

RP-3 航空煤油/O₂ 的简化反应机理优化与验证

曾文¹, 徐紫馨¹, 张鑫炜², 胡斌², 常亚超³

(1 沈阳航空航天大学航空发动机学院, 沈阳 110136; 2 中国科学院工程热物理研究所, 北京 100190;
3.大连理工大学海洋能源利用与节能教育部重点实验室, 大连 116024)

摘要: 采用 RP-3 航空煤油的简化反应机理对多工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物的氧化、着火延迟与层流燃烧特性进行了数值计算, 并与相应试验数据进行了对比验证; 同时, 采用敏感性分析方法对该简化反应机理中燃料相关骨架反应机理中的基元反应进行了敏感性分析; 采用遗传算法, 对重要的基元反应速率常数进行优化, 形成了优化后的 RP-3 航空煤油/氧气混合物的简化反应机理。结果表明, 大部分工况条件下初始简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间以及层流燃烧速度的预测值与相应试验值存在较大误差。同时, 优化后的简化反应机理对多工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中的主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度的预测值与相应试验值吻合较好。

关键词: RP-3 航空煤油; 简化反应机理; 敏感性分析; 遗传算法; 燃烧特性

中图分类号: TK401

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2024)06-0539-11

Optimization and Verification of Reduced Reaction Mechanism of RP-3 Kerosene/Oxygen

Zeng Wen¹, Xu Zixin¹, Zhang Xinwei², Hu Bin², Chang Yachao³

(1 School of Aero-engine, Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China;

2. Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

3. Key Laboratory of Ocean Energy Utilization and Energy Conservation of Ministry of Education, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: The oxidation, ignition delay and laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ mixture were simulated by the reduced reaction mechanism of RP-3 kerosene under multiple conditions, and the simulated results were compared with the corresponding experimental data. At the same time, the sensitivity analysis method was used to analyze the elementary reactions of the fuel related skeleton reaction mechanism in the reduced reaction mechanism. Furthermore, genetic algorithm was used to optimize the rate constants of important elementary reactions, and the optimized reduced reaction mechanism of RP-3 kerosene/O₂ mixture was formed. The results show that the predicted values of main species concentration during the oxidation process, ignition delay time and laminar combustion speed of RP-3 kerosene/O₂ mixture by the initial reduced reaction mechanism show great discrepancies with the corresponding experimental data under most operating conditions, while those by the optimized reduced reaction mechanism are in good agreement with the corresponding experimental data under multiple operating conditions.

收稿日期: 2023-11-29.

基金项目: 国家科技重大专项资助项目(2017-III-0006-0031).

作者简介: 曾文(1977—), 男, 博士, 教授.

通信作者: 曾文, zengwen928@sohu.com.

Keywords: RP-3 kerosene; reduced reaction mechanism; sensitivity analysis; genetic algorithm; combustion characteristics

近年来,随着科技不断发展及作战理念的变革,世界主要军事强国都将临近空间视为现代空中作战的关键战略领域^[1]. 空气涡轮火箭(ATR)发动机是空天飞行器的一种新型动力系统,其组成部件主要包括压气机、富燃燃气发生器、涡轮、燃烧室及尾喷管等^[2]. 航空煤油与液氧在富燃燃气发生器中进行富燃燃烧,产生的高温燃气进入涡轮做功,带动压气机工作;涡轮出口燃气进入燃烧室,与压气机出口空气在燃烧室内再次燃烧,最后经尾喷管排出,为飞行器提供动力. ATR发动机的推力取决于流经涡轮的燃气温度、流量与成分组成,因此,航空煤油与液氧在富燃燃气发生器中的氧化、着火与燃烧特性就显得尤为重要^[3]. 在富燃燃气发生器内,航空煤油与氧气的混合、点火与燃烧过程是一个复杂的湍流混合和强烈受控于化学反应动力学的湍流燃烧过程. 为了更准确地了解航空煤油与氧气在富燃燃气发生器中的氧化、着火与燃烧细节,提高富燃燃气发生器中航空煤油的氧化、着火与燃烧特性的数值计算精度,在相应数值计算中有必要采用航空煤油与氧气的化学反应机理.

航空煤油的成分非常复杂,其化学反应机理包括几百种组分、几千个基元反应^[4-6]. 在对富燃燃气发生器中流动与燃烧过程进行数值计算时,如果在CFD模型中耦合如此庞大的化学反应机理,将会对现有计算资源与计算能力提出巨大挑战. 目前最有效的方法就是构建航空煤油的模型燃料,并形成该模型燃料的简化反应机理. 针对RP-3航空煤油,曾文等^[7-8]、Mao等^[9-11]、Li等^[12]、Yu等^[13]、Zhong等^[14]、Liu等^[15]分别提出了其模型燃料,并构建了相应模型燃料的详细与简化反应机理,同时完成了详细与简化反应机理对RP-3航空煤油/空气混合物的氧化、着火延迟及层流燃烧特性的预测性能评估. 但是,上述学者构建的RP-3航空煤油模型燃料的详细与简化反应机理对RP-3航空煤油/氧气混合物的氧化、着火延迟及层流燃烧特性的预测是否准确尚未得到验证.

本文采用Liu等^[16-17]构建的RP-3航空煤油模型燃料的简化反应机理,对多工况条件下(尤其是富燃条件,即当量比大于1.0)RP-3航空煤油/氧气混合物的氧化、着火延迟及层流燃烧特性进行数值计算,并采用敏感性分析方法与遗传算法,对该简化反应机理进行优化,最后完成了优化后的简化反应机理的试验验证,为ATR发动机富燃燃气发生器的结构设计、燃

烧组织与性能优化提供理论基础与技术支撑.

1 初始简化反应机理验证

Liu等^[16]针对RP-3航空煤油的成分组成与物理特性,提出了一种由正癸烷($nC_{10}H_{22}$)、正十二烷($nC_{12}H_{26}$)、异十六烷(HMN, $iC_{16}H_{34}$)、甲基环己烷(MCH, C_7H_{14})和甲苯(A_1CH_3 , C_7H_8) (摩尔分数分别为14%、10%、30%、36%、10%)组成的5组分模型燃料. 同时,通过理论计算与试验测试,Liu等^[16]发现该模型燃料的主要物理特性及化学特性与RP-3航空煤油吻合较好. 在此基础上,Liu等^[17]构建了该模型燃料的简化反应机理(包括181种组分、872个反应),并对该简化反应机理在RP-3航空煤油/空气混合物的氧化、着火延迟及层流燃烧特性的预测精度进行了全面验证与分析.

本文采用该简化反应机理对RP-3航空煤油/氧气混合物的氧化、着火延迟及层流燃烧特性进行数值计算,并与相应试验数据进行对比分析.

1.1 氧化特性

在初始压力为0.1 MPa、当量比为1.0、初始温度范围为650~1050 K的条件下,采用该简化反应机理对RP-3航空煤油/氧气混合物在流动管反应器中的氧化特性进行数值计算,并与相同工况条件下RP-3航空煤油/氧气混合物在流动管反应器中的氧化过程中主要组分浓度的试验数据^[18]进行对比分析,如图1所示.

从图1可以看出,该简化反应机理对RP-3航空煤油/氧气混合物氧化过程中 O_2 、 H_2O 、 CO 、 CO_2 、 CH_4 的摩尔分数随温度变化趋势的预测值与相应试验值吻合较好,但在氧化发生的起始温度及氧化后上述5种组分的摩尔分数的预测上与相应试验值存在一定误差. 同时,该简化反应机理对 C_2H_6 、 C_2H_4 、 C_3H_6 、 CH_3CHO 、 CH_3OH 、 C_4H_6 、 iC_4H_8 等组分的摩尔分数随温度变化趋势的预测值与相应试验值存在较大误差,尤其在氧化发生的起始温度及摩尔分数峰值的预测上误差较大.

1.2 着火延迟特性

在当量比分别为0.8、3.5、初始压力分别为0.2 MPa、1.0 MPa与5.0 MPa、初始温度范围为950~1500 K条件下,采用该简化反应机理对RP-3航空煤

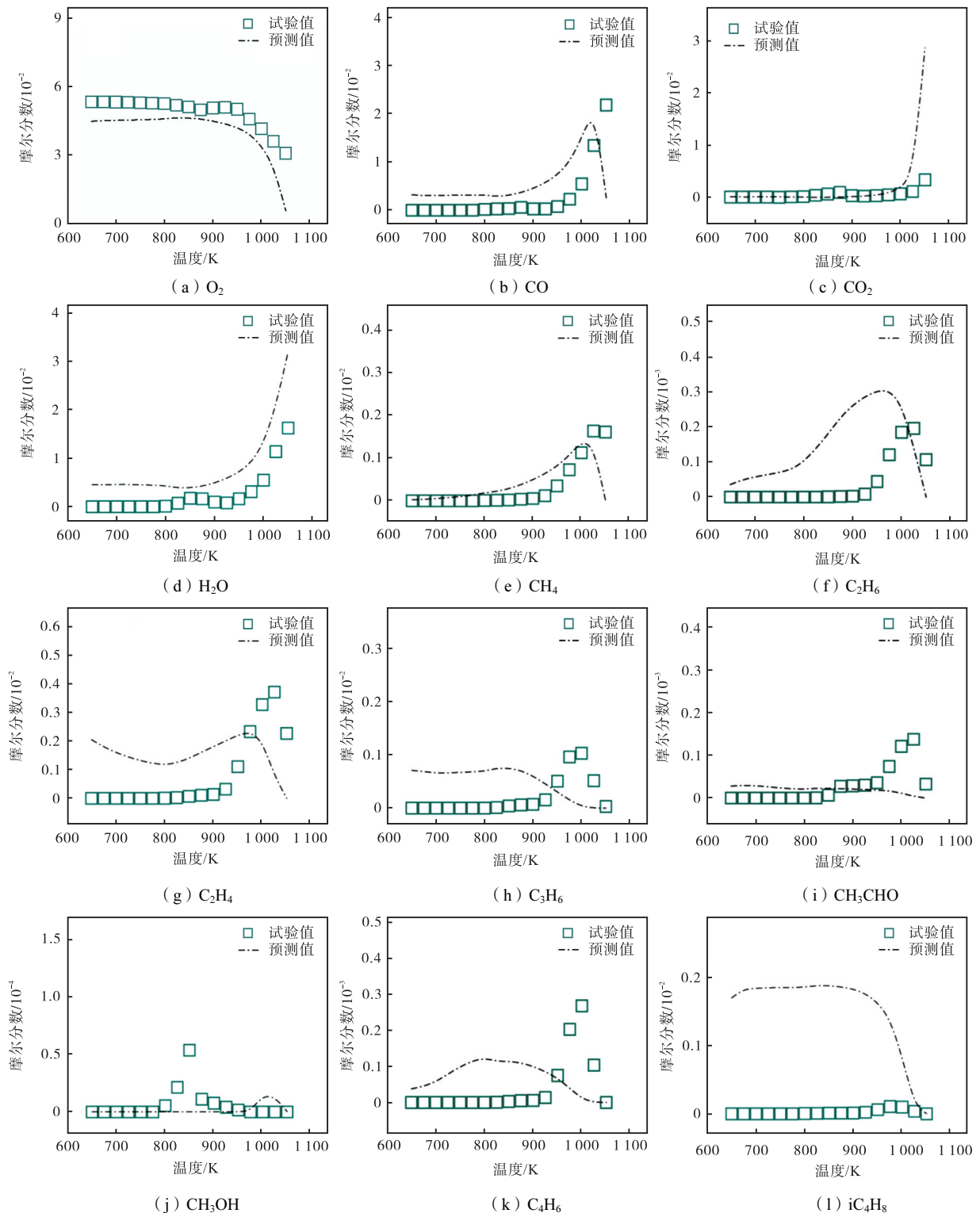


图 1 RP-3 航空煤油/氧气的氧化特性

Fig.1 Oxidation characteristics of RP-3 kerosene/O₂

油/氧气混合物在激波管中的着火延迟特性进行数值计算,并与相同工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物在激波管中的着火延迟时间的试验数据^[18]进行对比分析,如图 2 所示.从图可以看出,在不同工况条件下,采用该简化反应机理计算得到的 RP-3 航空煤油/氧气混合物着火延迟时间随温度的变化趋势与相

应试验值具有较好的一致性,尤其是当初始压力为 5.0 MPa、当量比为 0.8 时,采用该简化反应机理计算得到 RP-3 航空煤油/氧气混合物的着火延迟时间与试验值吻合良好.但是,在当量比为 0.8、初始压力分别为 0.2 MPa 和 1.0 MPa 条件下,RP-3 航空煤油/氧气混合物着火延迟时间的预测值均高于相应试验值;

同时,在当量比为 3.5、初始压力为 5.0 MPa 条件下, RP-3 航空煤油/氧气混合物着火延迟时间的预测值则低于相应试验值。

1.3 层流燃烧特性

在初始温度分别为 420 K、450 K 与 480 K、初始压力分别为 0.1 MPa、0.2 MPa 与 0.3 MPa、当量比范围为 0.6~1.7 条件下,采用该简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气在定容弹中的层流燃烧速度进行数值

计算,并与相同工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气在定容弹中的层流燃烧速度的试验数据^[19]进行对比分析,如图 3~图 5 所示。从图可以看出,在各工况条件下,虽然采用该简化反应机理计算得到的 RP-3 航空煤油/氧气混合物的层流燃烧速度随当量比的变化趋势与相应试验值吻合较好,但是,各工况条件下层流燃烧速度,尤其是层流燃烧速度峰值的预测值均高于相应试验值。

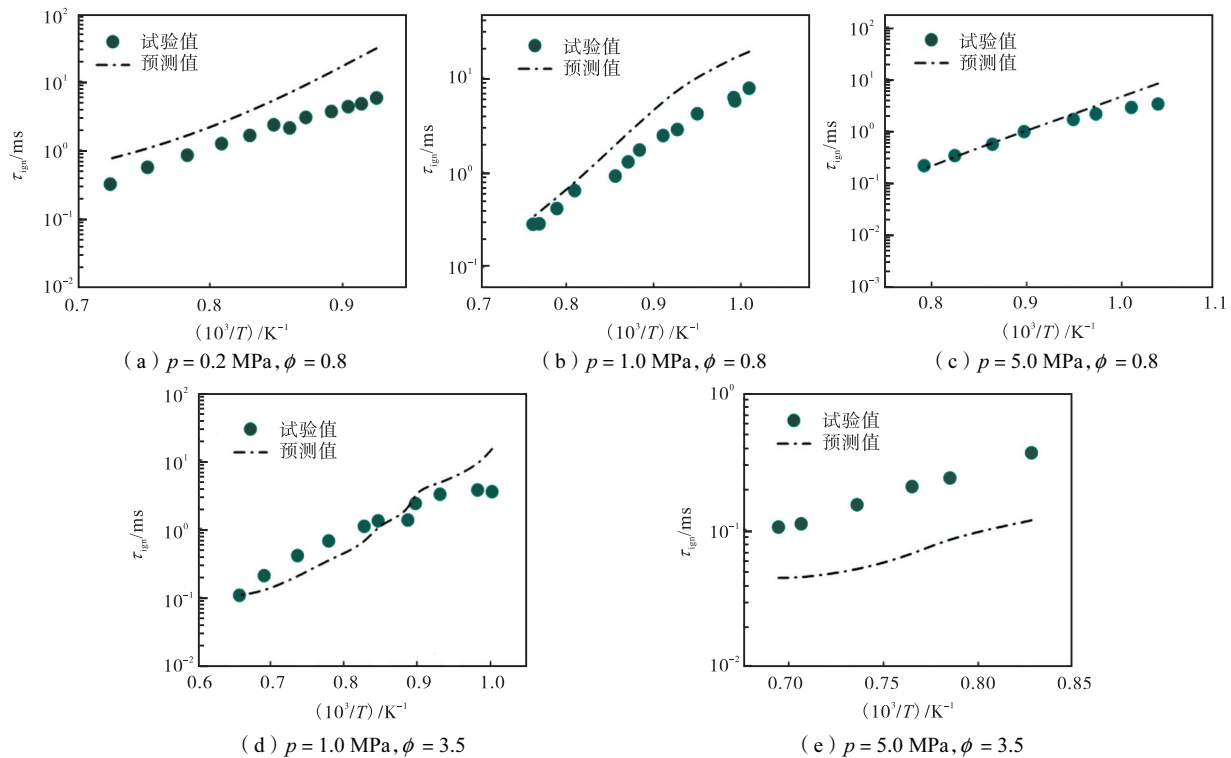


图 2 RP-3航空煤油/氧气的着火延迟特性

Fig.2 Ignition delay characteristics of RP-3 kerosene/O₂

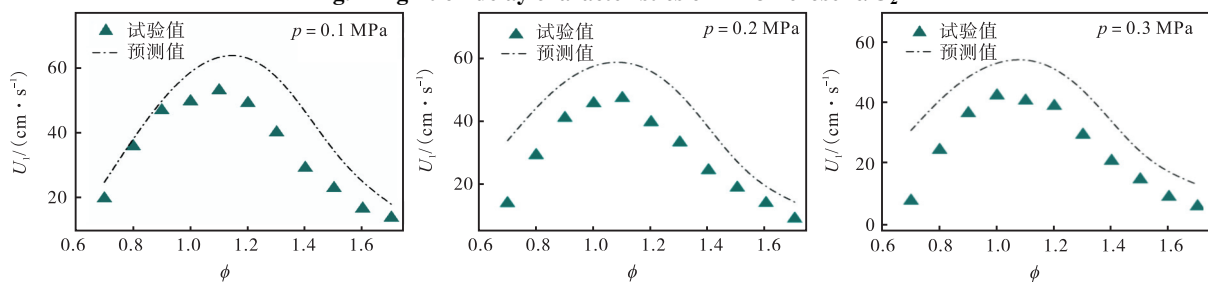


图 3 $T = 420\text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性

Fig.3 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ at $T = 420\text{ K}$

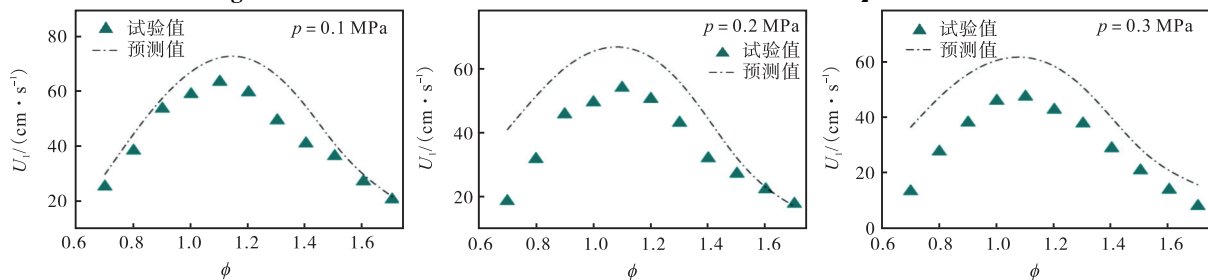
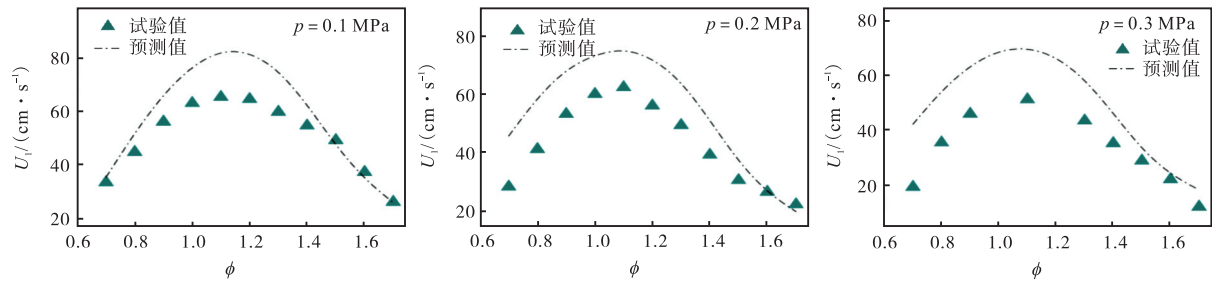


图 4 $T = 450\text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性

Fig.4 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ at $T = 450\text{ K}$

图 5 $T = 480 \text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性Fig.5 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ at $T = 480 \text{ K}$

2 初始简化反应机理优化

虽然采用该简化反应机理计算得到的 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分摩尔分数随温度的变化趋势、着火延迟时间随温度的变化趋势以及层流燃烧速度随当量比的变化趋势与试验获得的相关变化趋势吻合较好,但是,在各工况下主要组分摩尔分数、着火延迟时间及层流燃烧速度的预测值与相应试验值存在较大差异。

值得注意的是,由于计算理论或者试验测试设备精度的不足,碳氢燃料的化学反应机理中基元反应的反应速率常数存在一定的不确定性,尤其是涉及大分子的化学反应,从而影响化学反应机理的预测性能。在该简化反应机理的构建过程中^[17],先分别构建了模型燃料中 5 种组分的燃料相关骨架反应机理,然后与 C₀~C₃ 详细反应机理耦合,最终形成了模型燃料的简化反应机理。为了改善该简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气混合物的氧化特性、着火延迟特性及层流燃烧特性的预测性能,需对该简化反应机理中 5 种组分燃料相关骨架反应机理中基元反应的速率常数进行优化。

以典型工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度为目标,对该简化反应机理中燃料相关骨架反应机理中的反应速率进行敏感性分析,获得各基元反应的敏感性系数,从而识别对目标预测值影响较大的基元反应。

敏感性系数 S_{ij} 通过式(1)计算。

$$S_{ij} = \frac{\eta_{ij} - \eta_{ij,0}}{\eta_{ij,0}} \quad (1)$$

式中: η_{ij} 为第 i 个反应的速率常数增加 1 倍后反应机理对第 j 个目标的预测值; $\eta_{ij,0}$ 为初始反应机理对第 j 个目标的预测值。

由于不同目标的敏感性系数计算方法一致,在本

文中仅展示了初始压力为 0.1 MPa、当量比为 1.0 及初始温度范围为 700~900 K 工况条件下,燃料相关骨架反应机理中的基元反应对 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中 C₂H₄、C₃H₆ 和 iC₄H₈ 组分浓度的敏感性系数的计算与分析过程,如图 6 到图 8 所示,以阐明该简化反应机理的敏感性分析过程。

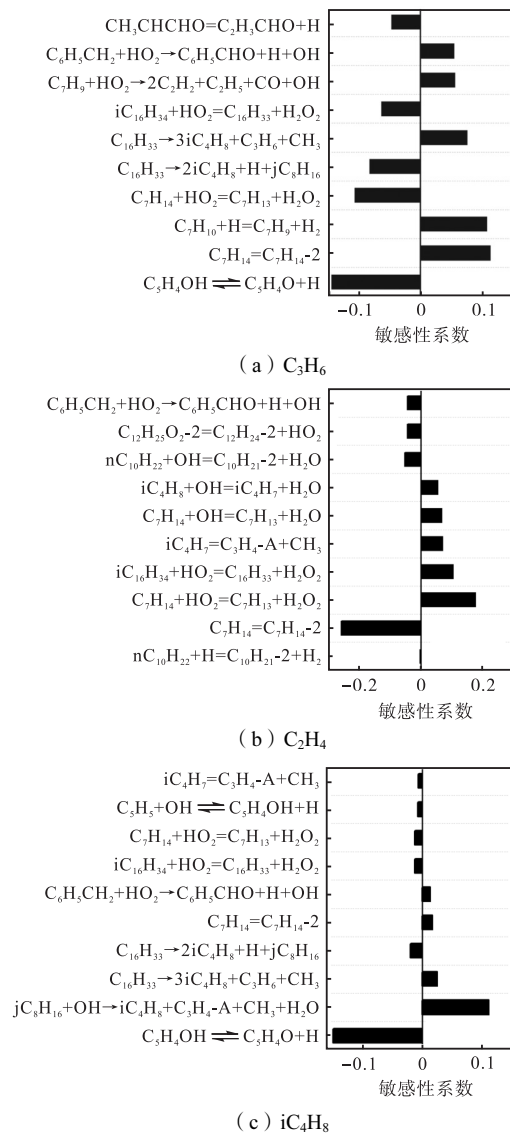
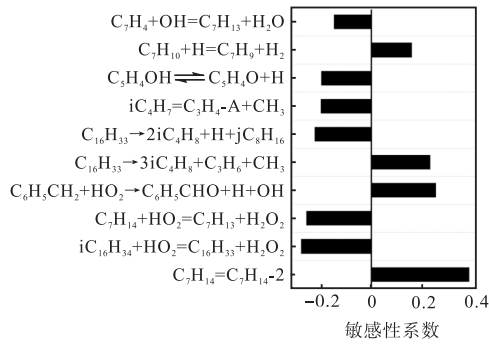
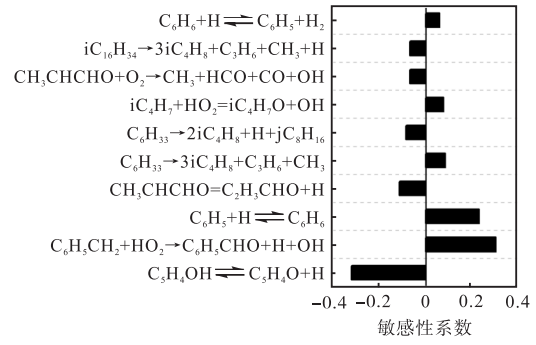
图 6 $T = 700 \text{ K}$ 时,主要组分浓度的敏感性分析

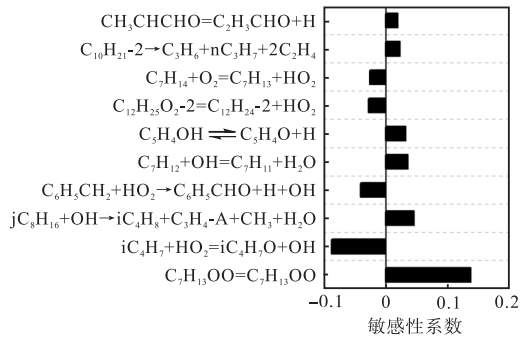
Fig.6 Sensitivity analysis of main species concentration at 700 K



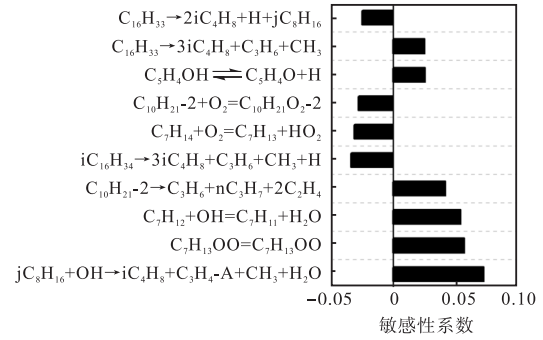
(a) C₃H₆



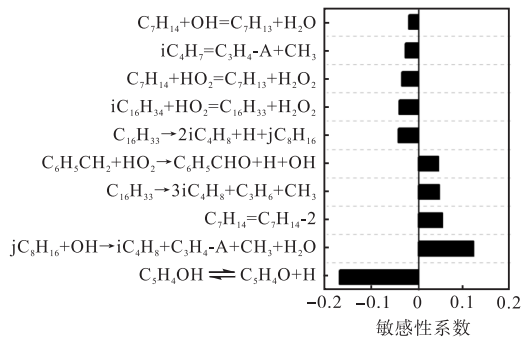
(a) C₃H₆



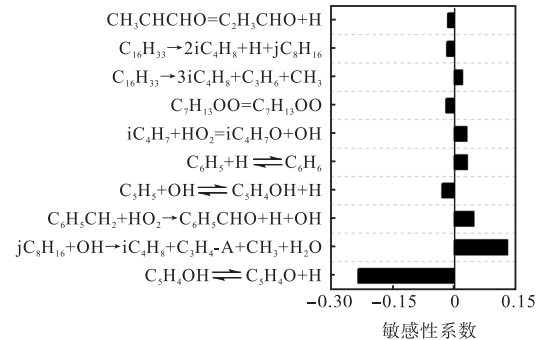
(b) C₂H₄



(b) C₂H₄



(c) iC₄H₈



(c) iC₄H₈

图7 $T=800\text{ K}$ 时,主要组分浓度的敏感性分析

Fig.7 Sensitivity analysis of main species concentration at 800 K

图8 $T=900\text{ K}$ 时,主要组分浓度的敏感性分析

Fig.8 Sensitivity analysis of main species concentration at 900 K

从图 6 到图 8 可以看出,在初始温度为 700 K 时,芳香烃子机理中的反应 $\text{C}_3\text{H}_4\text{OH} = \text{C}_3\text{H}_4\text{O} + \text{H}$ 对 C_3H_6 和 iC_4H_8 均显示了最高的敏感性系数,而对 C_2H_4 具有最高敏感性系数的反应为 MCH 子机理中的 $\text{MCH} = \text{C}_7\text{H}_{14}-2$. 而在初始温度为 800 K 时,对 C_2H_4 和 C_3H_6 具有最高敏感性系数的反应分别为 MCH 子机理中的 $\text{MCH}_2\text{OO} = \text{MCH}_2\text{QJ4}$ 和 $\text{MCH} = \text{C}_7\text{H}_{14}-2$, iC_4H_8 仍旧主要受反应 $\text{C}_5\text{H}_4\text{OH} = \text{C}_5\text{H}_4\text{O} + \text{H}$ 主导. 随着初始温度的继续升高,反应 $\text{C}_5\text{H}_4\text{OH} = \text{C}_5\text{H}_4\text{O} + \text{H}$ 对 C_3H_6 和 iC_4H_8 均显示了最高的敏感性系数,对 C_2H_4 具有最高敏感性系数的反应为 HMN 子机理中的 $\text{JC}_8\text{H}_{16} + \text{OH} \rightarrow \text{iC}_4\text{H}_8 + \text{C}_3\text{H}_4-\text{A} + \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$. 总体来说,在当前工况条件下, C_2H_4 、 C_3H_6 和

iC_4H_8 主要受环烷烃、异烷烃和芳香烃子机理主导,烷烃骨架反应机理中的基元反应则对烯烃组分浓度的影响均较小.

综合 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度的敏感性分析结果,选择对研究目标敏感性系数较高的基元反应进行进一步优化,以改善该简化反应机理的预测性能. 为了降低优化过程中的人为因素,并提高优化效率,通过结合 CHEMKIN 和非劣解排序遗传算法 (NSGA-II),实现基元反应速率常数的自动优化. 通过引入拥挤距离和精英策略,NSGA-II 能够降低计算的复杂性,并且可以有效保存最优解,其主要步骤如下:

(1) 将初始简化反应机理中敏感性系数较高的基元反应的速率常数在不确定范围内随机扰动,生成 N 个反应机理;

(2) 使用 CHEMKIN 计算 N 个反应机理对优化目标的预测值;

(3) 基于步骤(2)的结果,计算目标函数和适应度;

(4) 基于初始生成的 N 个反应机理,通过预设的选择、交叉和变异算子,生成 N 个新的反应机理;

(5) 使用 CHEMKIN 计算 N 个新的反应机理对优化目标的预测值,并计算目标函数和适应度;

(6) 采用精英策略,统计 N 个新的反应机理与上一代 N 个反应机理的适应度,选择适应度最前的 N 个反应机理作为下一代;

(7) 重复步骤(4)~(6),直到预设的最大迭代代数,获得最终的简化反应机理。

根据 Niu 等^[20]的工作,本文的优化目标:压力为 1.0 ~ 5.0 MPa、温度为 1000 ~ 1500 K 和当量比为 0.8 ~ 3.5 条件下的着火延迟时间,以及压力为 0.1 MPa、温度为 650 ~ 1100 K 和当量比为 1.0 条件下的组分浓度。目标函数如公式(2)和公式(3)所示,优化对象为初始简化反应机理中敏感性系数较高的基元反应的速率常数,优化参数设置如下:个体数为 28,交叉概率为 0.9,变异概率为 0.05,最大迭代代数为 500。

$$f_{ig}(A) = \sum_{j=1}^{N_{ig}} \left| \frac{\tau_j^{sim} - \tau_j^{exp}}{\tau_j^{exp}} \right| \quad (2)$$

$$f_{sp}(A) = \sum_{s=1}^{N_s} \sum_{t=1}^{N_t} \frac{|M_{s,t}^{sim} - M_{s,t}^{exp}|}{M_{s,t}^{exp} + M_{s,t,max}^{exp}} \quad (3)$$

式中: $f_{ig}(A)$ 和 $f_{sp}(A)$ 分别为着火延迟时间和组分浓度的目标函数; A 为被优化反应的指前因子; τ_j^{sim} 和 τ_j^{exp} 分别为第 j 个工况着火延迟时间的预测值和实验值; N_{ig} 为着火延迟时间的总数目; $M_{s,t}^{sim}$ 和 $M_{s,t}^{exp}$ 分别为第 s 个组分浓度在第 t 个温度点的预测值和试验值; $M_{s,t,max}^{exp}$ 为第 s 个组分浓度的最大值; N_s 和 N_t 分别为组分和温度点的总数目。

图 9 显示了初始简化反应机理优化过程中目标函数值随迭代代数的变化趋势。从图 9 可以看出,随着迭代代数的增加,两个目标函数的数值均越来越小,表明反应机理的预测性能得到了显著改善。此外,第 200 代的目标函数值与第 500 代基本一致,表明优化过程已经收敛,获得了最终的简化反应机理。其中,部分关键基元反应及其反应速率常数(指前因子)的优化前后数据(变化最为显著)如表 1 所示。

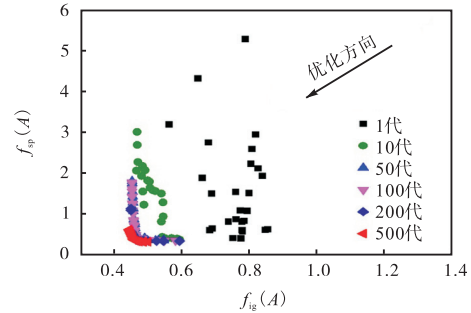


图 9 目标函数随迭代代数的变化趋势

Fig.9 Variation trend of objective function with iterative algebra

表 1 反应速率常数(指前因子)优化

Tab.1 Optimization of reaction rate constant (pre-exponential factor)

关键基元反应	优化前	优化后
$C_7H_8 + O_2 = C_6H_5CH_2 + HO_2$	2.0×10^{14}	4.0×10^{15}
$C_6H_5CHO + H = C_6H_5CO + H_2$	2.28×10^{10}	4.56×10^{11}
$iC_{16}H_{34} = 3iC_4H_8 + C_3H_6 + CH_3 + H$	5.66×10^{30}	1.13×10^{32}
$OOC_{16}H_{32}OOH = C_{16}H_{32}OOH + O_2$	5.8×10^{23}	1.16×10^{25}
$C_7H_{12}O + HO_2 = C_7H_{11}O + H_2O_2$	4.0×10^4	8.0×10^5
$CH_3O_2 + HO_2 = CH_3O_2H + O_2$	2.47×10^{11}	4.94×10^{12}
$C_{12}OOH_2-4 = C_{12}O_2-4 + OH$	6.88×10^{12}	1.38×10^{14}

3 简化反应机理验证

为了验证优化后的简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气的氧化特性、着火延迟特性以及层流燃烧特性预测的准确性,采用优化后的简化反应机理对宽工况范围条件下 RP-3 航空煤油/氧气的氧化特性、着火延迟特性以及层流燃烧特性进行数值计算,并与相应试验数据和优化前的简化反应机理的预测值进行对比分析。

图 10 显示了初始压力为 0.1 MPa、当量比为 1.0、初始温度范围为 650 ~ 1050 K 条件下,RP-3 航空煤油/氧气混合物在流动管反应器中的氧化过程中主要组分摩尔分数的试验值^[18]、优化前简化反应机理的预测值及优化后简化反应机理的预测值。由图 10 可以看出,经过优化后,该简化反应机理对主要组分摩尔分数的预测性能获得大幅提升。采用优化后的简化反应机理计算得到的 O_2 、 H_2O 、 CO 、 CO_2 、 CH_4 、 C_2H_6 、 C_2H_4 、 C_3H_6 、 CH_3CHO 、 CH_3OH 、 C_4H_6 、 iC_4H_8 等组分的摩尔分数随温度变化趋势与相应试验值吻合较好;同时,各初始温度下 O_2 、 H_2O 、 CO 、 CO_2 、 CH_4 的摩尔分数的预测值与试验值较为吻合, C_2H_6 、 C_2H_4 、 C_3H_6 、 CH_3CHO 、 CH_3OH 、 C_4H_6 、 iC_4H_8 等组分的摩尔分数峰值的预测值与试验值存在一定偏差,但是误差较小。

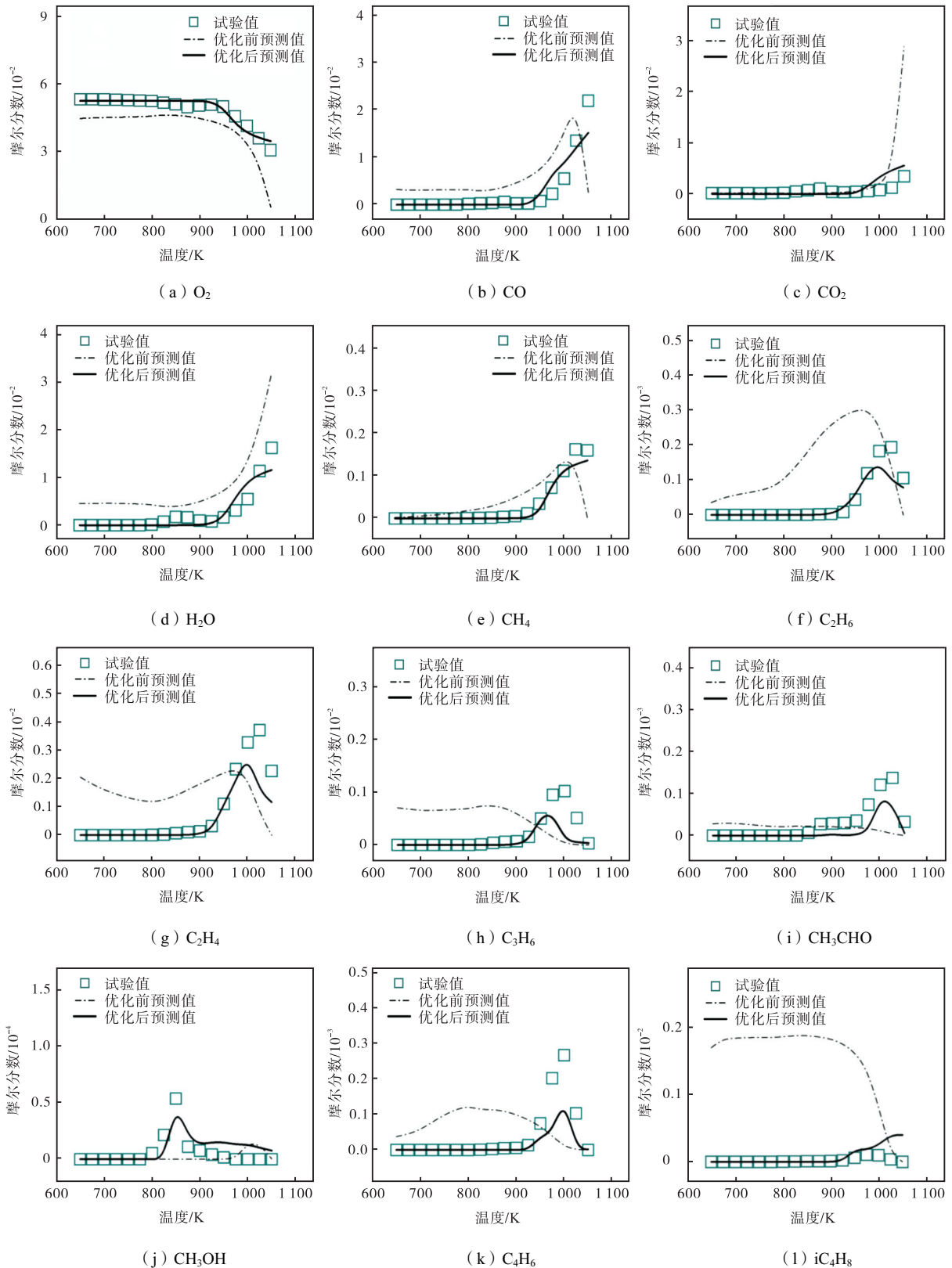


图 10 RP-3航空煤油/氧气的氧化特性

Fig.10 Oxidation characteristics of RP-3 kerosene/O₂

图 11 给出了初始压力分别为 0.2 MPa、1.0 MPa 及 5.0 MPa、当量比分别为 0.8 和 3.5、不同温度条件下,RP-3 航空煤油/氧气混合物在激波管中着火延迟时间的试验值^[18]、优化前简化反应机理的预测值及

优化后简化反应机理的预测值。

由图 11 可以看出,经过优化后,各工况条件下该简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气混合物着火延迟时间的预测性能获得大幅提升,尤其在初始压力

为 5.0 MPa、当量比为 3.5 时. 在高温区域, 采用优化后的简化反应机理计算得到的 RP-3 航空煤油/氧气混合物的着火延迟时间与相应试验值吻合良好, 在低温区域, 部分工况下着火延迟时间的预测值与相应试验值之间存在偏差, 但误差较小.

0.2 MPa 和 0.3 MPa、初始温度分别为 420 K、450 K 和 480 K、不同当量比条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物在定容弹中层流燃烧速度的试验值^[19]、优化前简化反应机理的预测值及优化后简化反应机理的预测值.

图 12 到图 14 给出了初始压力分别为 0.1 MPa、

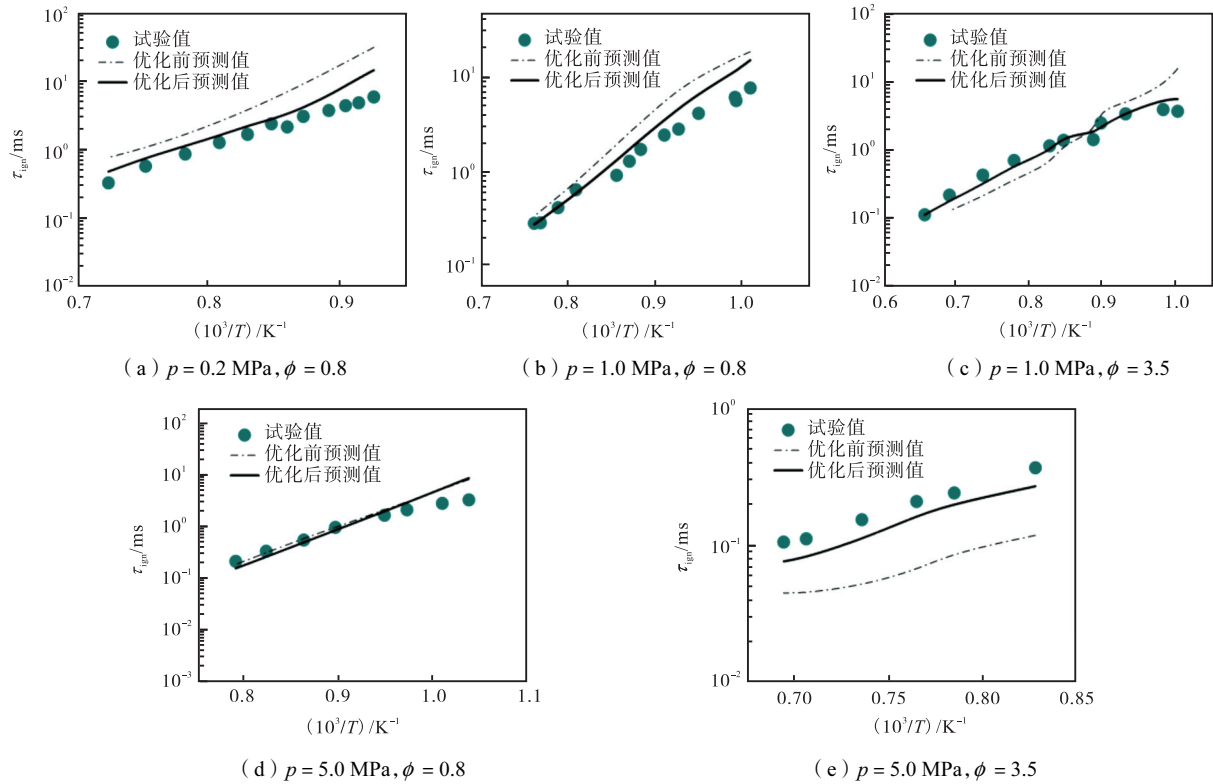


图 11 RP-3 航空煤油/氧气的着火延迟特性

Fig.11 Ignition delay characteristics of RP-3 kerosene/O₂

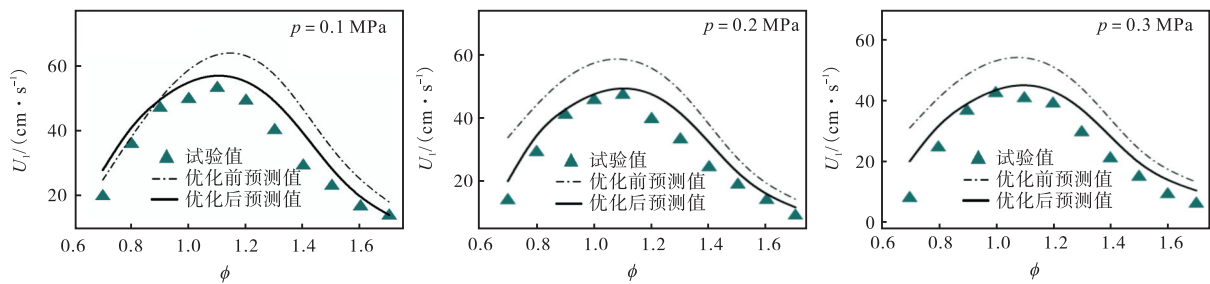


图 12 当 $T = 420 \text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性

Fig.12 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ at $T = 420 \text{ K}$

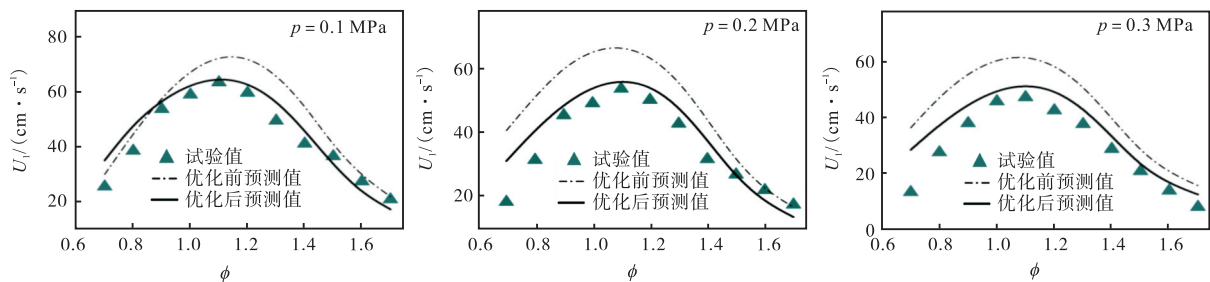


图 13 当 $T = 450 \text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性

Fig.13 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/O₂ at $T = 450 \text{ K}$

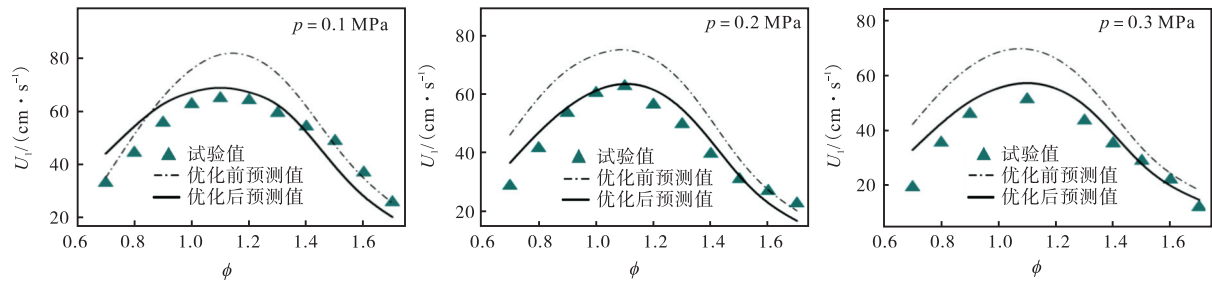


图 14 当 $T = 480 \text{ K}$ 时 RP-3 航空煤油/氧气的层流燃烧特性
 Fig.14 Laminar combustion characteristics of RP-3 kerosene/ O_2 at $T = 480 \text{ K}$

由图 12 到图 14 可以看出,虽然在部分工况条件下,采用优化后的简化反应机理计算得到的 RP-3 航空煤油/氧气混合物的层流燃烧速度与相应试验值存在较小偏差,但在大部分工况条件下,RP-3 航空煤油/氧气混合物层流燃烧速度的预测值与相应试验值吻合良好,说明优化后的简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气混合物层流燃烧速度的预测性能获得较大提升。

4 结 论

采用 RP-3 航空煤油的简化反应机理对 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度进行了数值计算,并与相应试验数据进行了对比分析;同时,采用敏感性分析方法与遗传算法,对该简化反应机理进行了优化,并完成了优化后的简化反应机理的验证。

(1) 通过与相应试验值的对比,发现 RP-3 航空煤油的简化反应机理能较好地预测 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分摩尔分数随温度的变化趋势、着火延迟时间随温度的变化趋势以及层流燃烧速度随当量比的变化趋势,但是,对大部分工况下 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度的预测精度较低。

(2) 采用敏感性分析方法对该简化反应机理中 5 种组分燃料相关骨架反应机理中基元反应进行了敏感性分析,阐明了 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中主要组分浓度、着火延迟时间及层流燃烧速度影响较大的基元反应。同时,采用遗传算法对重要的基元反应速率常数进行优化,形成了优化后的 RP-3 航空煤油/氧气混合物的简化反应机理。

(3) 通过与相应试验值的对比,发现优化后的简化反应机理对多工况条件下 RP-3 航空煤油/氧气混合物氧化过程中的主要组分浓度的预测相对误差低于 10%,着火延迟时间的预测相对误差低于 5%,层流燃烧速度的预测相对误差低于 8%。

参考文献:

- [1] 南向谊,王拴虎,李平.空气涡轮火箭发动机研究的进展及展望[J].火箭推进,2008,34(6):31-35.
Nan Xiangyi, Wang Shuanhu, Li Ping. Investigation on status and prospect of air turbine rocket[J]. *Journal of Rocket Propulsion*, 2008, 34(6): 31-35 (in Chinese).
- [2] Thomas M, Bossard J, Ostrander M. Addressing emerging tactical missile propulsion challenges with the solid propellant air-turbo-rocket[C]//36rd Joint Propulsion Conference and Exhibit. Huntsville, America, 2000: AIAA 2000-3309.
- [3] Thomas M, Leonard A. Air-turbo-rocket combustion[C]//33rd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, America, 1995: AIAA 95-0813.
- [4] Jiang R P, Liu G Z, Zhang X W. Thermal cracking of hydrocarbon aviation fuels in regenerative cooling microchannels[J]. *Energy & Fuels*, 2013, 27(5): 2563-2577.
- [5] Violi A, Yan S, Eddings E G, et al. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixture[J]. *Combustion Science and Technology*, 2002, 174(11/12): 399-417.
- [6] Ning W, Jin Z, Yu P, et al. Experimental investigation on flow patterns of RP-3 kerosene under sub-critical and supercritical pressures[J]. *Acta Astronautica*, 2014, 94: 834-842.
- [7] 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 Hong'an, 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).
- [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简化机理[J].推进技术,2014,35(8):1139-1145.

- Zeng Wen, Li Haixia, Ma Hongan, et al. Reduced chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2014, 35(8): 1139-1145 (in Chinese).
- [9] Mao Y B, Yu L, Wu Z Y, et al. Experimental and kinetic modeling study of ignition characteristics of RP-3 kerosene over low-to-high temperature ranges in a heated rapid compression machine and a heated shock tube[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 203: 157-169.
- [10] Mao Y B, Yu L, Qian Y, et al. Development and validation of a detailed kinetic model for RP-3 aviation fuel based on a surrogate formulated by emulating macroscopic properties and microscopic structure[J]. *Combustion and Flame*, 2021, 229: 111401.
- [11] Mao Y B, Xia J, Ruan C, et al. An experimental and kinetic modeling study of a four-component surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38(1): 555-563.
- [12] Li A, Zhang Z Y N, Cheng X G, et al. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology[J]. *Fuel*, 2020, 267: 116975.
- [13] Yu B B, Jiang X S, He D H, et al. Development of a chemical-kinetic mechanism of a four-component surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. *ACS Omega*, 2021, 6(36): 23485-23494.
- [14] Zhong B J, Peng H S. Development of a skeletal mechanism for aviation kerosene surrogate fuel[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2019, 35(3): 645-651.
- [15] Liu X, Wang Y, Bai Y Q, et al. Development and verification of a physical-chemical surrogate model of RP-3 kerosene with skeletal mechanism for aircraft SI engine[J]. *Fuel*, 2022, 311: 122626.
- [16] Liu J, Hu E J, Zeng W L, et al. A new surrogate fuel for emulating the physical and chemical properties of RP-3 kerosene[J]. *Fuel*, 2020, 259: 116210.
- [17] Liu J, Hu E J, Yin G Y, et al. An experimental and kinetic modeling study on the low-temperature oxidation, ignition delay time, and laminar flame speed of a surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. *Combustion and Flame*, 2022, 237: 111821.
- [18] 张鑫炜, 曾文, 胡斌, 等. RP-3 航空煤油/O₂ 的氧化与着火特性试验[J]. *航空动力学报*, 2024, 39(5): 1-9.
Zhang Xinwei, Zeng Wen, Hu Bin, et al. Experiment on the oxidation and ignition delay characteristics of RP-3 kerosene/oxygen[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2024, 39(5): 1-9 (in Chinese).
- [19] 饶大为. RP-3 航空煤油/空气预混火焰的不稳定燃烧特性研究[D]. 沈阳: 沈阳航空航天大学, 2023.
Rao Dawei. Study on the Unstable Combustion Characteristics of RP-3 Aviation Kerosene/Air Premixed Flame[D]. Shenyang: Shenyang Aerospace University, 2023 (in Chinese).
- [20] Niu B, Jia M, Xu G F, et al. Efficient approach for the optimization of skeletal chemical mechanisms with multi-objective genetic algorithm[J]. *Energy & Fuels*, 2018, 32: 7086-7102.