

文章编号: 1000-8055(2010)09-1948-08

RP-3 航空煤油燃烧的详细和简化化学动力学模型

肖保国¹, 杨顺华^{1,2}, 赵慧勇¹, 钱炜祺¹, 乐嘉陵¹

(1. 中国空气动力研究与发展中心 计算空气动力学研究所, 绵阳 621000;

2. 中国科学技术大学 物理学院 近代力学系, 合肥 230026)

摘 要: 建立了一个包含 109 组分和 946 个基元反应的煤油燃烧详细化学反应动力学模型, 采用“准稳态”假设方法来对其进行简化, 得到了包含 22 组分 18 步总包反应的简化反应模型. 通过与典型实验结果和文献计算结果对比可以看出, 简化模型具有较高的准确性, 能够准确反映出 RP-3 航空煤油点火特性, 能够用来对煤油燃烧问题进行准确的数值模拟.

关键词: 航空煤油; 化学动力学; 简化化学动力学; “准稳态”假设; 燃烧

中图分类号: O643.1

文献标识码: A

Detailed and reduced chemical kinetic mechanisms for RP-3 aviation kerosene combustion

XIAO Bao guo¹, YANG Shun hua^{1,2}, ZHAO Hui yong¹,
QIAN Wei qi¹, LE Jia ling¹

(1. Institute of Computational Aerodynamics,

China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China;

2. Department of Modern Mechanics, School of Physical Sciences,

University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: A detailed chemical kinetic mechanism containing 109 species and 946 elementary reactions for kerosene combustion was developed. With the use of quasi-stationary state approximation (QSSA) method, a reduced chemical kinetic mechanism including 22 species and 18 global reactions was obtained from the detailed kinetics. By comparing the reduced mechanisms with the typical experimental results and reference results, high precision of the reduced mechanisms is shown, which can be used to represent the ignition characteristic of RP-3 aviation kerosene fuel, and also simulate accurately the combustion of kerosene.

Key words: aviation kerosene; chemical kinetics; reduced chemical kinetics; quasi-stationary state approximation; combustion

超燃冲压发动机是一种新型的高超声速吸气式动力装置, 其特点是氧化剂直接取自大气中的氧气, 没有复杂的转动装置. 燃料在燃烧室内组织超声速燃烧, 具有较高的比冲, 在军事、民用领域具有广阔的应用前景, 世界各技术先进国家都在

积极开展这方面研究工作.

在超燃冲压发动机燃烧室内, 存在燃料的混合、点火与燃烧过程, 是一个复杂的湍流混合和强烈受控于化学动力学的湍流燃烧过程. 为了缩短发动机的研制周期和研究费用、优化燃烧室部件

收稿日期: 2009-07-30; 修订日期: 2009-10-20

基金项目: 国家自然科学基金(90716017)

作者简介: 肖保国(1980-), 男, 湖北红安人, 博士生, 主要从事超燃冲压发动机研究.

以及预测燃烧产物等,都需要精确模拟这些化学动力学过程.而在超燃冲压发动机的数值模拟中,为了更准确的了解燃烧室中的燃烧细节和流场特性,充分研究某些重要组分对发动机性能的影响(比如发动机来流中污染组分的影响等),希望采用详细的基元反应动力学模型.然而,碳氢燃料的详细化学动力学模型一般都过于复杂,往往包含上百个组分和上千个基元反应.在目前计算机技术发展水平下,如此庞大的化学动力学模型不可能直接应用于三维的计算流体动力学(CFD)计算中去.为了克服这方面的困难,一方面,希望采用更好的计算方法和计算工具来提高燃烧流场的计算速度;另一方面,更希望有一套简洁但能准确反映碳氢燃料点火燃烧特性的简化动力学模型来应用于燃烧流场的数值模拟.然而,详细的基元反应模型在被简化的同时,其应用范围以及对燃烧现象的刻画能力都不可避免的出现蜕化,当问题涉及范围跨度较大时,一些简化的动力学模型甚至不能很好的体现详细模型的一些重要特性.在数值研究中,需要全面考虑所采用燃料动力学模型的准确性和适用性.

对于煤油而言,作为超燃冲压发动机的一个主要的可选燃料,一般是多种碳氢化合物的混合物,其物理化学性质因制取方法、产地和生产时间的不同而不同.然而,由于缺乏对煤油燃料的化学动力学过程的理解,已严重制约了发动机的设计过程.因此,为了有效地开展数值模拟,需要对煤油的物理化学性质、详细和简化的化学反应动力学模型开展研究.

1 煤油燃烧化学动力学模型 回顾研究

由于煤油是多种碳氢化合物的混合物,其详尽的组分比较复杂,目前尚无统一的分子式,一种可行的办法就是采用替代燃料来表示煤油.一般认为,煤油中包含的平均碳原子个数为 10~16, H/C 原子个数比为 1.91~2.07.替代燃料成分的选择取决于所要模拟的燃料特性,一般分为物理替代和化学替代两种.物理替代燃料具有和真实燃料相似的密度、比热容、声速、黏性和导热系数等物理特性,可以用来模拟燃料的储存、加热及流动等物理过程;化学替代燃料具有和真实燃料相似的化学组成及相似的点火延迟、绝热火焰温度、层流火焰速度和化学反应速率等化学特性,可以用来模拟燃料的点火、燃烧以及裂解和结碳等化

学过程.既是物理替代也是化学替代的替代燃料称为全面替代燃料.替代燃料的有效性和准确性的验证可以针对特定问题的特定过程来进行,一般可以通过几个有限的关键参数的模拟来达到,不需要面面俱到.为了方便进行数值计算,替代物的组分应该尽可能的少,化学反应机理应该尽可能的简单.国外对替代物和化学动力学的研究开展了多年的实验和计算,国内相对较弱.

对于煤油替代物的选择,最简单的方法就是采用一种组分.Wang T S^[1]采用 $C_{12}H_{24}$ 来代表 RP-1 煤油,采用 11 组分 17 步准总包反应模型,该模型包括了燃料的裂解、烟(soot)的生成以及氧化.Wang 将该模型应用到火箭发动机燃烧室的数值模拟中,取得了比较好的结果.Kundu P K 等人^[2]对 Jet A 煤油的化学动力学模型进行了研究,其采用的煤油替代模型为 $C_{12}H_{23}$,给出了两套反应机理,分别为 12 组分 16 步反应和 16 组分 23 步反应.

随着研究的深入,出现了包括环烷的多组分的替代模型来代替煤油.Lindstedt 和 Maurice^[3]采用 89% 摩尔分数的正癸烷和 11% 摩尔分数的苯(或者甲苯、乙苯)作为煤油的替代模型.通过与 Doute^[4]的实验相比较,Lindstedt 认为苯不能代表煤油中的芳香烃,需要包括更高的芳香烃.如果使用甲苯或者乙苯代替苯,与层流煤油火焰实验中的苯相比,就可以得到更高的精度.Patterson^[5]采用摩尔分数分别为 89% 的正癸烷和 11% 的甲苯作为煤油的替代模型.采用半详细的化学反应机理,正癸烷的分解过程包含 14 步总反应,Patterson^[5]分别计算了 Doute^[4]和 Dagaut^[6]的实验,得到了与实验结果相符合的计算结果.Montgomery^[7]提出了 JP-8 燃料的 4 组分替代模型的详细和简化化学反应机理.4 种组分的摩尔分数分别是 32.6% 的正十烷、34.7% 的正十二烷、16.7% 的甲基环己烷和 16% 的丁基苯.详细化学反应机理有 164 个组分和 1162 步反应,Montgomery 随后又利用 CARM (computer aided reduction method) 软件把详细反应机理简化为两个简化反应机理.两个简化反应机理分别只有 15 和 20 个组分,采用该简化机理对绝热 PSR (perfect stirred reactor) 反应器进行了数值计算,得到了与实验值相吻合的 JP-8 点火延迟时间.Viol^[8]提出了包括环烷(cycloalkane)、链烷(alkanes)和芳香烃(aromatics)的 5 组分替代模型,其燃烧的详细反应机理包含 216 个组分,4826 个基元反

应. 其中煤油各组分的体积分数为: 73. 5% 的正十二烷、5. 5% 的异辛烷、1% 的苯、10% 的甲基环己烷和 10% 的甲苯. 这种替代物与 JP-8 煤油的沸点曲线很好吻合, 采用半详细的化学动力学模型对燃烧问题的计算, 得到了与 JP-8 实验相同的火焰结构. 在 2007 年, Montgomery^[9] 在 Violi 工作基础上利用 CARM 软件得到了一个优化的包含 30 个组分的简化机理. Montgomery 也计算了详细反应机理和该简化机理的点火延迟时间, 并与实验测量进行了比较, 三者非常一致. Cooke^[10] 对于回流耗散火焰, 提出了 6 组分的替代模型. 6 种组分的摩尔比分别是 10% 的异辛烷、20% 的甲基环己烷、15% 的二甲苯、30% 的正十二烷、5% 的萘满和 20% 正十四烷. 化学反应机理为 221 个气相组分和 5032 个基元反应. 他在燃料注入的不同距离上测量 6 组分的替代模型和 JP-8 的温度分布, 发现两者比较接近. Dagaut^[11-12] 基于 JSR (jet-stirred reactor) 和平面火焰炉的化学动力学数据, 其中 JSR 的条件包括: 压强为 101 325~ 4053 000 Pa, 化学当量比为 0. 2~ 2, 温度为 500~ 1 300 K, 提出了 3 组分的替代模型, 相应的体积分数分别是 74% 的正十烷、15% 的丙基苯和 11% 的丙基环己烷. 化学反应机理为 209 个组分和 1673 步化学反应. 计算的点火延迟时间与实验吻合, 组分的分布与 101 325, 101 3250 Pa 和 4053 000 Pa 下 JSR 中实验数据比较一致. 但是这个模型在高压环境下还需要改进.

国外的研究目前集中在多组分模型, 化学反应机理比较复杂, 有几百个组分和上千个基元反应需要处理, 这对于简单燃烧问题还可以容忍, 但是对于复杂的 CFD 计算还是过于庞大, 需要研究简化反应机理, 尽量减少组分和化学反应的数目, Montgomery 的做法就是一个方向. 同时, Dagaut 也指出实验还需要提供更全面的数据, 例如点火延迟时间、流场组分分布等, 以便对各种替代模型进行更完整的比较和验证. 随着超燃发动机研究的深入, 国内也开始了对煤油反应机理的研究. 其中大部分采用单组分的替代模型, 采用多组分替代模型的很少. 由于缺乏国内煤油的相关数据, 国内的研究大都采用国外的实验数据和化学动力学模型.

刘欧子^[13] 采用了 Wang T S^[1] 的替代模型 $C_{12}H_{24}$. 她采用了两种化学反应模型. 一个是单步不可逆有限速率化学反应模型; 另一个是 13 种组分的混合分数平衡化学反应模型. 她对带凹槽的

超燃发动机燃烧室进行了计算, 计算的壁面压强与实验比较一致. 黄生洪^[14] 采用了美国航空航天局 (NASA) 的 Langley 中心提出的为美国国家燃烧计算程序所用的一种 17 组分 30 步化学反应的简化机理, 煤油替代模型为 $C_{12}H_{23}$. 黄生洪利用该模型对超燃发动机燃烧室开展了计算, 他认为这种化学反应机理比较合理地描述了煤油在超燃流场内的裂解、点火、裂解产物的燃烧以及 NO 的生成等基本规律和特征. 其中对于 OH 分布特征的预测和文献利用 PLIF (planar laser induced fluorescence) 的物理观测结果一致. 不过, 其单步裂解机理对温度场的预测偏高. 杨顺华^[15] 通过对法国 Dagaut 的详细反应机理进行简化, 采用 $C_{10}H_{22}$ 来代替航空煤油, 化学反应机理为 10 组分 12 步模型. 他计算了超燃冲压发动机的流场, 计算的壁面压强和实验吻合较好. 李大鹏^[16] 采用的替代模型是 $C_{12}H_{23}$, 化学模型为简化的单步总包反应, 还考虑了气液两相流动模型. 他计算了双模态多凹槽的超燃发动机燃烧室, 并且运用到单模块超燃冲压发动机的设计中, 取得了合理的计算结果. 范学军^[17] 对中国大庆 RP-3 航空煤油的物理化学特性研究后指出, 由于大庆 RP-3 航空煤油在密度和构成等方面的性质更接近法国煤油, 参照法国 Dagaut 3 组份模型, 通过对 RP-3 煤油成份的分析, 选择了一个由 49% (摩尔比) 正十烷, 44% 的三甲基环己烷以及 7% 正丙基苯组成的替代煤油来模拟中国的大庆 RP-3 航空煤油进行热物理特性研究. 张若凌等人^[18] 从实验测量结果出发, 对煤油的密度、比热容、导热系数等热物理特性进行了系统研究, 最终得到了一个 3 组分的替代模型, 并以此为基础对超燃发动机冷却通道进行了数值模拟.

目前来看, 替代模型正从简单的单组分模型发展到多组分替代模型, 化学反应机理向精细化发展. 国内外提出了各种各样的替代组分和反应机理, 但是仍然需要开展进一步的研究.

2 RP-3 航空煤油燃烧化学动力学模型研究

由于煤油是一种复杂的混合物, 为了对煤油的燃烧进行数值模拟, 需要开展煤油的替代模型和相应的化学反应机理的研究. 首先, 作为评判各种替代模型和反应机理的前提, 需要开展更加深入广泛的实验, 得到更多详实的煤油燃烧流场的实验分布结果; 其次, 现有的详细化学反应机理普

遍有几百个组分和上千步反应需要处理,这对于工程上发动机流场的数值计算来说还难以容忍,如何尽可能地简化这些详细反应机理还需要进一步的研究;另外,国产航空煤油的物理化学性质与国外有差异,但是由于缺乏对国产航空煤油的物理和化学性质的分析,特别是实验数据的缺乏,国内的研究大多只能采用国外的航空煤油的数据,这显然对计算结果会产生不利的影响,因此迫切需要加强对国产航空煤油的研究。

本文在天津大学实验测量结果^[15]和张若凌^[18]等人研究的基础上,提出了一个由摩尔百分比分别为 79% 的正十烷、13% 的三甲基环己烷、8% 的乙基苯的煤油组分完全替代模型,该模型平均相对分子质量 137.04,近似分子式 $C_{9.71}H_{20.52}$ 。在借鉴国内外已有的煤油反应动力学模型的基础上,我们最终确定了一个包含 109 组分和 946 个基元反应的煤油化学反应动力学模型。如此庞大的化学反应模型给理论分析和数值模拟带来了巨大困难,耦合到燃烧流场计算中时会出现两个问题:一是“刚性问题”,即实际化学动力学模型中一

般都既包括反应速率快、特征时间尺度小的基元反应,也包括反应速率慢、特征时间尺度大的基元反应,反映到微分方程中就是方程的特征值差别明显,特征矩阵的条件数很大,形成了计算的刚性问题;二是计算效率的问题,当化学反应动力学模型包含较多的组分和基元反应时,会使计算中待求解变量的数目和方程规模过于庞大,占用大量的计算机内存和 CPU (central processing unit) 时间,从而影响到计算效率。因此,为了便于工程实际应用,本文利用基于“准稳态”方法为基础自行编制的化学动力学模型简化程序包 SPARCK^[15, 19 20] (software package for reduction of chemical kinetics) 对建立的煤油化学反应动力学模型进行简化,最终得到一个如表 1 的包含 22 个组分,18 个总包反应的简化反应动力学模型。与原来的详细基元反应动力学模型相比,简化模型有效地减少了反应组分,耦合到流场计算中时有望大大减少求解变量和求解微分方程数目,提高计算效率,利于工程计算与分析。

表 1 煤油燃烧的简化总包反应模型

Table 1 Reduced mechanism for kerosene combustion

No.	Reduced mechanism by SPARCK	No.	Reduced mechanism by SPARCK
1	$2H = H_2$	10	$H + O + H_2O + CO + C_2H_4 = O_2 + OH + C_3H_6$
2	$2O = O_2$	11	$2H + 2C_2H_2 = C_4H_6$
3	$H + O = OH$	12	$CH_2O + C_3H_6 = O + C_4H_8$
4	$H + OH = H_2O$	13	$2O + PHC_2H_5 = 2H + 2CO + 2C_2H_2 + C_2H_4$
5	$4OH = 2H + O_2 + H_2O_2$	14	$C_2H_4 + C_3H_6 = AC_5H_{10}$
6	$OH + CO = H + CO_2$	15	$2H + C_2H_4 + C_4H_8 = H_2 + AC_6H_{12}$
7	$2H + CO + CH_2O = 2O + C_2H_4$	16	$O + AC_8H_{16} = 2H + CH_2O + C_2H_2 + C_2H_4 + C_3H_6$
8	$2H + CO = CH_2O$	17	$NC_{10}H_{22} = 2H + C_2H_4 + 2C_4H_8$
9	$2H + 2O + 2H_2O + 2CO = H_2 + 2O_2 + 2OH + C_2H_2$	18	$O_2 + CYC_9H_{18} = 2OH + C_2H_2 + 2C_2H_4 + C_3H_6$

3 煤油等容条件下点火延迟时间分析

精确的点火延迟时间的测定是燃烧化学动力学建模的依据以及用以检验所用模型优劣的重要判据之一。直到最近,煤油点火的实验数据库还非常有限,而且目前所得到的点火延迟时间大部分都是通过激波管实验测量得到,其点火初始压力一般在 2026 500 Pa 以上。而在超燃冲压发动机

中,其工作压力一般低于 506 625 Pa, 本文的煤油化学反应动力学模型也主要针对这一工作范围。

为了检验本文的煤油简化化学反应动力学模型,用该模型计算了定容条件下煤油的点火延迟时间,并与 Freeman^[21]和 Mullins^[22]的实验结果进行了对比。计算条件为实验条件:油气比为 0.5, 初始压力为 101 325 Pa, 初始温度从 900 K 变化到 1600 K。其中,等容反应过程用常微分方程组来描述

$$\left. \begin{aligned} \frac{dY_k}{dt} &= \frac{\dot{\omega}_k W_k}{\rho} \quad k = 1, \dots, K \\ \frac{dT}{dt} &= -\frac{1}{\rho c_v} \sum_{k=1}^K \left(h_k \dot{\omega}_k W_k - RT \dot{\omega}_k \right) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

其中 K 为组分数目, T 为反应混合气体的温度; Y_k 为混合气体中第 k 种组分的质量分数; W_k 为第 k 种组分的分子量; h_k 为第 k 种组分的焓值; ρ 为混合气体密度; R 为气体常数; c_v 为混合气体的平均比定容热容; $\dot{\omega}_k$ 为第 k 种组分的摩尔产率. 采用 Gear 算法对式(1)进行数值求解.

此外, Adams 等人^[23] 采用 Violi^[8] 的煤油详细反应机理计算了同样条件下煤油点火延迟时间(记为 Ref.). 图 1(横坐标中 T 表示温度)中给出了上述条件下煤油点火延迟时间的比较. 从图中结果来看, 在初始温度较低时, 本文简化模型计算的点火延迟时间(记为 Reduced mech.)与文献计算结果非常一致. 对于高温部分, 本文计算的煤油点火延迟时间要略慢, 但与文献结果差别很小. 两种计算结果均与实验结果吻合较好. 从总的比较结果来看, 本文的简化模型具有较高的准确性, 能够准确反映出煤油点火特性, 本文模型在点火性能上能与 Violi 等人的详细机理相一致.

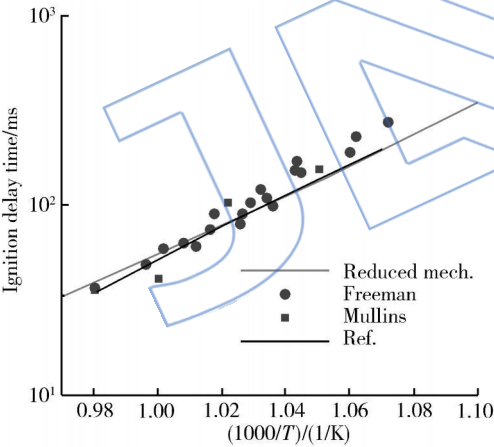


图 1 煤油点火延迟时间比较

Fig. 1 Comparison of experimental and calculated ignition delay of kerosene

4 煤油层流预混火焰数值模拟

为了进一步检验我们得到的简化模型的准确性和适用性, 本文采用得到的煤油简化模型对一个大气压下的煤油预混火焰^[4]进行了数值模拟, 将计算结果与文献[8]计算结果(记为 Ref.)和实验结果(记为 Exp.)进行对比. 本文采用如下稳态、等压、一维层流火焰传播的控制方程对实验燃烧流场进行数值模拟.

$$M = \rho u A \quad (2)$$

$$M \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(M \frac{dT}{dx} \right) + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_k c_{pk} \frac{dT}{dx} + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K \dot{\omega}_k h_k W_k = 0 \quad (3)$$

$$M \frac{dY_k}{dx} - \frac{d}{dx} (\rho A Y_k V_k) - A \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (k = 1, \dots, K) \quad (4)$$

$$\rho = \frac{p \bar{W}}{RT} \quad (5)$$

上述方程中, x 为空间坐标, M 为质量流率, T 为温度, Y_k 为第 k 组分的质量分数, p 为压力, u 为流体混合物的速度, ρ 是质量密度, W_k 是第 k 组分的摩尔质量, $\bar{W}$ 为混合物的平均摩尔质量, R 为通用气体常数, λ 为混合物的导热系数, c_p 是混合物的比定压热容, c_{pk} 为第 k 组分的比定压热容, $\dot{\omega}_k$ 为单位体积内 k 组分的化学反应产率, 按照有限速率化学反应计算得到, h_k 为 k 组分的比焓, V_k 为 k 组分的扩散速度, A 为火焰通过时的横截面积.

计算时, 实验测量温度作为输入参数, 其分布采用实验测量的温度沿火焰中心线上的分布规律, 如图 2 所示. 组分分布同样是火焰中心线上的测量结果.

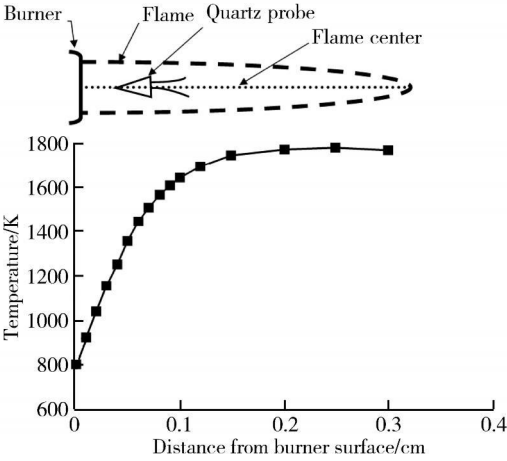


图 2 实验装置示意图和实验获得的温度分布

Fig. 2 Schematic diagram of experimental device and measured temperature profiles along flame center

图 3 给出的是采用本文的简化模型计算出的部分组分的摩尔分数的空间分布与实验测量结果以及和文献计算结果的比较. 总的来看, 本文模型的计算结果大部分与实验结果吻合较好, 个别组分的摩尔分数分布在峰值大小上有一定的差别,

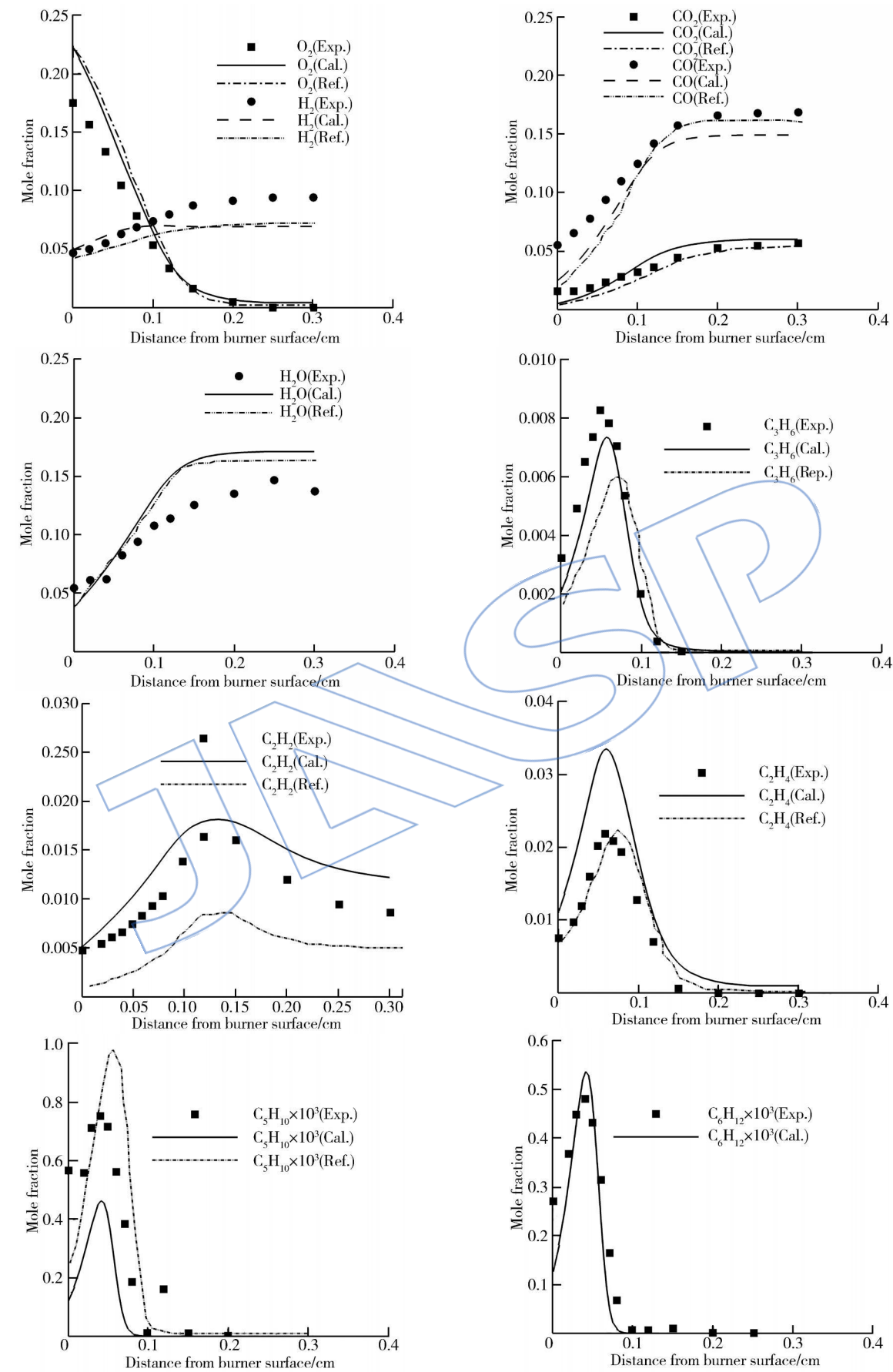


图 3 计算的部分组分的摩尔分数的空间分布与实验结果的比较

Fig. 3 Comparison of experimental and calculated mole fraction profile along flame center

但分布趋势还是吻合较好。从具体组分分布来看,本文模型计算的 H_2O 和 CO_2 量约从流场 0.1 cm 至 0.3 cm 部分要高于实验测量值,而同时 CO 和 H_2 的量则低于实验值;在 0.1 cm 之前的流场部分,计算的 H_2O 、 CO_2 和 H_2 的量基本能吻合实验测量结果, CO 的值略微偏低。对于燃烧过程的中间组分来说,部分组分与实验结果吻合一致,个别组分与实验结果有一定差距。本文简化模型计算结果和文献详细模型计算结果的对比来看,一些主要组分比如 O_2 、 H_2O 、 CO_2 、 CO 和 H_2 分布差别不大,两者基本一致。在具体空间分布上, O_2 的分布本文模型结果更接近实验结果,在 0.1 cm 之前的流场部分,本文计算的 H_2O 、 CO_2 、 CO 和 H_2 与实验结果更一致,在 0.1 cm 之后的流场部分,文献结果更接近实验值。从燃烧中间产物的分布比较来看,本文简化模型和文献的详细模型各有部分组分与实验非常一致,而另外部分中间产物在峰值大小上与实验结果有一定差距,但分布趋势还是相当一致。由于本文的简化模型是基于“准稳态”假设方法得到,该方法在对详细模型简化过程中,大量的燃烧中间产物会当作“准稳态”组分(指反应系统中某些组分的生成率近似等于消耗率)被简化掉,同时按照一定的条件简化基元反应的数目,最终得到具有总包反应形式的简化化学反应动力学模型。因此,简化模型不可避免地无法全面体现某些中间组分的燃烧过程,这也是导致图 3 中部分中间产物在峰值大小上与实验结果有一定差距的原因。

从上述对比结果来看,本文简化模型的计算结果能够准确反映出流场的燃烧特性,对燃烧过程主要组分的分布模拟较好,对部分燃烧中间产物的模拟能力有待提高。相比复杂的详细反应模型,简化模型有效地减少了反应组分,耦合到流场计算中时有望大大减少求解变量和求解微分方程数目,提高计算效率。在对预混层流煤油火焰的数值模拟过程中,简化模型具有和文献详细模型相当的模拟能力,简化模型能够用来对煤油燃烧问题进行准确的数值模拟。但同时也要说明的是,由于缺乏详实的国产航空煤油点火的相关实验数据,本文模型在准确反映国产航空煤油点火燃烧特性方面也还需要开展进一步的研究。

5 结 论

本文对煤油化学反应动力学模型进行了研究,提出了一个由摩尔分数分别为 79% 的正十

烷、13% 的三甲基环己烷、8% 的乙基苯的煤油组分完全替代模型,以此为基础,建立了一个包含 109 组分和 946 个基元反应的煤油详细化学反应动力学模型。利用以“准稳态”假设方法为基础的化学动力学模型简化软件 SPARCK,对该详细动力学模型进行了简化,得到了一个包含 22 组分 18 个总包反应的简化反应动力学模型。采用该简化模型对煤油的点火延迟时间进行了计算,并对预混层流煤油火焰进行了数值模拟,将相关计算结果和实验结果进行了对比分析。对比结果表明本文的简化模型具有较高的准确性,能够准确反映出煤油点火特性,简化模型具有和文献详细模型相当的模拟能力,能够用来对煤油燃烧问题进行准确的数值模拟。另外,与详细反应动力学模型相比,简化模型有效地减少了反应组分,耦合到流场计算中时有望大大减少求解变量和求解微分方程数目,从而有效地提高计算效率。

参考文献:

- [1] Wang T S. Thermophysics characterization of kerosene combustion[R]. AIAA Paper 2000-2511, 2000.
- [2] Kundu K P, Penko P F, Yang S L. Reduced reaction mechanism for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels[R]. AIAA Paper 98-0803, 1998.
- [3] Lindstedt P, Maurice L Q. Detailed chemical kinetic model for aviation fuels[J]. Journal of Propulsion and Power, 2000, 16: 187-195.
- [4] Douté C, Delfau J L, Akrich R, et al. Chemical structure of atmospheric pressure premixed n-decane and kerosene flames[J]. Combustion Science and Technology, 1995, 106: 327-344.
- [5] Patterson P M, Kyne A G, Pourkashanian M, et al. Combustion of kerosene in counterflow diffusion flames[J]. Journal of Propulsion and Power, 2000, 16: 453-460.
- [6] Dagaut P, Reuillon M, Cathonnet M, et al. High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature[J]. J. Chem. Phys., 1995, 92(1): 47-76.
- [7] Montgomery C J, Cannon S M, Mawid M A, et al. Reduced chemical kinetic mechanisms for JP-8 combustion[R]. AIAA Paper 2002-0336, 2002.
- [8] Violi A, Yan S, Eddings E G, et al. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixture[J]. Combustion Science and Technology, 2002, 174(11-12): 399-417.
- [9] Montgomery C J. Optimized reduced chemical kinetic mechanisms for ethylene and JP-8 combustion[R]. AIAA 2007-771, 2007.
- [10] Cooke J A, Bellucci M, Smooke M D, et al. Computational and experimental study of JP-8, a surrogate, and its com-

- ponents in counterflow diffusion flames[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30: 439-446.
- [11] Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbon oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel [J]. Phys. Chem. Chem. Phys., 2002, 4: 2079-2094.
- [12] Dagaut P, Cathonnet M. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling[J]. Progress in Energy and Combustion Science 2006, 32: 48-92.
- [13] 刘欧子. 双模态冲压发动机燃烧室碳氢燃料凹槽火焰稳定性研究[D]. 西安: 西北工业大学, 2006.
- LIU Ouzi. The characteristics of the cavity flame holders in the dual mode scramjet combustor with hydrocarbon fuel[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2006. (in Chinese)
- [14] 黄生洪, 徐胜利, 刘小勇. 煤油超燃冲压发动机两相流场数值研究(III) 煤油在超燃流场中的多步化学反应特征[J]. 推进技术, 2005, 26(2): 101-105.
- HUANG Shenghong, XU Shengli, LIU Xiaoyong. Combustion flow of kerosene fueled scramjet with 3D cavity (III) Multistep chemistry characteristics of kerosene[J]. Journal of Propulsion Technology, 2005, 26(2): 101-105. (in Chinese)
- [15] 杨顺华. 碳氢燃料超燃冲压发动机数值研究[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2006.
- YANG Shunhua. Numerical study of hydrocarbon fueled scramjets[D]. Mianyang: China Aerodynamics Research and Development Center, 2006. (in Chinese)
- [16] 李大鹏. 煤油双模态冲压发动机燃烧室工作过程研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 2006.
- LI Dapeng. Study of kerosene fueled dual mode ramjet combustor operation process[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2006. (in Chinese)
- [17] 范学军, 俞刚. 大庆 RP-3 航空煤油热物性分析[J]. 推进技术, 2006, 27(2): 187-192.
- FAN Xuejun, YU Gang. Analysis of thermophysical properties of Daqing RP-3 aviation kerosene[J]. Journal of Propulsion Technology, 2006, 27(2): 187-192. (in Chinese)
- [18] ZHANG Ruoling, JIANG Jing, LE Jialing. The simulation of endothermic fuel flow in cooling channels of scramjet[R]. [S. l.]: International Conference on Methods of Aerophysical Research, 2008.
- [19] 钱炜祺, 杨顺华, 肖保国, 等. 碳氢燃料点火燃烧的简化化学反应动力学模型[J]. 力学学报, 2007, 39(1): 37-44.
- QIAN Weiqi, YANG Shunhua, XIAO Baoguo, et al. Development of reduced chemical reaction kinetic model for hydrocarbon fuel combustion[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2007, 39(1): 37-44. (in Chinese)
- [20] 肖保国, 钱炜祺, 杨顺华, 等. 甲烷点火燃烧的简化化学反应动力学模型[J]. 推进技术, 2006, 27(2): 101-105.
- XIAO Baoguo, QIAN Weiqi, YANG Shunhua, et al. Investigation of reduced chemical reaction kinetic model for combustion of methane[J]. Journal of Propulsion Technology, 2006, 27(2): 101-105. (in Chinese)
- [21] Freeman G, Lefebvre A H. Spontaneous ignition characteristics of gaseous hydrocarbon air mixtures[J]. Combustion and Flame, 1984, 58: 153-162.
- [22] Mullins B P. Studies on the spontaneous ignition of fuels injected into a hot air stream: Part II - Effect of physical factors upon the ignition delay of kerosene air mixtures[J]. Fuel, 1953, 32: 234-252.
- [23] Adams B R, Marc A, Montgomery C J, et al. Scramjet combustor simulations using reduced chemical kinetics for practical fuels[R]. AFRL-PR WP-TR-2004-2011, 2004.