

ЕДИНАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ САЖЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПИРОЛИЗЕ И ОКИСЛЕНИИ АЛИФАТИЧЕСКИХ И АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ*

Г. Л. Агафонов¹, И. В. Билера², П. А. Власов³, И. В. Жильцова⁴,
Ю. А. Колбановский⁵, В. Н. Смирнов⁶, А. М. Тереза⁷

Аннотация: Представлены результаты экспериментов и детальных кинетических расчетов процесса образования частиц сажи при пиролизе и окислении ряда алифатических углеводородов с одинарными и кратными углерод–углеродными связями (C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_4 , C_3H_8 и C_3H_6) и простейших ароматических углеводородов (бензол, толуол и этилбензол) за отраженными ударными волнами в широком диапазоне температур (1500–2800 К). Единая кинетическая модель процесса сажеобразования, в которой рассматривается образование зародышей частиц сажи различных типов как из ароматических углеводородных фрагментов, так и из ненасыщенных алифатических углеводородов, количественно описывает экспериментальные результаты: временные зависимости выхода частиц сажи, временные зависимости температуры частиц сажи и буферного газа, температурные зависимости выхода сажи при фиксированном времени наблюдения, а также распределения основных продуктов пиролиза и окисления исходных углеводородов. Все расчеты проводились с постоянными кинетическими параметрами модели, установленными лишь однажды, для наилучшего описания экспериментов по пиролизу смеси ацетилена с аргоном (4,8% $C_2H_2/95,2\% Ar$).

Ключевые слова: процесс сажеобразования; ударная труба; пиролиз и окисление углеводородов; кинетическое моделирование

Литература

1. Агафонов Г. Л., Власов П. А., Смирнов В. Н. 2011. Образование сажи при пиролизе бензола, метилбензола и этилбензола в ударных волнах. Кинетика и катализ. Т. 52. № 3. С. 368–381.

* Работа выполнена в рамках Программы № 26 Президиума РАН «Горение и взрыв».

¹ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, agafonov@chph.ras.ru

² Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук, bilera@ips.ac.ru

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», iz@chph.ras.ru

⁴ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, zaslonko@chph.ras.ru

⁵ Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук, kolbanovsky@ips.ac.ru

⁶ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru

⁷ Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук, atereza@bk.ru

2. Haynes B. S., Wagner H. G. Soot formation // Prog. Energ. Combust. Sci., 1981. Vol. 7. No. 4. P. 229–273.
3. Frenklach M. Reaction mechanism of soot formation in flames // Phys. Chem. Chem. Phys., 2002. Vol. 4. P. 2028–2037.
4. Stein S. E., Fahr A. High-temperature stabilities of hydrocarbons // J. Phys. Chem., 1985. Vol. 89. No. 17. P. 3714–3725.
5. Agafonov G. L., Borisov A. A., Smirnov V. N., Troshin K. Ya., Vlasov P. A., Warnatz J. Soot formation during pyrolysis of methane and rich methane/oxygen mixtures behind reflected shock waves // Combust. Sci. Technol., 2008. Vol. 180. No. 10. P. 1876–1899.
6. Agafonov G. L., Smirnov V. N., Vlasov P. A. Shock tube and modeling study of soot formation during pyrolysis of propane, propane/toluene and rich propane/oxygen mixtures // Combust. Sci. Technol., 2010. Vol. 182. No. 11. P. 1645–1671.
7. Agafonov G. L., Smirnov V. N., Vlasov P. A. Shock tube and modeling study of soot formation during the pyrolysis and oxidation of a number of aliphatic and aromatic hydrocarbons // Proc. Combust. Inst., 2011. Vol. 33. P. 625–632.
8. Deuffhard P., Wulkow M. Computational treatment of polyreaction kinetics by orthogonal polynomials of a discrete variable // Impact Comput. Sci. Eng., 1989. Vol. 1. P. 269–301.
9. Appel J., Bockhorn H., Frenklach M. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: Laminar premixed flames of C₂ hydrocarbons // Combust. Flame, 2000. Vol. 121. No. 1–2. P. 122–136.
10. Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law C. K. USC Mech Version II. High-temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁–C₄ compounds. 2007. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm.
11. Skjøth-Rasmussen M. S., Glarborg P., Østberg M., Johannessen J. T., Livbjerg H., Jensen A. D., Christensen T. S. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot in fuel-rich oxidation of methane in a laminar flow reactor // Combust. Flame, 2004. Vol. 136. P. 91–128.
12. Richter H., Granata S., Green W. H., Howard J. B. Detailed modeling of PAH and soot formation in a laminar premixed benzene/oxygen/argon low-pressure flame // Proc. Combust. Inst., 2005. Vol. 30. P. 1397–1405.
13. Hidaka Y., Hattori K., Okuno T., Inami K., Abe T., Koike T. Shock-tube and modeling study of acetylene pyrolysis and oxidation // Combust. Flame, 1996. Vol. 107. P. 401–417.

Поступила в редакцию 01.11.14