

文章编号:1000-8055(2021)07-1452-10

doi:10.13224/j.cnki.jasp.20200417

基于 HyChem 方法的正丙基环己烷 反应动力学模型

王光彩, 王乾鹏, 丁梦缘, 王娟

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院
航空发动机气动热力国家级重点实验室, 北京 100191)

摘 要: 采用 Hybrid Chemistry(HyChem)建模方法对正丙基环己烷开展模型研究,以七步集总反应对大分子燃料热解形成小分子产物这一过程进行建模,小分子产物氧化过程则以小分子详细机理 USC Mech II 进行描述。将两个子机理结合构建了正丙基环己烷的 HyChem 反应动力学模型(包括 112 个组分和 791 个基元反应),并通过流动管热解、点火延迟时间以及层流火焰速度的实验数据进行了模型验证。验证结果表明,正丙基环己烷 HyChem 反应动力学模型可以很好的预测正丙基环己烷热解过程中主要组分分布情况,在宏观燃烧参数的预测方面也有很好的表现,对点火延迟时间的计算相对误差为 29.7%,对火焰传播速度的计算相对误差为 11.1%。

关 键 词: 正丙基环己烷; 反应动力学模型; HyChem 方法; 热解; 点火延迟时间; 层流火焰速度

中图分类号: V312⁺.1; TK16 **文献标志码:** A

Reaction kinetic model of *n*-propylcyclohexane based on HyChem method

WANG Guangcai, WANG Qianpeng, DING Mengyuan, WANG Juan

(National Key Laboratory of Science and Technology on Aero-Engine
Aero-thermodynamics, School of Energy and Power Engineering,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: The kinetic model of *n*-propylcyclohexane was studied by using the Hybrid Chemistry (HyChem) modeling method. The pyrolysis of the large fuel molecule to form small products was modeled by the seven-step lumped reaction, while the oxidation of the small products was described by the detailed reaction model USC Mech II. The HyChem kinetic model of *n*-propylcyclohexane consisting of 112 species and 791 elementary reactions was constructed by coupling the two sub-mechanisms, and the experimental data of the flow reactor pyrolysis, ignition delay time and laminar flame speed were used to conduct the model validation. The results showed that this reaction mechanism can accurately predict the product distribution during the pyrolysis of *n*-propylcyclohexane, and it also had good performance in the prediction of the global combustion parameters, the calculation relative error of ignition delay time was 29.7%, and the calculation relative error of laminar flame speed was 11.1%.

收稿日期:2020-10-06

基金项目:国家自然科学基金(U2032119,71690245)

作者简介:王光彩(1995—),男,硕士生,研究方向为燃料的化学反应动力学。

引用格式:王光彩,王乾鹏,丁梦缘,等. 基于 HyChem 方法的正丙基环己烷反应动力学模型[J]. 航空动力学报,2021,36(7):1452-1461. WANG Guangcai,WANG Qianpeng,DING Mengyuan,et al. Reaction kinetic model of *n*-propylcyclohexane based on HyChem method[J]. Journal of Aerospace Power,2021,36(7):1452-1461.

Key words: *n*-propylcyclohexane; reaction kinetic model; HyChem method; pyrolysis; ignition delay time; laminar flame speed

化石燃料是全球能源的主要供给者,其中航空发动机所采用的主要燃料为航空煤油,因此研究者需要对于航空煤油进行深入的研究,从而更好的完成航空发动机的设计,达到提高发动机效率、控制燃烧过程的污染排放等目的。目前,国外常用 JP-8、Jet-A 航空煤油以及国内常用的 RP-3 航空煤油均由数百种碳氢燃料组成,因其化学组分过于复杂,研究者通常采用模型燃料的方法对其开展反应动力学研究^[1]。环烷烃作为航空煤油的重要组成部分,常常被用于航空煤油模型燃料的构建,其中丙基环己烷更是频繁出现于航空煤油的模型燃料组分中^[2-10]。然而目前对于正丙基环己烷的研究并不多,且大都集中于宏观燃烧参数(点火延迟时间^[11-12]和层流火焰速度^[12-14])的研究。Crochet 等^[11]在 620~930 K 温度范围测量了正丙基环己烷贫油条件下的点火延迟时间以及冷焰延迟时间。Dubois 等^[12]完成了高温高压条件的正丙基环己烷点火延迟时间测量,并在 1 atm 的条件下对层流火焰速度进行了研究。Ji 等^[13]在常压逆流条件下测定了包括丙基环己烷、乙基环己烷在内的多种环烷烃的层流火焰速度。

目前为止,很少有研究者针对正丙基环己烷热解和氧化过程中的物种分布进行研究。Ristori 等^[15]通过射流搅拌反应器进行了 950~1 250 K 温度范围内的正丙基环己烷氧化实验,并通过气相色谱仪对反应物以及各种中间产物摩尔分数分布进行了测量,在此基础上建立了正丙基环己烷的反应动力学机理(包括 176 个组分和 1369 个基元反应)。但是目前正丙基环己烷热解和氧化过程中物种分布的实验数据仍然不是很完善,为了获取更加准确的反应动力学模型,更加详细的热解和氧化实验数据是必不可少的。因此,Wang^[16]在 950~1 300 K 温度范围内分别进行了压强为 0.004 MPa 和 0.1 MPa 的正丙基环己烷热解实验,并进一步发展了其详细反应动力学机理(包括 559 个组分和 3 074 个基元反应),对于正丙基环己烷的热解过程做出了非常好的预测。

尽管已经发展了较为完善的正丙基环己烷反应动力学模型,但因其基元反应数量太大,很难直接应用于发动机燃烧室的模拟。因此建立规模更小的反应动力学模型对于实际工程计算来说是十分有意义的。本文以之前模型为基础,采用 Hy-

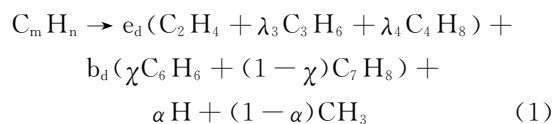
Chem 方法^[17-22]建立一个较为简化的模型,采用 7 步反应对大分子燃料热解生成小分子产物的过程进行建模,小分子产物的氧化过程则由成熟的小分子详细机理 USC Mech II (包括 111 个组分和 784 个基元反应)进行描述,从而构建了正丙基环己烷的 HyChem 模型(包括 112 个组分和 791 个基元反应)。经过实验数据与模型预测结果的对比发现,该模型可以很好的预测正丙基环己烷热解过程中各组分的摩尔分数分布,同时在宏观燃烧参数(点火延迟时间和层流火焰速度)的预测方面也有很好的表现。正丙基环己烷的 HyChem 模型在精度相差不多的条件下解决了原模型无法对于层流火焰速度进行预测的问题,并且将反应机理中组分和基元反应的数量缩减到原模型的 1/4 左右,从而大量节省了动力学模型在实际应用中的计算时间。

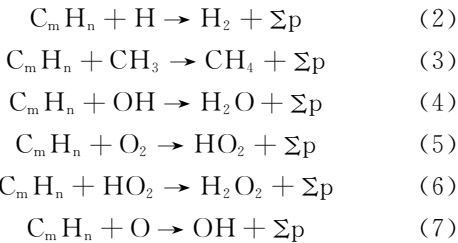
1 HyChem 模型构建

在大分子碳氢燃料高温氧化过程中,如果以燃料消耗量 95% 为分界线将反应过程分为燃料热解和热解产物氧化两个过程,则在这两个过程中,燃料热解过程所需时间不足热解产物氧化过程所需时间的 1/10,即在整个反应过程中,反应速率主要受热解产物氧化控制^[17]。因此对于燃料热解过程可以不从基元反应层面进行建模,而是通过集总燃料热解模型对其进行描述。将大分子碳氢燃料转化为 C₂H₄、C₃H₆、C₄H₈、C₆H₆、C₆H₅CH₃ 等小分子产物以及自由基 H 和 CH₃,而对热解产物氧化过程则采用小分子详细机理 USC Mech II 进行描述。由于只有在高温情况下才具备上述特征,因此本文所构建的 HyChem 模型适用于描述温度高于 NTC(negative temperature coefficient)区的高温范围内的反应过程。

1.1 集总燃料热解模型

正如之前所说,采用集总模型对大分子燃料热解过程进行描述,关于模型建立的具体细节在文献[17]中有详细表述,这里仅简单介绍。以 C_mH_n 来表示所研究的碳氢燃料,HyChem 模型以如下 7 步反应来描述燃料的热解过程。





其中

$$\Sigma p = \gamma CH_4 + e_a(C_2H_4 + \lambda_3 C_3H_6 + \lambda_4 C_4H_8) + b_a(\chi C_6H_6 + (1 - \chi)C_7H_8) + \beta H + (1 - \beta)CH_3 \tag{8}$$

上述反应中包括 6 个自变量参数 λ_3 、 λ_4 、 χ 、 γ 、 α 、 β 以及 4 个因变量参数 e_d 、 e_a 、 b_d 、 b_a 。 λ_3 代表热解过程产物中 C_3H_6 与 C_2H_4 的比值； λ_4 代表 C_4H_8 与 C_2H_4 的比值； χ 代表 C_6H_6 与 C_6H_6 和 C_7H_8 之和的比值； γ 代表消耗一个单位的燃料生成 CH_4 的量，通常设置为零； α 代表(R1)中消耗一个单位的燃料生成 H 的量； β 代表(R2~R7)中消耗一单位的燃料生成 H 的量。

4 个因变量参数的数值可由以下公式确定：

$$e_d = \frac{-(4 - \chi)m + \frac{7 - \chi}{2}n + 3\alpha + \chi - 13}{3(2 + 3\lambda_3 + 4\lambda_4)} \tag{9}$$

$$e_d = \frac{-(4 - \chi)m + \frac{7 - \chi}{2}n + 3\alpha + \chi - 13}{3(2 + 3\lambda_3 + 4\lambda_4)} \tag{10}$$

$$b_d = \frac{1}{3}\left(m - \frac{n}{2} + 1\right) \tag{11}$$

$$b_a = \frac{1}{3}\left(m - \frac{n}{2} + \gamma + 1\right) \tag{12}$$

1.2 正丙基环己烷 HyChem 模型构建

本文建立 HyChem 模型的方法与文献中略有不同,Xu 等^[18]主要利用流动管以及激波管的实验结果来为 7 步反应模型提供约束,从而确定最后的 HyChem 模型。这种方法适用于那些没有较为成熟反应机理的复杂多组分燃料,但是对于已经存在较为准确的详细反应机理的单组分燃料,我们就可以采用详细机理进行流动管以及激波管的模拟实验,利用模拟实验的结果为 7 步反应模型提供约束,从而得到该燃料的 HyChem 模型,进而通过已有实验数据完成模型的验证工作。

利用 CHEMKIN-II 软件中的 Closed Homogenous Batch Reactor 反应器进行正丙基环己烷的氧化热解模拟,化学反应过程采用正丙基环己烷详细机理(包括 559 个组分和 3074 个基元反

应)进行描述,反应条件设置为定温定压,初始温度为 1030 K,初始压强为 0.1 MPa、当量比为 1;正丙基环己烷摩尔分数为 501×10^{-6} ,平衡气摩尔分数分别为: 228×10^{-6} (CO_2), $5\,075 \times 10^{-6}$ (Ar), $6\,763.5 \times 10^{-6}$ (O_2), $772\,802 \times 10^{-6}$ (N_2)。图 1 展示了 λ_3 、 λ_4 、 χ 的数值大小,其中 $[C_3H_6]/[C_2H_4]$ 和在 $[1-C_4H_8]/[C_2H_4]$ 在反应进行到 10 ms 以后几乎保持在一个定值不再变化,两者数值分别为 0.338 和 0.025。但是在 10~30 ms 的过程中 $[C_6H_6]/([C_6H_6] + [C_5H_6CH_3])$ 始终保持缓慢减小,但始终非常接近 1,这表明此过程中甲苯的生成量极小,参考之后的热解数据最终取得 χ 为 0.9。

在 HyChem 模型的建模过程中未将 1,3-丁二烯作为主要生成物写入 7 步反应模型,而假设 1,3-丁二烯仅仅来源于热解生成物 C_2H_4 、 C_3H_6 以及 C_4H_8 之后的反应。但在正丙基环己烷的实际热解过程 1,3-丁二烯的生成量较大,若仅仅考虑小分子烯烃反应生成 1,3-丁二烯这一条途径,就会造成对于热解过程中 1,3-丁二烯生成量的严重低估。因此本文创新性的将 1,3-丁二烯加入到 7 步反应模型中,并令 θ 代表 7 步反应模型中 C_4H_6 的系数,从而得到了更加完善的 HyChem 模型。

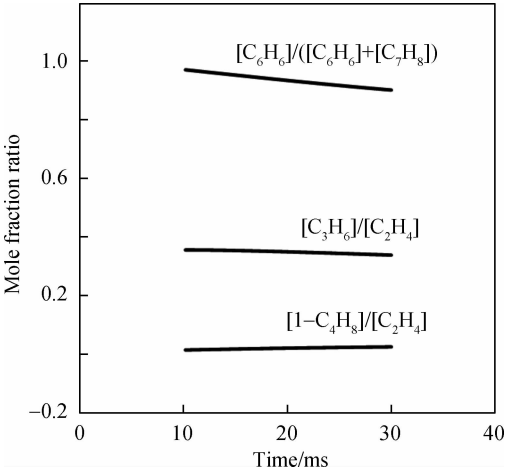


图 1 关键物种摩尔分数比
Fig.1 Ratios of key species mole fraction

利用 CHEMKIN-II 软件中的 Closed Homogenous Batch Reactor 反应器进行正丙基环己烷的激波管模拟,化学反应过程采用正丙基环己烷详细机进行描述,反应条件设置为绝热定压,模拟参数为 1 196 K,1.25 MPa,燃料摩尔分数 0.73%,Ar 为平衡气得到如图 2 虚线所示的

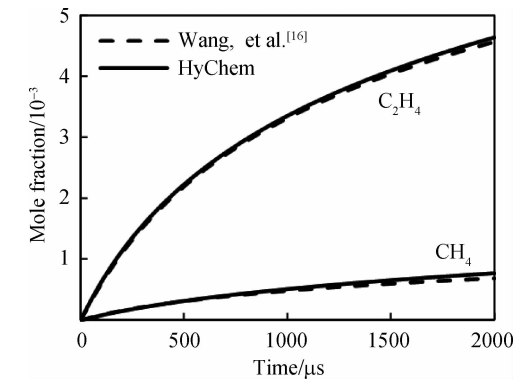


图 2 激波管模拟结果

Fig. 2 Shock tube simulation results

C_2H_4 和 CH_4 随时间的变化曲线。7 步反应模型中各反应速率参数来自于 Wang 等^[16] 以及 Jet-SurF 2.0, 取 $\gamma=0$ 和 λ_3 、 λ_4 、 χ 一同加入 7 步反应模型中, 经过不断的调整 α 、 β 以及反应速率参数得到最终的 HyChem 模型, 实线为 HyChem 模型在相同的模拟条件下得到的 C_2H_4 和 CH_4 随时间的变化曲线, 可以看出其与详细机理模拟结果非常接近。 C_2H_4 和 CH_4 随时间的变化曲线与 α 、 β 以及反应速率参数存在很大关系^[21], 随着 α 、 β 的增大, C_2H_4 的增长速率以及最终的摩尔分数都会增加, 但 CH_4 最终的摩尔分数会有所减少; k_1 对于 C_2H_4 和 CH_4 的增长速率均有影响, 而 k_2 仅仅影响初始增长率, k_3 的增加会使得 CH_4 摩尔分数大大增加。最终构建的 7 步反应模型各参数如表 1 和表 2 所示。其中 T 为温度, A 的单位为 mol、cm、s 的组合, n 为无量纲数, B 的单位为 cal/mol。

表 1 正丙基环己烷 7 步反应模型参数

Table 1 seven-step reaction model parameters of *n*-PCH

计量参数	数值	计量参数	数值
α	1.900	λ_4	0.025
β	0.400	θ	0.660
γ	0	χ	0.900
λ_3	0.338		

表 2 反应速率参数

Table 2 Reaction rate parameter

反应速率 参数	数值		
	A	n	B
k_1	3.17×10^{15}	0	74 000
k_2	2.77×10^6	2.49	4 470

续表

反应速率 参数	数值		
	A	n	B
k_3	4.50×10^2	3.25	11 163
k_4	4.14×10^3	2.85	-1 084
k_5	3.10×10^5	2.50	2 225
k_6	4.00×10^{13}	0	47 590
k_7	7.13×10^3	2.77	14 913

2 正丙基环己烷的 HyChem 模型验证

2.1 热解产物摩尔分数

正丙基环己烷热解实验是在国家同步辐射实验室的流动管反应器中完成, 文献[23]中有本实验装置的具体描述, 这里仅做简要介绍。实验装置主要由流动管反应器、差分室和电离室三部分构成; 其中流动管是由刚玉制成, 可以有效抑制管内壁的催化效应, 其总长度为 300 mm, 加热长度为 224 mm, 内径为 7 mm, 外径为 10 mm。放置在流动管后 5 mm 位置的石英喷嘴用于取样, 差分室由于压力差的作用, 经取样的热解产物会形成超声分子束, 超声分子束通过准直器后进入光电离室, 被同步辐射光电离, 离子化的产物在电场的作用下, 经过离子导入器由反射式飞行时间质谱仪进行探测。

在 950~1300 K 的温度范围内分别进行了压强为 0.004 MPa 和 0.1 MPa 的正丙基环己烷热解实验, 其中总气体流量为 $10^{-3} \text{ m}^3/\text{min}$, 燃料占比为 0.5%, 载气为 He(纯度为 99.999%)。0.004 MPa 压力下的滞留时间为 6.6~5.4 ms, 0.1 MPa 下的停留时间为 193~149 ms。流动管轴向温度采用 S 型热电偶进行测量, 温度的测量精度为 $\pm 30 \text{ K}$ 。

图 3 展示了 *n*-PCH 以及主要的热解产物随温度变化的曲线, 其中横轴温度代表沿流动管轴线温度的最大值(T_{max}), 纵轴为各组分的摩尔分数。从图中可以看出本文建立的 HyChem 模型较为成功的预测了正丙基环己烷的热解过程, 尤其是在 0.1 MPa 的条件下, C_2H_4 和 C_2H_6 预测效果明显优于详细机理 JetSurF 2.0。但是从图 3(c)中可以看出, 在 0.004 MPa 的条件下 HyChem 模型较高的估计了 C_3H_6 的摩尔分数, 这可

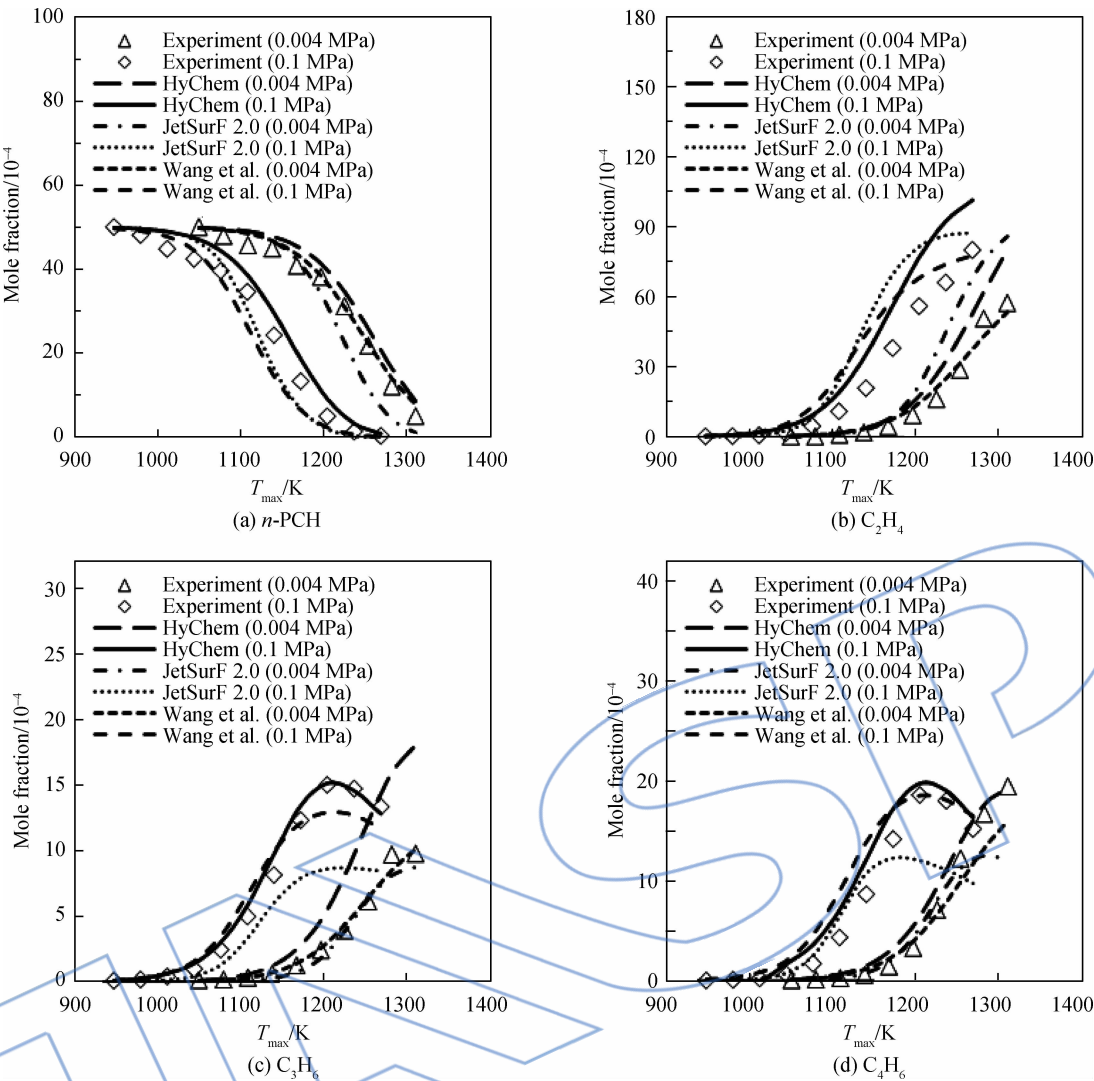


图 3 燃料和主要产物摩尔分数分布

Fig. 3 Mole fraction distribution of fuel and major products

能是由于低压条件下 C_3H_6 直接来源于燃料分解路径的生成量相对常压下较少的缘故。

热解过程中其他小分子产物随温度变化情况如图 4 所示,从图中可以看出,HyChem 模型可以较好地预测小分子产物的摩尔分数曲线,这得益于小分子详细机理的准确性,同时也说明了 HyChem 基础假设的可靠性,即只有乙烯、丙烯等几种主要产物直接来源于正丙基环己烷的分解,其他产物只来源于主要产物的进一步反应。此外从图 4(e)和图 4(f)中也可以看出 JetSurF 2.0 在预测 aC_3H_4 和 pC_3H_4 时存在很大程度上的高估,而 Wang 等发展的模型和 HyChem 模型则可以进行较好的估计。由于 JetSurF 2.0 以及本文建立的 HyChem 反应动力学模型所采用的小分子详细机理均为较为成熟的 USC Mech II。因此 JetSurF 2.0 在预测部分生成物摩尔分数方面预测精度不高的原因可能是大

分子燃料热解过程中部分反应的速率参数设置不合理。而本文建立的 HyChem 反应动力学模型以 7 步反应模型描述大分子燃料的热解过程,从而避免了详细机理中的这一问题。这也说明了进行正丙基环己烷模型研究的必要性。

图 5 为芳香烃类产物苯和甲苯随温度变化情况,可以看出 HyChem 模型在芳香烃类产物的预测方面存在着一些问题,尤其是在 0.004 MPa 的条件下,高估了苯和甲苯的生成量。这是因为在低压的条件下,正丙基环己烷实际反应中芳香烃产物生成量极少,但 HyChem 模型的 7 步反应模型中,一个单位燃料生成的苯和甲苯的量是不随压力发生变化的,因此在模拟 0.004 MPa 反应时,初始反应生成了过量的苯和甲苯,使得最后的预测结果偏高。同时从模型公式中也可以看出,苯和甲苯前系数 b_d 和 b_e 在 $\gamma=0$ 时,仅仅受燃料的

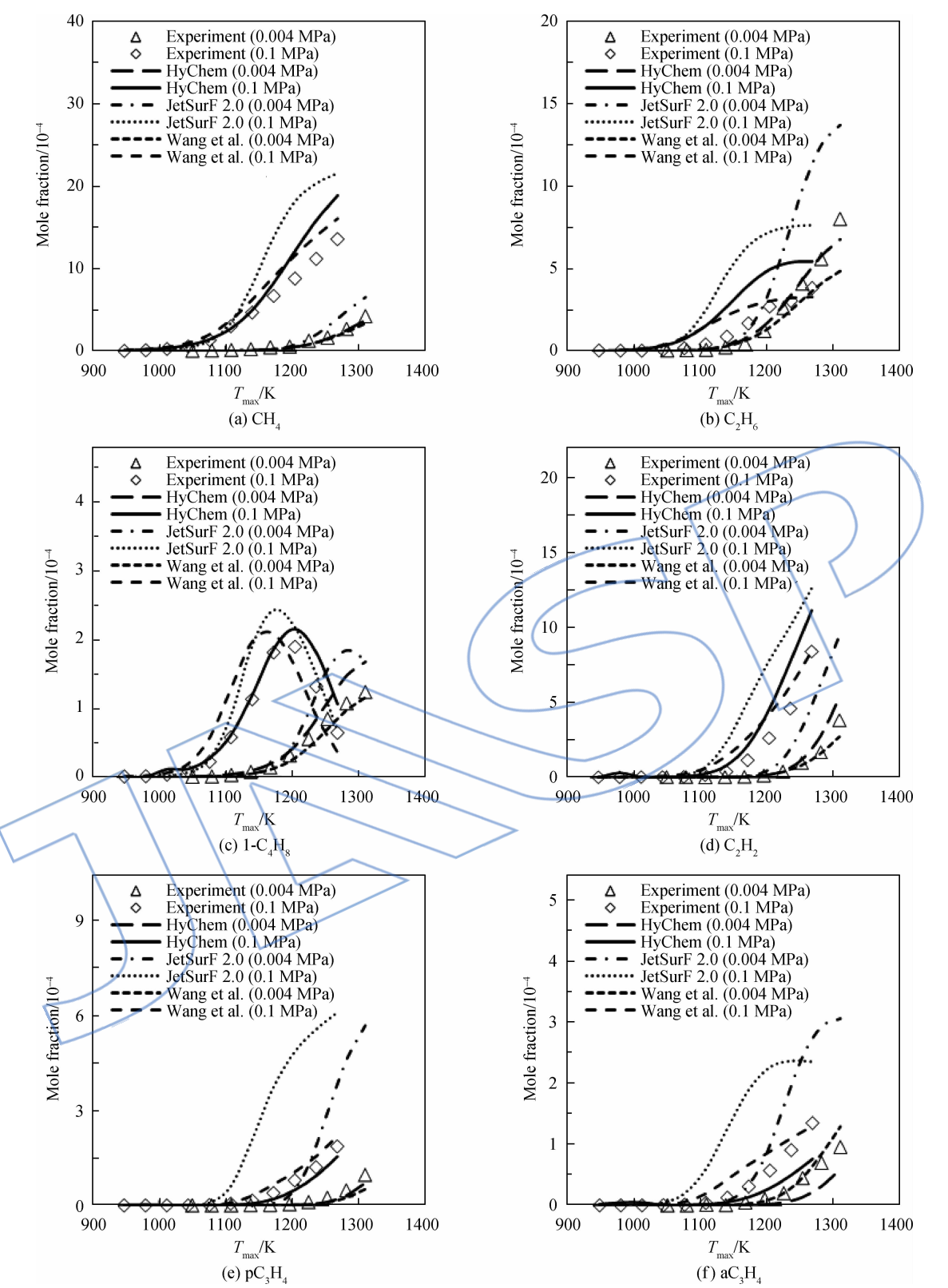


图 4 其他小分子产物摩尔分数分布

Fig. 4 Mole fraction distribution of other small molecules products

碳氢数量影响,这也造成了 HyChem 模型在预测芳香烃类产物时可能会出现较大的误差。这也是今后 HyChem 模型发展中所需要考虑的问题。后期可以尝试在不同压强条件下为苯和甲苯确定

不同的系数,从而建立不同的 7 步反应模型,以达到对芳香烃产物预测更加准确的目的。

2.2 点火延迟时间

在发动机燃烧室模拟中,点火延迟时间是发

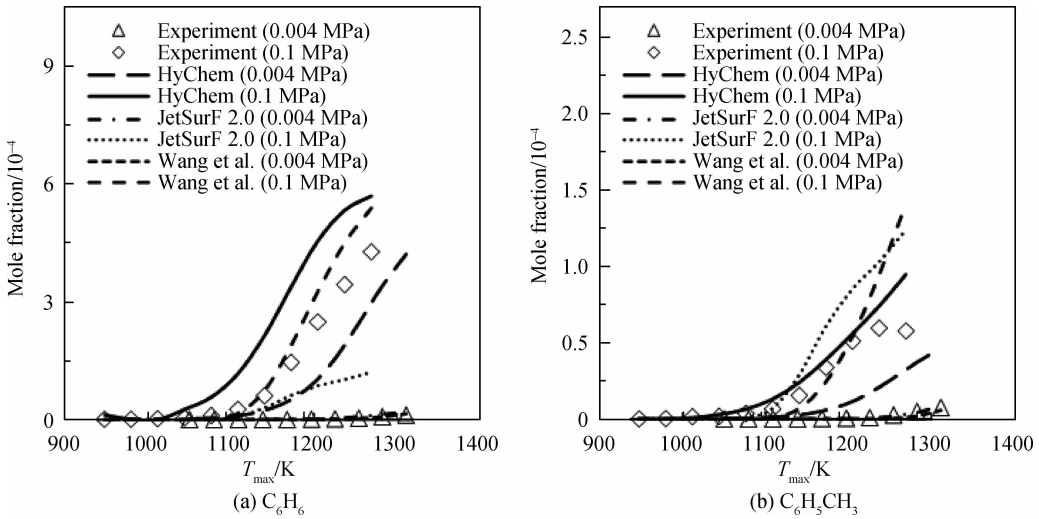


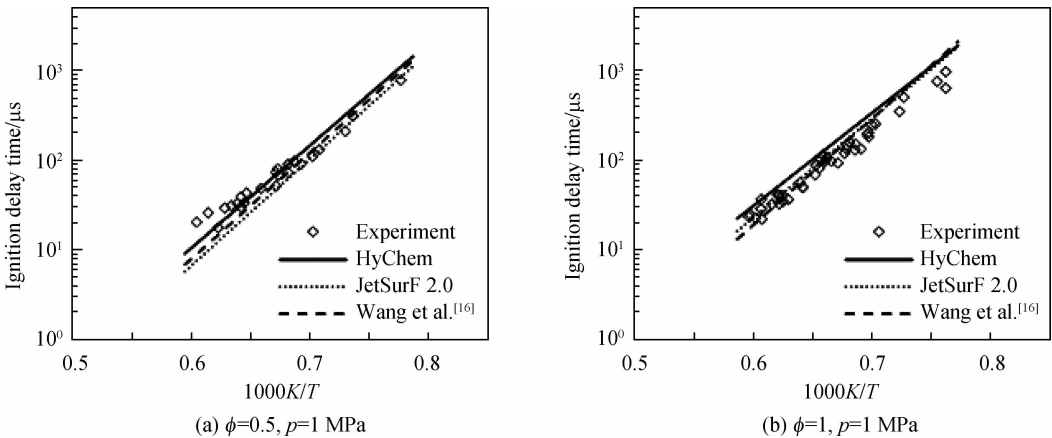
图 5 芳香烃产物摩尔分数分布
Fig. 5 Mole fraction distribution of aromatics species

动机燃烧室模拟中一个重要的宏观参数,判别一个模型的准确与否,通常会采用点火延迟时间来进行模型的验证。本文的点火延迟时间模拟是在 Closed Homogenous Batch Reactor 反应器中进行的,反应条件为定压绝热,将 OH 最大摩尔分数值的一半处定义为点火延迟时间。Dubois 等^[12]以正丙基环己烷混合氧气和氩气,在温度为 1250~1800 K,压强为 1 MPa 和 2 MPa 的条件下进行了点火延迟实验。如图 6 所示,在实验研究的范围内 HyChem、JetSurF 2.0 以及 Wang 等发展的模型均能对点火延迟时间做出很好的预测。3 个模型的相对误差分别为 29.7%、26.5% 和 22.3%。HyChem 模型的预测误差略高于其他两个详细模型,但在当量比为 0.5 的条件下,HyChem 模型的相对误差仅为 19.6%,其他两个模型分别为 26.8% 和 22.0%,即在贫油的条件下,HyChem 模型取得了更好的预测效果。综合来看,3 个反应动力学模型都可以对点火延迟时间进行很好的预测,其中在当量比为 0.5 时,反应数

量最少的 HyChem 模型的相对误差反而是最小的。这可能是由于尽管在高温条件下的实际热解产物组成仅为当量比的弱函数^[17]。但不同当量比下仍存在微小的差异。本文所确定的各产物之间比例关系可能更加契合低当量比区的实际情况,所以相比详细机理在贫油区取得了更好的预测效果。

2.3 层流火焰速度

在发动机燃烧室模拟中,层流火焰速度是发动机燃烧室模拟中另一个重要的宏观参数,因此本文进行了层流火焰速度的验证。本文采用 Premixed Laminar Flame Speed Calculation 反应器对正丙基环己烷进行了层流火焰速度的模拟,反应压力为 0.1 MPa,初始温度为 403 K 和 353 K,实验数据分别来自于文献[12]和文献[13]。如图 7 所示,HyChem 模型对于层流火焰速度的预测效果略差于 JetSurF 2.0,在低当量比区,HyChem 模型的预测结果相对于实验结果偏大,在高



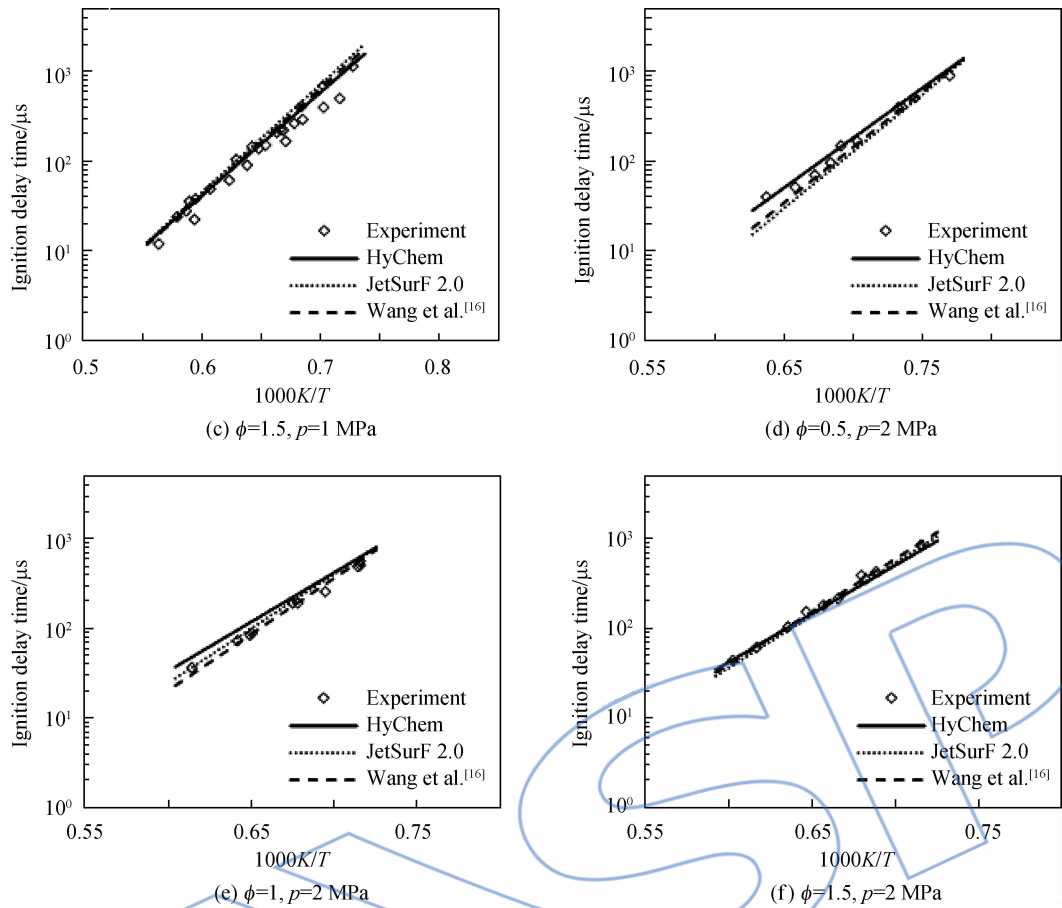


图 6 正丙基环己烷点火延迟时间
Fig. 6 Ignition delay time of *n*-PCH

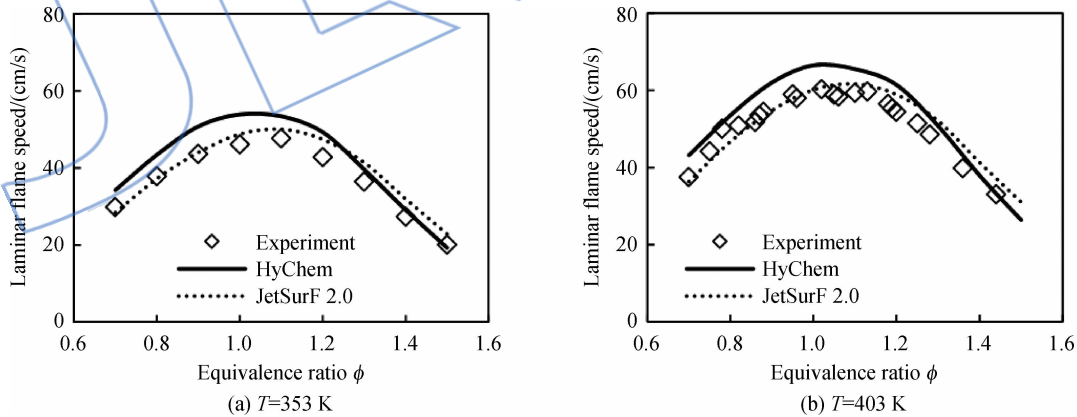


图 7 正丙基环己烷层流火焰速度
Fig. 7 Laminar flame speed of *n*-PCH

当量比区契合程度较高。这可能是由于HyChem反应动力学模型以7步反应模型描述大分子燃料的热解过程,相比实际热解过程缺少了C6-C8的大分子中间产物的存在,小分子产物摩尔分数则相对实际情况略微偏大,这导致了在预测贫油时层流火焰速度时模拟值偏大,而随着当量比的增加,火焰中大分子燃料所占比例增加,从而弱化了

这一现象。在预测误差分析方面,其中HyChem模型(包括112个组分和791个基元反应)对层流火焰速度预测的平均相对误差为11.1%,JetSurF 2.0(包括348个组分和2163个基元反应)对层流火焰速度预测的平均相对误差为6.9%,但两个模型均成功预测到了层流火焰速度的峰值位置位于当量比1~1.1之间。但是考虑到HyChem

模型反应数量仅为 JetSurF 2.0 的 1/3 左右,这个误差被认为是可以接受的。本文未采用 Wang 等发展的详细模型进行层流火焰速度的验证,这是由于该动力学模型存在大规模反应模型中经常出现的问题,即部分反应速率系数超过碰撞极限^[24]。从而导致在高温火焰中无法进行计算。本文建立的 HyChem 反应动力学模型以 7 步反应模型描述大分子燃料的热解过程,从而避免了详细机理中的这一问题。

3 结 论

本文以 HyChem 的基本方法对正丙基环己烷开展模型研究,以详细反应机理的模拟结果为约束条件,建立了 7 步反应模型并将其与 USC Mech II 耦合,从而构成了正丙基环己烷的 HyChem 反应动力学模型(包括 112 个组分和 791 个基元反应)。为了验证模型的准确性,本文进行了详细的模型验证工作,包括高温热解、点火延迟时间以及层流火焰速度的验证。通过热解模拟结果和实验结果对比发现,HyChem 模型可以很好的预测燃料的消耗以及大部分小分子产物随温度的变化趋势,尤其在 0.1 MPa 的条件下,对于 C_2H_4 和 C_4H_6 预测效果甚至优于详细机理 JetSurF 2.0。这也证明了 HyChem 基础假设的可靠性,即只有乙烯、丙烯等几种主要产物直接来源于正丙基环己烷的分解,其他产物只来源于主要产物的进一步反应。此外,HyChem 模型在预测宏观燃烧参数点火延迟以及层流火焰速度方面也有非常优秀的表现,点火延迟时间总的相对误差为 29.7%,在贫油条件下的预测相对误差更是仅为 19.6%。对于层流火焰速度的预测效果略逊于 JetSurF 2.0,但其相对误差也仅仅只有 11.1%。考虑到模型反应数较少,HyChem 模型在实际应用中还是具备自己的优势。

参考文献:

- [1] EDWARDS T, MAURICE L Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels[J]. Journal of Propulsion and Power, 2001, 17(2): 461-466.
- [2] DAGAUT P, KARSENTY F, DAYMAG, et al. Experimental and detailed kinetic model for the oxidation of a gas to liquid (GtL) jet fuel[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(3): 835-847.
- [3] SU Mengying, CHEN C P. Heating and evaporation of a new gasoline surrogate fuel: a discrete multicomponent modeling study[J]. Fuel, 2015, 161(1): 215-221.
- [4] WANG Quande, FANG Yamei, WANG Fan. Skeletal mechanism generation for high-temperature oxidation of kerosene surrogates[J]. Combustion and Flame, 2012, 159(1): 91-102.
- [5] DAGAUT P, DIEVART P. Combustion of synthetic jet fuels: naphthenic cut and blend with a gas-to-liquid (GtL) jet fuel[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36(1): 433-440.
- [6] WANG Qianpeng, WANG Cong, HUANG Yufei, et al. A kinetic study on pyrolysis of iso-propylcyclohexane: fuel structure effects of alkylcyclohexane isomers on reaction mechanisms[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2021, 38(1): 489-497.
- [7] 刘宇, 曾文, 马洪安, 等. RP-3 航空煤油 3 组分模拟替代燃料燃烧反应机理[J]. 航空动力学报, 2016, 31(9): 2055-2064.
- LIU Yu, ZENG Wen, MA Hongan, et al. Combustion reaction mechanism of three-component simulation surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(9): 2055-2064. (in Chinese)
- [8] 曾文, 李海霞, 马洪安, 等. RP-3 航空煤油 3 组分模拟替代燃料的化学反应详细机理[J]. 航空动力学报, 2014, 29(12): 2810-2816.
- ZENG Wen, LI Haixia, MA Hongan, et al. Detailed chemical reaction mechanism of surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2014, 29(12): 2810-2816. (in Chinese)
- [9] 刘振涛, 许全宏, 张弛, 等. 煤基喷气燃料代用组分神经网络混合构建方法[J]. 航空动力学报, 2016, 31(11): 2652-2658.
- LIU Zhentao, XU Quanhong, ZHANG Chi, et al. Surrogate formulation methodology of coal-based jet fuel based on neural network mixing model[J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(11): 2652-2658. (in Chinese)
- [10] 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)
- [11] CROCHET M, MINETTI R, RIBAUCOUR M, et al. A detailed experimental study of *n*-propylcyclohexane autoignition in lean conditions[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(11): 2078-2085.
- [12] DUBOIS T, CHAUMEIX N, PAILLARD C E. Experimental and modeling study of *n*-propylcyclohexane oxidation under engine-relevant conditions[J]. Energy and Fuels, 2009, 23(5): 2453-2466.
- [13] JI Chunsheng, DAMES E, SIRJEAN B. An experimental and modeling study of the propagation of cyclohexane and mono-alkylated cyclohexane flames[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011, 33: 971-978.
- [14] COMANDINI A, DUBOIS T, CHAUMEIX N. Laminar flame speeds of *n*-decane, *n*-butylbenzene, and *n*-propylcyclohexane mixtures[J]. Proceedings of the Combustion In-

stitute,2015,35(1):671-678.

[15] RISTORI A, DAGAUT P. Theoxidation of *n*-propylcyclohexane;experimental results and kinetic modeling[J]. Combustion Science and Technology ,2001,165(1):197-228.

[16] WANG Qianpeng, WANG Cong, HUANG Yufei, et al. Pyrolysis chemistry of *n*-propylcyclohexane via experimental and modeling approaches [J]. Fuel, 2021, 283 (1): 118847. 1-118847. 11.

[17] WANG Hai,XU Rui,WANG Kun,et al. A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: I evidence from experiments, and thermodynamic, chemical kinetic and statistical considerations[J]. Combustion and Flame,2018,193;502-519.

[18] XU Rui,WANG Kun,WANG Hai,et al. A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: II reaction kinetic models of jet and rocket fuels[J]. Combustion and Flame,2018,193;520-537.

[19] TAO Yujie,XU Rui,WANG Kun,et al. A Physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: III reaction kinetic model of JP10[J]. Combustion and Flame, 2018,198;466-476.

[20] WANG Hai,XU Rui,WANG Kun,et al. A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: IV HyChem modeling of combustion kinetics of a bio-derived jetfuel and its blends with a conventional Jet A[J]. Combustion and Flame,2018,198;477-489.

[21] SAGGESE C,WAN K,WANG Hai,et al. A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: V NOx formation from a typical Jet A[J]. Combustion and Flame,2020,212;270-278.

[22] SAGGESE C,XU Rui,WANG Hai,et al. A physics-based approach to modeling real-fuel combustion chemistry: VI predictive kinetic models of gasoline fuels[J]. Combustion and Flame,2020,220;475-487.

[23] QI Fei. Combustion chemistry probed by synchrotron VUV photoionization mass spectrometry[J]. Proceedings of the Combustion Institute,2013,34(1):33-63.

[24] CHEN Dongping, WANG Kun, WANG Hai. Violation of collision limit in recently published reaction models[J]. Combustion and Flame, 2017,186(1):208-210.

(编辑:叶青、张雪)