

正丁醇化学反应动力学简化机理的构建研究

刘凯敏^{1,2},鄂加强^{1†},马寅杰¹,杨靖¹,罗武生²,陈小强¹

(1. 湖南大学 整车先进设计制造技术全国重点实验室, 湖南 长沙 410082;
2. 中南林业科技大学 机械与智能制造学院, 湖南 长沙 410004)

摘要:利用 CHEMKIN PRO 气相化学反应动力学分析程序, 对正丁醇详细化学反应动力学机理的基本反应链进行数值分析, 找出正丁醇燃料在低温反应阶段和高温反应阶段所涉及的主要反应路径和中间产物. 基于“半解耦”方法, 以小分子机理 C1/CO/H₂作为“内核”, 耦合正丁醇低温反应和大分子向小分子过渡反应的主要机理, 构建了新的正丁醇化学反应动力学简化机理. 该机理包含 70 种组分和 150 个基元反应, 并通过了一维层流火焰速度、激波管等基础反应器的实验数据验证. 结果表明, 本文构建的正丁醇化学反应简化机理, 不仅可以准确计算正丁醇滞燃期的发展, 也能够合理预测层流火焰速度的演变趋势.

关键词:正丁醇;滞燃期;层流火焰速度;简化机理

中图分类号:TK411+2 **文献标志码:**A

Study on Reduced Mechanism of Chemical Reaction Kinetic for n-Butanol

LIU Kaimin^{1,2}, E Jiaqiang^{1†}, MA Yinjie¹, YANG Jing¹, LUO Wusheng², CHEN Xiaoqiang¹

(1. State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing Technology for Vehicle, Hunan University, Changsha 410082, China;
2. School of Mechanical and Intelligent Manufacturing, Central South University of Forestry and Technology,
Changsha 410004, China)

Abstract: Using the gas-phase chemical reaction kinetics software CHEMKIN PRO, the basic reaction chain of the detailed chemical reaction kinetics model of n-butanol was numerically analysed, so as to find out the main reaction paths and intermediate products involved in the low-temperature and high-temperature reaction phases of n-butanol fuel. Based on the semi-decoupling methodology, the small molecule mechanism of C1/CO/H₂ was taken as the kernel for n-butanol, and coupling the main mechanisms of low-temperature reaction and the transition reaction from large molecules to small molecules, a new reduced chemical reaction kinetic model of n-butanol with 70 species and 150 reactions was developed, which was validated by the tested data of basic reactors, such as the one-dimensional laminar flame speed and shock tube. The results show that the developed new reduced mechanism of n-butanol can both accurately calculate the ignition delay time, and reasonably predict the evolution trend of the laminar flame speed.

Key words:n-butanol; ignition delay; laminar flame speed; reduced mechanism

* 收稿日期:2024-09-04

基金项目:湖南省自然科学基金项目(2024JJ5645), Natural Science Foundation of Hunan Province (2024JJ5645);湖南省教育厅科学研究项目(21B0243), Scientific Research Project of Hunan Provincial Education Department (21B0243)

作者简介:刘凯敏(1987—),男,河南焦作人,湖南大学助理研究员,博士

† 通信联系人,E-mail: ejiaqiang@126.com

鉴于能源危机以及排放法规日益严格,机动车行业开始积极寻找新型可再生替代燃料,其中生物质燃料的开发和利用,受到了学术界和能源市场的高度关注^[1-2].以醇类燃料为代表的生物质能源中,含有4个碳原子的正丁醇因其生产途径的多样性^[3],逐渐变成四种同分异构体(正丁醇、仲丁醇、异丁醇和叔丁醇),成为研究最多、应用最广泛的燃料.目前,计算流体动力学(computational fluid dynamics, CFD)耦合化学反应动力学的先进模拟技术,是探索生物含氧燃料缸内燃烧过程最有效的技术手段,但这样的计算非常耗时且极易发散,主要受化学反应机理规模的限制.因此,研究机理简化技术、构建精确且可靠的正丁醇化学反应简化机理,是深入理解正丁醇燃烧过程及将其与CFD模型耦合进行多维数值研究所面临的重要课题和严峻挑战.

国内外对丁醇燃烧化学动力学机理的研究已逐渐开展,Sarathy等^[4]构建了包括正丁醇、异丁醇、仲丁醇和叔丁醇四种丁醇同分异构的详细动力学模型(426种组分和2 336个反应),该模型详细描述了四种不同碳链排列结构的丁醇同分异构体的低温反应和高温反应路径.Vranckx等^[5]提出并改进了一个反映正丁醇氧化过程的详细机理,包括过氧丁基的形成和各同分异构化反应,并通过了实际发动机高压环境下的滞燃期试验验证.在正丁醇简化机理的构建方面,Feng等^[6]运用直接关系图法、反应路径分析和敏感性分析方法构建了一个包含75种组分和285个基元反应的正丁醇简化机理.Huang等^[7]运用敏感性分析方法构建了一个柴油-正丁醇混合燃料的简化动力学模型,该模型包含101种组分和531个基元反应,并通过了滞燃期、层流火焰速度(laminar flame speed, LFS)和中间组分浓度的实验验证.Choo等^[8]运用考虑误差传递的直接关系图法、同分异构体归并法构建了一个包含60种组分和306个反应的正丁醇简化机理.Wang等^[9]将正丁醇简化机理与正庚烷-碳烟前驱物(PAH)机理合并,构建了正庚烷-PAH-正丁醇简化机理(76种组分和349个反应),并通过了激波管(shock tube, ST)、定容燃烧弹和发动机工作环境下的试验值验证.

在内燃机的实际运行过程中,层流火焰速度不仅是验证燃料化学反应动力学模型准确性的重要标准^[10],而且综合反映了可燃混合气的性质、燃烧初始条件以及缸内气体流动的整体效果^[11].通过回顾发现,当前国内外学者提出的正丁醇化学反应动力学简化模型大部分考虑了滞燃期的演变,通过层流

火焰速度试验验证的正丁醇简化机理研究虽然也已逐步开展,但仍存在机理规模偏大、适用工况范围有限的问题.因此,本文将使用CHEMKIN PRO分析正丁醇详细化学反应动力学的反应链机制,结合“半解耦”方法,构建一个包含70种组分和150个反应的简化机理,并通过ST、LFS两种基础反应器的试验数据验证.

1 正丁醇化学反应简化机理的构建

1.1 计算程序及模型的选择

本文采用CHEMKIN PRO气相化学反应动力学程序进行仿真研究,该软件由美国Sandia国家实验室开发.研究过程中,使用了LLNL实验室Sarathy等^[4]提出的正丁醇详细化学反应动力学机理,该机理包括2 336个反应和426种组分.该机理全面分析了分支链醇类和链状醇类特有的反应路径,已经通过了激波管、快速压缩机、射流搅拌器和预混层流火焰速度的试验数据验证.

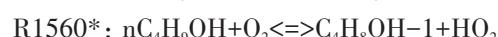
正丁醇作为掺混燃料被广泛应用在点燃式汽油机^[12]和压燃式柴油机^[13]中,由于燃料的氧化过程在不同压力、温度及当量比等边界条件下的反应路径不尽相同,因此正丁醇简化机理需要在多种工况条件下分析得出.限于文章篇幅,本文将以正丁醇在激波管中,初始温度为832 K,初始压力为4.0 MPa,当量比为1.0的工况条件为例,讨论正丁醇详细机理的氧化过程.

1.2 正丁醇燃烧的化学反应路径分析

1.2.1 低温反应路径

在正丁醇发生反应的低温区域,燃料的消耗主要始于正丁醇和氧气、H、OH、HO₂等自由基的脱氢反应.图1给出了正丁醇与OH发生脱氢反应的化学反应速率.Sarathy等^[4]曾指出,在初始温度800 K,初始压力6.0 MPa条件下,约有60%的正丁醇与OH和HO₂自由基发生脱氢反应生成C₄H₈OH-1.Vranckx等^[5]也指出,由于OH的存在,碳位的C—H键能较弱.通过分析,正丁醇与各自由基发生脱氢反应的最大平均反应速率依次为R1550*(代表Sarathy详细机理中的第

1 550个化学反应)、R1565*、R1543*和R1560*.其中,正丁醇通过R1550*、R1565*和R1560*都生成C₄H₈OH-1,而通过R1543*生成C₄H₈OH-3.



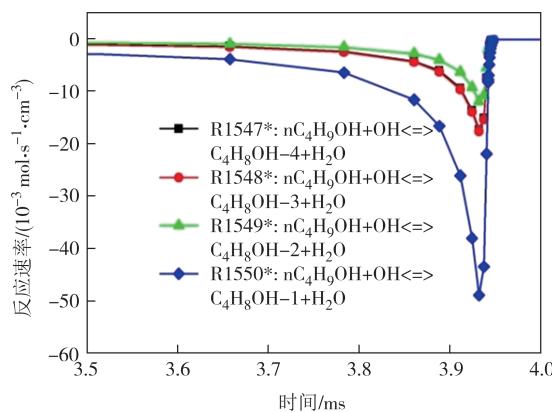


图1 正丁醇与OH自由基的脱氢反应

Fig.1 The dehydrogenation reactions of n-butanol with OH



正丁醇发生脱氢反应后，生成的四种丁醇基同分异构体会继续进行加氧反应，其反应速率如图2所示，反应速率为负值表示 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}$ 减小。在这四个反应中，R1893*的反应速率最大，且R1893*的反应速率峰值位置比其余反应稍有滞后。丁醇基四种加氧产物 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$ 各发生同分异构化生成12种 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OHOOH}$ 的同分异构体，其中反应速率较大的4种如图3所示。

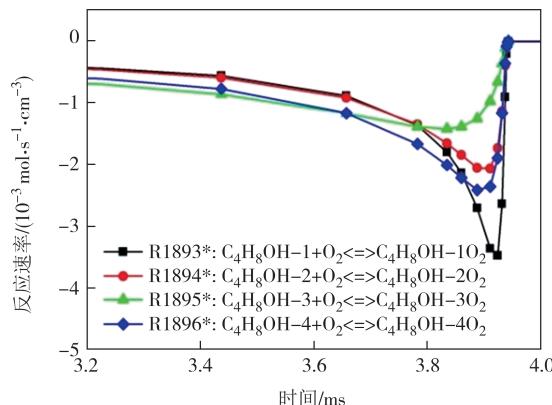
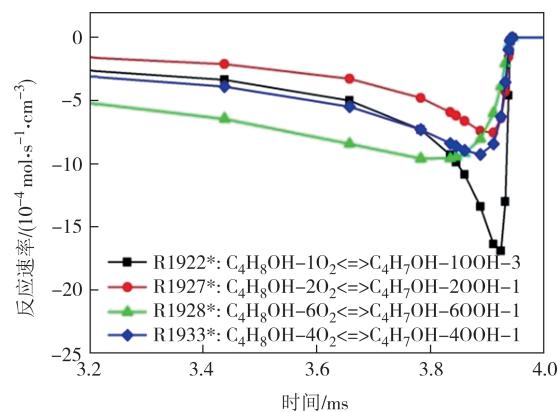
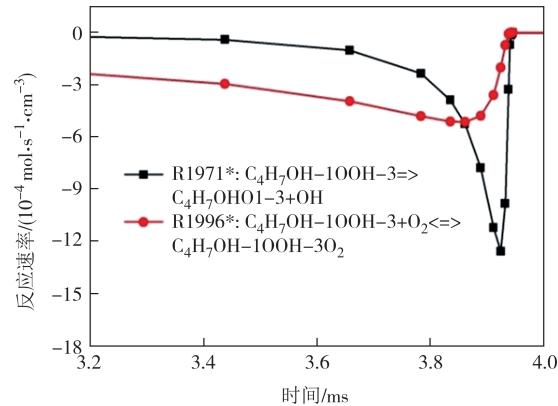
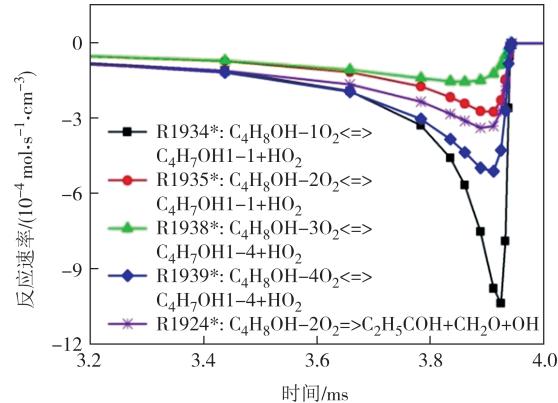


图2 丁醇基加氧反应

Fig.2 The oxygenation reactions of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}$

通过分析 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-\text{OOH}$ 四种同分异构体的主要消耗反应的化学反应速率可知，R1971*是 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-10\text{OH}-3$ 重要的分解反应，其反应速率最大，直接分解成 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}1-3$ 和OH，如图4所示。除了发生同分异构化反应外， $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$ 自身的裂解反应也是正丁醇低温氧化的重要组成部分，其自身裂解反应速率仅次于同分异构化反应速率，如图5所示。可见， $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-\text{O}_2$ 通过R1924*裂解成醛类和OH的反应速率略高于通过R1935*生成烯醇和 HO_2 的反应速率。

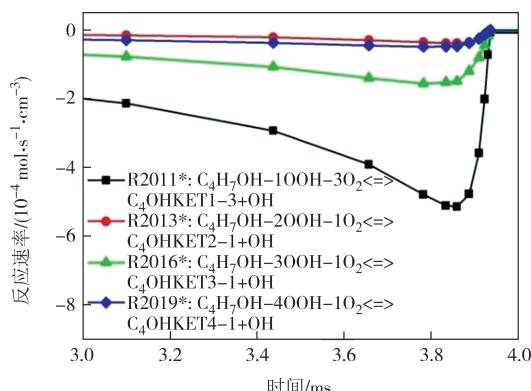
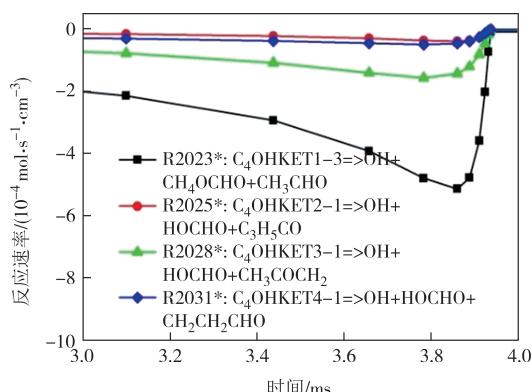
$\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-\text{OOH}$ 的加氧产物 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OHOOH-O}_2$ 的主

图3 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$ 的同分异构化反应Fig.3 The isomerization reactions of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$ 图4 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-10\text{OH}-3$ 的主要消耗反应Fig.4 The depletion reactions of $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-10\text{OH}-3$ 图5 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$ 的裂解反应Fig.5 The cracking reactions of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OHO}_2$

要分解路径如图6所示。R2011*和R2016*的反应速率较高，主要分解生成氢过氧化酮(C_4OHKET)和OH。氢过氧化酮继续裂解生成含氧组分和OH自由基(如图7所示)，其中R2023*的反应速率最高。

1.2.2 高温反应路径

在高温反应阶段，正丁醇的脱氢反应也是初始燃料消耗的重要反应。燃料单分子的裂解反应在高温反应链中也变得越来越重要。图8给出了正丁醇

图 6 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OHOOH}-\text{O}_2$ 的分解反应Fig.6 The decomposition reactions of $\text{C}_4\text{H}_7\text{OHOOH}-\text{O}_2$ 图 7 C_4OHKET 的裂解反应Fig.7 The cracking reactions of C_4OHKET

单分子裂解反应速率曲线,由图 8 可知,R1534*的反应速率最高,n $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ 裂解生成n C_3H_7 和 CH_2OH .

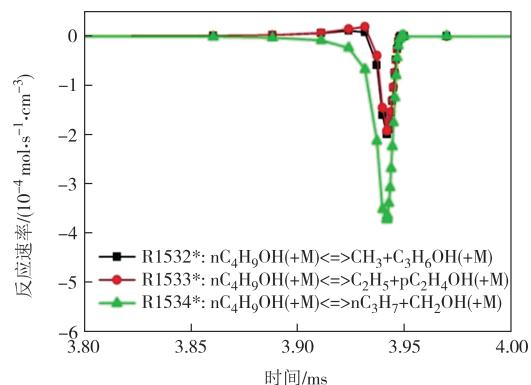


图 8 正丁醇单分子的裂解反应

Fig.8 The cracking reactions of n-butanol

正丁醇通过脱氢路径生成的丁醇基,会发生裂解和异构化反应.图 9 给出了丁醇基裂解的主要消耗反应路径, $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-1$ 裂解生成 $\text{C}_2\text{H}_3\text{OH}$ 和 C_2H_5 的反应速率最大.图 10 给出了丁醇基间的异构化反应, $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-4$ 通过 R1610*生成 p $\text{C}_4\text{H}_9\text{O}$ 的反应速率最大,R1612*次之.

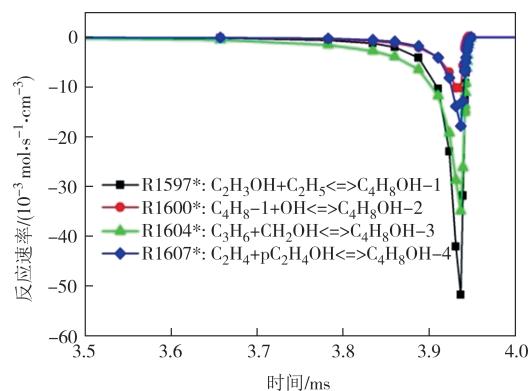


图 9 丁醇基的裂解反应

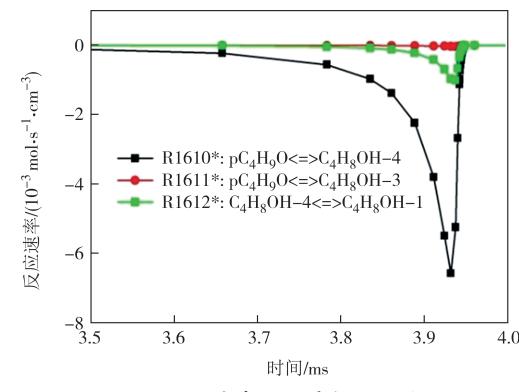
Fig.9 The cracking reactions of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}$ 

图 10 丁醇基间的异构化反应

Fig.10 The isomerization reactions of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}$

$\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-\text{O}_2$ 和 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}-\text{OOH}$ 通过裂解生成的烯醇,在高温反应阶段会继续进行单分子裂解和脱氢反应.如图 11 所示,R1628*和R1647*是反应速率最大的两个烯醇脱氢反应, $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}1-4$ 和 $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}1-1$ 分别与 OH 反应生成烯醇基.随后,烯醇基会继续进行裂解反应,R1695*是烯醇基最大的消耗反应,生成 C_4H_6 和 OH,如图 12 所示,其中 OH 是高温反应的主要自由基.如图 13 所示,在烯醇的单分子裂解反应中,R1711*的反应速率最高.

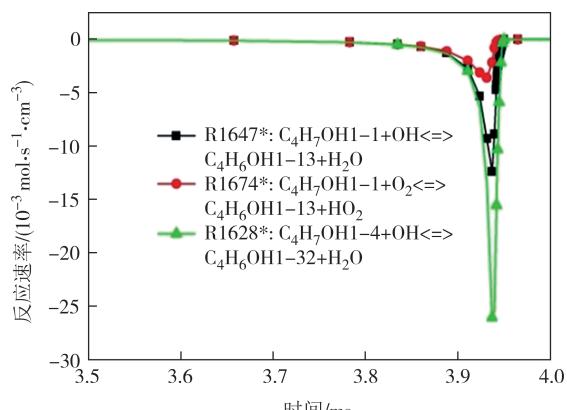


图 11 烯醇的脱氢反应

Fig.11 The dehydrogenation reactions of $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}$

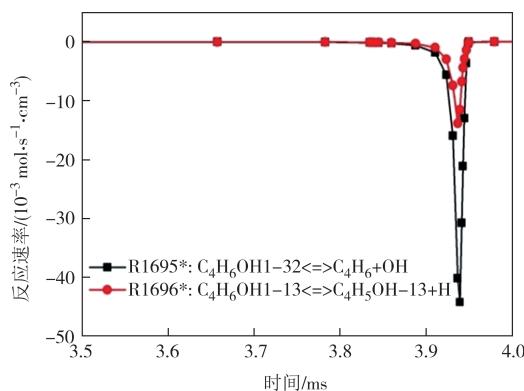


图 12 烯醇基的裂解反应

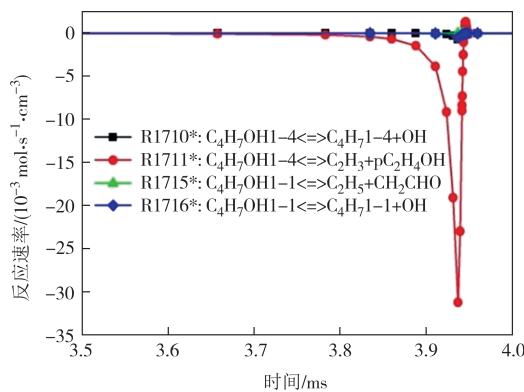
Fig.12 The cracking reactions of $\text{C}_4\text{H}_6\text{OH}$ 

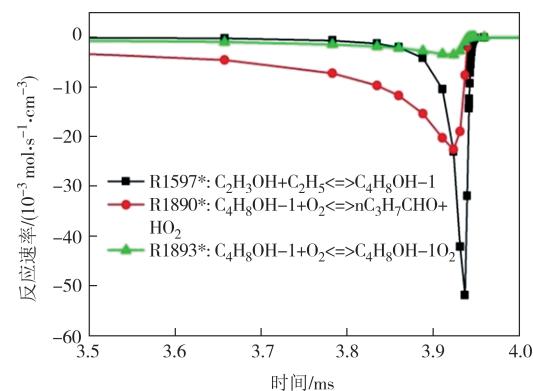
图 13 烯醇的单分子裂解反应

Fig.13 The cracking reactions of $\text{C}_4\text{H}_7\text{OH}$

除上述分析的各类反应外, 对比 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-1$ 的加氧反应 R1893* 与裂解反应 R1597*, $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-1$ 加氧生成醛和 HO_2 在正丁醇的高温反应阶段 (R1890*) 也具有较大的反应速率, 如图 14 所示。

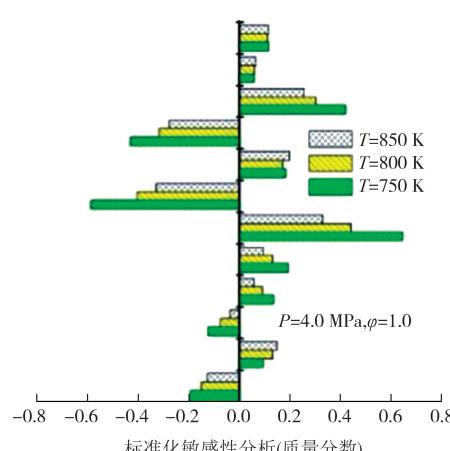
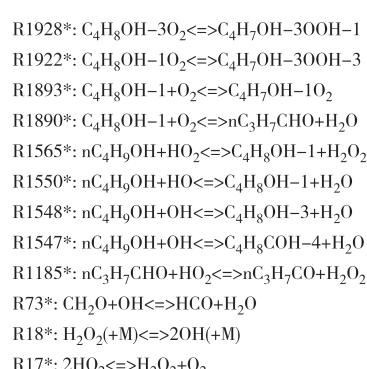
1.2.3 敏感性分析

温度和层流火焰速度是评价燃料燃烧的两个极其重要的因素。本节将利用敏感性分析方法, 通过改变初始温度 (T)、当量比 (φ) 来找出正丁醇燃烧过程中对温度和层流火焰速度影响较大的主要基元反

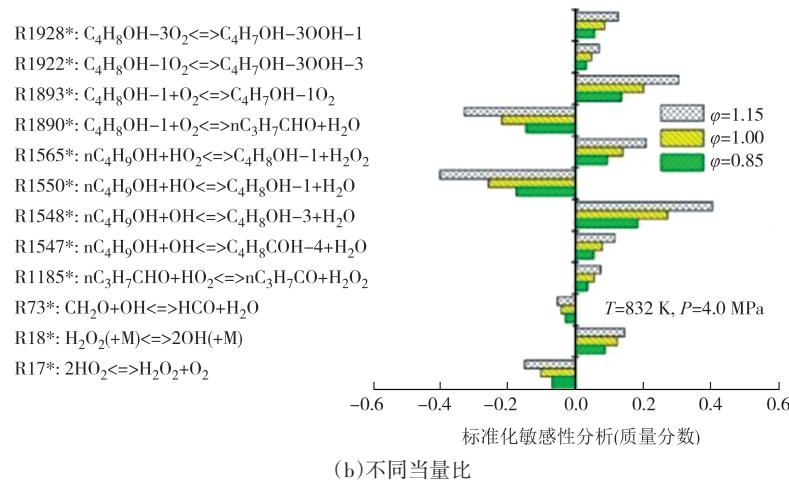
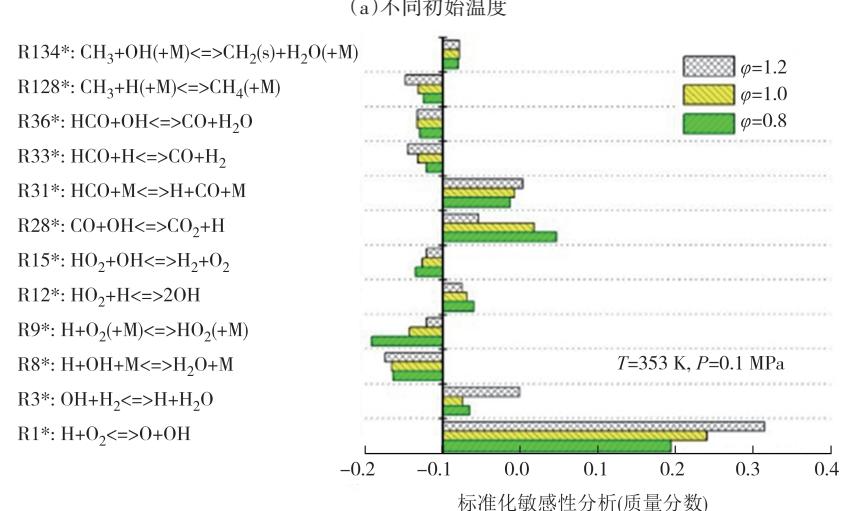
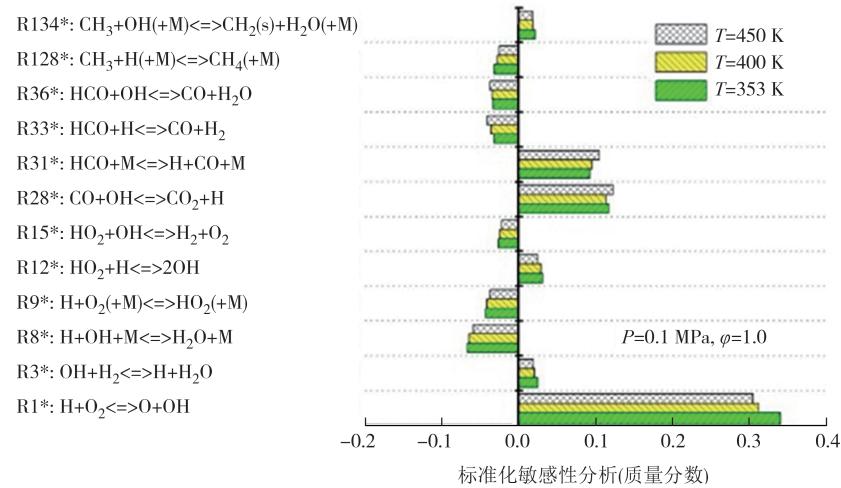
图 14 $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-1$ 的主要反应路径Fig.14 The main reactions path of $\text{C}_4\text{H}_8\text{OH}-1$

应。其中, 温度敏感性在激波管模型中计算得到, 层流火焰速度敏感性在一维预混层流火焰速度模型中计算。由图 15(a) 和 15(b) 给出的 $n\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ 的温度敏感性分析结果可知, R1548*、R1550*、R1890* 和 R1893* 等大分子反应对温度变化较敏感, 个别小分子反应如 R17*、R18* 和 R73* 虽然也具有较高的温度敏感性系数, 但影响力不及大分子反应。

图 16 给出了在压力 0.1 MPa、不同初始温度或不同当量比工况下正丁醇层流火焰速度敏感性系数最大的前 12 个基元反应。与温度敏感性不同, 离解的小分子和自由基团间的反应对层流火焰速度影响最大, 其中, $\text{H}+\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O}+\text{OH}$ 有最高的正敏感系数, 提高该反应速率能够增强系统反应活性, 但其敏感性随着温度的升高而降低, 随着当量比的增大而增大。与此同时, R8*、R9* 和 R15* 等反应对层流火焰速度的提高起主要的抑制作用, $\text{CH}_3+\text{H}(\text{+M}) \rightleftharpoons \text{CH}_4(\text{+M})$ 有较大的负敏感性系数, 该反应对预测烷烃类燃料的层流火焰速度也是至关重要的。通过对正丁醇燃烧的敏感性分析, 可以得到对温度和层流火焰速度影响较大的基元反应, 为正丁醇简化模型的构建提供指导。



(a) 不同初始温度

图 15 nC₄H₉OH 的温度敏感性分析Fig.15 The temperature sensitivity analysis of nC₄H₉OH图 16 nC₄H₉OH 的层流火焰速度敏感性分析Fig.16 The LFS sensitivity analysis of nC₄H₉OH

1.2.4 机理类别的梳理

通过研究 Sarathy 等提出的丁醇详细反应机理的

主要反应路径, 概括和总结出正丁醇氧化过程中典型的高温反应与低温反应的机理类别, 如表 1 和表 2

所示。其中,低温反应阶段的正丁醇燃料消耗反应与高温反应类别2相同,氢过氧化丁醇基用Q表示,丁醇基用R表示。

表1 正丁醇主要高温反应类别

Tab.1 The high temperature reaction categories for n-butanol

序号	反应类型
1	正丁醇(nC_4H_9OH)单分子燃料的裂解反应
2	正丁醇(nC_4H_9OH)分子的脱氢反应
3	丁醇基的裂解反应
4	丁醇基的异构化反应
5	烯醇(Enol, 不饱和醇)的脱氢反应
6	烯醇酮(Enol-Keto)间的异构化及被 H 、 HO_2 和甲酸催化异构化
7	烯醇加氢反应
8	烯醇基的裂解反应
9	烯醇单分子裂解反应
10	1-丁醇基加氧生成醛/酮和 HO_2

表2 正丁醇主要低温反应类别

Tab.2 The low temperature reaction categories for n-butanol

序号	反应类别
11	丁醇基的加氧反应($R+O_2=ROO$)
12	$R+ROO=RO+RO$
13	$R+HO_2=RO+OH$
14	$R+CH_3O_2=RO+CH_3O$
15	ROO自由基的异构化反应($ROO=QOOH$)
16	$ROO=enol+HO_2$
17	$ROO+HO_2=ROOH+HO$
18	$ROO+H_2O_2=ROOH+HO_2$
19	$ROO+CH_3O_2=RO+CH_3O+O_2$
20	$ROO+ROO=RO+RO+O_2$
21	$ROOH=RO+OH$
22	RO的裂解反应
23	通过环化作用生成环氧醇
24	$QOOH=enol+HO_2$
25	$QOOH=$ 烯烃(alkene)/ $=$ 烯醇+羧基(carbonyl)+ OH
26	$QOOH+O_2=OOQOOH$
27	氢过氧化1-丁基与 O_2 的反应
28	$OOQOOH=$ 氢过氧化酮(ketohydroperoxide)+ OH 或其他产物
29	氢过氧化酮裂解为含氧自由基和 OH
30	环氧醇与 OH 和 HO_2 的反应

1.3 正丁醇简化机理的构建

通过比较不同的机理简化方法,我们发现Liu等^[14]给出的“半解耦”方法,能够有效预测滞燃期及层流火焰速度的变化趋势,该方法的详细表述可查阅文献[15],具体步骤为:首先,选取可靠且详细的

H_2 、 $C0\sim Cn$ (n 取3、2或1)小分子反应机理作为整个机理的“内核”,用以准确计算燃料的高温阶段化学反应过程及火焰传播特性;其次,分析简化燃料在低温阶段的化学反应机理,并耦合已选取的“内核”模型,以模拟燃料的着火特性;最后,通过调整部分化学反应常数(指前因子、温度指数和活化能),以便同时准确预测层流火焰速度、关键组分变化和滞燃期等重要燃烧指标。

根据“半解耦”思想,选择Liu模型^[14]中 $C1/CO/H_2$ 小分子机理作为机理的“内核”。过渡反应选用Brakora等^[16]的 $C2\sim C3$ 的子模型,该子模型仅包含 C_3H_7 、 C_3H_6 、 C_3H_5 、 C_2H_4 和 C_2H_3 等组分,机理规模小,且已经被证实具有很好的准确性和预测性。结合本文对正丁醇燃料在低温反应和高温反应阶段的主要反应链及中间产物的分析,调整部分反应的指前因子系数,本文最终构建了一个新的正丁醇简化动力学模型,包括70种组分和150个基元反应。该模型在低温反应阶段和高温反应阶段的基本反应链以及所涉及的主要中间产物如图17所示。

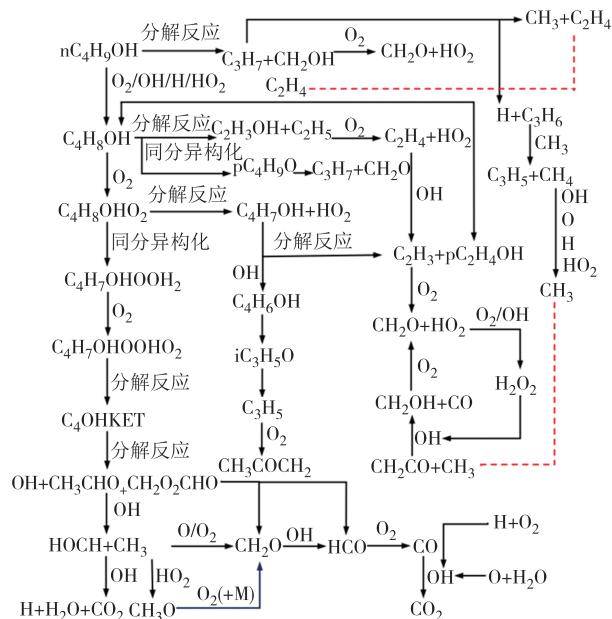


图17 正丁醇简化机理的主要反应路径

Fig.17 The main reaction path of n-butanol reduced mechanism

2 简化机理的验证

2.1 滞燃期的验证

图18给出了初始压力分别为4.0 MPa和8.0 MPa,当量比为1.0下,本文构建的正丁醇简化模型滞燃期

计算值与试验数据的对比,滞燃期的试验数据分别取自 Heufer 等^[17]和 Vranckx 等^[5]的研究。由图 18 可知,本文构建的正丁醇简化机理与 Sarathy 详细机理的滞燃期计算值与试验值取得了良好的一致性。为了简化表述,本文图例中“Exp”表示文献中的试验值,“Cal”表示化学反应动力学模型的计算值。

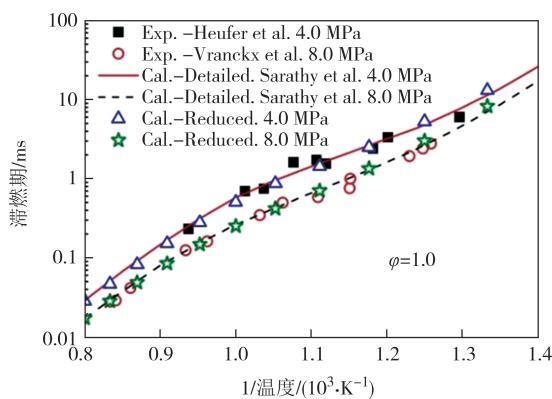
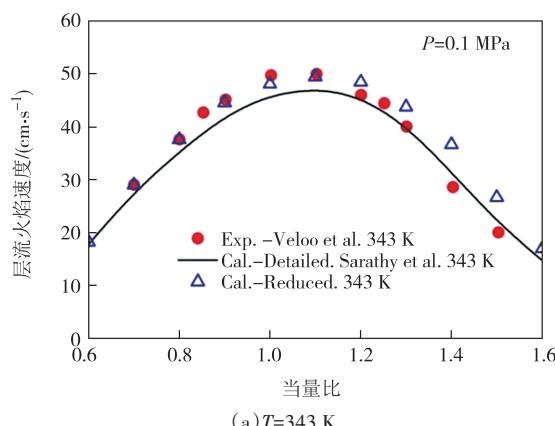


图 18 正丁醇在激波管中的滞燃期验证

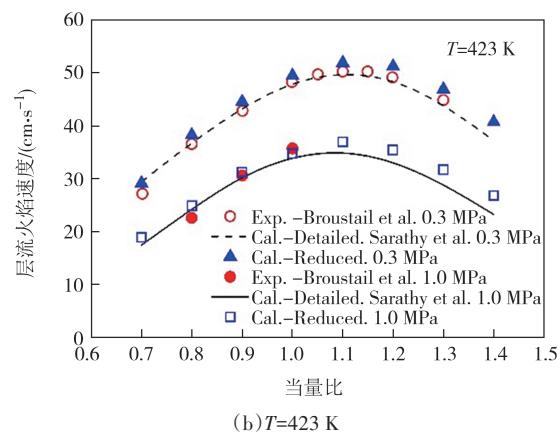
Fig.18 The verification of ignition delay of n-butanol in ST

2.2 层流火焰速度的验证

图 19(a)和(b)给出了初始压力为 0.1 MPa, 初始温度分别为 343 K 和 423 K 时, 本文构建的正丁醇简化模型对正丁醇/空气层流火焰速度的计算值和试验值的对比。层流火焰速度的试验数据分别取自 Veloo 等^[18]和 Broustail 等^[19]的研究。与 Sarathy 详细机理相比, 虽然正丁醇简化机理对层流火焰速度的预测与试验值仍有误差, 但也取得了较高的精度。在初始温度为 343 K, 当量比小于 1.1 时, 本文构建的正丁醇简化模型计算的层流火焰速度与试验值误差极小, 预测精度甚至优于 Sarathy 详细机理^[4]。因此, 本文构建的正丁醇简化机理可以比较合理地预测层流火焰速度随初始温度和当量比的变化趋势。



(a) $T=343\text{ K}$



(b) $T=423\text{ K}$

Fig.19 The LFS comparison between simulation results and experimental values

3 结论

1) 通过分析正丁醇在高温和低温反应阶段的关键中间产物及主要反应链, 基于“半解耦”方法, 通过选择 Liu 模型^[14]中 C1/CO/H2 小分子机理作为“内核”, 结合 Brakora 等^[16]提出的 C2~C3 子模型作为过渡机理, 构建了包含 70 种组分和 150 个反应的正丁醇化学反应动力学简化机理。

2) 利用化学反应动力学程序 CHEMKIN PRO, 对本文构建的正丁醇简化模型进行数值分析, 并与已发表的实验数据进行比较, 结果表明: 本文构建的正丁醇简化动力学机理能够很好地通过一维层流火焰速度、激波管的实验验证, 不仅可以合理预测层流火焰速度的演变趋势, 还能够准确计算正丁醇滞燃期的发展。

参考文献

- [1] SHENAVAEIZARE T, KHOSHSIMA A, ZARENEZHAD B. Development of surfactant-free microemulsion hybrid biofuels employing halophytic salicornia oil/ethanol and oxygenated additives[J]. Fuel, 2021, 292: 120249.
- [2] EBADIAN M, VAN DYK S, McMILLAN J D, et al. Biofuels policies that have encouraged their production and use: an international perspective[J]. Energy Policy, 2020, 147: 111906.
- [3] LIU K M, LI Y T, YANG J, et al. Comprehensive study of key operating parameters on combustion characteristics of butanol-gasoline blends in a high speed SI engine [J]. Applied Energy, 2018, 212: 13–32.
- [4] SARATHY S M, VRANCKX S, YASUNAGA K, et al. A

- comprehensive chemical kinetic combustion model for the four butanol isomers [J]. Combustion and Flame, 2012, 159 (6) : 2028–2055.
- [5] VRANCKX S, HEUFER K A, LEE C, et al. Role of peroxy chemistry in the high-pressure ignition of n-butanol: experiments and detailed kinetic modelling[J]. Combustion and Flame, 2011, 158(8): 1444–1455.
- [6] FENG H Q, ZHANG J, LIU D J, et al. Development of a reduced n-butanol mechanism with combined reduction methods [J]. Fuel, 2017, 187: 403–416.
- [7] HUANG H Z, ZHU J Z, ZHU Z J, et al. Development and validation of a new reduced diesel-n-butanol blends mechanism for engine applications[J]. Energy Conversion and Management, 2017, 149: 553–563.
- [8] CHOO E J C, CHENG X W, SCRIBANO G, et al. Development and validation of a n-butanol reduced chemical kinetic mechanism under engine relevant conditions [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2021, 53(12): 1285–1305.
- [9] WANG H, DENEYS REITZ R, YAO M F, et al. Development of an n-heptane-n-butanol-PAH mechanism and its application for combustion and soot prediction [J]. Combustion and Flame, 2013, 160(3): 504–519.
- [10] LIU K M, FU J Q, DENG B L, et al. The influences of pressure and temperature on laminar flame propagations of n-butanol, iso-octane and their blends[J]. Energy, 2014, 73: 703–715.
- [11] RANZI E, FRASSOLDATI A, GRANA R, et al. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2012, 38(4): 468–501.
- [12] LIU Z B, ZHEN X D, GENG J, et al. Effects of injection timing on mixture formation, combustion, and emission characteristics in a n-butanol direct injection spark ignition engine [J]. Energy, 2024, 295: 131059.
- [13] CAI Y, JIA M, LI Y, et al. Multiple combustion modes switching to realize full-load efficient energy conversion of n-butanol/diesel dual direct injection (DI²) engine [J]. Energy Conversion and Management, 2023, 278: 116722.
- [14] LIU Y D, JIA M, XIE M Z, et al. Improvement on a skeletal chemical kinetic model of iso-octane for internal combustion engine by using a practical methodology [J]. Fuel, 2013, 103: 884–891.
- [15] 刘凯敏, 鄂加强, 杨靖等. 汽油PRF简化化学反应动力学模型的构建研究[J]. 湖南大学学报(自然科学版), 2022, 49(6): 37–44.
- [16] LIU K M, E J Q, YANG J, et al. Study on Reduced Chemical Reaction Kinetic Mechanism of Primary Reference Fuel for Gasoline [J]. Journal of Hunan University (Natural Sciences) , 2022,49(6): 37–44. (in Chinese)
- [17] BRAKORA J L, RA Y, REITZ R D, et al. Development and validation of a reduced reaction mechanism for biodiesel-fueled engine simulations [J] . SAE International Journal of Fuels and Lubricants, 2009, 1(1):675–702. .
- [18] VELOO P S, WANG Y L, EGOLFOPOULOS F N, et al. A comparative experimental and computational study of methanol, ethanol, and n-butanol flames[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(10): 1989–2004.
- [19] BROUSTAIL G, HALTER F, SEERS P, et al. Experimental determination of laminar burning velocity for butanol/iso-octane and ethanol/iso-octane blends for different initial pressures [J]. Fuel, 2013, 106: 310–317.