

Анализ чувствительности воспламенения пропана в воздухе при низких температурах

Введение

Горение - сложное явление, характеризующееся взаимодействием и конкуренцией различных физико-химических процессов. Правильное описание химических изменений требует применения механизмов реакции, состоящих из нескольких сотен или тысяч реакций. Например, горение природного газа (смесь метана, этана и пропана) описывается подробным механизмом, в который входит около 130 веществ и 1300 реакций. Это означает, что химия процессов горения описывается огромным количеством параметров, и поэтому применение методов анализа чувствительности очень полезно для её понимания.

Постановка задачи

Требуется провести анализ чувствительности воспламенения стехиометрической смеси пропана / воздуха при начальном давлении 10 атм и начальной температуре 700 К для понимания управляющих реакций, характерных для низкотемпературного воспламенения.

Решение задачи в Chemical Workbench

Для проведения анализа чувствительности времени задержки воспламенения смеси пропан / воздух мы используем **Калориметрический реактор с чувствительностью** (подтип: тип VQ), доступный в Chemical Workbench.

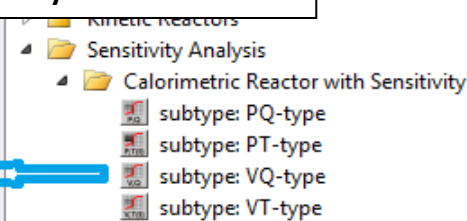
Химический кинетический механизм загружается из базы данных KintechDB. Механизм оригинала был импортирован из файла CHEMKIN, доступный по адресу <http://c3.nuigalway.ie/mechanisms.html> Natural gas to/including nC5 (2010).

Для входного потока была установлена стехиометрическая смесь пропана и воздуха при начальной температуре 700 К. Начальное давление процесса было установлено равным 10 атм.

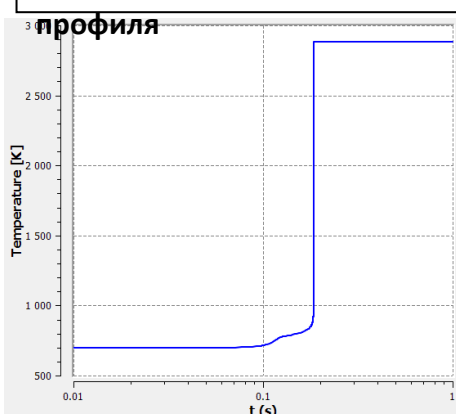
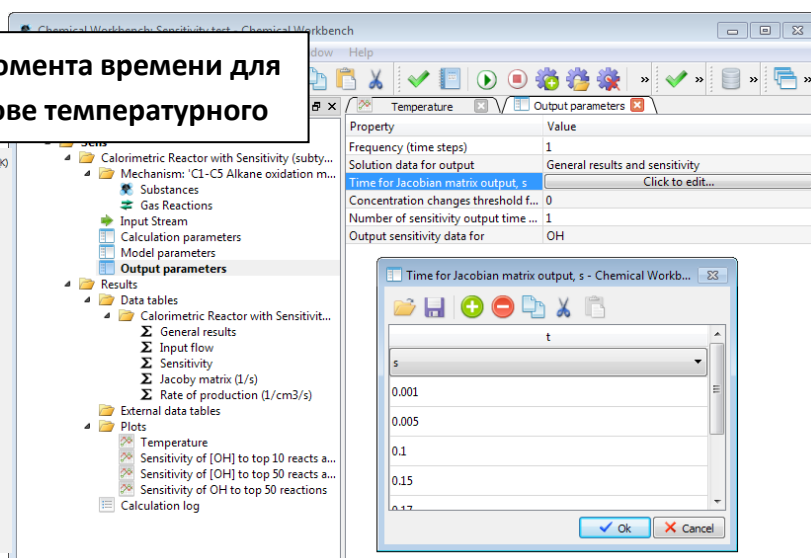
Для анализа чувствительности концентрация радикала OH был установлена как индикатор для получения коэффициентов чувствительности. **Время вывода матрицы Якоби** для печати коэффициентов чувствительности выбрано на основе временного момента, когда температурное поведение имеет значительные изменения.

Список реакторных моделей для анализа локальной чувствительности

в CWB



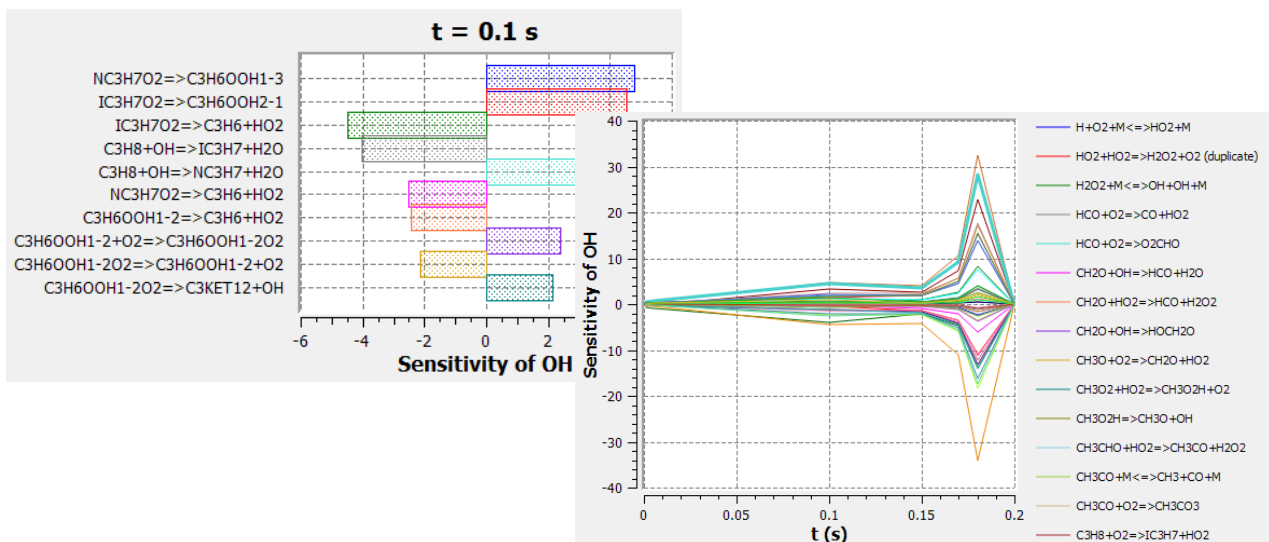
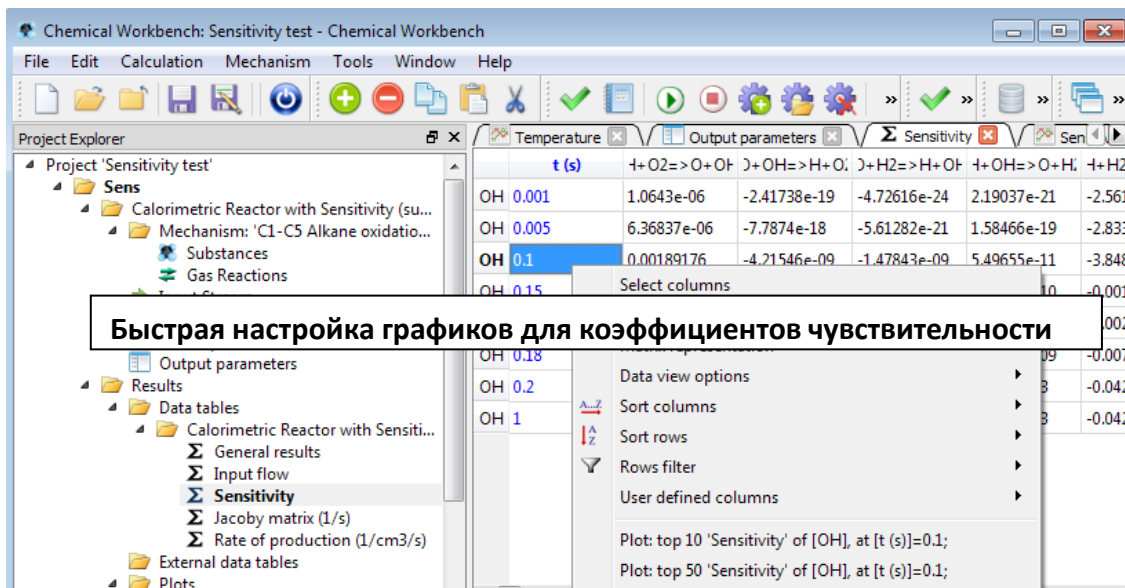
Установка цели (радикал OH) и момента времени для анализа чувствительности на основе температурного

Результаты

После завершения расчета создаются три таблицы (может потребоваться большее количество таблиц, если требуется вывод матрицы Якоби): **входной поток**, **общие результаты** (содержащие кинетические данные системы) и коэффициенты чувствительности в заданные моменты времени. Используя **таблицу чувствительности**, можно получить графики с 10 и 50 основными реакциями, которые главным образом влияют на концентрацию радикалов OH в выбранный момент времени. Кроме того, временные изменения коэффициентов чувствительности на стадии воспламенения также можно отслеживать, строя их в разные моменты времени.

Как показывает анализ чувствительности, в момент 0,1 с при первом повышении температуры доминирует путь низких температур (внутренняя изомеризация, распространение цепи и разветвление, характерные для низкотемпературной химии).



Следующие шаги

1. Анализ коэффициентов чувствительности в момент времени $t = 0,18$ с, когда выделяется большая часть тепла
2. Настройка чувствительности для перекисных радикалов (HO_2 , RO_2 ·)
3. Сменить топливо и механизм на более сложные (например, n-гептан) и построить такой же проект и анализ.