

А.Э. КОЗАЧЕНКО^{1,2}, Г.Л. АГАФОНОВ¹, А. С. БЕТЕВ¹, А.М. ТЕРЕЗА¹, С.П. МЕДВЕДЕВ¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова, РАН, Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЛИЗА И САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ПРОПЕНА В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

Посредством численного моделирования проведено описание экспериментально наблюдаемого пиролиза и самовоспламенения пропена за отраженными ударными волнами. Использовались несколько детальных кинетических механизмов (ДКМ), представленных в литературе. Экспериментальные данные были взяты также из литературы. Установлено, что если задержки воспламенения описываются достаточно хорошо всеми ДКМ, то описание профилей выхода атомов Н при пиролизе пропена фактически не описываются ни одним из рассмотренных ДКМ. Среди реакций, определяющих пиролиз пропена, выявлены наиболее важные, для которых требуется уточнение значений параметров их констант скорости.

A.E. KOZACHENKO^{1,2}, G.L. AGAFONOV¹, A.S. BETEV¹, A.M. TEREZA¹, S.P. MEDVEDEV¹

¹N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

NUMERICAL SIMULATION OF PROPENE PYROLYSIS AND AUTOIGNITION IN SHOCK WAVES

Numerical modeling is used to describe propene pyrolysis and autoignition observed experimentally behind reflected shock waves. Several detailed kinetic mechanisms (DKMs) presented in the literature are applied. Experimental data are also borrowed from the literature. It is found that ignition delay times are sufficiently well predicted with all DKMs, whereas the time-dependent concentration profiles of hydrogen atoms generated by propene pyrolysis cannot be obtained by using the DKMs employed. Among the reactions involved in propene pyrolysis, the most important ones are identified, for which the values of rate constant parameters should be revised.

Изучение воспламенения и пиролиза пропена представляет интерес как с точки зрения его топливных свойств [1], так и для уточнения параметров детальных кинетических механизмов (ДКМ) горения углеводородных топлив высшего порядка ($>C_2$) [2]. Учитывая, что пропен активно образуется при температурной утилизации различных отходов химической промышленности, важно знать кинетику химических реакций при его пиролизе и воспламенении.

Все расчеты проводились с использованием программного модуля [3]. Использовались ДКМ работ [4–6]. Посредством численного моделирования проведено описание экспериментально наблюдаемого выхода атомов Н, измеренного методом ARAS при пиролизе пропена за отраженными ударными волнами в диапазоне температур 1340–1910 К при давлениях 0.4–4.6 атм с аргоном в качестве разбавителя при концентрациях $3.5 \cdot 10^{-11}$ – $1.8 \cdot 10^{-10}$ моль/см³ [2]. Установлено, что ни один из выбранных ДКМ не описывает выход атомов Н. В тоже время использование всех трех ДКМ при описании ударно-трубных измерений задержек воспламенения пропена в диапазоне температуры 1100–1750 К при давлениях от 2 до 40 атм с коэффициентом топливо/окислитель (ϕ) от 0.5 до 2 и разбавлением аргоном от 72 до 96% [1] показало хорошее соответствие расчетных и экспериментальных результатов.

Анализ показал, что для улучшения численного моделирования пиролиза пропена необходимо уточнить константы скорости диссоциации C_3H_6 и C_3H_5 в зависимости от давления.

Список литературы

1. Burke S.M., Burke U., Mc Donagh R., et al // Combust. Flame. 2015. V. 162. P. 296.
2. Weber I., Golka L., Olzmann M. // Proceed. Combust. Symp. 2017. V. 36(1). P. 299.
3. CHEMKIN-Pro 15112, Reaction Design: San Diego, CK-TUT-10112-1112-UG-1, 2011.
4. Wang H., Warner S.J., Oehlschlaeger M.A., et al // Combust. Flame. 2010. V. 157. P. 1976.
5. Metcalfe W.K., Burke S.M., Ahmed S.S., et al // Int. J. Chem. Kinet. 2013. V. 45. P. 638.
6. Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. // Acta Astronautica. 2020. V. 176. P. 653.