

煤油点火特性的研究

梁金虎 王苏 张灿 范秉诚 崔季平

(中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室 北京 100190)

摘要 在预加热到 135℃ 的高温高密度激波管中反射激波后 5 区, 进行了国产 3 号航空煤油点火特性实验。实验温度范围为 800–1450K、当量比为 0.5, 1, 1.5, 实验获得了高压 (5.5、11、22atm) 和低压区 (0.5、1、2atm) 煤油点火延时与点火温度、压力、燃料燃烧当量比以及煤油和氧化剂浓度的依赖关系。同时采用三种煤油燃烧反应动力学模型对煤油点火过程进行了数值模拟, 并将动力学模拟结果与实验结果进行了对比。

关键词 点火延时, 煤油, 激波管, 动力学模拟

引言

碳氢燃料点火延时时间是表征燃料燃烧特性的重要基础数据, 也是验证燃烧反应化学动力学模型及其模型简化的重要依据^[1]。实际工程应用中, 燃料的点火延时也是包括超燃冲压式发动机和脉冲爆轰发动机在内的一系列先进概念发动机燃烧室设计时必须考虑的一个重要参数^[2,3]。尤其是在超燃冲压发动机中, 气体的高速流动状态导致其在燃烧室内的驻留时间通常只有几个毫秒, 与驻留时间可比的碳氢燃料点火延时时间成为燃烧室工作状态非常重要的参数, 碳氢燃料的点火特性一直是超燃发动机研究中关注的重要问题。

煤油是典型的碳氢燃料, 具有较为稳定的热力学特性和较高的体积能量密度, 是超燃冲压发动机和脉冲爆轰发动机的首选预期燃料^[4]。本文的研究燃料国产 3 号航空煤油是我国超燃冲压式发动机研究中的主要燃料。目前, 国内外的研究人员进行了大量关于碳氢燃料点火延时的研究工作, 但是研究燃料主要集中在单组分燃料, 针对煤油这种高碳数大分子的多组分混合物燃料的研究相对较少。早期对于煤油点火特性的研究主要是在流动反应装置上进行的, 这一时期最具代表性的工作是 Mullins 进行的^[5], 在类似于流动反应管的装置中进行了煤油点火特性的研究, 研究中来流为有“污染”的空气。Dagaut

等人^[6]通过测定煤油燃烧产物组成的分析方法在流动搅拌反应器中进行了法国航空煤油燃烧特性的研究, 并且建立了法国航空煤油燃烧反应的详细动力学模型。Dean 等人^[7]在加热型激波管测量了燃料 Jet-A 在空气中的点火延时, 实验条件为 $\Phi=0.5$ 、1.0、2.0, 压力 8.5 ± 1 atm, 温度范围 1000–1700K。Vasu 等人^[8]利用激波管考察了 Jet-A 和 JP-8 在压力范围为 17–51 atm, 温度范围为 715–1229K, 氧气含量分别为 10%和 21%条件下的点火特性。Steil 等人^[9]在高稀释度条件下 (Jet-A 含量为 900ppm) 测量了 Jet-A 在 1250–1700K 内的点火延时, 实验压力范围为 2.9–5.9atm。Kumar 和 Sung^[10]在预热的重活塞压缩反应器中(RCM)考察了 Jet-A 和 JP-8 在压力分别为 7、15、30atm, 温度为 650–1100K 条件下的点火特性。在国内, 王苏等人^[11]利用激波管测量了高氩气稀释度 (93-98%)条件下气相煤油在 1.6–5atm 条件下的点火延时。廖钦等人^[12]利用雾化激波管对雾化煤油在 1–6atm 下的非均相点火进行了相关研究。张英佳等人^[13]利用激波管考察了雾化煤油在高温常压(1445–1650K, 1atm)条件下的点火特性。以上研究中国外所用的煤油大部分是 Jet-A 和 JP-8, 国内研究所用的燃料是国产 3 号航空煤油。然而, 这几种煤油在化学组成上的不同是否会导致点火和燃烧特性的改变是不确定的。此外, 已有

实验和动力学模拟研究表明燃料在低压和高压下有时会呈现出不同的点火特性^[14-16]。

在激波管中，本文研究国产 3 号航空煤油点火特性，温度范围为 800–1450K，当量比为 0.5、1、1.5，压力为 0.5–22atm。本研究特别关注煤油在高压和低压条件下的点火特性，同时利用现有的三种煤油燃烧反应动力学模型对煤油点火过程进行了数值模拟，并将模拟结果与实验结果进行了对比。

1 实验

实验在中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室的高温高密度激波管上进行。激波管高压段长 3.0m，低压段长 4.1m，双膜段长 0.2m，内径均为 10.0cm，同时在激波管外壁上缠绕加热带以及保温材料，将激波管壁恒定在 135℃。低压室采用涡轮分子泵使系统的极限真空达到 5×10^{-4} Pa，系统漏率小于 2×10^{-2} Pa/min。低压室侧壁装有两个测量激波速度的压电传感器，在尾盖上装有一个测量反射激波后 5 区压力变化的压电传感器，此传感器信号经电荷放大器放大后接入数据采集卡。在低压段尾部紧靠后端盖的侧壁上开有内径为 8mm 的石英光学观察窗口，点火发生时发射的 OH 自由基光谱信号经透镜聚焦于单色仪的入射狭缝上，单色仪的测定波长选在 OH 自由基在 306.5nm ($A^2 \Sigma^+ \rightarrow X^2 \Pi_i$) 的特征发射光谱处，单色仪分光后经光电倍增管转换为电信号接入数据采集卡，数据采集卡与电脑连接。

点火延时一般定义为低压段端盖处压电传感器测到反射激波产生为时间零点，单色仪测定 OH 自由基发射光谱信号上升最大斜率处作切线与信号基线的交点处对应的时间为点火发生时间，两者时间差即为相应条件下的点火延时。

2 结果与讨论

通过激波管实验，测量了温度范围为 800–1450K， $\Phi=0.5、1、1.5$ ，压力分别为 0.5、1、2、5.5、11、22atm 时，国产 3 号航煤点

火延时的数据，给出了此条件下煤油点火延时与点火温度、压力、当量比以及煤油浓度和氧化剂浓度的拟合关系式。由于发现煤油在高压和低压下的点火延时对这些参数的依赖关系是不同的，因此对他们分别进行了拟合。

高压条件下，压力为 5.5、11、22atm 时

$$t_{ign} = 3.20 \times 10^{-11} [Kerosene]^{0.22} [O_2]^{-1.09} \exp(69941/RT) \quad (1)$$

$$t_{ign} = 4.72 \times 10^{-7} P^{-0.88} \phi^{0.23} \exp(62092/RT) \quad (2)$$

低压条件下，压力为 0.5、1、2atm 时

$$t_{ign} = 1.64 \times 10^{-6} [Kerosene]^{-0.33} [O_2]^{0.19} \exp(34491/RT) \quad (3)$$

$$t_{ign} = 2.87 \times 10^{-5} P^{-0.14} \phi^{-0.33} \exp(33197/RT) \quad (4)$$

式 (1) 和 (2) 的拟合回归系数 $R^2=0.92$ ，式 (3) 和 (4) 的拟合回归系数 $R^2=0.96$ ，其中 t_{ign} 表示点火延时，其单位为 s， ϕ 表示燃料燃烧当量比， $[Kerosene]$ 和 $[O_2]$ 分别代表煤油和氧气的浓度，单位为 mol/cm^3 ， P 为点火压力，单位为 atm，点火活化能的单位为 J/mol。

拟合结果显示，在高压和低压条件下当量比对煤油点火延时的影响指数是相反的。高压下当量比影响指数是正值，煤油点火延时随着当量比的增加而增长；低压下，当量比影响指数是负值，煤油点火延时随当量比的增加而缩短。

为了更加直观的观察这种影响，图 1 显示了当量比在不同压力下对煤油点火的影响。由于点火延时时间与温度的关系基本满足 Arrhenius 关系，通常将点火延时时间的对数 $\lg t_{ign}$ 与温度的倒数 $1/T$ 作图，纵坐标取对数坐标，横坐标 $1000/T$ 表示 1000 乘以温度的倒数。

从图 1 中可以看出，给定点火压力下，煤油点火延时随着当量比的改变并没有发生巨大变化。这一点与其他低碳数小分子燃料当量比改变而导致其点火延时的剧烈变化是不同的，其原因是由于改变燃料当量比的方式不同所造成的。一般情况下，改变燃料燃烧当量比的方式有两种，一种是固定燃料的浓度改变氧化剂的浓度，一种是固定氧化剂的浓度改变燃料的浓度。这两种方式都

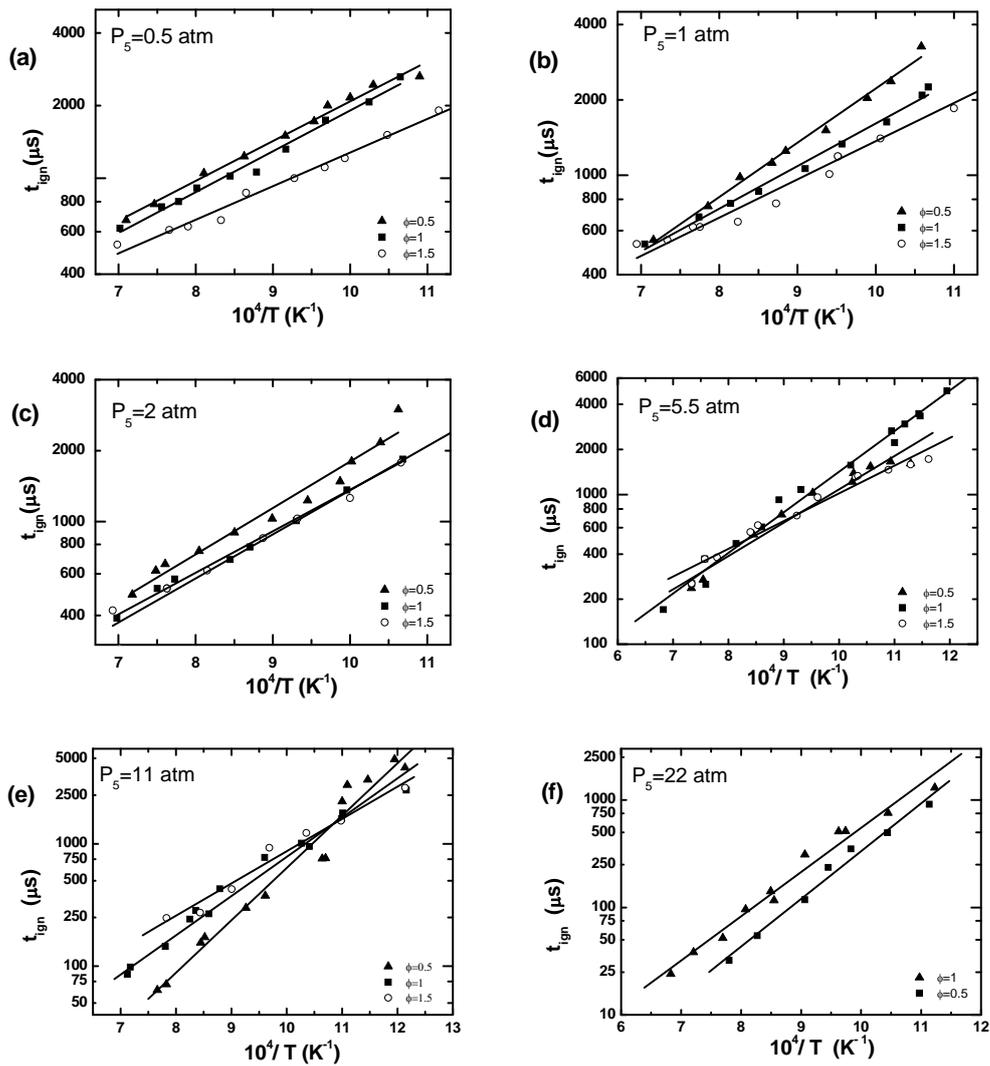


Fig.1. Effect of equivalence ratio on the ignition delay of kerosene at different pressures
(a) 0.5atm, (b) 1atm, (c) 2 atm, (d) 5.5 atm, (e) 11atm,(f) 22atm

可以改变燃料和氧化剂的比例，从而改变燃料燃烧的当量比。对于大分子燃料，如果采用第一种方式来改变当量比，氧化剂的比例将大幅变化。由于在实际点火过程中燃烧混合物中氧化剂比例是基本固定的，所以对高碳数大分子燃料的点火研究通常采用第二种当量比的改变方式，即固定氧化剂而改变燃料浓度。在这种条件下，虽然燃料浓度也会大幅变化，但是由于燃料在整个混合物中所占的比重比较小，其数值依旧为一个较小的百分数。另一方面，对大多数碳氢燃料而言，在点火延时与氧化剂和燃料浓度的依赖关系式中，氧化剂浓度指数的绝对值要比燃料浓度指数的绝对值大，因此采用第一种改变燃

料当量比的方式，即改变氧化剂浓度时，燃料当量比的变化将会引起点火延时的显著改变；当采用第二种改变燃料当量比的方式，即改变碳氢燃料的浓度时，导致燃料点火延时的改变程度将减小很多。本文研究得到，在高压条件下，煤油点火延时与大多数碳氢燃料类似，氧化剂的影响指数的绝对值远大于燃料的影响指数绝对值。在低压条件下，氧化剂和燃料的影响指数绝对值相差不大。本文研究中改变当量比的方式为改变燃料浓度，因此在高压和低压条件下，恒定压力变化当量比时，煤油点火延时都未发生剧烈改变。

图 1 显示，在低压条件下煤油的点火延

时随着当量比的增加而缩短，这与当量比对其他碳氢燃料点火特性的影响刚好相反。对于大多数碳氢燃料而言，点火延时随着当量比的增加而增长。在高压条件下，当量比对煤油点火延时的影响存在一个临界温度，在此临界温度当量比影响指数的正、负号发生转变。在临界温度以上的高温区，当量比影响指数为正值，煤油点火延时随着当量比的增加而增长；在临界温度以下的低温区，这一影响截然相反，当量比影响指数为负值，点火延时随着当量比的增加而缩短。

这一临界温度随着压力的不同而变化，在 22atm 下，临界温度低于实验温度范围的最低温度 850K；压力降低到 11atm 时，临界温度为 910K；压力降低到 5.5atm 时，临界温度升高到了 1180K。从这就说明临界温度随着点火压力的降低而升高。当压力降低到 2atm、至更低的 1 和 0.5atm 时，临界温度超出了实验温度范围中的最高温度 1450K。这表明，在低压实验中实验的温度范围都低于临界温度，实验温度范围处于当量比影响指数为负值的区域。所以在低压条件下的整个实验温度范围内，煤油的点火延时随着燃料当量比的增加而缩短。这表明煤油燃烧化学反应机理中，某些与压力有关的基元反应在点火过程中起着重要的作用。

在激波管实验结果的基础上，进一步通过 Chemkin 程序^[17]中的 Senkin 模块^[18]对煤油点火过程进行了化学动力学数值模拟。模拟过程中假设反射激波后 5 区为定容绝热体系，将点火发生时间定义为 OH 自由基浓度历史达到最大值时的时间。本文模拟过程中，采用了三种煤油燃烧反应机理。

Dagaut^[6]提出的模拟法国航空煤油的三组分替代物煤油燃烧反应机理模型。该模型包含 209 个物种和 1673 步反应，三组分替代物为正庚烷、正丙基苯和正丙基环己烷，三种化合物的摩尔比为：74%：15%：11%。

Honnet 等人^[19]提出的两组分替代物煤油燃烧反应机理模型，包含 122 个物种和 900 步反应，替代物为 77.17%(摩尔比)正庚烷和 22.83%(摩尔比)1,2,4-三甲基苯。

李象远等人^[20]使用自编的化学反应机

理自动生成程序提出的三组分替代物煤油燃烧反应机理模型，包含 232 个物种和 1189 步基元反应，三组分替代物为正庚烷、1,3,5-三甲基环己烷和正丙基苯，三种替代物的摩尔比为：74.24%、14.11%、11.65%。

使用上述三种化学反应机理，在 $\Phi=1$ 、压力为 0.5–22atm 条件下，本文分别对煤油点火过程进行了数值模拟，并将模拟结果与实验结果进行了对比，结果如下图 3 所示。

图 3 显示，在压力 22atm 下，国产 3 号航煤的点火延时本文实验结果与相同实验条件下 Vasu 等人以及 Dean 等人测量获得的 Jet-A 点火延时基本吻合。实验与数值模拟的对比显示，三种煤油化学反应动力学机理中，实验结果与利用 Honnet 的煤油燃烧反应机理的模拟结果基本吻合，采用 Dagaut 和李象远的煤油反应机理的模拟结果与实验结果有较大的偏差。其中，采用 Dagaut 机理模拟得到的点火活化能与本实验结果相近，而利用李象远机理模拟得到的结果过高的估计了煤油点火活化能。除了 22atm 外，其余压力下利用三种反应机理得到的模拟结果与实验结果相差较大，而且这种差异随压力的减小而增加。三种机理模拟结果得出的点火活化能都大于实验值，其原因可能是这三种机理都没有给出与压力有关基元反应的速率常数对压力依赖足够的权重。下一步工作，将对那些与压力有关基元反应的速率常数与压力的依赖关系适当修改，使其在低压下的模拟结果也能与实验结果较好的吻合，给出一个适用于国产 3 号航空煤油的燃烧反应动力学模型。

3 结论

在预热到 135℃的激波管中，利用 OH 自由基特征发射光谱测定了国产 3 号航空煤油的点火延时，温度为 800K–1450K， $\Phi=0.5$ 、1、1.5，压力分别为 0.5、1、2、5.5、11、22atm，获得了煤油点火延时与点火温度、压力、当量比以及煤油浓度和氧化剂浓度的拟合关系式。

通过考察当量比对煤油点火特性的影响发现，当量比对煤油点火特性的影响存在

一个临界温度。在高于临界温度的高温区，煤油点火延时随着当量比的增加而增长；低于临界温度的低温区，煤油点火延时随着当量比的增加而缩短。

1 Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2002, 4(11):2079-2094
 2 Davidson DF, Hanson RK. Interpreting shock tube ignition data. *Int J Chem Kinet*, 2004, 36(9):510-523

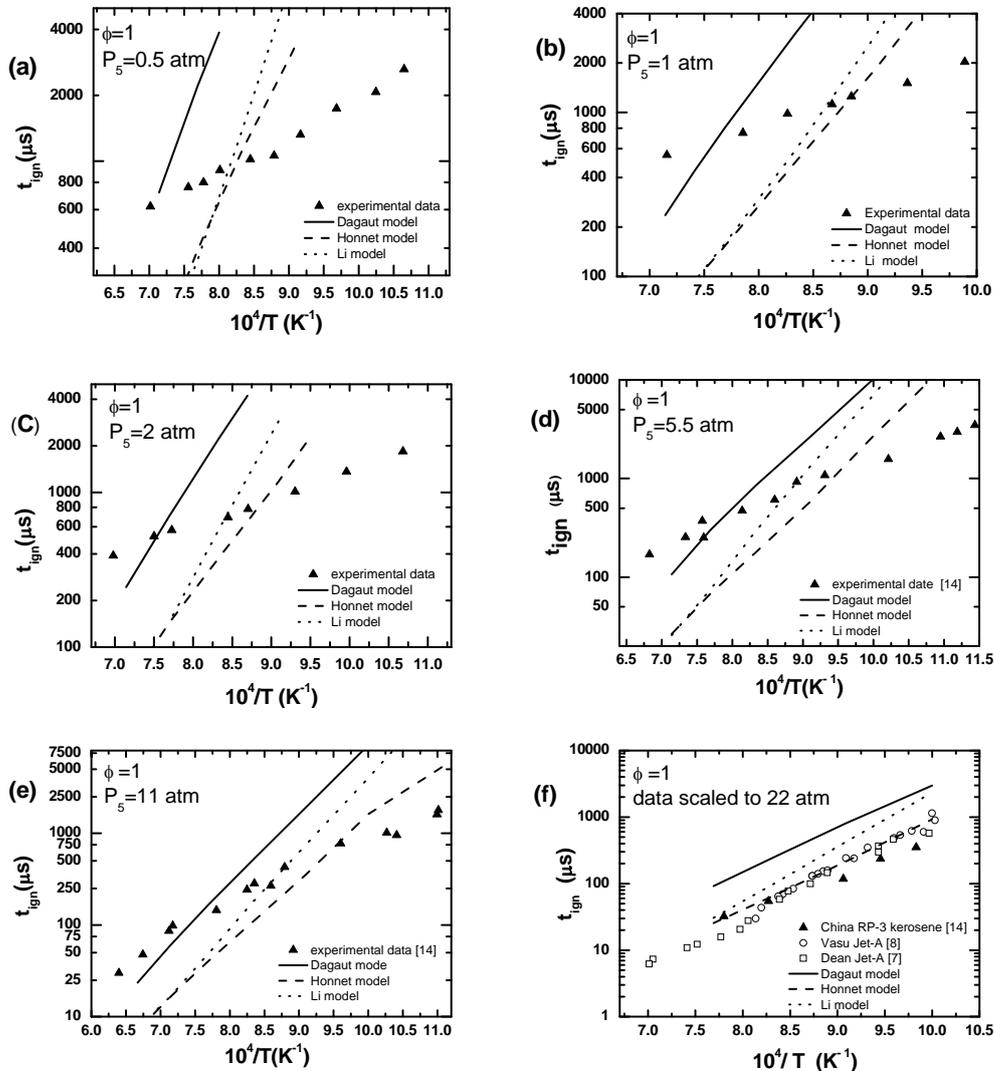


Fig.3 Measured and simulated ignition delays for stoichiometric kerosene at different pressures.
 (a) 0.5atm, (b) 1atm, (c) 2 atm, (d) 5.5 atm, (e) 11atm,(f) 22atm

利用三种煤油燃烧反应动力学模型进行动力学模拟得到的煤油点火延时与相同条件下的实验结果对比，结果显示 Honnet 提出的煤油燃烧反应机理在 22atm 下的模拟结果能够与实验结果很好的吻合，其余压力下这一模型过高的估计了煤油点火的活化能。Dagaut 模型和李象远的模型在整个压力范围都过高的估计了煤油的点火活化能，而且这种差距随着点火压力的减小逐渐变大。

3 Zhukov VP, Sechenov V A, Starikovskii AY. Autoignition of n-decane at high pressure. *Combustion and Flame*, 2008, 153(1-2), 130-136()
 4 张新宇.高超声速吸气式发动机的研究进展与发展趋势. *力学进展*, 2001, 31(3):478-480
 5 Mullins BP. Studies on the spontaneous ignition of fuels injected into a hot air-stream part 2: Effect of physical factors upon the ignition delay of kerosene-air mixtures. *Fuel*, 1953, 32(2):234-241
 6 Dagaut P, Cathonnet M. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling *Progress of Energy Combustion and Science*, 2006, 32:48-92

参考文献

- 7 Dean AJ, Penyazkov OG, Sevruk KL, et al. Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures. *Proc Combust Inst*, 2007, 31:2481-2488
- 8 Vasu SS, Davidson DF, Hanson RK. Jet fuel ignition delay times: shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions. *Combustion and Flame*, 2008, 152:125-143
- 9 Steil U, Braun UM, Aigner M, et al. An experimental and modeling study on the autoignition of kerosene and surrogate fuel mixture. In: 46th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, Nevada, 2008, AIAA paper 2008-973
- 10 Kumar K, Sung CJ. An experimental study of the autoignition characteristics of conventional jet fuel/oxidizer mixtures: Jet-A and JP-8. *Combustion and Flame*, 2010, 157(4):676-685
- 11 Wang S, Fan BC, He YZ, et al. Shock tube study of kerosene ignition delay. *Shock Waves*, 2009, 16(1): 775-780
- 12 Liao Q, Xu SL. The ignition delay measurement of atomized kerosene air mixture in an aerosol shock tube. *Journal of experimental Fluid Mechanics*, 2009, 23(3): 70-74
- 13 Zhang YJ, Huang ZH, Wang JH, et al. Shock tube study on auto-ignition characteristics of kerosene/air mixtures. *Chinese Science Bulletin*, 2011, 56(1):85-93
- 14 Petersen EL, Röhrig M, Davidson DF, et al. High-pressure methane oxidation behind reflected shock waves. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1996, 26(1):799-806
- 15 Petersen EL, Davidson DF, Hanson RK. Ignition delay times of ram accelerator CH₄/O₂/diluent Mixtures. *Journal of Propulsion and Power*, 1999, 15(1):82-91
- 16 Petersen EL, Davidson DF, Hanson RK. Kinetics modeling of shock-induced ignition in low-dilution CH₄/O₂ mixtures at high pressures & intermediate temperatures. *Combustion and Flame*, 1999, 117(1-2):272-290
- 17 Kee RJ, Rupley F M, Miller JA. CHEMKIN II. Sandia National Laboratory Report, 1989, SAND 89-8009
- 18 Lutz AE, Kee RJ, Miller JA. Senkin: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis, Sandia National Laboratories Report, 1987, SAND87-8248
- 19 Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1):485-492
- 20 Li XY, 2013, available at: <http://ccg.scu.edu.cn/RP3-detailedmech.inp.txt>

Studies on the ignition delay characteristics of kerosene

LIANG Jinhu WANG Su ZHANG Can FAN Bingcheng CUI Jiping

(State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100190, China)

Abstract In a shock tube preheated at a constant temperature of 135K, the ignition delay characteristics of China No. 3 aviation kerosene were studied behind reflected shock waves, at the temperature range from 800 to 1450K, and stoichiometric ratios of 0.5, 1, and 2. Under both high-pressure and low-pressure conditions, the experimental results of ignition time were correlated with the temperature, pressure, stoichiometry, and the concentrations of kerosene and oxygen. Meanwhile, the ignition process of kerosene was simulated by using three kinds of kerosene combustion kinetic model, and the simulation results were compared with the experimental results.

.Key words ignition delay, kerosene, shock tube, kinetic simulation