

ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ПРИМЕРЕ НИЗКО- И ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕНИЯ *n*-ГЕПТАНА*

П. А. Власов¹, В. Н. Смирнов², О. Б. Рябиков³, Г. Л. Агафонов⁴, А. Р. Ахуньянов⁵, Н. С. Малышев⁶

Аннотация: Рассмотрены современные тенденции построения детальных кинетических механизмов (ДКМ) реакций окисления углеводородов. Особое внимание уделено реакциям низкотемпературного окисления. На примере окисления смесей *n*-гептана с воздухом при различных соотношениях горючее/окислитель, давлениях и температурах продемонстрированы предсказательные возможности новых механизмов реакций.

Ключевые слова: низко- и высокотемпературное окисление углеводородов; детальное кинетическое моделирование; задержки воспламенения *n*-гептана; кинетика изменения промежуточных продуктов при низкотемпературном окислении *n*-гептана

DOI: 10.30826/CE19120203

Литература

1. Westbrook C. K., Pitz W. J., Herbinet O., Curran H. J., Silke E. J. A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of *n*-alkane hydrocarbons from *n*-octane to *n*-hexadecane // Combust. Flame, 2009. Vol. 156. P. 181–199.
2. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. 2003. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. Г. Л. Агафопова; под ред. П. А. Власова. — М.: Физматлит, 2003. 352 с. (Warnatz Ju., Maas U., Dibble R. W. Combustion. Physical and chemical fundamentals, modeling and simulations, experiments, pollutant formation. — 3rd ed. — Berlin — Heidelberg — New York: Springer-Verlag, 2001. 299 p.)
3. Curran H. J., Gaffuri P., Pitz W. J., Westbrook C. K. A comprehensive modeling study of *n*-heptane oxidation // Combust. Flame, 1998. Vol. 114. P. 149–177.
4. Tomlin A. S., T. Turnyi, and Pilling M. J. 1997. Mathematical tools for construction, investigation and reduction of combustion mechanisms // Low-temperature combustion and autoignition / Ed. M. J. Pilling. — Comprehensive chemical kinetics ser. — Elsevier. 35:293–437.
5. Ranzi E., Faravelli T., Gaffuri P., Sogaro A. Low temperature combustion: Automatic generation of primary oxydation reactions and lumping procedures // Combust. Flame, 1995. Vol. 102. P. 179–192.
6. Fournet R., Warth V., Glaude P. A., Battin-LeClerc F., Scacchi G., and Côme G. M. Automatic reduction of detailed mechanisms of combustion of alkanes by chemical lumping // Int. J. Chem. Kinet., 2000. Vol. 32. No. 1. P. 36–51.
7. Frenklach M., Wang H., Rabinowitz M. J. Optimization and analysis of large chemical kinetic mechanisms using the solution mapping method — combustion of methane // Prog. Energ. Combust., 1992. Vol. 18. P. 47–73.
8. Frenklach M. Transforming data into knowledge — process informatics for combustion chemistry // P. Combust. Inst., 2007. Vol. 31. No. 1. P. 125–140.
9. Wang H., Frenklach M. Detailed reduction of reaction mechanisms for flame modeling // Combust. Flame, 1991. Vol. 87. P. 365–370.
10. Soyhan H. S., Mauss F., Sorousbay C. Chemical kinetic modeling of combustion in internal combustion engines using reduced chemistry // Combust. Sci. Technol., 2002. Vol. 174. No. 11–12. P. 73–91.

* Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013–2020 гг. по теме ФИЦ ХФ РАН №47.16. Номер темы ФАНО 0082-2014-0004. Номер государственной регистрации ЦИТИС: AAAA-A17-117040610283-3.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», iz@chph.ras.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, zaslonko@chph.ras.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, agafonov@chph.ras.ru

⁵Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», zaslonko@chph.ras.ru

⁶Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, nikolas.m@mail.ru

11. *Poon H., Ng H., Gan S., Pang K., Schramm J.* Development and validation of chemical kinetic mechanism reduction scheme for large-scale mechanisms // *SAE Int. J. Fuels Lubr.*, 2014. Vol. 7. No. 3. P. 2014. doi: 10.4271/2014-01-2576.
12. *Ahmed S. S., Mauss F., Moréac G., Zeuch T.* A comprehensive and compact *n*-heptane oxidation model derived using chemical lumping // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2007. Vol. 9. P. 1107–1126.
13. Reduced kinetic mechanism for applications in combustion systems/ Eds. N. Peters, B. Rogg. — Lecture notes in physics ser. — New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1993. 361 p.
14. *Lam S., Goussis D.* Understanding complex chemical kinetics with computational singular perturbation // *P. Combust. Inst.*, 1988. Vol. 22. P. 931–941.
15. *Lam S. H., Goussis D. A.* Conventional asymptotics and computational singular perturbation for simplified kinetics modelling // *Reduced mechanism and asymptotic approximations for methane–air flames* / Ed. M. Smooke. — Lecture notes in physics ser. — Springer Verlag, 1991. Vol. 384. P. 227–242.
16. *Goussis D. A.* On the construction and use of reduced chemical kinetic mechanisms produced on the basis of given algebraic relations // *J. Comput. Phys.*, 1996. Vol. 128. P. 261–273.
17. *Lovas T., Nilsson D., Mauss F.* Automatic reduction procedure for chemical mechanisms applied to premixed methane/air flames // *P. Combust. Inst.*, 2000. Vol. 28. P. 1809–1815.
18. *Lovas T., Amnèus P., Mauss F., Mastorakos E.* Comparison of automatic reduction procedures for ignition chemistry // *P. Combust. Inst.*, 2002. Vol. 29. P. 1387–1393.
19. *Maas U.* Efficient calculation of intrinsic low-dimensional manifolds for the simplification of chemical kinetics // *Computing Visualization Sci.*, 1998. Vol. 1. P. 69–81.
20. *Соколик А. С.* Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. — М.: Изд-во АН СССР, 1960. 422 с.
21. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Брандштетер В., Нейгауз М. Г., Таил Р., Фролов С. М.* Моделирование самовоспламенения изооктана и *n*-гептана применительно к условиям ДВС // *Физика горения и взрыва*, 1994. Т. 30. № 6. С. 15–25.
22. *Warnatz J.* Critical survey of elementary reaction rate coefficients in the C/H/O system // *Combustion chemistry* / Ed. W. C. Gardiner, Jr. — New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1984. 197–360.
23. *Chevalier C., Warnatz J., Melenk H.* Automatic generation of reaction mechanisms for description of oxidation of higher hydrocarbons // *Ber. Bunsen. Phys. Chem.*, 1990. Vol. 94. P. 1362–1367.
24. *Zhang K., Banyon C., Bugler J., Curran H. J., Rodriguez A., Herbinet O., Battin-Leclerc F., B'Chir C., Heufer K. A.* An updated experimental and kinetic modeling study of *n*-heptane oxidation // *Combust. Flame*, 2016. Vol. 172. P. 116–135.
25. *Gauthier B. M., Davidson D. F., Hanson R. K.* Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures // *Combust. Flame*, 2004. Vol. 139. P. 300–311.
26. *Heufer K. A., Olivier H.* Determination of ignition delay times of different hydrocarbons in a new high pressure shock tube // *Shock Waves*, 2010. Vol. 20. P. 307–316.
27. *Shen H.-P. S., Steinberg J., Vanderover J., Oehlschlaeger M. A.* A shock tube study of the ignition of *n*-heptane, *n*-decane, *n*-dodecane, and *n*-tetradecane at elevated pressures // *Energ. Fuel.*, 2009. Vol. 23. P. 482–2489.
28. *Ciezk H., Adomeit G.* Shock-tube investigation of self-ignition of *n*-heptane–air mixtures under engine relevant conditions // *Combust. Flame*, 1993. Vol. 93. P. 421–433.
29. *Воинов А. Н., Скороделов Д. И., Борисов А. А., Любимов А. В.* Задержки воспламенения гептано-изооктано-воздушных смесей // *Ж. физ. химии*, 1967. Т. 41. № 5. С. 1150–1152.
30. *Olm C., Zsély I., Pálvölgyi R., Varga T., Nagy T., Curran H. J., Turányi T.* Comparison of the performance of several recent hydrogen combustion mechanisms // *Combust. Flame*, 2014. Vol. 161. No. 9. P. 2219–2234.
31. *Olm C., Zsély I., Varga T., Curran H. J., Turányi T.* Comparison of the performance of several recent syngas combustion mechanisms // *Combust. Flame*, 2015. Vol. 162. P. 1793–1812.

Поступила в редакцию 18.01.19