

ПРИМЕНЕНИЕ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОГО СУРРОГАТА КЕРОСИНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ПАРОВ АВИАЦИОННОГО ТОПЛИВА В СМЕСЯХ С ВОЗДУХОМ*

А. М. Савельев¹, В. А. Савельева², Н. С. Титова³, С. А. Торохов⁴, В. Е. Козлов⁵

Аннотация: Разработан компактный кинетический механизм воспламенения и горения четырехкомпонентного суррогата керосина Jet A, состоящего из *n*-декана, изооктана, изоцетана и толуола в соотношении 60/10/10/20 в смесях с воздухом. Кинетический механизм включает в себя 248 реакций для 68 компонентов и состоит из субмеханизмов окисления *n*-декана (42 компонента), изооктана (8 компонентов), изоцетана (7 компонентов) и толуола (11 компонентов). Верификация разработанного кинетического механизма выполнена на экспериментальных данных для керосина Jet A по времени воспламенения, скорости ламинарного пламени и изменению концентраций основных компонентов в диапазоне изменения температуры $T_0 = 450\text{--}1400$ К, давления $P_0 = 1\text{--}50$ атм и коэффициента избытка воздуха $\alpha = 0,6\text{--}4$ ($\phi = 0,25\text{--}1,7$). Продемонстрировано хорошее соответствие разработанного кинетического механизма экспериментальным данным.

Ключевые слова: суррогат авиационного керосина; кинетический механизм; численное моделирование; воспламенение; скорость ламинарного пламени

DOI: 10.30826/CE21140408

Литература

- Старик А. М., Титова Н. С., Торохов С. А. Кинетика окисления и горения сложных углеводородных топлив: авиационный керосин // Физика горения и взрыва, 2013. Т. 49. № 4. С. 12–30.
- Liu Y. C., Savas A. J., Avedisian C. T. Spherically symmetric droplet combustion of three and four component miscible mixtures as surrogates for Jet-A // P. Combust. Inst., 2013. Vol. 34. P. 1569–1576.
- Weide P., Blunck D. L. Liftoff height and CH₂O emissions from Jet-A and a surrogate fuel burning under MILD conditions // Combust. Flame, 2019. Vol. 206. P. 438–440.
- Dagaut P., Reuillon M., Boettner J. C., Cathonnet M. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm: Experimental study and detailed chemical kinetic modeling // P. Combust. Inst., 1994. Vol. 25. P. 919–926.
- Dagaut P., Reuillon M., Cathonnet M., Voisin D. High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature // J. Chim. Phys., 1995. Vol. 92. P. 47–76.
- Dean A. J., Penyazkov O. G., Sevruk K. L., Varatharajan B. Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures // P. Combust. Inst., 2007. Vol. 31. P. 2481–2488.
- 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(1). P. 181–199.
- Titova N. С., Торохов С. А., Старик А. М. О кинетических механизмах окисления *n*-декана // Физика горения и взрыва, 2011. Т. 47. № 2. С. 1–20.
- Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвяченский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₇ к C₈H₁₈, C₉H₂₀ и C₁₀H₂₂ // Хим. физика, 2011. Т. 30. № 12. С. 9–25.
- Козлов В. Е., Титова Н. С., Торохов С. А. Численное исследование влияния добавки водорода или синтез-газа к *n*-декану на эмиссию вредных веществ из камеры сгорания с гомогенным режимом горения // Хим. физика, 2020. Т. 39. № 5. С. 3–15.
- Yu W., Yang W., Tay K., Zhao F. An optimization method for formulating model-based jet fuel surrogate by emulating physical, gas phase chemical properties and threshold soot index (TSI) of real jet fuel under engine relevant conditions // Combust. Flame, 2018. Vol. 193. P. 192–217.
- Starik A. M., Kozlov V. E., Titova N. S., On the influence of singlet oxygen molecules on characteristics of HCCI com-

* Работа выполнена при финансовой поддержке ФАУ ЦИАМ им. П. И. Баранова.

¹ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», amsavelev@ciam.ru

²ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», vasavleva@ciam.ru

³ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», nstitova2020@mail.ru

⁴ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», satorokhov@ciam.ru

⁵ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», vekozlov@ciam.ru

- bustion: A numerical study // *Combust. Theor. Model.*, 2013. Vol. 17. P. 576–609.
13. *Vasu S. S., Davidson D. F., Hanson R. K.* Jet fuel ignition delay times: Shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions // *Combust. Flame*, 2008. Vol. 152. P. 125–143.
14. *Dooley S., Won S. H., Chaos M., Heyne J., Ju Y., Dryer F. L., Kumar K., Sung C.-J., Wang H., Oehlschlaeger M. A., Santoro R. J., Litzinger T. A.* A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties // *Combust. Flame*, 2010. Vol. 157. P. 2333–2339.
15. *Wang H., Oehlschlaeger M. A.* Autoignition studies of conventional and Fischer–Tropsch jet fuels // *Fuel*, 2012. Vol. 98. P. 249–258.
16. *Valco D., Allen C., Toulson E., Lee T.* Autoignition behavior of petroleum-based and hydroprocessed renewable jet fuel blends in a rapid compression machine. AIAA Paper No. 2013-0896, 2013.
17. *Zhukov V. P., Sechenov V. A., Starikovskiy A. Yu.* Autoignition of kerosene (Jet-A)/air mixtures behind reflected shock waves // *Fuel*, 2014. Vol. 126. P. 169–176.
18. *Davidson D. F., Hanson R. K.* Fundamental kinetics database utilizing shock tube measurements. Vol. 4: Ignition delay time measurements. — Stanford, CA, USA: Mechanical Engineering Department Stanford University, 2014. 144 p.
19. *Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A., et al.* CHEMKIN Release 4.0. San Diego, CA, USA: Reaction Design, Inc., 2004.
20. *Zhu Y., Li S., Davidson D. F., Hanson R. K.* Ignition delay times of conventional and alternative fuels behind reflected shock waves // *P. Combust. Inst.*, 2015. Vol. 35. P. 241–248.
21. *Freeman G., Lefebvre A. H.* Spontaneous ignition characteristics of gaseous hydrocarbon–air mixtures // *Combust. Flame*, 1984. Vol. 58. No. 2. P. 153–162.
22. *Chong C. T., Hochgreb S.* Measurements of laminar flame speeds of liquid fuels: Jet-A1, diesel, palm methyl esters and blends using particle imaging velocimetry (PIV) // *P. Combust. Inst.*, 2011. Vol. 33. P. 979–986.
23. *Kumar K., Sung C.-J., Hui X.* Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels // *Fuel*, 2011. Vol. 90. P. 1004–1011.
24. *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. P. 1444–1466.
25. *Doute C., Delfau J.-L., Akrich R., Vovelle C.* Chemical structure of atmospheric pressure premixed *n*-decane and kerosene flames // *Combust. Sci. Technol.*, 1995. Vol. 106. No. 4–6. P. 327–344.

Поступила в редакцию 15.11.2021