

DOI: 10.7652/xjtuxb201907006

高温下乙醇/异辛烷混合物着火特性的 反应动力学研究

秦明元, 何本壮, 陈日新, 樊祥山, 王井山, 王锡斌

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 为探究高温条件下在异辛烷中掺混乙醇对其着火滞燃期的影响,对乙醇/异辛烷混合燃料的自着火特性进行了实验和理论研究。通过反射激波管平台和数值模拟计算研究了异辛烷掺混不同摩尔分数的乙醇后在初始压力为 0.2 或 1 MPa、温度范围为 1 100~1 900 K、当量比为 1.0 下的着火特性和化学反应机理。研究表明,乙醇/异辛烷混合燃料的滞燃期随乙醇掺混量的增加和随压力的升高而减小,在高温下滞燃期随温度的升高而减小,且滞燃期的对数和温度的倒数近似呈线性关系。通过多元线性回归法拟合了滞燃期的 Arrhenius 公式,验证了 Nour Atef 机理与本实验的吻合性;通过反应路径和滞燃期敏感性分析,从化学动力学角度可知,掺混乙醇对着火滞燃期的影响本质上是由于掺混乙醇产生的大量 OH 活性基促进了反应,从而缩短了混合燃料的着火滞燃期。

关键词: 乙醇/异辛烷混合燃料;着火滞燃期;激波管;化学动力学

中图分类号: TK42 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2019)07-0038-07

Study on the Reaction Kinetics of Ignition Characteristics of Ethanol/Isooctane Mixtures at Elevated Temperatures

QIN Mingyuan, HE Benzhuang, CHEN Rixin, FAN Xiangshan,
WANG Jingshan, WANG Xibin

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: In order to investigate the effect of ethanol blending in iso-octane on the ignition delay times (IDT) under high temperature conditions, the auto-ignition characteristics of ethanol/isooctane mixtures were studied. High temperature ignition characteristics and chemical reaction mechanism were investigated using a shock-tube platform at two initial pressures of 0.2 MPa and 1 MPa, with a temperature range from 1 100 to 1 900 K and a stoichiometric ratio of 1:1, for isooctane blended with different molar percentages of ethanol (pure isooctane, E50, E75 and pure ethanol). The results showed that the IDT of ethanol/isooctane mixtures decreases with the ethanol blending ratio and pressure, and decreases with the increase of temperature at high temperatures. The logarithm of the IDT is approximately linear to the reciprocal of the temperature. The Arrhenius formula was fitted by multivariate linear regression and verified that the Nour Atef mechanism agreed well with experiment. Through the analyses on the reaction paths and the sensitivity of the IDT, the nature of the influence of blended ethanol on the IDT

收稿日期: 2019-01-12。 作者简介: 秦明元(1994—),男,硕士生;王锡斌(通信作者),男,副教授。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61235003)。

网络出版时间: 2019-04-11

网络出版地址: <http://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20190410.0939.004.html>

was analyzed by chemical kinetics and it is shown that a large number of OH active groups generated by the blended ethanol promoted the reaction, thus shortening the IDT of blended fuel.

Keywords: isooctane-ethanol blended fuel; ignition delay time; shock-tube; chemical kinetics

在当今石油资源不断减少的大背景下,燃料乙醇 C_2H_5OH 成为国际上公认的可降低汽车尾气排放和替代石油燃料的清洁能源。乙醇具有辛烷值高、与汽油无限互溶、污染少的特点,可以代替 MT-BE 等作为汽油辛烷值改进剂,有助于提高燃油经济性,降低排放,具有广阔的应用前景^[1-2]。

着火滞燃期作为内燃机工作过程中的一个重要参数,直接影响到发动机的动力指标、噪音大小以及工作粗暴性,同时也是内燃机燃烧过程的重要表征参数,因此研究燃料着火滞燃期特性具有很重要的意义。在燃烧研究领域,异辛烷 IC_8H_{18} 与汽油性质接近,通常用异辛烷作为汽油的替代燃料进行分析研究。Mittal 等提出了乙醇燃烧详细机理,可以准确预测乙醇在低温和高压下的自燃特性,并在压力 p 为 1~5 MPa、温度 T 为 825~985 K 和当量比 ϕ 为 0.3~1.0 的条件下进行了着火滞燃期的验证^[3]。Curran 提出了高压下异辛烷空气的详细反应机理,并利用该机理模拟了激波管中的着火滞燃期,结果表明该模型与实验具有良好的吻合性^[4]。Shen 等利用激波管测定了异辛烷在 p 为 0.7~5.8 MPa、 T 为 868~1 300 K 下,当量比分别为 0.25、0.5、1 时的着火滞燃期数据,大多情况下 Ar 作为稀释剂的混合燃料比 N_2 作为稀释剂的点火时间短 20%^[5]。Bogin 等在一台着火质量测试仪上对乙醇/异辛烷混合燃料在 p 为 0.5~1.5 MPa、 T 为 623~993 K、当量比为 0.7~1.0 时进行了着火滞燃期的研究,发现随着乙醇浓度的增加,负温度特性区域减少^[6]。Barraza 等利用自由活塞式快速压缩设备对乙醇、异辛烷和异辛烷/乙醇混合燃料在 p 为 1 MPa、 T 为 900~1 080 K、当量比为 1.0 的着火滞燃期进行了实验研究,结果表明乙醇/异辛烷混合燃料的反应受到异辛烷和乙醇相互之间反应的限制^[7-8]。

综上所述,针对纯乙醇燃料着火滞燃期的研究较少,异辛烷及乙醇/异辛烷混合燃料的着火滞燃期特性研究虽然较多,但大多集中在温度低于 1 000 K 的工况,而内燃机工作混合气处于更高的温度状态,此时通过着火滞燃期结合反应机理及反应路径,可以更好地反映缸内燃料燃烧的化学反应过程。因此,本文通过激波管研究了高温条件下(1 100~1 900 K)乙醇/异辛烷混合燃料着火滞燃期的变化

规律,可为进一步完善乙醇/异辛烷混合燃料的机理提供实验基础。

1 实验装置与燃料组分

1.1 实验装置

激波管实验平台可被用来测量不同燃料的着火滞燃期,是研究燃料自燃特性、优化化学反应机理的理想设备,实验装置如图 1 所示。图中间的双膜机构将激波管分成 2.0 m 的高压驱动段和 7.4 m 的低压被驱动段,低压被驱动段右端为实验段,附近等距布置了 4 个壁面压力传感器,压力传感器之间并联有 3 个时间间隔计数器,用于获得实验段端面的入射激波速度,实验段端面为 OH^* 光信号传感器,用于测量 OH^* 浓度的变化^[9]。

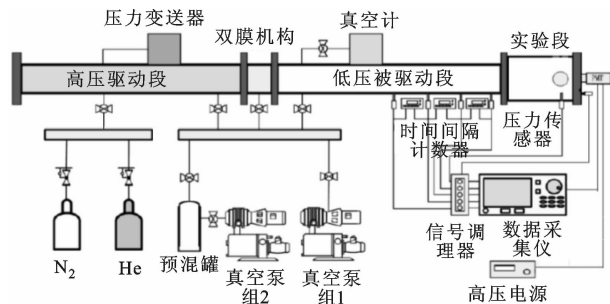


图1 激波管实验装置示意图

配气时,首先计算乙醇、异辛烷、Ar、 O_2 各分压,按照设计压力比,将乙醇和异辛烷注入到抽过真空的不锈钢预混罐中,控制罐内压力要低于二者饱和蒸气压的 1/2,以保证两种液体完全气化与混合。将相对应比例的 He、 N_2 充入高压段和夹膜段,低压段充入预混罐中的混合气。当气体进入后,打开夹膜段和排气阀门,使得高压驱动段与夹膜段之间存在的压差足以穿透夹膜;等待双膜机构破膜后,利用实验段右端面的光电倍增管(PMT)测量 OH^* 光信号作为着火开始的判断依据^[10]。本文的实验数据均为同一条件下进行多次实验,在误差范围内取平均值所得,具有一定的重复性。

着火滞燃期的定义不同,得出的实验结果不同。本实验中定义实验段端面反射激波形成的时刻,即将压力曲线上涨达到目标压力的时刻定义为着火滞燃期的零点,选择 OH^* 发光自由基信号曲线上升过程中斜率最大处的切线反推至零线的时刻点作为开

始剧烈燃烧的时刻,二者之间的时间间隔即为着火滞燃期^[11-12],反射激波温度为 1 200 K、压力为 1 MPa、当量比为 1.0 条件下乙醇/异辛烷/Ar/O₂ 混合压力和 OH* 信号随时间的变化如图 2 所示。由图 2 可知,E50(见表 1)的着火滞燃期为 2 411 μ s,可使结果受环境影响最小,减小了后处理过程中产生的误差,因而得到了燃烧学界的广泛使用^[13]。

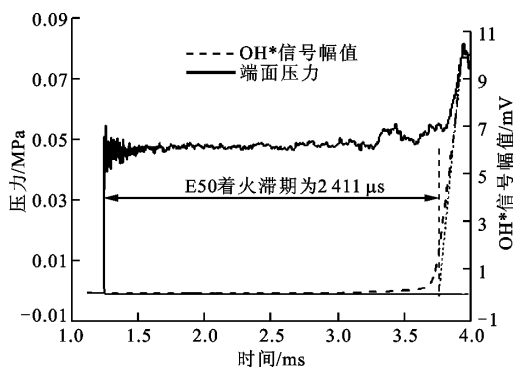


图2 反射激波管和 OH* 信号演变过程

1.2 燃料组分

目前,低掺比醇类混合燃料研究较多,中高掺比的研究相对较少,高掺醇比和纯乙醇燃料是目前的研究热点。因此,本文选择乙醇摩尔分数分别为 0、50%、75%和 100%的乙醇/异辛烷混合燃料(分别用 E0、E50、E75 和 E100 表示)进行分析,实验采用 Ar 稀释,初始压力为 0.2、1 MPa,温度为 1 100~1 900 K,当量比为 1.0。4 种不同混合燃料的实验配气组分如表 1 所示。

表1 混合燃料的实验配气组分

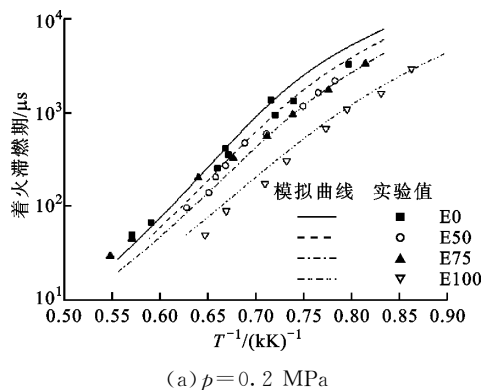
混合燃料	摩尔分数/%			
	乙醇	异辛烷	O ₂	Ar
E0	0.000	0.331	4.132	95.537
E50	0.264	0.264	4.091	95.381
E75	0.564	0.188	4.044	95.204
E100	1.309	0.000	3.927	94.764

混合燃料着火滞燃期的模拟计算采用 CHEMKIN-Pro 软件的 SENKIN 子代码,采用定容、绝热、零维反应器模型进行研究,SENKIN 中着火滞燃期定义为从反应开始时刻到温度梯度达到最大值之间的时间间隔^[14]。文献[15]的异辛烷机理较为完善,且包含详细的乙醇机理,因此本文采用文献[15]的异辛烷机理来模拟计算乙醇/异辛烷混合燃料的着火滞燃期。

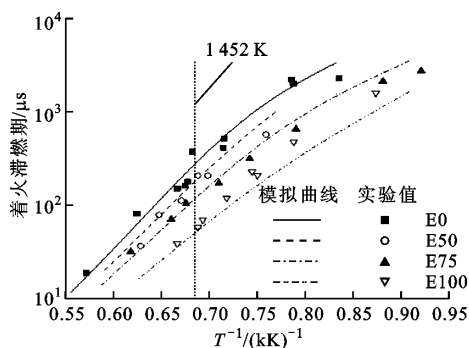
2 实验结果与分析

2.1 乙醇掺混比对滞燃期的影响

初始压力为 0.2、1 MPa 时乙醇/异辛烷混合燃料着火滞燃期随乙醇掺混比的变化关系如图 3 所示。由图 3 可知:初始压力为 0.2、1 MPa 时乙醇/异辛烷混合燃料的着火滞燃期随着乙醇含量的增加而缩短,而且在较低温时乙醇掺比变化对着火滞燃期的影响效果和较高温度时相比更明显,这时温度升高也会对着火滞燃期产生影响;乙醇含量较高时,着火滞燃期变化更明显,当异辛烷中加入乙醇后,由于乙醇中的 OH 基,影响了重要反应的活性,而燃料高温裂解会产生 OH 基,从而促进燃料分子的氧化,有效地缩短的着火滞燃期; $T=1\ 452$ K 时,E0 的着火滞燃期为 373.7 μ s,E50 着火滞燃期为 206 μ s,时间缩短了 44.9%;E100 着火滞燃期为 57.7 μ s,与 E0 的着火滞燃期相比缩短了 84.6%。



(a) $p=0.2$ MPa



(b) $p=1$ MPa

图3 乙醇/异辛烷混合燃料滞燃期随乙醇掺混比的变化关系

2.2 初始压力对滞燃期的影响

压力为 0.2、1 MPa、温度为 1 200~1 900 K 时 E75 着火滞燃期的变化如图 4 所示。由图 4 可知,着火滞燃期的对数值与温度的倒数近似呈线性关系。E75 混合燃料的着火滞燃期随温度的升高而减

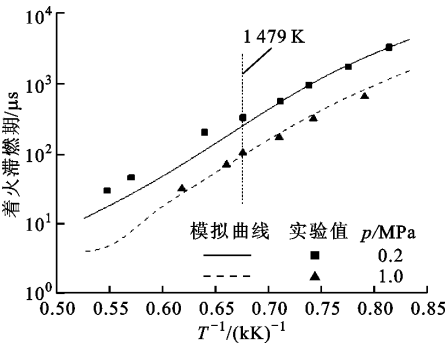


图 4 E75 在不同压力、温度下滞燃期的实验、模拟值

小,随压力的增大而减小, $T=1\,479\text{ K}$ 时,E75 在压力为 0.2 MPa 时着火滞燃期为 $329\text{ }\mu\text{s}$,而在压力为 1 MPa 时着火滞燃期为 $103.4\text{ }\mu\text{s}$,缩短了 68.6% 。当初始温度升高时,外界环境为化学反应提供了更多的能量,从而更容易达到反应所需的活化能,所需的时间更短,混合燃料的着火滞燃期缩短。温度一定时可认为分子动能恒定,根据分子碰撞理论,压力升高会减小分子的平均自由程,增大分子之间的碰撞频率,从而促进燃料化学反应,使得混合燃料的着火滞燃期缩短。

2.3 混合燃料滞燃期的 Arrhenius 拟合公式

由实验结果可对不同乙醇掺混比混合燃料进行多元线性回归拟合,Arrhenius 公式为

τ = A p^B exp(E_a / (R_u T)) (1)

式中:τ 为滞燃期,μs;A 为指前因子;B 为压力指数;E_a 为活化能,kJ/mol;p 为激波管端面的实际压力,MPa;R_u=8.314 kJ/(mol · K⁻¹)为通用气体常数;T 为激波管端面的实际温度,K。式(1)表征了温度和压力对滞燃期的影响,Arrhenius 公式中各参数随乙醇掺混比的变化如表 2 所示。

表 2 不同乙醇掺混比下的 Arrhenius 公式参数

混合燃料	A	B	E _a /kJ · mol ⁻¹	相关指数 R ²
E0	0.001 34	-0.586	159.173	0.968
E50	0.002 36	-0.537	147.967	0.939
E75	0.016 01	-0.836	130.733	0.979
E100	0.000 43	-0.426	155.564	0.984

由表 2 可知,压力指数 B 为负数,印证了乙醇/异辛烷着火滞燃期随压力的增大而减小,并且异辛烷着火滞燃期压力指数的绝对值大于乙醇(E100)压力指数的绝对值,这说明压力对异辛烷着火滞燃期的影响大于乙醇,着火滞燃期与温度的倒数呈正相关,也说明着火滞燃期随温度的增大而减小,各掺

混比拟合式的相关指数 R² 均大于 0.9。乙醇/异辛烷混合燃料滞燃期拟合值和实验值的对比如图 5 所示,可知拟合值与实验值吻合良好。

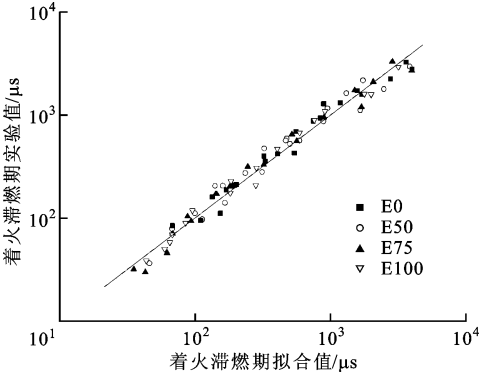


图 5 乙醇/异辛烷混合燃料滞燃期拟合值和实验值对比

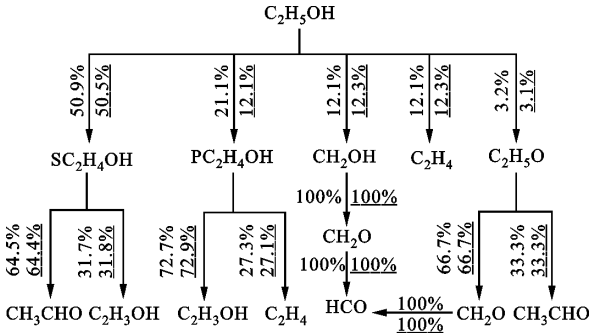
2.4 化学反应路径分析

为深入理解高温条件下乙醇/异辛烷的化学反应历程,通过模拟软件 CHEMKIN,得到 $\Phi=1.0$ 、 $T=1\,600\text{ K}$ 、 $p=1\text{ MPa}$ 条件下 E25、E75 的简化反应路径,如图 6 所示。

乙醇在高温下的氧化过程主要通过燃料分子的脱氢反应及燃料的裂解反应,乙醇的主要高温反应式为 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{SC}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{H}_2$ 、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{PC}_2\text{H}_4\text{OH} + \text{H}_2$ 、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$ 和 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{OH} + \text{CH}_3$ 。乙醇的脱氢反应生成物不同,主要是由于 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ 的 H 原子有 3 个位置^[16],其中 α 位氢原子和 OH 基团最近,键能最低,最容易发生脱氢反应,因此有超过一半的乙醇在高温条件下 α 位发生脱氢反应生成 $\text{SC}_2\text{H}_4\text{OH}$,乙醇氧化的最终产物为醛类和烯烃,其中醛基对甲基等自由基有一定的消耗作用,促进燃料氧化。异辛烷的主要高温反应式为 $\text{IC}_8\text{H}_{18} \rightleftharpoons \text{YC}_7\text{H}_{15} + \text{CH}_3$ 、 $\text{IC}_8\text{H}_{18} \rightleftharpoons \text{PC}_7\text{H}_{15} + \text{CH}_3$ 、 $\text{IC}_8\text{H}_{18} \rightleftharpoons \text{TC}_4\text{H}_9 + \text{IC}_4\text{H}_9$ 和 $\text{IC}_8\text{H}_{18} \rightleftharpoons \text{NCOC}_5\text{H}_{11} + \text{IC}_3\text{H}_7$ 。异辛烷主要是通过裂解产生 YC_7H_{15} 、 PC_7H_{15} 两种同分异构体,进而再进行裂解消耗,异辛烷氧化的最终产物以烯烃为主。

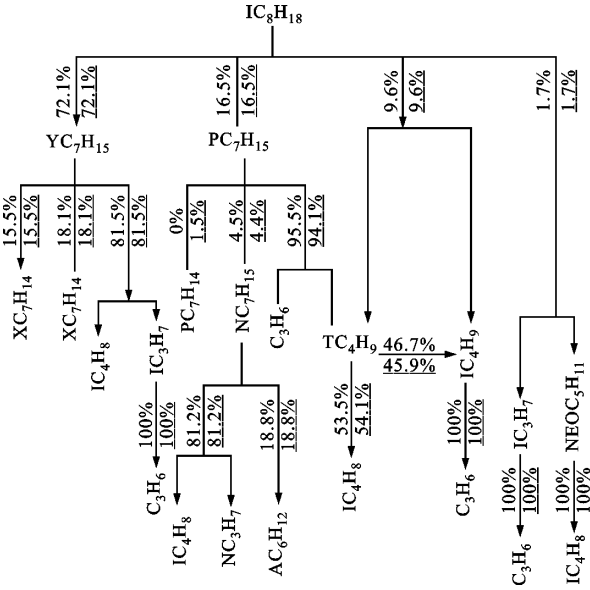
由图 6 可知:在相同工况下,随着乙醇掺混比的增大,乙醇氧化过程中的脱氢反应比例减少,分解反应比例增多;随着乙醇含量的增加及乙醇的裂解反应增多使得乙烯(C_2H_4)的含量明显增加,而乙烯基(C_2H_3)是烃类氧化过程中重要的高活性 C_2 类自由基^[14],能促进燃料分子的氧化过程。

E25、E75 混合燃料的异辛烷反应路径中 OH 基生成路径的对比如图 7 所示。 $1\,600\text{ K}$ 时,异辛烷的反应中 OH 基的生成主要来自反应 $\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{O}$



数值有下划线表示 E75 的,无下划线表示 E25 的

(a)乙醇反应路径



数值有下划线表示 E75 的,无下划线表示 E25 的

(b)异辛烷反应路径

图 6 $T=1\ 600\ \text{K}$ 、 $p=1\ \text{MPa}$ 、 $\Phi=1.0$ 时 E25、E75 的反应路径

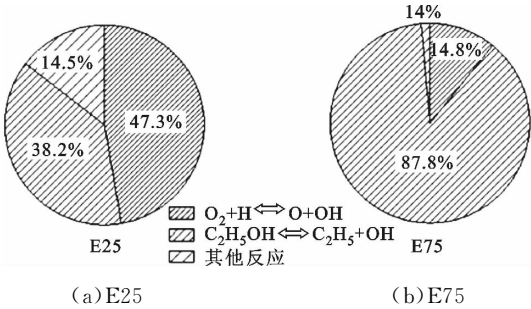


图 7 E25、E75 中异辛烷的 OH 基生成路径对比

+OH 和反应 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{OH}$ 中,由图 7 可知,E25 反应 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{OH}$ 占生成 OH 基总反应的 38.2%,E75 占比增至 87.8%,随着乙醇含量的增加,混合燃料中的 OH 基得到显著增加,从而促进燃料分子的氧化。无论是从乙醇反应路径

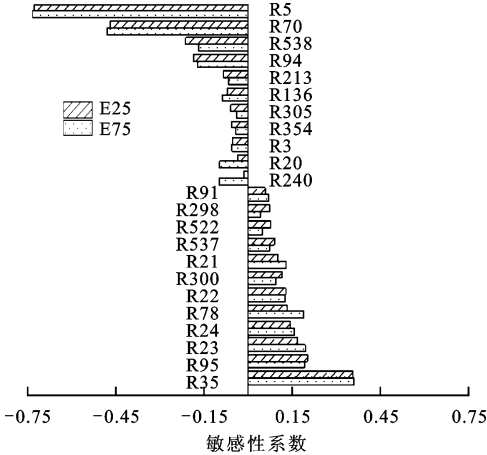
分析还是异辛烷反应路径分析,随着乙醇含量的增加乙醇/异辛烷混合燃料的反应速率都增加,因而着火滞燃期缩短。

2.5 着火滞燃期敏感性分析

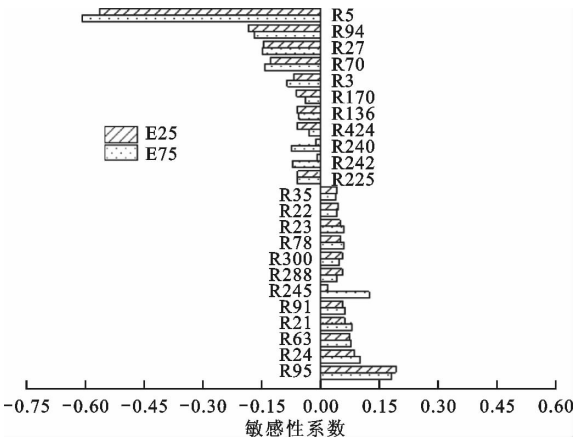
本文使用正规化敏感性分析温度为 1 300、1 600 K 时,乙醇掺混比的增加对乙醇/异辛烷混合燃料着火主要反应速率的影响。敏感性系数为

$$S_i = \frac{\tau(2k_i) - \tau(0.5k_i)}{1.5\tau(k_i)} \tag{2}$$

式中: S_i 为着火滞燃期的敏感性系数; k_i 为第 i 个反应的反应速率。利用 Atef Nour 简化机理(189 个组分,912 个反应),通过模拟计算得到最影响滞燃期的前 23 个反应,如图 8 所示,敏感性分析中涉及的主要反应方程式如表 3 所示。



(a)1 300 K



(b)1 600 K

图 8 $p=1\ \text{MPa}$ 、 $\Phi=1.0$ 时 E25、E75 着火滞燃期的敏感性分析

由图 8 可知,无论是温度为 1 300 K 还是 1 600 K,着火滞燃期敏感性系数绝对值最大的都是反应 R5,其中敏感性系数为负数时表示促进反应进行,正数时表示抑制反应进行。图 8 中敏感性系数为负

表 3 乙醇/异辛烷/O₂/Ar 反应系统关键基元反应

基元	反应化学方程式
R3	H ₂ +OH $\rightleftharpoons$ H+H ₂ O
R5	O ₂ +H $\rightleftharpoons$ O+OH
R20	HO ₂ +H $\rightleftharpoons$ 2OH
R21	HO ₂ +H $\rightleftharpoons$ H ₂ +O ₂
R22	HO ₂ +O $\rightleftharpoons$ OH+O ₂
R23	OH+HO ₂ $\rightleftharpoons$ H ₂ O+O ₂
R24	OH+HO ₂ $\rightleftharpoons$ H ₂ O+O ₂
R27	CO+OH $\rightleftharpoons$ CO ₂ +H
R35	CH ₃ +HO ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₄ +O ₂
R63	CH ₃ +O $\rightleftharpoons$ CH ₂ O+H
R70	CH ₃ +HO ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₃ O+OH
R78	CH ₃ O+O ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₂ O+HO ₂
R91	CH ₂ O+H $\rightleftharpoons$ HCO+H ₂
R94	HCO+M $\rightleftharpoons$ H+CO+M
R95	HCO+O ₂ $\rightleftharpoons$ CO+HO ₂
R124	C ₃ H ₃ +O ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₂ CO+HCO
R136	C ₂ H ₄ +OH $\rightleftharpoons$ C ₂ H ₃ +H ₂ O
R170	C ₂ H ₂ +O $\rightleftharpoons$ HCCO+H
R213	CH ₂ CO+OH $\rightleftharpoons$ HCCO+H ₂ O
R225	HCCO+O ₂ $\rightleftharpoons$ CO ₂ +CO+H
R240	C ₂ H ₅ OH+OH $\rightleftharpoons$ PC ₂ H ₄ OH+H ₂ O
R242	SC ₂ H ₄ OH $\rightleftharpoons$ CH ₃ CHO+H
R245	SC ₂ H ₄ OH+O ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₃ CHO+HO ₂
R288	C ₃ H ₆ $\rightleftharpoons$ C ₃ H ₅ -A+H
R298	C ₃ H ₆ +O ₂ $\rightleftharpoons$ C ₃ H ₅ -A+HO ₂
R300	C ₃ H ₆ +OH $\rightleftharpoons$ C ₃ H ₅ -A+H ₂ O
R305	C ₃ H ₆ +OH $\rightleftharpoons$ C ₃ H ₅ -T+H ₂ O
R354	C ₃ H ₅ -T+O ₂ $\rightleftharpoons$ CH ₃ COCH ₂ +O
R522	IC ₄ H ₈ $\rightleftharpoons$ IC ₄ H ₇ +H
R537	C ₃ H ₄ -A+CH ₃ $\rightleftharpoons$ IC ₄ H ₇
R538	IC ₄ H ₇ +HO ₂ $\rightleftharpoons$ IC ₄ H ₇ O+OH

数的公共反应分别是 R5、R94、R70、R3、R136、R240,其中只有 R3 的滞燃期敏感性随着温度的升高而增大,这是因为高温下更容易产生 OH 自由基从而促进 R3 的进行,而对于 R136、R240,虽然反应物中也含有 OH 自由基,但因为另一反应物都为 C₂ 物质,而高温下主要以低碳分子进行反应,因而敏感性下降。反应 R136 在 1 300 K 时敏感性随乙醇掺混比增大而增大,1 600 K 时随掺混比增大而减小。反应 R240 随乙醇掺混比增加敏感性变化最大,这是由于乙醇含量的增加使得 OH 基浓度大幅增大

导致,是掺混乙醇后影响着火滞燃期的关键反应。

图 8 中敏感性为正数,即抑制氧化进行的公共反应占大多数,只有反应 R537、R522、R298、R63 为独有反应,这是因为高温下更易发生低碳分子的反应,虽然 R537、R522、R298 在 1 300 K 时敏感性系数较大,但在 1 600 K 时几乎为 0。在公共反应中,所有反应的滞燃期敏感性系数均随温度的升高而降低,其中反应 R23、R78、R91 的敏感性系数随着乙醇掺混比的增加而增大,主要是因为反应物中含有乙醇氧化生成的 OH 自由基和醛基,且反应 R78、R91 构成链式反应,加快反应进行。

3 结 论

本文在压力为 0.2 或 1 MPa、温度为 1 100~1 900 K、当量比为 1.0 条件下,研究了高温环境下不同掺比的乙醇/异辛烷混合燃料着火滞燃期变化规律,得到如下结论。

(1)随着压力和乙醇掺混比的升高,混合燃料的着火滞燃期均有所减小;温度越高着火滞燃期越短,且着火滞燃期的对数值与温度的倒数近似呈线性关系。

(2)将实验数据进行 Arrhenius 公式的拟合,通过拟合公式计算的拟合值与实验值吻合良好,根据拟合公式的压力指数发现,压力对异辛烷着火滞燃期的影响大于对乙醇滞燃期的影响。

(3)通过反应路径和滞燃期敏感性分析发现,混合燃料在燃烧过程中,随着乙醇掺混比的增加,乙醇产生的 OH 等自由基会促进反应的进行,从而导致混合燃料的着火滞燃期缩短。

参考文献:

[1] 郑东,钟北京. 异辛烷/正庚烷/乙醇三组分燃料着火的化学动力学模型[J]. 物理化学学报, 2012, 28(9): 2029-2036.

ZHENG Dong, ZHONG Beijing. Chemical kinetic model for ignition of three-component fuel comprising iso-Octane/n-Heptane/Ethanol [J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2012, 28(9): 2029-2036.

[2] SARATHY S M, FAROOQ A, KALGHATGI G T. Recent progress in gasoline surrogate fuels [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2018, 65: 67-108.

[3] MITTAL G, BURKE S M, DAVIES V A, et al. Autoignition of ethanol in a rapid compression machine [J]. Combustion and Flame, 2014, 161(5): 1164-

- 1171.
- [4] CURRAN H J, PITZ W J. Oxidation of automotive primary reference fuels at elevated pressures [C] // Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion. Colorado, USA: The Combustion Institute, 1998: 379-387.
- [5] SHEN H P, VANDEROVER J. A shock tube study of iso-octane ignition at elevated pressures: the influence of diluent gases [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 155(4): 739-755
- [6] BOGIN G E, LUECKE J, RATCLIFF M A, et al. Effects of iso-octane/ethanol blend ratios on the observance of negative temperature coefficient behavior within the ignition quality tester [J]. *Fuel*, 2016, 186: 82-90.
- [7] BARRAZA B C, WOOLDRIDGE M S. Combustion chemistry of iso-octane/ethanol blends: effects on ignition and reaction pathways [J]. *Combust Flame*, 2018, 188: 324-336.
- [8] BARRAZA B C, WAGNON S W, WOOLDRIDGE M S. Combustion chemistry of ethanol: ignition and speciation studies in a rapid compression facility [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2016, 120: 7408-7418.
- [9] 潘伦, 张英佳, 黄佐华. C_2H_6/H_2 混合气着火特性的实验与化学动力学研究 [J]. *西安交通大学学报*, 2014, 48(9): 49-54.
- PAN Lun, ZHANG Yingjia, HUANG Zuohua. Experimental and kinetic research on ignition characteristics of C_2H_6/H_2 mixtures [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2014, 48(9): 49-54.
- [10] 张英佳, 黄佐华, 王金华, 等. 利用激波管实验装置研究丙烯/氧气/氮气混合气着火滞燃期 [J]. *西安交通大学学报*, 2010, 44(1): 9-12, 35.
- ZHANG Yingjia, HUANG Zuohua, WANG Jinhua, et al. Study on the ignition delay times of propene/oxygen/nitrogen mixtures by using shock tube [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2010, 44(1): 9-12.
- [11] NOORANI K E, AKIH K B, BERGTHORSON J M. Comparative high temperature shock tube ignition of c1-c4 primary alcohols [J]. *Energy & Fuels*, 2010, 24(11): 5834-5843.
- [12] MAN X, TANG C, ZHANG J, et al. An experimental and kinetic modeling study of n-propanol and i-propanol ignition at high temperatures [J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(3): 644-656.
- [13] MAN X, TANG C, ZHANG J, et al. An experimental and kinetic modeling study of n-propanol and i-propanol ignition at high temperatures [J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(3): 644-656.
- [14] 张烨苗, 李倩倩, 闫治宇, 等. 异辛烷掺混乙醇在高温下层流预混燃烧特性的研究 [J]. *西安交通大学学报*, 2018, 52(7): 74-79.
- ZHANG Yemiao, LI Qianqian, YAN Zhiyu, et al. Laminar flame premixed combustion characteristics of ethanol-isooctane blends at elevated temperatures [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2018, 52(7): 74-79.
- [15] ATEF N, KUKKADAPU G, MOHAMED S Y, et al. A comprehensive iso-octane combustion model with improved thermochemistry and chemical kinetics [J]. *Combustion and Flame*, 2017, 178: 111-134.
- [16] HE X, DONOVAN M T, ZIGLER B T, et al. An experimental and modeling study of iso-octane ignition delay times under homogeneous charge compression ignition conditions [J]. *Combustion and Flame*, 2005, 142(3): 266-275.
- [本刊相关文献链接]**
- 徐昭华, 胡二江, 黄佐华. 汽油层流燃烧速度的测量及其替代物模型研究. 2019, 53(3): 36-42. [doi:10.7652/xjtuxb201903006]
- 张英佳, 孙五川, 邓福泉, 等. N_2O 对乙烯自点火敏化作用的实验和理论研究. 2019, 53(1): 86-92. [doi:10.7652/xjtuxb201901011]
- 汪映, 白元启, 王鹏, 等. 高辛烷值组分对正庚烷着火燃烧特性的影响. 2018, 52(11): 30-36. [doi:10.7652/xjtuxb201811005]
- 张烨苗, 李倩倩, 闫治宇, 等. 异辛烷掺混乙醇在高温下层流预混燃烧特性的研究. 2018, 52(7): 74-79. [doi:10.7652/xjtuxb201807011]
- 刘军恒, 孙平, 刘源, 等. 掺混比对高压共轨柴油机颗粒物物理特性的影响. 2017, 51(12): 104-111. [doi:10.7652/xjtuxb201712016]
- 高莹, 麻斌, 邓海鹏, 等. 低乙醇配比的乙醇-柴油混合燃料空化特性试验. 2017, 51(11): 14-21. [doi:10.7652/xjtuxb201711003]
- 谢萌, 马志杰, 王全红, 等. 聚甲氧基二甲醚及其高比例掺混柴油混合燃料发动机燃烧与排放的试验研究. 2017, 51(3): 32-37. [doi:10.7652/xjtuxb201703006]
- 汪映, 黄智勇, 柯希春, 等. 液化石油气对二甲醚-柴油双燃料发动机燃烧和排放特性的影响. 2016, 50(5): 19-23. [doi:10.7652/xjtuxb201605003]
- 潘伦, 张英佳, 黄佐华. 混合气着火特性的实验与化学动力学研究. 2014, 48(9): 49-54. [doi:10.7652/xjtuxb201409009]

(编辑 赵炜)