

正十七烷与正十八烷对航空煤油理化性能及液滴平均直径的影响

周婷雅, 李江弘, 谭若樵, 甘志文, 杨晓奕
(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 讨论了正十七烷与正十八烷(C_{17} , C_{18})对燃料运动黏度、密度、表面张力理化性能的影响,探究了直链烷烃对 SMD(Sauter mean diameter)的影响。将 Key's 混合规律、Tat 混合规律和多项式拟合应用于密度公式的拟合,并将 Key's 混合规律与对数拟合应用于运动黏度公式的拟合,得出的理化性能拟合公式精度较高;通过测量纯煤油及 C_{17} , C_{18} 混合油雾化的 SMD,实验发现随着直链烷烃的质量分数的增加,混合油的运动黏度增加, SMD 也随之增加,雾化效果与纯航空煤油的相比较差,而 C_{18} 混合油的 SMD 要比 C_{17} 混合油要大,并且利用密度、运动黏度的拟合公式对 SMD 进行预测的偏差小于 0.3%。

关 键 词: 混合油; 正十七烷; 正十八烷; 理化性能; 索太尔平均直径 (SMD)

中图分类号: V312

文献标志码: A

Impact of heptadecane and octadecane on physical properties and SMD of kerosene

ZHOU Ting-ya, LI Jiang-hong, TAN Ruo-qiao,
GAN Zhi-wen, YANG Xiao-yi

(School of Energy and Power Engineering,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: The impact of n -alkanes ($C_{17} \sim C_{18}$) on the physical properties of kerosene, including kinematic viscosity, density and surface tension was discussed, and the effects of n -alkanes ($C_{17} \sim C_{18}$) on SMD (Sauter mean diameter) were investigated. The density fitting equation used Key's blending law, Tat blending law and polynomial fitting. The viscosity fitting equation used Key's blending law and logarithmic fitting. This fitting equation in this investigation have optimal accuracy. The atomization experiment shows that the SMD of blending fuels increases with the mass percentage of n -alkanes, which means that the added n -alkanes have negative effect to the atomization performance. The SMD of C_{18} blending fuels is larger than C_{17} blending fuels'. The fitting equation of physical properties are used to predict SMD of the blending fuels, and its error is less than 0.3%.

Key words: blending fuel; heptadecane; octadecane; physical properties;
Sauter mean diameter (SMD)

航空煤油由几百种碳氢化合物组成,一般来说,燃料的理化性质决定了燃料的性能,然而,航

空煤油的特定性质取决于燃料的化学组成,因此定量研究组成与性能之间的关系是非常必要

收稿日期:2014-09-01

基金项目:国家高技术研究发展计划(2012AA052102)

作者简介:周婷雅(1990—),女,海南昌江人,硕士生,主要从事航空替代燃料的理化、雾化研究。

通讯作者:杨晓奕(1968—),女,山东济南人,博士,教授,主要从事航空替代燃料的制备及基本燃烧性能研究。

的^[1].最先对煤油组分进行研究的是 Cookson 等,他们利用 HPLC(高压液相色谱)与¹³C NMR(碳核磁共振波谱)将煤油组分分为正构烷烃、异构烷烃、环烷烃、单环芳香烃、双环芳香烃与多环芳香烃,并提出煤油组分质量分数与燃料性能之间的多元线性模型,利用此模型得出的密度拟合精度为 $R^2=0.99^{[2-6]}$ (R^2 为拟合优度,当 R^2 接近 1 时,表明拟合效果好).随后 Yang 等利用 GC-FIMS(气相场离子质谱仪)与 PIONA(正构烷烃,异构烷烃,烯烃,环烷烃及芳香烃)将燃料组分划分为 12 种碳氢化合物,并用 GRNN(广义回归神经网络)建立组分与理化性能的关系,得出的密度拟合精度为 $R^2=0.97^{[8]}$.而 Fodor 与 Kohl 提出了一种新的基于 FTIR(傅里叶变换红外光谱)的分析模型,此模型利用不同的光谱强度来代替不同的碳氢化合物,然后分析中间馏程燃料的组成与燃料理化性能关系,得出的密度拟合精度为 $R^2=0.992$,黏度拟合精度为 $R^2=0.957^{[7]}$.这些文献主要都集中于研究燃料组分对燃料性能的综合影响,而随着生物质燃料的出现,产生了各种组分化合物,例如,通过 F-T 合成或对植物油加氢处理得到的正构烷烃与异构烷烃^[9-10],通过生物质热解得到的环烷烃与芳香烃^[11-12],经过发酵过程得到的醇类和对植物油进行酯化过程得到的脂类^[13],这些化合物分别或一起与煤油进行混合后的研究工作量是非常大的,因此,研究这些化合物的加入对燃料性能有怎样的影响是非常必要的.

而燃料性能的变化会导致雾化燃烧性能的改变,陈建文等人探讨了液体自身的物理性质如黏度、表面张力等对雾化性能的影响情况,实验结果表明,在相同的雾化压力下,黏度和表面张力大的液体雾化颗粒粒径相对较大,即雾化效果相对较差^[14].Pandey 等将生物柴油与纯柴油混合后,对混合油进行雾化测试,结果表明混合油黏度较大,导致混合油粒径比纯柴油粒径大,雾化效果变差^[15].因此,本文研究了 $C_{17} \sim C_{18}$ 直链烷烃对纯煤油理化性能及索太尔平均直径(SMD)的影响,并定量研究了各化合物与燃料性能的关系,这对改进燃料性能是非常有意义的.

1 实验部分

1.1 油样化学组成分析

本实验采用的航空煤油为 RP-3,气相色谱仪型号为 Agilent 7890/5975C;GC/MS 分析条件的色谱条件:HP-5MS 色谱柱,载气为高纯氮气,流

量为 1 mL/min,分流比为 80:1,进样口温度为 280℃,接口温度为 280℃,柱温为 50℃,保持 5 min,以 4℃/min 升温至 260℃,保持 5 min.质谱条件:离子源为 EI,离子源温度为 230℃,4 级杆温度为 150℃.质谱图见图 1,RP-3 油样烃族组成分析结果见表 1(表中数值为质量分数).从表 1 中可看出,油样以正构烷烃、芳香烃为主,分布范围在 $C_8 \sim C_{16}$ 之间,而正构烷烃主要集中在 $C_{10} \sim C_{13}$ 之间.

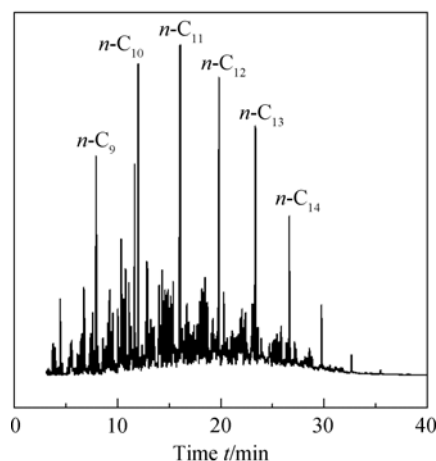


图1 油样总离子流色谱图

Fig. 1 Total ion chromatogram of the fuel

1.2 实验仪器及方法

理化性能测试:用单组分 C_{17} , C_{18} 直链烷烃分别以质量分数为 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10 与航空煤油(RP-3)进行掺混,直链烷烃 $C_{17} \sim C_{18}$ 从北京国药集团化学试剂有限公司购买,纯度为 0.99. 计算所需直链烷烃的量,并用电子天平准确称取,配置溶液,并对混合油进行密度、运动黏度、表面张力的测试,运动黏度测量仪器型号为 SYD-265H(符合 GB/T265 标准);密度测量仪器型号为 SYA-1884A(符合 GB/T1884-2000 标准);表面张力测量仪器型号为 SFT-A1(符合 ASTM D1331 标准);电子天平仪器型号为 BS 124S,精度为 0.0001 g.

雾化性能测试:雾化实验台简图如图 2 所示,包括燃油供给装置、调节装置、喷嘴以及测试装置.实验过程是将纯煤油及加入 C_{17} , C_{18} 的混合油(质量分数为 0.02, 0.06, 0.10)分别在供油压力为 0.5 MPa 的条件下进行喷雾,采用高压高纯氮气对油路供油,运用相位多普勒动态粒子分析仪(PDA)测量油样的 SMD,雾化喷嘴选用的是 DANFOSS 喷嘴,其流量大小为 $1.364 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$

表 1 油样的烃族组成(单位:%)
Table 1 Hydrocarbon composition of the fuel (unit:%)

碳数	饱和烃			芳香烃		总计
	正构烷烃	异构烷烃	环烷烃	烷基苯	双环苯	
C ₈	0.7380	0	0.8899	2.4075	0	4.0354
C ₉	2.5236	1.1721	3.2822	9.2313	0	16.2091
C ₁₀	4.2450	4.2746	2.0716	9.8087	0	20.3998
C ₁₁	3.7298	5.9131	1.1105	3.8585	1.8268	16.4387
C ₁₂	4.9426	3.3885	1.7004	0.2497	0.9778	11.2590
C ₁₃	4.7608	3.2659	1.3306	0.1431	0.0628	9.5632
C ₁₄	1.9898	0.3265	0.1704	0	0	2.4867
C ₁₅	0.6857	1.6306	0	0	0	2.3163
C ₁₆	0.1923	0	0	0	0	0.1923
总计	23.8075	19.9713	10.5556	25.6988	2.8675	82.9006

(0.7 MPa, 820 kg/m³), 生产说明书指明, 在 1 MPa 工况下, Jet-3 油样的雾化锥角为 80°. 精密压力表的量程为 1.6 MPa, 最小分度值为 0.01 MPa. PDA 采用的是丹麦 Dantec 公司的 PDA 系统, 型号为 BSA P60, 其测量的颗粒粒径范围是 0.5~1000 μm, 最大速度为 200 m/s, 精确度 1%.

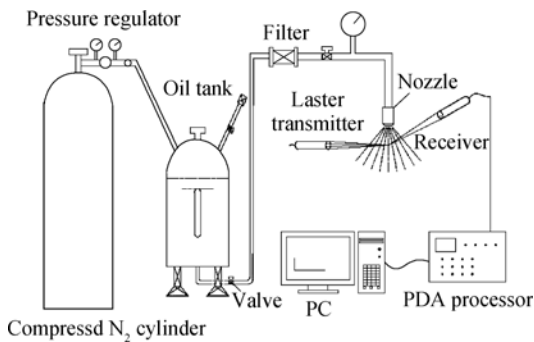


图 2 雾化实验台简图
Fig. 2 Diagram of atomization experimental setup

2 结果与讨论

密度、黏度、表面张力是燃料重要性质, 直接影响燃料雾化性能. 燃料的密度影响着燃料的雾化性能, 进而影响燃烧效率. 黏度影响燃料的燃烧性能, 高黏度会导致雾化性能降低, 从而造成燃烧不完全^[16]. 而表面张力会直接影响燃料的雾化性能, 在相同条件下, 表面张力较小的燃料, 雾化就容易, 表面张力即使有很小的降低, 也能使喷射时雾滴的直径变小很多.

2.1 理化特性

2.1.1 密度拟合

石油产品密度取决于化学组成. 对于正构烷烃, 烃沸点越高, 密度越大. 对于不同的烃类, 当碳原子数相同时, 芳香烃>环烷烃>烷烃^[17];

Kay's^[18-19]混合模型是研究混合物特性最广泛的混合模型, 通过混合物中每个化合物性能的线性相加而得到混合物的性能, 例如密度性能可表示为

$$\rho = \sum_i^m x_i \rho_i \quad (1)$$

式中 x_i 为组分 i 的质量分数、体积分数或摩尔分数, ρ_i 为组分 i 的密度.

Tat 基于 Kay's 模型提出了以下混合模型^[20]

$$\rho = \left[\sum_i^m \frac{x_i}{\rho_i} \right]^{-1} \quad (2)$$

式中 x_i 为组分 i 的质量分数, ρ_i 为组分 i 的密度. Tat 认为此式对于以质量分数来配制混合油的实验精确度更高.

这两个混合规律普遍应用于纯物质的混合, 近年来被用于生物柴油理化性能的预测, 精确度可达 96%, 这两个混合规律最大的缺点在于必须知道混合物中每个化合物的密度, 而对于很多液体来说这是不可行的, 因为大多液体都是由大量的化合物组成, 并且具有不同的性质. 而航空煤油也由不少的化合物组成, 要利用这个公式来预测燃料密度, 工作量也是不小的. 因此, 本文将纯煤

油作为一个整体,提出了以下公式用于预测加入直链烷烃后混合油密度

$$\rho = a_1 x + a_0 \quad (3)$$

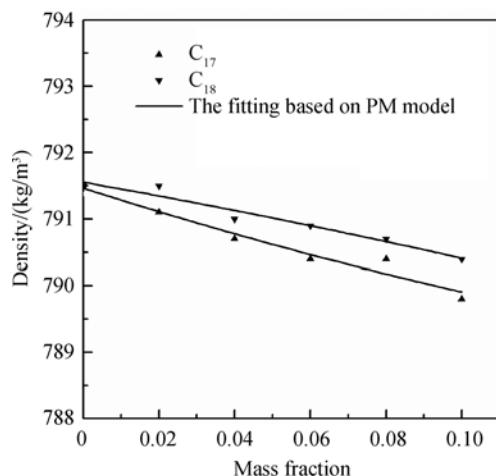
$$a_1 = \rho_i - \rho_1, a_0 = \rho_1 \rho = (a_1 x + a_0)^{-1} \quad (4)$$

$$a_1 = \frac{\rho_i - \rho_1}{\rho_1 \rho_i}, a_0 = \frac{1}{\rho_1}$$

式中 ρ 为混合油密度, ρ_1 为纯煤油的密度, ρ_i 为添加的直链烷烃的密度, x 为添加的直链烷烃的质量分数. 式(3)与式(4)(分别简称 $KM\rho$, TM)中将纯煤油作为一个整体,方便进行预测. 除了以上两个混合规则外还有多项式拟合

$$\rho = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots \quad (5)$$

式中 a_0, a_1, a_2 为多项式系数. 在本文中,次数为 3 阶以上的多项式,精确度并没有提高,且标准差太大,所以本文取次数为 2 阶的多项式(简称 PM)进行拟合. 图 3 为在 20℃ 下加入直链烷烃后混合油的密度与直链烷烃质量分数之间的关系,其中图 3(a)、图 3(b)、图 3(c)分别是基于 $KM\rho$, TM,



(c) Density fitting based on PM model

图 3 密度与质量分数之间的关系

Fig. 3 Relationship of density and mass fraction

PM 模型拟合出的图,从图 3 中可看出混合油密度随着质量分数的增加而减小,且随着直链烷烃碳数的增加而增加. 主要原因是直链烷烃的密度比纯煤油的密度要小,随着直链烷烃碳数的减小,直链烷烃的密度减小,因此混合油密度也逐渐减小.

表 2 为基于 $KM\rho$, TM, PM 三种模型进行拟合的精确度对比,可看出,PM 模型精确度较其他两种模型要低且 SD(标准差)较大,并不适用于预测本文的混合油密度,而 $KM\rho$, TM 精确度较高,但相比较而言,TM 模型的 SD 较小,因此更加适用于预测本文的混合油密度.

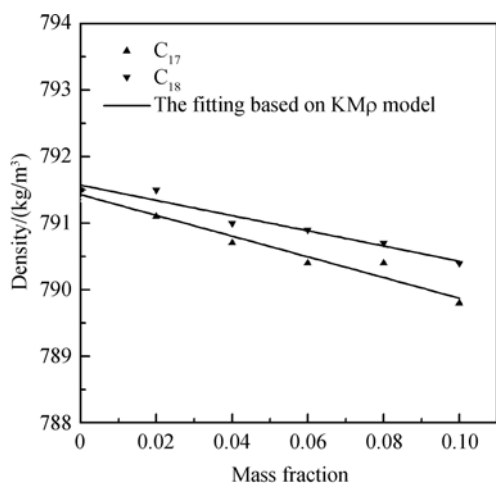
表 2 密度模型的精确度对比

Table 2 Accuracy comparison between density models

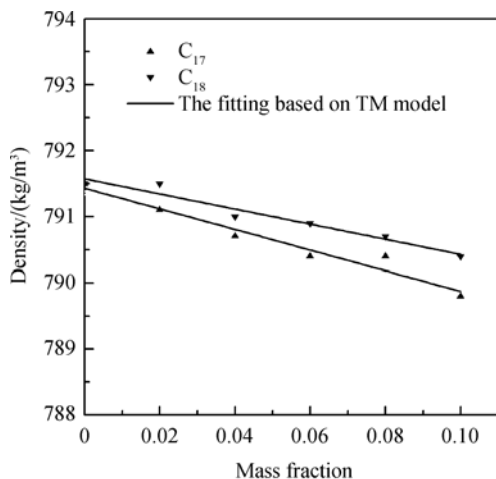
Models		SD			R^2
		a_0	a_1	a_2	
KM ρ	C ₁₇	0.1008	1.6659		0.9452
	C ₁₈	0.0773	1.2777		0.9404
TM	C ₁₇	1.618 $\times$	2.663 $\times$		0.9453
		10 ⁻⁷	10 ⁻⁶		
	C ₁₈	1.242 $\times$	2.042 $\times$		0.9404
		10 ⁻⁷	10 ⁻⁶		
PM	C ₁₇	0.1417	6.6687	64.0123	0.9310
	C ₁₈	0.1105	5.1998	49.9122	0.9225

2.1.2 运动黏度模型

液体燃料的黏度取决于燃料的化学成分和外界的湿度、压力. 在同系物中,烃类的相对分子质



(a) Density fitting based on $KM\rho$ model



(b) Density fitting based on TM model

量愈大,分子间引力也愈大,因而黏度也愈大.且液体燃料黏度随温度的变化不是简单的反比关系,根据 Krisnangkura 等人对生物柴油给出的一系列参数得出的黏度与温度关系表达式为

$$\ln \eta = \frac{A}{T} + B \quad (6)$$

式中 η 为动力黏度, T 为液体的绝对温度,若作 $\ln \eta$ 对 $1/T$ 的图,则所得黏温关系为一直线^[21].此式最大的缺点在于得出的是动力黏度,要想知道运动黏度必须得知道密度.而混合物液体运动黏度与质量分数也存在这样的关系,Cronauer 等人对此得出以下公式(简称 CM)

$$\ln \mu = \sum_i^m x_i \ln \mu_i \quad (7)$$

$$\ln \mu = a_1 x + a_0$$

$$a_1 = \ln \mu_i - \ln \mu_1, a_0 = \ln \mu_1$$

从 Kay's^[22-23] 混合模型可知,混合物运动黏度性能(简称 $KM\mu$)可表示为

$$\mu = \sum_i^m x_i \mu_i \quad (8)$$

$$\mu = a_1 x + a_0$$

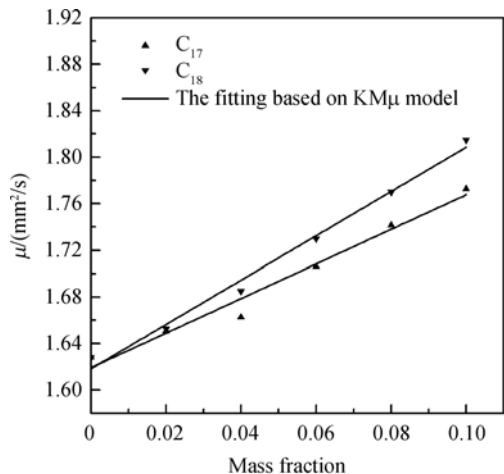
$$a_1 = \mu_i - \mu_1, a_0 = \mu_1$$

式中 x_i 为组分 i 的质量分数、体积分数或摩尔分数, μ_i 为组分 i 的运动黏度, μ_1 为纯煤油的运动黏度.

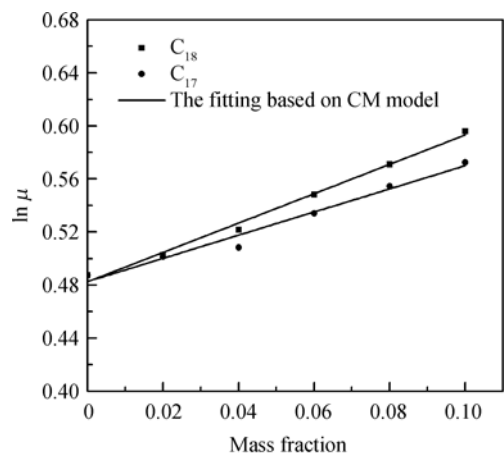
对实验数据(在 20℃ 下所测得,运动黏度误差范围为 $\pm 0.01 \text{ mm}^2/\text{s}$,仪器的控温精度为 $\pm 0.01^\circ\text{C}$)进行分析,图 4 为混合物运动黏度与直链烷烃质量分数之间的关系,图 4(a),图 4(b)是分别基于 $KM\mu$,CM 模型的拟合,从图中可看出,运动黏度随质量分数的增加而增加,随直链烷烃碳数的增加而增加,在质量分数为 0.02 与 0.04 时,随着碳数的增加,运动黏度没有明显的变化,但随着质量分数的增加,可看出随着碳数的增加,混合油的运动黏度逐渐增加.

表 3 为基于 $KM\mu$,CM 两种模型进行模拟的精确度对比,从表中可看出,CM 模型精确度较高,SD 较小,更加适用于预测本文的混合物运动黏度,但由于 C_{17} , C_{18} 在 20℃ 下为晶体状,所以不能通过数值计算的方法将系数求出,需通过对不同质量分数混合油的运动黏度进行数值拟合来确定系数 a_1 .对 CM 模型利用实验数据进行线性回归,所得到的拟合公式为

$$\begin{aligned} \ln \mu_{17} &= 0.8729x + 0.4827 \quad R^2 = 0.973 \\ \ln \mu_{18} &= 1.1071x + 0.4825 \quad R^2 = 0.991 \end{aligned} \quad (9)$$



(a) Kinematic viscosity fitting based on $KM\mu$ model



(b) Kinematic viscosity fitting based on CM model

图 4 运动黏度与质量分数之间的关系

Fig. 4 Relationship of kinematic viscosity and mass fraction

表 3 运动黏度模拟精确度对比

Table 3 Accuracy comparison between kinematic viscosity models

Models		SD		R^2
		a_1	a_2	
$KM\mu$	C_{17}	0.009 19	0.151 85	0.944 42
	C_{18}	0.005 64	0.093 09	0.988 12
CM	C_{17}	0.005 34	0.088 2	0.945 75
	C_{18}	0.002 85	0.047 14	0.991

回归公式精确度较高,计算简便,在使用本文所述的油样情况下,如已知混合油某一质量分数下的运动黏度,则可用来预估其他质量分数下的运动黏度.

2.1.3 表面张力模型

表面张力是液体的结构特性之一.在组成燃

料的各类烃中,以芳香烃的表面张力为最大,环烷烃次之,烷烃最小.据研究,燃料的馏分愈重,相对分子质量愈大,表面张力也愈高.所有液体的表面张力均随温度的升高而降低^[23].

对表面张力的研究中,等张比容模型、对比状态模型与表面热力学模型是主要的方法,前两者是基于大量实验数据的经验模型,后者是基于热力学原理.经验模型可以精确的预测纯物质及理想溶液的表面张力,热力学模型认为介于液相与气相之间的表面层具有它自己的特性,对液体的表面张力有很大的影响,因此模型中对表面层做了大量研究以获得液体的表面张力.除此之外,Winterfeld 等将 Kirkwood-Buff's 模型进行优化,使模型可适用于多组分混合物,并利用实验数据进行回归得到的偏差小于 3%^[23].Jouyban 等研究了二元与三元混合物^[24],提出了以下公式

$$\ln \sigma = \sum_i \xi_i \ln(\sigma_i) + \sum_i \sum_j \xi_i \xi_j \sum_{l=0}^2 \chi_l (\xi_i - \xi_j)^l \quad (10)$$

式中 ξ 为体积分、质量分数或摩尔分数, χ_l 为通过实验数据获得的常数.通过这个模型获得的预测值与实验数据的偏差小于 1.39%,这个模型被称为 Jouyban-Acree 模型,参数 χ_l 通常被认为等于 0,于是方程为

$$\ln \sigma = \sum_i \xi_i \ln(\sigma_i) \quad (11)$$

通过模型的对比,对于碳氢化合物的预测, Jouyban-Acree 模型实用性强且精确度高.

液体的表面张力是温度的直线函数^[22],即 $\sigma_t = \sigma_0(1 - \gamma t)$,式中 σ_t, σ_0 分别为液体在温度 t 和标准状况下的表面张力, γ 为温度系数.而液体的表面张力(20℃)与组成的关系如图 5,在质量分数为 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10 的混合油的表面张力略有上升趋势,因仪器的测量精度原因 ($\pm 1\%$ mN/m),其趋势在误差范围内.根据理论分析,在同温度下的 C_{17}, C_{18} 的表面张力比 RP-3 大,因此在加入 C_{17}, C_{18} 直链烷烃后表面张力应该有所增加.

2.2 SMD 分析

影响燃料雾化的理化性能主要是燃料的密度、运动黏度和表面张力.从理化实验结果可以看到,直链烷烃对纯煤油理化性能影响最大的是燃油的运动黏度,当 C_{17}, C_{18} 掺混质量分数增大到 0.10 的时候,运动黏度分别增大了 11.7%、11.5%.相对而言,混合油的密度及表面张力影响不大.

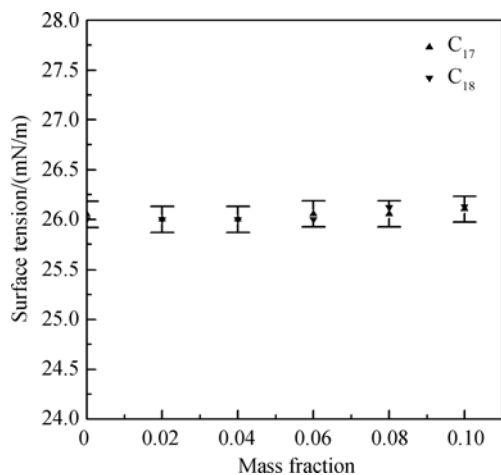


图5 表面张力与质量分数的关系

Fig. 5 Relationship of surface tension and mass fraction

2.2.1 SMD 的分布

利用 PDA 测量必须对整个喷雾场进行网格划分,而燃油喷雾场的截面是轴对称的,故本文只对喷雾中心轴线沿一侧径向进行测量.图 6 是对喷雾场测量网格点的示意图.

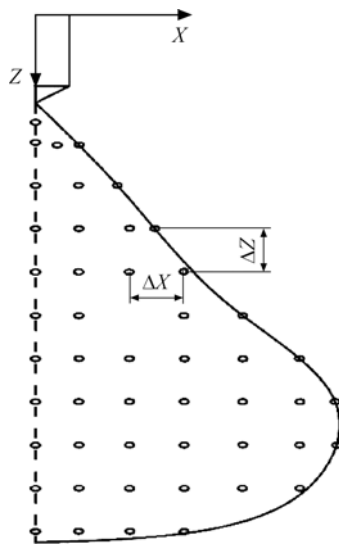


图6 PDA 测量网格点示意图

Fig. 6 Grid point distribution of PDA measurement

在本文中,对所测喷雾场的燃油液滴 SMD 进行线性加权平均,即每一个竖直轴向距离 Z 上的所有测量点,根据每个点的数量密度加权平均,得到线平均 SMD(记为 $D_{Sm,Z}$),以便表征和比较喷雾场的整体特性^[25].

计算方法为

$$D_{Sm,Z} = \left(\sum_i d_{30.xi}^3 \cdot n_{xi} \right) / \sum_i (d_{20.xi}^2 \cdot n_{xi}) \quad (12)$$

式中 $d_{30,xi}^3, d_{20,xi}^2$ 分别为每一个竖直轴向距离 Z 上第 i 个测量点的液滴体积平均直径与面积平均直径, n_{xi} 为数量密度。

图7、图8分别是在供油压力0.5 MPa下,加入不同质量分数(0, 0.02, 0.06, 0.10)的 C_{17} , C_{18} 混合油沿轴向距离的 SMD 分布。从图中看出,随着轴向距离的增大,燃油的 SMD 逐渐减小。在喷嘴附近的燃油液滴的 SMD 较大,且质量分数越大,出口粒径越大。随着轴向距离的增大,油样的 SMD 减小。当轴向距离 Z 超过 21 mm 时,燃油的粒径大小趋于稳定。一方面是因为燃油离开喷嘴,进入空气的初期影响液滴破碎的主要因素是燃油的运动黏度和表面张力等性质,受空气的影响较

小,因此,燃油的运动黏度和表面张力越大,其初始粒径也越大。另一方面,随着喷射的继续,燃油与周围空气的卷吸作用增大,与流场相互剪切,也使得燃油的 SMD 减小。在质量分数为 0.02, 0.06 时, C_{17} , C_{18} 混合油的 SMD 相差不大,而当质量分数增加到 0.10 时, C_{18} 混合油的 SMD 要比 C_{17} 混合油的 SMD 相对要大,主要原因为 C_{18} 混合油的运动黏度比 C_{17} 混合油的运动黏度要大。

图9、图10为供油压力为0.5 MPa时,在轴向距离 $Z=2$ mm 处, C_{17} , C_{18} 混合油的 SMD 沿一侧径向的分布。从图中可以看出,轴向距离一定时,燃油的 SMD 均随着径向距离的增大而增大。这是因为实验中采用的是空心离心喷嘴,燃油液滴离开喷嘴后,粒径较大的液滴,质量较大,动量也大,分布得也就越远。反之粒径小的液滴不易到

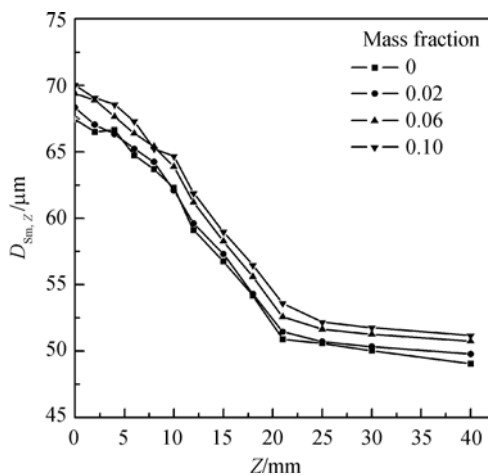


图7 C_{17} 混合燃油轴向 SMD 分布

Fig. 7 SMD axial distribution of the blending fuel with C_{17}

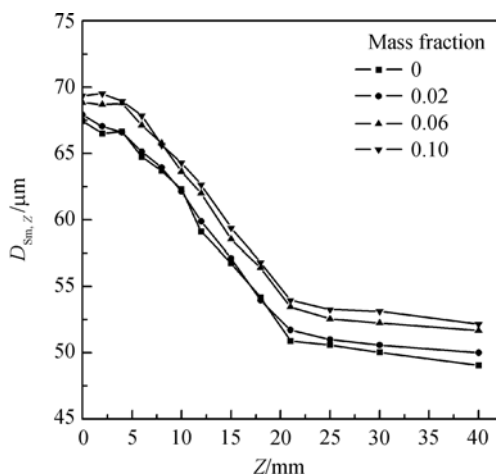


图8 C_{18} 混合燃油轴向 SMD 分布

Fig. 8 SMD axial distribution of the blending fuel with C_{18}

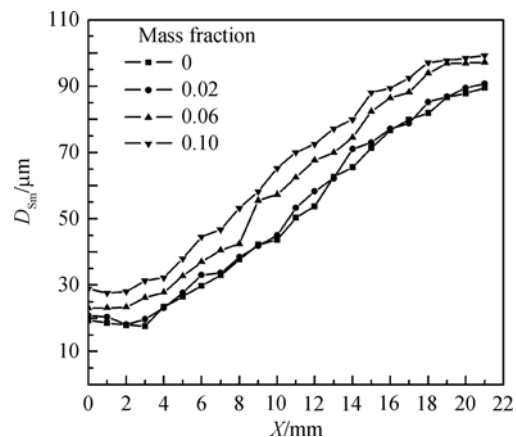


图9 C_{17} 混合燃油径向 SMD 分布

Fig. 9 SMD radial distribution of the blending fuel with C_{17}

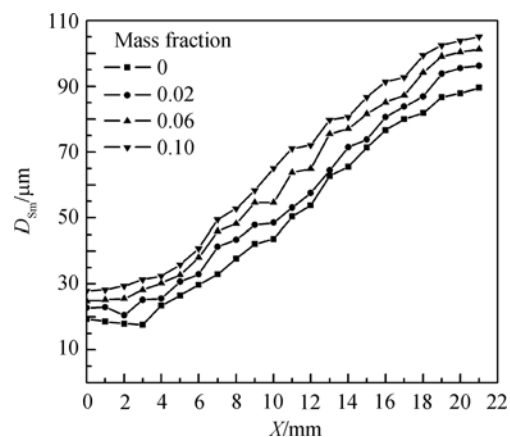


图10 C_{18} 混合燃油径向 SMD 分布

Fig. 10 SMD radial distribution of the blending fuel with C_{18}

达偏离轴线远的位置. 图中还可看出, 随着质量分数的增大, 其 SMD 的大小也相应增大. 这是因为随着质量分数的增加, 其运动黏度增大, 抵抗液滴破碎的能力越大, 雾化后得到的粒径也就越大. C_{17} , C_{18} 混合油的径向分布与轴向分布近似, 而相比之下, C_{18} 混合油的 SMD 要比 C_{17} 混合油的 SMD 相对要大 3% 至 8%, 其原因可能是由于运动黏度变化对燃料 SMD 的影响较密度变化对燃料 SMD 的影响要大.

由实验结果及以上分析可得出, 随着直链烷烃的质量分数的增加, 混合油的运动黏度增加, SMD 也随之增加, 雾化效果与纯航煤的相比较差, 而总的来说, C_{18} 混合油的 SMD 要比 C_{17} 混合油的 SMD 相对要大 3% 至 8%.

2.2.2 SMD 的对比分析

经过大量的实验研究及理论分析, 离心喷嘴液滴平均直径 (SMD, 记为 D_{sm}) 可用如下经验关系式表达^[26]

$$D_{sm} = C \cdot \sigma^{0.25} \nu^{0.25} \dot{m}^{0.25} \Delta p^{0.5} \rho^{-0.25} \quad (13)$$

式中 C 为常数, σ 为表面张力, ν 为运动黏度, $\dot{m}$ 为流量, Δp 为压差, ρ 为燃油密度. 而根据本文的实验结果可得 $C=1.107$.

由于表面张力基本不变, 可取一定值, 流量及压力不变, 故 SMD 与 ν/ρ 成正比, 当加入 C_{17} , C_{18} 后, 运动黏度增加, 密度减小, 因此, 混合油的 SMD 比纯煤油的要大. 图 11、图 12 分别为将 C_{17} , C_{18} 混合油运动黏度、密度的实验值及预测值代入公式后所得 SMD 的拟合值与雾化实验所测得的实验值的对比. 从图中可看出代入实验值与

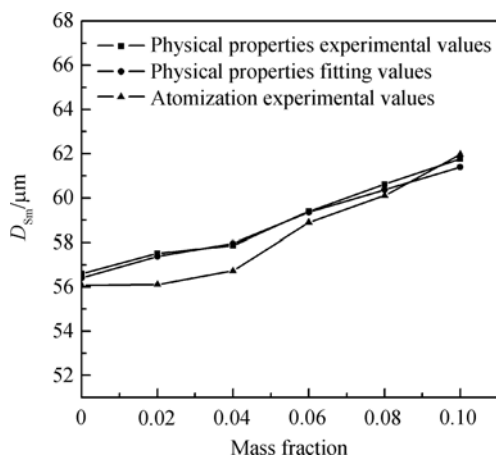


图 11 C_{17} 混合燃油 SMD 的对比分析

Fig. 11 SMD comparative of the blending fuel with C_{17}

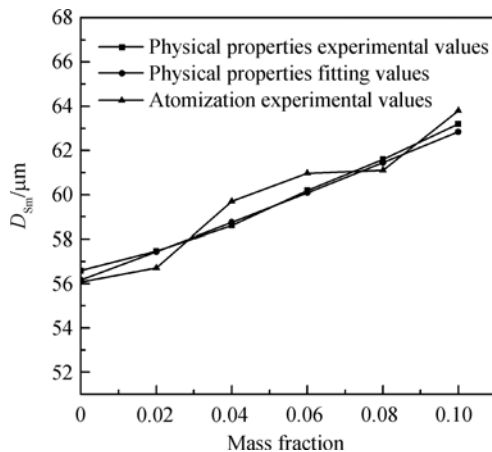


图 12 C_{18} 混合燃油 SMD 的对比分析

Fig. 12 SMD comparative of the blending fuel with C_{18}

预测值后所得到的 SMD 值的偏差很小 (均小于 0.3%), 且拟合值与实验值的偏差不大于 3%. 这说明采用 $C=1.107$ 的 SMD 拟合公式适用于添加了 C_{17} , C_{18} 混合油的 SMD 预测, 且利用运动黏度、密度的拟合公式对 SMD 进行预测也是可行的.

3 结 论

对于加入了直链烷烃 C_{17} , C_{18} 后的混合油密度, 随着质量分数的增加而减小, 而随着直链烷烃碳数的增加而增加, 且可根据公式 $\rho = (a_1 x + a_0)^{-1}$ 对添加了质量分数在 10% 内的直链烷烃 (C_{17} , C_{18}) 的煤油密度进行预测, 并且预测精度较高.

对于混合油运动黏度, 随着质量分数和直链烷烃碳数的增加而增加, 可利用公式 $\ln \mu = a_1 x + a_0$ 来计算不同质量分数下的运动黏度 (需通过测得任意两个质量分数下的运动黏度来得到 a_1 , a_0 值), 精度较高.

而对于混合油的表面张力, 可能由于加入的直链烷烃质量分数较小, 并没有太大的变化.

加入直链烷烃的混合油运动黏度变化较大, 密度的变化相对较小, 而表面张力并没有太大的变化, 所以混合油中对 SMD 的主要影响是运动黏度及密度, 且 SMD 与 ν/ρ 值成正比, 并可通过运动黏度、密度的拟合公式对混合燃料的 SMD 进行预测, SMD 的偏差小于 0.3%.

本文仅研究了直链烷烃 C_{17} , C_{18} 对纯煤油的理化性能与 SMD 的影响, 为以后研究多组分对纯煤油的理化性能及 SMD 的影响奠定了基础.

致谢:

This project was supported by Beijing Municipal Sci-

ence & Technology Commission (D131100003113003), the National High Technology Research and Development Program of China (863 Program, No. 2012AA052102), Program of International Science and Technology Cooperation of China (2013DFA61590).

参考文献:

- [1] Liu G, Wang L, Qu H, et al. Artificial neural network approaches on composition-property relationships of jet fuels based on GC-MS[J]. *Fuel*, 2007, 86(16): 2551-2559.
- [2] Cookson D J, Lloyd C P, Smith B E. Investigation of the chemical basis of kerosene (jet fuel) specification properties[J]. *Energy & Fuels*, 1987, 1(5): 438-447.
- [3] Cookson D J, Smith B E. Calculation of jet and diesel fuel properties using carbon-13 NMR spectroscopy[J]. *Energy & Fuels*, 1990, 4(2): 152-156.
- [4] Cookson D J, Lloyd C P, Smith B E. Investigation of the chemical basis of diesel fuel properties[J]. *Energy & Fuels*, 1988, 2(6): 854-860.
- [5] Cookson D J, Latten J L, Shaw I M, et al. Property-composition relationships for diesel and kerosene fuels[J]. *Fuel*, 1985, 64(4): 509-519.
- [6] Cookson D J, Smith B E, Shaw I M. Determination of hydrocarbon compound class abundances in kerosene and diesel fuels: chromatographic and nuclear magnetic resonance methods[J]. *Fuel*, 1987, 66(6): 758-765.
- [7] Fodor G E, Kohl K B. Analysis of middle distillate fuels by midband infrared spectroscopy[J]. *Energy & Fuels*, 1993, 7(5): 598-601.
- [8] Yang H, Ring Z, Briker Y, et al. Neural network prediction of cetane number and density of diesel fuel from its chemical composition determined by LC and GC-MS[J]. *Fuel*, 2002, 81(1): 65-74.
- [9] Schulz H. Short history and present trends of Fischer-Tropsch synthesis[J]. *Applied Catalysis A: General*, 1999, 186(1): 3-12.
- [10] Murata K, Liu Y, Inaba M, et al. Production of synthetic diesel by hydrotreatment of jatropha oils using Pt-Re/H-ZSM-5 catalyst[J]. *Energy & Fuels*, 2010, 24(4): 2404-2409.
- [11] Weiss W, Dulot H, Quignard A, et al. Direct coal to liquids (DCL): high quality jet fuels[C]// *Proceedings of 27th Annual International Pittsburgh Coal Conference 2010*. Istanbul, Turkey; Curran Associate, Inc., 2010: 1060-1064.
- [12] Torren R, Geoffrey A, William C, et al. Aromatic production from catalytic fast pyrolysis of biomass-derived feedstocks[J]. *Topics in Catalysis*, 2009, 52(3): 241-252.
- [13] Demirbas A. Biofuels securing the planet's future energy needs[J]. *Energy Conversion and Management*, 2009, 50(9): 2239-2249.
- [14] 陈建文, 张志伟, 王长周, 等. 液体黏度和表面张力对雾化颗粒粒径的影响[J]. *东北大学学报: 自然科学版*, 2010, 31(7): 1023-1025.
- CHEN Jianwen, ZHANG Zhiwei, WANG Changzhou, et al. Effects of fluid viscosity and surface tension on the size of atomized droplets[J]. *Journal of Northeastern University: Natural Science*, 2010, 31(7): 1023-1025. (in Chinese)
- [15] Pandey R K, Rehman A, Sarviya R M. Impact of alternative fuel properties on fuel spray behavior and atomization[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2012, 16(3): 1762-1778.
- [16] Saldana D A, Starck L, Mougou P, et al. Prediction of density and viscosity of biofuel compounds using machine learning methods[J]. *Energy & Fuels*, 2012, 26(4): 2416-2426.
- [17] 王宝仁, 孙乃有. 石油产品分析[M]. 北京: 化学工业出版社, 2004: 12-18.
- [18] Kay W B. Density of hydrocarbon gases and vapors at high temperature and pressure[J]. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1936, 28(9): 1014-1019.
- [19] Benmekki H, Mansoori G A. Pseudoionization technique and heavy fraction characterization with equation of state models[J]. *Advances in Thermodynamics*, 1989, 1: 57-77.
- [20] Tat M E, Van Gerpen J H. The specific gravity of biodiesel and its blends with diesel fuel[J]. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 2000, 77(2): 115-119.
- [21] Krisnangkura K, Yimsuwan T. An empirical approach in predicting biodiesel viscosity at various temperatures[J]. *Fuel*, 2006, 85(1): 107-113.
- [22] 许世海, 熊云, 刘晓. 液体燃料的性质及应用[M]. 北京: 中国石化出版社, 2010: 22-23.
- [23] Winterfeld P H, Scriven L E, Davis H T. An approximate theory of interfacial tensions of multicomponent systems: applications to binary liquid-vapor tensions[J]. *AIChE Journal*, 1978, 24(6): 1010-1014.
- [24] Jouyban A, Acree W E Jr. Comments on "solubility of ethyl maltol in aqueous ethanol mixtures" (Liu, B.-S.; Liu, R.-J.; Hu, Y.-Q.; Hu, Q.-F) *J. Chem. Eng. Data* 2008, 53, 2712-2714 [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2009, 54(3): 1168-1170.
- [25] Lefebvre A H. Atomization and sprays[M]. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1989.
- [26] Lefebvre A H. Gas turbine combustion[M]. Boca Raton, Florida: CRC Press, 1998.

(编辑: 秦理曼)