

文章编号: 1000-582X(2012)10-085-08

# 柴油机燃烧过程中多环芳香烃的生成机理

王 峰, 郑朝蕾, 何祖威

(重庆大学 低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400044)

**摘 要:**以正庚烷和甲苯作为柴油燃料替代混合物, 构建了 1 个包含多环芳香烃(PAHs)的柴油燃料替代混合物燃烧化学动力学机理, PAHs 的生成考虑到 5 个苯环。该机理包括 153 种组分, 697 个基元反应。在激波管、正庚烷预混火焰和均质充量压燃着火发动机条件下对该机理进行了验证, 结果表明构建的机理在 HCCI 燃烧方面的预测性能是可靠的, 可以进一步简化, 进而为 CFD 多维模型与化学反应动力学模型相耦合计算燃烧和排放提供了可行的途径。

**关键词:**柴油替代燃料; 多环芳香烃; 充量压燃着火

**中图分类号:**TK464

**文献标志码:**A

## PAHs formation mechanism during Combustion Process of Diesel Engines

WANG Feng, ZHENG Zhaolei, HE Zuwei

(Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems, Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**Abstract:** Based on the diesel surrogate fuel (n-heptane and toluene), we develop a new kinetic mechanism of diesel surrogate fuel included polycyclic aromatic hydrocarbon (PAHs) formation and growth of up to five aromatic rings. The new mechanism included 153 species and 697 reactions. We compare it with various experimental data available in the literature including shock tube, n-heptane premixed flames and homogeneous charge compression ignition(HCCI) engine, and the results show the good performance for HCCI combustion prediction by this new mechanism. The presented mechanism can be used as the basis for further reductions and applied the combustion and emission simulation by coupling chemical reaction kinetics model with computational fluid dynamics model in internal combustion engines.

**Key words:** diesel surrogate fuel; polycyclic aromatic hydrocarbon; Homogeneous charge compression ignition

柴油机的不均质、异相燃烧, 特别是燃烧时燃料分子往往被高温火焰或燃烧产物包围这一特点, 决定了排气中主要的有害排放物为颗粒物和  $\text{NO}_x$ 。

为了满足日益严格的排放法规, 缓解石油危机, 以均质充量压燃着火(HCCI)燃烧为代表的高效清洁燃烧方式是目前国内外内燃机界研究的焦点。随着研究和对燃烧概念理解的深入, 柴油机 HCCI 燃

烧在广义概念上并不是指缸内混合气绝对均匀燃烧, 而是包括分层燃烧、低温燃烧等一系列缸内混合气存在浓度分层的新型燃烧方式。这类新型燃烧方式以预混燃烧为主, 在很大程度上避免了传统柴油机燃烧的扩散燃烧阶段, 其排放中颗粒物质量浓度极低, 但由于这类燃烧方式与传统的柴油机和汽油机燃烧不同, 因此, 颗粒物的生成、演变及理化特性

**收稿日期:**2012-05-11

**基金项目:**国家科技支撑计划资助项目(2009BAG13B01);国家自然科学基金资助项目(51006128)

**作者简介:**王峰(1982-), 男, 重庆大学博士研究生, 主要从事内燃机燃烧过程数值模拟方向研究。

郑朝蕾(联系人), 女, 重庆大学副教授, 研究方向为内燃机燃烧理论, (E-mail) zhengzhaolei2002@yahoo.com.cn。

必然与传统的柴油机和汽油机不同。

碳烟是柴油机排放微粒的主要组成部分,常占微粒总量的 50%~80%之多。它被确定为可吸入颗粒物,对人体健康有严重危害,特别是碳烟前驱物多环芳香烃(PAHs)中某些成分对人体和生物具有较强的致癌和致突变作用。因此,在新型燃烧方式研究的过程中,无论是降低碳烟排放还是降低 PAHs 排放,对 PAHs 生成机理的研究都是必要的。

Wang, Appel, Slavinskay 分别在乙炔、乙烯层流预混火焰<sup>[1]</sup>以及乙烯、乙炔和乙烷层流预混火焰中<sup>[2]</sup>和甲烷和乙烯层流火焰<sup>[3]</sup>下对碳烟前驱体的生成和增长进行了研究。瑞典查尔姆斯理工大学 Golovitchev 教授构建了由 70 种组分和 313 个化学反应组成的正庚烷/甲苯的化学反应动力学模型<sup>[4]</sup>,但模型中关于 PAHs 的化学动力学机理只涉及到不多于 2 个苯环的苯和萘,这对于模拟碳烟的生成存在很大的局限性。

国内学者 Xi 和赵昌普等人的共同点都是用了 Wang 和 Frenklach 论文里的机理作为 PAHs 的基础,然后加入正庚烷的机理进行研究<sup>[5-6]</sup>。但是 Wang 和 Frenklach 机理研究 PAHs 的形成和发展直到 4 个苯环,并没有考虑甲苯、茚以及大于茚的芳香烃。研究表明这些芳香烃在 PAHs 占的比例很大<sup>[3]</sup>。

以正庚烷和甲苯作为柴油燃料替代混合物,构建一个包含 PAHs 的柴油燃料替代混合物机理,PAHs 的生成考虑到五环。对柴油机 HCCI 燃烧条件下燃烧过程中的 PAHs 化学反应途径进行研究,总结出燃烧过程中 PAHs 形成的关键反应和关键物质,为探索降低 PAHs 及碳烟排放的策略提供理论基础。

## 1 柴油燃料替代混合物的选择及机理构建

柴油的组分包括约 37%的链烷烃、34%的环烷烃和 29%(质量分数)的芳香烃。正庚烷 HCCI 燃烧是典型的两阶段燃烧,它的化学动力学已经在发动机条件下得到广泛确认。柴油中芳香烃混合物主要是单芳香族化合物,碳原子个数在 9~14 之间<sup>[7]</sup>。它们的分子结构可以认为是苯环加上 1 个或多个烷自由基。然而苯看起来过于简单,且没有分支结构,所以选择甲苯作为柴油燃料中芳香烃的代表。而环烷烃由于缺乏低温反应机理,为了避免化学动力学模型的复杂性,文中选择链烷烃的代表正庚烷和芳

香烃的代表甲苯作为柴油燃料的替代物组分,并构建了新的正庚烷/甲苯的化学动力学机理。其中正庚烷机理为 Peters 等人的骨架机理<sup>[8]</sup>,该机理包括了高温和低温阶段的主要反应。甲苯机理来源于 Andrae 等人的 TRF 模型<sup>[9]</sup>,另外还考虑了正庚烷和甲苯的交叉反应<sup>[10]</sup>。

笔者选择的柴油燃料替代混合物是正庚烷和甲苯,这与传统的柴油替代燃料正庚烷不同,为了考察柴油燃料替代混合物中甲苯的作用,下面通过和实验<sup>[11]</sup>对比来说明。

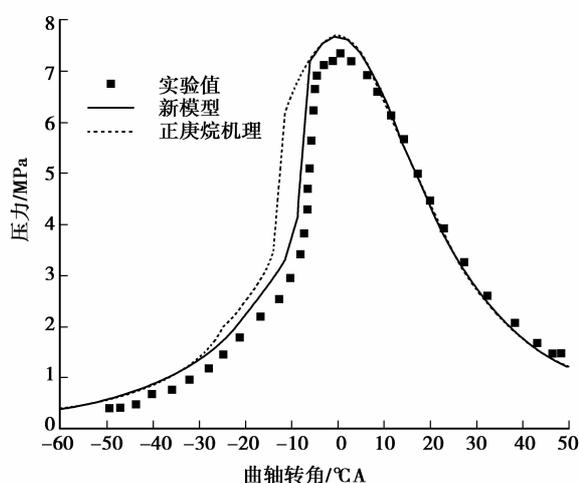


图 1 缸内压力计算结果与实验结果比较

计算所选取的 HCCI 发动机基本结构参数见文献<sup>[11]</sup>。计算所选取的工况:计算始点为上止点前 140 °CA,所对应的初始温度为 405 K,初始压力为 0.11 MPa,压缩比 15.36,转速 1 800 r/min。实验的燃料为柴油,其十六烷值是 58.3。

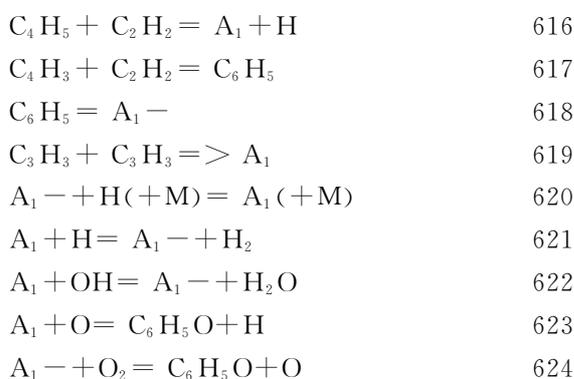
图 1 为利用新机理(正庚烷和甲苯的摩尔分数比 7:3, Golovitchev<sup>[4]</sup>认为用 70 mol%的正庚烷和 30 mol%的甲苯组成的混合燃料与实际的柴油燃料的性能很接近)、Patel 的 ERCV2 正庚烷机理<sup>[11]</sup>的计算结果和实验结果<sup>[12]</sup>的比较。可以看出:加入甲苯,使燃烧滞后。这是由于低温条件下较低的热释放率所致,因为在低温条件下,甲苯没有冷焰现象发生<sup>[13]</sup>。它们会和正庚烷低温条件下的产物进行反应,从而降低了混合物的反应速率,导致着火延迟明显。新机理的计算结果与实验更接近,可以更精确的模拟柴油燃料燃烧过程。从而进一步说明正庚烷和甲苯作为柴油燃料替代混合物的合理性。

## 2 PAHs 机理构建及主要反应路径分析

PAHs 生成和氧化机理以 Wang 和 Frenklach 的化学动力学模型<sup>[1]</sup>为基础,并增加了涉及到 5 个苯环的 PAHs 化学动力学机理<sup>[3]</sup>,对 PAHs 主要反应路径分析如下。

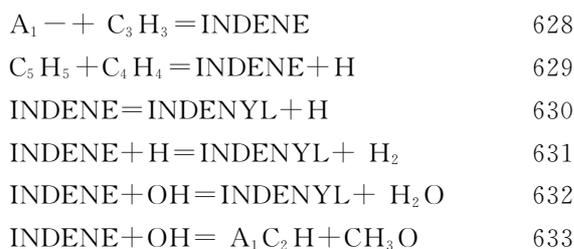
### 2.1 苯(A<sub>1</sub>)的形成和氧化

苯的生成途径主要有 2 条:一是 C<sub>4</sub>H<sub>x</sub> 与 C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 的环化反应生成第一个苯和苯基;另一条途径是在高温缺氧条件下,丙炔基化合生成苯环。苯和苯基的氧化反应为 621—624。



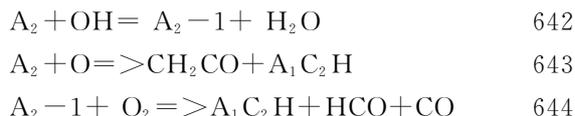
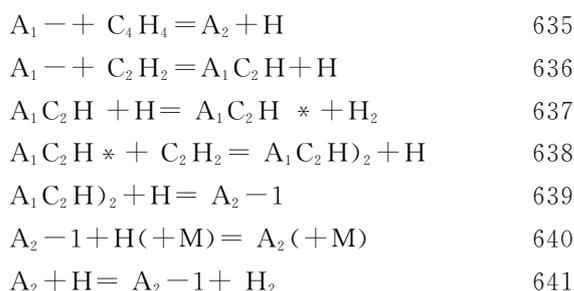
### 2.2 茛(INDENE)的形成和氧化

茛的生成路径主要有 2 种:一是苯基和丙炔基化合生成茛;二是环戊二烯基 C<sub>5</sub>H<sub>5</sub> 和乙烯基乙炔 C<sub>4</sub>H<sub>4</sub> 化合生成茛。茛的氧化反应为 631—633。



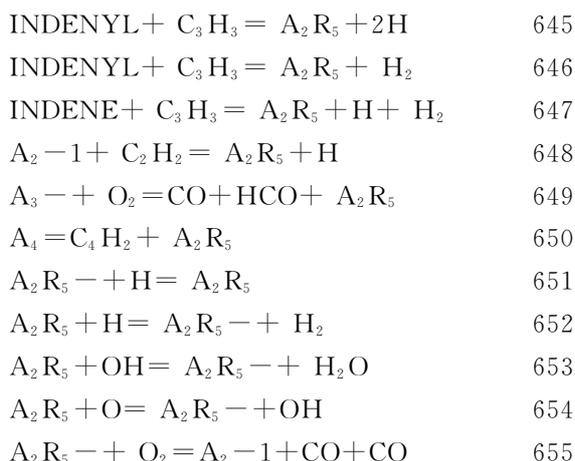
### 2.3 萘(A<sub>2</sub>)的生成和氧化路径

萘的生成路径主要有 2 条:苯基添加乙烯基乙炔(C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>);苯基通过 HACA 反应机理先生成苯炔基,然后生成二乙炔基苯 A<sub>1</sub>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>,二乙炔基苯 A<sub>1</sub>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> 与氢原子反应生成萘基,紧接着萘基和氢原子结合生成萘。萘和萘基的氧化反应为 641—644。



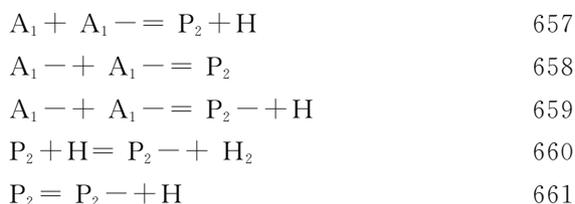
### 2.4 茈(A<sub>2</sub>R<sub>5</sub>)的形成和氧化

茈的生成路径主要有 4 种:茛、茛基分别与丙炔基化合生成茈;萘基的 HACA 反应机理生长为茈;菲基与氧气反应生成茈;茈的分解反应生成茈。茈和茈基的氧化反应为 651—655。



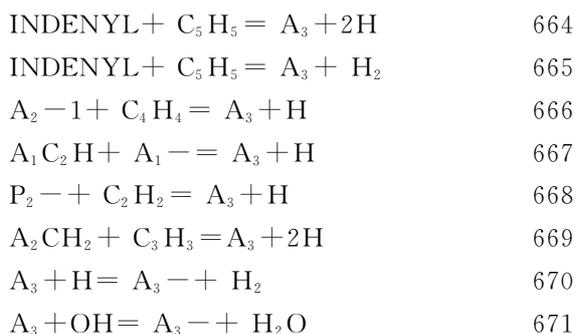
### 2.5 联苯(P<sub>2</sub>)的形成和氧化

联苯的生成路径主要有 2 种:苯与苯基的化合生成联苯;另一个途径是为 2 个苯基的化合。联苯的氧化反应为 660。



### 2.6 菲(A<sub>3</sub>)的生成和氧化路径

菲则通过 5 条途径生成:茛基与环戊二烯基化合生成菲;萘基添加乙烯基乙炔(C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>);乙炔苯脱氢后与苯基化合生成菲;联苯基加乙炔生成菲;A<sub>2</sub>CH<sub>2</sub> 与丙炔基化合生成菲。菲的氧化反应为 670、671。



### 2.7 芘(A<sub>4</sub>)的生成和氧化路径

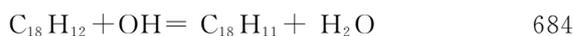
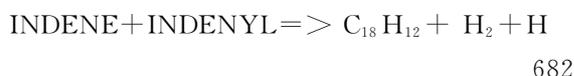
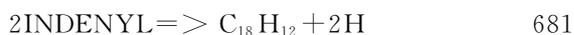
芘的生成主要是通过 A<sub>3</sub>- 与乙炔的反应, A<sub>3</sub>-

和乙炔的反应遵循 HACA 反应机理;  $C_{18}H_{11}$  和  $O_2$  反应生成芘。芘和芘基的氧化反应为 677-679。



## 2.8 1,2-苯并菲( $C_{18}H_{12}$ )的形成和氧化

$C_{18}H_{12}$  主要有 2 条生成路径, 一是通过茛基之间的化合生成; 二是茛和茛基化合生成。 $C_{18}H_{12}$  和  $C_{18}H_{11}$  的氧化反应为 683-685。



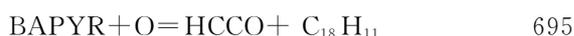
## 2.9 BGHIF 的形成和氧化

BGHIF 有 3 条主要生成路径: 一是茛烯基和苯化合生成; 二是 2 个茛基化合生成; 三是  $C_{18}H_{11}$  与氢原子反应生成。BGHIF 的氧化反应为 689、690。



## 2.10 BAPYR 的形成和氧化

BAPYR 有 3 条主要生成路径: 一是 BGHIF 和乙炔化合生成; 二是  $C_{18}H_{11}$  通过 HACA 反应机理生成; 三是茛烯基和苯乙炔化合生成。BAPYR 的氧化反应为 694、695。



从以上 PAH 分子的形成过程, 可以看到 PAH 分子的形成经历 3 个同等重要的反应类型: HACA 机理、芳香分子/基和小分子的反应、芳香分子和芳香基的反应。这对以前的观点: 即当第一个苯环或苯基生成后, 就可以通过脱氢以激活芳香烃分子, 然后乙炔分子吸附, 促使芳香烃分子的生长和 PAH 的环化反应, 即所谓 HACA(H-abstraction- $C_2H_2$

-addition) 反应机理进一步长大是一个很好的补充。

## 3 包含 PAHs 的柴油燃料替代混合物化学动力学机理验证

在上述柴油燃料替代混合物和 PAH 机理的基础上, 最终得到的总反应机理共 153 种组分, 697 个基元反应。机理的验证主要基于几个与 HCCI 燃烧相关联的实验。

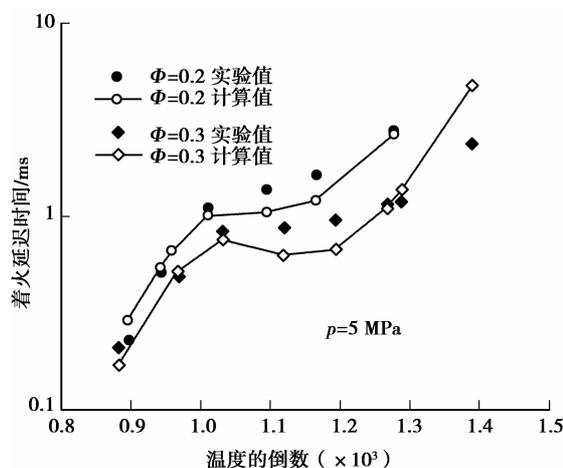
### 3.1 激波管中计算结果与实验结果的比较

对着火延迟的准确预测是检验一个化学动力学机理有效性的重要标志, 该部分工作主要在激波管实验中展开。计算使用化学反应动力学程序 CHEMKIN 4.1 的闭式均相反应器模块 (closed homogeneous batch reactor), 为着重研究反应机理, 计算中模型均采用零维, 忽略流动等因素的影响, 并且假定激波过后激波管内气体的反应在定容、均质、绝热的环境下进行, 计算中的着火延迟期定义为温度超过初始温度 400 K 时所经历的时间。

图 2(a) 是在贫燃预混以及当量比变化的条件下, 模拟计算的正庚烷着火延迟时间和 Herzler 等人<sup>[14]</sup> 的激波管实验数据的比较。初始压力为 5 MPa, 当量比分别为 0.2 和 0.3。

图 2(b) 是模拟计算的正庚烷着火延迟时间和 Fieweger 等人<sup>[15]</sup> 的激波管实验数据的比较。计算的初始压力为 4 MPa, 当量比为 1.0。

可以看出: 模型对温度的变化非常敏感, 能够很好地反映出负温度系数区 (NTC) 的变化。计算结果与实验结果吻合较好。



(a) 压力  $P=5$  MPa,  $\phi=0.2, 0.3$

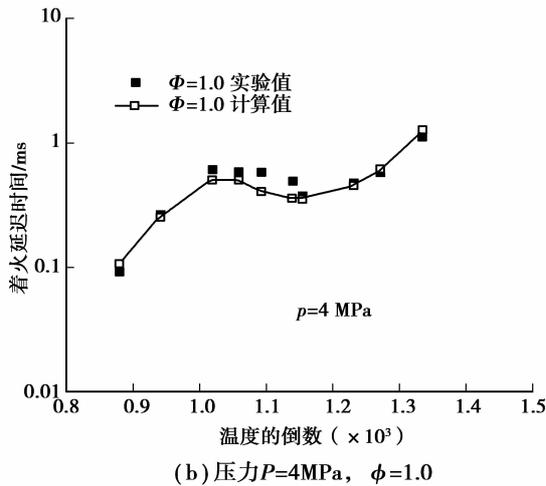


图 2 正庚烷着火延迟时间计算和实验比较

图 3 对甲苯在不同当量比情况下的着火延迟时间进行了模拟计算,并与 Davidson 等人<sup>[16]</sup>的实验数据作对比。实验数据要通过压力相关指数进行标准化。其中当量比为 0.5 时,压力指数为-0.5,当量比为 1.0 时,压力指数为-0.93。可以看出,模型能够很好地预测不同当量比情况下着火延迟时间。但是模型不能够反映出不同当量比情况下实验活化能的差异。因为在低温情况下,2 种当量比分别过低、过高的预测了着火延迟时间。

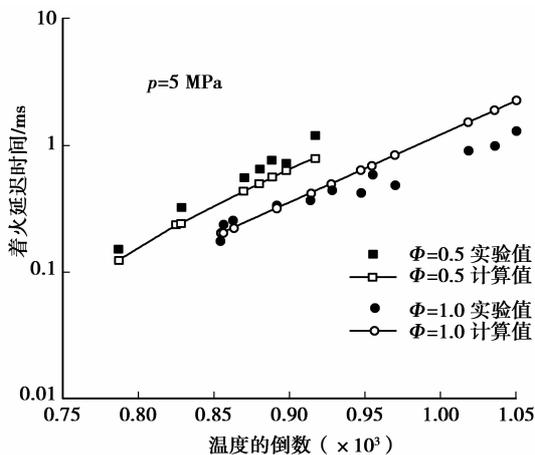


图 3 甲苯着火延迟时间计算和实验比较

图 4 是对贫预混条件下( $\phi=0.3$ ),3 种不同压力的柴油替代燃料计算的着火延迟时间与 Herzler 等人<sup>[17]</sup>的实验数据作比较。柴油替代燃料正庚烷和甲苯的混合物的摩尔百分数分别为 28% 和 72%。实验数据通过压力相关指数进行标准化。当量比为 0.3 时,压力相关指数分别为-0.883。可以看出,化学动力学模型能够很好地反映出随着温度和压力

的变化,着火延迟时间的变化趋势。

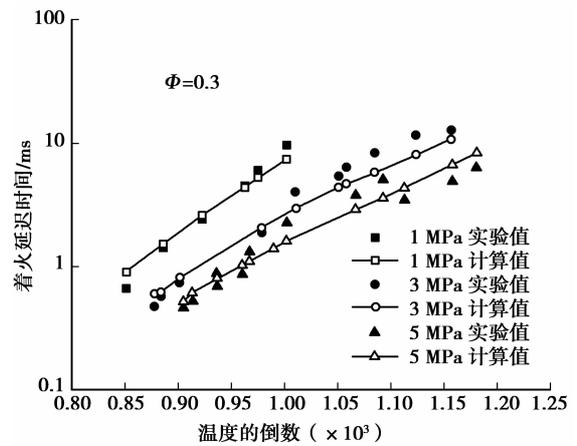


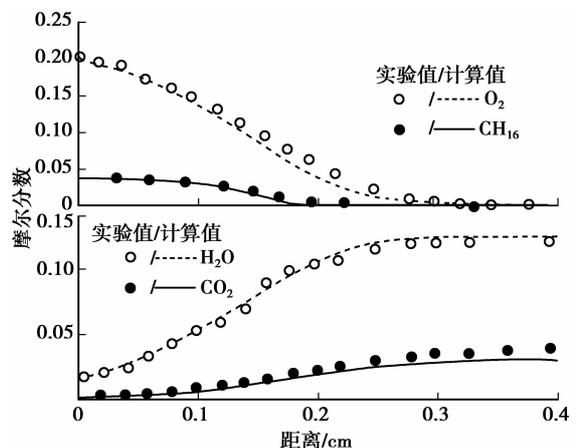
图 4 柴油替代燃料着火延迟时间计算和实验比较

### 3.2 正庚烷预混火焰条件下机理的验证

构建的机理应该有很好的适用性。下面利用构建的新机理,在正庚烷预混燃烧条件下,对燃烧过程中反应物、主要反应生成物、主要中间产物以及 PAH 的生成规律进行了数值计算,并与实验结果<sup>[18-19]</sup>进行了对比分析。模拟采用 Chemkin4.1 软件中的预混火焰模块 PREMIX 计算。

模拟计算中所用的工况如表 1 和表 2 所示:所有工况的压力均为 0.1 MPa。

图 5 显示了反应物和主要产物及主要中间产物摩尔分数变化的模拟结果和实验对比。计算工况如表 1 所示。压力为 0.1 MPa。从图 5 可以看出,反应物和主要产物与实验数据<sup>[18]</sup>吻合很好。主要中间产物中  $C_2H_4$  和  $C_2H_2$  的计算值分别在反应区和燃尽区低于实验值,但是变化趋势和实验值基本吻合。



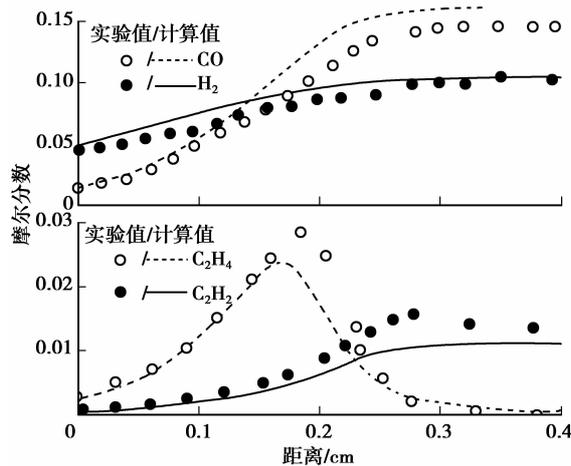


图 5 反应物和主要产物及主要中间产物摩尔分数变化曲线和实验对比

图 6 显示了当量比为 1.97 和 2.10 时,正庚烷预混火焰中各芳香烃的摩尔分数变化曲线和实验<sup>[19]</sup>对比。计算工况见表 2。压力均为 0.1 MPa。6 可以看出:随着当量比的增加,各芳香烃的摩尔分数也随之增加。这与实验预测的结果完全一致。但模拟的各芳香烃的摩尔分数值略低或略高于实验值,这是由于构建机理过程中,只考虑了 PAHs 各组分的主要生成和氧化机理。另外一个原因是 PAHs 组分动力学数据的不确定性所致<sup>[3]</sup>。

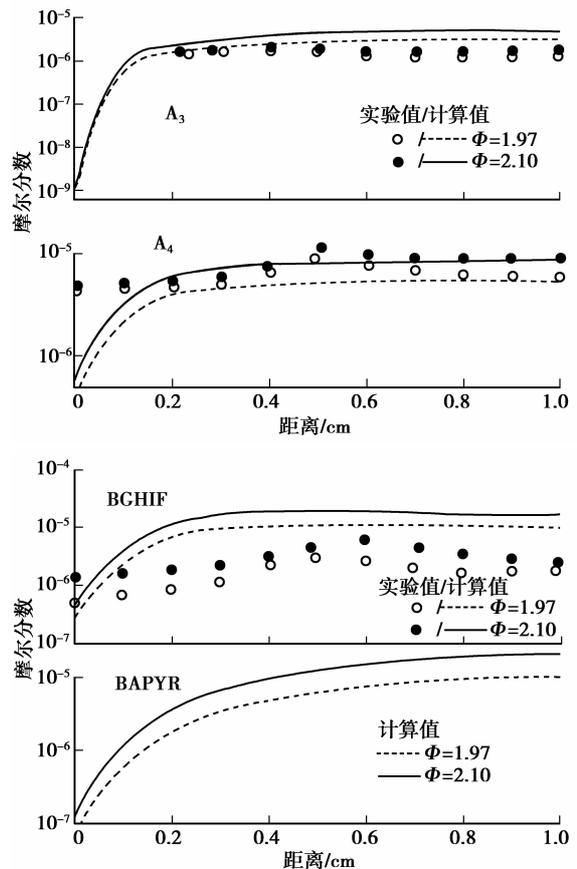
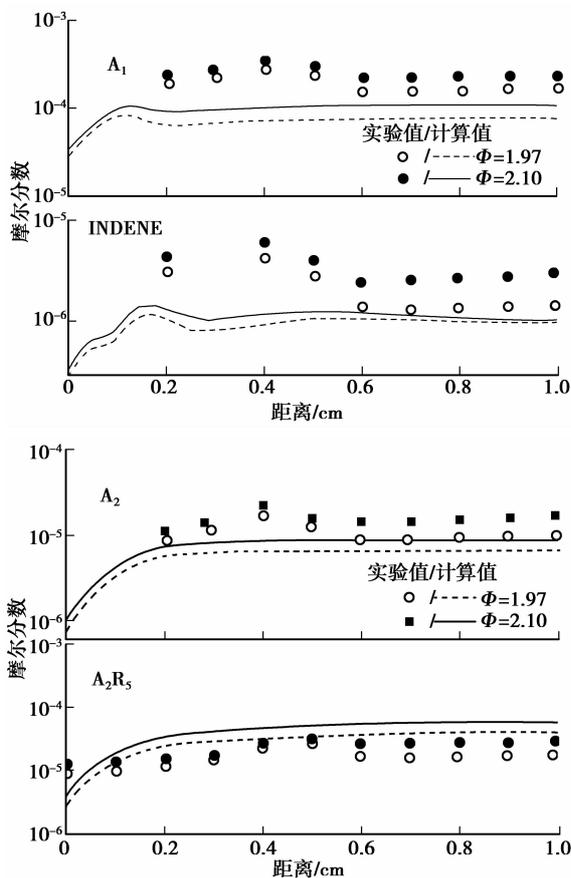


图 6 不同当量比的正庚烷预混火焰中各芳香烃的摩尔分数变化曲线和实验对比



新机理的模拟结果与以正庚烷为基础的实验的比较结果证明,新机理在考虑 PAHs 条件下,与相关的实验测试数据仍然比较吻合。说明该机理可用于正庚烷预混燃烧下产物的预测。

表 1 正庚烷预混火焰初始条件<sup>[18]</sup>

燃空当量比	正庚烷 (摩尔分数)	氧气 (摩尔分数)	氮气 (摩尔分数)	质量流量 / (g/cm <sup>2</sup> · s)
1.9	0.039 8	0.230 1	0.730 1	0.006 17

表 2 正庚烷预混火焰初始条件<sup>[19]</sup>

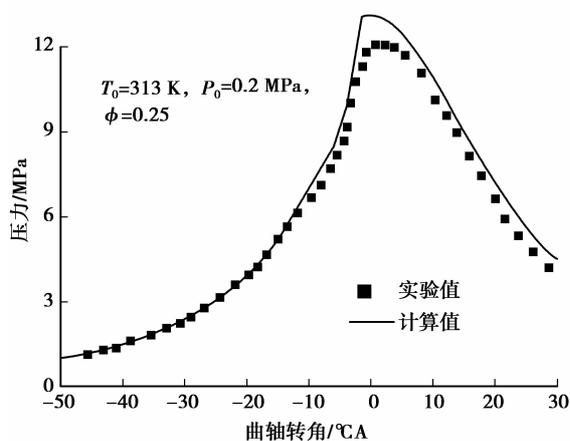
燃空当量比	正庚烷 (摩尔分数)	氧气 (摩尔分数)	氩 (摩尔分数)	进口速度 / (cm · s <sup>-1</sup> )
1.97	0.053 3	0.297	0.649 7	5.25
2.10	0.055	0.287 9	0.657 1	5.17

### 3.3 HCCI 发动机条件下机理的验证

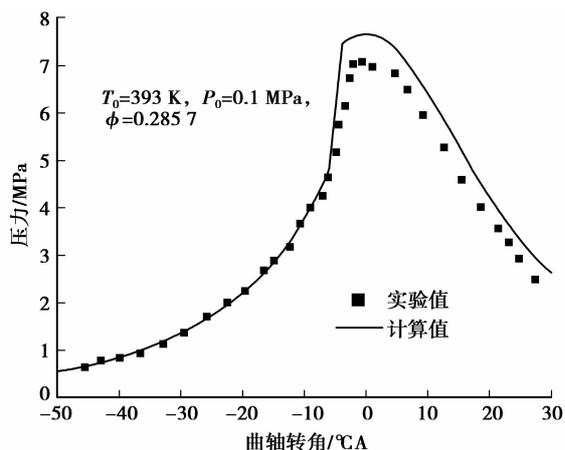
为了考察所构建的化学动力学模型在 HCCI 发动机工况条件下的预测性能,有必要对其进行验证。计算过程中考虑了完整的压缩和膨胀冲程,并以压

缩冲程终点作为曲轴转角的零点。设定计算始点为进气阀关闭点,计算终点是排气阀开启点。为简化计算,假设内燃机的压缩和膨胀过程均完全绝热,不考虑进、排气门关闭时的气体泄漏,不考虑余隙容积中的残留混合气,使用零维单区模型。

基于以上模型假设,采用了美国 SANDIA 国家实验室的 CHEMKIN4.1 软件中的 IC 模块来进行 HCCI 燃烧的计算,计算中采用了 KTH 实验室的发动机主要结构参数,实验系统详见文献[20]。为便于和实验比较,分别对表 3 所示 2 种工况的柴油替代燃料进行分析和比较,计算和实验中柴油替代燃料正庚烷和甲苯混合物的摩尔百分数均为 28%:72%。



(a)  $T_0=313\text{ K}$ ,  $P_0=0.2\text{ MPa}$ ,  $\phi=0.25$



(b)  $T_0=393\text{ K}$ ,  $P_0=0.1\text{ MPa}$ ,  $\phi=0.2857$

图 7 缸内压力计算结果与实验结果比较

工况 1 计算始点为至上止点前  $99^\circ\text{CA}$ , 所对应初始温度  $426\text{ K}$ , 初始压力  $0.28\text{ MPa}$ , 压缩比  $16.7$ , 当量比为  $0.25$ 。工况 2 计算始点为至上止点前  $99^\circ\text{CA}$ , 其所对应的初始温度  $447\text{ K}$ , 初始压力  $0.16\text{ MPa}$ ,

当量比为  $0.2857$ 。

图 7 为柴油替代燃料 2 种工况下压力的计算结果与 KTH 实验室 HCCI 发动机 100 个工作循环的平均压力试验结果<sup>[20]</sup>作比较。可以看出计算的缸内压力比试验结果高,这是由于计算假设缸内温度场、浓度场均匀,忽略了温度、浓度分层对燃烧的影响,此外计算没有考虑传热损失,因此比试验结果偏大,但计算的着火时刻和试验结果基本一致,这表明,该计算模型对着火时刻的预测满足要求。

表 3 HCCI 运行工况

工况	当量比	进气压力/ MPa	进气温度/ K	转速/ ( $\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$ )
工况 1	0.25	0.2	313	900
工况 2	0.2857	0.1	393	900

## 4 结 论

1) 提出了一个包含 PAHs 的柴油燃料替代混合物化学动力学机理,该机理共 153 种组分,697 个基元反应。新机理以正庚烷和甲苯作为柴油燃料替代混合物,更接近实际柴油燃料;将 PAHs 机理从 4 个苯环扩展至 5 个苯环,并增加了茚、萘烯、 $\text{C}_{18}\text{H}_{12}$  和 BGHIF 重要组分的反应机理。

2) 利用构建的柴油替代燃料化学反应机理在激波管条件下对着火延迟时间进行了预测。计算预测的结果与相关实验结果吻合较好。

3) 正庚烷预混火焰计算结果表明:主要反应物、反应生成物、部分中间产物和 PAHs 各组分的浓度分布规律的数值计算结果与实验结果吻合良好,说明该机理可用于正庚烷预混燃烧下产物的预测。

4) 与 HCCI 发动机实验的比较发现,文中机理对着火点、燃烧持续期做出了较好地预测计算。

## 参考文献:

- [1] Wang H, Frenklach M. A detailed kinetic modeling study of aromatics formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames [J]. Combustion and Flame, 1997, 110(1/2): 173-221.
- [2] Appel J, Bockhorn H, Frenklach M. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of  $\text{C}_2$  hydrocarbons [J]. Combustion and Flame, 2000, 121(1/2): 122-136.
- [3] Slavinskaya N A, Frank P. A modelling study of aromatic soot precursors formation in laminar methane and ethene flames [J]. Combustion and Flame, 2009,

- 156(9): 1705-1722.
- [4] Gustavsson J, Golovitchev V. Spray combustion simulation based on detailed chemistry approach for diesel fuel surrogate model[C/OL]. SAE Technical Paper, 2003, 2003-01-1848 [2011-03-28]. <http://papers.sae.org/2003-01-1848/>.
- [5] XI J, ZHONG B J. Reduced kinetic mechanism of n-heptane oxidation in modeling polycyclic aromatic hydrocarbon formation in diesel combustion [J]. Chemical Engineering & Technology, 2006, 29(12): 1461-1468.
- [6] 赵昌普, 陈生齐, 宋崇林, 等. 正庚烷预混火焰中 PAHs 的生成机理[J]. 燃烧科学与技术, 2008, 14(5): 400-405.  
ZHAO Changpu, CHEN Shengqi, SONG Chonglin, et al. PAHs formation mechanism in N-heptane premixed flame [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2008, 14(5):400-405.
- [7] Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, 4 (11): 2079-2094.
- [8] Peters N, Paczko G, Seiser R, et al. Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of n-heptane [J]. Combustion and Flame, 2002, 128 (1/2):38-59.
- [9] Andrae J C G, Brinck T, Kalghatgi G T. HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semi-detailed chemical kinetic model[J]. Combustion and Flame, 2008, 155(4): 696-712.
- [10] Andrae J C G, Brnborn P, Cracknell R F, et al. Autoignition of toluene reference fuels at high pressures modeled with detailed chemical kinetics [J]. Combustion and Flame, 2007, 149(1/2):2-24.
- [11] Patel A, Kong S C, Reitz R D. Development and validation of a reduced reaction mechanism for HCCI engine simulations[C/OL]. SAE 2004 World Congress & Exhibition, Detroit, United States, March 8, 2004, 2004-01-0558 [2011-03-29]. <http://papers.sae.org/2004-01-0558/>.
- [12] Kawano D, Suzuki H, Ishii H, et al. Ignition and combustion control of diesel HCCI[C/OL]// 2005 SAE Brasil Fuels & Lubricants Meeting, Rio De Janeiro, Brazil, May 11, 2005, 2005-01-2132 [2011-03-28]. <http://papers.sae.org/2005-01-2132/>.
- [13] Griffiths J F. Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1995, 21(1):25-107.
- [14] Herzler J, Jerig L, Roth P. Shock tube study of the ignition of lean n-heptane/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30 (1): 1147-1153.
- [15] Fieweger K, Blumenthal R, Adomeit G. Self-ignition of S. I. engine model fuels; a shock tube investigation at high pressure [J]. Combustion and Flame, 1997, 109(4):599-619.
- [16] Davidson D F, Gauthier B M, Hanson R K. Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30 (1): 1175-1182.
- [17] Herzler J, Fikri M, Hitzbleck K, et al. Shock-tube study of the autoignition of n-heptane/toluene/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures [J]. Combustion and Flame, 2007, 149 (1/2):25-31.
- [18] Bakali A E, Delfau J L, Vovelle C. Experimental study of 1 atmosphere, rich, premixed n-heptane and iso-octane flames[J]. Combustion Science and Technology, 1998, 140(1):69-91.
- [19] Inal F, Senkan S M. Effects of equivalence ratio on species and soot concentrations in premixed n-heptane flames [J]. Combustion and Flame, 2002, 131(1/2): 16-28.
- [20] Kalghatgi G, Risberg P, Angstrom. H E. A Method of Defining Ignition Quality of Fuels in HCCI Engines [C/OL]. SAE Fuel & Lubricants Meeting, Yokohama, Japan, May 19-22, 2003, 2003-01-1816 [2011-03-29]. <http://kth.diva-portal.org/smash/record.jsfpid=diva2:10096>.

(编辑 陈移峰)