

RP-3 航空煤油模拟替代燃料的 化学反应详细机理

曾 文¹, 李海霞¹, 马洪安¹, 陈保东¹, 胡二江²

(1. 沈阳航空航天大学 航空航天工程学院(部), 沈阳 110136;

2. 西安交通大学 能源与动力工程学院, 西安 710049)

摘 要: 在化学激波管中对 RP-3 航空煤油的着火特性进行了实验测量, 获得了多工况下 RP-3 航空煤油的着火延迟时间. 根据 RP-3 航空煤油的化学组成及物理特性, 提出了由体积分数分别为 0.65, 0.1, 0.25 的正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分组成的模拟替代燃料, 并形成了该模拟替代燃料的化学反应详细机理. 采用该化学反应详细机理对该模拟替代燃料在化学激波管中多工况下的着火特性进行了数值计算, 并与实验数据进行了对比分析. 结果表明: 在不同压力与当量比下, RP-3 航空煤油着火延迟时间的对数与着火温度的倒数呈线性关系, 并且随着着火温度与压力的升高以及当量比的降低, 着火延迟时间逐渐缩短; 同时, 在各工况下采用该化学反应机理计算得到的该模拟替代燃料着火延迟时间与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验值吻合良好.

关 键 词: 着火特性; RP-3 航空煤油; 化学反应详细机理; 正癸烷; 甲苯

中图分类号: V231.2; TK401

文献标志码: A

Detailed chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene

ZENG Wen¹, LI Hai-xia¹, MA Hong-an¹, CHEN Bao-dong¹, HU Er-jiang²

(1. Faculty of Aerospace Engineering,

Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China;

2. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The ignition characteristics of RP-3 kerosene were measured in a chemical shock tube and the ignition delay times of RP-3 kerosene at various conditions were gained. According to the chemical compositions and physical properties of RP-3 kerosene, a surrogate fuel including *n*-decane, toluene and propyl cyclohexane (volume fraction of 0.65, 0.1, 0.25) was provided, and the detailed chemical reaction mechanism for this surrogate fuel was developed. The ignition characteristics of this surrogate fuel in the chemical shock tube at various conditions were simulated using this detailed chemical reaction mechanism, and the simulation results were compared with the experimental data. The results show that the correlation for the logarithm of the ignition delay time of RP-3 kerosene and the reciprocal ignition temperature is linear under different pressures and equivalence ratios, and with the increase of ignition temperature and pressure and the decrease of equivalence ratio, the ignition delay time is shortened. At the same time, the ignition delay times of this surrogate fuel computed by this detailed chemical reaction mechanism under different conditions agree well with the experimental data of RP-3 kerosene.

收稿日期:2013-08-05

基金项目:国家自然科学基金(51376133); 辽宁省自然科学基金(2013024009); 沈阳市科技攻关项目(F13024200)

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.

Key words: ignition characteristics; RP-3 kerosene;
detailed chemical reaction mechanism; *n*-decane; toluene

航空煤油在航空发动机燃烧室内的着火与燃烧过程受控于燃料的反应动力学特性. 为了对航空发动机燃烧室燃烧过程进行准确的数值模拟, 必须考虑航空煤油的化学反应机理^[1-2]. 然而, 由于缺乏国产 RP-3 航空煤油的化学反应机理, 目前国内研究者在对航空发动机燃烧过程的数值计算中, 一般采用航空煤油的单步反应机理或国外航空煤油的燃烧反应机理. 肖保国等^[3]通过对 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, 计算了超燃冲压发动机燃烧室内的流场分布, 壁面压力的计算值和实验结果吻合较好. 侯宽新等^[4]对某航空发动机主燃烧室简化模型进行了基于正庚烷($n-C_7H_{16}$)详细反应机理的燃烧流场数值模拟, 得出了基于详细反应机理的温度场、组分浓度场, 验证了机理文件中反应的某些组分与特定自由基之间的关系. 侯凌云等^[5]针对某支板氢燃料超声速燃烧室, 分别采用了氢燃料的单步化学反应动力学、7 组分 8 步反应和 9 组分 19 步反应动力学模型, 对比分析了燃烧反应速率、内部温度场和速度场的分布特性. 结果表明, 采用详细化学反应动力学计算得到的温度场与实验值吻合较好.

RP-3 航空煤油属于高碳数碳氢混合物燃料, 其组成非常复杂, 由几十种甚至上百种组分组成^[6], 难以直接建立其反应动力学模型. 一种有效的方法就是发展一种具有与 RP-3 航空煤油相似的物理和化学特性的模拟替代燃料, 并形成该模拟替代燃料的化学反应详细机理. 近年来, 国外学者对国外航空煤油(如 JP-8, JP-10, Jet A 等)的着火与燃烧特性进行了大量的实验研究, 提出了多种单组分或多组分模拟替代燃料, 并形成了多种复杂的化学反应机理^[7-10]. 但是由于缺乏对国产 RP-3 航空煤油的物理与化学性质的了解, 尤其是缺乏详实的 RP-3 航空煤油的着火与燃烧特性的实验数据, RP-3 航空煤油的模拟替代燃料及其燃烧机理目前还鲜有报道.

本文对国产 RP-3 航空煤油的着火特性进行了实验测量, 同时, 提出了由正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分组成的 RP-3 航空煤油的模拟替代燃料, 并构建了该模拟替代燃料的化学反应机理. 采用该反应机理对该模拟替代燃料在化学激波管中多工况下的着火特性进行了数值计算, 并

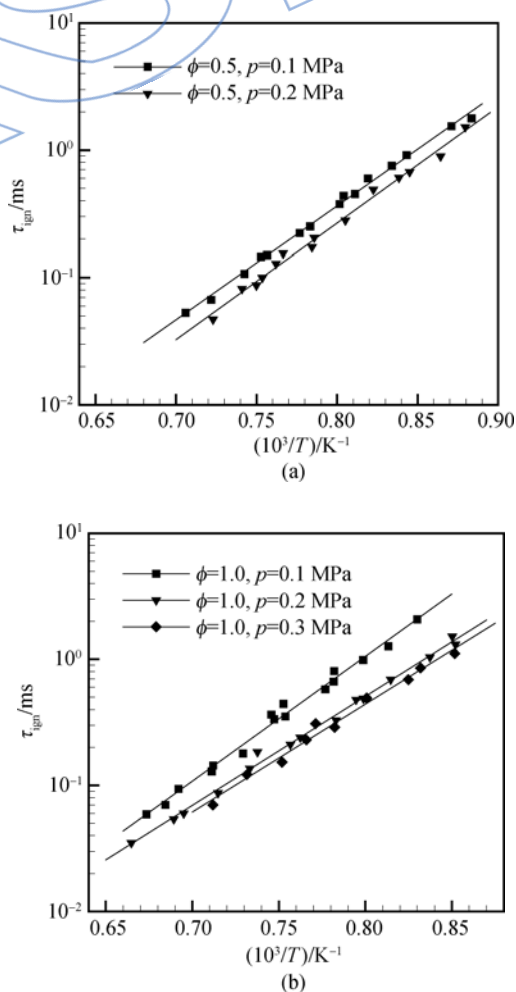
与实验数据进行了对比分析, 同时, 对该反应机理进行了敏感性分析, 阐明了对该模拟替代燃料着火延迟时间起关键作用的基元反应.

1 RP-3 航空煤油的着火特性

利用化学激波管实验装置对 RP-3 航空煤油/氧气/氩气混合气在着火温度 T 为 1 100 ~ 1 600 K, 压力 p 为 0.1, 0.2, 0.3 MPa, 当量比 ϕ 为 0.5, 1.0, 1.5 的条件下的着火特性进行了测量. 实验装置与原理可参见文献[11].

图 1 显示了不同压力与当量比下 RP-3 航空煤油的着火延迟时间. 图中纵坐标 τ_{ign} 为着火延迟时间, 横坐标 T 为着火温度. 如图所示, RP-3 航空煤油着火延迟时间的对数与着火温度的倒数呈线性关系, 同时, 随着着火温度、压力的升高以及当量比的降低, 着火延迟时间逐渐缩短.

利用多元线性回归拟合得到了着火温度范围



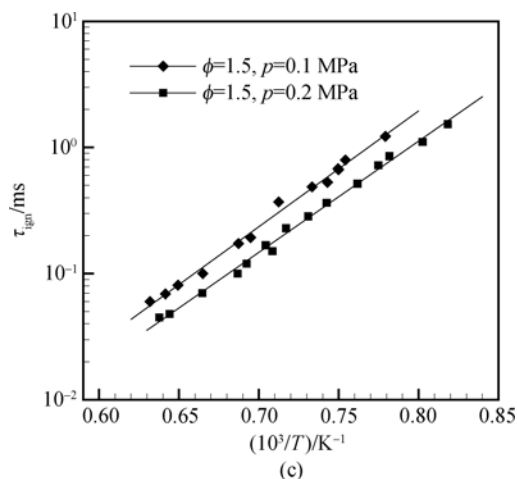


图 1 不同工况下 RP-3 航空煤油的着火延迟时间

Fig. 1 Ignition delay times of RP-3 kerosene at various conditions

为 1100~1600 K, 压力范围为 0.1~0.3 MPa, 当量比范围为 0.5~1.5 的条件下, RP-3 航空煤油的着火延迟时间的 Arrhenius 关系式

$$\tau_{\text{ign}} = 8.03 \times 10^{-5} p^{-0.87} \phi^{1.36} \exp\left(\frac{1.72 \times 10^5}{RT}\right) \quad (1)$$

式中 R 为通用气体常数。

2 化学反应详细机理

2.1 RP-3 航空煤油的模拟替代燃料

国产 RP-3 航空煤油的色谱分析数据如表 1 所示^[6], 包括 92.1% 的饱和碳氢化合物以及 7.9% 的芳香烃碳氢化合物(体积分数)。由于 RP-3

航空煤油在密度与成分构成等方面更接近法国航空煤油(Jet A), 本文参照 Dagaut 3 组分模型^[12], 通过对 RP-3 航空煤油成分的分析, 选择了一种由体积分数为 65% 正癸烷、10% 甲苯、25% 丙基环己烷组成的 3 种组分混合燃料作为 RP-3 航空煤油的模拟替代燃料。

2.2 正癸烷的反应机理

依据 Bikas 等^[13]提出的正癸烷燃料的化学反应详细机理, 并对之进行了修改^[14], 形成了正癸烷燃料的化学反应详细机理, 包括 67 种组分, 344 个反应^[15]。

2.3 正癸烷与甲苯的反应机理

依据 Kyne 等^[16]提出的甲苯热裂解与氧化反应机理, 并添加了苯生成的反应机理, 同时, 综合正癸烷燃料的化学反应机理, 形成了正癸烷与甲苯双组分混合燃料的化学反应详细机理, 包括 118 种组分、527 个基元反应。其中甲苯的热裂解与氧化的主要基元反应如表 2 所示。

2.4 正癸烷、甲苯与丙基环己烷的反应机理

依据谈宁馨等^[17]提出的甲基环己烷的高温燃烧机理, 并在此基础上添加了丙基环己烷的高温裂解与氧化反应机理, 同时, 综合正癸烷与甲苯的化学反应机理, 最终形成了正癸烷、甲苯以及丙基环己烷 3 种组分混合燃料的化学反应详细机理, 包括 150 种组分、591 个基元反应。其中, 丙基环己烷的热裂解与氧化的主要基元反应如表 3 所示。

表 1 RP-3 航空煤油主要成分的体积分数

Table 1 Volume fraction of major species of RP-3 kerosene

成分	饱和碳氢化合物				芳香烃碳氢化合物			
	烷烃	单循环烷烃	双循环烷烃	多循环烷烃	烷基苯	四氢化萘	萘	萘衍生物
体积分数/%	52.2	33.8	6.0	0.1	5.1	1.3	0.6	0.9

表 2 甲苯(C_7H_8)热裂解与氧化的主要基元反应Table 2 Major reactions of toluene (C_7H_8) pyrolysis and oxidation

序号	基元反应	序号	基元反应
1	$C_7H_8 + OH \rightleftharpoons C_7H_7 + H_2O$	8	$C_7H_8 \rightleftharpoons C_7H_7 + H$
2	$C_7H_8 + OH \rightleftharpoons C_7H_7O + H_2$	9	$C_7H_8 + C_6H_5 \rightleftharpoons C_6H_6 + C_7H_7$
3	$C_7H_8 + OH \rightleftharpoons C_7H_7OH + H$	10	$C_7H_8 + CH_3 \rightleftharpoons CH_4 + C_7H_7$
4	$C_7H_8 + O_2 \rightleftharpoons C_7H_7 + HO_2$	11	$C_7H_8 + O \rightleftharpoons C_7H_7 + OH$
5	$C_7H_8 + H \rightleftharpoons C_7H_7 + H_2$	12	$C_7H_8 + O \rightleftharpoons C_7H_7O + H$
6	$C_7H_8 + H \rightleftharpoons C_6H_6 + CH_3$	13	$C_7H_8 + HO_2 \rightleftharpoons C_7H_7 + H_2O_2$
7	$C_7H_8 \rightleftharpoons C_6H_5 + CH_3$		

表 3 丙基环己烷(C_9H_{18})热裂解与氧化的主要基元反应Table 3 Major reactions of propyl cyclohexane (C_9H_{18}) pyrolysis and oxidation

序号	基元反应	序号	基元反应
1	$C_9H_{18} \Rightarrow {}_1-C_9H_{18}$	10	$C_9H_{18} + C_2H_5 \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + C_2H_6$
2	$C_9H_{18} + H \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + H_2$	11	$C_9H_{18} + O \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + OH$
3	$C_9H_{18} + CH_3 \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + CH_4$	12	$C_9H_{18} + OH \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + H_2O$
4	$C_9H_{18} + C_2H_5 \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + C_2H_6$	13	$C_9H_{18} + HO_2 \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + H_2O_2$
5	$C_9H_{18} + O \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + OH$	14	$C_9H_{18} + H \Rightarrow {}_3-C_9H_{17} + H_2$
6	$C_9H_{18} + OH \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + H_2O$	15	$C_9H_{18} + C_2H_5 \Rightarrow {}_3-C_9H_{17} + C_2H_6$
7	$C_9H_{18} + HO_2 \Rightarrow {}_1-C_9H_{17} + H_2O_2$	16	$C_9H_{18} + O \Rightarrow {}_3-C_9H_{17} + OH$
8	$C_9H_{18} + H \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + H_2$	17	$C_9H_{18} + OH \Rightarrow {}_3-C_9H_{17} + H_2O$
9	$C_9H_{18} + CH_3 \Rightarrow {}_2-C_9H_{17} + CH_4$	18	$C_9H_{18} + HO_2 \Rightarrow {}_3-C_9H_{17} + H_2O_2$

3 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的着火特性

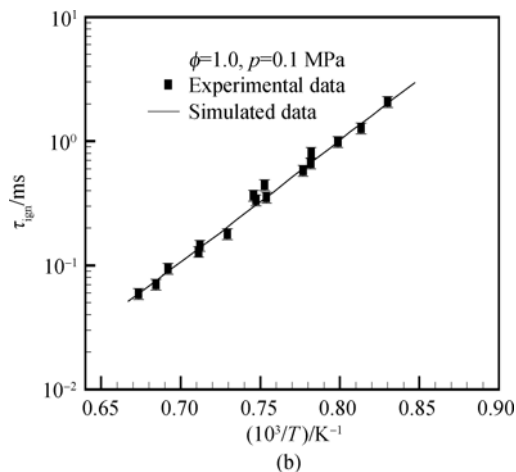
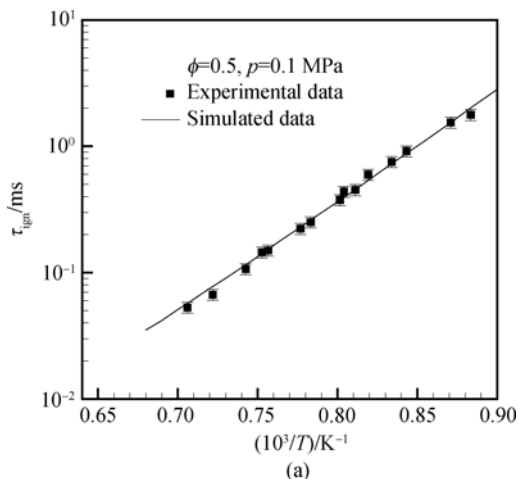
采用已建立的正癸烷、甲苯以及丙基环己烷 3 种组分混合燃料的化学反应详细机理,对该 RP-3 航空煤油模拟替代燃料在化学激波管中的着火特性进行数值计算.正癸烷、甲苯与丙基环己烷的体积分数为 0.65,0.1,0.25,着火温度范围为 1100~1600 K,压力范围为 0.1~0.3 MPa,当量比范围为 0.5~1.5.

图 2 显示了采用已建立的反应机理计算得到的 3 种组分混合燃料在不同压力与当量比下的着火延迟时间,并与相同工况下的实验数据进行了对比,图中在各实验数据上添加了 $\pm 10\%$ 的误差带.

如图 2 所示,当压力为 0.1 MPa、当量比为

1.5 时,着火温度处于低温(低于 1280 K)与高温段(高于 1538 K)时,3 种组分混合燃料着火延迟时间的计算值与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验值之间存在偏差(大于 $\pm 10\%$),但是当着火温度处于中间温度段时,计算值与实验值吻合良好.在其余几种工况下,着火温度范围为 1100~1600 K 内模拟替代燃料着火延迟时间的计算值与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验值吻合较好.

从多工况下该模拟替代燃料着火延迟时间的计算值与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验值的比较分析来看,体积分数为 0.65,0.1,0.25 的正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料可作为 RP-3 航空煤油的模拟替代燃料,同时,本文所建立的该模拟替代燃料的化学反应详细机理能较准确地反映出该模拟替代燃料的着火特性.



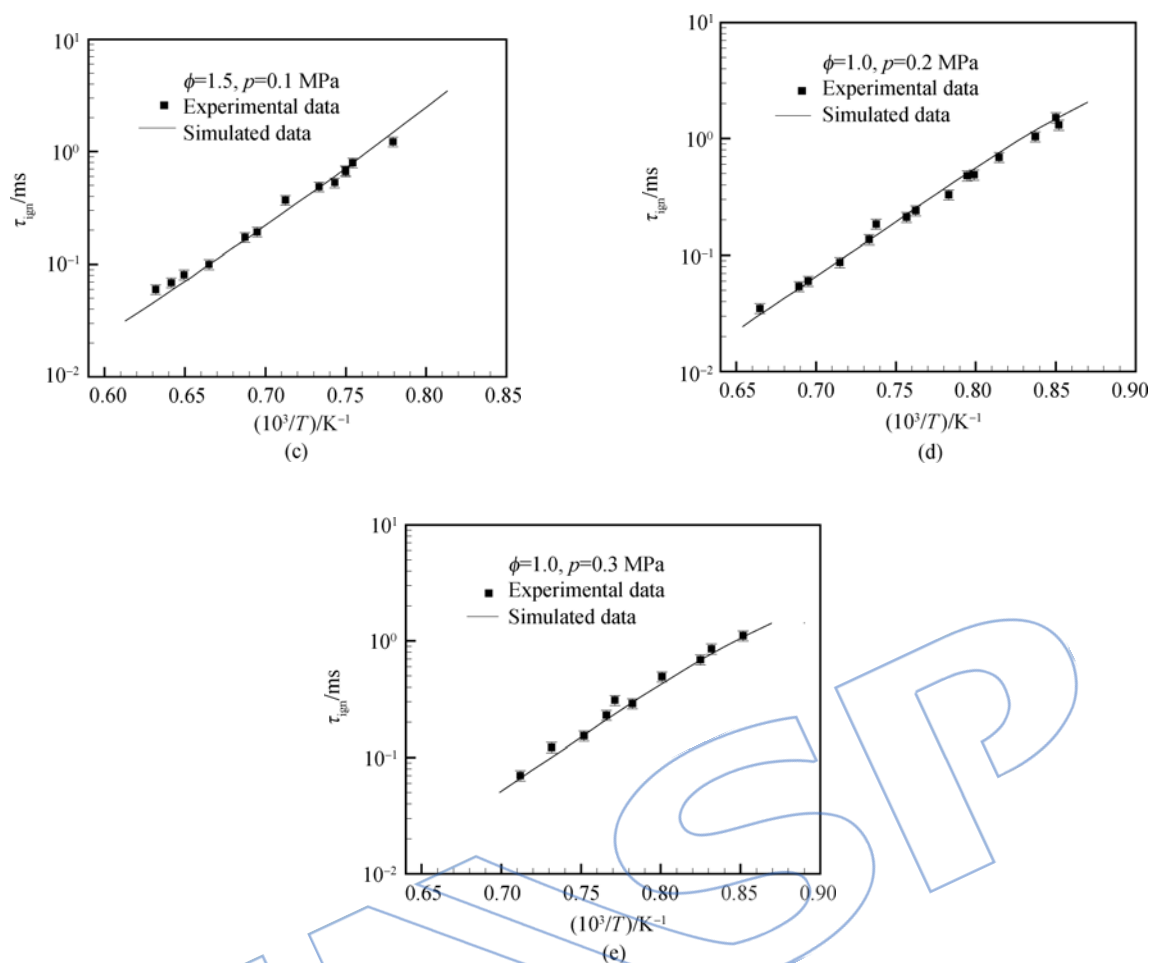


图2 多工况下 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的着火延迟时间

Fig. 2 Ignition delay times of surrogate fuel for RP-3 kerosene at various conditions

4 化学反应详细机理的敏感性分析

本文对已建立的正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料的化学反应详细机理进行敏感性分析^[18-19], 阐明反应机理中关键基元反应对该模拟替代燃料着火特性的影响, 进而理解该模拟替代燃料的着火机理。

图 3 显示了压力为 0.1 MPa, 当量比为 1.0, 着火温度为 1100 K 时, 对正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料着火特性影响最为显著的基元反应及其敏感性系数。

从图 3 可以看出, 对该模拟替代燃料着火特性影响最为显著的基元反应为

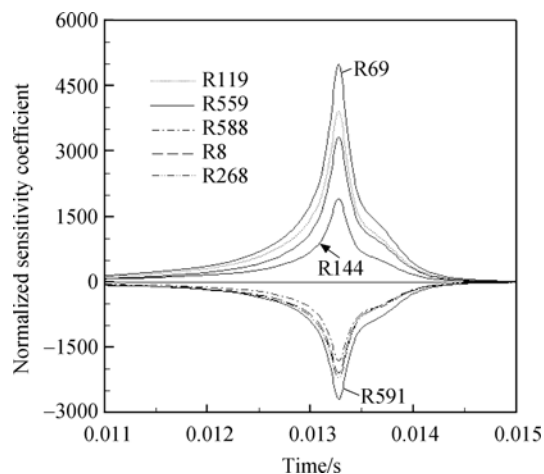
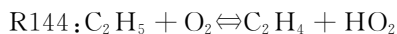
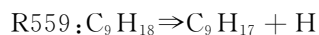
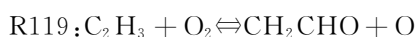
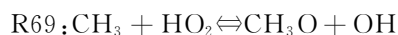
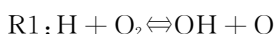
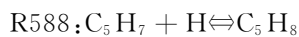
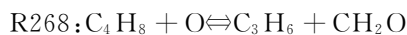


图3 影响模拟替代燃料着火特性的主要基元反应

Fig. 3 Major reactions affecting ignition characteristics of surrogate fuel





R1 是碳氢燃料燃烧过程中非常重要的链分支反应,因此,其敏感性系数最高.由于在基元反应 R69, R119, R559, R144 中有 OH, H, O, HO₂ 等自由基的生成,这些自由基将促进碳氢燃料的着火与燃烧,因此,这些基元反应的敏感性系数相对较高.在基元反应 R589, R591, R268, R588, R8 中消耗了自由基 O, OH, H, 因此这些基元反应将抑制碳氢燃料的着火与燃烧.

本文仅分析了某工况下对该模拟替代燃料着火特性影响最为显著的关键基元反应,其他对该模拟替代燃料着火特性也存在影响的基元反应在本文中并没有作详细的讨论.如果要建立该模拟替代燃料的化学反应简化机理,需进行多工况下该模拟替代燃料化学反应详细机理的敏感性分析,这将在作者下阶段研究中进行具体分析与阐述.

5 结 论

本文对国产 RP-3 航空煤油的着火特性进行了实验测量,并根据 RP-3 航空煤油的化学组成及物理特性,提出了由体积分数为 0.65, 0.1, 0.25 的正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料作为模拟替代燃料,形成了该模拟替代燃料的化学反应详细机理;采用该化学反应详细机理对该模拟替代燃料在化学激波管中多工况下的着火特性进行了数值计算,并与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验数据进行了对比分析.得到以下结论:

1) 在不同压力与当量比下,RP-3 航空煤油着火延迟时间的对数与着火温度的倒数呈线性关系,同时,随着着火温度、压力的升高以及当量比的降低,RP-3 航空煤油的着火延迟时间逐渐缩短.

2) 采用构建的化学反应详细机理计算得到正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料的着火延迟时间与 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验值吻合良好.

3) 通过对该模拟替代燃料的化学反应详细机理的敏感性分析发现,基元反应 R1, R69, R119, R559, R144, R589, R591, R268, R588, R8 对该模拟替代燃料着火特性的影响最为显著.

从上述分析发现,体积分数为 0.65, 0.1, 0.25 的正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 种组分混合燃料可作为 RP-3 航空煤油的模拟替代燃料.同时,本文所建立的该模拟替代燃料的化学反应详细机理

能很好反映出该模拟替代燃料的着火特性.

参考文献:

- [1] Edwards T, Maurice L Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels[J]. Journal of Propulsion and Power, 2001, 17(2): 461-466.
- [2] Riesmeir 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.
- [3] 肖保国, 杨顺华, 赵慧勇, 等. RP-3 航空煤油燃烧的详细和简化化学动力学模型[J]. 航空动力学报, 2010, 25(9): 1948-1955.
XIAO Baoguo, YANG Shunhua, ZHAO Huiyong, et al. Detailed and reduced chemical kinetic mechanisms for RP-3 aviation kerosene combustion[J]. Journal of Aerospace Power, 2010, 25(9): 1948-1955. (in Chinese)
- [4] 侯宽新, 刘勇, 赵坚行. 详细反应机理的航空发动机二维燃烧流场计算[J]. 航空动力学报, 2009, 24(12): 2655-2660.
HOU Kuanxin, LIU Yong, ZHAO Jianxing. Two dimensional numerical simulation of reactive flow in aero-engine combustor with detailed chemical kinetic mechanisms[J]. Journal of Aerospace Power, 2009, 24(12): 2655-2660. (in Chinese)
- [5] 侯凌云, 肖锋, 龚景松. 化学反应动力学对超声速燃烧的影响[J]. 推进技术, 2009, 30(2): 145-148.
HOU Lingyun, XIAO Feng, GONG Jingsong. Numerical study on supersonic combustion using different chemical reaction dynamics[J]. Journal of Propulsion Technology, 2009, 30(2): 145-148. (in Chinese)
- [6] 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)
- [7] Luche J, Reuillon M, Boettner J C, et al. Reduction of large detailed kinetic mechanisms: application to kerosene/air combustion[J]. Combustion Science and Technology, 2004, 176(3): 1935-1963.
- [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] Agosta A, Cernansky N P, Miller D L, et al. Reference components of jet fuels: kinetic modeling and experimental results[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2004, 28(7): 701-708.
- [10] 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.
- [11] 张英佳, 黄佐华, 王金华, 等. 激波管研究煤油/空气混合气

- 的自着火特性[J]. 科学通报, 2011, 56(1): 85-93.
- ZHANG Yingjia, HUANG Zuohua, WANG Jinhua, et al. Shock tube study on auto-ignition characteristics of kerosene/air mixtures[J]. Chinese Science Bulletin, 2011, 56(1): 85-93. (in Chinese)
- [12] Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbon oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, 4(1): 2079-2094.
- [13] Bikas G, Peters N. Kinetic modelling of *n*-decane combustion and autoignition[J]. Combustion and Flame, 2001, 126(1/2): 1456-1475.
- [14] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.
- [15] 李海霞. RP-3 航空煤油着火特性的实验与反应动力学研究[D]. 沈阳: 沈阳航空航天大学, 2013.
- LI Haixia. Experiment and kinetic research on ignition characteristics of RP-3 kerosene[D]. Shenyang: Shenyang Aerospace University, 2013. (in Chinese)
- [16] Kyne A G, Patterson P M, Pourkashanian M, et al. Prediction of premixed laminar flame structure and burning velocity of aviation fuel-air mixtures[R]. ASME Paper 2001-GT-0055, 2001.
- [17] 谈宁馨, 王静波, 华晓晓, 等. 甲基环己烷的高温燃烧机理及动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2011, 32(8): 1832-1837.
- TAN Ningxin, WANG Jingbo, HUA Xiaoxiao, et al. Combustion mechanism and kinetic modeling study of methyl cyclohexane at high temperature[J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2011, 32(8): 1832-1837. (in Chinese)
- [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] 曾文, 陈潇潇, 刘静忱, 等. 一种航空煤油数值模拟代用燃料的化学反应简化机理[J]. 航空动力学报, 2012, 27(3): 536-543.
- ZENG Wen, CHEN Xiaoxiao, LIU Jingchen, et al. Reduced chemical reaction mechanism of a surrogate fuel for kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2012, 27(3): 536-543. (in Chinese)