

气态煤油超声速燃烧简化化学反应模型*

樊孝峰, 王江峰, 赵法明, 杨天鹏

(南京航空航天大学 航空宇航学院, 江苏 南京 210016)

摘要:为探究超燃冲压发动机燃烧室中煤油燃料燃烧的化学动力学过程,综合采用敏感性分析方法与路径分析方法,针对RP-3航空煤油三组分替代燃料的详细反应模型进行简化,建立一种适用于超声速燃烧流场数值模拟的新型26组分89反应简化燃烧反应模型。采用该简化燃烧模型对RP-3航空煤油替代燃料的点火、燃烧特性进行数值模拟,并与详细反应模型结果和试验数据进行对比较验。此外,将该简化燃烧模型与超声速燃烧流场计算方法相结合,数值分析了典型超燃冲压发动机燃烧室流场内化学动力学特性。研究表明:新型简化燃烧反应模型在不影响数值模拟精度的前提下,有效减少了反应组分与反应方程个数,提高了超声速复杂燃烧流场的数值模拟效率,并且能够准确获得烯烃、炔烃等重要中间燃烧产物以及小分子活性基团的空间分布规律,给出更全面的流场信息。

关键词:超声速燃烧;RP-3航空煤油;化学反应模型;敏感性分析;反应路径分析

中图分类号:V211.3 **文献标志码:**A **文章编号:**1001-2486(2019)01-048-10

Reduced kinetic model for supersonic combustion of vaporized kerosene

FAN Xiaofeng, WANG Jiangfeng, ZHAO Faming, YANG Tianpeng

(College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: In order to explore the chemical kinetics process of kerosene combustion in scramjet combustor, a detailed chemical reaction model for the combustion of RP-3 surrogate fuel was simplified to obtain a new reduced model (26 species and 89 reactions) based on the sensitivity analysis and reaction path analysis, and the combustion characteristics of supersonic reacting flow field were depicted. The ignition and combustion characteristics of this surrogate fuel under various conditions were simulated by using the reduced reaction model, and the simulation results were compared with the experimental data and the calculated results by the detailed reaction model. Furthermore, numerical simulations were implemented by using a coupled nonequilibrium reaction solver with the proposed reduced model, and the combustion characteristic of a scramjet combustor with single-side cavity was analyzed in detail. The results indicate that the reduced model can represent the ignition and combustion characteristic of the detailed model to some extent. And the proposed reduced chemical kinetic model predicts the myriad details of the reacting flow field accurately, including the distributions of major species, such as alkenes and cycloalkanes. At the same time, the number of species involved in the reduced model is much fewer, and the reduced model can improve the combustion simulation efficiency.

Keywords: supersonic combustion; RP-3 aviation kerosene; chemical reaction model; sensitivity analysis; reaction path analysis

为准确模拟超燃冲压发动机燃烧室内的燃料燃烧细节,有必要对燃料燃烧的化学反应机理进行深入研究。航空煤油作为目前广泛使用的碳氢燃料,由一系列碳氢化合物组成,国内外学者在研究过程中通常采用单一组分或多组分混合物作为航空煤油的替代燃料,并提出了与之相对应的详细化学反应机理^[1-4]。详细机理通常包含成百上千个组分与化学反应以保证其在各个工况下均能准确反映燃料燃烧过程中的动力学特性。但是,

从计算效率的角度考虑,这些庞大的反应机理很难直接应用于实际超燃冲压发动机燃烧室内的计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)数值模拟中。

近年来,许多国内外学者对碳氢燃料详细化学反应机理的简化进行了深入的研究。Violi等^[5]采用6组分混合物(10%异辛烷、15%甲基环己烷、15%间二甲苯、30%正十二烷、5%四氢萘、20%正十四烷)作为航空煤油JP-8替代物,

* 收稿日期:2017-11-06

基金项目:南京航空航天大学重大项目培育基金资助项目(NP2018402)

作者简介:樊孝峰(1989—),男,湖南冷水江人,博士研究生,E-mail:fanxiaofeng@nuaa.edu.cn;

王江峰(通信作者),男,教授,博士,博士生导师,E-mail:wangjf@nuaa.edu.cn

研究了该替代燃料在无焰逆流扩散火焰中的燃烧特性,并采用反应路径分析方法对其详细机理进行了简化。Niemeyer 等^[6]采用直接关系图法对由 940 组分 3878 反应构成的正庚烷详细机理进行了简化,得到包含 108 组分 406 反应的简化机理,并在较宽的压力、温度和化学当量比范围内对比了两种反应机理预测得到的正庚烷点火延迟时间,二者得到了相吻合的结果。Chang 等^[7]通过机理解耦方法得到了包含 40 组分 141 反应的正癸烷简化机理,研究了不同工况下(包括点火延迟时间和层流火焰速度在内)的正癸烷点火及燃烧特性。曾文等^[8-9]针对国产 RP-3 航空煤油提出了一种由正癸烷、甲苯与丙基环己烷三种组分组成的替代燃料,建立了由 150 组分 591 基元反应构成的详细反应机理,并采用敏感性分析方法,对详细机理进行了简化,最终形成的简化化学反应机理包含 88 组分 281 反应。钟北京等^[10]采用基于特征值分析的计算奇异摄动法,针对由 118 组分 527 反应构成的正癸烷详细反应机理进行简化,得到了一个含 38 组分 34 反应的总包反应机理。

徐佳琪等^[3]在对 RP-3 航空煤油的成分分析的基础上提出以 73% 正十二烷($C_{12}H_{26}$)、14.7% 1,3,5-三甲基环己烷(C_9H_{18})、12.3% 正丙基苯(C_9H_{12})三组分混合物作为其替代燃料,建立了一种包含 2237 组分 7959 基元反应的详细化学反应机理,模拟了燃料在激波管中的点火延迟并与试验结果进行了对比验证。本文基于上述详细机理,综合采用敏感性分析方法和路径分析方法对其进行了合理简化。

1 详细反应机理的简化

实际超燃冲压发动机燃烧室工作静温范围为 1000 ~ 2500 K,压力范围为 1 ~ 3 个大气压强^[11-12]。考虑实际超燃冲压发动机的工作条件,针对 3 组分 RP-3 替代燃料在当量比 ϕ 为 1.0、2.0,初始温度为 1000 ~ 1500 K,压力为 1 个、2 个标准大气压条件下的点火延迟时间进行了数值模拟,分析各个反应对稳态温度的敏感性。敏感性系数能清晰地反映出燃料燃烧过程中关键反应步对燃料点火的促进或抑制作用,总结各工况下的温度敏感性系数,将 1 作为敏感性系数的阈值,删除不重要的基元反应。同时,为保证反应模型中包含燃料燃烧的主要燃烧产物,分析了反应达到稳态时各组分的摩尔分数,忽略摩尔分数小于 0.01% 的组分及其相关的基元反应。简化后得到的反应模型由 78 组分和 226 反应构成。

为进一步简化上述反应模型,在当量比为 1.0,初始温度分别为 1100 K、1500 K,压力为 1 个标准大气压的条件下,对直链烃、环烷烃以及芳香烃的燃烧过程进行模拟,采用反应路径分析方法筛选出燃烧过程中的主要反应路径。

替代燃料中的正十二烷为典型的直链烃。图 1 给出了正十二烷燃烧反应路径,通过数值描述了各反应路径在正十二烷分解过程中所占比重,为方便比较,取正十二烷消耗率达到 20% 时所得模拟结果,其中初始温度 1500 K 所得结果用粗体表示。从图中可以看出:①长链分子的反应路径很多,以烷烃分子中 C—H 单键断裂生成的烷基为主,少量烷烃 C—C 单键断裂后生成或大或小的烷基;②随温度的升高,C—C 单键断裂所得到的生成物所占比重逐渐增大。因此,可将烷烃分子的分解概括为以下两条路径:①烷烃分子与各自自由基发生脱氢反应生成烷基,烷基在高温条件下发生 β -分解反应,这也是正十二烷分解的主要反应路径;②高温条件下,烷烃分子中 C—C 单键断裂生成大小不一的烷基,烷基在高温条件下发生 β -分解反应,生成更小分子的烷基与烯烃。结合上述两条直链烃主要的分解反应路径,可以得到正十二烷热裂解反应,如表 1 所示。

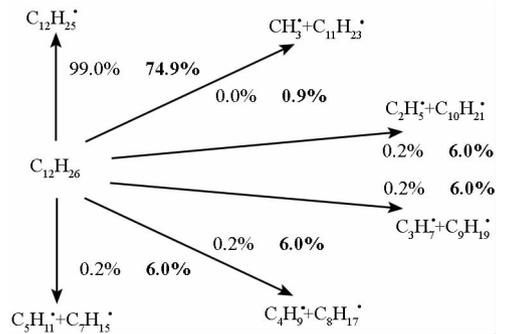


图 1 正十二烷反应路径分析

Fig. 1 Reaction path analysis for n-dodecane

表 1 正十二烷热裂解反应

Tab. 1 Reactions of n-dodecane pyrolysis

序号	化学反应表达式
1	$C_{12}H_{26} + H \rightleftharpoons C_{12}H_{25} + H_2$
2	$C_{12}H_{26} + O \rightleftharpoons C_{12}H_{25} + OH$
3	$C_{12}H_{26} + OH \rightleftharpoons C_{12}H_{25} + H_2O$
4	$C_{12}H_{26} \rightleftharpoons 6C_2H_4 + 2H$
5	$C_{12}H_{26} \rightleftharpoons 5C_2H_4 + 2CH_3$
6	$C_{12}H_{25} \rightleftharpoons 6C_2H_4 + H$
7	$C_{12}H_{25} + H \rightleftharpoons 5C_2H_4 + 2CH_3$
8	$C_{12}H_{25} + O_2 \rightleftharpoons 6C_2H_4 + HO_2$
9	$C_{12}H_{25} + CO \rightleftharpoons 6C_2H_4 + CHO$

图 2 给出了丙基苯分解反应路径, 为方便比较, 取丙基苯消耗率达到 20% 时所得模拟结果。从图中可以看出: ①取代基部分的反应与直链烷烃类似: 1100 K 时, 分解反应以丙基苯脱氢反应为主, 生成的苯丙基进而发生 β -分解生成苯甲基或苯乙烯; 1500 K 时, 取代基部分更容易发生 β -分解, 生成乙烯与苯甲基。②丙基苯分解过程虽然有多条反应路径, 但最重要的中间产物为苯基。综合上述分析, 本文将丙基苯的分解概括为以下两条路径: ①丙基苯取代基上发生脱氢反应与 β -分解生成苯甲基, 然后取代基上 C—C 单键断裂生成苯基; ②取代基上 C—C 单键直接断裂生成苯基。苯基可与各取代基反应, 生成环戊二烯和一氧化碳, 通过重复“加氧—脱—一氧化碳”这一过程, 环戊二烯逐渐裂解为乙炔、一氧化碳等小分子物质^[13]。高温条件下, 苯氧基、环戊二烯等中间产物寿命较短^[14], 因此本文认为苯基直接分解得到最终产物乙炔和一氧化碳。最终得到正丙基苯热裂解反应, 如表 2 所示。

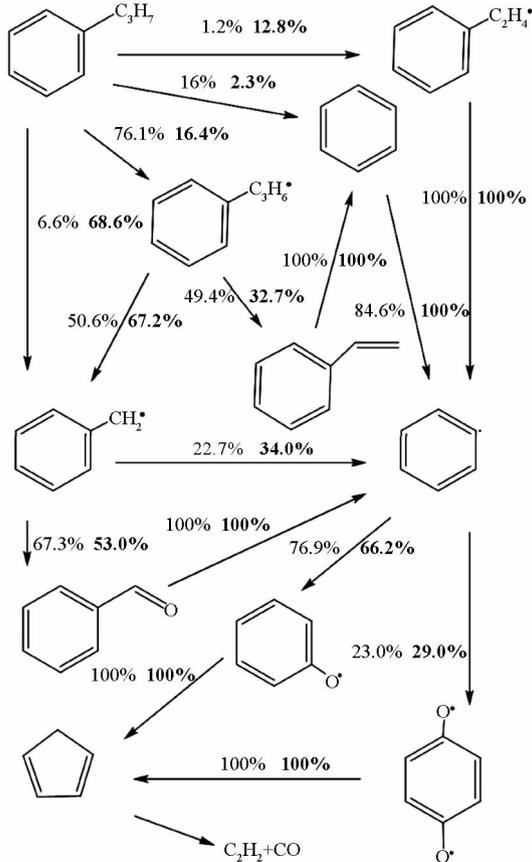


图 2 丙基苯反应路径分析

Fig. 2 Reaction path analysis for n-propylbenzene

替代燃料采用 1,3,5-三甲基环己烷来代替航空煤油中所包含的环烷烃。图 3 给出了 1,3,5-三甲基环己烷分解反应路径, 为方便比较, 取其消耗率达到 20% 时所得模拟结果。从图中可

表 2 丙基苯热裂解反应

Tab. 2 Reactions of n-propylbenzene pyrolysis

序号	化学反应表达式
1	$C_9H_{12} + H \rightleftharpoons C_7H_7 + 2CH_3$
2	$C_9H_{12} + O_2 \rightleftharpoons C_7H_7 + C_2H_4 + HO_2$
3	$C_9H_{12} + CO \rightleftharpoons C_7H_7 + C_2H_4 + CHO$
4	$C_9H_{12} \rightleftharpoons C_6H_5 + C_2H_4 + CH_3$
5	$C_7H_7 + O \rightleftharpoons 2C_2H_2 + C_2H_3 + CO$
6	$C_7H_7 + O \rightleftharpoons C_6H_5 + HCHO$
7	$C_6H_5 + 2O \rightleftharpoons C_2H_2 + C_2H_3 + 2CO$

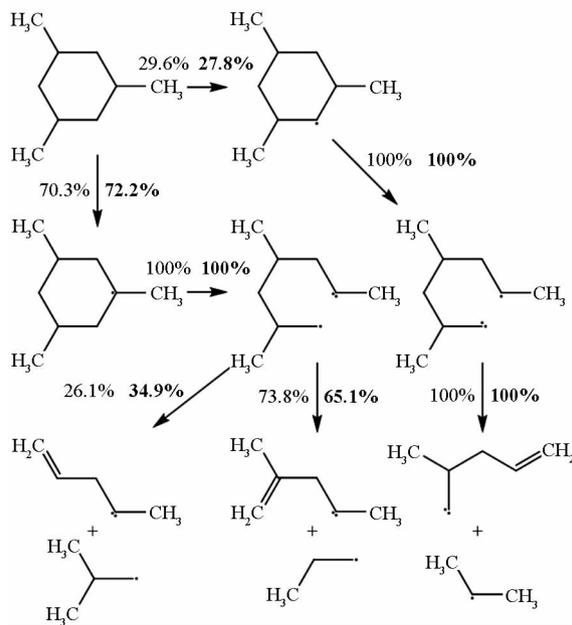


图 3 1,3,5-三甲基环己烷反应路径分析

Fig. 3 Reaction path analysis for 1,3,5-trimethylcyclohexane

以看出: 对于多取代基环烷烃, 甲基与环烷环连接的碳原子相连的 C—C 单键与 C—H 单键容易断裂发生开环和脱氢反应, 这是其键能较小的缘故^[15]; 开环后的反应与直链烷烃类似, 即在高温条件下发生 β -分解, 最终生成小分子的烯烃与烷基^[16]。综合以上反应路径分析, 在忽略分解过程中产生的各种异构体的合理假设下, 可以认为环烷烃脱氢开环后形成的烷基与烯烃在高温条件下迅速发生 β -分解反应, 生成更小分子的烷基与烯烃。最终得到 1,3,5-三甲基环己烷热裂解反应, 如表 3 所示。

合并上述正十二烷、正丙基苯、1,3,5-三甲基环己烷简化反应模型, 并在此基础上添加 H₂、CO、C₂H₂、C₂H₄ 氧化过程中所包含的基元反应, 最终得到 RP-3 航空煤油燃烧过程的简化反应模型, 共包含 26 组分 89 反应。

表 3 1,3,5-三甲基环己烷热裂解主要反应

Tab.3 Reactions of 1,3,5-trimethylcyclohexane pyrolysis

序号	化学反应表达式
1	$C_9H_{18} + O_2 \rightleftharpoons C_9H_{17} + HO_2$
2	$C_9H_{18} + H \rightleftharpoons C_9H_{17} + H_2$
3	$C_9H_{18} + O \rightleftharpoons C_9H_{17} + OH$
4	$C_9H_{18} + OH \rightleftharpoons C_9H_{17} + H_2O$
5	$C_9H_{17} + H \rightleftharpoons 3C_2H_4 + C_2H_3 + CH_3$
6	$C_9H_{17} + 2H \rightleftharpoons 2C_2H_4 + C_2H_2 + 3CH_3$

2 简化模型的修正

针对替代燃料在初始压力为 2 个标准大气压,当量比 1.0 时,初始温度分别为 1100 K、1200 K、1300 K、1400 K 条件下的稳态温度进行了敏感性分析。图 4 给出了简化模型中 14 个敏感性系数绝对值较大的反应,其中敏感性系数为正代表该反应促进点火,系数为负则抑制点火。由敏感性分析结果可知,在整个温度范围内,对稳态温度影响较大的基元反应通常伴随着 OH、CH、CH₃、CH₂、HO₂、H₂O₂ 等自由基的生成与消耗。此外,总包反应的引入使得简化模型忽略了部分组分和基元反应,因此模型的修正主要针对总包反应进行。以 $C_9H_{17} + H \rightleftharpoons 3C_2H_4 + C_2H_3 + CH_3$ 为例,其不同初始温度下的温度敏感性系数有很大的差异。初始温度为 1100 K 时,大分子碳氢化合物的裂解反应体现出了较大的温度敏感性系数,随着温度的增加,其敏感性系数迅速减小,当温度高于

1400 K 时基本可以忽略不计。为增强模型在 1100 K 时对点火延迟时间的预测,可增大该总包反应的反应速率系数,同时不影响对 1400 K 的预测结果。本文依据温度敏感性系数大小与正负,对简化模型中总包反应的反应速率系数相应增加或减小一定倍数,以修正点火延迟时间的预测值,通过逐一多次修正化学反应速率系数,使得在超燃冲压燃烧室的工况范围内,简化模型可以准确预测燃料的点火延迟时间。反应速率系数 k 表达式为:

$$k = AT^n e^{-E/(RT)}$$

式中: A, n, E 为常数; R 为通用气体常数。替代燃料高温裂解主要反应以及修正后的反应速率系数如表 4 所示。

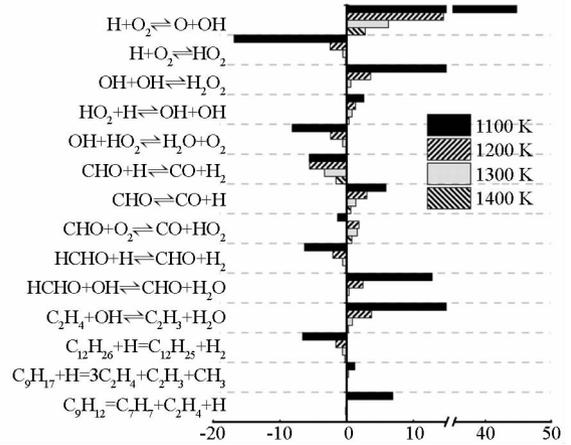


图 4 不同初始温度下主要反应的温度敏感性系数
Fig.4 Temperature sensitivity analysis of main reactions at four different initial temperatures

表 4 修正后主要反应速率系数

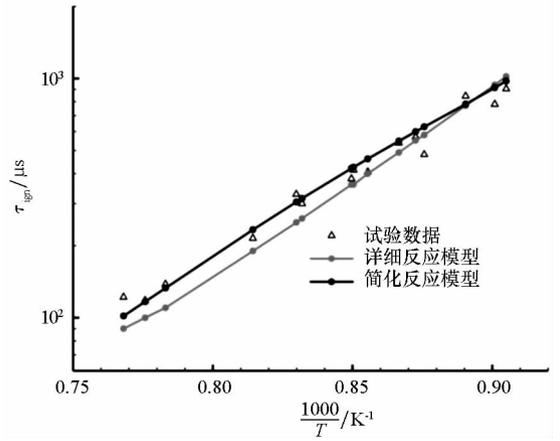
Tab.4 Modified kinetic parameters of major reactions

序号	化学反应表达式	$A/(cm^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1})$	n	$E/(J \cdot mol^{-1})$
1	$C_{12}H_{26} \rightleftharpoons 5C_2H_4 + 2CH_3$	8.30E+22	-1.6	88 270.0
2	$C_{12}H_{25} + H \rightleftharpoons 5C_2H_4 + 2CH_3$	8.20E+15	0.0	28 590.0
3	$C_{12}H_{25} + O_2 \rightleftharpoons 6C_2H_4 + HO_2$	2.00E+14	0.0	27 000.0
4	$C_{12}H_{25} + CO \rightleftharpoons 6C_2H_4 + CHO$	4.00E+06	0.0	1800.0
5	$C_9H_{12} \rightleftharpoons C_6H_5 + C_2H_4 + CH_3$	3.17E+17	0.0	70 000.0
6	$C_9H_{12} + H \rightleftharpoons C_7H_7 + 2CH_3$	4.00E+16	0.0	73 500.0
7	$C_9H_{12} + O_2 \rightleftharpoons C_7H_7 + C_2H_4 + HO_2$	5.30E+20	-2.0	78 500.0
8	$C_9H_{12} + CO \rightleftharpoons C_7H_7 + C_2H_4 + CHO$	5.10E+20	0.0	73 500.0
9	$C_7H_7 + O \rightleftharpoons 2C_2H_2 + C_2H_3 + CO$	6.03E+17	0.0	70 000.0
10	$C_7H_7 + O \rightleftharpoons C_6H_5 + HCHO$	1.00E+13	0.0	0.0
11	$C_6H_5 + 2O \rightleftharpoons C_2H_2 + C_2H_3 + 2CO$	5.00E+15	2.0	1000.0
12	$C_9H_{17} + H \rightleftharpoons 3C_2H_4 + C_2H_3 + CH_3$	2.51E+06	2.0	3000.0
13	$C_9H_{17} + 2H \rightleftharpoons 2C_2H_4 + C_2H_2 + 3CH_3$	3.51E+13	0.0	30 000.0

3 简化模型的验证

3.1 点火特性验证

为验证简化反应模型对点火延迟时间的描述是否准确,分别采用 2237 组分 7959 反应详细化学反应机理与本文提出的 26 组分 89 反应简化化学反应模型模拟了温度范围为 1100 ~ 1500 K,压力为 2 个、4 个标准大气压,化学当量比为 1.0、2.0 条件下 RP-3 航空煤油燃烧的点火延迟时间。图 5 给出了不同压力 P (单位为标准大气压) 与当量比 ϕ 条件下两种模型模拟得到的替代燃料点火延迟时间,并与相应工况下的试验数据进行了对比^[17]。图 5(a) 给出了 2 个标准大气压下,当量比 1.0 时点火延迟时间 τ_{ign} 随温度 T 的变化,由图中可知,点火延迟时间随温度的增加而减小;对比图 5(a) 与图 5(b) 可知,在同一压力下,随着当量比的增加,点火延迟时间增大,这是由于在当量比为 2.0 的富油状态下,部分燃料无法完全燃烧,热量释放速度减缓,说明简化反应模型准确模拟了燃料在相对缺氧的条件下发生裂解生成烯、炔等不饱和基团这一过程;对比图 5(a) 和



(c) $P=4, \phi=1.0$

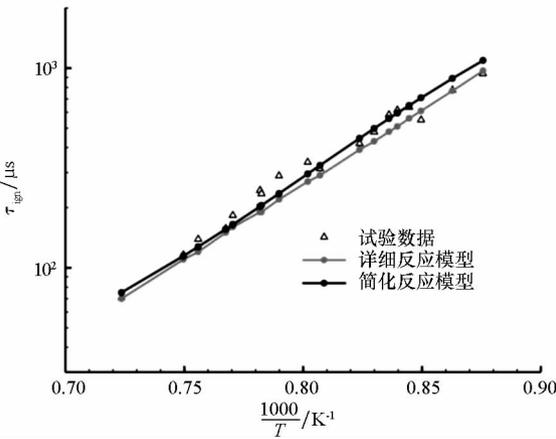
图 5 不同工况下 RP-3 航空煤油替代燃料的点火延迟时间

Fig. 5 Ignition delays of surrogate fuel for RP-3 at different conditions

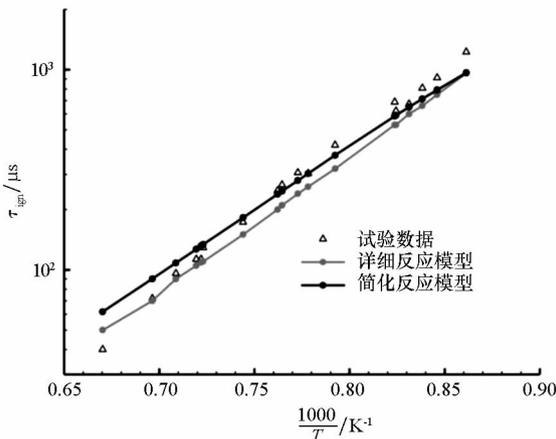
图 5(c) 可知,在当量比为 1.0 的条件下,随着压力的增加,点火延迟时间减小。与试验数据的对比结果表明,在各个工况下采用简化反应模型计算得到的替代燃料点火延迟时间与试验数据误差基本小于 10%,故认为在当量比 1.0 ~ 2.0、压力 2 ~ 4 个标准大气压的范围内,26 组分 89 反应模型可以很好地模拟 RP-3 航空煤油的点火延迟时间。

3.2 燃烧特性验证

为验证简化反应模型的燃烧特性,在温度 390 K、压力为 0.1 ~ 0.5 MPa、当量比为 0.8 ~ 1.5 的条件下,模拟了 RP-3 航空煤油的层流火焰速度 u ,并与相应工况下的试验数据进行了对比分析^[9],如图 6 所示。由图 6 可知层流火焰速度随压力的增加而降低。此外,同一压力下,随当量比



(a) $P=2, \phi=1.0$



(b) $P=2, \phi=2.0$

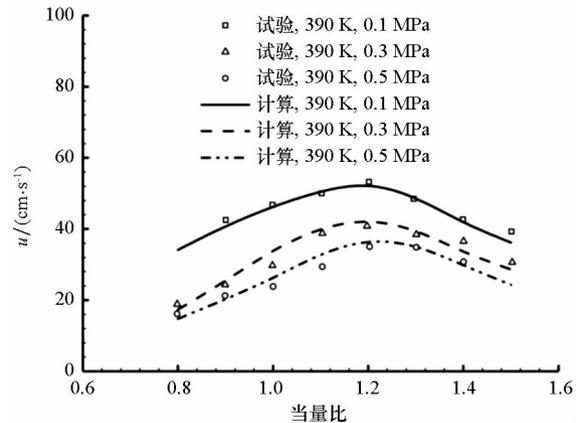


图 6 不同工况下 RP-3 航空煤油替代燃料的层流火焰速度

Fig. 6 Laminar flame speed of surrogate fuel for RP-3 at different conditions

增加,层流火焰速度有先增大后减小的趋势,其速度最大值出现在当量比 1.1 ~ 1.3 之间。与试验数据的对比结果表明,在各个工况下采用简化反应模型计算所得的层流火焰速度与试验数据相比误差均小于 10%,可以认为在当量比 0.8 ~ 1.5、压力 0.1 ~ 0.5 MPa 范围内,本文分析得到的 26 组分 89 反应模型可以准确模拟 RP-3 航空煤油的层流火焰速度特征。

图 7 给出了当量比为 1.0 时,替代燃料中三种燃烧反应物 $C_{12}H_{26}$, C_9H_{18} , C_9H_{12} 摩尔分数随时间的变化。详细机理预测结果中燃烧反应物的消耗明显快于简化模型预测结果。这是由于简化模型采用总包反应来概括各反应物分解过程,忽略了部分中间反应,减少了反应物的反应路径,导致反应物消耗速率降低。

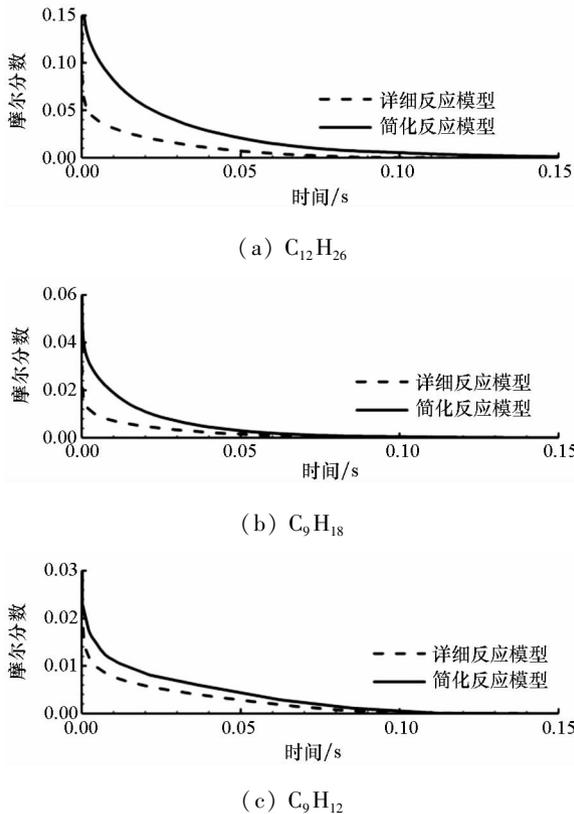


图 7 RP-3 燃烧反应物对比

Fig. 7 Comparisons of reactants in RP-3 combustion

图 8 给出了当量比 0.8 ~ 1.4 条件下,主要燃烧产物以及稳态温度随当量比的变化规律。由图 8(a) 可知,反应器中的稳态温度随当量比的增大先增大后减小,并在 1.1 ~ 1.2 之间达到峰值。采用简化反应模型模拟所得稳态温度与详细机理模拟结果基本一致,误差最大不超过 0.3%。图 8(b) 比较了采用不同反应模型数值模拟得到的主要燃烧产物 CO , CO_2 , H_2 , H_2O 摩尔分数随当量比的变化。对比图 8(a) 和图 8(b) 可以看出,

在贫油条件下,燃料充足,燃烧反应随着氧化剂 O_2 的增加而更加剧烈,相应的稳态温度升高;而在富油条件下,氧化剂不足,燃料无法完全燃烧,反应生成的 H_2 累积下来,燃烧过程中释放的总热量减小,相应的稳态温度降低。综合上述分析结果,表明在所选当量比范围内,虽然两种机理在预测燃烧反应物浓度随时间的变化上有一定差异,但是燃烧稳态温度与燃烧产物浓度随当量比的变化规律基本重合,说明经本文方法简化获得的 26 组分 89 反应简化模型能在一定范围内代替详细反应机理,反映替代燃料的稳态燃烧特性。

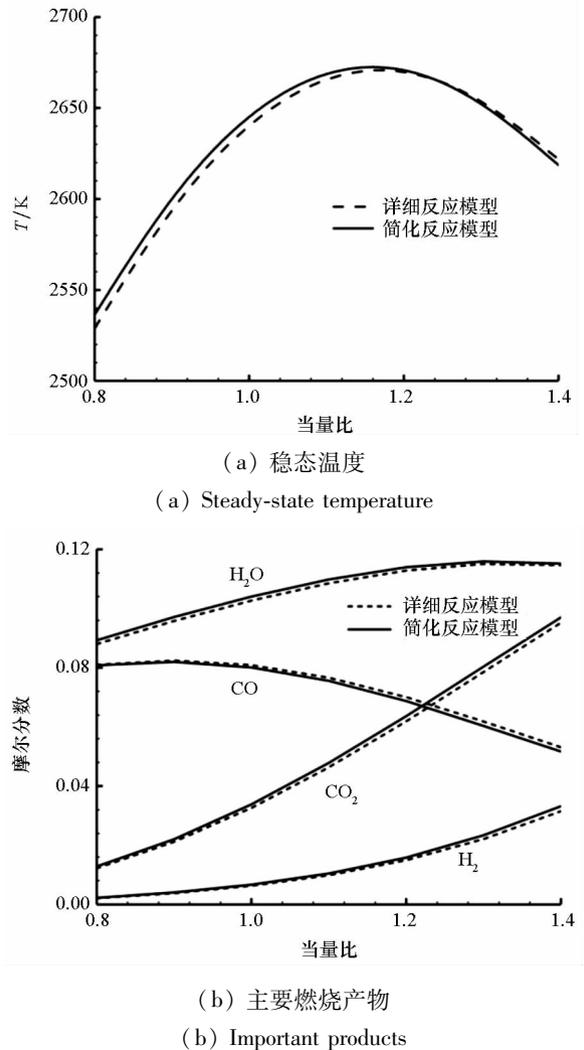


图 8 燃烧产物以及稳态温度随当量比的变化规律

Fig. 8 Comparisons of important products and steady-state temperature at different equivalence ratios

3.3 超燃冲压发动机燃烧室内化学动力学特性分析

针对超燃冲压发动机单凹腔燃烧室建立了相应的数值模型,进行了 RP-3 航空煤油燃烧流场的数值模拟,并与试验结果进行了对比。三维燃烧室尺寸与构型取自文献[18],如图 9 所示。计

算网格在凹腔前缘、凹腔后缘、喷嘴以及壁面附近进行了加密,为含 557 176 单元的块结构网格。计算区域包含整个试验段,燃烧室入口尺寸为 $54.5 \text{ mm} \times 75 \text{ mm}$,其构型、凹腔分布位置、喷嘴规格均与试验条件保持一致。数值计算中采用引导氢气进行点火以保证燃料稳定点火燃烧,当燃料燃烧可以维持火焰稳定循环时,关闭引导氢气。气态煤油通过凹腔上游的喷嘴以声速注入燃烧室,安装位置距凹腔前缘 8 mm ,每排 3 个喷嘴,间距 18 mm 。来流空气保持总温 1430 K 、总压 3.6 MPa 、马赫数 3.46 ,气态煤油保持静温 780 K ,当量比 $\phi = 1.06$ 。

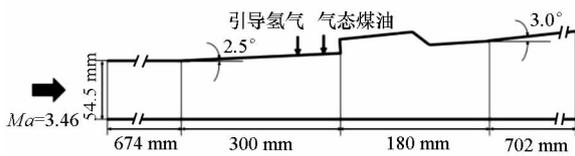


图 9 燃烧室构型

Fig. 9 Combustor model configuration

本文数值模拟采用基于混合网格的有限体积法,控制方程为含化学反应源项的多组元 Navier-Stokes 方程,空间离散采用中心格式,湍流模型采用 Menter^[19]提出的两方程 SST $k-\omega$ 模型以满足超声速燃烧湍流流场计算的需求,具体方法详见文献[20-22],采用本文分析简化后的 26 组分 89 反应 RP-3 燃烧反应模型描述超声速发动机燃烧室内气态煤油燃烧过程。为提高计算效率,在 PCs-Cluster 集群上进行了分布式并行计算。计算的硬件环境为 16 个节点的集群并行运算系统,每一节点的 CPU 主频 1.6 GHz ,流场收敛共耗时 37.6 h 。

图 10 分别给出了冷流与燃烧流场燃烧室内不同位置截面内的温度及声速线分布。从图 10(a)中可以看出,在冷流流场中,燃料由喷嘴注入主流,在射流与凹腔的共同作用下出现局部的亚声速区,该区域具有相对较低的流速与较高的温度,有利于燃料的掺混与燃烧。对比图 10(a)与图 10(b)可以发现,在燃烧流场中,燃料喷流与燃料燃烧释热耦合作用使得流场中形成了更大的亚声速区,燃料首先在凹腔上游的亚声速区域内发生剧烈燃烧,产生的高温气体随流动向凹腔以及燃烧室下游扩散,最终在整个燃烧室内形成稳定燃烧区域。图 11 给出了燃料燃烧过程中羟基自由基(OH)质量分数在流场中的分布。可以看出燃烧产物的分布与图 10(b)中温度分布类似:喷流燃烧火焰一部分通过边界层的亚

声速部分沿壁面向上游发展,一部分随主流向下游流动。过程中,剧烈燃烧引起当地温度的急剧上升,随之产生的高温气体沿主流向下游发展并一直延伸到燃烧室出口,使得燃烧室内部 OH 等活性基团的浓度维持在较高水平,进一步加速燃料的分解,当释热量达到动态平衡时,可以维持火焰稳定燃烧。

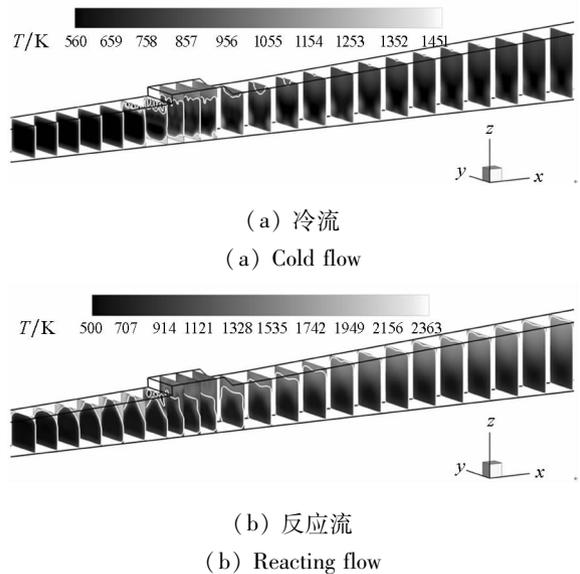


图 10 温度分布以及声速线

Fig. 10 Temperature contours together with sonic line

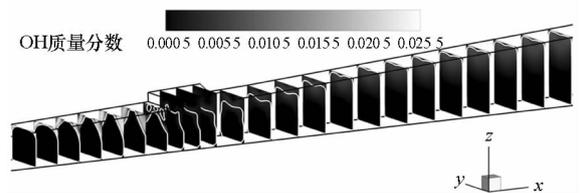


图 11 羟基自由基分布

Fig. 11 Contours of hydroxyl radical

图 12 比较了冷流流场与燃烧流场在燃烧室对称面上($y=0.0375 \text{ m}$ 处)3 个位于凹腔附近不同截面的温度分布。其中 $x=0.95 \text{ m}$ 燃料喷嘴附近,喷流与主流的相互作用强烈,其温度分布表明,流场温度在亚声速区域迅速升高,说明燃料燃烧主要发生在亚声速区域。此外,由于燃料刚离开喷嘴,燃料与空气之间的混合相对较差,喷流核内燃料浓度较高,处于富油状态,燃烧强度较低,而喷流与来流形成的交界面上空气浓度较高,处于贫油状态,燃烧强度较高,从而使得温度呈现出中心低、两侧高的分布形态。对比不同截面的温度分布可以发现,随着流动向下游发展,燃料与空气的混合增强,燃烧区域也逐渐由亚声速区域向超声速区域推移,在 $x=1.5 \text{ m}$ 处,燃烧已经扩散至整个超声速区域。

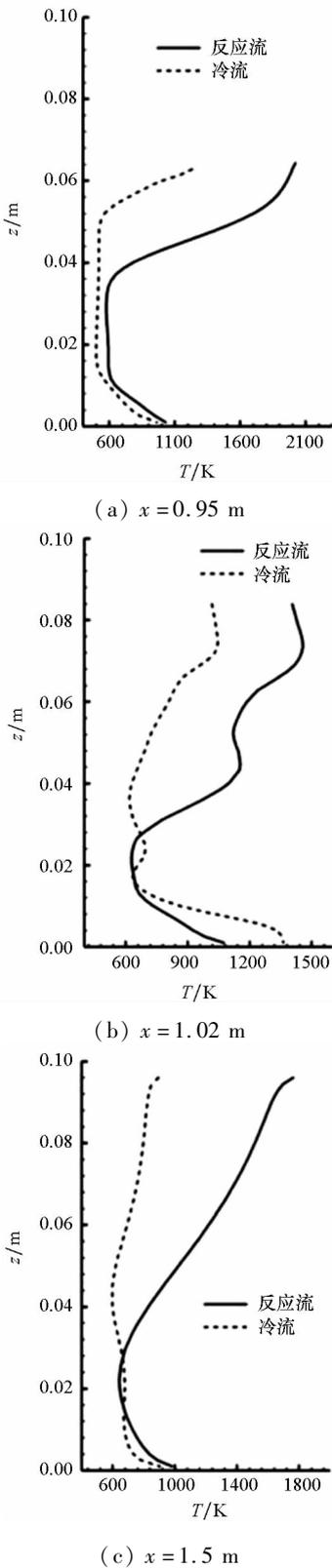


图 12 沿燃烧室对称面温度分布

Fig. 12 Temperature distributions along the symmetry plane

在碳氢燃料燃烧流场中,CH 常用以判断反应最初开始的时刻^[23], C_2H_4 是 β -分解反应的重要产物^[13]。图 13 给出了燃烧室对称面上不同流向位置的上述两种燃烧重要中间产物的质量分数分布。结果显示两种组分浓度分布存在较大差

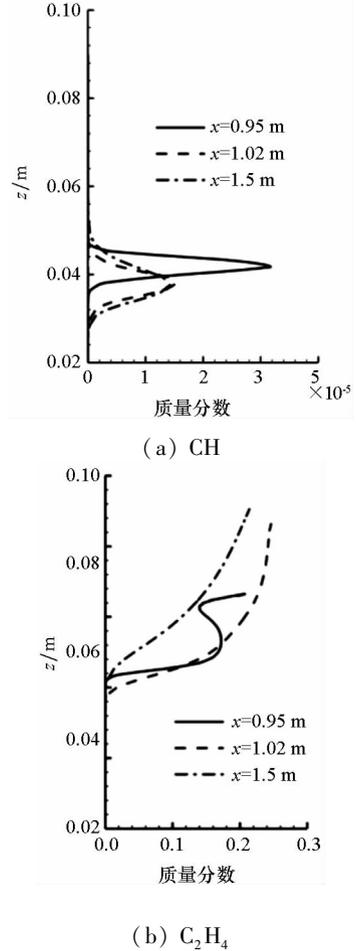


图 13 沿燃烧室对称面主要燃烧中间产物分布

Fig. 13 Intermediate products distributions along the symmetry plane

异:CH 主要位于燃烧反应剧烈的区域,与图 10 中主流与喷流交界面位置相对应; C_2H_4 在凹腔内部($x = 1.02 \text{ m}$ 处)浓度较高,这是由于部分燃料通过凹腔剪切层的不稳定运动进入凹腔,局部流场中氧化剂含量偏低,燃料燃烧不充分,反应以高温条件下的 β -分解反应为主。

图 14 给出了采用两种不同的化学反应简化模型预测得到的燃烧室侧壁面静压分布(图中 P 表示壁面静压, P_{ref} 表示来流压强)与试验数据的对比:模型 1 是 Wang^[24] 提出的广泛使用的航空煤油总包反应简化模型,采用 $C_{12}H_{24}$ 作为航空煤油的平均分子式,用总包反应 $C_{12}H_{24} + O_2 \rightarrow CO + H_2$ 概括煤油的高温分解过程,用 16 个基元反应描述 CO 与 H_2 的氧化燃烧过程;模型 2 是本文提出的简化化学反应模型。可以发现,燃烧室壁面静压在 $x = 0.47 \text{ m}$ 位置开始显著上升,这是由于喷流主流干扰与燃烧反应释热引起了壁面压力升高,这部分升高的压力通过边界层的亚声速部分向燃烧室上游传递。此外,由于喷嘴距离凹腔较近,在燃料剧烈燃烧与喷流干扰的耦合作用下,产

生了复杂的流动结构,因而在 $0.9 \text{ m} \leq x \leq 1.1 \text{ m}$ 区域内壁面静压存在剧烈的波动,峰值分别位于燃料喷流和凹腔后缘附近。从图 14 中可以看出,采用新型简化模型的数值模拟结果与试验结果及总包反应简化模型预测结果均吻合较好,表明新型简化模型可以准确捕捉该工况下的剧烈的压力变化,预测壁面静压。

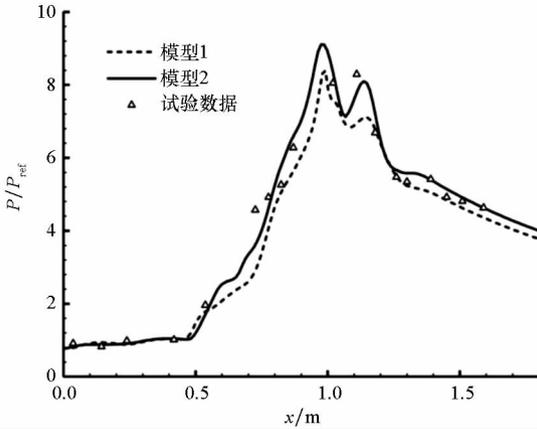


图 14 沿燃烧室侧壁面中心线静压分布
Fig. 14 Static pressure distributions along the side wall centerline

图 15 比较了两种简化化学反应模型预测的总温 T_0 分布。相比于模型 1,模型 2 预测了相对较高的总温分布,说明模型 2 燃烧反应释放的热量更多。差异产生的原因包含在以下两个方面:①模型 2 采用由直链烃、环烷烃、芳香烃三类碳氢化合物构成的替代燃料,与模型 1 相比更准确地反映了航空煤油的物理化学特性。②模型 1 仅采用总包反应 $\text{C}_{12}\text{H}_{24} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO} + \text{H}_2$ 概括煤油的高温分解过程,喷嘴附近大量存在的 H_2 会在一定程度上抑制模型 1 燃料的分解,使得整体燃烧释热偏少,相应的温度偏低;模型 2 详细考虑了煤

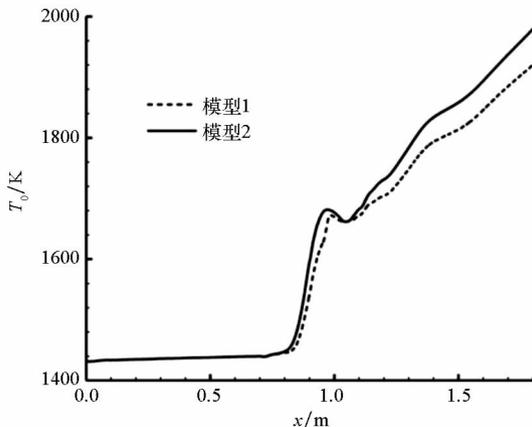


图 15 沿燃烧室对称面中心线温度分布
Fig. 15 Temperature distributions along the symmetry plane centerline

油燃烧过程中可能存在的脱氢反应 $\text{RH} + (\text{H}, \text{O}, \text{OH}) \longrightarrow \text{R} \cdot + (\text{H}_2, \text{OH}, \text{H}_2\text{O})$ 与 β -分解反应 $\text{RH} + (\text{H}, \text{O}, \text{OH}) \longrightarrow \text{R}' \cdot + \text{C}_2\text{H}_4$,在引导氢燃烧产生的自由基作用下促进这些反应的进行,能量释放过程更为完整,使得燃料的裂解程度更高,相应的温度偏高。

4 结论

1) 在高温高压条件下,大分子烷烃、环烷烃、芳香烃的裂解过程可以忽略部分中间产物,概括为烃基直接分解为乙烯和甲基,通过调整总包反应速率系数模拟简化过程中忽略的中间产物对燃料燃烧特性影响;

2) 本文建立的简化反应模型可以很好地预测在当量比 $1.0 \sim 2.0$ 、压力 $2 \sim 4$ 个标准大气压范围内替代燃料的点火延迟时间以及当量比 $0.8 \sim 1.5$ 、压力 $0.1 \sim 0.5 \text{ MPa}$ 范围内替代燃料的层流火焰速度;

3) 采用本文分析的简化反应模型得到的燃料燃烧稳态温度、产物浓度与详细反应模型结果吻合,表明该简化反应模型能准确反映替代燃料的燃烧特性,可在较大参数范围内代替详细模型;

4) 新型简化反应模型可以应用于超声速煤油复杂燃烧流场的数值模拟,模拟结果与试验数据相符较好;

5) 在当前当量比条件下,活性基团 (OH, CH 等) 主要分布在喷流与主流的交界面上,反映出燃烧室内部燃烧反应剧烈的区域,而凹腔内部由于局部流场中氧化剂含量偏低,反应以高温条件下的 β -分解反应为主,流场中具有较高浓度的烷基与烯烃。

参考文献 (References)

- [1] Dagaut P, El Bakali A, Ristori A. The combustion of kerosene; experimental results and kinetic modelling using 1-to 3-component surrogate model fuels [J]. Fuel, 2006, 85(7/8): 944-956.
- [2] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.
- [3] 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)
- [4] 王慧汝, 金捷, 王静波, 等. 正癸烷燃烧机理及航空煤油点火延迟动力学模拟 [J]. 高等学校化学学报, 2012, 33(2): 341-345.

- WANG Huiru, JIN Jie, WANG Jingbo, et al. Combustion mechanism of n-decane at high temperatures and kinetic modeling of ignition delay for aviation kerosene [J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2012, 33(2): 341-345. (in Chinese)
- [5] 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.
- [6] Niemeyer K E, Sung C J, Raju M P. Skeletal mechanism generation for surrogate fuels using directed relation graph with error propagation and sensitivity analysis[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(9): 1760-1770.
- [7] Chang Y C, Jia M, Liu Y D, et al. Development of a new skeletal mechanism for n-decane oxidation under engine-relevant conditions based on a decoupling methodology[J]. Combustion and Flame, 2013, 160(8): 1315-1332.
- [8] 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)
- [9] 刘宇, 曾文, 马洪安, 等. RP-3 航空煤油 3 组分模拟替代燃料燃烧反应机理[J]. 航空动力学报, 2016, 31(9): 2055-2064.
- LIU Yu, ZENG Wen, MA Hongan, et al. Combustion reaction mechanism of three-component simulation surrogate fuel for RP-3 kerosene [J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(9): 2055-2064. (in Chinese)
- [10] 钟北京, 文斐. 基于特征值分析的正癸烷骨架和总包简化机理[J]. 物理化学学报, 2014, 30(2): 210-216.
- ZHONG Beijing, WEN Fei. Skeletal and reduced mechanisms of n-decane simplified with eigenvalue analysis [J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2014, 30(2): 210-216. (in Chinese)
- [11] Ferri A. Mixing-controlled supersonic combustion[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1961, 5(5): 301-338.
- [12] Segal C. The scramjet engine: processes and characteristics[M]. USA: Cambridge University Press, 2009.
- [13] Colussi A J, Benson S W. The very low-pressure pyrolysis of 2-phenylethylamine. The enthalpy of formation of the aminomethyl radical [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 1977, 9(2): 307-316.
- [14] 张克松. 柴油机燃烧的数值模拟研究[D]. 济南: 山东大学, 2013.
- ZHANG Kesong. Numerical investigation of diesel combustion[D]. Jinan: Shandong University, 2013. (in Chinese)
- [15] 于珊, 张久顺, 魏晓丽. 环烷烃催化裂解生成乙烯和丙烯反应探析[J]. 石油学报(石油加工), 2013, 29(3): 475-481.
- YU Shan, ZHANG Jiushun, WEI Xiaoli. Exploration and analysis on ethylene and propylene formation in naphthene catalytic cracking [J]. Acta Petrolei Sinica (Petroleum Processing Section), 2013, 29(3): 475-481. (in Chinese)
- [16] Lechert H, Meyer A, Bezouhanova C, et al. Conversion of methylcyclopentane on H-ZSM 5 zeolites [J]. Journal of Molecular Catalysis, 1986, 35(3): 349-354.
- [17] 唐洪昌, 张昌华, 李萍, 等. 煤油自点火特性的实验研究[J]. 物理化学学报, 2012, 28(4): 787-791.
- TANG Hongchang, ZHANG Changhua, LI Ping, et al. Experimental study of autoignition characteristics of kerosene[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2012, 28(4): 787-791. (in Chinese)
- [18] 钟战, 王振国, 孙明波. 凹腔布置方案对气化煤油超声速燃烧特性的影响[J]. 国防科技大学学报, 2016, 38(2): 1-5.
- ZHONG Zhan, WANG Zhenguo, SUN Mingbo. Effects of cavity arrangement on characteristics of supersonic combustion of vaporized kerosene [J]. Journal of National University of Defense Technology, 2016, 38(2): 1-5. (in Chinese)
- [19] Menter F R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications [J]. AIAA Journal, 1994, 32(8): 1598-1605.
- [20] 张向洪, 伍贻兆, 王江峰. HLLC + 格式在高超声速热化学非平衡流场中的应用[J]. 南京航空航天大学学报, 2011, 43(2): 154-158.
- ZHANG Xianghong, WU Yizhao, WANG Jiangfeng. Numerical simulation of thermo-chemical non-equilibrium hypersonic flows using HLLC + scheme [J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2011, 43(2): 154-158. (in Chinese)
- [21] 刘晨, 王江峰, 伍贻兆. 激波诱导燃烧模拟中轴对称边界数值异常研究[J]. 航空动力学报, 2009, 24(6): 1219-1228.
- LIU Chen, WANG Jiangfeng, WU Yizhao. Study on the abnormality of the axial-symmetric boundary in simulation of shock-induced combustion[J]. Journal of Aerospace Power, 2009, 24(6): 1219-1228. (in Chinese)
- [22] 樊孝峰, 王江峰, 赵法明. Roe 格式在多组元燃烧流场数值模拟中的应用[J]. 南京航空航天大学学报, 2016, 48(3): 347-351.
- FAN Xiaofeng, WANG Jiangfeng, ZHAO Faming. Numerical simulation of multi-component reacting flow using Roe scheme[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2016, 48(3): 347-351. (in Chinese)
- [23] Ciezki H K, Adomeit G. Shock-tube investigation of self-ignition of n-heptane-air mixtures under engine relevant conditions [J]. Combustion and Flame, 1993, 93(4): 421-433.
- [24] Wang T S. Thermophysics characterization of kerosene combustion[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2001, 15(2): 76-80.