

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТЕЙ СОВРЕМЕННЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ ОКИСЛЕНИЯ АЦЕТИЛЕНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ

И.С. Яковенко¹

А.В. Ярков¹

А.В. Тюрнин¹

А.М. Тереза²

А.О. Новицкий³

П.Н. Кривошеев³

yakovenko.ivan@bk.ru

yarkov.andrey.v@gmail.com

lexastrogino@yandex.ru

tereza@chph.ras.ru

alexey.itmo@tut.by

krivosheyev.pavlik@gmail.com

¹ ОИВТ РАН, Москва, Российская Федерация

² ФИЦ ХФ РАН, Москва, Российская Федерация

³ Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси,
Минск, Республика Беларусь

Аннотация

Ввиду высокой реакционной способности ацетилен является одним из перспективных газовых топлив, однако для широкого использования на практике требуется всестороннее изучение возможных режимов горения таких топлив. Настоящая работа посвящена анализу современных кинетических механизмов окисления ацетилена. Актуальные подходы к численному анализу газодинамических течений в химически активных газовых смесях — мощный инструмент для решения многих задач промышленности и энергетики. Получение достоверных результатов численного моделирования нестационарных процессов горения и детонации невозможно без использования надежных и эффективных кинетических механизмов. Проведен обзор кинетических механизмов, описывающих окисление ацетилена. Восемь наиболее оптимальных механизмов исследованы на возможность их использования при детальном моделировании нестационарных процессов горения, в частности, ускорения пламени и перехода к детонации. С использованием полной модели газодинамики реагирующей среды выполнены расчеты времени задержки воспламенения и нормаль-

Ключевые слова

Горение, ацетилен, кинетический механизм, время задержки воспламенения, нормальная скорость горения, численное моделирование, нестационарное горение

ной скорости горения. Для оценки корректности полученных значений параметров воспламенения и горения проведено сопоставление с имеющимися экспериментальными данными. На основе анализа полученных результатов сделаны выводы о возможности применения рассматриваемых кинетических механизмов с учетом точности воспроизведения параметров горения и вычислительной эффективности

Поступила 03.06.2022

Принята 17.06.2022

© Автор(ы), 2022

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-58-04024) и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № T21PM-103)

Введение. Несмотря на общую тенденцию к декарбонизации и ужесточение требований к снижению уровня выбросов загрязняющих веществ при работе энергетических и двигательных систем, углеводородные топлива остаются основным источником энергии, используемым во многих областях промышленности. При этом повышение эффективности, экологичности и безопасности при сжигании углеводородов может быть достигнуто путем разработки новых комбинированных топлив и организации режимов горения, обеспечивающих высокую полноту сгорания, интенсивное энерговыделение и малую эмиссию оксидов углерода. Среди многообразия углеводородных соединений отдельного внимания заслуживает ацетилен, который применяют во многих областях — от газовой сварки и резки металлов до топлива ракетных двигателей. Важная особенность этого углеводорода — способность поддерживать горение в широком диапазоне составов смеси и термодинамических параметров системы. Добавление ацетилена в топливно-воздушную смесь способствует повышению устойчивости горения [1], что является ключевым шагом к организации эффективных режимов горения газообразных топлив и снижению сопутствующих вредных выбросов. Ацетилен также может выступать в качестве альтернативы традиционным видам топлива в двигателях внутреннего сгорания [2]. В то же время его использование сопряжено с высокими рисками развития нештатных режимов горения, в том числе детонационных, что может повлечь за собой повреждение химического реактора и создать угрозу возникновения аварийных ситуаций, сопровождаемых масштабными разрушениями и человеческими жертвами [3, 4]. Это мотивирует дальнейшие исследования в области нестационарного горения газовых смесей на основе ацетилена, самопроизвольного ускорения пламени и перехода горения в детонацию. При этом успешным подходом к изучению таких высокоин-

тенсивных процессов является сочетание натурального эксперимента и расчетно-теоретического анализа.

В настоящее время накоплена достаточно репрезентативная экспериментальная база по проблеме перехода горения в детонацию в газовых смесях на основе ацетилена [5–7], тогда как основной объем расчетно-теоретических работ по данному вопросу проводился с использованием упрощенных одноступенчатого [8] или редуцированного [9] кинетических механизмов. Проведение численных расчетов процессов нестационарного горения [10, 11], в том числе ускорения пламени и перехода к детонации [12, 13], требует тщательного выбора модели, описывающей химическую кинетику превращения исходной смеси в продукты горения. В частности, использование одноступенчатых кинетических механизмов приводит к получению искаженных данных о режимах ускорения пламени и механизмах перехода к детонации в газовых смесях [13–15]. В связи с этим важным шагом к проведению детального численного моделирования, способного воспроизвести качественно и количественно данные натуральных экспериментов по нестационарному развитию горения смесей на основе ацетилена, является выбор адекватного кинетического механизма, описывающего особенности горения в широком диапазоне значений термодинамических параметров. Существует немало кинетических механизмов, ориентированных на моделирование процесса горения углеводородов, однако зачастую ацетилен не входит в число основных соединений, на которые ориентируются авторы этих механизмов. При этом следует отметить, что задача моделирования газодинамики горения газовых смесей весьма трудоемка с позиции вычислительных ресурсов, что значительно ограничивает возможности использования детальных кинетических механизмов с большим числом химически активных компонентов.

Цель работы — проведение обзора доступных кинетических механизмов, способных воспроизвести основные особенности горения смесей на основе ацетилена в диапазоне значений температуры и давления, характерных для ускорения пламени и перехода к детонации.

Классификация кинетических механизмов. Кинетические механизмы подразделяют на три категории: 1) детальные; 2) глобальные; 3) редуцированные [16]. Детальные механизмы состоят из большого числа элементарных химических реакций и, по сути, воспроизводят реальные процессы молекулярных взаимодействий. Как правило, глобальные механизмы состоят из одной реакции или сравнительно небольшого числа реакций, описывающих интегральные стадии химических превращений, скорости которых определяются эмпирическими выражениями, содер-

жащими подгоночные параметры. Редуцированные механизмы занимают промежуточное положение и представляют собой уменьшенные детальные кинетические механизмы, полученные с использованием различных методик, направленных на снижение числа компонентов и реакций [17].

Пример глобального кинетического механизма — механизм, описанный в [18]. Несмотря на высокую с вычислительной позиции привлекательность, обусловленную высокой скоростью расчета уравнений химической кинетики, диапазон допустимых значений параметров и составов смеси, где такие глобальные механизмы с удовлетворительной точностью воспроизводят параметры горения, слишком мал для решения многих задач [19, 20]. Этот фактор имеет принципиальное значение при моделировании нестационарных процессов горения, в частности, ускорения пламени и перехода к детонации, при развитии которых состояние смеси изменяется в весьма широком диапазоне значений термодинамических параметров. В связи с этим важно более детально описать процесс горения в широком диапазоне значений параметров, что возможно при использовании детальных кинетических механизмов. Однако такие механизмы, описывая химическую кинетику в весьма широком диапазоне значений параметров и соотношений между компонентами, могут содержать более 1000 элементарных реакций с участием достаточно большого числа реагентов [21, 22]. При этом химические превращения описываются системой обыкновенных дифференциальных уравнений с числом уравнений, равным числу элементарных компонентов, решение которой ищется независимо в каждой расчетной ячейке при численном моделировании развития горения в заданных условиях. В результате при использовании детальных кинетических механизмов с большим числом компонентов основную часть времени численного интегрирования уравнений газовой динамики реагирующей среды занимает расчет химического источника. Для снижения требований к вычислительным ресурсам целесообразно использовать редуцированные кинетические механизмы с меньшим числом компонентов, которые с высокой точностью воспроизводят характеристики процесса горения в рассматриваемых диапазонах значений термодинамических параметров и составов [16].

Кинетические механизмы окисления ацетилена. В настоящее время существует большое число кинетических механизмов, описывающих окисление углеводородов [18–33], к которым относится ацетилен. Некоторые из этих механизмов приведены в таблице. С их использованием потенциально возможно численное решение задач горения и детонации смесей на основе ацетилена, так как они включают в себя его в качестве одного

из реагирующих компонентов. При этом механизмы № 7–13 разработаны специально для моделирования кинетики окисления ацетилена. Механизмы № 1–3 представляют собой полные механизмы окисления низших углеводородов. В случае механизма № 2 [22] в их число входят, например, метан, этан, этанол, формальдегид, ацетилен, а в случае механизма № 1 [21] — пропан, ацетон, бутан, бутен и др. Эти механизмы содержат большое число компонентов и реакций и, как правило, используются в виде отправной точки для создания более простых детальными механизмов, предназначенных для моделирования горения углеводородно-воздушных и углеводородно-кислородных смесей заданных составов в определенном термодинамическом состоянии или диапазоне состояний. Здесь механизмы № 1–3 ввиду их большого объема при проведении численных расчетов не использованы. Механизмы № 4–6 [24–26] являются детальными механизмами, полученными из полных в результате анализа чувствительности и путей реакции, и предназначены для моделирования горения большого числа углеводородов в широком диапазоне значений параметров и составов смеси. В настоящей работе рассмотрена версия механизма № 6 [26] 2012 г. В более поздних версиях этот механизм расширен включением реакций окисления углеводородов C_4 . Эти механизмы пользуются большой популярностью ввиду их непрерывной поддержки исследователями и частых обновлений. Они имеют широкую валидационную базу по времени задержки воспламенения для таких часто встречающихся веществ, как водород, метан, этан и формальдегид. Механизм № 7 [27] ориентирован на моделирование горения ацетилена и учитывает химические реакции вплоть до C_4 -углеводородов. Механизм № 8 [28] содержит ацетилен в качестве основного компонента и создан для описания кинетики окисления топлива при высоких значениях давления. Механизм № 9 [29] разработан для описания высокотемпературной кинетики ацетилена и этилена. Однако большое число учитываемых компонентов ограничивает использование механизмов № 7–9 [27–29] в газодинамических расчетах. Механизм № 10 представляет собой детальный механизм, описывающий горение и детонацию бедных и оклостехиометрических смесей на основе ацетилена [30]. Механизм № 11 — сокращенный 25-ступенчатый механизм окисления ацетилена [31], учитывающий взаимодействия между 17 активными компонентами. Механизмы № 12 и 13 разработаны в ФИЦ ХФ РАН для моделирования высокотемпературного горения ацетилена, состоят из 57 и 37 компонентов соответственно [32, 33]. Для проведения газодинамических расчетов перехода от медленного горения к детонации наибольший интерес представляют механизмы № 4–6 и № 10–13. Однако для обоснования выбора того или иного механизма тре-

буется их всесторонний анализ в целях определения точности воспроизведения таких важных параметров, как задержка воспламенения и нормальная скорость горения в диапазоне значений температуры и давления, достигаемых в процессе нестационарного развития горения. Для демонстрации работы более детальных механизмов, ориентированных на горение ацетилена, приведены результаты с использованием механизма № 9.

Кинетические механизмы окисления углеводородов

Номер п/п	Механизм	Число		Решаемая задача
		компонентов	реакций	
1	Aramco 2.0 [21]	493	5131	Горение и детонация смесей на основе C ₁ -, C ₂ -, C ₃ -, C ₄ -углеводородов
2	Konnov [22]	127	1200	То же на основе C ₁ - и C ₂ -углеводородов
3	PolyMech [23]	83	558	Процессы полигенерации в богатых смесях метана и диметилового эфира
4	GRI 3.0 [24]	53	325	Горение смесей на основе природного газа
5	FFCM-1 [25]	38	250	Горение и детонация смесей на основе водорода, C ₁ - и C ₂ -углеводородов
6	San Diego [26]	50	268	То же на основе водорода, C ₁ -, C ₂ -, C ₃ -углеводородов
7	DLR [27]	109	939	Горение и пиролиз ацетилена с учетом горения C ₁ -, C ₂ -, C ₃ -, C ₄ -углеводородов
8	HP Mech [28]	92	615	Высокотемпературное горение ацетилена
9	Wang — Laskin [29]	75	367	Горение смесей на основе этилена и ацетилена
10	Miller [30]	30	100	Горение и детонация смесей на основе ацетилена
11	Varatharajan — Williams [31]	17	25	
12	Tereza [32]	57	405	
13	Tereza (reduced) [33]	37	235	

Математическая модель. Динамика реагирующих газовых смесей описана с использованием полной системы уравнений Навье — Стокса в приближении малой сжимаемости с учетом теплопроводности и многокомпонентной диффузии. Для проведения численных расчетов применен вычислительный авторский пакет NRG с открытым исходным кодом [34], на базе которого реализован метод FDS решения уравнений газовой динамики в приближении малых чисел Маха [35]. В ходе решения использованы табличные уравнения состояния смеси, а также учтены зависимости удельной теплоемкости и энтропии образования от температуры и состава смеси. Полиномиальные аппроксимации теплофизических параметров рассчитаны по таблицам формата NIST-JANAF [36] с использованием коэффициентов, предложенных для соответствующих кинетических механизмов. Расчет коэффициентов переноса проводился с учетом молекулярных данных [37], прилагаемых к кинетическим механизмам. Физико-математические модели и алгоритмы, реализованные в вычислительном пакете NRG, всесторонне протестированы на решении тестовых задач физики горения [38], а сам пакет был ранее успешно применен для моделирования процессов перехода горения к детонации в газовых смесях на основе водорода [39, 40].

Результаты оценки параметров процесса горения с использованием различных кинетических механизмов. Один из основных экспериментально регистрируемых параметров, характеризующих горючую смесь, — время задержки воспламенения, которое определяется как время от момента нагрева смеси до начала стремительного образования радикалов и выделения энергии в результате экзотермической химической реакции. Имеется достаточно обширная экспериментальная база по определению времени задержки воспламенения смесей на основе ацетилена в ударных трубах [41–43]. Как правило, время задержки воспламенения является основным критерием при разработке и валидации кинетического механизма. При этом корректное воспроизведение времени задержки воспламенения играет важную роль при анализе возможных механизмов перехода от медленного горения к детонации, так как с этим параметром связана возможность возникновения очагов горения в свежей смеси на расстоянии перед фронтом пламени при локальном нагреве смеси в результате взаимодействия волн сжатия между собой или с препятствиями [44].

В действительности, в различных экспериментах используют разные методики определения времени задержки воспламенения. Так, в [41] определено время задержки воспламенения в результате анализа полученных

шлирен-методом фотографий процесса ударно-индуцированного воспламенения. Время задержки воспламенения в [42] установлено по пересечению линии нулевого значения CO_2 и касательной к временной зависимости концентрации CO_2 на стадии роста в точке перегиба. За время задержки воспламенения в [43] принят период, необходимый для того, чтобы сумма концентраций CO и CO_2 достигла 10 % своего конечного значения.

В настоящей работе для определения времени задержки воспламенения решена нульмерная задача, в рамках которой смесь в начальный момент времени равномерно нагрета до температуры T_0 при давлении p_0 . При заданной температуре начинается химическая реакция, сопровождающаяся изменением температуры и плотности смеси при постоянном давлении. Время задержки воспламенения определено по критерию, использованному в соответствующем эксперименте, за исключением работы [41], данные которой сравнивались с рассчитанными значениями по методу проведения касательной к кривой роста концентрации CO_2 .

Результаты, представленные на рис. 1, а, характеризуются наименьшим разбавлением реагирующей смеси из всех, представленных в работе, и обладают наибольшей химической активностью. Для этой смеси все механизмы дают близкие к экспериментальным данным значения времени задержки. Наиболее близкие к эксперименту значения получены с использованием механизма № 5. Удовлетворительные результаты дают расчеты с использованием механизмов № 9, 12 и 13. Перспективный для использования редуцированный механизм № 11 дает заниженные значения так же, как и механизм № 10. Механизм № 4 дает хорошее согласие с экспериментом только в области высоких значений температуры, при этом получены сильно завышенные значения времени задержки воспламенения в области низких значений температуры. Эта особенность механизма проявляется и далее в большинстве выполненных расчетов.

Практический интерес представляют бедные смеси ацетилена с кислородом с добавлением инертных разбавителей, так как эти смеси более безопасны и предпочтительны для экспериментальных наблюдений высокоинтенсивных процессов горения [5]. Результаты расчета времени задержки воспламенения для бедной ацетилен-кислородной смеси приведены на рис. 1, б. Удовлетворительное согласие с экспериментом получено по всем механизмам, за исключением механизма № 4.

Результаты расчета времени задержки воспламенения в условиях эксперимента [43], где также рассматривается ацетилен-кислородная смесь,

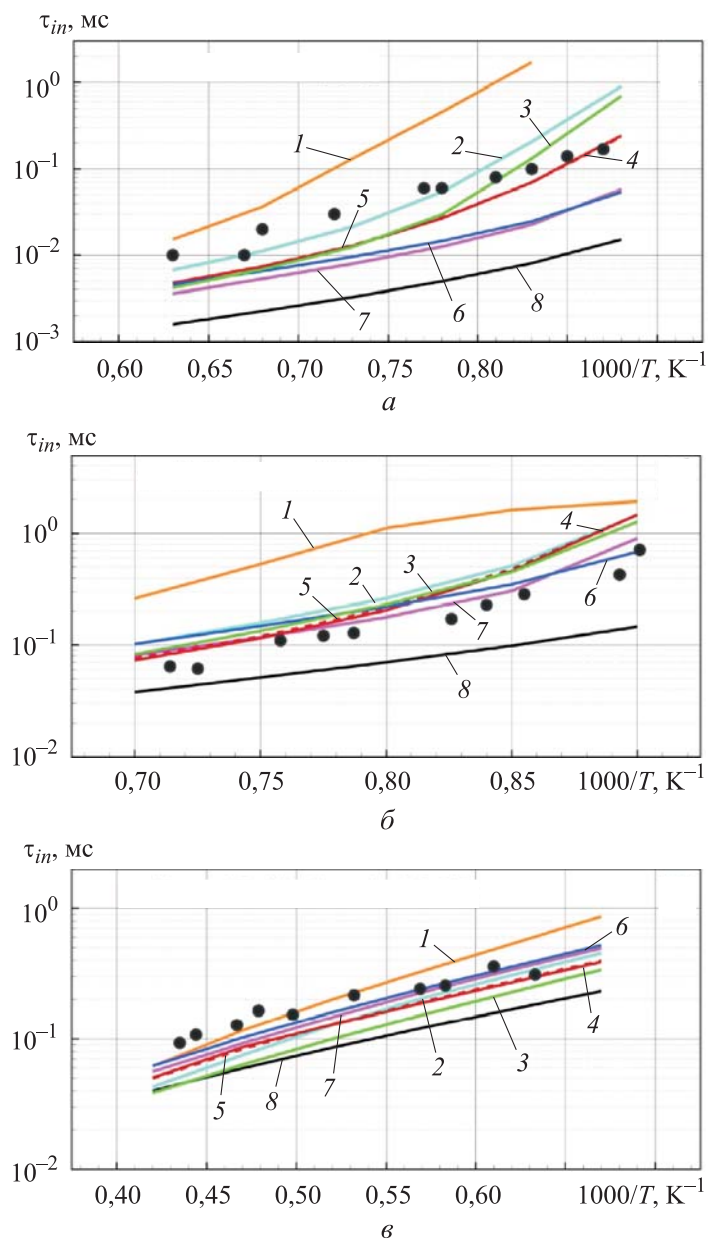


Рис. 1. Сравнение значений времени задержки воспламенения в зависимости от начальной температуры стехиометрической ацетилен-воздушной смеси под давлением 0,4 МПа с экспериментальными данными (●) из [41] (а), бедной ацетилен-кислородной смеси ($\phi = 0,5$) под давлением 0,15 МПа, разбавленной аргоном ($X_{Ar} = 0,95$), с экспериментальными данными (●) из [42] (б), богатой ацетилен-кислородной смеси ($\phi = 1,56$) под давлением 0,07 МПа, разбавленной аргоном ($X_{Ar} = 0,987$), с экспериментальными данными (●) из [43] (в) для механизмов №№ 4 (1), 5 (2), 9 (3), 12 (4), 13 (5), 11 (6), 6 (7) и 10 (8)

разбавленная аргоном, но с избытком топлива, приведены на рис. 1, в. Все механизмы дают достаточно хорошее соответствие с экспериментальными данными.

Еще один важный параметр, характеризующий способность кинетического механизма корректно предсказывать динамику развития горения, — нормальная скорость горения, определяемая как скорость пламени по отношению к несгоревшему газу, с которой плоский одномерный фронт пламени распространяется вдоль нормали к поверхности [44]. Значения нормальной скорости горения ацетилен-воздушных смесей приведены в [28, 46–50]. Однако следует отметить, что экспериментальные данные имеют довольно большую погрешность, а разброс значений нормальной скорости горения для стехиометрических ацетилен-воздушных смесей, представленных в различных источниках, достигает 15 %. Кроме того, ввиду особенностей хранения и транспортировки ацетилена в экспериментах используют смеси с примесями ацетона, что также искажает получаемые результаты [50]. При этом в литературе практически не описано влияние давления и температуры на скорость распространения пламени, в то время как изменение скорости горения с ростом температуры и сжатием смеси перед фронтом горения играет ключевую роль в процессе ускорения пламени и перехода от медленного горения к детонации [44].

В настоящей работе нормальная скорость горения S_L определена исходя из решения одномерных уравнений физико-математической модели в следующей постановке. В начальный момент времени расчетная область разделена на две части. В левой части находится свежая смесь заданного состава при температуре T_0 , в правой — нагретые до температуры 1500 К продукты горения. Через левую границу расчетной области осуществляется подача свежей смеси заданного состава со скоростью u_{in} , а через правую происходит свободное вытекание продуктов горения (рис. 2). После начала

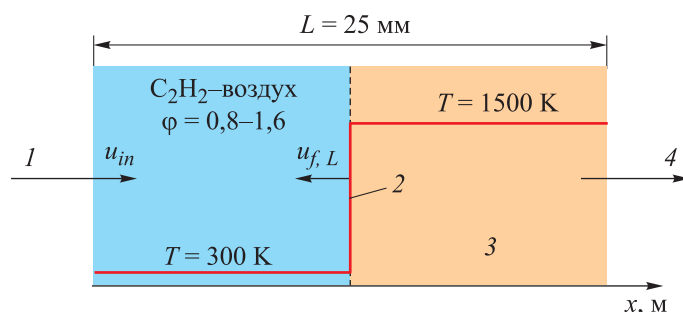


Рис. 2. Схема, иллюстрирующая постановку задачи о нахождении ламинарной скорости горения

расчета свежая смесь воспламеняется на границе холодной и нагретой областей, формируется фронт горения, который распространяется в сторону свежей смеси. По мере распространения фронта пламени скорость подачи свежей смеси динамически меняется так, чтобы фронт пламени занял стационарное положение. В этом случае скорость подачи свежей смеси во фронт горения совпадает с нормальной скоростью пламени $S_L = u_{in}$. Поскольку реактор является открытым, давление в расчетной области сохраняется постоянным и равным начальному давлению p_0 . В отличие от широко используемого вычислительного пакета химической кинетики Chemkin [37] реализованный здесь подход основан на решении полной системы уравнений газовой динамики и учитывает особенности газодинамических течений, формируемых при распространении пламени. Следовательно, полученное решение отражает особенности горения в условиях нестационарного распространения пламени и перехода к детонации.

Зависимость нормальной скорости горения $S_L(\varphi)$ от состава смеси для ацетилен-воздушных смесей при нормальных условиях приведена на рис. 3. Результаты демонстрируют, что наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных данных достигается с использованием механизмов №№ 4, 6, 9 и №№ 12, 13. При этом механизмы №№ 10, 11 дают завышенные значения скорости горения, в то время как механизм № 5 — существенно заниженные.

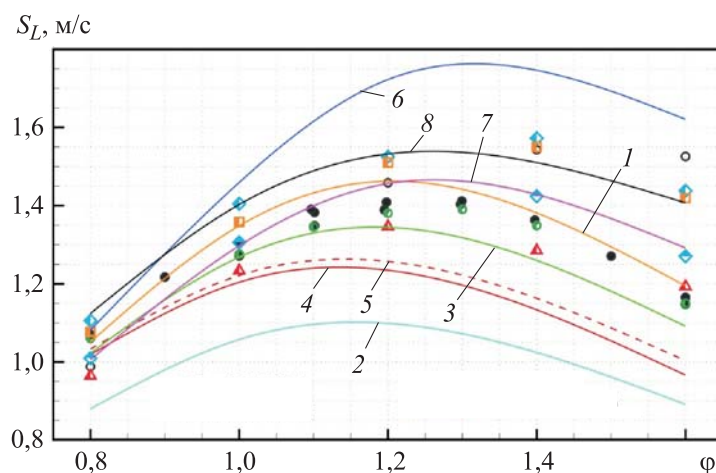


Рис. 3. Зависимость нормальной скорости горения от состава смеси $S_L(\varphi)$ для ацетилен-воздушных смесей при нормальных условиях, рассчитанная с использованием кинетических механизмов №№ 4 (1), 5 (2), 9 (3), 12 (4), 13 (5), 11 (6), 6 (7) и 10 (8), и экспериментальные данные из [28] (•), [46] (◦), [47] (◉), [48] (◻), [49] (◄) и [50] (◈)

Результаты анализа зависимости нормальной скорости горения стехиометрической ацетилен-воздушной смеси $S_L(p)$ от давления при температуре 300 К показывают (рис. 4), что все рассматриваемые механизмы качественно воспроизводят тренд экспериментальной зависимости из [46] на снижение скорости горения с ростом давления. Однако наилучшее количественное совпадение достигается при использовании механизмов №№ 12, 13. Следует отметить, что изменение скорости с увеличением давления в ацетилен-воздушной смеси носит умеренный характер, и заметно большую роль в развитии процесса на стадии, предшествующей переходу к детонации, играет возрастание температуры смеси, подверженной сжатию.

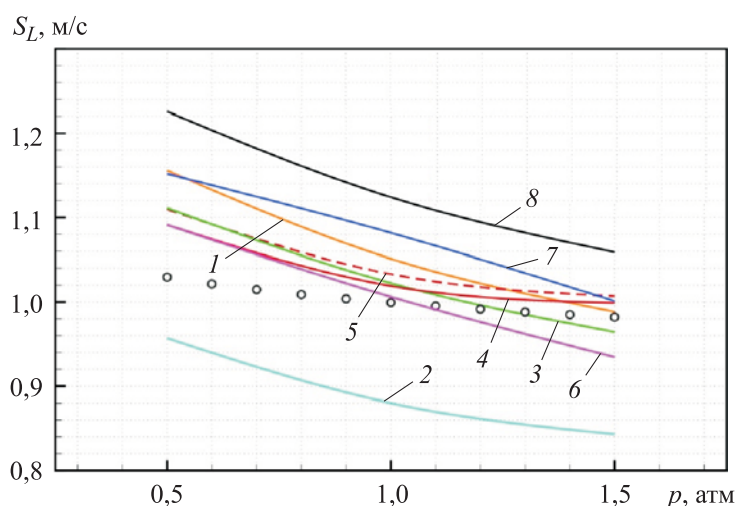


Рис. 4. Зависимость нормальной скорости горения стехиометрической ацетилен-воздушной смеси $S_L(p)$ от давления при температуре 300 К, полученная с использованием кинетических механизмов №№ 4 (1), 5 (2), 9 (3), 12 (4), 13 (5), 11 (6), 6 (7) и 10 (8), с корреляцией из [46] (\circ), построенной на основе экспериментальных данных

Рассмотрим зависимость нормальной скорости горения $S_L(T)$ от температуры (рис. 5). Изменение температуры 300...500 К бедной ацетилен-воздушной смеси ($\varphi = 0,8$) влечет за собой рост скорости горения более чем в 2 раза. Все механизмы качественно воспроизводят характер изменения скорости горения с ростом температуры. Наилучшее совпадение с экспериментальной корреляцией [46] получено с использованием механизмов №№ 4, 6 и 9. Механизмы №№ 12, 13 дают несколько заниженные значения скорости горения. Остальные механизмы дают либо сильно заниженные значения скорости (№ 5), либо завышенные (№№ 10, 11). Следует отметить,

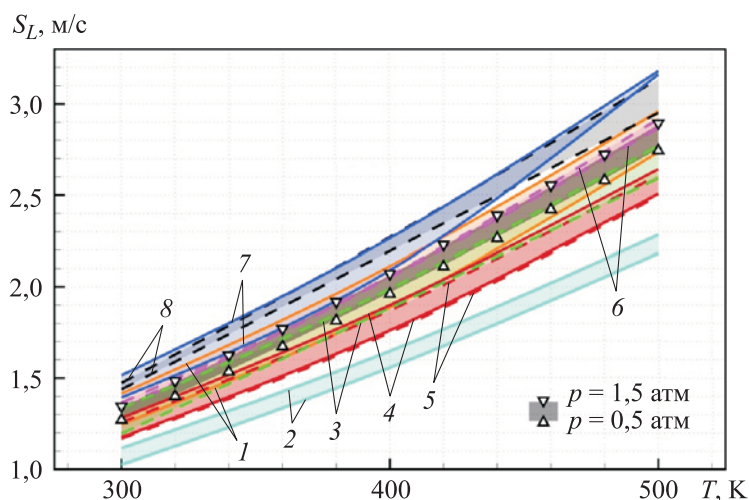


Рис. 5. Зависимость нормальной скорости горения $S_L(T)$ бедной ацетилен-воздушной смеси от температуры при значениях давления 0,5 и 1,5 атм, рассчитанная с использованием кинетических механизмов №№ 4 (1), 5 (2), 9 (3), 12 (4), 13 (5), 11 (6), 6 (7) и 10 (8), с корреляцией из [46], построенной на основе экспериментальных данных

что расхождение расчетов по представленным кинетическим механизмам в зависимости от давления обусловлено различием в этих механизмах констант скорости реакций мономолекулярного распада и обратным им реакциям рекомбинации с участием третьего вещества [51]. Константы скорости таких реакций зависят от многих параметров, несколько из которых определяются экспериментально и имеют большой разброс значений.

Заключение. Проведен обзор распространенных кинетических механизмов, описывающих химические превращения в смесях на основе углеводородов и потенциально способных воспроизводить основные особенности нестационарных процессов горения в смесях на основе ацетилена. Кинетические механизмы проверены на предмет соответствия расчетных значений времени задержки воспламенения и нормальной скорости горения экспериментальным данным. В результате анализа можно сделать вывод, что механизм № 4 хорошо проявляет себя при оценке нормальной скорости горения в широком диапазоне значений параметров. Однако он дает слишком высокие значения времени задержки воспламенения, что может негативно влиять на его возможности воспроизведения режимов с очаговым воспламенением перед фронтом пламени, наблюдаемых в эксперименте [5]. Механизм № 6 позволяет воспроизвести как значения нормальной скорости горения для различных термодинамических параметров системы, так и время задержки воспламенения. Механизм № 11,

включающий в себя наименьшее число компонентов, дает существенные погрешности при воспроизведении времени задержки воспламенения и скорости горения. Однако ввиду низких требований к вычислительным ресурсам этот механизм может быть использован для первичного анализа процессов ускорения пламени и перехода к детонации, так как полученные с его использованием результаты удовлетворительно согласуются на качественном уровне с экспериментом. Механизмы № 5, 10 дают завышенные и заниженные скорости горения соответственно и не обеспечивают количественного согласия с экспериментальными данными по времени задержки воспламенения. В совокупности с довольно большим числом компонентов эти результаты указывают на малую пригодность таких механизмов для детального моделирования нестационарных процессов ускорения пламени и перехода к детонации. Исходя из общих результатов тестов и числу используемых в механизме элементарных компонентов, наиболее перспективны для решения задач нестационарного горения смесей на основе ацетилена механизмы, разработанные в ФИЦ ХФ РАН. Причем механизм № 13 в рассмотренном диапазоне значений параметров не уступает по точности детальному кинетическому механизму, что свидетельствует о возможности использования механизма № 13 для снижения требований к вычислительным ресурсам и проведения крупномасштабных расчетов процессов ускорения пламени и перехода к детонации в смесях на основе ацетилена.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lakshmanan T., Nagarajan G. Study on using acetylene in dual fuel mode with exhaust gas recirculation. *Energy*, 2011, vol. 36, iss. 5, pp. 3547–3553. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2011.03.061>
- [2] Sharma S., Sharma D., Soni S.L., et al. Performance, combustion and emission analysis of internal combustion engines fuelled with acetylene — a review. *Int. J. Ambient. Energy*, 2022, vol. 43, iss. 1, pp. 622–640. DOI: <https://doi.org/10.1080/01430750.2019.1663369>
- [3] Zhang B., Pang L., Shen X., et al. Measurement and prediction of detonation cell size in binary fuel blends of methane/hydrogen mixtures. *Fuel*, 2016, vol. 172, pp. 196–199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.01.034>
- [4] Lemkowitz S.M., Pasmán H.J. A review of the fire and explosion hazards of particulates. *Kona*, 2014, vol. 31, pp. 53–81. DOI: <https://doi.org/10.14356/kona.2014010>
- [5] Krivosheyev P., Penyazkov O., Sakalou A. Analysis of the final stage of flame acceleration and the onset of detonation in a cylindrical tube using high-speed stereoscopic imaging. *Combust. Flame*, 2020, vol. 216, pp. 146–160. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.02.027>

- [6] Солоухин Р.И. Переход горения в детонацию в газах. *Прикладная механика и техническая физика*, 1961, № 4, с. 128–132.
- [7] Солоухин Р.И. Ударные волны и детонация в газах. М., ФИЗМАТГИЗ, 1963.
- [8] Khokhlov A.M., Oran E.S., Thomas G.O. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: the role of shock–flame interactions in turbulent flames. *Combust. Flame*, 1999, vol. 117, iss. 1-2, pp. 323–339.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(98\)00076-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00076-5)
- [9] Smirnov N.N., Betelin V.B., Nikitin V.F., et al. Detonation engine fed by acetylene-oxygen mixture. *Acta Astronaut.*, 2014, vol. 104, iss. 1, pp. 134–146.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2014.07.019>
- [10] Арефьев К.Ю., Федотова К.В., Крикунова А.И. и др. Математическое и физическое моделирование влияния пульсаций скорости сносящего потока воздуха на структуру пламени при диффузионном режиме горения метана. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2020, № 2 (89), с. 65–84.
DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2020-2-65-84>
- [11] Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Яковенко И.С. Влияние газодинамических процессов на развитие горения вблизи концентрационных пределов воспламенения. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2015, № 6 (63), с. 85–98. DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2015-6-85-98>
- [12] Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Пиневиц С.Г. Аномальное распространение пламени в горючих газовзвесьях. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2015, № 5 (62), с. 51–68.
DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2015-5-51-68>
- [13] Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Рыков Ю.В. Особенности распространения пламени в замкнутых объемах. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2010, № 1 (36), с. 21–39.
- [14] Dounia O., Vermorel O., Misdariis A., et al. Influence of kinetics on DDT simulations. *Combust. Flame*, 2019, vol. 200, pp. 1–14.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.11.009>
- [15] Liberman M.A., Kiverin A.D., Ivanov M.F. Regimes of chemical reaction waves initiated by nonuniform initial conditions for detailed chemical reaction models. *Phys. Rev. E*, 2012, vol. 85, iss. 5, art. 05631. DOI: <https://doi.org/10.1103/physreve.85.056312>
- [16] Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М., ФИЗМАТЛИТ, 2003.
- [17] Turányi T., Tomlin A.S. Analysis of kinetic reaction mechanisms. Berlin, Heidelberg, Springer, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-44562-4>
- [18] Westbrook C.K., Dryer F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Technol.*, 1981, vol. 27, iss. 1-2, pp. 31–43.
DOI: <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>

- [19] Mauss F., Lindstedt R.P. Reduced kinetic mechanisms for premixed acetylene-air flames. In: Peters N., Rogg B. (eds). *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems. Lecture Notes in Physics Monographs*, vol. 15. Berlin, Heidelberg, Springer, 1993, pp. 102–122. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-540-47543-9_7
- [20] Jones W.P., Lindstedt R.P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame*, 1988, vol. 73, iss. 3, pp. 233–249. DOI: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(88\)90021-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(88)90021-1)
- [21] Metcalfe W.K., Burke S.M., Ahmed S.S., et al. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C₁–C₂ hydrocarbon and oxygenated fuels. *Int. J. Chem. Kinet.*, 2013, vol. 45, iss. 10, pp. 638–675. DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/kin.20802>
- [22] Alekseev V.A., Bystrov N., Emelianov A., et al. High-temperature oxidation of acetylene by N₂O at high Ar dilution conditions and in laminar premixed C₂H₂+O₂+N₂ flames. *Combust. Flame*, 2022, vol. 238, art. 111924. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111924>
- [23] Porras S., Kaczmarek D., Herzler J., et al. An experimental and modeling study on the reactivity of extremely fuel-rich methane/dimethyl ether mixtures. *Combust. Flame*, 2020, vol. 212, pp. 107–122. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.09.036>
- [24] Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., et al. GRI-Mech 3.0. URL: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech> (дата обращения: 02.09.2022)
- [25] Smith G.P., Tao Y., Wang H. Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1). URL: <https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM1/pages/download.html> (дата обращения: 02.09.2022).
- [26] The San Diego mechanism. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. *web.eng.ucsd.edu: веб-сайт*. URL: <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> (дата обращения: 15.05.2022).
- [27] Slavinskaya N., Mirzayeva A., Whitside R., et al. A modelling study of acetylene oxidation and pyrolysis. *Combust. Flame*, 2019, vol. 210, pp. 25–42. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.08.024>
- [28] Shen X., Yang X., Santner J., et al. Experimental and kinetic studies of acetylene flames at elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.*, 2015, vol. 35, iss. 1, pp. 721–728. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.106>
- [29] Wang H., Laskin A.A. A comprehensive reaction model of ethylene and acetylene combustion. URL: <http://ignis.usc.edu/Mechanisms/C2-C4/c2.html> (дата обращения: 15.08.2022).
- [30] Miller J.A., Mitchell R.E., Smooke M.D., et al. Toward a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene: comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments. *Symp. Combust.*, 1982, vol. 19, iss. 1, pp. 181–196. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80189-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80189-6)

- [31] Varatharajan B.N., Williams F.A. Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluent systems. *Combust. Flame*, 2001, vol. 124, iss. 4, pp. 624–645.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(00\)00235-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(00)00235-2)
- [32] Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. Experimental study and numerical simulation of chemiluminescence emission during the self-ignition of hydrocarbon fuels. *Acta Astronaut.*, 2019, vol. 163, part A, pp. 18–24.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2019.03.001>
- [33] Tereza A.M., Agafonov G.L., Betev A.S., et al. Reduction of the detailed kinetic mechanism for efficient simulation of ignition delay for mixtures of methane and acetylene with oxygen. *Russ. J. Phys. Chem. B*, 2020, vol. 14, no. 6, pp. 951–958.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793120060299>
- [34] Numerical reactive gas-dynamics software package. *github.com: веб-сайт*.
URL: <https://github.com/yakovenko-ivan/NRG> (дата обращения: 15.08.2022).
- [35] McGrattan K., McDermott R., Weinschenk C., et al. Fire dynamics simulator, technical reference guide. National Institute of Standards and Technology, Special Publication 1018-1, 2013.
- [36] McBridge B.J., Gordon S., Reno M.A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. NASA-TM-4513. NASA, 1993.
- [37] Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A., et al. CHEMKIN: a software package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetic. Release 3.6. San Diego, Reaction Design, 2000.
- [38] Bykov V., Kiverin A., Koksharov A., et al. Analysis of transient combustion with the use of contemporary CFD techniques. *Comput. Fluids*, 2019, vol. 194, art. 104310.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2019.104310>
- [39] Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S., et al. Hydrogen-oxygen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2013, vol. 38, iss. 36, pp. 16427–16440.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.08.124>
- [40] Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Ivanov M.F. On the structure and stability of supersonic hydrogen flames in channels. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2016, vol. 41, iss. 47, pp. 22465–22478. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.10.007>
- [41] Edwards D.H., Thomas G.O., Williams T.L. Initiation of detonation by steady planar incident shock waves. *Combust. Flame*, 1981, vol. 43, pp. 187–198.
DOI: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(81\)90016-X](https://doi.org/10.1016/0010-2180(81)90016-X)
- [42] Hidaka Y., Hattori K., Okuno T., et al. Shock-tube and modeling study of acetylene pyrolysis and oxidation. *Combust. Flame*, 1996, vol. 107, no. 4, pp. 401–417.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(96\)00094-6](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(96)00094-6)
- [43] Homer J.B., Kistiakowsky G.B. Oxidation and pyrolysis of ethylene in shock waves. *J. Chem. Phys.*, 1967, vol. 47, iss. 12, art. 5290. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1701792>

- [44] Kiverin A.D., Yakovenko I.S. Estimation of critical conditions for deflagration-to-detonation transition in obstructed channels filled with gaseous mixtures. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 2018, vol. 13, no. 6, art. 54. DOI: <https://doi.org/10.1051/mmnp/2018071>
- [45] Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. М., Наука, 1980.
- [46] Rokni E., Moghaddas A., Askari O., et al. Measurement of laminar burning speeds and investigation of flame stability of Acetylene (C₂H₂)/air mixtures. *J. Energy Resour. Technol.*, 2015, vol. 137, iss. 1, art. 012204. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.4028363>
- [47] Ravi S., Sikes T.G., Morones A., et al. Comparative study on the laminar flame speed enhancement of methane with ethane and ethylene addition. *Proc. Combust. Inst.*, 2015, vol. 35, iss. 1, pp. 679–686. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.130>
- [48] Egolfopoulos F.N., Zhu D.L., Law C.K. Experimental and numerical determination of laminar flame speeds: mixtures of C₂-hydrocarbons with oxygen and nitrogen. *Symp. Combust.*, 1991, vol. 23, iss. 1, pp. 471–478. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80293-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80293-6)
- [49] Jomaas G., Zheng X.L., Zhu D.L., et al. Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of C₂–C₃ hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.*, 2005, vol. 30, iss. 1, pp. 193–200. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.228>
- [50] Lokachari N., Burke U., Ramalingam A., et al. New experimental insights into acetylene oxidation through novel ignition delay times, laminar burning velocities and chemical kinetic modeling. *Proc. Combust. Inst.*, 2019, vol. 37, iss. 1, pp. 583–591. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.07.027>
- [51] Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М., Наука, 1982.

Яковенко Иван Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории вычислительной физики ОИВТ РАН (Российская Федерация, 125412, Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2).

Ярков Андрей Владимирович — стажер-исследователь лаборатории вычислительной физики ОИВТ РАН (Российская Федерация, 125412, Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2).

Тюрнин Алексей Владимирович — стажер-исследователь лаборатории вычислительной физики ОИВТ РАН (Российская Федерация, 125412, Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2).

Тереза Анатолий Михайлович — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории гетерогенного горения ФИЦ ХФ РАН (Российская Федерация, 119991, Москва, ул. Косыгина, д. 4).

Новицкий Алексей Олегович — младший научный сотрудник лаборатории физико-химической гидродинамики Института тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси (Республика Беларусь, 220072, Минск, ул. П. Бровки, д. 15).

Кривошеев Павел Николаевич — канд. физ.-мат. наук, заведующий лабораторией физико-химической гидродинамики Института тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси (Республика Беларусь, 220072, Минск, ул. П. Бровки, д. 15).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Яковенко И.С., Ярков А.В., Тюрнин А.В. и др. Оценка возможностей современных кинетических механизмов окисления ацетилена для моделирования нестационарных процессов горения. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2022, № 5 (104), с. 62–85. DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-5-62-85>

EVALUATING POSSIBILITIES OF THE MODERN CHEMICAL KINETIC MECHANISMS OF ACETYLENE OXIDATION IN SIMULATING THE NON-STATIONARY COMBUSTION PROCESSES

I.S. Yakovenko¹

yakovenko.ivan@bk.ru

A.V. Yarkov¹

yarkov.andrey.v@gmail.com

A.V. Turnin¹

lexastrogino@yandex.ru

A.M. Tereza²

tereza@chph.ras.ru

A.O. Novitski³

alexey.itmo@tut.by

P.N. Krivosheyev³

krivosheyev.pavlik@gmail.com

¹ **Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation**

² **N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation**

³ **A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute, National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus**

Abstract

Acetylene is characterized by high reactivity and appears to be one of the promising gas fuels. However, possible combustion regimes of such fuels require a comprehensive study to be widely introduced in practice. This work is devoted to analyzing the modern kinetic mechanisms of acetylene oxidation. Current approaches to numerical analysis of the gas-dynamic flows in chemically active gas mixtures are a powerful tool in solving many industrial and energy problems. Obtaining positive results of numerical simulation of the non-stationary combustion and detonation processes is impossible without the use of reliable and efficient kinetic mechanisms. Kinetic mechanisms were considered describing the acetylene oxidation. Eight most optimal mechanisms

Keywords

Combustion, acetylene, kinetic mechanism, ignition delay time, normal combustion rate, numerical simulation, non-stationary combustion

were studied to identify the possibility of their implementation in detailed simulation of the non-stationary combustion processes, in particular, in flame acceleration and transition to detonation. Ignition delay time and laminar burning velocity were calculated using a complete model of the reacting medium gas dynamics. To evaluate correctness of the ignition and combustion parameters obtained values, they were compared with the available experimental data. Based on the obtained results analysis, conclusions were made on the possibility of applying the kinetic mechanisms under consideration, taking into account the combustion parameters accuracy and the computational efficiency

Received 03.06.2022

Accepted 17.06.2022

© Author(s), 2022

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant no. 20-58-04024) and the Belarusian Republican Foundation for Basic Research (grant no. T21PM-103)

REFERENCES

- [1] Lakshmanan T., Nagarajan G. Study on using acetylene in dual fuel mode with exhaust gas recirculation. *Energy*, 2011, vol. 36, iss. 5, pp. 3547–3553. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2011.03.061>
- [2] Sharma S., Sharma D., Soni S.L., et al. Performance, combustion and emission analysis of internal combustion engines fuelled with acetylene — a review. *Int. J. Ambient. Energy*, 2022, vol. 43, iss. 1, pp. 622–640. DOI: <https://doi.org/10.1080/01430750.2019.1663369>
- [3] Zhang B., Pang L., Shen X., et al. Measurement and prediction of detonation cell size in binary fuel blends of methane/hydrogen mixtures. *Fuel*, 2016, vol. 172, pp. 196–199. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.01.034>
- [4] Lemkowitz S.M., Pasmán H.J. A review of the fire and explosion hazards of particulates. *Kona*, 2014, vol. 31, pp. 53–81. DOI: <https://doi.org/10.14356/kona.2014010>
- [5] Krivosheyev P., Penyazkov O., Sakalou A. Analysis of the final stage of flame acceleration and the onset of detonation in a cylindrical tube using high-speed stereoscopic imaging. *Combust. Flame*, 2020, vol. 216, pp. 146–160. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.02.027>
- [6] Soloukhin R.I. Deflagration-to-detonation transition in gases. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 1961, no. 4, pp. 128–132 (in Russ.).
- [7] Soloukhin R.I. Udarnye volny i detonatsiya v gazakh [Shock waves and detonation in gases]. Moscow, FIZMATGIZ Publ., 1963.
- [8] Khokhlov A.M., Oran E.S., Thomas G.O. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: the role of shock–flame interactions in turbulent flames. *Combust. Flame*, 1999, vol. 117, iss. 1-2, pp. 323–339. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(98\)00076-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(98)00076-5)

- [9] Smirnov N.N., Betelin V.B., Nikitin V.F., et al. Detonation engine fed by acetylene-oxygen mixture. *Acta Astronaut.*, 2014, vol. 104, iss. 1, pp. 134–146.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2014.07.019>
- [10] Arefyev K.Yu., Fedotova K.V., Krikunova A.I., et al. Mathematical and physical simulation of the cross-flow velocity pulsation effect on the flame structure during the diffusion mode of methane combustion. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2020, no. 2 (89), pp. 65–84 (in Russ.).
DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2020-2-65-84>
- [11] Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S. Gas-dynamic processes influence on combustion evolution close to concentration flammability limits. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, no. 6 (62), pp. 85–98 (in Russ.). DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2015-6-85-98>
- [12] Ivanov M.F., Kiverin A.D., Pinevich S.G. Abnormal propagation of flame in combustible gas suspensions. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2015 (63), no. 5, pp. 51–68 (in Russ.).
DOI: <http://dx.doi.org/10.18698/1812-3368-2015-5-51-68>
- [13] Ivanov M.F., Kiverin A.D., Rykov Yu.V. Peculiarities of flame propagation in closed volumes. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2010, no. 1 (36), pp. 21–39 (in Russ.).
- [14] Dounia O., Vermorel O., Misdariis A., et al. Influence of kinetics on DDT simulations. *Combust. Flame*, 2019, vol. 200, pp. 1–14.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.11.009>
- [15] Liberman M.A., Kiverin A.D., Ivanov M.F. Regimes of chemical reaction waves initiated by nonuniform initial conditions for detailed chemical reaction models. *Phys. Rev. E*, 2012, vol. 85, iss. 5, art. 05631. DOI: <https://doi.org/10.1103/physreve.85.056312>
- [16] Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion. Physical and chemical fundamentals, modelling and simulation, experiments, pollutant formation. Berlin, Heidelberg, Springer, 2001. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-45363-5>
- [17] Turányi T., Tomlin A.S. Analysis of kinetic reaction mechanisms. Berlin, Heidelberg, Springer, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-44562-4>
- [18] Westbrook C.K., Dryer F.L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Technol.*, 1981, vol. 27, iss. 1-2, pp. 31–43.
DOI: <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>
- [19] Mauss F., Lindstedt R.P. Reduced kinetic mechanisms for premixed acetylene-air flames. In: Peters N., Rogg B. (eds). *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems. Lecture Notes in Physics Monographs*, vol. 15. Berlin, Heidelberg, Springer, 1993, pp. 102–122. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-540-47543-9_7
- [20] Jones W.P., Lindstedt R.P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame*, 1988, vol. 73, iss. 3, pp. 233–249.
DOI: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(88\)90021-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(88)90021-1)

- [21] Metcalfe W.K., Burke S.M., Ahmed S.S., et al. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C₁–C₂ hydrocarbon and oxygenated fuels. *Int. J. Chem. Kinet.*, 2013, vol. 45, iss. 10, pp. 638–675. DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/kin.20802>
- [22] Alekseev V.A., Bystrov N., Emelianov A., et al. High-temperature oxidation of acetylene by N₂O at high Ar dilution conditions and in laminar premixed C₂H₂+O₂+N₂ flames. *Combust. Flame*, 2022, vol. 238, art. 111924. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111924>
- [23] Porras S., Kaczmarek D., Herzler J., et al. An experimental and modeling study on the reactivity of extremely fuel-rich methane/dimethyl ether mixtures. *Combust. Flame*, 2020, vol. 212, pp. 107–122. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.09.036>
- [24] Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., et al. GRI-Mech 3.0. Available at: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech> (accessed: 02.09.2022)
- [25] Smith G.P., Tao Y., Wang H. Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1). Available at: <https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM1/pages/download.html> (accessed: 02.09.2022).
- [26] The San Diego mechanism. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. *web.eng.ucsd.edu: web site*. Available at: <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> (accessed: 15.05.2022).
- [27] Slavinskaya N., Mirzayeva A., Whitside R., et al. A modelling study of acetylene oxidation and pyrolysis. *Combust. Flame*, 2019, vol. 210, pp. 25–42. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.08.024>
- [28] Shen X., Yang X., Santner J., et al. Experimental and kinetic studies of acetylene flames at elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.*, 2015, vol. 35, iss. 1, pp. 721–728. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.106>
- [29] Wang H., Laskin A.A. A comprehensive reaction model of ethylene and acetylene combustion. Available at: <http://ignis.usc.edu/Mechanisms/C2-C4/c2.html> (accessed: 15.08.2022).
- [30] Miller J.A., Mitchell R.E., Smooke M.D., et al. Toward a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene: comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments. *Symp. Combust.*, 1982, vol. 19, iss. 1, pp. 181–196. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(82\)80189-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(82)80189-6)
- [31] Varatharajan B.N., Williams F.A. Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluent systems. *Combust. Flame*, 2001, vol. 124, iss. 4, pp. 624–645. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(00\)00235-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(00)00235-2)
- [32] Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. Experimental study and numerical simulation of chemiluminescence emission during the self-ignition of hydrocarbon fuels. *Acta Astronaut.*, 2019, vol. 163, part A, pp. 18–24. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2019.03.001>
- [33] Tereza A.M., Agafonov G.L., Betev A.S., et al. Reduction of the detailed kinetic mechanism for efficient simulation of ignition delay for mixtures of methane and acetylene with oxygen. *Russ. J. Phys. Chem. B*, 2020, vol. 14, no. 6, pp. 951–958. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793120060299>

- [34] Numerical reactive gas-dynamics software package. *github.com: веб-сайт*. Available at: <https://github.com/yakovenko-ivan/NRG> (accessed: 15.08.2022).
- [35] McGrattan K., McDermott R., Weinschenk C., et al. Fire dynamics simulator, technical reference guide. National Institute of Standards and Technology, Special Publication 1018-1, 2013.
- [36] McBridge B.J., Gordon S., Reno M.A. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. NASA-TM-4513. NASA, 1993.
- [37] Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A., et al. CHEMKIN: a software package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetic. Release 3.6. San Diego, Reaction Design, 2000.
- [38] Bykov V., Kiverin A., Koksharov A., et al. Analysis of transient combustion with the use of contemporary CFD techniques. *Comput. Fluids*, 2019, vol. 194, art. 104310. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2019.104310>
- [39] Ivanov M.F., Kiverin A.D., Yakovenko I.S., et al. Hydrogen-oxygen flame acceleration and deflagration-to-detonation transition in three-dimensional rectangular channels with no-slip walls. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2013, vol. 38, iss. 36, pp. 16427–16440. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.08.124>
- [40] Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Ivanov M.F. On the structure and stability of supersonic hydrogen flames in channels. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2016, vol. 41, iss. 47, pp. 22465–22478. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.10.007>
- [41] Edwards D.H., Thomas G.O., Williams T.L. Initiation of detonation by steady planar incident shock waves. *Combust. Flame*, 1981, vol. 43, pp. 187–198. DOI: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(81\)90016-X](https://doi.org/10.1016/0010-2180(81)90016-X)
- [42] Hidaka Y., Hattori K., Okuno T., et al. Shock-tube and modeling study of acetylene pyrolysis and oxidation. *Combust. Flame*, 1996, vol. 107, no. 4, pp. 401–417. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(96\)00094-6](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(96)00094-6)
- [43] Homer J.B., Kistiakowsky G.B. Oxidation and pyrolysis of ethylene in shock waves. *J. Chem. Phys.*, 1967, vol. 47, iss. 12, art. 5290. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1701792>
- [44] Kiverin A.D., Yakovenko I.S. Estimation of critical conditions for deflagration-to-detonation transition in obstructed channels filled with gaseous mixtures. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 2018, vol. 13, no. 6, art. 54. DOI: <https://doi.org/10.1051/mmnp/2018071>
- [45] Zeldovich Ya.B., Barenblatt G.I., Librovich V.B., et al. *Matematicheskaya teoriya goreniya i vzryva [Mathematical theory of combustion and explosion]*. Moscow, Nauka Publ., 1980.
- [46] Rokni E., Moghaddas A., Askari O., et al. Measurement of laminar burning speeds and investigation of flame stability of Acetylene (C₂H₂)/air mixtures. *J. Energy Resour. Technol.*, 2015, vol. 137, iss. 1, art. 012204. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.4028363>
- [47] Ravi S., Sikes T.G., Morones A., et al. Comparative study on the laminar flame speed enhancement of methane with ethane and ethylene addition. *Proc. Combust. Inst.*, 2015, vol. 35, iss. 1, pp. 679–686. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.130>

[48] Egolfopoulos F.N., Zhu D.L., Law C.K. Experimental and numerical determination of laminar flame speeds: mixtures of C₂-hydrocarbons with oxygen and nitrogen. *Symp. Combust.*, 1991, vol. 23, iss. 1, pp. 471–478.

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80293-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80293-6)

[49] Jomaas G., Zheng X.L., Zhu D.L., et al. Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of C₂–C₃ hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures. *Proc. Combust. Inst.*, 2005, vol. 30, iss. 1, pp. 193–200.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.228>

[50] Lokachari N., Burke U., Ramalingam A., et. al. New experimental insights into acetylene oxidation through novel ignition delay times, laminar burning velocities and chemical kinetic modeling. *Proc. Combust. Inst.*, 2019, vol. 37, iss. 1, pp. 583–591.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.07.027>

[51] Kuznetsov N.M. *Kinetika monomolekulyarnykh reaktsiy* [Kinetics of monomolecular reactions]. Moscow, Nauka Publ., 1982.

Yakovenko I.S. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory of Computational Physics, Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences (Izhorskaya ul. 13, str. 2, Moscow, 125412 Russian Federation).

Yarkov A.V. — Research Assistant, Laboratory of Computational Physics, Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences (Izhorskaya ul. 13, str. 2, Moscow, 125412 Russian Federation).

Turnin A.V. — Research Assistant, Laboratory of Computational Physics, Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences (Izhorskaya ul. 13, str. 2, Moscow, 125412 Russian Federation).

Tereza A.M. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Laboratory of Heterogeneous Combustion, N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences (Kosygina ul. 4, str. 1, Moscow, 119991 Russian Federation).

Novitski A.O. — Junior Researcher, Laboratory of Physical and Chemical Hydrodynamics, A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute, National Academy of Sciences of Belarus (P. Brovki ul. 15, Minsk, 220072 Belarus).

Krivosheyev P.N. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Head of Laboratory of Physical and Chemical Hydrodynamics, A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute, National Academy of Sciences of Belarus (P. Brovki ul. 15, Minsk, 220072 Belarus).

Please cite this article in English as:

Yakovenko I.S., Yarkov A.V., Turnin A.V., et al. Evaluating possibilities of the modern chemical kinetic mechanisms of acetylene oxidation in simulating the non-stationary combustion processes. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2022, no. 5 (104), pp. 62–85 (in Russ.).

DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2022-5-62-85>