

RP-3 航空煤油 3 组分模拟替代燃料 燃烧反应机理

刘 宇, 曾 文, 马洪安, 陈保东

(沈阳航空航天大学 航空航天工程学部(院), 沈阳 110136)

摘 要: 提出了一种包括 65% 正癸烷、10% 甲苯与 25% 丙基环己烷 3 组分的 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的燃烧反应机理, 该机理由 150 种组分和 591 个基元反应组成。采用该燃烧反应机理对 RP-3 航空煤油模拟替代燃料在激波管和定容燃烧弹中的着火与燃烧特性进行数值模拟, 并与相应工况实验数据进行对比分析。通过与 RP-3 航空煤油单组分正癸烷模拟替代燃料的燃烧反应机理进行对比分析发现: 正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 组分替代燃料的燃烧反应机理对着火延迟时间的计算偏差能够控制在 5% 以内, 对层流燃烧速度的计算偏差能够控制在 10% 以内, 计算值明显优于正癸烷单组分替代燃料; 进一步采用敏感性分析方法对 3 组分模拟替代燃料的燃料反应机理进行了适当修正, 修正后机理对层流燃烧速度的计算偏差由 10% 提高到 5% 以内, 能够更好预测所研究参数下的 RP-3 航空煤油的着火延迟时间和层流燃烧速度。

关 键 词: RP-3 航空煤油; 模拟替代燃料; 燃烧反应机理; 着火延迟时间; 层流燃烧速度

中图分类号: V231; TK401

文献标志码: A

Combustion reaction mechanism of three-component simulation surrogate fuel for RP-3 kerosene

LIU Yu, ZENG Wen, MA Hong-an, CHEN Bao-dong

(Faculty of Aerospace Engineering,

Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China)

Abstract: A kind of combustion reaction mechanism of surrogate fuel was developed, including 65% *n*-decane, 10% toluene and 25% propyl cyclohexane for RP-3 kerosene. The mechanism consisted of 150 species and 591 elementary reactions. The ignition and combustion characteristics of surrogate fuel at various conditions were simulated by this reaction mechanism, and the simulation results were compared with those of another one-component surrogate fuel (*n*-decane) and the experimental data, respectively. Results show that the chemical reaction mechanism of three-component surrogate fuel can accurately calculate the ignition and combustion characteristics of RP-3 kerosene. The calculation deviation of the ignition delay time can be controlled within 5%, and the calculation error of the laminar burning velocity can be controlled within 10%, better than those of *n*-decane. The combustion reaction mechanism of three-component surrogate fuel was also modified by sensitivity analysis, showing that the calculation error of the laminar burning velocity was improved from 10% to 5%. This means the modified mechanism can predict the ignition delay time and laminar burning velocity of RP-3 kerosene better.

收稿日期: 2015-10-20

基金项目: 国家自然科学基金(51376133); 辽宁省博士启动基金(20141076); 辽宁省教育厅科学研究一般项目(L2015404)

作者简介: 刘宇(1983—), 男, 辽宁兴城人, 讲师, 博士, 主要从事航空发动机燃料燃烧实验与化学反应机理研究。

通讯作者: 曾文(1977—), 男, 湖南沅江人, 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: RP-3 kerosene; simulation surrogate fuel; combustion reaction mechanism; ignition delay time; laminar burning velocity

航空发动机技术的落后已经严重制约我国在军事武器装备、民航运输等行业的发展.随着国家的大飞机项目与两机专项的立项,作为民用客机、军用飞机、运输机、高空长航时无人机等飞行器和武器装备“心脏”的航空发动机研发越来越受到国家的重视^[1].

在航空发动机研制中,为了降低研制费用和缩短研制周期、预测燃烧室性能以及优化燃烧室结构等,需要准确模拟燃烧过程中的细节.在航空发动机燃烧室内,燃料与空气的混合过程伴随复杂的湍流运动,而燃料的着火与燃烧过程则是一个强烈受控于化学反应动力学的湍流燃烧过程.因此,在对超燃冲压发动机燃烧室燃烧过程进行数值模拟时,需要采用航空煤油的化学反应机理.国产 RP-3 航空煤油是我国航空发动机的主要燃料,然而,由于缺乏 RP-3 航空煤油的化学反应机理,目前国内学者在计算燃烧室内的燃烧过程时,普遍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^[2-4].

开展我国航空发动机研制工作的首要任务是构建准确可靠的 RP-3 航空煤油化学反应机理.然而,RP-3 航空煤油成分极为复杂,直接构建其化学反应机理难度较大.一种有效的方法是找到与 RP-3 航空煤油具有相似理化性质的数值模拟替代燃料,形成该数值模拟替代燃料的化学反应机理.近些年,国内学者对 RP-3 航空煤油的着火与燃烧特性进行了大量研究,在现有国外航空煤油机理基础之上,获得了多种单组分和多组分 RP-3 航空煤油模拟替代燃料,并形成了多种化学反应机理^[5-12].对于单组分数值模拟替代燃料,主要为正癸烷,随着研究的深入,出现了包括环烷烃的双组分和多组分的替代燃料.范学军等^[5]以大庆 RP-3 航空煤油为例,选择了一种由 49%(摩尔分数)正癸烷、44%1,3,5-三甲基环己烷以及 7%正丙基苯组成的模拟替代燃料,用来对 RP-3 航空煤油进行热物性研究.计算结果表明,3 组分替代燃料可以较好地反应 RP-3 煤油在各种状态下物性的变化趋势,同时还可以精确地模拟大庆 RP-3 航空煤油密度和流动等参数.肖保国等^[6]在天津大学实验测量结果和张若凌等^[7]研究基础上,提出了一种由 79%(摩尔分数)正癸烷、13%三甲基环己烷、8%乙基苯构成的煤油模拟替代燃

料,并建立了煤油燃烧详细化学反应动力学模型(包含 109 种组分和 946 个基元反应).采用“准稳态”假设方法对详细反应机理进行简化,获得了包含 22 种组分和 18 步总包反应的简化反应机理.通过与实验值比较,得出简化机理具有较高的准确性,能够准确反应 RP-3 航空煤油点火特点.徐佳琪等^[8]通过对 RP-3 航空煤油成分的分析,以及对 8 组替代模型的对比实验,选取由 73.0%(质量分数)正十二烷、14.7%1,3,5-三甲基环己烷以及 12.3%正丙基苯组成的 RP-3 航空煤油模拟替代燃料,构建出 RP-3 航空煤油高温燃烧详细反应机理,并采用该机理计算了 RP-3 航空煤油在激波管中的着火延迟时间,通过与相应工况实验数据比较表明,该替代燃料燃烧反应机理能够较好预测 RP-3 煤油的高温点火特性.郑东等^[9]提出了 40%(摩尔分数)正癸烷、42%正十二烷、13%乙基环己烷和 5%对二甲苯的 RP-3 航空煤油 4 组分模拟替代燃料燃烧反应机理.并采用对冲火焰实验装置测量了 RP-3 航空煤油以及 4 组分替代燃料的层流火焰传播速度,用于验证其构建的半详细燃烧反应机理(包括 168 种组分和 1089 个基元反应).结果表明,该燃烧反应机理能够准确预测 RP-3 航空煤油着火延迟时间和火焰传播速度.曾文等^[10-12]在激波管中对国产 RP-3 航空煤油的着火特性进行了实验研究,获得了多工况下 RP-3 航空煤油的着火延迟时间.依据 RP-3 航空煤油的化学组成及理化特性,提出了一种由体积分数为 65%,10%和 25%的正癸烷、甲苯和丙基环己烷 3 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(包括 150 种组分和 591 个基元反应).采用反应流、敏感性分析等方法对详细机理进行了适当简化,同时采用该简化机理对模拟替代燃料在多工况下的着火延迟时间进行计算,通过与相应工况下实验数据以及详细机理计算值对比发现,简化机理计算值与实验值及详细机理计算值吻合良好.

本文拟开展国产 RP-3 航空煤油的层流燃烧特性的实验研究.采用相应工况实验数据对已构建正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 组分 RP-3 航空煤油模拟替代燃料燃烧反应机理进行验证,并通过与 RP-3 航空煤油单组分正癸烷模拟替代燃料的燃烧反应机理进行对比分析发现,正癸烷、甲苯与丙基

环己烷3组分模拟替代燃料的燃烧反应机理要优于正癸烷单组分替代燃料. 进一步通过敏感性分析对已构建3组分燃料燃烧反应机理进行修正, 结果证明, 修正后机理能够准确预测本文所研究参数下的RP-3航空煤油的着火延迟时间和层流燃烧速度.

1 RP-3 航空煤油模拟替代燃料反应机理的构建

1.1 单组分正癸烷反应机理的构建

依据 Bikas 等^[13]提出的正癸烷详细燃烧反应机理(包括67种组分和600个基元反应), 并结合 Honnet 等^[14]对该机理提出的修正, 形成了本文所采用的正癸烷详细燃烧反应机理(包括67种组分和344个基元反应)^[15]. 本文采用该机理, 分别对RP-3航空煤油在激波管和定容燃烧弹中的着火延迟时间和层流火焰传播速度进行了数值计算, 并与相应工况实验数据进行了对比分析.

1.2 3组分模拟替代燃烧反应机理的构建

本文根据RP-3航空煤油色谱分析数据^[5]和RP-3航空煤油的部分理化性质, 参照 Dagaut^[16]提出的法国航空煤油(Jet-A)替代燃料的3组分模型, 选择65%(体积分数)正癸烷、10%甲苯和25%丙基环己烷3组分燃料作为RP-3航空煤油的数值模拟替代燃料. 通过修改正癸烷详细燃烧反应机理, 并添加甲苯裂解与氧化反应机理、丙基环己烷高温裂解与氧化反应机理等, 最终获得正癸烷、甲

苯以及丙基环己烷3组分RP-3航空煤油数值模拟替代燃料的详细燃烧反应机理(包括150种组分和591个基元反应). 详细机理的构建参见文献^[11].

2 RP-3 航空煤油模拟替代燃料反应机理的验证

2.1 RP-3 航空煤油的着火特性实验

在当量比 ϕ 为 0.5, 1.0 和 1.5, 压力 p 为 0.1, 0.2 和 0.3 MPa, 着火温度 T 为 1100~1600 K 条件下, 采用激波管实验装置对 RP-3 航空煤油/氧气/氩气混合气的着火特性进行实验测量, 获得 RP-3 航空煤油着火延迟时间实验数据. 实验装置与实验原理参见文献^[17].

2.2 RP-3 航空煤油的燃烧特性实验

在当量比为 0.8~1.5, 初始压力为 0.1, 0.3 和 0.5 MPa, 初始温度为 390, 420 和 450 K 条件下, 采用定容燃烧弹实验装置对 RP-3 航空煤油/空气混合气的燃烧特性进行实验测量, 获得 RP-3 航空煤油层流燃烧速度实验数据.

2.2.1 实验装置

定容燃烧弹实验装置如图1所示^[18], 该实验装置由定容弹本体、点火系统、温度控制系统、纹影系统和数据采集系统等部分组成. 定容弹内径为 180 mm、容积为 5.5 L, 整个弹体用不锈钢加工而成, 如图2所示. 定容弹内采用中心电极点燃混

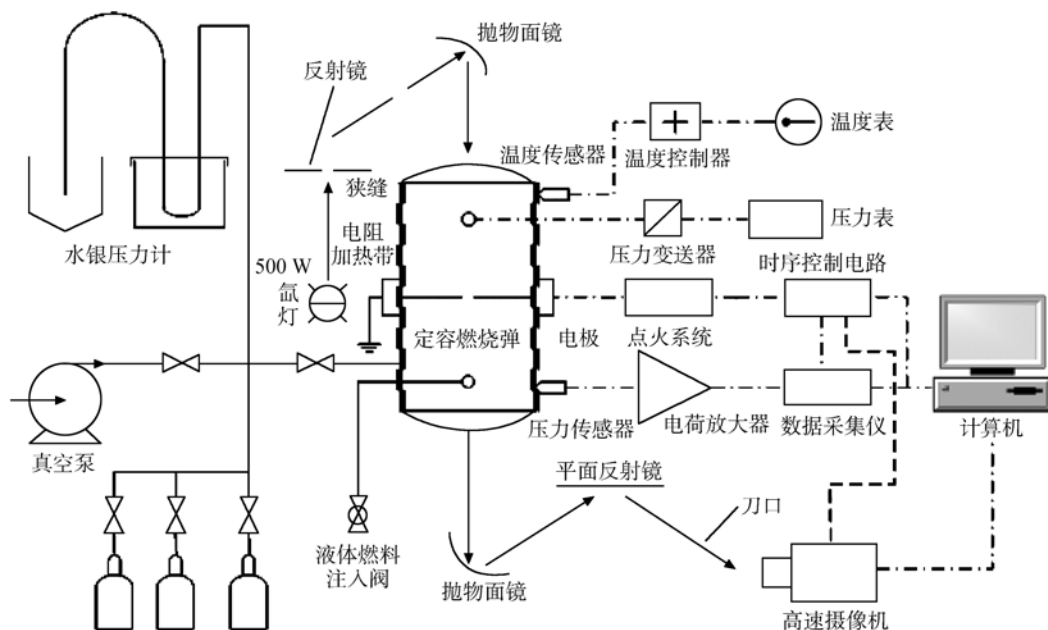


图1 实验系统布置图

Fig.1 Schematic diagram of the experimental facility

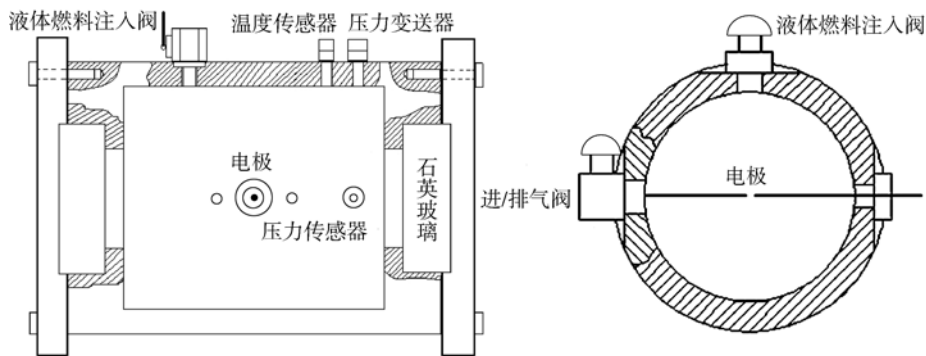


图2 定容燃烧弹示意图

Fig. 2 Schematic diagram of the constant volume combustion chamber

合气,外部装有压力传感器、压力变送器、热电偶、液体燃料注射阀与进排气阀等。定容弹的两端装有石英玻璃,窗口直径为130 mm,能够为纹影系统提供光学通路。实验采用纹影法测量火焰发展特性,通过高速摄像机记录火焰发展图片,该高速摄像机为美国 Phantom 公司生产的 V611,最高拍摄速度达1000000 帧/s。

在实验测量过程中,首先根据 RP-3 航空煤油的平均分子式 $C_{10}H_{22}$,计算出各当量比条件下 RP-3 航空煤油与空气的气态体积分数。然后根据 RP-3 航空煤油的饱和蒸汽压换算出其液态体积。由微量注射器将液态 RP-3 注入定容弹,容弹内压力随 RP-3 航空煤油蒸发而升高。由压力变送器获取容弹内压力变化,并依据分压定律确保 RP-3 航空煤油和空气注入量的准确性。注入完毕后静置 10 min,容弹内形成均匀混合气。在中心电极点火的同时触发高速摄像机,对火焰发展进行拍照。

2.2.2 实验原理

对于球形扩散火焰,拉伸火焰传播速率 S_n 可以定义为火核尺寸对时间的变化率^[19]

$$S_n = \frac{dr}{dt} \quad (1)$$

式中 r 为火焰半径, t 为时间。

火焰拉伸率 α 为火焰面上一个无限小面积的对数值对时间的导数

$$\alpha = \frac{d(\ln A)}{dt} = \frac{dA}{(A \cdot dt)} \quad (2)$$

式中 A 为火焰面积。

对球形扩散火焰而言,采用球形面积公式,由式(2)可得

$$\alpha = 2 \cdot dr / (r \cdot dt) = \frac{2S_n}{r} \quad (3)$$

马克斯坦理论指出,球形扩散火焰的拉伸火焰传播速率与火焰拉伸率可近似呈线性关系^[20]

$$S_l - S_n = L_b \alpha \quad (4)$$

采用式(1)与式(3)可获得 S_n 与 α 的线性关系,当 $\alpha=0$ 时,直线在 S_n 轴上的截距即为无拉伸层流火焰传播速率 S_l ,而直线的斜率的相反数即为马克斯坦长度 L_b 。

根据在火焰面上的质量守恒,有

$$A\rho_u u_l = A\rho_b S_l \quad (5)$$

式中 ρ_u 与 ρ_b 分别代表已燃区与未燃区的混合气密度。

由式(5)可获得层流燃烧速度 u_l

$$u_l = \frac{\rho_b S_l}{\rho_u} \quad (6)$$

2.3 RP-3 航空煤油模拟替代燃料反应机理的验证

2.3.1 着火特性验证

分别采用正癸烷单组分和已构建正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理,通过化学反应动力学软件 CHEMKIN PRO 的 Closed Homogeneous Batch Reactor 模块对 RP-3 航空煤油模拟替代燃料在当量比为 0.5, 1.0 与 1.5,着火温度为 1200~1500 K,压力为 0.1, 0.2 与 0.3 MPa 条件下的着火延迟时间 τ_{ign} 进行了数值计算,并与相应工况下 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验数据^[10]进行了对比分析。如图 3 所示,图中 φ 表示体积分数。采用正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理计算得到的着火延迟时间与相应工况下 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验数据基本吻合,各工况偏差均低于 5%。

采用正癸烷单组分燃烧反应机理计算得到的着火延迟时间在高温时(1500 K)略高于实验值,且随着着火温度的降低,着火延迟时间的计算值明显高于实验值,部分工况最大偏差高达 30%。

另外,由着火延迟时间的对数与温度倒数的

阿累尼乌斯形式曲线斜率可知,采用正癸烷、甲苯、丙基环己烷3组分机理计算得到的燃烧反应活化能与RP-3航空煤油燃烧反应活化能基本一

致,而采用正癸烷单组分机理计算得到的燃烧反应活化能明显高于RP-3航空煤油燃烧反应活化能。

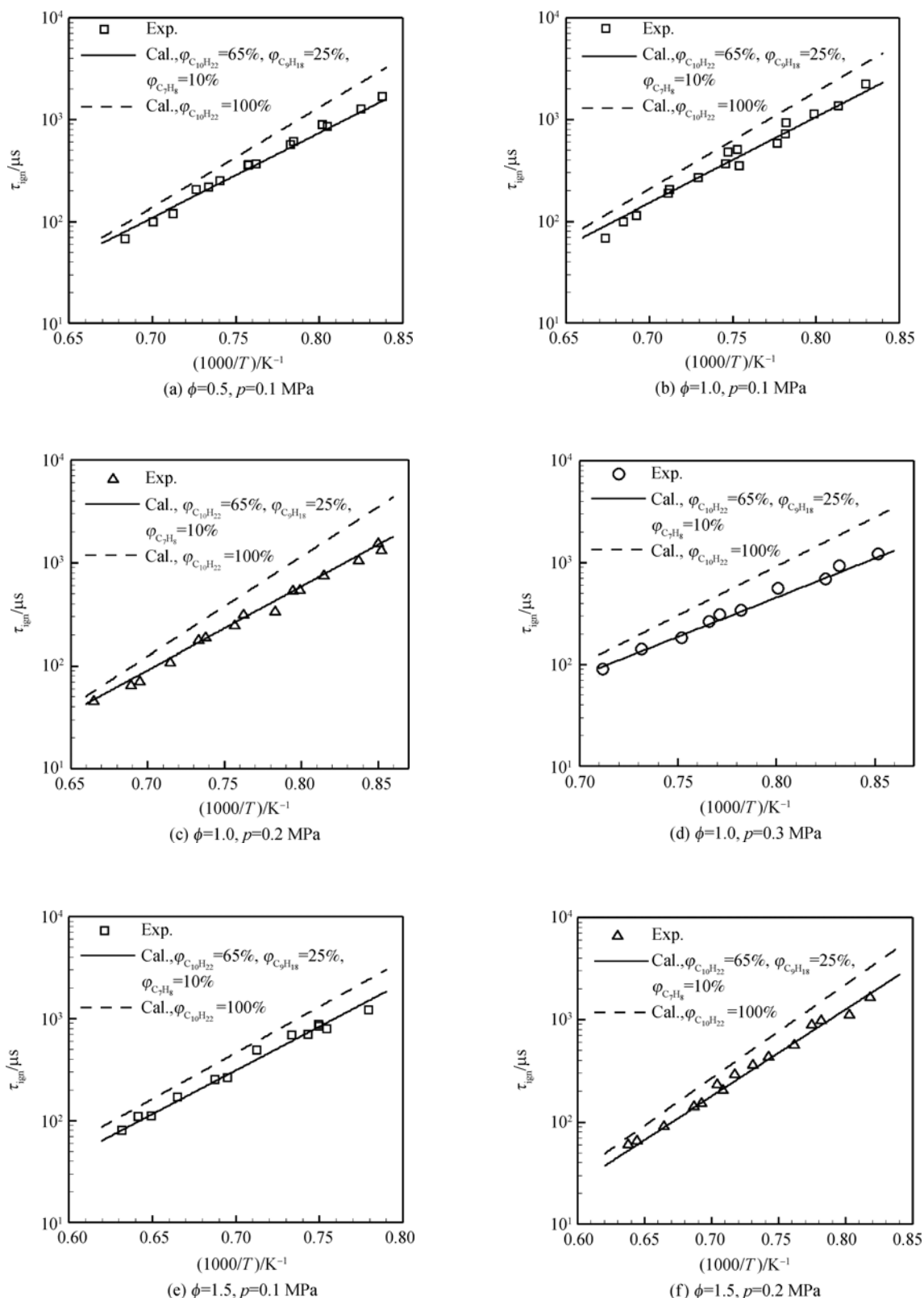


图3 多工况下RP-3航空煤油模拟替代燃料的着火延迟时间

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

2.3.2 燃烧特性验证

分别采用正癸烷单组分和已构建正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理,通过化学反应动力学软件 CHEMKIN PRO 的 Premixed Laminar Flame-Speed Calculation 模块对 RP-3 航空煤油模拟替代燃料在当量比为 0.8~1.5,初始温度 T_0 为 390, 420 和 450 K,压力为 0.1, 0.3 与 0.5 MPa 条件下的层流燃烧速度进行了数值计算,并与相应工况下 RP-3 航空煤油层流燃烧速度的实验数据进行了对比分析.如图 4 和图 5 所示,采用正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理计算得到的层流燃烧速度 u_l 在化学当量比为 0.8~1.5 范围内均略低于实验值,但其趋势与实验值吻合良好,层流燃烧速度最大值出现在

当量比 1.2,对比计算值与实验值发现,各工况计算值与实验值在当量比 1.2 时偏差较大,通过比较得知,各工况最大偏差均在 10%;随着当量比的提高,层流燃烧速度呈现先增大后降低的趋势,且随着初始压力的升高和初始温度的降低,层流燃烧速度逐渐降低.

采用正癸烷单组分燃烧反应机理计算得到的层流燃烧速度与相应工况下 RP-3 航空煤油着火延迟时间的实验数据存在明显误差,在化学当量比为 0.8~1.5 范围内计算值的层流燃烧速度最大值出现在当量比为 1.1 时,而实验值的层流燃烧速度最大值出现在当量比为 1.2 时;当当量比小于 1.2 时,计算值明显高于实验值,而当当量比大于 1.2 时,计算值又明显低于实验值.

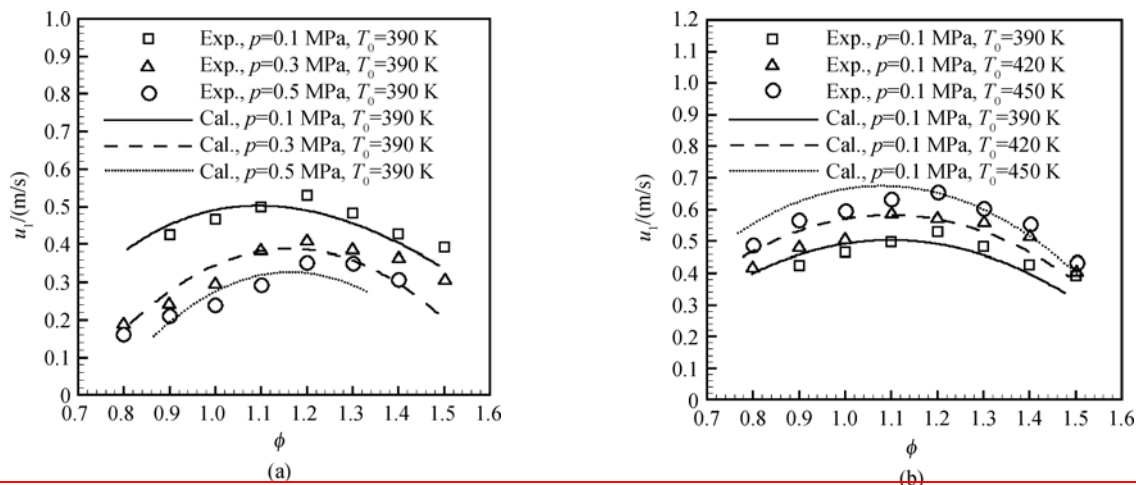


图 4 多工况下 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的层流燃烧速度(正癸烷)

Fig. 4 Laminar burning velocities of simulation surrogate fuel for RP-3 kerosene at various conditions (n -decane)

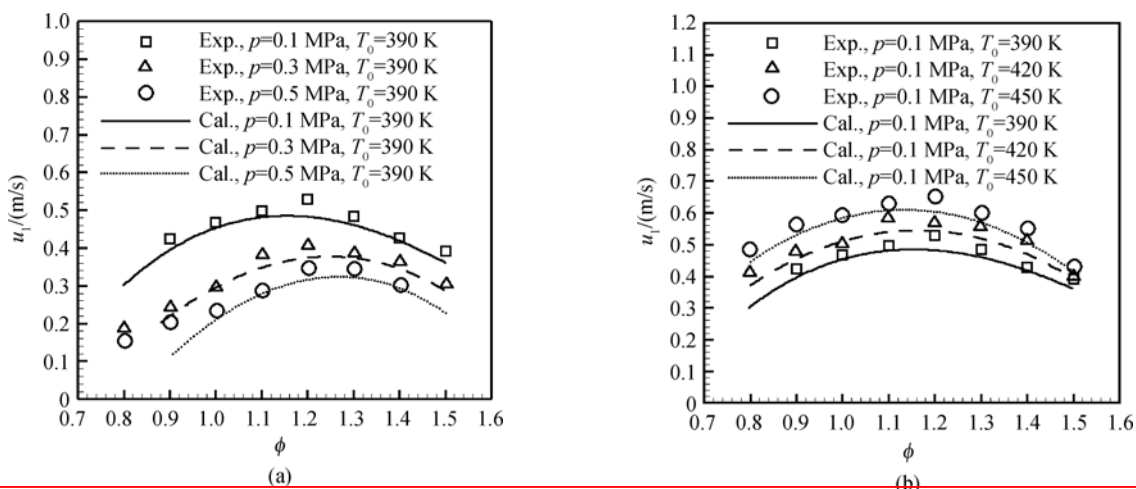


图 5 多工况下 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的层流燃烧速度(正癸烷、甲苯、丙基环己烷)

Fig. 5 Laminar burning velocities of simulation surrogate fuel for RP-3 kerosene at various conditions (n -decane, toluene and propyl cyclohexane)

3 RP-3 航空煤油模拟替代燃料 反应机理的修正

对比分析正癸烷单组分和正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分分别作为 RP-3 航空煤油模拟替代燃料时所构建的燃烧反应机理可知,3 组分机理在预测着火延迟时间和层流燃烧速度上都优于单组分机理.但采用 3 组分机理计算得到的层流燃烧速度也存在着一定误差,主要表现为化学当量比在 0.8~1.5 范围内计算值略低于实验值,因此,为使该机理能够同时较好预测 RP-3 航空煤油的着火与燃烧特性,本文将采用敏感性分析方法对已构建正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理做进一步修正.

3.1 敏感性分析

通过设置 CHEMKIN PRO(rate of production)中 Species Sensitivity and ROP 选项对正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理分别进行着火过程与火焰传播速度的敏感性分析.图 6 给出了当量比为 1,着火温度为 1300 K,压力为 0.2 MPa 时着火延迟温度的温度敏感性分析,其中敏感系数为正代表该基元反应促进着火,而敏感性系数为负代表该基元反应抑制着火,图中 TX, SX, NX 代表多种同分异构体.由图可知,在敏感性系数较大的基元反应中, $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$ 是最重要的链分支反应,具有最大的敏感性系数; $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$ 是重要的链传递反应,生成大量 OH 活性自由基; $2\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$ 生成相对较稳定 C_2H_5 基团,是敏感性系数为负的主要基元反应之一.另外,在敏感性系数较大的基元反应中,除了小分子基元反应之外,部分大分子基元反应(包括 H, OH 自由基撞击碳氢化合物生成活性基团的反应以及大分子碳氢化合物裂解反应)也对着火延迟时间有着重要影响.

图 7 给出了当量比为 1,初始温度为 420 K,压力为 0.1 MPa 时 RP-3 航空煤油模拟替代燃料的质量燃烧流量敏感性分析,其中敏感性系数为正代表促进燃烧,提高燃烧速度,敏感性系数为负代表抑制燃烧,降低燃烧速度.由图可知, $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$ 为促进燃烧的最重要链分支反应; $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$ 和 $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons$

$\text{CO} + \text{H} + \text{M}$ 是促进燃烧的主要基元反应,而 $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$ 和 $\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ 是抑制燃烧的主要基元反应;与影响着火的主要基元反应不同,主导燃烧的主要基元反应均为小分子基元反应.

3.2 燃烧反应机理的修正与验证

修正正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理的原则是在化学当量比 0.8~1.5 范围内找到对火焰传播速度影响较大、且对着火延迟时间影响较小的反应,通过调整动力学参数使对火焰传播速度的预测更接近实验结果.由敏感性分析结果可知,在主导燃烧的主要基元反应中, $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$, $2\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$, $\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$, $\text{CH}_3 + \text{H} (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{CH}_4 (+\text{M})$, $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$, $\text{C}_2\text{H}_5 (+\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} (+\text{M})$ 和 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} (+\text{M}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 (+\text{M})$ 等基元反应对着火延迟时间的影响较大(式中 M 表示第三体),因此,应尽量避免调整这些反应;另外,由于有 OH 参与的基元反应往往对着火延迟时间影响也较大,也应尽量避免调整这些反应,因此,本文主要对反应 $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$, $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$, $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$ 和 $\text{TXCH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ 进行调整,同时考虑对反应 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{H}$, $\text{C}_2\text{H}_3 (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} (+\text{M})$, $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$ 和 $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{CHO} + \text{O}$ 进行微调.从图 7 中可以看出, $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$, $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$ 和 $\text{TXCH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ 的敏感性系数为负,为了增大机理对于火焰传播速度的预测,其动力学参数的调整为减小指前因子;而 $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$ 的敏感性系数为正,为了增大机理对于火焰传播速度的预测,其动力学参数的调整为增大指前因子.本文以火焰传播速度为目标函数,依据基元反应敏感性系数大小,对上述基元反应的指前因子相应增加或减小一定倍数,以增大火焰传播速度的预测值.通过逐一多次调整指前因子数值,使得整个化学计量比范围内,火焰传播速度预测值最为接近实验值.对正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理进行修正的基元反应及动力学参数指前因子如表 1 所示.

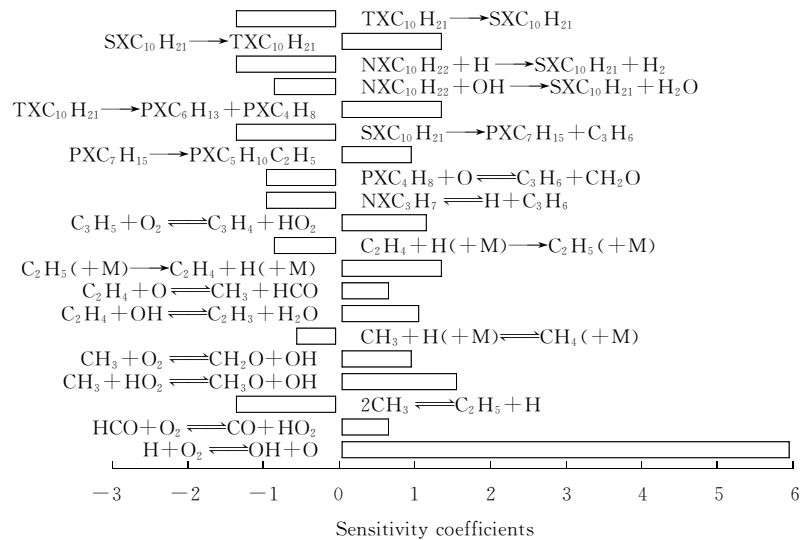


图6 着火延迟时间的温度敏感性分析

Fig. 6 Temperature sensitivity analysis of ignition delay time

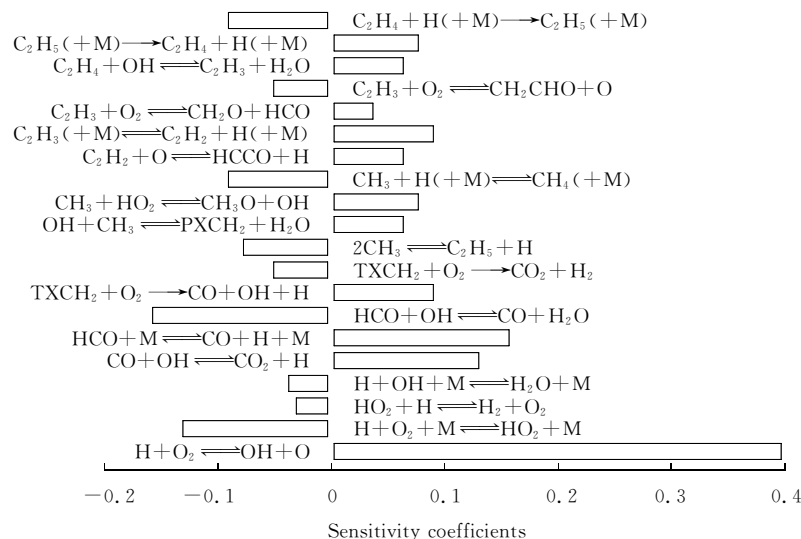


图7 燃烧质量流量的敏感性分析

Fig. 7 Sensitivity analysis of burning mass flow rate

表1 修正的基元反应动力学参数指前因子

Table 1 Modified kinetic parameter pre-exponential factor of elementary reaction

Elementary reaction	Reaction rate constant			
	Previous pre-exponential factor $A/$ ($\text{cm}^3 \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$)	Modified pre-exponential factor $A'/$ ($\text{cm}^3 \cdot (\text{mol} \cdot \text{s})^{-1}$)	Temperature index n	Activation energy $E/$ ($\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$)
$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	3.54×10^{18}	2.13×10^{18}	-0.8	0
$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	4.28×10^{13}	3.68×10^{13}	0	1410.1
$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	7.00×10^{14}	9.52×10^{14}	0	16802.1
$\text{TXCH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	1.20×10^{13}	0.66×10^{13}	0	1481.8
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{H}$	5.06×10^6	7.21×10^6	2.1	1570.3
$\text{C}_2\text{H}_3(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}(+\text{M})$	2.00×10^{14}	3.45×10^{14}	0	39744.3
$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$	1.70×10^{29}	3.11×10^{29}	-5.3	6493.8
$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{CHO} + \text{O}$	3.50×10^{14}	2.57×10^{14}	-0.6	5258.1

使用修正后的机理对正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃料的着火延迟时间和层流燃烧速度进行了重新计算,计算结果与实验结果的对比如图 8 所示.可见,修正后机理对着火延迟时间的计算偏差控制在 5% 以内,而对层流燃烧速度的计算偏差明显减小,将当量比在 0.8~1.5 范围内的最大偏差控制在 5%.显然调整之后的机理能够同时准确地预测本文所研究参数下的 RP-3 航空煤油燃料的着火延迟时间和层流燃烧速度.

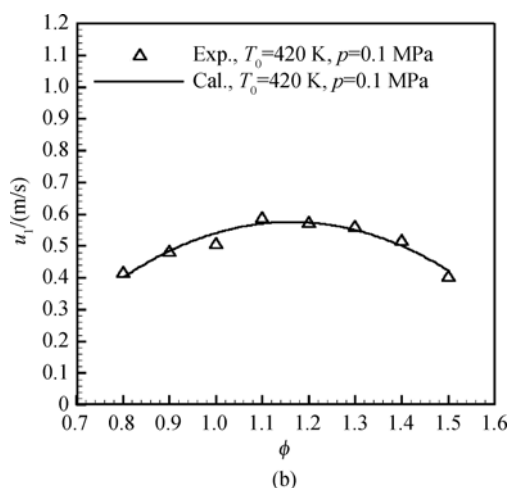
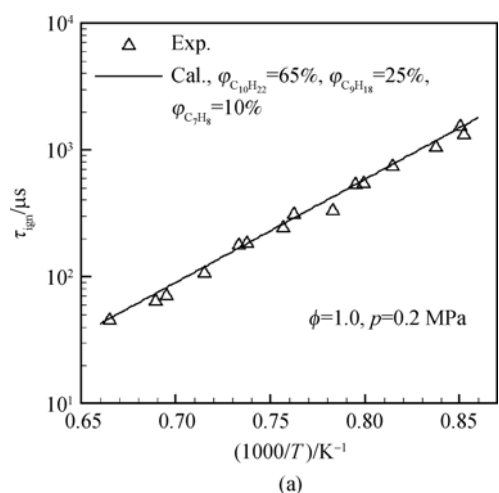


图 8 修正后 3 组分机理计算的着火延迟时间和层流燃烧速度与实验结果比较

Fig. 8 Comparison of calculated and experimental ignition delay time and laminar burning velocity using modified three-component mechanism

本文采用敏感性分析方法对 3 组分燃料机理在化学当量比为 0.8~1.5,初始温度为 420 K,压力为 0.2 MPa 范围内预测的火焰传播速度进行了优化,增大了机理预测层流燃烧速度值.为了保证机理在宽广范围内预测着火延迟时间和层流燃烧速度的准确性,仍需要在多种工况下进行敏感性

分析并采用上述方法调整动力学参数.关于 3 组分机理更为细致的修正与验证将在下一步工作中展开.

4 结 论

本文对 RP-3 航空煤油燃烧反应机理进行研究,提出了 65% 正癸烷,10% 甲苯与 25% 丙基环己烷 3 组分的 RP-3 航空煤油模拟替代燃料,并构建其燃烧反应机理.分别采用正癸烷单组分燃烧反应机理和正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理计算 RP-3 航空煤油在激波管和定容燃烧弹中多工况下的着火延迟时间和层流燃烧速度.通过与实验数据对比分析表明

1) 正癸烷、甲苯与丙基环己烷 3 组分混合替代燃料的燃烧反应机理要优于正癸烷单组分替代燃料,能够基本反映出一定工况下 RP-3 航空煤油的着火及燃烧特性;

2) 采用正癸烷、甲苯、丙基环己烷 3 组分燃烧反应机理计算得到的层流燃烧速度在化学当量比为 0.8~1.5 范围内均略低于实验值.本文采用了敏感性分析方法对已构建 3 组分燃烧反应机理做了进一步修正,修正后的机理能够准确地预测本文所研究参数下的 RP-3 航空煤油的着火延迟时间和层流燃烧速度.

参考文献:

- [1] 刘涛,纪军,卫海桥,等.先进发动机燃烧基础研究的进展和关键科学问题[J].中国科学基金,2012,26(1):325-329.
LIU Tao,JI Jun,WEI Haiqiao,et al. Progress and key scientific issues on advanced engine combustion research[J]. Bulletin of National Natural Science Foundation of China, 2012,26(1):325-329. (in Chinese)
- [2] 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(1):48-92.
- [3] You X,Egolfopoulos F N,Wang H. Detailed and simplified kinetic models of *n*-dodecane oxidation: the role of cracking in aliphatic hydrocarbon combustion[J]. Proceedings of the Combustion Institute,2009,32(1):403-410.
- [4] Honnet S,Seshadri K,Niemann U,et al. A surrogate fuel for kerosene[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009,32(1):485-492.
- [5] 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)

- [6] 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)
- [7] 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.
- [8] 徐佳琪,郭俊江,刘爱科,等. RP-3 替代燃料自点火燃烧机理构建及动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 643-652.
- XU Jiaqi, GUO Junjiang, LIU Aike, et al. Construction of autoignition mechanisms for the combustion of RP-3 surrogate fuel and kinetics simulation[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2015, 31(4): 643-652. (in Chinese)
- [9] 郑东,于维铭,钟北京. RP-3 航空煤油替代燃料及其化学反应动力学模型[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 636-642.
- ZHENG Dong, YU Weiming, ZHONG Beijing. RP-3 aviation kerosene surrogate fuel and the chemical reaction kinetic model[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2015, 31(4): 636-642. (in Chinese)
- [10] 曾文,李海霞,马洪安,等. RP-3 航空煤油着火特性的实验[J]. 航空动力学报, 2014, 29(3): 481-488.
- ZENG Wen, LI Haixia, MA Hongan, et al. Experiment of ignition characteristics of RP-3 kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2014, 29(3): 481-488. (in Chinese)
- [11] 曾文,李海霞,马洪安,等. RP-3 航空煤油模拟替代燃料的化学反应详细机理[J]. 航空动力学报, 2014, 29(12): 2810-2816.
- ZENG Wen, LI Haixia, MA Hongan, et al. Detailed chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2014, 29(12): 2810-2816. (in Chinese)
- [12] 曾文,李海霞,马洪安,等. RP-3 航空煤油模拟替代燃料的化学反应简化机理[J]. 推进技术, 2014, 35(8): 1139-1145.
- ZENG Wen, LI Haixia, MA Hongan, et al. Reduced chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. Journal of Propulsion Technology, 2014, 35(8): 1139-1145. (in Chinese)
- [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. The experiment on ignition characteristic and research on reaction kinetics of RP-3 kerosene[D]. Shenyang: Shenyang Aerospace University, 2013. (in Chinese)
- [16] 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.
- [17] 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)
- [18] Hu E J, Huang Z H, He J J, et al. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane-hydrogen-air flames[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34(11): 4876-4888.
- [19] Lamoureux N, Djebäyli-Chaumeix N, Paillard C E. Laminar flame velocity determination for H₂-air-He-CO₂ mixtures using the spherical bomb method[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2003, 27(4): 385-393.
- [20] Bradley D, Gaskell PH, Gu X J. Burning velocities, Markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames: a computational study[J]. Combustion and Flame, 1996, 104(1/2): 176-198.

(编辑:王碧珺)