会产生烯烃类中间产物。柴油添加异构烷烃、环烷烃后会使得燃烧相位推迟，缸内最大压力升高率增大，放热率曲线峰值升高。在排放方面，添加异构烷烃、环烷烃均会使得 CO 排放会增大，HC 排放有所降低；（c）柴油添加芳香烃会导致燃油物性发生较大改变，具体为燃油密度增大、黏度及十六烷指数降低，其中添加甲苯由于沸点较低，会使得燃油馏程曲线严重偏离原柴油；由于芳香烃较低的十六烷值，柴油添加芳香烃后使得燃烧滞燃期增大，放热率峰值增大，其中添加多环芳香烃滞燃期较单环芳香烃滞燃期更长，放热率峰值更高；添加芳香烃会使得燃烧持续期缩短，多环芳香烃较单环芳香烃燃烧持续期更短；此外，添加芳香烃会使得缸内最大压力升高率在中高负荷下显著增大；排放方面，添加芳香烃后会使得 CO、HC 排放在小负荷增大，NO<sub>x</sub> 排放在中高负荷下增大；（d）燃烧相位的改变是柴油添加上述候选组分对燃烧过程、排放产物的产生影响的主要因素，具体为添加高十六烷值燃料会使得燃烧相位提前、缸内最高压力及最高压力升高率下降、放热率峰值下降，而添加候选组分十六烷值低于柴油时，燃烧特征参数恰恰相反。因此，控制相同直喷时刻无法单独分析燃油十六烷值、挥发性等理化参数对燃烧和排放的影响，为着重研究燃料挥发性对燃烧和排放的影响，必须弱化反应活性对燃烧和排放的影响。

2. 燃料的密度、黏度、表面张力是影响直喷压燃式发动机喷雾特性的关键参数，馏程（挥发性）是决定燃空混合以及燃烧速率的核心参数，十六烷值决定着火延迟，而分子饱和度是主导 CO 和 HC 排放的主要因素，上述六个参数是柴油模型燃料构建过程中的关键指标。通过对比分析相同喷射时刻和相同着火时刻下的负荷特性，研究发现：（a）T30 从总体上能够反映各种负荷下燃料馏程（挥发性）对发动机燃烧过程的影响规律。除添加萘烷以外，CA50 随着 T30 的升高而推迟；对于氮氧化物排放，除添加苯和萘具有较高的排放水平，其他物质的氮氧化物排放随着 T30 的升高而降低；发动机的指示热效率与 T30 有明显的关系，在中小负荷下 T30 为 220-230°C 之间能够得到最高值。（b）十六烷值大于某一数值（本文推荐 50），继续提高燃料十六烷值，其对着火时刻的影响非常微小，几乎可以忽略。燃料分子饱和度对发动机的燃烧过程和排放水平有明显的影响。随着分子饱和度的降低，燃烧速率增加，最大气缸压力和峰值放热率升高。排放方面，随着分子饱和程度增加，HC 和 CO 排放显著降低（特别是小负荷下）；当 H/C 大于 1.8 以后，各种负荷下的 CO 和 HC 排放接近于原柴油机水平。分子饱和度对氮氧化物排放也有明显影响，特别是在中高负荷下，随着分子不饱和程度的增加，氮氧化物排放明显升高。（c）根据所选定的实际燃料关键理



化参数, 以及各个候选组分对实际发动机燃烧和排放的影响规律, 确定了模型燃料理化参数的取值范围, 构建了多组分模型燃料: 三组分模型燃料—41.3%正十六烷+36.8%异十六烷+21.9% $\alpha$ -甲基萘; 五组分模型燃料—21.6%正十六烷+15.5%正十八烷+26.0%异十六烷+20.7% $\alpha$ -甲基萘+16.2%四氢萘; 七组分模型燃料—21.5%正十六烷+15.4%正十八烷+25.8%异十六烷+13.7% $\alpha$ -甲基萘+8.1%四氢萘+8.1%正丁苯+7.4%丁基环己烷。

3. 考虑到实际发动机运行过程中参数的多样性 (包括负荷、喷油策略、废气再循环等) 以及实际柴油组分的复杂性, 本文进一步在不同发动机运行工况对模型燃料进行验证。研究表明: (a) 本文所构建的多组分模型燃料均可以精确复现实际发动机不同负荷条件下缸内燃烧过程; 在排放特性方面, 氮氧化物的吻合非常好, CO 在中等负荷下与柴油存在较小的偏差。在全负荷范围内, 五组分模型燃料各种气态排放物的累计偏差最小; (b) 三组分、五组分模型燃料在较宽的直喷正时条件下均能准确再现柴油燃烧过程; 在不同直喷正时条件下, 模型燃料与柴油 CO 排放、NO<sub>x</sub> 排放均十分接近, 五组分模型燃料 HC 排放及颗粒物总数目排放较三组分模型燃料更接近柴油; (c) 采用两段喷射模式时, 模型燃料能再现缸内柴油早喷引起的低温放热现象。在预喷时刻较早时, 模型燃料 CO 排放较柴油高, 且这种差异随着预喷时刻的推迟而降低。模型燃料 HC 排放在不同预喷时刻下均较柴油高, NO<sub>x</sub> 排放与柴油在不同预喷时刻条件下均十分接近。在预喷时刻较早时, 模型燃料由于产生大量核膜态颗粒物, 导致颗粒物总数目较柴油高, 随着预喷时刻的推迟, 颗粒物总数目与柴油大致相同; (d) 在 EGR 率低于 60% 时, 模型燃料与柴油缸内压力曲线和燃烧历程均十分吻合, 但 EGR 率为 60% 时, 模型燃料燃烧相位较柴油推迟约 0.5°CA。与之对应的是, CO 排放在低 EGR 率时与柴油十分接近, 但当 EGR 率达到 60% 时, 模型燃料 CO 排放高于柴油。在不同 EGR 率条件下, 模型燃料 HC 排放均略高于柴油, NO<sub>x</sub> 排放与柴油十分接近; (e) 模型燃料中分别添加甲基壬基甲酮、菲时, 在中小负荷下 CO 略有升高, 添加氯代十二烷、1-十四烯会改善颗粒物排放, 添加甲基壬基甲酮对颗粒物总数目排放影响不大, 添加三环芳香烃菲会导致颗粒物排放急剧增大。
4. 在前文构建模型燃料的基础上, 通过调制五组分柴油模型燃料的组分比例及成分, 分别控制燃料的十六烷值和挥发性, 对比研究了 PCCI 模式下燃料十六烷值及挥发性对燃烧和排放的影响。研究表明: (a) 在相同直喷正时下, 燃料十六烷值对燃烧相位起主导作用; 低十六烷值燃料有助于抑制 PCCI 模式下预喷燃料的过早燃烧, 且随着直喷燃料十六烷值的降低, 燃烧持续期不断缩短, 放热更集中, 但会导致较高的压力升高率; 排放方面, 降低直喷燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放增大, 直喷不同十六烷值燃料颗粒物粒径峰值大小关系不固定, 但降低燃料十六烷值对抑制粒径大于 20nm 颗粒物排放效果显著; (b) 单喷策略下, 提高燃料挥发性可降低 CO 排放; 在预喷比较低时, 改善燃油的挥发性可有效降低预喷柴油导致的较高 CO 排放, 但随着预喷比的增大, 提高燃油挥发性对 CO 排放改善作用被弱化。在预喷时刻较早时, 燃料挥发性对 CO 排放改善作用明显, 但预喷时刻晚于 40°CA, 提高燃料挥发性对 CO 排放的抑制能力下降; 在不同的预喷时刻下, 提高燃料



的挥发性均使得粒径介于 20nm 至 200nm 的颗粒物数目浓度降低；(c) 通过归一化分析发现，提高燃油挥发性在不同的喷油控制条件下均能改善 CO、HC 排放及指示油耗，降低燃料十六烷值会导致 CO、HC 排放及指示油耗升高。在试验工况条件下，通过调整喷油策略，可实现低 NO<sub>x</sub>、低油耗工况，其中在保证 NO<sub>x</sub> 排放低于 200ppm 前提下，提高燃油挥发性更具降低指示油耗潜力，在优化喷油策略的基础上，通过调制燃料理化性质可使得指示油耗低于 180g/kWh。

5. 本文基于提出的柴油模型燃料并结合三组分汽油模型燃料 (TRF)，通过调制柴油模型燃料十六烷值、汽油模型燃料辛烷值，系统的研究 RCCI 模式气道喷射燃料反应活性、直喷燃料反应活性以及缸内混合气反应活性 (气道喷燃料比例) 对燃烧过程的影响。主要结论如下：  
(a) 气道喷射高辛烷值燃料时，缸内直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧相位起主导作用。随着气道喷射燃料辛烷值降低，燃烧相位不断提前，燃烧持续期逐渐缩短；  
(b) 在相同预混合率下，气道喷射燃料辛烷值对 CO 排放起主导作用。在低预混合率下，随着气道喷辛烷值的增大，CO 排放逐渐降低。在预混合率为 0.6 时，辛烷值在 80 左右时，CO 排放最低，辛烷值的升高及降低，均会使得 CO 排放升高。在预混合率较高时，随着辛烷值的增大，CO 排放不断增大；  
(c) HC 排放与气道燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值间关系复杂。在低预混合率时，HC 排放在低 RON 低 CN 区域排放较高，随着 RON 的降低、CN 的增大，HC 排放逐渐降低。在预混合率为 0.6、0.8 时，分别存在一个高 HC 排放区域，在该区域的两侧，HC 排放逐渐降低；  
(d) 预混合率的增大会使得 CO、HC 排放升高，同时有效抑制 NO<sub>x</sub> 排放及颗粒物排放，且使得颗粒物几何平均直径下降。通过系统研究直喷燃料十六烷值、气道喷射燃料辛烷值以及预混合率，发现在有效着火范围内，预混合率 0.8、CN30 配合 TRF70 时，NO<sub>x</sub> 排放较低；  
(e) 非常规排放方面，RCCI 模式烃类氧化物排放和烯炔烃排放主要受预混合率控制，在低预混合率时，烃类氧化物排放较低，随着预混合率的增大，烃类氧化物排放不断增大，且在燃烧恶化区域，烃类氧化物排放急剧增大；  
(f) RCCI 模式指示油耗随着预混合率的增大有所下降的趋势。在预混合率为 0.4、0.6 时，指示油耗随着缸内燃料反应活性增大而不断降低；在预混合率 0.8 时，气道喷 TRF70 结合缸内直喷 CN30，指示油耗降至 185g/kWh，且此时 NO<sub>x</sub> 排放也低至 250ppm，据此提出气道喷低辛烷值燃料 (Low RON fuel)、缸内直喷低十六烷值燃料 (Low CN fuel) 的 LLRCCI 模式。与 DI、PCCI 模式对比发现，LLRCCI 模式 NO<sub>x</sub> 排放最低，且能改善 DI 模式颗粒物排放，指示油耗介于 DI 模式与 PCCI 模式之间，但 LLRCCI 模式 HC、CO 及有害非常规排放较高。

## 8.2 工作展望

本研究通过结合发动机燃烧排放特性、实际柴油理化性质构建了柴油模型燃料，并对构建的模型燃料分别从负荷、喷油控制参数、EGR、燃料成分等多角度进行了验证，所构建的模型燃料被证明与实际柴油非常接近。进一步的，基于构建的柴油模型燃料，通过对组分及比例的



调制，研究了燃料十六烷值、挥发性对 PCCI 模式的影响，以及气道喷燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧和排放性质的影响。取得了一些具有参考价值的研究成果，今后还需对以下工作进行细化和深入研究，主要包括：

1. 针对研究过程中改变燃油挥发性对 PCCI 模式的影响，采用正十二烷作为高挥发性燃料，未来还需考量碳七至碳十左右的具备更高挥发性的组分对 PCCI 模式的影响；
2. 本研究提出了 LLRCCI 模式，其中直喷燃料十六烷值降至 30，但直喷燃料滞燃期仍然较短，未来还需对 CN30 以下直喷燃料在 LLRCCI 模式下的应用进行进一步探索，并细化气道喷燃料辛烷值，详细研究辛烷值介于 TRF70 至 TRF85 燃料作用，进一步优化 LLRCCI 燃烧和排放；
3. LLRCCI 模式采用气道喷加直喷的双喷油策略，其中气道喷策略导致 CO、HC 排放较 DI 模式高，未来还需研究从根源上解决气道喷模式导致的高 CO、HC 以及非常规排放，这对 LLRCCI 模式的指示油耗的降低以及商业化应用至关重要。



## 创新点说明

针对国际上柴油模型燃料研究的不足，本文提出了构建柴油模型燃料的全新方法，即基于模型燃料候选组分对发动机燃烧排放性质的影响并结合实际柴油理化性质构建柴油模型燃料。其后，对所构建的模型燃料分别从负荷、喷油控制参数、EGR、燃料成分等多角度进行了验证，所构建的模型燃料被证明与实际柴油燃烧排放性能十分接近。进一步的，基于构建的柴油模型燃料，通过对组分及比例的调制，研究了燃料十六烷值、挥发性对 PCCI 模式的影响，以及气道喷燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值对 RCCI 模式燃烧和排放性质的影响。全文工作创新点如下：

1. 基于实际柴油的主要理化参数以及燃料与发动机的协同作用（着火时刻、排放等），提出了构建柴油模型燃料的约束条件，得到了多组分、大分子柴油模型燃料。通过多工况运转条件、多种喷射策略、以及多种燃烧技术手段下的验证，所构建的模型燃料能准确复现商用柴油的主要燃烧与排放性能。
2. 基于论文提出的五组分模型燃料，调制燃料的十六烷值以及挥发性，研究了他们对预混合压缩燃烧模式的影响规律，发现直喷燃料的十六烷值是影响 PCCI 燃烧的主导因素。
3. 基于柴油、汽油多组分模型燃料，论文系统地研究了 RCCI 燃烧的主要因素——气道喷燃料辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值、预混合率的影响规律。发现在直喷 CN30 配合气道喷 TRF70 时、预混合率 0.8 时，发动机效率最高、排放最低，从而提出 LLRCCI 模式。



## 参考文献

- [1] 内燃机学: 机械工业出版社; 2005.
- [2] 汪卫东. 国外三大汽车排放法规体系. 柴油机设计与制造. 2003;4-8.
- [3] Fontana G, Galloni E. Variable valve timing for fuel economy improvement in a small spark-ignition engine. *Applied Energy*. 2009;86:96-105.
- [4] Park C, Kim S, Kim H, Moriyoshi Y. Stratified lean combustion characteristics of a spray-guided combustion system in a gasoline direct injection engine. *Energy*. 2012;41:401-7.
- [5] Petitjean D, Bernardini L, Middlemass C, Shahed SM. Advanced gasoline engine turbocharging technology for fuel economy improvements. SAE Technical Paper, 2004-01-0988, 2004.
- [6] 王奇峰. 增压中冷汽油机热管理系统试验与仿真分析: 吉林大学; 2013.
- [7] Brandt EP, Wang Y, Grizzle JW. Dynamic modeling of a three-way catalyst for SI engine exhaust emission control. *IEEE Transactions on control systems technology*. 2000;8:767-76.
- [8] Chatterjee D, Deutschmann O, Warnatz J. Detailed surface reaction mechanism in a three-way catalyst. *Faraday Discussions*. 2002;119:371-84.
- [9] Qian Y, Zhou Q, Wang X, Zhu L, Lu XC. Enabling dual fuel sequential combustion using port fuel injection of high reactivity fuel combined with direct injection of low reactivity fuels. *Applied Thermal Engineering*. 2016;103:399-410.
- [10] Agarwal AK, Srivastava DK, Dhar A, Maurya RK, Shukla PC, Singh AP. Effect of fuel injection timing and pressure on combustion, emissions and performance characteristics of a single cylinder diesel engine. *Fuel*. 2013;111:374-83.
- [11] Sonar D, Soni SL, Sharma D, Srivastava A, Goyal R. Performance and emission characteristics of a diesel engine with varying injection pressure and fuelled with raw mahua oil (preheated and blends) and mahua oil methyl ester. *Clean Technologies & Environmental Policy*. 2015;17:1499-511.
- [12] Jaichandar S, Annamalai K. Combined impact of injection pressure and combustion chamber geometry on the performance of a biodiesel fueled diesel engine. *Energy*. 2013;55:330-9.
- [13] Sayin C, Gumus M, Canakci M. Effect of fuel injection pressure on the injection, combustion and performance characteristics of a DI diesel engine fueled with canola oil methyl esters-diesel fuel blends. *Biomass and Bioenergy*. 2012;46:435-46.
- [14] Lu XC, Qian Y, Yang Z, Han D, Ji J, Zhou X, et al. Experimental study on compound HCCI (homogenous charge compression ignition) combustion fueled with gasoline and diesel blends. *Energy*. 2014;64:707-18.
- [15] Zheng M, Reader GT, Hawley JG. Diesel engine exhaust gas recirculation—a review on advanced and novel concepts. *Energy conversion and management*. 2004;45:883-900.
- [16] Alam M, Song J, Acharya R, Boehman A, Miller K. Combustion and emissions performance of low sulfur, ultra low sulfur and biodiesel blends in a DI diesel engine. *Sae Transactions*. 2004;113:1986-97.
- [17] Zhang J, He K, Ge Y, Shi X. Influence of fuel sulfur on the characterization of PM10 from a diesel engine. *Fuel*. 2009;88:504-10.
- [18] İċingür Y, Altıparmak D. Effect of fuel cetane number and injection pressure on a DI Diesel engine performance and emissions. *Energy Conversion and Management*. 2003;44:389-97.
- [19] Kidoguchi Y, Yang C, Kato R, Miwa K. Effects of fuel cetane number and aromatics on combustion process and emissions of a direct-injection diesel engine. *JSAE Review*. 2000;21:469-75.
- [20] 张毓莹, 胡志海, 辛靖, 聂红. MHUG 技术生产满足欧V排放标准柴油的研究. *石油炼制与化工*. 2009;40:1-7.
- [21] Ghomashi H, Olley P, Mason B, Ebrahimi M. Simulating the influence of injection timing, premixed ratio, and inlet temperature on natural gas/diesel dual-fuel HCCI combustion in a diesel engine. *International Journal of Powertrains*. 2015;4:36-52.
- [22] Schmitt M, Frouzakis CE, Tomboulides AG, Wright YM, Boulouchos K. Direct numerical simulation of the effect of



- compression on the flow, temperature and composition under engine-like conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2015;35:3069-77.
- [23] Zhou D, Yang W, An H, Li J, Shu C. A numerical study on RCCI engine fueled by biodiesel/methanol. *Energy Conversion and Management*. 2015;89:798-807.
- [24] Zhang F, Liu H, Yu J, Yao M. Direct numerical simulation of n-heptane/air auto-ignition with thermal and charge stratifications under partially-premixed charge compression ignition (PCCI) engine related conditions. *Applied Thermal Engineering*. 2016;104:516-26.
- [25] Komninou N. The effect of thermal stratification on HCCI combustion: a numerical investigation. *Applied Energy*. 2015;139:291-302.
- [26] Ra Y, Reitz RD. A combustion model for IC engine combustion simulations with multi-component fuels. *Combustion and flame*. 2011;158:69-90.
- [27] Cathonnet M. Advances and challenges in the chemical kinetics of combustion. *Proceedings of the European combustion meeting2003*.
- [28] Ranzi E. A Wide-Range Kinetic Modeling Study of Oxidation and Combustion of Transportation Fuels and Surrogate Mixtures. *Energy & Fuels*. 2006;20:1024-32.
- [29] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, Peters N. A surrogate fuel for kerosene. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009;32:485-92.
- [30] Dryer FL. Chemical kinetic and combustion characteristics of transportation fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2015;35:117-44.
- [31] Edwards T, Maurice LQ. Surrogate Mixtures to Represent Complex Aviation and Rocket Fuels. *Journal of Propulsion & Power*. 2012;17:461-6.
- [32] Farrell JT, Cernansky NP, Dryer FL, Law CK, Friend DG, Hergart CA, et al. Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Jet Fuels. *SAE Technical Papers*. 2007-01-0201, 2007.
- [33] Pera C, Knop V. Methodology to define gasoline surrogates dedicated to auto-ignition in engines. *Fuel*. 2012;96:59-69.
- [34] Morgan N, Smallbone A, Bhave A, Kraft M, Cracknell R, Kalghatgi G. Mapping surrogate gasoline compositions into RON/MON space. *Combustion & Flame*. 2010;157:1122-31.
- [35] Li H, Yu L, Lu X, Ouyang L, Sun S, Huang Z. Autoignition of ternary blends for gasoline surrogate at wide temperature ranges and at elevated pressure: Shock tube measurements and detailed kinetic modeling. *Fuel*. 2016;181:916-25.
- [36] Mehl M, Chen JY, Pitz WJ, Sarathy SM, Westbrook CK. An Approach for Formulating Surrogates for Gasoline with Application toward a Reduced Surrogate Mechanism for CFD Engine Modeling. *Energy & Fuels*. 2011;25.
- [37] Perez PL, Boehman AL. Experimental Investigation of the Autoignition Behavior of Surrogate Gasoline Fuels in a Constant-Volume Combustion Bomb Apparatus and Its Relevance to HCCI Combustion. *Energy & Fuels*. 2012;26:6106-17.
- [38] Naik CV, Puduppakkam K, Wang C, Kottalam J, Liang L, Hodgson D, et al. Applying Detailed Kinetics to Realistic Engine Simulation: the Surrogate Blend Optimizer and Mechanism Reduction Strategies. *British Poultry Science*. 2010;3:241-59.
- [39] Dooley S, Sang HW, Chaos M, Heyne J, Ju Y, Dryer FL, et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties. *Combustion & Flame*. 2010;157:2333-9.
- [40] Dooley S, Sang HW, Heyne J, Farouk TI, Ju Y, Dryer FL, et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena. *Combustion & Flame*. 2012;159:1444-66.
- [41] Liu YC, Savas AJ, Avedisian CT. Surrogate Fuel Development Based on Droplet Combustion: Comparison of Multi-Component Mixtures with an Aviation Fuel. *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting*. 2012: 2012-1253..
- [42] Bruno TJ, Smith BL. Evaluation of the Physicochemical Authenticity of Aviation Kerosene Surrogate Mixtures. Part





- 1: Analysis of Volatility with the Advanced Distillation Curve. *Energy & Fuels*.2010;24:1-10.
- [43] Bruno TJ, Huber ML. Evaluation of the Physicochemical Authenticity of Aviation Kerosene Surrogate Mixtures. Part 2: Analysis and Prediction of Thermophysical Properties. *Energy & Fuels*. 2010;24:4266-76.
- [44] Violi A, Yan S, Eddings EG, Sarofim AF, Granata S, Faravelli T, et al. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures. *Combustion Science and Technology*. 2002;174:399-417.
- [45] Kim D, Martz J, Violi A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. *Combustion & Flame*. 2014;161:1489-98.
- [46] Schulz WD. Oxidation products of a surrogate JP-8 fuel. Preprints - American Chemical Society. Division of Petroleum Chemistry. 1992.
- [47] Mueller CJ, Cannella WJ, Bruno TJ, Bunting B, Dettman HD, Franz JA, et al. Methodology for Formulating Diesel Surrogate Fuels with Accurate Compositional, Ignition-Quality, and Volatility Characteristics. *Energy & Fuels*. 2012;26:3284-303.
- [48] Mueller CJ, Cannella WJ, Bays JT, Bruno TJ, DeFabio K, Dettman HD, et al. Diesel Surrogate Fuels for Engine Testing and Chemical-Kinetic Modeling: Compositions and Properties. *Energy & Fuels*. 2016;30:1445-61.
- [49] Reiter AM, Wallek T, Pfennig A, Zeymer M. Surrogate Generation and Evaluation for Diesel Fuel. *Energy & Fuels*. 2015;29:4181-92.
- [50] Pitz WJ, Cernansky NP, Dryer FL, Egolfopoulos FN, Farrell JT, Friend DG, et al. Development of an Experimental Database and Chemical Kinetic Models for Surrogate Gasoline Fuels. SAE Technical Paper 2017-01-0175, 2007.
- [51] Farrell JT, Cernansky NP, Dryer FL, Law CK, Friend DG, Hergart CA, et al. Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels. SAE Technical Paper 2007-01-0201, 2007.
- [52] Guibet J-C, Faure-Birchem E. *Fuels and engines: technology, energy, environment*: Éditions Technip; 1999.
- [53] Su X, Ra Y, Reitz RD. A Surrogate Fuel Formulation Approach for Real Transportation Fuels with Application to Multi-Dimensional Engine Simulations. SAE Technical Paper 2014-01-1464, 2014.
- [54] Pitz WJ, Mueller CJ. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Progress in Energy & Combustion Science*. 2011;37:330-50.
- [55] Lippert AM, Stanton DW, Reitz RD, Rutland CJ, Hallett WL. Investigating the effect of spray targeting and impingement on diesel engine cold start. SAE Technical Paper 2000-01-0269, 2000.
- [56] Pastor J, García-Oliver J, Nerva J-G, Giménez B. Fuel effect on the liquid-phase penetration of an evaporating spray under transient diesel-like conditions. *Fuel*. 2011;90:3369-81.
- [57] Kook S, Pickett LM. Liquid length and vapor penetration of conventional, Fischer-Tropsch, coal-derived, and surrogate fuel sprays at high-temperature and high-pressure ambient conditions. *Fuel*. 2012;93:539-48.
- [58] Lemoine F, Castanet G. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques: a state-of-the-art review. *Experiments in fluids*. 2013;54:1-34.
- [59] Basha SA, Gopal KR. In-cylinder fluid flow, turbulence and spray models—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2009;13:1620-7.
- [60] Perini F, Dempsey A, Reitz RD, Sahoo D, Petersen B, Miles PC. A Computational Investigation of the Effects of Swirl Ratio and Injection Pressure on Mixture Preparation and Wall Heat Transfer in a Light-Duty Diesel Engine. SAE Technical Paper 2013-01-1105, 2013.
- [61] Golovitchev VI, Gustavsson J, Cantore G, Montorsi L, Corcione FE. Large-Scale CFD Approach for Spray Combustion Modelling in Compression-Ignited Engines. SAE Technical Paper 2005-24-052, 2005.
- [62] Myong K-J, Suzuki H, Senda J, Fujimoto H. Evaporation characteristics of multi-component fuel. *Fuel*. 2006;85:2632-9.
- [63] Myong K-J, Suzuki H, Senda J, Fujimoto H. Spray inner structure of evaporating multi-component fuel. *Fuel*. 2008;87:202-10.



- [64] Zhang L, Kong S-C. Modeling of multi-component fuel vaporization and combustion for gasoline and diesel spray. *Chemical Engineering Science*. 2009;64:3688-96.
- [65] Siebers DL. Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays. SAE Technical Paper 980809, 1998.
- [66] Siebers DL. Scaling liquid-phase fuel penetration in diesel sprays based on mixing-limited vaporization. SAE Technical Paper 1999-01-0528, 1999.
- [67] Aye MM, Beeckmann J, Vanegas A, Peters N, Pitsch H. Experimental Investigation of Diesel and Surrogate Fuels: Spray and Ignition Behavior. SAE Technical Paper 2011-01-1921, 2011.
- [68] Som S, D'Errico G, Longman D, Lucchini T. Comparison and Standardization of Numerical Approaches for the Prediction of Non-reacting and Reacting Diesel Sprays. SAE Technical Paper 2012-01-1263, 2012.
- [69] Neroorkar K, Shields B, Grover JRO, Plazas Torres A, Schmidt D. Application of the Homogeneous Relaxation Model to Simulating Cavitating Flow of a Diesel Fuel. SAE Technical Paper 2012-01-1269, 2012.
- [70] Vijayraghavan Iyengar S, Rutland C. Effect of Physical Properties on Spray Models. SAE Technical Paper 2013-01-1601, 2013.
- [71] Srivastava S, Schock H, Jaber F. Numerical Simulations of Turbulent Sprays with a Multicomponent Evaporation Model. SAE Technical Paper 2013-01-1603, 2013.
- [72] Schihl P, Hoogterp L, Pangilinan H. Assessment of JP-8 and DF-2 Evaporation Rate and Cetane Number Differences on a Military Diesel Engine. SAE Technical Paper 2006-01-1549, 2006.
- [73] Ranzi E, Gaffuri P, Faravelli T, Dagaut P. A wide-range modeling study of n-heptane oxidation. *Combustion and Flame*. 1995;103:91-106.
- [74] Lu T, Law CK. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2009;35:192-215.
- [75] Maroteaux F, Noel L. Development of a reduced n-heptane oxidation mechanism for HCCI combustion modeling. *Combustion and Flame*. 2006;146:246-67.
- [76] Lindstedt RP, Maurice LQ. Detailed kinetic modelling of n-heptane combustion. *Combustion Science & Technology*. 1995;107:317-53.
- [77] Ciezki HK, Adomeit G. Shock-tube investigation of self-ignition of n-heptane/air mixtures under engine relevant conditions. *Combustion & Flame*. 1993;93:421-33.
- [78] Liu SY, Yao CD, Song JO, Tian ZY, Wang J. Experimental study on n-heptane flame with synchrotron radiation. *Journal of Engineering Thermophysics*. 2008;29:1595-1598.
- [79] Curran HJ, Gaffuri P, Pitz WJ, Westbrook CK. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation. *Combustion and flame*. 1998;114:149-77.
- [80] Huang H, Su W. A New Reduced Chemical Kinetic Model for Autoignition and Oxidation of Lean n-heptane/Air Mixtures in HCCI Engines. SAE Technical Paper 2005-01-0118, 2005.
- [81] Kelley A, Smallbone A, Zhu D, Law C. Laminar flame speeds of C 5 to C 8 n-alkanes at elevated pressures: Experimental determination, fuel similarity, and stretch sensitivity. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2011;33:963-70.
- [82] Wang Q-D, Wang J-B, Li J-Q, Tan N-X, Li X-Y. Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic modeling of pyrolysis and combustion of n-dodecane. *Combustion and Flame*. 2011;158:217-26.
- [83] Vasu SS, Davidson DF, Hong Z, Vasudevan V, Hanson RK. n-Dodecane oxidation at high-pressures: Measurements of ignition delay times and OH concentration time-histories. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009;32:173-80.
- [84] Ji C, Dames E, Wang YL, Wang H, Egolfopoulos FN. Propagation and extinction of premixed C<sub>5</sub>-C<sub>12</sub> n-alkane flames. *Combustion and Flame*. 2010;157:277-87.
- [85] Shen H-PS, Steinberg J, Vanderover J, Oehlschlaeger MA. A shock tube study of the ignition of n-heptane, n-decane, n-dodecane, and n-tetradecane at elevated pressures. *Energy & Fuels*. 2009;23:2482-9.



- [86] Ranzi E, Frassoldati A, Granata S, Faravelli T. Wide-range kinetic modeling study of the pyrolysis, partial oxidation, and combustion of heavy n-alkanes. *Industrial & engineering chemistry research*. 2005;44:5170-83.
- [87] Jia M, Xie M. A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for HCCI engines. *Fuel*. 2006;85:2593-604.
- [88] Chen Q, Dou Z, Li L. Optical signal measurement of iso-octane autoignition behind reflected shock wave. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*. 2014;9521:I-8.
- [89] Davidson DF, Gauthier BM, Hanson RK. Shock tube ignition measurements of iso -octane/air and toluene/air at high pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005;30:1175-82.
- [90] Kirchen P, Shahbakhti M, Koch CR. A skeletal kinetic mechanism for PRF combustion in HCCI engines. *Combustion science and technology*. 2007;179:1059-83.
- [91] Tsurushima T. A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009;32:2835-41.
- [92] Curran HJ, Gaffuri P, Pitz W, Westbrook C. A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. *Combustion and flame*. 2002;129:253-80.
- [93] Ji C, Sarathy SM, Veloo PS, Westbrook CK, Egolfopoulos FN. Effects of fuel branching on the propagation of octane isomers flames. *Combustion and Flame*. 2012;159:1426-36.
- [94] Li S, Sarathy SM, Davidson DF, Hanson RK, Westbrook CK. Shock tube and modeling study of 2, 7-dimethyloctane pyrolysis and oxidation. *Combustion and Flame*. 2015;162:2296-306.
- [95] Won SH, Dooley S, Veloo PS, Wang H, Oehlschlaeger MA, Dryer FL, et al. The combustion properties of 2, 6, 10-trimethyl dodecane and a chemical functional group analysis. *Combustion and Flame*. 2014;161:826-34.
- [96] Oehlschlaeger MA, Steinberg J, Westbrook CK, Pitz WJ. The autoignition of iso-cetane at high to moderate temperatures and elevated pressures: Shock tube experiments and kinetic modeling. *Combustion and flame*. 2009;156:2165-72.
- [97] Dagaut P, Hadj-Ali K. Chemical kinetic study of the oxidation of isocetane (2, 2, 4, 4, 6, 8, 8-heptamethylnonane) in a jet-stirred reactor: experimental and modeling. *Energy & Fuels*. 2009;23:2389-95.
- [98] Sarathy SM, Westbrook CK, Mehl M, Pitz WJ, Togbe C, Dagaut P, et al. Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C 7 to C 20. *Combustion and flame*. 2011;158:2338-57.
- [99] McEnally CS, Pfeifferle LD. Experimental study of fuel decomposition and hydrocarbon growth processes for cyclohexane and related compounds in nonpremixed flames. *Combustion and flame*. 2004;136:155-67.
- [100] Sivaramakrishnan R, Michael J. Shock tube measurements of high temperature rate constants for OH with cycloalkanes and methylcycloalkanes. *Combustion and Flame*. 2009;156:1126-34.
- [101] Li W, Law ME, Westmoreland PR, Kasper T, Hansen N, Kohse-Höinghaus K. Multiple benzene-formation paths in a fuel-rich cyclohexane flame. *Combustion and Flame*. 2011;158:2077-89.
- [102] Natelson RH, Kurman MS, Cernansky NP, Miller DL. Low temperature oxidation of n-butylcyclohexane. *Combustion and Flame*. 2011;158:2325-37.
- [103] Kang D, Lilik G, Dillstrom V, Agudelo J, Lapuerta M, Al-Qurashi K, et al. Impact of branched structures on cycloalkane ignition in a motored engine: Detailed product and conformational analyses. *Combustion and Flame*. 2015;162:877-92.
- [104] Ji C, Dames E, Sirjean B, Wang H, Egolfopoulos FN. An experimental and modeling study of the propagation of cyclohexane and mono-alkylated cyclohexane flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2011;33:971-8.
- [105] Zhang F, Wang Z, Wang Z, Zhang L, Li Y, Qi F. Kinetics of decomposition and isomerization of methylcyclohexane: Starting point for studying monoalkylated cyclohexanes combustion. *Energy & Fuels*. 2013;27:1679-87.
- [106] Zhu Y, Davidson D, Hanson R. Pyrolysis and oxidation of decalin at elevated pressures: A shock-tube study. *Combustion and Flame*. 2014;161:371-83.
- [107] Dagaut P, Ristori A, Frassoldati A, Faravelli T, Dayma G, Ranzi E. Experimental and semi-detailed kinetic modeling



- study of decalin oxidation and pyrolysis over a wide range of conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2013;34:289-96.
- [108] Li J, Yang WM, An H, Zhou DZ, Yu WB, Wang JX, et al. Numerical investigation on the effect of reactivity gradient in an RCCI engine fueled with gasoline and diesel. *Energy Conversion and Management*. 2015;92:342-52.
- [109] Agafonov GL, Vlasov PA, Smirnov VN. Soot formation in the pyrolysis of benzene, methylbenzene, and ethylbenzene in shock waves. *Kinetics & Catalysis*. 2011;52:358-70.
- [110] Bukharkina TV, Grechishkina OS, And NGD, Krukovskaya NV. Kinetic Model of Ethyl Benzene Oxidation Catalysed by Manganese Salts. *Organic Process Research & Development*. 2003;7:148-54.
- [111] Davis S, Wang H, Breinsky K, Law C. Laminar flame speeds and oxidation kinetics of benzene-air and toluene-air flames. *Symposium (international) on combustion*; 1996. 26. 1025-33.
- [112] Zhang L, Cai J, Zhang T, Qi F. Kinetic modeling study of toluene pyrolysis at low pressure. *Combustion and Flame*. 2010;157:1686-97.
- [113] Oehlschlaeger MA, Davidson DF, Hanson RK. Thermal decomposition of toluene: Overall rate and branching ratio. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2007;31:211-9.
- [114] Dagaut P, Ristori A, Frassoldati A, Faravelli T, Dayma G, Ranzi E. Experimental study of tetralin oxidation and kinetic modeling of its pyrolysis and oxidation. *Energy & Fuels*. 2013;27:1576-85.
- [115] Kukkadapu G, Weber BW, Sung C-J. Autoignition study of tetralin in a rapid compression machine at elevated pressures and low-to-intermediate temperatures. *Fuel*. 2015;159:436-45.
- [116] Wang H, Gerken WJ, Wang W, Oehlschlaeger MA. Experimental Study of the High-Temperature Autoignition of Tetralin. *Energy & Fuels*. 2013;27:5483-7.
- [117] Kukkadapu G, Sung C-J. Autoignition Study of 1-Methylnaphthalene in a Rapid Compression Machine. *Energy & Fuels*. 2017;31:854-66.
- [118] Wang H, Warner SJ, Oehlschlaeger MA, Bounaceur R, Biet J, Glaude P-A, et al. An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of  $\alpha$ -methylnaphthalene/air and  $\alpha$ -methylnaphthalene/n-decane/air mixtures at elevated pressures. *Combustion and Flame*. 2010;157:1976-88.
- [119] Narayanaswamy K, Blanquart G, Pitsch H. A consistent chemical mechanism for oxidation of substituted aromatic species. *Combustion and Flame*. 2010;157:1879-98.
- [120] Sun S, Yu L, Wang S, Mao Y, Lu X. Experimental and Kinetic Modeling Study on Self-Ignition of  $\alpha$ -Methylnaphthalene in a Heated Rapid Compression Machine. *Energy & Fuels*. 2017;31:11304-14.
- [121] Risberg P, Kalghatgi G, Ångström HE, Wåhlin F. Autoignition quality of diesel-like fuels in HCCI engines. *SAE Technical Paper*. 2005-01-2127, 2015.
- [122] Zhang QF. Reduced Chemical Kinetic Model of Toluene Reference Fuels for HCCI Combustion. *Acta Physico-Chimica Sinica*. 2011;27:530-8.
- [123] Curran HJ, Pitz WJ, Westbrook CK, Callahan GV, Dryer FL. Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated pressures. *Symposium on Combustion*. 1998;27:379-87.
- [124] Ra Y, Reitz RD. A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels. *Combustion and Flame*. 2008;155:713-38.
- [125] Andrae J. Comprehensive chemical kinetic modeling of toluene reference fuels oxidation. *Fuel*. 2013;107:740-8.
- [126] Sakai Y, Miyoshi A, Koshi M, Pitz WJ. A kinetic modeling study on the oxidation of primary reference fuel-toluene mixtures including cross reactions between aromatics and aliphatics. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009;32:411-8.
- [127] Stein Y, Yetter RA, Dryer FL, Aradi A. The Autoignition Behavior of Surrogate Diesel Fuel Mixtures and the Chemical Effects of 2-Ethylhexyl Nitrate (2-EHN) Cetane Improver. *SAE Technical Paper* 1999-01-1504, 1999.
- [128] Chang Y, Jia M, Li Y, Liu Y, Xie M, Wang H, et al. Development of a skeletal mechanism for diesel surrogate fuel



- by using a decoupling methodology. *Combustion and Flame*. 2015;162:3785-802.
- [129] Poon HM, Pang KM, Ng HK, Gan S, Schramm J. Development of multi-component diesel surrogate fuel models – Part I: Validation of reduced mechanisms of diesel fuel constituents in 0-D kinetic simulations. *Fuel*. 2016;180:433-41.
- [130] Poon HM, Ng HK, Gan S, Pang KM, Schramm J. Development and Validation of Chemical Kinetic Mechanism Reduction Scheme for Large-Scale Mechanisms. SAE Technical Paper 2014-01-2576, 2014.
- [131] Poon HM, Pang KM, Ng HK, Gan S, Schramm J. Development of multi-component diesel surrogate fuel models – Part II: Validation of the integrated mechanisms in 0-D kinetic and 2-D CFD spray combustion simulations. *Fuel*. 2016;181:120-30.
- [132] Liang L, Naik CV, Puduppakkam K, Wang C, Modak A, Meeks E, et al. Efficient Simulation of Diesel Engine Combustion Using Realistic Chemical Kinetics in CFD. SAE Technical Paper 2010-01-0178, 2010.
- [133] Puduppakkam KV, Liang L, Naik CV, Meeks E, Kokjohn SL, Reitz RD. Use of Detailed Kinetics and Advanced Chemistry-Solution Techniques in CFD to Investigate Dual-Fuel Engine Concepts. SAE Technical Paper 2011-01-0895, 2011.
- [134] Bergman M, Golovitchev VI. CFD Modeling of a Two-Stroke Free Piston Energy Converter using Detailed Chemistry. SAE Technical Paper 2005-24-074, 2005.
- [135] Fredriksson J, Bergman M, Golovitchev VI, Denbratt I. Modeling the Effect of Injection Schedule Change on Free Piston Engine Operation. SAE Technical Paper 2006-01-0449, 2006.
- [136] Imren A, Golovitchev V, Sorousbay C, Valentino G. The Full Cycle HD Diesel Engine Simulations Using KIVA-4 Code. SAE Technical Paper 2010-01-2234, 2010.
- [137] Zama Y, Yamamoto C, Furuhashi T, Saito M, Arai M. Fuel Sulfur Effect on Nano-PM Formation from Diffusion Flame. SAE Technical Paper 2011-01-2055.
- [138] Mathes A, Ries J, Caton P, Cowart J, Luning Prak D, Hamilton L. Binary Mixtures of Branched and Aromatic Pure Component Fuels as Surrogates for Future Diesel Fuels. SAE Technical Paper 2010-01-2188, 2010.
- [139] Felsch C, Luckhchoura V, Weber J, Peters N, Hasse C, Wiese W, et al. Applying Representative Interactive Flamelets (RIF) with Special Emphasis on Pollutant Formation to Simulate a DI Diesel Engine with Roof-Shaped Combustion Chamber and Tumble Charge Motion. SAE Technical Paper 2007-01-0167, 2007.
- [140] Weber J, Peters N, Diwakar R, Siewert RM, Lippert A. Simulation of the Low-Temperature Combustion in a Heavy Duty Diesel Engine. SAE Technical Paper 2007-01-0904, 2007.
- [141] Hasse C, Bikas G, Peters N. Modeling DI-Diesel Combustion using the Eulerian Particle Flamelet Model (EPFM). SAE Technical Paper 2000-01-2934, 2000.
- [142] Felsch C, Gauding M, Vanegas A, Won H, Luckhchoura V, Peters N, et al. Evaluation of Modeling Approaches for NO<sub>x</sub> Formation in a Common-Rail DI Diesel Engine within the Framework of Representative Interactive Flamelets (RIF). SAE Technical Paper 2008-01-0971, 2008.
- [143] Luckhchoura V, Won HW, Sharma A, Paczko G, Peters N. Investigation of Combustion Noise Development with Variation in Start of Injection using 3-Dimensional Simulations by Applying Representative Interactive Flamelet (RIF) Model. SAE Technical Paper 2008-01-0950, 2008.
- [144] Weber J, Peters N, Bockhorn H, Pittermann R. Numerical Simulation of the Evolution of the Soot Particle Size Distribution in a DI Diesel Engine Using an Emulsified Fuel of Diesel-Water. SAE Technical Paper 2004-01-1840, 2004.
- [145] Weber J, Won HW, Peters N. Experimental Validation of a Surrogate Fuel for Diesel. SAE Technical Paper 2007-01-1842, 2007.
- [146] Lu X, Han D, Huang Z. Fuel design and management for the control of advanced compression-ignition combustion modes. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2011;37:741-83.
- [147] Yao M, Zheng Z, Liu H. Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2009;35:398-437.



- [148] Kokjohn SL, Hanson RM, Splitter DA, Reitz RD. Experiments and modeling of dual-fuel HCCI and PCCI combustion using in-cylinder fuel blending. SAE Technical Paper 2009-01-2647, 2009.
- [149] Reitz RD, Duraisamy G. Review of high efficiency and clean reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion in internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2015;46:12-71.
- [150] Luo J, Yao M, Liu H, Yang B. Experimental and numerical study on suitable diesel fuel surrogates in low temperature combustion conditions. *Fuel*. 2012;97:621-9.
- [151] Peng Z, Zhao H, Ladommatos N. Effects of air/fuel ratios and EGR rates on HCCI combustion of n-heptane, a diesel type fuel. SAE Technical Paper 2003-01-0747, 2003.
- [152] Zheng Z, Yao M. Charge stratification to control HCCI: Experiments and CFD modeling with n-heptane as fuel. *Fuel*. 2009;88:354-65.
- [153] Mehl M, Pitz WJ, Sjöberg M, Dec JE. Detailed Kinetic Modeling of Low-Temperature Heat Release for PRF Fuels in an HCCI Engine. SAE Technical Paper 2009-01-1806, 2009.
- [154] Corcione FE, Costa M, Vaglieco BM, Omote H. 3D Simulations by a Detailed Chemistry Combustion Model and Comparison With Experiments of a Light-Duty, Common-Rail Diesel Engine. SAE Technical Paper 2005-24-057, 2005.
- [155] Zheng J, Miller DL, Cernansky NP, Liu D, Zhao X, Zhang M. Some Observations on the Effects of EGR, Oxygen Concentration, and Engine Speed on the Homogeneous Charge Combustion of n-Heptane. SAE Technical Paper 2004-01-1905, 2004.
- [156] Tanaka S, Ayala F, Keck JC. A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine. *Combustion and flame*. 2003;133:467-81.
- [157] Bergman M, Golovitchev VI. Modification of a Diesel Oil Surrogate Model for 3D CFD Simulation of Conventional and HCCI Combustion. SAE Technical Paper 2008-01-2410, 2008.
- [158] Zhou D, Yang W, An H, Li J, Kraft M. An Enhanced Primary Reference Fuel Mechanism Considering Conventional Fuel Chemistry in Engine Simulation. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 2016;138:092804.
- [159] Dubreuil A, Foucher F, Mounaïm-Rousselle C. Effect of EGR Chemical Components and Intake Temperature on HCCI Combustion Development. SAE Technical Paper 2006-32-0044, 2006.
- [160] Hou Y, Huang Z, Lu X, Fang J, Zu L. Fuel design real-time to control HCCI combustion. *Chinese Science Bulletin*. 2006;51:2673-80.
- [161] 侯玉春. 燃料设计控制 HCCI 燃烧与排放的试验研究: 上海交通大学; 2007.
- [162] Xingcai L, Yuchun H, Libin J, Linlin Z, Huang Z. Heat Release Analysis on Combustion and Parametric Study on Emissions of HCCI Engines Fueled with 2-Propanol/n-Heptane Blend Fuels. *Energy & Fuels*. 2006;20:1870-8.
- [163] Shibata G, Oyama K, Urushihara T, Nakano T. The effect of fuel properties on low and high temperature heat release and resulting performance of an HCCI engine. SAE Technical Paper 2004-01-0553, 2004.
- [164] Kokjohn SL, Hanson RM, Splitter DA, Reitz RD. Experiments and modeling of dual-fuel HCCI and PCCI combustion using in-cylinder fuel blending. SAE Technical Paper 2009-01-2647, 2009.
- [165] Su W, Huang H. Study of fuel distribution on diesel PCCI combustion by development of a new characteristic-time combustion model. SAE Technical Paper 2008-01-1605, 2008.
- [166] Cao L, Bhave A, Su H, Mosbach S, Kraft M, Dris A, et al. Influence of injection timing and piston bowl geometry on PCCI combustion and emissions. SAE Technical Paper 2009-01-1102, 2009.
- [167] Hou D, Zhang H, Kalish Y, Chia-fon FL, Cheng WL. Adaptive PCCI combustion using micro-variable circular-orifice (MVCO) fuel injector—key enabling technologies for high efficiency clean diesel engines. SAE Technical Paper 2009-01-1528, 2009.
- [168] Kiplimo R, Tomita E, Kawahara N, Yokobe S. Effects of spray impingement, injection parameters, and EGR on the combustion and emission characteristics of a PCCI diesel engine. *Applied Thermal Engineering*. 2012;37:165-75.
- [169] Parks JE, Prikhodko V, Storey JM, Barone TL, Lewis SA, Kass MD, et al. Emissions from premixed charge



- compression ignition (PCCI) combustion and affect on emission control devices. *Catalysis Today*. 2010;151:278-84.
- [170] Kook S, Bae C. Combustion control using two-stage diesel fuel injection in a single-cylinder PCCI engine. SAE Technical Paper 2004-01-0938, 2004.
- [171] Araki M, Umino T, Obokata T, Ishima T, Shiga S, Nakamura H, et al. Effects of compression ratio on characteristics of PCCI diesel combustion with a hollow cone spray. SAE Technical Paper 2005-01-2130, 2005.
- [172] Jung S, Ishida M, Yamamoto S, Ueki H, Sakaguchi D. Enhancement of NO<sub>x</sub>-PM trade-off in a diesel engine adopting bio-ethanol and EGR. *International Journal of Automotive Technology*. 2010;11:611-6.
- [173] Leermakers CAJ, Luijten CCM, Somers LMT, Kalghatgi GT, Albrecht BA. Experimental Study of Fuel Composition Impact on PCCI Combustion in a Heavy-Duty Diesel Engine. SAE Technical Paper 2011-01-1351, 2011.
- [174] Boot M, Rijk E, Luijten C, Somers B, Albrecht B. Spray Impingement in the Early Direct Injection Premixed Charge Compression Ignition Regime. SAE Technical Paper 2010-01-1501, 2010.
- [175] Kerschgens B, Vanegas A, Pitsch H. Numerical Assessment of Emission Sources for a Modified Diesel Engine Running in PCCI Mode on a Mixture of Gasoline and Diesel. SAE Technical Paper 2011-24-0014, 2011.
- [176] Zehni A, Khoshbakhti Saray R, Poorghasemi K. Numerical comparison of PCCI combustion and emission of diesel and biodiesel fuels at low load conditions using 3D-CFD models coupled with chemical kinetics. *Applied Thermal Engineering*. 2017;110:1483-99.
- [177] Juttu S, Mishra P, Thipse SS, Marathe NV, Babu MKG. Combined PCCI-DI Combustion to Meet EURO-IV Norms on LCV Engine - Experimental and Visualisation Study. SAE Technical Paper 2011-26-0031, 2011.
- [178] Hanson RM, Kokjohn SL, Splitter DA, Reitz RD. An Experimental Investigation of Fuel Reactivity Controlled PCCI Combustion in a Heavy-Duty Engine. SAE Technical Paper 2010-01-0864, 2011.
- [179] Kokjohn SL, Hanson RM, Splitter DA, Reitz RD. Experiments and Modeling of Dual-Fuel HCCI and PCCI Combustion Using In-Cylinder Fuel Blending. SAE Technical Paper 2009-01-2647, 2009.
- [180] Hanson R, Curran S, Wagner R, Kokjohn S, Splitter D, Reitz RD. Piston Bowl Optimization for RCCI Combustion in a Light-Duty Multi-Cylinder Engine. SAE Technical Paper 2012-01-0380, 2012.
- [181] Hanson R, Kokjohn S, Splitter D, Reitz RD. Fuel Effects on Reactivity Controlled Compression Ignition (RCCI) Combustion at Low Load. SAE Technical Paper 2011-01-0361, 2011.
- [182] Kokjohn SL, Hanson RM, Splitter DA, Reitz RD. Fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI): a pathway to controlled high-efficiency clean combustion. *International Journal of Engine Research*. 2011;12:209-26.
- [183] Curran S, Hanson R, Wagner R. Effect of E85 on RCCI Performance and Emissions on a Multi-Cylinder Light-Duty Diesel Engine. SAE Technical Paper 2012-01-0376, 2012.
- [184] Li Y, Jia M, Liu Y, Xie M. Numerical study on the combustion and emission characteristics of a methanol/diesel reactivity controlled compression ignition (RCCI) engine. *Applied Energy*. 2013;106:184-97.
- [185] Qian Y, Wang X, Zhu L, Lu X. Experimental studies on combustion and emissions of RCCI (reactivity controlled compression ignition) with gasoline/n-heptane and ethanol/n-heptane as fuels. *Energy*. 2015;88:584-94.
- [186] Qian Y, Ouyang L, Wang X, Zhu L, Lu X. Experimental studies on combustion and emissions of RCCI fueled with n-heptane/alcohols fuels. *Fuel*. 2015;162:239-50.
- [187] Splitter D, Reitz RD, Hanson R. High Efficiency, Low Emissions RCCI Combustion by Use of a Fuel Additive. SAE Technical Paper 2010-01-2167, 2010.
- [188] Soloiu V, Duggan M, Weaver J, Vlcek B, Harp S, Molina G. RCCI Operation With PFI of n-Butanol and DI of Biodiesel Compared With DI of Binary Mixtures of n-Butanol and Biodiesel. In ASME 2013 internal combustion engine division fall technical conference volume 2: fuels; numerical simulation; engine design, lubrication, and applications.
- [189] Zhou DZ, Yang WM, An H, Li J, Shu C. A numerical study on RCCI engine fueled by biodiesel/methanol. *Energy Conversion and Management*. 2015;89:798-807.
- [190] Nieman DE, Dempsey AB, Reitz RD. Heavy-Duty RCCI Operation Using Natural Gas and Diesel. SAE Technical



Paper 2012-01-0379, 2012.

- [191] Splitter D, Hanson R, Kokjohn S, Reitz RD. Reactivity Controlled Compression Ignition (RCCI) Heavy-Duty Engine Operation at Mid-and High-Loads with Conventional and Alternative Fuels. SAE Technical Paper 2011-01-0363, 2011.
- [192] 刘巽俊. 内燃机的排放与控制: 机械工业出版社; 2005.
- [193] Pitz WJ, Mueller CJ. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2011;37:330-50.
- [194] Krishnasamy A, Reitz RD, Willems W, Kurtz E. Surrogate Diesel Fuel Models for Low Temperature Combustion. SAE Technical Paper 2013-01-1092, 2013.
- [195] Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures. *Combustion Science and Technology*. 2002;174:399-417.
- [196] Yaws C. CHEMICAL PROPERTIES HANDBOOK: 世界图书出版公司北京公司; 1999.
- [197] Kim D, Martz J, Violi A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. *Combustion and Flame*. 2014;161:1489-98.
- [198] Narayanaswamy K, Pitsch H, Pepiot P. A component library framework for deriving kinetic mechanisms for multi-component fuel surrogates: Application for jet fuel surrogates. *Combustion and Flame*. 2016;165:288-309.
- [199] Bruno TJ, Smith BL. Evaluation of the Physicochemical Authenticity of Aviation Kerosene Surrogate Mixtures. Part 1: Analysis of Volatility with the Advanced Distillation Curve. *Energy & Fuels*. 2010;24:4266-76.
- [200] Bruno TJ, Huber ML. Evaluation of the Physicochemical Authenticity of Aviation Kerosene Surrogate Mixtures. Part 2: Analysis and Prediction of Thermophysical Properties. *Energy & Fuels*. 2010;24:4277-84.
- [201] Standard Test Method for Calculated Cetane Index of Distillate Fuels. ASTM.
- [202] Curran HJ, Gaffuri P, Pitz WJ, Westbrook CK. A Comprehensive Modeling Study of n -Heptane Oxidation. *Combustion & Flame*. 1998;114:149-77.
- [203] Westbrook C. Recent advances in chemical kinetics of jet fuels. *Aerospace Sciences Meeting*2013.
- [204] Yuan W, Li Y, Dagaut P, Yang J, Qi F. Investigation on the pyrolysis and oxidation of toluene over a wide range conditions. I. Flow reactor pyrolysis and jet stirred reactor oxidation. *Combustion & Flame*. 2015;162:3-21.
- [205] Yuan W, Li Y, Dagaut P, Yang J, Qi F. Investigation on the pyrolysis and oxidation of toluene over a wide range conditions. II. A comprehensive kinetic modeling study. *Combustion & Flame*. 2015;162:22-40.
- [206] Hiroyasu H, Arai M. Structures of Fuel Sprays in Diesel Engines. SAE Technical Paper 900475, 1990.
- [207] Hiroyasu H, Arai M, Tabata M. Empirical Equations for the Sauter Mean Diameter of a Diesel Spray. SAE Technical Paper 890464, 1989.
- [208] Heywood, JohnB. Internal combustion engine fundamentals: McGraw-Hill; 1988.
- [209] Kittelson DB. Engines and nanoparticles : a review. *Journal of Aerosol Science*. 1998;29:575-88.
- [210] Tree DR, Svensson KI. Soot processes in compression ignition engines. *Progress in Energy & Combustion Science*. 2007;33:272-309.
- [211] Merkisz J, Pielecha J. Nanoparticle Emissions From Combustion Engines: Springer International Publishing; 2015.
- [212] Ogawa H, Miyamoto N, Sakai A, Akao K. Combustion in a Two-stage Injection PCCI Engine With Lower Distillation-temperature Fuels. SAE Technical Paper 2004-01-1914, 2004..
- [213] Dijkstra R, Di Blasio G, Boot M, Beatrice C, Bertoli C. Assessment of the Effect of Low Cetane Number Fuels on a Light Duty CI Engine: Preliminary Experimental Characterization in PCCI Operating Condition. SAE Technical Paper 2011-24-0053, 2011.





# 符号与缩写

符号缩写	英文全称	中文含义
ATDC	After Top Dead Center	上止点后
BP	Boiling point	沸点
BTDC	Before Top Dead Centre	上止点前
CA	Crank Angle	曲轴转角
CA10	Crank Angle at 10% Completion of Heat Release	燃烧始点
CA50	Crank Angle at 50% Completion of Heat Release	燃烧中值时刻
CA90	Crank Angle at 90% Completion of Heat Release	燃烧终值时刻
CN	Cetane number	十六烷值
CO	Carbon monoxide	一氧化碳
CO <sub>2</sub>	Carbon dioxide	二氧化碳
DI	Direct injection	缸内直喷
Dist	Distillation range	馏程
EGR	Exhaust gas recirculation	废气再循环
HC	Hydrocarbon	碳氢
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition	均质压缩燃烧
H/C	Hydrogen to carbon ratio	氢碳比
HMN	2,2,4,4,6,8,8-Heptamethylnonane	2,2,4,4,6,8,8-七甲基壬烷
HRR	Heat release rate	放热速率
IMEP	Indicated Mean Effective Pressure	指示平均有效压力
ITE	Indicated Thermal Efficiency	指示热效率
JSR	Jet-stirred reactor	射流搅拌反应器
LHV	Lower heating value	低热值
MCH	Methyl cyclohexane	甲基环己烷
MON	Motor octane number	马达法辛烷值
NO <sub>x</sub>	Nitrogen oxide	氮氧化物
NTC	Negative temperature coefficient	负温度梯度系数



PCCI	Premixed charge compression ignition	预混合压缩燃烧
PI	Port injection	气道喷射
PM	Particulate matter	颗粒物
P <sub>max</sub>	Maximum in-cylinder pressure	缸内最高压力
PRF	Primary reference fuel	基础参比燃料
PRR <sub>max</sub>	Maximum in-cylinder pressure rising rate	缸内最大压力升高率
RCM	Rapid compression machine	快速压缩机
RCCI	Reactivity Control Compression Ignition	化学反应动力学控制压缩
RON	Research octane number	研究法辛烷值
RP	Premixed ratio	预混合率
SMD	Sauter mean diameter	液滴平均直径
ST	Surface tension	表面张力
T <sub>max</sub>	Maximum in-cylinder temperature	缸内最高压力
TRF	Toluene reference fuel	甲苯参比燃料
T <sub>10</sub>	Temperature at 10% volume fraction recovery	10%回收温度
T <sub>30</sub>	Temperature at 30% volume fraction recovery	30%回收温度
T <sub>50</sub>	Temperature at 50% volume fraction recovery	50%回收温度
T <sub>70</sub>	Temperature at 70% volume fraction recovery	70%回收温度
T <sub>90</sub>	Temperature at 90% volume fraction recovery	90%回收温度
ULSD	Ultra-low Sulphur diesel fuel	低硫柴油
$\Delta P$	Difference between injection pressure and ambient pressure	喷油压力差
Re	Reynolds number	雷诺数
S	Completely developed spray penetration	喷油贯穿距
We	Weber number	韦伯数
$\theta$	Spray cone angle	喷雾锥角
$\phi$	Equivalence ratio	当量比
$\rho_a$	Environmental air density	环境空气密度
$\rho_l$	Liquid density	密度
$u_a$	Environmental air viscosity	空气黏度



15001080

$u_l$

Liquid viscosity

液体黏度

$\eta$

Efficiency

效率



15001080



## 致 谢

春华秋实、寒来暑往，转眼间从本科毕业、硕士入学直至博士阶段接近尾声，整整过去了5个年头。又是一次即将毕业，在这近五年多的时光里，付出了很多，也收获了很多。在毕业论文即将完成的时候，谨以此致谢感谢一路以来相知相伴的师友，以为纪念。

首先，我要感谢我的恩师吕兴才教授。在近五年的学习生活中，我从一个懵懂的本科生成长为初窥科研门径的博士，完全依赖于导师的引导以及资助。吕老师在科研以及生活上的关心与帮助，助我度过了很多难关，让我能够摒弃优厚工作的诱惑，全力追求自己的本心，从事热爱的科研工作。本文从最开始选题到最终定稿，都是在导师吕兴才教授的关注和指导下完成的，没有老师的谆谆教诲和严格要求就没有我今天的成绩。吕老师知识渊博、治学严谨，为人平易近人，特别是在我完成博士论文的过程，给出了许多关键性指导，使我能顺利完成本课题。

其次，我要感谢黄宝玉师傅。在试验台架从无到有的搭建过程中，黄师傅凭借其丰富宝贵的实践经验，提供了许多帮助和指导。在黄师傅的指导下，我对发动机台架构建以及布局有着全面的认知和掌握。相信多年后，自己仍不会忘记在暑期期间，黄师傅在实验室帮助和指导自己搭建试验台架时，挥汗如雨的场景。同时，也要感谢刘国庆老师、方俊华、韩东、朱磊、具德浩等老师的帮助和建议。

在此特别感谢杨峥师兄对我研究生学习和生活上的关心和帮助，杨峥师兄带我熟悉实验室的环境，帮助我融入内燃机研究所这个大家庭。同时也感谢朱利峰、于亮、王小乐、单新星、孙书洲、周奇艳、姜晨旭、张亚辉、邱越、李秭泷等师弟师妹对我科研上的帮助。此外，还要感谢朱浩月、王春海、白金龙、何卓遥、张婷婷、陈婷等师兄师姐对我工作的帮助与支持。另外，也要感谢李鹏飞、徐丽丽、李华等同学在博士学业过程中的陪伴与鼓励。

最后，我要感谢我的父母及亲人，是他们无私的奉献和默默的支持支撑我走到今天。无论在何时，处于何种困难中，他们都是我最坚强的后盾。相信此生，自己不会忘记他们无言的爱和奉献。在此，尤其要感谢我的爱人谢云女士，她陪伴我度过了博士期间清苦的日子，在生活上关心照顾我。

在此已为人夫、初为人父、即将毕业的人生阶段，各种问题接踵而至，倍感生活压力之巨大。念苦思甜，尤为珍视、感激师长对我的关爱与帮助。在此，再次向所有关心我、鼓励我、帮助我的顺利完成学业的亲人、老师和朋友表示出最诚挚的感谢。



15001080

致 谢

---



# 攻读博士学位期间发表的学术论文

## SCI 论文:

1. **Qian Y**, Sun SZ, Ju DH, Shan XX, Lu XC. Review of the state-of-the-art of biogas combustion mechanisms and applications in internal combustion engines. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 69: 50-58. [\(SCIA 档\)](#)
2. **Qian Y**, Li H, Han D, Ji LB, Huang Z, Lu XC. Octane rating effects of direct injection fuels on dual fuel HCCI-DI stratified combustion mode with port injection of n-heptane. *Energy*, 2016, 111: 1003-1016. [\(SCIA 档\)](#)
3. **Qian Y**, Ouyang LQ, Wang XL, Zhu LF, Lu XC. Experimental studies on combustion and emissions of RCCI fueled with n-heptane/alcohols fuels. *Fuel*, 2015, 162: 239-250. [\(SCIA 档\)](#)
4. **Qian Y**, Wang XL, Zhu LF, Lu XC. Experimental studies on combustion and emissions of RCCI (reactivity controlled compression ignition) with gasoline/n-heptane and ethanol/n-heptane as fuels. *Energy*, 2015, 88: 584-594. [\(SCIA 档\)](#)
5. **Qian Y**, Zhu LF, Wang Y, Lu XC. Recent progress in the development of biofuel 2, 5-dimethylfuran. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, 41: 633-646. [\(SCIA 档\)](#)
6. **Qian Y**, Zhang YH, Wang XL, Lu XC. Particulate matter emission characteristics of a reactivity controlled compression ignition engine fueled with biogas/diesel dual fuel. *Journal of Aerosol Science*, 2017, 113:166-177. [\(SCIB 档\)](#)
7. **Qian Y**, Qiu Y, Zhang YH, Lu XC. Effects of different aromatics blended with diesel on combustion and emission characteristics with a common rail diesel engine. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 125:1530-1538. [\(SCIB 档\)](#)
8. **Qian Y**, Zhou QY, Wang XL, Zhu LF, Lu XC. Enabling dual fuel sequential combustion using port fuel injection of high reactivity fuel combined with direct injection of low reactivity fuels. *Applied Thermal Engineering*, 2016, 103: 399-410. [\(SCIB 档\)](#)
9. **Qian Y**, Wang XL, Ji LB, Huang Z, Lu XC. Experimental study on partially premixed compression ignition combustion fueled with a low octane number primary reference fuel using two-stage fuel supplying. *International Journal of Engine Research*, 2016, 17(6): 677-689. [\(SCIB 档\)](#)
10. **Qian Y**, Zhang Y, Wang XL, Lu XC. Experimental investigation of the combustion characteristics and the emission characteristics of biogas-diesel dual fuel in a common-rail diesel engine. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, 2017: 0954407017691398. [\(SCI 其他\)](#)
11. Shan XX, **Qian Y**, Zhu LF, Lu XC. Effects of EGR rate and hydrogen/carbon monoxide ratio on combustion and emission characteristics of biogas/diesel dual fuel combustion engine. *Fuel*, 2016, 181: 1050-1057.



(SCIA 档)

12. Zhu LF, Qian Y, Wang X, Lu XC. Effects of direct injection timing and premixed ratio on combustion and emissions characteristics of RCCI (Reactivity Controlled Compression Ignition) with N-heptane/gasoline-like fuels. Energy, 2015, 93: 383-392. (SCIA 档)
13. Wang XL, Qian Y, Zhou Q, Lu XC. Modulated diesel fuel injection strategy for efficient-clean utilization of low-grade biogas. Applied Thermal Engineering, 2016, 107: 844-852. (SCIB 档)

国际会议论文：

1. Qian Y, Zhang Y, Yu L, Huang Z, Lu XC. Effects of Iso-Alkanes as Surrogate Components Blending in Diesel Fuel on the Combustion Process and Emission Characters. SAE Technical Paper, 2016-01-2181, 2016. (EI 收录)





## 攻读博士学位期间所获奖励

- |           |                  |
|-----------|------------------|
| 2014-2015 | 上海交通大学博士研究生国家奖学金 |
| 2015-2016 | 上海交通大学博士研究生国家奖学金 |

## 攻读博士学位期间参与的科研项目

- ◇ 国家杰出青年科学基金（51425602）
- ◇ 国家 973 重大基础研究项目（2013CB228405）
- ◇ 国家自然科学基金面上项目（51176116）
- ◇ 上海市重点基础研究项目（14JC1400300）



15001080

# 上海交通大学

## 学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权上海交通大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

保密 ，在\_\_\_\_\_年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密 。

(请在以上方框内打“√”)

学位论文作者签名:

钱勇

指导教师签名:

吴光才

日期: 2017年12月1日

日期: 2017年12月1日



15001080

# 上海交通大学

## 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：钱勇

日期：2017年12月1日



15001080

## 上海交通大学博士学位论文答辩决议书



015020910039

姓名	钱勇	学号	015020910039	所在学科	动力工程及工程热物理
指导教师	吕兴才	答辩日期	2017-12-01	答辩地点	机械与动力工程学院F307
论文题目	柴油模型燃料的构建及其在新型燃烧模式中的基础研究				

投票表决结果：5 / 5 / 5 (同意票数/实到委员数/应到委员数) 答辩结论：通过 未通过  
评语和决议：

为了实现发动机超高效率和极低排放,迫切需要人们掌握柴油模型燃料的构建方法及其基本燃烧特性。论文提出了基于实际发动机燃烧与排放特性的模型燃料构建方法,开展了预混合压缩燃烧(PCCI)和反应活性控制压缩燃烧(RCCI)两种新型燃烧模式的影响因素研究,论文选题具有重要的理论意义和工程应用价值。

论文的主要工作及创新点如下:

1、基于实际柴油的主要理化参数以及燃料与发动机的协同作用,提出了柴油模型燃料的构建方法,得到了多组分、大分子柴油模型燃料。通过多工况运转条件、多种喷射策略、以及多种燃烧技术手段下的验证,所构建的模型燃料能准确复现商用柴油的主要燃烧与排放性能。

2、针对五组分模型燃料,研究燃料的十六烷值以及挥发性对预混合压缩燃烧模式的影响规律,通过喷射策略与燃料十六烷值的优化,显著降低了燃油消耗率。

3、基于柴油和汽油的多组分模型燃料,系统研究了气道喷射辛烷值、缸内直喷燃料十六烷值、预混合率对RCCI燃烧的影响规律。提出了气道喷射低辛烷值、缸内直喷低十六烷值的LLRCCI燃烧模式,使得发动机效率最高、排放最低。

论文工作量大、创新性强、成果丰富,表明作者具有扎实的基础理论知识和广泛的专业知识,具有很强的独立从事科研工作的能力,达到了工学博士培养要求。答辩时陈述清晰,回答问题正确,答辩委员一致同意通过钱勇博士学位的答辩,并建议授予工学博士学位。



2017年12月1日

答辩委员会成员签名	职务	姓名	职称	单位	签名
	主席	楼狄明	教授	同济大学	楼狄明
	委员	冯明志	研究员	中船重工七一一研究所	冯明志
	委员	湛勇	研究员	上海交通大学	湛勇
	委员	乔信起	教授	上海交通大学	乔信起
	委员	石磊	副研究员	上海交通大学	石磊
	秘书	具德浩	副教授	上海交通大学	具德浩