

О МЕХАНИЗМЕ ОКИСЛЕНИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА

А. М. Старик, Н. С. Титова, А. С. Шарипов, В. Е. Козлов

Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, 111116 Москва, star@ciam.ru

На основе разработанного реакционного механизма воспламенения и горения синтез-газа в воздухе проведен комплексный анализ кинетики окисления синтез-газа в широких диапазонах температуры, давления, коэффициента избытка топлива и его состава. Для верификации кинетической модели использовался обширный набор экспериментальных данных по временам задержки воспламенения, скорости распространения ламинарного пламени и временной эволюции концентраций основных компонентов, полученных в ударных трубах и в проточном реакторе. На основе анализа чувствительности показано, что роль реакций, определяющих основные характеристики воспламенения и горения, зависит от состава топливовоздушной смеси и самого синтез-газа.

Ключевые слова: синтез-газ, водород, химическая кинетика, воспламенение, горение.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время широко обсуждается возможность использования как в энергетике, так и в двигателях различных транспортных систем альтернативных топлив. Особое внимание исследователей привлекают так называемые синтетические топлива, образующиеся при газификации углей или при частичном окислении предельных и непредельных углеводородов, в состав которых входят в основном молекулярный водород и оксид углерода [1]. Причем в зависимости от способа производства такого синтетического топлива (его обычно называют синтез-газом) соотношение между этими компонентами изменяется в достаточно широком диапазоне. Несмотря на то, что кинетика окисления каждого из компонентов, входящих в состав синтез-газа (H_2 и CO), достаточно хорошо известна и созданы детальные кинетические модели для описания процессов воспламенения и горения смесей $H_2—O_2$ (воздух) и $CO—O_2$ (воздух) [2–8], многие проблемы, связанные с правильным описанием кинетики окисления синтез-газа, до конца не решены [9, 10]. (Далее запись типа « $H_2—O_2$ (воздух)» означает, что используется либо O_2 , либо воздух; аналогично для записи «... + N_2 (He)».)

Необходимо отметить, что реакционный механизм окисления смеси $H_2—CO$ является

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 08-01-00808, 08-08-00839) и федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № 02.740.11.0074).

базовым при построении кинетических моделей воспламенения и горения практически всех углеводородов, т. е. адекватное описание процессов в смеси $H_2—CO—O_2$ (воздух) весьма важно и для понимания кинетики цепных реакций в более сложных топливовоздушных системах [9]. Именно поэтому в последние годы значительные усилия были направлены на экспериментальное исследование процессов воспламенения и горения синтез-газа [11–15] и на создание расширенных реакционных механизмов [16–18], адекватно описывающих эксперименты. Эти модели стали результатом существенного прогресса в более точном вычислении и измерении констант скоростей элементарных реакций и в определении термодинамических свойств индивидуальных веществ, а также в измерении таких характеристик процессов горения, как время задержки воспламенения и скорость распространения пламени в смеси $H_2—CO—O_2$ (воздух). Тем не менее, несмотря на значительные успехи в создании кинетического механизма воспламенения и горения смесей $H_2—O_2$ и $CO—O_2$, список реакций в механизме окисления как водорода, так и CO еще далеко не полон. Например, в вышеупомянутые кинетические модели не включены реакции с участием O_3 , которые необходимы для описания процессов окисления и воспламенения различных смесей, содержащих водород, углеводороды и озон.

Целью данной работы как раз и является создание кинетической модели процессов в смеси $H_2—CO—O_2$ (воздух), которая с разумной точностью описывала бы имеющиеся экспериментальные данные по времени задержки