

甲醇微小尺度燃烧反应动力学模型的简化和优化

张 鹏, 倪计民, 石秀勇

(同济大学 汽车学院, 上海 201804)

摘要: 采用基于误差传播的直接关系图法(directed relation graph with error propagation, DRGEP)、全物种敏感性分析法(full species sensitivity analysis, FSSA)和基于反应路径法的直接关系图法(directed relation graph with path flux analysis, DRGPFA)对甲醇燃烧详细机理进行了简化,利用敏感性分析法筛选出关键基元反应,通过指前因子扰动法进行粗扰动和细扰动分析,并对甲醇简化机理进行了优化和验证。结果表明,FSSA 简化机理含有 16 种组分、65 个基元反应,能较准确的预测点火延迟时间和层流火焰速度;V6-3-4 优化机理的预测精度较详细机理更接近试验值。

关键词: 机理简化;甲醇;机理优化;敏感性分析;指前因子扰动法

中图分类号: TK01

文献标志码: A

Reduction and Optimization for Detailed Kinetic Model of Methanol in Small-scale Combustion

ZHANG Peng, NI Jimin, SHI Xiuyong

(School of Automotive Studies, Tongji University, Shanghai 201804, China)

Abstract: The directed relation graph with error propagation (DRGEP), full species sensitivity analysis (FSSA) and directed relation graph with path flux analysis (DRGPFA) were used to reduce the mechanism of methanol. Based on the reduced mechanism, the key primitive reactions were found by sensitivity analysis, then their pre-exponential factors were adjusted by coarse perturbation and refinement perturbation analysis which were on this basis of pre-factor perturbation method, to obtain the optimal optimization mechanism and verify it. The results show that the FSSA reduced mechanism has 16 species and 65 reactions, which can accurately predict ignition delay time and laminar flame velocity. The

prediction accuracy of the V6-3-4 optimized mechanism is better than that of the FSSA reduced mechanism, and the predicted value is much closer to the experimental value than the detailed mechanism.

Key words: mechanism reduction; methanol; mechanism optimization; sensitivity analysis; pre-exponential factor perturbation method

微型能源系统可采用燃烧的方式为微电子机械设备供能,因此,微小尺度燃烧引起了众多学者的关注^[1-3]。甲醇是一种清洁的液体燃料,成本低廉,原料广泛,易于采购,较气体燃料具有能量密度高、便于储存等优点,是微能源系统的理想燃料^[4]。然而,相对于内燃机、锅炉等的大尺度燃烧,甲醇在微小尺度燃烧器中的燃烧较为复杂,存在燃料驻留时间短、热损失大及自由基易淬灭等缺点^[5-6]。因此,研究适用于微小尺度燃烧条件下的甲醇动力学模型,对于深入研究甲醇在微小尺度燃烧器中的燃烧过程,优化甲醇微小尺度燃烧器结构、提高燃烧稳定性和燃烧效率等具有重要意义。

学者们针对甲醇燃烧反应动力学模型开展了大量研究。基于激波管实验,Bowman^[7]首次构建了甲醇的详细燃烧动力学模型,该模型含有 14 种组分、28 个基元反应,能够在高温范围内准确预测甲醇滞燃期。Aronowitz^[8]、Dryer^[9]、Held^[10]、Li^[11]等对甲醇机理进行更新与完善。C0-C4 核心机理研究的学者也发展并优化了甲醇的动力学模型^[12-13],使得甲醇燃烧动力学模型精度逐步提高,适用范围广,但是其规模也发展到了上百种组分和上千个基元反应,例如 Burke^[14]提出的 Mech15.34 机理包含 173 种组分、1 011 个基元反应;Creck 团队^[15]开发的 C3 机理^[16],其包含 114 种组分,1 999 个基元反应。对甲醇燃烧过程进行数值模拟时,

收稿日期: 2021-07-11

基金项目: 清华大学汽车安全与节能国家重点实验室开放基金(KFY2229)

第一作者: 张鹏(1982—),男,博士生,主要研究方向为清洁燃料燃烧和控制技术。E-mail: 1810568@tongji.edu.cn

通信作者: 石秀勇(1979—),男,副教授,工学博士,主要研究方向为汽车发动机节能与排放控制。

E-mail: shixy@tongji.edu.cn



论文
拓展
介绍

需要将甲醇燃烧的动力学机理与流动方程组耦合起来进行数值求解,如果直接使用甲醇的详细燃烧动力学机理,会使计算量非常大^[17]。此外,过多的组分所涉及的反应特征时间尺度差异较大。对于反应速率较快的基元反应,求解其微分方程时需要用到非常小的步长,使得微分方程难以求解,导致计算的刚性问题^[18]。因此,需要对甲醇详细动力学模型进行简化。

近些年来,学者们对甲醇详细动力学模型开展了简化研究。闫妍^[19]利用敏感性分析法对学者Li^[11]提出的甲醇详细机理进行了简化,得到了包含16种组分,17个基元反应的甲醇简化机理,该机理能较好预测(Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI)发动机的燃烧特性。王刚^[20]通过对甲醇氧化的主要反应路径分析,得到了包含17种组分,40个基元反应的甲醇简化机理,该机理更适合与CFD(Computational Fluid Dynamics)多维模型耦合计算。Lindsted^[21]运用敏感性分析及试验验证法,对包含52种组分、326个基元反应的甲醇详细机理进行了简化,简化机理含有14个C/H/O主反应和5个子反应,且保留了详细机理的主要特征。Jing^[22]利用敏感性分析法对Zhang机理^[23]进行了简化,得到27种组分、54个基元反应的甲醇简化机理。

然而,简化机理在规模缩小的同时,必然会带来预测性能的降低,因而有必要对简化机理进行优化^[24],即在可能复制选定的试验结果的基础上,在不确定的物理现实领域内对燃烧模型的参数值,如速率参数,热力学性质参数等进行系统调整,以达到最佳效果的方法^[25]。目前,国内外针对甲醇机理的优化研究相对较少,例如Olm^[26]基于全局优化算法对Li机理^[11]的17个重要基元反应的57个阿伦尼乌斯参数进行了优化。Magnus^[27]基于智能优化工具包DAKOTA构建了用于优化动力学参数的灵活工具箱,并利用该工具箱完成了甲醇机理点火延迟时间和层流火焰速度的优化。但是目前针对微小尺度燃烧条件下甲醇机理的优化研究还鲜见报道。为此,本文采用分级优化的方法,对基元反应速率参数的指前因子进行粗扰动调整,得出机理预测参数随指前因子的变化规律,再通过细化扰动调整,分析寻找最佳指前因子,从而最大程度的提高模型的预测性能。选择C3甲醇详细机理为研究对象,利用基于误差传递的直接关系图法(DRGEP)、全物种敏感性分析法(FSSA)和基于反应路径分析的直接关系图法(DRGPFA)分别进行了简化研究,此外还考虑到简化带来的误差,利用敏感性分析和指前因子扰动法

对简化机理进行了分级优化,提高简化机理的预测精度。

1 研究方案

1.1 机理简化方案

由于C3甲醇详细机理的规模相对不大,组分和基元反应数目适中,为此,本文选择了使用较广泛的单一简化方法和组合简化方法分别对详细机理进行简化。

(1)基于误差传播的直接关系图法(DRGEP):从误差传播的角度去分析剔除某一物质对目标物质所产生影响,若其累积误差小于设定阈值则认为该物质为冗余物质,可以从详细机理中剔除^[28]。

(2)全物种敏感性分析法(FSSA):以敏感性分析法为基础对所有目标产物进行敏感性分析,进而根据全物种敏感性系数判断出各个基元反应之间的相关性,并判断这些相关反应对所有目标物质影响程度,清除对目标产物无明显影响的基元反应,进而得到简化机理^[29]。

(3)基于反应路径分析的直接关系图法(DRGPFA):直接关系图法中的误差仅考虑预选物质的第一代(直接关系),而通过路径通量分析,能体现第一代和第二代或更高代的重要性,通过代替使用绝对反应速率,使得生产和消耗通量都用于识别重要的反应途径,能在保持目标精度的同时尽可能生成较小的机理^[30]。为此,本文采用它们的组合对机理进行简化。

基于微小尺度燃烧的特点,确定机理简化工况条件为:温度 $T=1\ 100\sim 1\ 400\text{K}$ 、当量比 $\varphi=0.75\sim 1.25$ 及压力 $P=1\sim 1.5\text{atm}$ 。采用Chemkin软件中的闭式均相反应器模型,在简化工况条件下对甲醇的燃烧过程进行计算,利用Reaction Workbench软件,以点火延迟时间的最大误差作为目标参数,得到具有不同误差的简化机理。

1.2 机理优化方案

首先通过点火延迟时间和层流火焰速度的敏感性分析,筛选出关键基元反应。基于阿伦尼乌斯公式^[31],化学应速率常数的计算公式如式(1)所示:

$$k = V \times \exp(-E/RT) \quad (1)$$

式中: k 为化学应速率常数; V 为指前因子; E 为活化能; R 为摩尔气体常数和 T 为温度。

指前因子 V 是化学反应的重要动力学参数之一,利用指前因子扰动法^[32]对关键基元反应的指前

因子进行修正,进而提高点火延迟时间和层流火焰速度的预测精度,达到优化的目的。优化选取的工况与简化工况一致,优化过程分为粗扰动和细化扰动,粗扰动设计方案如表 1 所示,细化扰动则是以最佳粗扰动为基础,根据粗扰动所得到的规律,进行局部指前因子变化量优化。

表 1 粗扰动设计方案
Tab.1 Coarse perturbation

扰动代号	指前因子变化量
V1	$\times 2$
V2	$\times 0.5$
V3	$\times 10$
V4	$\times 1.2$
V5	$\times 0.8$
V6	$\times 0.1$

1.3 机理验证方案

通过比较点火延迟时间和层流火焰速度的实验值和计算值,对机理进行验证。实验值来源于公开发表的文献中的数据,计算值是通过详细机理、简化机理、优化机理和 Chemkin 软件中的闭式均相反应器模型、层流燃烧火焰模型的耦合计算得出。计算的边界条件为:当量比 φ 为 0.75~1.25,压力 P 为 1~1.5 atm,温度 T 为 1100~1400K。为了对实验值和计算值的差异进行定量分析,层流火焰速度的误差分析采用常规的误差计算式(2),点火延迟时间的误差分析采用对数相对误差式(3)。

$$M_1 = \frac{|M_s - M_e|}{M_e} \quad (2)$$

$$M_2 = \left| \frac{\ln M_s - \ln M_e}{\ln M_e} \right| \quad (3)$$

式中: M_1 为层流火焰速度误差; M_2 为点火延迟时间误差; M_e 为点火延迟时间和层流火焰速度的参考值,即实验值或采用详细机理的计算值; M_s 为采用简化机理和优化机理得到的点火延迟时间和层流火焰速度的计算值。

2 验证和分析

2.1 甲醇简化机理的验证和分析

表 2 为简化机理与详细机理规模和预测性能的对比,数据来源于 Reaction Workbench 软件的计算结果。表中的最大误差为采用三种不同规模的简化机理预测的点火延迟时间与详细机理预测结果之间的误差。可以看出,三种简化机理的规模均远小于详细机理,且计算时间较详细机理大幅减少,均小于

详细机理所需计算时间的 1/3,DRGEP 简化机理的误差最小,但是组分和反应数相对较多,计算时间最长;FSSA 简化机理的组分与反应数最少,计算时间最短,但误差最大;DRGPFA 简化机理的组分和反应数适中,最大误差和计算时间均与 FSSA 简化机理非常接近。

表 2 简化机理与详细机理的规模和预测性能的对比
Tab.2 Comparison of scale and predictive performance of reduced and detailed mechanisms

机理	组分数目	基元反应数目	最大误差/%	计算时间/min
详细	114	1999	0	330
DRGEP	24	151	9.01	105
FSSA	16	65	13.46	36
DRGPFA	20	91	13.20	71

2.1.1 点火延迟时间

图 1 为温度范围为 1100~1400 K,当量比 $\varphi=1.0$,压力 $P=1.5$ atm 下的点火延迟时间计算值与实验值,其中实验数据来自 Pinzón^[33]的激波管实验。由图 1 可知,在温度系数(1000/温度)为 0.70~0.83(温度值在 1200~1400K)范围内,点火延迟时间的计算值与实验值较吻合,其中 DRGEP 简化的甲醇机理的计算值与详细机理计算值更接近,FSSA 和 DRGPFA 两种简化机理的计算值接近,与详细机理计算值保持一定偏差;当温度系数为 0.83~0.91(温度值在 1100K~1200K)范围内,四种机理的点火延迟时间的计算值逐渐接近,但与实验值的偏差增大,所以需要 1100K~1200K 低温段进行优化研究。

表 3 为点火延迟时间的误差分析,可见,从点火延迟时间的角度,DRGEP 简化机理优于 FSSA 简化机理,FSSA 简化机理略优于 DRGPFA 简化机理。

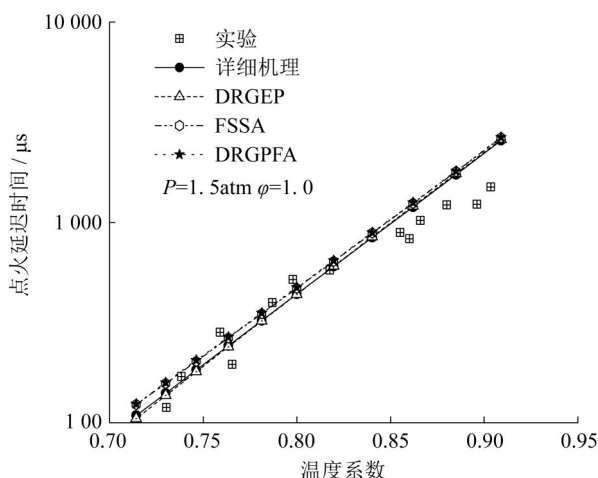


图 1 点火延迟时间对比

Fig.1 Comparison of ignition delay time

表3 点火延迟时间的误差
Tab.3 Error comparison of ignition delay time

工况	误差类别	相对于详细机理			相对于实验值			
		DRGEP/%	FSSA/%	DRGPFA/%	详细/%	DRGEP/%	FSSA/%	DRGPFA/%
$\varphi=1.0, P=1.5\text{atm}$	平均误差	1.31	7.64	8.36	5.81	5.22	9.82	10.11

2.1.2 层流火焰速度

图2为当量比 $\varphi=0.75\sim1.25$,压力 $P=1\text{atm}$,温度 $T=298\text{K}$ 下,层流火焰速度的计算值及实验值,实验数据来自Egolfopulos^[34]的层流火焰实验。由图2可知,当 $\varphi<1.0$,DRGEP简化机理计算值与详细机理的计算值曲线几乎重合,且与实验值比较吻合;当 $\varphi>1.0$,DRGEP简化机理与详细机理的计算值偏差逐渐增大,同时和实验值偏差也增大。对于FSSA和DRGPFA两种简化机理计算值与详细机理计算值及实验值始终保持一定的差距,并且随着当量比的增加,差距越来越大,因此需要着重考虑高当量比1.1~1.25下的层流火焰速度优化。

表4为层流火焰速度的误差分析,从层流火焰速度的角度,DRGEP简化机理优于DGRPFA简化

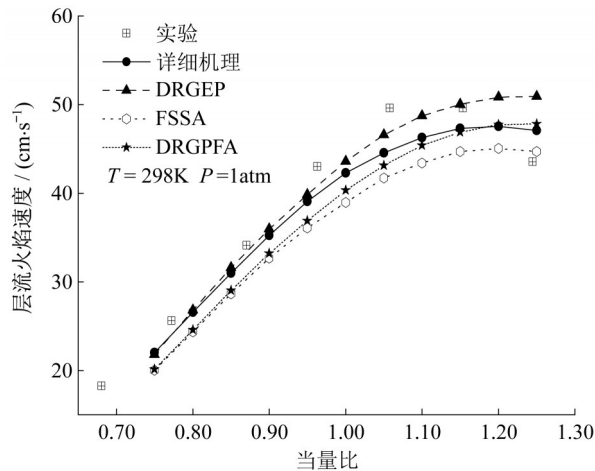


图2 层流火焰速度对比
Fig.2 Comparison of laminar flame speed values

机理,DRGPFA简化机理优于FSSA简化机理。

表4 层流火焰速度的误差
Tab.4 Error of laminar flame speed

工况	误差类别	相对于详细机理			详细/%	相对于实验值		
		DRGEP/%	FSSA/%	DRGPFA/%		DRGEP/%	FSSA/%	DRGPFA/%
$P=1\text{atm}, T=298\text{K}$	平均误差	3.78	6.94	4.21	6.55	6.90	13.06	8.19

2.2 甲醇优化机理的验证与分析

根据DRGEP、FSSA及DRGPFA三种简化机理点火延迟时间和层流火焰速度的综合分析,DRGEP简化机理与详细机理最接近,但是规模较大,FSSA简化机理的组分与反应数目最少,而且误差适中,为了有利于后续与CFD软件耦合计算,因此优先选择FSSA机理进行优化。

2.2.1 敏感性分析

(1)点火延迟时间的敏感性分析

图3为三种不同温度下,对点火延迟时间比较敏感的基元反应所对应的敏感性系数值,由图3可知,基元反应R14只有在温度 $T=1100\text{K}$ 时对点火延迟时间有影响作用,R21和R54对 $T=1400\text{K}$ 时的点火延迟时间无影响。结合前文分析,主要考虑对低温范围进行优化,所以优先选择对基元反应R14、R21和R54进行点火延迟时间的修正。

(2)层流火焰速度的敏感性分析

图4为三种不同当量比下,对层流火焰速度比较

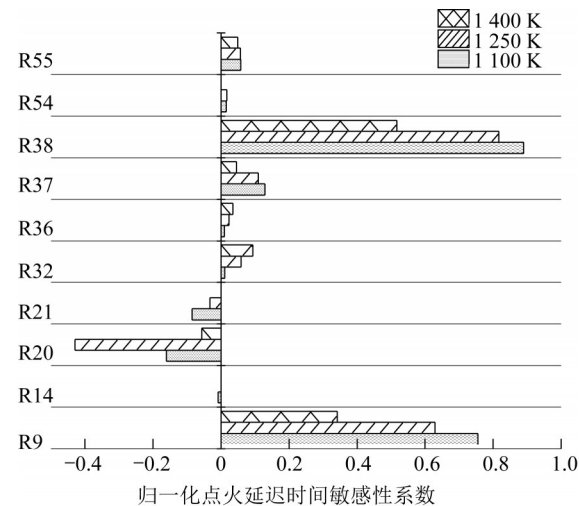


图3 点火延迟时间敏感性系数
Fig.3 Normalization of sensitivity coefficient of ignition delay time

敏感的基元反应所对应的敏感性系数值,从图4中可以看出当量比在1.0~1.25范围内,基元反应R6和R59

对层流火焰速度有影响,对低当量比0.75无影响。结合前文分析,需要着重考虑当量比在1.0~1.25范围内的优化,所以针对层流火焰速度的修正,选择优化R6和R59两个基元反应。

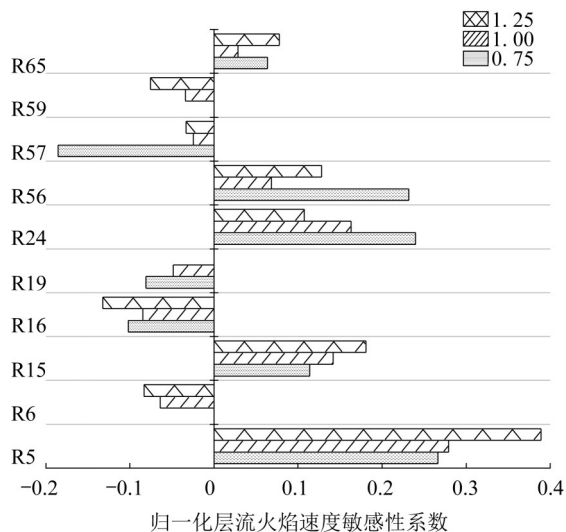


图4 层流火焰速度敏感性系数

Fig.4 Normalization of sensitivity coefficient of laminar flame speed values

(3)粗扰动待修正基元反应

结合点火延迟时间和层流火焰速度,发现基元反应R14、R21和R54对层流火焰速度无影响,R6和R59同样不影响点火延迟时间,最终确定待修正的基元反应为R6、R14、R21、R54和R59,表5为这些基元反应的化学方程式和指前因子。

表5 待修正基元反应方程和指前因子

Tab.5 Primitive reaction equation and pre-exponential factor to be modified

编号	基元反应	指前因子
R6	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	3.50×10^{22}
R14	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	7.59×10^{13}
R21	$2\text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	1.90×10^{11}
R54	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	7.82×10^7
R59	$\text{HCO} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{CO}$	7.34×10^{13}

2.2.2 粗扰动分析

(1)点火延迟时间

图5为粗扰动下点火延迟时间的计算值,从图中可以看到V3与详细机理的偏差最大,其他优化后的机理都与详细机理的计算值较为接近,其中V6比详细机理的计算值更加接近于实验值,因此选择V6为点火延迟时间的最佳粗扰动进行下一步研究。

(2)层流火焰速度

图6为粗扰动下层流火焰速度的计算值,从图

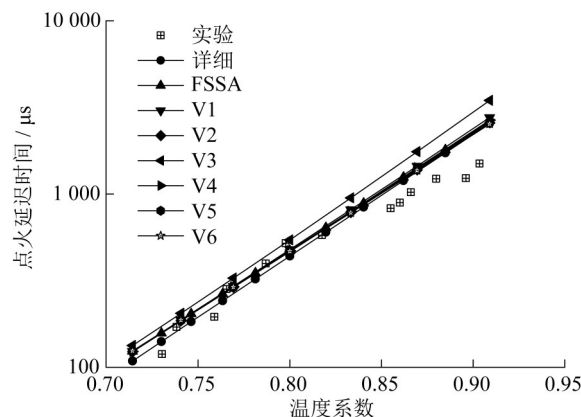


图5 粗扰动下点火延迟时间

Fig.5 Ignition delay time in coarse perturbation

中可以看到V1~V3的偏差过大,只有V6接近于实验值,但是高当量比下仍有一定的偏差。因此选择V6为层流火焰速度的最佳粗扰动进行下一研究。

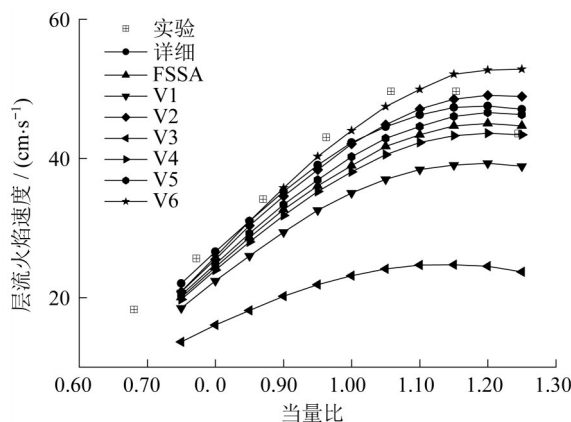


图6 粗扰动下层流火焰速度

Fig.6 Laminar flame speed in coarse perturbation

2.2.3 细化扰动分析

经过粗扰动分析,确定了最佳粗扰动V6,接下来则不再对筛选出的关键基元反应进行整体修正,而是局部修正,进而使得优化机理预测的点火延迟时间与层流火焰速度更加接近于实验值。

(1)点火延迟时间

由图5可知,修正过后的机理V6预测的点火延迟时间,仍在低温下有较大偏差,高温下有较小的偏差,所以先考虑对有低温敏感而对高温敏感性不大的基元反应进行修正,由于R14和R54的归一化敏感性系数值太小,所以这三个基元反应只选择R21进行低温下的修正。高温下也需要略微修正,由图3可知,R32和R37都满足要求,R32对高温的敏感性系数更大,对中低温不敏感,R37则恰好相反,所以选择R37不仅可以对高温段的点火延迟时间进行略

微修正,还能对中低温段起着更大幅度的修正,最终选择对 R21 和 R37 进行修正。

根据前文粗扰动研究发现,正敏感性系数能减少点火延迟时间,负敏感性系数能增大点火延迟时间,所以对于 R21 应适当减小,R37 适当增大。因此,设计了表 6 所示的 V6-1、V6-2、V6-3 三种修正系数。计算结果如图 7 所示,发现 V6-3 的计算效果最理想,此外 V6-1、V6-2 和 V6-3 的点火延迟时间计算值的变化趋势验证了上述结论的准确性。

表 6 细化扰动

Tab.6 Refined perturbation

编号	V6-1	V6-2	V6-3	V6-3-1	V6-3-2	V6-3-3	V6-3-4
R21	×0.1	×0.1	×0.1	×0.1	×0.1	×0.1	×0.1
R37	×1	×10	×5	×5	×5	×5	×5
R57	×1	×1	×1	×0.5	×0.7	×0.7	×0.5
R59	×1	×1	×1	×1	×1	×10	×10

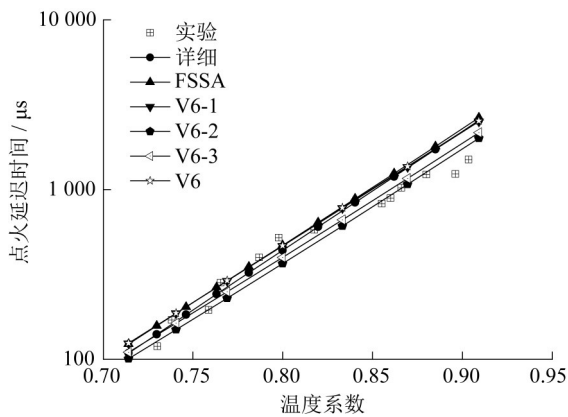


图 7 细化扰动下点火延迟时间

Fig.7 Ignition delay time in refined perturbation

(2)层流火焰速度

机理 V6 的计算值在低当量比 0.75~1.10 范围略微偏低,而在高当量比为 1.10~1.25 范围偏高,因此需要对这两部分进行修正。对点火延迟时间修正的基元反应 R21 和 R37 对层流火焰速度几乎无影响,故在 V6-3 优化的基础上,以提高层流火焰速度的预测性能为目标,对机理进一步优化。

对于低当量比下的层流火焰速度,选择 R57 进行优化,因为 R57 对低当量比下的层流火焰速度影响大,对中高当量比工况下影响较小;对于高当量比的层流火焰速度优化则继续选择 R6 和 R59。当层流火焰速度的敏感性系数为负值时,绝对值越小,层流火焰速度反而会增大,所以对于 R6 和 R59 应适当增大,R57 适当减小。因此,设计了表 6 所示的 V6-3-1、V6-3-2、V6-3-3、V6-3-4 四组修正系数。计算结果

如图 8 所示,四种优化机理的预测值与实验值相比,其中机理 V6-3-4 在低当量比和高当量比的计算值与实验值较为吻合,中当量比下的偏差也较小,因此 V6-3-4 作为最佳层流火焰速度修正系数。

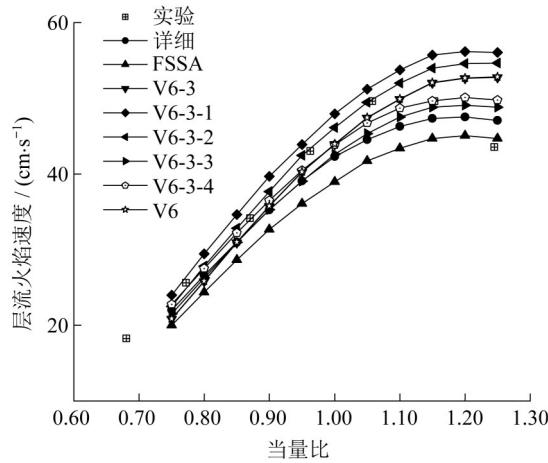


图 8 细化扰动下层流火焰速度

Fig.8 Laminar flame speed values in refined perturbation

表 7 为结合粗扰动和细化扰动下的所有修正的基元反应及修正前后的指前因子,其中由于基元反应 R59 在粗扰动中缩小十倍,在细化扰动中扩大十倍,相当于没有调整,所以舍去反应 R59。

表 7 修正基元反应优化前后指前因子的对比

Tab.7 Comparison of pre-exponential factors

编号	基元反应	优化前指前因子	优化后指前因子
R6	$H+OH+M \rightleftharpoons H_2O+M$	3.50×10^{22}	3.50×10^{21}
R14	$H_2O_2+OH \rightleftharpoons H_2O+HO_2$	7.59×10^{13}	7.59×10^{12}
R21	$2HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2+O_2$	1.90×10^{11}	1.90×10^9
R37	$CH_3OH+O_2 \rightleftharpoons CH_2OH+HO_2$	3.58×10^5	1.79×10^6
R54	$CH_2O+OH \rightleftharpoons HCO+H_2O$	7.82×10^7	7.82×10^6
R57	$HCO+O_2 \rightleftharpoons CO+HO_2$	7.58×10^{12}	3.79×10^{12}

2.2.4 优化机理的验证

图 9 为最终优化机理 V6-3-4 与点火优化机理 V6-3 的点火延迟时间计算值,二者曲线重合,这说明了本研究中点火延迟时间优化与层流火焰速度优化的相互独立性。图 10 为详细机理、FSSA 简化机理和优化机理 V6-3-4 的计算值相对于实验值的平均误差,点火延迟时间的平均误差分别为:5.22%、9.82%和 3.13%,层流火焰速度的平均误差分别为:6.35%、13.06%和 2.52%。可以发现优化机理 V6-3-4 的预测精度相对于 FSSA 简化机理有了较大幅度的提升,而且相对于详细机理与实验值吻合程度更好。

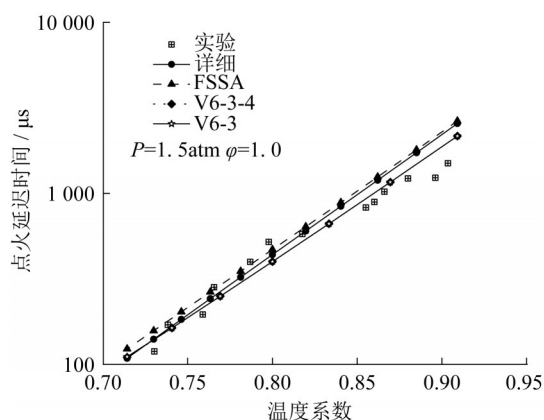


图9 点火延迟时间

Fig.9 Ignition delay time

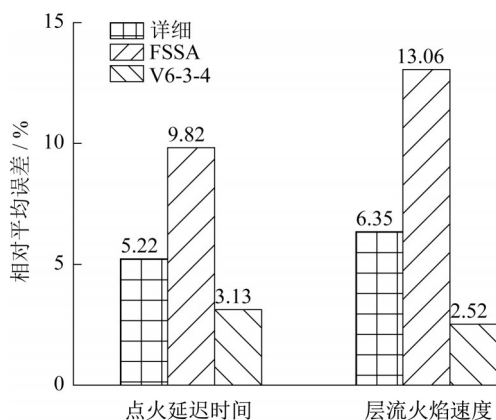


图10 计算值与实验的误差

Fig.10 Error between simulation and experiment

3 结论

(1)在微小尺度燃烧工况条件下,对甲醇C3机理详细机理进行简化,通过分析简化机理对点火延迟时间与层流火焰速度的计算性能,验证了简化机理的准确性。结果表明:与详细机理相比,DRGEP、FSSA、DRGPFSA简化机理预测点火延迟时间平均误差分别为1.31%、7.46%和8.36%,预测层流火焰速度平均误差分别为3.78%、6.94%和4.21%;与实验值相比,三种机理预测的点火延迟时间的平均误差分别为5.22%、9.82%和10.11%,预测层流火焰速度的平均误差分别为6.90%、8.96%和8.19%。包含16种组分、65个基元反应的FSSA简化机理具有较好的预测性能和较小的规模。

(2)基于点火延迟时间与层流火焰速度的敏感性分析,确定了FSSA简化机理初步待修正基元反应:R6、R14、R21、R54和R59;基于粗扰动、细化扰动分析,确定了最终的待修正基元反应:R6、R14、R21、R37、R54和R57,得到了相应的修正值和优化

机理V6-3-4。

(3)对比分析了详细机理、FSSA简化机理、V6-3-4优化机理对点火延迟时间、层流火焰速度的预测性能,结果表明与实验值相比,三种机理预测点火延迟时间平均误差分别为5.22%、9.82%和3.13%,层流火焰速度平均误差分别为:6.35%、13.06%和2.52%。V6-3-4优化机理具有良好的预测性能。

作者贡献声明:

张鹏:研究方法、数据建模和计算、论文撰写。

倪计民:研究方案、方法论指导、论文修改。

石秀勇:研究方案、数据建模指导、论文修改。

参考文献:

- [1] TANG Aikun, XU Yiming, SHAN Chunxian, *et al.* A comparative study on combustion characteristics of methane, propane and hydrogen fuels in a micro-combustor [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015, 40 (46): 16587.
- [2] FAN Aiwu, ZHANG He, WAN Jianlong. Numerical investigation on flame blow-off limit of a novel microscale Swiss-roll combustor with a bluff-body[J]. Energy, 2017, 123 (15): 252.
- [3] HUO Jiepeng, JIANG Liqiao. Numerical study on the propagation of premixed flames in confined narrow disc-shape chambers[J]. Combustion Science and Technology, 2019, 191 (8): 1380.
- [4] 吴继盛,吴家正,刘洪运. 甲醇作柴油机替代燃料的研究现状与展望[J]. 节能技术, 2021, 39(1): 9.
WU Jisheng, WU Jiazheng, LIU Hongyun. Research wtatus and prospect of methanol as alternative fuel for diesel engines [J]. Energy Conservation Technology, 2021, 39(1): 9.
- [5] 罗燕来. 电场作用下乙醇扩散小火焰特性及燃烧化学反应机理研究[D]. 广州:华南理工大学, 2018.
LUO Yanlai. Investigation on the characteristics and chemical reaction mechanism of small ethanol diffusion flame under electric field [D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2018.
- [6] 王小婷. 微尺度平板式和圆柱形燃烧器的实验和数值模拟研究[D]. 武汉:华中科技大学, 2019.
WANG Xiaoting. Experimental and numerical studies on planar and cylingdricl micro combustors [D]. Wuhan: Huazhong University of Science & Technology, 2019.
- [7] CRAIG T. Bowman . A shock-tube investigation of the high temperature oxidation of methanol[J]. Combustion and Flame, 1975, 25: 343.
- [8] ARONOWITZ D, SANTORO R J, DRYER F L, *et al.* Kinetics of the oxidation of methanol experimental results semiglobal modeling and mechanistic concepts[J]. Combustion and Flame, 1979, 17(1): 633.

- [9] CHARLES K W, FREDERICK L D. A comprehensive mechanism for methanol oxidation[J]. Combustion Science and Technology, 1979, 20(3/4): 125.
- [10] TIMOTHY J H, FREDERICK L D. A comprehensive mechanism for methanol oxidation[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 1998, 30(11): 805.
- [11] LI Juan, ZHAO Zhenwei, ANDREI Kazakov, *et al.* A comprehensive kinetic mechanism for CO, CH₂O, and CH₃OH combustion [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2007, 39(3): 109.
- [12] HENRY J C. Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2019, 37(1): 57.
- [13] XUE Jie, XI Shuanghui, WANG Fan. An extensive study on skeletal mechanism reduction for the oxidation of C0 - C4 fuels [J]. Combustion and Flame, 2020, 214: 184.
- [14] ULTAN B, WAYNE K M, SINEAD M B, *et al.* A detailed chemical kinetic modeling, ignition delay time and jet-stirred reactor study of methanol oxidation [J]. Combustion and Flame, 2016, 165(5): 125.
- [15] RANZI E, FRASSOLDATI A, STAGNI A, *et al.* Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: fossil and biomass-derived transportation fuels [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2014, 46 (9): 512.
- [16] ELISEO R, ALESSIO F, ALESSANDRO S, *et al.* Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: Fossil and biomass-derived transportation fuels[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2014, 46(9): 512.
- [17] GAN Xiao. A novel integrated strategy for construction of a 96-Species n-Decane skeletal mechanism with application to ignition delay tester[J]. Energy & Fuels, 2020, 34: 6367.
- [18] QUENTIN C, PERRINE P, ELEONORE R, *et al.* A fully automatic procedure for the analytical reduction of chemical kinetics mechanisms for computational fluid dynamics applications[J]. Fuel, 2021, 303: 121.
- [19] 闫妍, 张煜盛. 甲醇简化机理及其在 HCCI 燃烧分析中的应用[J]. 华中科技大学学报, 2010, 38(9): 112.
YAN Yan, ZHANG Yusheng. Methanol-reduced mechanism and its application in HCCI combustion analysis[J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology, 2010, 38 (9): 112.
- [20] 王刚, 刘训标, 袁春, 等. 一个新的甲醇氧化简化化学动力学机理[J]. 燃烧科学与技术, 2009, 15(6): 557.
WANG Gang, LIU Xunbiao, YUAN Chun, *et al.* A new reduced chemical kinetic mechanism for methanol oxidation[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2009, 15 (6): 557.
- [21] LINDSTEDT R P, MEYER M P. A dimensionally reduced reaction mechanism for methanol oxidation[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2002, 29: 1395.
- [22] ZHANG Jing, ZHANG Yang. Reduced mechanism generation for methanol-based toluene reference fuel with combined reduction methods[J]. Fuel, 2019, 247: 135.
- [23] ZHANG Fan, SHUAI Shijin, WANG Zhi, *et al.* A detailed oxidation mechanism for the prediction of formaldehyde emission from methanol-gasoline SI engines[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011, 33(2): 3151.
- [24] YAO Tong, PEI Yuanjiang, ZHONG Beijing, *et al.* A compact skeletal mechanism for N-dodecane with optimized semi-global low-temperature chemistry for diesel engine simulations[J]. Fuel, 2017, 191: 339.
- [25] CARSTEN O, TAMÁS V, ÉVA V, *et al.* Development of an ethanol combustion mechanism based on a hierarchical optimization approach [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2016, 48(8): 423.
- [26] CARSTEN O, TAMÁS V, ÉVA V, *et al.* Uncertainty quantification of a newly optimized methanol and formaldehyde combustion mechanism [J]. Combustion and Flame, 2017, 186: 45.
- [27] MAGNUS F, ANDREA B, ALBERTO C, *et al.* A toolbox for optimization of chemical kinetic mechanisms[J]. Computer Physics Communications, 2021, 264: 107.
- [28] KYLE E N, SUNG C, MANDHAPATI P R. Skeletal mechanism generation for surrogate fuels using directed relation graph with error propagation and sensitivity analysis [J]. Combustion and Flame, 2010, 157(9): 1760.
- [29] LIU Z, YANG L, ENZHE S, *et al.* Development of a reduced multi-component combustion mechanism for a diesel/natural gas dual fuel engine by cross-reaction analysis[J]. Fuel, 2021, 293: 120.
- [30] SUN Wenting, CHEN Zheng, GOU Xiaolong, *et al.* A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(7): 1298.
- [31] KEITH J L. The development of the arrhenius equation [J]. Journal of Chemical Education, 1984, 61(6): 494.
- [32] RICHARD O, YOUNGCHUL R, MANUELA G D, *et al.* Investigation of mixing and temperature effects on HC/CO emissions for highly dilute low temperature combustion in a light duty diesel engine [J]. SAE World Congress & Exhibition, 2007(1): 193.
- [33] PINZÓN LT, MATHIEU O, MULVIHILL C R, *et al.* Ignition delay time and H₂O measurements during methanol oxidation behind reflected shock waves [J]. Combustion and Flame, 2019, 203: 143.
- [34] EGOLFOPULOS F N, DU D X, LAW C K. A comprehensive study of methanol kinetics in freely-propagating and burner-stabilized flames, flow and static reactors, and shock tubes[J]. Combustion Science and Technology, 1992, 83(1/3): 33.