

RP-3 航空煤油低温氧化特性的试验与数值计算

刘靖¹, 胡二江¹, 黄佐华¹, 曾文²

(1. 西安交通大学 能源与动力工程学院 动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049;

2. 沈阳航空航天大学 航空发动机学院

辽宁省航空推进系统先进测试技术重点实验室, 沈阳 110136)

摘 要: 在射流搅拌反应器(JSR)中对压力为 0.1 MPa、温度范围为 550~1 100 K、当量比分别为 0.5 与 1.0、滞留时间为 2 s 的工况条件下 RP-3 航空煤油及由正癸烷(摩尔分数为 0.14)/正十二烷(0.1)/异十六烷(0.3)/甲基环己烷(0.36)/甲苯(0.1)组成的模型燃料的低温氧化过程进行了试验测试。同时,通过耦合基于反应类的全局敏感性分析方法、解耦法和遗传算法,构建了该模型燃料的简化反应动力学机理(181 个组分和 872 个反应),并对模型燃料的低温氧化特性进行了数值计算。结果表明:模型燃料低温氧化过程中主要组分摩尔分数随温度的变化趋势与 RP-3 航空煤油吻合较好;构建的 RP-3 航空煤油模型燃料的简化反应机理可以较好地预测该模型燃料低温氧化过程中主要组分摩尔分数随温度变化的整体趋势,但在部分组分摩尔分数峰值及负温度系数(NTC)效应预测上尚存在偏差。

关 键 词: RP-3 航空煤油; 模型燃料; 低温氧化; 简化反应机理; 射流搅拌器(JSR)

中图分类号: V231.2; TK401

文献标志码: A

Experiment and numerical calculation on low-temperature oxidation characteristics of RP-3 aviation kerosene

LIU Jing¹, HU Erjiang¹, HUANG Zuohua¹, ZENG Wen²

(1. State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering,

School of Energy and Power Engineering,

Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Key Laboratory of Advanced Measurement and Test Technique for

Aviation Propulsion System, Liaoning Province, School of Aero-engine,

Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China)

Abstract: The low-temperature oxidation of RP-3 aviation kerosene and its surrogate fuel (*n*-decane (mole fraction of 0.14)/*n*-dodecane (0.1)/iso-cetane (0.3)/methylcyclohexane (0.36)/toluene (0.1)), were experimentally tested in a jet stirring reactor (JSR) at the conditions of the pressure of 0.1 MPa, the temperature range of 550—1 100 K, the equivalence ratios of 0.5 and 1.0, and the residence time of 2 s. Meanwhile, through the reaction class-based

收稿日期: 2021-02-18

基金项目: 国家自然科学基金(91641124)

作者简介: 刘靖(1995—), 女, 博士生, 主要从事碳氢燃料基础燃烧特性研究。

通信作者: 胡二江(1983—), 男, 教授, 博士, 主要从事航空发动机点火和燃烧调控研究。E-mail: hujjiang@mail.xjtu.edu.cn

引用格式: 刘靖, 胡二江, 黄佐华, 等. RP-3 航空煤油低温氧化特性的试验与数值计算[J]. 航空动力学报, 2022, 37(1): 36-45. LIU Jing, HU Erjiang, HUANG Zuohua, et al. Experiment and numerical calculation on low-temperature oxidation characteristics of RP-3 aviation kerosene[J]. Journal of Aerospace Power, 2022, 37(1): 36-45.

global sensitivity analysis, decoupling methodology and multi-objective genetic algorithm, the reduced reaction kinetic mechanism of the surrogate fuel (including 181 species and 872 reactions) was established, and the low-temperature oxidation characteristics of the surrogate fuel were simulated. The results showed that the temperature-dependent trends of the mole fractions of main species in the low-temperature oxidation process of the surrogate fuel were in good agreement with RP-3 aviation kerosene. The reduced reaction mechanism of the surrogate fuel for RP-3 aviation kerosene had a good prediction of the temperature-dependent trends of the mole fractions of main species during the low-temperature oxidation of the surrogate fuel. However, there were still some deviations in the prediction of the peak mole fractions and negative temperature coefficient (NTC) effect of some species.

Key words: RP-3 aviation kerosene; surrogate fuel; low-temperature oxidation; reduced reaction mechanism; jet stirring reactor (JSR)

随着航空发动机技术水平的提高,新型航空发动机燃烧室内的压力与温度已达到 5 MPa 与 2 600 K 左右,目前的试验测试技术尚无法实现如此高温高压环境下燃烧室内燃烧流场与燃烧组分浓度场的精确测量。因此,只能通过对燃烧室内燃烧流场的准确数值模拟才能获得航空发动机燃烧室中的流场特性、燃烧细节和污染物生成规律,从而指导新型航空发动机燃烧室的结构设计与性能优化。同时,相比于试验测试方法,数值模拟也能降低航空发动机的研发成本,缩短研发周期。在航空发动机燃烧室内燃烧流场与污染物生成特性的数值计算中,一般把某种单组分燃料(如 $C_{12}H_{23}$)作为航空煤油的模型燃料,同时采用该单组分燃料的单步或简单多步化学反应机理,虽然可以在一定程度上预测燃烧室的温度场以及进出口温升,但无法对燃料的着火过程、燃烧组分与主要污染物的产生和消耗进行准确的预测,相应数值计算的精准度偏低,数值计算的作用在航空发动机燃烧室的结构设计和性能优化过程中无法充分发挥。因此,为了更准确地掌握航空发动机燃烧室中的燃烧细节和污染物生成特性,进一步提高航空发动机燃烧室燃烧与排放性能的数值计算精度,充分发挥数值计算在航空发动机研发过程中的重要作用,构建准确的航空煤油化学反应机理势在必行^[1]。

作为一种实际碳氢燃料,航空煤油的成分非常复杂,由平均碳原子个数为 10~16 的烷烃、环烷烃、芳香烃以及多环芳烃等多种碳氢化合物构成,其化学反应机理涉及几百种组分、几千个基元反应^[2]。要想通过综合考虑如此庞大的反应机理与复杂流场对航空发动机燃烧室内的流动与燃烧

过程进行完整、准确的数值计算极为困难。一种有效的方法就是发展一种具有与航空煤油相似物理特性(密度、比热容、声速、黏性和导热系数等)和化学特性(低温氧化特性、着火延迟特性与层流燃烧特性等)的模型燃料^[3],并形成该模型燃料的简化反应机理。针对国外广泛使用的 JP-8、JP-10、Jet-A 等航空煤油,许多学者根据其主要成分组成与物理特性,提出了多种单组分、双组分或多组分模型燃料,并对航空煤油与其模型燃料的主要物理和化学特性进行了广泛的试验对比验证。同时,构建了大量的模型燃料详细与简化反应机理,并在宽工况范围下完成了反应机理的试验验证^[4-7]。近年来,针对国产 RP-3 航空煤油,许多学者参照 JP-8、JP-10、Jet-A 等航空煤油的模型燃料,提出了多种 RP-3 航空煤油的模型燃料,并构建了多种反应机理。同时,开展了 RP-3 航空煤油与其模型燃料的低温氧化特性、着火延迟特性以及层流燃烧特性的试验测试,并完成了反应机理的试验验证。张英佳等^[8]、Zhang 等^[9]、唐洪昌等^[10]、Mao 等^[11]、Chen 等^[12]、Liang 等^[13]、刘宇等^[14]相继开展了 RP-3 航空煤油与其模型燃料着火延迟与层流燃烧特性的试验研究,获得了多工况条件下 RP-3 航空煤油与其模型燃料的着火延迟时间、层流燃烧速度以及主要影响因素与影响规律。Liu 等^[15]开展了 RP-3 航空煤油与其模型燃料低温氧化特性的试验研究,获得了当量比为 2.0、初始压力为 0.1 MPa 条件下 RP-3 航空煤油与其模型燃料的低温氧化特性。但是,相比于着火延迟特性与层流燃烧特性,RP-3 航空煤油的低温氧化特性的试验研究开展较少。在实际的航空发动机燃烧室中,燃油喷入燃烧室后将经历破碎、雾化、蒸

发以及空气掺混等过程。由于航空发动机燃烧室入口空气温度较高(五代机能达到 850~900 K),燃油在该空气环境下,会先发生低温氧化,而燃油的低温氧化特性将直接影响点火后燃烧室的燃烧性能与排放性能。同时,碳氢燃料化学反应机理的试验验证,目前主要为着火延迟特性、层流燃烧特性以及低温氧化特性,因此,RP-3 航空煤油的低温氧化特性试验将为其模型燃料化学反应机理的试验验证提供试验验证数据。

在先期研究中,Liu 等^[16]对 RP-3 航空煤油的主要组成成分与物理特性进行了试验测试与分析,提出了其模型燃料的遴选指标,确定了由正癸烷(摩尔分数为 0.14,后文同)/正十二烷(0.1)/异十六烷(0.3)/甲基环己烷(0.36)/甲苯(0.1)组成的 RP-3 航空煤油模型燃料,并试验测试了该模型燃料的主要物理特性与化学特性。结果发现,该模型燃料的平均分子量、氢碳比、十六烷值与低热值、不同温度下密度与动力黏度变化趋势等主要物理特性与 RP-3 航空煤油非常吻合,着火特性和层流燃烧特性也有很好的吻合。本文针对该模型燃料,利用射流搅拌器(JSR)对压力为 0.1 MPa,温度范围为 550~1 100 K,当量比分别为 0.5 与 1.0,滞留时间为 2 s 的工作条件下 RP-3 航空煤油及该模型燃料的低温氧化特性进行了试验测试,并完成了两者的对比分析;同时,针对该模型燃料的成分组成,构建了其简化反应机理,完成了该模型燃料低温氧化特性的数值计算,并与相应试验结果进行了对比分析。本文试验进一步丰富了 RP-3 航空煤油低温氧化特性的试验数据库,所构建的模型燃料简化机理为实现航空发动机燃烧室

燃烧与排放性能的高精度数值计算提供了理论基础与技术支持。

1 试验装置与方法

低温氧化反应系统如图 1 所示^[17],由加热系统、进气系统、射流搅拌器和检测系统组成。射流搅拌器如图 2 所示,由反应球、气体进口管和尾气排出管组成。反应球的内径为 54 mm(体积为 86 mm³),球体正中位置布置 4 个内径为 0.3 mm 的喷嘴,4 个射流喷嘴可以保证氧气和燃料在反应器内均匀混合。射流搅拌器的材料为石英,可以耐温高达 1 300 K,并且石英能够有效减少壁面反应和催化反应。混合气从射流搅拌器一端进入,通过喷嘴喷出后在球体内部混合均匀,整个球体内部保持定温定压的试验条件。

加热系统包括预加热和试验段加热。对射流搅拌器之前的管路利用加热带和温度控制器进行预加热,设定温度高于液体燃料沸点 20~40 K,且不高于该条件下燃料的初始反应温度。预加热可以避免反应混合气中的液体燃料液化,造成试验误差,也可以减小射流搅拌器内的温度梯度。在射流搅拌器后的管路设定同样的温度,避免剩余反应物和产物在管道内液化,使测得的产物摩尔分数偏小,同时可以防止堵塞气相色谱仪(GC)进样口。射流搅拌器的温度由高温电炉控制,该电炉可以稳定提供从 298~1 500 K 的温度环境,并且温度能够长时间保持稳定。射流搅拌器内反应温度由 K 型热电偶配合手持式温度测量仪测得,并与高温电炉所示温度对比,以检测是否有温度偏差。

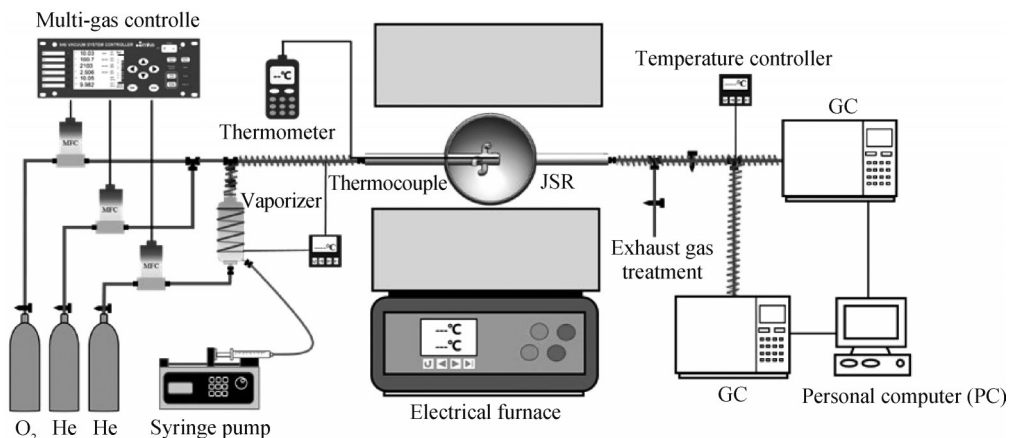


图 1 试验系统布置图^[17]

Fig.1 Schematic diagram of the experimental facility^[17]

进气系统由液体燃料和气体两部分组成。液体燃料通过高压输液泵(体积流量控制范围为0.001~10.0 mL/min,误差为0.1%)注入至预热到液体沸点之上的汽化罐中,燃料蒸气和氧气分别由载气氦气稀释,氧气和氦气的流速通过质量流量控制计精确控制。反应物种利用装备有热导检测器(TCD)和氢火焰离子检测器(FID)的气相色谱和气质联用来采样和分析。 $C_1\sim C_4$ 轻烃化合物定性定量通过毛细色谱柱配合FID检测器来完成, H_2 、 O_2 、 CO_2 、 CO 、 H_2O 则通过毛细色谱柱配合TCD检测。FID和TCD检测器的检测极限分别是0.1 mg/L和10 mg/L。气相色谱的定性定量通过注入已知组分和体积分数的标气实现。在同一试验条件下每个试验点至少采样3次来保证试验的可靠性和重复性,降低试验误差概率,整个试验测量的相对误差在10%以内,详细可参考Gao等^[17]对该试验台的验证结果。



图2 射流搅拌器实图

Fig.2 Picture of the jet stirring reactor

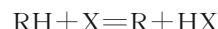
2 反应动力学模型

RP-3航空煤油模型燃料由正癸烷($n-C_{10}H_{22}$)、正十二烷($n-C_{12}H_{26}$)、异十六烷($i-C_{16}H_{34}$ 、HMN)、甲基环己烷(C_7H_{14} 、MCH)、甲苯(C_7H_8 、 A_1CH_3)组成。模型燃料中各组分的详细反应机理作为模型燃料简化机理构建的基础和起点,对模型燃料简化机理的构建至关重要。为了保证模型燃料简化机理可靠性,模型燃料中各组的详细反应机理均来自于劳伦斯利物莫国家实验室(LLNL)。正癸烷与正十二烷的详细反应机理包含2 755个组分和11 173个反应^[18],该机理能很好地预测正癸烷与正十二烷在激波管、快速压缩机(RCM)、流动管反应器、射流搅拌器及定容燃烧反应器中的低温氧化、着火延迟及层流燃烧特性^[19-22]。异十六烷的详细反应机理包含1 107个组

分和4 469个反应,该机理能较好地预测异十六烷在激波管中的着火延迟特性^[23]。甲基环己烷的详细反应机理包含1 540个组分和6 498个反应,该机理能较好地预测甲基环己烷在激波管与RCM中的着火延迟特性^[24]。甲苯的详细反应机理包含530个组分和2 808个反应,该机理能很好预测甲苯在激波管和RCM中的着火延迟特性、在流动管反应器和JSR中的低温氧化特性以及在对冲火焰中的层流燃烧特性^[25-26]。

通过耦合基于反应类的全局敏感性分析方法^[27]、解耦法^[28]和遗传算法^[29],构建该模型燃料的简化反应机理。首先,使用基于反应类的全局敏感性分析方法对模型燃料中各组分的详细反应机理中的反应类进行评估,获得重要反应类,并基于产物率分析(ROP),从每个重要的反应类中选取一个代表性反应,形成各组分的骨架子机理。基于解耦法,将各组分的骨架子机理与 $C_0\sim C_3$ 详细反应机理^[30]耦合,形成各组分的初始简化反应机理;然后,使用遗传算法在不确定性范围内对各组分的初始简化反应机理中骨架子机理的反应速率系数进行优化,获得各组分最终简化反应机理;最后,综合各组分最终简化反应机理,形成模型燃料的简化反应机理,包含181个组分和872个反应。

图3显示了RP-3航空煤油模型燃料简化反应机理的构建过程与主要反应路径。对于 $n-C_{10}H_{22}$ 、 $n-C_{12}H_{26}$ 、MCH和 $i-C_{16}H_{34}$,燃料分子(RH)首先通过脱氢反应生成燃料基(R)



其中X为H、OH、 HO_2 和 O_2 。

在低温工况下, $R(C_{10}H_{21}, C_{12}H_{25}, i-C_{16}H_{33}, c-C_7H_{13})$ 与 O_2 反应生成 RO_2 , RO_2 随后经过异构化反应形成 $QOOH$, $QOOH$ 随后与 O_2 反应生成 O_2QOOH , O_2QOOH 释放一个OH基生成 C_nket ($OC_{10}H_{19}OOH$, $OC_{12}H_{23}OOH$, $i-OC_{16}H_{31}OOH$, $c-OC_7H_{11}OOH$), C_nket 随后分解为更小的分子。

在高温工况下,受燃料分子结构的影响,不同的燃料基展示了不同的氧化行为。正癸烷和正十二烷的燃料基经过一系列的 β -裂解反应生成 $C_0\sim C_3$ 组分。为降低机理规模,将连续的 β -裂解反应集总为一个反应。HMNR($i-C_{16}H_{33}$)在高温工况下通过两条路径消耗:一是热解生成 $j-C_8H_{16}$, $j-C_8H_{16}$ 随后与OH基反应生成 $i-C_4H_8$;二是直接热解为 $i-C_4H_8$ 。 $i-C_4H_8$ 随后经过脱氢反应生成 $i-C_4H_7$, $i-C_4H_7$ 与 HO_2 基反应生成 $i-C_4H_7O$, $i-C_4H_7O$

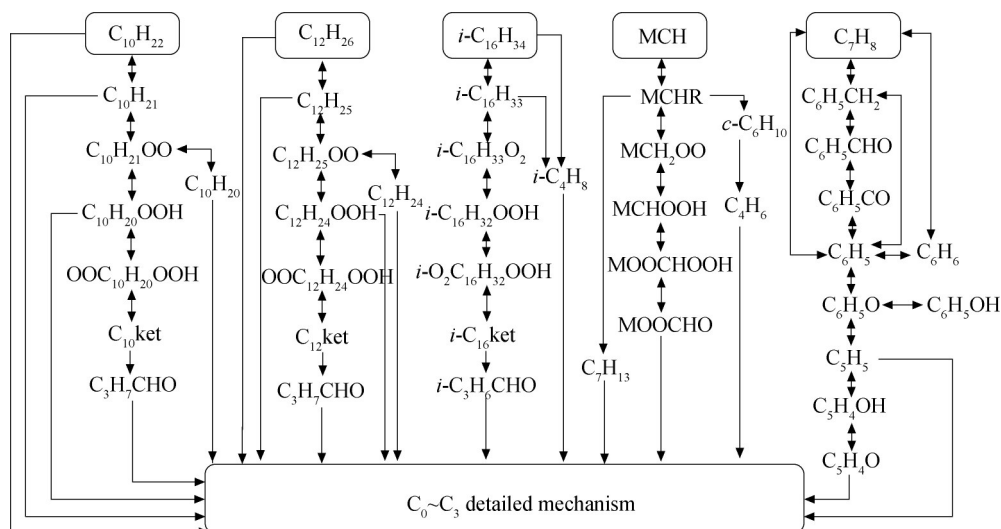


图3 RP-3航空煤油模型燃料简化反应机理的主要路径分析

Fig.3 Main path analysis of the reduced reaction mechanism of the surrogate fuel for RP-3 aviation kerosene

随后裂解为 $C_0 \sim C_3$ 组分。MCHR($c-C_7H_{13}$) 在高温工况下或者直接开环生成 $g-C_7H_{13}$, $g-C_7H_{13}$ 随后裂解为 $C_0 \sim C_3$ 组分; 或者分解为 $c-C_6H_{10}$, $c-C_6H_{10}$ 随后开环生成 C_4H_6 , C_4H_6 与 H 基反应生成 C_2H_4 和 C_2H_3 。另外, 在高温工况下燃料分子直接裂解为 $C_0 \sim C_3$ 组分。

由于苯环结构稳定, 甲苯(C_7H_8) 没有低温反应。在高温工况下, C_7H_8 首先经过脱氢反应生成苯甲基($C_6H_5CH_2$), $C_6H_5CH_2$ 随后与 O 和 HO_2 基反应生成 C_6H_5CHO , C_6H_5CHO 经过 OH 和 H 基脱氢反应生成 C_6H_5CO , C_6H_5CO 随后分解为 C_6H_5 。 A_1CH_3 也可与 H 基反应生成 C_6H_6 , C_6H_6 随后经历脱氢反应生成 C_6H_5 , C_6H_5 随后与 O_2 反应生成 C_6H_5O 。 C_6H_5O 的消耗路径包含两条: 一是与 H 基反应生成 C_6H_5OH , C_6H_5OH 经历脱氢反应生成 C_6H_5O ; 二是通过开环反应生成 C_5H_5 , C_5H_5 或者与 O_2 反应生成小分子, 或者与 OH 反应生成 C_5H_4O , C_5H_4O 随后裂解为小分子组分。

3 结果与分析

采用 JSR 系统测量了压力为 0.1 MPa、当量比分别为 0.5 与 1.0、温度范围为 550~1 100 K 工

况条件下 RP-3 航空煤油与其模型燃料低温氧化过程中主要组分的摩尔分数。同时, 采用本文构建的模型燃料简化反应机理, 利用 Chemkin-pro 软件中的 PSR(perfectly stirred reactor) 模块对模型燃料的低温氧化特性进行数值模拟, 并与 RP-3 航空煤油及其模型燃料相应试验值进行了对比分析。

根据 RP-3 航空煤油与其模型燃料的分子式^[16], 试验开始前不同当量比下 RP-3 航空煤油、模型燃料中各组分、 O_2 与 He 的摩尔分数如表 1 所示。

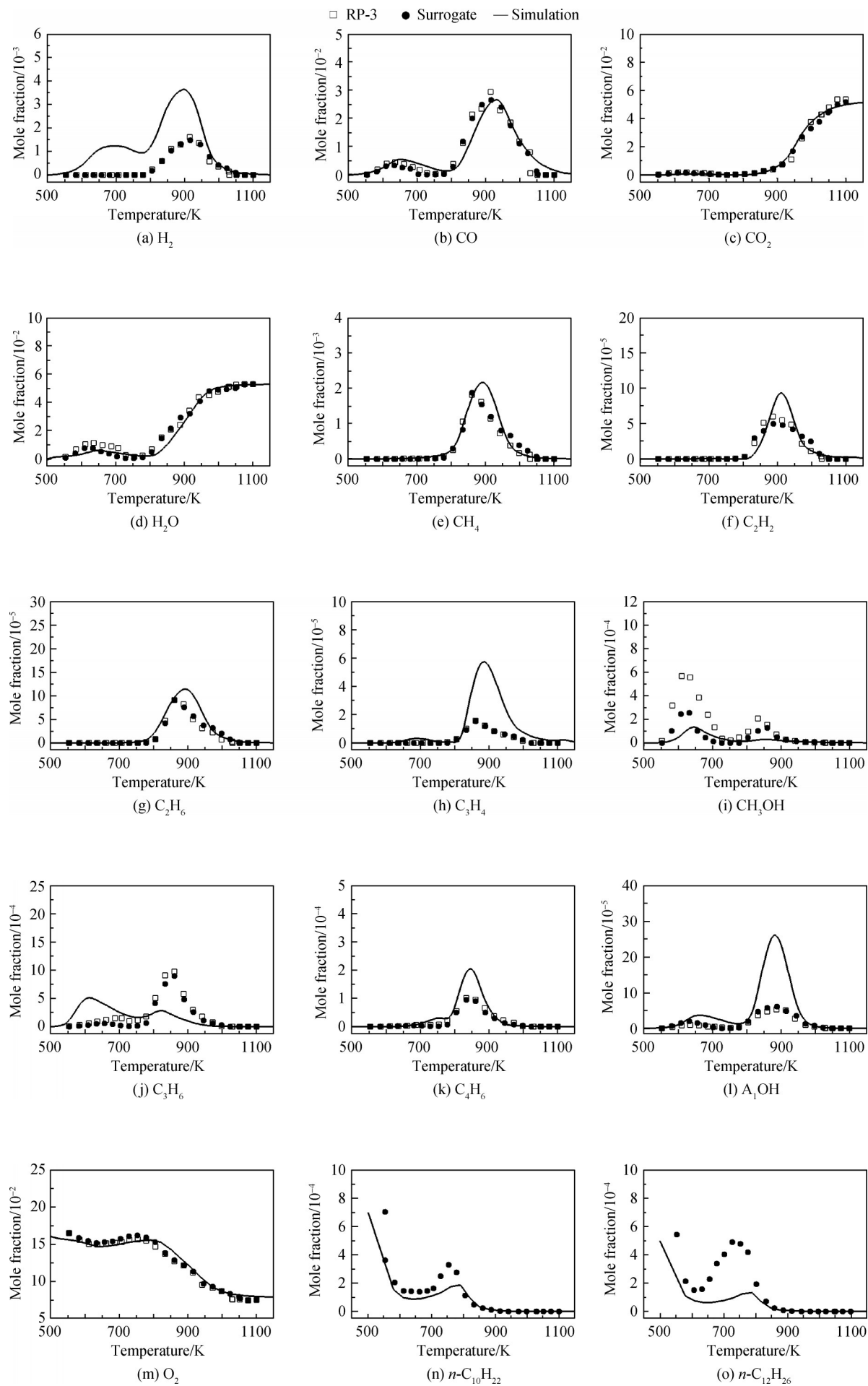
图 4 与图 5 分别显示了压力为 0.1 MPa、当量比 ϕ 分别为 0.5、1.0 时, RP-3 航空煤油与其模型燃料低温氧化过程中主要组分的摩尔分数随温度的变化趋势, 其中, 符号为试验值, 线型为计算值。

从图 4 与图 5 可以看出, RP-3 航空煤油及其模型燃料在低温氧化过程中, 大部分组分的摩尔分数随温度的变化趋势吻合较好, 负温度系数 (NTC) 效应区域 (起始点与消失点之间的温度区域)、摩尔分数峰值基本一致。但是, 与模型燃料相比, RP-3 航空煤油低温氧化过程中, 甲醇 (CH_3OH) 的 NTC 效应区域更深, NTC 效应更为

表 1 试验工况及混合气组成 (摩尔分数)

Table 1 Experiment conditions and mixture compositions (mole fraction)

ϕ	RP-3	O_2	He	$n-C_{10}H_{22}$	$n-C_{12}H_{26}$	HMN	MCH	A_1CH_3	O_2	He
0.5	0.005	0.160 35	0.834 65	0.000 7	0.000 5	0.001 5	0.001 8	0.000 5	0.160 5	0.834 5
1.0	0.005	0.080 175	0.914 825	0.000 7	0.000 5	0.001 5	0.001 8	0.000 5	0.080 25	0.914 75



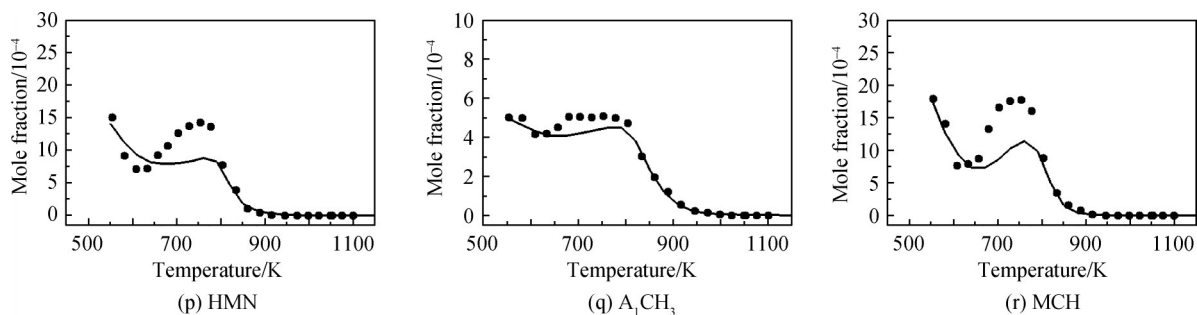
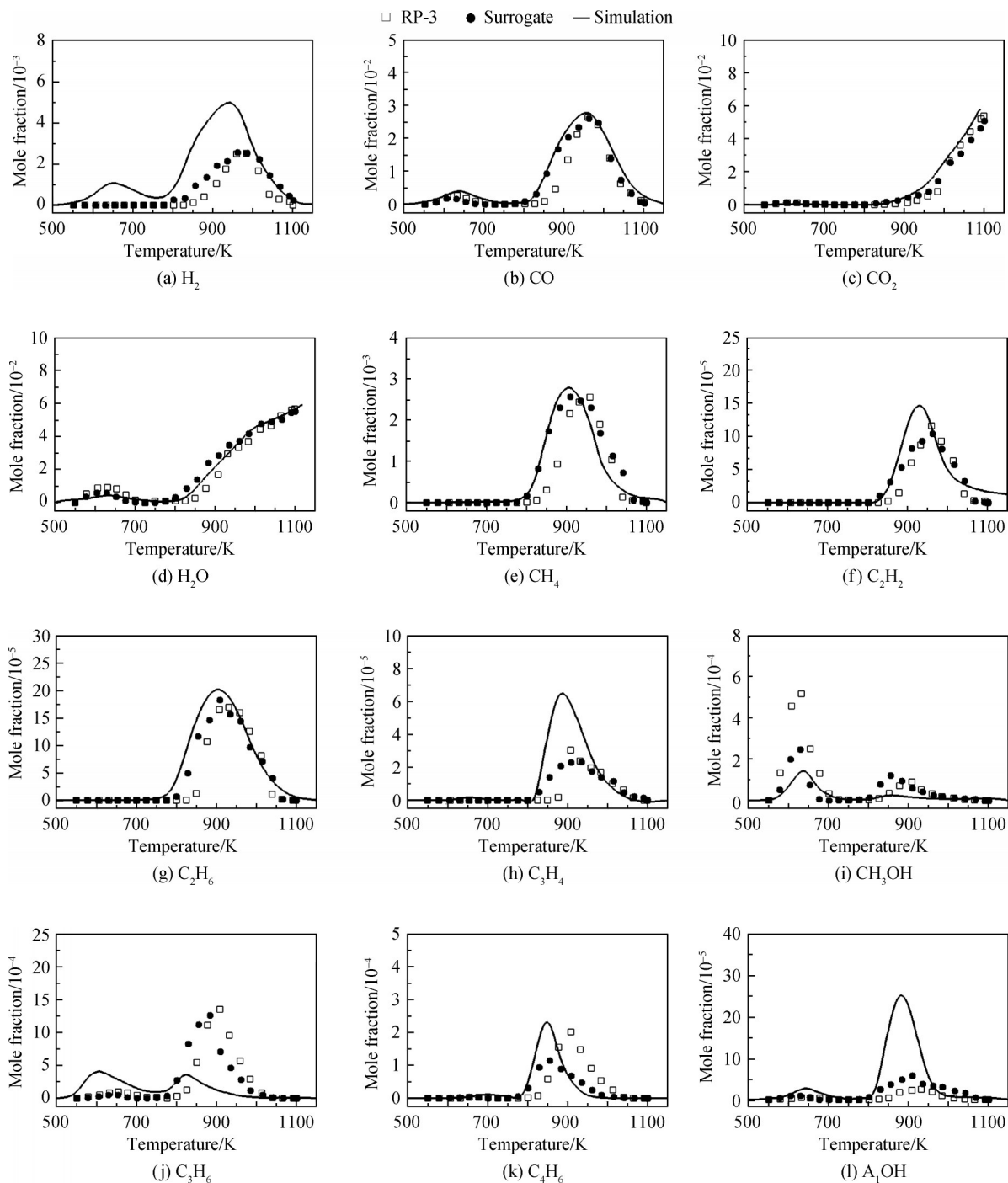


图4 RP-3航空煤油与其模型燃料低温氧化过程中的主要组分摩尔分数实验值和计算值对比($\phi=0.5$)

Fig.4 Comparison of experimental and calculated mole fractions of major components in the low temperature oxidation of RP-3 aviation kerosene and its surrogate fuel ($\phi=0.5$)



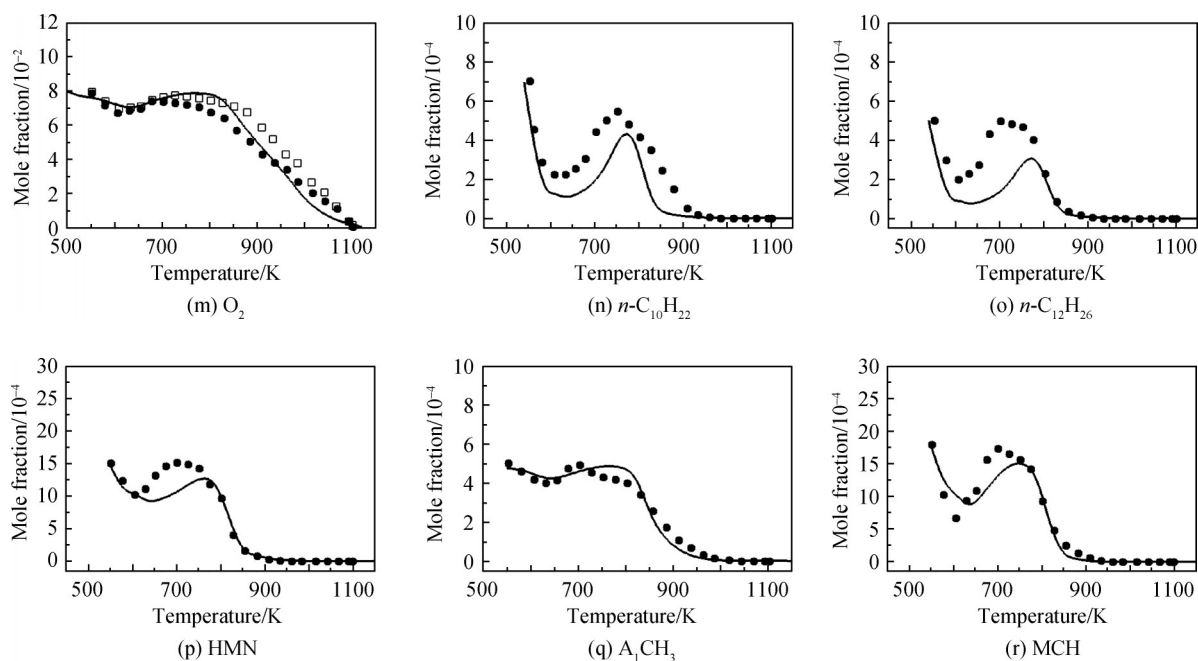


图5 RP-3航空煤油与其模型燃料低温氧化过程中的主要组分摩尔分数试验值和计算值对比($\phi=1.0$)

Fig.5 Comparison of experimental and calculated mole fractions of major components in the low-temperature oxidation of RP-3 aviation kerosene and its surrogate fuel ($\phi=1.0$)

明显;同时,当量比为1.0时,部分组分生成的起始温度更高,丁二烯(1,3- C_4H_6)的摩尔分数峰值也更高。

从图4与图5可以看出,采用模型燃料的简化反应机理计算得到的 CO 、 CO_2 、 H_2O 、甲烷(CH_4)、乙炔(C_2H_2)、乙烷(C_2H_6)、丁二烯(1,3- C_4H_6)的摩尔分数随温度的变化趋势与模型燃料的相应试验值吻合较好(包括NTC效应区域、生成与消耗对应点温度以及摩尔分数峰值)。在氢气(H_2)、丙炔(C_3H_4)、甲醇(CH_3OH)、丙烯(C_3H_6)、苯酚(A_1OH)摩尔分数随温度的变化趋势预测上,虽然整体趋势(包括NTC效应区域、生成与消耗对应点温度)基本一致,但是,在NTC效应区域深度以及摩尔分数峰值上存在差异。

从图4与图5可以看出,RP-3航空煤油及其模型燃料在低温氧化过程中,氧气(O_2)的摩尔分数随温度的变化趋势吻合较好。在当量比为0.5时,正癸烷、正十二烷、异十六烷、甲苯的NTC区域均开始于550 K而结束于750 K,甲基环己烷的NTC区域则开始于550 K而结束于700 K。在当量比为1.0时,正癸烷、正十二烷、异十六烷、甲苯、甲基环己烷的NTC区域均开始于550 K而结束于700 K。同时,采用模型燃料的简化反应机理计算得到的模型燃料中各组分摩尔分数随温度变化的整体趋势与相应试验值基本一致,但是,在

摩尔分数峰值的预测上均存在较小差异。

从上述分析可以看出,在初始压力为0.1 MPa、当量比分别为0.5与1.0时,由正癸烷(摩尔分数为0.14)/正十二烷(0.1)/异十六烷(0.3)/甲基环己烷(0.36)/甲苯(0.1)组成的模型燃料的低温氧化特性与RP-3航空煤油吻合较好。虽然在某些组分的NTC效应和摩尔分数峰值的预测上存在偏差,但是,该模型燃料简化反应机理仍可以较好地预测模型燃料低温氧化过程中主要组分摩尔分数随温度变化的整体趋势。

4 结论

在射流搅拌器中对压力为0.1 MPa、温度范围为550~1100 K、当量比分别为0.5与1.0工况条件下RP-3航空煤油及其模型燃料的低温氧化特性进行了试验测试。同时,构建了该模型燃料的简化反应机理,对模型燃料的低温氧化特性进行了数值计算,并与相应试验值进行了对比分析,得到如下结论:

1) 由正癸烷(摩尔分数为0.14)/正十二烷(0.1)/异十六烷(0.3)/甲基环己烷(0.36)/甲苯(0.1)组成的模型燃料的低温氧化特性与RP-3航空煤油吻合较好。

2) RP-3航空煤油模型燃料的简化反应机理包括181个组分和872个反应。

3) 模型燃料的简化反应机理可以较好地预测模型燃料低温氧化过程中主要组分摩尔分数随温度变化的整体趋势。但是,在某些组分摩尔分数的预测上与试验数据存在差异,在下阶段工作中该模型燃料的简化反应机理尚需进一步优化和完善。

参考文献:

- [1] MASIOL M, HARRISON R M. Aircraft engine exhaust emissions and other airport-related contributions to ambient air pollution: a review[J]. *Atmospheric Environment*, 2014, 95:409-455.
- [2] MENSCH A, SANTORO R J, LITZINGER T A, et al. Sooting characteristics of surrogates for jet fuels[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(6):1097-1105.
- [3] KIM D, MARTZ J, VIOLI A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(6):1489-1498.
- [4] MUNZAR J D, AKIH-KUMGEH B, DENMAN B M, et al. An experimental and reduced modeling study of the laminar flame speed of jet fuel surrogate components[J]. *Fuel*, 2013, 113:586-597.
- [5] ABIANEH O S, CHEN C P, MAHALINGAM S. Numerical modeling of multi-component fuel spray evaporation process[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 69:44-53.
- [6] NARAYANASWAMY K, PITSCH H, PEPIOT P. A component library frame work for deriving kinetic mechanisms for multi-component fuel surrogates: application for jet fuel surrogates[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 165:288-309.
- [7] ALEKSEEV V A, SOLOVIOVA-SOKOLOVA J V, MATVEEV S S, et al. Laminar burning velocities of *n*-decane and binary kerosene surrogate mixture[J]. *Fuel*, 2017, 187:429-434.
- [8] 张英佳, 黄佐华, 王金华, 等. 激波管研究煤油/空气混合气的自着火特性[J]. *科学通报*, 2011, 56(1):85-93.
ZHANG Yingjia, HUANG Zuohua, WANG Jinhua, et al. Shock tube study on auto-ignition characteristics of kerosene/air mixtures[J]. *Chinese Science Bull*, 2011, 56(1):85-93. (in Chinese)
- [9] ZHANG C H, 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.
- [10] 唐洪昌, 张昌华, 李萍, 等. 煤油自点火特性的实验研究[J]. *物理化学学报*, 2012, 28(4):787-791.
TANG Hongchang, ZHANG Changhua, LI Ping, et al. Experimental study of autoignition characteristics of kerosene[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2012, 28(4):787-791. (in Chinese)
- [11] MAO Y B, YU L, WU Z Y, 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.
- [12] CHEN B H, LIU J Z, YAO F, et al. Ignition delay characteristics of RP-3 under ultra-low pressure (0.01–0.1 MPa)[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 210:126-133.
- [13] LIANG J H, WANG S, HU H H, et al. Shock tube study of kerosene ignition delay at high pressures[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2012, 55(6):947-954.
- [14] 刘宇, 孙震, 罗睿, 等. CH₄/RP-3 航空煤油混合燃料燃烧特性的实验研究[J]. *推进技术*, 2018, 39(5):1177-1186.
LIU Yu, SUN Zhen, LUO Rui, et al. Experimental study on combustion characteristics of CH₄/RP-3 kerosene mixed fuel[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2018, 39(5):1177-1186. (in Chinese)
- [15] LIU Y X, YU D, TIAN D X, et al. An experimental and modeling study of oxidation of 1, 2, 4-trimethylcyclohexane with JSR[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, 37(1):437-444.
- [16] LIU J, HU E J, ZENG W, et al. A new surrogate fuel for emulating the physical and chemical properties of RP-3 kerosene[J]. *Fuel*, 2020, 259:116210.1-116210.9.
- [17] GAO Z H, HU E J, XU Z H, et al. Low to intermediate temperature oxidation studies of dimethoxymethane/*n*-heptane blends in a jet-stirred reactor[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 207:20-35.
- [18] WESTBROOK C K, PITZ W J, HERBINET O, et al. A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of *n*-alkane hydrocarbons from *n*-octane to *n*-hexadecane[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(1):181-199.
- [19] HERBINET O, MARQUAIRE P M, BATTIN-LECLERC F, et al. Thermal decomposition of *n*-dodecane: experiments and kinetic modeling[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2007, 78(2):419-429.
- [20] OLCZANSKI E, BURCAT A. Decane oxidation in a shock tube [J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2006, 38(12):703-713.
- [21] ZEPPIERI S P, KLOTZ S D, DRYER F L. Modeling concepts for larger carbon number alkanes: a partially reduced skeletal mechanism for *n*-decane oxidation and pyrolysis[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(2):1587-1595.
- [22] XI S H, XUE J, WANG F, et al. Reduction of large-size combustion mechanisms of *n*-decane and *n*-dodecane with an improved sensitivity analysis method[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 222:326-335.
- [23] OEHLSCHLAEGER M A, STEINBERG J, WESTBROOK C K, et al. The autoignition of iso-cetane at high to moderate temperatures and elevated pressures: shock tube experiments and kinetic modeling[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(11):2165-2172.
- [24] WEBER B W, PITZ W J, MEHL M, et al. Experiments and modeling of the autoignition of methylcyclohexane at high

- pressure[J]. Combustion and Flame, 2014, 161 (8): 1972 - 1983.
- [25] NAKAMURA H, DARCY D, MEHL M, et al. An experimental and modeling study of shock tube and rapid compression machine ignition of *n*-butylbenzene/air mixtures[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(1):49-64.
- [26] METCALFE W K, DOOLEY S, DRYER F L. Comprehensive detailed chemical kinetic modeling study of toluene oxidation[J]. Energy and Fuels, 2011, 25(11):4915-4936.
- [27] MORRIS M D. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments[J]. Technometrics, 1991, 33(2):161-174.
- [28] CHANG Y C, JIA M, LI Y P, et al. Development of a skeletal mechanism for diesel surrogate fuel by using a decoupling methodology[J]. Combustion and Flame, 2015, 162 (10): 3785-3802.
- [29] ELLIOTT L, INGHAM D B, KYNE A G, et al. Genetic algorithms for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2004, 30(3):297-328.
- [30] METCALFE W K, BURKE S M, AHMED S S, et al. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C₁-C₂ hydrocarbon and oxygenated fuels[J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2013, 45(2):638-675.

(编辑:王碧珺)