

文章编号:1000-8055(2020)04-0673-09

doi:10.13224/j.cnki.jasp.2020.04.001

RP-3 航空煤油综合替代燃料模型构建

禹 进¹, 余彬彬², 于佳佳³

- (1. 重庆交通大学 机电与车辆工程学院, 重庆 400074;
2. 中国人民解放军陆军勤务学院 油料系, 重庆 401331;
3. 重庆大学 能源与动力工程学院, 重庆 400044)

摘 要: 基于直接匹配分子结构和官能基团的思路,选取正十二烷、2,5-二甲基己烷、1,3,5-三甲基苯和十氢化萘作为基础燃料,为 RP-3 航空煤油构建了替代燃料模型。物理替代验证表明该替代燃料模型能很好地反映 RP-3 航空煤油在亚临界到超临界状态下的主要物理性质。利用所构建的替代燃料简化机理验证了其化学替代性能,结果表明:该模型不仅在高温区和低温区都能与着火延迟时间的实验值良好吻合,而且也能够良好反映燃料的在低压条件下(0.1~0.01MPa)的着火延迟现象。模拟的物性参数和着火延迟时间与实验值的良好吻合证明了该替代燃料能同时实现物理替代和化学替代,为深刻认识超燃冲压发动机中燃料再生冷却与燃烧过程耦合机理,实现航空发动机再生冷却系统和推进动力系统等多部件联合仿真奠定基础。

关 键 词: RP-3 航空煤油; 再生冷却; 替代燃料; 化学反应机理; 官能团

中图分类号: V511⁺.1; TK401 **文献标志码:** A

Development of comprehensive surrogate fuel model for RP-3 aviation kerosene

YU Jin¹, YU Binbin², YU Jiajia³

- (1. School of Mechatronics and Automobile Engineering,
Chongqing Jiaotong Univeristiy, Chongqing 400074, China;
2. Department of Oil, Army Logistics University of
the People's Liberation Army of China, Chongqing 401331, China;
3. School of Energy and Power Engineering,
Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: A comprehensive surrogate of RP-3 fuel was developed by the methodology of directly matching the molecular structure and functional groups. *n*-dodecane, 2, 5-dimethyl-hexane, 1, 3, 5-trimethylbenzene and decalin were selected as the surrogate components. The physical surrogate model can well predict the main physical properties of RP-3 aviation kerosene from subcritical to supercritical pressures. Besides, the performances of chemical surrogate fuel were also validated against experimental data. Present surrogate fuel model was in good agreement with the experimental ignition delay times both at low and high temperature regions. In addition, present surrogate fuel could also well reflect the ignition delay time at low pressures (0.1—0.01 MPa). Results showed that present surrogate fuels could

收稿日期:2019-10-30

基金项目:重庆市自然科学基金面上项目(cstc2019jcyj-msxmX0590); 重庆市教委科学技术研究项目(KJQN201800735)

作者简介:禹进(1990—),男,讲师,博士,主要从事替代燃料模型研究。E-mail:yjin123@yeah.net

引用格式:禹进,余彬彬,于佳佳. RP-3 航空煤油综合替代燃料模型构建[J]. 航空动力学报,2020,35(4):673-681. YU Jin, YU Binbin, YU Jiajia. Development of comprehensive surrogate fuel model for RP-3 aviation kerosene[J]. Journal of Aerospace Power,2020,35(4):673-681.

emulate both the physical and kinetic properties well. The success of present surrogate fuel lays a foundation for understanding of the coupling mechanism of fuel regenerative cooling process and combustion process, and achieving co-simulation of aero-engine regenerative cooling system and propulsion power system in scramjet.

Key words: RP-3 aviation kerosene; regenerative cooling; surrogate fuel; chemical reaction mechanism; functional group

超燃冲压发动机是实现高超声速飞行的重要关键技术。超燃冲压发动机通常采用主动再生冷却的热防护技术,燃料在超燃冲压发动机中先对发动机室壁进行冷却,然后再进入发动机燃烧室燃烧^[1]。数值模拟计算对冲压发动机的设计和优化起着非常重要的作用,因此有必要发展航空燃料的物性计算模型以及燃烧反应机理来实现超燃冲压发动机再生冷却过程和燃烧过程的数值模拟。然而,超燃冲压发动机所使用的航空煤油由上百种碳氢化合物构成,在现有的条件下,几乎不可能构建真实航空煤油的物理计算模型和详细化学动力学机理。而采用选取几种典型的基础组分来代表真实燃料的物理化学性质的“替代燃料”方法已被视为一种有效的解决手段^[2]。根据所需要表征的燃料性质,替代燃料可分为物理替代和化学替代。

物理替代是指用特定的燃料去替代真实目标燃料,用以物理特性的模拟及预测。在超燃冲压发动机中,物理替代主要应用于燃料再生冷却系统的传热、传质和流动的数值模拟中。由于再生冷却系统的燃料常常工作在超临界状态,因而构建能模拟 RP-3 航空煤油超临界状态下的物理替代模型成为学界研究的热点。在早期,范学军和俞刚^[3]为了模拟 RP-3 航空煤油的热物理特性,构建了三元燃料的物理替代燃料模型。随后,Zhong 等^[4]提出的包含 10 种组分的 RP-3 航空煤油物理替代燃料模型被广泛应用于再生冷却系统的数值模拟研究中。近年来,裴鑫岩等^[5]、程泽源等^[6]和曾文等^[7]也提出了各自关于 RP-3 航空煤油较为简单的物理替代燃料模型。

化学替代是指利用替代燃料模型来替代复杂燃料的化学反应机理,从而模拟燃料的气相燃烧现象及过程。目前,对航空煤油化学替代燃料构建主要是通过匹配燃料燃烧性质参数来实现^[8-9]。基于该方法,徐佳琪等^[10]利用机理自动生成程序 ReaxGen 构建了 RP-3 替代燃料的高温燃烧详细机理。Zhang 等^[11]提出正癸烷和 1,2,4-三甲基苯作为 RP-3 替代燃料的基础燃料,模拟了燃料

的着火特性,取得了较好的效果。郑东等^[12]提出了能够预测着火延迟时间和火焰传播速度的 4 组分 RP-3 航空煤油替代燃料模型。颜应文等^[13]选择正癸烷和正丙基苯为基础燃料,得到简化的替代燃料模型。曾文等^[14]提出了用正癸烷、甲苯和丙基环己烷作为替代燃料来预测 RP-3 航空煤油的高温着火延迟时间。吕兴才课题组^[15]构建了三元基础组分的替代燃料模型,用以研究 RP-3 航空煤油的着火特性。

上述的替代燃料模型构建都是单独分别构建燃料的物理替代燃料和化学替代燃料模型。然而,航空煤油在冲压发动机中要经历再生冷却和燃烧两个有着强烈耦合关系的过程,因此亟需能同时实现物理替代和化学替代的航空煤油替代燃料来实现冲压发动机的数值模拟研究。不仅如此,现有通过直接匹配燃料性质参数来构建替代燃料的方法往往需要大量实验数据来完成多目标优化计算,使得替代燃料构建的难度和成本大大增加。因此,本文在以前工作的基础上^[16],提出采用匹配官能团的方法,为 RP-3 航空煤油构建能同时反映其物理性质和燃烧性质的综合替代燃料模型。

1 模型构建

1.1 基础燃料及其比例确定

替代燃料模型构建的目的就是为了使替代燃料与真实燃料的物理化学特性相似,而燃料的物理化学性质本质上是由燃料的分子结构所决定的。所以如果能使替代燃料与目标燃料的分子结构组成相似,就能保证它们的物理化学性质的相似^[16-17]。为了实现替代燃料与目标燃料分子结构的精确匹配,本文提出采用 4 种官能团:CH₃, CH₂, CH 和苯基来量化燃料的分子结构。这 4 种官能团是“官能基团贡献法”中最常见的官能团。不仅如此,CH₃ 和 CH₂ 的比值能反映碳氢燃料在低温条件下的化学反应活性。根据徐佳琪等^[10]通过色/质联用手段检测的物种 RP-3 航空煤油样品中大于 0.5% 的物种组成

数据,然后通过分析每一种组分的分子结构,进而计算出每一种组分的官能团的物质的量,最终获得 RP-3 航空煤油样品中的各个官能团的物质的量。1 mol 的 RP-3 航空煤油中官能团的物质的量如表 1 所示。

根据确定的官能团,接下来就是确定基础燃料。虽然可能会有很多燃料选取方案能匹配官能团种类和数量,然而由于受到基础组分是否具有

可靠的化学反应机理的限制,能够备选的基础燃料就大大减少。再考虑简单性与经济性,最终确定了正十二烷、2, 5-二甲基己烷、1,3,5-三甲基苯和十氢化萘作为基础燃料。选取正十二烷来反映直链烷烃的物理化学特性,并提供甲基和亚甲基官能团。选取 2, 5-二甲基己烷表征支链烷烃的物化性质。1,3,5-三甲基苯和十氢化萘分别代表芳香烃和环烷烃。

表 1 1 mol 的 RP-3 航空煤油及其替代燃料中的官能团物质的量
Table 1 Functional groups amount of substance of 1 mol RP-3 aviation kerosene and its surrogate fuels

燃料类型	官能团物质的量/mol				氢碳比	摩尔质量/ (g/mol)
	CH ₃	CH ₂	CH	苯基		
替代燃料	2.38	6.64	0.64	0.14	2.06	147.5
RP-3	2.45	6.49	0.64	0.14	2.08 ^[12]	148.8 ^[12]

选取基础燃料后,通过匹配基础燃料与目标燃料的 4 种官能团确定基础燃料的比例。定义了一个误差函数 F 来评估模型燃料与目标燃料官能团的吻合程度,其定义式为

$$F_i = 100 \times \left| \frac{n_{i, \text{calc}} - n_{i, \text{targ}}}{n_{i, \text{targ}}} \right|$$

其中 $n_{i, \text{targ}}$ 和 $n_{i, \text{calc}}$ 分别代表目标燃料和替代燃料中第 i 种官能团物质的量。通过计算不同基础燃料配比下的误差函数 F ,确定出总匹配误差最小的基础燃料配比。最终得到基础燃料的配比为:摩尔分数为 54% 的正十二烷,22% 的 2, 5-二甲基己烷、14% 的 1,3,5-三甲基苯和 10% 的十氢化萘,如表 1 所示。可以看出,虽然采用的官能基团匹配法没有将氢碳比和摩尔质量作为匹配目标,但是官能团的匹配能使替代燃料的氢碳比和摩尔质量自动地与目标航空煤油匹配。

1.2 化学反应机理构建及简化

在确定基础燃料及其比例之后,接下来就是根据选定基础燃料,将所有基础燃料的化学反应机理耦合在一起。构建机理过程如图 1 所示。正十二烷的反应机理选取的是 Cai 等^[18]优化的化学反应机理。2,5-二甲基己烷详细化学反应机理来自文献^[19]。1,3,5-三甲基苯和十氢化萘的反应机理分别选自文献^[20]和文献^[21]。将 4 种基础燃料的大分子反应路径添加进名为 Aramco-Mech 2.0 的 C0~C4 机理^[22]中,得到了包含 4 种基础燃料的替代燃料机理。耦合 4 种基础燃料机理得到的替代燃料机理必须保证每一种基础燃料的机理都能与基础燃料的实验吻合。由于篇幅的

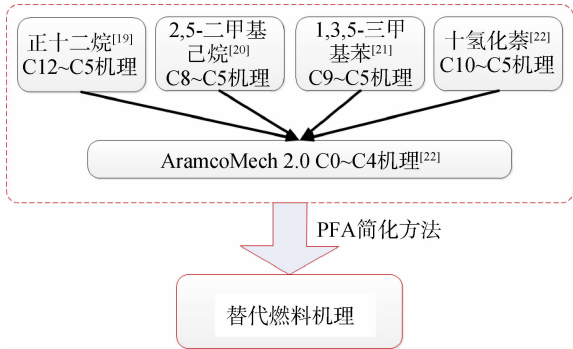


图 1 RP-3 航空煤油替代模型机理构建示意图
Fig. 1 Schematic diagram of developing process for RP-3 aviation kerosene surrogate model

限制,对于基础燃料机理的验证工作不作详细阐述。

耦合 4 种基础燃料机理,最终得到含 3105 个组分和 10939 个基元反应的替代燃料详细机理。然而,对于燃烧反应流模拟,如此庞大的机理会造成计算的时间成本大大增加,因此有对其简化的必要。本文采用 PFA(path flux analysis)简化方法^[23]对得到的替代燃料化学反应机理进行了简化。在简化过程中,选择每一种基础燃料作为简化对象,得到该基础燃料的半详细机理,然后将得到的 4 种基础燃料的所有简化组分进行整合,得到包含四元基础燃料的半详细机理。该半详细机理包含 796 个组分和 3533 个基元反应的化学反应半详细机理。由于该简化机理保留了宽范围的适应性,使得其简化程度不高。如果想得到更为简化的机理,在该机理的基础上,针对特定工况条件下作进一步的简化处理。

2 物理替代性能验证

选取 RP-3 航空煤油在再生冷却过程所涉及的最重要的热物参数:密度、黏度、比热容和导热系数来对构建的替代燃料的物理替代性能进行了验证。在超燃冲压发动机冷却通道内,碳氢燃料的工作压力通常都在临界压力以上。RP-3 航空煤油临界压力和温度分别是 2.3 MPa 和 646 K^[24]。所以,本文的替代燃料模型对在亚临界到超临界条件下的物性参数进行了验证。

程泽源等^[6]对比了 5 种 RP-3 航空煤油物理替代燃料模型,结果表明 Ren 等^[25]提出的摩尔分数分别为 53% 正十一烷,18% 正丁基环己烷和 29% 的 1,3,5-三甲基苯组成替代燃料预测 RP-3 物性上表现最优。不仅如此,曾文等^[7]将正十二烷、正癸烷、异十六烷、甲基环己烷和甲苯作为基础燃料,利用 RP-3 航空煤油遴选指标进行优化计算,得到了基础燃料的比例,并与航空煤油物性参数的实验值吻合较好。因此,采用 Supertrapp 软件^[26],利用广义对应态法则来计算替代燃料的物性参数,详细的计算方程见文献[3]。本文的替代燃料与 Ren 等^[25]和曾文等^[7]的替代燃料模型进行了对比。

燃料的密度是一个非常重要的热物理参数,它对于燃料的流动传热以及燃料的着火延迟都有非常重要的影响。利用本文提出的替代燃料模型计算了航空煤油在不同压力和温度条件下的密度分布,并与文献[27]中的实验数据进行了对比,如图 2 所示。在图 2 中,实验压力 $p=2.32\text{ MPa}$ 时,替代燃料预测的临界温度大约为 640 K,这与实验密度值的拟临界温度位置预测较准。当环境压力超过临界压力时,如在 3.0 MPa 和 4.0 MPa 时,燃料不再具有明显的相变过程。3 种替代燃料模型都能较好地预测不同压力和温度条件下航空煤油的密度变化规律,图中 T 表示温度。

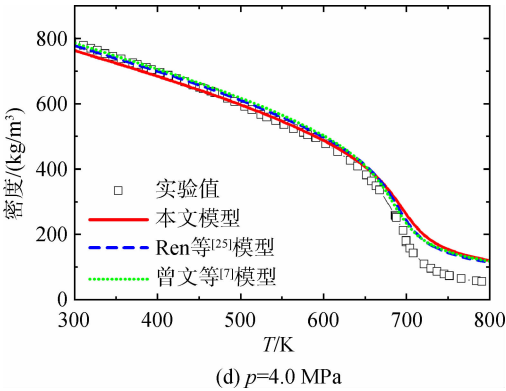
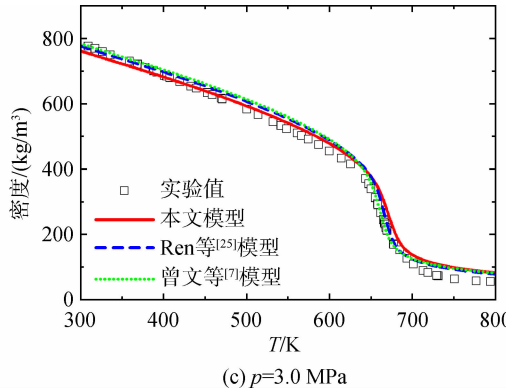
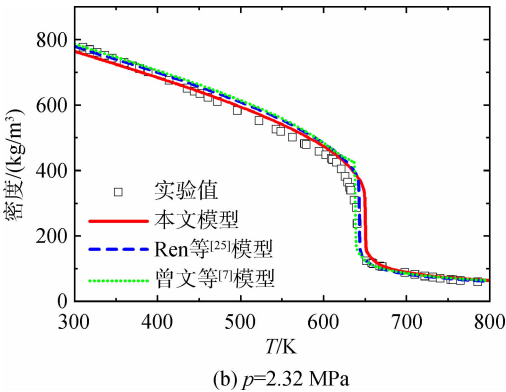
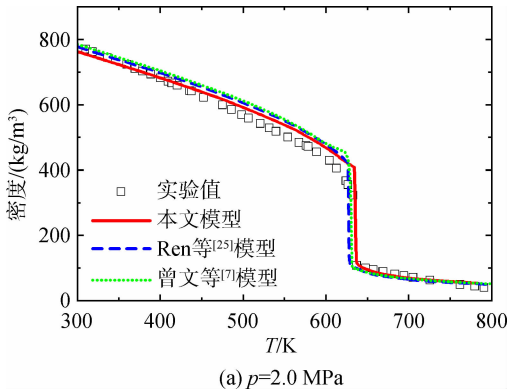


图 2 RP-3 航空煤油替代燃料密度计算值与实验值对比
Fig. 2 Contrast between calculated data and experiment data of density of RP-3 aviation kerosene

图 3 是的航空煤油替代模型在不同压力下的黏度和文献[28]报道的实验结果的对比。可以看出本文的替代燃料对燃料黏度的预测的精度非常高,在低温段,预测值与实验值的吻合程度较高,在高温段时,预测精度有所下降。这整个压力和温度区间的预测中,预测的最大误差为 10%。本文模型与 Ren 等^[25]替代模型的表现相似,而曾文的替代燃料模型在 300~600 K 区间高估了燃料的黏度,导致预测值高于实验值。

图 4 是的航空煤油替代模型在不同压力下的比定压热容 c_p 和文献[29]报道的实验结果的对比,可以看出本文的替代燃料能反映出比定压热

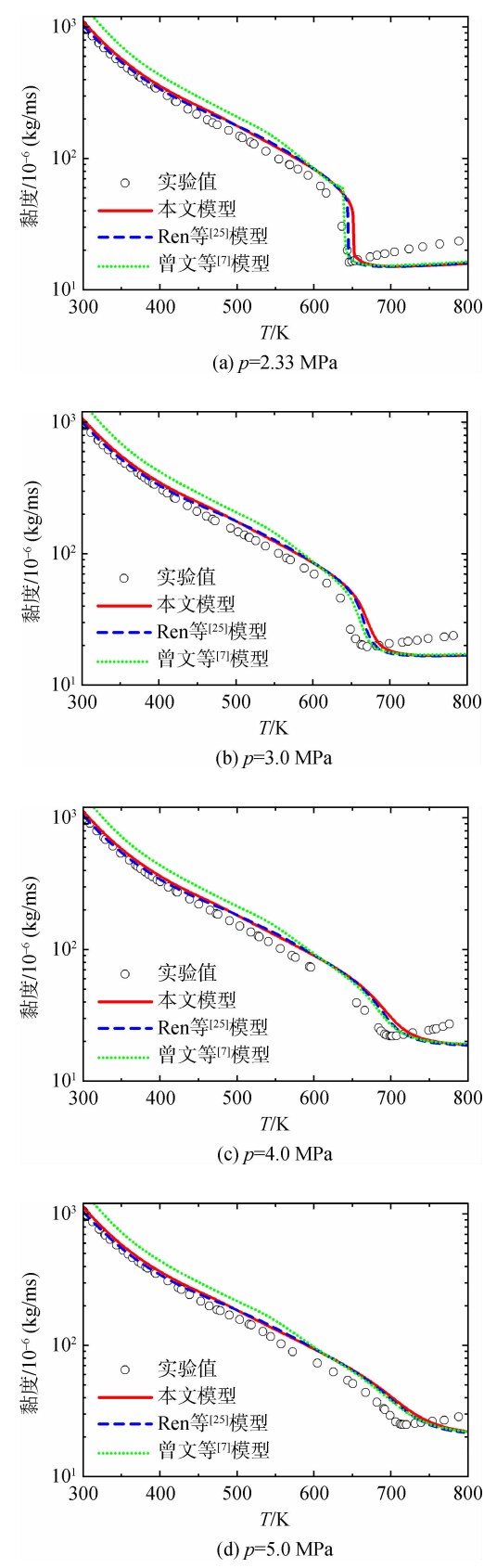


图 3 RP-3 航空煤油替代燃料黏度计算值与实验值对比
Fig. 3 Contrast between calculated data and experiment data of viscosity of RP-3 aviation kerosene

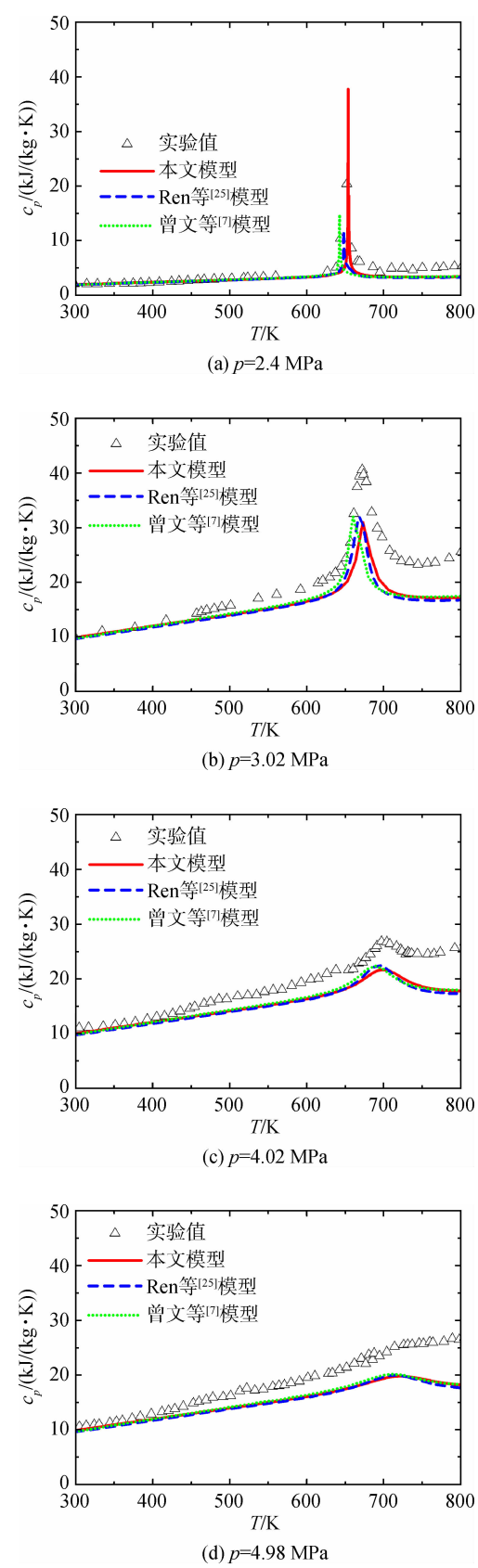


图 4 RP-3 航空煤油替代燃料比热容计算值与实验值对比
Fig. 4 Contrast between calculated data and experiment data of specific heat of RP-3 aviation kerosene

容随压力和温度的变化趋势。在低温段,预测值与实验值的吻合程度较高,比定压热容计算曲线的差异随着温度的升高而增大,在临界点时,预测的误差达到最大。本文的替代燃料模型在所有工况下,低估了比定压热容。相比其他两种替代燃料模型,本文的模型对临界点的预测与实验值吻合更好。

图 5 是的航空煤油替代模型在 $p=5\text{ MPa}$ 下的导热系数和文献[30]报道的实验结果的对比。由于实验值只有 $300\sim500\text{ K}$ 的数据,故不能反映出其临界点附近的变化情况。从图中可以看出,随着温度的增加,导热系数呈变小的趋势。本文的替代燃料能较好的反映出导热系数随温度的变化趋势,预测的平均误差约为 10% 。本文模型对导热系数的预测优于 Ren 等^[25]替代燃料,但曾文的模型在导热系数的预测上有更高的精度。

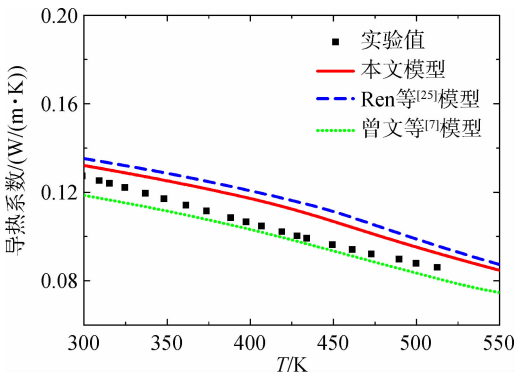


图 5 RP-3 航空煤油替代燃料导热系数计算值与实验值对比($p=5\text{ MPa}$)

Fig. 5 Contrast between calculated data and experiment data of thermal conductivity of RP-3 aviation kerosene ($p=5\text{ MPa}$)

3 化学替代模型验证

激波管着火延迟时间可以反映燃料在气相中的点火特性。因此,可以利用着火延迟时间数据来验证替代燃料模型。图 6 为 RP-3 航空煤油在 1 MPa 、当量比 φ 为 $0.5\sim1.5$ 条件下的着火延迟时间分布,实验数据来自文献[15]。同时,本文的替代燃料与 Zhang 等^[11]的模型进行了对比。从图 6 中可以看出,在 3 种不同的当量比条件下,所构建的替代燃料的模拟值与实验值在高温和低温段均能吻合良好。相比 Zhang 等^[11]的模型,本文模型不仅在高温段($1400\sim1000\text{ K}$)具有更高的预测精度,同时在低温区域也与实验值吻合得更好,能够良好反映燃料的 NTC(negative temperature

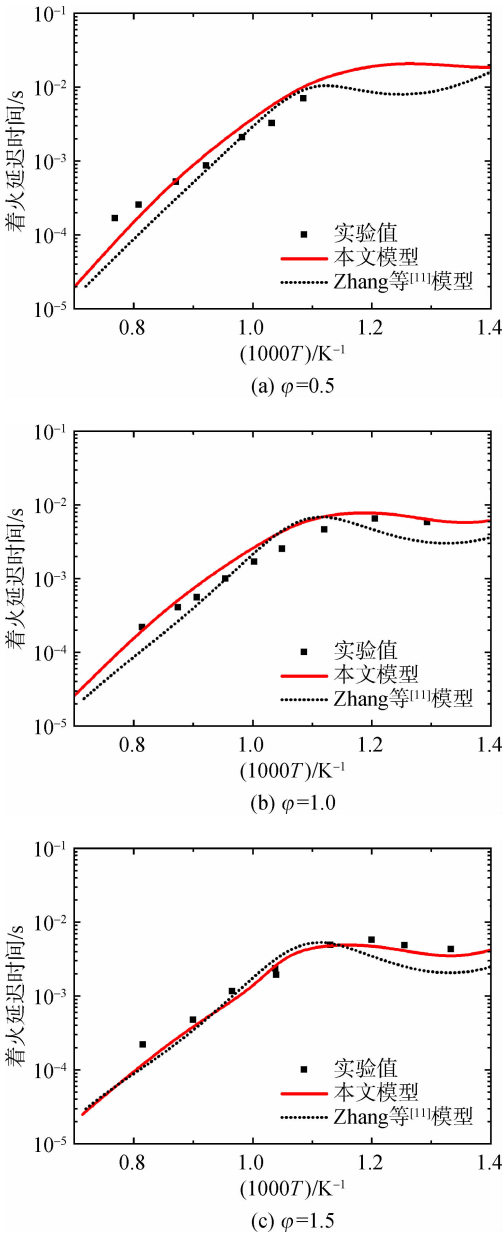


图 6 RP-3 航空煤油替代燃料高压着火延迟时间计算值与实验值对比($p=1.0\text{ MPa}$)

Fig. 6 Contrast between calculated data and experiment data of ignition delay times for RP-3 surrogate fuel at high pressure conditions ($p=1.0\text{ MPa}$)

coefficient)现象。

冲压发动机在 20 km 以上的高空或是在青藏高原等极端环境运行时,冲压发动机燃烧室内燃料将处于低压环境。因此,探究低压条件下燃料的点火特性,有助于揭示极端条件下燃料的燃烧机制。图 7 为 RP-3 航空煤油在低压条件下替代燃料对着火延迟时间的预测与实验值^[31]对比。同时,本文的替代燃料与 Zhang 等^[11]的模型进行了对比。从图 7 可以看出,在低压条件下,本文的替代燃料在当量比为 1 的条件下与实验值有较高

的预测精度。当量比为 0.5 时,在 0.1、0.03 MPa 和 0.05 MPa 时与实验室吻合较好。当量比为 1.5 时,在 0.01 和 0.03 MPa 有较高的预测精度。Zhang 等^[11]的模型的反应活性更高,因此着火延

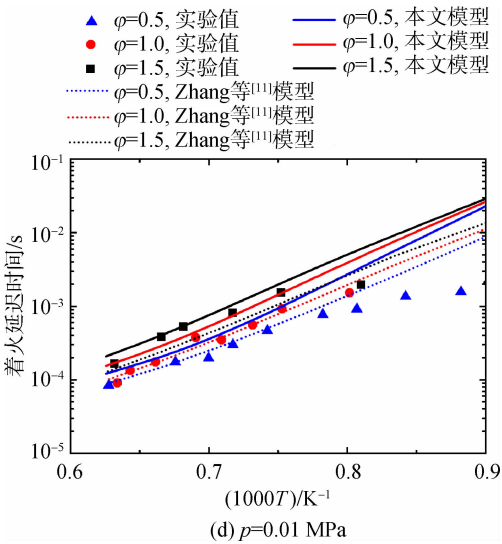
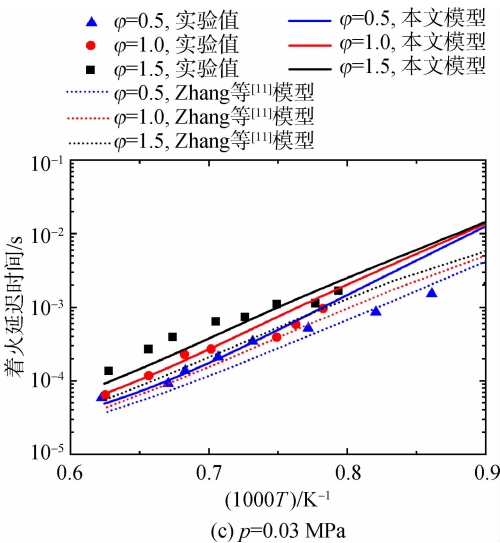
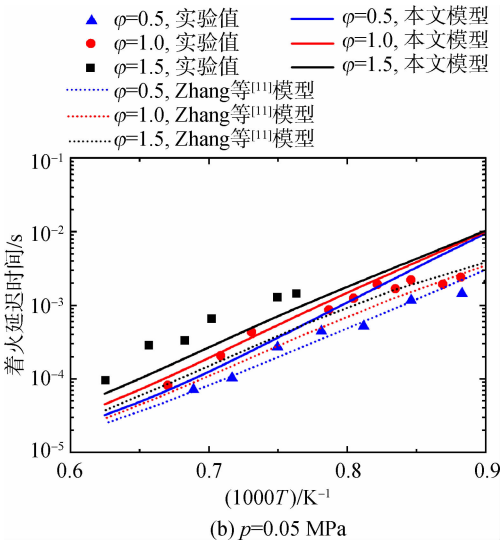
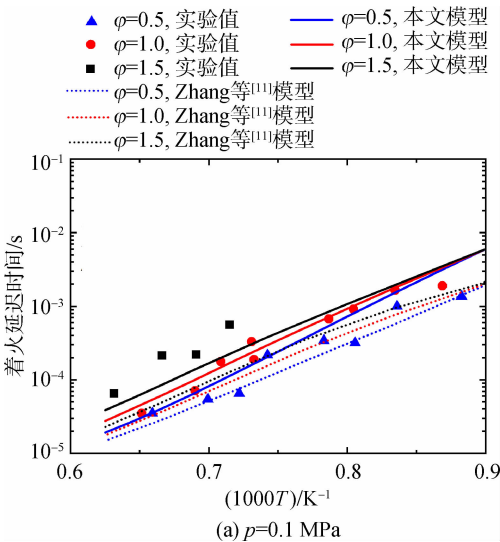


图 7 RP-3 航空煤油替代模型低压着火延迟时间
计算值与实验值对比
Fig. 7 Contrast between calculated data and experiment
data of ignition delay times for RP-3 surrogate
fuel at low pressure conditions

迟时间短于本文模型。因此,Zhang 等^[11]的模型对当量比为 0.5 条件时预测精度较高,但在当量比为 1.5 条件下时,预测值低于实验值。

4 结 论

基于 RP-3 航空煤油官能团的组成,构建了以摩尔分数分别为 54%正十二烷,22% 2,5-二甲基己烷和 14% 1,3,5-三甲苯基苯和 10%十氢化萘的 RP-3 航空煤油替代燃料。该替代燃料不仅可以较好地描绘出 RP-3 航空煤油在亚临界和超临界状态下的密度、黏度、比热容和导热系数的变化趋势,而且还能良好反映不同压力、温度和当量比条件下的燃料着火性能。模拟与实验的对比证明了该替代燃料的物理和化学替代的有效性,为深刻认识超燃冲压发动机中燃料再生冷却与燃烧过程耦合机理,开展极端条件下燃料燃烧特性研究奠定了基础。

参考文献:

[1] 章思龙,秦江,周伟星,等. 高超声速推进再生冷却研究综述[J]. 推进技术,2018,39(10):23-36.
ZHANG Silong,QIN Jiang,ZHOU Weixing,et al. Review on regenerative cooling technology of hypersonic propulsion[J]. Journal of Propulsion Technology,2018,39(10): 23-36. (in Chinese)
[2] PITZ W J,MUELLER C J. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels[J]. Progress in Energy and Combustion Science,2011,37(3):330-350.

- [3] 范学军,俞刚. 大庆 RP-3 航空煤油热物性分析[J]. 推进技术, 2006, 27(2): 187-192.
FAN Xuejun, YU Gang. Analysis of thermophysical properties of Daqing RP-3 aviation kerosene[J]. Journal of Propulsion Technology, 2006, 27(2): 187-192. (in Chinese)
- [4] ZHONG F, FAN X, YU G, et al. Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2009, 23(3): 543-550.
- [5] 裴鑫岩,侯凌云,莫崇康,等. 航空煤油替代燃料模型热物性[J]. 航空动力学报, 2015, 30(9): 2122-2128.
PEI Xinyan, HOU Lingyun, MO Chongkang, et al. Thermophysical properties for surrogate models of aviation kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2015, 30(9): 2122-2128. (in Chinese)
- [6] 程泽源,朱剑琴,金钊. 吸热型碳氢燃料 RP-3 替代模型研究[J]. 航空动力学报, 2016, 31(2): 391-398.
CHENG Zeyuan, ZHU Jianqin, JIN Zhao. Study on surrogate model of endothermic hydrocarbon fuel RP-3 [J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(2): 391-398. (in Chinese)
- [7] 曾文,刘靖,张治博,等. 一种新的 RP-3 航空煤油模拟替代燃料[J]. 航空动力学报, 2017, 32(10): 2314-2320.
ZENG Wen, LIU Jing, ZHANG Zhibo, et al. A new surrogate fuel of RP-3 kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2017, 32(10): 2314-2320. (in Chinese)
- [8] DOOLEY S, WON S H, CHAOS M, et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(12): 2333-2339.
- [9] DOOLEY S, WON S H, HEYNE J, et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena [J]. Combustion and Flame, 2012, 159(4): 1444-1466.
- [10] 徐佳琪,郭俊江,刘爱科,等. RP-3 替代燃料自点火燃烧机理构建及动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 643-652.
XU Jiaqi, GUO Junjiang, LIU Aike, et al. Construction of autoignition mechanisms for the combustion of RP-3 surrogate fuel and kinetics simulation[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2015, 31(4): 643-652. (in Chinese)
- [11] ZHANG C, LI B, RAO F, et al. A shock tube study of the autoignition characteristics of RP-3 jet fuel[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2015, 35(3): 3151-3158.
- [12] 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, 31(4): 636-642.
ZHENG Dong, YU Weiming, ZHONG Beijing. RP-3 aviation kerosene surrogate fuel and the chemical reaction kinetic model[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2015, 31(4): 636-642. (in Chinese)
- [13] YAN Y, LIU Y, FANG W, et al. A simplified chemical reaction mechanism for two-component RP-3 kerosene surrogate fuel and its verification[J]. Fuel, 2018, 227: 127-134.
- [14] ZENG W, LI H X, CHEN B D, et al. Experimental and kinetic modeling study of ignition characteristics of Chinese RP-3 kerosene[J]. Combustion Science and Technology, 2015, 187(3): 396-409.
- [15] MAO Y, YU L, WU Z, et al. Experimental and kinetic modeling study of ignition characteristics of RP-3 kerosene over low-to-high temperature ranges in a heated rapid compression machine and a heated shock tube[J]. Combustion and Flame, 2019, 203: 157-169.
- [16] YU J, WANG Z, ZHUO X, et al. Surrogate definition and chemical kinetic modeling for two different jet aviation fuels[J]. Energy and Fuels, 2016, 30(2): 1375-1382.
- [17] YU J, JU Y, GOU X. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups[J]. Fuel, 2016, 166: 211-218.
- [18] CAI L, PITSCH H, MOHAMED S Y, et al. Optimized reaction mechanism rate rules for ignition of normal alkanes [J]. Combustion and Flame, 2016, 173: 468-482.
- [19] SARATHY S M, JAVED T, KARSENTY F, et al. A comprehensive combustion chemistry study of 2,5-dimethylhexane[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(6): 1444-1459.
- [20] WANG B Y, YU D, PAN G F, et al. An experimental and modeling study on the low temperature oxidation of surrogate for JP-8: Part I neat 1,3,5-trimethylbenzene [J]. Combustion and Flame, 2018, 192: 507-516.
- [21] WANG M, ZHANG K, KUKKADAPU G, et al. Autoignition of trans-decalin, a diesel surrogate compound: rapid compression machine experiments and chemical kinetic modeling[J]. Combustion and Flame, 2018, 194: 152-163.
- [22] ZHOU C W, LI Y, O'CONNOR E, et al. A comprehensive experimental and modeling study of isobutene oxidation [J]. Combustion and Flame, 2016, 167: 353-379.
- [23] 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.
- [24] WANG N, ZHOU J, PAN Y, et al. Determination of critical properties of endothermic hydrocarbon fuel RP-3 based on flow visualization[J]. International Journal of Thermophysics, 2014, 35(1): 13-18.
- [25] REN Y Z, ZHU J Q, DENG H W. Numerical study of heat transfer of RP-3 at supercritical pressure[J]. Advanced Materials Research, 2013, 663: 470-476.
- [26] HUBER M L. NIST 4. thermophysical properties of hydrocarbon mixtures database: Verison 3. 0[R]. Washington D C: US Department of Commerce, 2007.
- [27] DENG H, ZHANG C, XU G, et al. Density measurements of endothermic hydrocarbon fuel at sub- and supercritical conditions[J]. Journal of Chemical and Engineering Data, 2012, 56(6): 2980-2986.
- [28] DENG H, ZHANG C, XU G, et al. Viscosity measurements of endothermic hydrocarbon fuel from 298K to 788K under supercritical pressure conditions[J]. Journal of

Chemical and Engineering Data,2012,57(2):358-365.

[29] DENG H,ZHU K,XU G, et al. Isobaric specific heat capacity measurement for kerosene RP-3 in the near-critical and supercritical regions[J]. Journal of Chemical and Engineering Data,2012,57(2):263-268.

[30] XU G,JIA Z,WEN J, et al. Thermal-conductivity measurements of aviation kerosene RP-3 from 285K to 513K at sub-and supercritical pressures[J]. International Journal of Thermophysics,2015,36(4):620-632.

[31] 姚峰. 激波管的研发与 RP-3 煤油点火延迟特性研究[D]. 杭州:浙江大学,2019.

YAO Feng, the development of shock tube and study on ignition delay characteristics of RP-3 kerosene[D]. Hangzhou:Zhejiang University,2019. (in Chinese)

(编辑:王碧琚)