

正十烷简化机理的构建及其在发动机燃烧数值模拟中的应用^{*}

尹 柔^{1,2}, 薛 洁^{2,3}, 王静波^{1,2}, 李象远^{1,2}

(1. 四川大学 化学工程学院, 四川 成都 610065;
2. 四川大学 空天动力燃烧与冷却教育部工程研究中心, 四川 成都 610065;
3. 四川大学 原子与分子物理研究所, 四川 成都 610065)

摘 要: 为了预测发动机点火包线和贫/富油极限等关键性能, 迫切需要发展航空燃料及其典型组分的高精度化学动力学模型。针对燃料典型组分正十烷, 采用自主开发的机理生成程序 ReaxGen 构建了其燃烧详细机理 (1499 种组分、5713 步反应)。为了验证机理的合理性与可靠性, 在当量比 $\Phi=0.5 \sim 2.0$, 压力 $p=0.1 \sim 8\text{MPa}$ 的宽工况条件下进行了点火延迟模拟验证, 结果表明, 本文提出的正十烷详细机理在较宽的温度、压力和当量比条件下具有较高的模拟精度。为获得适用于发动机燃烧模拟的高精度简化机理, 基于误差传播的直接关系图方法简化了正十烷燃烧详细机理, 得到包含 709 种组分、2793 步反应的正十烷半详细机理。进一步在高温范围 (1000~1500K), 采用路径通量分析方法简化得到含 77 种组分、359 个反应的骨架机理。获得的骨架机理能够合理描述正十烷在高温下的燃烧特性, 且该骨架机理尺度规模可用于基于火焰面模型的燃烧数值模拟。基于此高精度的骨架机理模型, 结合火焰面生成流形湍流燃烧模型, 采用大涡模拟方法进行了航空发动机环形燃烧室单头部扇形的燃烧模拟, 初步获得了非稳态流场结构, 其中温度模拟结果与实验值基本符合。

关键词: 正十烷; 简化机理; 直接关系图法; 路径通量法; 燃烧数值模拟

中图分类号: V231.3 文献标识码: A 文章编号: 1001-4055 (2021) 08-1876-07

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 190789

Reduced Mechanism for *n*-Decane Combustion and Its Application in Numerical Simulation of Aeroengine Combustor

YIN Rou^{1,2}, XUE Jie^{2,3}, WANG Jing-bo^{1,2}, LI Xiang-yuan^{1,2}

(1. College of Chemical Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China;
2. Engineering Research Center of Combustion and Cooling for Aerospace Power, Ministry of Education, Sichuan University, Chengdu 610065, China;
3. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

Abstract: In order to predict key performances such as engine ignition envelope and lean/rich fuel limit, there is an urgent need to develop high-precision chemical kinetic models of aviation fuel and its typical compo-

^{*} 收稿日期: 2019-11-04; 修订日期: 2020-05-06。

基金项目: 国家自然科学基金 (91641120; 91741201)。

作者简介: 尹 柔, 硕士生, 研究领域为碳氢燃料机理构建与简化。E-mail: 494338214@qq.com

通讯作者: 王静波, 博士, 研究员, 研究领域为航空燃料反应机理与燃烧模拟。E-mail: wangjingbo@scu.edu.cn

引用格式: 尹 柔, 薛 洁, 王静波, 等. 正十烷简化机理的构建及其在发动机燃烧数值模拟中的应用[J]. 推进技术, 2021, 42 (8): 1876-1882. (YIN Rou, XUE Jie, WANG Jing-bo, et al. Reduced Mechanism for *n*-Decane Combustion and Its Application in Numerical Simulation of Aeroengine Combustor [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2021, 42 (8): 1876-1882.)

nents. In this work, focusing on the typical component surrogate of *n*-decane in aviation fuel, a detailed mechanism for *n*-decane combustion including 1499 species and 5713 reactions was developed based on the automatic mechanism generation program of ReaxGen. In order to verify the reliability of the mechanism, the ignition delay simulation was carried out under the equivalence ratio of 0.5~2.0 and pressure of 0.1~8MPa. The results show that the detailed mechanism of *n*-decane has a good performance under a wide range of temperature, pressure and equivalence ratio. In order to obtain a high-precision simplified mechanism for aeroengine combustion simulation, the semi-detailed mechanism of *n*-decane containing 709 species and 2793 reactions was generated through the method of directed relation graph with error propagation. Further, in the high temperature range of 1000~1500K, the skeletal mechanism of *n*-decane of 77 species and 359 reactions was developed by the paths flux analysis method. The skeletal mechanism reasonably describes the combustion characteristics of *n*-decane at high temperature, and the scale of the skeletal mechanism is suitable for the numerical simulation of combustion based on the flamelet generated manifold method. Based on the high precision skeletal mechanism, combining with the turbulent combustion model of flamelet generated manifold, the large eddy simulation method is used to simulate the single-head fan of the annular aeroengine combustor, and the unsteady flow field is preliminarily obtained. The results of temperature simulation are consistent with the experimental values.

Key words: *n*-decane; Reduced mechanism; Directed relation graph with error propagation; Paths flux analysis; Numerical combustion simulation

1 引言

航空飞行器中使用的航空燃料组成十分复杂,主要包括烯烃、链烷烃、环烷烃和芳香烃等碳氢化合物。由于实际燃料包含的组分过多,通常选用燃料中几个重要的组分作为替代燃料来研究燃料的燃烧特性。此外,对于大分子碳氢燃料燃烧详细机理,通常涉及数以百计的物种和数以千计的基元反应,目前通常采用机理自动生成程序构建详细机理。国际上主流的详细机理自动生成程序主要有:布拉格技术研究所 Karaba 等开发的 RNG 程序^[1]、美国麻省理工大学 Green 课题组开发的 RMG 程序^[2]、约翰克普勒大学 Blurock 开发的 REACTION 程序^[3]、法国南锡大学 Battin-Leclerc 等开发的 EXGAS 程序^[4-5]、意大利米兰理工大学 Ranzi 等开发的 MAMOX++ 程序^[6-7]、以及四川大学燃烧动力学中心李象远团队开发的 Reax-Gen 程序^[8]等。

正十烷是航空燃料的重要组分,是喷气燃料和柴油替代燃料中的长直链烷烃组分的典型代表,许多研究者对其进行了详细机理和简化机理的构建。2008年,Biet等^[9]采用 EXGAS 程序自动生成了正十烷详细机理,在宽温度范围(650~1200K),高压(1.2, 5, 8MPa),当量比为 0.5, 1.0, 2.0 的条件下进行了点火延迟时间的验证。Westbrook等^[10]构建了详细的化学动力学机理来描述 C₈-C₁₆ 正构烷烃的裂

解和氧化反应,其中正十烷机理包含 940 种组分、3878 步反应,在 667~1250K 的宽温度范围内,压力 5MPa,当量比为 0.5~2.0 的条件下验证了点火延迟时间。在含有正十烷组分的燃料机理构建方面,2009年,Honnet等^[11]构建了煤油双组分替代模型正十烷和 1,2,4-三甲基苯的简化机理,包含 122 种组分和 900 步反应。2011年,Ramirze等^[12]提出了 B30 生物柴油的替代燃料模型,组分为正十烷、辛酸甲酯和甲基萘,最终提出包含 1964 种组分、7748 步反应包含低温与高温燃烧反应的详细机理。

在正十烷燃烧的实验研究方面,已有许多研究者进行了不同条件下的点火延迟时间和层流火焰速度实验。碳氢燃料的燃烧机理中包含大量物种和基元反应,如此庞大的化学反应模型耦合到流场计算中会出现“刚性问题”和计算效率的问题,因此必须进行化学反应机理简化。目前主要的机理简化方法有:路径通量法(Paths Flux Analysis, PFA)^[13]、直接关系图法(Directed Relation Graph, DRG)^[14]和通量投影树法(Flux Projection Tree, FPT)^[15]等。

本文针对燃料典型组分正十烷,基于机理自动生成程序 ReaxGen 构建其燃烧详细机理,结合机理简化方法获得高精度的骨架机理;基于火焰面生成流形方法(Flamelet Generated Manifold, FGM)^[16],实现骨架机理在航空发动机燃烧室单头部燃烧模拟中的应用。

2 正十烷燃烧详细机理及简化机理的构建

2.1 正十烷燃烧详细机理的构建

本文中,正十烷燃烧的详细机理主要包括两部分:基于 AramcoMech 1.3^[17]的 C_0 - C_2 小分子核心机理和 ReaxGen 程序自动生成的扩展机理。ReaxGen 程序根据组分反应中心的结构自动生成对应的产物,其反应动力学参数由反应类规则确定,生成的产物组分按照反应类规则继续迭代产生一系列反应,再结合核心机理,得到高碳烃燃烧的详细机理^[7]。该程序主要包含 10 种高温反应类型和 19 种低温反应类型^[18-20]。

正十烷详细机理中单分子裂解的动力学参数来源于 Curran 等^[21-23],氢提取反应的动力学参数来源于 Warnatz 等^[24],同时考虑到烷基与氧分子加成反应的原始数据采用估计值,本文针对这类反应主要采用了 Westbrook 等^[10]的最新数据。扩展机理组分的热力学数据主要采用 Benson^[25]提出的基团贡献法计算获得,组分的输运数据由物质的临界参数计算得到^[26],而核心机理组分的热力学数据和输运数据主要来自文献^[17]。基于上述方法,本文最终构建了包含 1499 种组分、5713 步反应的正十烷燃烧详细机理。

2.2 正十烷燃烧简化机理的构建

在进行发动机燃烧数值模拟时,计算量随组分或者基元反应数量的增加呈非线性增长,因此对详细机理进行简化是十分必要的。在 DRG 方法中^[14],用直接关系图来描述物种间通过化学反应的耦合,可以得到尺寸大小不同的简化机理。但在 DRG 方法中存在误差,为此,Peiopt-Desjardins 等^[27]提出基于误差传播的直接关系图方法(Directed Relation Graph with Error Propagation, DRGEP)。而 PFA 方法^[13]引入了更加复杂的计算相互作用系数的方法,在该方法中组分的产生与消耗对相互作用系数的贡献被分别计算,并且由于考虑了多通道的贡献,PFA 在删除非重要物种方面的效率高于 DRG。

如图 1 所示,采用自主开发的机理简化程序 ReaxRed^[28],采用 DRGEP 方法简化得到包含 709 种组分、2793 步反应的正十烷半详细机理。基于该半详细机理,在压力 1.3MPa,当量比 0.5, 1.0 和 2.0 以及温度 1000, 1200, 1400K 的工况下,采用 PFA 方法简化,获得适用于高温范围(1000~1500K)含 77 种组分、359 个反应的骨架机理。

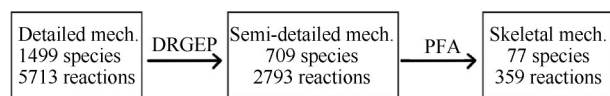


Fig. 1 Reduction process of the combustion mechanism for *n*-decane

3 正十烷燃烧详细机理及简化机理的验证

3.1 激波管点火延迟和层流火焰速度模拟

在 Chemkin-Pro 程序包^[29]中使用零维封闭均相反应器进行激波管点火延迟模拟,点火延迟时间定义为从反应起始时刻到温度随时间变化率达到最大时刻的时间间隔。由于非理想边界层效应以及非理想流体力学会造成点火强能量的释放,传统的 CONV 方法(Constant Internal Energy and Volume)对于高压点火延迟时间模拟会存在较大偏差。本文采用 CONP 方法(Constant Enthalpy and Pressure)结合 VITM 参数(Volume as a Function of Time)来描述上述非理想设备效应。选择典型的线性压力梯度 $(dp/dt)(1/p_0)=3\%/ms$ 描述设备效应,其中 p_0 为初始压力,根据 p_0 和时间 t 可以给出其它时刻的压力值;并通过压力 p 与体积 V 的等熵方程 $(p_2/p_1)=(V_1/V_2)^\gamma$ 获得体积变化曲线作为输入文件,其中 γ 是绝热指数。

Chemkin-Pro 程序包也用于层流火焰速度的模拟,首先通过设置定梯度值为 0.02 和曲线值等参数使模拟结果收敛到与网格设置无关。采用混合平均扩散法计算输运系数,由于一维层流流动的能量方程中,包含了传导的热流——扩散项,即热扩散效应对层流火焰速度有影响^[30],因此文本在模拟层流火焰速度时,考虑了热扩散 Soret 效应。表 1 总结了正十烷燃烧的实验数据,包括点火延迟时间和层流火焰速度,用于验证机理的合理性。

3.2 正十烷燃烧详细机理与半详细机理的验证

在当量比 $\Phi=0.5\sim 2.0$, 压力 $p=0.1\sim 8.4MPa$ 的宽工况条件下,对详细机理和半详细机理进行了点火延迟实验验证。点火延迟模拟结果如图 2 所示,其中点线代表详细机理,虚线代表半详细机理,实线代表骨架机理。从图中可以看出,在 $\Phi=0.5$, 宽压力范围的条件,详细机理与半详细机理均表现出良好的模拟效果;在 $\Phi=1.0$, 低中压条件下,机理模拟结果对点火延迟实验数据的重现性良好,很好地呈现了负温度效应的变化趋势,在高压低温下(4MPa, 830~930K)的点火延迟表现出较大误差,最大误差为 56%。这种偏差一方面是由于激波管进行高压实验

Table 1 Chosen experimental data used for validations of *n*-decane from literature

Combustion parameters	<i>T</i> /K	<i>p</i> /MPa	Φ	Reference
Laminar flame speed	360	0.1	0.7~1.4	[31]
	400	0.1	0.7~1.4	[31]
	470	0.1	0.7~1.3	[31]
Ignition delay time	1174~1668	0.1	0.5~1.0	[32]
	764~1306	1.3	0.5~2.0	[33]
	835~1272	4.0	1.0	[34]
	990~1168	8.0	0.5	[35]

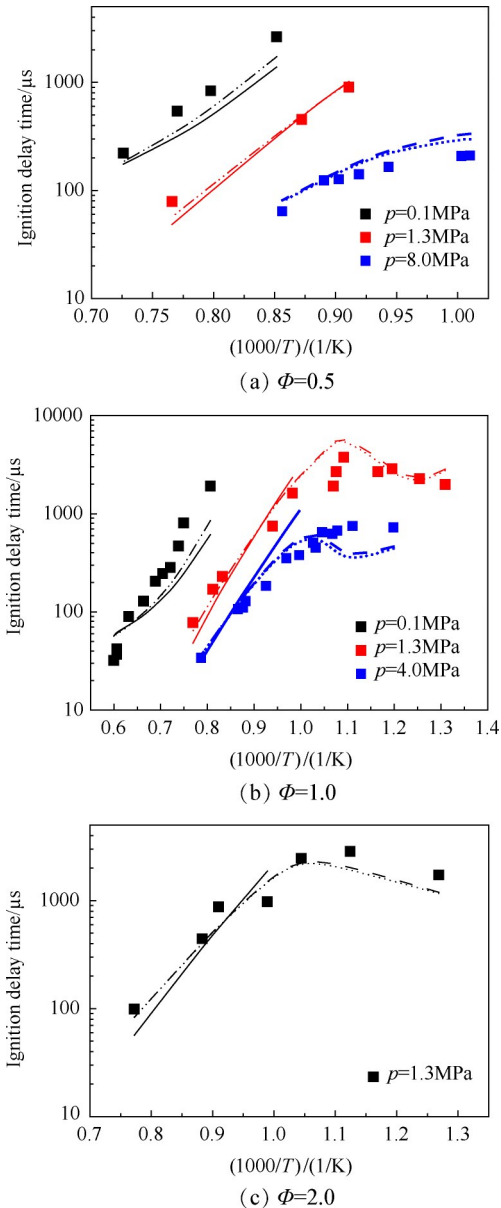


Fig. 2 Comparison of experimental ignition delay time with simulation results for *n*-decane combustion

时由于压力抖动带来的测量误差^[35],另一方面也说明正十烷在高压低温下的机理模型有待进一步研究;在 $\Phi=2.0$ 时,点火延迟模拟值实验数据符合较好,

良好地呈现出负温度曲线的变化趋势。在高于1000K的高温段,详细机理、半详细机理和骨架机理的模拟效果表现出较好的一致性,仅在 $\Phi=1.0, p=4.0\text{MPa}, T=1000\text{K}$ 附近存在较大误差。

3.3 正十烷骨架机理的验证

在 $\Phi=0.5\sim 2.0, p=0.1\sim 4.0\text{MPa}, T=1004\sim 1668\text{K}$ 下,验证了正十烷骨架机理的高温点火延迟时间,模拟结果与实验结果的对比如图2所示。结果表明,在 $\Phi=0.5\sim 2.0, p=1.3\text{MPa}$ 下,该骨架机理可以很好地预测正十烷/空气混合物在高温下的点火延迟时间,在 $p=4.0\text{MPa}$ 下,部分模拟结果较差,说明其高压低温的动力学还有待进一步研究。通过与实验结果对比,整体说明了骨架机理在所研究的温度范围内的燃烧适用性。

在 $T=360, 400, 470\text{K}, p=0.1\text{MPa}$ 以及 $\Phi=0.7\sim 1.4$ 条件下进行了骨架机理的层流火焰速度验证。模拟与实验的对比结果如图3所示,其中点表示实验数据,实线为模拟结果,模拟结果与实验误差均在15%以内,表明该骨架机理模型可以较好地预测正十烷/空气混合物在各种当量比和温度下的层流火焰速度。

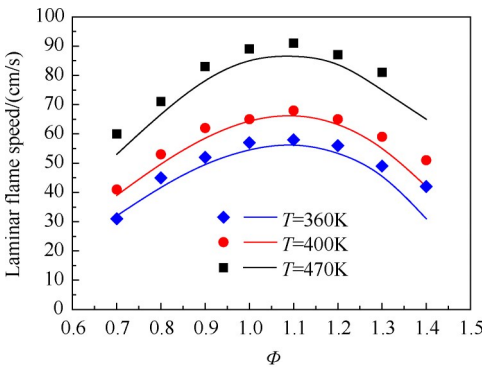


Fig. 3 Comparison of experimental laminar flame speed with simulation results of skeletal mechanism for *n*-decane combustion ($p=0.1\text{MPa}$)

在 $T=300\text{K}, p$ 分别为0.1MPa和1.3MPa, $\Phi=0.7\sim 1.5$ 的条件下,对比了详细机理、半详细机理与骨架机理的绝热火焰温度,模拟结果如图4所示,可以看出三者之间差别不大,说明骨架机理具有较好的绝热火焰温度再现性,也表明了简化机理的合理性。

4 正十烷骨架机理在燃烧数值模拟中的应用

基于上述简化的正十烷燃烧骨架机理模型,结合高精度湍流燃烧模型FGM方法^[16],采用大涡模拟程序SprayFGMfoam^[36]进行了航空发动机环形燃烧室单头部扇形的燃烧模拟。徐宝鹏等^[36]将FGM燃烧模型植

入到 OpenFOAM 中定制求解器,实现了 SprayFGM-Foam 程序的开发。计算采用本文简化的 77 种组分、359 步反应的正十烷高温骨架机理,网格规模 2100 万,其中结构化网格 1900 万,非结构化网格 300 万。对燃烧室头部冷却结构和旋流器区域采用非结构网格处理几何的复杂性,对主燃烧区和火焰筒外部区域采用结构网格提高计算效率。采用开源软件 FlameMaster 构建 FGM 层流火焰数据库,采用 β 概率密度函数表征湍流对燃烧的影响构建湍流火焰数据库。

在计算过程中,采用 PIMPLE 算法求解压力场和速度场之间的耦合问题,该方法在每个时间步长内用 SIMPLE 稳态算法求解,时间步长的步进用 PISO 算法完成,结合了两种算法的特点,可以采用较大的 CFL 数,提高计算效率。采用有限体积法离散 Navier-Stokes 方程,保证方程的守恒性,时间采用二阶隐式格式,动量方程采用二阶 LUST 格式,能量方程采用二阶 TVD 格式。湍流模型选用单方程亚网格尺度

SGS 湍流模型,采用拉格朗日法实现喷雾与流场的双向耦合。计算采用的入口空气流量为 0.5089 kg/s,入口压力 900800 Pa,入口温度 703.3 K。燃烧室入口采用定质量流量边界,燃烧室出口采用速度对流边界和压力穿透边界条件,固体壁面为无滑移绝热边界。

计算获得的航空发动机单头部非稳态流场模拟结果如图 5 所示。图 5 分别为单头部数值模拟中间截面热态的瞬时和平均的压力、密度、温度和速度云图。平均参数分布云图中保留了瞬时参数分布的典型特征,但它抹平了参数脉动信息,参数变化更加平滑,时均值的最大值明显小于瞬时最大值,例如温度时均最大值只有 2300 K,而瞬时最大值为 2500 K,因此如果只根据时均参数设计燃烧室,会低估实际存在的极端条件,将会对燃烧室的运行带来危险。实验测得燃烧室出口最高温度和平均温度分别为 1478.6 K 和 1322.0 K,燃烧模拟获得的初步流场中最高温度为 1420.4 K,平均温度 1359.9 K,与实验值基本符合。

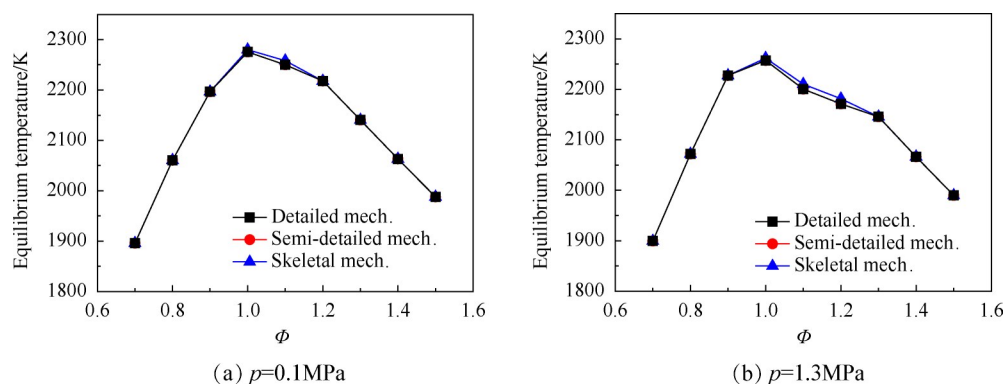
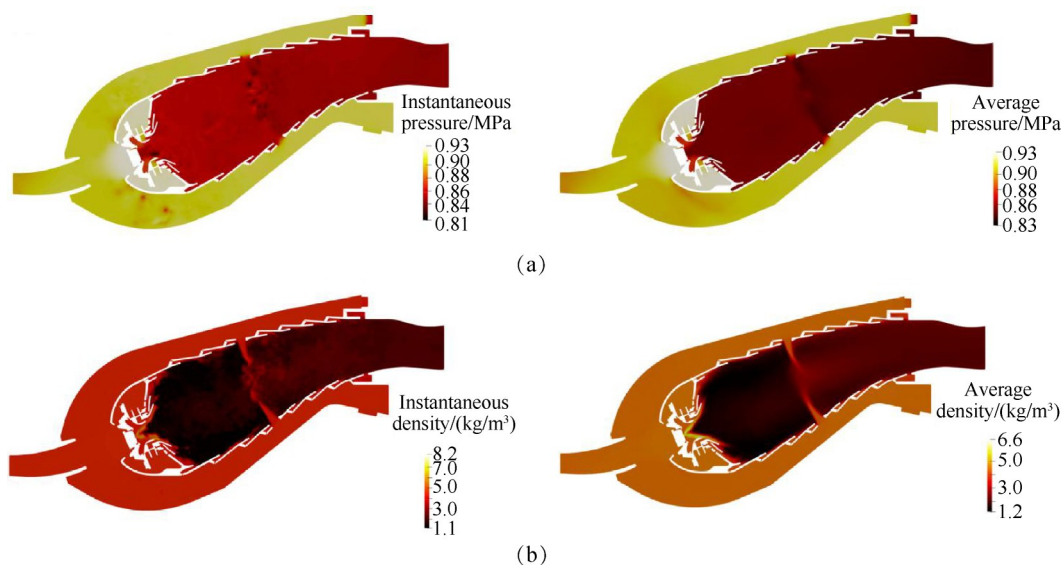


Fig. 4 Comparison of simulated adiabatic flame temperatures with the detailed, semi-detailed and skeletal mechanism for n -decane combustion ($T=300\text{K}$)



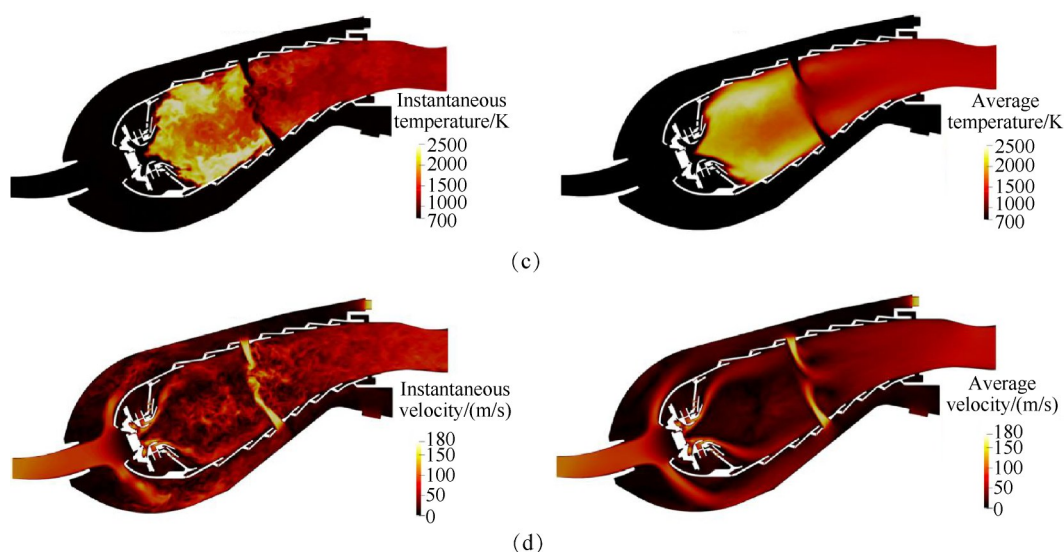


Fig. 5 Instantaneous and average of pressure, density, temperature and velocity clouds in the middle section of aeroengine combustor

5 结 论

本文采用机理自动生成程序 ReaxGen 得到正十烷的燃烧详细机理(1499 种组分、5713 步反应),通过 DRGEP 方法简化得到包含 709 种组分、2793 步反应的半详细机理,以及针对高温工况条件(1000~1500K)进行简化,得到含有 77 种组分、359 个反应的骨架机理。对正十烷详细机理及简化机理进行了动力学模拟验证与对比,并结合骨架机理进行了燃烧数值模拟,得到以下主要结论:

(1)详细机理和半详细机理点火延迟时间均具有较高的模拟精度,较好地呈现了点火延迟时间的负温度效应。

(2)骨架机理在高温段的点火延迟时间模拟结果与详细机理、半详细机理符合较好,且与实验结果相差不大。此外,骨架机理能够很好地预测层流火焰速度,具有较好的绝热火焰温度再现性,表明了该简化机理的合理性及其在所研究的温度范围内良好的燃烧适用性。

(3)采用 SprayFGMFoam 大涡模拟程序,基于 FGM 湍流燃烧模型,结合构建的高精度小尺寸骨架机理,进行了航空发动机环形燃烧室单头部扇形的燃烧模拟,初步获得了非稳态流场信息,其中温度模拟结果与实验值基本符合。

致 谢:感谢国家自然科学基金的资助。

参考文献

[1] Karaba A, Zamostny P, Lederer J, et al. Generalized Model of Hydrocarbons Pyrolysis Using Automated Reac-

tions Network Generation[J]. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2013, 52(44): 15407–15416.

[2] Green W H, Barton P I, Bhattacharjee B, et al. Computer Construction of Detailed Chemical Kinetic Models for Gas-Phase Reactors [J]. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2001, 40(23): 5362–5370.

[3] Blurock E S. Detailed Mechanism Generation. (1) Generalized Reactive Properties as Reaction Class Substructures[J]. *Cheminform*, 2004, 35(39).

[4] Battin-Leclerc F, Warth V, Bounaceur R, et al. The Oxidation of Large Alkylbenzenes: An Experimental and Modeling Study[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 35(1): 349–356.

[5] Husson B, Bounaceur R, Tanaka K, et al. Experimental and Modeling Study of the Oxidation of *n*-Butylbenzene [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(4): 1399–1416.

[6] Pelucchi M, Somers K P, Yasunaga K, et al. An Experimental and Kinetic Modeling Study of the Pyrolysis and Oxidation of *N*-C₃-C₅ Aldehydes in Shock Tubes [J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(2): 265–286.

[7] Dagaut P, Ristori A, Frassoldati A, et al. Experimental and Semi-Detailed Kinetic Modeling Study of Decalin Oxidation and Pyrolysis over a Wide Range of Conditions [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34(1): 289–296.

[8] 李 军, 邵菊香, 刘存喜, 等. 碳氢燃料热裂解机理及化学动力学模拟[J]. *化学学报*, 2010, 68(3).

[9] Biet J, Hakka M H, Warth V, et al. Experimental and Modeling Study of the Low-Temperature Oxidation of Large Alkanes[J]. *Energy and Fuels*, 2008, 22(4).

[10] Westbrook C K, Pitz W J, Herbinet O, et al. A Detailed Chemical Kinetic Reaction Mechanism for *n*-Alkane Hy-

- drocarbons from *n*-Octane to *n*-Hexadecane [J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(1): 181–199.
- [11] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A Surrogate Fuel for Kerosene [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1): 485–492.
- [12] Ramirez H P, Hadj-Ali K, Diévar P, et al. Oxidation of Commercial and Surrogate Bio-Diesel Fuels (B30) in a Jet-Stirred Reactor at Elevated Pressure: Experimental and Modeling Kinetic Study [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(1): 375–382.
- [13] Sun W T, Chen Z, Gou X L, et al. A Path Flux Analysis Method for the Reduction of Detailed Chemical Kinetic Mechanisms [J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(7): 1298–1307.
- [14] Lu T F, Law C K. A Directed Relation Graph Method for Mechanism Reduction [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1): 1333–1341.
- [15] Liu A K, Jiao Y, Li S H, et al. Flux Projection Tree Method for Mechanism Reduction [J]. *Energy and Fuels*, 2014, 28(8): 5426–5433.
- [16] Verhoeven L M, Ramaekers W J S, Van Oijen J A, et al. Modeling Non-Premixed Laminar Co-Flow Flames Using Flamelet-Generated Manifolds [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(1): 230–241.
- [17] Metcalfe W K, Sinéad M Burke, Ahmed S S, et al. A Hierarchical and Comparative Kinetic Modeling Study of C_1 – C_2 Hydrocarbon and Oxygenated Fuels [J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2013, 45(10).
- [18] Muharam Y, Warnatz J. Kinetic Modelling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons Using an Automatic Mechanism Generation [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2007, 9(31).
- [19] 郭俊江, 李树豪, 谈宁馨, 等. 正庚烷低温燃烧机理构建 [J]. *工程热物理学报*, 2014, 35(11): 2298–2302.
- [20] Curran H J, Gaffuri P, Pitz W J, et al. A Comprehensive Modeling Study of *n*-Heptane Oxidation [J]. *Combustion and Flame*, 1998, 114(1–2): 149–177.
- [21] Wang S Q, Miller D L, Cernansky N P, et al. A Flow Reactor Study of Neopentane Oxidation at 8 Atmospheres: Experiments and Modeling [J]. *Combustion and Flame*, 1999, 118(3): 415–430.
- [22] Curran H J, Gaffuri P, Pitz W J, et al. A Comprehensive Modeling Study of Iso-Octane Oxidation [J]. *Combustion and Flame*, 2002, 129(3): 253–280.
- [23] Zhou C W, Li Y, Ultan B, et al. An Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study of 1,3-Butadiene Combustion: Ignition Delay Time and Laminar Flame Speed Measurements [J]. *Combustion and Flame*, 2018, 197: 423–438.
- [24] Nehse M, Jürgen Warnatz, Chevalier C. Kinetic Modeling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1996, 26(1).
- [25] Benson S W. Thermochemical Kinetics [M]. *New York: John Wiley and Sons*, 1968.
- [26] Holley A T, You X Q, Dames E, et al. Sensitivity of Propagation and Extinction of Large Hydrocarbon Flames to Fuel Diffusion [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1): 1157–1163.
- [27] Peiopt-Desjardins P, Pitsch H. An Efficient Error-Propagation-Based Reduction Method for Large Chemical Kinetic Mechanisms [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 154(1–2): 67–81.
- [28] 李树豪, 刘建文, 李 瑞, 等. 碳氢燃料燃烧机理的自动简化 [J]. *高等学校化学学报*, 2015, 36(8).
- [29] Anon. ANSYS Chemkin-Pro 17.1 [M]. *Canonsburg: Reaction Design*, 2016.
- [30] 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(1): 353–379.
- [31] Kumar K, Sung C J. Laminar Flame Speeds and Extinction Limits of Preheated *n*-Decane/ O_2/N_2 and *n*-Dodecane/ O_2/N_2 Mixtures [J]. *Combustion and Flame*, 2007, 151(1–2): 209–224.
- [32] Pei S S, Wang H Y, Zhang X W, et al. Experimental Measurement of Ignition Delay Times of Thermally Cracked *n*-Decane in a Shock Tube [J]. *Energy and Fuels*, 2017, 31(3): 3262–3269.
- [33] Pfahl U, Fieweger K, Adomeit G. Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions [J]. *Symposium on Combustion*, 1996, 26(1): 781–789.
- [34] Malewicki T, Brezinsky K. Experimental and Modeling Study on the Pyrolysis and Oxidation of *n*-Decane and *n*-Dodecane [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34(1): 361–368.
- [35] Zhukov V P, Sechenov V A, Starikovskii A Y. Autoignition of *n*-Decane at High Pressure [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 153(1–2): 130–136.
- [36] Li T, Kong F F, Xu B P, et al. Turbulent Combustion Modeling Using a Flamelet Generated Manifold Approach—a Validation Study in OpenFOAM [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, 40(8): 1197–1210.

(编辑:朱立影)