

文章编号:1000-8055(2012)03-0536-08

一种航空煤油数值模拟替代燃料的 化学反应简化机理

曾 文, 陈潇潇, 刘静忱, 马洪安, 陈英涛
(沈阳航空航天大学 动力与能源工程学院, 沈阳 110136)

摘 要: 通过对一种航空煤油数值模拟替代燃料(正癸烷)着火与燃烧的化学反应详细机理(包括 67 种组分, 344 个反应)进行反应流与敏感性分析, 建立了该替代燃料的化学反应简化机理(包括 50 种组分, 118 个反应). 分别采用详细机理与简化机理对正癸烷在激波管中的着火延迟时间、在预混燃烧炉内的燃烧过程进行了数值计算, 并与实验结果进行了对比分析. 结果表明: 与实验数据相比, 采用详细机理与简化机理计算得到的着火延迟时间、反应物与主要生成物的摩尔分数与炉壁距离的整体变化趋势吻合较好. 正癸烷可以作为航空煤油的一种数值模拟替代燃料. 同时, 所建立的化学反应简化机理能很好的描述正癸烷着火与燃烧的动力学特性.

关 键 词: 正癸烷; 预混燃烧; 着火延迟; 简化机理; 敏感性分析

中图分类号: TK401

文献标志码: A

Reduced chemical reaction mechanism of a surrogate fuel for kerosene

ZENG Wen, CHEN Xiao-xiao, LIU Jing-chen,
MA Hong-an, CHEN Ying-tao

(School of Engine and Energy Engineering,
Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China)

Abstract: The detailed reaction mechanism (including 67 species and 344 reactions) of the ignition and combustion of a surrogate fuel (*n*-decane) for kerosene was reduced by adopting net reaction rate analysis and sensitivity analysis, and a reduced mechanism (including 50 species and 118 reactions) was gained. The ignition delay time of *n*-decane in the shock tube and the process of *n*-decane premixed combustion in the premixed burner were simulated by adopting the detailed and reduced reaction mechanisms, and the simulated results was compared with the experimental data. The results show that the ignition delay time, the shape of the profiles of the mole fractions of the reactants and the major combustion products simulated by the detailed mechanism and the reduced mechanism agree well with the experimental data. The *n*-decane can be a surrogate fuel for kerosene, and the reduced reaction mechanism can describe the kinetic characteristics of the ignition and combustion of *n*-decane.

Key words: *n*-decane; premixed combustion; ignition delay time;
reduced reaction mechanism; sensitivity analysis

收稿日期: 2011-04-21; **修订日期:** 2011-07-01

基金项目: 国家自然科学基金(50906059); 天津大学内燃机燃烧学国家重点实验室开放课题(K2011-06).

作者简介: 曾文(1977—), 男, 湖南沅江人, 副教授, 博士后, 主要从事航空发动机燃烧过程与排放物生成的数值研究.

航空发动机燃烧室内是非预混的湍流火焰,在以往的航空发动机燃烧过程的多维数值计算中(如在 Fluent 软件中),航空煤油一般选用 $C_{12}H_{23}$ 作为替代燃料,采用的化学反应机理一般为单步总包反应或几步反应机理^[1],其虽然能得到较为准确的燃烧放热率或燃烧室内的温度场分布,但其无法对燃料的着火过程及各种中间产物物质的量浓度的变化规律进行有效或详细的动力学分析。

典型的航空煤油主要包括 Jet A, Jet A-1 与 JP-8,其中 Jet A-1 是在 JP-8 中加入防腐蚀添加剂与防结冰添加剂形成的^[2]。航空煤油一般包括上百种脂肪烃和芳香烃,其中的主要成分为直链烷烃、分支链烷烃、环烷烃、芳香烃及烯烃。目前还无法对航空煤油中各种主要成分的详细化学反应动力学机理进行描述,一种有效的方法就是发展一种航空煤油的数值模拟替代燃料,并形成该替代燃料的详细反应机理。航空煤油的数值模拟替代燃料一般是由一种或多种碳氢组分混合物构成,其应具有与航空煤油相似的物理和化学特性。

近年来,国外学者提出了多种单组分或多组分航空煤油数值模拟替代燃料并对其燃烧特性进行了大量的实验和数值研究^[3-6],提出了多种复杂的化学反应详细机理。要想综合考虑如此庞大的

化学反应详细机理与复杂流场,对航空发动机燃烧室内的燃烧过程进行完整、准确的数值计算极为困难。因此选择何种数值模拟替代燃料并合理简化其化学反应机理,使其既保持化学反应动力学特性,又能与 CFD(computational fluid dynamics)耦合,是进行航空煤油燃烧过程详细动力学数值模拟的关键。

本文首先对多种航空煤油数值模拟替代燃料进行了分析,选取了正癸烷作为替代燃料。同时,依据 Bikas G 等^[7]提出的正癸烷着火与燃烧的化学反应详细机理并综合考虑 Honnet S 等^[2]对之提出的修改,形成了正癸烷着火与燃烧的详细化学反应机理。然后,采用反应流与敏感性分析方法对该详细反应机理进行了简化,形成了正癸烷着火与燃烧的化学反应简化机理。最后对详细反应机理与简化机理在激波管和预混燃烧炉内进行了验证。

1 航空煤油数值模拟替代燃料的选择

近年来,国外学者提出了多种单组分或多组分航空煤油数值模拟替代燃料,如表 1 所示。

表 1 航空煤油的主要数值模拟替代燃料
Table 1 Surrogate fuel for kerosene

作者	实验燃料	数值模拟替代燃料	反应机理	模拟环境
Gueret C 等 ^[8]	Jet A-1	79% <i>n</i> -decane, 10% <i>n</i> -propylcyclohexane, 11% 1,2,4-trimethylbenzene	准全局反应机理	Jet stirred reactor (JSR)
Cathonnet M 等 ^[9]	Jet A-1	<i>n</i> -decane	78 种组分, 603 个反应	JSR
Dagaut P 等 ^[10]	Jet A-1	<i>n</i> -decane	90 种组分, 573 个反应	JSR
Vovelle C 等 ^[11]	Jet A-1	90% <i>n</i> -decane, 10% toluene	39 种组分, 207 个反应	JSR
Patterson P M 等 ^[12]	Jet A-1	89% <i>n</i> -decane, 11% toluene	84 种组分, 440 个反应	JSR
Cathonnet M 等 ^[13]	Jet A-1	78% <i>n</i> -decane, 9.8% cyclohexane, 12.2% toluene	188 种组分, 1463 个反应	JSR
Dagaut P 等 ^[14]	Jet A-1	74% <i>n</i> -decane, 11% <i>n</i> -propylcyclohexane, 15% <i>n</i> -propylbenzene	207 种组分, 1592 个反应	JSR
Montgomery C J 等 ^[15]	JP-8	32.6% <i>n</i> -decane, 34.7% <i>n</i> -dodecane, 16.7% methylcyclohexane, 16% <i>n</i> -butylbenzene	164 种组分, 1162 个反应	Shock tube
Cooke J A 等 ^[16]	JP-8	<i>n</i> -decane, <i>n</i> -dodecane, <i>n</i> -hexadecane, xylenes, decaline, tetraline	221 种组分, 5032 个反应	Counter flow
Kyne A C 等 ^[17]	Jet A-1	89% <i>n</i> -decane, 11% toluene	84 种组分, 440 个反应	Premixed

这些数值模拟替代燃料在各种相应的反应器中都与采用相应的实验燃料体现了较为吻合的燃烧与着火特性. 从表 1 中可以看到, 随着数值模拟代用燃料中组分的增多, 其相应的化学反应机理也随之变得更为复杂. 同时, 在这几种主要的数值模拟替代燃料中, 正癸烷(*n*-decane)或单独作为一种数值模拟替代燃料, 或在多组分替代燃料中占据非常大的比重, 同时其物理特性和化学特性与航空煤油极其相似. 因此, 在本文中, 选定正癸烷(*n*-C₁₀H₂₂)作为航空煤油的数值模拟替代燃料.

2 正癸烷着火与燃烧的简化机理

2.1 正癸烷着火与燃烧的详细反应机理

依据 Bikas G 等^[7]提出的正癸烷着火与燃烧的化学反应详细机理(包括 67 种组分, 600 个反应), 并综合考虑 Honnet S 等^[2]对之提出的修改, 形成了本文所采用的正癸烷着火与燃烧的详细化学反应机理(包括 67 种组分, 344 个反应). 本文分别对该详细反应机理在激波管中的着火延迟时间随初始温度的变化趋势及其在预混火焰中各组分摩尔分数随与炉壁距离的变化趋势进行了数值模拟, 并与实验数据进行了对比分析. 详见文章第 3 部分.

该反应机理还是过于复杂, 同时由于航空发动机燃烧室内是非预混的湍流火焰, 要想综合考虑如此复杂的化学反应详细机理与复杂流场, 对航空煤油的燃烧过程进行完整、准确的数值计算极为困难. 因此, 有必要对该反应机理进行适当的简化, 使其既保持基元反应的特点, 又能与 CFD 耦合. 在本文中, 采用的简化方法包括敏感性分析及反应流分析.

2.2 敏感性分析

敏感性分析是用来分析一种模型的解与出现在这个模型中的各种参数之间的定量关系的一种有效与系统的方法^[18]. 假设一个变量, 其可以表示为

$$\frac{dZ}{dt} = F(Z, t, a) \quad (1)$$

在本文中, $Z = (T, Y_1, Y_2, \dots, Y_i)'$, T 为反应温度; $a = (A_1, A_2, \dots, A_k)$ 为各反应步的指前因子; Y_i 为各组分的质量分数.

当某个反应步 a 值发生变化时, 势必会引起反应温度与某种组分质量分数的变化. 敏感性分析就是改变每一个反应步中的 a 值, 分析反应温度与各组分质量分数随 a 改变的程度. 反应温度与组分质量分数变化越大, 说明其受此反应步的影响就越大. 其一阶敏感性系数矩阵可由下式计算:

$$w_{l,i} = \frac{\partial Z_l}{\partial a_i} \quad (2)$$

对式(2)进行求导可得

$$\frac{dw_{l,i}}{dt} = \frac{\partial F_l}{\partial Z} \cdot w_{l,i} + \frac{\partial F_l}{\partial a_i} \quad (3)$$

式中 Z_l 为第 l 种变量, a_i 为第 i 个反应的指前因子.

敏感性分析包括两方面: 反应温度对各反应步的敏感性及各组分质量分数对各反应步的敏感性. 反应温度对各反应步的敏感性分析的目的是要保证采用简化后的反应机理计算得到的燃料着火延迟时间的正确性. 在该部分敏感性分析中, 对初始压力为 1.2×10^6 Pa、当量比为 1.0 时, 初始温度分别为 700, 800, 900, 1000, 1100, 1200 K 与 1300 K 时的温度敏感性系数进行了分析, 选取了各初始温度下敏感性系数大于 2.0 的各反应步. 各组分摩尔浓度对各反应步的敏感性分析的目的是要保证采用简化后的反应机理计算得到的各组分摩尔浓度的变化趋势的正确性. 在该部分分析中, 初始温度设定为 1000 K、初始压力为 1.01×10^5 Pa、当量比为 1.0, 选取敏感性系数大于 0.01 的各反应步.

2.3 反应流分析

该详细反应机理包含 344 个基元反应, 但并不是每个基元反应对反应过程的贡献是一样的. 其中, 有的基元反应对某种组分的净生成速率影响较大, 而有的基元反应则影响较小. 反应流分析的目的就是要找出详细反应机理中对组分生成速率影响较大的反应基元步, 去除那些影响较小的基元反应步, 从而构成一种较为实用的简化机理. 在本论文中, 选取净生成速率大于 $0.0005 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s})$ 的基元反应步.

综合反应流分析及敏感性分析, 可以得到正癸烷着火与燃烧的化学反应简化机理, 如表 2 所示. 该简化机理包括 50 种组分, 118 个基元反应.

表 2 正癸烷着火与燃烧简化机理中的基元反应步

Table 2 Reactions in the reduced mechanism of the *n*-decane ignition and combustion

No.	反应步	No.	反应步	No.	反应步
1	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	41	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}_2$	81	$\text{C}_4\text{H}_4 + \text{H} \rightleftharpoons_s \text{-C}_4\text{H}_5$
2	$\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	42	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO} + \text{OH}$	82	$\text{C}_4\text{H}_4 + \text{H} \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_5$
3	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	43	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{OH}$	83	$_u\text{-C}_4\text{H}_5 + \text{M} \rightleftharpoons_s \text{-C}_4\text{H}_5 + \text{M}$
4	$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	44	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2$	84	$_s\text{-C}_4\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$
5	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	45	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	85	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_6$
6	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons 2\text{OH}$	46	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons_s \text{-CH}_2 + \text{CO}$	86	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{H} \rightleftharpoons_s \text{-C}_4\text{H}_5 + \text{H}_2$
7	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	47	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{H}$	87	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$
8	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	48	$\text{C}_2\text{H}_3 (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} (+\text{M})$	88	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons_s \text{-C}_4\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$
9	$2\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	49	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	89	$\text{C}_4\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_3\text{CHO}$
10	$\text{H}_2\text{O}_2 (+\text{M}) \rightleftharpoons 2\text{OH} (+\text{M})$	50	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$	90	$\text{C}_4\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{C}_4\text{H}_6 + \text{H}$
11	$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	51	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{CHO} + \text{O}$	91	$\text{C}_4\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_3$
12	$\text{CO} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$	52	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HO}_2$	92	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_4\text{H}_6 + \text{HO}_2$
13	$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	53	$\text{CH}_3\text{CO} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{CO}$	93	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_4\text{H}_6 + \text{CH}_4$
14	$\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$	54	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2$	94	$\text{C}_4\text{H}_7 + \text{C}_3\text{H}_5 \rightleftharpoons \text{C}_4\text{H}_6 + \text{C}_3\text{H}_6$
15	$\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	55	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{CHO} + \text{H}_2$	95	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons_{-1} \text{-C}_4\text{H}_8$
16	$\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{HO}_2$	56	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	96	$_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_4\text{H}_7 + \text{H}_2$
17	$\text{CH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + _3\text{-CH}_2$	57	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{CO} + \text{CH}_4$	97	$_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CO}$
18	$_3\text{-CH}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$	58	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	98	$_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_2\text{O}$
19	$_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	59	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	99	$_1\text{-C}_4\text{H}_8 + \text{OH} \rightleftharpoons_n \text{-C}_3\text{H}_7 + \text{CH}_2\text{O}$
20	$_3\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	60	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HCO}$	100	$_p\text{-C}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$
21	$_1\text{-CH}_2 + \text{M} \rightleftharpoons_s \text{-CH}_2 + \text{M}$	61	$\text{C}_2\text{H}_5 (+\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} (+\text{M})$	101	$_p\text{-C}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons_{-1} \text{-C}_4\text{H}_8 + \text{H}$
22	$_1\text{-CH}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}$	62	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} (+\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 (+\text{M})$	102	$\text{C}_5\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$
23	$_1\text{-CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$	63	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$	103	$\text{C}_5\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_3\text{H}_6$
24	$_1\text{-CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_6$	64	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	104	$_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{H} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{H}_2$
25	$_1\text{-CH}_2 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$	65	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	105	$_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{O} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{OH}$
26	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	66	$\text{C}_2\text{H}_2 + _1\text{-CH}_2 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}$	106	$_1\text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_9 + \text{H}_2\text{O}$
27	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	67	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}$	107	$_1\text{-C}_6\text{H}_{13} \rightarrow_p \text{-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_2\text{H}_4$
28	$2\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$	68	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CO} + \text{H}$	108	$_1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow_{-1} \text{-C}_5\text{H}_{10} + \text{C}_2\text{H}_5$
29	$2\text{CH}_3 (+\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 (+\text{M})$	69	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2$	109	$_1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow_{-1} \text{-C}_4\text{H}_8 + _n\text{-C}_3\text{H}_7$
30	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	70	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_4$	110	$_1\text{-C}_7\text{H}_{15} \rightarrow_p \text{-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_6$
31	$\text{OH} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons_{-1} \text{-CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	71	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{O}$	111	$_2\text{-C}_{10}\text{H}_{21} \rightarrow_{-1} \text{-C}_7\text{H}_{15} + \text{C}_3\text{H}_6$
32	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$	72	$_n\text{-C}_3\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	112	$_3\text{-C}_{10}\text{H}_{21} \rightarrow_{-1} \text{-C}_6\text{H}_{13} + _1\text{-C}_4\text{H}_8$
33	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$	73	$_n\text{-C}_3\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$	113	$_n\text{-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{OH} \rightarrow _3\text{-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2\text{O}$
34	$\text{CH}_3 + \text{H} (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{CH}_4 (+\text{M})$	74	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_8$	114	$_n\text{-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{OH} \rightarrow _2\text{-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2\text{O}$
35	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	75	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightleftharpoons_n \text{-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	115	$_n\text{-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{H} \rightarrow _3\text{-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2$
36	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	76	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H} \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_3$	116	$_n\text{-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{H} \rightarrow _2\text{-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2$
37	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$	77	$_u\text{-C}_4\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + 2\text{HCO}$	117	$_2\text{-C}_{10}\text{H}_{21} \rightarrow _3\text{-C}_{10}\text{H}_{21}$
38	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	78	$\text{C}_4\text{H}_4 + \text{H} \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_3 + \text{H}_2$	118	$_3\text{-C}_{10}\text{H}_{21} \rightarrow _2\text{-C}_{10}\text{H}_{21}$
39	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{O}$	79	$\text{C}_4\text{H}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$		
40	$\text{HCCO} + \text{H} \rightleftharpoons_{-1} \text{-CH}_2 + \text{CO}$	80	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_3 \rightleftharpoons_u \text{-C}_4\text{H}_5$		

3 化学反应机理的验证

3.1 激波管

在激波管中,对正癸烷的着火延迟时间随初始温度的变化趋势进行了详细数值模拟,分别采用了其着火与燃烧的化学反应详细机理和简化机理.同时,对其在不同初始压力、当量比下的着火延迟时间随初始温度的变化趋势进行了分析与实验数据进行了对比,如图 1 所示,图中横坐标为 $1000\text{ K}/\text{初始温度}(T_0)$.

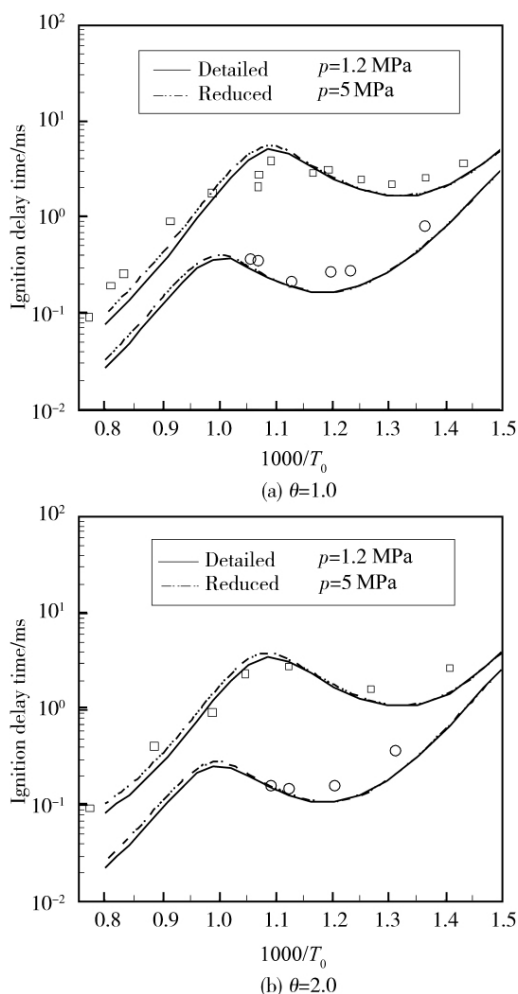


图 1 激波管中正癸烷的着火延迟时间
(实线:详细反应机理;点划线:简化机理;
符号:实验数据^[7])

Fig. 1 Ignition delay time of *n*-decane in the shock tube
(line: detailed mechanism; dotted line: reduced mechanism;
symbol: experimental data^[7])

从图 1 可以看出,在初始压力为 1.2 MPa 与 5 MPa、当量比为 1.0 与 2.0 时,在低初始温度区域(650~900 K),采用化学反应详细机理与简化

机理计算得到的着火延迟时间吻合较好;在高初始温度区域(900~1250 K),采用简化机理计算得到的着火延迟时间要略高于详细机理.

与实验数据^[7]对比发现,采用详细机理与简化机理计算得到的着火延迟时间随初始温度的整体变化趋势与实验数据吻合较好,但在某些初始温度下略有差异.当初始压力为 1.2 MPa、当量比分别为 1.0 与 2.0 时,在初始温度为 1000~1250 K 与 650~850 K 之间,计算得到的着火延迟时间要略低于实验值,而在 850~1000 K 之间则略高.当初始压力为 5 MPa、当量比分别为 1.0 与 2.0 时,在初始温度为 650~800 K 之间,计算得到的着火延迟时间要略低于实验值,而在 800~1000 K 之间则吻合较好.

3.2 预混火焰

燃烧炉内准一维常压稳定的层流预混火焰的具体计算参数为:反应物组成为 3.2% *n*-C₁₀H₂₂, 28.57% O₂ 与 68.23% N₂(体积分数),混合气流量为 $10.74 \times 10^{-3} \text{ g}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$,初始压力为 $1.01 \times 10^5 \text{ Pa}$.

实验装置及结构可参见文献^[19],其中主要的实验参数为:航空煤油(Jet A-1)由 79% *n*-alkanes(烷烃)、10% cycloalkanes(环烷烃)、11% aromatics(芳香烃)组成,航空煤油的流量为 1.06 cm³/s, O₂ 的流量为 10.3 cm³/s, N₂ 的流量为 24.6 cm³/s,当量比为 1.7,初始压力为 $1.01 \times 10^5 \text{ Pa}$.

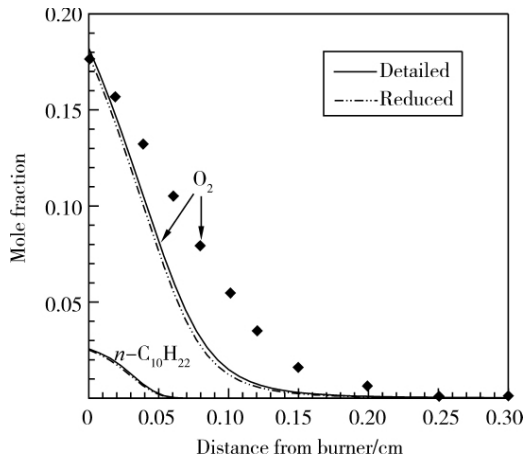
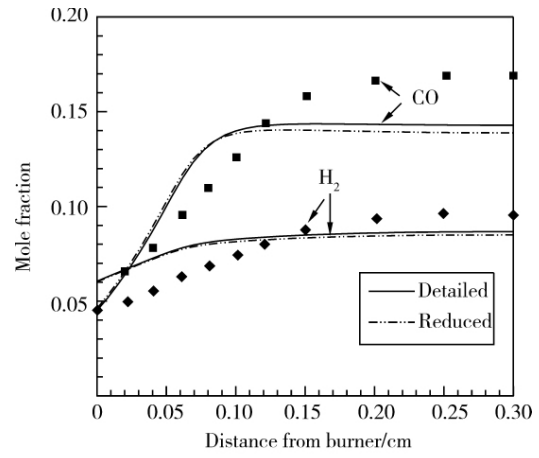
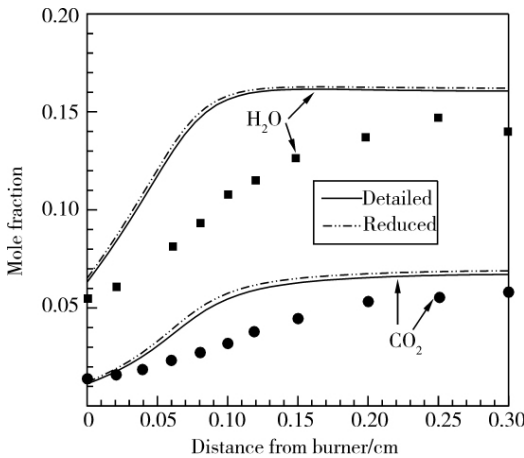
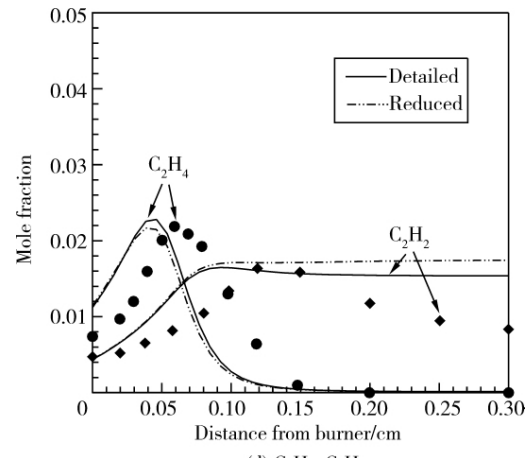
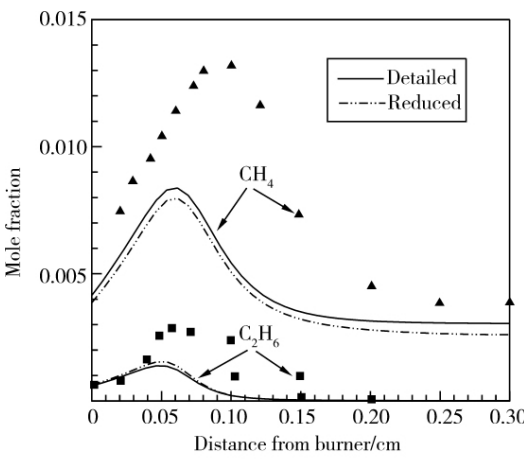
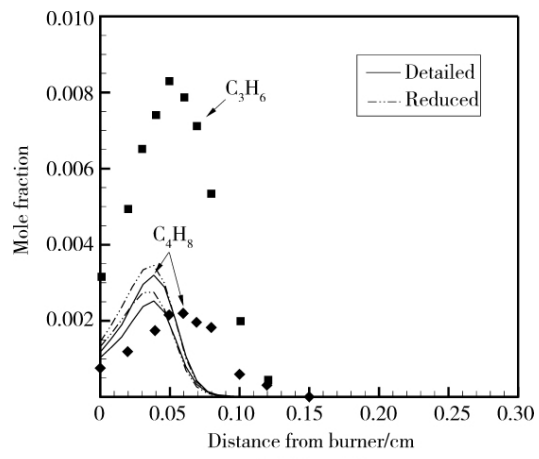
图 2 显示了炉内反应物与主要生成物摩尔分数的变化趋势.

从图 2(a)可以看出,采用详细机理与简化机理计算得到的反应物摩尔分数随与炉壁距离的变化趋势吻合较好.在航空煤油燃烧火焰的实验测试中,由于航空煤油为多种组分的混合物,其摩尔分数的变化趋势无法精确测定,因此在图 2(a)中,并没有显示航空煤油摩尔分数变化趋势的实验值.计算得到的氧气摩尔分数随与炉壁距离的整体变化趋势与实验值基本吻合,但在数量上略低,说明在计算过程中,氧气的消耗要更快.在主要生成物中,采用详细机理与简化机理计算得到的 H₂, H₂O, CO₂, C₂H₄, C₂H₆ 与 C₃H₄ 摩尔分数吻合较好;采用简化机理计算得到的 CO, CH₄, C₂H₂, C₃H₆, C₄H₈, C₅H₁₀ 与 C₆H₁₂ 虽然整体趋势与采用详细机理基本一致,但在数量上存在一定差异,其中 CO 与 CH₄ 要略低,而 C₂H₂, C₃H₆, C₄H₈, C₅H₁₀ 与 C₆H₁₂ 则略高.这有可能在简化详细机理

过程中这些组分的敏感性系数选取过大,从而去掉了影响该组分生成与消耗的关键反应步。

与实验数据对比,上述各组分的摩尔分数随与炉壁距离的整体变化趋势基本吻合,但在数量上同样存在一定的差异,其中 CO , H_2O , CH_4 , C_3H_6 , C_5H_{10} 与 C_3H_4 较为明显。在实验过程中,中间组分摩尔分数的测量十分困难,要保证其准

确性难度较大。同时,实验受很多因素的影响,比如测量仪器的测试精度、实验工况的确定和保证等,这些都将影响实验结果的准确性。因此,要保证数值计算结果与实验结果吻合很好非常困难。如果整体变化趋势吻合、在数量上又能保证在一定的误差范围,这完全可以证明数值计算结果的正确性。

(a) O_2 , $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ (b) CO , H_2 (c) H_2O , CO_2 (d) C_2H_4 , C_2H_2 (e) CH_4 , C_2H_6 (f) C_3H_6 , C_4H_8

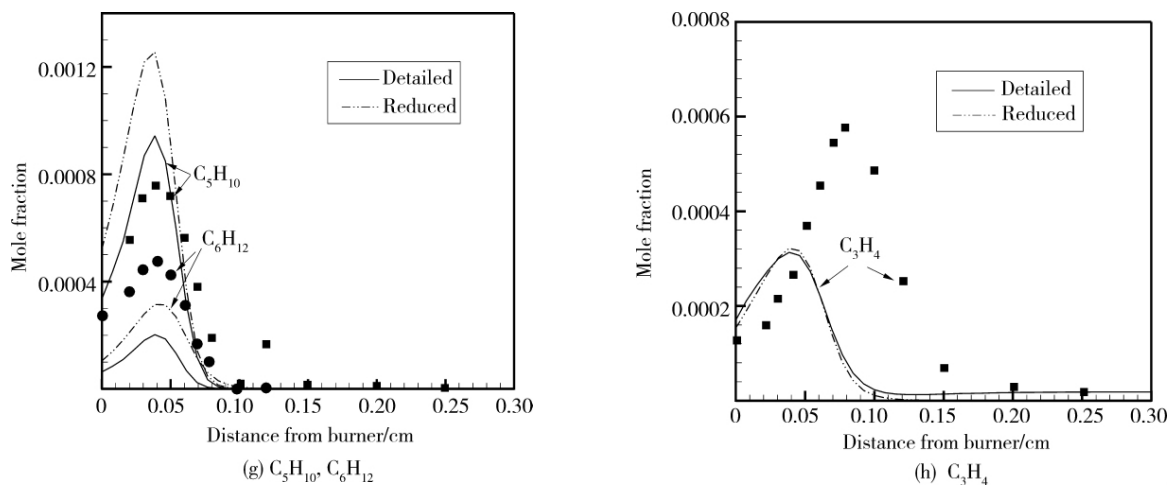


图 2 正癸烷预混燃烧下各组分摩尔分数的变化趋势(实线:详细反应机理;点划线:简化机理;符号:实验数据^[19])

Fig. 2 Mole fractions of species in *n*-decane premixed combustion (line: detailed mechanism; dotted line: reduced mechanism; symbol: experimental data^[19])

4 结 论

本文通过对正癸烷着火与燃烧的化学反应详细机理进行反应流与敏感性分析,建立了正癸烷着火与燃烧的化学反应简化机理(包括 50 种组分,118 个反应)。同时,分别采用详细机理与简化机理对正癸烷在激波管中的着火延迟时间进行了数值计算,并对其在预混燃烧炉内的燃烧过程进行了动力学数值模拟,并与实验结果进行了对比分析,得到以下结论:

1) 综合反应流分析及敏感性分析,正癸烷着火与燃烧的化学反应机理由 67 种组分、344 个反应简化为 50 种组分、118 个反应。

2) 在激波管中,采用化学反应详细机理与简化机理计算得到的着火延迟时间吻合较好;与实验数据相比,采用详细机理与简化机理计算得到的着火延迟时间随初始温度的整体变化趋势吻合较好,但在某些初始温度下略有差异。

3) 在预混燃烧炉内,采用详细机理与简化机理计算得到的反应物、各主要生成物摩尔分数随与炉壁距离的整体变化趋势吻合较好,但某些生成物在数量上略有差异。与实验数据对比,计算得到的反应物及各主要生成物的摩尔分数随与炉壁距离的整体变化趋势基本吻合,但在数量上同样存在一定的差异。

通过上述分析可以发现,正癸烷可以作为航空煤油的一种数值模拟替代燃料;同时,本文所建立的化学反应机理能很好地描述正癸烷着火与燃烧的动力学特性。

参考文献:

- [1] 郭艳龙,张宝诚,乔娟. 某型航空发动机燃烧室排气污染物数值模拟[J]. 航空发动机, 2008, 34(4): 38-41.
GUO Yanlong, ZHANG Baocheng, QIAO Juan. Numerical simulation of pollutant emissions from an aeroengine combustor[J]. Aeroengine, 2008, 34(4): 38-41. (in Chinese).
- [2] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.
- [3] Dagaut P, Bakali A E, Ristori A. The combustion of kerosene: experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate model fuels[J]. Fuel, 2006, 85(7-8): 944-956.
- [4] Franzelli B, Riber E, Sanjosé M, et al. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(7): 1364-1373.
- [5] Chrigui M, Moesl K, Ahmadi W, et al. Partially premixed prevaporized kerosene spray combustion in turbulent flow[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2010, 34(3): 308-315.
- [6] Wen Z, Yun S, Thomson M J, et al. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames[J]. Combustion and Flame, 2003, 135(3): 323-340.
- [7] Bikas G, Peters N. Kinetic modelling of *n*-decane combustion and autoignition[J]. Combustion and Flame, 2001, 126(1-2): 1456-1475.
- [8] Gueret C, Cathonnet M, Boettner J C, et al. Experimental study and modeling of kerosene oxidation in a jet-stirred flow reactor[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 1990, 23(1): 211-216.
- [9] Cathonnet M, Bales G C, Chakir A, et al. On the use of detailed chemical kinetics to model aeronautical combustors performances[C] // Proceedings of the Third European Propulsion Forum, EPF91. ONERA Paris; AAAF, 1992:

- 313-331.
- [10] Dagaut P, Reuillon M, Boettner J C, et al. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm; experimental study and detailed chemical kinetic modeling[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 1994, 25(1): 919-926.
- [11] Vovelle C, Delfau J L, Reuillon M. Formation of aromatic hydrocarbons in decane and kerosene flames at reduced pressure[M] // Bockhorn H. Soot formation in combustion; mechanisms and models. Berlin: Springer, 1994: 50-65.
- [12] Patterson P M, Kyne A G, Pourkashanian M, et al. Combustion of kerosene in counter-flow diffusion flames[J]. Journal of Propulsion and Power, 2000, 16(2): 453-460.
- [13] Cathonnet M, Voisin D, Etsouli A, et al. Kerosene combustion modelling using detailed and reduced chemical kinetic mechanisms[C] // Symposium Applied Vehicle Technology Panel on Gas Turbine Engine Combustion, RTO Meeting Proceedings. Neuilly-sur-Seine, France: NATO Res. and Tech. Organisation, 1999: 14. 1-14. 9.
- [14] Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, 4(1): 2079-2094.
- [15] Montgomery C J, Cannon S M, Mawid M A, et al. Reduced chemical kinetic mechanisms for JP-8 combustion [R]. AIAA 2002-0336, 2002.
- [16] Cooke J A, Bellucci M, Smooke M D, et al. Computational and experimental study of JP-8, a surrogate, and its components in counter-flow diffusion flames[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 439-446.
- [17] Kyne A G, Patterson P M, Pourkashanian M, et al. Prediction of premixed laminar flame structure and burning velocity of aviation fuel-air mixture[C] // Proceedings of Turbo. Expo. 2001: Land, Sea and Air. New Orleans, USA: ASME, 2001.
- [18] Rasmussen C L, Rasmussen A E, Glarborg P. Sensitizing effects of NO_x on CH₄ oxidation at high pressure[J]. Combustion and Flame, 2008, 153(4): 529-545.
- [19] 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(1-2): 327-344.

更正

由于排版疏忽,本刊2012年27卷2期第275页所刊登文章“相位测量轮廓术应用于叶片测量”(作者:李华伟、申作春、覃银红,等)的“摘要”中,“测量精度为 $(0.084 \pm 10.01) \text{ mm}$ ”应为“测量精度为 $(0.0841 \pm 0.01) \text{ mm}$ ”,特此更正.在此向作者及读者致歉.

《航空动力学报》编辑部

2012. 3