

RP-3 航空煤油替代燃料简化机理及其验证

颜应文, 戴超, 李井华

(南京航空航天大学 能源与动力学院 江苏省航空动力系统重点实验室, 南京 210016)

摘 要: 选定正癸烷作为 RP-3 航空煤油单组分替代燃料, 建立了一种包含 36 组分 62 步基元反应的简化机理. 并设计了本生灯预混预蒸发试验系统对 RP-3 航空煤油的火焰进行了试验研究. 同时, 采用两种已被验证的煤油简化机理(分别为 23 步和 38 步)及 62 步简化机理对本生灯预混预蒸发燃烧火焰进行数值模拟, 并将计算结果和试验数据相对比. 结果表明: 在轴向, 温度和 CO_2 体积分数呈先上升后下降的趋势, 并且温度在距喷嘴轴向距离为 0.020 m 时达到最大值; 而 O_2 体积分数呈现下降后上升的趋势, 并且距喷嘴轴向距离为 0.025 m 时达到最小值. 与 38 步简化机理和 23 步简化机理所获得的数据相比, 在各工况下, 62 步简化机理计算所获得的火焰温度分布和 O_2 体积分数分布与试验数据能很好地吻合; 同时, 62 步简化机理计算的 CO_2 体积分数分布与试验数据变化规律基本一致, 而 23 步和 38 步机理的计算结果只能保持和试验数据变化趋势的一致性. 因此, 选定的正癸烷可作为 RP-3 航空煤油的单组分替代燃料, 并且所获得的 62 步简化机理能在较大范围内反映 RP-3 航空煤油的燃烧性能.

关 键 词: 航空煤油; 正癸烷; 简化机理; 火焰温度; 燃气组分

中图分类号: V231.2; TK401

文献标志码: A

Reduced mechanism of surrogate fuel for RP-3 aviation kerosene and verification

YAN Ying-wen, DAI Chao, LI Jing-hua

(Jiangsu Province Key Laboratory of Aerospace Power System,
College of Energy and Power Engineering,

Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: *N*-decane was chosen as the surrogate fuel of RP-3 aviation kerosene, and a reduced mechanism (36 species and 62 steps) was established. A Bunsen burner with premixed pre-evaporation combustion was designed to study the combustion flame of RP-3 aviation kerosene. And two verified kerosene simplified mechanisms (23 steps and 38 steps respectively) and the 62 steps mechanism were used by numerical simulation. The numerical results were compared with the experimental data. Results show that, the distributions of temperature and volume fraction of CO_2 first increase and then decrease in the axial direction, and the temperature reaches the maximum at axial distance from nozzle of 0.020 m. While the volume fraction of O_2 first decreases and then increases, the volume fraction reaches the minimum at axial distance from nozzle of 0.025 m. Compared with the 38 steps and 23 steps reduced mechanisms, the distributions of temperature and volume fraction of O_2 are in good agreement with the experiment data when 62 steps reduced mechanism is applied. At the same time, the numerical results with 62 steps reduced mechanism can also well simulate the volume fraction of CO_2 , but the numerical results of 23 steps and 38 steps can only predict the change trend of the experimental results. Therefore, *n*-decane can be used as the

收稿日期:2015-03-24

基金项目:国家自然科学基金(51676097); 航空科学基金(2013ZB52017)

作者简介:颜应文(1978—),男,湖南衡山人,副教授,博士,主要从事航空发动机燃烧技术研究. E-mail:yanyw@nuaa.edu.cn

surrogate fuel of RP-3 aviation kerosene and the 62 steps reduced mechanism can accurately predict the combustion characteristics of RP-3 aviation kerosene.

Key words: aviation kerosene; *n*-decane; reduced mechanism; flame temperature; gas component

航空发动机燃烧室中航空煤油液雾燃烧反应十分繁杂,同时受控于湍流和化学动力学,为了加快对发动机燃烧室的研制并降低其研究经费,需要深入了解燃烧室内湍流燃烧过程,以便对其进行优化设计.因此,开展对燃烧室内湍流液雾燃烧过程的数值模拟非常有必要,所以需要精确模拟航空煤油燃烧中的化学动力学过程.然而,碳氢燃料与氧的化学反应过程非常繁杂,其具体反应过程包含着几百个组分和上千个基元反应^[1],对于这样复杂反应系统,其详细化学动力学模型一般都过于复杂,在目前计算机技术发展水平下很难直接应用于实际航空发动机燃烧室内三维流场数值预估;目前一般把航空煤油用单组分 $C_{12}H_{23}$ 作为其替代燃料,所采用的化学反应机理一般为单步化学反应机理或者简单多步化学简化机理^[2],虽然可以对航空发动机燃烧室的温度场以及进出口温升等进行一定程度的预测,但无法对燃料的点火过程以及燃烧过程中各种重要中间生成物的产生和消耗进行准确的预估,特别是判断火焰位置的 OH 以及最高燃烧温度的准确预估,严重制约了发动机燃烧室的设计和优化进程.为了有效地开展航空发动机燃烧室数值模拟,提高航空煤油燃烧计算结果精度,需要对航空煤油的多步化学反应机理进行研究,探索其化学反应动力学模型^[3]供航空发动机燃烧室数值仿真使用是十分有必要的.

近年来,很多国外学者对航空煤油替代燃料进行了大量研究,并相继提出了各种单组分或多组分的航空煤油替代燃料以及其详细化学反应机理,并进行大量的航空煤油燃烧试验来验证其替代燃料化学反应机理的正确性,最终得到可靠的化学反应机理. Patterson 等^[4]将 89% 的正癸烷和 11% 的甲苯作为 Jet A-1 的数值模拟替代燃料,应用一种半详细的多步化学反应机理,包括 84 种组分 440 个反应,分别在喷射搅拌反应器(JSR)和预混平板火焰(PFF)中计算了其燃烧反应过程,结果表明大部分组分的体积分数变化趋势与试验数据保持了很高的一致性. Riesmeier 等^[5]则以 20% 正癸烷与 80% 三甲基苯作为 Jet A-1 的数值模拟替代燃料,采用详细的化学反应机理(67 种组分 600 个反应),对其在燃气轮机预

混燃烧室内燃烧进行研究.上述化学反应机理都很庞大和复杂,无法应用于实际航空发动机燃烧室燃烧的数值预估,因此选取合适的替代燃料并对其详细化学反应机理进行相应简化,得到其简化机理,并进行相应的试验验证是十分有必要的.

本文首先对航空煤油数值模拟替代燃料进行总结与分析,选取正癸烷作为航空煤油单组分替代燃料,并参考 Bikas 等^[6]提出的正癸烷详细化学反应机理,剔除低温下的反应和苯的反应机理,同时参考王慧汝等^[7]得到的详细机理,采用敏感性分析^[8]和反应流分析方法,建立了一套 RP-3 航空煤油替代燃料(正癸烷)详细化学反应机理简化的方法,并得到正癸烷的化学反应简化机理^[9],为了验证该简化机理的正确性,设计了以 RP-3 航空煤油为燃料的本生灯预混预蒸发燃烧试验装置,对其燃烧火焰进行试验研究,同时建立本生灯预混燃烧数学模型,分别采用 3 种不同的简化机理对燃烧过程进行数值预测,并将数值模拟结果和试验数据进行对比,验证简化机理的正确性.

1 航空煤油数值模拟替代燃料的选择及简化机理

近年来,国内外学者对于航空煤油替代燃料已进行了大量研究,并提出了很多航空煤油的单组分或多组分替代燃料模型^[10-18].文献[7]把正癸烷作为航空煤油的单组分替代燃料,其余参考文献将正癸烷作为替代燃料的一个非常重要的组分,并且正癸烷在其中所占的比重都很大;同时正癸烷无论是物理特性还是化学特性都与航空煤油非常类似;另外从数值计算成本考虑,替代燃料其组分不能太多;同时为了模拟其燃烧温度、组分等,主要考虑其化学替代.基于上述因素的综合考虑,本文选取正癸烷作为航空煤油的单组分替代燃料.

随后,以燃烧温度和反应物质组分作为简化依据,从 Bikas 等^[6]经过验证的正癸烷详细化学反应机理出发,应用敏感性分析和反应流分析进行机理简化,具体简化过程如文献[9]所示.最终,本文将 344 步详细化学反应机理简化为 36 组分 62 步简化化学反应机理,从而建立了正癸烷燃烧的简化化学反应机理,其基元反应步详见表 1. 表

表 1 正癸烷简化化学反应机理
Table 1 Reduced mechanism of *n*-decane

基元反应序号	反应步	基元反应序号	反应步
1	$\text{N-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{OH} \longrightarrow \text{T-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2\text{O}$	32	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO} + \text{OH}$
2	$\text{N-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{OH} \longrightarrow \text{S-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2\text{O}$	33	$\text{HCCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}_2$
3	$\text{N-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{H} \longrightarrow \text{T-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2$	34	$\text{HCCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{P-CH}_2 + \text{CO}$
4	$\text{N-C}_{10}\text{H}_{22} + \text{H} \longrightarrow \text{S-C}_{10}\text{H}_{21} + \text{H}_2$	35	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
5	$\text{T-C}_{10}\text{H}_{21} \longrightarrow \text{P-C}_6\text{H}_{13} + \text{P-C}_4\text{H}_8$	36	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$
6	$\text{S-C}_{10}\text{H}_{21} \longrightarrow \text{P-C}_7\text{H}_{15} + \text{C}_3\text{H}_6$	37	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$
7	$\text{P-C}_7\text{H}_{15} \longrightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_3\text{H}_6$	38	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \longrightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$
8	$\text{P-C}_7\text{H}_{15} \longrightarrow \text{P-C}_4\text{H}_8 + \text{N-C}_3\text{H}_7$	39	$\text{CH}_3 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$
9	$\text{P-C}_7\text{H}_{15} \longrightarrow \text{P-C}_5\text{H}_{10} + \text{C}_2\text{H}_5$	40	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$
10	$\text{P-C}_6\text{H}_{13} \longrightarrow \text{P-C}_4\text{H}_9 + \text{C}_2\text{H}_4$	41	$\text{OH} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{P-CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$
11	$\text{P-C}_5\text{H}_{10} \longrightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_3\text{H}_5$	42	$2\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$
12	$\text{P-C}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{C}_2\text{H}_4$	43	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \longrightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$
13	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{P-C}_4\text{H}_8$	44	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \longrightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$
14	$\text{C}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightleftharpoons \text{N-C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	45	$\text{P-CH}_2 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{CH}_2\text{O}$
15	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_8$	46	$\text{P-CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_6$
16	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$	47	$2\text{CH}_3 + \text{M} \longrightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{M}$
17	$\text{N-C}_3\text{H}_7 \rightleftharpoons \text{H} + \text{C}_3\text{H}_6$	48	$\text{P-CH}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{T-CH}_2 + \text{M}$
18	$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	49	$\text{T-CH}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$
19	$\text{C}_3\text{H}_5 + \text{H} \longrightarrow \text{C}_3\text{H}_4 + \text{H}_2$	50	$\text{T-CH}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO} + \text{OH} + \text{H}$
20	$\text{C}_3\text{H}_4 + \text{OH} \longrightarrow \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	51	$\text{T-CH}_2 + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$
21	$\text{C}_3\text{H}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CO} + \text{H}$	52	$\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
22	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	53	$\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$
23	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	54	$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$
24	$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2$	55	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$
25	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HCO}$	56	$\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$
26	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	57	$\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
27	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	58	$2\text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
28	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HO}_2$	59	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$
29	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$	60	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons 2\text{OH}$
30	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCCO} + \text{H}$	61	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$
31	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{T-CH}_2 + \text{CO}$	62	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$

中 N, S, T, P 表示化学键位置, N 表示正位, P 表示对位, S 表示仲位, T 表示叔位, M 表示第三体。

2 航空煤油本生灯预混预蒸发燃烧验证试验

为了对上述简化反应机理进行试验验证, 本文设计了本生灯预混预蒸发燃烧试验装置(如图

1、图 2 所示)。由图可知, 燃油经过微量油泵被注入燃油加热管道后形成燃油蒸气; 由压气机提供的空气, 通过流量计后进入空气加热管道, 加热管道的温度由电压控制。燃油蒸气和热空气经过混合后进入本生灯, 在本生灯出口处形成预混预蒸发燃烧火焰。本生灯喷口直径为 12 mm, 喷口雷诺数如表 2 所示。采用单点双铂铑热电偶测量燃气

温度;采用单点取样管对燃气进行取样,样气通过冷却水套冷却终止其化学反应后,进入 ULTRA-MAT 23 气体分析仪对燃气体积分数进行测量;通过对三维坐标架进行移动,从而测量本生灯中心轴线以及不同高度的径向位置上的温度与燃气体积分数分布。

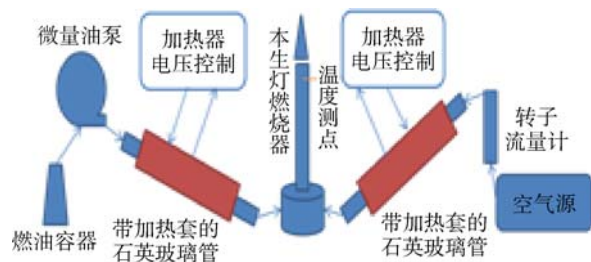


图 1 RP-3 航空煤油本生灯预混预蒸发燃烧试验系统简图

Fig. 1 Bunsen burner pre-evaporation flame experiment system of RP-3 aviation kerosene



图 2 试验系统实物图

Fig. 2 Real experiment system

3 计算模型

本文参照试验所采用的本生灯模型,并在火焰外添加了一个高为 600 mm、底面直径为 350 mm 的假想圆筒灯罩,建立了如图 3 所示的数值计算模型。经网格无关性验证后,最终选择 139 万网格。同时本文选取 Kundu 等^[19]提出的 $C_{12}H_{23}$

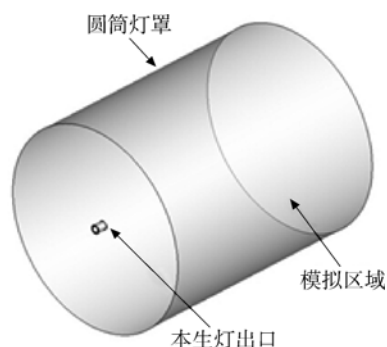


图 3 计算模型

Fig. 3 Calculation model

的 23 步反应机理和文献[20]中 Strelkova 等提出的 72.7%正癸烷、9.1%正己烷和 18.2%苯的 38 步简化机理作为补充进行数值模拟,对本文提出的 62 步简化机理进行对比验证,并分析其优劣。试验及数值模拟工况如表 2 所示。

表 2 试验及数值模拟工况

Table 2 Condition of experiment and numerical simulation

参数	工况		
	1	2	3
燃油流量/(mL/h)	90	90	90
空气流量/(L/h)	650	800	900
进口温度/K	430	430	430
雷诺数 Re	1567	1902	2124

本文数值计算中,可燃混气的进口即本生灯的出口,采用质量流量进口边界条件;同时,由于周围空气无明显的流动迹象,灯罩两端均采用压力进口和压力出口边界条件。计算中使用的数学模型经过验证后,分别选择标准 $k-\epsilon$ 湍流模型模拟湍流流动,用组分输运模型和涡耗散概念(EDC)化学动力学反应模型模拟燃烧,分别采用 3 种不同的化学反应机理;压力方程采用 1 阶精度进行离散,动量、湍流动能及其耗散率、能量、组分等方程的离散则使用 first order upwind 格式,求解使用 SIMPLE (semi-implicit method for pressure-linked equations)算法。本文把进出口流量相对误差小于 1%,全部残差小于 1.0×10^{-3} 作为收敛标准。

4 本生灯火焰结果分析

4.1 温度结果分析

图 4~图 6 是 3 个工况下燃烧火焰中心轴线上的温度(T)分布数值模拟结果和试验数据对比图。从图中可知,各工况下试验数据和 3 种简化机理数值模拟的中心轴线温度变化规律基本一致,均在本生灯出口后温度急剧上升,形成高温区,随后在距喷口轴向距离 $X=0.02$ m 附近达到最大值,其后随着燃料的消耗,燃烧强度逐渐减弱,并且射流不断卷吸周围冷空气,因此燃气温度逐渐降低,最后在火焰尾部温度趋于环境温度,形成直线。可以看出在大多数工况下,数值模拟温度均比试验数据要高,并且在火焰尾部试验中的温度下

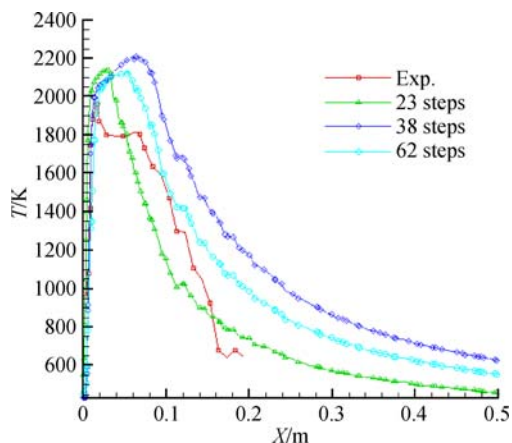


图4 工况1火焰中心轴线温度分布

Fig. 4 Temperature distribution on the axis of flame center in condition 1

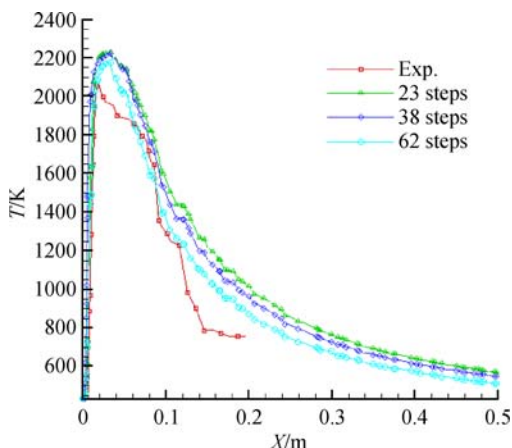


图5 工况2火焰中心轴线温度分布

Fig. 5 Temperature distribution on the axis of flame center in condition 2

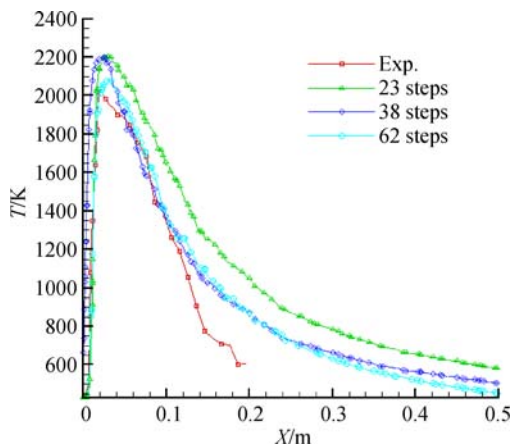


图6 工况3火焰中心轴线温度分布

Fig. 6 Temperature distribution on the axis of flame center in condition 3

降速率明显大于数值模拟结果,这是由于数值模拟是纯理想的环境下进行,并且加设了一个灯罩,避免了一些外部因素干扰,因此数值模拟结果的温度要稍高于试验测量的温度.另外,3种简化机理中23步简化机理数值模拟结果和试验数据相差最大,在富油工况(工况1)时,其点火延迟距离(即焰心长度)很短,火焰高温区集中在本生灯出口附近,并且温度在达到最大值后急剧下降,而试验数据在达到温度最大值后,形成一个高温区,温度下降速度较慢,而在贫油工况时(工况3)时,其温度高温区向后偏移,并且远高于相同点的试验数据温度值.在富油况下,38步简化机理模拟得到的温度值相比试验数据而言,均偏高,而在贫油或者最佳油气比附近工况下,和试验数据具有一定的吻合度,可以对火焰温度进行一定预测.相对于其他两种简化机理,62步简化机理在各工况下数值模拟结果均表现出和试验数据较高的吻合性,特别是在最佳油气比和贫油工况下,能对火焰轴线温度进行较精准的预测;在富油时,数值模拟得到的火焰中部温度分布和试验数据吻合较好,而在火焰锋面段两者有一定的差异.

图7~图9是工况2在不同高度上半径方向上温度分布图.可以看出3种简化机理计算的径向温度分布规律均基本一致,在本生灯出口附近(图7所示),火焰高度截面中心处刚好在焰心位置,因此温度较低;随着距喷口中心半径(R)的增加,燃料蒸发燃烧,温度不断上升,并在火焰锋面附近(半径为0.005 m)达到最大值;随后半径的继续增大,处于外焰区域,受气体流动、热扩散和卷吸冷空气影响,燃气温度速度减低;在高度达到0.024 m时(图8所示),该截面刚好处于火焰内焰截止点附近,因此在中心处温度最高,并在中心附近形成一个圆形高温区,由于有火焰锋面燃烧的放热和气体传热作用,高温区温度比较稳定,随半径的不断增大,散热增加,温度快速下降,最终趋于环境温度.而图9所测量的截面处于外焰区域,因此温度从中心处迅速降低.在3种不同的高度截面,不同的半径上,23步简化机理和38步简化机理数值计算的温度和试验数据相比一直偏高,并且下降速率过小,和试验数据相差较大;而62步简化机理模拟结果在内焰和外焰区域计算的径向温度分布基本能很好地和试验数据相吻合,因此能对火焰温度进行较精确的预测.

4.2 氧气体积分数分布结果分析

图10和图11是不同工况下火焰中心轴线上

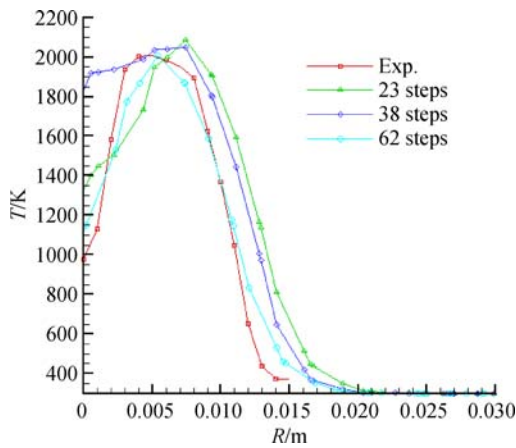


图 7 工况 2 高度为 0.008 m 处径向温度分布

Fig. 7 Temperature distribution on the radius at height of 0.008 m in condition 2

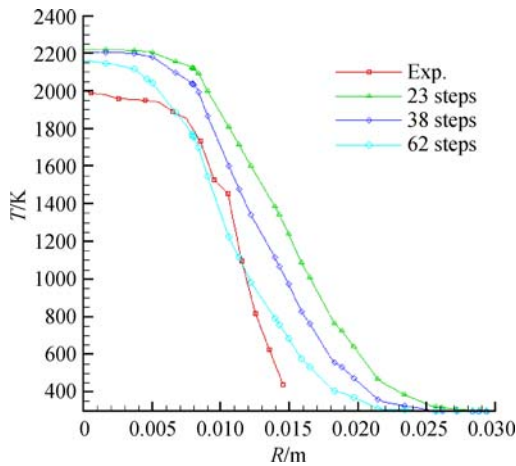


图 8 工况 2 高度为 0.024 m 处径向温度分布

Fig. 8 Temperature distribution on the radius at height of 0.024 m in condition 2

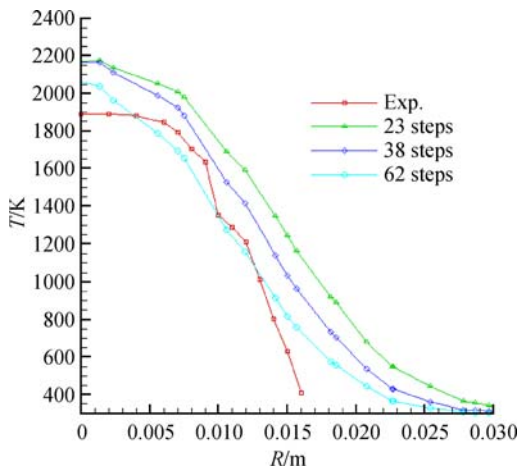
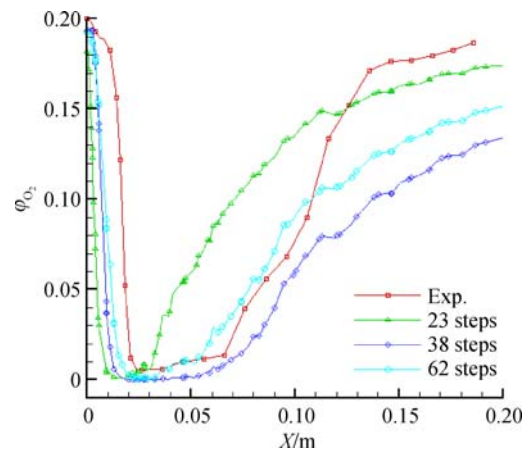
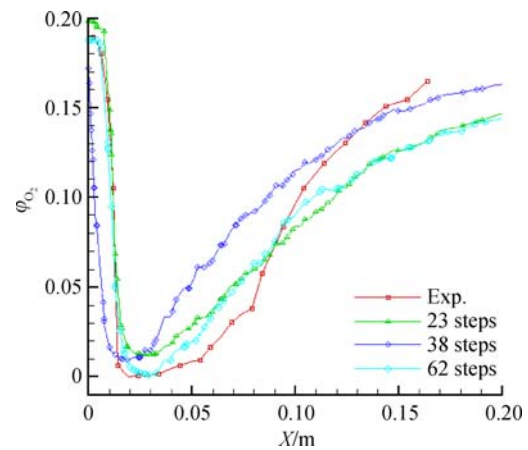


图 9 工况 2 高度为 0.042 m 处径向温度分布

Fig. 9 Temperature distribution on the radius at height of 0.042 m in condition 2

O_2 体积分数 (φ_{O_2}) 分布数值模拟结果和试验数据对比图. 从图中可知, 3 种简化机理计算结果和试验数据变化趋势基本相同, 在本生灯出口处预混预蒸发可燃混气剧烈燃烧, 大量消耗氧气, 形成一个氧气真空区, 其体积分数在 $X=0.025$ m 左右降到最低, 随后由于燃料的减少, 氧气消耗降低, 同时卷吸周围新鲜空气, 因此其体积分数不断升高, 在火焰尾部趋于环境氧气体积分数. 各工况下试验测量的氧气体积分数下降阶段所用距离都比 3 种简化机理数值模拟结果偏大, 特别是在富油时 (图 10 所示), 3 种简化机理与试验数据相差较远, 但在贫油时 (图 11 所示) 62 步简化机理和试验数据吻合较好, 能很好地对点火滞后进行预测. 可燃混气在火焰锋面处由于剧烈燃烧, 形成了一个氧气真空区, 总体积分数趋于零, 且存在有一

图 10 工况 1 火焰中心轴线 O_2 体积分数分布Fig. 10 O_2 volume fraction distribution on the axis of flame center in condition 1图 11 工况 3 火焰中心轴线 O_2 体积分数分布Fig. 11 O_2 volume fraction distribution on the axis of flame center in condition 3

定的长度,具体随着工况不同而有所不同,图10表明23步简化机理在出口燃烧氧气降到最低后迅速升高,几乎没有形成一段氧气真空区和试验数据不符,而且在火焰尾部氧气体积分数升高速率太快,一直高于试验数据;38步简化机理在富油时能对氧气消耗进行一定的预测,形成一段低氧气体积分数区,但区域长度偏大,而在当油气比接近最佳或贫油时,也像23步简化机理一样,基本不形成氧气低体积分数区,体积分数达到最低后迅速升高;62步简化机理在各工况下均能较好地模拟得到氧气低体积分数区域,并且和试验数据相吻合,特别是在富油工况.在火焰外焰区域,随着燃烧强度的减弱,氧气体积分数升高,进入氧气体积分数增长区,3种机理中62步简化机理所预测的氧气体积分数变化能很好地与试验数据相吻合;而在火焰尾部区域,由于试验中受周围冷空气作用,氧气体积分数增长速率明显大于理想条件下的数值模拟结果.

图12和图13是在工况3下的不同高度时半径方向上氧气体积分数分布图,可以看出各种工况下径向氧气体积分数分布规律基本相同,截面中心区域附件温度最高,燃烧最剧烈,因此氧气被大量消耗,体积分数最低,随着半径的增大,燃料消耗减少,同时不断卷吸外面新鲜空气,因此氧气体积分数不断上升.图12表明,由于该高度在火焰内焰区域,因此在中心轴线上氧气体积分数稍高,而半径在0.005 m处时,刚好处于火焰锋面附近,因此氧气体积分数最低(基本接近零),随着半径的继续增大,氧气体积分数急剧增大.图13表明,由于该测量高度在外焰区域,因此,在中心轴线上氧气体积分数不为零,随着距离的增大,氧气体积分数急剧增大,不存在图12中的氧气体积分数先减少再增大的变化过程.在3种高度截面上,23步简化机理数值计算所得的结果和试验最不符合,其形成的氧气低体积分数区域偏大,在数值上和试验数据相差最大;38步简化机理在则能对内焰中心的氧气体积分数进行一定的预测,和试验数据由较好的一致性,但其形成的氧气低体积分数区在内焰偏大,而在外焰却偏小,和试验数据相差均较大;62步简化机理在火焰中心段和试验数据有一定的差异,但随着径向距离增加,氧气体积分数开始增加时,其数值模拟结果和试验数据变化规律具有很高一致性,并且数值上相差较小.在火焰中部区域,当半径超过一定值,氧气体积分数开始进入增加阶段,62步简化机理结果都能与试

验数据相接近,反映氧气体积分数变化的真实规律.在火焰尾部区域,由于周围冷空气的大量掺混,试验所得的氧气体积分数在截面中心之外快速上升,3种简化机理计算得到的径向氧气体积分数和试验数据相差均较大.

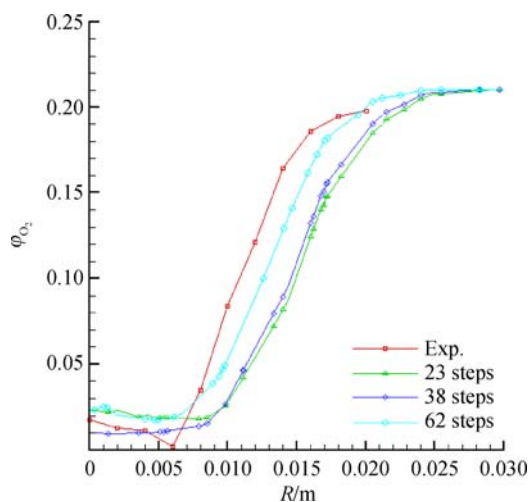


图12 工况3高度为0.017 m处径向O₂体积分数分布
Fig. 12 O₂ volume fraction distribution on the radius at height of 0.017 m in condition 3

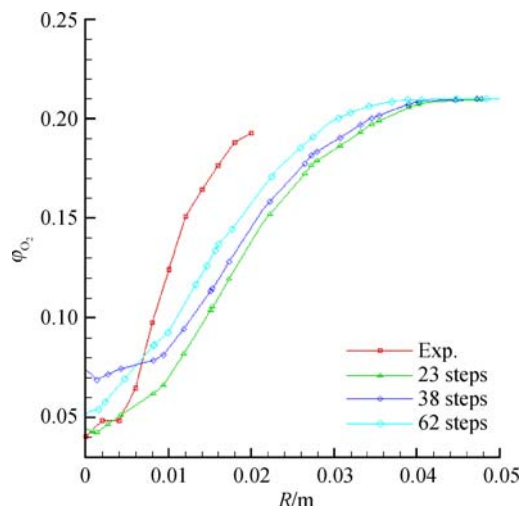
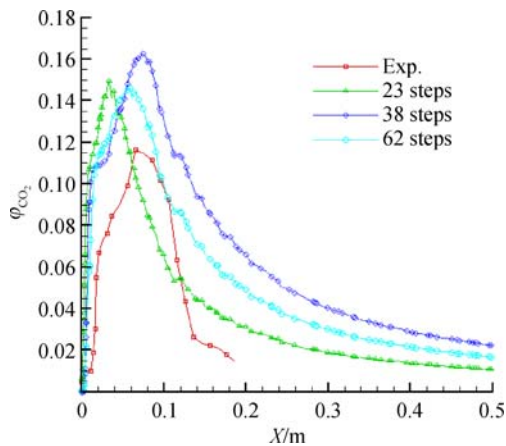
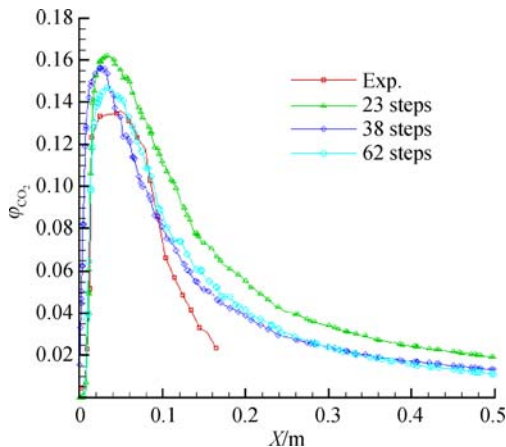


图13 工况3高度为0.065 m处径向O₂体积分数分布
Fig. 13 O₂ volume fraction distribution on the radius at height of 0.065 m in condition 3

4.3 二氧化碳体积分数分布结果分析

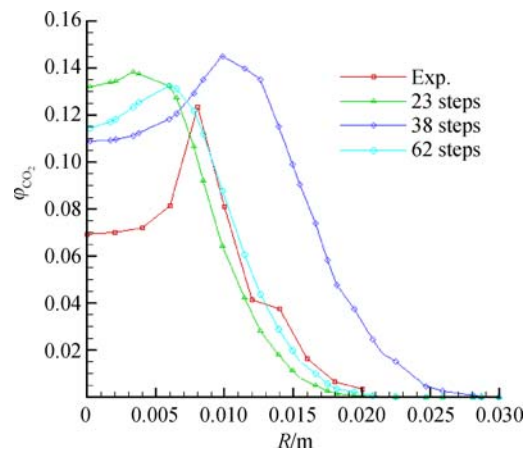
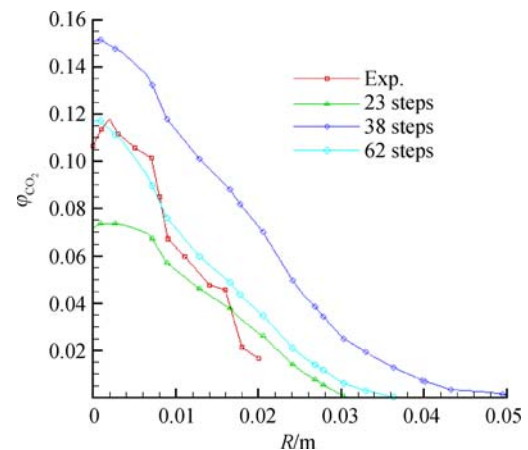
图14和图15是3个工况下火焰中心轴线上CO₂体积分数(φ_{CO_2})分布数值模拟结果和试验数据对比图.从图中可知,在各工况下轴线上CO₂体积分数变化规律是基本相同的,并且与温度分布变化规律基本一致,在本生灯出口预混可燃混气剧烈燃烧,温度增加,CO₂体积分数不断上升,

图 14 工况 1 火焰中心轴线 CO_2 体积分数分布Fig. 14 CO_2 volume fraction distribution on the axis of flame center in condition 1图 15 工况 3 火焰中心轴线 CO_2 体积分数分布Fig. 15 CO_2 volume fraction distribution on the axis of flame center in condition 3

并达到最大值,形成高体积分数区,随后随着轴线距离的增加,燃烧强度减弱, CO_2 气体扩散和周围空气不断掺混,因此体积分数迅速下降。3 种简化机理数值模拟结果均比试验数据偏高,特别在其体积分数上升阶段(即燃烧区域),并且数值模拟结果达到体积分数最大值的轴线位置与试验数据达到最大值的轴线位置有一定差异,越富油时(图 14 所示)两者差距越大,贫油时两者很接近(图 15 所示);但是在 CO_2 体积分数下降段,62 步简化机理能很好地和试验数据相对应,对其变化趋势做出一定预测,尤其在最佳油气比和贫油工况,其对体积分数下降段的计算结果基本和试验相吻合。23 步简化机理在所有工况下计算得到的结果比试验数据高出很多,而且在数据变化规律上只是保持趋势相同,实际规律相差较大;38 步

简化机理在富油工况下计算得到的 CO_2 体积分数最高,并且在外焰区其 CO_2 体积分数降低速度很慢,并不符合试验数据变化,但在贫油时其计算结果和 62 步简化机理结果差距不大,能对试验进行一定程度的预测。

图 16 和图 17 是工况 1 时不同高度下沿半径方向 CO_2 体积分数分布图。图 16 表明高度为 0.022 m 截面上,处于燃烧内焰区域,数值模拟获得的径向 CO_2 体积分数比试验数据偏高很多,在内焰区域,由于氧气不足,燃烧不充分,产生大量 CO ,因此中心处 CO_2 体积分数较低,随着径向向外增大,环境中氧气补充进来,促使 CO 燃烧形成 CO_2 ,形成其高体积分数区,在火焰锋面处达到最大,半径再增大, CO_2 体积分数急剧减少,62 步简化机理数值获得的结果在火焰锋面外区域两者吻

图 16 工况 1 高度为 0.022 m 处径向 CO_2 体积分数分布Fig. 16 CO_2 volume fraction distribution on the radius at height of 0.022 m in condition 1图 17 工况 1 高度为 0.088 m 处径向 CO_2 体积分数分布Fig. 17 CO_2 volume fraction distribution on the radius at height of 0.088 m in condition 1

合较好. 图 17 结果表明, 随着测量截面高度的增加, 当处于火焰外焰区域时, CO_2 体积分数急剧下降, 不存在图 16 中的先增大后降低的变化趋势, 62 步简化机理数值计算结果与试验结果吻合较好, 基本能较好地预测其体积分数分布, 而 38 步简化机理数值计算结果与试验数据相差最大, 这是由于其是混合替代燃料, 其中的苯不需要裂解, 直接进行反应 $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{O} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5 + \text{CO} + \text{O}$, 而氧气又很充足, 加速了 CO 转化为 CO_2 的速率, 因此 CO_2 体积分数远高于试验测量结果. 相比较而言, 62 步简化机理在外焰区其径向 CO_2 体积分数的数值计算结果明显优于其他两种机理数值计算结果, 基本和试验数据相重合, 具有很高的的一致性和准确性.

5 结 论

本文选取正癸烷作为 RP-3 航空煤油的单组分替代燃料, 为了验证本文提出的正癸烷简化化学反应机理的正确性, 设计了以 RP-3 航空煤油为燃料的本生灯预混预蒸发燃烧试验装置, 应用两种已被证实的简化机理(23 步简化机理和 38 步简化机理)和本文 62 步简化机理对本生灯燃烧火焰进行数值模拟, 并和试验结果进行对比分析, 得到结果如下:

1) 在各工况下, 62 步简化机理数值计算获得的火焰中心轴线上以及不同高度半径方向上的温度、氧气体积分数分布与试验数据能很好地吻合, 能对燃烧火焰进行较准确和可靠的预测.

2) 38 步简化机理在贫油工况时能对轴线温度以及在富油时对氧气体积分数分布能进行一定预测, 但在其他工况时数值结果与试验数据相差较远.

3) 23 步简化机理数值计算结果和实际燃烧温度相差很远, 对温度和氧气体积分数计算结果与试验结果对比分析, 两者相差较远, 无法对燃烧火焰进行准确预测.

4) 62 步简化机理计算获得的 CO_2 体积分数分布在外焰区域与试验数据吻合很好, 而在内焰富油区域数值预测的体积分数比试验数据偏高, 但变化规律相似, 而 23 步简化机理和 38 步简化机理基本只能保持和试验数据变化趋势的一致性, 但数值计算结果一直偏高.

综上所述, 正癸烷可作为 RP-3 航空煤油的单组分替代燃料, 本文所建立的正癸烷 62 步简化化学反应机理能在较大的油气比变化范围内较好

地模拟 RP-3 航空煤油燃烧情况, 可对其燃烧特性进行较为准确和可靠的预测. 同时, 由于经过简化后, 中间组分数目和基元反应数目大幅度降低, 从而可以大大降低应用该简化机理模拟航空发动机燃烧室喷雾燃烧过程的计算时间和计算资源, 从而提高其计算效率.

参考文献:

- [1] Violi A, Yan S, Eddings E G, et al. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures[J]. Combustion Science and Technology, 2002, 174(11/12): 399-417.
- [2] 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)
- [3] Edwards T, Maurice L Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels[J]. Journal of Propulsion and Power, 2001, 17(3): 461-466.
- [4] Patterson P M, Kyne A G, Pourkhashanian M, et al. Combustion of kerosene in counter-flow diffusion flames[J]. Journal of Propulsion and Power, 2000, 16(2): 453-460.
- [5] Riesmeier E, Honnet S, Peters N, et al. 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(3): 899-905.
- [6] Bikas G, Peters N. Kinetic modelling of *n*-decane combustion and autoignition: modelling combustion of *n*-decane[J]. Combustion and Flame, 2001, 126(1/2): 1456-1475.
- [7] 王慧汝, 金捷, 王静波, 等. 正癸烷燃烧机理及航空煤油点火延时动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2012, 33(2): 341-345.
WANG Huiru, JING Jie, WANG Jingbo, et al. Combustion mechanism of *n*-decane at high temperature and kinetic modeling ignition delay for aviation kerosene[J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2012, 33(2): 341-345. (in Chinese)
- [8] Turanyi T, Berecs T, Vajda S, et al. Reaction rate analysis of complex kinetic system[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 1989, 21(2): 83-99.
- [9] 戴超, 颜应文, 李井华, 等. 一种基于敏感性分析的 RP-3 替代燃料简化机理[J]. 南京航空航天大学学报, 2015, 47(4): 579-587.
DAI Chao, YAN Yingwen, LI Jinghua, et al. Reduced mechanism surrogate fuel for RP-3 kerosene based on sensitivity analysis[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2015, 47(4): 579-587. (in Chinese)
- [10] 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):

- 1949-1955.
- 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): 1949-1955. (in Chinese)
- [11] Montgomery C J, Cannon S M, Mawid M A, et al. Reduced chemical kinetic mechanisms for JP-8 combustion [R]. AIAA-2002-0336, 2002.
- [12] Gueret C, Cathonnet M, Boettner J C, et al. Experimental study and modeling of kerosene oxidation in a jet-stirred flow reactor [J]. Symposium (International) on Combustion, 1991, 23(1): 211-216.
- [13] 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(11): 1935-1963.
- [14] Dagaut P. Kinetics of jet fuel combustion over extended conditions: experimental and modeling [J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2007, 129(2): 394-403.
- [15] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene [J]. Proceeding of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.
- [16] Vovelle C, Delfau J L, Reuillon M. Formation of aromatic hydrocarbons in decane and kerosene flames at reduced pressure [M]. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 1994.
- [17] Cooke J A, Bellucci M, Smooke M D, et al. Computational and experimental study of JP-8, a surrogate, and its components in counterflow diffusion flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 28(1): 439-446.
- [18] Wilson C W, Kyne A G, Pateerson P M, et al. Prediction of premixed laminar flame structure and burning velocity of aviation fuel-air mixture [R]. ASME Paper 2001-GT-0055, 2001.
- [19] Kundu K P, Deur J M. A simplified reaction mechanism for calculation of emissions in hydrocarbon (Jet-A) combustion [R]. AIAA 93-2341, 1993.
- [20] Strelkova I M, Kirillov I A, Potapkin B V, et al. Detailed and reduced mechanisms of jet a combustion at high temperatures [J]. Combustion Science and Technology, 2008, 180(10/11): 1788-1802.

(编辑:叶青、王碧琚)