

# RP-3 航空煤油三组分替代燃料简化机理验证

方 文, 颜应文, 刘云鹏, 李井华  
(南京航空航天大学 能源与动力学院, 南京 210016)

**摘 要:** 利用机理自动简化程序 ReaxRed 对航空煤油 RP-3 三组分替代燃料半详细化学反应动力学模型采用两种方案分别进行了简化。方案一采用直接关系图(directed relation graph, DRG)法构建了 109 组分 423 步基元反应, 方案二在方案一的结果上采用基于误差传播的 DRG(directed relation graph based on error propagation, DRGEP)方法和计算奇异摄动(computational singular perturbation, CSP)法构建了 84 组分 271 步基元反应。结合点火延迟试验数据对方案二所构建的简化机理进行了验证, 并且采用层流火焰速度、温度和重要产物等方面的数值计算结果进行对比分析, 结果表明: 方案二所构建的简化机理在简化过程中保留一定的计算精度前提下更加经济实用, 其中在各种工况下方案二简化机理和半详细机理的点火延迟时间之间的平均误差在 6% 以内并且它们在火焰传播速度方面平均误差在不超过 8%。采用本生灯预混燃烧器为物理模型, 以 RP-3 航空煤油为燃料, 进行相应的试验研究来验证方案二的简化机理, 结果表明该简化机理数值计算结果与试验数据较吻合。

**关 键 词:** 三组分替代燃料; RP-3 航空煤油; 点火延迟; 层流火焰速度; 简化机理; 本生灯

**中图分类号:** V231.2      **文献标志码:** A

## Simplified mechanism verification of three component surrogate fuels for RP-3 aviation kerosene

FANG Wen, YAN Yingwen, LIU Yunpeng, LI Jinghua  
(College of Energy and Power Engineering,  
Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

**Abstract:** Two schemes were used in mechanism simplification program ReaxRed to simplify aviation kerosene RP-3 semi-detailed chemical reaction kinetics model of three component surrogate fuels. The first scheme used directed relation graph (DRG) method to obtain 109 species and 423 elementary reactions. The second scheme used directed relation graph based on error propagation (DRGEP) method and computational singular perturbation (CSP) method, which obtained 84 species and 271 elementary reactions on the basis of the result of the first scheme. The experimental data of ignition delay of kerosene was adopted to demonstrate the rationality of the simplified mechanism created by the second scheme, the numerical simulation results of laminar flame speed, temperature and mole fraction of important product were compared and analyzed. Results indicated that the second scheme with high calculation accuracy was more economical and practical compared with the first scheme. Under various operating conditions, the average error between the ignition delay time of the

收稿日期:2017-03-27  
基金项目:国家自然科学基金(51676097)  
作者简介:方文(1992—),男,硕士生,主要从事航空发动机燃烧技术研究。  
通讯作者:颜应文(1978—),男,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  
引用格式:方文,颜应文,刘云鹏,等. RP-3 航空煤油三组分替代燃料简化机理验证[J]. 航空动力学报,2018,33(9):2101-2111.  
FANG Wen, YAN Yingwen, LIU Yunpeng, et al. Simplified mechanism verification of three component surrogate fuels for RP-3 aviation kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2018, 33(9): 2101-2111.

second scheme's simplified mechanism and the ignition delay time of the semi-detail mechanism was within 6% and their error in the flame propagation speed did not exceed 8%. In order to further verify the simplified mechanism of the second scheme, RP-3 aviation kerosene was adopted as fuel and an experimental study of premixed burner of the Bunsen burner was conducted. The results showed that the numerical calculation results of the simplified mechanism were consistent with the experimental data.

**Key words:** three component surrogate fuels; RP3-aviation kerosene; ignition delay; laminar flame speed; simplified mechanism; Bunsen burner

燃烧室是航空发动机的三大核心部件之一,燃烧室内燃料着火、燃烧速率、火焰结构、可燃范围等燃烧特性的研究是发动机燃烧室研制的难题和关键,需要对其内部燃料/氧化剂的燃烧过程进行深入研究<sup>[1]</sup>。航空发动机燃烧室中液雾燃烧反应实际上是一个十分复杂的湍流混合与化学动力学共同控制的湍流燃烧过程,因此要准确地模拟出燃烧室中的火焰燃烧过程,必须要开展航空煤油化学动力学模型的研究。采用计算燃烧学与化学动力学模型相结合的方法,能更准确地预估出燃烧室内湍流燃烧特性,从而为航空发动机燃烧室的设计与优化提供技术支撑。

中国航空发动机使用的燃油为 RP-3 航空煤油,不同国家航空煤油的烃类构成比例、碳氢比(C/H)、平均摩尔质量等均有较大的差异。郑东等<sup>[2]</sup>比较了 JP-8、Jet-A、RP-3 型航空煤油的组成成分之后,发现 3 种型号航空煤油组分种类以及组分比例存在着很大的区别,不能采用一个通用的化学反应动力学模型来描述不同牌号航空煤油的燃烧反应特性。因此研究出符合中国 RP-3 航空煤油的化学反应动力学模型是数值研究中国航空发动机燃烧室燃烧特性的一个必要条件。

航空煤油组分非常复杂,发展一个包含所有组分的燃烧化学反应动力学模型是不切实际的,因此,在该研究领域,国内外学者们通常采用航空煤油替代燃料来取代实际煤油作为对象开展相应的燃烧特性研究工作,即根据实际煤油的物理和化学特性,采用一种或几种组分作为其替代燃料,并将应用环境理想化处理以便进行研究,并且针对替代燃料的物理化学特性,提出替代燃料的详细化学反应动力学模型。在目前计算机的计算能力范围内进行航空发动机燃烧室内湍流燃烧过程数值模拟,必须在尽可能保证机理的数值模拟精度条件下对详细动力学机理进行简化,从而减少计算成本,提高计算效率。对详细化学反应动力学模型进行简化在国内外成为研究的热门方向,

简化方法也是各式各样,具体可以分为两大类<sup>[3]</sup>。第一类是骨架机理,即从半详细机理中去掉不重要的组分和基元反应,从而得到骨架机理,具体代表有:敏感性分析(sensitivity analysis)<sup>[4]</sup>、直接关系图(DRG)法<sup>[5]</sup>、计算奇异摄动法(CSP)<sup>[3,6]</sup>;而去除冗余反应的方法有:基于 CSP 重要性指标的反应移除方法<sup>[7]</sup>和主成分分析(PCA)方法<sup>[8]</sup>。在骨架机理简化方法中,得到比较广泛认可的是由 Lu 等<sup>[5]</sup>提出的 DRG 法,DRG 方法由于简单而且高效被迅速推广应用和改进,进而衍生出多种基于 DRG 的简化方法,例如:基于误差传播的 DRG (DRGEP)方法<sup>[9]</sup>及路径通量法(PFA)法<sup>[10]</sup>。第二类方法是时间尺度分析方法,通过分析各反应的时间尺度降低计算的刚性。具体代表有:计算奇异摄动法<sup>[11]</sup>和准稳态分析(quasi steady state approximation, QSSA)法<sup>[12]</sup>等。

李象远研究团队针对 RP-3 航空煤油多组分替代燃料发展了一套半详细化学反应动力学模型<sup>[13]</sup>,此模型替代燃料包含质量分数为 73% 的正十二烷( $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ )、质量分数为 14.7% 的 1,3,5-3 甲基环己烷( $\text{C}_9\text{H}_{18}$ )和质量分数为 12.3% 的正丙基苯( $\text{PHC}_3\text{H}_7$ ),该三组分替代燃料的半详细机理包括 257 个组分和 874 步基元反应。Xu 等<sup>[13]</sup>对该替代燃料的各组分比例做出了合理性验证,并且引用 Tang 等<sup>[14]</sup>做的航空煤油点火延迟时间试验结果来验证该详细机理的点火延迟时间,结果表明该模型能很好地描述 RP-3 煤油的高温点火特性。由于四川大学开发的 ReaxRed 简化程序<sup>[15]</sup>对 RP-3 航空煤油三组分替代燃料的半详细化学反应动力学模型已经进行了大量的验证,该半详细化学动力学模型能较好地反映 RP-3 航空煤油燃烧过程,因此本文基于四川大学开发的 ReaxRed 简化程序<sup>[15]</sup>对 RP-3 航空煤油三组分替代燃料的半详细化学反应动力学模型进行了简化,得到三组分简化机理,并与试验数据和半详细机理结果进行对比分析,验证本文的三组分简

化机理正确性。

# 1 三组分替代燃料简化动力学机理的构建

本文 RP-3 航空煤油的三组分替代燃料采用的半详细机理包含 257 个组分和 874 步基元反应,由于该半详细机理的组分数目和基元反应数目比较庞大,无法应用于实际航空发动机燃烧室中 RP-3 航空煤油燃烧过程的数值模拟,因此需要对其进行简化。本文分别采用两种简化方案:方案一采用 DRG 来简化半详细化学反应动力学模型,最终得到骨架简化机理一;方案二在方案一的基础上继续进行简化,然后采用 DRGEP 进行深度简化,最后采用 CSP 去除一些冗余反应,最终得到骨架简化机理二。

## 1.1 简化方法

### 1.1.1 直接关系图法

DRG 通过建立各组分之间的关联系数来判断哪些组分是重要的,哪些组分是可以被删除,进而去掉相关的反应方程。为定量确定一个组分对另一个组分的直接影响,确定组分 B 对组分 A 生成速率的归一化贡献  $R_{AB}$ 。

本文采用下式来建立组分之间的关系归一化贡献

$$R_{AB} = \frac{\sum_{i=1,\dots,I} |v_{A,i}\omega_i\delta_B^i|}{\sum_{i=1,\dots,I} |v_{A,i}\omega_i|} \tag{1}$$

式中  $v_{A,i}$  为第  $i$  个反应方程中组分 A 的系数,  $\omega_i$  是第  $i$  个方程的摩尔生成率,  $I$  是总反应方程数量。如果组分 B 参与该反应,则  $\delta_B^i = 1$ , 否则  $\delta_B^i = 0$ 。

如果  $R_{AB}$  足够大,从骨架机理中删除组分 B 对组分 A 的生成速率会产生很大的影响。因此如果 A 被保留,B 也应该被保留,这时我们说组分 A 和组分强烈的依赖组分 B。为了量化 A 对 B 的依赖程度,定义一个小的阈值  $\xi$ ,对于  $R_{AB}$  小于  $\xi$ ,这个依赖关系很小,A 和 B 之间没有相互联系的边。如果  $R_{AB}$  大于  $\xi$ ,这个依赖关系就很大,A 和 B 之间就存在相互联系的边。因此通过这个原则来建立关于开始设置重要组分的直接关系图。保留相互强耦合的重要组分,删除相互关联小的组分及其基元反应,最后得到骨架机理的基元反应集合。

### 1.1.2 基于误差传播的直接关系图法

Pepiot-Desjardins 等<sup>[9]</sup>在 2008 年提出了基

于误差传播的 DRG (DRGEP) 方法,其组分间关系值定义为

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1,\dots,I} |v_{A,i}\omega_i\delta_B^i|}{\max\left[\sum_{i=1,\dots,I} \max(v_{A,i}\omega_i, 0), \sum_{i=1,\dots,I} \max(-v_{A,i}\omega_i, 0)\right]} \tag{2}$$

并且引入误差传播的概念,考虑组分之间的直接和间接关系,组分 A 不仅能直接受组分 B 的影响,也可以通过第 3 组分,并通过其他路径来影响 A。两个组分之间的路径依赖系数 (path-dependent coefficient) 定义如下:

$$r_{AB,P} = \prod_{i=1}^{n-1} r_{s_i s_{i+1}} \tag{3}$$

$$R_{AB} = \max(r_{AB,P}) \tag{4}$$

式中  $s_1$  为组分 A,  $s_n$  为组分 B。在 DRGEP 方法中  $R_{AB}$  是组分之间相关系数的最终表达式。DRGEP 方法考虑了组分之间直接和间接的关系,并且将各组分的生成和消耗分开进行讨论,并考虑到不同路径对组分之间的影响。

### 1.1.3 基于 CSP 重要性指标的反应移除方法

基于 CSP 重要性指标的反应移除方法,它不将可逆反应的正逆反应分开,而是作为一个反应进行计算,因此可以较精确判断能快速达到平衡状态的可逆反应的重要性。判断反应重要性的指标 ( $K_{A,i}$ ) 定义如下:

$$K_{A,i} = \frac{|v_{A,i}\omega_i|}{\sum_{i=1,\dots,I} |v_{A,i}\omega_i|} \tag{5}$$

通过这个方法进行简化时,首先设定重要组分和阈值,计算重要组分的  $K_{A,i}$  值,保留  $K_{A,i}$  大于所设定的阈值的基元反应,去除冗余反应,从而使骨架机理更加简化。

## 1.2 简化过程

### 1) 方案一

温度选用 1000~1500 K (本文半详细机理属于高温燃烧详细机理,所以简化它时本文同样选用 1000 K 以上的某一高温区间,参考了 Xu 等<sup>[13]</sup>这篇文章。),压力为  $1 \times 10^5 \sim 4 \times 10^5$  Pa,当量比  $\Phi$  分别为 0.3、0.8 和 1.5,组成不同的工况点。本文应用 Chemkin 2.0-Senkin<sup>[16-17]</sup> 程序对 RP-3 航空煤油三组分替代燃料进行高温恒压点火模拟,以点火延迟时间点的模拟结果作为抽样点,用骨架机理方法对半详细机理进行简化。

首先,采用 ReaxRed 中骨架机理简化方法

DRG 作为骨架机理简化的第一步,把替代燃料,氧化物和最终产物( $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ 、 $\text{C}_9\text{H}_{18}$ 、 $\text{PHC}_3\text{H}_7$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{N}_2$  和  $\text{O}_2$ )设为重要组分。初始阈值设为 0.01,阈值步长为 0.005,终止阈值为 0.4,总共 78 组阈值。运行结束一个阈值得到一个对应的简化机理,再增加一个步长进入下一轮的简化,直到阈值达到终止阈值,程序将结束运行简化完成,分别得到 78 种简化机理。完成后判断这 78 种机理简化合理为标准:从实际应用出发,通常控制点火延迟误差在 30% 以内<sup>[18]</sup>(计算工作量和计算精度的折衷值)选取适当阈值所对应的简化机理,点火延迟平均误差也要尽量小。

图 1 为采用 DRG 方法简化方法最后得到的不同组分和它们与半详细机理之间在点火延迟时间上的最大相对误差。由图 1 分析可知,当选 109 组分时,在各种温度压力工况下最大相对点火延迟误差是 23.7%,当组分数比 109 小时,相对点火延迟误差都大于 30%,所以选取 109 组分是比较合理的。此时取得阈值是 0.245,基元反应为 432 步,此时的平均相对点火延迟误差只有 8%。

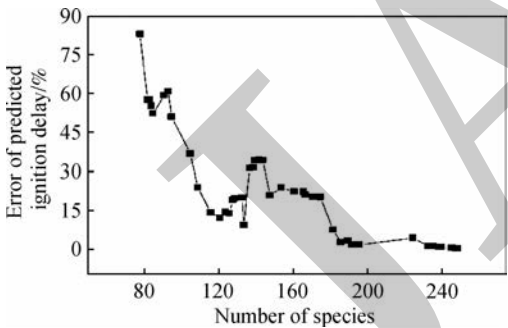


图 1 采用 DRG 方法简化的 RP-3 航空煤油的骨架机理与半详细机理的点火延迟时间最大相对误差与物种数的关系图

Fig. 1 The maximum relative error of ignition delay times with species number for the skeletal mechanism and semi-detailed mechanism with DRG methods of the RP-3 aviation kerosene

2) 方案二

由于 DRG 简化方法只考虑了组分间的直接关系,并没有将组分的生成和消耗分开进行分析。然而,DRGEP 却能将组分的生成和消耗分开进行分析,Lu 等<sup>[19]</sup>提出了多步 DRG 方法,而且方亚梅等<sup>[18]</sup>成功的用两步 DRG 把正十二烷的详细机理模型进行简化。因此,方案二在 DRG 简化基础上再采用 DRGEP 进行深度简化是可靠的。

在方案一基础上,即采用 DRG 方法得到的 109 组分 432 步基元反应的简化结果,方案二采用 ReaxRed 中的 DRGEP 方法作为骨架机理简化的第二步,同样把替代燃料,氧化物和最终产物设为重要组分。初始阈值设为 0.005,阈值步长为 0.005,终止阈值为 0.3,总共 59 组阈值。

图 2 为采用 DRGEP 方法进行深度简化最后得到的不同组分和它们与方案一 DRG 构建出反应模型之间在点火延迟时间上的最大相对误差。由图 2 分析可知,当选 84 组分时,最大相对点火延迟误差只有 26%。可是当组分小于 84 组分时,最大相对点火延迟误差急剧增加,并且超过了 100%,因此本文选取 84 组分是较为合理的选择。为进一步简化骨架机理,第三步依然采用基于 CSP 重要性指标的方法除去多余的反应。最终得到方案二骨架机理简化模型为 84 组分 271 步基元反应。可以看出方案二简化模型的组分和基元反应数目比方案一又有较大程度的减少。

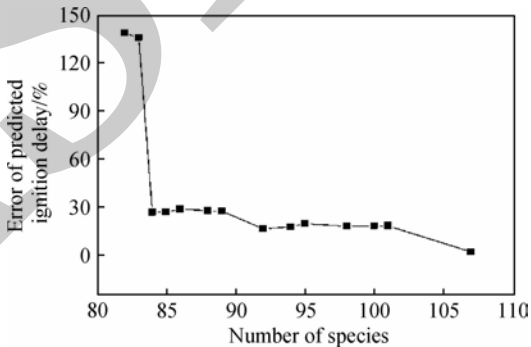


图 2 采用 DRGEP 方法简化的 RP-3 航空煤油的骨架机理与方案一简化机理的点火延迟时间最大相对误差与物种数的关系图

Fig. 2 The maximum relative error of ignition delay time with species number for the skeletal mechanism and reduced mechanism of case 1 with DRGEP methods of the RP-3 aviation kerosene

2 骨架简化机理初步验证

由以上可知,方案二利用 DRG、DRGEP 和 CSP 相结合方法,简化出来的简化机理包含 84 组分 271 步基元反应,组分数减少了 67.3%,基元反应步数减少了 69%。由于方案二替代燃料的简化机理组分数目和基元反应数目大幅度下降,因此可以降低其数值模拟航空发动机燃烧室内湍流燃烧的计算成本。为了证明简化机理的有效性,必须对简化机理进行相应的验证。

本文首先采用 Chemkin 程序的闭式均相反应器模型来计算方案二和半详细机理在不同工况下的点火延迟时间来判断。图 3 表示在当量比  $\Phi$  在 0.5~1.5、压力  $p$  在  $1\times 10^5\sim 1.5\times 10^6$  Pa、温度在 1000~1600 K 条件下方案二与半详细机理的点火延迟时间  $t_{\text{ign}}$  计算结果对比图。综合图 3(a)、图 3(b)和图 3(c)可以看出,y 轴的点火延迟时间  $t_{\text{ign}}$  数据取对数,其中单位为 s 与 x 轴的  $(1000/T)$  呈现较好的线性关系,其中  $T$  表示温度。结果表明温度和压力对点火延迟时间的影响比较大,而当量比对航空煤油的点火延迟时间影响很小。随着温度或者压力的升高,航空煤油点火延迟时间都会相应减少。方案二简化机理的点火延迟时间和半详细机理的点火延迟时间在各个工况的结果吻合较好,并且它们之间的平均误差在 6% 以内。

图 4 为方案二简化机理和半详细机理在压力为  $2\times 10^5$  Pa 和  $4\times 10^5$  Pa、当量比  $\Phi$  为 1~2 工况下的点火延迟时间和 Tang 等<sup>[14]</sup> 的航空煤油点火延迟时间试验数据比较图。由图 4 可知,在图

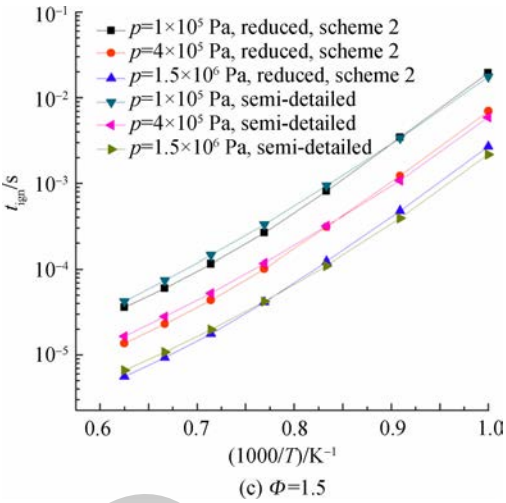
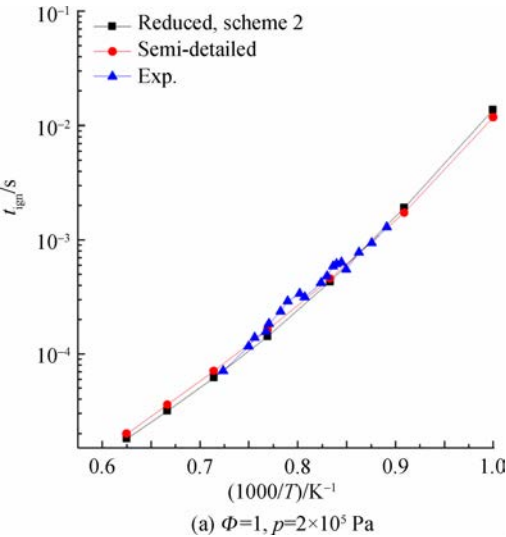
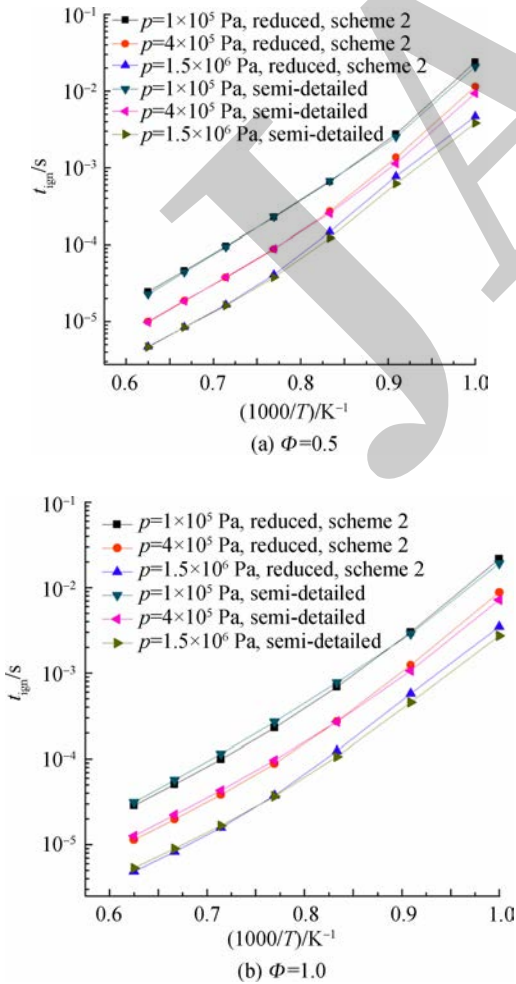


图 3 简化机理与半详细机理的点火延迟时间比较  
Fig. 3 Ignition delay time comparison of the reduced mechanism and the semi-detailed mechanism

4(a)和图 4(b)工况下详细和简化机理的数值计算结果在温度为 1100~1400 K 范围内与试验数据几乎重合。在图 4(c)工况下,计算结果和试验数据稍有偏离,其中半详细机理计算结果在 1100~1300 K 范围内比试验数据稍小,而在 1300~1500 K 范围内又比试验结果稍大,而简化机理计算结果在 1100~1470 K 范围内比试验数据稍小,在比 1470 K 大的温度范围内有比试验结果稍大的趋势。通过 3 种数据对比分析,综合图 4(a)、图 4(b)和图 4(c)可以看出,方案二简化机理和半详细机理计算结果稍有微小差别,但基本吻合,并且都与试验数据吻合较好。

图 5 表示当量比  $\Phi$  为 0.7~1.4、压力  $p$  为  $1\times 10^5\sim 10\times 10^5$  Pa、温度在 420 K 和 563 K 时 3 种机理的层流火焰速度对比图。计算模型采用



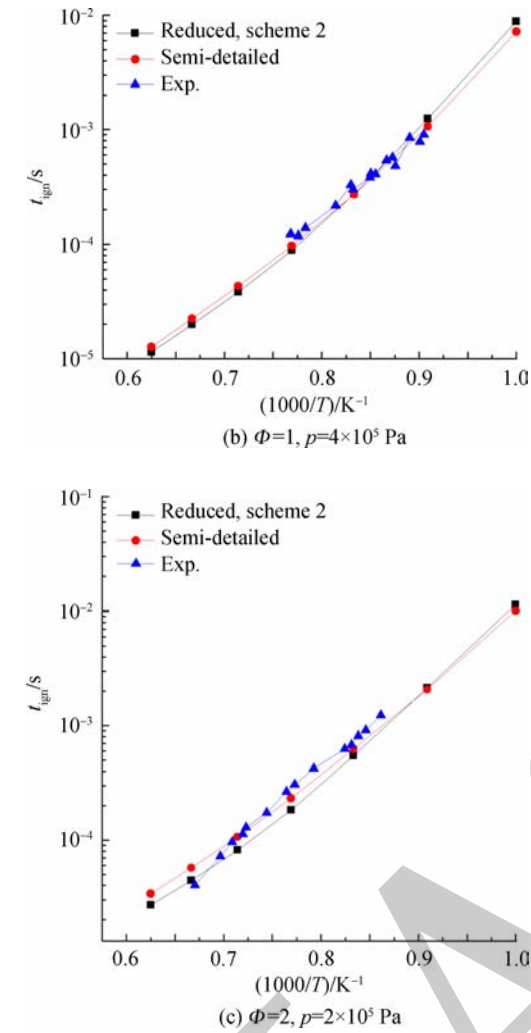


图 4 简化机理和半详细机理的点火延迟时间试验和数值模拟结果比较

Fig. 4 Ignition delay time comparison of the experimental results and numerical simulation results about the reduced mechanism and semi-detailed mechanism

Chemkinpro 中的 Flame-speed 模型。图 5(a)表明温度对层流火焰速度影响很大,当进口温度 563 K 时的层流火焰速度大约是 420 K 的层流火焰速度 2 倍,这与文献[20]中提出层流火焰速度对温度有很强的依赖性这个结论相吻合,这主要是由于混合气体温度增加,既增加了活化分子的百分数,同时也增加单位时间内反应物分子的有效碰撞的次数,因此层流火焰速度急剧增大;而当量比对层流火焰速度的影响也很大,随当量比的增加,层流火焰速度是先增加后减少,大约在当量比为 1.1 时同一温度和压力下的层流火焰速度达到最大,这与文献[20]中结论相吻合,这主要是由于当量比对燃料火焰速度的首要影响是由它影响火焰温度而引起的,因此预测火焰速度在稍缺氧的情况下会达到最大值,而在该当量比基础上增

大或减少,火焰速度都会下降。图 5(b)是当量比为 1、温度为 563 K 时不同压力下层流火焰速度图,结果表明,随着压力的增加,层流火焰速度逐渐下降,这也符合 Metghalchi 等<sup>[21]</sup>选定的燃料下火焰速度和压力的变化关系。综合图 5(a)和图 5(b)在各种工况下半详细机理的火焰速度虽然普遍比简化机理的层流火焰速度要稍小,但误差在 6%~8%之间,在工程可接收误差范围内,并且曲线图的变化趋势是一样的。

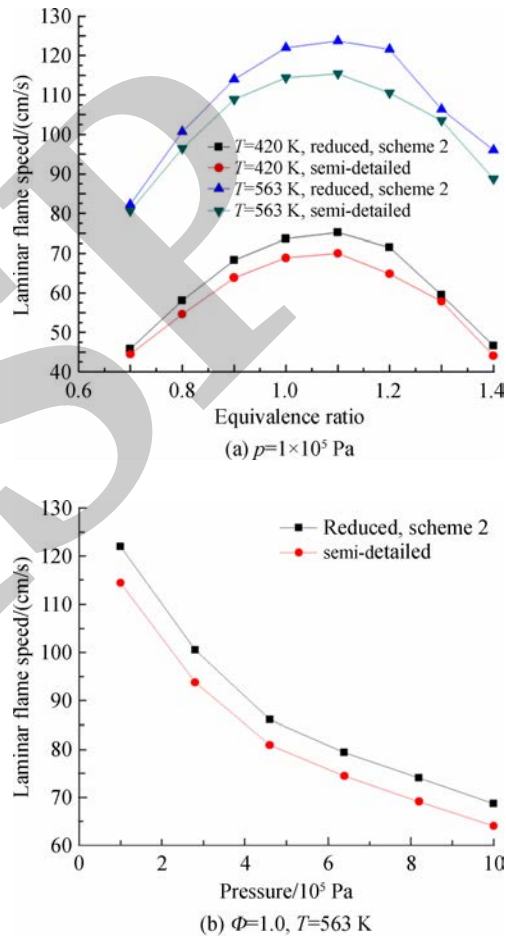


图 5 简化机理和半详细机理的层流火焰速度的比较  
Fig. 5 Laminar flame speed comparison of the reduced mechanism and semi-detailed mechanism

图 6 表示当量比  $\Phi=1$ 、初始压力为  $1\times 10^5 \text{ Pa}$ 、初始温度为 1300 K、停留时间为 3 ms 时两种机理的温度和一些重要产物的对比图,其计算模型采用 Chemkinpro 中的充分搅拌反应器(PSR)模型。由图 6(a)中在温度上升阶段,方案二简化机理比半详细机理的时间要稍提前,这也符合图 3(b)中  $1\times 10^5 \text{ Pa}$  下点火延迟时间分布趋势(在 1176~1600 K 范围内方案二的点火延迟时间比半详细机理的结果要稍小),由于点火初始温度为

1300 K,属于 1176~1600 K 范围内,因此方案二的点火延迟时间会稍小,导致温度上升会提前,但是两者的差别非常小。至于最高温度,方案二为 2695 K,而半详细机理为 2683 K,因此相比较而言,方案二简化机理与半详细机理之间的误差非常小。CO 和 CO<sub>2</sub> 是重点关心的燃烧产物,图 6 (b)表明两个机理的燃烧产物之间在时间上的差值主要是由点火延迟时间造成的,在最终平衡产物 CO 和 CO<sub>2</sub> 中,可以看出方案二与半详细机理结果基本吻合,CO 摩尔分数变化趋势先上升或缓慢下降,因为 CO 最终会经过氧化反应生成 CO<sub>2</sub>,所以 CO<sub>2</sub> 的摩尔分数会缓慢上升;OH 是一个很重要的中间产物,除了可以用它来判断火焰面的位置和燃烧释热率的大小,很多研究者在进行点火延迟试验时还把它作为一种验证机理的有力判断方法。图 6(c)表明,方案二的 OH 摩尔分数上升时间和温度上升时间几乎同步,同样半详细机理要稍提前,这也符合图 4 中点火延迟时间分析的结论。同样方案二的简化机理计算结果中 O<sub>2</sub> 的量也因为点火延迟的不同会稍提前消耗,在最终产物的摩尔分数上,方案二的氧气的摩尔分数和半详细机理的结果也几乎重合。

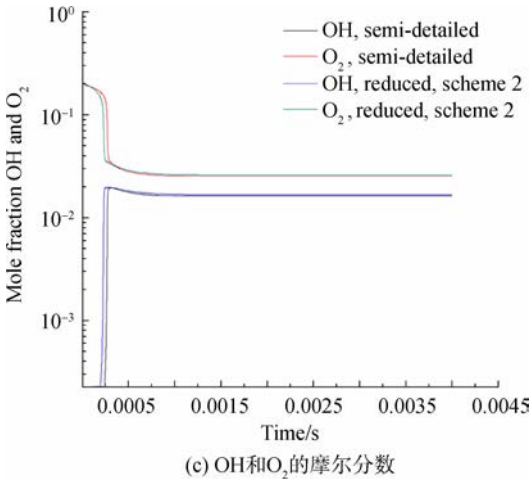
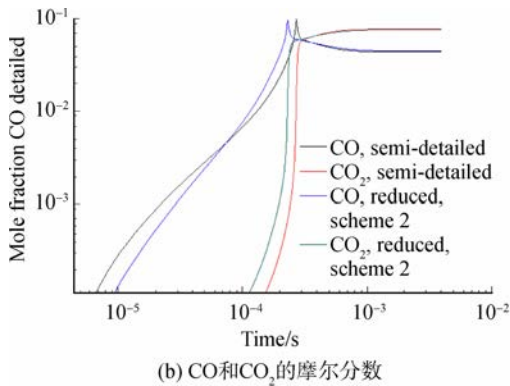
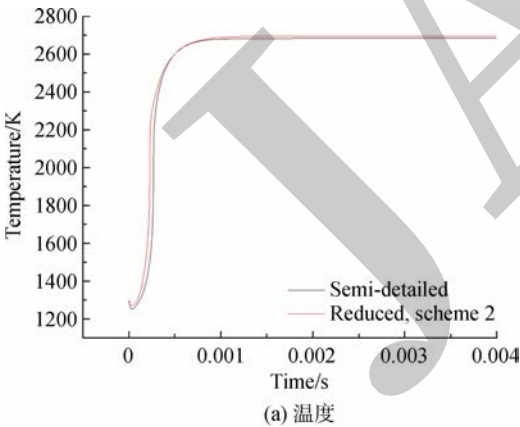


图 6 简化机理和半详细机理的燃烧中间产物的比较  
( $\Phi=1, p=1\times10^5$  Pa,  $T=1300$  K)  
Fig. 6 Combustion intermediates comparison of the reduced mechanism and semi-detailed mechanism  
( $\Phi=1, p=1\times10^5$  Pa,  $T=1300$  K)

3 骨架简化机理的验证

本文设计了燃烧 RP-3 航空煤油的试验系统来进一步验证该简化机理。试验系统越简单,外界影响因素越少,所得试验数据越可靠,因此本文设计的试验系统为 RP-3 航空煤油预混预蒸发本生灯燃烧火焰。图 7(a)表示 RP-3 航空煤油本生灯预混预蒸发燃烧火焰试验系统简图,图 7(b)是本次试验系统实物图。空气流量由 LZB-6 型玻璃转子体积流量计(量程为 1.5~15 L/min,测温精度为 $\pm 2.5\%$ )来显示,RP-3 煤油的流量是由微量油泵来控制。在本生灯出口喷出以前煤油和空气都会分别被加热,液体航空煤油会完全蒸发,并与空气形成预混预蒸发可燃混气,从本生灯出口喷出,经点燃后,可燃混气开始燃烧。本文分别测量该燃烧火焰的温度、最终燃烧产物以及中间燃烧产物等试验数据沿本生灯中心轴向的变化规律,用于对 RP-3 航空煤油三组分替代燃料的方案二简化机理提供相应的试验数据。主要试验内容包括:①在给定工况条件下采用单点双铂铑热电偶(直径为 0.1 mm,测温范围为 0~2073 K 测温精度为 $\pm 0.5\%$ ),测量本生灯燃烧火焰温度,并通过坐标架的移动,测量本生灯中心轴线温度分布;②在给定工况条件下采用单点取样管(取样管头部采用外径为 3 mm,内径为 2 mm 的不锈钢毛细管弯曲 90°制成)和烟气分析仪(XGF-404 型烟气连续排放分析系统),测量本生灯燃烧火焰中心轴线上的燃烧产物质量分数分布,主要包括 O<sub>2</sub> 和

CO<sub>2</sub>。表 1 为本文本生灯预混燃烧器试验的工况。

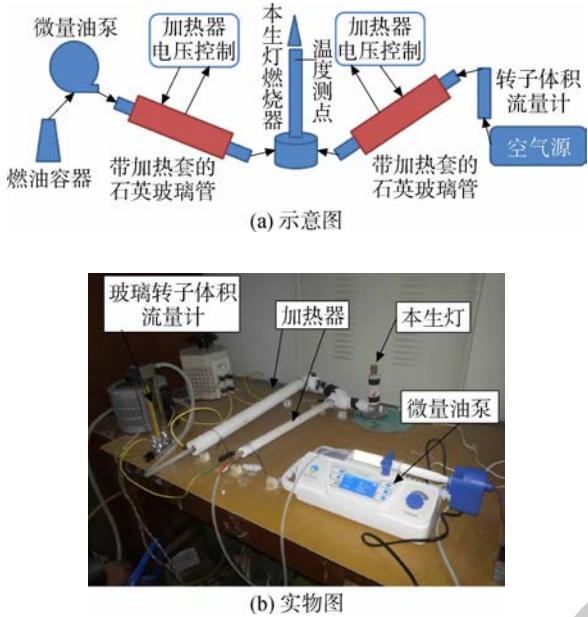


图 7 试验系统示意图和实物图

Fig. 7 Schematic diagram and physical diagram experimental system

表 1 本生灯燃烧器试验工况

Table 1 Experimental cases of Bunsen burner

| 参数              | 数值     |
|-----------------|--------|
| 航空煤油体积流量/(mL/h) | 100    |
| 空气体积流量/(L/h)    | 800    |
| 进口温度/K          | 430    |
| 进口压力/ $10^5$ Pa | 1      |
| 油气比             | 0.0754 |

本文采用 CFD 计算软件 Fluent 对以上测量的本生灯预混预蒸发燃烧火焰进行数值模拟,采用方案二简化机理来模拟 RP-3 航空煤油化学反应,从而利用试验数据来验证 RP-3 航空煤油三组分替代燃料的方案二简化机理用于实际工程燃烧问题的可靠性。

图 8(a)为本文数值模拟采用的本生灯物理模型。本生灯物理模型出口直径为 12 mm,高为 20 mm,在外面设置了一个灯罩,灯罩高为 600 mm,直径为 350 mm。计算模型的边界条件为:本生灯出口为质量流量进口,外面灯罩的空气进口为压力进口,灯罩的出口为压力出口(为了模拟现实情形,灯罩的进出口压力大小设置都为  $1\times10^5$  Pa),灯罩壁面采用绝热壁面模型。图 8(b)为本生灯物理模型的计算网格,计算网格为全非结构

化网格,经网格无关性验证后,最终选取的计算网格数目为 243 万,网格最小尺寸为 0.5 mm,最大尺寸为 6 mm。数值计算中使用的数学模型分别为标准  $k-\epsilon$  湍流模型、组分输运模型、涡耗散概念模型(EDC),压力,动量,能量和组分等方程的离散采用 2 阶迎风进度进行离散,湍流动能及其耗散率使用 1 阶迎风格式进行离散。根据 Fluent 的数值模拟收敛标准,设定本文模拟结果的进出口流量相对误差小于 1%、除连续性方程残差小于  $1.0\times10^{-6}$  外,其他残差均小于  $1.0\times10^{-3}$  即判断该数值模拟为收敛。

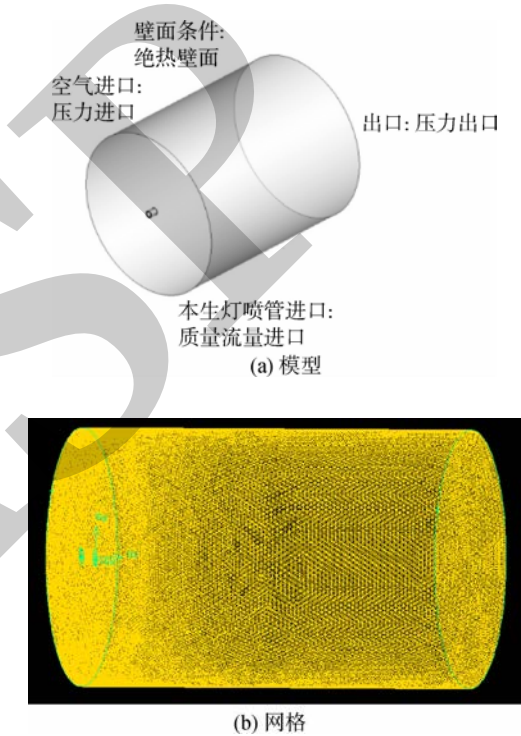


图 8 计算模型和网格

Fig. 8 Calculation model and mesh

图 9(a)为本生灯中心截面  $x=0\text{ m}$  ( $yOz$  平面)上的温度云图,从图中可以看出预混燃气从本生灯出口喷出,经点燃后迅速燃烧,形成火焰锋面,使温度不断升高,形成高温区,在红色高温区之前存在一个小的三角形薄层区域是本生灯火焰的内焰,内焰中间喷嘴出口有未燃小三角形区域属于焰心,随后由于燃烧强度降低,气流向后推进以及周围冷空气掺混等共同作用,温度开始下降,最后趋于环境温度;图 9(b)左边是本生灯中心截面  $x=0\text{ m}$  ( $yOz$  平面)上的 OH 质量分数( $w_{OH}$ )云图,右边是此试验工况下火焰照片。从右图中可以清楚的看出呈三角形蓝色的本生灯预混燃烧的内焰薄层区域,和比较淡的橘黄色扩散火焰。蓝

色的辐射来源于高温区域被激活的 CH 自由基,橘黄色辐射主要为碳粒辐射<sup>[20]</sup>。OH 质量分数常被用于判断火焰面位置以及燃烧释热率的大小,从左图中可以看出,比较大的质量分数颜色包含 3 种,中间红色质量分数最大的区域属于预混火焰面区域,外层绿色的三角形薄层属于扩散火焰面区域,中间黄色区域属于它们的过渡区域。红色和黄色区域对应着右图中的蓝色火焰区域,外层绿色区域对应着右图中橘黄色火焰区域,而内层喷嘴出口 OH 质量分数很低的小三角形区域属于焰心未燃区域。

图 9(c)是本生灯中心截面  $x=0\text{ m}$  ( $yOz$  平面)上的  $\text{CO}_2$  质量分数  $w_{\text{CO}_2}$  云图。在本生灯出口燃料裂解成小分子中间产物,并最终主要通过 CO 转化成  $\text{CO}_2$  (即反应步  $\text{CO}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{CO}_2+\text{H}$ ),OH 的质量分数直接决定了  $\text{CO}_2$  的生成速率和质量分数分布,而一般来说在火焰锋面 OH 的质量分数是最高的,故在火焰锋面之后会形成  $\text{CO}_2$  高质量分数区,并且由于 OH 同样是燃烧强度和高温区的标志,其形成的  $\text{CO}_2$  高质量分数区域和高温区以及氧气低质量分数区在形状和结构组成上是相似的。随着距离的增加, $\text{CO}_2$  会扩散到空气中,从而导致质量分数下降;图 9(d)是本生灯中心截面  $x=0\text{ m}$  ( $yOz$  平面)上的  $\text{O}_2$  质量分数云图,在火焰面内  $\text{O}_2$  质量分数几乎为零,这是

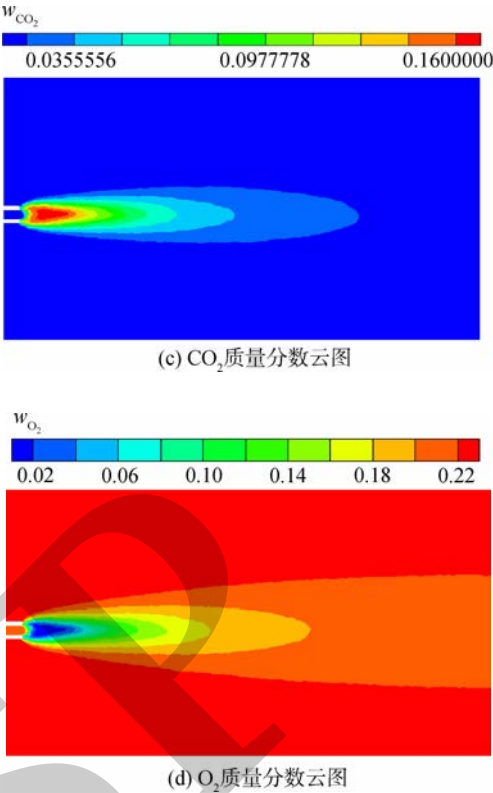
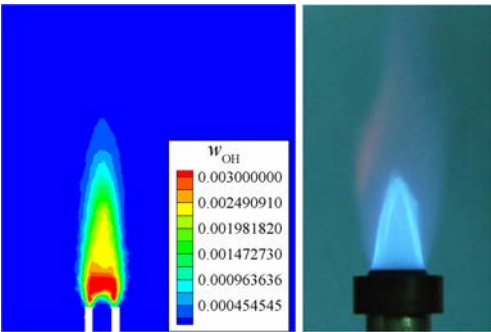
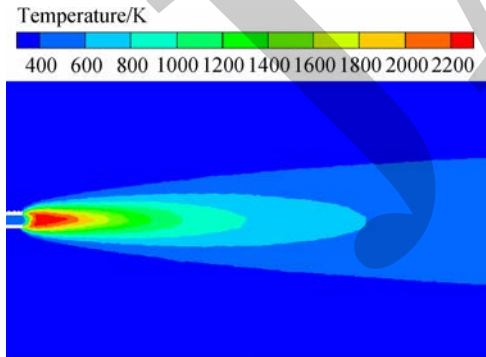


图 9 本生灯火焰中心面的数值模拟结果云图  
Fig. 9 Numerical simulation results of Bunsen flame at the central axial plane

由于燃烧氧化反应消耗了大量的氧气,因此在火焰锋面内氧气全部被消耗。随着混合气的推进燃料质量分数不断减少,氧气的消耗也在降低并且在火焰面外由于射流的卷吸作用,会卷吸周围的空气,因此氧气的质量分数又逐渐升高,另外由于气体流动的影响,中心轴线的区域的氧气质量分数始终会低于周围环境中的氧气质量分数。

图 10(a)为中心轴线温度值与试验值对比,坐标为 0 m 表示的是喷嘴出口位置,在温度上升区域,各个取样点的试验值与计算值几乎吻合,上升趋势也一样,在  $x=0.024\text{ m}$  达到最大值。下降趋势也基本吻合,说明试验值测量的火焰长度和数值计算的火焰长度基本一样。出现在最大值处的计算结果比试验值高的原因有两个:①测量设备的测量误差;②数值计算是在一个理想的环境下进行的,而试验时会受到环境中大气的干扰。从而导致数值计算出来的最高温度比试验测量得到的最高温度要稍高。

图 10(b)为本生灯中心轴线上  $\text{CO}_2$  质量分数变化图,数值模拟结果和试验数据在轴线上  $\text{CO}_2$  质量分数变化规律是大致相同的,在本生灯出口燃料裂解成小分子中间产物,并最终主要通过



CO 转化成  $\text{CO}_2$  (即反应步  $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$ ), OH 的质量分数直接决定了  $\text{CO}_2$  的生成速率和质量分数分布,而一般来说在火焰锋面 OH 的质量分数是最高的,故在火焰锋面之后会形成  $\text{CO}_2$  最高质量分数区域。此次数值模拟和试验都显示  $\text{CO}_2$  最高质量分数最高的位置出现在 0.06 m。

图 10(c)为本生灯中心轴线上  $\text{O}_2$  质量分数变化图,从图中可知,方案二简化机理计算结果和试验数据变化趋势基本相同,在本生灯出口预混预蒸发燃油混气剧烈燃烧,大量消耗氧气,形成一个氧气真空区(其中本次试验结果的低氧气质量分数区域在轴线长度方向上为  $x=0.019\text{m}$  到  $x=0.05\text{m}$ ;方案二简化机理数值模拟的低氧气质量分数区域在轴线长度方向上为  $x=0.02\text{m}$  到  $x=0.04\text{m}$ ),随后由于燃料的减少,氧气消耗降低,其质量分数不断升高,在火焰尾部趋于环境氧气质量分数,在  $x=0.05\text{m}$  以后数值模拟的氧气质量分数曲线和试验结果上升趋势一样。从图 10 的 3 张图可以发现,本文所构建的方案二 84 组分简化机理在本生灯中轴线上的温度、 $\text{O}_2$  质量分数和  $\text{CO}_2$  质量分数的数值模拟结果与试验数据基本吻合,因此说明本文发展得到的 84 组分简化机理基本能较好地模拟 RP-3 航空煤油预混预蒸发本生灯燃烧火焰的燃烧性能。

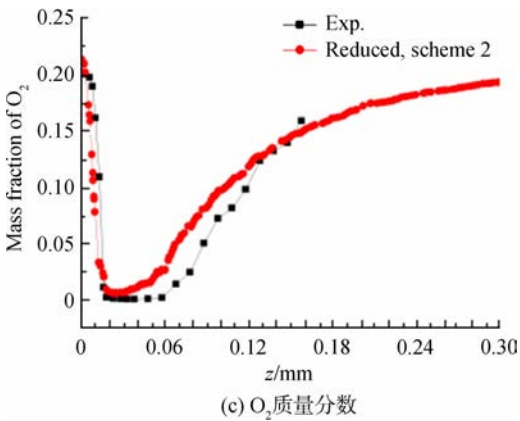


图 10 本生灯火焰中心线不同参数的模拟结果和试验数据对比图  
Fig. 10 Comparison of simulation result and experiment result of different parameters at the central axial of Bunsen burner

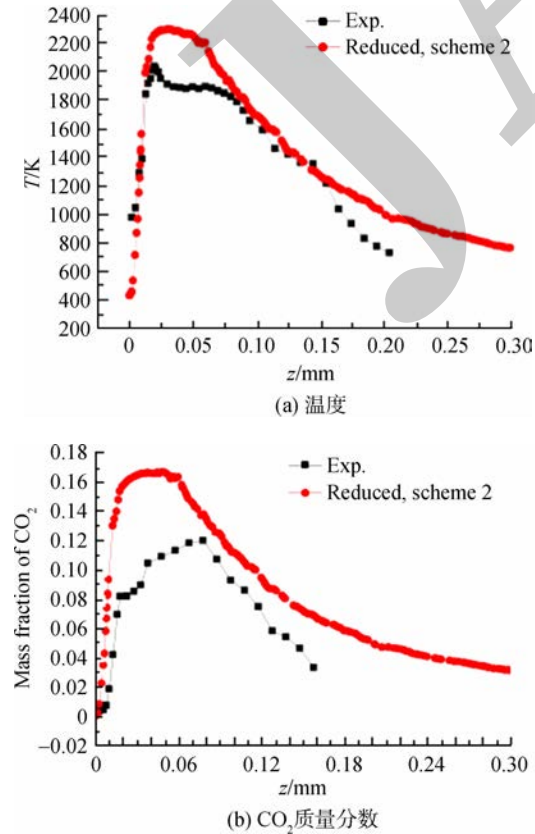
4 结 论

本文首先对 RP-3 航空煤油三组分替代燃料的半详细化学反应动力学模型(包括 257 个组分和 874 步基元反应)进行相应的简化,获得其简化机理。分别采用了两种简化方案,方案一采用直接关系图法 DRG,构建了 109 组分 423 步基元反应。方案二在方案一构建的骨架机理上继续采用基于误差传播的直接关系图 DRGEP 法,并且采用基于 CSP 重要指标的反应移除方法,最终构建了 84 组分 271 步基元反应,其组分数减少了 67.3%、基元反应步数减少了 69%。利用点火延迟试验数据和半详细机理计算结果的验证下,方案二简化机理点火延迟时间吻合较好。同时分别对层流火焰传播速度、温度和重要产物,利用方案二简化机理和半详细机理进行相互验证,说明方案二简化机理与半详细机理两者吻合较好。因此说明方案二简化机理在保证一定的计算精度下,能大幅度降低计算成本。

最后以 RP-3 航空煤油预混预蒸发本生灯燃烧火焰为对象,采用试验数据来验证本文所提出的方案二简化机理,84 组分简化机理的数值模拟结果在本生灯中轴线上的温度、 $\text{CO}_2$  质量分数和  $\text{O}_2$  质量分数都能较好的与试验数据相吻合,并且数值计算时间在工程可接受范围内。因此说明本文所研究构建的 84 组分简化机理在保证计算精度条件下可以用于 RP-3 航空煤油实际工程燃烧问题的数值模拟。

参考文献:

[1] 严传俊,范玮. 燃烧学[M]. 西安:西北工业大学出版社,



- 2005.
- [2] 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 alternative fuel and its chemical reaction dynamics model[J]. Journal of Physical Chemistry, 2015, 31(4): 636-642. (in Chinese)
- [3] VALORANI M, CRETA F, GOUSSIS D, et al. An automatic procedure for the simplification of chemical kinetic mechanisms based on CSP[J]. Combustion and Flame, 2006, 146(1/2): 29-51.
- [4] RABITZ H, KRAMER M A, DACOL D. Sensitivity analysis in chemical kinetics[J]. Annual Review of Physical Chemistry, 1983, 34(1): 419-61.
- [5] LU T F, LAW C K. A directed relation graph method for mechanism reduction[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 1333-1341.
- [6] LAM S H. Using CSP to understand complex chemical kinetics[J]. Combustion Science and Technology, 1993, 89(5/6): 375-404.
- [7] LU T F, LAW C K. Strategies for mechanism reduction for large hydrocarbons: *n*-heptane[J]. Combustion and Flame, 2008, 154(1): 153-163.
- [8] VAJDA S, VALKO P, TURANYI T. Principal component analysis of kinetic models[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 1985, 17(1): 55-81.
- [9] PEPIOT-DESJARDINS P, PITSCH H. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms[J]. Combustion and Flame, 2008, 154(1/2): 67-81.
- [10] SUN W T, CHEN Z, GOU X L, et al. A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(7): 1298-1307.
- [11] LAM S H, GOUSSIS D A. The CSP method for simplifying kinetics[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 1994, 26(4): 461-486.
- [12] CHEN J Y. A general procedure for constructing reduced reaction mechanisms with given independent relations[J]. Combustion Science and Technology, 1988, 57(1/2/3): 89-94.
- [13] XU J Q, GUO J J, LIU A K, 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.
- [14] TANG H C, ZHANG C H, LI P, et al. Experimental study of autoignition characteristics of kerosene[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2012, 28(4): 787-791.
- [15] 王繁, 李象远. ReaxRed, 碳氢燃料机理简化程序: CN0288831[P]. 2014-05-04.
- [16] KEE R J, RUPLEY F M, MILLER J A. Chemkin: II a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics [R]. Sandia Report, SAND89-8009, 1989.
- [17] LUTZ A E, KEE R J, MILLER J A. Senkin: a fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis [R]. Sandia Report, SAND87-8248, 1987.
- [18] 方亚梅, 王全德, 王繁, 等. 正十二烷高温燃烧详细化学动力学机理的系统简化[J]. 物理化学学报, 2012, 28(11): 2536-2542.
- FANG Yamei, WANG Quande, WANG Fan, et al. The systematic simplification of the detailed chemical kinetics mechanism of the high temperature combustion of *n*-dodecane[J]. Journal of Physical Chemistry, 2012, 28(11): 2536-2542. (in Chinese)
- [19] LU T F, LAW C K. Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph: *n*-heptane and iso-octane[J]. Combustion and Flame 2006, 144(1/2): 24-36.
- [20] TURNS S R. 燃烧学导论: 概念与应用[M]. 2 版. 姚强, 李永清, 王宇, 译. 北京: 清华大学出版社, 2009.
- [21] METGHALCHI M, KECK J C. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane and indolene at high pressures and temperature[J]. Combustion and Flame, 1982, 48: 191-210.

(编辑:王碧珺)