

烷烃类燃料/空气预混气着火过程数值预测

蒋 勇,吴志新,朱 宁,范维澄

(中国科学技术大学 火灾科学国家重点实验室,合肥 230026)

摘要:理论分析烷烃类燃料、空气混合物热着火过程,并对 IPIC - CFD II 软件进行修改,使之适合燃料零维着火计算。程序采用了美国 SANDIA 国家实验室、NASA 和 BERKELEY 大学热力学数据库中的相关参数以及大型化学反应动力学软件包 CHEMKIN 中相关的模型和子程序。运用开发的源码,以庚烷/空气预混气为例,采用庚烷氧化的最新化学反应动力学机理(包含 290 个基元反应,涉及 57 种组分),计算了其在不同点火温度、不同当量比和不同压力下的着火延迟时间,同时预测了火焰中反应物、主产物、自由基浓度以及温度变化的时间进程,以具体说明该软件的应用效果。

关键词:预混火焰;化学动力学机理;点火

中图分类号:TD712.7 **文献标识码:**A

0 引言

自然界普遍存在热点火和着火现象,对不同燃料着火过程的研究一直为安全科学界和燃烧学界所重视,也是长期的研究课题之一,但对其机理的认识目前还很不充分^[1]。烷烃类燃料(如甲烷、汽油等)广泛应用于国民经济的各个领域和社会生活的各个方面,通过详细的或半详细的化学反应动力学机理分析,结合建立在能量守恒定律、质量守恒定律、数值方法上的计算机模拟技术,以深入探究其着火机理无疑具有十分重要的意义。安全保护和安全生产方面:由于火核的形成、火蔓延与温度、混合气压力、混合物当量比等众多因素密切相关,完全通过实验

来找出着火临界点或整个着火过程规律,其花费大、周期长、效果不够明显,甚至在有些情况下是不可能的,例如在烷烃类混合气中仅含有 1% 的自由基 O、OH、H 时,我们通过标定的程序计算,发现:针对不同烷烃燃料,其着火延迟时间比预混气中不含此类自由基的着火延迟时间缩短,有的甚至高达 1-2 个数量级^[2]。所以综合国内外现有实验数据、吸收先进理论成果,开发出相应的数值预测软件,在计算机上对所选燃料的着火过程进行大量的“数值实验”,以认识其着火过程的规律,从而为有效地抑制火灾等灾害的发生提供理论指导;能源利用方面:目前热机中普遍应用烷烃类燃料,如天然气(主要成分为甲烷)发动机、LPG 发动机(主要成分为丙烷和丁烷混合物)以及汽油机和柴油机等。热机中点火与着火是燃烧工作过程组织的重要方面之一,可靠和精确的点火可以大幅度降低 NO_x、HC、CO 和 SO_x 等污染物排放,提高燃料的经济性和动力性。开展动力装置内烷烃类燃料燃烧过程的基础研究,对节约石油资源、合理利用能源和保护生态环境具有深远的意义。

解决实际燃烧过程中点火和着火过程依赖于对其中化学反应动力学机理的理解,从理论上研究燃烧化学问题有二种方法,即化学平衡和化学动力学方法。第一种方法的假定在大多数条件下并不成立(如低温富油时的预混火焰),因而往往和实际燃烧过程相差甚远;后者从化学动力学机理出发去研究问题,所以可以得到满意的结果^[3]。国外对燃料详

收稿日期:2001-04-20;修改日期:2001-05-30

基金项目:国家自然科学基金重点资助项目(59936140);国家自然科学基金资助项目(50076042);江苏省汽车工程重点实验室开放基金资助项目(K2089)

细的基元反应动力学研究已开展数十年,取得了许多重要的成果;国内在此方面的研究还很不充分,但是目前该领域的研究已逐渐引起国内学者的高度重视^[2~5],中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室的研究人员对耦合低碳烷烃类气体燃料详细基元反应或半详细反应动力学机理的非定常输运过程进行了研究,并成功地进行了三维数值模拟^[2]。本文采用 SANDIA 国家实验室、NASA 和 BERKELEY 大学热力学数据库中的相关参数^[6~8]以及大型化学反应动力学软件包 CHEMKIN^[9~11]中相关的模型和子程序,对 IPIC-CFD II 软件^[2]进行修改,使之适合燃

料零维着火计算,以大幅度减少计算时间。

1 化学动力学机理

表 1 为本研究中使用的庚烷在空气中氧化的化学动力学机理,由 290 个基元反应和 57 种物质所组成,它由瑞典的 Valeri Golovichev 博士研究提出。它主要有三个反应途径:第一是 C_7H_{16} 逐渐氧化为 CO_2 以及 CO ;第二是 C_2 、 C_3 等化学反应途径,它表示低碳组分聚合生成高碳物质的过程;第三为 N 化学机理,表示氮氧化物生成过程。

表 1 计算过程采用的基元反应(包括自由基反应)

$C_7H_{16} + O_2 = C_7H_{15} + HO_2$	$CH_3O_2 + C_2H_4 = C_2H_3 + CH_4O_2$	$CH_3 + HCO = CH_2O + CH_2$	$O_2 + CH_2CHO = >OH + CO + CH_2O$
$C_7H_{16} + O_2 = C_7H_{15} + 2 + HO_2$	$CH_4O_2 + OH = CH_3O_2 + H_2O$	$CH_3 + C_2H_4 = CH_4 + C_2H_3$	$O_2 + CH_2CHO = >OH + 2HCO$
$C_7H_{16} + H = C_7H_{15} + 1 + H_2$	$CH_4O_2 + O = CH_3O_2 + OH$	$CH_3 + CH_3 = C_2H_4 + H_2$	$H + CH_2CHO < = > CH_3 + HCO$
$C_7H_{16} + H = C_7H_{15} + 2 + H_2$	$CH_3 + O = CH_2O + H$	$CH_3 + CH_2 = C_2H_4 + H$	$H + CH_2CHO < = > CH_2CO + H_2$
$C_7H_{16} + OH = C_7H_{15} + 1 + H_2O$	$CH_3 + OH = CH_2 + H_2O$	$C_2H_4 + H = C_2H_3 + H_2$	$OH + CH_2CHO < = > H_2O + CH_2CO$
$C_7H_{16} + OH = C_7H_{15} + 2 + H_2O$	$CH_3 + OH = CH_2O + H_2$	$C_2H_4 + O = CH_3 + HCO$	$OH + CH_2CHO < = > HCO + CH_2OH$
$C_7H_{16} + HO_2 = C_7H_{15} + 1 + H_2O_2$	$CH_3O + H = CH_3 + OH$	$C_2H_4 + O = CH_2O + CH_2$	$C_3H_8(+ M) = C_2H_5 + CH_3(+ M)$
$C_7H_{16} + HO_2 = C_7H_{15} + 2 + H_2O_2$	$CO + O + M = CO_2 + M$	$C_2H_4 + O = C_2H_3 + OH$	$O + C_3H_8 < = > OH + C_3H_7$
$C_7H_{16} + CH_3 = C_7H_{15} + 1 + CH_4$	$CO + OH = CO_2 + H$	$C_2H_4 + OH = CH_2O + CH_3$	$H + C_3H_8 < = > C_3H_7 + H_2$
$C_7H_{16} + CH_3 = C_7H_{15} + 2 + CH_4$	$CO + O_2 = CO_2 + O$	$C_2H_4 + HO_2 = C_2H_3 + H_2O_2$	$OH + C_3H_8 < = > C_3H_7 + H_2O$
$C_7H_{16} = C_7H_{15} + 1 + H$	$HO_2 + CO = CO_2 + OH$	$C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$	$C_3H_7 + H_2O_2 < = > HO_2 + C_3H_8$
$C_7H_{16} = C_7H_{15} + 2 + H$	$H_2 + O_2 = OH + OH$	$C_2H_4 + M = C_2H_2 + H_2 + M$	$CH_3 + C_3H_8 < = > C_3H_7 + CH_4$
$C_7H_{16} = C_4H_9 + C_3H_7$	$H_2 + OH = H_2O + H$	$C_2H_4 + M = C_2H_3 + H + M$	$C_3H_8 + C_2H_5 = C_3H_7 + C_2H_6$
$C_7H_{15} + 1 + O_2 = C_7H_{15}O_2$	$O + OH = O_2 + H$	$C_2H_4 + H = C_2H_3$	$C_3H_8 + C_2H_3 = C_3H_7 + C_2H_4$
$C_7H_{15} + 2 + O_2 = C_7H_{15}O_2$	$O + H_2 = OH + H$	$C_2H_6 + O_2 = C_2H_5 + HO_2$	$CH_3 + C_2H_4(+ M) < = > C_3H_7(+ M)$
$C_7H_{15}O_2 = C_7H_{14}O_2H$	$H + HO_2 = O + H_2O$	$C_2H_5 + O_2 = C_2H_4 + HO_2$	$O + C_3H_7 < = > C_2H_5 + CH_2O$
$C_7H_{14}O_2H + O_2 = C_7H_{14}O_2HO_2$	$O + OH + M = HO_2 + M$	$C_2H_4 + O_2 = C_2H_3 + HO_2$	$H + C_3H_7(+ M) < = > C_3H_8(+ M)$
$C_7H_{14}O_2HO_2 = C_7KET21 + OH$	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	$C_2H_4 + C_2H_4 = C_2H_5 + C_2H_3$	$H + C_3H_7 < = > CH_3 + C_2H_5$
$C_7KET21 = C_5H_{11}CO + CH_2O + OH$	$H + O_2 + O_2 = HO_2 + O_2$	$C_2H_5 + HO_2 = C_2H_4 + H_2O_2$	$CH_2 + C_3H_8 = CH_3 + C_3H_7$
$C_3H_{11}CHO + O_2 = C_3H_{11}CO + HO_2$	$H + O_2 + H_2O = HO_2 + H_2O$	$C_2H_2 + O_2 = HCO + HCO$	$OH + C_3H_7 < = > C_2H_5 + CH_2OH$
$C_3H_{11}CHO + OH = C_3H_{11}CO + H_2O$	$H + O_2 + N_2 = HO_2 + N_2$	$C_2H_2 + O = CH_2 + CO$	$HO_2 + C_3H_7 < = > O_2 + C_3H_8$
$C_3H_{11}CHO + H = C_3H_{11}CO + H_2$	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	$C_2H_2 + H + M = C_2H_3 + M$	$HO_2 + C_3H_7 = > OH + C_2H_5 + CH_2O$
$C_3H_{11}CHO + O = C_3H_{11}CO + OH$	$H + HO_2 = OH + OH$	$C_2H_3 + H = C_2H_2 + H_2$	$CH_3 + C_3H_7 < = > 2C_2H_5$
$C_3H_{11}CHO + HO_2 = C_3H_{11}CO + H_2O_2$	$O + HO_2 = O_2 + OH$	$C_2H_3 + O_2 = CH_2O + HCO$	$C_3H_7 + CH_3 < = > CH_4 + C_3H_6$
$C_3H_{11}CHO + CH_3 = C_3H_{11}CO + CH_4$	$OH + OH = O + H_2O$	$C_2H_3 + OH = C_2H_2 + H_2O$	$C_3H_6 + C_2H_5 = C_3H_5 + C_2H_6$
$C_3H_{11}CHO + CH_2O_2 = C_3H_{11}CO + CH_4O_2$	$H + H + M = H_2 + M$	$C_2H_3 + CH_2 = C_2H_2 + CH_3$	$C_3H_6 + O = CH_3 + CH_3CO$
$C_3H_{11}CO = C_3H_{11} + CO$	$H + H + H_2 = H_2 + H_2$	$C_2H_3 + HCO = C_2H_4 + CO$	$C_2H_3 + O_2 < = > HO_2 + C_2H_2$
$C_3H_{11} = C_2H_5 + C_3H_6$	$H + H + H_2O = H_2 + H_2O$	$C_2H_3 + C_2H_3 = C_2H_2 + C_2H_4$	$O + CH_3CHO < = > OH + CH_2CHO$
$C_7H_{15} + 1 = C_2H_4 + C_5H_{11}$	$H + H + CO_2 = H_2 + CO_2$	$C_2H_3 + O = C_2H_2 + OH$	$O + CH_3CHO = > OH + CH_3 + CO$
$C_7H_{15} + 2 = CH_3 + C_6H_{12}$	$H + OH + M = H_2O + M$	$C_2H_2 + OH = CH_3 + CO$	$O_2 + CH_3CHO = > HO_2 + CH_3 + CO$
$C_6H_{12} = C_3H_7 + C_3H_5$	$H + O + M = OH + M$	$C_2H_2 + CH_2 = C_3H_3 + H$	$H + CH_3CHO < = > CH_2CHO + H_2$
$C_7H_{15} + 2 = C_4H_9 + C_3H_6$	$O + O + M = O_2 + M$	$C_3H_3 + OH = C_3H_2 + H_2O$	$H + CH_3CHO = > CH_3 + H_2 + CO$
$C_7H_{15} + 1 = C_7H_{15} + 2$	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	$C_3H_3 + O = CH_2O + C_2H$	$OH + CH_3CHO = > CH_3 + H_2O + CO$
$C_4H_9 = C_3H_6 + CH_3$	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$	$C_2H_3 = C_2H_2 + H$	$HO_2 + CH_3CHO = > CH_3 + H_2O_2 + CO$
$C_4H_9 = C_2H_5 + C_2H_4$	$OH + OH(+ M) = H_2O_2(+ M)$	$C_2H_2 = C_2H + H$	$CH_3 + CH_3CHO = > CH_3 + CH_4 + CO$
$C_3H_7 = C_2H_4 + CH_3$	$H_2O_2 + H = HO_2 + H_2$	$C_2H + O_2 = HCO + CO$	$H + CH_2CO(+ M) < = > CH_2CHO(+ M)$
$C_3H_7 = C_3H_4 + H$	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$	$C_2H + H_2 = H + C_2H_2$	$O + CH_2CHO = > H + CH_2 + CO_2$

$C_3H_7 + O_2 = C_3H_6 + HO_2$	$H_2O_2 + H = H_2O + OH$	$C_2H_2 + O = C_2H + OH$	$CH_3 + CH_3 = C_2H_5 + H$
$C_3H_6 = C_2H_3 + CH_3$	$H_2O_2 + O = H_2O + O_2$	$C_2H_2 + OH = C_2H + H_2O$	$CH_2 + OH = CH_2O + H$
$C_3H_6 + H = C_3H_5 + H_2$	$H_2O_2 + O = OH + HO_2$	$C_2H_2 + C_2H = C_4H_2 + H$	$CH_2 + O_2 = HCO + OH$
$C_3H_6 + CH_3 = C_3H_5 + CH_4$	$H_2 + HO_2 = H_2O + OH$	$C_3H_4 + O = C_2H_3 + HCO$	$CH_2 + O_2 = CO_2 + H_2$
$C_3H_6 + O_2 = C_3H_5 + HO_2$	$CO_2 + N = NO + CO$	$C_3H_4 + O = C_2H_4 + CO$	$CH_2 + O_2 = CO + H_2O$
$C_3H_6 + OH = CH_3CHO + CH_3$	$N_2O + O = N_2 + O_2$	$C_3H_4 + O = HCCO + CH_3$	$CH_2 + O_2 = CH_2O + O$
$C_3H_5 = C_3H_4 + H$	$N_2O + O = NO + NO$	$C_4H + H_2 = H + C_4H_2$	$CH_2 + O_2 = CO_2 + H + H$
$C_3H_5 + H = C_3H_4 + H_2$	$N_2O + H = N_2 + OH$	$C_4H_2 + OH = C_4H + H_2O$	$CH_2 + O_2 = CO + OH + H$
$C_3H_5 + O_2 = C_3H_4 + HO_2$	$N_2O + OH = N_2 + HO_2$	$C_4H_2 + O = C_3H_2 + CO$	$CH_2 + CH_2 = C_2H_2 + H_2$
$C_3H_4 + OH = C_2H_3 + CH_2O$	$N_2O + M = N_2 + O + M$	$C_3H_2 + O = C_2H_2 + CO$	$CH_2 + CH_2 = C_2H_2 + H + H$
$C_3H_4 + OH = C_2H_4 + HCO$	$N + NO = N_2 + O$	$C_3H_2 + OH = HCO + C_2H_2$	$CH_2 + CO_2 = CH_2O + CO$
$C_3H_4 + O_2 = C_3H_3 + HO_2$	$N + O_2 = NO + O$	$C_2H_2 + C_2H = C_4H_3$	$CH_3 + O_2 = CH_3O_2$
$C_2H_5 + O = CH_3CHO + H$	$N + OH = NO + H$	$C_3H_2 + CH_2 = C_4H_3 + H$	$CH_3O_2 + HO_2 = CH_4O_2 + O_2$
$C_2H_4 + HO_2 = CH_3CHO + OH$	$CH_2O + O_2 = HCO + HO_2$	$C_4H_2 + H = C_4H_3$	$CH_3O_2 + CH_4 = CH_4O_2 + CH_3$
$C_2H_4 + CH_3O = CH_3CHO + CH_3$	$CH_2O + O = HCO + OH$	$C_4H_3 + H = C_2H_2 + C_2H_2$	$CH_3O_2 + CH_3 = CH_3O + CH_3O$
$C_2H_4 + CH_3O_2 = CH_3CHO + CH_3O$	$CH_2O + H = HCO + H_2$	$C_4H_3 + H = C_4H_2 + H_2$	$CH_3O_2 + O = CH_3O + O_2$
$CH_3CHO = CH_3 + HCO$	$CH_2O + OH = HCO + H_2O$	$C_4H_3 + OH = C_4H_2 + H_2O$	$CH_3O_2 + H = CH_3O + OH$
$CH_3CO + M = CH_3 + CO + M$	$CH_2O + HO_2 = HCO + H_2O_2$	$C_2H_2 + HCCO = C_3H_3 + CO$	$CH_3O_2 + CH_2O = CH_4O_2 + HCO$
$CH_3CHO + O_2 = CH_3CO + HO_2$	$CH_2O + M = CO + H_2 + M$	$C_3H_2 + O_2 = HCCO + CO + H$	$CH_3O_2 + C_2H_6 = CH_4O_2 + C_2H_5$
$CH_3CHO + H = CH_3CO + H_2$	$CH_2O + M = HCO + H + M$	$HCCO + O = H + CO + CO$	$CH_3O_2 + CH_3O_2 = CH_3O + CH_3O + O_2$
$CH_3CHO + OH = CH_3CO + H_2O$	$HCO + HCO = CH_2O + CO$	$HCCO + O_2 = OH + 2CO$	$CH_3O_2 + H_2O_2 = CH_4O_2 + HO_2$
$CH_3CHO + O = CH_3CO + OH$	$HCO + OH = H_2O + CO$	$HCCO + CH_2 = C_2H_3 + CO$	$CH_4O_2 = CH_3O + OH$
$CH_3CHO + CH_3 = CH_3CO + CH_4$	$HCO + H = H_2 + CO$	$HCCO + HCCO = C_2H_2 + CO + CO$	$C_2H_3 + O_2 = > O + CH_2CHO$
$CH_3CHO + CH_2 = CH_3CO + CH_3$	$HCO + O = OH + CO$	$C_2H + OH = H + HCCO$	$CH_3 + CH_3(+ M) = C_2H_6(+ M)$
$CH_3CHO + HO_2 = CH_3CO + H_2O_2$	$HCO + O = H + CO_2$	$CH_2 + CO(+ M) = CH_2CO(+ M)$	$CH_3 + O_2 = CH_2O + OH$
$CH_3CHO + CH_3O_2 = CH_3CO + CH_4O_2$	$HCO + O_2 = HO_2 + CO$	$C_2H_2 + OH = CH_2CO + H$	$H + CH_2OH < = > OH + CH_3$
$CH_3CO + O = CH_3 + CO_2$	$HCO + M = H + CO + M$	$CH_2CO + H = HCCO + H_2$	$H + CH_3O < = > H + CH_2OH$
$CH_3CO + H = CH_3 + HCO$	$HCO + HO_2 = CO_2 + OH + H$	$CH_2CO + H = CH_3 + CO$	$CH_3 + H = CH_2 + H_2$
$CH_3CO + OH = CH_3 + CO + OH$	$CH_4 + O_2 = CH_3 + HO_2$	$CH_2CO + O = HCCO + OH$	$CH_3 + CH_3O = CH_4 + CH_2O$
$CH_3CO + HO_2 = CH_3 + CO_2 + OH$	$CH_4 + H = CH_3 + H_2$	$CH_2CO + O = CH_2 + CO_2$	$CH_3 + HO_2 = CH_3O + OH$
$CH_3CO + CH_3 = C_2H_6 + CO$	$CH_4 + OH = CH_3 + H_2O$	$CH_2CO + OH = HCCO + H_2O$	$CH_3 + O_2 = CH_3O + O$
$CH_3O + CO = CH_3 + CO_2$	$CH_4 + O = CH_3 + OH$	$C_2H_3 + O = CH_2CO + H$	$H + CH_2OH < = > H_2 + CH_2O$
$CH_3O + H = CH_2O + H_2$	$CH_4 + HO_2 = CH_3 + H_2O_2$	$C_3H_3 + O_2 = CH_2CO + HCO$	$CH_3 + H = CH_4$
$CH_3O + OH = CH_2O + H_2O$	$CH_4 + CH_2 = CH_3 + CH_3$	$C_4H_3 + O_2 = HCCO + CH_2CO$	$CH_3O(+ M) = CH_2O + H(+ M)$
$CH_3O + O = CH_2O + OH$	$CH_3 + CH_2O = CH_4 + HCO$	$O + CH_2OH < = > OH + CH_2O$	
$CH_3O + O_2 = CH_2O + HO_2$	$CH_3 + HCO = CH_4 + CO$	$H + CH_2O(+ M) < = > CH_2OH(+ M)$	

2 计算方法、计算结果及计算有效性分析

计算方法:在点火瞬间以及针对较小的点火空间范围,反应系统可作为等压绝热燃烧体系来处理,所以反应系统随时间变化的能量方程和物质方程可表示如下:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\rho C_P} \sum_{K=1}^K h_K \dot{\omega}_K W_K \quad (1)$$

$$\frac{dY_K}{dt} = \frac{\dot{\omega}_K W_K}{\rho} \quad (K = 1, \dots, K) \quad (2)$$

式中: T 为温度; t 为时间; ρ 为密度; h_K 为 K 组分焓;

$\dot{\omega}_K$ 表示 K 组分生成速率; W_K 为 K 组分子分子量; Y_K 为 K 组分浓度。

整个计算流程见图 1, 解释器用来读入提供的化学反应动力学机理, 并且从热力学数据库中提取与该机理相关的物质热力学信息, 解释器的输出中包含了该机理中元素、物质和反应的所有信息。气相子程序库中包含燃烧计算中需要的标准子模块, 供主程序根据计算任务来调用。由于化学反应中反应物、主产物和自由基浓度大小差别很大, 加上各基元反应之间的时间尺度相距甚远, 使得该体系为刚性反应系统, 本研究中使用刚性反应系统算法器和

变时间步长来保证计算结果的精度和计算的稳定性。

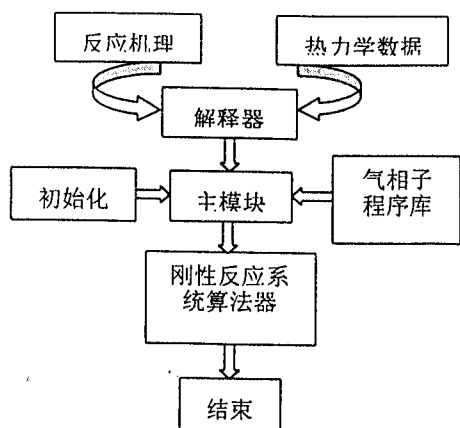


图 1 程序流程框图

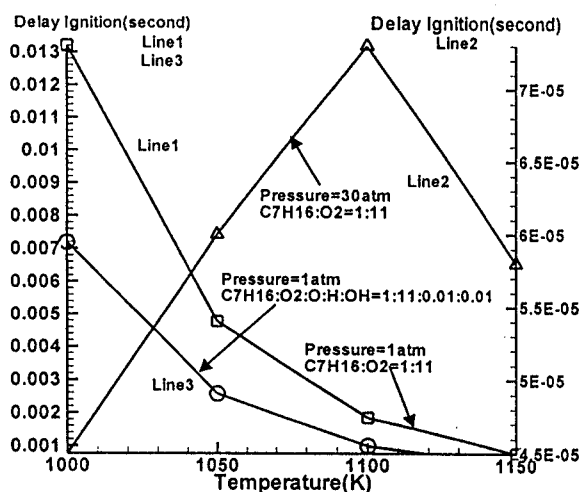


图 2 着火延迟与温度、压力和当量比关系

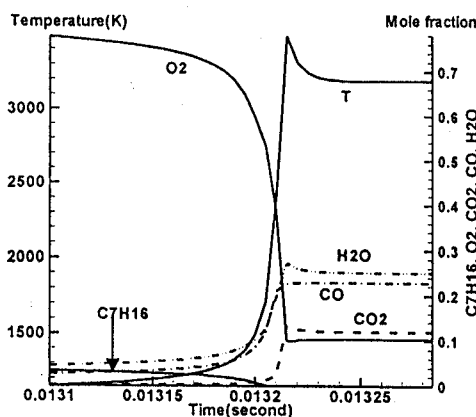


图 3 温度、反应物、主产物的时间进程

计算结果: 计算结果见图 2~图 4。图 2 反映着火延迟与点火温度、压力和当量比之间的关系, 篇幅所限, 这里仅示出少量的计算结果: 曲线 1 为 1atm 下, 混合气摩尔比为 $C_7H_{16}:O_2 = 1:11$ 时, 着火延迟与温度的变化关系; 曲线 2 为 30atm 下, 混合气摩尔

比为 $C_7H_{16}:O_2 = 1:11$ 时着火延迟与温度的变化关系; 曲线 3 为 1atm 下, 混合气摩尔比为 $C_7H_{16}:O_2:O:H:OH = 1:11:0.01:0.01$ 时, 着火延迟与温度的变化关系。图 3 和图 4 分别为着火过程温度、反应物、主产物和自由基浓度随时间的变化关系, 初始条件为: 点火温度为 1000K, 组分摩尔比为: $C_7H_{16}:O_2 = 1:11$, 初始压力为 1atm。

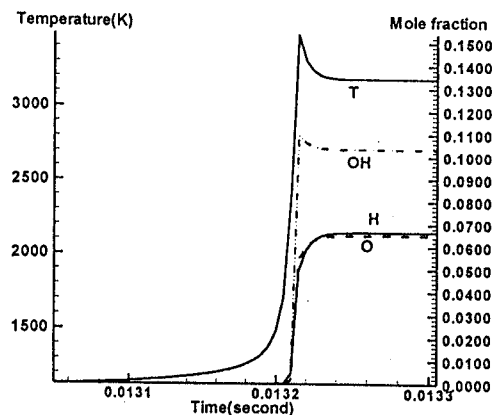


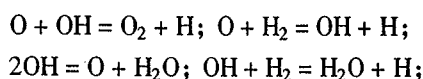
图 4 温度和自由基 O、H、OH 的时间进程

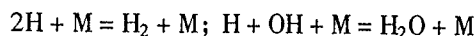
计算有效性分析: 庚烷反应动力学机理的正确性已由瑞典 Valeri Golovichev 博士证明, 它与实验结果相当一致; 程序的有效性见文献^[2,3]。这里需要特别指出的是: 由图 3~图 4 可以发现, 着火以后燃烧的温度高达 3000K 以上, 这与实际并不完全符合, 主要原因为: 当燃烧的时间尺度和火蔓延的空间尺度足够大时, 本研究中采用的零维和绝热等压假定就不能成立; 相反则可以有效说明点火瞬间的情况。

3 结论

(1) 点火后庚烷着火有明显滞后现象, 滞燃期与混合气组分、组分浓度、初始压力以及点火温度有关。在一个大气压下, 点火温度为 1000K, 初始组分摩尔比为: $C_7H_{16}:O_2 = 1:11$ 时, 着火延迟约为 13.2ms。点火温度上升, 滞燃期一般缩短, 当点火温度上升到 1150K 时, 着火延迟约为 0.77ms (见图 2); 混合气压力增加时, 滞燃期与温度的变化关系较为复杂 (见图 2 曲线 2); 当混合气体中包含极少量自由基 H、OH、O 时, 着火温度降低且滞燃期缩短 (见图 2 曲线 1 和曲线 3)。

(2) 自由基 H、OH、O 是传播整个链式氧化反应的重要活性物质, H、OH、O 的生成和消耗主要在所谓“自由基池”中进行:





它们的计算精度直接影响整个火焰结构的模拟,对此,采用变步长以及刚性反应系统算法器来保证计算结果的可靠性是行之有效的方法,自由基 H、OH、O 的计算结果见图 4。

(3)本文采用的机理能够较为合理地预测庚烷点火与着火过程。

(4)作者在吸收国内外先进燃烧模型和引入精确的热力学数据库的基础上,开发出的计算燃烧学软件 IPIC-CFD II 能够较为合理地预测火焰结构,为今后用于解决相关工程实际问题提供了极大的便利。

参 考 文 献

- [1] S. S. Sazhin, G. Feng and M. R. Heikal. Thermal Ignition Analysis of a Monodisperse Spray with Radiation[J]. Combustion and Flame, 2001, 124(4):684~701.
- [2] 蒋勇. IPIC-CFD II: 一种计算带有化学反应流和喷雾的多维流动模拟程序[R]. 博士后出站报告, 中国科学技术大学, 2000. 12.
- [3] 董刚, 蒋勇, 陈义良, 王清安. 大型气相化学软件包 CHEMKIN 及其在燃烧中的应用[J]. 火灾科学, 2000, 9(1):27~33.
- [4] 黎军, 田文栋, 吴承康. 层流预混滞止火焰结构及传播速度的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2000, 6(4):286~288.
- [5] 董刚, 陈义良. 低压 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ 预混火焰结构的数值预测[J]. 中国科学技术大学学报, 2000, 30(3):329~333.
- [6] <http://www.Sandia.gov/>
- [7] <http://www.nasa.gov/>
- [8] <http://www.Berkeley.edu/>
- [9] R. J. Kee, J. A. Miller and T. H. Jefferson. CHEMKIN: A General-purpose, Problem-independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package[R]. Sandia National Lab. Report No. SAND80-8003, 1980.
- [10] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller. CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics[R]. Sandia National Lab. Report No. SAND89-8009, 1989.
- [11] R. J. Kee, F. M. Rupley, K. Meeks and J. A. Miller. CHEMKIN-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetic[R]. Sandia National Lab. Report No. SAND96-8216, 1996.

Numerical Predictions of Premixed Alkane Fuel/air during Ignition Process

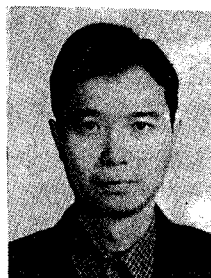
JIANG Yong, WU Zhi-xin

ZHU Ning, FAN Wei-cheng

(State Key Lab. of Fire Science, USTC, Hefei, Anhui 230026, P. R. China)

Abstract: The ignition process of premixed alkane fuel/air is studied in this work. The IPIC-CFD II software is modified and hereby it could be applied in zero-dimensional numerical prediction of combustion. The thermodynamics databases released by Sandia National Lab. and NASA as well as University of California, Berkeley were included in the program; besides, some models of CHEMKIN were used. The new kinetic schemes used for C_7H_{16} consist of 57 species in 290 reactions. Ignition delays for the premixed air-fuel under different temperatures of ignition and different equivalence ratios as well as different pressures are disposed of and calculated by using the code. The variations of concentrations of reactants, main products and radicals as well as temperature variation are predicted as time goes on, in order to testify the code explicitly.

Key words: premixed flame; chemical kinetics; ignition



作者简介: 蒋勇 (1966-), 男, 博士后。中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室副教授。主要从事计算燃烧学和燃料燃烧行为等方面的研究工作。

吴志新 (1964-), 男, 博士。中国汽车技术研究中心标准化研究所总工程师, 现为中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室高级访问学者。
朱宁 (1966-), 男, 博士。日本静岡理科大学机械工学科助手 (Assistant Professor), 现为中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室高级访问学者。