

# ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ БЕДНЫХ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ\*

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

**Аннотация:** Проведено численное моделирование задержек воспламенения  $\tau$  и скорости ламинарного горения  $S_L$  бедных водородно-воздушных смесей. Рассчитаны задержки воспламенения  $\tau$  и скорость ламинарного горения  $S_L$  в диапазоне от 6% до 14% водорода при начальном давлении 1 и 6 атм и температуре 800–2000 К. Анализ расчетов с использованием различных детальных кинетических механизмов (ДКМ), представленных в литературе, показал, что полученные расчетные значения  $\tau$  и  $S_L$  достаточно близки. В то же время зависимости задержки  $\tau$  и величины тепловыделения от температуры ведут себя по-разному с ростом начального давления. Показано, что в бедных смесях увеличение начальной концентрации  $H_2$  приводит к незначительному уменьшению значения  $\tau$ . Сделан вывод, что для прогнозирования пожаровзрывобезопасности бедных водородно-воздушных смесей можно использовать любой из представленных ДКМ.

**Ключевые слова:** бедные водородно-воздушные смеси; самовоспламенение; задержка воспламенения; скорость ламинарного горения; численное моделирование; химическая кинетика; детальный кинетический механизм

**DOI:** 10.30826/CE21140401

## Литература

1. *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.
2. *Павлов В. А., Герасимов Г. Я.* Измерение пределов воспламенения и времен индукции водородно-воздушных смесей за фронтом падающей ударной волны при низких температурах // *ИФЖ*, 2014. Т. 87. № 6. С. 1238–1244.
3. *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.
4. *Davidson D. F., Hanson R. K.* Interpreting shock tube ignition data // *Int. J. Chem. Kinet.*, 2004. Vol. 36. No. 9. P. 510–523.
5. *Франк-Каменецкий Д. А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. 502 с.
6. *Oreluk J., Needham C. D., Baskaran S., Sarathy S. M., Burke M. P., West R. H., Frenklach M., Westmoreland P. R.* Dynamic chemical model for  $H_2/O_2$  combustion developed through a community workflow. — Cornell University, 2018. Paper 1801.10093.
7. *Смыгина Е. А.* Влияние состава горючих смесей на основе водорода на режимы воспламенения и горения: Дис. . . . канд. физ.-мат. наук. — Москва: МГТУ им. Н. Э. Баумана., 2018. 120 с.
8. *Petersen E. L., Davidson D. F., Rohrig M., Hanson R. K.* Shock-induced ignition of high-pressure  $H_2-O_2$ -air and  $CH_4-O_2$ -air mixtures. AIAA Paper No. 95-31 13, 1995.
9. *Мартыненко В. В., Пенязков О. Г., Рагоцнер К. А., Шабуня С. И.* Высокотемпературное воспламенение водорода и воздуха при повышенных давлениях за отраженной ударной волной // *ИФЖ*, 2004. Т. 77. № 4. С. 100–107.
10. *Masten D. A., Hanson R. K., Bowman C. T.* Shock tube study of the reaction  $H + O_2 \rightarrow OH + O$  using OH laser absorption // *J. Phys. Chem.*, 1990. Vol. 94. No. 18. P. 7119–7128.
11. *Michael J. V., Sutherland J. W., Harding L. B., Wagner A. F.* Initiation in  $H_2/O_2$ : Rate constants for  $H_2 + O_2 \rightarrow H + HO_2$  at high temperature // *P. Combust. Inst.*, 2000. Vol. 28. P. 1471–1478.

\*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2019–2023 гг. по теме ФИЦ ХФ РАН № 49.23 при финансовой поддержке Госзадания АААА-А18-118031590088-8.

<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, s.p\_medvedev@chph.ras.ru

<sup>5</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, sergei.khomik@gmail.com

12. Petersen E. L., Kalitan D. M., Rickard M. J. A. Calibration and chemical kinetics modeling of an OH chemiluminescence diagnostic. AIAA Paper No. 2003-4493, 2003.
13. Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F. L. An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion // Int. J. Chem. Kinet., 2004. Vol. 36. No. 10. P. 566–575.
14. Pang G. A., Davidson D. F., Hanson R. K. Experimental study and modeling of shock tube ignition delay times for hydrogen–oxygen–argon mixtures at low temperatures // P. Combust. Inst., 2009. Vol. 32. P. 181–188.
15. Hong Z., Davidson D. F., Hanson R. K. An improved H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements // Combust. Flame, 2011. Vol. 158. No. 4. P. 633–644.
16. Aul C. J., Crofton M. W., Mertens J. D., Petersen E. L. A diagnostic for measuring H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> concentration in a shock tube using tunable laser absorption near 7.8 μm // P. Combust. Inst., 2011. Vol. 33. P. 709–716.
17. Burke M. P., Chaos M., Ju Y., Dryer F. L., Klippenstein S. J. Comprehensive H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> kinetic model for high-pressure combustion // Int. J. Chem. Kinet., 2012. Vol. 44. P. 444–474.
18. 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. 15393–15405.
19. 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.
20. Hedayatzadeh S. M., Soltanieh M., Fatehifar E., Heidarinasab A., Nasr M. R. J. An optimized kinetic model for H<sub>2</sub>–O<sub>2</sub> combustion in jet-stirred reactor at atmospheric pressure // J. Research Ecology, 2016. Vol. 4. No. 1. P. 137–146.
21. Mulvihill C. R., Petersen E. L. Concerning shock-tube ignition delay times: An experimental investigation of impurities in the H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> system and beyond // P. Combust. Inst., 2019. Vol. 37. P. 259–266.
22. Smith G. P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Song S., Gardiner W. C., Jr., Lissianski V. V., Qin Z. GRI-Mech 3.0, 1999. <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>.
23. Conaire M. Ó., Curran H. J., Simmie J. M., Pitz W. J., Westbrook C. K. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // Int. J. Chem. Kinet., 2004. Vol. 36. No. 11. P. 603–622.
24. Saxena P., Williams F. A. Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide // Combust. Flame, 2006. Vol. 145. P. 316–323.
25. Konnov A. Remaining uncertainties in the kinetic mechanism of hydrogen combustion // Combust. Flame, 2008. Vol. 152. No. 4. P. 507–528.
26. Le Cong T., Dagaut P. Oxidation of H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> mixtures and effect of hydrogen initial concentration on the combustion of CH<sub>4</sub> and CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub> mixtures: Experiments and modeling // P. Combust. Inst., 2009. Vol. 32. No. 1. P. 427–435.
27. Shimizu K., Hibi A., Koshi M., Morii Y., Tsuboi N. Updated kinetic mechanism for high-pressure hydrogen combustion // J. Propul. Power, 2011. Vol. 27. No. 2. P. 383–395.
28. Keromnes A., Metcalfe W. K., Heufer K. A., Donohoe N., Das A. K., Sung C. J., Herzler J., Naumann C., Griebel P., Mathieu O., Krejci M. C., Petersen E. L., Pitz W. J., Curran H. J. 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.
29. Smith G. P., Tao Y., Wang H. Foundational Fuel Chemistry Model Version 1.0 (FFCM-1), 2016. <http://nanoenergy.stanford.edu/ffcm1>.
30. Skrebkov O. V., Kostenko S. S., Smirnov A. L. Vibrational nonequilibrium and reaction heat effect in diluted hydrogen-oxygen mixtures behind reflected shock waves at 1000 < T < 1300 K // Int. J. Hydrogen Energ., 2020. Vol. 45. P. 3251–3262.
31. Zhang Y., Fu J., Xie M., Liu J. Improvement of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> chemical kinetic mechanism for high pressure combustion // Int. J. Hydrogen Energ., 2021. Vol. 46. No. 7. P. 5799–5811.
32. Dahoe A. E. Laminar burning velocities of hydrogen–air mixtures from closed vessel gas explosions // J. Loss Prevent. Proc., 2005. Vol. 18. P. 152–166.
33. Кузнецов Н. М. Кинетика мономолекулярных реакций. — М.: Наука, 1982. 224 с.
34. Семёнов Н. Н. Цепные реакции. — М.: Госхимтехиздат, 1934. 562 с.
35. Baulch D. L., Bowman C. T., Cobos C. J., Cox R. A., Just Th., Kerr J. A., Pilling M. J., Stocker D., Troe J., Tsang W., Walker R. W., Warnatz J. Evaluated kinetic data for combustion modeling: Supplement II // J. Phys. Chem. Ref. Data, 2005. Vol. 34. No. 3. P. 757–1397.
36. Abagyan A. A., Adamov E. O., Burlakov E. V. One decade after Chernobyl: Nuclear safety aspects. — Vienna, Austria: Springer. Report IAEA-J4-TC972, 1996. 46 p.
37. Иванов М. Ф., Киверин А. Д., Смыгалина А. Е. Воспламенение водородно-воздушной смеси вблизи нижнего концентрационного предела // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки, 2013. № 1. С. 89–108.
38. 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.
39. Абрамов С. К., Азатян В. В., Баймуратова Г. Р., Болодьян И. А., Навценя В. Ю., Соколов Д. Н., Шебеко А. Ю., Шебеко Ю. Н. Особенности горения водородно-воздушных смесей вблизи нижнего концентрационного предела распространения пламени // Хим. физика, 2010. Т. 29. № 11. С. 50–54.
40. Kee R. J., Rupley F. M., Meeks E., Miller J. A. CHEMKIN III. — Livermore, CA, USA: Sandia National Laboratories. Technical Report No. SAND96-8216, 1996.
41. Burcat A., Ruscic B. Third Millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables. — Chicago–Tel-Aviv: Argonne National Labora-

tory Technion-Israel Institute of Technology. ANL-05/20  
Technical Report TAE-960, 2005.  
42. *Alekseev V.* Laminar burning velocity of hydrogen and

flame structure of related fuels for detailed kinetic model validation. — Lunds: Lunds Universitet, 2015. Ph.D. Thesis.

*Поступила в редакцию 15.11.2021*