

В.А. Кулаков

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ВОДОРОДА В УСЛОВИЯХ ДИЗЕЛЬНОГО ДВИГАТЕЛЯ

*В разработанную компьютерную модель рабочего процесса дизельного двигателя в качестве топлива включен газообразный водород. Для описания процесса горения использованы стандартные химические реакции с учетом тепловых эффектов каждой. Исследовано влияние скоростей реакций на выходные параметры рабочего процесса: состав газов, мощность и КПД. При высоких давлениях на впуске показана возможность воспламенения и горения водорода.*

**Моделирование, водород, горение, скорость химической реакции, тепло-выделение, давление, мощность.**

В настоящее время актуальной является задача использования альтернативных топлив как более дешевых и менее токсичных. При полном сгорании водорода выделяется только вода и в небольших количествах остальные нетоксичные соединения водорода. В разработанную ранее компьютерную модель рабочего процесса дизельного двигателя [6, 7] в качестве топлива включен газообразный водород. Для описания процесса горения использованы стандартные химические реакции с учетом тепловых эффектов каждой. Исследовано влияние скоростей реакций на выходные параметры рабочего процесса: мощность и КПД. Показана возможность воспламенения и горения водорода при высоких давлениях на впуске.

**Исходные параметры.** В расчетах, приведенных в [6], были использованы следующие исходные параметры рабочего процесса:  $S/D = 14$  см/13 см, степень сжатия = 16,5;  $n = 2000$  об/мин, давление и температура на впуске —  $p_0 = 0,09$  МПа,  $T_0 = 298$  К.

Однако при этих условиях воспламенения водорода не происходит, поэтому приходится предполагать использование турбокомпрессора во впускной системе, и после расчетов процесса сжатия в турбокомпрессоре начальные условия на впуске будут следующие:  $P_a = 0,15$  МПа,  $T_a = 436$  К,  $m_{O_2} = 0,406$  г = 0,0127 mole,  $m_{N_2} = 1,335$  г = 0,0477 mole,  $m_{H_2} = 0,0431$  г = 0,215 mole. Следует отметить, что  $m_{O_2}$  и  $m_{N_2}$  меньше чем в [6] (0,42 и 1,4 г), из-за впрыскивания  $H_2$  во впускную систему.

**Химическая модель.** Химические реакции, включенные в модель, их параметры и влияние на процесс горения приведены в табл. Типичные параметры реакций взяты из [1–4]. Параметры констант реакций различаются в разных источниках, но по возможности выбирались параметры для интервала температур 1500–2500 °С.

Так как впрыскивание  $H_2$  происходит в начале сжатия, мы можем предположить, что  $H_2$  и свежий заряд воздуха хорошо перемешаны, и можно рассчитывать скорости химических реакций по всему объему цилиндра  $V_{цил}$  ( $V_{цил}$  есть функция от угла поворота коленчатого вала двигателя  $V_{цил}(\varphi), \text{см}^3$ ). Например, для реакции



мы имеем скорость уменьшения  $H_2$  в целом по объему цилиндра:

$$dM_{H_2}/dt = -k \cdot (M_{H_2}/V_{цил}) \cdot (M_{OH}/V_{цил}) \cdot V_{цил}, \text{ mole/sec} , \quad (2)$$

где  $k$  — константа реакции (1),  $M_{H_2}$ ,  $M_{OH}$ ,  $M_{H_2O}$  массы  $H_2$ ,  $OH$ ,  $H_2O$  в молях в объеме  $V_{цил}$ .

Таблица

**Химические реакции горения водорода**  
 $k = A \cdot T^n \cdot \exp(-E_a/RT)$ , (см<sup>3</sup>, см<sup>6</sup>, sec, cal, K, mole)

№	Реакция	A	n	E <sub>a</sub>	-dH(298K)	Влияние
1	H <sub>2</sub> O + H = H <sub>2</sub> + OH	3.0e+14	0	20100	-13808	Слабое
2	H <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + H	2.5e+14	0	10000	13808	Слабое
3	O <sub>2</sub> + H = OH + O	1.9e+14	0	16400	-15521	Сильное
4	OH + O = O <sub>2</sub> + H	2.8e+15	-0.8	-100	15521	Сильное
5	H <sub>2</sub> + O = OH + H	1.5e+13	0	8900	-2013	Сильное
6	OH + H = H <sub>2</sub> + O	6.9e+12	0	7000	2013	Слабое
7	H <sub>2</sub> O + O = OH + OH	6.3e+09	1.3	17000	-15821	Сильное
8	OH + OH = H <sub>2</sub> O + O	6.0e+08	1.3	0	15821	<b>Высокое</b>
9	H <sub>2</sub> + M = H + H + M	1.0e+20	-1.3	104800	-107136	Сильное
10	H + H+M = H <sub>2</sub> + M	2.0e+13	-0.3	0	107136	Сильное
11	O <sub>2</sub> + M = O + O + M	1.6e+20	-1.6	120000	-120643	Слабое
12	O + O+M = O <sub>2</sub> + M	3.6e+12	-0.6	0	120643	Сильное
13	H <sub>2</sub> O + M = H + OH + M	8.7e+20	-2	120000	-120943	Слабое
14	H + OH+M = H <sub>2</sub> O + M	3.6e+16	-1	0	120943	Слабое
15	OH + M = O + H + M	1.1e+16	0	104000	-105122	Слабое
16	O + H+M = OH + M	4.7e+12	0	0	37116	<b>Высокое</b>
17	H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = HO <sub>2</sub> + H	1.1e+12	0	56000	-56193	Слабое
18	HO <sub>2</sub> + H = H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	6.0e+12	0	0	56193	Сильное
19	HO <sub>2</sub> + M = H + O <sub>2</sub> + M	5.7e+15	0	48800	-50942	Сильное
20	H + O <sub>2</sub> +M = HO <sub>2</sub> + M	4.1e+12	0	0	50942	Сильное
21	OH + OH = HO <sub>2</sub> + H	1.6e+12	0	37600	-38660	Слабое
22	HO <sub>2</sub> + H = OH + OH	2.0e+13	0	0	38660	Сильное
23	OH + O <sub>2</sub> = HO <sub>2</sub> + O	9.4e+13	0	54000	-541800	Слабое
24	HO <sub>2</sub> + O = OH + O <sub>2</sub>	6.0e+13	0	0	54180	Сильное
25	H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub> = HO <sub>2</sub> + OH	1.0e+14	0	71200	-70001	Сильное
26	HO <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	6.0e+12	0	0	70001	Сильное
27	H <sub>2</sub> O + O = HO <sub>2</sub> + H	5.3e+11	0	54400	-54480	Слабое
28	HO <sub>2</sub> + H = H <sub>2</sub> O + O	6.0e+11	0	0	54480	Слабое
29	H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = OH + OH	2.5e+12	0	39000	-17534	<b>Высокое</b>
30	OH + OH = H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	1.7e+13	0	47891	17534	Слабое
31	H <sub>2</sub> O + OH = H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub>	7.2e+09	0.4	72000	-52467	Слабое
32	H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O + OH	6.5e+11	0	18500	52467	Слабое
33	H <sub>2</sub> O + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + OH	1.9e+12	0		-33360	Слабое
34	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O + HO <sub>2</sub>	1.8e+12	0	300	33360	Слабое
35	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H = H <sub>2</sub> O + OH	7.1e+12	0	4200	72020	Слабое
36	H <sub>2</sub> O + OH = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H	6.4e+11	0	72600	-72020	Слабое
37	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M = OH + OH + M	4.1e+16	0	42000	-48923	Сильное
38	OH + OH+M = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M	1.6e+11	0	-9600	48923	<b>Высокое</b>
39	H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O	4.8e+13	0	91400	-87540	Слабое
40	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O = H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	2.8e+13	0	6400	87540	Слабое
41	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H = H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub>	7.0e+12	0	4200	19553	Слабое
42	H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + H	1.6e+12	0	20000	-19553	Слабое
43	HO <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	2.4e+13	0	1500	36641	Сильное
44	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = HO <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub>	3.7e+14	0	41800	-36641	Слабое
45	HO <sub>2</sub> + OH = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O	2.9e+12	0.5	20400	-17539	Слабое
46	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O = HO <sub>2</sub> + OH	2.8e+13	0	6400	17539	Слабое

Аррениусовская форма константы реакции имеет следующий вид:

$$k = A \cdot T^n \cdot \exp(-E_a/RT), \text{ cm}^3/(\text{mole} \cdot \text{sec}). \quad (3)$$

Зная скорость уменьшения  $\text{H}_2$ , мы можем рассчитать скорости появления/уменьшения  $\text{OH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}$  в объеме  $V_{\text{цил}}$ :

$$dM_{\text{OH}}/dt = dM_{\text{H}_2}/dt, \text{ mole/sec}, \quad (4)$$

$$dM_{\text{H}_2\text{O}}/dt = -dM_{\text{H}_2}/dt, \text{ mole/sec}, \quad (5)$$

$$dM_{\text{H}}/dt = -dM_{\text{H}_2}/dt, \text{ mole/sec}. \quad (6)$$

Используя уравнение 2, мы можем рассчитать изменение массы  $\text{H}_2$  в цилиндре за интервал  $\Delta t$  с номером  $m$ :

$$M_{\text{H}_2,m} - M_{\text{H}_2,m-1} = dM_{\text{H}_2}/dt \cdot \Delta t. \quad (7)$$

Аналогичные уравнения мы имеем для скоростей изменений других компонент. По ним мы можем рассчитать массу каждого компонента для каждого угла поворота коленчатого вала, начиная с момента сжатия.

**Расчет термодинамических параметров.** Скорость выделения энергии в объеме  $V_{\text{цил}}$  за счет реакции (1) следующая:

$$(dQ_{\text{react}}/dt)_1 = (H_{\text{H}_2\text{O}} + H_{\text{H}} - H_{\text{H}_2} - H_{\text{OH}}) \cdot dM_{\text{H}_2}/dt, \text{ J/sec}. \quad (8)$$

Энтальпии компонент рассчитываются как функции от  $T$ . Например, для  $T = 1500 \text{ K}$ :

$$H_{\text{H}_2\text{O}}(T) = -dH_{\text{H}_2\text{O}}(298\text{K}) + c_p(1500) \cdot (T - 298), \text{ J/mole}, \quad (9)$$

здесь  $c_p(1500)$  — удельная теплоемкость при постоянном давлении и температуре 1500.

Суммируя  $(dQ_{\text{react}}/dt)_i$  по всем реакциям, мы получаем полную скорость тепловыделения в цилиндре:

$$dQ_{\text{цил}}/dt = \sum (dQ_{\text{react}}/dt)_i. \quad (10)$$

Теперь мы можем применить уравнение теплового баланса для расчета изменения температуры в цилиндре в интервале времени с номером  $m$ :

$$(T_m - T_{m-1}) \cdot \sum C_{vi} \cdot M_{im} = \Delta t \cdot (dQ_{\text{цил}}/dt - dQ_{\text{стенки}}/dt) - \Delta A, \quad (11)$$

где  $C_{vi}$  — теплоемкость  $i$ -й компоненты массой  $M_{im}$ ,  $dQ_{\text{стенки}}/dt$  — скорость теплоотвода в стенки за счет радиации и конвекции (рассчитывается по стандартным уравнениям, если известна величина внутренней поверхности цилиндра для каждого момента времени и средняя температура стенок),  $\Delta A$  — работа сил давления за  $m$ -й интервал времени:

$$\Delta A = p_m \cdot (V_m - V_{m-1}). \quad (12)$$

Затем мы используем уравнение состояния газа для нахождения давления в цилиндре:

$$p_m V_m = RT_m \cdot \sum M_{im}, \quad (13)$$

где  $\sum M_{im}$  — общее число молей заряда в цилиндре в момент времени  $m$ .

Зная изменение давления в цилиндре, нетрудно рассчитать основные индикаторные показатели рабочего процесса: мощность (работа сил давления за рабочий цикл) и КПД.

**Результаты расчетов.** В начальных расчетах впрыскивание  $\text{H}_2$  подразумевается в начале сжатия перед закрытием впускных клапанов. Воспламенение  $\text{H}_2$  оказывается возможным при использовании предварительного сжатия свежего заряда в турбокомпрессоре со степенью сжатия  $P_c/P_0 = 1,3$  и выше.

Оптимальные параметры рабочего процесса достигаются при  $P_c/P_0 = 1,7$  и  $\text{H}_2 \text{ mole}/\text{O}_2 \text{ mole} = 1,7$  перед закрытием впускных клапанов. Результаты рас-

четов масс компонентов, давления и температуры как функций от угла поворота коленчатого вала (угла ПКВ) представлены на рис. 1.

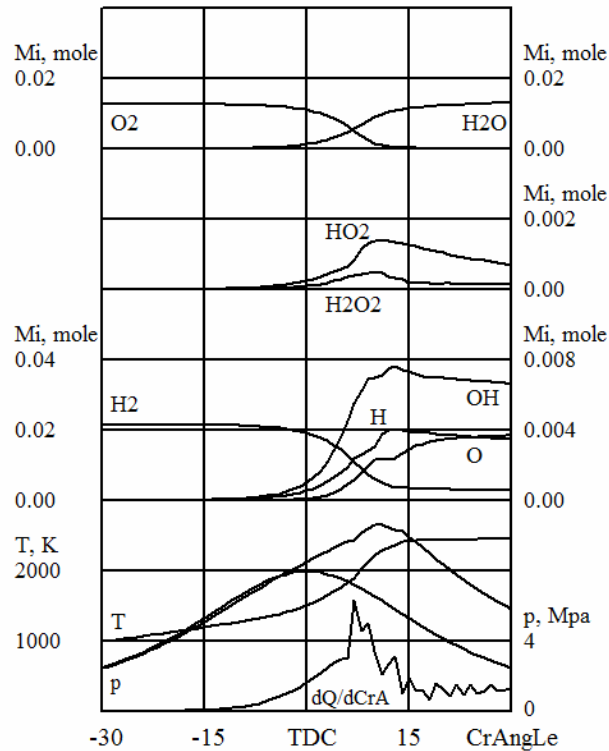
#### OPERATION CONDITIONS

Stroke/Bore=14cm/13cm  
 n=2000rpm  
 Compression Ratio=16.5  
 p0=0.09MPa T0=298K  
 Superchargin Ratio=1.7  
 pa=0.15MPa Ta=442K  
 H2mole/O2mole=1.7

O2(-30)	0,013mole	0,405g
H2(-30)	0,022mole	0,043g
N2(-30)	0,048mole	1,335g
OH(-30)	0,000mole	0,000g
SumMi(-30)	0,082mole	1,7833,g

#### OUTPUT PARAMETERS

O2(30)	0,000mole	0,002g
H2(30)	0,003mole	0,006g
N2(30)	0,048mole	1,335g
H2O(30)	0,013mole	0,236g
H(30)	0,004mole	0,004g
O(30)	0,004mole	0,059g
OH(30)	0,007mole	0,113g
HO2(30)	0,001mole	0,024g
H2O2(30)	0,000mole	0,005g
SumMi(30)	0,078mole	1,783g



**Рис.1.** Горение водорода в цилиндре. Подача H<sub>2</sub> перед закрытием впускных клапанов. КПД = 0,51, P<sub>i</sub> = 1,47 MPa, N<sub>i</sub> = 45,7 кВт/цил

Если известна объемная скорость реакции в каждый момент времени нетрудно рассчитать вклад каждой реакции из таблицы в изменение масс компонент в цилиндре в процессе горения, например, изменение водорода за счет реакции 5 ( $H_2 + O = OH + OH$ ) к моменту времени  $t$  можно рассчитать, суммируя изменение  $H_2$  за счет реакции 5 по всем интервалам времени, начиная с начального с номером 0 :

$$M_{H_2,5,m} = M_{H_2,0} - \sum dM_{H_2,5,i}, \quad i = 0, m, \quad (14)$$

где  $M_{H_2,0}$  — начальное количество водорода в молях.

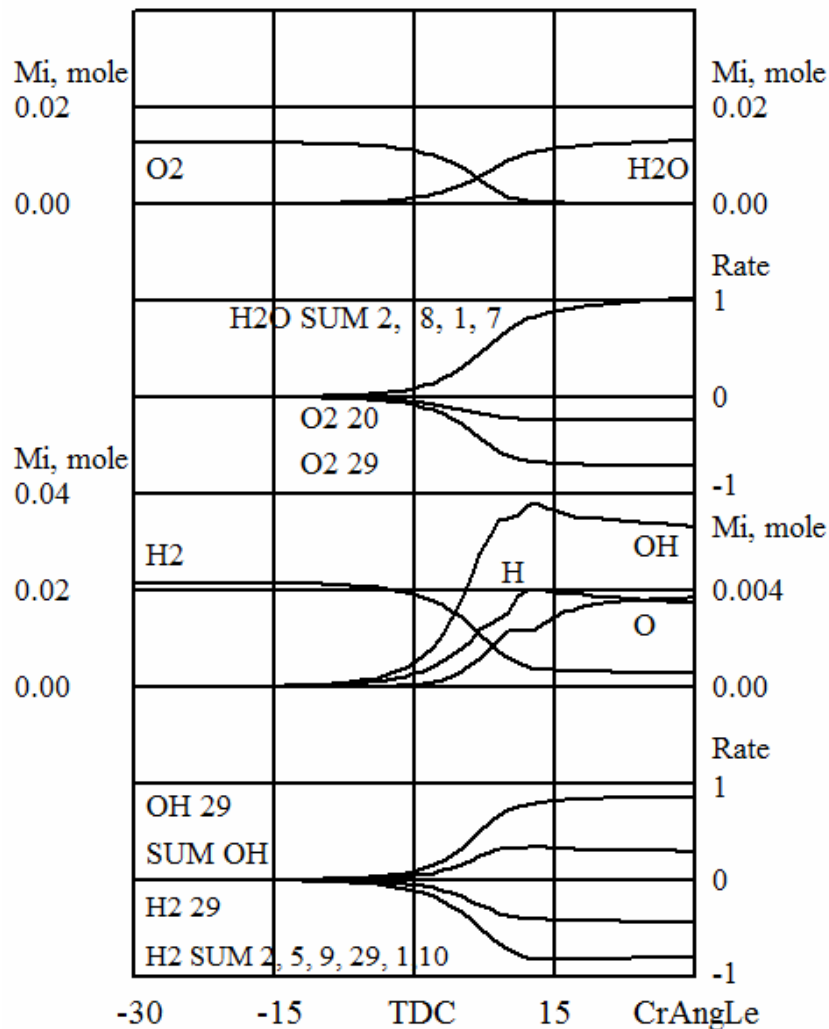
Относительное уменьшение  $H_2$  к моменту времени  $t$  за счет реакции 5 будет:

$$P_{H_2,5,m} = M_{H_2,5,m} / M_{H_2,0}. \quad (15)$$

Графики изменения компонент за счет отдельных реакций приведены на рис. 2.

Имея разработанную модель и отлаженную программу, мы можем моделировать рабочий процесс при различных условиях. Топливо можно впрыскивать не только перед закрытием впускных клапанов до начала сжатия (во впускную систему), но и в конце такта сжатия перед ВМТ (верхней мертвой точкой). Результат такого расчета представлен на рис. 3. Параметры этого рабочего процесса несколько лучше. Правда технологически осуществить такой

способ подачи топлива через форсунки сложнее, но есть возможность использовать имеющуюся топливную аппаратуру.



**Рис. 2.** Вклад различных реакций в изменение состава газов в цилиндре в процессе горения

Результаты, представленные на рис. 3, получены при степени наддува  $p_c/p_0 = 1,5$  и  $H_2 \text{ mole}/O_2 \text{ mole} = 1,44$ .

Часть мощности и КПД теряются при турбонаддуве и впрыскивании топлива. Эту часть потерь мы можем оценить, проведя расчеты без горения (обнулив константы химических реакций). Величины потерь мощности и КПД можно видеть на рис. 4.

OPERATION CONDITIONS

Stroke/Bore=14cm/13cm  
 n=2000rpm  
 Compression Ratio=16.5  
 p0=0.09MPa T0=298K  
 Superchargin Ratio=1.5  
 pa=0.14MPa Ta=423K  
 H2mole/O2mole=1.44  
 H2 circle delivery: 0,023mole 0,047g

O2(-30)	0,016mole	0,500g
H2(-30)	0,000mole	0,000g
N2(-30)	0,059mole	1,645g
OH(-30)	0,000mole	0,000g
SumMi(-30)	0,098mole	2,1917,g

OUTPUT PARAMETERS

O2(30)	0,000mole	0,004g
H2(30)	0,002mole	0,005g
N2(30)	0,059mole	1,645g
H2O(30)	0,014mole	0,259g
H(30)	0,003mole	0,003g
O(30)	0,005mole	0,076g
OH(30)	0,009mole	0,154g
HO2(30)	0,001mole	0,039g
H2O2(30)	0,000mole	0,008g
SumMi(30)	0,094mole	2,192g

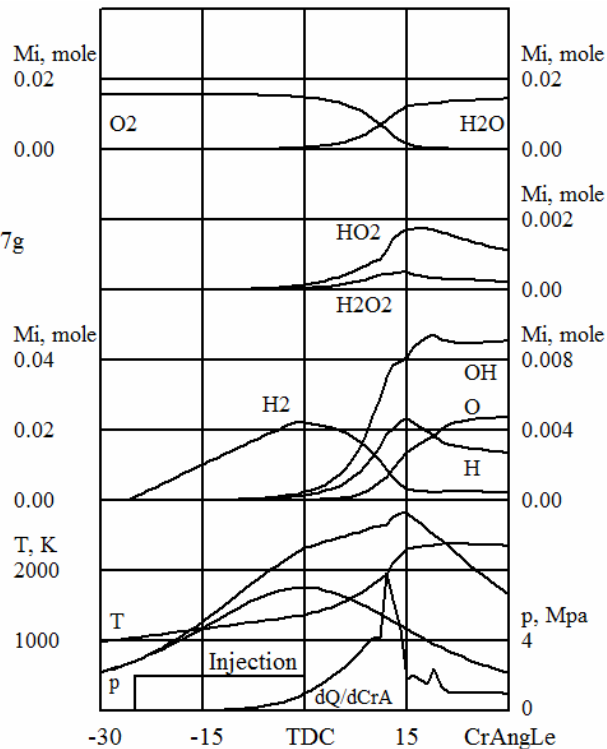


Рис. 3. Горение водорода в цилиндре. Подача H<sub>2</sub> перед ВМТ.  
 КПД = 0,57, Pi = 1,8 МПа, Ni = 55,6 кВт/цил

OPERATION CONDITIONS

n=2000rpm  
 H2mole/O2mole=1.5  
 O2(-30) 0,016mole 0,500g  
 H2(-30) 0,000mole 0,000g  
 N2(-30) 0,059mole 1,645g  
 SumMi(-30) 0,098mole 2,192,g

OUTPUT PARAMETERS

O2(30)	0,016mole	0,500g
H2(30)	0,023mole	0,047g
N2(30)	0,059mole	1,645g
SumMi(30)	0,098mole	2,192g

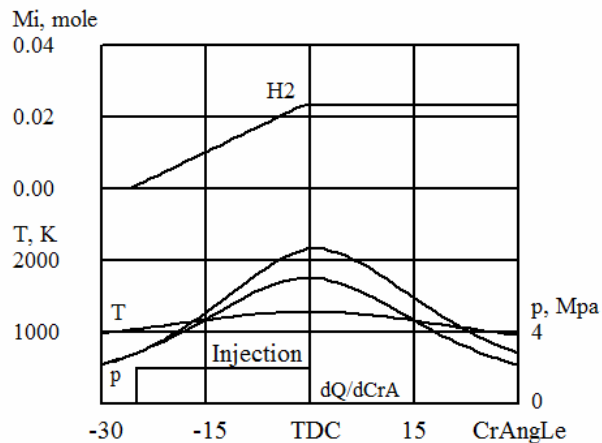
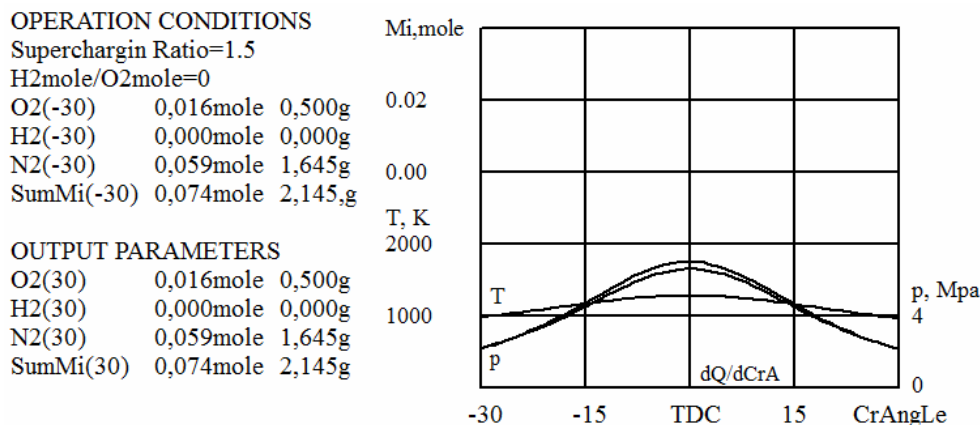


Рис. 4. Нет горения водорода в цилиндре. Подача H<sub>2</sub> перед ВМТ.  
 КПД = 0,12, Pi = 0,36 МПа, Ni = 11,3 кВт/цил

Результаты расчетов без впрыскивания H<sub>2</sub> и без горения представлены на рис. 5.

Из данных, представленных на рис. 4 и 5, можно сделать вывод, что на впрыскивание и турбонаддув затрачивается около 7 % мощности.



**Рис. 5.** Нет горения водорода в цилиндре. Нет подачи водорода.  
КПД = 0,05, P<sub>i</sub> = 0,17 МПа, N<sub>i</sub> = 5,2 кВт/цил

Большое количество новых данных по скоростям химических реакций содержится в [9, 10, 11] и других источниках. К сожалению, во многих из них приводятся данные для ограниченных интервалов температур. Сбалансированные значения могут быть взяты у Басевича [4, 5], однако и у него важнейшие для горения водорода реакции, такие как  $H_2 + O_2 = OH + OH$  не учитываются.

Следующим этапом моделирования может быть включение в расчеты образования окислов азота  $NO_x$  [8].

**Выводы.** Результаты расчетов показывают, что воспламенение водорода может быть достигнуто при высокой степени турбонаддува для обеспечения высокой начальной температуры в цилиндре.

Впрыскивание водорода в конце такта сжатия перед ВМТ позволяет уменьшить коэффициент турбонаддува до 1,5.

Следует отметить, что концентрация водорода в цилиндре значительно меньше, чем в гремучей смеси:

$$M_{H_2, \text{ mole}}/M_{O_2, \text{ mole}} = 1,5 < 2. \quad (16)$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. Кондратьев В.Н. Константы скорости газозофазных реакций. — М.: Наука, 1970, 351 с.
2. Baulch D.L. et al. Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, Vol. 1.: Homogeneous Gas Phase Reactions of the H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> System, Butterworth, London, 1976.
3. Warnatz J. et al, Combustion Chemistry. Springer, New York, 1984.
4. Басевич В.Я. Детальные кинетические механизмы горения гомогенных газовых смесей с участием кислородсодержащих окислителей // Успехи химии — 1987, 56 :5. — С. 705–731.
5. Basevich V.Ya. Chemical Kinetics in the combustion processes. In Handbook of heat and mass transfer. V.4, Ed. Chermisinoff N., Houston, Gulf. 1990.
6. Барсуков С.И., Кулаков В.А. Термогазодинамическая связь процессов подвода и выгорания топлива в дизелях // Двигателестроение. — 1988 — № 2. — С. 56–59.
7. Kulakov V.A. Modeling of Diesel Engine Operation, SAE paper 911790, 1993.
8. Kulakov V.A., Merker G. Nitrogen Oxidizing in Modeling of Diesel Engine Operation, SAE paper 952063, 1995.
9. Baulch D.L. et al, Evaluated kinetic data for combustion modeling, J. Phys. Chem. Ref. Data, V. 21, 1992.

10. *Tsang W., Hampson R.F.* Chemical kinetic data base for combustion chemistry. Part I. Methane and related compounds: J. Phys. Chem. Ref. Data, V. 15, 1986.

11. *Cohen N., Westberg K.R.* Chemical kinetic data sheets for high-temperature chemical reactions, J. Phys. Chem. Ref. Data, V.12, 1983.

Тюмень, ТГНГУ  
vkulakov@tyumendom.ru

V.A. Kulakov

*Modeling of Hydrogen Combustion in Diesel Engine Conditions*

*The hydrogen as fuel is included into the computer modeling of diesel engine operation. Standard chemical reactions are used to describe combustion process. Influence of speeds of reactions to output operation parameters (composition of gases, power, efficiency) is investigated. Possibility of ignition and burning of hydrogen is shown with high pressure at valve closing.*

***Modeling, hydrogen, burning, rate of chemical reaction, thermal emission, pressure, power.***