



РФЯЦ-ВНИИТФ  
РОСАТОМ

# Анализ энерговыделения при горении водорода для различных кинетических схем

Е. Е. Пигасов<sup>1,2</sup>, М.С. Жарылканова<sup>2</sup>, Ю.М. Ковалев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина

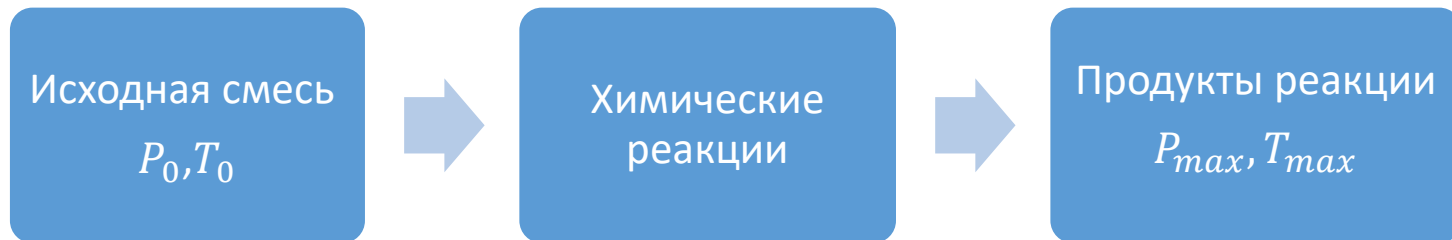
<sup>2</sup> Южно-Уральский государственный университет (НИУ)

1.

# Постановка задачи

# Адиабатический реактор

- В реакторе находится смесь из  $n_c$  компонентов
- Компоненты участвуют в  $n_r$  химических реакциях
- Тепло- и массообмен с окружающей средой отсутствует
- Смесь идеально перемешана



- Целевые параметры:  $P_{max}, T_{max}$

# Математическая модель

Скорость  $j$ -й реакции определяется *законом Аррениуса и законом действующих масс* (зависимость от температуры и концентрации соответственно):

$$W_j = z_j T^{b_j} \exp\left(-\frac{E_{\text{акт}j}}{RT}\right) \prod_{i=1}^{n_c} C_i^{\nu_{i,j}} \quad (1)$$

$z_j, b_j, E_{\text{акт}j}$  – константы кинетического механизма

$R$  – универсальная газовая постоянная

$T$  – температура

$C_i$  – мольная концентрация  $i$ -го реагента

Уравнения материального и теплового баланса:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} W_j (\nu'_{i,j} - \nu_{i,j}), \quad i = 1 \dots n_c \quad (2)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\sum_{i=1}^{n_c} [h_i(T) \frac{dC_i}{dt}]}{\sum_{i=1}^{n_c} [C_i c_{P_i}(T)]} \quad (3)$$

1. Рябинин В.К., Ковалев Ю.М. Математическое моделирование адиабатического периода индукции для метан-кислородных смесей в широком диапазоне начальных давлений и температур // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование. — 2013. - Т. 6, № 1. - С. 56–71.

2. Пигасов Е. Е., Рябинин В. К., Ковалев Ю. М. Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакции окисления водорода. Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование. — 2013. — Т. 6, № 3. — С. 130–135

Использованы термодинамические полиномы NASA

# Кинетические механизмы



- Одностадийный 1 [3]  $k_1 = 2,14 \cdot 10^8 \exp\left(-\frac{129000}{RT}\right)$ ,  $[k] = \frac{\text{м}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}}$ ,  $[E] = \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$
- Одностадийный 2 [3]  $k_2 = 2,96 \cdot 10^5 \exp\left(-\frac{6900}{RT}\right)$ ,  $[k] = \frac{\text{м}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}}$ ,  $[E] = \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$
- Механизм Бабушок, укороченный (16 реакций, 6 реагентов) [4]
- Механизм Бабушок, полный (44 реакции, 8 реагентов) [4]
- Механизм Сан Диего (38 реакций, 9 реагентов) [5]
- Механизм Матвеев (60 реакций, 8 реагентов) [6]

3. Бабушок В.И. Глобальные кинетические параметры для высокотемпературных газофазных реакций / В.И. Бабушок, А.Н. Дақданча. – Красноярск, 1990.

4. Бабушок В.И. Тестовые примеры моделирования кинетики сложных реакций / В.И. Бабушок, А.Н. Дақданча // ФГВ. – 1993. – № 4. – С. 48–80.

5. Williams F.A. Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, University of California, San Diego [Электронный ресурс]. – <http://maeweb.ucsd.edu/~combustion/cermech/index.html> (2010).

6. Матвеев В. Г. Упрощение механизма горения водорода // Физика горения и взрыва. – 2001, Т. 37.

**2.**

# Результаты расчетов

# Адиабатический период индукции

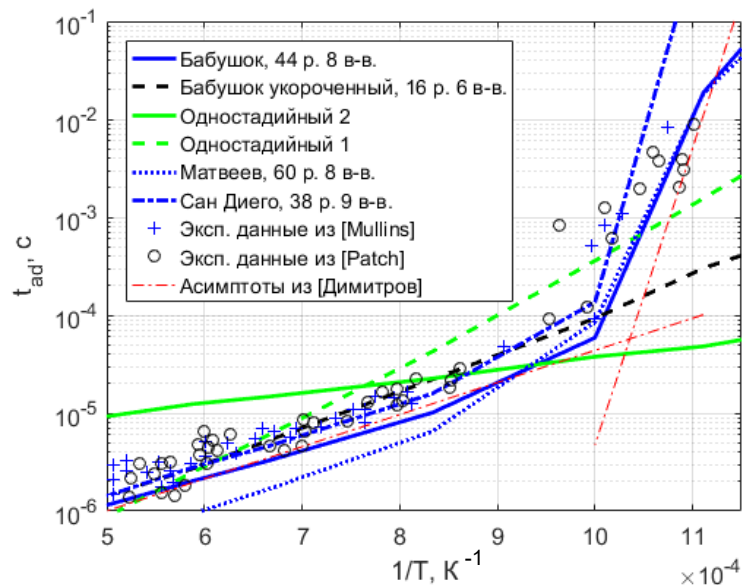


Рисунок 1. Сравнение результатов расчетов адиабатического периода индукции с экспериментальными данными из [5].

7. Mullins, B.P. "Studies of the spontaneous ignition of fuels injected into a hot air stream" – NATO AGARD AG S/P2 1952.

8. Patch, R.W. "Shock tube measurement of dissociation on rates of H<sub>2</sub>-J chem. Phys, 1962 vol.36, №7.

9. Димитров В.И. Простая кинетика. – Новосибирск, 1982.

# Температура и давление

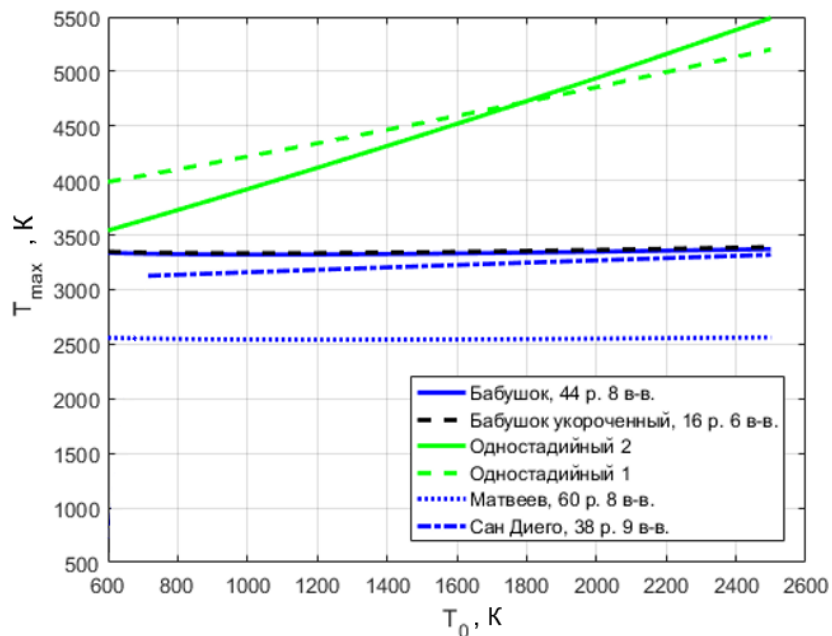


Рисунок 2. Зависимость максимальной температуры смеси от начальной температуры.

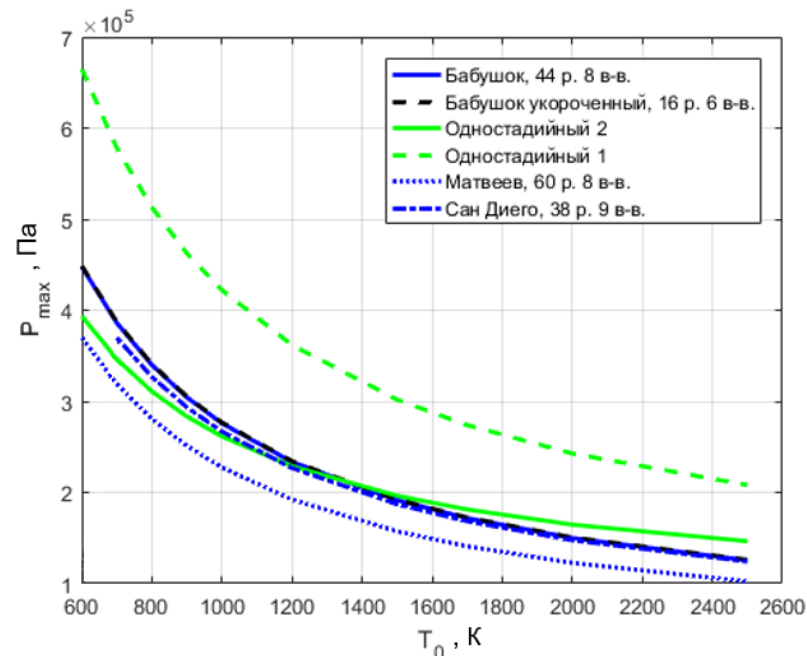


Рисунок 3. Зависимость максимального давления смеси от начальной температуры.



# Заключение

## Выводы:

- Количество реакций и компонентов не является критерием «качества» кинетического механизма
- Для каждого механизма необходимо проводить исследование на стетствие точности описания целевых параметров поставленной задаче
- Балансом между точностью и скоростью вычислений в высокотемпературной области является укороченный механизм Бабушок (16 реакций)

# Спасибо за внимание

**Е. Е. Пигасов<sup>1,2</sup>, М.С. Жарылканова<sup>2</sup>, Ю.М. Ковалев<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина

<sup>2</sup> Южно-Уральский государственный университет (НИУ)

31.05.2023

