

基于分析法对 Jet - A 燃料进行燃烧反应机理简化的研究

王伟, 刘帅, 白杰

(中国民航大学 天津民用航空器适航与维修重点实验室, 天津 300300)

摘要: 利用耦合路径通量分析和敏感性分析的方法对 Jet - A 型航空煤油在航空发动机燃烧室工况下的燃烧反应机理进行了简化。选用 POSF - 4658 的燃烧反应机理(1607 组分、6633 机理)替代 Jet - A 型航空煤油在航空发动机燃烧室工况下的详细的燃烧反应机理。将燃烧室工况作为简化过程的初始条件, 分析得到了替代 Jet - A 的简化机理(122 组分、331 机理)。通过对替代 Jet - A 简化反应机理、Jet - A 详细反应机理、 $C_{13}H_{28}$ 机理、五步机理与实验值的比较分析可发现, 得到的替代 Jet - A 的简化机理能够反映 Jet - A 型燃料主要的燃烧特性。利用国际上常用的 Jet - A 机理计算的绝热火焰温度、点火延迟时间及层流火焰速度与本研究提出的简化的计算值进行比较。结果表明, 本研究提出的简化机理具有较高的精确度, 简化机理计算得到的点火延迟时间、绝热火焰温度、层流火焰速度与详细机理计算结果的平均相对误差分别为 1.2%、3.3%、3.7%。替代 Jet - A 简化反应机理提供了可用于航空发动机燃烧室模拟仿真的化学反应动力学模型。

关键词: 燃烧室; Jet - A; 机理简化; 路径通量分析; 敏感性分析

中图分类号: V312 文献标识码: A
DOI: 10.16146/j.cnki.rndlge.2016.05.009

引言

航空发动机燃烧室内部的航空煤油点火和燃烧过程是湍流流动和化学反应动力学共同作用的过程。由于燃料产地、加工工艺以及油料添加剂的不同, 不同国家、不同牌号的航空煤油的组分也不尽相同。不同牌号航空煤油的烃类构成比例存在着比较大的差异, 而航空煤油是包含有上百种化学组分的

混合物, 组分结构十分复杂。其具体的组分构成差别就更加明显了, 组分的差异势必导致不同牌号航空煤油在物理性质和燃烧特性上存在差别。郑东等人比较了 JP - 8、Jet - A、RP - 3 型号航空煤油的组成成分^[1]。3 种型号航空煤油组分种类以及组分比重相差较大, 无法使用一个通用的替代模型描述不同牌号航空煤油的燃烧反应特性。因此, 研究航空煤油的燃烧特性、燃烧反应机理需要针对不同型号的航空煤油分别进行替代组分的选取以及反应机理的分析。

虽然应用计算流体力学方法耦合详细化学反应机理, 能够准确反映燃烧温度、组分随空间及时间的分布, 能够缩短发动机的研制周期、研究费用、优化燃烧室部件以及预测燃烧产物等。但是由于上述原因存在, 国际上相应的研究、计算设备的容量尚无法对航空煤油燃烧过程的进行详细数值模拟。为实现对煤油燃烧过程及反应机理的研究, 国内外学者使用替代燃料的方法来表示航空煤油的化学式^[1], 使用机理简化的手段以较少组分数目、反应机理数目、燃烧的化学反应过程来完成对复杂燃料的仿真和模拟。(替代燃料是指, 选取一种或者几种具有代表性的化学成分替代该型号航空煤油的成分, 构筑该型号航空煤油的燃烧反应机理)。替代燃料是国际上针对大分子碳氢复杂燃料反应机理研究的惯用方法。机理简化方法是删除冗余组分减少反应机理数目的反应机理简化方法或者通过数学方法减少计算量的机理简化方法。Carmen M 等人通过实验测定了 Jet - A 的热力学性质^[2]。通过对航空煤油组分

收稿日期: 2015 - 06 - 25; 修订日期: 2015 - 07 - 24

基金项目: 中国民航大学天津民用航空器适航与维修重点实验室开放基金; 中央高校基本科研业务费专项(ZXH2012J003)

作者简介: 王伟(1977 -), 男, 河南许昌人, 中国民航大学副教授。

通讯作者: 刘帅(1990 -), 男, 中国民航大学硕士研究生。

的分析(烷烃、环烷烃、苯等成分),选用一种或几种组分的混合物替代 Jet - A 型航空煤油进行燃料燃烧特性的研究。Freeman 将 $C_{13}H_{28}$ 作为 Jet - A 的替代燃料^[3],并给出了 Jet - A 的一步反应机理,在忽略中间产物的 Jet - A 燃烧模拟研究中常用到这个模型。Edelman 考虑了燃料的不完全燃烧过程^[4],同样将 $C_{13}H_{28}$ 作为 Jet - A 的替代燃料,给出了 Jet - A 的两步反应机理。Kiehne 使用质量分数为 0.75 的碳氢化合物和 0.25 的芳香族化合物作为 Jet A 的替代燃料^[5],得到了 Jet - A 燃烧的五步反应机理。Chi - Ming 利用 Jet - A 的实验值验证了五步反应机理的准确性^[6]。Kundu 曾选用丙烷作为 Jet - A 气相燃烧反应的替代燃料^[7~8],利用 Westbrook 等人提出的单步/两步总包反应机理总结了 Jet - A 燃烧的反应机理^[9~10],将 $C_{12}H_{23}$ 作为 Jet - A 的分子式,得到了 Jet - A 燃烧的 $C_{12}H_{23}$ 燃烧机理。针对 Jet - A 爆震燃烧,kundu 等人修改了 $C_{12}H_{23}$ 模型^[11],得到

$C_{11}H_{21}$ 燃烧机理。近期 Stephen Dooley 等人选取正癸烷、异辛烷和甲苯的混合物(POSF - 4658) 作为 Jet A 的替代燃料^[12]。通过实验验证了反应机理的有效性, POSF - 4658 反应机理与实验值具有极高的吻合度。

本研究使用耦合通量路径分析和敏感性分析的机理简化方法对 Jet - A 的燃烧反应机理进行简化,得到的简化反应机理可用于燃烧仿真,从而为航空发动机燃烧室部件的研究提供仿真的基础。

1 燃烧机理及简化方法分析

1.1 Jet - A 型航空煤油的替代燃料

研究表明 Jet - A 型航空煤油主要由平均碳原子个数为 10 ~ 16 的多种碳氢化合物构成,尚无统一的分子式,其燃烧反应机理如表 1 所示。

表 1 常见的 Jet - A 型航空煤油的反应机理

Tab. 1 Mechanism governing the reaction of commonly - seen Jet-A type aviation kerosene

| 序号 | 反应机理 | 组分数 | 基元反应数目 | Jet - A 模型 | 参考 |
|----|-------------------|------|--------|---|----|
| 1 | 一步反应机理 | 4 | 1 | $C_{13}H_{26}$ | 6 |
| 2 | 两步反应机理 | 5 | 2 | $C_{13}H_{26}$ | 7 |
| 3 | 五步反应机理 | 8 | 5 | $C_{13}H_{28}$ 、 $C_{10}H_8$ | 8 |
| 4 | $C_{12}H_{23}$ 机理 | 16 | 23 | $C_{12}H_{23}$ | 10 |
| 5 | $C_{11}H_{21}$ 机理 | 16 | 18 | $C_{11}H_{21}$ | 14 |
| 6 | POSF - 4658 机理 | 1607 | 6633 | $C_{10}H_{22}$ 、 C_8H_{18} 、 $C_6H_5CH_3$ | 15 |

目前, $C_{12}H_{23}$ 模型的应用范围较广且精度较高,在 Jet - A 燃烧模拟中已经得到了广泛的应用, $C_{11}H_{21}$ 模型仅用于爆震模拟。Jet - A 燃烧反应的五步机理比一步机理和两步机理具有更高的精确度,在早期模拟 Jet - A 燃烧的过程中常用五步反应机理。但由于一步机理的表述简单、易于计算且具有一定精度,一步反应机理一直使用至今,在无限速率的燃烧反应中(Damkohler number $\gg 1$) 模拟常用一步机理。Stephen Dooley 等人给出的 POSF - 4658 机理是当前国际公认的 Jet - A 型航空煤油的详细反应机理。而国内外多数学者针对 Jet - A 的研究均以 POSF - 4658 机理为基础展开的。

1.2 燃烧反应机理简化

对于成分复杂燃料的燃烧过程,其化学反应机理复杂会造成流体控制方程的源项过于庞大,会使计算结果难于收敛同时耗时增加。Law 指出,碳氢燃料的中等反应机理含有多达几十种组分和上百个基元反应^[14],与几十种以上的组分和几百种以上的反应机理相关的时间尺度存在着明显的区别,这将导致计算过程中的刚性,有必要在不丧失燃料主要燃烧特性的基础上通过对详细反应机理进行简化得到简化反应机理。因此,对煤油燃烧反应的机理简化是对燃烧场仿真模拟的必要准备。

机理简化方法大致可分为四类。第一类是通过反应速率分析或敏感性分析去除一些不重要的组分

或反应机理,主要方法有敏感性分析、准稳态假设等^[15]。第二类是基于时间尺度的分析方法,主要有计算奇异摄动法、本征低维流法等^[16]。第三类方法利用解集分布或计算列表提高对反应系统的微分方程积分的效率,主要包括自适应列表法^[17]。第四类方法主要考虑组分间的耦合关系,利用耦合关系整体去除或保留具有强耦合关系的组分群,代表性的方法是直接关系图法和基于直接关系图的误差传播法^[18]。

最近 Sun 等人在直接关系图法的基础上提出路径通量分析法(PFA)^[19],并已证明该方法具有比直接关系图法更好的简化效果,苟小龙推导了多代反应路径通量分析法^[20],这在很大程度上提高了反应路径分析法在机理简化过程中的效率与精度。多代反应路径通量分析法分析了组分间的间接相关性,其机理简化的效果优于一代、二代反应路径通量分析法。苟小龙指出,多代反应路径通量分析方法在处理中大型碳氢化合物的详细反应机理过程中具有较高的精度^[21]。但对大型碳氢化合物仅使用单一的路径通量分析法简化会限制反应机理的简化程度,不能将组分数、机理数减少到一个较小的范围。王卫等人针对这个问题提出了耦合路径通量分析与敏感性分析的简化方法,在保持精度的前提下进一步减少反应组分数和基元反应数。因此,针对大型碳氢化合物 Jet - A 的详细反应机理,本文使用耦合路径通量分析与敏感性分析方法进行简化;利用三代路径通量分析得到精度较高的反应机理,利用敏感性分析减少组分数和机理数。

替代燃料 POSF - 4658 的反应机理是目前最准确、详尽的 Jet - A 详细机理,包含 1607 组分、6633 机理。本文利用耦合路径通量分析与敏感性分析方法对 Jet - A 的详细机理进行简化。为了用于对航空发动机燃烧室燃烧过程进行模拟,选取燃烧室工况作为初始条件。本文对比了详细机理和简化机理的点火延迟时间、反应平衡时的组分浓度等参数以验证简化机理的准确性。同时,针对目前国际上常用的 Jet - A 燃烧反应机理,将简化机理的计算结果与常用的 Jet - A 燃烧反应机理做对比,分析简化机理与其他 Jet - A 燃烧机理的差异。

1.3 路径通量分析方法和敏感性分析方法概述

耦合路径通量分析与敏感性分析方法的实质是

在保持精度的基础上最大限度地减少反应组分数目和反应机理数目。具体方法已在文献[22]中做了详细的阐述,本文只作概述。路径通量分析方法已在文献[19]中进行了详细的阐述,本文不再赘述。

对于三代路径通量分析而言,预设一个阈值 ε ,当组分 A、B 的通量值 $r_{AB}^{\text{pro-3st}} > \varepsilon$ ($r_{AB}^{\text{con-3st}} > \varepsilon$) 时,组分 B 相对于组分 A 的生成(消耗)关系不可以忽略。敏感性分析的思路是去除每一组分以及该组分相关的反应机理,以删除该组分后的特征参数与原始机理特征参数的误差值作为该组分相对原机理的敏感性系数。选取适合的阈值以得到一定组分数目的简化机理。

2 简化机理的构筑

本文的研究使用普林斯顿大学 Chem - RC^[18-21]代码以及进行路径通量计算,使用 CHEMKIN 代码完成敏感性分析以及对常微分方程的积分。

由不同初始条件得到的机理简化结果会存在一定的差异^[18],这个差异直接影响模拟结果的准确性。为准确反映 Jet A 在航空发动机燃烧室中的燃烧特性,选定航空发动机燃烧室稳定燃烧时工况作为系统初始条件。压力 10 atm ~ 40 atm,温度范围 800 K ~ 1 000 K,当量比 0.3 ~ 1.5。

选定 $C_6H_5CH_3$ 、 C_8H_{18} 、 $C_{10}H_{22}$ 、 O_2 、 N_2 作为反应路径通量分析的预选组分。图 1 给出简化机理的组分数、相应基元反应数与给定阈值 ε 之间的关系。由图可知,简化机理随阈值的减小趋近详细机理,但当阈值 ε 处于零的某一邻域时,简化机理仅能维持预先选定的组分,其它的耦合关系都将忽略;组分数、机理数并不是阈值 ε 的连续函数,这由耦合组分群体间的非线性关系造成的,这些组分群体或被整体的保留在机理中或者被整体的去除。

如图 1 所示,在较小的阈值下,会得到组分数目、机理数目较多的简化机理,精度高但简化程度低,这与王卫等人的论述是一致的^[22]。因此,需要利用敏感性分析对多代路径通量分析得到的机理进行再简化。

选择 $\varepsilon = 0.09$ 时的简化机理,该机理包含 1 081 种组分,3 577 个反应机理。同时,对分析结果进行温度敏感性分析、稳态组分敏感性分析,去除对目标

函数影响不大的反应机理。在敏感性分析中,选取最大误差阈值 $\varepsilon_1 = 0.01$ 、相对误差阈值 $\varepsilon_2 = 0.03$ 、阈值 ε_2 的迭代变化量 $\delta = -10^{-5}$,得到最终的简化反应机理包含 122 种组分,331 个反应机理。

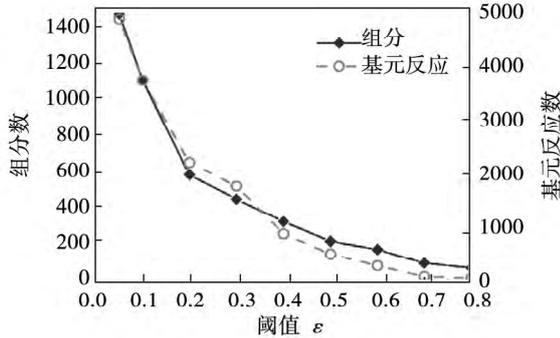


图 1 简化机理的组分数目、相应基元反应个数与给定阈值 ε 之间的关系

Fig. 1 Relationship among the number of the components in the mechanism simplified, corresponding number of the elementary reactions and the given threshold value ε

3 简化机理的验证

根据耦合路径通量和敏感性分析方法得到 Jet - A 燃烧的简化机理,利用零维均质混合器模型、预混火焰模型对简化机理进行验证,比较详细机理、简化机理计算结果的差异。分别将 $C_{12}H_{23}$ 机理、一步机理和五步反应机理在不同反应器模型中的计算结果与简化机理作比较。同时利用 Jet - A 实验值与简化机理进行比较^[2,3,6,12,24]。

图 2 (a)、(b) 反映了零维均质混合器模型中计算得到当量燃料燃烧的温度变化,系统压力 2 000 ~ 4 000 kPa,初始温度 900 ~ 1 000 K。零维均相预混燃烧模型假设组分在任意时刻均匀混合,忽略了扩散对于反应的影响,更有利于从反应动力学角度得到与详细机理相符合的简化结果。对应系统压力为 2 000、4 000 kPa 不同的系统初始条件,简化机理在点火延迟时间、绝热火焰温度的计算结果与详细机理吻合良好,点火延迟时间的相对误差值小于 1%,当系统压力为 2 000 kPa 时,简化机理得到的绝热火焰温度与详细机理的误差为 62 K (相对误差为

2.2%) ,系统压力为 4 000 kPa 时简化机理得到的绝热火焰温度与详细机理的误差为 87 K (相对误差为 3.1%)。在零维模型中,实验值仅测量了系统的平衡温度,详细机理、简化机理得到的平衡温度(绝热火焰温度)与实验值的误差小于 50 K (相对误差为 1.8%)。如图 2 所示,一步反应机理、五步反应机理计算的点火延迟时间与详细机理的计算结果存在明显偏差,一步反应机理、五步反应机理计算的绝热火焰温度与详细机理的相对误差大于 10.2%,所以一步反应机理、五步反应机理相对本研究得到的简化机理的精度较低; $C_{12}H_{23}$ 机理的绝热火焰温度与详细机理接近(相对误差为 5.2%),但点火延迟时间的偏差较大, $C_{12}H_{23}$ 机理具有一定的精度。

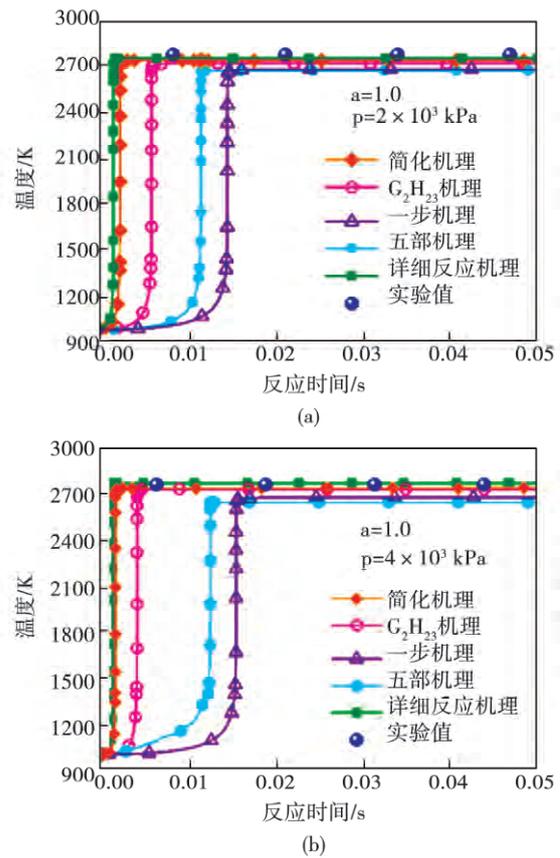


图 2 零维均质混合器中,不同机理的温度分布
Fig. 2 Distribution of the temperature under different mechanisms in a zero-dimension homogeneous mixer

在零维均质混合器中,分别取初始压力 1 000、2 000、4 000 kPa,燃料当量比去 0.5、1.0,初始温度 800 ~ 1 100 K,不同系统压力下点火延迟时间的对数值随初始温度倒数值的变化如图 3 ~ 图 5 所示。

当量混合、贫油混合, 压力为 1 000、2 000、4 000 kPa 的条件下, 简化机理、详细机理和实验值的点火延迟时间随初始温度的变化趋势有高度的一致性, 且数值偏差较小, 简化机理的点火延迟时间与详细机理、实验值的偏差均小于 3.5%。由图中的曲线可知, 本研究得到的简化机理曲线与详细机理曲线、实验值曲线吻合较好。因此, 在所讨论的压力、当量比范围内, 简化机理对点火延迟时间的预测值具有比较高的精确度。

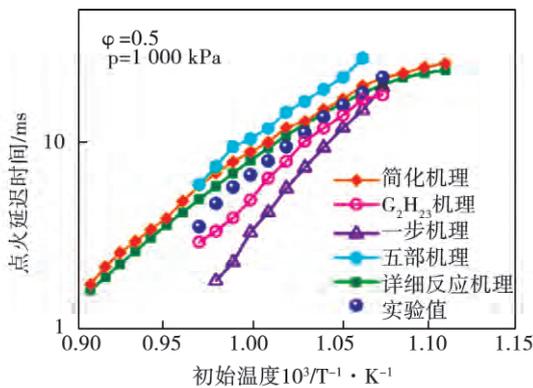


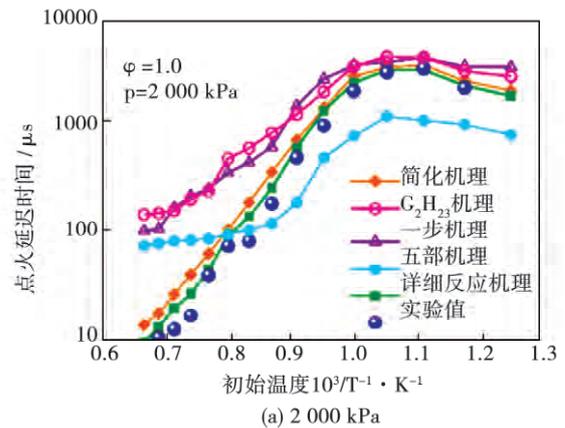
图 3 不同初始温度下不同反应机理得到的点火延迟时间的对比

Fig. 3 Comparison of the ignition delay times (IDT) obtained at different initial temperatures under various reaction mechanisms

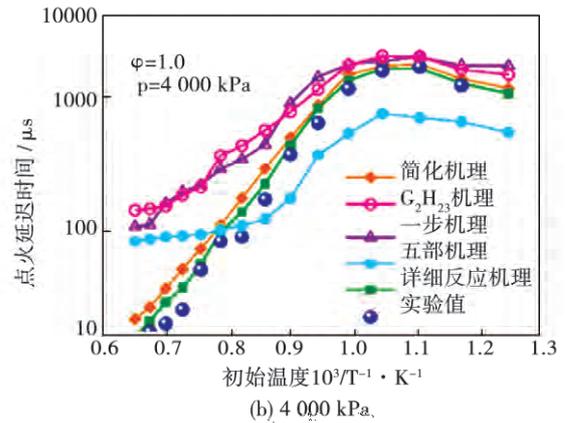
$C_{12}H_{23}$ 机理的点火延迟时间与详细机理、实验值得到的点火延迟时间随温度的变化趋势是吻合的, 但在高温区 ($10^3/T < 1$) 吻合较差。 $C_{12}H_{23}$ 机理对系统初温低、当量混合状态有比较高的精确度, 但对于贫油混合或者高温反应的精确度比较低。一步反应机理与五步反应机理具有一定的精度, 但是两者计算的点火延迟时间无法满足目前燃烧模拟的精度要求。

图 5 中对比了 Jet - A 简化机理计算的层流火焰速度与实验值、详细机理、 $C_{12}H_{23}$ 机理、五步反应机理的层流火焰速度^[24], 燃料温度 500 K, 压力 2 000 kPa。层流预混火焰模型既考虑了燃烧过程中化学反应动力学对结果的影响, 有考虑了流动过程(对流和扩散) 对结果的影响, 能够较为真实的反映 Jet - A 的气相燃烧过程。从计算结果来看, 在当量比 0.5 ~ 1.4 的区间内, 简化机理曲线与详细机理

曲线和实验值曲线高度吻合, 最大相对误差为 4.1%。所以本文得到的简化机理能够准确的反应实验结果以及详细机理的结果。贫油程度增加或富油程度增加并不会使计算结果与实验值产生较大的差异。 $C_{12}H_{23}$ 机理在当量比介于 0.9 ~ 1.05 的范围内可以准确反映层流火焰速度的真值, 但贫油程度增加或富油程度增加会使 $C_{12}H_{23}$ 机理产生较大偏差, 平均相对误差为 7.4%。五步反应机理可以反应层流火焰速度随当量比的变化趋势, 但具体数值存在一定的偏差, 平均相对误差为 13.3%。



(a) 2 000 kPa



(b) 4 000 kPa.

图 4 不同初始温度下不同反应机理的点火延迟时间对比

Fig. 4 Comparison of the ignition delay times (IDT) obtained at different initial temperatures under various reaction mechanisms

综上所述, 本文在航空发动机燃烧室条件下得到的 Jet - A 燃料简化机理计算的点火延迟时间、绝热火焰温度、层流火焰速度与详细反应机理的计算值、实验测量值吻合程度较好。因此, 简化机理的可以比较准确的反映 Jet - A 详细机理的特性以及准确地

反映 Jet - A 型航空煤油的真实燃烧特性。通过与详细机理、实验值的比较可知, $C_{12}H_{23}$ 机理也具有较高精度、但是 $C_{12}H_{23}$ 机理的应用范围较窄, 在航空发动机燃烧室条件下, $C_{12}H_{23}$ 机理也可以反应 Jet - A 型航空煤油的燃烧特性, 但是存在一定的偏差。一步反应机理可较好反映目标函数随试验条件的变化趋势, 较准确的反应均质系统的绝热火焰温度, 由于该机理忽略中间组分不能反映点火延迟时间、火焰传播特性。所以对于无限速率的燃烧模拟过程, 一步反应机理因为形式简单的优势而被大量应用。五步反应机理比一步机理更详细, 但对于中间组分的描述逊色于 $C_{12}H_{23}$ 机理, 五步机理在点火延迟时间、火焰传播特性的分析中存在较大的偏差。

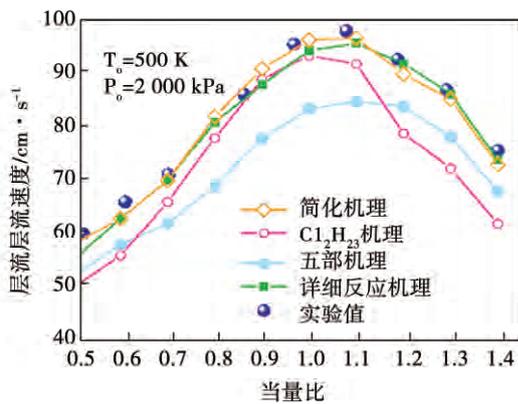


图 5 Jet - A 燃料/空气混合物在不同化学计量比下的火焰传播速度

Fig. 5 Propagation speed of the flame formed by burning Jet - A fuel/air mixture at various stoichiometric ratios

因此, 本文得到的 Jet - A 简化机理可以真实的反映 Jet - A 燃料在航空发动机燃烧室内的实际燃烧过程, 比广泛应用的 $C_{12}H_{23}$ 机理具有更高的精度, 比详细的 POSF - 4658 机理具有更少的组分数目和反应机理数目。

4 结 论

本研究利用耦合路径通量分析和敏感性分析方法, 以航空发动机燃烧室工况作为初始条件对 Jet - A 燃烧的详细反应机理(POSF - 4658) 进行简化, 得

到了组分数为 122、基元反应数为 331 的简化机理。采用该简化机理对燃料的点火延迟时间、绝热火焰温度以及层流火焰速度进行了计算, 将相关计算结果与详细反应机理的计算结果、实验值进行对比分析, 简化机理计算得到的点火延迟时间、绝热火焰温度、层流火焰速度与详细机理计算结果的平均相对误差分别为 1.2%、3.3%、3.7%; 因此, 本研究的简化模型在航空发动机燃烧室内的工况条件下(当量比 0.3 - 1.5、压力 1 000 ~ 4 000 kPa、系统初始温度 800 ~ 1 000 K) 具有较高的准确性, 能够准确反映出 Jet - A 燃料的反应过程, 能够用于对航空发动机燃烧室的燃烧过程进行准确的数值模拟。在简化机理与详细机理、实验值的对比过程中, 将目前国际上常用的 Jet - A 反应机理在绝热火焰温度、点火延迟时间、层流火焰速度的计算结果进行了比较。通过分析各个反应计算结果与详细机理的相对误差, 本研究得到的简化机理计算的绝热火焰温度、点火延迟时间和层流火焰速度与详细机理计算结果的相对误差明显小于其他反应机理计算值与详细机理计算结果的相对误差; 所以本研究得到的简化机理比已有的 Jet - A 燃料机理在航空发动机燃烧室工况下具有更高的精确度。该简化机理与详细的反应机理相比, 简化机理有效的将组分数由 1 607 减少到 122。因此, 简化机理具有精度高、简化程度高的优点。在航空发动机燃烧室的燃烧效率、燃烧稳定性、高空重点火、污染物排放的等方面的研究研究中, 简化机理耦合流动模型计算时可减少求解变量和方程数目, 可以高效、高精度的对燃烧场进行仿真。

致谢: 本文受到中国民航大学天津市民用航空器适航与维修重点实验室开放基金的资助, 中央高校基本科研业务费专项(ZXH2012J003) 基金的资助。感谢美国 Connecticut 大学的 Tianfeng - Lu 教授在本文工作过程中的指导, 以及为本文提供 Chem - RC 代码。

参考文献:

[1] 郑 东, 于维铭, 钟北京. RP - 3 航空煤油替代燃料及其化学反应动力学模型[J]. 物理化学学报, 2015, 04: 636 - 642.
ZHENG Dong, YU Wei-ming, ZHONG Bei-jing. RP - 3 aviation

- kerosene surrogate fuel and the chemical reaction kinetic model [J]. *Journal of Physico-chemistry* 2015 04: 636 - 642.
- [2] Carmen M. Gracia - Salcedo ,Theodore A. Brabbs ,and Bonnie J. McBride. Experimental Verification of the Thermodynamic Properties for a Jet-A Fuel [R] NASA TM-401475 ,NASA Lewis Research Center Cleveland ,Ohio ,1988.
- [3] Freeman ,G. ; Lefebvre ,A. H. , SPONTANEOUS IGNITION CHARACTERISTICS OF GASEOUS HYDROCARBON-AIR MIXTURES [J]. *Combustion and Flame* 1984 58 (2) :153 - 162.
- [4] Edelman ,P. B. ; Fortune ,O. F. , A quasi-global chemical kinetic model for finite rate combustion of hydrocarbon fuels with application to turbulent burning and mixing in hypersonic engines and nozzles [J]. *AIAA paper* ,1969 69 - 86.
- [5] Kiehe ,T. M. ,Matthews ,R. D. ,Wilson ,D. D. ,An eight-step kinetic mechanism for high temperature propane flames [J]. *Combustion Science and Technology* 1987 54 1 - 23.
- [6] Chi-Ming ,L. E. E. ; Krishna ,K. ; Bahman ,G. ,Simplified jet fuel reaction mechanism for lean burn combustion application [J]. In 31st Aerospace Sciences Meeting ,American Institute of Aeronautics and Astronautics: 1993.
- [7] Kundu ,K. ; Penko ,P. ; Yang S. Reduced reaction mechanisms for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels [J]. In 36th *AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* ,American Institute of Aeronautics and Astronautics: 1998.
- [8] Dean ,A. J. ,Penyazkov ,O. G. ,Sevruk ,K. L. and Varatharajan ,B. ,Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures [J]. *Proc. Combust. Instit.* 2006 11, 28 p1529.
- [9] Westbrook ,C. K. and Dryer ,F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion [J]. *Combustion Science and Technology* , 1979 11, 27 p31.
- [10] Montgomery ,C. J. ; Cremer ,M. A. ; Chen J. -Y. ; Westbrook ,C. K. ; Maurice ,L. Q. ,Reduced chemical kinetic mechanisms for hydrocarbon fuels [J]. *Journal of Propulsion and Power* 2002 18 (1) : 192 - 198.
- [11] Kumud ,A. ; Krishna ,K. ; Paul ,P. , A Study on Detonation of Jet-A Using a Reduced Mechanism [J]. In 48th *AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition* , American Institute of Aeronautics and Astronautics: 2010.
- [12] Dooley ,S. ; Won ,S. H. ; Chaos ,et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties. *Combustion and Flame* 2010 157 (12) : 2333 - 2339.
- [13] Blakey S ,Rye L ,Wilson C W. Aviation gas turbine alternative fuels: A review [J]. *Proceedings of the Combustion Institute* 2011 , 33(2) : 2863 - 2885.
- [14] Law C K ,Sung C J ,Wang H. Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanism for combustion modeling [R]. *AIAA* 2002 - 0331 2003.
- [15] Peters ,N. ; Kee ,R. J. ,Computation of Stretched Laminar Methane-air Diffusion Flames using a Reduced Four-Step Mechanism [J]. *Combustion and Flame* 1987 68(1) : 17 - 29.
- [16] Tianfeng ,L. ; Yiguang ,J. et al. Complex CSP for chemistry reduction and analysis [J]. In 39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit ,American Institute of Aeronautics and Astronautics: 2001.
- [17] Toner ,S. R. ; Moriarty ,N. W. ; Frenklach ,M. et al. Computational economy improvements in PRISM. *International Journal of Chemical Kinetics* 2003 35(9) : 438 - 452.
- [18] Lu ,T. F. ; Law ,C. K. A directed relation graph method for mechanism reduction [J]. *Proceedings of the Combustion Institute* 2005 30: 1333 - 1341.
- [19] Sun ,W. ; Chen Z. ; Gou X. et al. A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms [J]. *Combustion and Flame* 2010 157(7) : 1298 - 1307.
- [20] 苟小龙 ,王 卫 桂 莹. 基于三代路径通量分析方法的甲烷燃烧机理简化 [J]. *工程热物理学报* 2014 09: 1870 - 1873. GOU Xiao-long ,WANG Wei ,GUI Ying. Methane reaction mechanism simplification based on third generation path flux analytic method [J]. *Journal of Engineering Thermophysics* ,2014 ,09: 1870 - 1873.
- [21] 苟小龙 ,王 卫 桂 莹 等. 一种多代路径通量分析化学机理简化方法 [J]. *推进技术* 2012 03: 412 - 417. GOU Xiao-long ,WANG Wei ,GUI Ying ,et al. A method for simplifying a multi-generation path flux analytic chemical reaction mechanism [J]. *Journal of Propulsion Technology* ,2012 3: 412 - 417.
- [22] 王 卫 禹 进 ,苟小龙. 耦合路径通量分析与敏感性分析方法的燃烧机理简化 [J]. *工程热物理学报* ,2014 ,11: 2303 - 2307. WANG Wei ,YU Jin ,GOU Xiao-long. Combustion mechanism simplification by using path flux analysis and sensitivity analytic method [J]. *Journal of Engineering Thermophysics* ,2014 ,11: 2303 - 2307.
- [23] Jack D. Mattingly; William H. Heiser; David T. Pratt. Aircraft engine design [M]. American Institute of Aeronautics and Astronautics 2002. .
- [24] Vasu S. S. ; Davidson ,D. F. ; Hanson ,R. K. Corrigendum to "Jet fuel ignition delay times: Shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions" [J]. *Combustion and Flame* 2009 156(4) : 946.

(刘 瑶 编辑)

guo (College of Energy Source and Power Engineering ,Northeast University of Electric Power ,Jilin ,China ,Post Code: 132012) //Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. -2016 31(5) . -54 ~60

With air and water serving as the gas-liquid two-phase flow working media and by using a Y type mixer having an angle of 90 degrees ,a visualization experiment was performed by employing a high-speed video camera inside a snake-shaped micro-channel with a rectangular cross section of $800\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$. Through changing the gas-liquid two-phase flow rate ,some special flow patterns different from those in a straight micro-channel were observed in the section b and c along the micro-channel. The length of the air bubble in an air bubble flow was analyzed and a new correlation formula was proposed. For a halberd-shaped slug flow ,the relationship between the length/width ratio and the number of capillary was analyzed and the test results of the length of the gas halberd and liquid film thickness were compared with those obtained by using the currently available correlation formulae in the literatures. It has been found that the prediction accuracy by using the formulae proposed by Qian and Quere is relatively good. Moreover ,due to the action of the shearing and centripetal force exerted by the snake-shaped tube ,the transition of the air halberd at the elbow II is found to have the following three modes: expansion and elongation ,shearing induction and direct transition. **Key words:** snake-shaped micro-channel ,flow pattern ,air bubble length ,liquid-film thickness ,length and width ratio

基于分析法对 Jet - A 燃料进行燃烧反应机理简化的研究 = **Study of the Simplification of the Mechanism Governing the Combustion Reaction of Jet-A Fuel Based on the Analytic Method** [刊 ,汉] WANG Wei ,LIU Shuai ,BAI Jie (Key Laboratory on Civil Aircraft Airworthiness and Maintenance ,Civil Aviation University of China ,Tianjin ,China ,Post Code: 300300) //Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. -2016 31(5) . -61 ~67

The coupling path flux analytic method and sensitivity one were chosen to simplify the combustion reaction mechanism of Jet-A type aero-kerosene under the operating conditions of the combustor of an aero-engine. The combustion reaction mechanism of POSF-4658 (involving 1607 components and 6633 reactions) was selected to substitute the detailed combustion reaction mechanism of Jet-A type aero-kerosene under the operating conditions of the combustor of an aero-engine. With the operating conditions of the combustor serving as the initial conditions for the simplification process ,a mechanism (involving 122 components and 331 reactions) simplified for substituting that of the Jet-A type aero-kerosene was obtained through an analysis. By analyzing and comparing the reaction mechanism simplified for substituting that of the Jet-A type aero-kerosene ,a detailed reaction mechanism of Jet-A type aero-kerosene ,

$C_{13}H_{28}$ reaction mechanism and the five-step reaction mechanism with the test values, it can be found that the reaction mechanism simplified for substituting that of the Jet-A type aero-kerosene can reflect the main combustion characteristics of the Jet-A type fuel. The adiabatic flame temperature, ignition delaying time and laminar flow flame speed calculated by using the worldwide commonly used Jet-A reaction mechanism were compared with the values calculated by using the simplified reaction mechanism proposed by the authors. It has been found that the simplified reaction mechanism under discussion enjoys a relatively high precision and the average relative errors of such parameters as the ignition delaying time, adiabatic flame temperature and laminar flow flame speed calculated by using the simplified reaction mechanism and those calculated by using the detailed reaction mechanism are 1.2%, 3.3% and 3.7% respectively. The reaction mechanism simplified for substituting that of the Jet-A type aero-kerosene can provide a chemical reaction kinetic model for simulating combustors in aero-engines. **Key words:** combustor, Jet-A, mechanism simplification, path flux analysis, sensitivity analysis

化学镀 Ni-P 合金镀层对铁细菌微生物污垢的影响 = **Influence of the Coat Chemically Plated With Ni-P Alloy on Iron Bacteria-formed Microbe Fouls** [刊, 汉] LIU Zuo-dong (College of Energy Source, Power and Mechanical Engineering, North China University of Electric Power, Beijing, China, Post Code: 102206), YAO Xiang, BAI Wen-yu, XU Zhi-ming (College of Energy Source and Power Engineering, Northeast University of Electric Power, Jilin, China, Post Code: 132012) // Journal of Engineering for Thermal Energy & Power, -2016, 31(5), -68 ~ 75

The influence of the coat chemically plated with Ni-P alloy on the microbe fouls commonly seen on the surface of heat exchange equipment items was investigated in order to expand the scope of applications of chemically-plated coats. First, various kinds of the coat surfaces with various characteristics were prepared by adjusting the chemical plating solution process with the influence of the lactic acid concentration on the plating speed and the surface energy being studied. Afterwards, a 5-7 day still-keeping test of the microbe fouls was conducted and their macroscopic and microscopic morphology of the coat surfaces before and after the test were analyzed. In addition, the correlation between the surface energy and the surface weight loss of the samples was studied. In the scope of the process under the test, both the plating speed and the surface energy of the samples will decrease with an increase of the lactic acid content. Upon the completion of the still-keeping test, the bacteria fouls attached to the surface of the common carbon steel sample was relatively excessive and in a life cycle of the microbe the mass subject to the microbe erosion on the surface of carbon steel assumed a gradual descending tendency, however, the surface of the coat plated still shined a kind of metal luster and no big change in the mass occurred. The microscopic morphology of the coat