

【航空动力系统与控制】

基于组分平均的 RP-3 航空煤油替代燃料
机理构建及动力学模拟席双惠¹, 王振宇², 郭 霄², 李树豪²

(1. 郑州航空工业管理学院 机械工程学院, 河南 郑州 450046;

2. 郑州航空工业管理学院 航空发动机学院, 河南 郑州 450046)

摘 要:为解决 RP-3 航空煤油组分复杂导致的燃烧机理建模难题,提出一种基于组分平均的燃烧模型构建方法。该方法通过考察多组实际 RP-3 航空煤油样品的组分特性,明确其平均组分构成以烷烃、环烷烃和芳香烃为主。基于此特性,筛选正十二烷、1,3,5-三甲基环己烷和正丙苯分别作为代表性组分,构建包含 67 组分、246 步基元反应的 RP-3 航空煤油骨架燃烧机理。对机理进行宽工况范围内点火延迟时间、层流火焰速度和关键物种浓度分布的数值模拟,并与公开文献中的实验数据进行对比验证,结果表明:所构建 67 组分机理对点火延迟时间的预测误差小于 30%,层流火焰速度误差在 8% 以内,关键物种浓度分布与实验值吻合良好。物质产率分析和敏感度分析表明,机理完整保留了不同温度区间的关键反应路径,能够精准捕捉核心物种的演变规律。所构建的 67 组分机理兼顾精度与计算效率,可用于工程尺度航空发动机燃烧数值模拟。

关键词:RP-3 航空煤油;替代燃料;组分平均;动力学模拟;基元反应

中图分类号:V 231 **文献标识码:**A **DOI:**10.13486/j.issn.2097-4973.2026.04.001

RP-3 航空煤油作为我国自主研发的核心喷气燃料是保障国产军机与民机稳定运行的“动力血液”,其燃烧性能直接决定航空发动机的推力上限、燃油经济性及污染物排放水平^[1-2]。在“双碳”目标与国防装备升级的双重驱动下,新一代高推重比、低排放航空发动机研发进入攻坚阶段,新一代航空发动机对燃烧过程的控制精度提出毫秒级、微米级要求,而支撑这一精度的核心基础是与 RP-3 真实燃烧规律高度匹配的燃烧机理模型^[3]。由于 RP-3 是包含数百种烃类组分的复杂混合物,直接构建全组分燃烧机理面临物种数量爆炸、计算成本激增等问题,根本无法满足发动机设计阶段“快速迭代、多方案对比”的工程应用需求^[4-5]。因此,构建“精度达标、效率可控”的替代燃料燃烧模型,成为连接燃料基础特性与发动机工程应用的关键桥梁,也是航空发动机领域的核心研究热点。

国外在复杂燃料燃烧模型构建方面起步早、体系成熟,已形成替代燃料法、模块化法、机理简化法三大技术路线并实现工程落地,且围绕 Jet-A、JP-8、JP-10 等煤油型号开展了系统研究^[6-8]。但国外煤油多以石蜡基原油为原料,异构烷烃含量普遍低于 25%,而 RP-3 航空煤油以环烷基原油为核心原料,异构烷烃占比高达 35.6%,导致国外所构建机理对 RP-3 航空煤油点火延迟等参数的预测误差较大。国内学者针对

收稿日期:2026-03-13

基金项目:河南省自然科学基金项目(252300420815);河南省科技攻关计划项目(252102220016)

第一作者简介:席双惠(1992—),女,河南开封人,讲师,博士,主要从事燃烧反应动力学研究。

E-mail: xishuanghui@zua.edu.cn

RP-3 航空煤油的研究已取得阶段性进展。文献[9]基于自主开展的 RP-3 航空煤油对冲火焰实验与激波管点火延迟实验,结合量子化学计算与反应速率敏感性分析,选取正癸烷、正十二烷、异十六烷、甲基环己烷和甲苯为替代组分,构建了包含 181 组分、873 步基元反应的替代燃料燃烧反应机理。该机理通过优化中温区关键反应的速率常数,将 RP-3 燃料在高温下的点火延迟预测误差控制在 5% 以内。文献[10]创新性采用“化学解构-重构”策略,基于 RP-3 各组分不同的权重系数,通过协同优化组分间的交叉反应路径,分别从着重考量分子结构特性和侧重于化学成分占比两种方向,构建了覆盖低温到高温全燃烧区间的包含 2 851 组分、12 242 步基元反应的详细机理。该机理在广泛燃烧工况下对点火延迟时间和重要物种浓度分布进行了模拟验证,为煤油燃料燃烧过程的精细化模拟提供了理论支撑。文献[11]则聚焦直接煤液化替代煤油及其与传统 RP-3 航空煤油喷气燃料混合的点火情况,通过激波管实验与化学动力学模拟研究了掺混比例 50/50 混合燃料的点火特性,并提出了以正十二烷、十氢化萘、正戊基环己烷和正丙基苯为替代组分的包含 793 组分、4 358 步基元反应的直接煤液化喷气燃料燃烧反应机理,其为航空煤油低碳化替代燃料的配方设计与燃烧调控提供了新的技术思路。

尽管上述研究推动了 RP-3 航空煤油燃烧机理的发展,但仍存在三方面问题:一是组分适应性不足,现有研究均以单一来源的 RP-3 航空煤油为研究对象,通过实验测量确定替代组分及配比并构建机理,但实际生产中,不同炼油厂产出的 RP-3 航空煤油因原油来源、加工工艺的差异,其烷烃、环烷烃、芳烃等核心组分的比例存在显著波动,而现有模型多基于固定的组分比例构建,未考虑这种组分差异性,导致模型难以准确预测实际应用中燃料组分波动所引发的燃烧特性变化,严重影响模型的实际适配能力;二是精度与计算成本难以兼顾,文献[10]提出的详细机理虽预测精度较高,但包含的物种与基元反应数量庞大,在进行发动机三维数值模拟时,难以满足工程应用中高效模拟的需求;三是验证体系碎片化,当前多数模型仅通过点火延迟、层流火焰速度等宏观参数进行验证,缺乏对燃烧过程中关键中间体浓度分布及核心反应路径的定量验证,导致模型的可靠性存疑。

针对现有研究的不足,本文提出一种基于组分平均的 RP-3 航空煤油替代燃料燃烧模型构建方法。该方法核心在于考察多组实际 RP-3 航空煤油样品的组分差异,通过对多文献中烷烃、环烷烃和芳香烃三大类组分的配比、不同组分的理化参数进行加权平均,获得能够普遍代表 RP-3 航空煤油整体特性的组分构成,使替代组分更具有普适性,进而避免不同批次 RP-3 航空煤油的成分组成差异问题。基于该方法,选择出代表性组分,构建了包含 67 种物种的骨架机理,并对机理进行宽工况范围点火延迟时间、层流火焰速度及关键物种浓度分布的模拟验证;同时,采用物质产率分析和基于点火延迟时间的敏感度分析对 67 组分机理进行关键反应路径分析,在宽工况范围内验证该机理精度。

1 基于组分平均的 RP-3 煤油燃烧模型构建

受原油种类、产地来源及生产年份等多重因素影响,不同批次的 RP-3 航空煤油在组分构成及比例上存在细微波动,但从大类组分分布规律来看,其核心特征仍保持稳定:各类烃的碳原子数分布在 $C_8 \sim C_{16}$, 但 $C_9 \sim C_{12}$ 碳链长度的烃类在各组分中占比最高,是构成燃料的主体成分;异构烷烃分子结构中通常带有 1~3 个甲基支链,支化特性直接影响燃料的抗爆性能与氧化活性;环烷烃以环己烷及其烷基取代衍生物为主,这类组分是保障燃料低温流动性的关键;芳香烃则以烷基苯类化合物为核心,其含量控制着燃料的结焦倾向与燃烧放热特性。航空煤油组分的高度复杂性导致直接针对实际航空煤油开展燃烧模型研究面临巨大挑战。目前该领域的主流解决路径为筛选理化特性与燃烧规律匹配的单一或多种组分作为替代组分,构建替代燃料体系,通过模拟替代体系的燃烧过程,复现实际燃料的核心燃烧特性,为机理构建与数值模拟提供可行方案。

本研究整合了文献[12-17]的公开测试结果,对各类典型组分的质量占比进行加权平均计算,最终得到较为合理的统计结果:烷烃 63.64%、环烷烃 19.50%、芳香烃 14.24%、其余组分 4.60%。考虑到烷烃

在燃烧过程中的主导作用,将其余组分占比并入烷烃类别。在此基础上,结合替代燃料模型对 RP-3 航空煤油理化特性的复现能力,最终确定本研究的 RP-3 航空煤油替代燃料体系组成为烷烃 67.34%、环烷烃 19.50%、芳香烃 13.16%,具体配比如表 1 所示,其完整理化特性参数如表 2 所示。本研究提出的新型替代燃料模型可有效匹配航空煤油的密度、黏度、热值、平均分子量、化学通式及氢碳比等多种理化特性。

表 1 RP-3 航空煤油替代组分配比(质量分数)

燃料	烷烃/%	环烷烃/%	芳香烃/%	其他/%	文献
RP-3	53.00	37.70	4.60	4.70	[12]
	72.00	13.70	11.30	3.00	[13]
	67.80	17.80	14.40	—	[14]
	64.23	23.92	11.85	—	[15]
	55.30	21.40	17.20	6.10	[16]
组分平均值	63.64	19.50	14.24	4.60	
替代组分	67.34	19.50	13.16	—	本研究

表 2 RP-3 航空煤油主要物性参数

燃料	密度/ ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	低热值/ ($\text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$)	氢/碳比	摩尔质量/ ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)	黏度/ ($\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)	表面张力/ ($\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$)	比热容/ ($\text{kJ} \cdot \text{kg} \cdot \text{K}^{-1}$)	化学式	文献
RP-3	0.785	—	2.08	148.83	1.48	—	—	$\text{C}_{10.57} \text{H}_{21.99}$	[12]
	—	—	2.05	150.03	—	25.80	—	$\text{C}_{10.68} \text{H}_{21.89}$	[13]
	—	42.4	1.96	165.00	—	—	—	—	[14]
	0.791	42.4	1.97	153.09	—	—	—	$\text{C}_{10.94} \text{H}_{21.52}$	[15]
	0.778	42.8	2.04	149.05	1.55	—	—	$\text{C}_{10.62} \text{H}_{21.66}$	[16]
	—	—	—	—	—	—	2.143	—	[17]
替代 组分	0.773	43.5	2.02	151.7	1.59	25.07	2.085	$\text{C}_{10.8} \text{H}_{21.8}$	本研究

考虑到同碳数区间的正构烷烃与异构烷烃在高温氧化阶段的核心反应路径(如 C-C 键断裂、H 提取反应、 β -裂解反应)具有较高相似性,比如正十二烷的直链烷基自由基裂解与氧化行为,可在工程精度范围内覆盖该碳数区间异构烷烃的支链烷基自由基反应特征。此外,本研究的核心目标是构建适用于工程燃烧设备的简化骨架机理,因此在确保预测精度前提下,该模型的燃烧动力学机理构建,以正十二烷、1,3,5-三甲基环己烷及正丙苯的专属子机理为核心,整合了 USC Mech II 机理^[18]与文献[19]开发的 CO/H₂/NO_x 反应机理。具体而言,机理构建以 JetSurF II 机理^[20]为基础框架,该机理不仅包含正十二烷子机理,还集成了高精度的高温 C₀~C₄ 核心反应网络(USC-Mech II),本研究从中提取并优化了正十二烷的高精准燃烧子机理;1,3,5-三甲基环己烷与正丙苯的子机理则参考了文献[21-22]的研究成果,并结合杨等^[11]的最新数据对部分关键反应速率常数进行了更新校准。通过全局整合、参数优化及初步筛选等系列工作,最终开发出包含 67 组分、246 步反应的 RP-3 航空煤油替代燃料燃烧反应机理。

2 结果与讨论

2.1 点火延迟时间特性

选取文献[9-11,23]在激波管中测得的 RP-3 航空煤油点火延迟实验数据,对所构建的 67 组分机理进

行宽工况范围的模拟验证。验证工况为 $T=650\sim 1\,500\text{ K}$, $p=0.1\sim 2.0\text{ MPa}$, $\phi=0.2\sim 2.0$ 。67 组分机理预测值与实验数据的对比如图 1 所示(符号代表实验值,线条代表模拟值)。宽工况范围内,机理预测值与实验值变化趋势完全一致,且在 $\phi=1.0$ 和 1.5 、 $p=1.0\text{ MPa}$ 工况下的低温区域,可以给出合理的负温度曲线效应。整个工况范围内,点火延迟时间的最大误差在 30% 以内。67 组分模型可以合理地描述 RP-3 航空煤油在贫油(0.2)~富油(2.0)、低温(650 K)~高温(1 500 K)、低压(0.1 MPa)~高压(2.0 MPa)宽工况下的点火延迟时间。

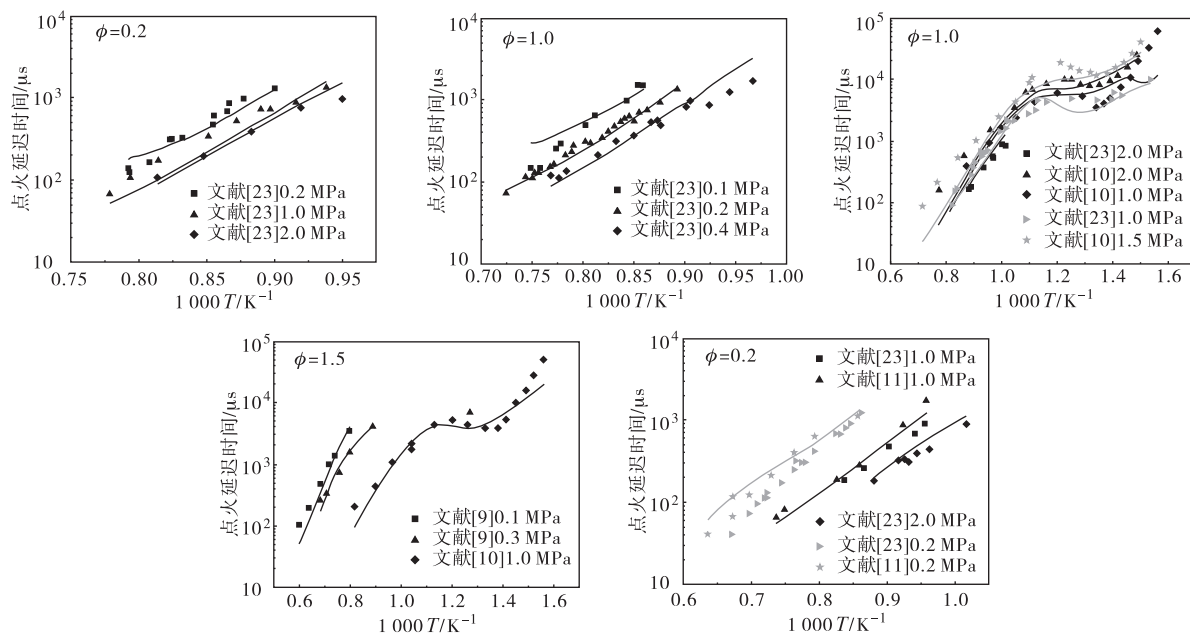


图 1 点火延迟时间的预测与实验数据对比

2.2 层流火焰速度特性

针对 RP-3 航空煤油层流火焰速度与关键物种浓度验证,均基于文献[9]的实验数据。文献[9]系统报道了 RP-3 航空煤油替代燃料在宽工况下的低温氧化特性、点火延迟时间与层流火焰速度数据,采用激波管+对冲火焰燃烧器+同步辐射分子束质谱的多平台联用技术,实验数据的系统误差控制在 $\pm 5\%$ 以内,该文献实验数据已成为 RP-3 航空煤油替代机理验证的基准数据。层流火焰速度验证工况:压力 p 为 0.1 MPa、0.3 MPa,初始进口温度 T 为 420 K、450 K、480 K,当量比 ϕ 为 0.7~1.4。机理预测值与实验数据的对比结果如图 2 所示(符号代表实验值,线条代表模拟值)。

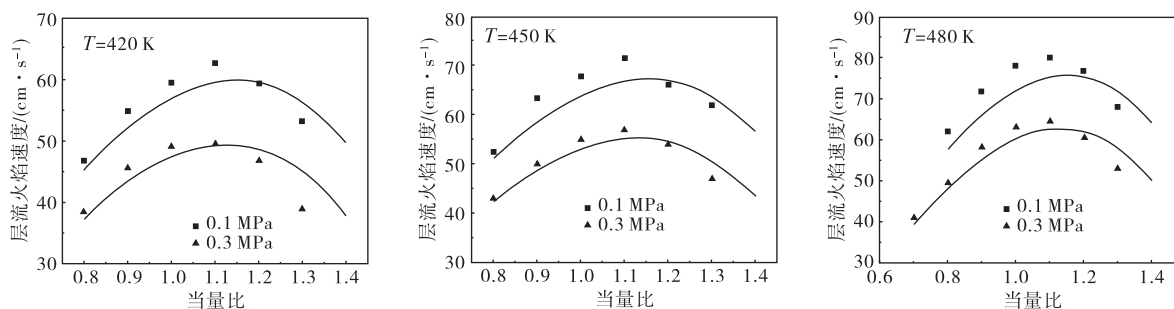


图 2 层流火焰速度的预测与实验数据对比

由图 2 可以看出,67 组分机理在整个当量比范围内的预测值与两组实验数据均保持良好一致性,火焰速度峰值出现在 $\phi=1.1$ 附近,与实验规律完全吻合。另外,在 $p=0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi<1.1$ 时,层流火焰速度的模拟结果与实验值有稍许误差,最大偏差约为 6 cm/s,误差百分比为 8%,出现在 $T=480\text{ K}$ 、 $\phi=1.0$ 工况。

2.3 关键物种浓度分布

关键物种浓度验证是机理精准性的核心保障,本次采用文献[9]在射流搅拌反应器(JSR)中测得的 RP-3 航空煤油替代燃料主要小分子物种分布实验数据,验证工况:温度 $T=550\sim 1\,100\text{ K}$,压力 $p=0.1\text{ MPa}$,当量比 ϕ 为 0.5、1.0,停留时间 $\tau=2\text{ s}$,重点验证 H_2 、 O_2 、 CH_4 、 CO 、 CO_2 、 H_2O 的浓度分布,所得结果如图 3 所示。从图 3 可以看出,67 组分机理可以给出较好的物种浓度演变趋势。在整个反应过程中, H_2 和 CH_4 的物种浓度较低;在温度低于 900 K 时, CO 浓度随温度的升高而增大,当温度大于 900 K 时, CO 浓度则随温度的升高而减小; CO_2 和 H_2O 的浓度均随温度的升高而增大,随着反应的进行最终有趋于定值的趋势。总体上,67 组分机理可以给出合理的关键物种浓度的分布趋势。

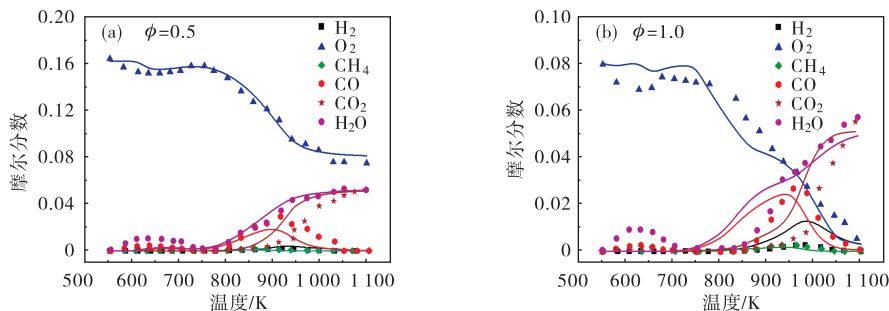


图 3 关键物种浓度分布与实验数据对比

2.4 动力学分析

为明确 67 组分模型中对点火延迟时间起决定性作用的关键反应,分别选取当量比为 0.5、1.0 和 1.5,温度为 700 K 和 1 200 K,压力为 1 MPa 的工况对模型开展敏感度分析。该方法通过计算单一反应速率常数变化特定倍数时点火延迟时间的相对变化率(敏感度系数 S)来量化反应的重要性, S 的绝对值越大,说明该反应对点火延迟时间的调控作用越显著。其核心计算逻辑:以反应 i 的速率常数 α_i 为基准,当该速率常数增至 $2\alpha_i$ 时,分别记录对应工况下的点火延迟时间 τ_{ign} 与 $\tau_{ign}(2\alpha_i)$,通过二者的相对变化关系定义敏感度系数^[24]: $S = \frac{\tau_{ign}(2\alpha_i) - \tau_{ign}}{\tau_{ign}(\alpha_i)} \times 100\%$ 。

若计算得到的敏感度系数为正值,表明该反应速率提升后点火延迟时间延长,即该反应在燃烧过程中抑制点火发生;若敏感度系数为负值,则意味着反应速率加快会促使点火延迟时间缩短,说明该反应对燃料点火具有促进效应。这一判断标准为后续锁定关键调控反应提供了明确的量化依据。

不同工况条件下对 67 组分模型所得敏感度分析结果如图 4 所示。

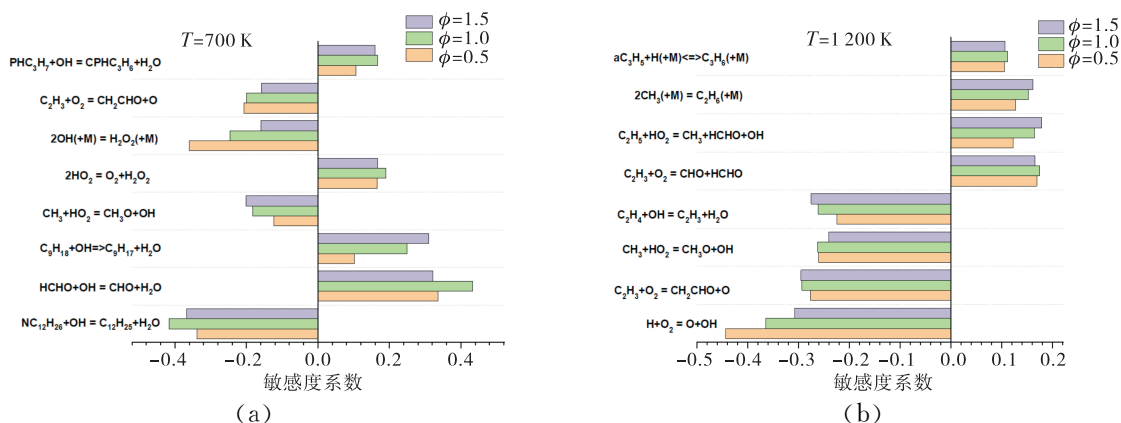


图 4 不同工况下 67 组分机理点火延迟时间敏感度分析

在低温 700 K 时,以过氧化物生成与分解反应为主,在当量比分别为 0.5、1.0、1.5 时,正十二烷脱氢

反应 $\text{NC}_{12}\text{H}_{26} + \text{OH} = \text{C}_{12}\text{H}_{25} + \text{H}_2\text{O}$ 显示出比较大的敏感性,是低温氧化的速率控制步骤;其中一些关键反应 $\text{NC}_{12}\text{H}_{26} + \text{OH} = \text{C}_{12}\text{H}_{25} + \text{H}_2\text{O}$ 、 $2\text{OH}(\text{+M}) = \text{H}_2\text{O}_2(\text{+M})$ 、 $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{CHO} + \text{O}$ 、 $\text{HCHO} + \text{OH} = \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$ 与文献[14]中对点火延迟时间的敏感度分析结果一致。

在高温 1 200 K 时,选取了 $\phi = 1.0$ 工况与文献[13]中构建的包含 138 组分的高温详细机理进行了对比,结果如图 5 所示。文献[13]中机理的高温点火延迟预测覆盖宽压力、宽当量比工况,且与实验数据的吻合度较高,具备领域内公认的可可靠性。在高温 1 200 K 时,以链分支反应为核心, $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$ 的敏感度系数在所有工况中最大,是高温下点火延迟的决定性反应,这与高温燃烧中自由基快速增殖的机理一致。从图 4 和图 5 中的敏感度分析结果可以看出,67 组分机理保留了不同温度、不同当量比(涵盖贫燃、化学计量比、富燃)区间的关键反应路径,为其预测精度提供了核心保障。OH 自由基作为燃烧过程中主导燃料氧化分解的关键物种,其产率变化直接反映燃烧反应的推进程度与氧化驱动力强弱。为深入探究 67 组分机理对不同燃烧工况的适配性,选取发动机典型燃烧区间内的特征工况(温度 $T = 700\text{ K}$ 、1 200 K;当量比 $\phi = 0.5$ 、1.0、1.5),对核心氧化自由基 OH 进行了物质产率分析,同时与文献[13]构建的包含 138 组分的高温详细机理进行了对比。本研究选取了对 OH 自由基生成和消耗比较重要的前 10 个反应,所得结果如图 6~9 所示。

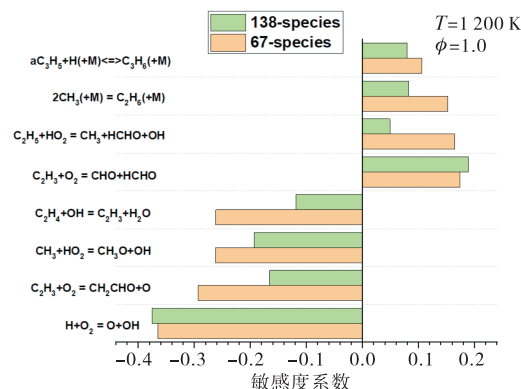


图 5 不同机理点火延迟时间敏感度分析

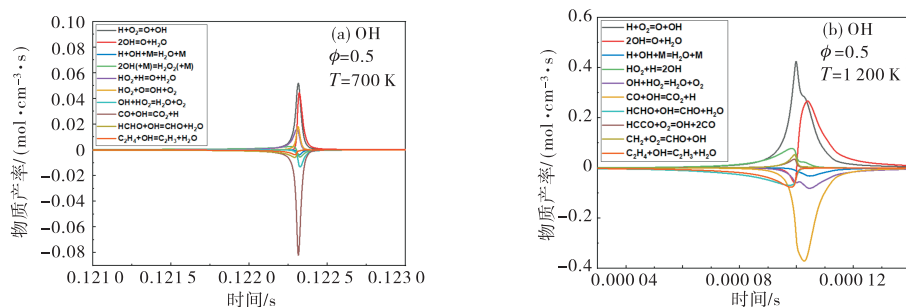


图 6 $\phi = 0.5$ 时 67 组分机理不同温度下 OH 自由基产率分析

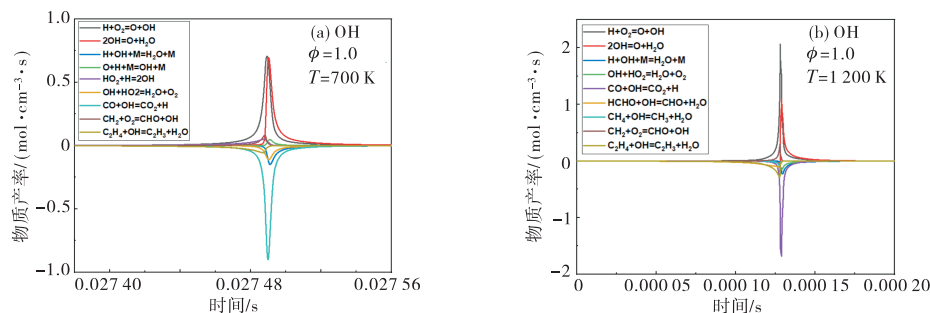


图 7 $\phi = 1.0$ 时 67 组分机理不同温度下 OH 自由基产率分析

从图 6~9 中所展示的温度维度来看,700 K 属于低温燃烧区间,1 200 K 为高温燃烧区间,二者的 OH 自由基产率呈现出显著的温度依赖性。在 $\phi = 0.5$ 、1.0、1.5 三种当量比下,低温 700 K 时 OH 自由基产率均处于较低水平,其中对 OH 生成最为显著的反应为 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$,在 $\phi = 0.5$ 时该反应产率为 $0.05\text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$, $\phi = 1.0$ 时为 $0.71\text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$, $\phi = 1.5$ 时为 $0.50\text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$;而对 OH 消耗最为显著的反应均为 $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$,不同当量比下该反应的产率分别为 $0.08\text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$

($\phi = 0.5$)、 $0.91 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ ($\phi = 1.0$)、 $0.41 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ ($\phi = 1.5$)。这一低产率特征源于低温下 OH 的主要生成路径 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ 、 $2\text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$ 受到显著抑制,这也是低温燃烧反应推进缓慢的核心原因。当温度升至 $1\,200 \text{ K}$ 高温区间时,各当量比下对 OH 生成影响最为显著的反应产率均大幅攀升: $\phi = 0.5$ 时达 $0.42 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$, $\phi = 1.0$ 时达 $2.30 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$, $\phi = 1.5$ 时达 $2.06 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,对 OH 起到消耗的反应产率也分别提升至 $0.37 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ ($\phi = 0.5$)、 $1.68 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ ($\phi = 1.0$)、 $1.38 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ ($\phi = 1.5$)。这主要是由于高温下链分支反应 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$ 被显著强化,该反应作为高温环境中 OH 的主导生成路径,大量生成的 OH 成为推动燃烧反应高效进行的核心动力,这一变化规律与高温燃烧中氧化反应剧烈推进的特性完全吻合。

从当量比维度分析, $\phi = 0.5$ 、 1.0 和 1.5 的氧含量差异,对 OH 自由基产率形成了显著的调控作用,且该调控作用在不同温度区间呈现出差异化特征。在 $T = 700 \text{ K}$ 低温工况下,氧含量是制约 OH 自由基生成的核心因素。当 $\phi = 0.5$ 时, O_2 浓度充足,但受低温抑制,对 OH 生成影响最显著的 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ 反应产率仅为 $0.05 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,对应 $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ 的消耗产率为 $0.08 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,生成与消耗均处于低水平; $\phi = 1.0$ 下,燃料与氧的配比更适配燃烧反应推进,尽管同样处于低温环境,OH 生成反应产率仍达到 $0.71 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,远高于贫燃工况,相应的消耗产率也高达 $0.91 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$; $\phi = 1.5$ 中, O_2 供应匮乏,直接限制了 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ 反应的推进,生成产率仅为 $0.50 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,同时 CO 等还原性物种浓度较高,消耗产率为 $0.41 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,整体氧化驱动力弱于化学计量比工况。

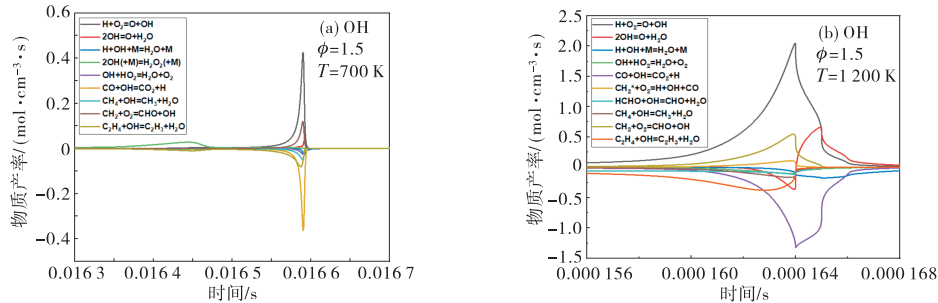


图8 $\phi = 1.5$ 时 67 组分机理不同温度下 OH 自由基产率分析

在 $T = 1\,200 \text{ K}$ 高温工况下,温度对燃烧反应的促进作用占据主导,但当量比的氧含量调控仍不可或缺,且本文构建的 67 组分机理与文献[13]的 138 组分机理的产率分析结果基本是一致的,在趋势上也显示出较高的一致性。 $\phi = 1.0$ 下,凭借燃料与氧的最优配比,链分支反应 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$ 推进最充分,OH 生成反应产率高达 $2.30 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,消耗产率也达到 $1.68 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$,成为三种当量比中 OH 自由基产率最高的工况;富燃工况 ($\phi = 1.5$) 虽受高温驱动,OH 生成反应产率提升至 $2.06 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ (消耗产率 $1.38 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$),但因 O_2 相对匮乏,燃料分子与氧的竞争反应加剧,产率略低于化学计量比工况;贫燃工况 ($\phi = 0.5$) 虽 O_2 供应充足,但过量的 O_2 会加剧部分自由基的无效消耗,同时燃料浓度较低导致链反应传播效率受限,使得 OH 生成反应产率仅为 $0.42 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$ (消耗产率 $0.37 \text{ mol}/(\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1})$),远低于化学计量比和富燃工况。这一规律表明,高温下 OH 自由基产率不仅依赖于链分支反应的强化,还与燃料和氧的配比密切相关,化学计量比工况最利于高温下 OH 自由基的生成与转化。

OH 自由基产率分析结果表明,67 组分机理能够精准捕捉不同温度、不同当量比下 OH 自由基的产率变化规律:低温下准确还原了 OH 因分解受阻导致的低产率特征,高温下合理呈现了链分支反应强化带来的 OH 高产率趋势,富燃工况则精准反映了氧含量匮乏对 OH 自由基生成的抑制效应。这一精准预测能力,直接印证了机理中对低温氧化物生成路径、高温链分支反应等 OH 自由基关键生成/消耗路径速率参数优化的合理性,进一步验证了 67 组分机理在多工况下对核心氧化物种演变规律的预测可靠性,为

后续基于该机理开展燃烧过程调控研究奠定了重要基础。

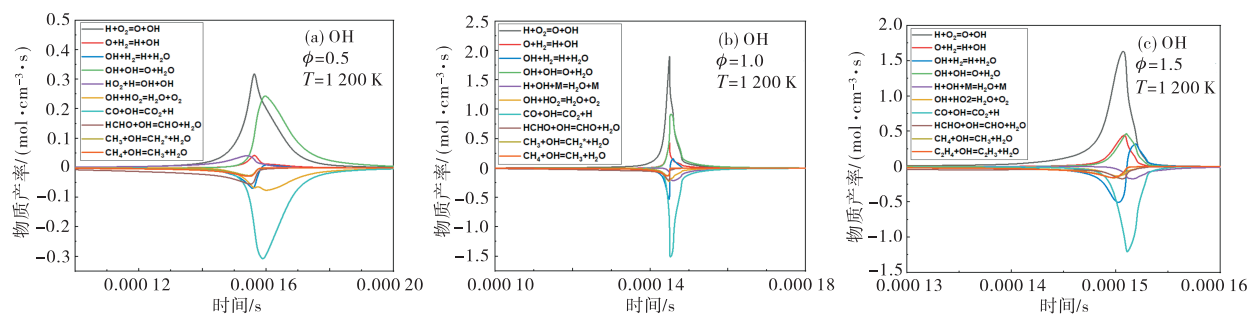


图 9 文献[13]138 组机理在 $T=1200\text{ K}$ 、不同当量比下 OH 自由基产率分析

为进一步揭示 67 组机理对燃料主导组分氧化过程的描述能力,选取当量比 $\phi=1.0$ 、 T 为 700 K 和 1200 K 、 $p=1\text{ MPa}$ 工况,重点针对占比最高(67.34%)的正十二烷开展反应路径分析,明确其不同温度下的主导氧化路径,量化其对燃料总消耗的贡献占比,验证机理对核心组分燃烧规律的捕捉能力,所得结果如图 10 所示。

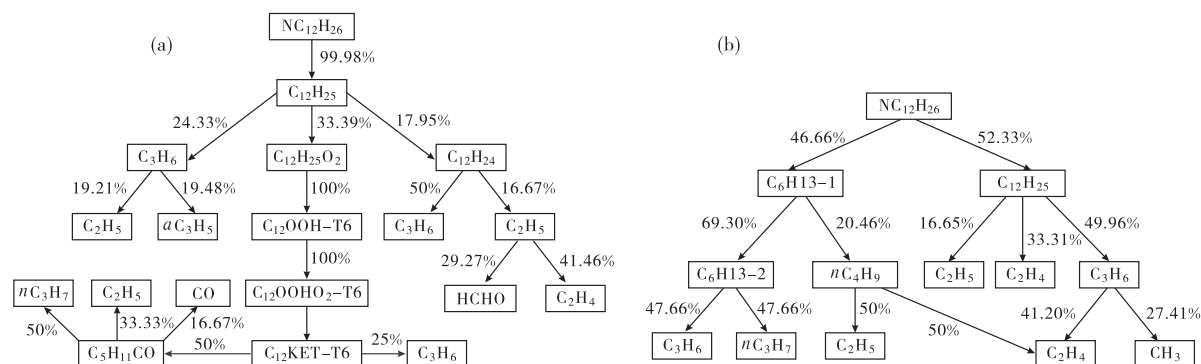


图 10 67 组机理在 $\phi=1.0$ 、不同温度下的反应路径分析

图 10(a)为 $T=700\text{ K}$ 、 $\phi=1.0$ 低温工况下所得结果,可以看出,正十二烷作为绝对主导组分,反应核心路径为“脱氢-过氧化物生成-裂解传链”。正十二烷首先通过与 OH 自由基的脱氢反应($\text{NC}_{12}\text{H}_{26} + \text{OH} = \text{C}_{12}\text{H}_{25} + \text{H}_2\text{O}$)生成烷基自由基 $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$,该反应与前文敏感度分析中低温主导反应完全一致,是低温氧化的速率控制步骤。生成的 $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ 迅速与 O_2 结合形成过氧自由基(RO_2),进而发生分子内异构化反应生成氢过氧烷基自由基(QOOH); QOOH 进一步发生裂解反应,生成酮类、醛类小分子化合物及新的活性自由基,持续维持链反应传播。低温下正十二烷的过氧化物循环反应活跃度,直接决定了整体燃烧反应的推进速率,这与前文 OH 自由基低产率导致燃烧缓慢的规律相呼应,也印证了机理对正十二烷低温氧化核心路径的精准保留。

图 10(b)为 $T=1200\text{ K}$ 、 $\phi=1.0$ 低温工况下所得结果,正十二烷仍为核心主导组分,反应路径转变为“快速脱氢-链分支-短链氧化”,热裂解与自由基反应协同推进氧化过程。高温环境下,正十二烷一方面通过与 OH、O 自由基的脱氢反应生成烷基自由基,另一方面直接发生热裂解反应,断裂为短链烷烃与烯烃;生成的烷基自由基与 O_2 的反应不再以过氧化物生成为主,而是直接触发链分支反应,生成烯烃与小分子自由基。同时,正十二烷裂解生成的短链产物快速参与 $\text{C}_0 \sim \text{C}_4$ 小分子核心反应网络(如 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$ 、 $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$),加速氧化进程并释放大热量。该路径特征与前文高温下链分支反应主导、OH 自由基高产率的规律完全吻合,证实机理可精准捕捉正十二烷高温剧烈氧化的核心规律。

反应路径分析结果表明,67 组机理能够精准捕捉正十二烷在 $\phi=1.0$ 不同温度区间的主导氧化规律:低温下准确复现了正十二烷过氧化物循环主导的缓慢氧化特征,高温下合理呈现了其热裂解与链分支

反应协同强化的剧烈氧化路径。这进一步证实了机理对 RP-3 航空煤油核心组分(正十二烷)氧化路径的完整保留,为其在发动机典型工况下的应用提供了坚实的路径层面支撑。

3 结论

本研究针对 RP-3 航空煤油组分复杂导致的燃烧机理建模难题,开展了基于组分平均的替代燃料构建与骨架机理开发及验证研究,所得结论如下:提出了基于组分平均的 RP-3 航空煤油替代燃料构建方法,通过整合多组公开样品数据,确定平均组分为烷烃 63.64%、环烷烃 19.50%、芳香烃 14.24%,并最终确定正十二烷(67.34%)、1,3,5-三甲基环己烷(19.50%)、正丙苯(13.16%)为最优替代体系,可有效匹配 RP-3 航空煤油核心理化特性;构建了包含 67 组分、246 步反应的 RP-3 航空煤油骨架燃烧机理,该机理整合了成熟子机理并优化关键反应参数,兼顾了燃烧过程描述的精准性与数值模拟的计算效率;宽工况验证结果表明,该机理对 RP-3 航空煤油点火延迟时间预测误差小于 30%,层流火焰速度误差控制在 8% 以内,关键物种浓度分布与实验值吻合度良好,可满足工程尺度模拟需求;敏感度分析、OH 自由基产率分析和反应路径分析证实,机理完整保留了不同温度区间的关键反应路径,能够精准捕捉核心氧化物物种的演变规律,为航空发动机燃烧系统优化设计提供可靠的理论支撑。

参考文献:

- [1] 马洪安,付淑青,吴宗霖,等. RP-3 航空煤油燃烧特性及其反应机理构建综述[J]. 航空发动机,2021,47(1):26-31.
- [2] 吴悠,杨明,杨斌. 航空煤油反应动力学模型的发展现状和挑战[J]. 清华大学学报(自然科学报),2023,63(4):521-545.
- [3] Curran H J. Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion[J]. Proceedings of the Combustion Institute,2019,37(1):57-81.
- [4] Dryer F L. Chemical kinetic and combustion characteristics of transportation fuels[J]. Proceedings of the Combustion Institute,2015,35(1):117-144.
- [5] Colket M,Heyne J,Rumizen M,et al. Overview of the national jet fuels combustion program[J]. AIAA Journal,2017,55(4):1087-1104.
- [6] Narayanaswamy K,Pitsch H,Pepiot P. A component library framework for deriving kinetic mechanisms for multi-component fuel surrogates:application for jet fuel surrogates[J]. Combustion and Flame,2016,165:288-309.
- [7] Humer S,Frassoldati A,Granata S,et al. Experimental and kinetic modeling study of combustion of JP-8,its surrogates and reference components in laminar nonpremixed flows[J]. Proceedings of the Combustion Institute,2007,31(1):393-400.
- [8] Zhong Beijing,Zeng Zhaomei,Zhang Houzhen. An experimental and kinetic modeling study of JP-10 combustion[J]. Fuel,2022,312:122900.
- [9] Liu Jing,Hu Erjiang,Yin Geyuan,et al. An experimental and kinetic modeling study on the low-temperature oxidation,ignition delay time,and laminar flame speed of a surrogate fuel for RP-3 kerosene[J]. Combustion and Flame,2022,237:111821.
- [10] Li Ang,Zhang Zhenyingnan,Cheng Xiaogang,et al. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology[J]. Fuel,2020,267:116975.
- [11] Yang Zhiyuan,Zeng Ping,Wang Biyao,et al. Ignition characteristics of an alternative kerosene from direct coal liquefaction and its blends with conventional RP-3 jet fuel[J]. Fuel,2021,291:

120258.

- [12] Zheng Dong, Yu Weiming, Zhong Beijing. RP-3 aviation kerosene surrogate fuel and the chemical reaction kinetic model[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2015, 31: 636-642.
- [13] Xu Jiaqi, Guo Junjiang, Liu Aike, et al. Construction of autoignition mechanisms for the combustion of RP-3 surrogate fuel and kinetics simulation[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2015, 31: 643-652.
- [14] Mao Yebing, Yu Liang, Wu Zhiyong, 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.
- [15] Huang Linyuan, Huang Sheng, Mao Yebing, et al. An experimental study on the laminar burning velocities of RP-3 kerosene and its surrogate fuel at elevated pressures and temperatures[J]. *Fuel*, 2023, 331: 125844.
- [16] Cheng Zeyuan, Zhu Jianqin, Jin Zhao. Study on surrogate model of endothermic hydrocarbon fuel RP-3[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2016, 31(2): 391-398.
- [17] 张志强, 陈战斌. 航空喷气燃料 RP-3 比热容特性研究[J]. *工程与试验*, 2018, 58(2): 42-46.
- [18] Wang H, You X, Joshi A V, et al. USC mech version II high-temperature combustion reaction model of $H_2/CO/C_1-C_4$ compounds[EB/OL]. [2026-05-20]. <http://ignis.usc.edu/USCMech.IIhtm>.
- [19] Sun Wuchuan, Zhao Qian, Curran H J, et al. Further insights into the core mechanism of $H_2/CO/NO_x$ reaction system[J]. *Combustion and Flame*, 2022, 245: 112308.
- [20] Wang H, Dames E, Sirjean B, et al. A high temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures[J]. *JetSurF Version*, 2010, 2(2): 19.
- [21] Liu Yuexi, Sandra R, Clemens N, et al. Combustion study of a surrogate jet fuel[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 202: 252-261.
- [22] Liu Yuexi, Wang Beijing, Weng Junjie, et al. A wide-range experimental and modeling study of oxidation and combustion of n-propylbenzene[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 191: 53-65.
- [23] Zhang Changhua, Li Bin, Rao Fan, et al. A shock tube study of the auto-ignition characteristics of RP-3 jet fuel[J]. *Proceedings of Combustion Institute*, 2015, 35: 3151-3158.
- [24] Weber B W, Kumar K, Zhang Yu, et al. Autoignition of n-butanol at elevated pressure and low-to-intermediate temperature[J]. *Combustion and Flame*, 2017, 158(5): 809-819.

Construction and kinetic simulation of a RP-3 aviation kerosene replacement model based on component averaging

XI Shuanghui¹, WANG Zhenyu², GUO Xiao², LI Shuhao²

(1. School of Mechanical Engineering, Zhengzhou University of Aeronautics,
Zhengzhou 450046, China;

2. School of Aero Engine, Zhengzhou University of Aeronautics, Zhengzhou 450046, China)

Abstract: To address the challenge of combustion mechanism modeling caused by the complex composition

of RP-3 aviation kerosene, a component-averaged combustion model construction method was proposed. By investigating the compositional characteristics of multiple groups of actual RP-3 aviation kerosene samples, it was clarified that its average composition is dominated by alkanes, cycloalkanes and aromatics. Based on these characteristics, *n*-dodecane, 1,3,5-trimethylcyclohexane and *n*-propylbenzene are selected as representative components to develop a skeletal mechanism of RP-3 kerosene comprising 67 species and 246 elementary reactions. Experimental data from published literature were employed to validate the mechanism across a wide range of operating conditions, including ignition delay time, laminar flame speed, and concentration profiles of key species. The results indicate that the mechanism predicts the ignition delay time with an error of less than 30% and the laminar flame speed with an error within 8%, while the predicted concentration profiles of key species are in good agreement with the experimental values. Species yield analysis and sensitivity analysis demonstrate that the mechanism fully retains the critical reaction pathways in different temperature ranges and can accurately capture the evolution rules of core species. The 67-species mechanism established in this study balances prediction accuracy and computational efficiency, and is applicable for numerical simulations of combustion processes in engineering-scale aero engines.

Keywords: RP-3 aviation kerosene; surrogate fuel; component averaging; kinetic simulation; elementary reactions

(责任编辑:唐立平)

引用格式 席双惠,王振宇,郭霄,等. 基于组分平均的 RP-3 航空煤油替代燃料机理构建及动力学模拟[J]. 山东航空学院学报,2026,43(4):1-11.

Xi Shuanghui, Wang Zhenyu, Guo Xiao, et al. Construction and kinetic simulation of a RP-3 aviation kerosene replacement model based on component averaging[J]. Journal of Shandong University of Aeronautics, 2026, 43(4):1-11.