

# ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА НА ДИНАМИКУ РОСТА ДАВЛЕНИЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И СГОРАНИЯ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ\*

А. М. Тереза<sup>1</sup>, Г. Л. Агафонов<sup>2</sup>, Э. К. Андержанов<sup>3</sup>, А. С. Бетев<sup>4</sup>, С. П. Медведев<sup>5</sup>,  
С. В. Хомик<sup>6</sup>, Т. Т. Черепанова<sup>7</sup>

**Аннотация:** Проведено численное моделирование задержек воспламенения и роста давления в процессе самовоспламенения бедной (6% H<sub>2</sub>), стехиометрической (29,6% H<sub>2</sub>) и богатой (75% H<sub>2</sub>) водородно-воздушных смесей при начальных давлениях 1 и 6 атм в диапазоне начальных температур 850–1700 К. Установлено, что для бедных и богатых смесей рост давления практически не зависит от выбора детального кинетического механизма (ДКМ). В то же время для стехиометрической смеси такая зависимость наблюдается. Выход продуктов горения на параметры термодинамического равновесия (ТР) во временном масштабе задержки воспламенения замедляется с ростом начальной температуры и ускоряется при повышении давления. Для стехиометрической смеси ТР достигается быстрее, чем для бедной и богатой. Показано, что динамика роста давления, определяемая химической кинетикой после индукционного периода самовоспламенения, может быть разной в зависимости от ДКМ и не зависит от задержки воспламенения. Данный факт может иметь существенное значение при относительно высоких температурах.

**Ключевые слова:** водородно-воздушные смеси; динамика роста давления; самовоспламенение; задержка воспламенения; численное моделирование; химическая кинетика; детальный кинетический механизм

DOI: 10.30826/CE24170301

EDN: SMJXGW

## Литература

1. Sanchez A. L., Williams F. A. Recent advances in understanding of flammability characteristics of hydrogen // Prog. Energ. Combust., 2014. Vol. 41. P. 1–55. doi: 10.1016/j.peccs.2013.10.002.
2. Grune J., Sempert K., Haberstroh H., Kuznetsov M., Jordan T. Experimental investigation of hydrogen–air deflagrations and detonations in semi-confined flat layers // J. Loss Prevent. Proc., 2013. Vol. 26. P. 317–323. doi: 10.1016/j.jlpp.2011.09.008.
3. Домашенко А. М., Степанов А. В. Взрывопожароопасность при создании и эксплуатации промышленных систем получения, хранения и транспортирования жидкого водорода. Методы обеспечения защиты // Вести газовой науки, 2022. № 2(51). С. 211–220.
4. Семёнов Н. Н. Цепные реакции. — М.: Госхимтехиздат, 1934. 562 с.
5. Dryer F. L., Chaos M. Ignition of syngas/air and hydrogen/air mixtures at low temperatures and high pressures: Experimental data interpretation and kinetic modeling implications // Combust. Flame, 2008. Vol. 152. P. 293–299. doi: 10.1016/j.combustflame.2007.08.005.
6. Shimizu K., Hibi A., Koshi M. Updated kinetic mechanism for high-pressure hydrogen combustion // J. Propul. Power, 2011. Vol. 27. No. 2. P. 383–395. doi: 10.2514/1.48553.
7. Mathieu O., Levacque A., Petersen E. L. Effects of N<sub>2</sub>O addition on the ignition of H<sub>2</sub>–O<sub>2</sub> mixtures: Experimental and detailed kinetic modeling study // Int. J. Hydrogen Energ., 2012. Vol. 37. P. 15393. doi: 10.1016/j.ijhydene.2012.07.071.
8. Keromnes A., Metcalfe W. K., Heufer K. A., et al. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // Combust. Flame, 2013. Vol. 160. P. 995–1011. doi: 10.1016/j.combustflame.2013.01.001.
9. Hashemi H., Christensen J. M., Gersen S., Glarborg P. Hydrogen oxidation at high pressure and intermediate temperatures: Experiments and kinetic modeling //

\* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания № 122040500073-4.

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, tereza@chph.ras.ru

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, gennady\_1@mail.ru

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, enes@inbox.ru

<sup>4</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, asbetev@gmail.com

<sup>5</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, s\_p\_medvedev@chph.ras.ru

<sup>6</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, sergei.khomik@gmail.com

<sup>7</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, tatkanor@gmail.com

- P. Combust. Inst., 2015. Vol. 35. P. 553–560. doi: 10.1016/j.proci.2014.05.101.
10. Alekseev V. A., Christensen M., Konnov A. A. The effect of temperature on the adiabatic burning velocities of diluted hydrogen flames: A kinetic study using an updated mechanism // Combust. Flame, 2015. Vol. 162. P. 1884–1898. doi: 10.1016/j.combustflame.2014.12.009.
  11. Власов П. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Реакции инициирования самовоспламенения смесей  $H_2-O_2$  в ударных волнах // Хим. физика, 2016. Т. 35. № 6. С. 35–48.
  12. Hu E., Pan L., Gao Z., Lu X., Meng X., Huang Z. Shock tube study on ignition delay of hydrogen and evaluation of various kinetic models // Int. J. Hydrogen Energ., 2016. Vol. 41. No. 30. P. 13261–13280. doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.05.118.
  13. Konnov A. A. Yet another kinetic mechanism for hydrogen combustion // Combust. Flame, 2019. Vol. 203. P. 14–22. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.01.032.
  14. Zhang Y., Fu J., Xie M., Liu J. Improvement of  $H_2/O_2$  chemical kinetic mechanism for high pressure combustion // Int. J. Hydrogen Energ., 2021. Vol. 46. No. 7. P. 5799–5811. doi: 10.1016/j.ijhydene.2020.11.083.
  15. Jin S., Shu B., He X., Fernandes R., Li L. A study on autoignition characteristics of  $H_2-O_2$  mixtures with diluents of  $Ar/N_2$  in rapid compression machine for argon power cycle engines // Fuel, 2021. Vol. 303. P. 121291. doi: 10.1016/j.fuel.2021.121291.
  16. Hong Z., Davidson D. F., Hanson R. K. An improved  $H_2/O_2$  mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements // Combust. Flame, 2011. Vol. 158. P. 633–644. doi: 10.1016/j.combustflame.2010.10.002.
  17. Schonborn A., Sayad P., Konnov A. A., Klingmann J.  $OH^*$ -chemiluminescence during autoignition of hydrogen with air in a pressurised turbulent flow reactor // Int. J. Hydrogen Energ., 2014. Vol. 39. No. 23. P. 12166–12181. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.05.157.
  18. Tingas E.-A., Kyritsis D. C., Goussis D. A.  $H_2$ -air autoignition dynamics around the third explosion limit // J. Energ. Eng., 2019. Vol. 145. No. 1. P. 04018074. doi: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000588.
  19. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. 502 с.
  20. Брякина У. Ф., Губин С. А., Тереза А. М., Шаргатов В. А. Определение границы применимости модели химически равновесной смеси к продуктам детонации газовых смесей // Хим. физика, 2010. Т. 29. № 12. С. 24–31.
  21. Кузнецов Н. М. Кинетика мономолекулярных реакций. — М.: Наука, 1982. 224 с.
  22. CHEMKIN-Pro 15112 Reaction Design. — San Diego, CA, USA, 2011. СК-TUT-10112-1112-UG-1.
  23. Тереза А. М., Агафонов Г. Л., Андержанов Э. А., Медведев С. П., Хомик С. В. Особенности численного моделирования воспламенения бедных водородно-воздушных смесей // Горение и взрыв, 2021. Т. 14. № 4. С. 4–13.
  24. Konnov A. A. On the role of excited species in hydrogen combustion // Combust. Flame, 2015. Vol. 162. P. 3755–3772. doi: 10.1016/j.combustflame.2015.07.014.
  25. Krivosheyev P., Kisel Y., Skilandz A., Sevrouk K., Penyazkov O., Tereza A. Ignition delay of lean hydrogen-air mixtures // Int. J. Hydrogen Energ., 2024. Vol. 66. P. 81–89. doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.03.363.
  26. Тереза А. М., Агафонов Г. Л., Андержанов Э. К., Бетев А. С., Медведев С. П., Хомик С. В. Численное моделирование характеристик самовоспламенения бедных смесей  $H_2$ -воздух // Хим. физика, 2022. Т. 41. № 8. С. 66–73.
  27. Трое Ю., Вагнер Х., Шотт Г., Геттингер Р., Пейдж Ф., Клайн М. Физическая химия быстрых реакций / Под ред. Б. Ф. Левитта; пер. с англ. Е. В. Мозжухина, Ю. П. Петрова. — М.: Мир, 1976. 396 с. (True J., Wagner H. G., Schott G. L., Getzinger R. W., Page F. M., Clyne M. A. A. Physical chemistry of fast reaction / Ed. B. P. Levitt. — London: Plenum, 1973.)

Поступила в редакцию 01.12.2023