

УДК 541.124:546.262:547.53:547.216

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ЭМИССИЮ CO, CO₂ И ПРЕКУРСОРОВ САЖИ ИЗ ПЛАМЕН СМЕСИ ЦИКЛОГЕКСАНА И БЕНЗОЛА

© 2021 г. I. Ferhoun^{a, b}, M. Guemini^{b, c, *}, Y. Rezgui^{b, c}

^aFaculty of Applied Sciences, Department of Process Engineering, Kasdi Merbah University, Ouargla, Ghardaia Road, B.P.511, 30000 Algeria

^bFaculty of Sciences and Applied Sciences, Department of Process Engineering, Larbi Ben M'hidi University, Oum El Bouaghi, Constantine Road, B.P.358, 04000 Algeria

^cLaboratory of Applied Chemistry and Technology of Materials, Larbi Ben M'hidi University, Oum El Bouaghi, Constantine Road, B.P.358, 04000 Algeria

*e-mail: m_guemini@yahoo.fr

Поступила в редакцию 15.06.2020 г.

После доработки 22.11.2020 г.

Принята к публикации 28.01.2021 г.

Проведено сравнение кинетических моделей горения двух циклических углеводородов, имеющих одинаковое количество атомов углерода и разную химическую структуру (циклогексан и бензол), с применением расчетной программы PREMIX, разработанной на основе формализма CHEMKIN II. Расчеты выполняли для трех соотношений эквивалентов ($\Phi = 0.8, 1$ и 1.8) предварительно смешанных ламинарных пламен *цикло*-C₆H₁₂/воздух и C₆H₆/воздух с использованием двух ранее проверенных и опубликованных моделей. Найдено, что ароматизация играет первостепенную роль в реакциях образования/разрушения загрязнителей. Результаты моделирования показали, что при сгорании бензола образуются более высокие концентрации CO, CO₂, C₂H₂, C₃H₃ и C₅H₅ по сравнению с циклогексаном. Одной из основных целей настоящей работы было получение надежных данных о влиянии структуры топлива на образование CO и CO₂, а также на механизмы формирования прекурсоров сажи. Эта цель была достигнута при анализе путей реакции, что позволило предложить подробные кинетические схемы, объясняющие пути образования или уничтожения всех загрязнителей, выделяющихся из двух исследованных видов топлива.

Ключевые слова: циклогексан, бензол, CO_x, прекурсоры сажи, горение, кинетическое моделирование

DOI: 10.31857/S045388112104002X

Effect of the Chemical Structure of Hydrocarbons on the Emissions of CO, CO₂ and Soot Precursors Issued from Cyclohexane and Benzene Premixed Flames

I. Ferhoun^{1,2}, M. Guemini^{2,3,*}, and Y. Rezgui^{2,3}

¹*Faculty of Applied Sciences, Department of Process Engineering, Kasdi Merbah University, Ouargla, Ghardaia Road, B.P.511, 30000 Algeria*

²*Faculty of Sciences and Applied Sciences, Department of Process Engineering, Larbi Ben M'hidi University, Oum El Bouaghi, Constantine Road, B.P.358, 04000 Algeria*

³*Laboratory of Applied Chemistry and Technology of Materials, Larbi Ben M'hidi University, Oum El Bouaghi, Constantine Road, B.P.358, 04000 Algeria*

*e-mail: m_guemini@yahoo.fr

A kinetic modeling comparative study of the combustion of two cyclic hydrocarbons having the same number of carbon atoms and a different chemical structure (cyclohexane and benzene) was carried out using the PREMIX calculation code developed around the CHEMKIN II formalism, under the conditions of three equivalence ratios ($\Phi = 0.8, 1$ and 1.8) of cycloC₆H₁₂/air and C₆H₆/air premixed laminar flames, using two previously validated and published models. It has been found that aromatization played a primordial role in the formation/depletion reactions of pollutants. The modeling results indicated that the combustion of benzene produced high concentrations of CO, CO₂, C₂H₂, C₃H₃ and C₅H₅ as compared to cyclohexane. In addition, one of the main objectives of this study was to obtain a good understanding of the effect of fuel structure on CO, CO₂ production as well as on the formation mechanisms of soot precursors. This goal was achieved by analysing the reaction pathways, which allowed us to proposedetailed kinetic schemes explaining the formation or depletion paths of each pollutant issued from the two investigated fuels.

Keywords: cyclohexane, benzene, CO_x, soot precursors, combustion, kinetic modeling