

正癸烷燃烧骨架反应机理构建与验证

李延吉¹, 马 婕¹, 曾 文², 常亚超³

(1. 沈阳航空航天大学 辽宁省清洁能源重点实验室, 辽宁 沈阳 110136;

2. 沈阳航空航天大学 航空发动机学院, 辽宁 沈阳 110136;

3. 大连理工大学 海洋能源利用与节能教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 为了研究航空煤油中正癸烷燃料的氧化和燃烧特性, 缩小反应机理规模, 本文对正癸烷开展了化学反应动力学机理的系统简化。采用基于反应类的全局敏感性分析及路径敏感性分析法, 结合产率分析法, 识别正癸烷大分子子机理中的关键反应类并选出其中具有代表性的反应, 并基于解耦法将骨架子机理与 C_0-C_3 子机理耦合, 形成正癸烷的初始骨架机理。利用遗传算法在不确定度范围内针对点火延迟时间和燃料、CO 和 CO_2 摩尔分数对燃料子机理的反应速率系数进行优化, 提高骨架机理的准确性, 最终得到一个包含 48 种组分和 209 个化学反应的正癸烷骨架机理。计算结果表明: 正癸烷燃烧骨架反应机理在较宽的工况范围内对正癸烷燃烧过程中层流燃烧速度、着火延迟时间及重要组分浓度的预测具有较高的准确性。

关 键 词: 正癸烷; 机理简化; 骨架机理; 层流燃烧速度; 着火延迟时间

中图分类号: V312+.1

文献标识码: A

DOI: 10.16146/j.cnki.rndlgc.2024.12.012

[引用本文格式] 李延吉, 马 婕, 曾 文, 等. 正癸烷燃烧骨架反应机理构建与验证[J]. 热能动力工程, 2024, 39(12): 104-112. LI Yanji, MA Jie, ZENG Wen, et al. Construction and verification of n-decane combustion skeleton reaction mechanism[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2024, 39(12): 104-112.

Construction and Verification of n-Decane Combustion Skeleton Reaction Mechanism

LI Yanji¹, MA Jie¹, ZENG Wen², CHANG Yachao³

(1. Key Laboratory of Clean Energy in Liaoning, Shenyang Aerospace University, Shenyang, China, Post Code: 110136;

2. School of Aero-engine, Shenyang Aerospace University, Shenyang, China, Post Code: 110136;

3. Key Laboratory of Ocean Energy Utilization and Energy Conservation of Ministry of Education, Dalian University of Technology, Dalian, China, Post Code: 116024)

Abstract: In order to study the oxidation and combustion characteristics of n-decane fuel in aviation kerosene and to reduce the scale of the reaction mechanism, the kinetic mechanism of n-decane chemical reaction was systematically simplified in this paper. Reaction class-based global sensitivity analysis and path sensitivity analysis methods combined with rate of production analysis method were used to identify key reaction classes in the sub-mechanism of n-decane macromolecules and select representative reactions. Based on the decoupling method, the skeleton sub-mechanism was coupled with the C_0-C_3 sub-mechanism to form the initial skeleton mechanism of n-decane. According to the ignition delay time and the mole fraction of fuel, CO and CO_2 , genetic algorithm was used to optimize the reaction rate coefficients of the fuel sub-mechanism in the range of uncertainty, so as to improve the accuracy of the skeleton mechanism. Finally, an n-decane skeleton mechanism containing 48 species and 209 chemical reactions

收稿日期: 2024-03-13; 修订日期: 2024-05-13

基金项目: 沈阳市科学技术计划项目 (21108926)

Fund-supported Project: Shenyang Science and Technology Plan Project (21108926)

作者简介: 李延吉 (1974-), 男, 沈阳航空航天大学教授。

was obtained. The results show that the reaction mechanism of n-decane combustion skeleton has high accuracy in predicting laminar burning speed, ignition delay time and concentration of important components in a wide range of operating conditions.

Key words: n-decane, simplified mechanism, skeleton mechanism, laminar burning speed, ignition delay time

引 言

随着航空业的快速发展,化石能源日益枯竭,研究碳氢燃料燃烧反应动力学机理对发动机的燃烧效率、火焰稳定性及污染物排放有重要影响^[1]。航空煤油作为一种复杂的碳氢化合物,其组分多达数百种^[2],主要由链烷烃、环烷烃、芳香烃和多环烃等多类物质组成^[3]。模拟计算难度较大,存在模拟计算效率低、计算成本高等问题^[4]。因此,需要从航空煤油成分中选取一种或多种具有代表性的替代燃料,建立能准确反映航空发动机燃烧特性的化学反应动力学机理用于燃烧流场的数值模拟。

正癸烷是航空煤油的重要组成成分,其物理和化学特性与实际煤油相似,常用作航空煤油替代燃料,对其进行燃烧反应动力学机理研究有助于深入了解航空煤油的燃烧细节,开发更环保和高效的航空燃料。

国内外对正癸烷化学反应动力学机理的构建与简化展开了大量研究。Bikas 等人^[5]使用正癸烷作为 JP-8 航空煤油的模拟替代燃料,化学动力学机理由 67 种组分和 600 个反应组成,并对其进行了验证,结果表明,该机制适用于各种燃烧工况。王慧汝等人^[6]以单一正癸烷作为 RP-3 航空煤油替代模型,由 ReaxGen 程序自动生成燃烧反应的详细机理,在加热激波管上进行燃烧实验,结果证明,该模型能够有效地预测 RP-3 航空煤油的燃烧特性,生成的正癸烷详细反应机理包含 388 种组分和 2 226 步化学反应。张方等人^[7]采用基于误差的直接关系图法与基于计算奇异摄动法,将 119 种组分、373 个反应的正癸烷详细动力学机理简化得到 32 种组分和 73 个化学反应的正癸烷骨架机理。刘建文等人^[8]提出了一个正癸烷详细反应机理,包含 388 个物种和 2 226 个反应,并利用基于直接关系图法得到了包含 62 个物种和 422 个反应的骨架机理。以上研究通过对燃烧机理的进一步简化,提高航空煤油燃烧 CFD 数值仿真计算效率,同时为设计与优化航空发动机燃烧室提供理论依据。

本文采用基于反应类的全局敏感性分析法及路径敏感性分析法,结合产率分析法,同时利用解耦法和遗传算法进行优化,构建了正癸烷燃料的骨架机理。通过 CHEMKIN-PRO 软件计算正癸烷在激波管内的着火延迟时间、定容弹内的层流燃烧速度以及射流搅拌反应器内的重要组分浓度,将模拟结果与实验数据对比,验证正癸烷骨架反应机理的准确性。

1 正癸烷机理构建

1.1 构建思路

通过采用基于反应类的全局敏感性(RC-GSA)分析法^[9]及路径敏感性(PSA)分析法^[9]、产率(ROP)分析法、解耦法^[10]以及遗传算法(GA)^[11],构建了正癸烷的骨架机理。图 1 为骨架机理构建流程。

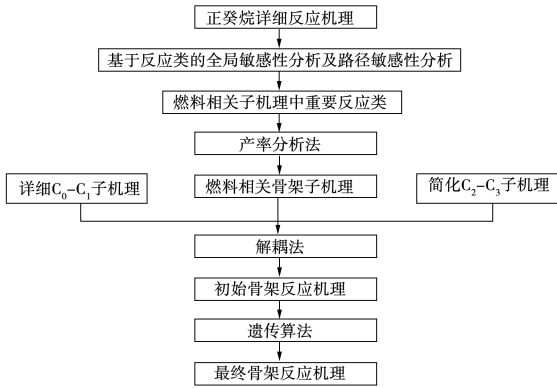


图 1 简化骨架反应机理构建流程
Fig. 1 Simplified reaction mechanism construction process of skeleton

选出正癸烷的详细反应机理,利用基于反应类的全局敏感性分析法与路径敏感性分析法评估正癸烷大分子子机理的反应类,选择关键的反应类并根据不确定度范围进行保留;再利用产率分析法在每个反应类中选择一个同分异构体,删除不重要的反应,形成正癸烷的大分子骨架子机理;将正癸烷骨架子机理与详细的 C₀-C₁子机理和简化的 C₂-C₃子机理通过解耦法耦合,形成其初始骨架反应机理;最后,采用遗传算法优化不确定度范围内骨架机理的

反应速率常数得到最终的正癸烷骨架反应机理。

1.2 骨架机理构建

选取来自美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室 (LLNL) 的正癸烷 (nC₁₀H₂₂) 详细机理, 经过同类机理有关着火延迟时间、层流燃烧特性及氧化特性的验证比较, 证明其详细机理具有一定可靠性。

1.2.1 全局敏感性分析

正癸烷的详细反应机理共包含 2 755 个组分和 9 273 个化学反应^[12]。根据 Curran 等人^[13]对烷烃燃料反应分类的研究, 将 nC₁₀H₂₂ 详细机理中大分子子机理的反应分成 29 个不同的类别, 如表 1 所示。

表 1 正癸烷子机理反应类别划分

Tab. 1 Division of n-decane sub-mechanism reaction classes

序号	反应类
1	nC ₁₀ H ₂₂ 分解
2	nC ₁₀ H ₂₂ + X = R + XH
3	R 分解
4	R 异构化
5	C ₁₀ H ₂₀ + X = C ₁₀ H ₁₉ + XH
6	C ₁₀ H ₂₀ 加成
7	C ₁₀ H ₁₉ 加成和分解
8	C ₁₀ H ₁₉ 分解
9	C ₁₀ H ₂₀ 分解
10	逆烯反应
11	R + O ₂ = RO ₂
12	R + RO ₂ = RO + RO
13	R + HO ₂ = RO + OH
14	R + CH ₃ O ₂ = RO + OH
15	RO ₂ 异构化
16	RO ₂ = HO ₂ + C ₁₀ H ₂₀
17	RO ₂ + HO ₂ = ROOH + O ₂
18	RO ₂ + H ₂ O ₂ = ROOH + HO ₂
19	RO ₂ + CH ₃ O ₂ = RO + CH ₃ O + O ₂
20	ROOH = RO + OH
21	ROOH = RO + OH
22	RO 分解
23	QOOH = QO + OH
24	QOOH = Q + HO ₂
25	ROOH 分解
26	QOOH + O ₂ = O ₂ QOOH
27	O ₂ QOOH = KET + OH
28	KET 分解
29	QO + OH/HO ₂ = 小分子

基于反应类的划分, 采用 Morris 法^[14]进行全局敏感性分析, 通过在输入参数的可能值范围内进行

局部变化, 来评估每个输入参数对模型输出的全局影响。输入参数选取反应的指前因子, 输出参数选取作为简化目标的激波管 (ST) 内的着火延迟时间和射流搅拌反应器 (JSR) 内的重要组分浓度。首先, 随机生成扰动因子序列 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_i, x_{i+1}, \cdots, x_k)$, 得到相应的简化目标 Y 。然后, 根据局部扰动范围 Δ , 对 Y 值进行计算。局部敏感性系数为:

$$\mu_{ij}(x) = \frac{Y_j(x_1, \cdots, x_{i-1}, x_i + \Delta, \cdots, x_k) - Y_j(x)}{\Delta}$$

(1)

通过 n 次模拟后, 获得全局敏感性系数为:

$$\bar{\mu}_{ij} = \frac{\sum_{l=1}^n \mu_{ij}^l}{n}$$

(2)

敏感性系数方差为:

$$\sigma^2(d_{ij}) = \frac{n \sum_{l=1}^n (\mu_{ij}^l)^2 - (\sum_{l=1}^n \mu_{ij}^l)^2}{n(n-1)}$$

(3)

式中: Y_j —初始反应机理对第 j 个简化目标的预测结果; $\bar{\mu}_{ij}$ —第 i 个反应类对第 j 个简化目标的影响程度; $\sigma^2(d_{ij})$ —第 i 个反应类对第 j 个简化目标非线性关系或者与其他反应类耦合性能力^[15]。

全局敏感性系数和敏感系数方差的综合效果决定了第 i 个反应类对第 j 个简化目标的重要性。

Hantouche 等人^[16]研究发现, 存在一些反应 μ_{ij} 较小, 但是去掉该反应, 机理会对简化目标预测值的准确性有较大影响。因此, 引入路径敏感性系数 $PSC_{i,j}$, 将其与全局敏感性分析结合, 以防删除重要的反应。路径敏感性系数计算公式为:

$$PSC_{i,j} = \frac{|Y_{i,j} - Y_j|}{\max(Y_{i,j}, Y_j)}$$

(4)

式中: $PSC_{i,j}$ —移除第 i 个反应类对第 j 个简化目标预测结果的影响程度; $Y_{i,j}$ —从初始反应机理中删除第 i 个反应类后获得的机理对第 j 个简化目标的预测结果。

为了更准确地评估反应类在较宽工况和简化目标下的重要性, 可将 $\mu_{ij}, \sigma^2(d_{ij})$ 和 $PSC_{i,j}$ 进行归一化处理, 公式如下:

$$\mu_{ij}^* = \bar{\mu}_{ij} / \max(\bar{\mu}_{ij})$$

(5)

$$\sigma_{ij}^* = \sigma_{ij} / \max(\sigma_{ij})$$

(6)

$$PSC_{i,j}^* = PSC_{i,j} / \max(PSC_{i,j})$$

(7)

图 2 给出了正癸烷子机理中反应类的全局敏感性分析结果。

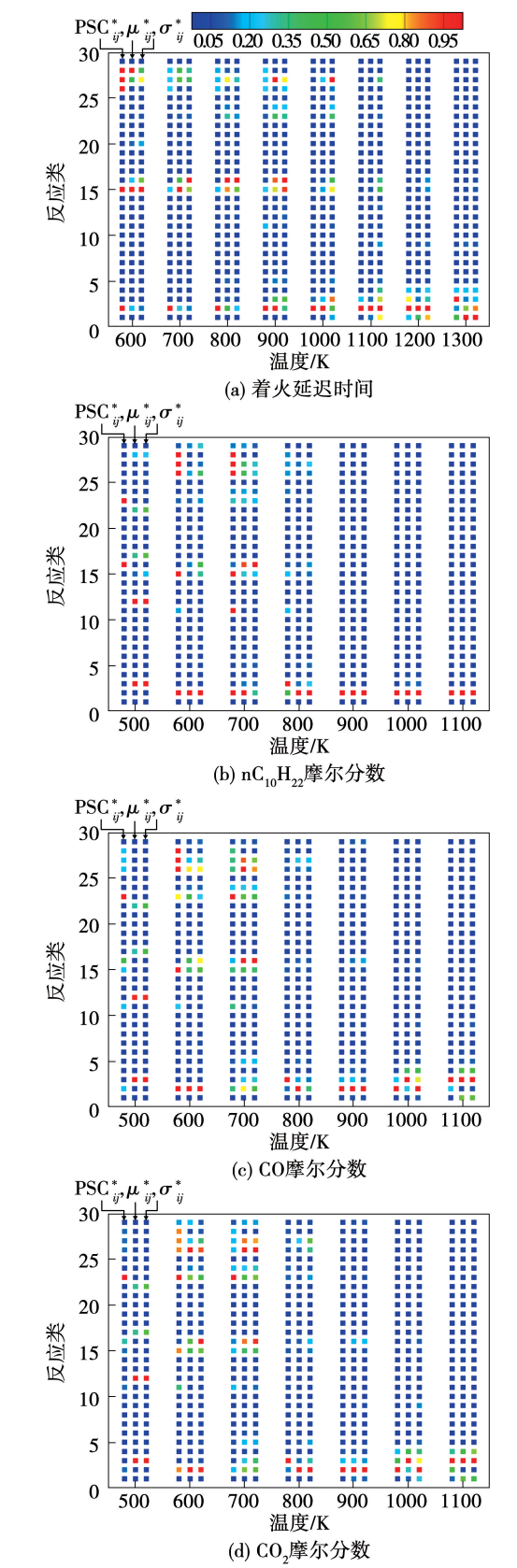


图 2 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 大分子反应类简化目标的敏感性分析
Fig. 2 Sensitivity analyses of simplified targets in the $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ macromolecular reaction class

以压力 $p = 2.0\text{ MPa}$ 、当量比 $\phi = 1.0$ 、温度 $T = 600 \sim 1\,300\text{ K}$ 工况下激波管内的着火延迟时间和 $p = 0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi = 1.0$ 、 $T = 500 \sim 1\,100\text{ K}$ 工况下射流搅拌器内 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 、 CO 和 CO_2 的摩尔分数为简化目标进行全局敏感性分析计算。可以看出,在低温范围和负温度系数 (NTC) 区域内,反应类 2, 15, 16, 26, 27 和 28 都具有较高的 μ_{ij}^* 值,表示此类反应对燃料着火延迟时间和 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 、 CO 和 CO_2 摩尔分数存在较大影响。在高温范围内,反应类 1, 2 与 3 均具有较高的 $\text{PSC}_{i,j}^*$ 值、 μ_{ij}^* 值与 σ_{ij}^* 值,说明这些反应类不仅对简化目标具有较大的影响和非线性响应,而且与其他反应类之间的耦合性作用也更强。此外,反应类 11 的 $\text{PSC}_{i,j}^*$ 值较高、 μ_{ij}^* 值较低,说明反应类 11 对机理简化过程的作用较小,但若将其移除,会增大实验值与预测值之间差距。因此,以上反应类需要保留在反应机理简化过程中。

由图 2 可知,3 个评价指标 $\text{PSC}_{i,j}^*$ 、 μ_{ij}^* 、 σ_{ij}^* 对反应类进行敏感性分析得到的结果存在差距。为了更全面地考虑不同评价指标对反应类特性的综合影响,避免仅依赖单一指标可能导致的偏差,采用平均指标 ξ_i 来判断反应类的重要性,公式如下:

$$\xi_i = \frac{\sum_{j=1}^n (\text{PSC}_{i,j}^* + \mu_{ij}^* + \sigma_{ij}^*)}{n} \tag{8}$$

利用计算好的每个反应类的平均指标 ξ_i 对表 1 中的反应类按照从小到大的顺序重新进行排序,结果如表 2 所示。确定平均指标的阈值为 ξ^* ,当 $\xi_i > \xi^*$ 时,相关组分及反应才可以被保留。

以着火延迟时间、 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 、 CO 和 CO_2 的摩尔分数为简化目标,根据 ξ_i 从小到大的顺序对详细机理中的反应类进行删除,直至累计删除到 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 骨架机理的预测值超过详细机理预测值的不确定度。不同 ξ^* 机理模拟的简化目标的预测值与不确定度范围如图 3 所示。其中,阴影范围代表初始反应机理对简化目标预测值的不确定度,虚线表示删除反应类后对简化目标的预测值,实线则代表删除小于 ξ_i

反应类后的反应机理预测简化目标的结果超过不确定度范围时的临界值。不确定度范围可通过基于采样的全局敏感性分析法确定^[17]。

表 2 正癸烷子机理反应类排序

Tab. 2 Ordering of n-decane sub-mechanism
reaction classes

反应序号	平均指标
10	0.000 1
12	0.000 2
14	0.000 3
25	0.000 5
22	0.000 6
21	0.000 7
13	0.000 8
18	0.001 0
20	0.001 3
7	0.001 4
19	0.001 5
9	0.001 8
17	0.002 0
8	0.004 0
29	0.005 3
1	0.006 2
6	0.006 5
4	0.013 5
5	0.027 0
11	0.030 6
24	0.040 4
28	0.068 5
23	0.070 3
26	0.102 9
3	0.107 1
16	0.169 0
15	0.185 5
27	0.187 0
2	0.653 8

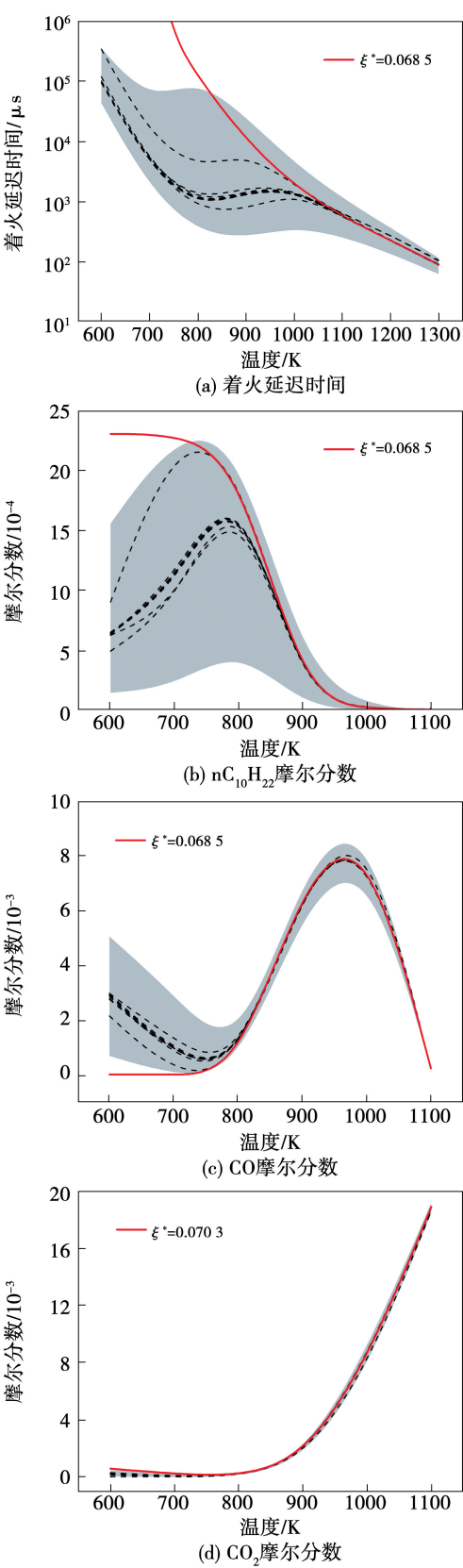


图 3 不同 ξ^* 机理模拟的简化目标的
预测值与不确定度范围

Fig. 3 Predicted values and uncertainty ranges of simplified
targets simulated by different ξ^* mechanisms

累积删除到反应类 11 ($\xi^* = 0.068\ 5$) 和反应类 28 ($\xi^* = 0.070\ 3$) 时, $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理计算得到的简化目标刚好超出详细机理的不确定度范围, 由于反应类 11 的 $PSC_{i,j}^*$ 值很高, 将此类反应删除将会增大误差。因此, 在构建 $nC_{10}H_{22}$ 的骨架机理的过程中, 为了保证反应机理的准确性和可靠性, 选择平均指标较小的 0.068 5 作为重要反应类的临界阈值。图 4 为 $nC_{10}H_{22}$ 大分子反应类的平均指标与阈值。由图 4 可知, 共保留了 10 个反应类。

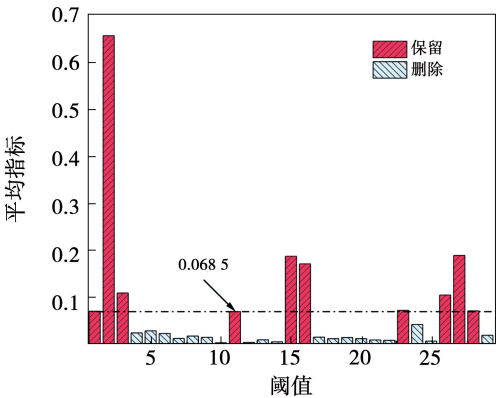


图 4 $nC_{10}H_{22}$ 大分子反应类的平均指标与阈值
Fig. 4 Average sensitivity coefficients and thresholds of $nC_{10}H_{22}$ macromolecular reaction class

1.2.2 产率分析

在正癸烷大分子子机理中, 涵盖了许多同分异构体组分和相关反应。为了减少反应机理的计算量, ROP 分析法可以有效去除部分反应类中的同分异构体并在每组同分异构体中保留了一个代表性的组分, 由此得到 $nC_{10}H_{22}$ 骨架子机理。为了保证 ROP 分析结果的准确性, 对不同温度下正癸烷的反应路径进行分析, 结果如图 5 所示。图中 3 个数据由上到下分别表示 550, 750 和 950 K 的不同温度。可以看出, 在不同温度下, 反应类 2 和反应类 11 中不同同分异构体组分路径通量差距较小, 但是由于反应类 15 中 $C_{10}OOH_2-4$ 相关反应的 ROP 最大, 因此选择 $C_{10}H_{21}-2$ 、 $C_{10}H_{21}O_2-2$ 和 $C_{10}OOH_2-4$ 的相关路径反应保留在简化机理中。至此, 正癸烷燃料大分子骨架机理已构建完成, 包括 9 种组分和 18 个化学反应。

Chang 等人^[10] 提出了构建简化机理的解耦法, 可以将燃料相关的骨架机理、 $H_2/CO/C_1$ 子机理和 C_2-C_3 简化机理进行结合。本文采用的简化 C_0-C_3

子机理^[18], 此机理准确且适用于多种燃料。将 C_0-C_3 子机理与正癸烷大分子骨架机理相结合, 形成正癸烷的初始骨架机理, 包括 48 个组分和 209 个化学反应。

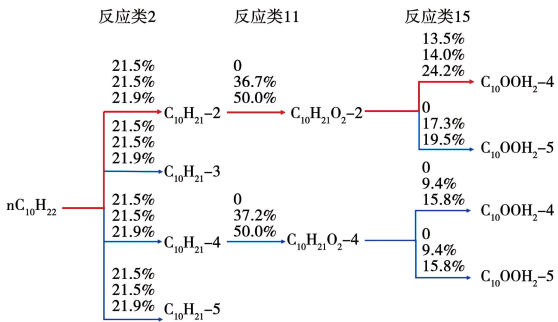


图 5 JSR 内正癸烷在 $p = 0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi = 1.0$ 工况下反应类 2, 11 和 15 的 ROP 分析结果
Fig. 5 Rate of production analysis result of reaction classes 2, 11 and 15 of n-decane in JSR at $p = 1.0\text{ MPa}$, $\phi = 1.0$

1.2.3 骨架机理优化

由于在骨架机理构建过程中删除了大量反应, 反应途径大大简化, 会影响到 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理的准确性。受实验误差和计算理论的限制, 动力学模型的速率系数都存在不确定性^[19]。由于 C_0-C_3 小分子子机理已经验证, 为了进一步提高机理的预测能力, 需要优化 $nC_{10}H_{22}$ 大分子骨架机理部分, 在不确定范围内通过非支配排序遗传算法 II (NSGA-II) 对反应速率常数进行优化^[11]。在 NSGA-II 中, 引入了激波管 (ST) 内的点火延迟时间和射流搅拌反应器 (JSR) 内重要组分浓度两种实验数据作为目标函数, 可以更好地预测反应机理的点火与燃烧特性。本文优化 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理使用文献 [20] 中的着火延迟时间实验数据, 其工况为 $T = 650 \sim 1\ 300\text{ K}$ 、 $\phi = 1.0 \sim 2.0$ 、 $p = 1.3\text{ MPa}$; 以及文献 [21] 中主要组分 $nC_{10}H_{22}$ 、 O_2 、 CO 和 CO_2 摩尔分数的实验数据, 其工况为 $T = 550 \sim 1\ 100\text{ K}$ 、 $\phi = 1.0$ 、 $p = 0.1\text{ MPa}$ 。图 6 为不同代个体的优化过程 and 对应目标值。可以发现, 第 250 代的目标值分布与第 500 代基本相同, 表明遗传个体的目标差值会随着遗传代数的增加而不断缩小, 直至优化基本达到收敛。最后选择 500 代中离原点最近的第 19 个遗传个体为误差值最小的 $nC_{10}H_{22}$ 最终骨架反应机理。

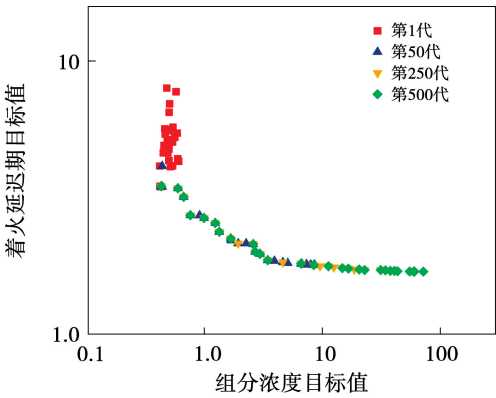


图 6 不同代个体的优化过程和对应该目标值
Fig. 6 Optimization process and corresponding target value of individuals from different generations

综上所述, $nC_{10}H_{22}$ 燃料的机理简化已经完成。为了验证 $nC_{10}H_{22}$ 最终骨架机理的预测性能, 将其与 LLNL 详细机理及实验数据在 $p = 1.3 \text{ MPa}$ 、 $\phi = 1$ 条件下进行对比验证, 结果如图 7 所示。实验数据来自文献[20], 可以发现, 在删除了大量组分和反应后, 简化前后机理的模拟预测趋势高度一致, 说明该方法具有可靠性。用遗传算法优化大分子子机理的指前因子后, 骨架机理的性能明显增强, 相比于 LLNL 详细机理, $nC_{10}H_{22}$ 的简化机理能更准确地预测负温度系数 (NTC) 区域内点火延迟的模拟结果。

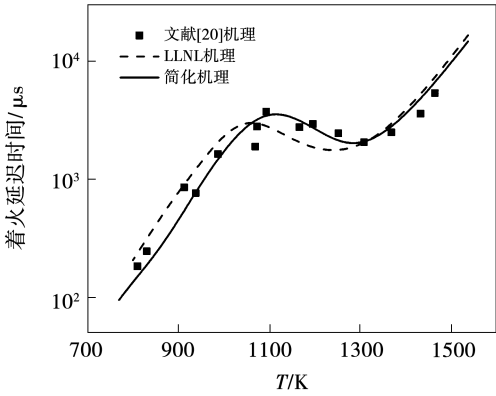


图 7 $nC_{10}H_{22}$ 着火延迟时间模拟值对比
Fig. 7 Comparison of simulated values of $nC_{10}H_{22}$ ignition delay time

2 正癸烷机理验证

为了确保构建的 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理能够准确预测燃料的燃烧特性, 必须依赖实验数据来验证宽工况下机理的合理性。采用简化的 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理,

在 CHEMKIN-PRO 软件中模拟不同条件下定容弹内的层流燃烧速度、激波管内的着火延迟时间和射流搅拌反应器内氧化反应过程中的重要组分浓度, 并与相关实验数据进行对比, 来验证 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理的准确性。

2.1 层流燃烧速度

图 8 给出了 $nC_{10}H_{22}$ 层流燃烧速度的模拟验证结果, 实验数据来自于文献[22-23]。实验工况为 $p = 0.1 \sim 0.3 \text{ MPa}$ 、 $\phi = 0.7 \sim 1.4$ 、 T 为 353, 338 和 400 K。可以看出, 此机理预测的层流燃烧速度整体发展趋势与实验值高度吻合, 均在当量比 1.1 时达到最大值。此外, 某些工况下燃料层流燃烧速度的预测值略低于实验值, 但偏差较小。由于实验值可能存在误差, 因此 $nC_{10}H_{22}$ 骨架机理可以预测其火焰传播特性。

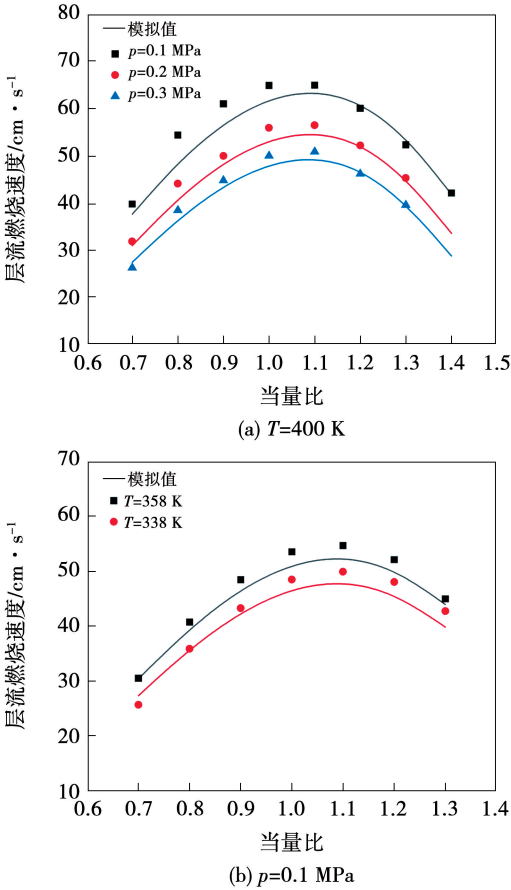


图 8 $nC_{10}H_{22}$ 层流燃烧速度的模拟计算值与实验值对比
Fig. 8 Comparison of simulated and experimental values of $nC_{10}H_{22}$ laminar burning speed

2.2 着火延迟时间

图 9 给出了 $\phi = 1.0$ 和 2.0 时不同压力下的 $nC_{10}H_{22}$ 在激波管内着火延迟时间的模拟计算值与

实验值对比。实验数据来自于文献[20,24]。可以发现,在宽工况范围内简化机理预测的 $nC_{10}H_{22}$ 着火延迟时间与实验数据几乎吻合,证明该机理具有很强的预测能力,可以准确描述正癸烷的着火延迟特性。

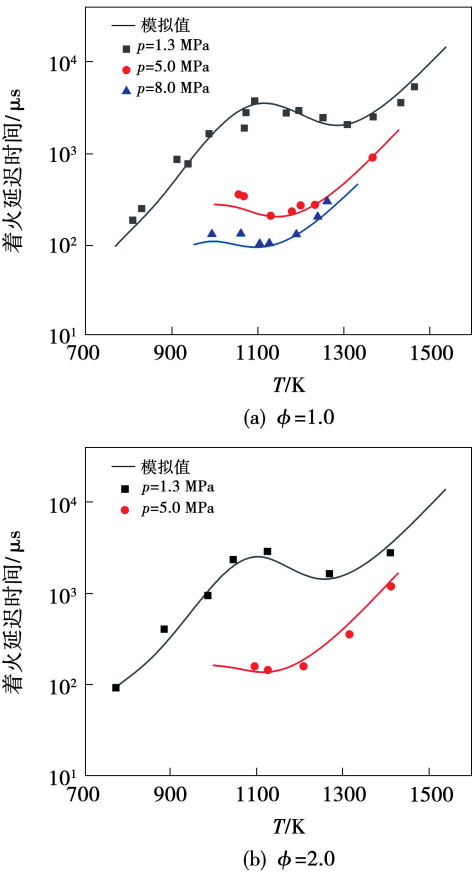


图 9 $nC_{10}H_{22}$ 着火延迟时间的模拟计算值与实验值对比
Fig. 9 Comparison of simulated and experimental values of $nC_{10}H_{22}$ ignition delay time

2.3 重要组分浓度

图 10 给出了 ϕ 为 1.5 和 2.0 时, $p=0.1$ MPa、 $T=900\sim1\,300$ K 工况条件下,JSR 内 $nC_{10}H_{22}$ 氧化过程中重要组分摩尔分数的计算值与实验值对比。实验数据来自于文献[25]。可以看出,氧化过程中的重要基元摩尔分数随温度的变化与实验数据基本一致,但存在一些组分在某些工况下的模拟浓度与实验数据之间具有一定差异。该机理计算得到 $nC_{10}H_{22}$ 摩尔分数含量略高于实验值,反应物的消耗略慢于实际消耗。当量比为 1.5 时, CH_4 和 C_2H_4 的摩尔分数略低于实验值,当量比达到 2.0 时,误差减小。综上,该机理预测反应组分浓度的效果良好。

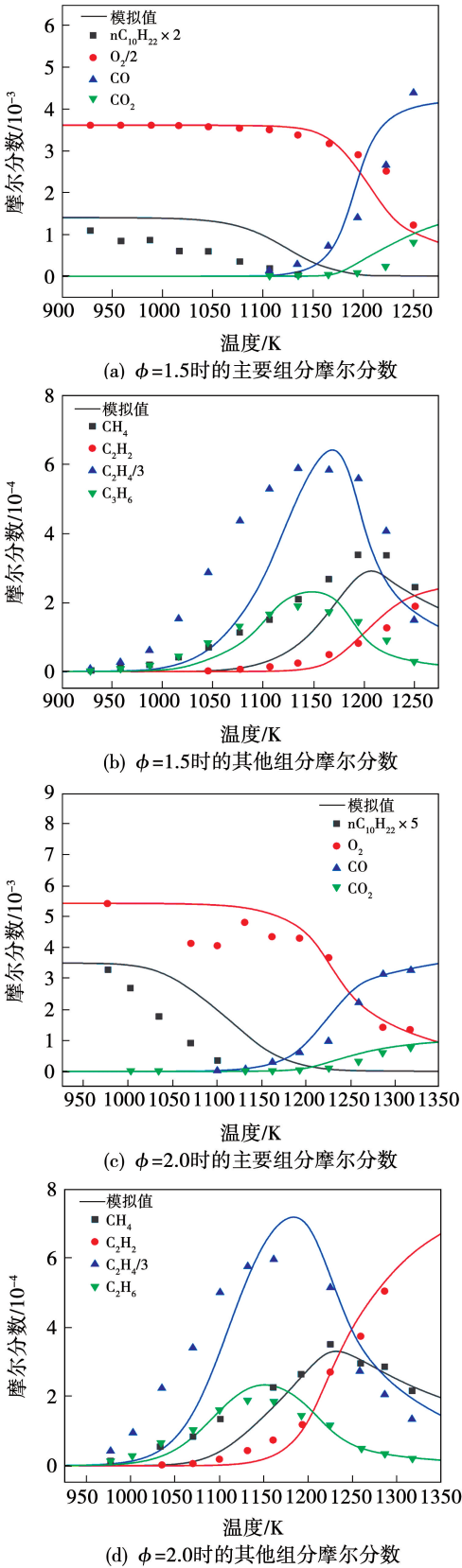


图 10 $\phi=1.5$ 和 2.0 时 $nC_{10}H_{22}$ 重要组分摩尔分数的模拟计算值与实验值对比
Fig. 10 Comparison of simulated and experimental values of molar fractions of $nC_{10}H_{22}$ key component at $\phi=1.5, 2.0$

3 结 论

本文对航空煤油代表性组分正癸烷进行骨架反应机理的构建,并验证该机理在不同工况下的燃烧性能。结论如下:

(1) 通过基于反应类的全局敏感性分析及路径敏感性分析法结合 ROP 分析法,对反应进行筛选,共保留了 10 个反应类,形成了包括 9 种组分和 18 个化学反应的 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 大分子骨架机理。

(2) 基于解耦法,构建了包含 48 种组分和 209 个化学反应的 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 骨架反应机理,利用 GA 法,以着火延迟时间及 $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$ 、CO 和 CO_2 摩尔分数为简化目标进行优化,提高了骨架机理预测性能。

(3) 该机理在较宽的实验条件下层流燃烧速度、着火延迟时间和重要组分浓度的模拟计算结果与实验数据具有良好的一致性,证明该方法能够完整保留原始机理的关键反应特性,为深入理解正癸烷乃至航空煤油的燃烧过程、预测发动机性能奠定了基础。

参考文献:

[1] RIESMEIER E, HONNET S, PETERS N. Flamelet modeling of pollutant formation in a gas turbine combustion chamber using detailed chemistry for a kerosene model fuel[J]. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2004, 126(4): 899–905.

[2] FENG Y, LIU Y N, CAO Y, et al. Thermal management evaluation for advanced aero-engines using catalytic steam reforming of hydrocarbon fuels[J]. *Energy*, 2020, 193(15): 116738. 1–116738. 9.

[3] MENSCH A, ROBERT J S, THOMAS A L, et al. Sooting characteristics of surrogates for jet fuels[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(6): 1097–1105.

[4] JIANG R P, LIU G Z, ZHANG X. Thermal cracking of hydrocarbon aviation fuels in regenerative cooling microchannels[J]. *Energy & Fuels*, 2013, 27(5): 2563–2577.

[5] BIKAS G, PETERS N. Kinetic modelling of n-decane combustion and autoignition[J]. *Fuel and Energy Abstracts*, 2001, 126(1/2): 1456–1475.

[6] 王慧汝, 金捷, 王静波, 等. 正癸烷燃烧机理及航空煤油点火延时动力学模拟[J]. *高等学校化学学报*, 2012, 33(2): 341–345.

WANG Huiru, JIN Jie, WANG Jingbo, et al. Combustion mechanism of n-decane at high temperatures and kinetic modeling of ignition delay for aviation kerosene[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2012, 33(2): 341–345.

[7] 张方, 何加龙, 熊绍专. 基于 DRGEP 和 CSP 方法的正癸烷骨架机理简化[J]. *四川大学学报(自然科学版)*, 2019, 56(3): 513–517.

ZHANG Fang, HE Jialong, XIONG Shaozhan. Reduction of n-decane detailed combustion reaction mechanism based on DRGEP and CSP[J]. *Journal of Sichuan University(Natural Science Edition)*, 2019, 56(3): 513–517.

[8] 刘建文, 熊生伟, 马雪松, 等. 正癸烷燃烧详细反应机理的构建及简化[J]. *推进技术*, 2012, 33(1): 64–68.

LIU Jianwen, XIONG Shengwei, MA Xuesong, et al. Development and reduction of n-decane detailed combustion reaction mechanism[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2012, 33(1): 64–68.

[9] CHANG Y C, JIA M, NIU B, et al. Reduction of large-scale chemical mechanisms using global sensitivity analysis on reaction class/sub-mechanism[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 212: 355–366.

[10] CHANG Y C, JIA M, LIU Y D, et al. Development of a new skeletal mechanism for n-decane oxidation under engine-relevant conditions based on a decoupling methodology[J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(8): 1315–1332.

[11] NIU B, JIA M, XU G F, et al. Efficient approach for the optimization of skeletal chemical mechanisms with multi-objective genetic algorithm[J]. *Energy & Fuels*, 2018, 32(6): 7086–7102.

[12] SARATHY S M, WESTBROOK C K, MEHL M, et al. Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(12): 2338–2357.

[13] CURRAN H J, GAFFURI P, PITZ W J, et al. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 114(1/2): 149–177.

[14] MORRIS M D. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments[J]. *Technometrics*, 1991, 33(2): 161–174.

[15] 王朋志. 敏感性分析在燃烧机理简化和不确定传播的研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2021.

WANG Pengzhi. Sensitivity analysis in the study of combustion mechanism reduction and uncertainty propagation[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2021.

[16] HANTOUCHE M, SARATHY S M, KNIO O M. Global sensitivity analysis of n-butanol reaction kinetics using rate rules[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 196: 452–465.

[17] HELTON J C, JOHNSON J D, SALLABERRY C J, et al. Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis[J]. *Reliability Engineering and System Safety*, 2006, 91: 1175–1209.

[18] CHANG Y, JIA M, NIU B, et al. Construction of a skeletal oxidation mechanism of n-pentanol by integrating decoupling methodology, genetic algorithm, and uncertainty quantification[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 194: 15–27.