

КИНЕТИЧЕСКИЕ ДЕТАЛЬНЫЙ И ГЛОБАЛЬНЫЙ МЕХАНИЗМЫ ДЛЯ СУРРОГАТНОГО ТОПЛИВА

В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев², С. Н. Медведев³, В. С. Посвянский⁴, С. М. Фролов⁵

Аннотация: Для моделирования процессов горения в технических устройствах необходимо иметь кинетические механизмы топлив-суррогатов: детального кинетического механизма (ДКМ) и/или глобального механизма (ГМ). В работе рассмотрены механизмы окисления и горения суррогатного топлива для авиационного керосина JP-8. В литературе предложено много вариантов ДКМ и ГМ, в том числе на основе трех n-алканов — гептана, декана и додекана. Оправданием такого подхода является то, что JP-8 более чем на 70% состоит из n-алканов, остальное — циклические и непредельные углеводороды, ароматика, их производные и др. По известным данным хроматографирования JP-8 основными составляющими этого топлива являются n-алканы от n-C₈H₁₈ до n-C₁₆H₃₄. В работе рассмотрен вариант ДКМ суррогата JP-8 на основе 9 n-алканов, для которых ранее был предложен механизм окисления и горения. Полный объем такого ДКМ для окисления и горения суррогатного топлива — 162 компонента и 2380 реакций (каждая реакция учитывается в прямом и обратном направлении). Кинетика для ГМ разрабатывается отдельно для самовоспламенения и для распространения ламинарного пламени. Глобальные механизмы могут содержать не более 20 компонентов и 13 реакций. Представлены расчетные примеры самовоспламенения и распространения пламени. Вычисленные задержки самовоспламенения и скорости распространения пламени по ДКМ и по ГМ сравниваются с данными экспериментов. Последние достаточно удовлетворительно описываются предложенными механизмами.

Ключевые слова: горение; суррогатные топлива; авиационный керосин JP-8; кинетические детальные механизмы; кинетические глобальные механизмы

Литература

1. Westbrook C. K., Sarofim A., Eddings E. C-SAFE validation project. Department of Chemical and Fuels Engineering. University of Utah, 2002. 86 p.

* Работа выполнена при поддержке Фонда перспективных исследований Российской Федерации и Российского научного фонда (проект 14-13-00082).

¹ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

² Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevINF@yandex.ru

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

⁴ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vsposv@chph.ras.ru

⁵ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

2. Allen C., Toulson E., Edwards T., Lee T. Application of a novel charge preparation approach to testing the autoignition characteristics of JP-8 // *Combust. Flame*, 2012. Vol. 159. No. 9. P. 2780–2788.
3. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₁₀ к C₁₁–C₁₆ // *Хим. физика*, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.
4. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений. Ч. 1. Основной химический процесс тепловыделения // *Хим. физика*, 1998. Т. 7. № 9. С. 112–128.
5. Басевич В. Я., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы, разработанные для моделирования многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // *Хим. физика*, 2006. Т. 25. № 6. С. 54–62.
6. Беляев А. А., Посвянский В. С. Нормальная скорость распространения ламинарного пламени // *Алгоритмы и программы. Информ. бюлл. Гос. фонда алгоритмов и программ СССР*, 1985. Т. 3. № 66. С. 35.
7. Ji C., You X., Holley A. T., et al. Propagation and extinction of mixtures of air with *n*-dodecane, JP-7, and JP-8 fuels. AIAA Paper No. 2008-974.
8. Kumar K., Sung C. J., Hui X. Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels. AIAA Paper No. 2009-991.
9. Singh D., Nishiie T., Qiao L. Laminar burning speeds and Markstein lengths of *n*-decane/air, *n*-decane/O₂/He, Jet-A/air and S-8/air flames. AIAA Paper No. 2010-951.
10. Meeks E., Naik C. V., Puduppakkam K. V., et al. Experimental and modeling studies of the combustion characteristics of conventional and alternative jet fuels. Final Report NASA/CR-2011-216356, 2011.
11. Dooley S., Won S. H., Heyne J., et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena // *Combust. Flame*, 2012. Vol. 159. No. 4. P. 1444–1466.
12. Munzar J. D. Laminar flame speed of jet fuel surrogates and second generation biojet fuel blends. Montreal, Quebec: McGill University, 2013. M.Sc. Thesis.

Поступила в редакцию 01.11.14