

# 燃烧机理构建的极小化反应网络 方法: C<sub>2</sub>燃料燃烧

申屠江涛<sup>1</sup>, 李宜蔚<sup>1</sup>, 陆彦戎<sup>1</sup>, 李娟琴<sup>1,2</sup>, 毛业兵<sup>2,3</sup>, 李象远<sup>1,2</sup>

(1. 四川大学化学工程学院, 2. 空天动力燃烧与冷却教育部工程研究中心,  
3. 机械工程学院, 成都 610065)

**摘要** 针对目前C<sub>2</sub>燃料反应机理中存在的诸多问题, 本文采用极小化反应网络方法, 在特定化学分辨率条件下构建了乙烯、乙烷和乙醇等典型C<sub>2</sub>燃料的燃烧反应机理. 构建的C<sub>2</sub>单组分机理具有简洁的反应网络, 采用可逆反应形式, 并对反应方向在形式上进行了统一. 在动力学参数方面, 采用经典Arrhenius方程(A, E<sub>a</sub>)双参数形式, 在保证物理意义的同时有利于参数优化. C<sub>2</sub>机理构建过程中避免了机理简化步骤, 能够大幅减少物种数和反应数. 动力学模拟结果表明, 构建的C<sub>2</sub>燃烧反应机理在保持较小尺寸的同时有较高的可靠性, 并为机理的实际工程应用降低计算成本带来便利.

**关键词** 燃烧机理; 极小化反应网络; 化学分辨率; 可逆反应; C<sub>2</sub>燃料

中图分类号 O643.12 文献标志码 A doi: 10.7503/cjcu20230386

## Combustion Mechanism Development Based on Minimized Reaction Network Method: C<sub>2</sub> Fuel

SHENTU Jiangtao<sup>1</sup>, LI Yiwei<sup>1</sup>, LU Yanrong<sup>1</sup>, LI Juanqin<sup>1,2</sup>,

MAO Yebing<sup>2,3\*</sup>, LI Xiangyuan<sup>1,2\*</sup>

(1. College of Chemical Engineering,

2. Engineering Research Center of Combustion and Cooling for Aerospace Power, Ministry of Education,

3. School of Mechanical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

**Abstract** The increasing number of species and reactions in the combustion mechanisms has caused inconvenience to the engineering application of turbulent combustion simulation. The minimized reaction network method was adopted to develop combustion mechanisms for typical C<sub>2</sub> fuels such as ethylene, ethane and ethanol under specific chemical resolution. Each C<sub>2</sub> single mechanism features a compact reaction network with reversible reaction. Moreover, the direction of all reactions was unified in form. For kinetic parameters, the form of classical Arrhenius equation with two parameters (A, E<sub>a</sub>) was adopted. This choice ensures physical significance while facilitating parameter optimization. The mechanism reduction process was avoided in the development of the C<sub>2</sub> mechanisms, while the number of species and reactions were significantly decreased. The simulation results indicate that the C<sub>2</sub> combustion mechanisms developed in this work exhibit high reliability while maintaining small scales, which may bring convenience to the practical engineering application of the mechanisms by reducing computational costs.

收稿日期: 2023-08-29. 网络首发日期: 2023-11-17.

联系人简介: 李象远, 男, 博士, 教授, 主要从事理论化学和燃烧化学研究. E-mail: xyli@scu.edu.cn

毛业兵, 男, 博士, 副研究员, 主要从事燃烧反应动力学研究. E-mail: maoyb@scu.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金(批准号: 91741201)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China(No.91741201).

**Keywords** Combustion mechanism; Minimized reaction network; Chemical resolution; Reversible reaction;  
C<sub>2</sub> fuel

目前, C<sub>2</sub>燃料在燃烧反应动力学的研究中占据着重要的位置,一方面, C<sub>2</sub>燃料在实际燃烧装置中已经有了较多的应用<sup>[1-3]</sup>,另一方面,作为小分子产物,它们的燃烧机理往往包含在大分子燃料的燃烧动力学研究中,起到重要的支撑作用.近年来, C<sub>2</sub>燃料燃烧反应机理的构建取得了很大进展,极大地丰富了燃烧反应动力学理论,但现有的C<sub>2</sub>燃料燃烧反应机理仍存在一系列问题.

首先,现有的C<sub>2</sub>燃料燃烧反应机理规模庞大,已超出现有的计算能力,不适于工程应用.近年来,量子化学理论和计算机计算能力的发展推动了详细反应网络的研究和反应参数的精确计算.为了提高动力学模型的准确性,研究人员试图扩大机理规模,以便将所有可能的反应途径纳入详细机理<sup>[4]</sup>.其中, C<sub>2</sub>燃料燃烧机理往往以核心机理的形式出现,一般包含了C<sub>0</sub>~C<sub>4</sub>比较常见的燃料和物种,现应用较为广泛的有NUIG1.3(National University of Ireland, Galway)<sup>[4]</sup>, AramcoMech3.0<sup>[5]</sup>, UCSD(University of California, San Diego)<sup>[6]</sup>和USC-II(University of Southern California)<sup>[7]</sup>等机理.也有针对特定C<sub>2</sub>燃料组分开发的机理,如Yang等<sup>[8]</sup>提出的乙烯机理,但往往由于考虑了较为详细的反应路径从而包含较多C<sub>2</sub>及以上的物种,与核心机理的界限比较模糊.燃烧机理发展的最终目标仍然是与流场耦合进行数值计算<sup>[9]</sup>.由于计算能力的限制,燃烧流场的模拟要求动力学机理尽可能简洁,因此,不断扩大的详细机理规模与实际应用目标之间的矛盾变得更加严重.

为了适应现有计算能力,研究人员试图构建C<sub>2</sub>燃料的小尺寸燃烧反应机理.反应形式上最为简约的是总包机理,比较常见的有数值模拟软件Fluent自带的总包机理<sup>[10]</sup>,采用燃料和氧气直接反应生成二氧化碳和水的总包反应,采取了不可逆形式,并且对一些物种限定了反应级数.此外,也有采用半总包形式的燃烧机理,如Singh等<sup>[11]</sup>提出的乙烯机理,首先,乙烯和氧气反应生成一氧化碳和氢气,一氧化碳和氢气再进行后续的反应,该机理总共包含9个物种10个反应.以总包机理和半总包机理为代表的小尺寸机理虽然具有精简的反应过程,但往往没有经过充分的动力学验证,并且对于燃烧过程中间物种化学信息的描述能力有所欠缺.机理简化是一种普遍认可的降低机理尺度的方式,其思路是针对目标燃料和工况,通过特定计算保留重要的反应通道.对于C<sub>2</sub>燃料,比较成功的有将NUIG1.1详细机理简化后得到的骨架机理<sup>[12]</sup>.骨架机理在一定程度上满足了计算能力的需求,但基于数学处理的简化过程会导致机理保真度和物理图像的损失,而且对简化方法和工况选择以及详细机理参数的依赖又使得骨架机理因人而异,燃烧机理的普适性和科学性得不到保证.

目前, C<sub>2</sub>燃料机理的另一个特征是大量采用不可逆反应,包括Fluent总包机理以及其它一些典型机理<sup>[13]</sup>.不可逆反应意味着当反应在反应物和产物达到理论上的化学平衡时,仍然会向着热力学反自发过程进行,这显然不符合热力学的基本原理.如,大量裂解反应,在低温下平衡常数很小,平衡转化率很低,但如按单向反应处理,意味着即使在很低的温度下,稳定燃料分子最后仍会全部变为裂解产物,这样的处理降低了燃烧机理的科学性,在一些较为极端的工况下其结果必然也会产生很大偏差.

此外,在动力学参数的表达形式上,目前, C<sub>2</sub>燃料反应机理中通常采用如下所示的(A, n, E)三参数Arrhenius方程:

$$k = AT^n e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1)$$

式中: A为指前因子(一级反应s<sup>-1</sup>, 二级反应cm<sup>3</sup>·mol<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>, 三级反应cm<sup>6</sup>·mol<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>); T(K)为开氏温度; n为温度指数; k为速率常数(一级反应s<sup>-1</sup>, 二级反应cm<sup>3</sup>·mol<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>, 三级反应cm<sup>6</sup>·mol<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>); E(J/mol)为活化能项; R(8.314 J·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>)为普适气体常数.使用该表达式时,由同一组速率常数(k~T)拟合得到的(A, n, E)参数并不是唯一的<sup>[14]</sup>,这导致动力学参数呈现个性化特征以及温度区间外推趋势不唯一的现象,外推到高温区(难有实验验证数据)将可能导致k值大的偏差; n取值的大范围(从正到负)变化,使得A, E参数不再具有物理意义,反应势垒等微观动力学图像消失,很难根据反应类型直观地判断参数(A, n, E)的合理性.

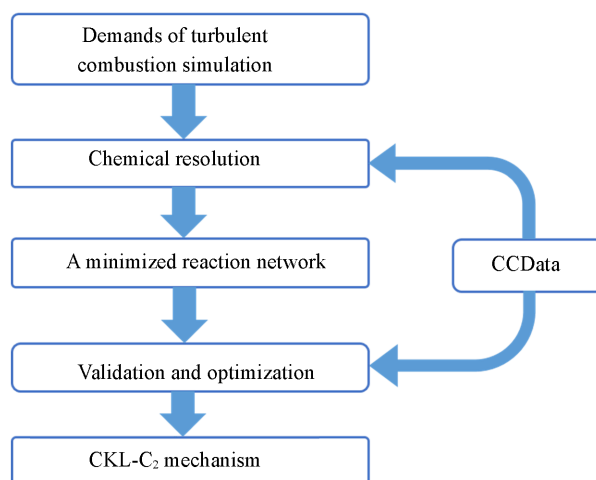
本文针对以上问题,通过前期提出的极小化反应网络方法<sup>[15,16]</sup>,构建了包括乙烯、乙烷以及乙醇

等C<sub>2</sub>燃料的燃烧反应机理,并通过文献报道的实验数据对机理进行了验证.

## 1 燃烧反应机理构建

### 1.1 极小化反应网络建模方法

极小化反应网络方法的建模流程如Scheme 1所示.首先,根据机理构建的化学分辨率需求确定物种,再确定机理独立反应数,并构建极小化反应网络,进而优化确定动力学参数形成最终的机理.四川大学开发的燃烧动力学平台包含的燃烧化学数据库CCData(Combustion chemistry data)<sup>[17]</sup>为物种的参数和机理的优化提供了参考数据支持.该方法在机理构建这一源头上控制物种数和反应数,无需通过机理简化,直接构建小尺度机理.同时该方法构建全部采用可逆反应,动力学参数采用双参数的表达形式,增强了机理的科学性.



Scheme 1 Modeling flowchart of minimized reaction network method

CKL-C<sub>2</sub> mechanism: combustion kinetic mechanism for C<sub>2</sub> fuels with minimized reaction network developed in this work.

1.1.1 确定动力学模型分辨率 根据机理构建需求和大多数湍流燃烧模拟工程应用对物种数的限制,在反应体系中选择合适的化学反应物种,确定机理分辨率(用物种数 $L$ 表示).为了限制物种数,优先排除C<sub>2</sub>以上的双自由基高活性物种和流场测量中难以表征的物种.

1.1.2 确定机理独立反应数和构建极小化反应网络 根据化学势判据,反应达到平衡时,各组元化学势满足:

$$\sum_B A_{i,B} \mu_B = 0 \quad (2)$$

式中: $A_{i,B}$ 为物种B的化学反应计量系数, $\mu_B$ 为物种B的化学势.对已有的详细机理,将体系达到同时平衡时的化学势关系表达为齐次方程组:

$$A\mu = 0 \quad (3)$$

式中: $A$ 为反应计量系数矩阵; $\mu$ 为化学势列矩阵.采用初等行变换获得 $A$ 矩阵的秩 $R_A$ ,即为该机理的独立反应方程数.实际上,独立反应数还可通过下式获得:

$$R_A = L - M \quad (4)$$

式中: $M$ 为原子矩阵的秩,一般对于燃烧机理, $M$ 即为原子种类数.

确定描述复杂燃烧反应体系化学平衡状态所需的最小化学反应数目即独立反应数.独立反应中的物种浓度在不同条件下随时间的演变一般采用质量作用定律进行计算.理论上,一个燃烧体系的动力学过程可使用它的 $R_A$ 个独立反应的正逆反应速率参数来获得.但是,由于有些独立反应可能不是基元反应从而缺乏动力学参数,需要用已知动力学参数的可逆反应来组合替代这些独立反应,这样会导致反应数目适当增加.

1.1.3 通过机理整体优化确定动力学参数 不同于目前燃烧机理反应速率参数普遍使用的式(1),该

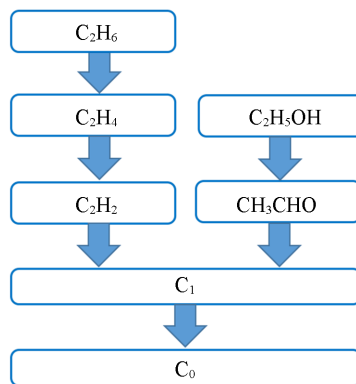
方法坚持采用下式所示的经典 Arrhenius 双参数形式:

$$k = Ae^{\frac{E_a}{RT}} \quad (5)$$

如此处理还原了活化能  $E_a$  的物理意义, 同时避免了三参数公式拟合不当带来的问题, 并且压缩了参数变量的数目. 反应采用的初始动力学参数参考四川大学开发的燃烧动力学平台<sup>[17]</sup>, 最后通过对目标实验数据进行机理验证和参数的适当优化, 得到最终的目标燃料机理.

## 1.2 C<sub>2</sub>燃烧机理的构建

选取的主要燃料分子为 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> 和 C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH. 为了从机理构建源头上控制机理规模, 构建的 C<sub>2</sub> 机理同样针对单组分燃料基于层级构建方法以模块化的方式进行构建, 并对所有涉及的反应在形式上进行了反应方向的规范, 以便于针对特定燃料进行机理抽取. 构建的 C<sub>2</sub> 机理所包含的主要燃料以及主要物种关系如 Scheme 2 所示, C<sub>0</sub>-C<sub>1</sub> 模块采用前期极小化反应网络方法构建的 C<sub>0</sub>-C<sub>1</sub> 机理<sup>[15,16]</sup>. 构建的机理涉及到的物种热力学参数和输运参数来自于具有较高可靠性的 AramcoMech3.0 机理<sup>[5]</sup>, 各单组分燃烧反应机理文件均可通过补充资料或四川大学开发的燃烧动力学平台<sup>[17]</sup>获得.



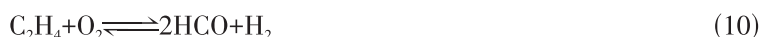
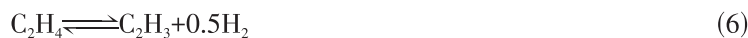
Scheme 2 Main relationship of species for the C<sub>2</sub> mechanism

1.2.1 乙烯机理构建 构建机理时, 考虑 C<sub>2</sub>H<sub>3</sub> 等必需中间物种的同时保证所有物种尽快进入已有的 C<sub>0</sub>-C<sub>1</sub> 机理, 增加了 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 和 C<sub>2</sub>H 这 4 个物种. 由于所采用的物种均由 C, H 和 O 3 种原子组成, 因此, 只需要选定 3 个合适的初始物种, 并保证其它物种均能由这 3 个起始物种生成. 对乙烯燃料燃烧, 将 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, O<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub> 作为独立反应的初始物种是合适的, 因此, 可得到由该 3 个物种和其它物种的化学计量系数矩阵关系(表 1).

Table 1 Independent reactions of C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> as initial components

No.	Species	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	No.	Species	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>
1	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1	0	-0.5	8	H	0	0	0.5
2	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	1	0	-1	9	O	0	0.5	0
3	C <sub>2</sub> H	1	0	-1.5	10	OH	0	0.5	0.5
4	CH <sub>2</sub> O	0.5	0.5	0	11	HO <sub>2</sub>	0	1	0.5
5	HCO	0.5	0.5	-0.5	12	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0	1	1
6	CO	0.5	0.5	-1	13	H <sub>2</sub> O	0	0.5	1
7	CO <sub>2</sub>	0.5	1	-1					

矩阵中的化学计量系数所代表的化学反应计量方程式如下式所示, 这样就得到包含该 16 个物种化学平衡体系的 13 个独立反应:





理论上, 在当前采用的物种框架内,  $\text{C}_2\text{H}_4$  燃料燃烧从初始状态到最终达到体系平衡的动力学过程可以通过这些独立反应的正逆反应速率进行描述. 如果所有独立反应的速率常数已知, 用这些独立反应来形成  $\text{C}_2\text{H}_4$  燃烧机理已经足够. 然而, 由于部分独立反应不是基元反应, 需要用速率常数已知的反应来组合以及替代这些缺乏速率常数的独立反应, 这样的处理会适当地增加机理的尺度. 由于涉及到已有的  $\text{C}_0$ - $\text{C}_1$  机理模块包含的物种和反应, 在对总包反应进行处理时, 不再对该模块的物种和反应进行调整. 问题实际上变成对于包含新增物种的总包反应的处理, 这样也符合层级构建方法和模块化构建方式的思路. 经过合适的筛选和调整, 最终的  $\text{C}_2\text{H}_4$  机理具有 16 个物种和 24 个反应 (不包含  $\text{N}_2$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{He}$ ), 相较包含的  $\text{C}_0$ - $\text{C}_1$  机理模块, 只新增了 4 个物种 10 个反应 (表 2). 在  $\text{C}_2\text{H}_4$  机理针对实验工况的动力学模拟中, 只对该部分新增的反应进行动力学参数的调整和优化, 以保证其它模块涉及的物种和反应不同单组分机理中具有固定性.

Table 2 Added reactions with kinetic parameters of  $\text{C}_2\text{H}_4$  module

Species	Reaction	$A/(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	$E_a/(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$
$\text{C}_2\text{H}_4$	$\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}(+\text{M})$	$2.00 \times 10^{16}$	461010
	Low-pressure limit	$2.60 \times 10^{17}$	403660
	$\text{H}_2/2/\text{H}_2\text{O}/6/\text{CO}/1.5/\text{CO}_2/2/\text{CH}_4/2/\text{Ar}/0.7/$		
	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{HO}_2$	$4.22 \times 10^{14}$	157250
$\text{C}_2\text{H}_3$	$\text{C}_2\text{H}_4\text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$3.77 \times 10^{14}$	27880
	$\text{C}_2\text{H}_3(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}(+\text{M})$	$1.89 \times 10^{13}$	164230
	Low-pressure limit	$3.31 \times 10^{14}$	137520
	$\text{H}_2/2/\text{H}_2\text{O}/6/\text{CO}/1.5/\text{CO}_2/2/\text{CH}_4/2/\text{Ar}/0.7/$		
$\text{C}_2\text{H}_2$	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{HCO}$	$1.85 \times 10^{15}$	0
	$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	$8.00 \times 10^{16}$	0
	$\text{C}_2\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{C}_2\text{H}$	$2.63 \times 10^{15}$	497750
	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + \text{CO}$	$5.86 \times 10^{15}$	153870
$\text{C}_2\text{H}$	$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$	$3.53 \times 10^{15}$	75950
	$\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{CO}$	$5.00 \times 10^{14}$	6270

1.2.2 乙烷机理构建 与乙烯燃料燃烧反应机理的构建方式相同,  $\text{C}_2\text{H}_6$  考虑在  $\text{C}_2\text{H}_4$  的基础上增加新物种进行衔接, 新增物种为  $\text{C}_2\text{H}_6$  和  $\text{C}_2\text{H}_5$ . 由于考虑了  $\text{C}_2\text{H}_6$  裂解生成两个  $\text{CH}_3$  的反应, 而在  $\text{C}_1$  机理中,  $\text{CH}_3$  通过生成  $\text{CH}_2$  进行消耗, 因此, 在  $\text{C}_2\text{H}_6$  最终的机理抽取结果中相比  $\text{C}_2\text{H}_4$  机理增加了  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ,  $\text{CH}_3$  和  $\text{CH}_2$  这 4 个物种.  $\text{C}_2\text{H}_6$  机理共包含 20 个物种 ( $\text{N}_2$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{He}$  除外), 独立反应数为 17. 所构建的  $\text{C}_2\text{H}_6$  机理包含 33 个反应, 相较  $\text{C}_2\text{H}_4$  机理共增加 4 个物种 9 个反应, 其中涉及  $\text{C}_2$  的物种为 2 个, 反应为 6 个, 如表 3 所示.

1.2.3 乙醇机理构建 构建的乙醇燃烧机理在  $\text{C}_0$ - $\text{C}_1$  机理基础上增加了  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ ,  $\text{CH}_3\text{CO}$  和  $\text{CH}_2\text{CO}$  这 5 个物种. 所构建的  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  机理共 20 个物种 (不包含  $\text{N}_2$ ,  $\text{Ar}$  和  $\text{He}$ ), 独立反应数为 17. 最终得到的  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  机理共包含 28 个反应, 相对于  $\text{C}_0$ - $\text{C}_1$  机理新增的 10 个  $\text{C}_2$  反应如表 S1 (见本文支持信息) 所示.

上述构建的乙烯、乙烷和乙醇燃烧机理包含的物种数和反应数与 NUIG1.1 简化骨架机理<sup>[12]</sup> 的

Table 3 Added reactions with kinetic parameters of C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> module

Species	Reaction	$A/(cm^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1})$	$E_a/(J \cdot mol^{-1})$
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (+M) $\rightleftharpoons$ CH <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub> (+M)	1.62×10 <sup>16</sup>	358390
	Low-pressure limit	3.31×10 <sup>19</sup>	302510
	Ar/0.7/H <sub>2</sub> /2/H <sub>2</sub> O/6/CO/1.5/CO <sub>2</sub> /2/CH <sub>4</sub> /2/C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /3/		
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (+M) $\rightleftharpoons$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H(+M)	5.64×10 <sup>16</sup>	420130
	Low-pressure limit	9.36×10 <sup>20</sup>	409050
	Ar/0.7/H <sub>2</sub> /2/H <sub>2</sub> O/6/CO/1.5/CO <sub>2</sub> /2/CH <sub>4</sub> /2/C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> /3/		
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +O <sub>2</sub> $\rightleftharpoons$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +HO <sub>2</sub>	6.02×10 <sup>13</sup>	133380
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +OH $\rightleftharpoons$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O	1.20×10 <sup>13</sup>	10990
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> +HO <sub>2</sub> $\rightleftharpoons$ C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.32×10 <sup>14</sup>	73020
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> (+M) $\rightleftharpoons$ C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +H(+M)	8.20×10 <sup>13</sup>
Low-pressure limit		3.02×10 <sup>17</sup>	102490
Ar/0.7/H <sub>2</sub> /2/H <sub>2</sub> O/6/CO/1.5/CO <sub>2</sub> /2/CH <sub>4</sub> /2/			

物种数和反应数的对比列于表4, 可知, 采用极小化反应网络方法构建的CKL机理尺寸已经大幅度降低.

Table 4 Comparison of reactions and species(containing N<sub>2</sub>, Ar, He) of NUIG and CKL1.0 mechanisms\*

Fuel	Skeletal-NUIG	CKL1.0
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	54s-305r	19s-24r
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	49s-284r	23s-33r
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	38s-265r	23s-28r

\* s: species; r: reaction.

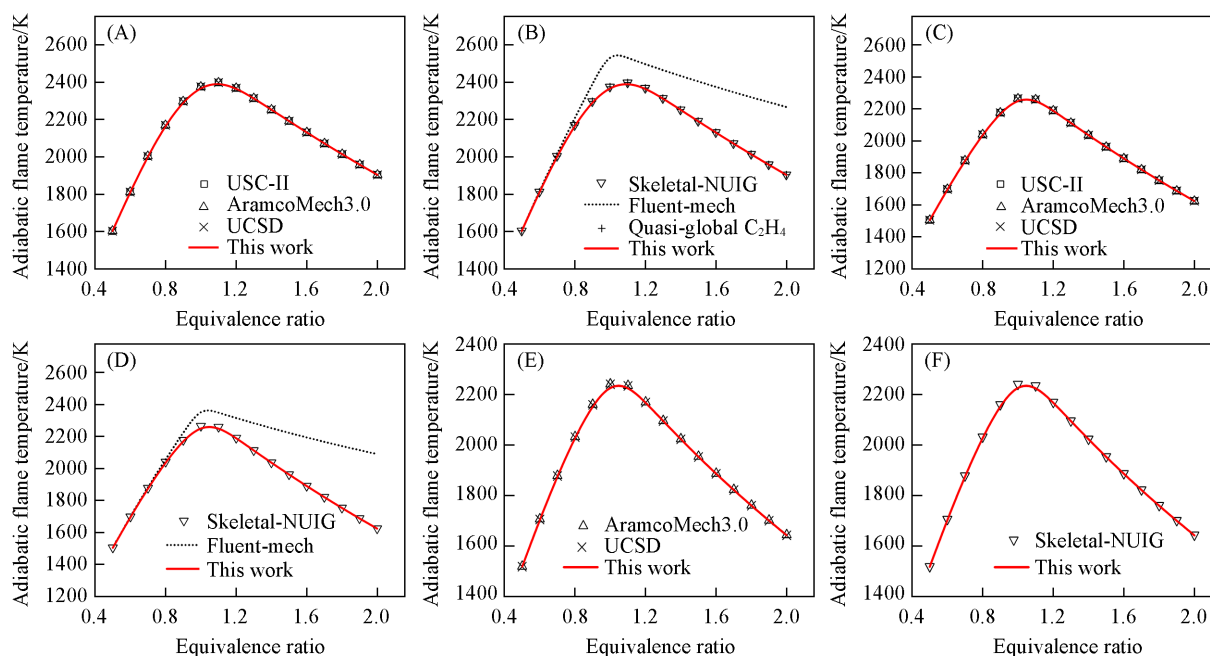
## 2 燃烧反应机理验证

所构建的机理主要针对绝热火焰温度、点火延迟时间和层流火焰速度等燃料宏观燃烧指标进行了验证, 将模拟结果与AramcoMech3.0<sup>[5]</sup>, UCSD<sup>[6]</sup>和USC-II<sup>[7]</sup>等详细机理的结果进行了比较, 同时也与NUIG1.1简化骨架机理<sup>[12]</sup>和Fluent总包机理<sup>[10]</sup>等小尺寸机理进行了对比, 此外, 针对乙烯燃料还考察了Singh等<sup>[11]</sup>的半总包机理的模拟结果(Quasi-global C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>). 所有的计算模拟工作均采用Chemkin-Pro软件<sup>[18]</sup>完成, 绝热火焰温度使用化学平衡模拟器, 点火延迟时间使用零维封闭均相反应器, 层流火焰速度使用预混层流火焰速度计算模块.

### 2.1 绝热火焰温度

绝热火焰温度反映了燃料在绝热条件下实现充分燃烧时得到的混合物所能达到的温度, 是衡量燃烧反应机理可靠性的一个基本指标. 绝热火焰温度要求燃烧反应机理具有合适的物种选择以及准确的热力学数据. 将所构建的机理与其它机理的绝热火焰温度模拟结果进行了对比. 不同燃烧反应机理在初态( $p_0=1 \times 10^5$  Pa,  $T_0=298$  K)、燃料与空气(79%N<sub>2</sub>+21%O<sub>2</sub>)混合物条件下的定压绝热火焰温度如图1所示. 由图1(A), (C)和(E)可知, C<sub>2</sub>燃料机理的模拟结果在0.5~2.0的当量比( $\phi$ , 燃料燃烧时, 完全燃烧所需要的氧化剂量与实际供给的氧化剂量之比)范围内和AramcoMech3.0, USC-II, UCSD等详细机理的结果基本相同, 说明构建的机理具有较好的绝热火焰温度预测能力.

图1(B), (D)和(F)展示了所构建的机理与其它具有较少物种数的燃烧机理比较的结果. 图1(B), (D)和(F)包含了NUIG1.1简化后骨架机理(Skeletal-NUIG)的结果, 其物种数和反应数见表4. 图1(B)和(D)包含了Fluent总包机理<sup>[10]</sup>(Fluent-mech)的结果. 图1(B)包含了Singh等<sup>[11]</sup>提出的半总包乙烯机理(Quasi-global C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)的结果. 不同燃料机理和NUIG1.1骨架机理符合程度较好, 此外, Singh等<sup>[11]</sup>提出的半总包乙烯机理同样与所构建的机理和NUIG1.1骨架机理的绝热火焰温度基本相同. 而对于Fluent总包机理, 绝热火焰温度则在当量比大于0.8的时候要高于其它机理, 可以认为这是



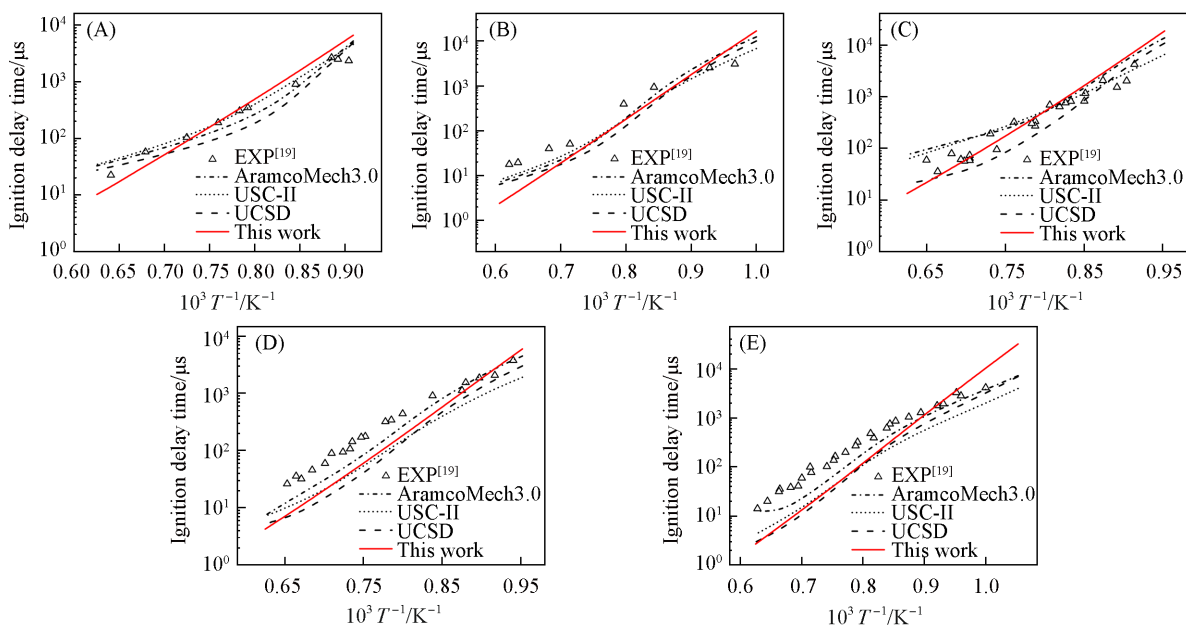
**Fig.1** Adiabatic flame temperatures of different mechanisms at  $p_0=1\times 10^5$  Pa and  $T_0=298$  K

(A, C, E) Detailed mechanisms; (B, D, F) small-scale mechanisms; (A, B)  $C_2H_4$ ; (C, D)  $C_2H_6$ ; (E, F)  $C_2H_5OH$ .

总包机理采用了单向反应形式,同时忽略了中间物种,化学平衡移动比较充分导致燃料燃烧释放热量较大、温度提升较高的结果.

## 2.2 点火延迟时间

2.2.1 乙烯点火延迟时间 将所构建的  $C_2H_4$  机理在不同工况下的点火延迟时间和实验值<sup>[8,19]</sup>以及其它机理进行了比较,其中,当量比为1和3的结果分别包含在图2和图3中,当量比为0.5的结果包含在图S1和图S2(见本文支持信息)中.



**Fig.2** Ignition delay times of  $C_2H_4$  mechanism in this work compared with detailed scale mechanisms and experimental data

(A)  $\phi=1$ ,  $p=2.13\times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=1.75/5.25/93$ ; (B)  $\phi=1$ ,  $p=9.31\times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=1.75/5.25/93$ ; (C)  $\phi=3$ ,  $p=2.19\times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ ; (D)  $\phi=3$ ,  $p=9.84\times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ ; (E)  $\phi=3$ ,  $p=18.2\times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ .

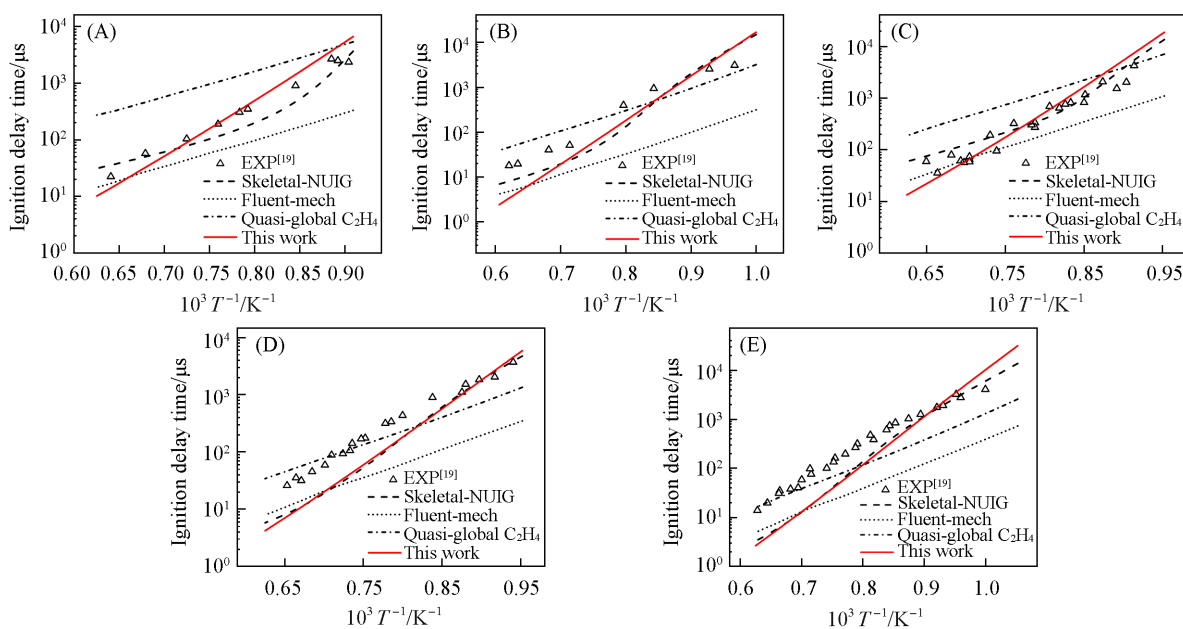


Fig. 3 Ignition delay times of  $C_2H_4$  mechanism in this work compared with small mechanisms and experimental data

(A)  $\phi=1$ ,  $p=2.13 \times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=1.75/5.25/93$ ; (B)  $\phi=1$ ,  $p=9.31 \times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=1.75/5.25/93$ ; (C)  $\phi=3$ ,  $p=2.19 \times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ ; (D)  $\phi=3$ ,  $p=9.84 \times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ ; (E)  $\phi=3$ ,  $p=18.2 \times 10^5$  Pa, molar ratio of  $C_2H_4/O_2/Ar=3.5/3.5/93$ .

AramcoMech3.0, USC-II 和 UCSD 等详细机理在当量比为 1 时与实验值较为接近[图 2(A)和(B)]. 由图 2(C), (D)和(E)可见, 几个核心机理在当量比为 3 的模拟工况下有不同的结果, 当初始压力为  $2.19 \times 10^5$  Pa 时, 几个核心机理在初始温度较低时与实验值符合较好, UCSD 机理在初始温度较高时略小于实验值, 此时 AramcoMech3.0 和 USC-II 机理则略大于实验值; 在初始压力更高的  $9.84 \times 10^5$  和  $18.2 \times 10^5$  Pa 时, 几个核心机理的点火延迟时间都表现出略小于实验值. 如图 3(A)和(B)所示, 半总包乙烯机理在当量比为 1, 初始压力为  $2.13 \times 10^5$  Pa 时的点火延迟时间明显大于实验值, 而在压力升高后的  $9.31 \times 10^5$  Pa 时, 模拟值和实验值的差别减少. 由图 3(C), (D)和(E)可见, 该机理在当量比为 3 的工况下出现了类似趋势, 点火延迟时间模拟值在初始压力为  $2.19 \times 10^5$  Pa 时总体大于实验值, 在初始压力为  $18.2 \times 10^5$  Pa 时变成总体小于实验值, 明显地表现出随着压力的升高, 该机理点火延迟时间模拟值变化的幅度要大于实验值的变化幅度. 模拟结果说明, 该机理并不能很好捕捉点火延迟时间随初始压力变化的趋势. 由图 3 可见, Fluent 总包机理的点火延迟时间总体上要小于实验值和其它机理, 仅在初始压力较低( $2.19 \times 10^5$  Pa)且初始温度较高时和实验值较为接近. 对于所构建的  $C_2H_4$  机理, 在当量比为 1 和 3 的工况下, 当初始温度较低的时候, 点火延迟时间的模拟值和实验值较为接近; 当初始温度较高的时候, 点火延迟时间则倾向于小于实验值. 所构建的  $C_2H_4$  机理总体上与其它详细机理以及 NUIG 骨架机理较为接近, 与半总包乙烯机理和 Fluent 总包机理则有比较明显的差别.

图 S1 和图 S2 包含了乙烯燃料和空气混合物在当量比为 0.5、不同初始压力时的点火延迟时间. 对于详细机理, 在初始压力较高( $10 \times 10^5$  Pa)时, 几个详细机理没有明显的区别. 在初始压力较低( $1 \times 10^5$  Pa)时, 几个详细机理表现出了不同的结果, 其中 USC-II 机理的点火延迟时间明显大于实验值, UCSD 机理与实验值最为接近. 图 S1(C)包含了初始温度小于 1000 K 时的中低温点火延迟时间数据, 几个核心机理在这段温度区间内都高估了点火延迟时间, 说明这些机理在该工况下存在反应通道缺失的情况. Yang 等<sup>[8]</sup>的乙烯详细机理对这一部分的机理反应通道进行了完善, 得到了较好的结果. NUIG 骨架机理在当量比为 0.5 时的总体表现要好于所构建的  $C_2H_4$  机理, 在不同压力下都较好地预测了实验值的变化, 仅在初始压力为  $10 \times 10^5$  Pa 的低温区间内高估了实验结果. 半总包乙烯机理在初始压力为  $1 \times 10^5$

Pa时的点火延迟时间大幅度大于实验值,在初始压力为 $4 \times 10^5$  Pa时点火延迟时间线条斜率和实验值与其它机理存在不同,在初始压力为 $10 \times 10^5$  Pa的低温时和实验值较为符合,在中温时则小于实验值.对于所构建的 $C_2H_4$ 机理,在初始压力为 $1 \times 10^5$  Pa时的点火延迟时间模拟结果在USC-II机理和AramcoMech3.0机理之间,在初始压力为 $4 \times 10^5$  Pa时和实验值符合较好,在初始压力为 $10 \times 10^5$  Pa时的中低温区间内慢于其它详细机理.由于低温反应途径不是所构建机理重点考虑的部分,不存在 $C_2$ 的低温物种和反应通道,因此对于该部分的点火延迟时间预测准确度不足.

2.2.2 乙烷点火延迟时间 将所构建的 $C_2H_6$ 机理在不同工况下的点火延迟时间和实验值<sup>[20,21]</sup>以及其它机理进行了比较.

图4和图S3(见本文支持信息)包含了本文构建的 $C_2H_6$ 机理与AramcoMech3.0, USC-II和UCSD等详细机理的对比结果. AramcoMech3.0机理和UCSD机理的结果相对于USC-II机理更为相近.在当量比为0.5和1时,USC-II机理的点火延迟时间总体上小于其它机理,且在当量比为0.5时,USC-II机理模拟结果与其它详细机理的差别更为明显.图S4和图S5(见本文支持信息)包含了所构建的 $C_2H_6$ 机理和NUIG骨架机理、Fluent总包机理等小尺寸机理的对比结果. NUIG骨架机理总体上与实验值符合较好,而Fluent总包机理在当量比为1和2时要小于实验值,并且在温度越低时,这一差别越明显.

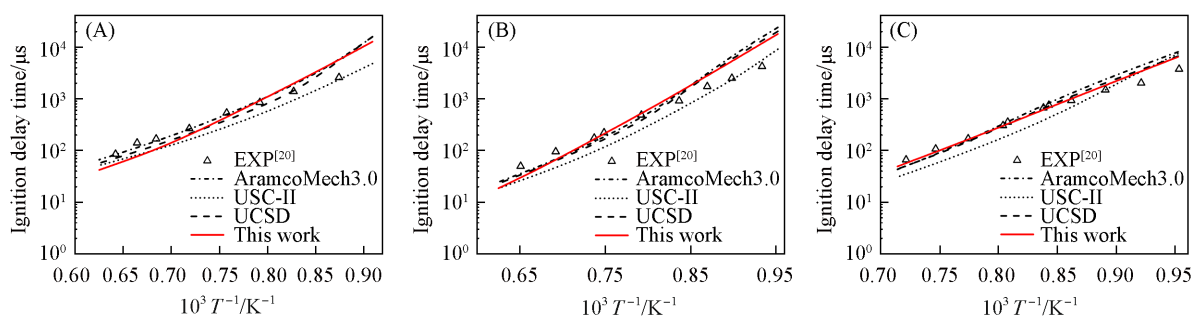
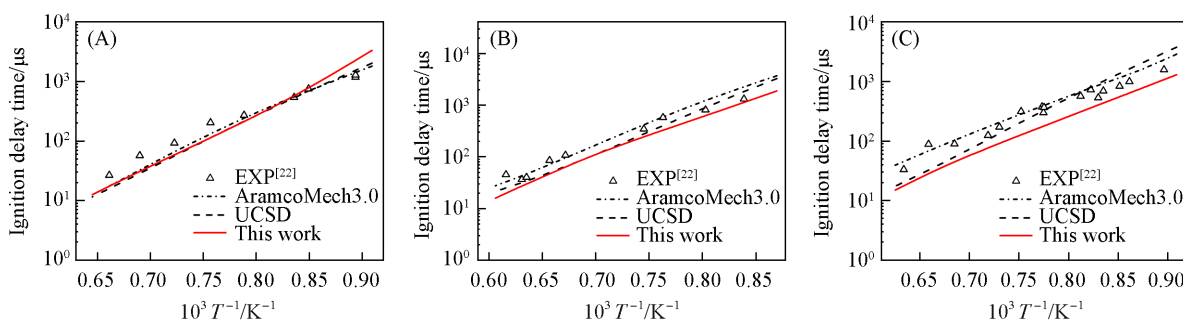


Fig. 4 Ignition delay times of  $C_2H_6$  mechanism in this work compared with detailed mechanisms and experimental data

(A)  $\phi=1$ ,  $p=1.2 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_6/O_2/Ar=1.13/3.96/94.9$ ; (B)  $\phi=1$ ,  $p=4 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_6/O_2/Ar=1.13/3.96/94.9$ ; (C)  $\phi=1$ ,  $p=16 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_6/O_2/Ar=1.13/3.96/94.9$ .

所构建的 $C_2H_6$ 机理的点火延迟时间总体表现和实验值以及其它机理的结果比较接近.在当量比为0.5,初始压力为2 MPa,所构建的 $C_2H_6$ 机理的点火延迟时间模拟值要小于实验值.在当前工况下,在初始温度高于1150 K ( $1000 \text{ K}/T=0.87$ ),所构建的 $C_2H_6$ 机理的结果要优于USC-II机理,而在初始温度低于1150 K时,USC-II机理更接近实验值.在当量比为2,初始压力为0.12和0.5 MPa时,点火延迟时间最高的初始温度较高,达到了1600 K以上,此时,所构建的 $C_2H_6$ 机理的模拟值要小于实验值,而其它工况并未达到该温度.在这些工况下的初始温度进一步升高时,所构建的 $C_2H_6$ 机理可能会同样存在过快预测点火延迟时间的情况,这一推测需要对在这些当量比和压力工况以及更高初始温度下的点火延迟时间实验值进行对比验证.

2.2.3 乙醇点火延迟时间 所构建的 $C_2H_5OH$ 机理在不同工况下的点火延迟时间与实验值<sup>[22]</sup>以及AramcoMech3.0, UCSD等机理的比较结果如图5所示,与NUIG骨架机理的比较结果如图S6(见本文支持信息)所示. AramcoMech3.0机理和UCSD机理点火延迟时间的结果在当量比为0.5时比较接近,UCSD机理的点火延迟时间在当量比为1时略微小于AramcoMech3.0机理;在当量比为2、初始压力为 $2.31 \times 10^5$  Pa时有明显的区别,当初始温度高于1250 K ( $1000 \text{ K}/T=0.8$ )时,UCSD机理的点火延迟时间要明显小于AramcoMech3.0机理,而当初始温度小于1250 K时,AramcoMech3.0机理的点火延迟时间则小于UCSD机理.所构建的 $C_2H_5OH$ 机理在当量比为0.5时和详细机理以及NUIG骨架机理比较接近,当初始温度低时呈现出一定的区别.在当量比为1和2时,所构建的 $C_2H_5OH$ 机理的点火延迟时间



**Fig. 5 Ignition delay times of  $C_2H_5OH$  mechanism in this work compared with detailed mechanisms and experimental data**

(A)  $\phi=0.5$ ,  $p=11.63 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_5OH/O_2/Ar=1/6.2/92.8$ ; (B)  $\phi=1$ ,  $p=2.09 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_5OH/O_2/Ar=1.5/4.7/93.8$ ;  
(C)  $\phi=2$ ,  $p=2.31 \times 10^5$  Pa,  $C_2H_5OH/O_2/Ar=4/6/90$ .

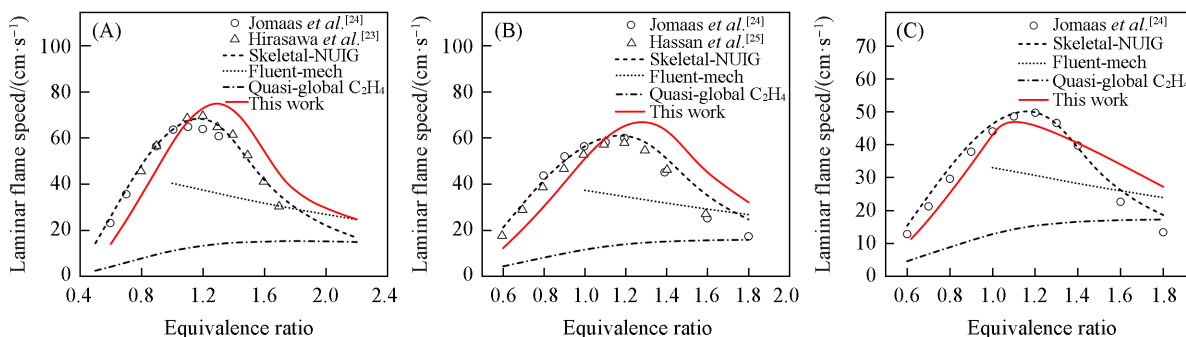
要小于实验值以及详细机理和NUIG骨架机理。

### 2.3 层流火焰速度

**2.3.1 乙烯层流火焰速度** 所构建的  $C_2H_4$  机理在不同工况下的层流火焰速度和实验值<sup>[23-25]</sup>以及其它机理的比较结果如图 S6 和图 S7 (见本文支持信息) 所示, 实验值的初始压力分为  $1 \times 10^5 \sim 5 \times 10^5$  Pa, 初始温度为 298 K. 在初始压力  $p=1 \times 10^5$  Pa 时, Hirasawa 等<sup>[23]</sup> 的实验值在当量比为 1.2 时取得层流火焰速度的峰值, 约为 68 cm/s, Jomaas 等<sup>[24]</sup> 的实验值在当量比为 1.1 时取得层流火焰速度的峰值, 约为 64 cm/s; 在初始压力  $p=2 \times 10^5$  Pa 时, Hassan 等<sup>[25]</sup> 的实验值在当量比为 1.2 时取得层流火焰速度的峰值, 约为 60 cm/s, Jomaas 等<sup>[24]</sup> 的实验值在当量比为 1.2 时取得层流火焰速度的峰值, 约为 56 cm/s; 在初始压力  $p=5 \times 10^5$  Pa 时, Jomaas 等<sup>[24]</sup> 的实验值在当量比为 1.2 时取得层流火焰速度的峰值, 约为 50 cm/s.

对于包含了详细机理模拟结果的图 S7, UCSD 机理和 USC-II 机理在初始压力为  $1 \times 10^5$  和  $2 \times 10^5$  Pa 时能较好地再现实验值, 其中, UCSD 机理层流火焰速度的峰值要大于 USC-II 机理. 而当初始压力为  $5 \times 10^5$  Pa 时, Jomaas 等<sup>[24]</sup> 的实验值在当量比约为 1.2 时取得峰值, UCSD 机理和 USC-II 机理的模拟值峰值在当量比约为 1.1 时取得. 对于包含了小尺寸机理模拟结果 (图 6), NUIG 骨架机理的模拟值在不同工况下能够比较准确地预测实验值, 在当量比大于 1.6 的富燃区域会略微高估这一指标. Fluent 总包机理的层流火焰速度在模拟范围内随当量比的增加而降低, 基本呈线性变化, 在当量比为 1.6 附近和实验值有交集. Singh 等<sup>[11]</sup> 提出的半总包乙烯机理的层流火焰速度总体上慢于实验值, 仅在当量比大于 1.6 时和实验值比较接近, 并且半总包乙烯机理的层流火焰速度随着当量比增加总体上呈现出单调增加的趋势, 在模拟的当量比范围内不能明显观察到层流火焰速度峰值所在的当量比.

在不同初始压力的贫燃工况下, 所构建的  $C_2H_4$  机理的层流火焰速度模拟值略微小于实验值. 在初始压力为  $1 \times 10^5$  和  $2 \times 10^5$  Pa 的富燃工况下, 构建的  $C_2H_4$  机理的层流火焰速度模拟值大于实验值, 在初始



**Fig. 6 Laminar flame speed of  $C_2H_4$  mechanism in this work compared with detailed mechanisms and experimental data**

(A)  $T=298$  K,  $p=1 \times 10^5$  Pa; (B)  $T=298$  K,  $p=2 \times 10^5$  Pa; (C)  $T=298$  K,  $p=5 \times 10^5$  Pa.

压力为 $5 \times 10^5$  Pa的富燃工况下, 构建的 $C_2H_4$ 机理的层流火焰速度模拟值分布在实验值两侧. 构建的 $C_2H_4$ 机理在初始压力为 $1 \times 10^5$ 和 $2 \times 10^5$  Pa时, 在当量比为1.3附近取得层流火焰速度的峰值, 相较于实验值和其它详细机理略微偏大. 但构建的 $C_2H_4$ 机理和实验值以及其它详细机理、NUIG骨架机理几者之间的峰值大小基本接近, 优于Fluent总包机理和半总包乙烯机理. 相比其它小尺寸机理, 构建的 $C_2H_4$ 机理基本上反映了层流火焰速度随当量比变化的趋势, 但针对层流火焰速度峰值所在当量比的预测有进一步提升的空间, 考虑到机理尺寸, 误差是可以被接受的.

2.3.2 乙烷层流火焰速度 构建的 $C_2H_6$ 机理在不同工况下的层流火焰速度和实验值<sup>[24,26,27]</sup>以及其它机理的比较结果如图7和图S8(见本文支持信息)所示. 包含了初始温度298 K下初始压力范围为 $1 \times 10^5 \sim 10 \times 10^5$  Pa, 以及初始温度325 K下初始压力为 $5 \times 10^5$  Pa的层流火焰速度实验值.

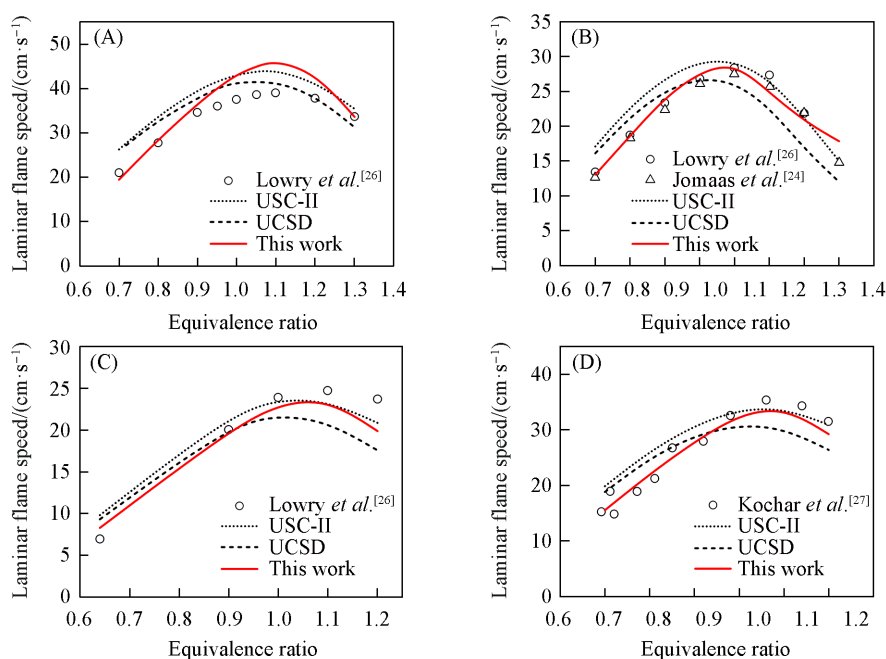


Fig. 7 Laminar flame speed of  $C_2H_6$  mechanism in this work compared with detailed mechanisms and experimental data

(A)  $T=298$  K,  $p=1 \times 10^5$  Pa; (B)  $T=298$  K,  $p=5 \times 10^5$  Pa; (C)  $T=298$  K,  $p=10 \times 10^5$  Pa; (D)  $T=325$  K,  $p=5 \times 10^5$  Pa.

由包含了详细机理模拟结果的图7可见, USC-II机理的层流火焰速度略微快于UCSD机理, 两者在贫燃工况均呈快于实验值的结果. 在初始温度为298 K、初始压力为 $1 \times 10^5$  Pa的富燃工况, UCSD机理比USC-II机理更接近实验值, 而在初始压力大于等于 $5 \times 10^5$  Pa的富燃工况, USC-II机理比UCSD机理更符合实验值. 由包含了详细机理模拟结果的图S8可见, NUIG骨架机理在贫燃时能够比较精准地再现实验值, 在富燃时表现出来有差异的结果. 当初始温度为298 K、初始压力为 $1 \times 10^5$ 和 $5 \times 10^5$  Pa的富燃工况时, NUIG骨架机理和实验值符合较好, 仅有略微区别, 而当初始温度或初始压力进一步提升时, NUIG骨架机理在富燃时则要慢于实验结果. Fluent总包机理不能体现出层流火焰速度实验值随当量比变化的趋势, 在目前模拟的富燃工况下总体明显慢于实验值, 仅在当量比为1.4时和实验值比较接近.

构建的 $C_2H_6$ 机理在初始温度为298 K、初始压力为 $1 \times 10^5$  Pa时的层流火焰速度峰值约为46 cm/s, 比实验值高约8 cm/s, 在较贫燃和较富燃的区域则和实验结果比较接近. 在这个工况时, 构建的 $C_2H_6$ 机理的表现不如NUIG骨架机理. 在初始温度为298 K、初始压力为 $5 \times 10^5$  Pa时, 构建的 $C_2H_6$ 机理模拟结果较好. 在初始温度为298 K、初始压力为 $10 \times 10^5$  Pa与初始温度为325 K、初始压力为 $5 \times 10^5$  Pa的两个工况, 构建的 $C_2H_6$ 机理在富燃区域内的层流火焰速度模拟结果要优于NUIG骨架机理, 在贫燃区域两者则基本接近.

2.3.3 乙醇层流火焰速度 所构建的C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH机理在不同工况下的层流火焰速度和实验值以及其它机理的比较结果如图8和图S9(见本文支持信息)所示,包含的初始温度为298和453 K,初始压力为1×10<sup>5</sup> Pa. 在初始温度T=298 K时, van Lipzig等<sup>[28]</sup>、Egolfopoulos等<sup>[29]</sup>和Gülder等<sup>[30]</sup>的实验值在当量比约为1.1时取得的层流火焰速度峰值约为44~48 cm/s; 在初始温度T=453 K时, Egolfopoulos等<sup>[29]</sup>的实验值在当量比为1.0时取得的层流火焰速度峰值约93 cm/s.

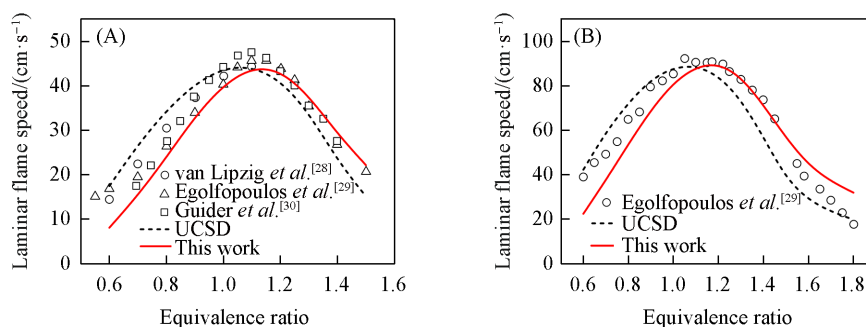


Fig. 8 Laminar flame speed of C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH mechanism in this work compared with detailed mechanisms and experimental data

(A) T=298 K, p=1×10<sup>5</sup> Pa; (B) T=453 K, p=1×10<sup>5</sup> Pa.

由图8可见, UCSD详细机理的层流火焰速度在贫燃时略快于实验值,在富燃时则略慢于实验值. 由图S9可见, NUIG骨架机理的层流火焰速度在较贫燃和在较富燃的区域都能较好地预测实验值,而在当量比为1.0的附近区域, NUIG骨架机理的层流火焰速度慢于实验值,最大误差约10 cm/s.

在当前模拟的工况下,构建的C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH机理的层流火焰速度总体上和实验结果符合较好,对于峰值当量比的捕捉要优于UCSD详细机理. 构建的C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH机理在贫燃区域略慢于实验值,此外,在初始温度T=453 K、初始压力p=1×10<sup>5</sup> Pa的工况下,当 $\phi > 1.5$ 时,构建的C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH机理的层流火焰速度要快于Egolfopoulos等<sup>[29]</sup>的实验结果.

### 3 结 论

随着燃烧反应机理反应网络设计的复杂化,物种和反应数目越来越多,给燃烧数值模拟及工程应用造成困难. 采用极小化反应网络方法构建了乙烯、乙烷和乙醇等典型C<sub>2</sub>燃料的燃烧反应机理. 该方法在指定物种分辨率的条件下,构建具有简洁反应网络的燃烧反应机理. 其所包含的反应采用可逆形式,同时在速率常数的表达式上采用经典Arrhenius方程(A, E<sub>a</sub>)双参数形式,能够在减少参数数目的同时保证参数的物理意义,有利于参数优化. 此外,该方法能够避免详细机理需要的机理简化步骤,在大幅减少物种数目和反应数目的同时降低计算成本. 单组分燃料燃烧机理基于先前开发的C<sub>0</sub>-C<sub>1</sub>燃料反应机理以层级、模块化的方式进行构建,并将所有反应的方向在形式上进行统一,最终得到的C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>机理共包含19个物种24个反应,该模块新增4个物种10个反应; C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>机理共包含23个物种33个反应,该模块新增2个物种6个反应; C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH机理共包含23个物种28个反应,该模块新增5个物种10个反应. 所构建的C<sub>2</sub>燃料燃烧机理通过包括绝热火焰温度、点火延迟时间、层流火焰速度等在内的模拟进行验证,并与国际流行详细机理和其它小尺寸机理进行了对比,结果表明,本文构建的机理在保持较小尺寸的同时有较高的可靠性,从而进一步表明了极小化反应网络建模方法可能为发动机湍流燃烧模拟在内的实际工程应用带来极大的帮助.

支持信息见 <http://www.cjcu.jlu.edu.cn/CN/10.7503/cjcu20230386>.

### 参 考 文 献

- [1] Kolhe A. V., Malwe P. D., Chopkar Y., Panchal H., Ağbulut Ü., Mubarak N. M., Chowdhury S., Amesho K. T. T., *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2023, 1—21

- [ 2 ] Zhong Y., Zhang Y., Mao C., Ukaew A., *Processes*, **2022**, *10*(9), 1689
- [ 3 ] Kobayashi K., Tomioka S., Takahashi M., Kodera M., *Ceas Space J.*, **2023**, *15*(6), 845—866
- [ 4 ] El-Sabor Mohamed A. A., Sahu A. B., Panigrahy S., Baigmohammadi M., Bourque G., Curran H., *Combust. Flame*, **2022**, *245*, 112306
- [ 5 ] Zhou C. W., Li Y., Burke U., Banyon C., Somers K. P., Ding S., Khan S., Hargis J. W., Sikes T., Mathieu O., Petersen E. L., Alabbad M., Farooq A., Pan Y., Zhang Y., Huang Z., Lopez J., Loparo Z., Vasu S. S., Curran H. J., *Combust. Flame*, **2018**, *197*, 423—438
- [ 6 ] *UCSD Mechanism, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research)*, University of California at San Diego, Version 2016-12-14, <http://combustion.ucsdedu>
- [ 7 ] Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law C. K., *USC Mech Version II*, <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/USC%20Mech%20II/USC%20Mech%20II.html>
- [ 8 ] Yang M., Wan Z., Tan N., Zhang C., Wang J., Li X., *Combust. Flame*, **2020**, *221*, 20—40
- [ 9 ] Wang L., Liu Y., Bi G., Zhang L., Song J., *Fuel Process. Technol.*, **2022**, *229*, 107167
- [ 10 ] *Ansys Fluent Release 14.5*, Ansys Inc., Canonsburg, PA, **2012**
- [ 11 ] Singh D. J., Jachimowski C. J., *Aiaa J.*, **1994**, *32*(1), 213—216
- [ 12 ] Wang Q., Panigrahy S., Yang S., Martinez S., Liang J., Curran H. J., *Energ. Fuel*, **2021**, *35*(8), 6921—6927
- [ 13 ] Wang H., Xu R., Wang K., Bowman C. T., Hanson R. K., Davidson D. F., Brezinsky K., Egolfopoulos F. N., *Combust. Flame*, **2018**, *193*, 502—519
- [ 14 ] Li X. Y., Yao X. X., Shentu J. T., Sun X. H., Li J. Q., Liu M. X., Xu S. M., *Chem. J. Chinese Universities*, **2020**, *41*(3), 512—520 (李象远, 姚晓霞, 申屠江涛, 孙晓慧, 李娟琴, 刘明夏, 许诗敏. 高等学校化学学报, **2020**, *41*(3), 512—520)
- [ 15 ] Li X. Y., Shentu J. T., Li Y. W., Li J. Q., Wang J. B., *Chem. J. Chinese Universities*, **2020**, *41*(4), 772—779 (李象远, 申屠江涛, 李宜蔚, 李娟琴, 王静波. 高等学校化学学报, **2020**, *41*(4), 772—779)
- [ 16 ] Li Y. W., Shentu J. T., Wang J. B., Li X. Y., *Chem. J. Chinese Universities*, **2021**, *42*(6), 1871—1880 (李宜蔚, 申屠江涛, 王静波, 李象远. 高等学校化学学报, **2021**, *42*(6), 1871—1880)
- [ 17 ] Ren H. S., Wang J. B., Li X. Y., *Combustion Dynamics, Sichuan (CDS)*, Center for Combustion Dynamics, Sichuan University, **2021**, <https://cds.scu.edu.cn>
- [ 18 ] *Chemkin-Pro 15112*, Reaction Design, San Diego, **2011**
- [ 19 ] Saxena S., Kahandawala M. S. P., Sidhu S. S., *Combust. Flame*, **2011**, *158*(6), 1019—1031
- [ 20 ] Pan L., Zhang Y., Zhang J., Tian Z., Huang Z., *Int. J. Hydrogen Energ.*, **2014**, *39*(11), 6024—6033
- [ 21 ] Hu E., Chen Y., Zhang Z., Li X., Cheng Y., Huang Z., *Energ. Fuel*, **2015**, *29*(7), 4557—4566
- [ 22 ] Noorani K. E., Akih-Kumgeh B., Bergthorson J. M., *Energ. Fuel*, **2010**, *24*(11), 5834—5843
- [ 23 ] Hirasawa T., Sung C. J., Joshi A., Yang Z., Wang H., Law C. K., *P. Combust. Inst.*, **2002**, *29*(2), 1427—1434
- [ 24 ] Jomaas G., Zheng X. L., Zhu D. L., Law C. K., *P. Combust. Inst.*, **2005**, *30*(1), 193—200
- [ 25 ] Hassan M. I., Aung K. T., Kwon O. C., Faeth G. M., *J. Propul. Power*, **1998**, *14*(4), 479—488
- [ 26 ] Lowry W., de Vries J., Krejci M., Petersen E., Serinyel Z., Metcalfe W., Curran H., Bourque G., *J. Eng. Gas Turbines Power*, **2011**, *133*(9), 091501—091509
- [ 27 ] Kochar Y., Seitzman J., Lieuwen T., Metcalfe W., Burke S., Curran H., Krejci M., Lowry W., Petersen E., Bourque G., *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, **2011**, GT2011-45122, 129—140
- [ 28 ] van Lipzig J. P. J., Nilsson E. J. K., de Goey L. P. H., Konnov A. A., *Fuel*, **2011**, *90*(8), 2773—2781
- [ 29 ] Egolfopoulos F. N., Du D. X., Law C. K., *Symp. (Int.) Combust.*, **1992**, *24*(1), 833—841
- [ 30 ] Gülder Ö. L., *Symp. (Int.) Combust.*, **1982**, *19*(1), 275—281

(Ed.: Y, K, S)