

УДК 541.124:547.263:546.11.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК ВОДОРОДА НА ГОРЕНИЕ *n*-ПРОПАНОЛА В ПЛАМЕНИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО СМЕШАННЫХ ТОПЛИВ¹

© 2019 Y. Rezgui¹, *, M. Guemini¹

¹Laboratory of Applied Chemistry and Technology of Materials, University of Oum El Bouaghi, P.O.B. 358, Constantine Road, Oum El Bouaghi 04000, Algeria

*E-mail: yacinereference@yahoo.com

Поступила в редакцию 06.08.2018 г.

После доработки 13.11.2018 г.

Принята к публикации 24.12.2018 г.

На основе моделей, базирующихся на сочетании достоверных кинетических схем, развит реакционный механизм, описывающий горение смесей *n*-пропанол/водород в режиме высоких температур. В предлагаемой модели задействовано 287 частиц и 2761 реакция. Модель проверена для доступных литературных данных для пламенстехиометрических, предварительно смешанных смесей *n*-пропанол/кислород/аргон при низких давлениях. Удовлетворительное согласие между расчетными и экспериментальными данными получено для реактантов и некоторых интермедиатов. Однако расчетные максимумы для некоторых углеводородных интермедиатов и оксигенатов оказались выше экспериментальных. Предложенная кинетическая схема в сочетании с модифицированной одномерной моделью (Premix) и пакетом Chemkin II использована для изучения кинетических эффектов добавления водорода на структуру пламени и эмиссию загрязнителей при горении стехиометрических смесей *n*-пропанол/водород при низком давлении (3333 Па). Топливные смеси готовили пошаговым (по 10%) добавлением водорода к пламени чистого *n*-пропанола при постоянной мольной доле инертного газа (аргона) и эквивалентном отношении. Результаты моделирования показали, что адиабатическая температура пламени топлив с добавленным H₂ ниже, чем в пламени без водорода. Чем выше уровень водорода, тем ниже адиабатическая температура. Независимо от доли водорода в горючей смеси *n*-пропанол расходуется в основном в реакциях метатезиса с радикалами OH и H. Кроме того, мольные доли CH₄, C₂H₂, CH₂O, CH₃CHO и CO₂ уменьшаются по мере увеличения количества водорода в топливной смеси.

Ключевые слова: добавление водорода, *n*-пропанол, ламинарные пламена, эмиссия загрязнителей, оксигенаты, кинетическое моделирование

DOI: 10.1134/S0453881119030110

¹ Полностью статья опубликована в английской версии журнала “Kinetics and Catalysis” № 3. 2019 г.