

27 сентября 2019 г.

СЕКЦИЯ №2

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ  
РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК**

УДК 621.452

**КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ГОРЕНИЯ СУРРОГАТА  
КЕРОСИНА**

Семенихин А.С., Идрисов Д.В., Григорьев Е.М., Матвеев С.С.,  
Гураков Н.И., Зубрилин И.А., Чечет И.В., Матвеев С.Г.  
Самарский университет, г. Самара, [air.booklet@gmail.ru](mailto:air.booklet@gmail.ru)

*Ключевые слова: керосин, модельное топливо, модель горения*

Основное авиационное топливо – керосин, имеет сложный состав, который меняется в зависимости от марки, производителя и месторождения сырья, поэтому для моделирования его горения используют модельные топлива – суррогаты. Для прогнозирования эмиссии вредных веществ требуется создание новых детальных кинетических механизмов, способных описывать горение, как отдельных химических веществ, составляющих суррогаты, так и их смесь.

В ходе работ были разработаны два суррогата авиационного керосина составленные из четырех и шести углеводородов, которые по своим физико-химическим свойствам (плотность, вязкость, отношение С/Н и т.п.) отличаются от авиационного керосина не более чем на 3%.

Таблица 1. Состав рассматриваемых модельных топлив

Название суррогата	н-декан C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	н-додекан C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	изо-цетан C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	метил-циклогексан C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	бутил-циклогексан C <sub>10</sub> H <sub>20</sub>	о-ксилол C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	тетралин C <sub>10</sub> H <sub>12</sub>	бензол C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>
SU1	30%	20%	15%	20%	-	10%	5%	-
SU2	20%	40%	-	-	25%	-	-	15%

Для моделирования горения разработанных суррогатов, на основании существующих механизмов был создан детальный кинетический механизм, состоящий из 360 химических веществ и 2653 элементарных химических реакций, включающий пути образования канцерогенных полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и оксидов азота. Механизм, был

верифицирован по времени задержки воспламенения, пиролизу, распределению концентраций над горелкой и ламинарной скорости распространения пламени.

Расхождение результатов расчета ламинарной скорости распространения пламени с экспериментальными данными не превышает 10% для отдельно взятых компонентов и 5% для суррогатов SU1 и SU2. Рассчитанные значения времени задержки воспламенения компонентов согласуются с экспериментальными данными в диапазоне температур свыше 1000К. Время задержки воспламенения керосина хорошо согласуется с экспериментом при давлениях свыше 30 атмосфер, для атмосферного давления расчетные значения завышены. Максимальное отклонение прогнозируемых концентраций основных продуктов горения от экспериментальных данных в случае пиролиза керосина не превышает 10%. Наибольшее отклонение для рассматриваемых над горелкой ПАУ наблюдается в случае антрацена, концентрации которого прогнозируются в 3 раза ниже экспериментальных. Результаты работы показывают, что созданный кинетический механизм может применяться для изучения предложенных суррогатов SU1 и SU2.

УДК 544.15

## **ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ГОРЕНИЯ ИНДЕНИЛ И ЦИКЛОПЕНТАДИЕНИЛ РАДИКАЛОВ**

Красноухов В.С., Самарский университет, г. Самара

Порфирьев Д.П. Самарский университет, г. Самара, Физический институт  
имени П.Н. Лебедева РАН, г. Самара

Загидуллин М.В., Самарский университет, г. Самара, Физический  
институт им П.Н. Лебедева РАН, г. Самара

Мебель А.М., Самарский университет, г. Самара; Международный  
университет Флориды, Майами, США

vladya11@gmail.com

*Ключевые слова: горение, ПАУ, сажа, инденил, циклопентадиенил, ab initio  
расчеты*

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) относятся к распространенным загрязнителям и служат в качестве предшественников в образовании сажи [1]. Формирование сажи начинается с образования простейших ПАУ, их дальнейшего роста, образования зародышей сажи и их коагуляции. В работах [2,3] представлены результаты теоретических