

正十二烷高温机理简化及验证

卢海涛^{1,2}, 刘富强^{1,2,*}, 王于蓝^{1,2}, 王成冬^{1,2}, 范雄杰^{1,2}, 刘存喜^{1,2}, 徐纲^{1,2}

¹ 中国科学院工程热物理研究所, 北京 100190

² 中国科学院大学, 北京 100049

Mechanism Reduction and Verification for the High-Temperature Combustion of *n*-Dodecane

LU Haitao^{1,2}, LIU Fuqiang^{1,2,*}, WANG Yulan^{1,2}, WANG Chengdong^{1,2}, FAN Xiongjie^{1,2}, LIU Cunxi^{1,2}, XU Gang^{1,2}

¹ Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China

² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China

*Corresponding author. Email: liufuqiang@iet.cn; Tel.: +86-10-82543256.

经过 Analysis Chemkin Reaction Workbench 简化后，对部分反应机理的指前因子进行修正，如下表 1：

表 1 部分基元反应的指前因子修正

反应机理	修正前指前因子	修正后指前因子
$H + O_2 = O + OH$	$1.04E + 14$	$8.04E + 13$
$CO + OH = CO_2 + H$	$7.05E + 04$	$5.70E + 04$
$CH_3 + HO_2 = CH_4 + O_2$	$3.61E + 12$	$2.00E + 13$
$C_2H_3 + O_2 = CH_2CHO + O$	$3.03E + 11$	$4.53E + 11$
$C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$	0.131	0.4
$C_2H_3 + CH_3 = A-C_3H_5 + H$	$1.93E + 18$	$6.93E + 18$
$A-C_3H_5 + H = C_3H_6$	$5.93E + 54$	$7.50E + 54$
$N-C_{12}H_{26} + OH \Rightarrow C_{12}H_{25} + H_2O$	$9.04E + 08$	$9.04E + 07$
$N-C_{12}H_{26} + HO_2 \Rightarrow C_{12}H_{25} + H_2O_2$	$3.52E + 02$	$4.00E + 02$

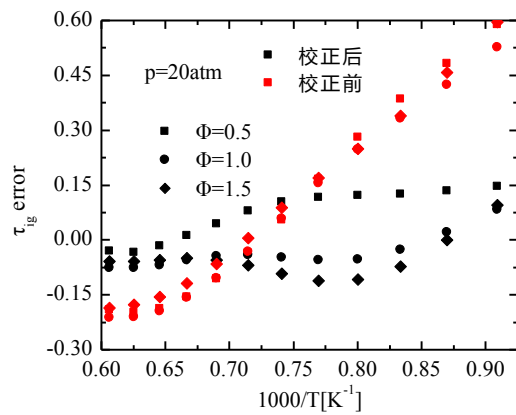


图 1 着火延迟误差对比图

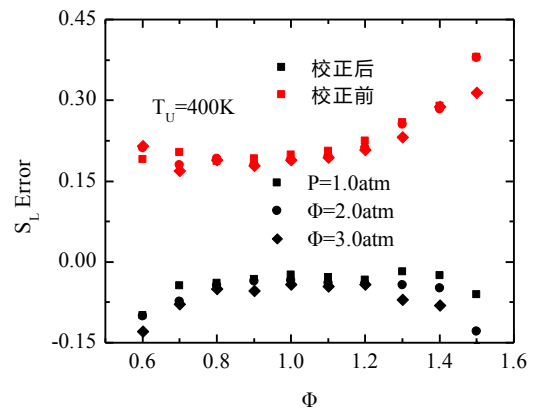


图 2 层流火焰传播速度误差对比图

修正前，着火延迟计算结果与详细机理间的误差最大可达 0.6，层流火焰传播速度误差约为 0.38；修正后，着火延迟最大误差为 0.15，层流火焰传播速度误差最大为 0.15。由此可见，经调整后，机理模拟的精确性更高。