

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ГОРЕНИЯ СУРРОГАТА КЕРОСИНА

Семенихин А.С., Идрисов Д.В., Зубрилин И.А., Чечет И.В., Матвеев С.Г.

¹Самарский университет, г. Самара, semenikhin.as@ssau.ru

Ключевые слова: Кинетический механизм горения, суррогат керосина, модельное топливо, квантово-химический расчёт

Состав авиационного керосина включает десятки химических веществ, доля которых может изменяться. По этой причине, при моделировании процессов горения используют модельные топлива (суррогаты) с определённым составом из нескольких хорошо изученных компонентов. Повышение эффективности кинетического моделирования связано с увеличением компонентов суррогата и уточнением значений соответствующих скоростей реакций.

Разрабатываемые суррогаты включают в себя такие компоненты как ксилолы, тетралин, изо-цетан, метилциклогексан, бутилциклогексан и многие другие. В Самарском университете были разработаны перспективные физико-химические суррогаты SU1 и SU2 [1], объёмный состав которых приведён в табл.1. Кинетическое моделирование горения суррогатов SU и аналогичных смесей возможно с использованием кинетических моделей POLIMI 1412 [2], JetSurf 2.0 [3] и A17 [4].

Табл. 1 – составы исследуемых суррогатов (объёмные доли)

Название	n-decane	n-dodecane	iso-cetane	methylcyclohexane	butylcyclohexane	o-xylene	tetralin	benzene
Формула	C10H22	C12H26	C16H34	C7H14	C10H20	C8H10	C10H12	C6H6
SU1	30%	20%	15%	20%		10%	5%	
SU2	20%	40%			25%			15%

Результаты расчётно-экспериментальных исследований показали, что указанные модели удовлетворительно описывают время задержки воспламенения керосина, скорость распространения пламени суррогата и концентрации основных продуктов сгорания. Однако, для более точного прогнозирования концентраций вредных веществ, описания пиролиза и воспламенения при низких температурах ($T < 1000\text{K}$) требует модификации используемых механизмов.

В связи с вышесказанным цель данного исследования заключается в определении ключевых реакций окисления компонентов суррогата, и уточнении соответствующих значений скоростей реакций.

В работе представлены результаты кинетического реакторного моделирования пиролиза суррогата авиационного керосина и его компонентов. Результаты анализа скоростей реакций (ROP analysis) позволили определить наиболее значимые реакции для уточнения высокоточными методами компьютерной химии. Для реагентов, промежуточных стадий, переходных состояний и продуктов была рассчитана оптимизированная геометрия, составлена поверхность потенциальной энергии и рассчитаны колебательные частоты методом теории функционала плотности (DFT, density functional theory) B3LYP (Becke, 3-parameter, Lee-Yang-Parr) с набором базисных функций 6-311G**. Значения энергий уточнялись с помощью комбинированного G3(MP2,CC) метода, точность которого для рассматриваемых структур сопоставима с экспериментальной. Полученные энергетические и молекулярные параметры были использованы для решения главного кинетического уравнения Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (RRKM-ME, Rice Ramsperger-Kassel-Marcus master equation) с целью вычисления скоростей химических реакций для различных давлений и температур.

Полученные значения скоростей реакций представлены в виде коэффициентов модифицированного уравнения Аррениуса и включены в кинетическую модель A17. Исследование выполнено за счёт научной стипендии АО «ОДК», П ОДК 283-2019 (№ ОДК/2027/11/2020/643).

Список литературы

1. Матвеев С.Г. Разработка компонентного состава суррогата авиационного керосина для моделирования рабочего процесса камеры сгорания газотурбинного двигателя / вестник самарского университета. аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. – 2019. – №1. – т.18. – с.78-87.
2. Bieleveld T., Frassoldati A., Cuoci A., и др. Experimental and kinetic modeling study of combustion of gasoline, its surrogates and components in laminar non-premixed flows / Proceedings of the Combustion Institute. – 2009. – V.32. – P.493-500. doi:10.1016/j.proci.2008.06.214
3. H. Wang, E. Dames, B. Sirjean, и др. A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures, JetSurF version 2.0, September 19, 2010 / [электронный ресурс] <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.html>.
4. Семенихин А. С., Идрисов Д. В., Григорьев Е. М., и др. Кинетический механизм горения суррогата керосина / Процессы горения, теплообмена и экологии тепловых двигателей: сб. тезисов XI Всерос. науч.-техн. конф. с междунар. участием, г. / М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Самар. нац. исслед. ун-т им. С. П. Королева (Самар. ун-т); [отв. ред. С. В. Лукачев]. – 2019. – С. 77-78. – ISBN = 978-5-7883-1433-4

Сведения об авторах

Семенихин Александр Сергеевич, аспирант кафедры Теплотехники и тепловых двигателей. Область научных интересов: кинетическое моделирование процессов горения.

Идрисов Дмитрий Владимирович, аспирант кафедры Теплотехники и тепловых двигателей. Область научных интересов: кинетическое моделирование процессов горения.

Зубрилин Иван Александрович, старший научный сотрудник. Область научных интересов: процессы горения в газотурбинных двигателях.

Чечет Иван Викторович, канд. техн. наук, старший научный сотрудник. Область научных интересов: физика и химия процессов горения.

Матвеев Сергей Геннадьевич, канд. техн. наук, ведущий научный сотрудник. Область научных интересов: процессы горения в газотурбинных двигателях.

IMPROVEMENT OF KINETIC COMBUSTION MECHANISMS OF KEROSENE SURROGATE

Semenikhin A.S.¹, Idrisov D.V.¹, Zubrilin I.A.¹, Chechet I.V.¹, Matveev S.G.¹

¹Samara National Research University, Samara, Russia, semenikhin.as@ssau.ru

Keywords: kinetic combustion mechanism, kerosene surrogate, model fuel, quantum-chemical calculation

The purpose of this study is to determine the key oxidation reactions of the components of the aviation kerosene surrogate, and to refine the corresponding values of the reaction rates.