

船用重油多元模型燃料的构建与验证

朱 磊, 李 昂, 张真英男, 黄 震

(上海交通大学 动力机械与工程教育部重点实验室, 上海 200240)

Development and Validation of Multi-Component Surrogate for Heavy Fuel Oil

ZHU Lei, LI Ang, ZHANG Zhenyingnan, HUANG Zhen

(Key Lab. for Power Machinery and Engineering of M. O. E.,
Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: In order to reproduce combustion properties of heavy fuel oil, a multi-component surrogate was proposed based on the chemical deconstruction method. The multi-component surrogate consisted of n-tetradecane, farnesane, tetralin and n-decylbenzene to characterize n-alkanes, iso-alkanes, cyclo-alkanes and aromatics in the target fuel, respectively. Besides, the optimal proportions of surrogate components were determined by the weighted Euclidean distance algorithm. Point-to-point validations of oxidation properties of the multi-component surrogate at low and intermediate temperatures were experimentally conducted in a flow reactor. The multi-component surrogate successfully reproduced the changing profiles of the concentrations of typical reactants, intermediates and products with temperature. Based on the decoupling methodology, a skeletal mechanism for the multi-component surrogate was proposed and developed. The mechanism effectively predicted the oxidation property of heavy residual fuel oil at low and intermediate temperatures. According to the sensitivity analyses based on the skeletal mechanism, elementary reactions relates to large n-alkane contributed a lot to soot formation in the combustion of heavy fuel oil. Besides, according to the results in a visual constant volume combustion chamber, the multi-component surrogate well predicts the spray and combustion process in engine-relevant conditions.

摘要: 为了复现实际船用重油燃料燃烧特性, 基于化学解构法原理, 提出了重油多元模型燃料。选择了正十四烷、2,6,10-三甲基十二烷、四氢化萘和正癸基苯作为基础燃料, 表征实际重油的正构烷烃、异构烷烃、环烷烃和芳烃成分。模型燃料的比例依据带权欧几里得距离算法进行最优化求解。针对发展的多元模型燃料, 基于流动反应器试验平台对模型燃料的中低温氧化特性进行点对点比较, 多组分模型燃料成功复现了典型反应物、中间产物和生成物浓度随温度变化的趋势。基于“解耦法”的机理简化方法, 发展了重油多组分模型燃料骨架机理。该机理成功预测了重油馏分的中低温氧化特性。基于该骨架机理进行敏感性分析, 得到烷烃类自由基主导的基元反应与重油碳烟生成密切相关的结论。此外, 基于定容燃烧装置数值仿真结果, 证明了重油多组分模型燃料对近发动机条件下的喷雾燃烧过程具有较高的预测能力。

关键词: 船用重油; 模型燃料; 流动反应器; 氧化特性; 骨架机理

Key words: heavy fuel oil; surrogate fuel; flow reactor; oxidation property; skeletal mechanism

收稿日期: 2020-07-16

修回日期: 2020-08-26

基金项目: 船用低速机工程(一期)研制(工信部联装函[2017]21号); 国家自然科学基金项目(52071216, 91741120)

Foundation Item: Research and Development of Marine Low-Speed Engine — Phase I (Ministry of Industry and Information[2017]21); National Natural Science Foundation of China(52071216, 91741120)

作者简介: 朱 磊(通信作者), 男, 副研究员, 主要研究方向为发动机高效清洁燃烧, E-mail: tonyzhulei@sjtu.edu.cn。

DOI: 10.13949/j.cnki.nrjgc.2020.06.005

中图分类号: TK428.9

0 概述

船用重油是原油开采过程中提取汽、柴油后剩余的重质组分,是中低速柴油机的主要燃料。随着国防与民用高性能船用低速机的需求日益迫切,需要加快研发具有高效率、低排放的船用低速机,这依赖于对船用重油在发动机中的燃烧过程有准确而深刻的认识^[1-4]。但是重油燃料成分的复杂性给船机燃料和排放的仿真工作带来了极大的挑战。在燃烧化学领域,通常使用简单的模型燃料代替复杂的真实燃料开展基础燃烧试验和反应动力学研究,从而用于实际燃料雾化混合、燃烧过程、排放物生成乃至整机性能的预测和机理研究^[5]。模型燃料虽然由简单的有限成分组成,但含有目标燃料的典型官能团。在燃料燃烧过程中,这些官能团影响反应体系的自由基池,最终决定了反应产物的种类和浓度^[6]。由于模型燃料和目标燃料具有相似的分子结构和官能团组成,因此模型燃料能够准确复现目标燃料的物理化学特性及氧化过程、着火过程、排放物生成规律等。

针对汽油、柴油、航空煤油等目标燃料,现阶段主要提出了两种模型燃料构建方法^[7-10]。第一种方法是燃料理化特性匹配法^[7-8]。通过对目标燃料和模型燃料的物理特性、化学特性和燃料特性进行综合匹配,得到误差最小的模型燃料比例。其中,物理特性主要包括黏度、密度、沸点等参数,化学特性包括氢碳比、焓值、相对分子质量等参数,燃烧特性包括自着火特性、火焰传播速度等参数。第二种方法指燃料分子结构匹配法^[9-10],主要通过对甲基、苄基、酯基等特征官能团进行匹配和调控,从而得到最优的模型燃料比例。和汽油、柴油等运输燃料不同,船用重油燃料成分复杂,模型燃料构建难度较大。现阶段主流的模型燃料为单组分模型燃料,如正庚烷、正十二烷、正十四烷等。文献[11]中基于二冲程发动机的数值模拟提出简化的正庚烷机理,可以复现目标燃料成烟特性和 NO_x 生成特性。此外,文献[12]中基于正十二烷模型燃料,探究了船用柴油喷嘴直径对燃烧特性的影响。文献[13]中选择正十四烷作为模型燃料,成功预测了废气再循环策略对二冲程柴油发动机 NO_x 排放的影响规律。文献[14]中同样基于正十四烷单组分模型燃料,成功模拟了重油自着火和船机喷雾燃烧过程。此外,文献[15]中使用简化的正十四烷机理在

CONVERGE 软件中进行三维数值仿真,该模型较好地预测了发动机缸压曲线、缸内温度及典型排放物的规律,通过耦合多环芳烃(PAH)子机理,成功预测了四环芳烃(A4)的生成特性。

但单组分正十四烷模型燃料无法表征实际重油中异构烷烃、环烷烃等成分的燃烧特性。近年来,重油多元模型燃料逐步成为研究热点^[16-17]。例如,文献[16]中使用正十四烷+甲苯的二元模型燃料,提高了船用发动机碳烟排放预测精度,探究了正十四烷和甲苯两种燃料在氧化过程中的耦合作用。但是,真实重油中的芳烃成分远比甲苯复杂,而且2组分模型燃料缺乏异构烷烃和环烷烃成分,因此上述模型燃料燃烧过程与真实重油存在较大差异。最近,文献[17]中报道了4组分和6组分模型燃料,其中包括1-甲基萘、十五烷基环己烷等大分子环烷烃和芳烃。该模型燃料可以较好地复现真实重油的馏程曲线、密度等参数,是现阶段船用重油最准确的物理模型。但是该模型燃料碳链长度较长,目前缺乏准确的化学反应动力学模型,该多元模型燃料亟待进一步发展。

综上所述,针对船用重油燃料,需要开发系统性的模型燃料配方方法,提出高置信度的多元模型燃料,捕捉和复现实际重油燃烧过程中的氧化特性,构建多元模型燃料燃烧化学动力学模型,从而为船用发动机的设计与开发提供理论和技术支撑。

1 重油模型燃料的构建

1.1 模型燃料构建方法

图1展示了船用重油二维气相色谱分析测试结果^[17]。由图可得,船用重油目标燃料包括大分子直链烷烃、环烷烃、烷基苯及萘、菲等多环芳烃成分。

根据二维气相色谱(GC×GC-TOFMS)的原理,图1横坐标温度对应着重油组分的沸点温度。如图1所示,当温度从140℃逐渐升高,可以实现重油组分的分离。基于以上现象,本文中提出了化学解构法原理,应用于重油模型燃料的构建中。通过分馏的方法,以沸点温度作为分类标准,将复杂的目标燃料分解为易挥发馏分、可挥发馏分和难挥发馏分。针对以上三类燃料,分别构建子模型燃料。最后整合3个子模型燃料,即可得到最终的重油模型燃料。

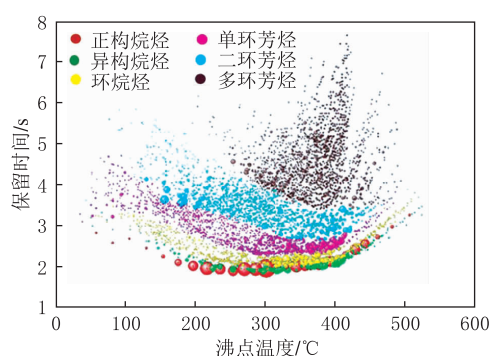


图1 国产船用180重油二维GC测试结果

具体构建步骤如图2所示。基于化学解构法的模型燃料构建的核心在于“化整为零”和“化繁为简”^[18-20],将复杂目标燃料分解为子模型燃料,大大简化模型燃料构建难度,通过回溯和迭代子模型的方法得到重油模型燃料,有助于提高模型预测精度。此外,分馏的方法可以有效去除真实重油中存在的灰分、硫分及机械杂质,有利于基础燃料测试试验的开展。

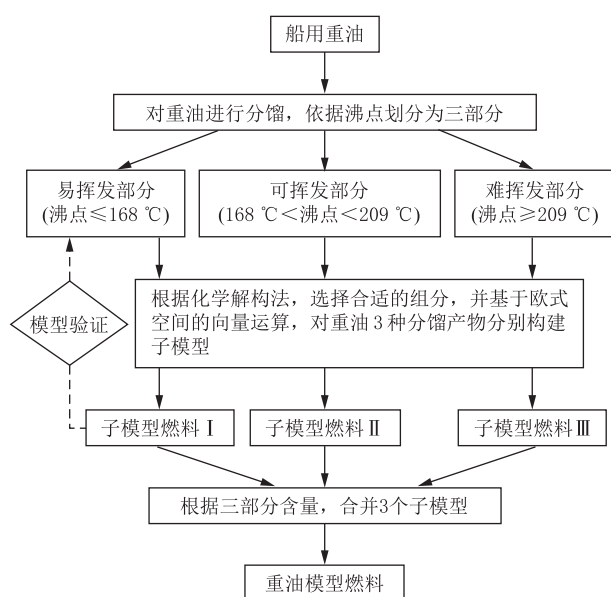


图2 基于化学解构法的重油模型燃料构建

1.2 选择模型燃料种类

基于化学解构法的模型燃料构建首先需要确定模型燃料的种类。实际重油中的成分主要分为正构烷烃、异构烷烃、环烷烃和芳烃,相对应地,本文中模型燃料选择正十四烷、2,6,10-三甲基十二烷、四氢化萘和正癸基苯4种基本燃料。4种基本燃料的化学式和分子结构如表1所示。

上述4种基本燃料中,正十四烷和2,6,10-三甲基十二烷分别是偶碳正构烷烃和异戊二烯型异构烷烃的代表,这两种燃料通常被视为典型的生物标

表1 模型燃料化学式与分子结构

燃料	化学式	分子结构
正十四烷	$C_{14}H_{30}$	
2,6,10-三甲基十二烷	$C_{15}H_{32}$	
四氢化萘	$C_{10}H_{12}$	
正癸基苯	$C_{16}H_{26}$	

志化合物,具有一定稳定性^[21]。生物标志化合物指在有机质演化过程中没有或者极少发生变化,基本保持原始生化组分的碳骨架,记载了原始生物母质的特殊分子结构信息的化合物。并且这两种燃料均有成熟的化学反应动力学机理,因此选择正十四烷和2,6,10-三甲基十二烷表征实际重油中的正构烷烃和异构烷烃。选择四氢化萘作为基础燃料的原因是其不饱和度较大,并且燃烧过程中兼顾环烷烃和芳烃的特征,此外四氢化萘的中低温燃烧机理和高温机理也比较成熟。选择正癸基苯作为基础燃料的原因是重油分馏物种中芳烃多以长烷基苯的形式存在,和正癸基苯分子结构相似。

1.3 计算模型燃料最优比例

针对重油易挥发馏分、可挥发馏分和难挥发馏分,需要配比以上4种基础燃料,计算每个子模型中最优的燃料比例。基于以上需求,开发了带权的欧几里得距离最优化算法。下面以易挥发馏分子模型为例对该算法进行阐释。为了匹配目标燃料和模型燃料的理化参数,提出了以下10个约束条件,主要分为三类:第一类是基于分子结构的约束,包括碳原子数、氢原子数、氢碳比和不饱和度;第二类是基于重油成分的约束,包括正构烷烃含量、异构烷烃含量、环烷烃含量和芳烃含量;第三类是基于船机喷雾燃烧的约束,包括相对分子质量和碳芳香指数(calculated carbon aromaticity index, CCAI)。值得注意的是,碳芳香指数是重油密度和黏度的函数,适合于表征渣油系燃料的发火特性。在欧几里得距离算法中,输入参数是4种基本燃料的比例,构成一组四维空间向量。通过10个约束条件组分的本征矩阵的映射,可以得到十维空间里唯一确定的一组向量,接着通过左乘无量纲矩阵、权重矩阵,计算出在上述欧式空间里最小距离,即对应最优的模型燃料比例。基于上述思想,计算出易挥发馏分(子模型I)、可挥发馏分(子模型II)和难挥发馏分(子模型III)的最优子模型燃料物质的量比例如表2所示。

基于上述分析,重油子模型燃料的种类和比例已经确定。根据化学解构法原理,合并子模型,如式

表 2 最优子模型燃料比例

燃料	物质的量比例		
	子模型 I	子模型 II	子模型 III
正十四烷	0.521	0.433	0.366
2,6,10-三甲基十二烷	0.081	0.097	0.072
四氢化萘	0.364	0.418	0.441
正癸基苯	0.034	0.052	0.121

(1)所示,其中 S_i 代表每个子模型的燃料构成, χ_i 代表子模型的物质的量比例。计算得到的最优重油多元模型燃料包括 44.6%正十四烷、8.7% 2,6,10-三甲基十二烷、40.7%四氢化萘和 6.0%正癸基苯。

$$S_{\text{total}} = \sum_{i=1}^3 S_i \cdot \chi_i \quad (1)$$

2 试验系统和方法

针对本文开发的船用重油多组分模型燃料,需要开展对比验证工作,确保模型燃料和目标燃料呈现相似的燃烧特性。其中,中低温氧化现象是大分子燃料裂解、中间产物形成的典型特性,中低温氧化的基础数据对化学反应动力学模型的发展也起到关键性作用。本文中基于常压流动反应器试验平台对重油子模型燃料的中低温氧化特性进行验证。

常压流动反应器试验平台如图 3 所示^[18-19,22],主要包括进样系统、加热系统和检测系统 3 个子系统。进样系统包括高精度注射泵、质量流量计、混合腔、石英雾化器等装置。加热系统包括闭环控制加热模块、石英管等装置。试验温度范围控制在 500 K~1 300 K 区间,为了避免金属材料对燃料热解潜在的催化作用^[23],选择石英作为反应器材料。石英管加热段长度为 460 mm,内径 6 mm,外径 22 mm。检测系统基于两台气相色谱仪进行定性和定量分析,分别配备氢离子火焰检测器(GC-FID)和热导检测器(GC-TCD),检测产物分别为甲烷、乙烷、乙烯等 C1~C5 烃类化合物和氢气、一氧化碳等小分子无机化合物。基于流动反应器的燃烧成分分析重复性较好,组分测量误差小于 15%,试验温度控制精度为 ± 1 K。

3 结果与讨论

船用重油模型燃料的验证分为两个层次,第一个层次是基于流动反应器试验平台对目标燃料和模型燃料的氧化特性进行点对点验证,第二个层次是基于发展的化学动力学模型进行流动反应器试验和数值模型结果的点对线验证。

3.1 重油子模型燃料的验证

基于常压流动反应器试验平台,首先关注重油

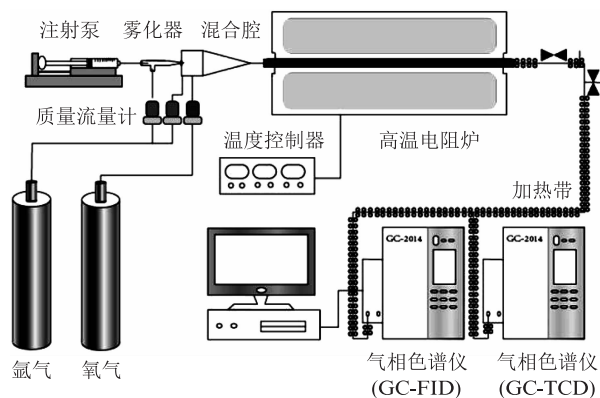


图 3 流动反应器结构示意图

子模型燃料中低温氧化特性的点对点验证。点对点验证指在相同的测量条件,比较燃料差异对反应物消耗和中低温氧化产物生成的影响,点对点比较是评价模型燃料优劣的最直接的手段。

基于流动反应器的中低温氧化试验选择温度范围为 650 K~1 050 K,当量比控制为 1,入口的碳原子流量为 0.54%,反应物总流量为 0.001 9 mol/s。值得注意的是,每组模型燃料和目标燃料中均加入 50%体积分数的正庚烷。掺混正庚烷的原因有:(1)实际重油中正庚烷的碳链长度较短,不会对重油燃料自身的分子结构产生较大的影响。(2)加入正庚烷后有助于减小目标燃料的黏度和降低混合物的沸点,有利于试验的顺利开展。(3)在以前的研究中,正庚烷通常被看做柴油模型燃料而被广泛地应用于喷雾、燃烧及排放的模拟工作中,而船用二冲程柴油机同时具备燃烧重油和燃烧轻质柴油的能力,因此将柴油模型燃料正庚烷加入重油构成混合燃料也符合实际重油燃烧的特点。

图 4~图 6 展示了重油分馏物与子模型燃料氧化过程中 6 种典型的物质(O_2 、 H_2 、CO、甲烷、乙烯和丙烯)浓度随温度的变化趋势。选择以上 6 种燃料的原因如下: O_2 作为反应物,其浓度表征了氧化反应体系的整体活性。 H_2 、CO、甲烷等物质是大分子重油燃料热解氧化过程中重要的 C0~C1 小分子中间产物,其浓度表征大分子燃料从热解到完全转化过程中的反应活性。此外,乙烯和丙烯属于 C2~C3 不饱和烃,通常被视为典型碳烟前驱体,其浓度和重油碳烟排放水平密切相关。

由图 4~图 6 的点对点比较可得,3 种子模型燃料均较好地复现了实际重油馏分的中低温氧化活性,表征了重油典型的氧化特性。例如,在 650 K~800 K 温度区间,3 种子模型燃料均成功复现了实际重油中低温反应活性。

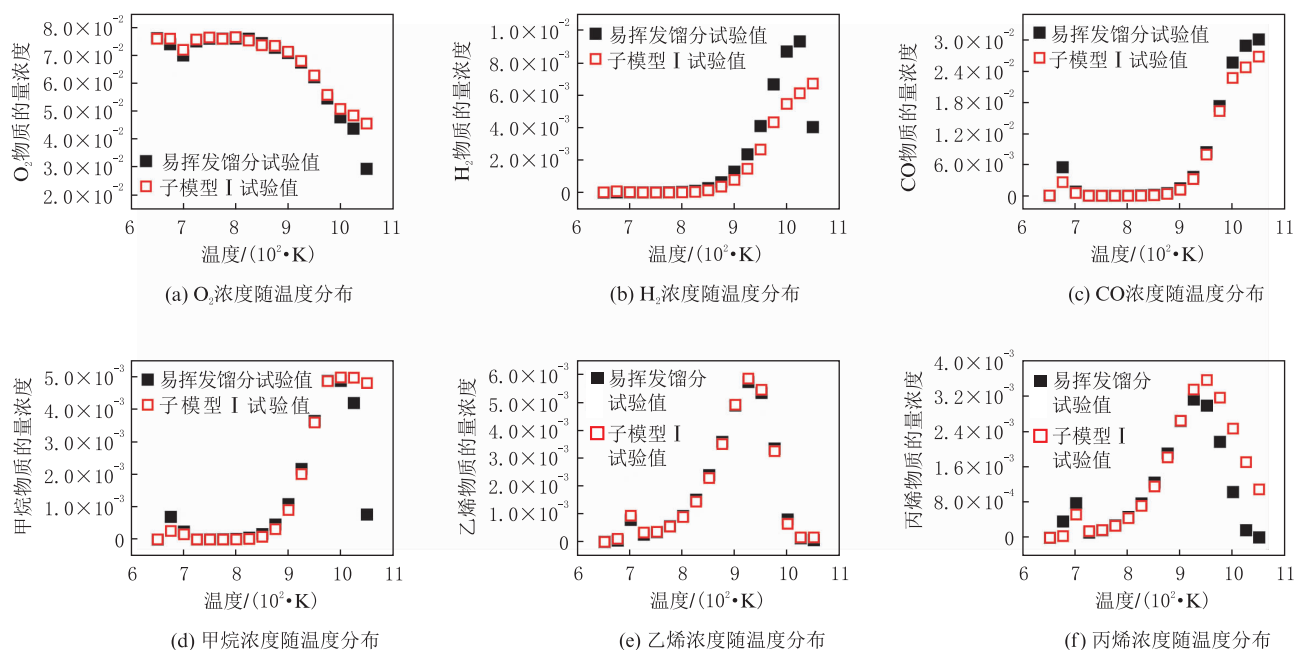


图 4 常压当量比为 1 条件下重油易挥发组分和子模型燃料 I 氧化特性对比图

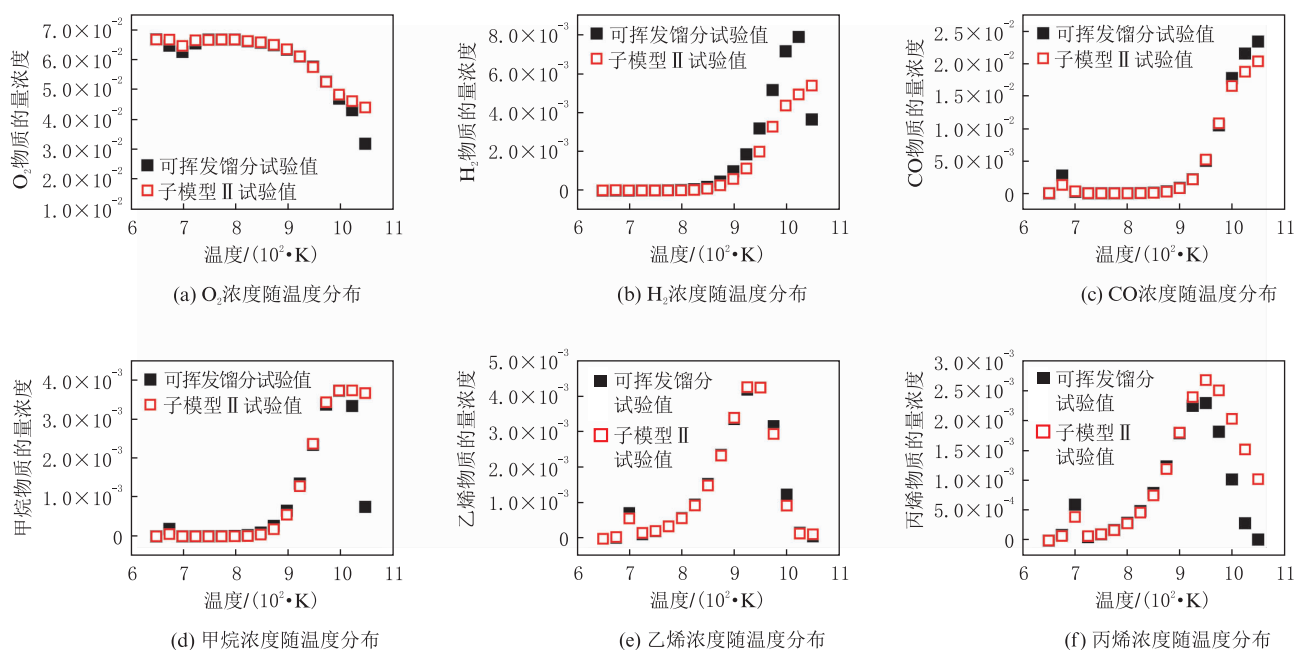


图 5 常压当量比为 1 条件下重油可挥发组分和子模型燃料 II 氧化特性对比图

通过比较 O_2 、CO 和不饱和烃的浓度随温度的变化趋势,子模型燃料和重油馏分均呈现出相似的负温度系数现象,并且该温度区间与文献[24]中的烷烃类燃料低温反应温度区间近似,这说明模型燃料中的正构烷烃和异构烷烃的中低温氧化反应可以较好地表征实际重油复杂的中低温反应类型。当温度升高到 950 K 时,烃类中间产物浓度迅速上升,这和实际重油燃料发生 β -剪切反应密切相关。由图可得,子模型燃料和实际重油馏分在高温下生成乙烯和丙烯的峰值浓度相似,这说明模型燃料可以较

好地复现实际重油的碳烟生成与排放特性。综上所述,基于化学解构法发展的多元模型燃料在预测实际重油氧化特性上具有较高精度。

3.2 重油多组分骨架机理的发展

为了将上述重油多元模型燃料应用于实际动力装置仿真中,需要发展高置信度的重油骨架机理。依据“解耦法”原理^[25],构建了重油模型燃料骨架机理。“解耦法”的特点体现在以下两方面:(1) $C_4 \sim C_n$ 子机理的反应规模非常小,通过有限的大分子机理可以很好地控制整个反应体系的规模,从而适用

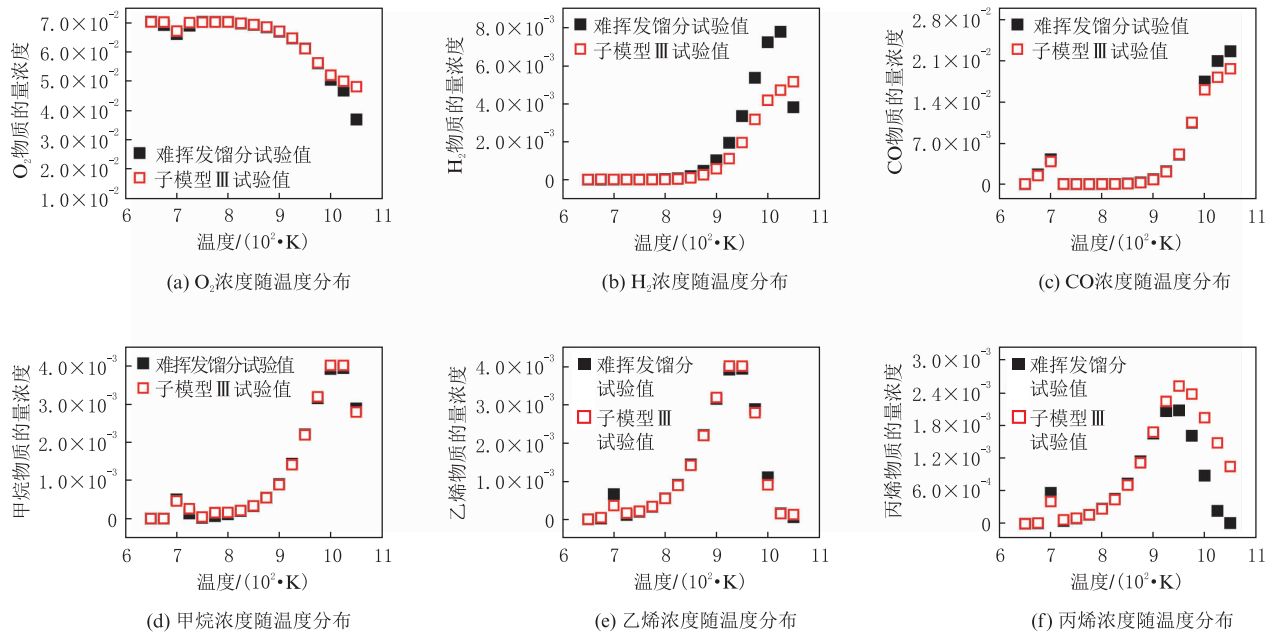
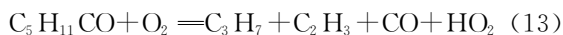
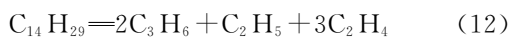
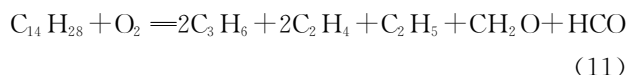
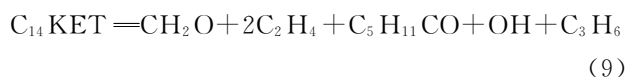
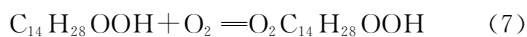
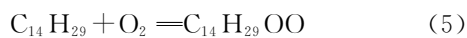
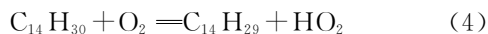
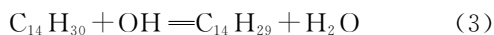
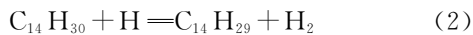


图6 常压当量比为1条件下重油难挥发组分和子模型燃料Ⅲ氧化特性对比图

于三维发动机的数值模拟与仿真之中。(2) $C_0 \sim C_1$ 的机理(H_2 、 CO 、 C_1)使用详细机理是因为小分子碳氢化合物的氧化和放热对发动机的燃烧和排放有着显著的影响。因此,重油骨架机理包括简化的大分子热解和氧化机理及详细的 $C_0 \sim C_1$ 核心机理。其中,正十四烷子机理遵循文献[26]提出的烷烃骨架机理构建准则,采用集总的思想选取烷烃的一次加氧反应、异构反应、二次加氧反应、低温链传递反应和链分支反应等反应类型,如图7所示。R1~R12 基元反应分别见式(2)~式(13)。



2,6,10-三甲基十二烷子机理和正构烷烃骨架机理相似,本文中对文献中[27]提出的2,6,10-三甲基十二烷的一次加氧反应和异构反应的指前因子进行调整,如表4所示。

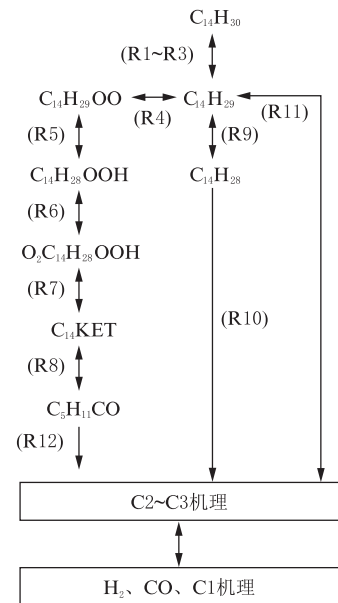


图7 正十四烷骨架子机理的构建

表4 子机理指前因子修正

基元反应	指前因子	
	修正前	修正后
$IC_{13}H_{31} + O_2 = IC_{15}H_{31}O_2$	1×10^{12}	1×10^{14}
$IC_{15}H_{31}O_2 = IC_{15}H_{30}OOH$	1.510×10^{11}	1.510×10^{12}

根据文献[28],57%正丙苯和43%正庚烷可以较好地表征正癸基苯的着火特性,因此将正癸基苯子机理分解为正丙苯子机理和正庚烷子机理。其中正癸基苯子机理参考文献[29]提出的甲苯子机理并补充侧链氧化反应。此外,四氢化萘子机理来源于文献[29],着重考虑氢提取反应和开环反应等反应类型。至此,完成重油多组分模型燃料骨架机理构

建,机理包含 58 种物质和 182 步基元反应。

3.3 重油化学反应动力学模型的验证

基于流动反应器试验结果,对重油多组分模型燃料骨架机理进行验证,结果如图 8~图 10 所示。由图可得,新发展的重油骨架机理基本可以复现实际重油馏分在常压和化学计量比条件下的氧化特征。但值得注意的是,重油骨架机理过高地预测了中低温氧化的活性。原因主要有以下两

点:(1) 烃类燃料中低温氧化过程只包含简单的一次加氧和二次加氧过程,缺乏烷烃类燃料多次加氧基元反应,导致反应路径缺失;(2) 本文中提出的骨架机理尚未考虑多种大分子燃料的交互反应。因此后续工作需要对骨架机理的中低温化学反应路径和参数进行修正。但总体来说,重油多元模型燃料骨架机理可以较好地预测实际重油燃料的氧化特性。

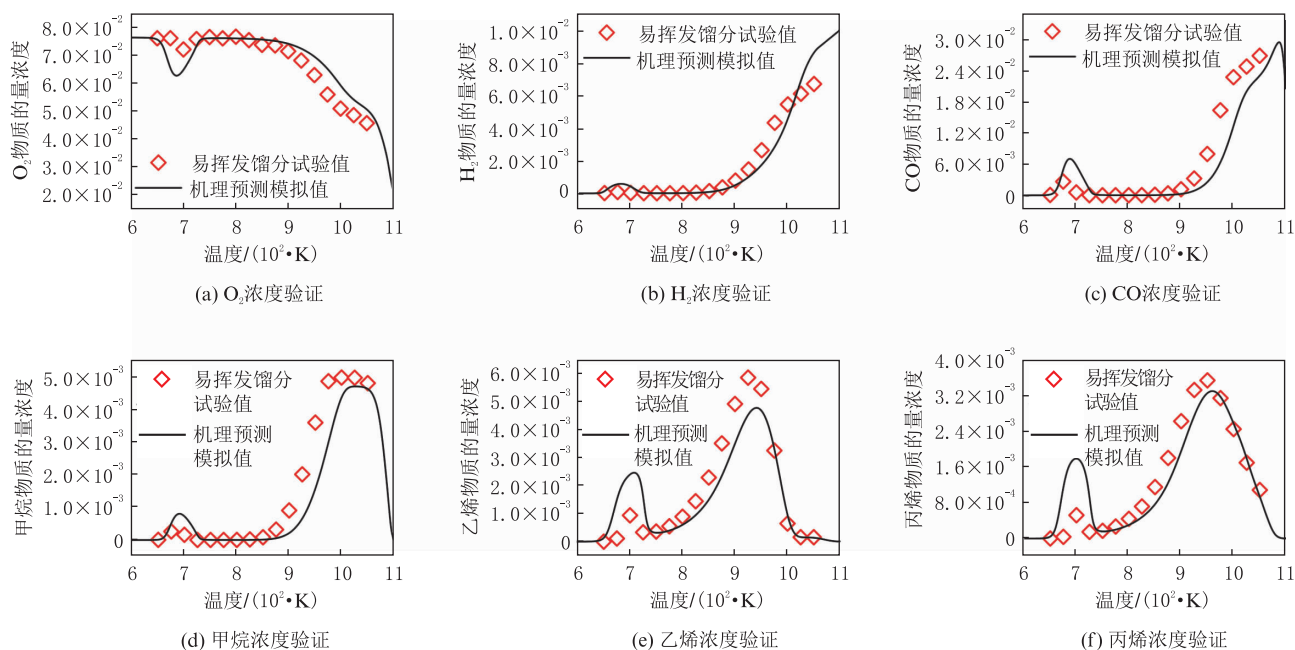


图 8 重油易挥发组分和子模型燃料 I 氧化特性对比图

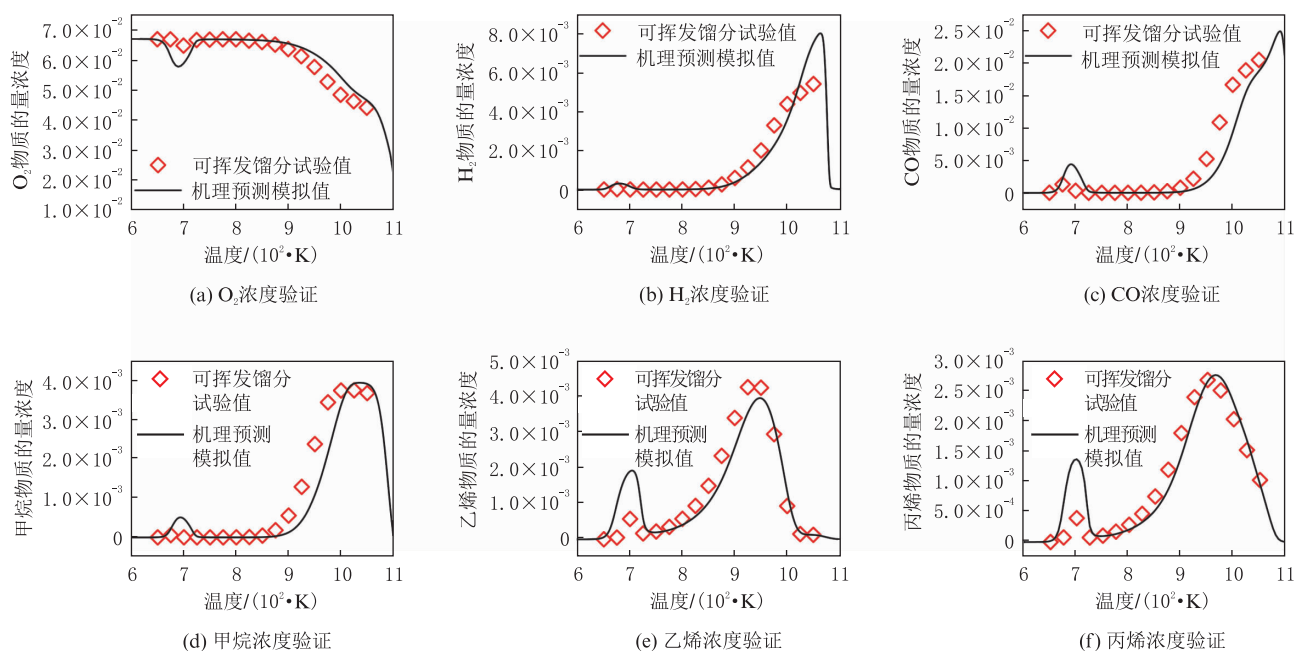


图 9 重油可挥发组分和子模型燃料 II 氧化特性对比图

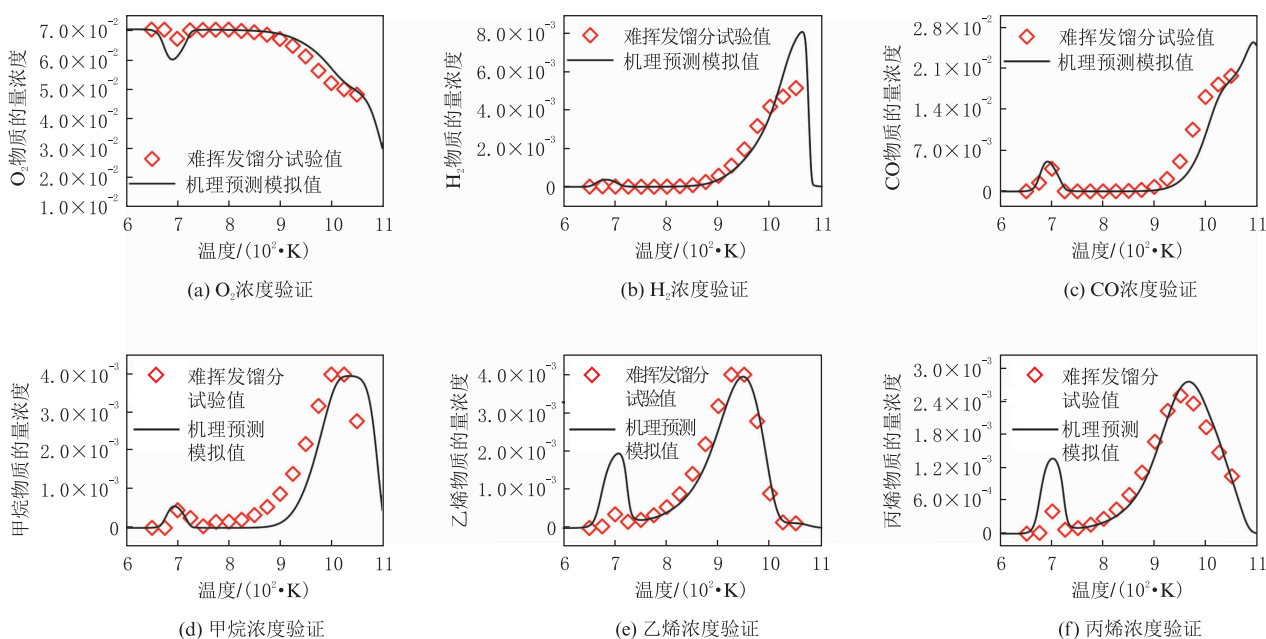
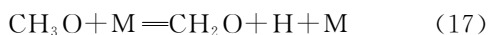
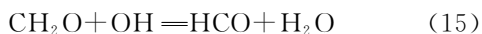


图 10 重油难挥发组分和子模型燃料Ⅲ氧化特性对比图

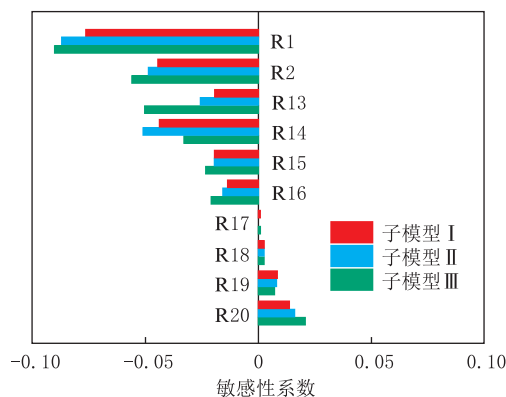
基于高置信度的多组分模型燃料机理可预测实际重油燃烧和排放特性。敏感性分析是常用的化学动力学分析方法,用于分析基元反应的速率常数的小扰动对全局预测结果的影响,有助于揭示燃烧关键反应路径。敏感性系数 K_i 求解表达式如式(14)所示。

$$K_i = -\frac{A_i}{c_j} \frac{\partial c_j}{\partial A_i} \quad (14)$$

式中, A_i 为第 i 步基元反应的指前因子; c_j 为第 j 种物质的浓度。负值敏感性系数表示第 i 步基元反应速率的提升对第 j 种物质的生成有促进作用。图 11 展示了 950 K、当量比为 1 条件下乙烯进行敏感性系数。基元反应 R13~R20 分别见式(15)~式(22)。



如图所示,对于易挥发、可挥发和难挥发 3 种子模型燃料,正十四烷参与的氢提取反应 R1(式(2))和 R2(式(3))对乙烯的生成贡献度较大,生成的正构烷烃自由基后续发生 β -剪切反应,是不饱和烃生成的关键路径,而和乙烯分解相关的基元反应呈现出正值敏感性系数。这说明重油中的正构烷烃成分与船用发动机燃烧过程中的碳烟生成密切相关。

图 11 3 种子模型燃料生成乙烯的敏感性分析
($p=0.1$ MPa, $T=950$ K)

通过上述敏感性分析,揭示了实际重油燃烧生成碳烟的关键路径,为船用发动机颗粒物的控制提供理论依据。

3.4 重油模型燃料喷雾燃烧验证

为了验证模型燃料在近发动机工况下的燃烧预测能力,基于 CONVERGE 软件结合多组分重油详细化学反应动力学模型,对船用重油燃料在定容燃烧装置中的喷雾燃烧过程进行三维数值仿真,并与文献[14]中的试验结果进行比较。

定容燃烧装置几何模型如图 12 所示,内径为 150 mm,长度为 350 mm,基础网格尺寸为 4 mm,网格在速度和温度边界层处进行自适应加密。重油喷雾燃烧数值模拟边界条件与文献[14]一致,喷油持续期 25.0 ms,喷油压力为 70 MPa。由于多组分重油模型燃料热值与实际重油存在区别,经过等热值

换算后的喷油量为 0.115 13 g。

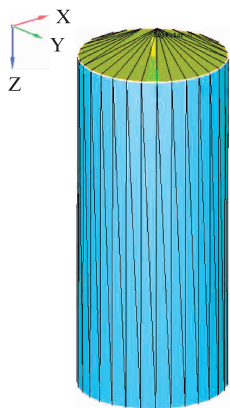


图 12 重油定容喷雾燃烧几何模型

仿真结果如图 13 所示,图中分别展示了不同时刻火焰等温面图像和温度场云图。喷油后 4.3 ms 时,温度云图中出现高温区域,说明此时重油多组分模型燃料已经着火,和试验数据一致。随后火焰沿轴线继续发展,火焰长度迅速增大。根据文献[30-31]定义,1 300 K 等温面随时间的变化规律表征了火焰面的发展趋势。如图所示,重油多组分模型燃料较好地复现了不同时刻下贯穿距、火焰举升距等喷雾燃烧参数,这说明本文中发展的重油多组分模型燃料对近发动机条件下的喷雾燃烧过程具有较高的预测能力。因此,提出的船用重油多组分模型燃料可应用于船用发动机高精度三维仿真中,深入揭示重油燃烧过程,为船机高效清洁燃烧组织提供基础数据和理论支撑。

4 结论

(1) 基于化学解构法原理,提出了船用重油多组分模型燃料,包括正十四烷、2,6,10-三甲基十二烷、四氢化萘和正癸基苯 4 种基本燃料,模型燃料比例通过带权欧几里得距离算法进行最优化求解。基于流动反应器氧化特性试验,船用重油多组分模型燃料成功复现了典型反应物、中间产物和生成物浓度随温度变化的趋势,并呈现了真实重油馏分氧化过程的典型特征,包括负温度系数现象和高温段不饱和烃快速生成现象。

(2) 基于“解耦法”原理,发展了重油多组分模型燃料骨架机理。该机理成功预测了重油馏分的中低温氧化特性。基于该骨架机理,对碳烟前驱体乙烯的敏感性进行分析,得出烷烃类自由基的氢提取反应对重油碳烟的生成起到主导作用的结论。

(3) 定容燃烧装置数值仿真结果复现了不同时刻下贯穿距、火焰举升距等喷雾燃烧试验参数,证明

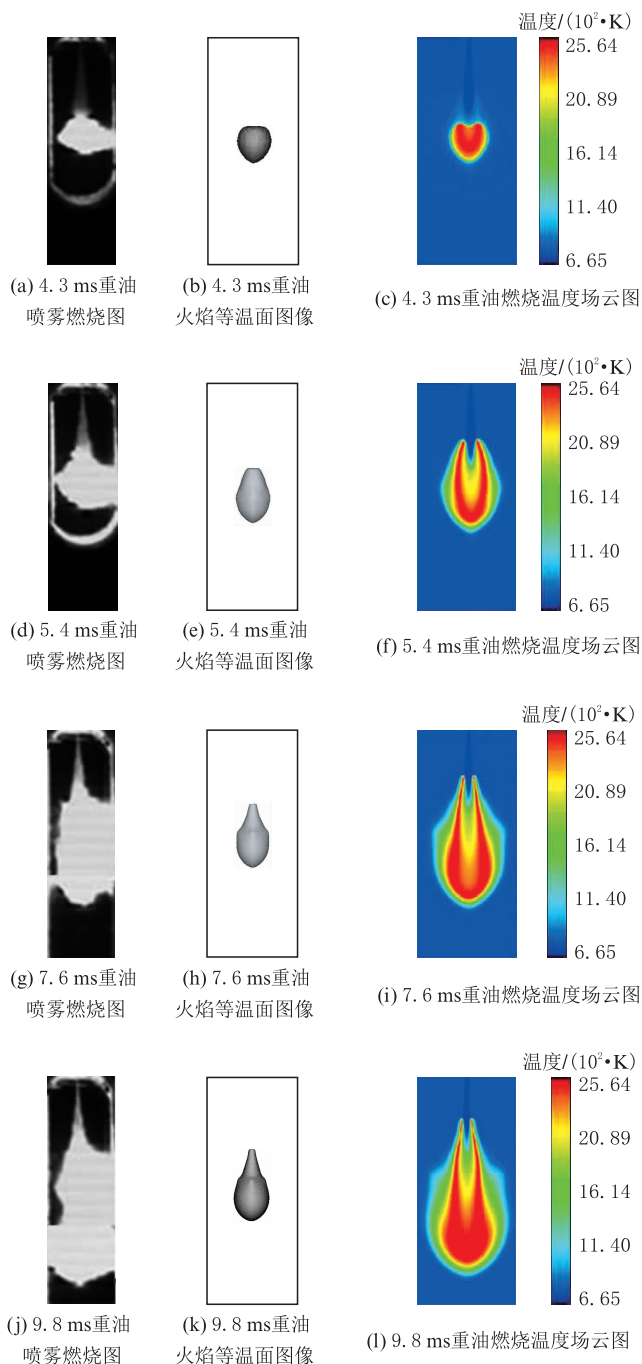


图 13 不同时刻重油喷雾燃烧仿真结果与试验结果对比图

了重油多组分模型燃料对近发动机条件下的喷雾燃烧过程具有较高的预测能力。

参考文献:

- [1] 刘龙,胡建华,袁建国. 低速柴油机有效热效率优化研究[J]. 船舶工程,2019,41(S1):218-225.
LIU L, HU J H, YUAN J G. The optimization on effective thermal efficiency of low-speed diesel engine[J]. Ship Engineering, 2019,41(S1):218-225.
- [2] 余永华,王桂新,杨建国. 引燃柴油对中速双燃料发动机燃烧与排放的影响[J]. 柴油机,2017,39(5):10-16.
YU Y H, WANG G X, YANG J G. Study on the effect of pilot

- diesel on the combustion and emission of medium-speed dual fuel engine[J]. Diesel Engine, 2017,39(5):10-16.
- [3] 孙秀秀,梁兴雨,刘腾.船用重油替代燃料化学反应动力学研究[J].船舶工程,2019,41(S1):138-142.
- SUN X X, LIANG X Y, LIU T. Research on chemical reaction kinetics of alternative fuel for bunker fuel[J]. Ship Engineering, 2019,41(S1):138-142.
- [4] 冀雯霞,朱磊,吕兴才,等. EGR 率对低速二冲程船舶柴油机燃烧与排放的影响[J].船舶工程,2019,41(S1):158-161.
- JI W X, ZHU L, LÜ X C, et al. Effect of EGR rate on the combustion and emissions of marine low-speed two-stroke diesel engine[J]. Ship Engineering, 2019,41(S1):158-161.
- [5] VIOLI A, YAN S, EDDINGS E G, et al. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures[J]. Combustion Science and Technology, 2002,174(11/12):399-417.
- [6] DOOLEY S, WON S H, CHAOS M, et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties[J]. Combustion and Flame, 2010,157(12):2333-2339.
- [7] DOOLEY S, WON S H, HEYNE J, et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena[J]. Combustion and Flame, 2012,159(4):1444-1466.
- [8] KIM D, VIOLI A. Hydrocarbons for the next generation of jet fuel surrogates[J]. Fuel, 2018,228:438-444.
- [9] YU J, WANG Z J, ZHUO X F, et al. Surrogate definition and chemical kinetic modeling for two different jet aviation fuels[J]. Energy & Fuels, 2016,30(2):1375-1382.
- [10] YU J, JU Y G, GOU X L. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups[J]. Fuel, 2016,166:211-218.
- [11] PANG K M, KARVOUNIS N, WALTHER J H, et al. Numerical investigation of soot formation and oxidation processes under large two-stroke marine diesel engine-like conditions using integrated CFD-chemical kinetics[J]. Applied Energy, 2016,169:874-887.
- [12] BOLLA M, ALES S, WRIGHT Y M, et al. Influence of injector diameter (0.2 ~ 1.2 mm range) on diesel spray combustion: measurements and CFD simulations[C/OL]//SAE Paper, 2014, 2014-01-1419. (2014-04-01)[2020-07-01]. DOI:10.4271/2014-01-1419.
- [13] RAPOTASIOS S I, SAKELLARIDIS N F, PAPAGIANNAKIS R G, et al. Application of a multi-zone combustion model to investigate the NO_x reduction potential of two-stroke marine diesel engines using EGR[J]. Applied Energy, 2015,157:814-823.
- [14] STRUCKMEIER D, TSURU D, KAWAUCHI S, et al. Multi-component modeling of evaporation, ignition and combustion processes of heavy residual fuel oil[C/OL]//SAE Paper, 2009, 2009-01-2677. (2009-11-02)[2020-07-01]. DOI:10.4271/2009-01-2677.
- [15] SUN X X, LIANG X Y, SHU G Q, et al. Development of a reduced n-tetradecane-polycyclic aromatic hydrocarbon mechanism for application to two-stroke marine diesel engines[J]. Energy & Fuels, 2017,31(1):941-952.
- [16] SUN X X, LIANG X Y. The new n-tetradecane-toluene chemical model of marine diesel fuel with cross reaction[J]. Energy Procedia, 2017,142:1153-1158.
- [17] WU Z Y, MAO Y B, YU L, et al. Surrogate formulation for marine diesel considering some important fuel physical-chemical properties[J]. Energy & Fuels, 2019,33(4):3539-3550.
- [18] LI A, ZHU L, MAO Y B, et al. Surrogate formulation methodology for biodiesel based on chemical deconstruction in consideration of molecular structure and engine combustion factors[J]. Combustion and Flame, 2019,199:152-167.
- [19] LI A, JI W X, HUANG Z, et al. Predictions of oxidation and autoignition of large methyl ester with small molecule fuels[J]. Fuel, 2019,251:162-174.
- [20] LI A, ZHANG Z Y, CHENG X G, et al. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology[J]. Fuel, 2020,267:116975.
- [21] MOSTAFA, A, EL-GAYAR M S, BARAKAT A O. Relationship between petroleum composition and depositional environment of petroleum source rocks from the gulf of suez and the western desert of Egypt[J]. Petroleum Science & Technology, 1998,16(1/2):191-207.
- [22] LI A, ZHU L, DENG Z W, et al. A fundamental investigation into chemical effects of carbon dioxide on intermediate temperature oxidation of biodiesel surrogate with laminar flow reactor[J]. Energy, 2017,141:20-31.
- [23] GORNAY J, CONIGLIO L, BILLAUD F, et al. Octanoic acid pyrolysis in a stainless-steel tube; what is the role of the coke formed on the wall[J]. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2010,87:78-84.
- [24] YU L, QIU Y, MAO Y B, et al. A study on the low-to-intermediate temperature ignition delays of long chain branched paraffin; Iso-cetane[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2019,37(1):631-638.
- [25] CHANG Y C, JIA M, LI Y P, et al. Development of a skeletal mechanism for diesel surrogate fuel by using a decoupling methodology[J]. Combustion and Flame, 2015,162(10):3785-3802.
- [26] CHANG Y C, JIA M, LIU Y D, et al. Application of a decoupling methodology for development of skeletal oxidation mechanisms for heavy n-alkanes from n-octane to n-hexadecane[J]. Energy Fuels, 2013,27(6):3467-3479.
- [27] RICHTER S, KATHROTIA T, NAUMANN C, et al. Experimental and modeling study of farnesane[J]. Fuel, 2018,215:22-29.
- [28] DARCY D, NAKAMURA H, TOBIN C J, et al. An experimental and modeling study of surrogate mixtures of n-propyl- and n-butylbenzene in n-heptane to simulate n-decylbenzene ignition[J]. Combustion and Flame, 2014,161(6):1460-1473.
- [29] YU W B, YANG W M, TAY K, et al. An optimization method for formulating model-based jet fuel surrogate by emulating physical, gas phase chemical properties and threshold sooting index (TSI) of real jet fuel under engine relevant conditions[J]. Combustion and Flame, 2018,193:192-217.
- [30] SUN X X, LIANG X Y, SHU G Q, et al. Development of surrogate fuels for heavy fuel oil in marine engine[J]. Energy, 2019,185:961-970.
- [31] WEI H Q, CHEN X, WANG G F, et al. Effect of swirl flow on spray and combustion characteristics with heavy fuel oil under two-stroke marine engine relevant conditions[J]. Applied Thermal Engineering, 2017,124:302-314.