

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ  
ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР  
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМ. Н.Э. БАУМАНА

УДК 544.45

На правах рукописи

Смыгалина Анна Евгеньевна

**ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ГОРЮЧИХ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ ВОДОРОДА НА  
РЕЖИМЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ**

Специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
кандидат физико-математических наук  
Киверин Алексей Дмитриевич

Москва – 2018

## Оглавление

<b>Введение .....</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. Численное моделирование процессов воспламенения и горения смесей на основе водорода .....</b>	<b>17</b>
1.1. Математическая модель .....	17
1.2. Численный метод .....	25
1.3. Расчеты основных величин, характеризующих процесс горения .....	26
1.3.1. Определение времени индукции .....	26
1.3.2. Определение ламинарной скорости пламени .....	33
<b>Глава 2. Нижний концентрационный предел воспламенения водородно-воздушной смеси .....</b>	<b>37</b>
2.1. Определение нижнего концентрационного предела воспламенения водорода как важнейшая задача обеспечения безопасности на АЭС .....	37
2.2. Понятие нижнего концентрационного предела воспламенения и его экспериментальное определение .....	40
2.3. Анализ нижнего концентрационного предела воспламенения в нульмерном приближении .....	42
2.4. Одномерная постановка задачи об определении нижнего концентрационного предела воспламенения .....	45
2.5. Анализ нижнего концентрационного предела воспламенения в одномерном приближении .....	49
2.6. Воспламенение в смеси однородного и неоднородного составов .....	55
2.7. Основные результаты .....	61
<b>Глава 3. Пределы воспламенения водорода при его истечении под высоким давлением через раскрывающуюся диафрагму .....</b>	<b>62</b>

3.1. Обзор работ по самовоспламенению водорода при его истечении под высоким давлением .....	62
3.2. Постановка задачи .....	65
3.3. Анализ результатов численного моделирования .....	69
3.4. Основные результаты .....	79

**Глава 4. Горение смесей на основе водорода в двигателе с искровым зажиганием. Определение составов, обеспечивающих эффективную работу двигателя в штатном режиме .....**

4.1. Концепция использования водорода в качестве топлива для элементов распределенной энергетической системы .....	82
4.2. Обзор работ по горению смесей с высоким содержанием водорода в двигателях с искровым зажиганием .....	85
4.3. Постановка задачи численного моделирования .....	88
4.4. Режимы горения смесей на основе водорода при работе двигателя с искровым зажиганием .....	93
4.5. Влияние содержания добавок низкоактивных веществ к водороду на параметры работы двигателя .....	99
4.6. Горение обедненных смесей на основе водорода в двигателе. Сравнение с экспериментальными данными .....	104
4.7. Основные результаты .....	108

**Заключение .....**

**109**

**Благодарность .....**

**110**

**Список литературы .....**

**111**

## **Введение**

В настоящей работе изложены результаты исследований влияния состава газовых смесей на основе водорода на режимы их горения и пределы воспламенения. Исследования выполнены методами вычислительной газовой динамики.

### **Актуальность темы исследования**

Концентрации горючего и окислителя, а также величина относительного содержания этих компонент, наряду с параметрами, характеризующими состояние смеси, полностью определяют условия возникновения того или иного режима горения либо возникновения горения вообще. Проблема фундаментального исследования процессов воспламенения и горения смесей различных составов является одной из первостепенных задач современной физики горения и взрыва, которая в первую очередь становится актуальной при решении практических вопросов.

Основные результаты диссертации касаются вопросов воспламенения и горения газообразного водорода. Вопрос о нижнем концентрационном пределе воспламенения водорода является актуальным в задачах обеспечения безопасности атомной энергетики, поскольку водород может выделяться в неконтролируемо больших объемах при развитии аварий на атомных электростанциях. При этом наиболее важным является определение минимально возможной концентрации водорода, ниже которой воспламенение возникнуть не может. Постоянно расширяющаяся тенденция использования водорода в качестве топлива либо добавки к углеводородным топливам сделала также актуальным вопрос о безопасном хранении водорода. При разгерметизации баллона высокого давления, содержащего водород, возможно самовоспламенение водорода при его истечении в атмосферу. В этом случае воспламенение возникает в разогретом слое за ударной волной, формируемой при расширении струи водорода. Здесь, одним из важнейших вопросов является определение предела давления в баллоне, при

котором аварийный выброс водорода независимо от диаметра отверстия не приводит к самовоспламенению смеси. При этом предельное давление ограничивает скорость подачи водорода, определяющую состав смеси или концентрацию водорода в потенциальной зоне воспламенения.

В настоящее время водород представляется одним из наиболее перспективных топлив, поскольку продуктом горения водорода является вода, которая вновь может быть преобразована в водород. Также водород при горении проявляет себя как одно из наиболее чистых с экологической точки зрения горючих: в продуктах не содержатся токсичные и вредные для экологии вещества, выделяющиеся в больших количествах при горении углеводородных топлив. В то же время горение водорода как вещества, обладающего наибольшей теплотой сгорания, может протекать в режимах, представляющих чрезвычайную опасность при практическом использовании. При исследовании горения водорода в двигателях с искровым зажиганием к таким потенциально опасным режимам относятся детонация и стук, характеризующиеся скачками давления, приводящими к быстрому износу двигателя. В настоящей работе рассматриваются подходы по обеспечению оптимальных режимов работы двигателя на водороде, заключающиеся в использовании малых добавок низкоактивных веществ к водороду либо в использовании бедных водородно-воздушных смесей. Отдельно рассматриваются вопросы эффективности работы двигателя при использовании таких составов смесей на основе водорода.

### **Степень разработанности темы исследования**

Ряд ранних работ, направленных на исследование горения, описанных в [1,2], были посвящены анализу влияния концентрации горючей компоненты на процессы горения и воспламенения, в рамках чего аналитически были получены решения о концентрационных пределах воспламенения, позволяющие на качественном уровне говорить об особенностях развития горения в смесях различного состава. С развитием методов численного моделирования стало возможным решать задачи горения с заданием различных составов и детально исследовать влияние концентрации, включая влияние локального поля концентрации, на развитие

процессов горения и воспламенения. Однако, вопрос об определении фундаментального концентрационного предела воспламенения водорода, как и других горючих, является до сих пор открытым. Существенно более разработанными являются задачи определения концентрационных пределов воспламенения и распространения пламени в камерах заданных конфигураций, содержащих потенциально воспламеняемую смесь [3-5]. При этом используемые конфигурации камер сгорания, как правило, определены соответствующими стандартами (например, [6]).

Процесс самовоспламенения водорода при его истечении из камеры высокого давления подробно исследуется, экспериментально и теоретически, начиная с работы [7]. Механизм самовоспламенения водорода в этом случае зависит от многих параметров, среди которых следует особо выделить скорость подачи водорода, определяющую интенсивность перемешивания и образования смеси водорода с окислителем, находящихся в соотношении, необходимом для воспламенения. К настоящему времени достаточно подробно исследованы критерии самовоспламенения по давлению [8-13], диаметру отверстия [8,11,12], геометрии камеры низкого давления [8,11,13]. Методами численного моделирования получено описание процесса, в основном, при высоких, свыше 100 атм, давлениях [10,14,15]. В настоящей диссертационной работе, основанной на выполненных в ОИВТ РАН [12] экспериментах, анализируется влияние времени раскрытия диафрагмы на динамику, перемешивание и образование смеси, способной к воспламенению. Исследуются давления ниже 100 атм, поскольку представляет отдельный интерес определение критического давления, обеспечивающего отсутствие самовоспламенения водорода, что необходимо для его безопасного использования.

В настоящее время с целью поиска новых перспективных топлив для двигателей внутреннего сгорания, характеризующихся высокой эффективностью использования и экологичностью, проводится большое количество исследований [16-20], посвященных определению составов, обеспечивающих режимы сгорания с оптимальными показателями. При этом водород, как правило, рассматривается в

качестве добавки к традиционным топливам. Помимо этого, водород широко исследуется и как базовое топливо [16,19-22]. В этом контексте основное внимание уделяется исследованию развития нештатных режимов горения, таких как стук, обратные вспышки, преждевременное воспламенение, в связи с чем предлагаются соответствующие регулировки параметров работы двигателя, например, угла опережения зажигания, степени сжатия. В настоящей работе проводится определение оптимальных составов смесей на основе водорода для использования в двигателе с искровым зажиганием, с учетом возможности получения водорода за счет энергии возобновляемых источников из воды посредством электролиза. В рамках такого подхода водород служит аккумулятором возобновляемой энергии, поэтому вопросы ограничения на объем используемого в двигателе водорода и эффективности являются второстепенными в сравнении с необходимостью обеспечения штатных режимов работы двигателя посредством использования определенных составов. Проводится исследование возможности предотвращения детонационных режимов горения за счет использования малых добавок низкоактивных компонент к водороду. При этом получающиеся составы близки к стехиометрии водородно-воздушной смеси.

### **Цели и задачи настоящей работы**

Основной целью диссертации является исследование влияния состава смесей на основе водорода на развитие процессов воспламенения и обеспечение оптимальных режимов горения. В работе рассматриваются следующие задачи:

1) Определение нижнего концентрационного предела устойчивого воспламенения водорода как его минимальной концентрации, ниже которой невозможно поддержание развития экзотермических реакций горения. Для решения такой задачи в работе предложен новый метод, основанный на концепции Я.Б. Зельдовича о спонтанной волне горения, при этом решение задачи сводится к одномерной постановке.

2) Исследование влияния локального поля концентрации водорода на его самовоспламенение при истечении водорода из объема высокого давления в канал, заполненный воздухом. Конкретные характеристики поля концентрации водорода

определяются скоростью подачи водорода в канал, задаваемой в настоящей работе длительностью раскрытия диафрагмы. В рамках решения задачи получено описание механизма возникновения очагов воспламенения и детально рассматривается влияние газодинамических процессов на установление условий, необходимых для развития самовоспламенения.

3) Определение минимальных добавок низкоактивных веществ: метана, водяного пара, избытка воздуха, к водородно-воздушной смеси оклостехиометрического состава, обеспечивающих отсутствие детонационных режимов сгорания в двигателе с искровым зажиганием.

4) Исследование влияния концентрации низкоактивных добавок к водороду: метана, водяного пара, избытка воздуха на параметры работы двигателя.

### **Научная новизна настоящей работы**

Разработан новый метод определения нижнего концентрационного предела воспламенения горючих смесей на основе концепции Я.Б. Зельдовича о спонтанной волне горения. С использованием предложенного метода получено определение нижнего концентрационного предела воспламенения водорода.

Описан ранее не обсуждаемый механизм образования очагов воспламенения при истечении водорода под высоким давлением в канал, заполненный воздухом. При этом особенности постановки задачи заключались в задании конечного времени раскрытия диафрагмы, разделяющей камеры высокого и низкого давлений, а также задании относительно невысоких начальных давлений водорода. В работе выделены два различных типа очагов воспламенения, впервые подтверждающие недавние экспериментальные результаты, представленные в литературе.

Предложен метод подавления детонационных режимов сгорания в двигателе, работающем на водороде, состоящий в использовании малых по объему добавок низкоактивных компонент к водороду. Определены необходимые величины добавок к водородно-воздушной смеси оклостехиометрического состава. Исследованы зависимости параметров работы двигателя от состава смеси при больших по отношению к минимальным величинах добавок.



**Теоретическая и практическая значимость работы** определяется новыми результатами в области классической теории горения и взрыва, составляющих базис для широкого круга прикладных задач воспламенения и горения газообразных смесей. Предложенный подход к определению нижнего концентрационного предела может быть использован для теоретического анализа принципиальной возможности воспламенения смесей различных составов. Выявленные механизмы формирования очагов воспламенения водорода при его истечении под высоким давлением в канал составляют основу интерпретации этого явления, что представляет первостепенную важность при составлении критериев для задач водородной безопасности. Описанный в работе подход по предотвращению детонационных режимов сгорания в двигателе с искровым зажиганием, заключающийся в использовании небольших по объему добавок низкоактивных веществ к оклостехиометрической водородно-воздушной смеси, имеет непосредственное практическое значение для разработки перспективных компонентов водородной энергетики. Полученные зависимости режимов сгорания смесей на основе водорода от содержания добавок: метана, водяного пара, избытка воздуха могут быть использованы для разработки оптимальных параметров и условий функционирования двигателей с искровым зажиганием для расширения практического использования таких двигателей, обладающих рядом преимуществ по сравнению с двигателями, работающими на традиционных топливах.

### **Методология и методы исследования**

Поставленные в рамках диссертационного исследования задачи решались методами вычислительной газовой динамики с использованием программного кода, предназначенного для комплексного исследования процессов горения и детонации, разработанного в лаборатории Математического моделирования ОИВТ РАН. Для решения поставленных задач в ходе выполнения исследования были также разработаны расширенные версии программного кода, учитывающие специфику поставленных задач.

Алгоритм решения включал в себя предварительный этап, состоящий в валидации и верификации используемых моделей и программных кодов, а также в

исследовании сходимости получаемого решения. Результаты моделирования сопоставлялись с имеющимися в литературе экспериментальными данными, в том числе полученными в ОИВТ РАН.

### **Положения, выносимые на защиту**

Метод определения нижнего концентрационного предела устойчивого воспламенения горючих смесей на основе решения одномерной задачи о развитии волны воспламенения на градиенте концентрации.

Результаты численного моделирования по развитию горения в условиях неравномерного пространственного распределения горючей компоненты.

Механизм возникновения очагов воспламенения водорода при его истечении под высоким давлением через раскрывающуюся диафрагму в канал, заполненный воздухом.

Метод подавления детонационных режимов сжигания водорода в двигателе с искровым зажиганием за счет использования добавок метана, водяного пара и избытка воздуха.

Количественные и качественные закономерности сгорания смесей на основе водорода в двигателе с искровым зажиганием и оценка эффективности получаемых режимов.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Поскольку общим для рассматриваемых в диссертации задач являлось выявление достоверных с качественной и количественной точек зрения зависимостей режимов воспламенения и горения от заданного состава горючей смеси на основе водорода, в рамках исследования была проведена валидация и верификация используемых математических моделей, компьютерных кодов и алгоритмов. В частности, были проведены тестовые расчеты основных величин, характеризующих динамику процессов горения: времени индукции и скорости ламинарного пламени, в диапазонах начальных условий и составов смесей, соответствующих исследуемым режимам. Результаты расчетов были сопоставлены с соответствующими экспериментальными данными, представленными в литературе.

Результаты решенных в рамках диссертационного исследования задач сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными, в том числе с уникальными данными, полученными в ОИВТ РАН.

Основные результаты работы докладывались автором на следующих научных конференциях: Международная конференция “Фундаментальные и прикладные задачи механики” (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017), XXVIII-XXXII International conference on interaction of intense energy fluxes with matter (Эльбрус, 2013, 2015, 2017), XXIX, XXXI International conference on equations of state for matter (Эльбрус, 2014, 2016), 7-9 всероссийских конференциях “Необратимые процессы в природе и технике” (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013, 2015, 2017), 36<sup>th</sup> International Symposium on Combustion (Seoul, 2016), 7<sup>th</sup> International conference “Photosynthesis research for sustainability” (Пушино, 2016), Международном конгрессе “Возобновляемая энергетика XXI век: энергетическая и экономическая эффективность” (Москва, 2015), Международной конференции “Возобновляемая энергетика: проблемы и перспективы” (Махачкала, 2015), 7<sup>th</sup> European combustion meeting (Budapest, 2015), Международной конференции “Физико-математические проблемы создания новой техники” (Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014), 6<sup>th</sup> International symposium on non-equilibrium processes, plasma, combustion and atmospheric phenomena (Сочи, 2014), конференции в рамках Летней суперкомпьютерной академии (Москва, ВМК МГУ, 2014), XXV Симпозиуме “Современная химическая физика” (Туапсе, 2013), 54й конференции “Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе” (Москва, МФТИ, 2011), а также на семинаре Лаборатории водородных энергетических технологий ОИВТ РАН (21 апреля 2015, Москва).

### **Личный вклад автора**

Вклад автора в работы, вошедшие в диссертацию, является одним из основных. Автор принимала активное участие в постановке конкретных задач. Ею собственноручно выполнены все необходимые модификации компьютерных кодов для решения поставленных задач, проведена валидация кодов, уточнение

используемых моделей для расчета транспортных коэффициентов, адаптация кода для проведения моделирования с использованием детальных механизмов химической кинетики, проведены тесты на сходимость для разбираемых задач. Автором выполнено компьютерное моделирование поставленных задач, проведен анализ полученных результатов и их сопоставление с литературными и экспериментальными данными. Автор принимала активное участие в обсуждении и интерпретации результатов, формулировке и обосновании выводов, вошедших в диссертацию.

### **Публикации**

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 31 печатном издании, 4 из которых в журналах, рекомендованных ВАК, 27 – в сборниках тезисов и трудах конференций.

### **Публикации в журналах из перечня ВАК**

- I. Об использовании водорода в качестве топлива для двигателей в энергетическом цикле удаленных производственных объектов / Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Смыгалина А.Е., Зайченко В.М. // ЖТФ. — 2018. — № 88(1). — С. 147-150.
- II. Mechanism of self-ignition of pressurized hydrogen flowing into the channel through rupturing diaphragm / Ivanov M.F., Kiverin A.D., Smygalina A.E., Golub V.V., Golovastov S.V. // International Journal of Hydrogen Energy. — 2017. — Vol. 42(16). — P. 11902-11910.
- III. Горение смесей на основе водорода в газопоршневом двигателе / Смыгалина А.Е., Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Зайченко В.М. // Известия РАН. Энергетика. — 2015. — № 2. — С. 120-130.
- IV. Иванов, М.Ф. Воспламенение водородно-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела / М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин, А.Е. Смыгалина // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». — 2013. — № 1(48). — С. 89-108.

**Публикации в сборниках материалов и тезисов научных конференций**

1. Горение смесей с высоким содержанием водорода в двигателе с искровым зажиганием при различных составах и углах опережения зажигания / В.М. Зайченко, М.Ф. Иванов, А.Е. Смыгалина // Тезисы докладов Международной конференции “Фундаментальные и прикладные задачи механики”. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. — 2017. — С. 60-61.
2. Influence of mixture composition and ignition timing on efficiency of spark ignition engine running on hydrogen-based mixtures / V.M. Zaichenko, A.I. Tsyplakov, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina // Book of abstracts of the XXXII International conference on interaction of intense energy fluxes with matter. — 2017. — P. 199.
3. Самовоспламенение водорода при его истечении под давлением через раскрывающуюся диафрагму с учетом времени раскрытия / М.Ф. Иванов, А.Е. Смыгалина // Труды 9й Всероссийской конференции “Необратимые процессы в природе и технике”, Ч. I. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. — 2017. — С. 156-159.
4. Numerical analysis of the self-ignition of pressurized hydrogen flowing through gradually opening diaphragm into the channel / A. Smygalina, M. Ivanov, A. Kiverin, V. Golub, S. Golovastov // Abstract of the 36<sup>th</sup> International Symposium on Combustion. — 2016. — Work-in-progress poster 4P079.
5. Detonation mitigation in hydrogen-fueled spark ignition engine by adding low-energetic components / V. Zaitchenko, M. Ivanov, A. Smygalina // Abstracts and programme of the 7<sup>th</sup> International conference “Photosynthesis research for sustainability - 2016”. — P. 183.
6. Combustion onset in channels induced by hydrogen jet propagating from the high pressure chamber / V.V. Golub, S.V. Golovastov, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina // Book of abstracts of the XXXI International conference on equations of state for matter. — 2016. — P. 202.

7. Experimental and computational procedures for investigation of methane-hydrogen combustion in spark ignition engine / V.M. Zaichenko, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina, A.I. Tsyplakov // Book of abstracts of the XXXI International conference on equations of state for matter. — 2016. — P. 203.
8. Аккумуляция электрической энергии в системах энергоснабжения удаленных потребителей на базе ВИЭ / В.М. Зайченко, М.Ф. Иванов, А.Е. Смыгалина, А.А. Чернявский // Материалы Международного конгресса “Возобновляемая энергетика XXI век: энергетическая и экономическая эффективность”. — 2015. — С. 185-190.
9. Подавление детонации в газопоршневых двигателях, работающих на водороде, посредством добавления низкоактивных компонент к топливу / А.Е. Смыгалина, М.Ф. Иванов, В.М. Зайченко // Материалы IV Международной конференции “Возобновляемая энергетика: проблемы и перспективы”. — 2015. — № 2(5). — С. 154-159.
10. Development of renewable energy sources storage system / V. Zaichenko, M. Ivanov, A. Smygalina, A. Chernavskij // Proceedings of the International conference “Thermophysical and mechanical properties of advanced materials”. — P. 58.
11. Numerical investigation of hydrogen-air mixtures ignition near lean flammability limit / A.E. Smygalina, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin // Proceedings of the 25<sup>th</sup> International colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems. — Paper 0185.
12. Numerical investigation of hydrogen-air mixtures ignition near lean flammability limit / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina // Proceedings of the European combustion meeting – 2015. — Paper P4-10.
13. Qualitative criteria for composition of hydrogen based mixtures for use in spark-ignition engines / A.E. Smygalina // Book of abstracts of the XXX International conference on interaction of intense energy fluxes with matter. — 2015. — P. 119.
14. Воспламенение водородо-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела / М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин, А.Е. Смыгалина //

- Труды 8й Всероссийской конференции “Необратимые процессы в природе и технике”, Ч. I. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. — 2015. — С. 194-197.
15. Горение смесей на основе водорода в газопоршневом двигателе / А.Е. Смыгалина, М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин // Сборник тезисов Международной конференции “Физико-математические проблемы создания новой техники”. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана. — 2014. — С. 100-101.
  16. Combustion regimes of hydrogen-based mixtures in gas-fueled reciprocating engines / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina // *Advances in nonequilibrium processes: plasma, combustion, and atmosphere* / ed. by A.M. Starik, S.M. Frolov. — М.: TORUS-PRESS. — P. 184-190.
  17. Воспламенение водородо-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела / А.Е. Смыгалина, М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин // Сборник тезисов XXVI Симпозиума “Современная химическая физика”. — 2014. — С. 117.
  18. Validation of reduced kinetic models for simulations of transient combustion processes / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina // *Book of abstracts of the XXIX International conference on equations of state for matter*. — 2014. — P. 87-88.
  19. Zeldovich concepts for transient combustion and flammability limits determination / A.D. Kiverin, M.F. Ivanov, A.E. Smygalina // *Proceedings of the XXIX International conference on equations of state for matter*. — 2014. — P. 74-77.
  20. Ivanov, M.F. Validation of reduced kinetic models for simulations of non-steady combustion processes [Электронный ресурс] / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina, M.A. Liberman. — 2013. — Режим доступа: <http://arxiv.org/abs/1312.3565v1>.
  21. Горение смесей на основе водорода в газопоршневом двигателе / М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин, А.Е. Смыгалина // Сборник тезисов XXV Симпозиума “Современная химическая физика”. — 2013. — С. 114-115.
  22. Numerical modeling of laminar flames using different reduced chemical kinetics and detailed transport models / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina,

- M.A. Liberman // Proceedings of the Topical workshop “Kinetic studies using laminar flames”. — 2013. — P. 48.
23. Создание программного модуля для решения задач горения с учетом детальной химической кинетики / А.Е. Смыгалина // Молодежный научно-технический вестник. — М.: ФГБОУ ВПО “МГТУ им. Н.Э. Баумана”, 2013.
24. Combustion regimes of hydrogen-based mixtures in gas-fueled reciprocating engines / M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, A.E. Smygalina, V.M. Zaichenko // Proceedings of the XXVIII International conference on interaction of intense energy fluxes with matter. — 2013. — P. 101-103.
25. Разработка компьютерного кода (модуля) для использования в газодинамических расчетах детальной кинетики, задаваемой из форматов ChemKin / А.Е. Смыгалина // Труды 7й Всероссийской конференции “Необратимые процессы в природе и технике”, Ч. II. — 2013. — С. 83-86.
26. Выбор детальной модели химической кинетики в расчетах газодинамики горения / А.Е. Смыгалина // Молодежный научно-технический вестник. — М.: ФГБОУ ВПО “МГТУ им. Н.Э. Баумана”, 2012.
27. Выбор детальной модели химической кинетики в расчетах газодинамики горения / А.Е. Смыгалина // Труды 54й конференции МФТИ “Проблемы фундаментальных и прикладных естественных и технических наук в современном информационном обществе”. Молекулярная и биологическая физика. — 2011. — С. 160-162.

### **Структура и содержание глав диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы. Диссертация содержит 120 страниц, 2 таблицы и 37 рисунков. Список литературы включает 98 наименований.



## **Глава 1. Численное моделирование процессов воспламенения и горения смесей на основе водорода**

В первой главе рассмотрена математическая модель, используемая для численного моделирования процессов воспламенения и горения смесей на основе водорода, составленная на основе системы уравнений газодинамики и системы уравнений химической кинетики. Описан численный метод для решения системы уравнений газодинамики. Представлены используемые методы расчета транспортных коэффициентов и термохимических величин. Приведены результаты расчетов времени индукции и ламинарной скорости пламени в нульмерной и одномерной постановках, соответственно, выполненные с целью валидации и верификации используемых программных кодов. С целью выбора оптимальной кинетической модели проведен анализ ряда представленных в литературе детальных механизмов химической кинетики горения водорода и метана.

### **1.1. Математическая модель**

Математическая модель, используемая для численного моделирования процессов воспламенения и горения газообразных смесей, представляет собой систему уравнений газодинамики Навье–Стокса [23,24] для сжимаемой среды с учетом процессов переноса, таких как вязкость, теплопроводность и диффузия, а также химического превращения. Система состоит из уравнения неразрывности и уравнений, выражающих законы сохранения импульса, массы каждого химического компонента и энергии. В общем виде такая система записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} \right) = -grad(p) + div(\sigma'), \quad (2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial w_s}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) w_s \right) = div \left( \rho D_s(T) \frac{w_s}{Y_s} \nabla Y_s \right) + M_s r_s, \quad s = 1..N, \quad (3)$$

$$\rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) E \right) = -div(p\mathbf{v}) + div(\sigma' \mathbf{v}) + \quad (4)$$

$$+ div(\kappa \nabla T) + \sum_{k=1}^N h_k div \left( \rho D_k \frac{w_k}{Y_k} \nabla Y_k \right) - \sum_{k=1}^N h_k r_k,$$

где  $\rho$  – плотность, [кг/м<sup>3</sup>],  $\mathbf{v}$  – скорость, [м/с],  $p$  – давление, [Па],  $w_s$  – массовая доля  $s$ -й компоненты,  $Y_s$  – объемная доля  $s$ -й компоненты,  $\sigma'$  – тензор вязких напряжений, компоненты которого выражены в Па,  $D_s$  – коэффициент диффузии  $s$ -го компонента в смеси с другими компонентами (или коэффициент многокомпонентной диффузии), [м<sup>2</sup>/с],  $M_s$  – молярная масса  $s$ -го компонента, [моль/м<sup>3</sup>],  $r_s$  – скорость изменения молярной плотности (концентрации)  $s$ -го компонента при протекании химических реакций, [моль/(м<sup>3</sup>·с)],  $E$  – полная энергия единицы массы жидкости, [Дж/кг], выражается через удельную кинетическую энергию и удельную внутреннюю энергию единицы массы газа:  $E = \varepsilon + v^2/2$ ,  $h_s$  – молярная энтальпия  $s$ -го компонента, [Дж/моль],  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности, [Дж/(К·м·с)].

Число уравнений (3) равно числу химических компонент в газообразной смеси  $N$ . Суммирование в уравнении (4) проводится по всем компонентам смеси  $N$ .

Система уравнений газодинамики (1-4) замыкается двумя уравнениями состояния газовой смеси

$$p = p(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T),$$

$$p = cRT = \left( \sum_{s=1}^N \frac{R}{m_s} Y_s \right) \rho T, \quad (5)$$

$$d(\varepsilon \cdot \rho) = c_V \cdot dT, \quad (6)$$

где  $m_s$  – масса компонента  $s$  в смеси, [кг],  $c_V$  – теплоемкость при постоянном объеме единицы объема газовой смеси, [Дж/(м<sup>3</sup>·К)].

Решение системы уравнений (1-6) проводится при задании начальных и граничных условий для искоемых функций. Для задач, рассматриваемых в

диссертации, начальные и граничные условия приводятся в рамках описания постановок конкретных задач.

В настоящей работе моделирование проводится в одномерной плоской постановке (главы 1,2), а также в двумерной постановке в цилиндрических координатах (главы 3,4).

Система уравнений (1-4) в одномерной постановке имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} &= 0, \\ \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \sigma'_{xx}}{\partial x}, \\ \rho \left( \frac{\partial w_s}{\partial t} + v \frac{\partial w_s}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_s \frac{\partial w_s}{\partial x} \right) + M_s r_s, \\ \rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + v \frac{\partial E}{\partial x} \right) &= -\frac{\partial}{\partial x} (pv) + \frac{\partial}{\partial x} (\sigma'_{xx} v) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \\ &+ \sum_{k=1}^N h_k \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_s \frac{\partial w_s}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^N h_k r_k,\end{aligned}$$

где  $v$  – проекция скорости на ось  $x$ .

В двумерной цилиндрической постановке система (1-4) имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r u)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial z} &= 0, \\ \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \sigma'_{rr})}{\partial r} + \frac{\partial \sigma'_{rz}}{\partial z}, \\ \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \sigma'_{zr})}{\partial r} + \frac{\partial \sigma'_{zz}}{\partial z}, \\ \rho \left( \frac{\partial w_s}{\partial t} + u \frac{\partial w_s}{\partial r} + v \frac{\partial w_s}{\partial z} \right) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \rho D_s \frac{\partial w_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_s \frac{\partial w_s}{\partial z} \right) + M_s r_s, \\ \rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial r} + v \frac{\partial E}{\partial z} \right) &= -\frac{1}{r} \frac{\partial(r p u)}{\partial r} - \frac{\partial(pv)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \sigma'_{rr} u + r \sigma'_{rz} v)}{\partial r} + \\ &+ \frac{\partial(\sigma'_{zr} u + \sigma'_{zz} v)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \kappa \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \\ &+ \sum_{k=1}^N h_k \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \rho D_k \frac{\partial w_k}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho D_k \frac{\partial w_k}{\partial z} \right) \right) - \sum_{k=1}^N h_k r_k,\end{aligned}$$

где  $u, v$  – проекции скорости на координатные оси  $r$  и  $z$ , соответственно.

Компоненты тензора вязких напряжений  $\sigma'$  выражаются по формуле (без учета второй вязкости) [23]:

$$\sigma'_{lm} = \mu \left( \frac{\partial v_l}{\partial x_m} + \frac{\partial v_m}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \delta_{lm} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right), \quad (7)$$

где  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости, [кг/(м·с)]. В одномерном случае тензор  $\sigma'$  принимает вид:

$$\sigma'_{xx} = \frac{4}{3} \mu \frac{\partial v_x}{\partial x}.$$

Коэффициент динамической вязкости  $\mu$  для смеси, состоящей из  $N$  компонент, определяется по формуле [25]:

$$\mu = \frac{1}{2} \left[ \sum_{s=1}^N Y_s \mu_s + \left( \sum_{s=1}^N \frac{Y_s}{\mu_s} \right)^{-1} \right], \quad (8)$$

где в обоих слагаемых суммирование проводится по числу химических компонент  $N$ . Коэффициенты  $\mu_s$  рассчитываются для каждого  $s$ -го компонента с использованием транспортных параметров  $\hat{\sigma}_s, \hat{\epsilon}_s$  с учетом того, что принимается модель Леннарда – Джонса межмолекулярного взаимодействия:

$$\mu_s = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi \hat{m}_s k T}}{\pi \hat{\sigma}_s^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (9)$$

Формула (9) [26] записана в системе СГС,  $\mu_s$  имеет единицу измерения г/(см·с). Входящие в нее величины:  $\hat{\sigma}_s$  – диаметр молекулы, [см],  $k$  – константа Больцмана,  $\hat{m}_s$  – масса молекулы, [г],  $\Omega^{(2,2)*}$  – приведенный интеграл столкновений, являющийся функцией приведенной температуры  $T^* = \frac{T}{(\hat{\epsilon}_s/k)}$ , где  $\hat{\epsilon}_s$  – глубина потенциала межмолекулярного взаимодействия, в единицах измерения энергии. Для практического использования формулу (9) можно переписать в виде:

$$\mu_s = 8,44 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{M_s T}}{\hat{\sigma}_s^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (10)$$

Здесь  $M_s$  – молярная масса в кг/моль,  $\hat{\sigma}_s$  в нм,  $\mu_s$  в кг/(м·с). Приведенный интеграл столкновений [26] аппроксимируется выражением:

$$\Omega^{(2,2)*} = \frac{1,16145}{(T^*)^{0,14874}} + \frac{0,52487}{\exp(0,77320 \cdot T^*)} + \frac{2,16178}{\exp(2,43787 \cdot T^*)}. \quad (11)$$

Коэффициент теплопроводности  $\kappa$  газовой смеси определяется выражением [25]:

$$\kappa = \frac{1}{2} \left[ \sum_{s=1}^N Y_s \kappa_s + \left( \sum_{s=1}^N \frac{Y_s}{\kappa_s} \right)^{-1} \right]. \quad (12)$$

Входящие в выражение (12) для смеси коэффициенты теплопроводности отдельных компонент  $\kappa_s$  согласно кинетической теории газов задаются формулой [26]:

$$\kappa_s = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi \hat{m}_s k T}}{\pi \hat{\sigma}_s^2 \Omega^{(2,2)*}} \hat{c}_{V_s}. \quad (13)$$

Формула записана в системе единиц СГС. Здесь  $\hat{c}_{V_s}$  – теплоемкость, приходящаяся на одну молекулу. Молекулярная теплоемкость  $\hat{c}_{V_s}$  может быть рассчитана следующим образом:

$$\hat{c}_{V_s} = C_{V_s} / N_A,$$

где  $C_{V_s}$  – молярная теплоемкость, [Дж/(моль·К)],  $N_A$  – число Авогадро. В случае одноатомного газа

$$\hat{c}_{V_s} = \frac{3}{2} k. \quad (14)$$

В системе СИ с учетом (14) выражение для коэффициента теплопроводности  $\kappa_s$  принимает вид:

$$\kappa_s = 2,632 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{T/M_s}}{\hat{\sigma}_s^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (15)$$

В данной формуле  $M_s$  имеет единицу измерения кг/моль,  $\hat{\sigma}_s$  – нм,  $\kappa_s$  – Вт/(м·К). Чтобы использовать формулу (15) для расчетов коэффициентов  $\kappa_s$  многоатомных молекул была применена поправка Эйкена [26]:

$$\kappa_{s \text{ многоат}} = \kappa_{s \text{ моноат}} \cdot \left( \frac{4}{15} \frac{C_{V_s}}{R} + \frac{3}{5} \right), \quad (16)$$

Коэффициент диффузии  $s$ -го компонента для многокомпонентной смеси определяется выражением [25]:

$$D_s = \frac{1-w_s}{\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq s}}^N \frac{Y_k}{D_{sk}}}, \quad (17)$$

Массовая  $w_s$  и молярная  $Y_s$  доли отдельных компонент определяются через концентрации  $c_s$ , [моль/м<sup>3</sup>], по формулам:

$$w_s = \frac{M_s c_s}{\sum_{\beta=1}^N M_\beta c_\beta} = \frac{M_s c_s}{\rho}, \quad Y_s = c_s / c. \quad (18)$$

Коэффициенты бинарной диффузии рассчитываются на основе формулы из кинетической теории газов [26]:

$$D_{sk} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k^3 T^3 / \hat{m}_{sk}}}{p \pi \hat{\sigma}_{sk} \Omega^{(1,1)*}}. \quad (19)$$

Здесь  $\hat{\sigma}_{sk} = (\hat{\sigma}_s + \hat{\sigma}_k)/2$ ,  $\hat{m}_{sk} = \hat{m}_s \hat{m}_k / (\hat{m}_s + \hat{m}_k)$ ,  $\Omega^{(1,1)*}$  – приведенный интеграл столкновений, являющийся функцией приведенной температуры  $T^*$ . Единицы измерения величин – единицы системы СГС. Для практического использования формула (19) переписывается для единиц измерения СИ:

$$D_{sk} = 5,95 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{T^3(M_s + M_k)/(M_s M_k)}}{p [0,5(\hat{\sigma}_s + \hat{\sigma}_k)]^2 \Omega^{(1,1)*}}, \quad (20)$$

где  $M_s$  – в кг/моль,  $p$  – в Па,  $T$  – в К,  $\hat{\sigma}_s$  – в нм. Приведенный интеграл столкновений может быть определен с помощью аппроксимации:

$$\begin{aligned} \Omega^{(1,1)*} = & \frac{1,06036}{(T^*)^{0,16510}} + \frac{0,193}{\exp(0,47635 \cdot T^*)} + \\ & + \frac{1,03587}{\exp(1,52996 \cdot T^*)} + \frac{1,76474}{\exp(0,47635 \cdot T^*)}. \end{aligned} \quad (21)$$

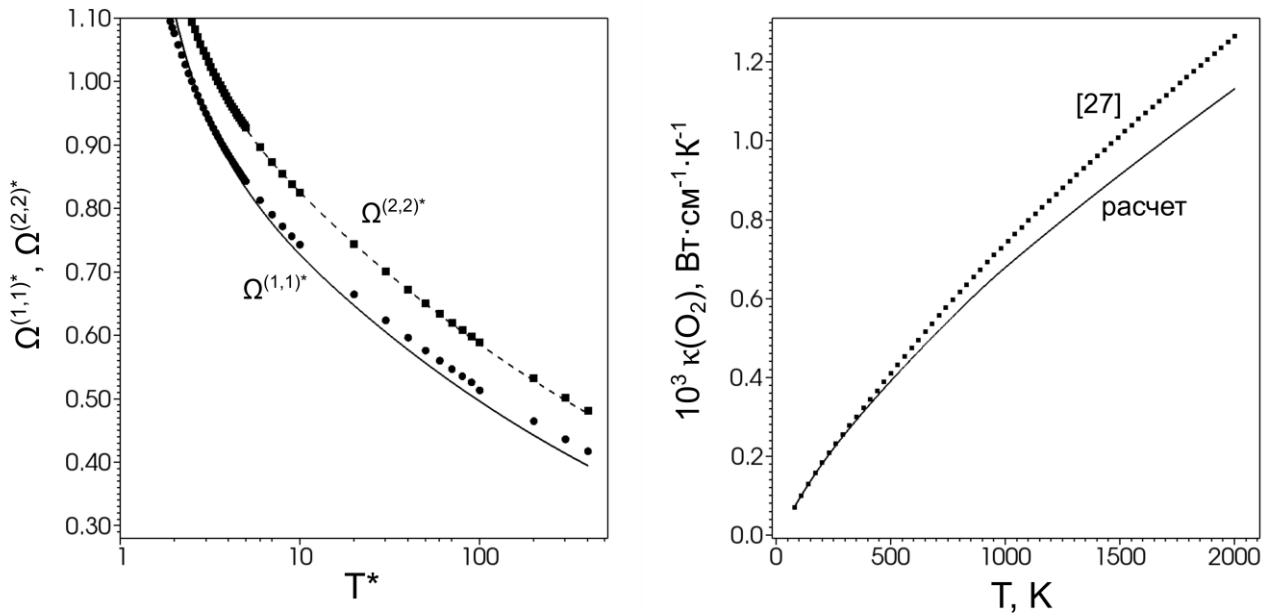


Рисунок 1 (слева). Расчет интегралов столкновений по представленным аппроксимациям (11), (21). Результаты расчетов (линии) сопоставлены с данными [26] (точки).

Рисунок 2 (справа). Расчет коэффициента теплопроводности молекулы  $O_2$  по формуле (16). Результаты сопоставлены с данными [27].

На рисунках 1, 2 представлены результаты расчета величин, необходимых для вычисления коэффициентов переноса для газовой смеси: интегралов столкновений и коэффициента теплопроводности  $\kappa_s$  для молекулы  $O_2$ . Удовлетворительное согласие с данными из литературы показывает надежность используемых аппроксимаций (11) и (21) с учетом поправки (16), необходимых для расчета коэффициентов вязкости, теплопроводности и диффузии многокомпонентной газовой смеси.

Расчет термодинамических параметров отдельных компонент смеси: молярных теплоемкости, энтальпии и энтропии, проводится с использованием метода интерполяции экспериментальных данных полиномами пятого порядка по температуре [28]:

$$\begin{aligned} \frac{c_{p_s}}{R} &= (a_1)_s + (a_2)_s T + (a_3)_s T^2 + (a_4)_s T^3 + (a_5)_s T^4, \\ \frac{h_s}{RT} &= (a_1)_s + \frac{(a_2)_s T}{2} + \frac{(a_3)_s T^2}{3} + \frac{(a_4)_s T^3}{4} + \frac{(a_5)_s T^4}{5} + \frac{(a_6)_s}{T}, \\ \frac{s_s}{RT} &= (a_1)_s \ln T + (a_2)_s T + \frac{(a_3)_s T^2}{2} + \frac{(a_4)_s T^3}{3} + \frac{(a_5)_s T^4}{4} + (a_7)_s, \end{aligned} \quad (22)$$

где коэффициенты  $(a_i)_s$ ,  $i=1..7$ , соответствующие  $s$ -му компоненту берутся из термодинамических таблиц (например, [28]). С учетом этого теплоемкость единицы объема смеси рассчитывается по формуле:

$$c_p = \sum_{k=1}^N (C_p)_k c_k,$$

где  $c_k$  – концентрация  $s$ -го компонента в моль/м<sup>3</sup>. Теплоемкость при постоянном объеме определяется с помощью соотношения Майера:

$$c_V = c_p - cR,$$

$c$  – концентрация смеси.

Стоящая в уравнениях газодинамики величина  $r_s$ , определенная как скорость изменения концентрации  $s$ -го компонента при химическом превращении, рассчитывается в результате решения системы уравнений химической кинетики для всех  $N$  компонент смеси. Такая система записывается с использованием закона действующих масс [29], согласно которому скорость изменения концентрации вещества при протекании химической реакции пропорциональна произведению

концентраций участвующих реагентов. В общем виде, если химическое превращение происходит согласно механизму из  $Q$  элементарных обратимых реакций между  $N$  компонентами, эта система записывается как

$$\sum_{s=1}^N \bar{v}_{qs} \alpha_s \leftrightarrow \sum_{s=1}^N \bar{\bar{v}}_{qs} \alpha_s, \quad q = 1..Q, \quad (23)$$

где  $\alpha_s$  – химическая формула  $s$ -го компонента,  $\bar{v}_{qs}$  – стехиометрический коэффициент  $s$ -го компонента в левой части  $q$ -й реакции,  $\bar{\bar{v}}_{qs}$  – стехиометрический коэффициент  $s$ -го компонента в правой части  $q$ -й реакции. Тогда для скорости изменения концентрации  $s$ -го компонента имеем:

$$r_s = \left( \frac{\partial c_s}{\partial t} \right)_{chem} = \sum_{q=1}^Q (\bar{\bar{v}}_{qs} - \bar{v}_{qs}) \left[ \bar{k}_q \prod_{i=1}^N c_i^{\bar{v}_{qi}} - \bar{\bar{k}}_q \prod_{i=1}^N c_i^{\bar{\bar{v}}_{qi}} \right], \quad s = 1..N. \quad (24)$$

Величины  $\bar{k}_q$  и  $\bar{\bar{k}}_q$  называются константами скорости  $q$ -й реакции. Данные величины в реакциях горения имеют, как правило, сильную температурную зависимость, а также могут иметь зависимость от давления. Общепринятым является определение констант скоростей реакций по закону Аррениуса:

$$k_q = A_q T^{b_q} \exp\left(-\frac{E_{act_b}}{RT}\right). \quad (25)$$

Величины  $A_q$  и  $b_q$ , определяющие предэкспоненциальный множитель, а также энергия активации  $E_{act_b}$  задаются согласно специально разрабатываемым механизмам химической кинетики (например, [25,30-35]). Эти параметры могут быть заданы как для прямой, так и для обратной реакции. Если для обратной реакции данные величины не заданы, они могут быть выражены с использованием константы равновесия  $K_q$ :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{k}}_q &= \bar{k}_q / K_q, \\ K_q &= \exp\left(\frac{\Delta s_q}{R} - \frac{\Delta h_q}{RT}\right). \end{aligned} \quad (26)$$

Энтальпия  $\Delta h_q$  и энтропия  $\Delta s_q$   $q$ -й реакции [29] определяются с использованием  $h_s$  и  $s_s$  (22):

$$\Delta h_q = \sum_{s=1}^N (\bar{\bar{v}}_{qs} - \bar{v}_{qs}) h_s, \quad \Delta s_q = \sum_{s=1}^N (\bar{\bar{v}}_{qs} - \bar{v}_{qs}) s_s.$$

Если константа скорости имеет зависимость от давления, в этом случае для ее расчета используются подходы Линдемманна или Трое, подробно описанные в



литературе [25,36]. В таких подходах для вычисления константы скорости задаются дополнительные параметры, которые указываются в кинетических механизмах [30-35].

## 1.2. Численный метод

Для численного решения системы уравнений газодинамики (1-4) использовался явный эйлерово-лагранжев метод, известный также как метод “крупных частиц” [37]. Численный метод был модифицирован в [38] и в используемой версии имел второй порядок точности по пространству и первый порядок точности по времени. В рамках эйлерово-лагранжева метода решение системы (1-4) на конечно-разностной сетке разбивается на три этапа, реализуемых последовательно в рамках одного шага по времени. На первом, “эйлеровом”, этапе искомые величины (плотность, скорость, полная энергия, массовые доли) рассчитываются в каждой ячейке сетки без учета конвективного переноса. На втором, “лагранжевом”, этапе рассчитываются потоки массы газовой смеси через границы ячеек. На третьем, заключительном, этапе искомые величины, определенные на первом этапе, пересчитываются с учетом конвективных слагаемых.

Во всех задачах, рассматриваемых в настоящей работе, используется однородная сетка.

Система уравнений химической кинетики (24), записанная согласно выбранному кинетическому механизму (23), представляет собой жесткую систему обыкновенных дифференциальных уравнений [39]. Решение такой системы осуществлялось в каждой ячейке области на каждом временном шаге методом Гира, реализованном в системе подпрограмм из библиотеки Slatec [40].

### 1.3. Расчеты основных величин, характеризующих процесс горения

В настоящем разделе проводится расчет основных величин, характеризующих процесс горения: времени индукции и ламинарной скорости пламени, с использованием программного кода, реализующего описанную выше математическую модель и численный метод. Результаты расчетов сопоставляются с экспериментальными данными, представленными в литературе. Таким образом, можно говорить о проведении верификации математической модели и программного кода для решения задач горения. Поскольку обе рассматриваемые величины – время индукции и ламинарная скорость пламени – определяются механизмом протекания химических реакций [1], сопоставление данных величин, рассчитанных с использованием различных кинетических механизмов, в интересующем диапазоне составов смеси и ее термодинамического состояния, позволяет осуществить выбор механизма, оптимально подходящего для использования при решении конкретной задачи. В настоящем разделе диссертации приведены результаты таких расчетов для выбора механизмов химической кинетики, оптимальных для решения поставленных задач, рассмотренных в следующих главах диссертации.

#### 1.3.1. Определение времени индукции

Время индукции, или время задержки воспламенения [1], определяется как время достижения максимума скорости реакции при решении задачи о развитии адиабатического взрыва. Согласно специфике постановки задачи [1] время индукции рассчитывается в ходе совместного решения системы уравнений химической кинетики (24) и уравнения энергии с заданными начальными условиями – начальной температурой, давлением, концентрациями реагентов, а

также механизмом химической кинетики. Поскольку процесс химического превращения рассматривается в адиабатических условиях в отсутствии потоков тепла и массы, то задача решается в нульмерном приближении. Постановка задачи записывается следующим образом [25]:

$$\begin{aligned} \frac{dw_s}{dt} &= \frac{r_s}{\rho}, \quad s = 1..N, \\ \frac{dT}{dt} &= - \frac{\sum_{k=1}^N \bar{h}_k r_k}{\rho \bar{c}_p}, \end{aligned} \quad (27)$$

где энтальпия  $\bar{h}_k$  и теплоемкость  $\bar{c}_p$  являются удельными, имеющими единицы измерения Дж/кг и Дж/(кг·К). Из уравнения (27) следует, что на каждом временном шаге удельный энергетический вклад в систему составляет (с учетом того, что процесс изобарный):

$$\Delta \bar{h} = - \frac{\sum_{k=1}^N (\Delta \bar{H}_{f,298}^0)_k \cdot \Delta c_k}{\rho},$$

а изменение температуры равно:

$$\Delta T = \frac{\Delta h}{c_p} = - \frac{\rho \Delta \bar{h}}{\sum_{k=1}^N c_k c_{p_k}},$$

где  $(\Delta \bar{H}_{f,298}^0)_k$  – стандартная энтальпия образования [29]  $k$ -го компонента, в Дж/моль.

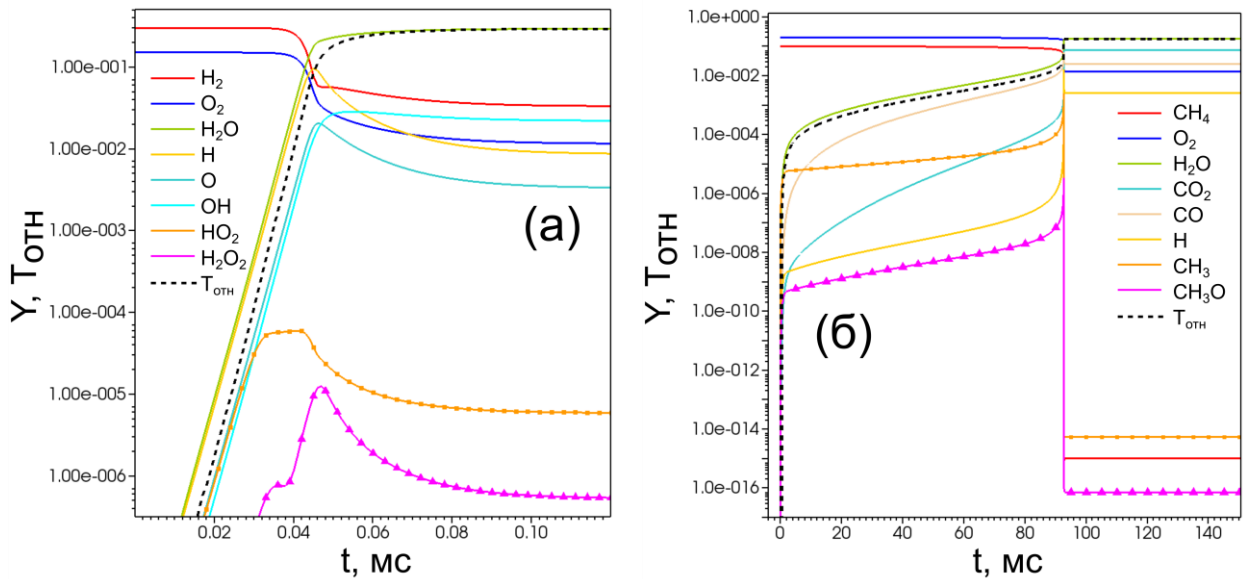


Рисунок 3. Профили мольных долей химических компонент и эволюция температуры (отображена качественно) в ходе развития адиабатического взрыва

стехиометрической смеси  $\text{H}_2$ -воздух (а) и  $\text{CH}_4$ -воздух (б) по механизмам [30] и [31] для условий  $p_0=1$  бар,  $T_0=1200$  К.

Анализ рисунка 3 указывает на то, что определить время индукции возможно по достижению максимума одного из промежуточных радикалов. Согласно такому определению можно говорить о времени индукции как о моменте перехода от стадии накопления радикалов к стадии рекомбинации радикалов, в ходе которой происходит основное энергосвыделение. В большинстве работ, основываясь на экспериментальных методах определения времени индукции [41], в качестве такого радикала выбирают радикал  $\text{OH}$ . В настоящей работе при решении всех поставленных задач время индукции определялось по максимуму мольной доли радикала  $\text{H}$ .

Время индукции зависит от начальных параметров реагирующей смеси: температуры, давления и состава. В связи с этим, для определения особенностей развития горения в различных условиях важным представляется экспериментальное определение времени индукции как функции температуры, давления и концентрации компонент. Сравнение получаемых экспериментально зависимостей с аналогичными зависимостями, рассчитанными с использованием различных модельных механизмов химической кинетики, позволяет определить, какой из механизмов наиболее адекватно воспроизводит особенности горения в том или ином диапазоне параметров. Как видно из данных, представленных на рисунке 4, при использовании различных кинетических механизмов может иметь место достаточно большой разброс в определении времени индукции. С точки зрения структуры модельного кинетического механизма это определяется в основном различием в параметрах  $A$ ,  $b$ ,  $E_{act}$ , необходимых для расчета констант элементарных реакций.

В настоящее время кинетическое описание процесса горения смесей на основе водорода, включая составы с добавлением метана, достаточно хорошо исследовано. Разработан целый ряд детальных и редуцированных кинетических механизмов [25,30-35,42], описывающих горение рассматриваемых в диссертации

смесей. При этом выбор кинетического механизма имеет решающее значение при построении математической модели для расчета процессов воспламенения и горения.

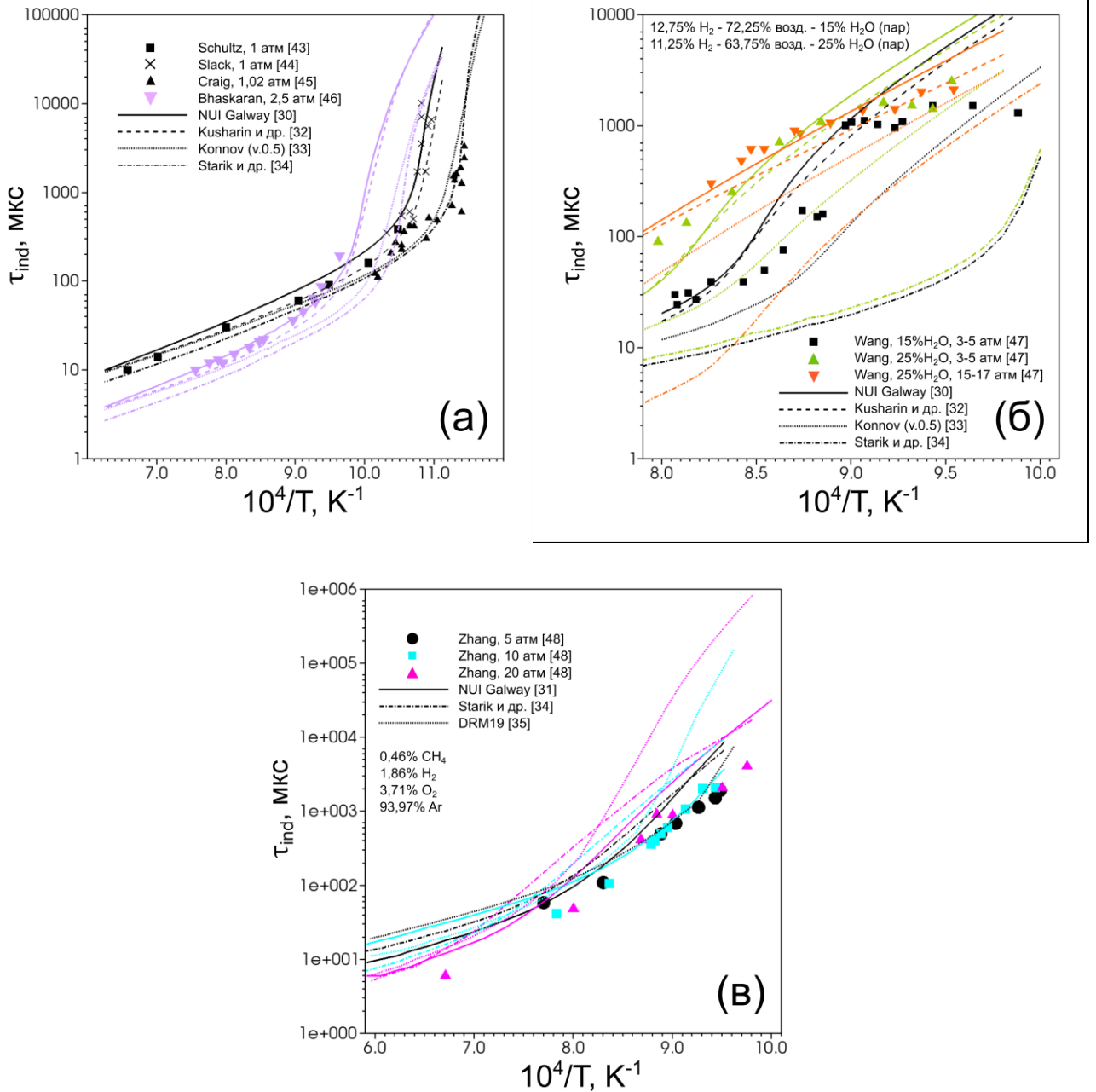


Рисунок 4. Времена индукции в зависимости от  $10^4/T$  для (а) стехиометрической смеси  $H_2$ -воздух при давлении 1 атм, 2,5 атм, экспериментальные данные [43-46], моделирование по механизмам [30,32-34]; (б) смесей  $H_2$ -воздух-водяной пар, экспериментальные данные [47], моделирование – аналогично (а); (в) смесей  $CH_4$ - $H_2$ - $O_2$ , разбавленных Ar, экспериментальные данные [48], моделирование – [31,34,35].

Получение методами математического моделирования количественных оценок, включая построение пределов реализации того или иного режима горения, во многом определяется именно выбором кинетического механизма. С этой позиции сравнение расчетов времен индукции с имеющимися в литературе экспериментальными данными является первоочередной процедурой верификации, позволяющей выбрать кинетический механизм, наиболее достоверно воспроизводящий особенности воспламенения в исследуемом диапазоне параметров.

В настоящей диссертации описанный алгоритм выбора кинетического механизма необходимо реализовать для трех рассматриваемых задач. Отметим, что референтные работы по исследованию кинетических механизмов содержат достаточно подробный анализ разрабатываемых механизмов, например, в [30] показано, что рассматриваемый механизм позволяет получать достоверные результаты для смесей водород - кислород существенно обедненных составов (до значений эквивалентного соотношения для горючего  $\Phi = 0,2$ ) и для высоких, до 87 атм, давлений, а также при различном содержании компонент-разбавителей. Однако, как правило, диапазоны параметров, специфические для конкретной задачи, отличаются от рассмотренных в референтных работах (например, рассмотренный в [30] диапазон отличается от условий задачи, рассматриваемой в главе 4 настоящей диссертации). Поэтому в таких случаях дополнительный анализ с целью выбора оптимального механизма является особенно необходимым. Диапазоны изменения параметров смеси (давления, температуры и состава), отвечающие особенностям конкретных постановок разбираемых задач, являются следующими. Оценка концентрационного предела воспламенения водорода в воздухе (глава 2) проводится в условиях различного содержания водорода при нормальных условиях. Для задачи самовоспламенения водорода при его истечении под давлением в канал, заполненный воздухом, (глава 3) особенностью является наличие высоких (до 60 атм) давлений. Для указанных задач, таким образом, может быть выбран механизм [30], поэтому дальнейший анализ механизмов в отношении этих задач носит в большей мере подтверждающий характер. При решении задачи

о горении смесей водород - воздух, водород - водяной пар - воздух, водород - метан - воздух в камере сгорания двигателя с искровым зажиганием (глава 4) помимо достоверного воспроизведения кинетики горения при повышенном давлении важно корректное воспроизведение особенностей влияния различных добавок на процесс горения. Для выбора наиболее точно воспроизводящих экспериментальные зависимости кинетических схем с целью их дальнейшего использования в расчетах динамики горения был проведен анализ достаточно хорошо зарекомендовавших себя на сегодняшний день схем, описывающих горение водорода и метана [30-35].

На рисунке 4 представлены расчетные зависимости времен индукции от температуры (обратной величины температуры), при различных начальных давлениях и составах, а также соответствующие экспериментальные данные. Исследовались смеси водорода, водорода и водяного пара, а также водорода и метана с кислородом. В последнем случае также учитывалось разбавление аргоном, имеющее место в референтных экспериментах.

Сопоставление приведенных на рисунке 4 данных позволяет выбрать для дальнейшей работы те кинетические схемы, рассчитанные согласно которым времена индукции наиболее точно соотносятся с представленными в литературе экспериментальными данными во всем представляющем интерес интервале изменения температуры и давления. Для того чтобы пояснить критерий выбора кинетических схем на рисунке 5 приведены усредненные по всему интервалу температур относительные расхождения между расчетными и экспериментальными данными по временам индукции для разных составов и давлений

$$\xi = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{|\tau_i - \hat{\tau}_i|}{\tau_i + \hat{\tau}_i},$$

где  $M$  – количество значений температуры, при которых в эксперименте найдены времена индукции при определенном значении давления и определенном составе,  $\tau_i$  – экспериментальный отсчет времени индукции, соответствующий  $i$ -му

значению температуры,  $\hat{t}_i$  – время индукции, рассчитанное с использованием той или иной кинетической схемы, для  $i$ -го значения температуры.

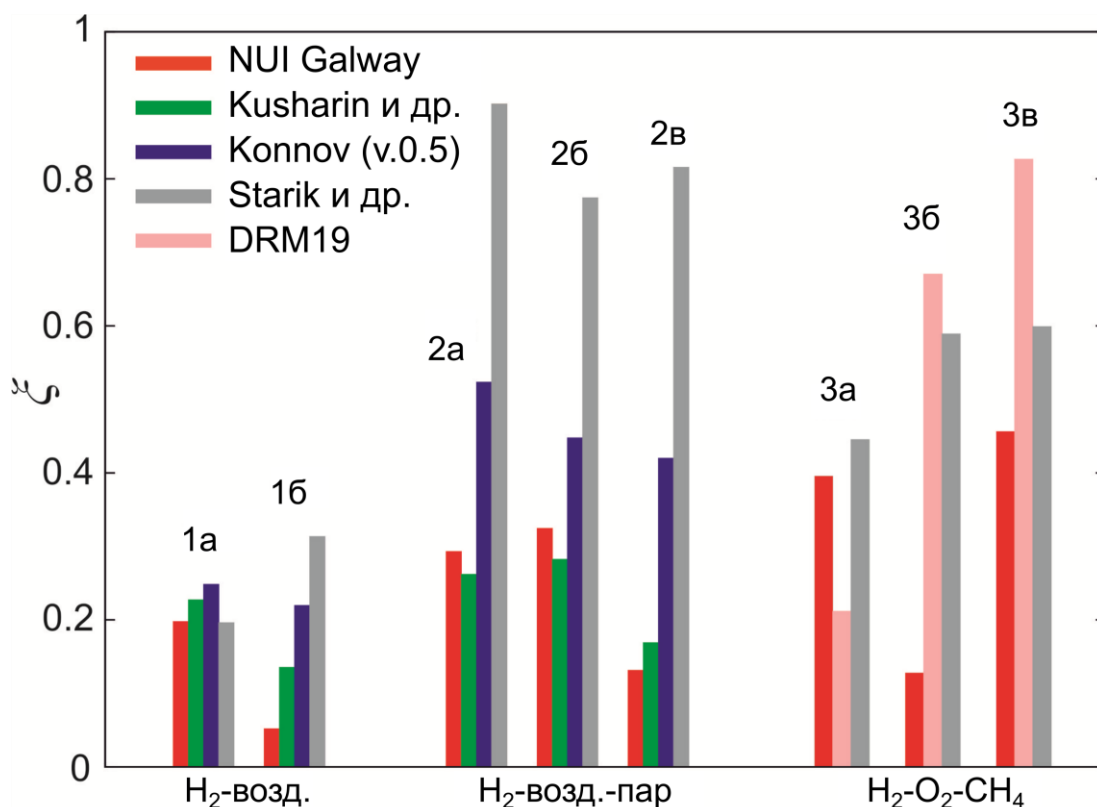


Рисунок 5. Результаты определения величины  $\zeta$  на основе экспериментальных и расчетных значений времен индукции, представленных на рисунке 4. Группы столбцов 1-3 соответствуют различным давлениям и составам: 1а – 1 атм, 1б – 2,5 атм, 2а – 4 атм, 15%H<sub>2</sub>O, 2б - 4 атм, 25%H<sub>2</sub>O, 2в – 16 атм, 25%H<sub>2</sub>O, 3а – 5 атм, 3б – 10 атм, 3в – 20 атм.

Анализ представленных на рисунках 4, 5 зависимостей позволяет выделить механизмы химической кинетики NUI Galway [30,31] (механизм для горения метана [31] включает в себя в качестве подмеханизма схему горения водорода [30]) для использования в расчетах горения бедных водородно-воздушных смесей (в задачах, рассматриваемых в главах 2 и 3), а также смесей водород-метан-воздух и водород-водяной пар-воздух в двигателе с искровым зажиганием (решение этой задачи проводится в главе 4 настоящей диссертации). При этом для горения бедных смесей водород-воздух может быть также применен механизм Kusharin et al. [32], имеющий минимальные отличия от механизма [30] для соответствующих условий. Указанные механизмы [30,31] приводят к невысоким расхождениям между



экспериментальными и расчетными величинами времен индукции для различных условий. Стоит отметить, что выбранные экспериментальные данные (рис. 4) достаточно хорошо подходят для проводимого анализа, поскольку отвечают условиям исследуемых в диссертации задач: по составу используемых смесей, давлению и температуре. Отметим, что специфика разбираемой в главе 2 задачи, рассматриваемой в разделе 2.3, обуславливает проведение более детального анализа кинетических механизмов, обосновывающего выбор механизма для дальнейшего решения поставленной задачи.

### 1.3.2. Определение ламинарной скорости пламени

Для определения методами математического моделирования нормальной скорости ламинарного пламени  $U_f$  [1] была выбрана следующая постановка задачи. Одномерная область плоской геометрии имела закрытый, левый, торец и открытый, правый. Область была заполнена однородной смесью горючего и окислителя исследуемого состава, находящейся при заданной начальной температуре и фоновом давлении. Инициирование горения происходило на границе небольшой области заданной протяженности (порядка 100 ячеек расчетной сетки), заполненной продуктами горения, нагретыми до адиабатической температуры. Перенос тепла из горячей области инициирует горение в прилегающих слоях свежей горючей смеси, что ведет к формированию волны горения, и со временем устанавливается стационарный режим распространения пламени в канале от закрытого торца. В такой постановке для определения ламинарной скорости пламени необходимо учитывать расширение продуктов горения за фронтом пламени, приводящее к увеличению скорости перемещения фронта относительно неподвижной системы отсчета [49]. Согласно известному соотношению ламинарная скорость пламени определяется как  $U_f = U/\theta$ , где  $U$  – скорость перемещения фронта горения в лабораторной системе отсчета,  $\theta = \rho_u/\rho_b$

– коэффициент расширения,  $\rho_u$  – плотность несгоревшей горючей смеси,  $\rho_b$  – плотность горячих продуктов горения.

Для нахождения ламинарной скорости пламени может быть также применена другая постановка, наиболее приближенная к условиям реального эксперимента по определению этой фундаментальной характеристики горения. В рамках такой постановки ламинарная скорость непосредственно определяется в ходе моделирования как скорость перемещения фронта горения. Расчет проводится в одномерной области конечной длины, на границах которой задаются условия протекания. Расчетная область разбивается на 3 зоны: первую (левую) область заполняет воздух при температуре 300 К, вторую (среднюю) область – нагретые до адиабатической температуры горения продукты, третью (правую) область – однородная смесь горючего и окислителя при заданной фоновой температуре. Давление во всей области задается равным величине фонового давления.

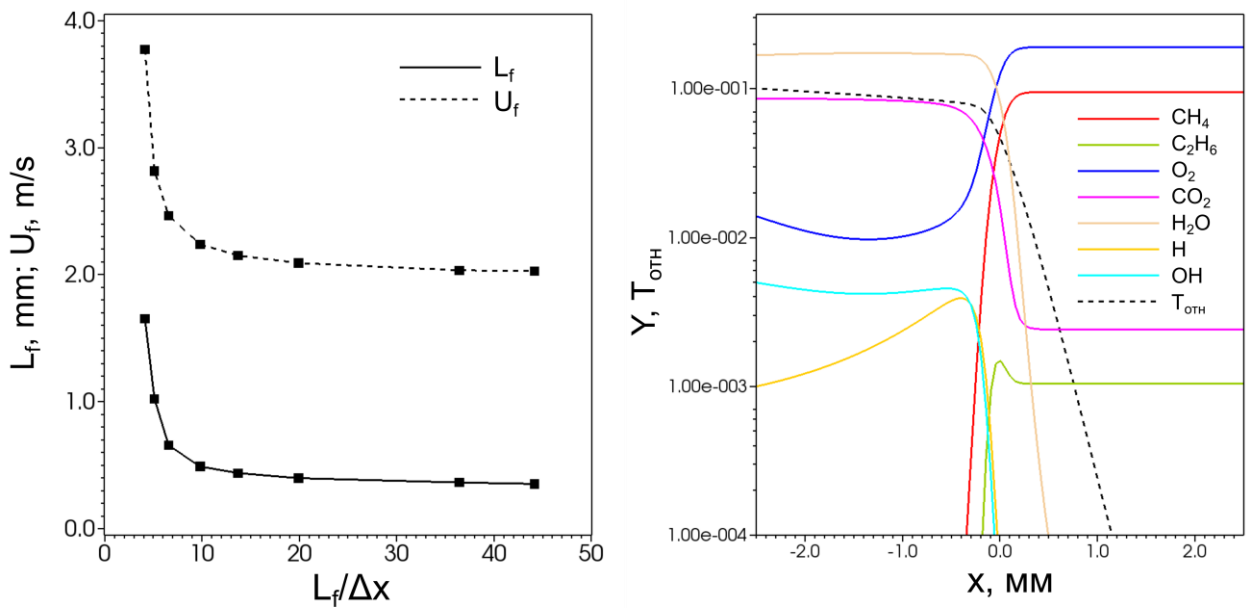


Рисунок 6 (слева). Тест на сходимость (получено для стехиометрического водородно-воздушного пламени при нормальных условиях).

Рисунок 7 (справа). Структура фронта пламени природный газ-воздух.

Анализ результатов расчетов показал, что при определении ламинарной скорости в двух различных постановках существенных различий получено не

было. В качестве основной постановки была выбрана первая (о распространении волны горения в канале от закрытого торца). Результаты расчетов и их анализ приводятся ниже.

На рисунке 6 представлены результаты теста на сходимость искомого решения, на основе которых для дальнейших расчетов была выбрана сетка с размером ячейки 20 мкм. При этом расчеты были проведены для стехиометрической водородно-воздушной смеси, фронт пламени в которой характеризуется наименьшей шириной. На данном рисунке также приведены рассчитанные величины ширины фронта в зависимости от используемой сетки. Ширина фронта определялась по формуле [50]  $L_f = \frac{T_b - T_u}{\max(\nabla T)}$ , где  $T_b$  и  $T_u$  – температуры продуктов горения и несгоревшей смеси, соответственно. Структура фронта на примере предварительно перемешанного пламени природного газа и воздуха представлена на рисунке 7.

Ламинарная скорость пламени, как и время индукции, существенно зависит от начального состояния реагирующей смеси: ее температуры, давления и состава, и так же является величиной, определяемой кинетикой химического превращения, которая задается соответствующим механизмом [1]. Поэтому при выборе кинетического механизма для численного решения тех или иных задач газодинамики горения, наряду с выбором, проведенным в разделе 1.3.1 на основе анализа зависимостей времени индукции от параметров смеси, необходимо проводить сопоставление рассчитанных с использованием разных кинетических механизмов ламинарных скоростей с соответствующими экспериментальными данными в интересующем диапазоне начальных условий. Представленные на рисунках 8, 9 экспериментальные и расчетные зависимости ламинарной скорости от концентрации горючего, температуры и давления, показывают, что выбранные в разделе 1.3.1 кинетические механизмы [30,31] позволяют получить удовлетворительное согласие с экспериментальными данными в рассматриваемых диапазонах начальных составов, давлений и температур.

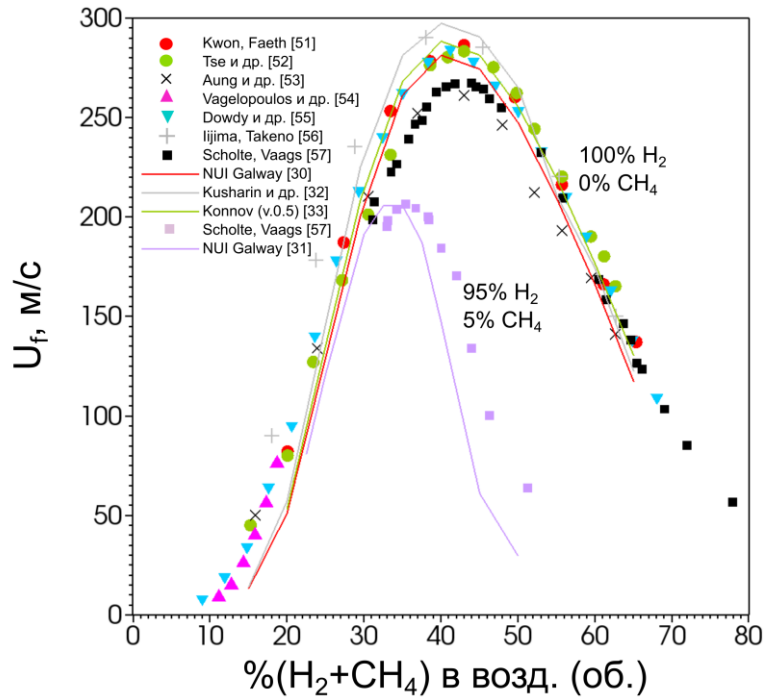


Рисунок 8. Скорость ламинарного пламени для смесей  $H_2$ -воздух,  $H_2$  (95% об.)- $CH_4$  (5% об.)-воздух при нормальном давлении и температуре в зависимости от содержания горючего в его смеси с воздухом. Экспериментальные данные: [51-57]. Расчеты с использованием кинетических механизмов [30-33].

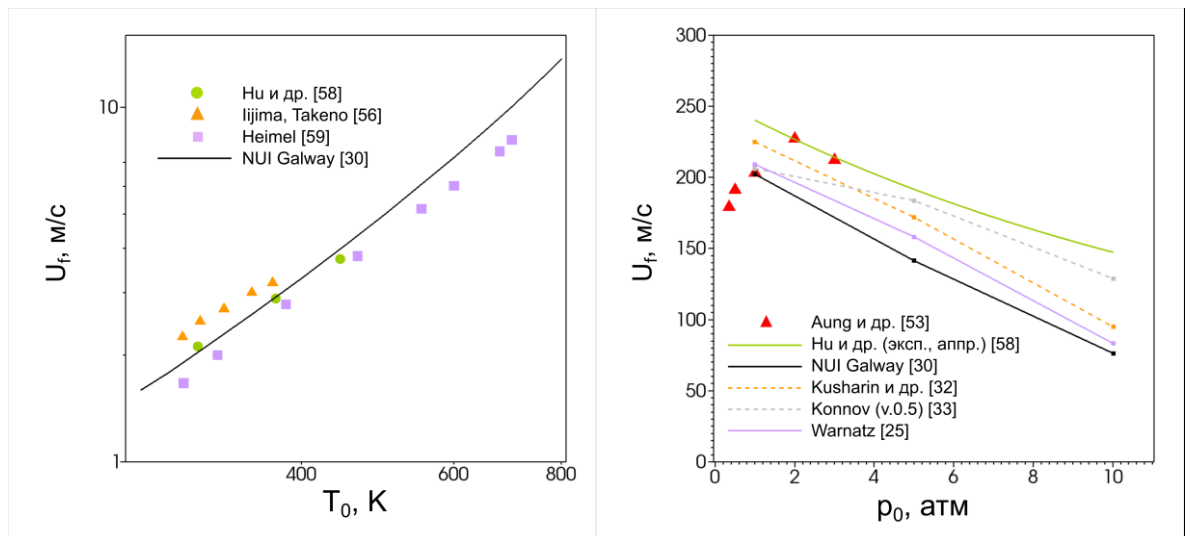


Рисунок 9. Скорость ламинарного пламени для стехиометрической смеси  $H_2$ -воздух в зависимости от температуры, при давлении 1 атм (а), и от давления, при температуре 300 К (б). Эксперименты: (а) [58,56,59], (б) 1-[53,58]. Расчеты: (а) [30], (б) 3-[30,32,33,25].

## **Глава 2. Нижний концентрационный предел воспламенения водородно-воздушной смеси**

В главе 2 представлены результаты расчетов по определению минимальной концентрации водорода в его смеси с воздухом, значения ниже которой являются недостаточными для поддержания протекания экзотермической реакции горения. В дополнении к нульмерным расчетам проведено расширенное исследование устойчивости воспламенения по отношению к газодинамическим возмущениям на основе одномерных расчетов. Одномерные расчеты выполнены на основе предложенной постановки задачи о воспламенении смеси с заданной пространственной неоднородностью содержания водорода. Полученные результаты находятся в согласии с доступными экспериментальными данными. Также в главе проведен анализ результатов численного моделирования волн горения в смесях околопредельных составов, что позволило проиллюстрировать особенности развития процесса горения в таких смесях. Результаты опубликованы в [IV].

### **2.1. Определение нижнего концентрационного предела воспламенения водорода как важная задача обеспечения безопасности на АЭС**

В процессе развития тяжелой аварии на АЭС в результате нарушения целостности реакторной зоны создаются условия для генерации водорода в объеме под защитной оболочкой (контейнментом), прежде всего за счет окисления циркония в топливных оболочках при взаимодействии с водой. В результате сформированных под контейнментом конвективных течений водород распределяется в объеме, перемешиваясь с воздухом, водяным паром и другими продуктами окисления расплавов компонент разрушающейся реакторной зоны [6].

Таким образом, в помещениях под контайнментом образуются области, заполненные водородосодержащими смесями, способными, в общем случае, к воспламенению даже при относительно небольших внешних энергозатратах.

В дальнейшем процесс может развиваться различными путями: горение затухает; по горючей смеси распространяется медленная или быстрая волна горения; реализуется переход от дозвукового горения к детонации; возможно непосредственное возбуждение детонации в результате интенсивного энергозатрата. Все эти проявления дополнительного энерговыделения за счет химической реакции горения водорода могут быть крайне разрушительными при тяжелых авариях на АЭС. Естественно, что вопрос о критериях воспламенения и развитии горения под контайнментом реакторного зала является одним из основных (далеко еще не решенных) вопросов, связанных с оценкой разрушительного действия взрыва водородно-воздушной смеси при тяжелых авариях на АЭС. Проблема заключается в том, что установление того или иного режима горения зависит от целого ряда частных условий, формируемых в окружающей среде в процессе развития аварии. Предсказать не только качественно, но и количественно эти условия крайне сложно, хотя бы потому, что заранее неизвестны многие детали поведения такой сложной системы, как разрушающийся реактор. Неопределенность в постановке задач развитого горения отражается на достоверности прогностических результатов. В этой ситуации актуальным является определение предельных характеристик горючей газовой смеси, обеспечивающих устойчивое ее воспламенение. К таким характеристикам относятся, прежде всего, нижний предел концентрации водорода в смеси и нижний предел температуры смеси, при которых происходит ее воспламенение. Вторая характеристика, однако, на практике менее значима, так как в условиях тяжелой аварии, как правило, всегда возникают локальные очаги высокой (превышающей температуру воспламенения) температуры. Например, в результате электрического пробоя, или передачи энергии от высокотемпературного расплава. При определении концентрационного предела, хотя состав атмосферы под контайнментом в условиях аварии и представляет сложную смесь, достаточно

ограничиться только водородно-воздушной смесью, так как другие возможные компоненты (водяной пар, углекислый газ и т. п.), как правило, только способствуют повышению нижнего предела воспламенения.

Наиболее жестким критерием возникновения горения является нижний предел экзотермической реакции, имеющий чисто химическую природу и определяемый термодинамическими условиями, при которых скорость зарождения и ветвления цепей равна скорости их обрыва [60]. Следующим критерием, преодоление которого необходимо для распространения горения горючей смеси, является равенство между временем индукции экзотермической реакции и характерным временем диссипации энергии в зоне энерговыделения. При заданных температуре и давлении этот предел воспламенения зависит от концентрации горючей компоненты.

Следует ожидать, что так как в предельно бедных смесях горение представляет собой слабо развитую экзотермическую реакцию с малым энерговыделением, это не может приводить непосредственно к интенсивным динамическим нагрузкам, разрушающим защитные системы (например, контайнмент при аварии на АЭС). Тем не менее, детальный анализ развития горения в водородно-воздушных смесях вблизи нижнего концентрационного предела воспламенения чрезвычайно важен, так как “тлеющее” вблизи предела пламя может стать источником интенсивного ускоряющегося пламени в случае изменения условий в окружающей среде (дополнительное выделение водорода в области горения, или достижение зоной горения области с большей концентрацией водорода и температурой).

Настоящая работа посвящена принципиальным для оценки водородной безопасности проблемам корректного расчета нижнего предела воспламенения и распространения горения из области поджига бедной водородно-воздушной смеси.

## 2.2. Понятие нижнего концентрационного предела воспламенения и его экспериментальное определение

Практическая важность нижнего концентрационного предела воспламенения для задач пожаро-взрывобезопасности очевидна. Однако само понятие “предел воспламенения” в имеющихся публикациях трактуется весьма широко: от локального возбуждения реакции окисления водорода в зоне поджига под действием стороннего энерговложения до установления режима устойчивого распространения пламени в горючей среде. В этой ситуации целесообразно за определение рассматриваемого критерия взять определение, приведенное в Государственном стандарте РФ (ГОСТ 31610.10—2012) [61]: “Нижний концентрационный предел распространения пламени (воспламенения) – минимальное содержание горючего вещества в однородной смеси с окислительной средой, при котором возможно распространение пламени по смеси на любое расстояние от источников зажигания”. Приняв такое определение, мы не ставили целью в данной работе, проанализировать, что авторы различных публикаций конкретно имеют в виду под понятием нижнего концентрационного предела воспламенения. Вместо этого мы попытаемся определить нижний концентрационный предел воспламенения водородно-воздушной смеси, соответствующий приведенной выше формулировке.

Закономерности горения бедной водородно-воздушной смеси были определены в основном экспериментально, причем значение нижнего концентрационного предела воспламенения было получено еще в 1952 году [62]. В этой работе нижний концентрационный предел воспламенения при нормальных условиях (температура свежей смеси  $T_0 = 300$  К, давление  $p_0 = 0,1$  МПа) равен  $C_{\min} = 4,1\%$  объема (мольной доли) водорода. Достаточно подробный анализ результатов систематических исследований горения вблизи нижнего концентрационного предела представлены в значительно более поздней работе [63]. Основные эксперименты проводились в сферической камере объема 120 л, а



основным индикатором распространения пламени являлось изменение со временем давления в камере. В такой постановке результаты имеют в определенной степени косвенный характер. Обработка полученных данных по давлению позволила заключить, что при 4% водорода воспламенение отсутствует, так как давление в камере поднималось всего на 0,002 атм в течение непродолжительного времени. При 6% водорода давление в объеме увеличивалось на 0,05 атм, причем изменение давления наблюдалось только на верхнем датчике, что можно трактовать как слабое горение, направленное снизу вверх. При концентрации водорода равном 8% пиковое давление в камере достигало 2 атм и распространялось вначале вверх и горизонтально, а затем и вниз. Когда концентрация водорода достигла 10%, пиковое давление в камере выросло до 3,2 атм, при этом пламя распространялось уже изотропно и наблюдалось полное сгорание смеси.

В настоящее время является общепринятым и приводится в фундаментальных монографиях и обзорах (например, [64,65]) значение нижнего концентрационного предела воспламенения, равное  $C_{\min} = 4\%$  водорода при нормальных условиях для свежей смеси. Представленная величина нижнего концентрационного предела является фактически некоторым принятым характерным значением. Как было показано выше на примере работы [63], результаты реальных физических измерений напрямую зависят от условий проведения экспериментов и отличаются от принятых 4%. Зависимость нижнего концентрационного предела от постановки экспериментов подтверждается и в официальном отчете МАГАТЭ [6]. Эксперименты, проводимые в больших объемах, дают несколько меньшее значение порога воспламенения [64]. Порог воспламенения уменьшается с ростом температуры и возрастает с ростом давления водородно-воздушной смеси [64]. В принципе, возможны и другие, еще не рассмотренные ситуации, приводящие к отклонениям нижнего порогового значения от принятых 4%.

В большинстве экспериментальных работ для интерпретации результатов, как правило, дополнительно проводились расчеты адиабатического равновесного

давления при постоянном объеме [60, 63, 65]. Совпадение измеренных и расчетных значений давления позволяло определить концентрационный предел, при котором горение захватывало весь объем камеры. В экспериментах [63] такое совпадение наблюдалось при концентрации водорода в 10% и выше. При меньших процентах водорода в смеси рассчитанные и измеренные значения давления значительно расходились. Этот результат достаточно очевиден, так как при концентрации водорода, меньшей полученного десятипроцентного предела, процесс, как показали эксперименты, не являлся равновесным. Для получения более детальной картины воспламенения водородно-воздушных смесей были проведены расчеты горения бедных смесей на основе полной системы уравнений газовой динамики горения, описанной в главе 1 данной работы.

### **2.3. Анализ нижнего концентрационного предела воспламенения в нульмерном приближении**

Нульмерное моделирование химического превращения при горении, подразумевающее решение системы дифференциальных уравнений химической кинетики с учетом изменения температуры за счет энерговыделения при протекании химических реакций, представляется наиболее простым методом оценки нижнего концентрационного предела воспламенения. Такое моделирование позволяет определить время индукции  $\tau_{ind}$  – ведущий параметр среди собственных характеристик горения, определяющих критерий воспламенения, при заданной температуре, концентрации и давлении, и характерное время развития экзотермической стадии реакции горения  $\tau_{reac}$ , также при заданных параметрах. В настоящей работе время индукции определялось как время, прошедшее от начала отсчета до достижения максимального значения концентрации радикала H, а время  $\tau_{reac}$  – как время от окончания стадии индукции до выхода на стационар профиля температуры.

Из сопоставления времени индукции и  $\tau_{\text{reac}}$  можно выделить два режима протекания химической реакции горения: при относительно низких температурах время индукции значительно и оно превышает основное время экзотермической стадии реакции, а при высоких температурах время индукции мало и составляет значения меньше времени  $\tau_{\text{reac}}$ . Переходное состояние протекания химической реакции между двумя режимами характеризуется равенством  $\tau_{\text{ind}}(T,C)$  и  $\tau_{\text{reac}}(T,C)$ , и можно определить условия его достижения: температуру (известную также как температура “кроссовера” или, согласно терминологии, принятой в монографии [64], как температура продленного второго предела воспламенения), концентрацию водорода и давление. Таким образом, температура и концентрация, при которых достигается равенство  $\tau_{\text{ind}}$  и  $\tau_{\text{reac}}$ , определяют нижний предел экзотермической реакции.

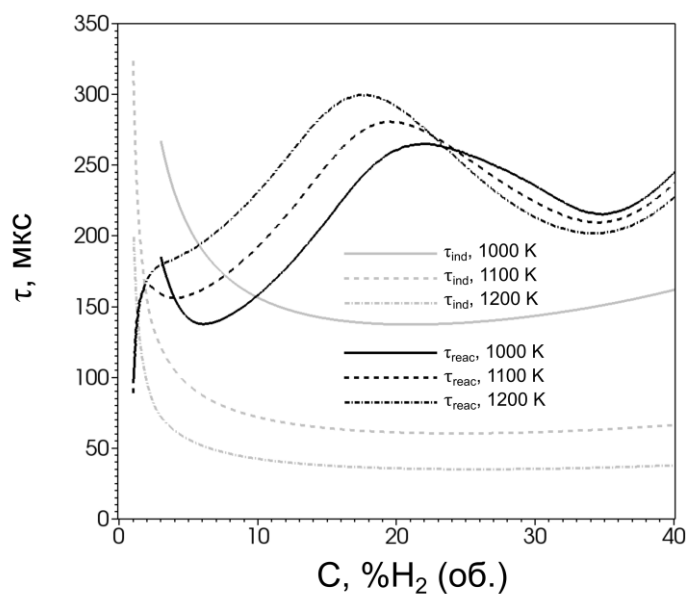


Рисунок 10. Время индукции и время экзотермической стадии реакции водородно-воздушной смеси в зависимости от концентрации водорода при различных значениях начальных температур. Расчет проведен с использованием кинетического механизма [32].

Поскольку в настоящей работе везде мы принимаем давление, равным атмосферному, то переходное состояние определяется как линия пересечения поверхности времени индукции и времени  $\tau_{\text{reac}}$ , задаваемых координатами

температуры  $T$  и концентрации водорода  $C$ . Такое переходное состояние протекания химической реакции, задаваемое некоторыми конкретными значениями температуры и концентрации водорода, можно рассматривать как нижний предел воспламенения водородно-воздушной смеси при заданном давлении в нульмерном приближении.

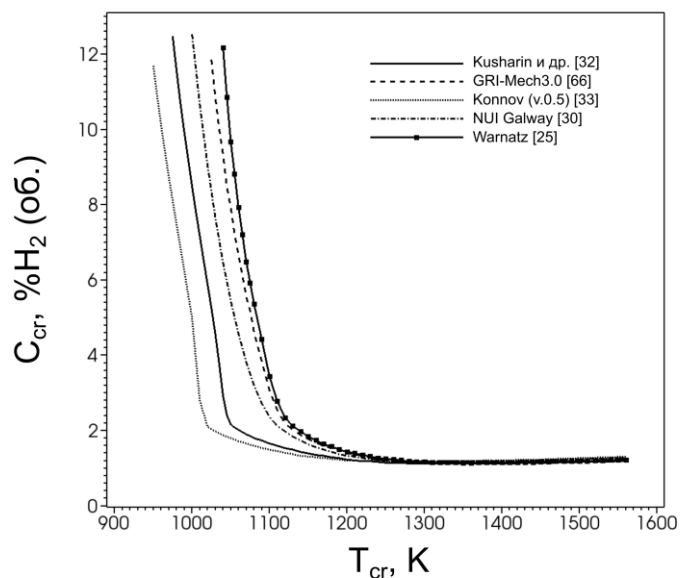


Рисунок 11. Температура и концентрация, соответствующие нижнему пределу экзотермической реакции, или состоянию “кроссовера”, рассчитанные с использованием различных кинетических механизмов [32,66,33,30,25].

На рисунке 10 представлены зависимости времени индукции и экзотермической стадии реакции  $\tau_{reac}$  от концентрации водорода при различных температурах. Точка пересечения двух кривых, соответствующих одному значению температуры, определяет состояние “кроссовера”. На рисунке 11 приведены определенные таким образом значения температуры  $T_{cr}$  и концентрации  $C_{cr}$  в точке “кроссовера”, рассчитанные с использованием различных кинетических механизмов [32,66,33,30,25]. Рисунок показывает, что при достаточно высоких температурах возможно воспламенение смеси с концентрацией водорода, составляющей около 1% (об.) (концентрационный предел воспламенения); при умеренных температурах воспламенения имеем резкий вертикальный ход кривых, показывающий, что почти при любой концентрации водорода смесь не может быть

воспламенена, если температура оказывается меньше определенного значения, лежащего в диапазоне 950 - 1050 К при расчете с использованием различных кинетических механизмов (температурный предел воспламенения).

Таким образом, оказывается, что концентрационный предел воспламенения (величина  $C_{cr}$ , к которой стремятся кривые при высоких температурах), найденный в ходе нульмерного моделирования горения, оказывается около 1% (об.) водорода, что можно считать заниженным значением по сравнению с неоднократно определенным в экспериментах значением 4% (об.) (например, [63]). Разумно предположить, что при подводе энергии, обеспечивающем достижение высоких температур, воспламенение происходит в условиях развития газодинамических процессов, развивающихся в результате подвода энергии и оказывающих влияние на развитие реакции горения в области подвода энергии. Для того, чтобы корректно определить значение нижнего концентрационного предела с учетом воздействия возмущений поля течений представляется рациональным провести дополнительный анализ с использованием одномерных расчетов, результаты которого приводятся ниже.

#### **2.4. Одномерная постановка задачи об определении нижнего концентрационного предела воспламенения**

В большинстве случаев при численном моделировании процессов горения в первую очередь анализируют качественные особенности динамики фронта пламени. Однако, когда в тему исследований входит анализ критериальных оценок, количественная точность результатов становится так же важна, как и корректность качественного описания исследуемых процессов. Для моделирования процесса горения при низких концентрациях горючего в многомерных постановках оказывается ключевым использование детальных механизмов химической кинетики, поскольку реакции, обеспечивающие зарождение и ветвление цепей,

являются эндотермическими или изотермическими, и, таким образом, на этих стадиях отсутствует выделение энергии в среде и, следовательно, не возникают газодинамические возмущения. В результате расчетная скорость развития воспламенения при учете цепного механизма протекания реакции значительно меньше по сравнению с той, что дают одношаговые модели. Особенно это различие велико на начальной стадии горения при температурах ниже так называемого “кроссовера” или продленного второго предела воспламенения, когда скорость роста разветвленных цепей равна скорости их обрыва, что показывает рисунок 11. Таким образом, численное моделирование процессов воспламенения и определение нижнего концентрационного предела горения водородно-воздушной смеси требует использования более детальных моделей химической кинетики. Кроме того, для получения количественных оценок пределов воспламенения необходимо не только использовать систему химических уравнений, описывающую ход цепных реакций, но и провести сопоставление наиболее распространенных моделей химической кинетики с целью оценки погрешностей и выбора моделей, что представлено в разделе 1.3 настоящей диссертации.

Из сопоставления времен индукции, представленных на рисунке 4 (а), а также кривых, соответствующих условиям по температуре и концентрации для продленного второго предела воспламенения, показанных на рисунке 11, в качестве кинетического механизма для последующего одномерного моделирования была выбрана схема, использованная Кушариным и др. в работе [32]. С точки зрения результатов рисунка 11 эта схема была выбрана как обеспечивающая средний результат по определению критерия воспламенения в области умеренных температур.

Выше были приведены результаты физических экспериментов по определению нижнего концентрационного предела воспламенения водородно-воздушной смеси, а также оценка величины в нульмерном приближении. Определим теперь эту характеристику методами вычислительного эксперимента в одномерной постановке. В этом случае задачу можно идеализировать так, чтобы в явном виде определить роль отдельных ведущих факторов. Главным фактором,

определяющим порог воспламенения, является время индукции горючей смеси. Однако поджиг смеси требует дополнительного стороннего энергозвложения. Относительный вклад этого энергозвложения в энергетику и динамику среды для бедных смесей может быть немал, что способно исказить значение порога воспламенения. Для исключения сторонних влияний, задачу о воспламенении водородно-воздушной смеси рассмотрим в постановке, аналогичной классической задаче Я.Б. Зельдовича о развитии спонтанной волны воспламенения на градиенте времени индукции [67] (в нашем случае на градиенте концентрации водорода, поскольку, как показывает рисунок 10, время индукции монотонно зависит от концентрации). В зависимости от объемной доли водорода в смеси инициирование горения, т.е. накопление необходимого количества радикалов с их дальнейшей рекомбинацией и выделением энергии, происходит на разных временных масштабах. Таким образом, при заданной постоянной температуре, при которой ожидается воспламенение стехиометрической смеси, можно построить пространственно неоднородное распределение (градиент) концентрации водорода (что в данном случае эквивалентно градиенту времени индукции). Согласно механизму Зельдовича на фоне такого неравномерного распределения будет развиваться спонтанная волна горения, распространяющаяся из точки с минимальным временем индукции в направлении нарастания времени индукции. Механизм распространения такой волны обусловлен исключительно кинетикой протекания цепной реакции воспламенения. В точке градиента, где преобладающей становится роль газодинамических механизмов, режим распространения волны экзотермической реакции сменяется режимом распространения тепловой волны за счет теплопроводности и диффузии на фоне фактически “замороженной кинетики”. В классической постановке о температурном градиенте [68] это определялось критерием на скорость спонтанной волны реакции. Если  $U_{sp} < U_f$ , спонтанная волна медленнее волны горения, распространяющейся с нормальной скоростью  $U_f$ , так что диффузионные процессы протекают быстрее, а следовательно воспламенение не реализуется.

Постановка задачи, рассматриваемой в настоящей работе, состояла в следующем. В начальный момент времени в одномерной области размером  $L$  однородным образом задавалась температура и давление (1 атм). Для разных расчетов температура  $T_{initial}$  составляла 950 К, 970 К, 1000 К, 1050 К, 1100 К, 1200 К. Концентрация водородно-воздушной смеси задавалась в виде спадающего градиента концентрации водорода: максимальная концентрация задавалась на левой границе области, минимальная (нулевая) – на правом. Значение максимальной концентрации определялось (рис. 12), исходя из заданной температуры и зависимости времени индукции от концентрации, аналогичной представленной на рисунке 10. Так, для 950 К максимальная концентрация составляла 16,2% (об.), а для 1200 К – 25,8%.

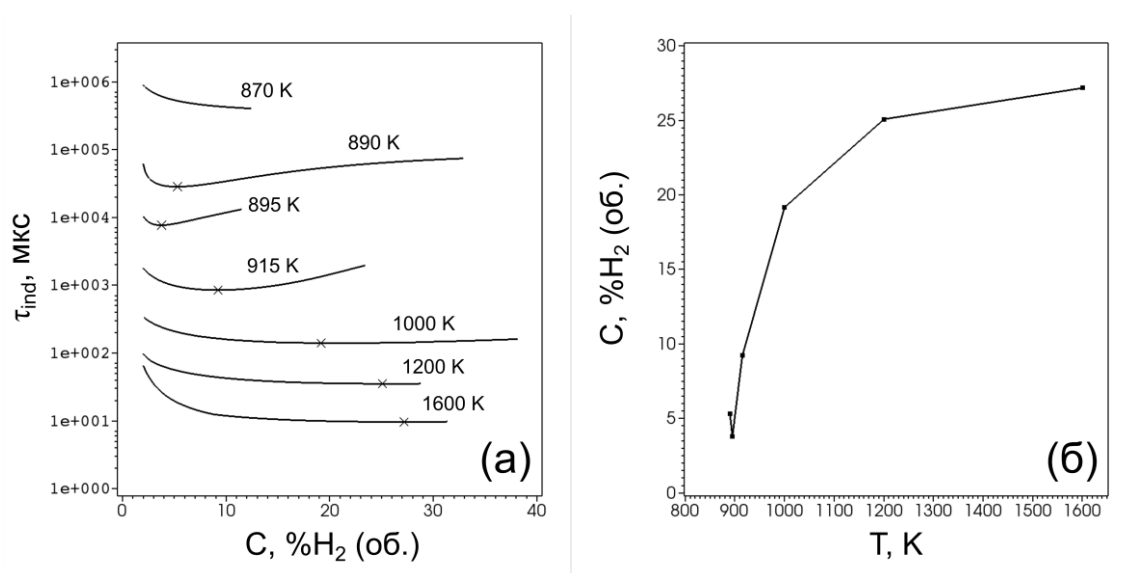


Рисунок 12. (а) Зависимости времени индукции от концентрации водорода в его смеси с воздухом при различных начальных температурах. Символами отмечены точки, соответствующие минимумам времени индукции. (б) Концентрация водорода, обеспечивающая минимум времени индукции, в зависимости от начальной задаваемой температуры.

Размер одномерной области  $L$  определялся с учетом задаваемой температуры (и концентрации), исходя из следующего соотношения:  $L = a_{max} \cdot (\tau_{ind})_{min}$ , где  $a_{max}$  – максимальное значение скорости звука вдоль градиента концентрации, а  $(\tau_{ind})_{min}$  – минимальное время индукции. Такое условие определяет равенство характерного



времени индукции  $(\tau_{ind})_{min}$  при заданной температуре и времени диссипации энергии, происходящей с характерной скоростью  $a_{max}$ , и ограничивает таким образом время диссипации, поскольку при больших временах диссипации, наблюдался бы режим с заведомо превалирующим влиянием диссипативных процессов на воспламенение, тогда как это выходит за пределы области устойчивого воспламенения. Следовательно, анализ таких режимов не дал бы никакой информации для точного количественного определения нижнего концентрационного предела воспламенения. Для 950 К длина  $L$  составила 0,187 м, а для 1200 К – 0,027 м. В качестве граничных условий на левом конце области задавалась жесткая стенка, правый конец области был открыт. Расчеты проводились на однородной сетке с пространственным шагом 20 мкм. Шаг по времени составлял 0,01 мкс.

## **2.5. Анализ нижнего концентрационного предела воспламенения в одномерном приближении**

Рассмотрим теперь результаты моделирования, выполненного в описанной выше постановке. На рисунке 13 представлены профили концентрации (мольной или объемной доли)  $H_2$  для отдельных моментов времени, через промежутки времени в 2,5 мкс, для расчета, проведенного при температуре 1000 К. Согласно данным, представленным на рисунке 13 в момент времени  $t = (\tau_{ind})_{min}$  (137,2 мкс для заданной температуры 1000 К) происходит самовоспламенение смеси у левой границы области. В соседнем слое, занятом смесью с меньшим содержанием водорода, задержка воспламенения больше, в связи с этим воспламенение в области  $x > 0$  происходит с соответствующей задержкой и так далее. В результате на фоне градиента концентрации формируется спонтанная волна горения, распространяющаяся в направлении области с большим временем индукции со скоростью  $U_{sp} = (d\tau_{ind}/dx)^{-1}$ . Выделение энергии за счет химического превращения

во фронте волны горения формирует температурную волну, движимую волной реакции. На фоне этого в результате расширения продуктов горения за фронтом волны реакции формируется волна сжатия.

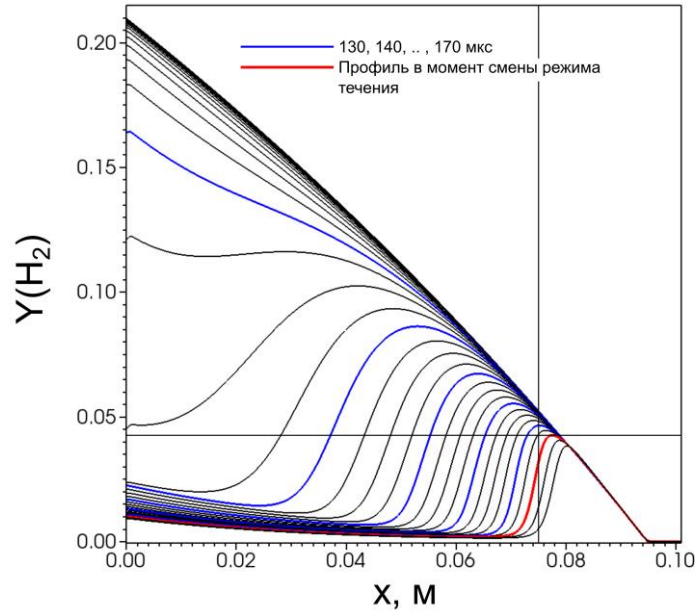


Рисунок 13. Профили концентрации  $H_2$  через каждые 2,5 мкс от начала отсчета. Выделенный профиль соответствует моменту смены режима горения. Расчет проведен при начальной температуре 1000 К.

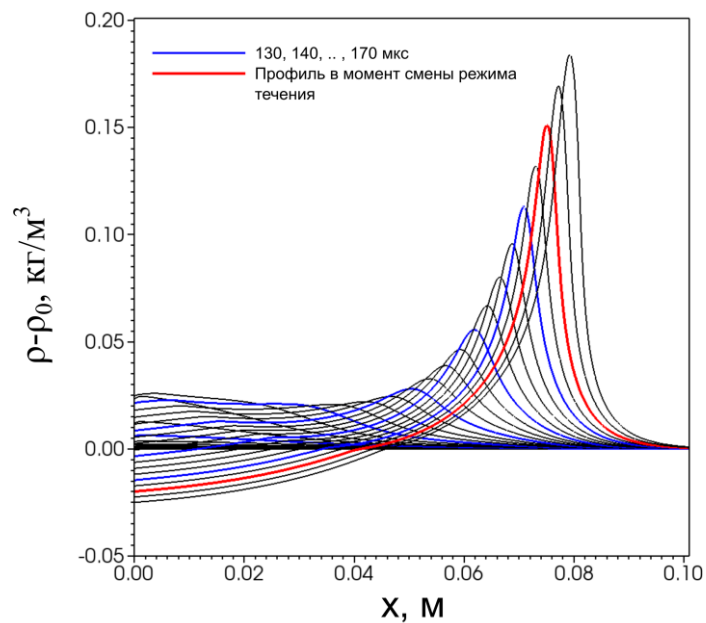


Рисунок 14. Профили  $(\rho - \rho_0)$ , где  $\rho$  – плотность смеси в текущий момент времени,  $\rho_0$  – плотность смеси в начальном состоянии.

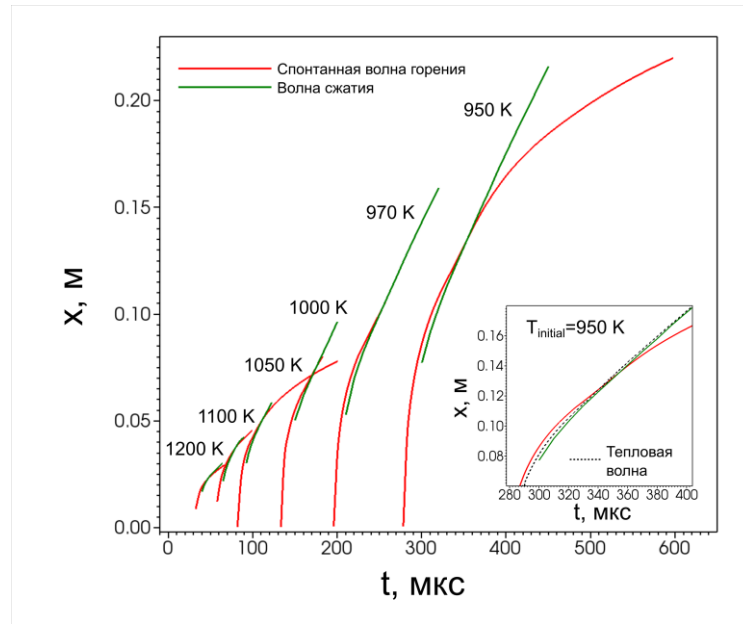


Рисунок 15. Траектории волны горения, тепловой волны и волны сжатия для расчетов при различных начальных температурах.

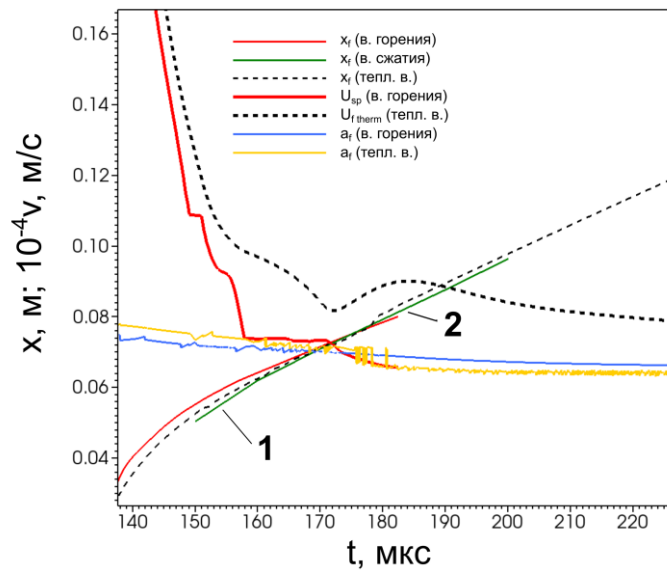


Рисунок 16. Траектории и скорости волны горения, тепловой волны и волны сжатия; значения скорости звука на фронте волны горения и тепловой волны. Цифры соответствуют разным режимам течения. (Начальная температура 1000 К.)

На рисунках 13 и 14 показаны профили концентрации водорода в смеси и плотности смеси в последовательные моменты времени. Здесь стоит отметить, что скорость спонтанной волны горения, определяемая как  $U_{sp} = (d\tau_{ind}/dx)^{-1}$ , в общем случае не ограничена сверху и может принимать любые значения. Так, в

рассматриваемом случае в момент инициирования реакции на левом конце расчетной области скорость спонтанной волны горения составляет величину порядка 3500 м/с (рис. 15), тогда как скорость звука в холодной смеси составляет величину порядка 600 м/с, а в области продуктов горения – порядка 900 м/с. В связи с этим на ранних стадиях развития процесса наблюдается отставание волны сжатия от фронта спонтанной волны горения (рис. 15).

Рассмотрим развитие процесса более детально. Анализ траекторий фронта реакции, тепловой волны и волны сжатия, представленных на рисунках 15, 16 указывает на существование двух различных сменяющих друг друга режимов течения (рис. 15). В расчетах положение фронта реакции (фронта спонтанной волны горения,  $x_{\text{comb}}$ ) определялось как координата  $x$ , в которой градиент энерговыделения принимает максимальное значение по абсолютной величине, положение фронта тепловой волны ( $x_{\text{temp}}$ ) – аналогично, по максимальному градиенту температуры, положение фронта волны сжатия ( $x_{\text{compr}}$ ) – по положению максимального значения возмущения плотности на фоне начального градиента (рис. 14). Как можно видеть из представленных на рисунках 13 и 16 данных по мере распространения волны реакции в область обедненных составов водородно-воздушной смеси ее скорость падает. Это можно объяснить тем, что время индукции в области обедненных составов имеет весьма острую зависимость от содержания водорода (рисунок 10). При этом скорость спонтанной волны реакции согласно определению можно выразить через зависимость времени индукции от концентрации водорода как:  $U_{\text{sp}} = (d\tau_{\text{ind}}/dC \cdot dC/dx)^{-1}$ , где величина  $dC/dx$  определяет наклон линейного градиента концентрации водорода. Согласно указанной зависимости при остром возрастании времени индукции с уменьшением концентрации водорода должно наблюдаться острое снижение скорости спонтанной волны горения. Смена режима развития процесса происходит, когда волна сжатия, распространяющаяся со скоростью звука вслед за фронтом волны реакции, опережает распространяющуюся с торможением спонтанную волну (рис. 16). В момент времени, когда  $x_{\text{compr}} = x_{\text{comb}}$ , скорость волны горения становится

почти постоянной, а затем падает ниже значения локальной скорости звука (скорости звука на фронте реакции).

Режим 1 на рисунке 16 соответствует распространению спонтанной волны реакции вдоль градиента концентрации. В этом режиме динамика температурной волны и, как следствие, образовавшейся волны сжатия, полностью определяется динамикой волны реакции. Температурный фронт и фронт волны сжатия являются следствием выделения энергии в зоне реакции и непосредственно связаны с ней. Режим 2 соответствует перераспределению температуры и массы в пространстве за отошедшей вперед волной сжатия, за счет газодинамических процессов, теплопроводности и диффузии. Энерговыделение здесь имеет место только в результате протекания обратных реакций в продуктах горения. Соответственно перемещение в пространстве границы раздела продуктов горения и воздуха происходит за счет гидродинамического переноса массы, что и определяет скорость “фронта реакции” при установлении режима 2. В этой области наблюдается значительно более быстрое перемещение температурной волны, определяемое движением волны сжатия, по сравнению с волной реакции, скорость которой быстро замедляется. Смена режима иллюстрирует смену ведущего механизма - смену кинетического спонтанного механизма на диффузионный. Факт установления промежуточного значения скорости волны реакции на сверхзвуковом уровне (рис. 16) в области перехода от режима 1 к режиму 2 определяется действием волны сжатия на характеристики горения. Выход волны сжатия перед фронтом реакции определяет локальное увеличение плотности потока горючего во фронт, что поддерживает реакцию на установившемся ранее уровне в течение некоторого времени перед переходом на стадию затухания волны реакции в диффузионном режиме.

Определим по профилю концентрации (рис. 13) в момент смены режима значение концентрации  $N_2$  перед фронтом волны реакции. При задании начальной температуры 1000 К, моменту времени 174,94 мкс на рис. 15 соответствует точка  $x_{comb} = 0,075$  м. Из рис. 13 видно, что, когда фронт реакции располагается в окрестности точки 0,075 м (вертикальная тонкая линия), концентрация перед

фронтом в максимуме составляет величину  $\sim 4\%$ . Таким образом, сопоставляя ход процесса, представленный на рис. 13 и 15, можно заключить, что при достижении в среде концентрации водорода порядка  $4\%$  и менее спонтанная волна вырождается. Это говорит о том, что в заданных условиях для концентраций водорода ниже  $4\%$  воспламенения нет, что соответствует известным ранее данным [63-65]. Принципиальным отличием от предыдущих работ, однако, является то, что в принятом в настоящей работе подходе при расчете воспламенения отсутствуют какие-либо сторонние воздействия, гидродинамические и диссипативные факторы (до момента вырождения волны реакции волна сжатия отстает от волны реакции и не влияет на нее). Фактически найденный при таком подходе концентрационный предел определяется только ситуацией, когда концентрация одной из компонент горючей смеси (водорода) становится недостаточной, чтобы поддерживать протекание экзотермической химической реакции и поддержания за счет этого тепловой волны. Таким образом, полученное значение в  $4\%$  мольной доли водорода в водородно-воздушной смеси, по-видимому, можно считать фундаментальным нижним концентрационным пределом возникновения экзотермической реакции или локального горения, который соответствует заданной температуре в области энергосжигания.

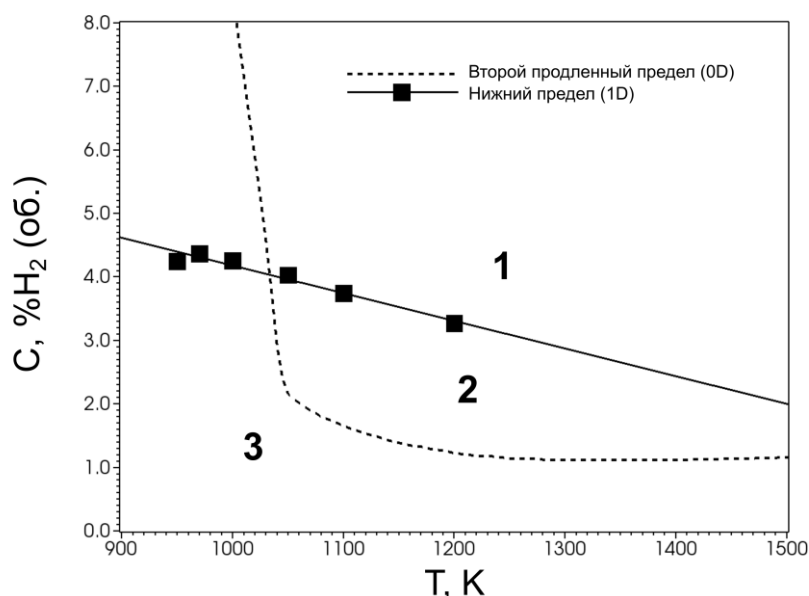


Рисунок 17. Нижний концентрационный предел, определенный в рамках нульмерного и одномерного приближений, в зависимости от температуры поджига.

Проведенные дополнительные расчеты при различных температурах позволили получить более полное представление о зависимости нижнего концентрационного предела возникновения локального горения водородно-воздушной смеси от температуры поджига, представленной на рис. 17. Все определенные значения лежат близко к 4%, но при повышении температуры данное значение падает до 3,1%. Естественно, возникающие в реальных условиях геометрические (размерные) и диссипативные факторы могут повышать величину этого предела, что и отражается в приведенных ранее экспериментальных данных.

Представленные на рисунке 17 результаты определения нижнего концентрационного предела в нульмерной и одномерной постановках позволяют сделать следующие выводы. Область над кривой  $T_{cr}-C_{cr}$ , полученной в нульмерных расчетах, соответствует условиям возникновения воспламенения, при этом в области достаточных для воспламенения температур  $C_{cr} \sim 1,0\%$ . Таким образом, не представляется возможным инициировать воспламенение смесей с меньшим содержанием водорода. Область же, заключенную на рис. 17 между полученным в нульмерном приближении значением предела ( $\sim 1\%$ ) и полученным здесь значением ( $\sim 3,1 - 4,0\%$ ) (область 2), следует рассматривать как область газодинамической неустойчивости воспламенения, связанную с развитием газодинамических процессов в области подвода энергии. Таким образом, область, ограниченная указанными кривыми, соответствует условиям реализации режимов воспламенения, чувствительным к газодинамическим возмущениям на стадии подвода энергии и воспламенения.

## 2.6. Воспламенение в смеси однородного и неоднородного составов

Представленные в предыдущем разделе расчеты нижнего концентрационного предела подтвердили устойчивое возникновение экзотермической реакции в смесях, начиная с концентрации водорода в 4%.

Согласно результатам нульмерного численного моделирования в смесях с содержанием водорода, превышающим определенное критическое значение, в области подвода энергии имеет место дополнительное увеличение температуры по отношению к начальной (рисунок 18). Однако, неочевидным является ответ на вопрос о возможности распространения устойчивого фронта горения по смеси с таким энерговыделением. В связи с этим проведено дополнительное исследование о распространении волн горения от области воспламенения околопредельных составов водородно-воздушных смесей.

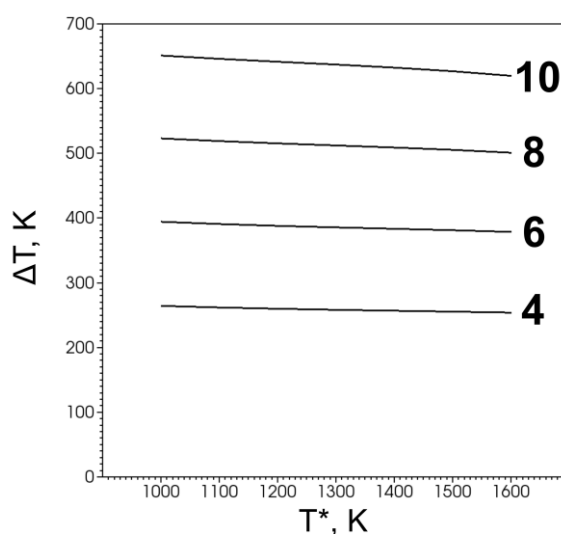


Рисунок 18. Изменение температуры за счет инициирования реакции горения в зависимости от температуры поджига  $T^*$  для смесей разных составов. Цифрами отмечено процентное по объему содержание водорода в его смеси с воздухом.

Для анализа процессов распространения пламени от области локального воспламенения расчеты проводились в традиционной одномерной постановке. Инициирование горения осуществлялось путем начального энерговложения в ограниченной области однородной смеси заданного состава. Воспламенение реализовывалось в равномерно прогретом до 1500 К слое шириной 2 см. Параметры очага воспламенения выбирались заведомо обеспечивающими устойчивое воспламенение и в то же время достаточную энергию для поддержания локального горения в течение конечного промежутка времени. Однако, полученное в расчетах дополнительное повышение температуры в области энерговложения, не означает,



что такое инициирование непосредственно ведет к формированию самоподдерживающейся волны горения, распространяющейся по смеси заданного состава.

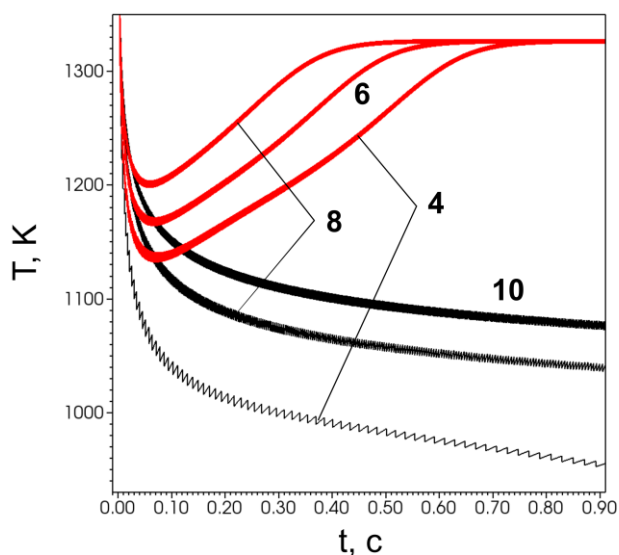


Рисунок 19. Эволюция температуры за фронтом тепловой волны в случае равномерного распределения концентрации (черные линии) и за фронтом волны реакции (красные линии). Числа обозначают соответствующие расчетам концентрации водорода.

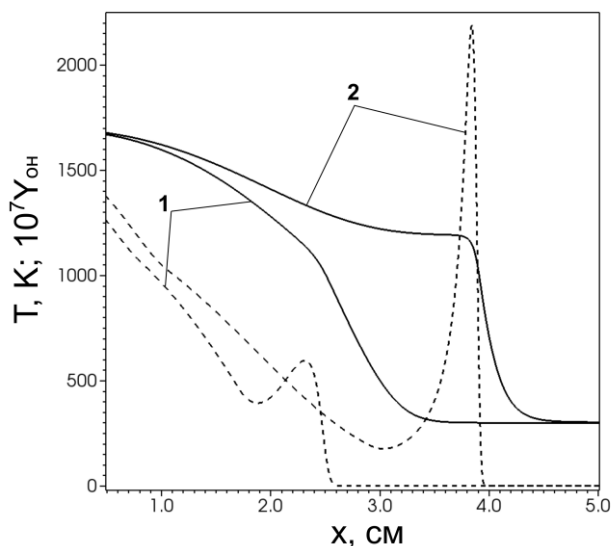


Рисунок 20. Профили температуры (сплошные линии) и концентрации радикала ОН (штриховые), сформированные в ходе распространения волн теплопроводности и диффузии в однородной среде с концентрацией водорода 4% (1) и в неоднородной среде с распределением концентрации от 4 до 15% (2).

Обычно для водородно-воздушной смеси при нормальных условиях предел устойчивого горения определяется как величина в окрестности 10% содержания водорода в смеси [64]. Расчеты поджига однородных (равномерно перемешанных) смесей, проведенные с меньшим содержанием водорода показали, что в этом случае устойчивая волна дефлаграционного горения не формируется, а возникающее на начальной стадии горение внутри очага воспламенения постепенно затухает. Согласно данным о развитии горения в ультрабедных составах в условиях микрогравитации [69] известно, что в таких смесях возможно поддержание горения внутри очагов воспламенения в течении конечного промежутка времени за счет диффузии водорода внутрь очага. Однако, такой механизм горения, предсказанный впервые Я.Б. Зельдовичем [1], не обеспечивает распространение нормальной волны горения по смеси. Тем не менее, температурная волна в этом случае за счет теплопроводности распространяется из области очага. При этом продукты горения, образующиеся в результате химической реакции в этой области, выносятся из нее волной диффузии. Временной ход температуры на фронте тепловой волны для равномерно перемешанных смесей представлен на рисунке 19 черными линиями. На рисунке 20 цифрой "1" показаны кривые, распределения в пространстве температуры и концентрации радикала ОН для однородной смеси с содержанием водорода 4%. Для смесей с 8% и 10% кривые температуры и концентрации качественно совпадают с приведенными на рис. 20, но смещены на тот же момент времени по направлению распространения процесса. Это естественно, так как из рис. 18 видно, что с ростом концентрации водорода растет и энерговыделение за счет химической реакции, увеличивая тем самым скорость тепло-массопереноса. Ход рассчитанных кривых на рис. 20 показывает, что с течением времени в среде с концентрацией водорода 4% не создаются условия, необходимые для поддержания горения за счет дефлаграционного механизма. В результате энерговыделение в смеси весьма мало, и энергия, локализованная на начальной стадии процесса в области поджига, диссипирует со временем, и монотонно спадает от точки энерговложения в пространстве.

Формирование устойчивой волны горения и установление самоподдерживающегося режима дефлаграционного распространения пламени наблюдалось только в расчете горения смеси с ~ 10% мольной долей водорода. Таким образом, на основе проведенной серии расчетов за нижний концентрационный предел воспламенения водородно-воздушной смеси, понимаемый в соответствии с определением Государственного стандарта [61], следует принять 10% содержания водорода в смеси. В то же время концентрация водорода, равная 4%, хотя и является порогом устойчивого возбуждения реакции, не создает условия, необходимые для распространения пламени, и тем самым лежит ниже порога воспламенения. Принципиальным, однако, является то, что между полученными пороговыми значениями концентрации, как в экспериментах, так и в проведенных расчетах, горение также наблюдается, хотя и носит отличный от классического горения характер. Как показали недавние исследования в этой области [70] в условиях Земной гравитации очаги воспламенения могут самоподдерживаемо распространяться в восходящих конвективных течениях. Это является эффективным каналом передачи энергии и может послужить причиной возгорания устойчиво горящих смесей в других областях помещения при естественной неоднородности поля концентраций в объеме. Таким образом, для задач пожаро-взрывобезопасности в этом случае представляется целесообразным за предел воспламенения принять нижнее пороговое значение концентрации в 4%.

Для анализа воспламенения смеси в среде с неоднородной концентрацией водорода серия расчетов была проведена в следующей постановке. Область начального энерговложения, как и прежде, имела ширину 2 см и температуру 1500 К. Концентрация водорода в этой области задавалась в интервале от 4% до 8% и считалась однородной. На границе области задавался линейный рост концентрации, в результате чего концентрация водорода возрастала до 15% на пространственном масштабе в 1 см. Результаты расчетов представлены на рисунках 19 (красные линии) и 20 (отмечено цифрой "2"). Видно, что во всех рассмотренных вариантах в ходе развития процесса формируется самоподдерживающийся режим распространения пламени. Наблюдается рост

температуры и выход ее на уровень, соответствующий температуре продуктов горения в 15% смеси водорода с воздухом. Более детальный анализ перехода к стационарному режиму горения на градиенте нарастающей концентрации показывает, что, как видно из кривых на рисунке 19, процесс проходит через несколько стадий. Тепловая волна распространяется из области энерговложения вдоль градиента концентрации из области наиболее бедной смеси в область менее бедной смеси. Далее в области нарастания концентрации водорода до 10-11% наблюдаются ускорение тепловой волны и перестройка профиля температуры, связанные со стартом интенсивных химических реакций во фронте тепловой волны. В результате этого формируется устойчивая волна горения, в которой волна реакции и тепловая волна двигаются совместно в виде самоподдерживающегося комплекса. Таким образом, в случаях старта тепловой волны из области с содержанием водорода менее 8% наблюдается три характерных стадии: 1) распределение тепла в слабо реагирующей среде, 2) формирование устойчивого режима горения, 3) распространение устойчивой волны горения в смеси. Факт формирования в конечном итоге устойчивой волны горения, в свою очередь, определяет возможность ее ускорения и установления наиболее опасных режимов с формированием ударных и детонационных волн.

При подводе энергии в области 8-11% концентрации водорода воспламенение непосредственно рождает волну дефлаграционного горения.

Заметим, что задача о распространении тепловой волны вдоль градиента концентрации позволяет визуализировать пределы существования и устойчивости волн горения, так как эволюция профиля тепловой волны (рис. 19) полностью определяется особенностями воспламенения в смесях различного состава.

## 2.7. Основные результаты

В проведенном исследовании определены условия по концентрации водорода и температуре, соответствующие двум режимам воспламенения: устойчивому и неустойчивому по отношению к газодинамическим возмущениям.

Результаты проведенных в этой работе вычислительных экспериментов показали, что 4% молярная доля водорода определяет нижний предел устойчивого развития экзотермической реакции окисления водорода в водородно-воздушной смеси при нормальных условиях и температуре поджига порядка 1000 К. Однако такая концентрация не способна обеспечить формирование самоподдерживаемой волны реакции и, следовательно, не является по определению нижним пределом воспламенения. Реакция в этом случае затухает при удалении от области поджига. Самоподдерживаемое устойчивое распространение пламени было получено только с достижением концентрацией водорода величины около 10%.

Полученные результаты близки к описанным в обзоре [6]. Приведенные критерии, однако, играют роль только для концентрационно однородных смесей. При наличии неравномерного в объеме распределения концентрации инициирование реакции в области, заполненной смесью с концентрацией водорода ниже предела воспламенения, может тем не менее привести к инициированию волны горения в более богатой смеси, что обеспечивает воспламенение, как это показано на примере, приведенном в разделе 2.6.

### **Глава 3. Пределы воспламенения водорода при его истечении под высоким давлением через раскрывающуюся диафрагму**

В настоящей главе диссертации представлены результаты численного анализа механизма самовоспламенения водорода при его истечении в канал, заполненный воздухом, через раскрывающуюся диафрагму. В основу работы были положены экспериментальные исследования, выполненные ранее в ОИВТ РАН. При этом анализ сосредоточен в первую очередь на режимах самовоспламенения вблизи критической для выбранной геометрии канала величины выталкивающего водорода давления (60 атм). Посредством численного моделирования продемонстрировано формирование двух типов очагов воспламенения, наблюдаемых экспериментально, и описаны механизмы их зарождения и развития. Процессы истечения водорода с его последующим воспламенением рассмотрены для различных времен раскрытия диафрагмы, определяющих скорость подачи водорода. Полученная зависимость возникновения самовоспламенения от времени раскрытия удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными, на основе которых проводилось моделирование. Рассмотрены локальные условия по температуре и концентрации в области возникновения самовоспламенения. Результаты исследований опубликованы в работе [III].

#### **3.1. Обзор работ по самовоспламенению водорода при его истечении под высоким давлением**

Постоянно расширяющаяся тенденция использования водорода в качестве топлива для новых перспективных двигателей или в качестве добавок к углеводородным топливам сделала актуальным вопрос о безопасном хранении водорода, например, в баллонах высокого давления. Опасность возникает тогда,

когда при аварийной разгерметизации баллона, водород струей вырывается в атмосферу, и перемешивается с воздухом. Еще в 1972 году Wolanski P. и Wojcicki S. [7] показали, что интенсивность ударной волны, формирующейся перед струей водорода, распространяющейся в среде кислорода, воздуха или синтез газа, может быть достаточной для достижения на контактной границе водорода с окружающим газом температуры, близкой к температуре воспламенения перемешанной горючей смеси. В дальнейшем методами математического моделирования [8,14,71,72] и экспериментально [73-76] было показано, что при истечении струи водорода из камеры высокого давления в воздух при определенном диаметре выпускного отверстия (начальном диаметре струи) и определенном давлении сжатого водорода возникает самовозгорание перемешанной на контактной границе водородно-воздушной смеси. В последующих работах [9-11,15] был проведен детальный анализ исследуемых процессов, подтвердивший результаты первых исследований и предложенный в них механизм самовозгорания. Механизм самовозгорания струи водорода, выбрасываемой под высоким давлением в открытую атмосферу, в первом приближении достаточно прост [7,71]. Ударная волна, возникающая за счет истечения сжатого водорода и движущаяся перед контактной поверхностью, нагревает окислитель (воздух), и далее за счет диффузионного и газодинамического перемешивания водорода и нагретого до достаточной температуры окислителя вблизи контактной поверхности имеет место воспламенение. В наиболее близких к условиям лабораторных экспериментов ситуациях, когда водород из камеры высокого давления истекает в канал, заполненный воздухом при значительно меньшем (как правило нормальном) давлении, существенную роль в перемешивании и воспламенении водородно-воздушной смеси начинает играть переотражение от стенок канала ударных волн, генерируемых струей сжатого водорода, и их взаимодействие с пограничным слоем [9-11,15,72-76]. При этом, хотя общая картина процесса вполне понятна, многие детали воспламенения, чрезвычайно важные для выработки критериев безопасного хранения водорода, требуют дальнейшего изучения. Так, требует дальнейшего более детального анализа влияние на самовоспламенение смеси диаметра струи,

геометрии канала, скорости раскрытия диафрагмы, а также давления в камере (баллоне) высокого давления. При этом, хотя влиянию давления, как ведущего фактора, определяющего процесс возгорания водорода, посвящено большое количество работ, практически все они ограничиваются достаточно высокими начальными давлениями в запускающей камере. В то же самое время не менее важно определение критической величины давления в баллоне, при котором аварийный выброс водорода при любых диаметрах отверстия не приводит к самовоспламенению смеси. Таким образом, весьма актуальным является анализ возможности самовоспламенения при относительно низких начальных давлениях газа.

В работе [9] представлена связь между давлением в камере высокого давления и турбулизацией среды, перемешиванием и воспламенением водородно-воздушной смеси в камере низкого давления (квадратного сечения  $10 \times 10$  мм длиной 300 мм), полученная на основании обработки экспериментальных данных в широком диапазоне давлений. Согласно [9], при начальном давлении водорода в 6,5 МПа наблюдается образование зоны смешения водорода и воздуха в области пограничного слоя, но зажигание смеси отсутствует. При начальном давлении водорода в интервале от 7,5 МПа до 9,0 МПа наблюдается самовоспламенение перемешанной смеси в области пограничного слоя на краю зоны смешения. При начальном давлении в 9,0 МПа и выше воспламенение возникает также в области пограничного слоя на краю зоны смешения и далее охватывает практически всю эту зону. Таким образом, из результатов работы [9] выстраивается вполне физически обоснованная картина самовоспламенения струи сжатого водорода, истекающей в канал, заполненный воздухом при значительно более низком (нормальном) давлении. Согласно этой картине за лидирующей ударной волной формируется турбулизованная зона смешения холодного водорода с воздухом, нагретым ударной волной. В случае, если температура в этой зоне оказывается достаточной для того, чтобы время индукции экзотермической реакции оставалось меньше времени рассеяния энергии и диффузии компонентов смеси, возникает возгорание смеси, при этом область возгорания будет тем ближе к центру струи,



чем будет меньше время индукции, или, что то же, чем будет больше интенсивность ударной волны, нагревающей газ в зоне смешения. В то же время, если начальное давление водорода оказывается недостаточным для того, чтобы при температуре перемешанной смеси время индукции было меньше времени диссипации энергии, самовоспламенение в среде не возникает. Примерно такая же интерпретация экспериментальных данных представлена в работе [11]. Самовоспламенение в этой работе наблюдалось уже при давлениях близких к 5,0 МПа. Длина канала в этой работе составляла 240 – 360 мм, а его диаметр был выбран равным 15 мм.

Очевидно, что количественная оценка нижнего предела давления, при котором не происходит самовоспламенение сжатого водорода, и определение всех факторов, от которых зависит этот предел, крайне важны для выработки критериев безопасного хранения водорода. При этом расхождения в определении давлений, при которых наступает отсутствие самовоспламенения, требует дополнительного детального анализа. В настоящей работе рассмотрим ситуацию, исследованную экспериментально в [12], когда начальное давление в камере высокого давления водорода лежит в интервале 5,0 – 6,0 МПа, а длина канала 80 мм, что меньше, чем приведено в работе [9].

### **3.2. Постановка задачи**

Математическое моделирование процессов самовоспламенения водорода проводилось согласно с условиями соответствующих экспериментов [12]. Рассмотрение проводилось в цилиндрической системе координат в приближении аксиальной симметрии. В начальный момент времени водород находился в камере высокого давления (КВД), отгороженной диафрагмой от канала низкого давления (КНД), заполненного воздухом при нормальных условиях (давление – 0,1 МПа, температура – 300 К). После открытия диафрагмы в КНД формируются вызванные

распадом разрыва на контактной границе водород-воздух течения, которые при определенных значениях таких характеристик системы, как начальное давление в КВД, время раскрытия диафрагмы, а также радиус и длина КНД, приводят к самовоспламенению струи истекающего водорода. Изучение роли первых двух из указанных факторов в возникновении самовоспламенения водорода является темой настоящего исследования. Динамика процесса прослеживалась в трубе (канале) радиусом 9 мм и длиной 180 мм, из которых 100 мм – длина КВД и 80 мм – длина КНД, как это показано на рисунке 21. Выбранный при расчетах радиус КНД совпадал с радиусом КВД установки, используемой в экспериментах [12]. Длина КВД была взята меньшей, чем в установке [12], однако, этой длины было достаточно, чтобы во всех проведенных расчетах волна разрежения не успевала отразиться от конца КВД и исказить процесс течения в КНД до его выхода за пределы расчетной области. Условия на границах соответствовали закрытым стенкам, за исключением выхода из КНД, где задавались условия на открытой границе. Система предполагалась адиабатически изолированной. На стенках камер задавалось условие прилипания.

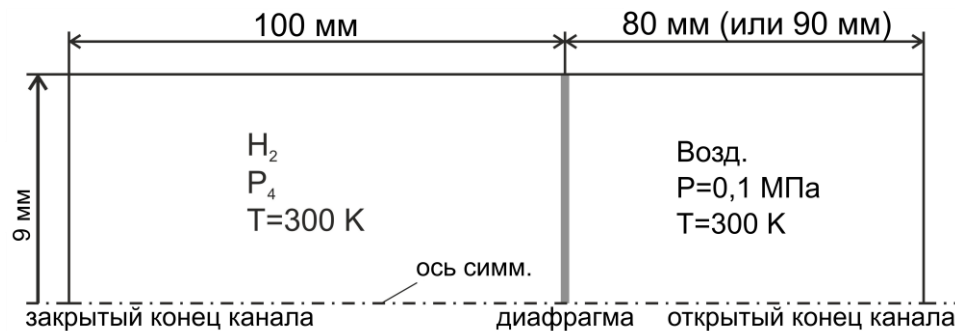


Рисунок 21. Геометрия КВД и КНД и начальные условия задачи.

Раскрытие диафрагмы с течением времени задавалось так, что радиус образующегося отверстия рос пропорционально времени, прошедшему с начала раскрытия. В расчетах была также учтена толщина диафрагмы, она была взята равной 200 мкм, что соответствует ее реальной толщине в экспериментах [12], где

диафрагма выбиралась из материала, не подверженного изгибу до момента разрыва.

Моделирование химических превращений проводилось с использованием схемы химической кинетики [30] для горения водорода, включающей 21 элементарную двустороннюю реакцию между 8 компонентами, концентрация девятого компонента, азота  $N_2$ , не изменяется в ходе реакции, но учитывается для расчета трехчастичных взаимодействий. Стоит отметить, что выбор данной схемы химической кинетики обусловлен ее способностью достоверно воспроизводить процесс воспламенения водорода в воздухе в области высоких давлений и в широком диапазоне составов смеси, как это представлено в [30] и также показано в разделе 1.3, что является принципиальным для достижения целей настоящей работы в силу того, что воспламенение может возникнуть в условиях, различных по температуре, давлению и составу смеси.

Расчеты системы уравнений газодинамики проводились в двумерных координатах в предположении аксиальной симметрии.

Выбор численного метода решения системы уравнений газодинамики является особенно важным в данной задаче, ввиду того, что возникновение самовоспламенения зависит от процессов, различных по характерным масштабам протекания: сжатия смеси под относительно высоким давлением, 60 атм и молекулярных процессов переноса – диффузии, определяющей перемешивание смеси, а также теплопроводности и вязкости. Используемый численный метод, описанный в 1.2, показал хорошее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными при исследованиях динамики пламени в широких трубах, ускорения водород-кислородного пламени в трубах и перехода горения в детонацию [77]. В то же время, как показано в разделе 1.3.2, метод приводит к удовлетворительным результатам при расчетах горения при нормальном давлении, в которых определяющую роль играют процессы молекулярного переноса.

Для моделирования задач, описываемых в настоящей работе, было проведено исследование сходимости решения, по результатам которого было определено удовлетворительное разрешение расчетной сетки. Основные расчеты проводились

на конечно-разностной однородной сетке с линейным размером ячейки 12 мкм и количеством ячеек более 11 миллионов.

Ниже представлено исследование сходимости результатов моделирования самовоспламенения водорода при его истечении в трубу через раскрывающуюся диафрагму, полученных с использованием численного алгоритма, описанного в главе 1 настоящей диссертации. Геометрические размеры области в моделируемой в данной работе задаче являются достаточно большими, чтобы в такой постановке проводить исследование сходимости. В связи с этим для тестирования решения на сходимость были выбраны меньшие геометрические размеры расчетной области; в остальном же постановка, в том числе и конфигурация, мало отличалась от базовой постановки, используемой в данной работе. Постановка задачи для исследования сходимости была следующая: радиусы каналов высокого и низкого давления составляли 2,5 мм, длины каналов высокого и низкого давления – 30 мм и 60 мм соответственно, на стенках задавалось условие прилипания, начальное давление водорода в камере высокого давления 100 атм, время раскрытия диафрагмы 7 мкс. Расчетная сетка являлась однородной; используемые сетки имели размеры ячеек 48, 24, 18, 12, 10, 8 и 6 мкм. Воспламенение возникало у стенок канала, примерно через 10 мкс после начала истечения.

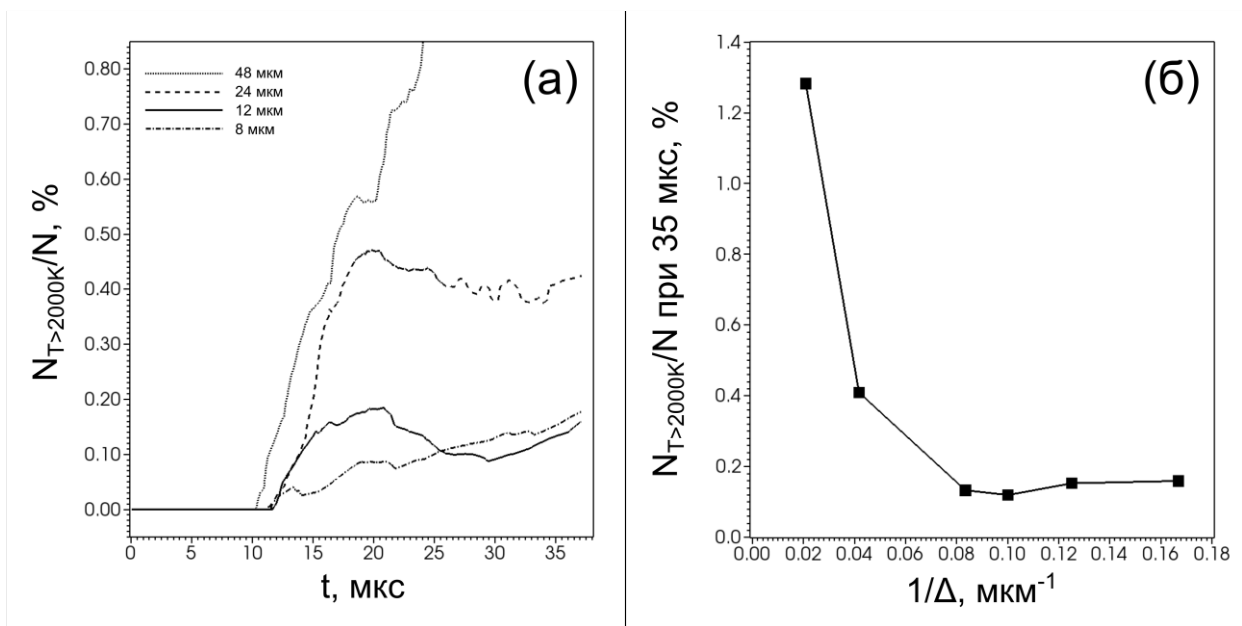


Рисунок 22. (а) Доля числа ячеек расчетной области, в которых температура достигла 2000 К и выше, от общего числа ячеек в зависимости от времени для

разных размеров расчетной ячейки. (б) Та же величина на фиксированный момент времени 35 мкс в зависимости от обратной величины размера ячейки.

Анализ сходимости решений, получаемых с использованием сеток с разным размером ячеек, осуществлялся по алгоритму, описанному в работах [10,15], путем сопоставления характерной величины процесса самовоспламенения – доли числа ячеек расчетной области, в которых температура достигла 2000 К и выше, от общего числа ячеек в камере низкого давления (в работах [10] и [15] рассматривались площадь и объем соответственно, занимаемые смесью с температурой выше 2000 К, нормированные на общую площадь сечения или объем трубы). На рисунке 22 (а) приведена эволюция отношения числа ячеек  $N_{T>2000K}/N$  для сеток с разным размером расчетной ячейки. Видно, что сетки с ячейками 48 и 24 мкм дают сильный рост величины  $N_{T>2000K}/N$ , в то время как наиболее близко к расчету на мелкой сетке 8 мкм подходит расчет на сетке 12 мкм. На рисунке 22 (б) приведено значение  $N_{T>2000K}/N$  для момента времени 35 мкс в зависимости от обратного размера расчетной ячейки (приведены результаты для всех сеток: 48 – 6 мкм). Данный рисунок показывает, что самой крупной сеткой, на которой достигается сходимость, является сетка с размером расчетной ячейки 12 мкм. Такая сетка и была выбрана для дальнейших расчетов в описанной постановке.

### 3.3. Анализ результатов численного моделирования

Анализ механизма воспламенения в настоящей работе проводился для давлений водорода в КВД  $p = 60; 50; 45$  атм. Время раскрытия диафрагмы  $t$  варьировалось от 20 до 40 мкс. Соответственно диаметр отверстия, через которое вытекала струя водорода, за соответствующее время увеличивался от нуля до 18 мм. Интервал давлений и интервал времен раскрытия диафрагмы были выбраны

таким образом, чтобы более детально рассмотреть динамику среды вблизи определенной в работе [12] границы области самовоспламенения струи водорода, истекающей под давлением в канал через диафрагму. Расчеты в выбранных интервалах давлений и времен раскрытия диафрагмы показали, что самовоспламенение и дальнейшее устойчивое горение, вызванные истечением струи водорода под большим давлением, не возникало при давлении в КВД меньше 60 атм, что согласуется с результатами экспериментов [12]. При выталкивающем водород давлением в 60 атм в случае изначально полностью открытой диафрагмы самовоспламенение водорода не наблюдалось, однако, учет конечной скорости раскрытия диафрагмы за 20 или 30 мкс приводил к самовоспламенению, что также согласуется с представленными в [12] результатами. При времени раскрытия 40 мкс возгорания водорода не наблюдалось на всей выбранной протяженности камеры, заполненной воздухом. Отсюда видно, что для воспламенения водорода, истекающего из камеры, давление в которой близко к предельному значению, достаточному для воспламенения, время раскрытия диафрагмы является принципиальным.

Общие сведения о зависимости факта самовозгорания водорода от скорости раскрытия диафрагмы, полученные на основе анализа результатов математического моделирования, представлены также в работах [8,11]. Суть процесса, изложенная в этих работах, сводится к утверждению о том, что постепенное раскрытие диафрагмы должно порождать последовательность волн сжатия, переотражение от стенок и наложение которых усиливает ведущую ударную волну, что повышает температуру следующего за ней слоя смешения водорода и воздуха и, в конечном итоге, приводит к возгоранию водорода. Выполненный в настоящей работе более детальный анализ проблемы показал, однако, значительно более сложную картину формирования условий возгорания водорода и позволил выделить новые особенности зарождения зон возгорания водорода в ограниченных пространствах. Результаты проведенного анализа представлены ниже.

Так как в большинстве работ по самовоспламенению расширяющегося водорода начальным стадиям развития процесса уделяется относительно малое внимание, рассмотрим вначале более подробно формирование струи водорода и течений в канале на стадии раскрытия диафрагмы. Начиная распространяться из отверстия, расширяющегося в ходе раскрытия диафрагмы, струя водорода формирует фактически два направления течений: вдоль оси канала и по радиусу от оси к стенкам канала. В общем случае на каждом из этих направлений в струе могут создаваться условия, обеспечивающие возгорание водорода [10]. При заданных геометрических параметрах канала эти условия зависят от начального давления водорода и скорости раскрытия диафрагмы. Представленные ниже результаты посвящены анализу различий в динамике струй, формирующихся при варьировании времени раскрытия диафрагмы, и относятся к начальному давлению водорода (давлению в КВД) в 60 атм, которое по результатам экспериментов [12] и проведенных нами расчетов можно условно принять за наименьшее давление, способное вызвать устойчивое самовоспламенение водорода при заданных геометрических размерах КНД.

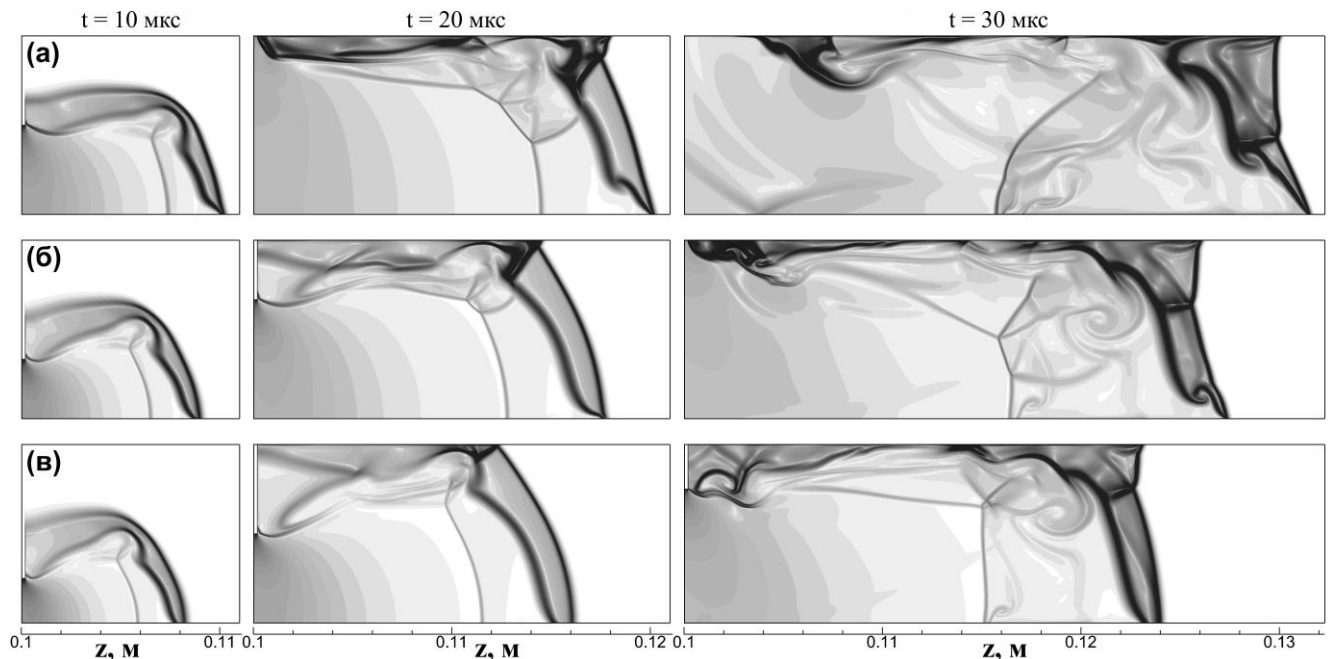


Рисунок 23. Градиенты плотности в расширяющихся струях с разными временами раскрытия диафрагмы: (а)  $\tau = 20$  мкс; (б)  $\tau = 30$  мкс, (в)  $\tau = 40$  мкс на моменты времени  $t = 10; 20; 30$  мкс.

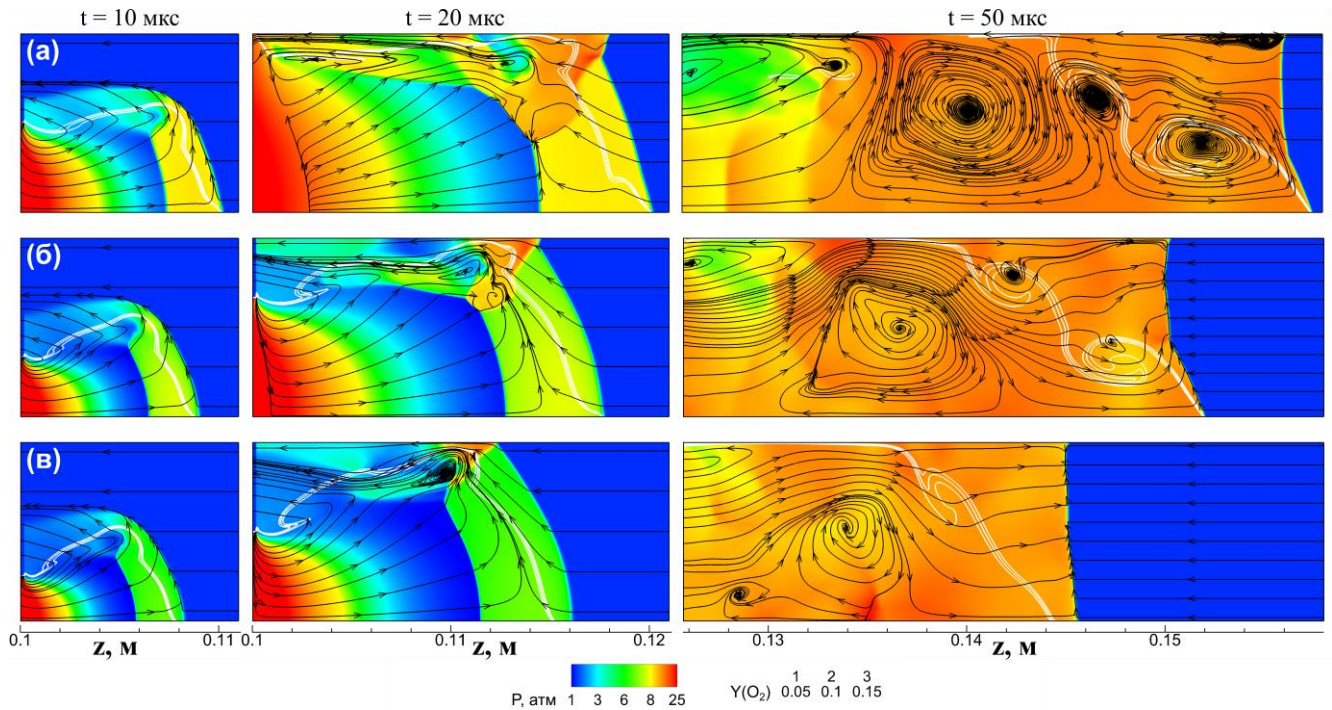


Рисунок 24. Поля течений, давления и контуры мольной доли кислорода (белые линии) в струях, формирующихся при разных временах  $\tau$  раскрытия диафрагмы: (а) –  $\tau = 20$  мкс, (б) –  $\tau = 30$  мкс, (в) –  $\tau = 40$  мкс. В вариантах, соответствующих каждому  $\tau$ , рисунки, расположенные слева направо, соответствуют моментам времени  $t = 10; 20; 50$  мкс.

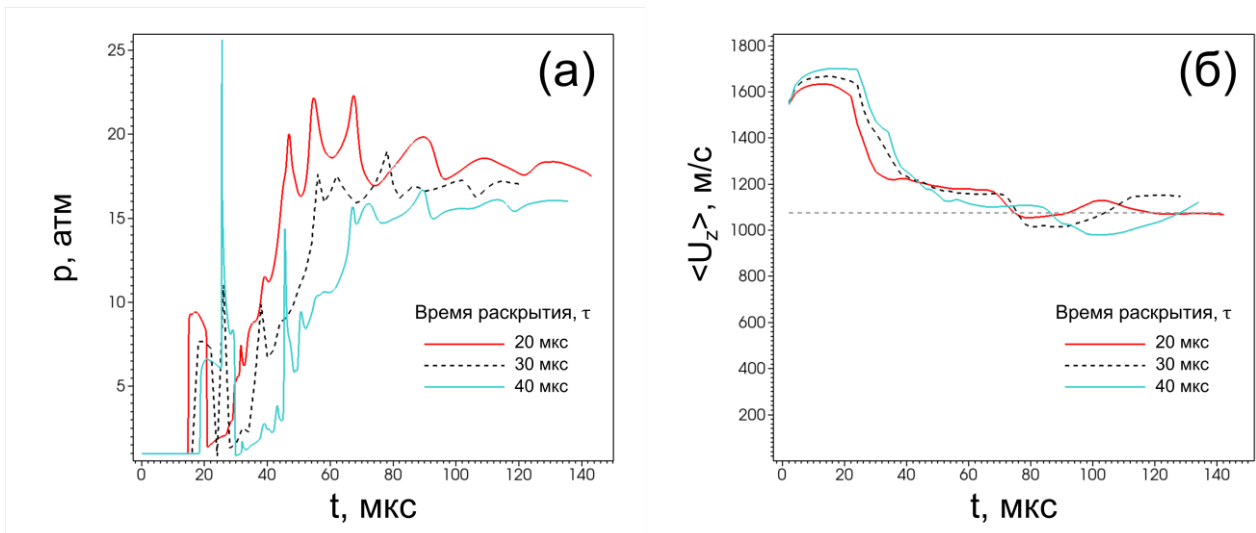


Рисунок 25. (а) Давления в струях, формирующихся при разных временах раскрытия диафрагмы. Датчик расположен на оси симметрии на расстоянии 15 мм от диафрагмы. Давление в КВД 60 атм. (б) Средняя скорость в струе водорода (среднее значение скорости получено для составляющей скорости вдоль оси



канала). Горизонтальная пунктирная линия соответствует решению задачи о распаде разрыва.

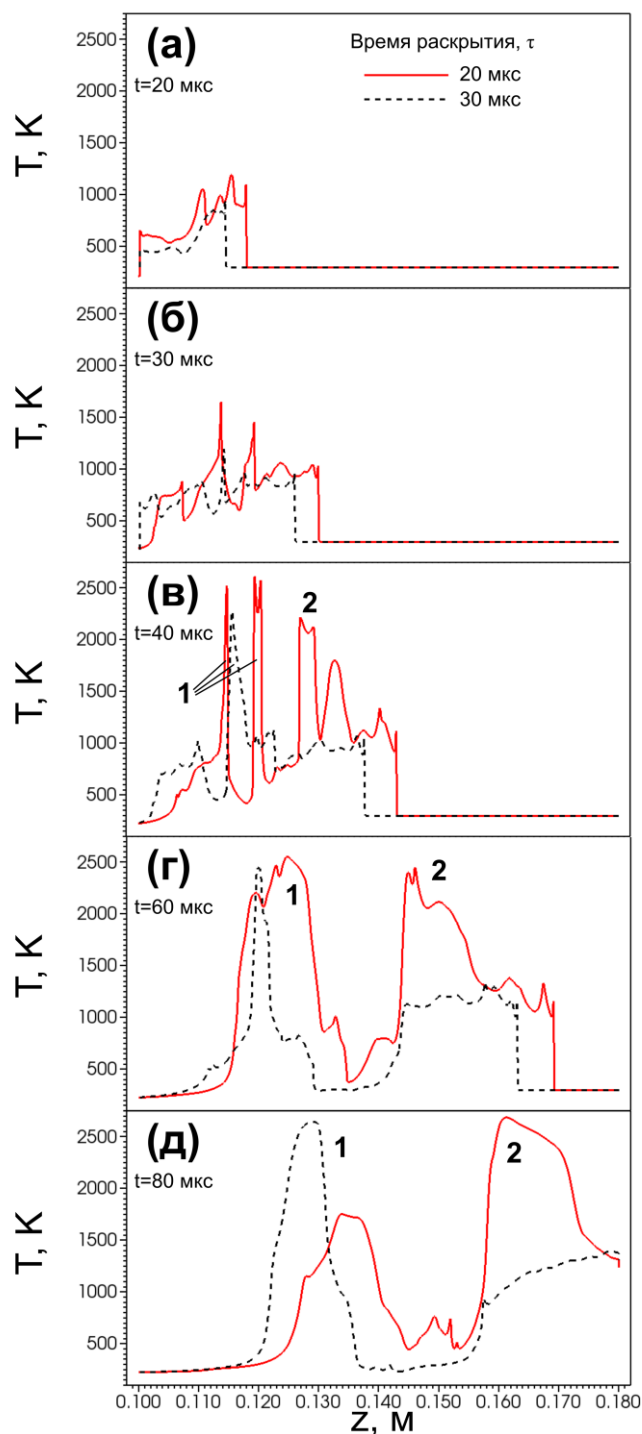


Рисунок 26. Температура вдоль пограничного слоя у стенки канала для варианта с  $\tau = 20 \mu\text{s}$  и  $\tau = 30 \mu\text{s}$  на разные моменты времени. (а) 20 мкс; (б) 30 мкс; (в) 40 мкс; (г) 60 мкс; (д) 80 мкс; 1 – очаги воспламенения в области выхода струи водорода на стенку канала; 2 – второй основной очаг воспламенения.

На рисунках 23, 24 показаны (в полуплоскости, проходящей через ось симметрии) структуры течений и распределения давления в струе водорода для вариантов с различными временами раскрытия диафрагмы на начальных стадиях развития процесса. Белые жирные линии на рисунке 24 соответствуют изолиниям концентрации кислорода воздуха вдоль контактной поверхности. На рисунке 25 (а) приведены полученные в расчетах для тех же времен раскрытия диафрагмы изменения давления со временем на оси канала на расстоянии, соответствующем положению датчика давления в экспериментах [12] для измерения давления в струе водорода. Полученные распределения скоростей и давлений в формирующихся струях полностью соответствуют известной структуре начального участка недорасширенной затопленной струи [78] и качественно совпадают с результатами многочисленных расчетов струй, выполненных в работах [8,11] при решении задач, сходных с рассматриваемой нами. (Ограничение качественным уровнем совпадения объясняется здесь недостаточной для количественного сопоставления детализацией результатов в цитируемых статьях и неполным совпадением постановок задач, решаемых в статьях и представляющих интерес для исследуемой в настоящей работе проблемы). Развитие процесса в направлении оси канала оценим, рассматривая изменения со временем давления в выделенной точке на оси канала и вдоль продольного сечения струи. Как видно из рисунка 25, формирование течения происходит в три стадии. Первая сугубо нестационарная стадия процесса характеризуется пульсационным изменением давления, отражающим структуру начального участка недорасширенной затопленной струи, отличающуюся чередованием зоны повышенного давления в области сжатия и зоны пониженного давления в расширяющейся струе, как это видно из рисунка 24 на моменты времени 10 и 20 мкс. На второй стадии формирования течения устанавливается непрерывное истечение струи из КВД с одновременным нарастанием давления в струе, что объясняется выравниванием давления за ударной волной, наблюдаемым на рисунке 20 при  $t = 50$  мкс. Третья стадия процесса соответствует установлению квазистационарного потока газа за ударной волной. Максимальная скорость в струе достигается в первые 10 мкс, лежит в интервале 2500-2600 м/с и слабо зависит от

времени раскрытия диафрагмы. Со временем максимальная скорость падает и при  $t = 100$  мкс достигает 2000 м/с для варианта  $\tau = 20$  мкс и 1500 м/с для варианта  $\tau = 40$  мкс. Возникающие на квазистационарной стадии нерегулярные возмущения давления связаны с воздействием переотраженных волн сжатия, не меняющих среднее значение давления на этой стадии, которое тем больше, чем меньше время раскрытия диафрагмы. При этом, если время раскрытия меняется от 40 мкс до 20 мкс, то квазистационарное давление в струе увеличивается незначительно, от 16 до 18 атм, что лежит в интервале давлений, зарегистрированных в соответствующих экспериментах [12, Fig.4b]. Эти возмущения давления поднимают температуру за фронтом ведущей ударной волны не более чем до 800 К, что недостаточно для возбуждения реакции окисления водорода в воздухе. Отсутствие поджига в центральной части фронта струи в рассматриваемых экспериментах вполне ожидаемо, так как этот эффект всегда наблюдался только при значительно больших начальных давлениях водорода [9,10].

Из рисунков 23, 24 видно, что конечное время раскрытия диафрагмы приводит к формированию в струе течения, расходящегося от открывающегося отверстия в радиальном направлении, при этом отклонение боковой кромки струи от направления вдоль продольной оси тем больше, чем больше время открытия диафрагмы. Так, боковая поверхность струи, при быстром раскрытии диафрагмы ( $\tau = 20$  мкс) приближается к стенке канала, оставаясь практически параллельной к ней, в то время как с увеличением времени раскрытия ( $\tau = 30, 40$  мкс) боковая поверхность приближается к стенке под все большим углом, как это следует из сопоставлений рис. 23 (а, б, в) на момент времени  $t = 10$  мкс. К моменту  $t = 20$  мкс во всех рассматриваемых вариантах раскрытия диафрагмы боковая часть струи подходит к стенке канала и струя водорода начинает занимать почти все поперечное сечение канала за исключением тонкого пограничного слоя у стенок. При этом в вариантах с  $\tau = 30$  мкс и  $\tau = 40$  мкс стенку вначале достигают точки на наклонной боковой поверхности струи, наиболее близко расположенные к стенке (рис. 23 (б, в),  $t = 20$  мкс), и только через время, сравнимое с соответствующим временем раскрытия диафрагмы, вся боковая поверхность струи достигает

пограничного слоя. В варианте с  $\tau = 20$  мкс взаимодействие с пограничным слоем происходит вдоль всей боковой поверхности практически одновременно (рис. 23 (а),  $t = 20$  мкс), что способствует лучшему перемешиванию воздушной массы у стенки с водородом в расширяющейся струе. При достижении струей области вблизи стенки канала температура в пограничном слое определяется приращением внутренней энергии газа за счет вязких напряжений и генерируемых струей ударных волн, переотражающихся от стенки канала и боковой поверхности струи. Далее развитие воспламенения в этой области проследим по рис. 26 для варианта  $\tau = 20$  мкс. К моменту времени 20 мкс температура в пограничном слое достигает для варианта при  $\tau = 20$  мкс 1000-1200 К (рис. 26, а). При этой температуре время задержки воспламенения водородно-воздушной смеси падает (с учетом его снижения при повышенном давлении) ниже времени диссипации энергии, полученной пограничным слоем, что обеспечивает воспламенение водорода в отдельных участках области начального контакта струи водорода с боковой поверхностью канала, создавая в этой области локальные очаги возгорания (рис. 26, б, в). Дополнительным фактором, усиливающим перемешивание холодного водорода с нагревающейся в пограничном слое смесью, является совпадение по времени полного открытия диафрагмы в этом варианте с достижением в пограничном слое температуры, достаточной для запуска химической реакции. С увеличением интенсивности подачи водорода в область возгорания увеличивается интенсивность химической реакции, что поддерживает горение в этой области и определяет в ней более высокую температуру, что видно из рис. 26 (в, г). К моменту времени  $t = 60$  мкс два отдельных очага в пограничном слое сливаются (рис. 26, г), температура в области горения достигает 2500 К, после чего горение в очаге начинает затухать из-за отсутствия в данном случае механизма последующей доставки окислителя к данному локальному очагу горения. Полное тушение этого очага происходит до выхода струи из открытого конца канала.

При увеличении времени раскрытия диафрагмы развитие воспламенения в области начального контакта струи с боковой стенкой канала замедляется. Это связано с тем, что с увеличением времени раскрытия диафрагмы снижается

скорость подачи водорода и как следствие снижается интенсивность течения. С одной стороны, снижение интенсивности радиальной составляющей течения способствует снижению степени сжатия газа в зазоре между поверхностью струи и боковой поверхностью канала. С другой стороны, снижение аксиальной скорости потока задерживает время прихода зоны перемешивания в нагретый пограничный слой, что в предельном случае не обеспечивает воспламенение до истечения характерного времени диссипации энергии в нагретом пограничном слое. Так, при времени раскрытия диафрагмы  $\tau = 30$  мкс наблюдалось более медленное формирование очага воспламенения, что видно из рис. 26 (а-в), а при  $\tau = 40$  мкс возгорание водорода вообще не наблюдалось.

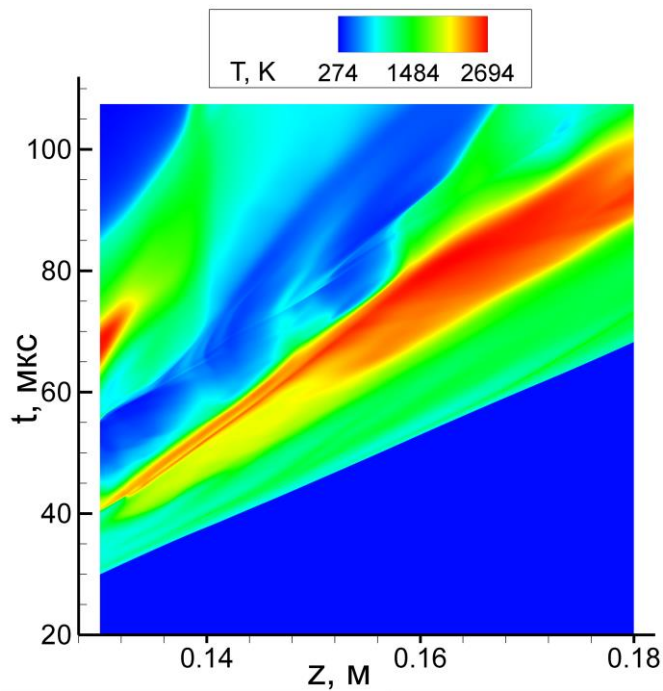


Рисунок 27. x-t диаграмма развития основного очага горения для варианта с  $\tau = 20$  мкс.

Рассмотрим дальнейшее развитие процессов, вызванное распространением струи водорода по каналу. Со временем фронт ударной волны опережает контактную границу, нагревая воздух за своим фронтом до температуры близкой к 1000 К. При этом в виду расширяющегося характера течения на начальной стадии процесса опережение вблизи стенки оказывается больше, чем на оси канала. Более того, стоит отметить, что в режимах с быстрым ( $\tau < 40$  мкс) раскрытием диафрагмы

скорость головной части струи распространяется со сверхзвуковой скоростью, что определяет отсутствие опережения ударной волной контактного разрыва в центральной области канала. С одной стороны, это объясняет невозможность воспламенения в центральной части струи при рассматриваемых относительно низких давлениях, так как фактически за времена порядка сжатия воздуха в ударном фронте не успевают развиваться процессы перемешивания и воспламенения. С другой стороны, это обеспечивает большую площадь боковой поверхности струи, определяемой разницей скоростей в головной части струи и на стенке канала.

Боковая поверхность струи по сути представляет из себя сдвиговый слой между холодным водородом и нагретым воздухом. Сдвиговая неустойчивость боковой поверхности струи ведет к формированию вихревых течений (рис. 23,  $t = 30$  мкс), что является основным механизмом перемешивания водорода с воздухом. В режимах с быстрым раскрытием диафрагмы большая площадь боковой поверхности струи определяет большую скорость нарастания сдвиговой неустойчивости и как следствие большую интенсивность вихревых течений и более интенсивное перемешивание водорода с воздухом на контактном разрыве. В дополнении к этому из рис. 26 видно, что большая интенсивность ведущей ударной волны в варианте с  $\tau = 20$  мкс по сравнению с вариантом с  $\tau = 30$  мкс обеспечивает более высокую среднюю температуру сжатого воздуха, которая в двух вариантах составляет, соответственно, 1000 К и 900 К. Такое различие в температуре существенно влияет на время задержки воспламенения и приводит к тому, что в варианте с  $\tau = 20$  мкс возгорание разогретой области пограничного слоя, наступает практически сразу (примерно через 6-8 мкс) после повышения в этой области концентрации водорода, доставляемого от контактной поверхности вихревыми течениями, распространяющимися вдоль поверхности струи от ее головной части в направлении пограничного слоя. Из рис. 26 (в) видно, что второй очаг возгорания для варианта с  $\tau = 20$  мкс возникает в непосредственной близости от более раннего первого, локализованного в области первичного контакта струи водорода с боковой поверхностью канала. Однако, если первый очаг затухает после выгорания

кислорода воздуха, захваченного струей водорода при ее взаимодействии со стенкой канала, то второй очаг остается стабильным за счет обеспечения вихревыми течениями регулярного поступления к очагу горения перемешанной смеси водорода с воздухом. Этот вторичный устойчивый очаг горения доходит до открытого конца канала, что позволяет считать его основным. На рис. 27 представлена  $x-t$  диаграмма описанного процесса. Видно затухание первого очага и расширение зоны перемешивания и горения основного. Для варианта с  $\tau = 30$  мкс из-за того, что время индукции значительно больше, самовозгорание до выхода струи из канала не происходит. Температура за фронтом ударной волны на протяжении движения струи водорода по каналу медленно поднимается до 1200 К. Самовозгорание в основном очаге и продолжение горения водорода вплоть до открытого конца канала, полученные в расчетах для времен открытия диафрагмы  $\tau = 20$  мкс и  $\tau = 30$  мкс укладываются в интервалы режимов самовоспламенения, оцененные при сходной постановке экспериментально [12].

### 3.4. Основные результаты

Математическое моделирование распространения струи водорода высокого давления по каналу выделило два очага возгорания водорода: ранний, возникающий непосредственно после достижения боковой поверхностью струи стенки канала, и более поздний, вызванный иницированием химической реакции в нагретой ведущей ударной волной области пограничного слоя. Эти очаги отличаются друг от друга как временем жизни, так и механизмами, иницирующими и поддерживающими горение водородно-воздушной смеси. В первом случае механизмом иницирования является волна сжатия, сформированная расширяющейся струей водорода и действующая в радиальном направлении в зазоре между боковой поверхностью струи и стенкой канала. Волна сжимает и нагревает воздух в зазоре, а в отраженном импульсе интенсифицирует

перемешивание нагретого воздуха с водородом. Во втором случае необходимый для воспламенения разогрев воздуха реализуется внутри пограничного слоя, формирующегося за фронтом ведущей ударной волны, при этом смесь водорода с воздухом готовится и поступает в область горения за счет эффектов перемешивания и “турбулентной” диффузии, определяемыми вихревыми течениями на боковой поверхности струи. При этом, если в первом случае, водород, захваченный струей в период ее расширения до стенки канала, оказывается в дальнейшем лишен механизма подкачки свежего окислителя, в результате чего первый ранний очаг самовоспламенения затухает, то доступ воздуха ко второму очагу самовозгорания, реализуемый вихревыми образованиями, усиливающимися с развитием неустойчивостей на контактной границе, остается стабильным. Это обеспечивает продвижение второго очага в потоке вдоль канала до выхода в открытое пространство. Экспериментально наличие двух очагов самовоспламенения водорода было продемонстрировано в работе [79], где прослежено развитие этих очагов и показано затухание более раннего из них. Таким образом, только второй очаг и механизмы, обеспечивающие его развитие, определяют устойчивое развитие горения водорода в канале после начальной стадии его самовозгорания. При этом, как показали проведенные в настоящей работе исследования, формирование вихревых течений, необходимых для поддержания горения в очаге при давлениях близких к нижней границе самовоспламенения, одинаково зависит как от начального давления водорода, так и от времени раскрытия диафрагмы.

Результаты настоящей работы, полученные методами компьютерного моделирования, и данные экспериментов [12], достаточно хорошо согласуясь между собой, позволяют считать возможным самовоспламенение водорода в каналах выбранной геометрии (диаметр 18 мм, длина 80 мм) при начальном давлении водорода в 60 атм. При этом компьютерное моделирование показало, что самовозгорание в трубе выбранной геометрии не может происходить при давлениях ниже 60 атм, а при давлении в 60 атм – при временах раскрытия диафрагмы больших 30 мкс. Таким образом, результаты проведенного в работе



математического моделирования и результаты экспериментов [12] позволяют определить нижнюю по давлению границу самовозгорания водорода для конкретной частной геометрии канала. Естественно при этом отметить, что изменение длины или диаметра канала потребуют пересмотра граничных значений как давления, так и времени раскрытия диафрагмы. Например, при времени раскрытия диафрагмы 40 мкс возгорание водорода при давлении 60 атм все же возможно, но при большей длине канала.

Полученное в настоящей работе при выбранной геометрии канала значение нижнего по давлению предела самовозгорания водорода ниже принятого ранее в работе [9] предела в 75 атм. Однако, самовоспламенение водорода ниже 60 атм описано в более поздней экспериментальной работе [11], где оно наблюдалось при начальных давлениях водорода в интервале от 47,5 до 54,6 атм. В работах [9, 11], однако, не проводится анализ влияния на самовоспламенение времени раскрытия диафрагмы, таким образом, невозможно определить, являются ли эти значения граничными для соответствующих геометрий каналов или только указывают на возникновение самовоспламенения при указанных давлениях.

## **Глава 4. Горение смесей на основе водорода в двигателе с искровым зажиганием. Определение составов, обеспечивающих эффективную работу двигателя в штатном режиме**

В главе 4 настоящей диссертации рассматривается подход по предотвращению детонационных режимов работы двигателя с искровым зажиганием при использовании газообразного водорода в качестве топлива. В рамках предлагаемого подхода используются небольшие (по объему) добавки к водороду низкоактивных в сравнении с водородом компонент: метана, водяного пара, избытка воздуха. На основе численного моделирования показана принципиальная работоспособность предлагаемого подхода. Для подтверждения возможности практического использования предлагаемого подхода выполнены специализированные расчеты с учетом постановки и условий экспериментов, проведенных в ОИВТ РАН, и получено удовлетворительное согласие результатов расчетов с экспериментальными данными. Основные результаты опубликованы в работах [I, III].

### **4.1. Концепция использования водорода в качестве топлива для элементов распределенной энергетической системы**

Использование водорода в качестве топлива для двигателей внутреннего сгорания имеет существенное значение для систем распределенной энергетики [80-82], которые в настоящее время становятся экономически более выгодными [80,81] по сравнению с централизованными системами энергоснабжения. Необходимо отметить, что наиболее востребованными системы распределенной энергетики становятся при организации работ, связанных с освоением природных ресурсов, в регионах, значительно удаленных от обжитых территорий.

В системах распределенного производства электроэнергии особое место занимают возобновляемые источники энергии, для которых, как правило, характерно нестабильное во времени энергопроизводство (примером могут служить ветряные электростанции, работающие только при наличии достаточного ветрового давления) [83]. В этом случае для оптимального использования энергии необходимо включение в систему эффективных накопителей избыточной энергии. Проблема накопителей выработанной энергии становится особенно актуальной для автономных электростанций, расположенных в местах, удаленных от глобальных электрических сетей. Традиционные подходы к накоплению энергии в мощных аккумуляторных батареях характеризуются относительно высокой ценой и малой для длительного накопления энергии емкостью. В связи с этим интерес представляет поиск альтернативных методов накопления энергии.

В качестве одной из перспективных возможностей накопления энергии рассматривается следующий подход: получаемая от возобновляемых источников (например, на ветряных электростанциях) избыточная электроэнергия расходуется на электролиз воды, продуктом которого является водород [84,85]. Получаемый водород можно накапливать, длительное время хранить и по мере необходимости использовать как топливо в газопоршневом двигателе с искровым зажиганием, являющимся приводом электрогенератора или другой технической системы. В работе [86] проведен сравнительный экономический анализ производства и аккумуляирования водорода и прямого аккумуляирования электроэнергии, который показал, что при долгосрочном (более 5 суток) аккумуляировании энергии предпочтительней оказывается использование водорода. Вопрос о КПД предлагаемой энергетической системы в данном случае не является столь же актуальным, как для регионов с централизованным энергоснабжением, так как задача оптимизации затрат на единицу выработанной электроэнергии в данном случае заменяется задачей обеспечения бесперебойного энергоснабжения.

Водород как топливо обладает рядом преимуществ: он имеет большую удельную теплоту сгорания в воздухе по сравнению с другими жидкими и газообразными топливами, его достаточно легко накапливать, хранить и

транспортировать [87], в результате сгорания отсутствуют вредные углеродосодержащие выбросы. С другой стороны, водород имеет слабую детонационную стойкость, что препятствует его широкому использованию в качестве топлива, так как детонация в двигателях внутреннего сгорания может приводить к быстрому износу и выходу из строя двигателя из-за возникновения больших скачков давления. Для повышения детонационной стойкости топлива на основе водорода естественной представляется идея использования топливных добавок, характеризующихся меньшей детонационной способностью. В качестве такого топлива могут быть взяты широко используемые метан или природный газ [16]. Как правило, водородосодержащие топлива разрабатываются и исследуются с двумя целями: создание высокоэффективного топлива для двигателей внутреннего сгорания на основе водорода [88] и использование водорода как добавки к углеводородным топливам для повышения их эффективности [17,18]. В первом случае цель во многом совпадает с задачей, стоящей при разработке системы эффективного энергоспроизводства, рассматриваемой в настоящей работе. Однако, если при использовании водорода в качестве топлива для двигателей автомобилей, предполагающих их широкое распространение, большое значение придается вопросам снижения вредных компонент в отработанных газах при сохранении достаточно высокого коэффициента полезного действия, то в нашем случае актуальной является проблема минимизации количества метана или любого другого газа, доставляемого на удаленную автономную электростанцию, для повышения порога детонации водородного топлива. Идеальным представляется полный отказ от привлечения дополнительных горючих компонент и повышение детонационной стойкости только за счет добавления к водороду водяного пара, являющегося в данном случае продуктом сгорания водородного топлива, или использования в качестве горючего бедных водородно-воздушных смесей. Анализу эффективности такого подхода к созданию водородного горючего посвящено проводимое исследование.

Поскольку в рамках описанного подхода на объем используемого водорода не накладывается ограничений, в качестве базовой топливно-воздушной смеси

была взята стехиометрическая водородно-воздушная смесь. Таким образом, результатами решения поставленной задачи являются минимальные содержания добавок: метана, водяного пара, избытка воздуха, обеспечивающие отсутствие детонации, в водородно-воздушной смеси, которую можно приближенно считать стехиометрической. Стоит отметить, что возможность использования стехиометрических смесей на практике оказывается ограниченной в связи с возникновением других аномальных режимов горения, таких как обратные вспышки или преждевременное воспламенение [19]. Ниже будет более подробно отмечено, что специально поставленные в ОИВТ РАН эксперименты по сгоранию водорода в двигателе с искровым зажиганием показали, что при коэффициенте избытка воздуха  $\lambda < 1,4$  водородно-воздушной смеси наблюдаются обратные вспышки во впускном коллекторе. Указанное значение  $\lambda$ , соответствующее содержанию водорода 23,1% (по объему), оказывается больше  $\lambda$ , обеспечивающего отсутствие детонационных режимов сгорания в двигателе, определенного в ходе настоящего исследования как 1,2 (%H<sub>2</sub>, об. = 26,5), при условии использования воздуха, взятого в избытке, в качестве малоактивной ингибирующей добавки.

Для подтверждения достоверности полученных в настоящей работе данных по необходимому содержанию малоактивных добавок проведены дополнительные расчеты и сравнение их с экспериментальными данными по сгоранию смеси водород-воздух при  $\lambda 1,5$ .

#### **4.2. Обзор работ по горению смесей с высоким содержанием водорода в двигателях с искровым зажиганием**

Ввиду экологичности водородного топлива, а также его возобновляемости, то есть возможности выработки водорода за счет возобновляемых источников энергии, использование водорода и смесей традиционных топлив с водородом в двигателе внутреннего сгорания становится наиболее перспективным в энергетике,

что определяет наличие большого количества детальных исследований по данной проблеме. Поскольку в настоящей работе рассматривается вопрос о составе топлива на основе водорода, которое возможно использовать в двигателе с искровым зажиганием как обеспечивающее отсутствие детонационных режимов сгорания, ниже приводятся литературные данные о составах с высоким содержанием водорода, при которых имеет место нормальная работа двигателя с искровым зажиганием.

В экспериментах, описанных в [21,22], работа двигателя на водороде осуществлялась в диапазонах эквивалентного соотношения для горючего  $\Phi = 0,44 - 0,6$  и  $0,45-0,6$ , соответственно (или диапазонах коэффициента избытка воздуха  $\lambda$   $1,7 - 2,3$ ;  $1,7 - 2,2$ ). При этом в [21] приводится, что при больших  $\Phi$  (меньших  $\lambda$ ) в используемой конфигурации двигателя наблюдаются обратные вспышки и стук.

Использование стехиометрической водородно-воздушной смеси в двигателе с искровым зажиганием рассмотрено в [19], а также экспериментально осуществлено в [20] (при степени сжатия 10,3 и дросселировании). В работе [19] отмечено, что такие аномальные режимы горения как преждевременное воспламенение и обратные вспышки имеют более отчетливый характер возникновения при использовании смесей на основе водорода с  $\lambda = 1$ . Также указано, что стук может при  $\lambda = 1$  не возникать, что однако, противоречит некоторым работам [89], в которых утверждается, что при работе двигателя на водороде при  $\lambda = 1$  всегда имеет место стук. В работе [90] экспериментально и с использованием численного моделирования показано, что при работе двигателя с искровым зажиганием на водороде появление стука происходит при высоких скоростях вращения коленчатого вала, больших 3000 об/мин; отмечено, что обратные вспышки способны увеличить вероятность появления стука. Предотвращение обратных вспышек при использовании стехиометрической водородно-воздушной смеси [19] возможно при специальной доработке конструкции двигателя: подборе поршневых колец и узких объемов камеры сгорания, образуемых при подходе поршня к верхней мертвой точке (ВМТ), а обеспечение уменьшения вероятности быстрого износа двигателя от больших

скачков давления достигается при подборе формы камеры сгорания. Тем не менее, в [19] отмечено, что использование стехиометрического состава приводит к увеличению мощности по сравнению с использованием бедных смесей. Для предотвращения выбросов оксидов азота, достигающих высоких значений при  $\lambda = 1$  по сравнению с бедными смесями, в [19] отмечена необходимость использования системы нейтрализации выхлопных газов.

В работе [91] сгорание стехиометрической смеси  $H_2$ -воздух в двигателе с искровым зажиганием происходит в нормальном режиме. При этом степень сжатия является достаточно низкой и составляет 7.

Широко исследуется использование смесей водорода с традиционными топливами. В экспериментальной работе [16] рассмотрена работа двигателя с искровым зажиганием на смесях водород/метан при  $\lambda = 1 - 2,5$  и содержании метана 0 – 20% (по массе) в его смеси с водородом ( $\lambda = 1$  использовано только при содержании метана 20%). В работе определено, что при фиксированном  $\lambda$  добавление метана приводит к снижению температуры сгорания. В работе также продемонстрировано, что в результате увеличения содержания метана в смеси имеет место снижение термического и механического КПД (получено для  $\lambda \geq 1,6$ ).

Таким образом, доступные в литературе данные показывают возможность использования близких к стехиометрии составов на основе водорода в эксперименте и на практике. При этом использование таких смесей оказывается возможным при достаточно низких степенях сжатия либо при средних степенях сжатия и дросселировании. Добавление в небольшом количестве метана к водороду приводит при фиксированном коэффициенте избытка воздуха в обедненных смесях к понижению термического и механического КПД.

### 4.3. Постановка задачи численного моделирования

В настоящей работе методами математического моделирования рассматривается горение в цилиндрической камере двигателя водородно-воздушной смеси в условиях, когда эта смесь разбавлена водяным паром, либо метаном, либо концентрация водорода в смеси меньше стехиометрической. Вычислительный эксперимент включает в себя расчеты стадии сжатия горючей смеси, стадии искрового поджига смеси, а также стадии сгорания и расширения продуктов горения с учетом обратного хода поршня, что соответствует второму и третьему тактам четырехтактного двигателя [92]. Размеры камеры сгорания, закон движения поршня и характеристики источника воспламенения смеси выбраны типичными для поршневых двигателей. Сопоставление результатов расчетов для разных топлив с различными добавками позволило выделить смеси, обеспечивающие бездетонационные режимы и оценить их эффективность с точки зрения производимой полезной работы, определяемой основными параметрами работы двигателя – максимальным давлением и углом поворота коленчатого вала (у.п.к.в.), соответствующим максимальному давлению.

Для корректного решения поставленной задачи используемая математическая модель должна воспроизводить не только качественное, но и количественное различие в динамике и энергетике процессов горения под движущимся поршнем различных смесей с достаточно близким химическим составом. Это, в свою очередь, выдвигает более строгие требования к выбору математических моделей кинетики химических реакций, а также процессов переноса всех компонент горючей смеси и продуктов горения, включая промежуточные радикалы в зоне горения.

Использованные в расчетах математическая модель и численный алгоритм описаны в главе 1, разделах 1.1 и 1.2, соответственно. Моделирование динамики и горения смеси проводилось в двумерной постановке, в цилиндрических



координатах в предположении аксиальной симметрии (как и при решении задачи, описанной в главе 3).

Моделирование химического превращения проводилось с использованием механизмов химической кинетики [30,31]. Выбор механизмов обоснован в разделах 1.3.1 и 1.3.2 настоящей диссертации.

Расчет искомых газодинамических характеристик у границы с движущимся поршнем проводился путем объединения расчетной ячейки, пересекаемой поршнем с соседней по оси  $OZ$ . При этом воздействие поршня на газ в объединенной ячейке учитывалось как адиабатическое сжатие или расширение, в соответствии с фазой движения поршня.

Параметры цилиндрической камеры сгорания и двигателя, используемые в математической модели приведены в таблице 1 и являются типичными для газопоршневых двигателей, что показывает сравнение с параметрами двигателя, используемого в экспериментах, на основе которых проведены дополнительные расчеты, описанные в разделе 4.6.

Таблица 1.

Используемые при математическом моделировании параметры двигателя и камеры сгорания

	I	II (на основе экспериментов)
Ход поршня, м	0,128	0,125
Диаметр цилиндра, м	0,130	0,110
Рабочий объем, м <sup>3</sup>	0,00170	0,00119
Степень сжатия	11,4	11,4
Скорость вращения коленчатого вала, об/мин	1500	1500
Мощность источника искрового поджига, Дж/(с·кг)	$2 \cdot 10^{11}$	$2 \cdot 10^{11}$
Длительность вложения энергии, мкс	12	12

Угол опережения зажигания, ° п.к.в.	170	180
Поверхность поршня	плоская	имеет выемку объемом $9,51 \cdot 10^{-5} \text{ м}^3$

Зажигание задавалось при повороте коленчатого вала на угол п.к.в., составляющий  $10^\circ$  до ВМТ, или  $170^\circ$  (верхняя мертвая точка (ВМТ) соответствует  $180^\circ$ , начало такта сжатия –  $0^\circ$ ). Такое опережающее зажигание согласно рекомендации [93] обеспечивает достижение пика давления в камере при повороте коленчатого вала на  $10\text{--}20^\circ$  после ВМТ, в фазе расширения, что обеспечивает наиболее высокий КПД двигателя.

Закон движения поршня задавался известной формулой, описывающей закон движения поршня в камерах сгорания двигателей с искровым зажиганием [94]:

$$U_p = U_0 \frac{\pi}{2} \sin(2\pi vt) \left( 1 + \frac{\cos(2\pi vt)}{\sqrt{R^2 - \sin^2(2\pi vt)}} \right),$$

где  $v$  - угловая скорость вращения коленчатого вала,  $U_0$  – величина, зависящая от хода поршня и угловой скорости коленчатого вала и равная в рассматриваемом случае I –  $6,34 \text{ м/с}$  и в случае II –  $6,25 \text{ м/с}$ ,  $R$  – отношение длины шатуна к радиусу кривошипа, равное  $4,0$ .

Искровой поджиг задавался как вклад энергии с удельной мощностью  $2 \cdot 10^{11} \text{ Дж/(кг} \cdot \text{с)}$  в течение  $12 \text{ мкс}$  в области, ограниченной окружностью радиуса  $4 \text{ мм}$ , и расположенной в центре верхней стенки цилиндра, к которой подходит поршень при движении в направлении ВМТ, что соответствует расположению электродов свечи зажигания в эксперименте.

Форма поршня была выбрана плоской, таким образом, при достижении поршнем ВМТ газовая смесь заключалась в объеме цилиндрической формы.

Камера предполагалась адиабатически изолированной. Процесс рассчитывался также без учета потерь на трение. На границе со стенками камеры и поршня задавались условия проскальзывания для скорости. В качестве начальных условий в камере задавались стандартные температура и давление, однородная

концентрация топливно-воздушной смеси, нулевая массовая скорость смеси. Последние два условия позволяют получить хорошее соответствие с экспериментальными условиями, в которых находится смесь на момент зажигания вблизи ВМТ, формируемыми в результате перемешивания смеси на такте сжатия и постепенного снижения скорости смеси и завихренностей.

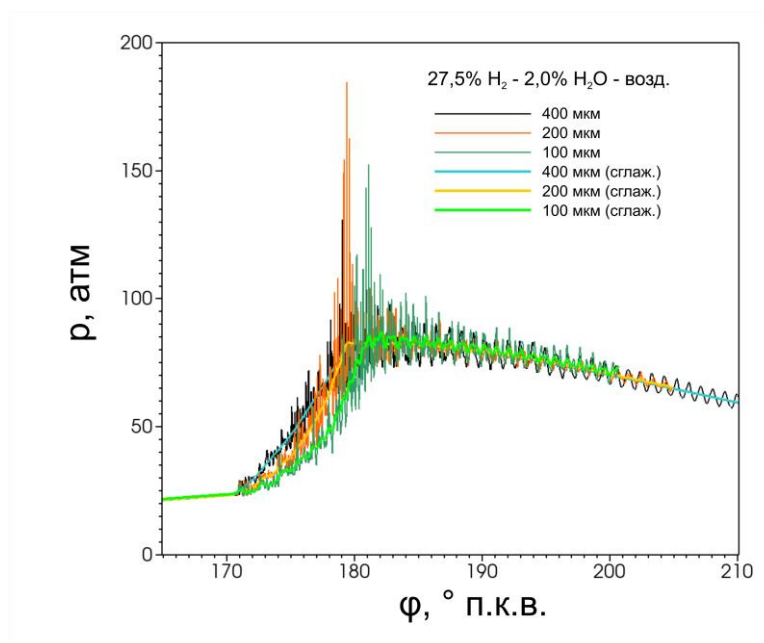


Рисунок 28. Индикаторные диаграммы, полученные в ходе расчетов, выполненных на сетках с размерами ячейки 100, 200, 400 мкм.

Как было описано в разделе 4.1 в данной работе в качестве топливно-воздушных смесей рассматриваются смеси водород-метан-воздух, водород-водяной пар-воздух и бедные водородно-воздушные смеси. Составы смесей горючего с низкоактивными добавками и воздухом задавались следующим образом. Содержание воздуха в смесях с водяным паром либо метаном составляло по объему для всех смесей 70,5%, оставшаяся часть приходилась на смесь водорода с водяным паром или метаном, например, 28,5% H<sub>2</sub> и 1,0% H<sub>2</sub>O. Далее при упоминании о составе смесей с низкоактивными добавками будем указывать только содержание этих добавок, поскольку содержание воздуха фиксировано. Для бедных смесей водород-воздух будет указываться содержание в этой смеси водорода.

Основные расчеты проводились с шагом пространственной сетки 400 мкм, определенным в результате теста на сходимость решения по размеру ячейки сетки (рис. 28). В рамках теста на сходимость показано, что индикаторная диаграмма, полученная на сетке с шагом 400 мкм, не имеет каких-либо существенных различий от аналогичных диаграмм, полученных на сетках с шагами, в 2 и 4 раза меньшими: 200 и 100 мкм. При этом расчеты проводились для типичной смеси, рассматриваемой в настоящей работе: 27,5%  $H_2$  – 2,0%  $H_2O$  – воздух. Таким образом, расчеты на выбранной сетке приводят к удовлетворительной точности определения параметров работы двигателя – максимального давления и угла п.к.в., соответствующего максимальному давлению, – на основе которых проводится анализ влияния составов на режимы сгорания и обеспечение оптимальной работы двигателя. Стоит однако отметить, что расчеты, проведенные на расчетных сетках с шагом 400 мкм и 100 мкм отличаются по воспроизводимой форме фронта пламени и его локальной динамике. В связи с этим, рассмотрение различий в режимах горения, обсуждаемое ниже в разделе 4.4, проводилось с использованием расчетов на сетке с шагом 100 мкм.

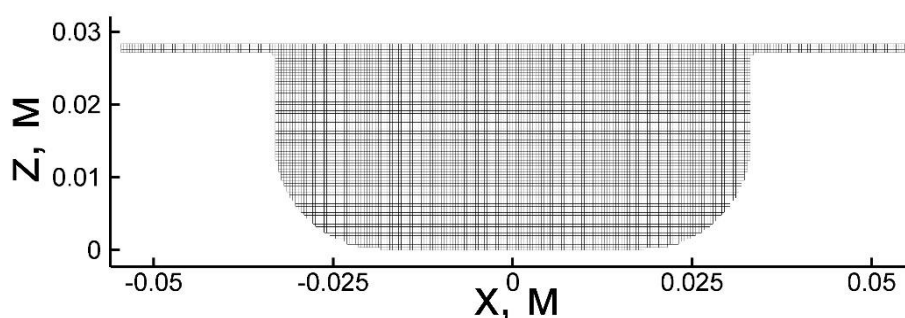


Рисунок 29. Геометрия камеры сгорания двигателя Г-266 в момент достижения поршнем ВМТ для расчетов, проводимых на основе экспериментов.

Отметим теперь различия в постановке расчетов, выполненных в соответствии с проведенными в ОИВТ РАН экспериментами. В таблице 1 приведены основные параметры газового двигателя Г-266, входящего в экспериментальную установку на базе электростанции АГ-75, учет которых проводился при моделировании. Двигатель Г-266 был преобразован из дизельного

двигателя с цилиндрической камерой сгорания посредством понижения степени сжатия, которое было произведено за счет выборки выемки в поршне объемом  $9,51 \cdot 10^{-5} \text{ м}^3$ , симметричной относительно оси цилиндра и имеющей форму, представленную на рисунке 29. Угол опережения зажигания в экспериментах был выбран, соответствующим ВМТ,  $180^\circ$  у.п.к.в. Свеча зажигания, а также датчик давления, с использованием которого регистрировались индикаторные диаграммы, располагались недалеко друг от друга в центре верхней стенки цилиндра.

Для более точного воспроизведения экспериментальных условий в расчетах учитывались потери тепла через стенки камеры и поршня за счет теплопереноса между газом и стенками, а также стенками и окружающей средой. Учет теплопереноса проводился путем расчета приведенных коэффициентов теплопроводности, зависящих от толщины слоев разных сред, по формуле для расчета теплопроводности через многослойную стенку [95]. При этом как показывают работы [96,97] наиболее интенсивный теплоотвод наблюдается при использовании водорода как топлива, что делает необходимым учет данного процесса в настоящей работе для достижения удовлетворительного согласия с экспериментами.

Обсуждаемые расчеты также проводились на сетке с шагом 400 мкм, выбранной на основе теста на сходимость, аналогичного описанному выше. Описание структуры течений в разделе 4.6 проведено на основе расчета на сетке с шагом 100 мкм.

#### **4.4. Режимы горения смесей на основе водорода при работе двигателя с искровым зажиганием**

Следуя принятой практике [93], при анализе режимов сжигания топлива в камере сгорания двигателя за основные характеристики процесса были приняты индикаторные диаграммы, показывающие зависимость давления внутри камеры

сгорания от объема камеры под поршнем, либо от угла п.к.в., или от соответствующих моментов времени. В последних случаях диаграмму еще называют развернутой.

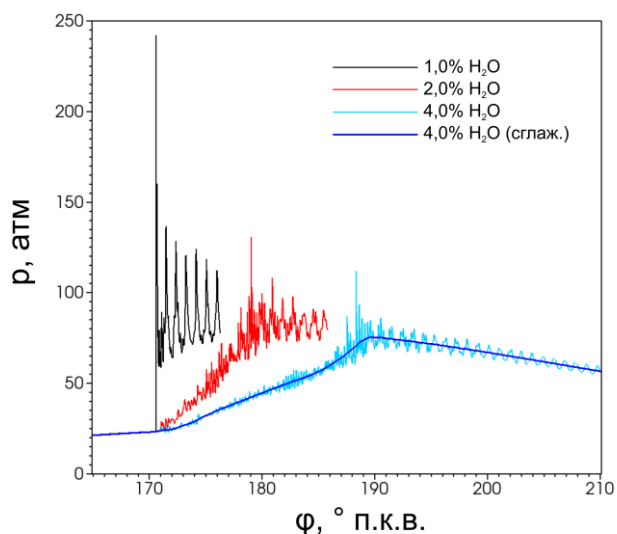


Рисунок 30. Индикаторные диаграммы для смесей  $H_2$  с добавлением водяного пара.

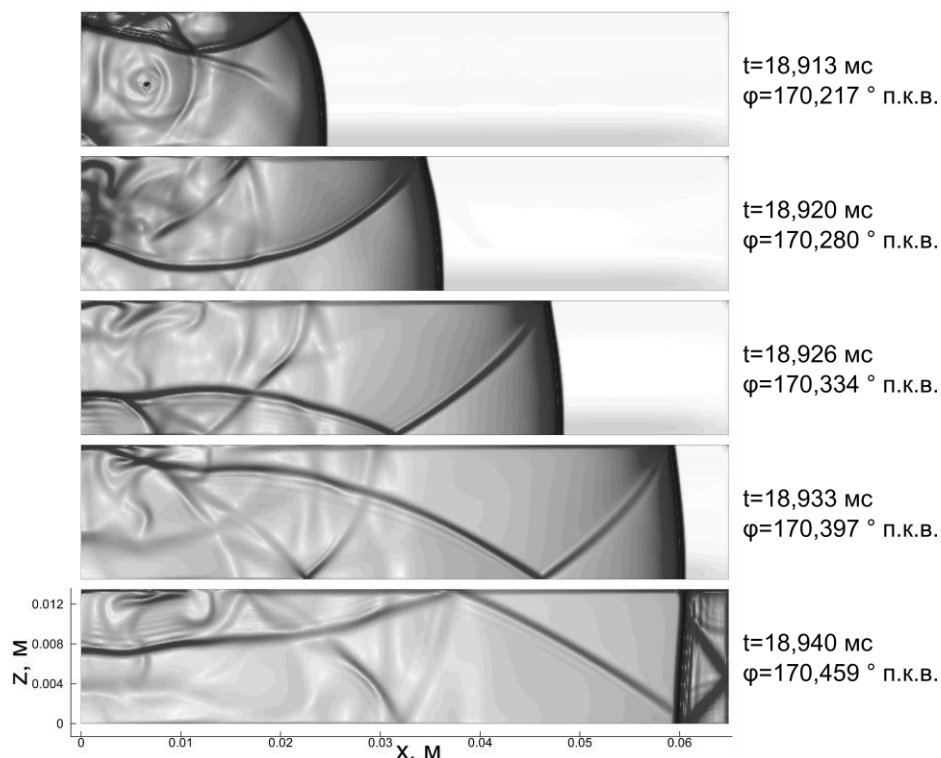


Рисунок 31. Поле градиента плотности, показывающее особенности течения в цилиндре под движущимся поршнем при детонации смеси 28,5%  $H_2$  – 1,0%  $H_2O$  (пар) для моментов времени от 18,900 мс до 18,940 мс, соответствующих углам поворота коленчатого вала  $170,100 - 170,459^\circ$  п.к.в.

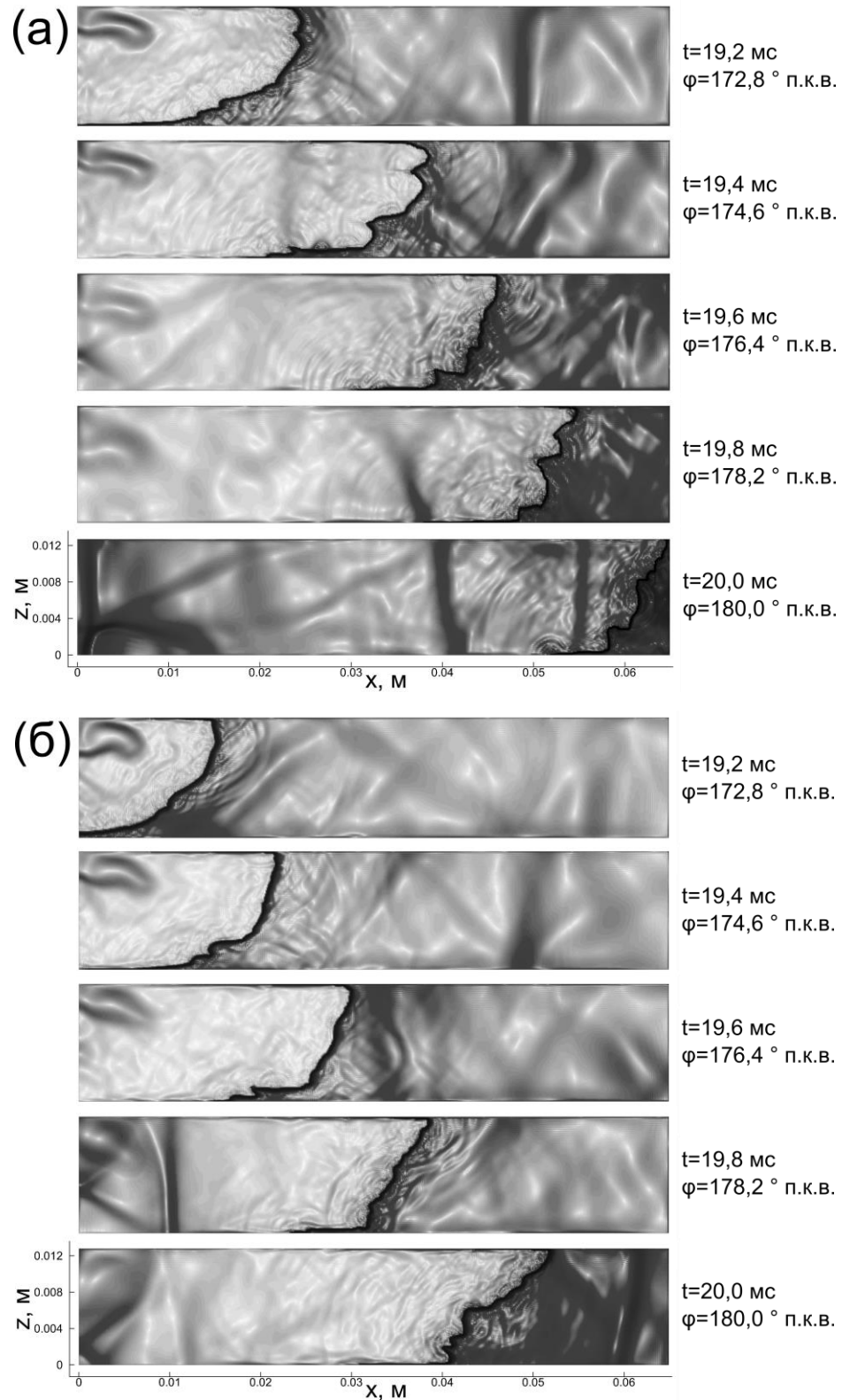


Рисунок 32. Поле градиента плотности, показывающее особенности течения в цилиндре под движущимся поршнем при горении смесей 27,5%  $\text{H}_2$  – 2,0%  $\text{H}_2\text{O}$  (пар) (а) и 25,5%  $\text{H}_2$  – 4,0%  $\text{H}_2\text{O}$  (пар) (б) для моментов времени от 0,0192 мкс до 0,0200 мкс с шагом 0,2 нс, соответствующих углам поворота коленчатого вала 172,8 – 180,0° п.к.в. (шаг 1,8° п.к.в.).

На рисунке 30 представлены индикаторные диаграммы, полученные для смесей водорода с разным количеством добавления водяного пара. Результаты показывают, что смесь с добавлением весьма малого количества водяного пара, 1,0% (здесь и далее составы выражены в % по объему), также как и стехиометрическая водородно-воздушная смесь (не представлена на рисунке), как и следовало ожидать, демонстрирует почти мгновенное сгорание в момент зажигания с сильным скачком давления, достигающим в расчетах до 240 атм, что уже характерно для детонационных режимов. Последующие пики давления отвечают отраженным ударным волнам, распространяющимся в объеме камеры после сгорания смеси. Понятно, что использование таких смесей в реальных условиях невозможно в силу того, что столь большие скачки давления приводят к быстрому износу двигателя. При увеличении содержания пара в смеси до 2,0% режим сгорания перестает быть детонационным. Сгорание такой смеси происходит за 1,04 мс, а скачок давления близок к 130 атм, что все еще превышает давление, обеспечивающее реализацию длительных циклов сгорания топлива в камере двигателя. Для смесей с метаном и бедных смесей аналогичным образом были определены следующие граничные содержания добавок, ниже которых детонация не наблюдается: 1,0%  $\text{CH}_4$  и 3,0% избытка воздуха, соответственно. Последующее увеличение добавки пара приводит к уменьшению максимального давления за цикл и к увеличению угла п.к.в., при котором это максимальное давление в камере сгорания достигается.

Рассмотрим более подробно развитие различных режимов сгорания при использовании разного количества добавок (на примере водяного пара) на основе теневых картин течения, представленных на рис. 31 и 32. На рисунках 31, 32 (а) и 32 (б) представлена эволюция полей течений при сгорании смесей водорода с добавлением 1,0, 2,0 и 4,0% водяного пара, соответственно, то есть рассмотрены случаи, для которых на рисунке 30 были приведены индикаторные диаграммы. В случае смеси с добавлением 1,0% пара в среде в результате подвода энергии от искры инициируется детонационная волна, которая приводит к весьма быстрому сгоранию всей смеси в течение 30 мкс. В случаях использования смесей с 2,0 и 4,0%



водяного пара наблюдается значительно более медленный режим сгорания (см. рис. 30). Режимы, представленные на рисунках 32 (а) и (б) качественно одинаковы, режим на рисунке 32 (б) отличается лишь меньшей скоростью распространения фронта пламени, что связано с большим разбавлением горючего паром. Начальная стадия развития горения в обоих случаях характеризуется достаточно ровным, почти сферическим, фронтом пламени. При этом в области несгоревшей смеси можно наблюдать возникновение волн сжатия, генерируемых в результате расширения продуктов горения в более холодную непрореагировавшую смесь. На более поздней стадии на поверхности фронта пламени наблюдается интенсивный рост неустойчивости, что связано с воздействием на фронт отраженных от стенок камеры сгорания волн сжатия. В виду периодического характера воздействия волн сжатия на фронт пламени можно наблюдать последовательные стадии роста неустойчивости и ее стабилизации. При этом в случае реализации более интенсивного режима в смеси с меньшим содержанием паров воды наблюдается соответственно более интенсивный рост неустойчивости, и на финальной стадии развития горения вблизи боковой стенки цилиндра можно наблюдать существенно изрезанную струеобразную структуру фронта пламени. Развитие поверхности фронта пламени ведет к его ускорению, что в свою очередь определяет формирование ударных волн в системе. Этот факт отражен на индикаторной диаграмме (рис. 30) в форме пиков давления, возникающих на последних стадиях сгорания смеси (вблизи максимума индикаторного давления). При большем разбавлении водородно-воздушной смеси парами воды (режим (б)) описанные газодинамические эффекты оказываются менее выраженными, что обеспечивает более мягкий режим сгорания смеси с существенно меньшей амплитудой колебаний давления. На рисунке 33 показаны характерные профили температуры и давления, характеризующие структуру волн реакции, распространяющихся в детонационном (рис. 33, а) и дефлаграционном (рис. 33, б) режимах. Во втором случае можно наблюдать формирование волн сжатия в процессе горения на фоне непрерывного роста давления в камере сгорания. Природа наблюдаемых на

индикаторной диаграмме колебаний давления связана именно с этими волнами сжатия, которые также можно наблюдать на теневых картинах течения (рис. 32).

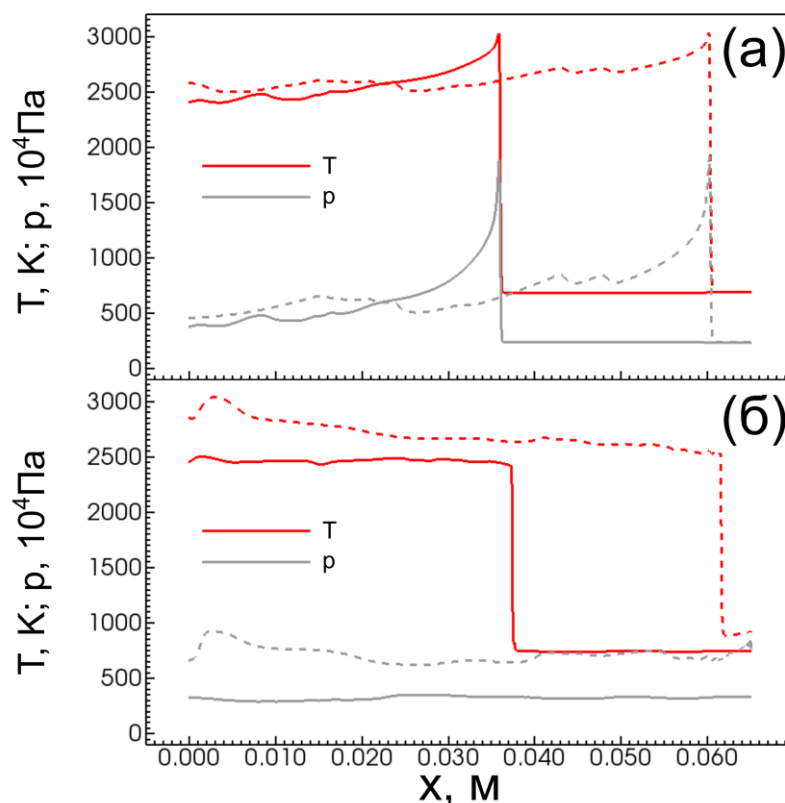


Рисунок 33. Профили температуры и скорости в характерных сечениях при фиксированном  $z$  для двух временных отсчетов для (а) горения смеси водорода с добавлением 1,0% водяного пара, (б) добавлением 2,0% водяного пара.

В экспериментальной работе [91] представлены теневые изображения, полученные при горении стехиометрической смеси водород-воздух в двигателе с искровым зажиганием. В данной работе не наблюдалась детонация, а теневые картины схожи с полученными в настоящей работе для режима “нормального” горения (см. рисунок 32): фронт пламени на начальной стадии имеет ровную, практически сферическую форму, что, как показано в [91] сильно отличается от фронта горения пропана. Полученное качественное совпадение подтверждает корректность результатов настоящей работы, полученных для режимов “нормального” горения. Отсутствие детонации в работе [91] при горении стехиометрической водородно-воздушной смеси может быть объяснено использованием значительно более низкой степени сжатия и более низкой скорости

вращения коленчатого вала в [91] по сравнению с настоящей работой: 7,0 по сравнению с 11,4 и 1380 об/мин по сравнению с 1500 об/мин.

#### **4.5. Влияние содержания добавок низкоактивных веществ к водороду на параметры работы двигателя**

В настоящем разделе рассмотрим, как влияет повышение количества разных типов добавок к водороду по сравнению с минимальными количествами, обеспечивающими отсутствие детонации, на изменение следующих параметров работы двигателя: максимального давления и угла п.к.в., соответствующего максимальному давлению.

Как показали расчеты, описанные в разделе 4.4, минимальные добавки, не приводящие к детонации, составляют: 1,0%  $\text{CH}_4$  (соответствующий коэффициент избытка воздуха  $\lambda = 0,9$ , соотношение водород/метан (по объему) – 96,6%  $\text{H}_2$  / 3,4%  $\text{CH}_4$ ), 2,0%  $\text{H}_2\text{O}$  (пар) ( $\lambda = 1,1$ ), 3,0% избыток воздуха ( $\lambda = 1,2$ ). При добавлении метана наблюдается переход смеси в область более богатых смесей. Действительно, согласно стехиометрическим уравнениям для горения метана требуется в 4 раза больший объем окислителя, чем для горения водорода, поэтому при замещении доли водорода метаном окислитель окажется в большем недостатке по сравнению с исходной водородной смесью, то есть смесь станет более богатой. Полученная закономерность, согласно которой для подавления детонации требуется по объему меньше метана, чем избытка воздуха, связана со сложным характером зависимостей ламинарной скорости от доли горючего в воздухе и одновременно доли метана в горючем при рассмотрении в качестве горючего смеси  $\text{H}_2$  /  $\text{CH}_4$ . Такие зависимости, имеющие формы куполов, приведены, например, в [64, рис. 1.34]. Отметим, что распространение пламени в двигателе внутреннего сгорания подвержено влиянию газодинамических факторов и может иметь турбулентный характер [92,94], однако сравнение ламинарных скоростей,

позволяет корректно сопоставить кинетику развития горения различных смесей в двигателе. Согласно указанным зависимостям ламинарные скорости для 100%  $H_2$  выше соответствующих скоростей для смеси с небольшим по объему замещением водорода метаном при любом соотношении между топливом и воздухом, поэтому достижение одинаковых скоростей будет наблюдаться при меньшем содержании горючего в воздухе для бедной смеси  $H_2$  / воздух по сравнению со смесью с метаном. Результаты определения критических значений 1,0% метана и 3,0% избытка воздуха отвечают данным выводам.

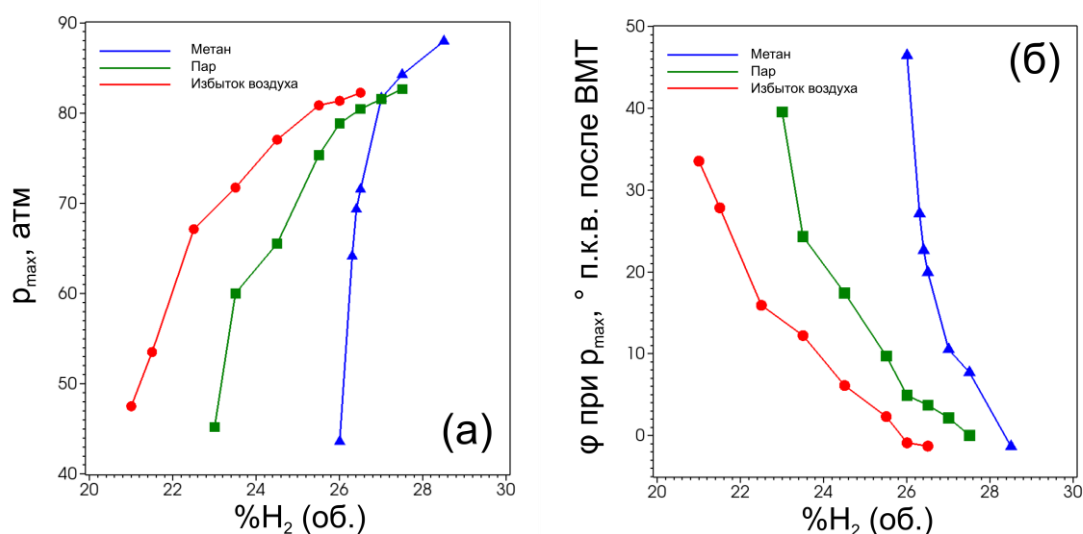


Рисунок 34. (а) Максимальное давление за цикл в зависимости от содержания водорода в смеси для трех типов смесей. (б) Угол п.к.в., соответствующий достижению максимального давления за цикл, в зависимости от содержания водорода в смеси для трех типов смесей. Данный угол п.к.в. отсчитывается от ВМТ.

Последующее увеличение количества добавок по отношению к минимально необходимым для обеспечения отсутствия детонации закономерно приводит к уменьшению максимального давления за цикл и к увеличению угла п.к.в., при котором это максимальное давление в камере сгорания достигается. Для количественного сопоставления рабочих характеристик смесей водорода с различными типами добавок и их процентными соотношениями, были выбраны следующие параметры: максимальное давление, достигаемое за цикл, и соответствующий его достижению угол п.к.в. Как известно из теории двигателей

внутреннего сгорания, термодинамический цикл Отто обеспечивается, если нет преждевременного сгорания, то есть максимальное давление приходится на угол п.к.в. после достижения ВМТ. С другой стороны, этот угол не должен превышать некоторых допустимых значений (примерно  $20^\circ$  п.к.в после ВМТ). В противном случае мощность двигателя снижается. Кроме того, в проведенном анализе учитывалось, что для надежного функционирования двигателя максимально достигаемое за цикл давление должно быть ограничено. В разных случаях за максимально допустимые значения давления принимаются значения от 50 до 86 атм (в настоящей работе принято 80 атм).

На рисунке 34 представлены значения максимального давления и соответствующие углы п.к.в., при которых достигаются максимальные давления, для смесей с различным содержанием водорода и различными типами добавок. Значения давления определялись исходя из индикаторных диаграмм, усредненных по высоким частотам колебаний давления, аналогичных представленной на рис. 30 для смеси с 4,0%  $H_2O$ . Рисунок 34 показывает, что смеси, создающие при сжигании давления близкие к принятому предельному значению в 80 атм, содержат добавки к водороду не менее 2,7%  $CH_4$  (смесь 1), 3,1%  $H_2O$  (пар) (смесь 2), 4,2% избытка воздуха (смесь 3). При этом углы п.к.в., отсчитываемые от ВМТ, при которых в этих смесях достигаются максимумы давления соответственно равны:  $12,4^\circ$  п.к.в. – для смеси 1,  $5^\circ$  п.к.в. – для смеси 2,  $4,5^\circ$  п.к.в. – для смеси 3. Из приведенных результатов видно, что для всех рассмотренных перспективных смесей на основе водорода максимальные давления, близкие к 80 атм достигаются в непосредственной близости от ВМТ (угол отклонения от ВМТ близок или меньше  $10^\circ$  п.к.в.), когда рабочий объем камеры еще весьма мал, и за короткое время создаются излишне большие локальные нагрузки на стенки камеры, что может служить причиной более быстрого износа двигателя. Заметим, что выбранный в работе высокий уровень допустимого в камере сгорания давления соответствует наиболее экономичным с точки зрения использования низкоактивных добавок и в то же время наиболее жестким режимам сжигания топлива в поршневом двигателе. Снижение верхнего допустимого уровня давления в камере до 60 – 50 атм (что

принято в большинстве современных двигателей внутреннего сгорания) приводит, как показали расчеты, к более мягким режимам сжигания топлива. В то же время для всех рассмотренных вариантов максимальное давление, начиная с 60 атм, достигается при повороте коленчатого вала более, чем на  $20^\circ$  п.к.в. от ВМТ, что как уже говорилось, снижает мощность двигателя. В таблице 2 приведены составы смесей, обеспечивающие допустимые значения максимального давления и соответствующие им углы п.к.в., отсчитываемые от ВМТ. В последней строке таблицы приведен состав смесей, гарантирующий достижение максимальных давлений в камере сгорания при угле п.к.в. от ВМТ, близкого, но не превышающего  $20^\circ$ .

Интересно отметить, что проведенные расчеты указывают на высокую чувствительность параметров сгорания смеси в камере двигателя внутреннего сгорания к добавкам метана, что позволяет при сравнительно небольших изменениях в процентном содержании метана получать режимы сжигания топливно-воздушной смеси с требуемыми параметрами рабочего цикла. Такой результат следует из рисунка 34: одинаковые параметры могут быть достигнуты при большем добавлении избытка воздуха, чем метана, и объясняется уже отмеченным выше различием в кинетике химического превращения двух данных типов смесей (бедной смеси  $H_2$  / воздух и смеси с метаном), в том числе определяющим различие ламинарных скоростей. При дальнейшем уменьшении содержания водорода в двух рассматриваемых типах смесей данный эффект будет усиливаться (см. рис. 34), что объясняется помимо указанного различия в ламинарных скоростях горения также выбранной особенностью формирования смесей в данной работе: согласно [64, рис. 1.34], одинаковые ламинарные скорости горения бедных смесей  $H_2$  / воздух и смесей с метаном (при выбранном условии  $\%(H_2 + CH_4)$  в воздухе = 29,5) будут достигаться по мере того, как кривая для горючего – 100%  $H_2$ , показывающая ламинарные скорости горения бедных смесей  $H_2$  / воздух, будет отстоять все дальше от точек кривых для смесей  $H_2$  /  $CH_4$ , соответствующих содержанию  $\%(H_2 + CH_4) = 29,5$ .

Составы смесей, обеспечивающие максимальные давления, не превышающие рекомендуемых допустимых значений и соответствующие им углы п.к.в., отсчитываемые от положения ВМТ

	% CH <sub>4</sub>	φ	% H <sub>2</sub> O	φ	% изб.возд.	φ
	% H <sub>2</sub>		% H <sub>2</sub>		% H <sub>2</sub>	
p <sub>max</sub> < 80 атм	2,7	12,4°	3,1	5°	4,2	4,5°
	26,8		26,4		25,3	
p <sub>max</sub> < 60 атм	3,2	25°	6,0	24°	7,5	22°
	26,3		23,5		22,0	
p <sub>max</sub> < 50 атм	3,4	40°	6,3	33°	8,3	31°
	26,1		23,2		21,2	
φ (p <sub>max</sub> ) < 20° П.К.В.	3,0		5,4		7,5	
	26,5		24,1		22,2	

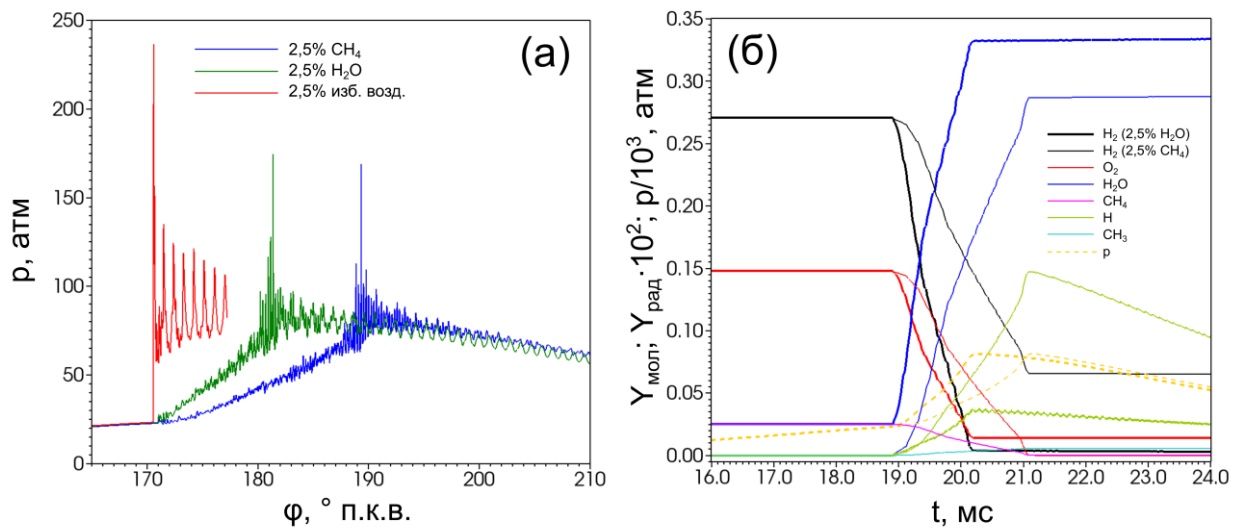


Рисунок 35. (а) Индикаторные диаграммы при содержании 2,5% различных типов добавок. (б) Химическое превращение при сгорании смесей с добавлением 2,5% CH<sub>4</sub> и 2,5% H<sub>2</sub>O (пар) в двигателе.

На рисунке 35 (а) дополнительно показано, что при одинаковом содержании добавок (в качестве примера взято 2,5%) смесь с метаном в наибольшей степени

понижает интенсивность сгорания, что характеризуется достижением наименьшего значения максимального давления и наибольшего значения угла п.к.в., соответствующего максимальному давлению. Смесь водорода с добавлением 2,5%  $\text{H}_2\text{O}$ , пара, имеет коэффициент избытка воздуха 1,09, а смесь с 2,5%  $\text{CH}_4$  –  $\lambda = 0,8$ . Выше сравнение длительности химического превращения, выражаемого значениями ламинарной скорости горения для бедных смесей  $\text{H}_2$  / воздух и смесей с метаном, подтвердило наличие большей интенсивности снижения сгорания в двигателе у смесей с метаном, чем у бедных смесей  $\text{H}_2$  / воздух. Аналогичная зависимость в понижении интенсивности сгорания, однако, имеющая меньшее различие между типами смесей, наблюдается также при сравнении смесей с метаном и смесей с водяным паром. В данном случае смеси с метаном характеризуются более медленным протеканием химического превращения, чем смеси с таким же содержанием водяного пара (см. рис. 35, б). Помимо этого, для смесей с метаном наблюдается на 5,86% большее недогорание водорода, чем для смесей с водяным паром.

#### **4.6. Горение обедненных смесей на основе водорода в двигателе. Сравнение с экспериментальными данными**

В настоящем разделе приведены результаты численного моделирования сгорания водорода, выполненные в постановке проведенных в ОИВТ РАН в Отделе «Распределенных энергетических систем» экспериментов, и результаты сопоставления рассчитанных и экспериментально полученных индикаторных диаграмм для подтверждения работоспособности вычислительного алгоритма с точки зрения получения с его применением достоверных количественных оценок, что является важным для сделанных в разделах 4.4, 4.5 выводов.



Основные параметры двигателя, на котором были проведены эксперименты, приведены в разделе 4.3. Также в 4.3 представлены особенности постановки расчетов.

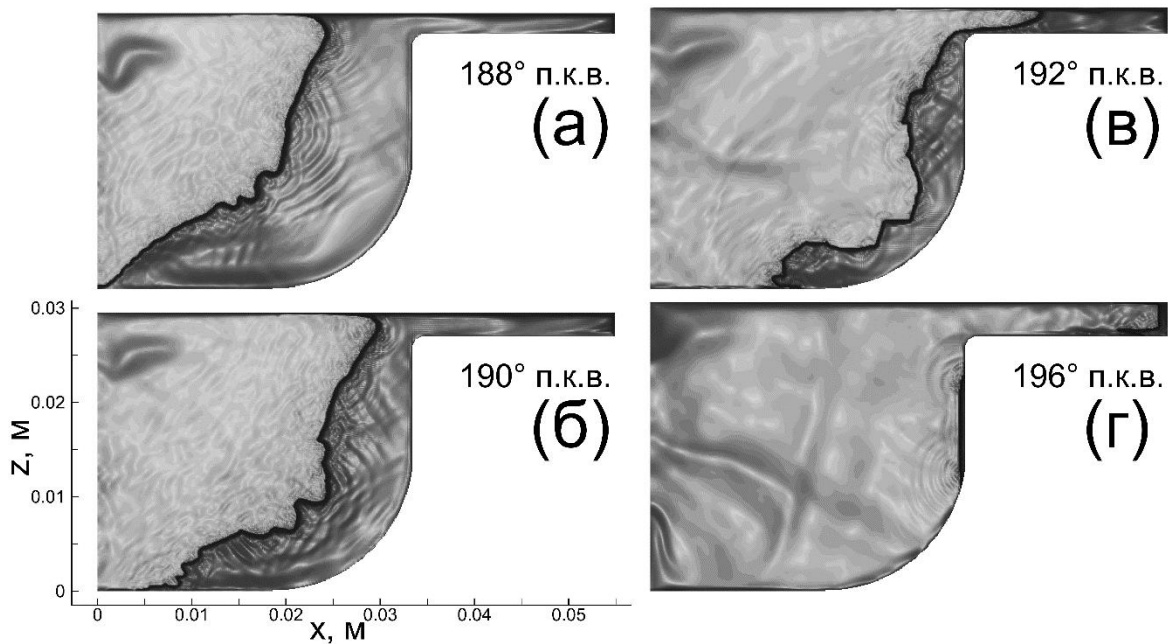


Рисунок 36. Поле градиента плотности, иллюстрирующее течения, развивающиеся в камере сгорания при использовании в качестве топлива  $H_2$  при  $\lambda = 1,5$ . Поля течений представлены на последовательные моменты времени, соответствующие углам п.к.в. 188 – 196°.

В качестве топлива в экспериментах использовался газообразный водород, 100%  $H_2$ . Эксперименты проводились при качественном регулировании мощности двигателя посредством использования различной степени обеднения водорода,  $\lambda$ . В таком подходе в отличие от использования водорода при  $\lambda = 1$  (стехиометрическая смесь) дроссельная заслонка была полностью открыта. Отметим, что указанный подход качественного регулирования мощности является распространенным при использовании водорода либо смесей с водородом в качестве топлива [20,98]. Кроме того, в работе [20] при использовании двигателя со степенью сжатия 10,3 показано, что работа двигателя на водороде с применением качественного регулирования нагрузки при полностью открытой дроссельной заслонке позволяет получить наибольшие значения КПД во всем

испытанном диапазоне скоростей 1500-4500 об/мин в сравнении с работой двигателя на водороде при  $\lambda = 1$  и дросселировании, что, как отмечено, происходит за счет уменьшения насосных потерь в подходе качественного регулирования.

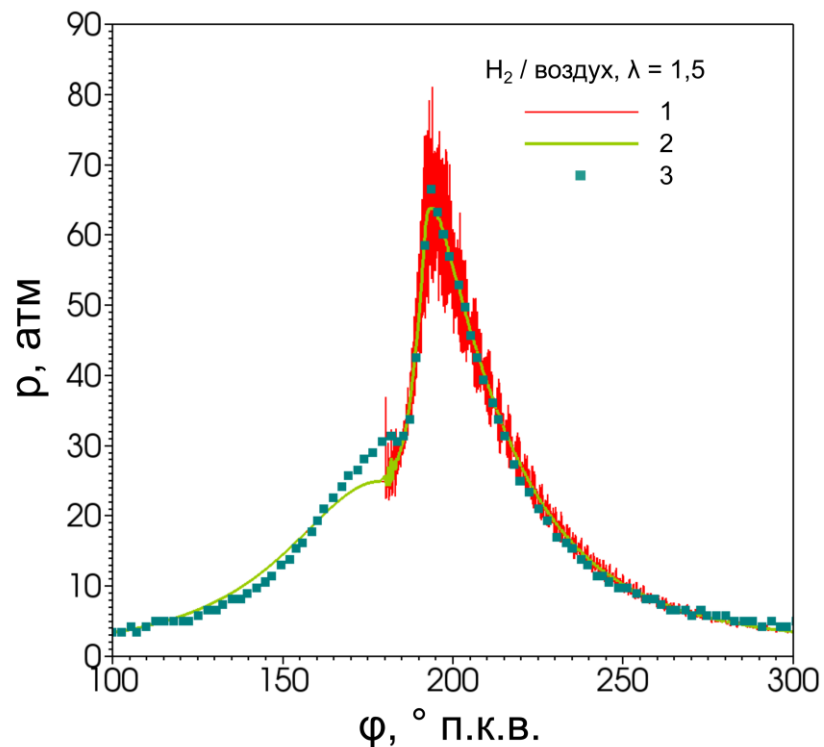


Рисунок 37. Индикаторные диаграммы для смесей H<sub>2</sub> / воздух,  $\lambda = 1,5$ : полученные в расчетах (1) и эксперименте (3). Кривая 2 представляет сглаженную кривую 1.

В экспериментах, результат которых используется в настоящей работе, коэффициент избытка воздуха варьировался от 3,0 до минимально допустимого для нормальной работы двигателя. Для используемого двигателя со степенью сжатия 11,4 таким значением оказалось  $\lambda = 1,4$ . В экспериментах при  $\lambda = 1,4$  возникали обратные вспышки во впускном коллекторе: воспламенение водорода при впуске за счет нагрева от разогретых частей двигателя. Отметим, что значение  $\lambda = 1,4$ , соответствующее содержанию водорода 23,1%, превышает полученное предельное значение  $\lambda = 1,2$ , обеспечивающее отсутствие детонации (26,5% H<sub>2</sub>). Экспериментально полученный факт того, что при  $\lambda > 1,2$  возможна реализация недетонационного режима сгорания водородно-воздушной смеси в камере сгорания поршневого двигателя дополнительно подтверждает полученные выше количественные результаты по критическим составам смесей.

Моделирование с учетом условий проведенных экспериментов выполнялось для смеси с  $\lambda = 1,5$ . На рисунке 35 показаны соответствующие теневые изображения распространения пламени и волн сжатия в камере сгорания. Форма фронта отличается от сферической, однако, к моменту достижения  $188^\circ$  п.к.в. (см. рис. 36, а), наблюдается формирование возмущений на фронте и их рост в последующие моменты времени. Развитие возмущений вызывает растяжение фронта вдоль направления под углом к оси камеры, что возвращает форму фронта к сферической. При  $196^\circ$  п.к.в. (см. рис. 36, г), достаточно значительном отходе от ВМТ, фронт достигает стенок камеры и поршня, минимизируя тем самым недогорание водорода (при больших  $\lambda$ , характеризующихся более низкими скоростями горения, уже при существенном расширении фронт пламени не успевает достичь стенок камеры, так что недогорание водорода возрастает значительно).

На рисунке 37 приведены индикаторные диаграммы при сгорании смеси с  $\lambda = 1,5$ , полученные в эксперименте и расчете. Приведена также сглаженная рассчитанная диаграмма. Согласие результатов является удовлетворительным. Отметим наличие расхождения в области ВМТ: в расчетах не достигается более высокое давление сжатия, получаемое в экспериментах. Данное расхождение вызвано использованием в расчетах модели теплопереноса от газа в стенки, лишь приближенно описывающей процесс. При достижении нагрева смеси за счет сжатия, составляющего  $\sim 700$  К, наблюдается уже существенный теплоотвод в стенки, приводящий к уменьшению давления в камере по сравнению с расчетом, учитывающим адиабатическую изолированность стенок. Тем не менее используемая модель теплопереноса качественно и количественно согласуется с аналогичными литературными данными [96]: максимальная величина потока тепла составляет около  $1200$  Вт/см<sup>2</sup> (при индикаторном давлении  $\sim 7,5$  атм), поток тепла резко возрастает по мере достижения окончания сгорания и сохраняет высокие значения в течение всего такта расширения, что соответствует тому, что наибольшее влияние теплопереноса на ход индикаторной диаграммы приходится на весь такт расширения (также в настоящей работе влияние приходится и на конец такта сжатия, что было отмечено выше).

#### 4.7. Основные результаты

В результате анализа проведенной серии расчетов определены минимальные составы добавок к водородно-воздушной смеси, обеспечивающие бездетонационный режим горения: 1.0% метана, 2.0% пара, 3.0% избытка воздуха. Определены содержания добавок в смесях, делающих их сгорание оптимальным для рабочего цикла двигателя. При этом под оптимальными режимами понимались режимы с максимальным давлением, не превышающим 80 атм, и соответствующим ему углом поворота коленчатого вала, не большим  $20^\circ$  п.к.в. от ВМТ. Смеси с добавлением метана продемонстрировали более высокую способность к понижению интенсивности сгорания, чем смеси с паром и избытком воздуха. Данное поведение объясняется тем, что смеси с метаном обладают большими временами задержки воспламенения, чем смеси с паром, в условиях по температуре и давлению, характерных для протекания процесса сгорания в двигателе. Если рассматривать метаносодержащую смесь как топливо для двигателя в удаленных районах, использование в качестве добавки метана потребует дополнительно его доставки в этот район, таким образом, снижая имеющее место преимущество этой добавки в рамках рассматриваемой концепции.

Получено удовлетворительное согласие с экспериментальной индикаторной диаграммой расчета, выполненного в соответствии с условиями экспериментов, что подтверждает надежность используемой вычислительной модели и достоверность полученных количественных результатов для составов смесей.

## Заключение

В заключении сформулируем основные результаты диссертации:

1. Определены значения нижнего концентрационного предела воспламенения водородно-воздушной смеси: (1) на основе анализа длительности эндо- и экзотермических стадий химического превращения, (2) с учетом развития газодинамических возмущений, инициированных протеканием экзотермических реакций при воспламенении, (3) с учетом условия устойчивого распространения волны дефлаграции в смеси однородного состава. Результаты для указанных вариантов составили ~ 1%, ~ 4%, ~ 10%. Показано, что формирование устойчивой дефлаграционной волны возможно и при локальной концентрации водорода ниже 10%, в том случае если существует пространственно неоднородное возрастающее поле концентрации. В связи с этим целесообразно на практике использовать значение нижнего концентрационного предела устойчивого воспламенения (~ 4%).

2. Выявлены два типа очагов самовоспламенения водорода при его истечении под относительно невысоким давлением (60 атм) в канал, заполненный воздухом, отличающиеся друг от друга как временем жизни, так и механизмами, инициирующими и поддерживающими горение водородно-воздушной смеси. При этом устойчивость очагов второго типа определяется формированием на боковой поверхности струи водорода вихревых течений, обеспечивающих непрерывную подготовку и подачу водородно-воздушной смеси в область очага горения.

3. Получены количественные оценки критического давления водорода и времени раскрытия диафрагмы, необходимых для формирования устойчивого очага горения. Как показало проведенное исследование, для выбранной геометрии канала (диаметр 18 мм, длина 80 мм) самовоспламенение не может происходить при давлениях ниже 60 атм, а при давлении в 60 атм – при временах раскрытия диафрагмы больших 30 мкс. Давление 60 атм, таким образом, составляет нижнюю границу самовозгорания водорода для конкретной частной геометрии канала.

4. Продемонстрировано подавление детонационных режимов сгорания оклостехиометрических смесей на основе водорода в двигателе с искровым зажиганием со степенью сжатия 11,4 за счет использования малых в объемном соотношении добавок низкоактивных компонент: метана – 1,0%, водяного пара – 2,0%, избытка воздуха – 3,0%, при заданном способе формирования составов смесей, при котором содержание воздуха составляло фиксированное значение 70,5%.

5. Получены зависимости основных параметров работы двигателя с заданными характеристиками при использовании составов с содержаниями добавок, большими определенных критических значений, при заданном способе формирования составов смесей. Наиболее сильная зависимость выявлена при использовании в качестве добавки метана. Определены составы, обеспечивающие параметры работы двигателя, оптимальные для достижения высоких КПД.

### **Благодарность**

Выражаю благодарность профессору, доктору физико-математических наук Иванову Михаилу Федоровичу, скончавшемуся в 2017 году, под научным руководством которого я имела честь работать.

**Список литературы**

1. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. — М.: Наука, 1980. — 478 с.
2. Вильямс, Ф.А. Теория горения / Ф.А. Вильямс; пер. с англ. С.С. Новикова, Ю.С. Рязанцева. — М.: Наука, 1971. — 616 с.
3. Hansen, O.R. CFD-based risk assessment for hydrogen applications / O.R. Hansen, P. Middha // *Process Safety Progress*. — 2008. — Vol. 27(1). — P. 29-34.
4. CFD calculations of gas leak dispersion and subsequent gas explosions: validation against ignited impinging hydrogen jet experiments / Middha P., Hansen O.R., Grune J., Kotchourko A. // *Journal of Hazardous Materials*. — 2010. — Vol. 179. — P. 84-94.
5. Ren, S. Influence of concentration distribution of hydrogen in air on measured flammability limits / S. Ren, Q. Zhang // *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. — 2015. — Vol. 34. — P. 82-91.
6. IAEA-TECDOC-1661 Mitigation of hydrogen hazards in severe accidents in nuclear power plants. — Vienna: IAEA, 2011. — 162 p.
7. Wolanski, P. Investigation into the mechanism of the diffusion ignition of a combustible gas flowing into an oxidizing atmosphere / P. Wolanski, S. Wojcicki // *Proceedings of the combustion institute*. — 1973. — Vol. 14. — P. 1217-1223.
8. Wen, J.X. Numerical study on spontaneous ignition of pressurized hydrogen release through a length of tube / J.X. Wen, B.P. Xu, V.H.Y. Tam // *Combustion and flame*. — 2009. — Vol. 156(11). — P. 2173-2189.
9. A flow visualization study on self-ignition of high pressure hydrogen gas released into a tube / Kim Y.R., Lee H.J., Kim S., Jeung I.S. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2013. — Vol. 34. — P. 2057-2064.
10. Numerical study on the spontaneous-ignition features of high-pressure hydrogen released through a tube with burst conditions / Lee H.J., Park J.H., Kim S.D. et al. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2015. — Vol. 35. — P. 2173-2180.

11. An experimental study on shock waves and spontaneous ignition produced by pressurized hydrogen release through a tube into atmosphere / Duan Q.L., Xiao H.H., Gao W. et al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2015. — Vol. 40(25). — P. 8281-8289.
12. Golovastov, S. The influence of diaphragm rupture rate on spontaneous self-ignition of pressurized hydrogen: Experimental investigation / S. Golovastov, V. Bocharnikov // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2012. — Vol. 37(14). — P. 10956-10962.
13. Kaneko, W. Effects of diaphragm rupturing conditions on self-ignition of high-pressure hydrogen / W. Kaneko, K. Ishii // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2016. — Vol. 41(25). — P. 10969-10975.
14. The effect of pressure boundary rupture rate on spontaneous ignition of pressurized hydrogen release / Xu B.P., Wen J.X., Dembele S. et al. // *Journal of loss prevention in process industries*. — 2009. — Vol. 22(3). — P. 279-287.
15. Effects of initial diaphragm shape on spontaneous ignition of high-pressure hydrogen in a two-dimensional duct / Terashima H., Koshi M., Miwada C. et al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2014. — Vol. 39(11). — P. 6013-6023.
16. Experimental study of the performance and emission characteristics of an adapted commercial four-cylinder spark ignition engine running on hydrogen-methane mixtures / Dieguez P.M., Urroz J.C., Marcelino-Sadaba S. et al. // *Applied Energy*. — 2014. — Vol. 113. — P. 1068-1076.
17. Combustion analysis of a spark ignition engine fueled with gaseous blends containing hydrogen / Moreno F., Arroyo J., Munoz M., Monne C. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2012. — Vol. 37. — P. 13564-13573.
18. Combustion analysis of a spark ignition i.c. engine fueled alternatively with natural gas and hydrogen-natural gas blends / Mariani A., Prati M.V., Unich A., Morrone B. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2013. — Vol. 38. — P. 1616-1623.



19. Verhelst, S. Hydrogen-fueled internal combustion engines / S. Verhelst, T. Wallner // Progress in energy and combustion science. — 2009. — Vol. 35. — P. 490-527.
20. Comparison of the renewable transportation fuels, hydrogen and methanol formed from hydrogen, with gasoline – Engine efficiency study / Vancoillie J., Demuynck J., Sileghem L. et al. // International Journal of Hydrogen Energy. — 2012. — Vol. 37. — P. 9914-9924.
21. Navale, S.J. An experimental study on performance, emission and combustion parameters of hydrogen fueled spark ignition engine with the timed manifold injection system / S.J. Navale, R.R. Kulkarni, S.S. Thipse // International Journal of Hydrogen Energy. — 2017. — Vol. 42. — P. 8299-8309.
22. Unni, J.K. Development of hydrogen fueled transport engine and field tests on vehicles / J.K. Unni, P. Govindappa, L.M. Das // International Journal of Hydrogen Energy. — 2017. — Vol. 42. — P. 643-651.
23. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2006. — 736 с. — т. VI. Гидродинамика.
24. Седов, Л.И. Механика сплошной среды: в 2 т. / Л.И. Седов. — М.: Наука, 1970. — 492 с. — 1 т.
25. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл; пер. с англ. Г.Л. Агафонова; под ред. П.А. Власова. — М.: Физматлит, 2006. — 352 с.
26. Гиршфельдер, Дж. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд; пер. с англ. под ред. Е.В. Ступоченко. — М.: Изд-во иностранной литературы, 1961. — 928 с.
27. Hanley, H.J.M. The viscosity and thermal coefficients of dilute nitrogen and oxygen / H.J.M. Hanley, J.F. Ely // Journal of Physical and Chemical Reference Data. — 1973. — Vol. 2(4). — P. 735-755.
28. Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion. Report ANL-05/20, TAE 960 / Burcat A., Ruscic B. — Illinois, USA: Argonne National Laboratory, 2005. — 30 p.

29. Химия / Под ред. А.И. Горбунова. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2007. — 688 с.
30. Comprehensive modeling study of hydrogen oxidation / O Conaire M., Curran H.J., Simmie J.M. et al. // International Journal of Chemical Kinetics. — 2004. — Vol. 36(11). — P. 603-622.
31. Methane/propane oxidation at high pressures: experimental and detailed chemical kinetic modeling / Petersen E.L., Kalitan D.M., Simmons S. et al. // Proceedings of the Combustion Institute. — 2007. — Vol. 31. — P. 447-454.
32. Detonability of H<sub>2</sub>/CO/CO<sub>2</sub>/Air mixtures / Kusharin A.Y., Agafonov G.L., Popov O.E., Gelfand B.E. // Combustion science and technology. — 1998. — Vol. 135. — P. 85-98.
33. Konnov, A.A. Refinement of the kinetic mechanism of hydrogen combustion / A.A. Konnov // Химическая физика. — 2004. — № 23(8). — С. 5-18.
34. Starik, A.M. On the influence of singlet oxygen molecules on the speed of flame propagation in methane-air mixture / A.M. Starik, V.E. Kozlov, N.S. Titova // Combustion and Flame. — 2010. — Vol. 157(2). — P. 313-327.
35. Kazakov, A. Reduced version of GRI-Mech1.2 [Электронный ресурс] / A. Kazakov, M. Frenklach. — 1994. — Режим доступа: <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
36. Уманский, С.Я. Теория элементарных химических реакций / С.Я. Уманский. — Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2009. — 408 с.
37. Белоцерковский, О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. — М.: Наука, 1982. — 392 с.
38. Numerical modeling of the propagating flame and knock occurrence in spark-ignition engines / Liberman M.A., Ivanov M.F., Peil O.E. et al. // Combustion science and technology. — 2004. — Vol. 177(1). — P. 151-182.
39. Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / Э. Хайрер, Г. Ваннер; пер. с англ. — М.: Мир, 1999. — 685 с.

40. Slatec. Common mathematical library [Электронный ресурс]. — 1993. — Режим доступа: <http://www.netlib.org/slatec/index.html>.
41. Seery, D.J. An experimental and analytical study of methane oxidation behind shock waves / D.J. Seery, C.T. Bowman // *Combustion and Flame*. — 1970. — Vol. 14. — P. 37-48.
42. Global reduced mechanisms for methane and hydrogen combustion with nitric oxide formation constructed with CSP data / Massias A., Diamantis D., Mastorakos E., Goussis D. // *Combustion theory and modelling*. — 1999. — Vol. 3(2). — P. 233-257.
43. Validation of detailed reaction mechanisms for detonation simulation. Report FM99-5 / Schultz E., Shepherd J. — Pasadena: California Institute of Technology, 2000. — 230 p.
44. Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and nitrogen dioxide. NASA Report CR-2896 / Slack M., Grillo A. — 1977.
45. A shock tube study of the ignition delay of hydrogen-air mixtures near the second explosion limit. Report AFAPL-TR-66-74 / Craig R.R. — 1966.
46. Bhaskaran, K.A. Shock tube study of the effect of unsymmetric dimethylhydrazine on the ignition characteristics of hydrogen-air mixtures / K.A. Bhaskaran, M.C. Gupta, T.H. Just // *Combustion and Flame*. — 1973. — Vol. 21. — P. 45-48.
47. Wang, B.L. Ignition of shock-heated H<sub>2</sub>-air-steam mixtures / B.L. Wang, H. Olivier, H. Gronig // *Combustion and Flame*. — 2003. — Vol. 133. — P. 93-106.
48. Experimental and modeling study on ignition delays of lean mixtures of methane, hydrogen, oxygen, and argon at elevated pressures / Zhang Y., Huang Z., Wei L. et al. // *Combustion and Flame*. — 2012. — Vol. 159. — P. 918-931.
49. Иванов, М.Ф. Особенности распространения пламени в замкнутых объемах / М.Ф. Иванов, А.Д. Киверин, Ю.В. Рыков // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки»*. — 2010. — № 1. — С. 21-38.
50. Experimental and numerical investigation of the effect of H<sub>2</sub> enrichment on laminar methane-air flame thickness / Lafay Y., Renou B., Cabot G., Boukhalfa M. // *Combustion and Flame*. — 2008. — Vol. 153. — P. 540-561.

51. Kwon, O.C. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames: measurements and predictions / O.C. Kwon, G.M. Faeth // *Combustion and Flame*. — 2001. — Vol. 124. — P. 590-610.
52. Tse, S.D. Morphology and burning rates of expanding spherical flames in  $H_2/O_2$ /inert mixtures up to 60 atmospheres / S.D. Tse, D.L. Zhu, C.K. Law // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2000. — Vol. 28. — P. 1793-1800.
53. Aung, K.T. Effects of pressure and nitrogen dilution on flame/stretch interactions of laminar premixed  $H_2/O_2/N_2$  flames / K.T. Aung, M.I. Hassan, G.M. Faeth // *Combustion and Flame*. — 1998. — Vol. 112. — P. 1-15.
54. Vagelopoulos, C.M. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin-flame technique / C.M. Vagelopoulos, F.N. Egolfopoulos // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 1994. — Vol. 25. — P. 1341-1347.
55. Dowdy, D.R. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures / D.R. Dowdy, D.B. Smith, S.C. Taylor // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 1990. — Vol. 23. — P. 325-332.
56. Iijima, T. Effects of temperature and pressure on burning velocity / T. Iijima, T. Takeno // *Combustion and Flame*. — 1986. — Vol. 65. — P. 35-43.
57. Scholte, T.G. Burning velocities of mixtures of hydrogen, carbon monoxide and methane with air / T.G. Scholte, P.B. Vaags // *Combustion and Flame*. — 1959. — Vol. 3. — P. 511-524.
58. Experimental and numerical study on laminar burning velocities and flame instabilities of hydrogen-air mixtures at elevated pressures and temperatures / Hu E., Huang Z., He J., Miao H. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2009. — Vol. 34. — P. 8741-8755.
59. Effect of initial mixture temperature on burning velocity of hydrogen-air mixtures with preheating and simulated preburning. NACA Technical note 4156 / Heimel S. — 1957.

60. One-step reduced kinetics for lean hydrogen-air deflagration / Fernandez-Galisteo D., Sanchez A.L., Linan A., Williams F.A. // *Combustion and Flame*. — 2009. — Vol. 156. — P. 985-996.
61. ГОСТ 31610.10—2012 Электрооборудование для взрывоопасных газовых сред. Часть 10. Классификация взрывоопасных зон. — М.: Стандартинформ, 2013. — 71 с.
62. Limits of flammability of gases and vapors. Bulletin 503 US Bureau of Mines / Coward H.F., Jones G.W. — 1952.
63. Flammability of methane, propane, and hydrogen gases / Cashdollar K.L., Zlochower I.A., Green G.M. et al. // *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. — 2000. — Vol. 13(3-5). — P. 327-340.
64. Гельфанд, Б.Е. Водород: параметры горения и взрыва / Б.Е. Гельфанд, О.Е. Попов, Б.Б. Чайванов. — М.: Физматлит, 2008. — 288 с.
65. Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety. State-of-the Art Report, OCDE-Nuclear Safety, NEA/CSNI/R. — 2000.
66. GRI-Mech3.0 [Электронный ресурс]. — Режим доступа: [//me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://me.berkeley.edu/gri_mech/).
67. Зельдович, Я.Б. Классификация режимов экзотермической реакции в зависимости от начальных условий / Я.Б. Зельдович. — Черноголовка, 1978. — 7 с. — Препринт Института химической физики АН СССР.
68. Liberman, M.A. Regimes of chemical reaction waves initiated by nonuniform initial conditions for detailed chemical reaction models / M.A. Liberman, A.D. Kiverin, M.F. Ivanov // *Physical review E*. — 2012. — Vol. 85. — P. 056312-1 – 056312-11.
69. Ronney, P.D. Near-limit flame structures at low Lewis number / P.D. Ronney // *Combustion and Flame*. — 1990. — Vol. 82(1). — P. 1-14.
70. Large-scale flame structures in ultra-lean hydrogen-air mixtures / Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2018. — Vol. 43. — P. 1894-1901.

71. The shock-wave mechanism of spontaneous ignition of hydrogen under conditions of sudden efflux from reservoir at high pressure / Bazhenova T.V., Bragin M.F., Golub V.V., Ivanov M.F. // High Temperature. — 2007. — Vol. 45(5). — P. 665-672.
72. Lee, B.J. Numerical study of spontaneous ignition of pressurized hydrogen released by the failure of a rupture disk into a tube / B.J. Lee, I.S. Jeung // International journal of hydrogen energy. — 2009. — Vol. 34(20). — P. 8763-8769.
73. Spontaneous ignition of pressurized releases of hydrogen and natural gas into air / Dryer F.L., Chaos M., Zhao Z.W. et al. // Combustion science and technology. — 2007. — Vol. 179(4). — P. 663-694.
74. Self-ignition and explosion during discharge of high-pressure hydrogen / Mogi T., Kim D., Shiina H., Horiguchi S. // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2008. — Vol. 21(2). — P. 199-204.
75. Shock-induced ignition of hydrogen gas during accidental or technical opening of high-pressure tanks / Golub V.V., Baklanov D.I., Bazhenova T.V. et al. // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2007. — Vol. 20(4-6). — P. 439-446.
76. Mechanisms of high-pressure hydrogen gas self-ignition in tubes / Golub V.V., Baklanov D.I., Golovastov S.V. // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2008. — Vol. 21(2). — P. 185-198.
77. Киверин, А.Д. Исследование нестационарных процессов горения газообразных горючих смесей в каналах: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.14 / Киверин Алексей Дмитриевич. — М., 2011. — 125 с.
78. Дулов, В.Г. Гидродинамика процессов истечения / В.Г. Дулов, Г.А. Лукьянов. — Новосибирск: Наука, 1984. — 233 с.
79. Study on self-ignition of high pressurize hydrogen released by rupture disk with various open area / H.J. Lee, S.Y. Lee, H. Yoon, M.C. Jeong, I.S. Jeung // 36<sup>th</sup> International Symposium on Combustion. — 2016.
80. Angrisani, G. Distributed microtrigeneration systems / G. Angrisani, C. Roselli, M. Sasso // Progress in energy and combustion science. — 2012. — Vol. 38(4). — P. 502-521.

81. Концепция развития распределенной энергетики в России / Батенин В.М., Зайченко В.М., Леонтьев А.И., Чернявский А.А. // Известия РАН. Энергетика. — 2017. — № 1. — С. 3-18.
82. Wang, L. Optimal decentralized coordination of electric vehicles and renewable generators in a distribution network using A\* search / L. Wang, S. Sharkh, A. Chipperfield // International Journal of Electrical Power and Energy Systems. — 2018. — Vol. 98. — P. 474-487.
83. Зайченко, В.М. Распределенное производство энергии / В.М. Зайченко, А.Д. Цой, А.Я. Штеренберг. — М.: БуКос, 2008. — 207 с.
84. Marchenko, O.V. Mathematical modeling and economic efficiency assessment of autonomous energy systems with production and storage of secondary energy carriers / O.V. Marchenko // International Journal of Low-Carbon Technologies. — 2010. — Vol. 5. — P. 250-255.
85. Шпильрайн, Э.Э. Введение в водородную энергетику / Э.Э. Шпильрайн, С.П. Малышенко, Г.Г. Кулешов. — М.: Энергоатомиздат, 1984. — 264 с.
86. Марченко, О.В. Сравнение экономической эффективности производства и аккумулирования водорода и электроэнергии / О.В. Марченко, С.В. Соломин // Известия РАН. Энергетика. — 2014. — № 3. — С. 114-123.
87. Klell, M. Mixtures of hydrogen and methane in the internal combustion engine – Synergies, potential and regulations / M. Klell, H. Eichlseder, M. Sartory // International Journal of Hydrogen Energy. — 2012. — Vol. 37. — P. 11531-11540.
88. Vudumu, S.K. Computational modeling, validation, and utilization for predicting the performance, combustion and emission characteristics of hydrogen IC engines / S.K. Vudumu, U.O. Koylu // Energy. — 2011. — Vol. 36. — P. 647-655.
89. Li, H. Knock in spark ignition hydrogen engines / H. Li, G. Karim // International Journal of Hydrogen Energy. — 2004. — Vol. 29. — P. 859-865.
90. Luo, Q.H. Inducing factors and frequency of combustion knock in hydrogen internal combustion engines / Q.H. Luo, B.G. Sun // International Journal of Hydrogen Energy. — 2016. — Vol. 41. — P. 16296-16305.

91. Heywood, J.B. Comparison of flame development in a spark-ignition engine fueled with propane and hydrogen / J.B. Heywood, F.R. Vilchis // *Combustion Science and Technology*. — 1984. — Vol. 38. — P. 313-324.
92. Кавтарадзе, Р.З. Теория поршневых двигателей / Р.З. Кавтарадзе. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. — 719 с.
93. Стечкин, Б.С. Индикаторная диаграмма, динамика тепловыделения и рабочий цикл быстроходного поршневого двигателя / Б.С. Стечкин, К.И. Генкин, В.С. Золотаревский, И.В. Скородинский. — М.: Изд-во АН СССР, 1960. — 200 с.
94. Heywood, J.B. *Internal combustion engine fundamentals* / J.B. Heywood. — N.Y.: Mc. Graw Hill, 1988. — 930 p.
95. Коротких, А.Г. Теплопроводность материалов / А.Г. Коротких. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2011. — 97 с.
96. On the applicability of empirical heat transfer models for hydrogen combustion engines / Demuynck J., De Paere M., Huisseune H. et al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2011. — Vol. 36. — P. 975-984.
97. Heat loss comparison between hydrogen, methane, gasoline and methanol in a spark-ignition internal combustion engine / Demuynck J., De Paere M., Verhaert I., Verhelst S. // *Energy Procedia*. — 2012. — Vol. 29. — P. 138-146.
98. Sierens, R. Variable composition hydrogen/natural gas mixtures for increased engine efficiency and decreased emissions / R. Sierens, E. Rosseel // *Journal of Engines and Gas Turbines Power*. — 2000. — Vol. 122. — P. 135-140.