

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КРИТЕРИЕВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ВОДОРОД-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ*

А. А. Захаркина¹, А. С. Шарипов², И. Н. Кадочников³

Аннотация: С использованием недавно разработанного подмеханизма «ЛНТ-ОНex(H₂)», предназначенного для описания кинетики электронно-возбужденного радикала ОН*, рассмотрены особенности динамики ОН* при самовоспламенении разбавленной аргоном (молярная доля аргона $\gamma_{Ar} = 0,97$) водород-кислородной смеси в широком диапазоне начальных условий: температуры ($T_0 = 1000–2000$ К), давления ($p_0 = 0,001–50$ атм) и коэффициента избытка горючего ($\phi = 0,1–5$). Для данных условий проведено сравнение времен самовоспламенения, определяемых по максимуму концентрации ОН* и по другим, альтернативным критериям, используемым в численных экспериментах, явно не разрешающих кинетику хемилюминесцирующих частиц. Выяснилось, что при пониженных давлениях подмеханизм «ЛНТ-ОНex(H₂)» предсказывает формирование профилей концентрации ОН* без выраженного максимума, и в таком случае расхождение значений задержки воспламенения водород-кислородной смеси, определяемых разными способами, может быть значительным. При нормальном и повышенных давлениях рассмотренные способы определения задержки воспламенения водород-кислородной смеси дают близкие значения времени индукции, при этом лучше всего с положением пика концентрации ОН* согласуется момент максимальной скорости прироста температуры.

Ключевые слова: окисление водорода; гидроксильный радикал; электронное возбуждение; время задержки воспламенения; кинетическое моделирование; хемилюминесценция

DOI: 10.30826/CE25180101

EDN: NWNIFB

Литература

1. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. Химические процессы в газах. — М.: Наука, 1981. 264 с.
2. Бедарев И. А., Федоров А. В. Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода // Физика горения и взрыва, 2006. Т. 42. № 1. С. 26–33.
3. Konnov A. A. Remaining uncertainties in the kinetic mechanism of hydrogen combustion // Combust. Flame, 2008. Vol. 152. P. 507–528.
4. Яковенко И. С., Яков А. В., Тюнин А. В., Тереза А. М., Новицкий А. О., Кривошеев П. Н. Оценка возможностей современных кинетических механизмов окисления ацетилена для моделирования нестационарных процессов горения // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки, 2022. № 5(104). С. 62–85.
5. Charton M., Gaydon A. G. Excitation of spectra of OH in hydrogen flames and its relation to excess concentrations of free atoms // Proc. R. Soc. Lon. Ser. A, 1958. Vol. 245. P. 84–92.
6. Kaskan W. E. Abnormal excitation of OH in H₂/O₂/N₂ flames // J. Chem. Phys., 1959. Vol. 31. P. 944.
7. Gardiner W. C., Jr., Morinaga K., Ripley D. L., Takeyama T. Shock-tube study of OH (²Σ[−]Π) luminescence // Phys. Fluids, 1969. Vol. 12. P. 1–120.
8. Скребков О. В., Мягков Ю. П., Каркач С. П., Васильев В. М., Смирнов А. Л. Механизм образования возбужденного радикала ОН* (²Σ⁺) при воспламенении ударной волной разбавленной смеси H₂ + O₂ // Докл. РАН. Сер. Физ. Химия, 2007. Т. 383. С. 1–4.
9. Petersen E. L. Interpreting endwall and sidewall measurements in shock-tube ignition studies // Combust. Sci. Technol., 2009. Vol. 181. P. 1123–1144.
10. Kobtsev V. D., Kostritsa S. A., Pelevkin A. V., Smirnov V. V., Starik A. M., Titova N. S., Torokhov S. A., Vereshchagin K. A., Volkov S. Y. Ignition and early stage combustion of H₂–O₂ mixture upon the photodissociation of O₂ molecules by UV laser radiation: Experimental

* Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 24-09-00152). Авторы выражают признательность Б. И. Луговичскому за ценные советы методического характера и техническую помощь.

¹Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова; Московский физико-технический институт (МФТИ), zakharkina.aa@phystech.edu

²Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, assharipov@ciam.ru

³Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, inkadochnikov@ciam.ru

- and numerical study // *Combust. Flame*, 2019. Vol. 200. P. 32–43.
11. Еремин А. В., Коришунова М. Р., Михеева Е. Ю. О влиянии ингибиторов горения на уровень неравновесного излучения при воспламенении водородокислородных смесей за ударной волной // *Физика горения и взрыва*, 2019. Т. 55. С. 136–139.
12. 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.
13. Hardalupas Y., Orain M. Local measurements of the time-dependent heat release rate and equivalence ratio using chemiluminescent emission from a flame // *Combust. Flame*, 2004. Vol. 139. P. 188–207.
14. Grana-Otero J., Mahmoudi S. Excited OH kinetics and distribution in H₂ premixed flames // *Fuel*, 2019. Vol. 255. P. 115750.
15. Jo S. M., Shim H., Park G., Kwon O. J., Kim J. G. Temperature determination in a shock tube using hydroxyl radical A–X band emission // *Phys. Fluids*, 2019. Vol. 31. P. 026109.
16. Tereza A. M., Medvedev S. P., Smirnov V. N. Chemiluminescence of electronically excited species during the self-ignition of acetylene behind reflected shock waves // *Acta Astronaut.*, 2021. Vol. 181. P. 612–619.
17. Su B., Papp M., Zhang P., Turanyi T. Dependence of ignition delay time on its definition — a case study on methane ignition // *Combust. Flame*, 2024. Vol. 262. P. 113364.
18. Шарипов А. С., Пелевкин А. В. О реакционной способности синглетного дельта-кислорода по отношению к простейшим углеводородам // *Горение и взрыв*, 2019. Т. 12. № 1. С. 4–11.
19. Park J. W., Al-Saadon R., MacLeod M. K., Shiozaki T., Vlasisavljevich B. Multireference electron correlation methods: Journeys along potential energy surfaces // *Chem. Rev.*, 2020. Vol. 120. P. 5878–5909.
20. Konnov A. A. On the role of excited species in hydrogen combustion // *Combust. Flame*, 2015. Vol. 162. P. 3755–3772.
21. Sharipov A. S., Loukhovitski B. I., Pelevkin A. V., Korshunova M. R. A detailed kinetic submechanism for OH* chemiluminescence in hydrogen combustion revisited. Part 1 // *Combust. Flame*, 2024. Vol. 263. P. 113407.
22. Sharipov A. S., Loukhovitski B. I., Pelevkin A. V., Korshunova M. R. A detailed kinetic submechanism for OH* chemiluminescence in hydrogen combustion revisited. Part 2 // *Combust. Flame*, 2024. Vol. 263. P. 113417.
23. Луховицкий Б. И., Шарипов А. С., Арсентьев И. В., Пелевкин А. В., Скилондъ А. В., Кисель Ю. С., Кривошеев П. Н. Теоретико-экспериментальное определение константы скорости неадиабатической хемилуминесцентной реакции $H + O + N_2 = OH^* + N_2$ // *Инженерно-физический ж.*, 2024. Т. 97. С. 967–978.
24. 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*, 2014. Vol. 162. P. 1884–1898.
25. Тропин Д. А., Фёдоров А. В., Боченков Е. С. Время задержки воспламенения смесей водород/силан/воздух при низких температурах // *Физика горения и взрыва*, 2018. Т. 54. № 4. С. 30–37.
26. Fiala T., Sattelmayer T. Heat release and UV–Vis radiation in non-premixed hydrogen-oxygen flames // *Exp. Fluids*, 2015. Vol. 56. P. 144.
27. Schiavone F. G., Aniello A., Riber E., Schuller T., Laera D. On the adequacy of OH* as heat release marker for hydrogen–air flames // *P. Combust. Inst.*, 2024. Vol. 40. P. 105248.
28. Пелевкин А. В., Луховицкий Б. И., Шарипов А. С. Квантово-химический анализ кинетики неадиабатической реакции $H + O + M = OH^* + M^*$ // *Горение и взрыв*, 2024. Т. 48. № 1. С. 3–15.
29. Starik A., Sharipov A. Theoretical analysis of reaction kinetics with singlet oxygen molecules // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011. Vol. 13. P. 16424–16436.
30. Kathrotia T., Fikri M., Bozkurt M., Hartmann M., Riedel U., Schulz C. Study of the $H + O + M$ reaction forming OH*: Kinetics of OH* chemiluminescence in hydrogen combustion systems // *Combust. Flame*, 2010. Vol. 157. P. 1261–1273.
31. Mevel R., Pichon S., Catoire L., Chaumeix N., Pailard C. E., Shepherd J. E. Dynamics of excited hydroxyl radicals in hydrogen-based mixtures behind reflected shock waves // *P. Combust. Inst.*, 2013. Vol. 34. P. 677–684.
32. Smith G. P., Tao Y., Wang H. Foundational Fuel Chemistry Model (FFCM-1), Version 1.0. 2016. <https://web.stanford.edu/group/haiwanglab/FFCM1/pages/download.html>.
33. 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.
34. Mulvihill C. R., Petersen E. L. OH* chemiluminescence in the H₂–NO₂ and H₂–N₂O systems // *Combust. Flame*, 2020. Vol. 213. P. 291–301.
35. Varga T., Nagy T., Olm C., Zsely I. G., Palvolgyi R., Valko E., Vincze G., Cserhati M., Curran H. J., Turanyi T. Optimization of a hydrogen combustion mechanism using both direct and indirect measurements // *P. Combust. Inst.*, 2015. Vol. 35. P. 589–596.

Поступила в редакцию 10.12.2024

После доработки 21.01.2025

Принята к публикации 22.01.2025