

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

На правах рукописи

Филимонова Елена Александровна

**КИНЕТИКА ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ, КОНВЕРСИИ ОКСИДОВ АЗОТА И
УГЛЕВОДОРОДОВ, СТИМУЛИРОВАННЫХ
НАНОСЕКУНДНЫМИ РАЗРЯДАМИ**

01.04.08 - физика плазмы

**Диссертация на соискание ученой степени доктора
физико-математических наук**

Москва 2021

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	7
ГЛАВА 1 СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ПЛАЗМЫ НА ПРОЦЕССЫ ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ).....	23
1.1 Необходимость очистки воздуха и продуктов сгорания от оксидов азота, серы и летучих органических соединений. Плазменные способы очистки	23
1.2 Газоразрядные реакторы для конверсии NO_x и углеводородов.....	29
1.3 Моделирование физико-химических процессов для целей газофазной очистки. Сравнительный анализ физических моделей.....	35
1.4 Сравнение экспериментальных данных с результатами моделирования конверсии NO в NO_2 в присутствии углеводородов в низкотемпературном плазменном реакторе	46
1.5 Особенности удаления летучих органических соединений с помощью плазмы.....	57
1.6 Проблемы организации горения углеводородных топлив в реальных устройствах с учетом современных требований к экономии топлива и уменьшению токсичности выхлопа. Стратегия низкотемпературного горения	67
1.7 Разряды для инициации воспламенения и управления горением в двигателе внутреннего сгорания.....	73
1.8 Численные методы исследования горения в компрессионном двигателе.....	79
1.9 Основные выводы для формулировки задач	84
ГЛАВА 2 МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ.....	89
2.1 Основные положения для создания модели химической кинетики. Особенности химического кинетического механизма горения.....	89
2.2 Тестовые расчеты	92
2.2.1 Эксперименты на ударных трубах.....	93
2.2.2 Многостадийное воспламенение. Горение ацетальдегида.....	95
2.2.3 Особенности воспламенения при высоких давлениях.....	97
2.2.4 Ламинарная скорость волны горения.....	101
2.3 Эмиссия оксидов азота при подаче пара с природным газом в камеру сгорания газотурбинной установки.....	102
2.3.1 Особенности моделирования.....	102
2.3.2 Описание численной модели.....	103
2.3.3 Обсуждение результатов.....	104

2.3.4	Кинетический анализ образования оксидов азота.....	108
2.3.5	Сравнение с экспериментом.....	111
2.4	Механизм хеми-ионизации при воспламенении метано-кислородной смеси.....	113
2.4.1	Описание эксперимента.....	114
2.4.2	Механизм хеми-ионизации и эволюция электронной плотности.....	115
2.4.3	Источники возникновения голубого свечения при воспламенении метан-кислородной смеси.....	119
2.4.4	Выводы по Главе 2.....	122

ГЛАВА 3 МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ.....124

3.1	Модель газофазного химического реактора для удаления токсичных примесей на основе периодического наносекундного разряда.....	124
3.1.1	Иерархия времен физико-химических процессов и основные приближения.....	124
3.1.2	Модель взаимодействующих каналов. Основные уравнения.....	127
3.1.3	Программная реализация модели газофазного химического реактора – RADICAL..	130
3.2	Модель химического реактора сжатия для задач воспламенения в компрессионном двигателе с инициацией неравновесной плазмой разряда.....	134
3.2.1	Модель физико-химических процессов в рабочем объеме цилиндра компрессионного двигателя	135
3.2.2	Конверсия природного газа в химическом реакторе сжатия. Тестирование модели.....	139
3.3	Выводы по Главе 3.....	143

ГЛАВА 4 УДАЛЕНИЕ ОКСИДОВ АЗОТА И СЕРЫ В ГАЗОФАЗНОМ ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ.....145

4.1	Удаление оксидов азота из продуктов сгорания метана.....	145
4.1.1	Особенности химической кинетики удаления NO_x в коронном разряде.....	146
4.1.2	Влияние различных параметров на конечный результат конверсии.....	152
4.2	Сравнительное моделирование удаления NO_x и SO_2 из загрязненных газов с использованием импульсно-периодических коронного и барьерного разрядов.....	154
4.2.1	Типы реакторов.....	156
4.2.2	Результаты моделирования для дизельного выхлопа.....	158
4.2.3	Результаты моделирования для продуктов сгорания метана.....	165
4.2.4	Результаты моделирования для загрязненного воздуха.....	168
4.2.5	Сравнительный анализ.....	170

4.3	Выводы по Главе 4.....	171
ГЛАВА 5 КОНВЕРСИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ И ОКСИДОВ АЗОТА.....		173
5.1	Влияние пропилена и этилена на конверсию NO_x в синтетическом дизельном выхлопе.....	173
5.1.1	Описание эксперимента и особенностей моделирования.....	173
5.1.2	Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.....	177
5.1.3	Особенности газофазной кинетики окисления NO в присутствии углеводородов.....	182
5.2	Моделирование конверсии нафталина в биогазе.....	194
5.2.1	Описание эксперимента и особенностей моделирования.....	194
5.2.2	Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.....	200
5.2.3	Влияние ион-молекулярных реакций и электрон-ионной рекомбинации на процесс удаления нафталина.....	206
5.3	Выводы по Главе 5	212
ГЛАВА 6 ЭФФЕКТ ВОЗДЕЙСТВИЯ РАЗРЯДА НА МНОГОСТАДИЙНОЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЕ И ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ ТЕМПЕРАТУРНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ СКОРОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ПРОПАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ.....		214
6.1	Моделирование воздействия разряда.....	215
6.2	Авто-воспламенение пропано-воздушной смеси при низких начальных температурах..	217
6.3	Изменение химического кинетического механизма под воздействием разряда. Влияние первичных радикалов на многостадийное воспламенение.....	221
6.4	Изменение поведения отрицательного температурного коэффициента под воздействием электрического разряда.....	224
6.5	Связь между удельным энерговыделением и подавлением отрицательного температурного коэффициента.....	227
6.6	Выводы по Главе 6.....	230
ГЛАВА 7 УПРАВЛЕНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЕМ В КОМПРЕССИОННОМ ДВИГАТЕЛЕ С ГОМОГЕННЫМ ЗАРЯДОМ С ПОМОЩЬЮ СТРИМЕРНЫХ РАЗРЯДОВ.....		233
7.1	Расчет нагрева и концентраций химически активных частиц при воздействии разряда на инжектируемую массу газа	233
7.2	Кинетический анализ различных режимов воспламенения.....	236
7.2.1	Выбор оптимального момента включения разряда.....	236
7.2.2	Причина селективности момента воздействия разряда.....	242

7.3	Связь удельного энерговклада с различными характеристиками горения.....	244
7.3.1	Влияние удельного энерговклада на задержку воспламенения.....	244
7.3.2	Чувствительность процесса воспламенения, инициированного разрядом, к составу и начальной температуре подогрева смеси.....	246
7.4.	Анализ промежуточных и конечных продуктов горения и окисления.....	248
7.4.1	Влияние удельного энерговклада на концентрацию CO, несгоревших углеводородов и NO _x	248
7.4.2	Влияние NO, образующегося в разряде, на концентрацию NO _x в выхлопе двигателя.....	251
7.5	Выводы по Главе 7.....	256

ГЛАВА 8. ФОРМИРОВАНИЕ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ В ПРОПАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ С НЕОДНОРОДНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКТИВНОСТЬЮ, ИНИЦИИРУЕМОЙ ВЫСОКОЧАСТОТНЫМ КОРОННЫМ РАЗРЯДОМ В КОМПРЕССИОННОМ ДВИГАТЕЛЕ.....

8.1	Основные положения и уравнения в модели распространения волны горения.....	259
8.2	Оценка температуры и концентраций химически активных частиц в зоне, активированной высокочастотным коронным разрядом.....	263
8.2.1	Способ создания активированной зоны.....	263
8.2.2	Расчет начальных концентраций первичных активных частиц в канале одиночного стримера за один импульс.....	266
8.2.3	Расчет концентраций первичных активных частиц и нагрева газа в стримерном канале в импульсном режиме.....	268
8.2.4	Оценка концентраций и средней температуры в активированной зоне.....	270
8.2.5	Время задержки воспламенения и формирование волны горения для двух подходов к расчету состава смеси в стримерном канале.....	273
8.3	Время задержки воспламенения для различных условий инициации разряда.....	275
8.3.1	Времена задержки воспламенения при фиксированном угле поворота коленвала.....	276
8.3.2	Зависимость времени задержки воспламенения от удельного энерговклада в стримерный канал для разных моментов инициации разряда.....	283
8.4	Распространение волны горения, инициируемое разрядом.....	286
8.4.1	Различные режимы горения.....	286
8.4.2	Сравнение различных режимов распространения волны горения для разных моментов инициации разряда.....	292

8.5 Выводы по Главе 8.....	297
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	299
БЛАГОДАРНОСТИ.....	304
ПРИЛОЖЕНИЕ 1. КИНЕТИЧЕСКАЯ СХЕМА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ДЛЯ КОНВЕРСИИ, ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ, СОДЕРЖАЩАЯ В КАЧЕСТВЕ ТОПЛИВА МЕТАН, ЭТАН и ПРОПАН.....	305
ПРИЛОЖЕНИЕ 2. СХЕМА РЕАКЦИЙ ДЛЯ C_2H_4 И C_3H_6 С РАДИКАЛОМ OH ДЛЯ КОНВЕРСИИ NO.....	308
СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ.....	309
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	315

ВВЕДЕНИЕ

Загрязнение атмосферы выбросами промышленных установок и двигателей внутреннего сгорания вызывает большую озабоченность из-за угрозы здоровью человека и окружающей среде. В общем балансе выбросов транспортные средства представляют наиболее существенный источник загрязнения. По сравнению с самолетами, морским и железнодорожным транспортом загрязнения на автострадах дают основную долю выбросов, особенно это касается углеводородов, оксида углерода и оксидов азота. В Европе на долю автомобилей приходится 33% выбросов NO_x из 58%, 27% CO из 30%, 13% несгоревших углеводородов из 18%, приходящихся на весь транспортный сектор [1]. Если к этим выбросам добавить загрязнения (в том числе в виде частиц размером в несколько микрон), которые возникают из-за изнашиваемости покрытий автомобильных дорог, шин и т.д., то получается, что именно автомобили в большей степени ухудшают качество воздуха. Автотранспорт потребляет 72% топлива по сравнению, например, с железнодорожным, на который приходится лишь 5.3% [1]. В связи с этим в развитых странах разрабатывают программы, стратегии и принимают соответствующие законы, чтобы уменьшить нагрузку транспорта на окружающую среду, в том числе, на климат, и улучшить здоровье людей. Очень важным считается найти эффективные пути для достижения этих целей.

Возможны два подхода для снижения вредных выбросов в отработавших газах автомобилей и теплоэлектростанций: 1) очистка отработавших газов различными способами, и 2) эффективная организации горения в камере сгорания. Использование низкотемпературной плазмы для контроля загрязнения воздуха может быть общим способом для обоих подходов. В последние 10-20 лет широко исследуются возможности наносекундных импульсных разрядов обеспечить необходимый уровень конверсии токсичных примесей в загрязненном воздухе и продуктах сгорания, а также обеспечить стабильное воспламенение и горение в двигателе внутреннего сгорания в пограничных режимах для обедненных смесей.

Актуальность работы

Повышенный интерес к плазме, создаваемой наносекундными разрядами, связан с получением высокоэнергетических электронов и их способностью накапливать химически активные частицы, при этом газовая температура значительно ниже температуры электронов. Сами разрядные системы представляют собой не только лабораторные установки, но и имеют компактные промышленные прототипы. Необходимость практического применения разрядных устройств требует глубокого понимания физико-химических процессов, происходящих не только непосредственно в разряде, но и в самом объекте исследования, в котором создается плазма. Численное моделирование воздействия неравновесной плазмы газового разряда на химически активные среды является очень важным инструментом для построения детального кинетического

механизма с целью понимания, управления и оптимизации процессов по различным параметрам, в зависимости от конкретной задачи. При этом следует учитывать, что при давлениях порядка атмосферы и выше наносекундный разряд имеет многоканальную, стримерную природу.

Несмотря на значительный прогресс в понимании процессов плазменной очистки с использованием импульсных газоразрядных устройств, в настоящее время отсутствует адекватное описание всей совокупности исследуемых явлений. В плазменно-стимулированном горении остается много пробелов, связанных с особенностями окисления углеводородов. Разряды стримерного типа имеют временную и пространственную дискретность в подводе энергии к газу, который прокачивается через пламохимический реактор или находится в закрытом объеме. Аналитические модели малоперспективны в отношении решения самосогласованной задачи, объединяющей электрические, газодинамические и химические процессы. Поэтому основное внимание уделяется созданию численных моделей, которые, однако, также не всегда охватывают физико-химические явления в полной мере.

В настоящее время существуют разные уровни в описании систем с газоразрядным воздействием. Выбор полноты описания процесса диктуется поставленной задачей. Далеко не всегда стандартные программные средства и кинетические схемы реакций для различных смесей могут быть использованы, их функции, как правило, ограничены, кроме того, изменение программного кода невозможно. Однако, собственные программные средства и кинетические схемы дают более широкие возможности их модификации для решения актуальных задач и позволяют получить новые, значимые результаты.

Например, расчет состава газа в результате конверсии, инициируемой разрядом, требует учета большого числа реакций, количество которых может составлять несколько сотен и даже тысяч. Особенности такого типа задач накладывают определенные условия на выбор реакций. Химический состав среды изменяется как в результате единичного воздействия разряда, так и в результате изменения фона из-за импульсно-периодического характера введения энергии в разрядную камеру. Список реагентов должен включать в себя компоненты фонового газа и стримерных каналов, а также продукты их последующих взаимодействий. При создании конкретной кинетической схемы необходимо проводить предварительный анализ степени влияния компонентов и реакций на кинетику конверсии примесей или окисления и горения углеводородов, и оставлять наиболее важные реакции, т.е. создавать редуцированные схемы, иначе процесс вычисления займет много времени, а результат расчета будет сложно анализировать. Тем более это важно, если химическая кинетика включается в полной мере в газодинамические уравнения. Поэтому создание комплекса, состоящего из базы данных химических реакций, и соответствующих программ по созданию укороченных кинетических схем, программ для расчета

состава и анализа важности тех или иных процессов, является актуальной задачей. Такой комплекс позволяет создавать кинетические схемы для разных задач.

С другой стороны, как правило, плазмохимические реакторы для очистки газов на основе стримерных наносекундных разрядов имеют вид объема разной конфигурации, через который прокачивается газ. Далеко не всегда программными средствами можно точно воспроизвести вид реактора, решая при этом задачу определения состава газа после обработки разрядом. Однако учитывать дискретность подвода энергии (импульсно-периодический режим) и пространственную неоднородность по составу, связанную с наличием стримерных каналов, которые расширяются в результате диффузии, необходимо. Поэтому создание адекватной модели плазмохимического реактора, описывающей процесс конверсии в реакторах различной конфигурации, является насущной задачей.

Одна из основных проблем технологий, использующих стримерные наносекундные разряды для очистки дизельного выхлопа от окислов азота, состоит в уменьшении потребляемой мощности. К промышленному выпуску плазмохимических систем очистки дизельного выхлопа можно будет перейти, лишь сократив энергетические затраты на электропитание этих систем до 3% мощности двигателя. В современных опытных устройствах эти затраты превышают 4-5%. Энергетическая эффективность очистки во многом зависит от организации разряда и эффективности химических реакций. Добавление примесей углеводородов существенно увеличило эффективность конверсии NO в NO₂. Однако присутствие углеводородов изменяет механизм окисления оксидов азота. И не все реакционные каналы известны. Поэтому необходимо совершенствование кинетической схемы низкотемпературного окисления NO.

Но более перспективным направлением снижения оксидов азота в отработавших газах сейчас считается оптимизация процессов горения в камере сгорания двигателя с использованием стратегии низкотемпературного горения (Low temperature combustion (LTC) strategies). Главным фактором такой оптимизации считается использование бедных смесей в компрессионном двигателе с гомогенным или стратифицированным по температуре и степени обогащения топливно-воздушной смеси. Однако, в такой смеси возникают трудности воспламенения и распространения пламени. Для стабилизации горения (отсутствие пропусков воспламенения от цикла к циклу) исследуются несколько видов плазмы, например, плазма, создаваемая лазером, или наносекундным разрядом. С помощью разрядов можно управлять воспламенением. На развитие воспламенения влияет момент (угол поворота коленвала) включения разряда относительно верхней мертвой точки (ВМТ).

В стратегии низкотемпературного горения предполагается использовать химические свойства самой топливно-воздушной смеси. Поскольку многие углеводороды, которые используются в качестве топлива, обладают свойством многостадийного воспламенения, то

понимание того, как разряд влияет на проявление этого свойства во время сжатия смеси в цилиндре двигателя, является очень актуальной, не решенной до сих пор задачей. Необходимо восполнить пробел в области изучения влияния плазмы на протекание низкотемпературной стадии горения в двигателе внутреннего сгорания.

Однако использование неравновесной плазмы разряда в двигателе внутреннего сгорания может привести к дополнительной наработке оксидов азота, особенно в случае обедненного топлива, содержащего избыточное количество кислорода по сравнению со стехиометрическим составом. Эта нерешенная до конца проблема сдерживает применение такого типа разрядов в двигателе. Поэтому важно ответить на вопрос, при каких условиях и какой тип разряда подходит для замены свечи зажигания при использовании обедненного топлива. Также важно понять влияние разряда на другие составляющие выхлопа: оксиды углерода и несгоревшие углеводороды.

Особенностью стримерных разрядов является пространственная неоднородность плазмы, и временная зависимость вложенной в смесь энергии, как от формы импульса напряжения, так и от количества импульсов. Для решения задачи о воспламенении и формировании волны горения в 1D или 2D приближении необходимо выработать подходы к описанию активированной разрядом области в реальном устройстве. В настоящее время создание численной модели с учетом многоимпульсного и многоканального режима работы разряда представляет собой сложную и нерешенную до сих пор проблему. Однако, даже создание упрощенной модели активированной разрядом области позволит использовать ее в 2D и 3D моделях.

Известно, что при определенных условиях в двигателе могут развиваться разные сценарии горения: дефлаграционное горение, режим перехода дефлаграционного горения в последовательное распространение волн авто-воспламенения от фронта пламени, режим возникновения волны авто-воспламенения от стенки цилиндра, движущейся навстречу основной волне горения. Режимы с авто-воспламенением сопровождаются большими колебаниями давления, которые могут привести к повреждению двигателя или нежелательному аудио шуму. При дефлаграционном горении скорость фронта волны горения порядка 10-30 м/с, при авто-воспламенении скорость фронта достигает 1600 м/с. Особенно это важно для смесей с высоким цетановым числом, или как их еще называют, смеси, чувствительные к коэффициенту избытка топлива. Чувствительность таких смесей связана с наличием в топливе низкотемпературной стадии окисления и стадии окисления при промежуточных температурах, которые сопровождаются выделением тепла. Воздействие неравновесного разряда на эти стадии может привести к разным сценариям горения. Как влияет разряд на формирование разного типа волн горения пока мало исследовано. Этот вопрос вообще ранее не изучался численно, путем моделирования. Кроме того, необходимо учесть, что давление в камере сгорания меняется в

результате движения поршня. Обычно при изучении горения для условий двигателя внутреннего сгорания рассматривают распространение волны горения в условиях постоянного объема.

Цель и задачи исследования

Исходя из актуальности описанных выше проблем, была поставлена следующая **цель**:

Разработать теоретические положения о кинетических механизмах процессов конверсии токсичных примесей, воспламенения и горения при инициации неравновесной плазмой наносекундных разрядов в топливных смесях и продуктах сгорания. Для этого необходимо решить ряд задач:

1. Исследовать влияние наносекундного разряда на удаление NO_x в загрязненном воздухе и продуктах сгорания, а также на конверсию углеводородов в различных смесях. Для этого создать программный комплекс, состоящий из базы данных химических реакций, управляющих компьютерных программ и программ по расчету состава смеси.
2. Создать математическую и численную модель газофазного химического реактора для удаления токсичных примесей с помощью наносекундного импульсно-периодического разряда.
3. Создать численную модель химического реактора сжатия, в котором воспламенение инициируется неравновесной плазмой.
4. Исследовать влияние наносекундного разряда на многостадийное воспламенение углеводородо-воздушных смесей, включая отрицательный температурный коэффициент полной скорости окисления смеси.
5. Исследовать влияние неравновесной плазмы на процессы воспламенения в химическом реакторе сжатия (аналог компрессионного двигателя) с учетом особенностей низкотемпературного окисления углеводородов.
6. Определить степень влияния неравновесной плазмы на состав продуктов сгорания в компрессионном двигателе с гомогенным зарядом.
7. Предложить подход для определения состава и нагрева активированной области, созданной высокочастотным коронным разрядом в химическом реакторе сжатия.
8. Исследовать роль низкотемпературного окисления углеводородов на распространение фронта пламени, инициированного высокочастотным коронным разрядом в химическом реакторе сжатия, с учетом изменения давления в цилиндре за счет сжатия.

Таким образом, если обобщить все задачи, то можно сказать, что необходимо выявить основные принципы эффективного использования химических свойств самой смеси для целей конверсии токсичных примесей и организации горения в компрессионном двигателе при

инициации наносекундным разрядом. Конечным результатом должно быть уменьшение энергозатрат на удаление токсичных примесей в продуктах сгорания, а для горения под эффективностью подразумевается оптимальное применение неравновесной плазмы в компрессионном двигателе для стабильного горения (без пропусков воспламенения), чтобы потенциально устранить необходимость использования дорогостоящих систем последующей обработки выхлопных газов.

Новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые показано, что наносекундный разряд: 1) не подавляет, а стимулирует развитие и увеличивает интенсивность холодного пламени; 2) уменьшает проявление отрицательного температурного коэффициента полной скорости окисления, вплоть до его исчезновения.
2. Разработана модель химического реактора сжатия (аналог компрессионного двигателя) с инициацией воспламенения неравновесной плазмой разряда.
3. Предложен новый способ организации горения в компрессионном двигателе с помощью воздействия неравновесной плазмы разряда на бедную смесь с учетом стадии низкотемпературного выделения тепла (стадия холодного пламени) или выделения тепла при промежуточных температурах. Разряд непосредственно смесь не воспламеняет, а лишь подталкивает начало этих стадий и способствует более быстрому их протеканию. Смесь воспламеняется за счет сжатия.
4. Предложены рекомендации организации горения в бедной смеси с помощью разряда для сокращения в выхлопе CO и несгоревших углеводородов (УНС) и незначительного увеличения концентрации NO_x по сравнению с термическими NO_x.
5. Впервые показано, что значительное влияние высокочастотного коронного разряда на воспламенение и режим распространения волны горения объясняется стимуляцией кинетического механизма окисления при низких и промежуточных температурах. Воспламенение активированной разрядом зоны и авто-воспламенение перед фронтом пламени происходят в оптимальном диапазоне углов поворота коленвала, если разряд инициируется задолго до верхней мертвой точки. Необходимо рассматривать влияние энерговклада в стример с учетом структуры активированной зоны, созданной стримерными каналами.
6. Разработан метод учета дискретного по времени и пространству образования реагентов, связанного с многоканальной структурой наносекундного разряда. Метод применен для создания модели реактора для удаления токсичных примесей, и расчета состава и нагрева области, активированной высокочастотным коронным разрядом в компрессионном двигателе.

7. Построена кинетическая химическая модель конверсии NO_x в продуктах сгорания дизельного двигателя, содержащих в качестве добавок C_2H_4 и C_3H_6 при инициации процесса наносекундным разрядом.
8. Показана важная роль возбужденных молекул азота в разложении нафталина в биогазе при инициации наносекундным разрядом, а также необходимость учета ион-молекулярных, электрон-ионных реакций и диссоциативной рекомбинации.

Таким образом, разработка многофункциональной кинетической модели, включающей широкий спектр разнообразных реакций, и создание численных моделей газофазного химического реактора для удаления или конверсии токсичных примесей и химического реактора сжатия, в которых происходит активация смеси импульсно-периодическим наносекундным разрядом, позволило решить широкий круг задач по низкотемпературному окислению NO_x , конверсии различных токсичных веществ (оксидов азота, оксидов серы, формальдегида, этилена, нафталина и др.) и горению в смесях, содержащих компоненты воздуха и углеводороды. Полученная энергетическая эффективность конверсии была в хорошем соответствии с экспериментальными результатами.

Впервые исследована роль импульсно-периодического наносекундного стримерного разряда в процессах воспламенения и горения в гибридном двигателе внутреннего сгорания, который в стабильных условиях работает как компрессионный двигатель, а в случае пропуска воспламенения инициация процесса осуществляется разрядом. Проблема рассмотрена для топливных смесей, у которых проявляется многостадийное воспламенение и отрицательный температурный коэффициент скорости окисления смеси.

Восполнен пробел в области изучения влияния плазмы на протекание низкотемпературной стадии горения в условиях двигателя внутреннего сгорания. Плазма наносекундного разряда стимулирует развитие и увеличивает интенсивность холодного пламени, уменьшая проявление ОТК. Показано, что можно организовать горение обедненной топливной смеси в компрессионном двигателе, изменив реакционный путь протекания низкотемпературной стадии горения, который приводит к авто-воспламенению от сжатия, с помощью высокочастотной короны, и при этом улучшить состав выхлопа по CO и UHC и не увеличить значительно концентрацию NO_x по сравнению с термическими NO_x . Создание стратификации среды по термохимической реактивности в компрессионном двигателе с помощью такого разряда приводит к разным сценариям распространения волны горения. Выявлены основные параметры разрядного воздействия (величина удельного энерговклада в стримерный канал, радиус и доля объема активированной области, обработанной разрядом, момент инициации разряда по отношению к ВМТ). Таким образом можно преодолеть трудности воспламенения и распространения волны

горения в бедной смеси, использование которой в двигателях внутреннего сгорания в настоящее время является приоритетным.

Положения, выносимые на защиту. На защиту выносятся:

1. Механизм и результаты воздействия неравновесной плазмы наносекундного разряда на многостадийное воспламенение и отрицательный температурный коэффициент скорости окисления смеси.
2. Численная модель химического реактора сжатия (аналог компрессионного двигателя), в котором воспламенение инициируется неравновесной плазмой.
3. Метод организации стабильного горения в химическом реакторе сжатия с помощью воздействия неравновесной плазмы разряда на стадию низкотемпературного выделения тепла.
4. Рекомендации по выбору режима воздействия неравновесной плазмы для получения низкоэмиссионного выхлопа компрессионного двигателя.
5. Кинетический механизм влияния инициации высокочастотного коронного разряда на воспламенение и режим распространения волны горения в компрессионном двигателе.
6. Метод для оценки температуры и состава в области, активированной коронным высокочастотным разрядом в компрессионном двигателе.
7. Численная модель газофазного химического реактора для удаления или конверсии токсичных примесей с помощью наносекундного разряда.
8. Кинетическая химическая модель конверсии NO_x при инициации наносекундным разрядом в продуктах сгорания дизельного двигателя, содержащих в качестве добавок C_2H_4 и C_3H_6 .
9. Кинетические механизмы и результаты конверсии токсичных примесей в продуктах сгорания и биогазе в реакторах разной конфигурации на основе коронного и барьерного разряда.

Научная и практическая значимость

Понимание того, что в наносекундном стримерном разряде число стримеров, их толщина, скорость нарастания напряжения, ширина импульса, величина удельного энерговклада зависят от внешних характеристик электрической цепи, может дать средство для управления процессом в различных приложениях. Именно эта особенность используется для целей воспламенения в двигателе внутреннего сгорания и для очистки загрязненных газов. В зависимости от условий воздействия можно управлять конечным состоянием системы через изменение ее параметров на стадии разряда.

В настоящее время в рамках стратегии низкотемпературного горения предлагается использовать гибридные двигатели, которые в стабильных условиях могут работать как компрессионные (двигатели HCCI - homogenous charge compression ignition), а в нестабильных условиях инициатором горения является электрический разряд (spark-assisted engine). Создание такого типа двигателей – одно из ведущих направлений в двигателестроении. Предполагается, что используется обедненная смесь, которая обеспечивает при воспламенении низкую концентрацию NO_x , отсутствие сажи, небольшие потери тепла на стенках цилиндра, большую степень сжатия по сравнению со стехиометрической смесью, а также способствует экономии топлива. Проблема воспламенения бедных смесей – актуальная задача, возникающая при разработке современных энергоэффективных двигателей. Трудности воспламенения и формирования волны горения в бедной смеси при использовании обычной свечи зажигания (приводит к большим энергозатратам и быстрой изношенности свечей), преодолеваются применением высокочастотных (5 МГц) коронных разрядов. На основе такого разряда за рубежом уже созданы устройства, которые широко тестируются в реальных условиях с точки зрения стабильности работы при разных режимах (например, низкая температура подогрева смеси, большие и малые нагрузки), и даже предлагаются потребителю. Эти устройства рассматриваются как замена свечи зажигания и могут подстраиваться к условиям в камере сгорания двигателя, т.е. к изменению плотности смеси. В таких стримерных разрядах до 60% энергии трансформируется в газ, в отличие от 1% от обычной свечи зажигания при том же энергозатрате ~ 100 мДж; мощность разряда на один цилиндр составляет 25 Вт, активированная область может достигать нескольких кубических сантиметров [2-4]. Такой разряд особенно эффективен для альтернативных видов топлива, к которым относится метан и попутный нефтяной газ, содержащий, в основном, пропан и бутан в разной пропорции. Получение научно-обоснованных решений для применения высокочастотной короны может быть перспективным с точки зрения дальнейшего использования в двигателестроении, обеспечивая более эффективные и экологически безопасные способы горения за счет применения обедненных топливных смесей.

На основе результатов исследований, представленных в диссертации, предлагается использовать эти же устройства, но не для поджига, а только для активации горючей смеси при определенном угле поворота коленвала в течение короткого времени (3-5 град поворота коленвала). Разряд непосредственно смесь не воспламеняет, а лишь «подталкивает» протекание соответствующих реакций, а сама смесь воспламеняется в результате сжатия. Это требует меньших энергозатрат, т.к. момент активации определяется химическими свойствами самой смеси, которой присуща низкотемпературная стадия окисления. Разряд включается задолго до ВМТ, при достаточно низких давлениях и температурах. В этих условиях разряд легче инициировать. Выделяемое на этой стадии тепло за счет химических реакций с участием

пероксидов способствует тому, что при воспламенении горение продолжается, а не гаснет на стадии расширения продуктов сгорания при нисходящем движении поршня. Это помогает управлять временем задержки воспламенения, предпочтительно - не дальше 5 градусов поворота коленвала за ВМТ.

Химически активные частицы, наработанные разрядом, при взаимодействии с топливом дают долгоживущие промежуточные компоненты, разложение которых приводит к частичному выделению тепла. В зависимости от условий воздействия, процесс можно оборвать на стадии холодного пламени или стадии голубого пламени с учетом проявления отрицательного температурного коэффициента (ОТК) полной скорости окисления смеси, что важно для активирования топливно-воздушной смеси и ее дальнейшего использования для разных целей (горение, реформинг, получение новых веществ). Управление таким явлением, как многостадийное воспламенение, дает ключ к управлению процессами окисления и горения в практических устройствах.

Важным моментом для организации горения в гибридном двигателе является то, что при активации разрядом часть смеси поджигается волной горения, идущей от активированной области, а часть – за счет авто-воспламенения смеси перед фронтом пламени. Такая организация горения помогает избежать резкого выделения тепла и роста давления, свойственного авто-воспламенению всей массы смеси. Выводы, полученные в диссертации, показывают, что путем регулирования удельного энергозатрата в стримерный канал высокочастотного коронного разряда и момента инициации разряда относительно ВМТ можно решить проблему большой концентрации несгоревших углеводородов и оксида углерода, свойственных горению бедных смесей, а также управлять режимом распространения волны горения. Высокочастотные коронные разряды в качестве активатора воспламенения потенциально устраняют необходимость использования дорогостоящих систем последующей обработки выхлопных газов (что сопоставимо с дополнительным использованием топлива на 2-4% [5]).

Для целей очистки комбинированное использование плазмы наносекундных разрядов и различных катализаторов имеет хороший потенциал для промышленного применения. В этой двух стадийной очистке основное энергопотребление будет в реакторе с разрядом, создающим неравновесную плазму. В статье [6] была продемонстрирована работа системы очистки, состоящей из реактора с диэлектрическим барьерным разрядом и реактора быстрой избирательной каталитической нейтрализации (fast SCR - Selective catalytic reduction). Полученные результаты показывают 100% конверсию NO_x , причем 80% восстанавливается до N_2 при $T=100$ °C. Плазма позволяет окислять NO в диоксид NO_2 , без дальнейшего окисления NO_2 в азотную кислоту. В плазме происходит только частичное окисление углеводородов, без превращения их в CO_2 и H_2O . Такая

селективность определяется, прежде всего, уровнем концентрации активных частиц, создаваемых плазмой, что регулируется электрическим полем и удельным энерговкладом в газ. Представленная в диссертации модель газофазного химического реактора совместно с базой данных по химической кинетике позволяет проводить оптимизацию процессов в газовой фазе, то есть выбирать тип углеводородной добавки для сокращения энергозатрат для удаления NO, величину ее концентрации в зависимости от состава газа и температуры, оптимизировать частотный режим, удельный энерговклад за импульс. Также даются рекомендации, в каких смесях и для каких примесей лучше использовать каждый из исследованных типов разрядов (коронный или диэлектрический барьерный).

В мировой энергетике от 10% до 14% производимой в мире энергии вырабатывают из топлива, полученного из биомассы, основной газ в таком топливе – N₂. В настоящее время проблема удаления тяжелых углеводородов является слабым местом в использовании биогаза как для производства энергии, так и для химического производства различных веществ. Основная проблема в удалении тяжелых углеводородов из биогаза связана с уменьшением затрат энергии на очистку. Синергетический эффект совместного участия плазмы разряда и катализатора при удалении тяжелых углеводородов аналогичен тому, что было показано для окислов азота в присутствии углеводородов. Как показали результаты моделирования, представленные в диссертации, стримерный тип разряда является достаточно хорошим для конверсии тяжелых углеводородов с точки зрения энергозатрат. Это связано с тем, что при использовании наносекундного импульсно-периодического разряда в биогазе создается высокое приведенное поле, необходимое для наработки возбужденных молекул азота электронным ударом. Возбужденная молекула азота является в рассматриваемых условиях эксперимента лучшим компонентом для разрушения тяжелых циклических углеводородов типа нафталина.

Представленные в диссертации инструменты и методы исследования могут быть использованы для решения широкого круга задач для целей конверсии, окисления и горения с возможной инициацией наносекундным разрядом.

На разных этапах работа была поддержана грантами РФФИ, в том числе международными грантами РФФИ с Нидерландами и Францией.

Исследования, связанные с удалением токсичных примесей, проводились по приглашению автора в качестве исследователя в Сеульском национальном университете, в Инчхонском университете (Южная Корея), в Leibniz Institute for Plasma Science and Technology (INP), Greifswald (Германия), Centrum Wiskunde & Informatica (CWI), Amsterdam, и Eindhoven University of Technology, (Нидерланды).

Достоверность результатов и апробация работы

Для решения различных задач по очистке загрязненных газов от токсичных примесей, конверсии и горению проводилось предварительное тестирование кинетических схем на экспериментах, взятых из литературных источников. Результаты численных исследований по очистке и конверсии загрязненных газов, а также горению в закрытых объемах хорошо согласуются с экспериментальными данными. Знание и опыт, приобретенные при решении этих задач помогли при решении актуальных задач горения в компрессионном двигателе, когда инициация происходит высокочастотным коронным разрядом. Поскольку в настоящий момент нет возможности сравнить воспламенение в компрессионном двигателе с инициацией высокочастотным коронным разрядом напрямую, то предложенные подходы и модель химического реактора сжатия служат основой для прогнозирования результатов.

Результаты, представленные в диссертационной работе, докладывались на многочисленных всероссийских и международных конференциях, а также на московских семинарах и семинарах в Южной Корее, Германии, Франции и Нидерландах. Список конференций: Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии, 2002, 2005, 2011, 2015, 2018; Международное совещание по магнитоплазменной аэродинамике в аэрокосмических приложениях, 2003, 2005, 2009-2020; Всероссийская конференция по низкотемпературной плазме (ФНТП), 1995, 1998, 2014, 2017, 2020; Звенигородская конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу, 2004-2019; XV Всероссийский симпозиум по горению и взрыву, 2020; Всероссийская научно-техническая конференция «АВИАДВИГАТЕЛИ XXI ВЕКА», 2015; Inter. Conference on Combustion Physics and Chemistry, 2018; 14th Inter. CODATA Conference, 1994; Inter. Symp. on High Pressure, Low Temperature Plasma Chemistry (Hakone), 1996, 1998, 2000, 2002, 2014; Inter. Conference on Gas Discharges and Their Applications, 1997, 2004, 2006, 2012, 2014; Inter. Symp. on Plasma Chemistry (ISPC), 1997, 1999, 2001, 2005, 2007; Inter. Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG), 2013, 2017, 2019; International Symposium on Non-Thermal/Thermal Plasma Pollution Control Technology & Sustainable Energy, 2001, 2018; EUCASS Aerospace Thematic Workshop, 2011, 2017; Inter. Symp. Combustion and Atmospheric Pollution, 2003; Central European Symposium on Plasma Chemistry, 2009, 2011; 3rd Int. Conf. on Reactive Plasmas and 14th Symposium on Plasma Processing, 1997; Inter. Conference on Plasma Physics and Plasma Technology, 1997; European Sectional Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionised Gases, ESCAMPIG, 1996, 1998; 3rd Inter. Conference on Applied Electrostatics, 1997; 11th Symp. on Elementary Processes and Chemical Reactions in Low Temperature Plasma, 1998; VII Inter. Conference on Electrostatic Precipitation, 1998; 14th Inter. Symp. on Plasma Chemistry, 1999; Всероссийская конференция по молекулярной физике неравновесных систем, 2000; Inter. Conference on Physics of Low Temperature Plasma, 2003; AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibition, 2006; 7-й

Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике, 2006; 63rd gaseous Electronics Conference (GEC) and 7th International Conference on Reactive Plasmas, 2010; Всероссийская конференция «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред», 2009, 2010, 2011; Workshop NATO Research and Technology Agency AVT 199, 2012; Inter. Conference on Plasma Assisted Decontamination of Biological and Chemical Agents, 2008; 12th Asian Symposium on Visualization, 2013; Eighth Inter. Symp. on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena (NEPCAP), 2018; XXXIV Inter. Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, 2019; Inter. Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM), 2017.

Личный вклад автора

Задача о влиянии наносекундного разряда на многостадийное воспламенение была полностью решена автором. Идея организации горения в компрессионном двигателе с инициацией неравновесной плазмой принадлежит автору. Постановка задач, моделирование горения в химическом реакторе сжатия, анализ результатов с формулировкой выводов и рекомендаций по оптимальной организации горения сделаны автором. При решении задачи о распространении фронта пламени в компрессионном двигателе с инициацией высокочастотным разрядом автором был предложен и реализован метод оценки состава и нагрева активированной разрядом зоны, рассчитан состав и нагрев в этой зоне для разных условий на стадии сжатия. Эти результаты использовались как начальные условия для расчета распространения фронта пламени по программе PlasmAero. Анализ и обработка полученных результатов расчета проводились при определяющем участии автора. Статьи по горению в большей своей части были написаны автором.

Автор участвовала в создании базы данных по химической кинетике, в написании программ по расчету состава смеси. Является соавтором программных комплексов РАДИКАЛ и ДИЗЕЛЬ. Автор полностью отвечала за создание схем, в том числе редуцированных, химических реакций для разных задач и проводила тестирование этих схем. Автором было проведено моделирование по удалению токсичных примесей из различных смесей, с последующим анализом и обработкой полученных результатов, с формулировкой выводов. Отдельные статьи или большие разделы в статьях по конверсии оксидов азота, серы и углеводородов написаны автором.

Автор представляла результаты исследований на многих конференциях, делала доклады на семинарах. Также автор была руководителем или исполнителем грантов РФФИ.

Автором лично или совместно с соавторами опубликованы в рецензируемых изданиях: главы в 2 монографиях и 7 книгах и 23 статьи, а также 90 тезисов докладов и 1 препринт, которые относятся непосредственно к теме диссертации.

Структура диссертации

Диссертация состоит из Введения, 8 глав, Заключения, двух Приложений и Списка литературы. Объем диссертации: - 339 стр., она содержит 35 таблиц и 185 рисунков, список литературы включает 415 работ. Во Введении обосновывается актуальность работы, формулируются цель и задачи работы, новизна полученных результатов, положения, выносимые на защиту, обсуждается практическая значимость, приводятся места апробации работы и личный вклад автора.

В **Главе 1** дается обзор современных научных исследований в области плазменной очистки воздуха и продуктов сгорания от различных примесей, а также конверсии углеводородов в разных газах. Обсуждаются проблемы плазменно-стимулированного горения с целью усовершенствования работы двигателей внутреннего сгорания. Анализируются подходы к численному моделированию воздействия наносекундных стримерных разрядов на химически активные среды. Дается перечень газоразрядных реакторов для конверсии NO_x и органических компонентов, а также для целей плазменно-стимулированного горения.

Глава 2 посвящена описанию принципов создания базы данных химических реакций и компонентов, принципам анализа и редуцирования схем химических реакций для конкретных задач. Приведены тестовые расчеты и сравнение с экспериментами для проверки системы реакций в разных диапазонах температур и давлений для разного состава. Даны результаты моделирования эмиссии оксидов азота при подаче пара с природным газом в камеру сгорания газотурбинной установки, приведено сравнение рассчитанной величины оксидов азота с величиной, полученной в эксперименте. Обсуждается механизм хеми-ионизации в метано-кислородной смеси и причины возникновения голубого свечения в предпламенной волне неполного сгорания, приведено сравнение с экспериментальными данными по плотности электронов и частоте столкновения электронов с нейтральными компонентами во фронте волны горения.

В **Главе 3** представлена математическая и численная модель газофазного химического реактора для очистки и конверсии различных газов с учетом неоднородного распределения компонентов смеси и многоимпульсного режима подачи энергии. Также описана математическая и численная модель химического реактора сжатия – аналога компрессионного двигателя - с инициацией воспламенения неравновесной плазмой высокочастотного коронного разряда. Приведены расчеты состава синтез газа из природного газа для реального компрессионного двигателя, дано сравнение с экспериментом.

В **Главе 4** даны результаты моделирования удаления оксидов азота из продуктов сгорания метана в газофазном химическом реакторе на основе импульсного коронного разряда. Представлено сравнение с экспериментами и установлена степень влияния основных параметров физико-химической модели на удаление NO . Приведено сравнение энергетической эффективности

коронного и барьерного разряда для целей очистки загрязненного воздуха и продуктов сгорания углеводородов от оксидов азота и серы. Сравнение проводится с учетом особенностей каждого типа разряда при одинаковом составе смеси и одинаковой температуре.

В **Главе 5** обсуждается конверсия углеводородов в газофазном химическом реакторе. Показано влияние углеводородных примесей на удаление NO_x из дизельного выхлопа, строятся схемы реакций окисления C_2H_4 и C_3H_6 в присутствии оксидов азота. В работе представлены численные и экспериментальные результаты конверсии NO_x , исследовано влияние температуры на конверсию NO_x . Исследуется, в какой степени при измерениях продуктов конверсии NO_x результат зависит от метода измерения.

Представлено моделирование конверсии нафталина в чистом азоте и нескольких смесях на основе азота, включая биогаз. Выявлены основные химические процессы, которые влияют на энергетическую эффективность конверсии. Обсуждается роль возбужденных молекул азота, ион-молекулярных, электрон-молекулярных реакций и диссоциативной рекомбинации на разложение нафталина. Приведено сравнение с экспериментом.

В **Главе 6** приводятся результаты моделирования воздействия наносекундного разряда на многостадийное воспламенение в пропано-воздушной смеси. Необходимо было выяснить роль разряда и ответить на вопрос: подавляет ли разряд интенсивность холодного пламени или способствует его развитию, и как изменяется химический кинетический механизм отрицательного температурного коэффициента скорости окисления смеси под воздействием разряда. Объясняется причина кардинального воздействия разряда на отрицательный температурный коэффициент, заключающаяся в смене кинетических механизмов. Приводится соотношение между основными компонентами (атомом O , пропильным радикалом C_3H_7 и гидропероксидным радикалом $\text{C}_3\text{H}_7\text{O}_2$) и удельным энергоскладом, определяющими при каком энергоскладе исчезнет проявление отрицательного температурного коэффициента.

В **Главе 7** обсуждаются результаты параметрического исследования влияния неравновесной плазмы наносекундного разряда на воспламенение в компрессионном двигателе с гомогенной смесью (HCCI engine - homogenous charge compression ignition engine). Предложен способ организации горения в цилиндре двигателя HCCI с помощью селективного воздействия электрического разряда типа высокочастотной короны. Исследуется влияние момента инициации и длительности включения разряда в зависимости от химических свойств топлива, а именно, наличия низкотемпературной стадии горения, на управление воспламенением, чтобы избежать пропуска воспламенения и стабилизировать воспламенение в определенном диапазоне углов за ВМТ в рабочем цикле двигателя. Определяется чувствительность воспламенения к степени обеднения смеси, к температуре на впуске, и к присутствию химически активных частиц, образующихся в разряде. Степень влияния неравновесного разряда на концентрацию оксидов

азота, углерода и несгоревших углеводородов в выхлопе представлена в зависимости от удельного энерговклада в стримерный канал.

В **Главе 8** показывается, как на формирование волны горения в компрессионном двигателе с гомогенным зарядом (НССИ) влияет стратификация среды по составу и температуре, созданная высокочастотным коронным разрядом при высоких давлениях в бедной пропано-воздушной смеси. Предлагается подход к описанию активированной разрядом зоны в цилиндре двигателя. Скорость волны горения, возникновение различных режимов авто-воспламенения, сопровождающихся сильными колебаниями давления, исследуются в зависимости от момента инициации разряда, доли объема активированной зоны, обработанной разрядом, и удельного энерговклада в стримерный канал. Объяснение значительного влияния разряда дается с точки зрения стимуляции кинетического механизма окисления при низких и промежуточных температурах.

В **Заключении** приводятся основные научные результаты, полученные в диссертации.

В **Приложении 1** даны ведущие реакции, описывающие поведение многостадийного воспламенения и отрицательного температурного коэффициента в смеси пропан-воздух.

В **Приложении 2** дана схема реакций для C_2H_4 и C_3H_6 с радикалом OH при конверсии NO .

Приведен **Список работ автора**, опубликованных по теме диссертации.

Приведен **Список использованной литературы**

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи

1. Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование газофазного химического реактора на основе импульсного стримерного разряда для удаления токсичных примесей. Часть I // ТВТ.1998. Т.36. №.3. С.374-379.
2. Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование газофазного химического реактора на основе импульсного стримерного разряда для удаления токсичных примесей // ТВТ.1998. Т.36. №.4. С.557-564.
3. Amirov R.H., Chae J.O., Desiaterik Yu.N., Filimonova E.A., M.B. Zhelezniak M.B. Removal of NO_x and SO₂ from Air Excited by Streamer Corona: Experimental Results and Modelling // Japan Journal of Appl. Phys. 1998, v.37, pp. 3521-3529.
4. Амиров Р.Х., Десятерик Ю.Н., Железняк М.Б., Филимонова Е.А., Чо Ч.О. Конверсия оксидов серы и азота в импульсно-периодическом коронном разряде // Физика плазмы. 1998. Т.24. №.12. С.1141.
5. Filimonova E.A., Kim H.K. and Park I.H. Simulation of NO_x removal from diesel engine exhaust by pulsed corona and dielectric barrier discharge // Journal of Accelerator and Plasma Research, (ISSN 1225-9896), 1999, v.4, No.2, pp.39-47.
6. Filimonova E.A., Amirov R.H., Kim H.T. and Park I.H. Comparative modelling of NO_x and SO₂ removal from pollutant gases by using pulsed corona and silent discharges // Journal of Physics D. Applied Physics. 2000, v. 33. pp.1716-1727.
7. Филимонова Е.А., Амиров Р.Х., Ким Х.Т., Парк И.Х. Моделирование конверсии оксидов азота в выхлопе дизельного двигателя, обработанного барьерным разрядом // Химическая физика, 2000. Т.19. №. 9.С.75-82.
8. Филимонова Е.А., Амиров Р.Х. Моделирование конверсии этилена, инициируемой стримерной короной в потоке воздуха, Физика плазмы, 2001, т.27, №8, с.750-756.
9. Amirov R.H., Filimonova E.A. and Zhelezniak M.B., Modeling of NO_x, SO₂, VOC removal by pulsed corona and dielectric barrier discharge" // International Journal of Magnetohydrodynamics , Plasma and Space Research, 2001. v.10.No.4.pp.281-323.
10. Filimonova E.A., Kim Y., Hong S.H., and Song Y.H. Multiparametric investigation on NO_x removal from simulated diesel exhaust with hydrocarbons by pulsed corona discharge // Journal of Physics D. Applied Physics. 2002 v. 35. pp.2795-2807.
11. Kim H.T., Chung Y.-S., Whang M.-W. and Filimonova E.A. A study on NO_x removal efficiency depending on electrode configurations of silent discharges // Journal of the Korean Institute for Industrial Safety, 2002.V.17.No.3.pp.112-117.
12. Filimonova E.A. Discharge effect on the negative temperature coefficient behaviour and multistage ignition in C₃H₈-air mixture // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. V. 48. 015201
13. Фирсов А.А., Исаенков Ю.И., Крупский М.Г., Рудаков В.Ю., Филимонова Е.А., Яранцев Д.А., Леонов С.Б. Неравновесная инициация объемного горения в двигателе внутреннего сгорания: моделирование и постановка эксперимента. // Компьютерные исследования и моделирование. 2014. Т. 6. № 6. С. 911–922.
14. Гордин К.А. Масленников В.М., Филимонова Е.А. Оценка уровня эмиссии оксидов азота при подаче пара с природным газом в камеру сгорания газотурбинной установки // Теплофизика высоких температур. 2013, Т. 51. №6. С. 937-944.

15. K.B. Artem'ev, S.Yu. Kazantsev, N.G.Kononov, I.A. Kossyi, N.I.Malykh, N.A.Popov, N.M. Tarasova, E.A. Filimonova, K.N.Firsov. Nonequilibrium plasma accompanying the ignition of methane-oxygen mixtures // *J. of Physics D: Applied Phys.* 46 (2013) 055201.
16. E. A. Filimonova and G. V. Naidis. Effect of gas mixture composition on tar removal process in a pulsed corona discharge reactor // *Journal of Physics: Conference Series* 257 (2010) 012018, ISSN 1742-6596.
17. V.A. Bityurin., E.A. Filimonova, G. V. Naidis. Simulation of Naphthalene Conversion in Biogas Initiated by Pulsed Corona Discharges // *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2009, V.37, № 6, Part1, p. 911-919.
18. K. V. Artem'ev, N. K. Berezhetskaya, S. Yu. Kazantsev, N. G. Kononov, I. A. Kossyi, N. A. Popov, N. M. Tarasova, E. A. Filimonova, K. N. Firsov. Fast combustion waves and chemi-ionization processes in a flame initiated by a powerful local plasma source in a closed reactor // *Philosophical Transactions Royal Society A*. 2015 V. 373. 20140334;
19. Filimonova E., Bocharov A, Bityurin V. Influence of a non-equilibrium discharge impact on the low temperature combustion stage in the HCCI engine // *Fuel* 2018 228:309-322.
20. A. Dobrovolskaya, E. Filimonova, V. Bityurin, A.Bocharov, N. Klyuchnikov. Different numerical approaches for simulation of combustion wave initiation by electrical discharge // *AIP Conference Proceedings* 1978(1):470074. (2018, July)
21. A.S. Dobrovolskaya, E.A. Filimonova, V.A. Bityurin, A.N. Bocharov. Numerical study of combustion-wave propagation initiated by non-equilibrium discharge // *Journal of Physics. Conference Series*. 2019. 1147:012054,
22. Filimonova, E.A., Bocharov, A.N., Dobrovolskaya, A.S.. Bityurin V.A. Influence of Nanoseconds Pulsed Discharges on the Composition of Intermediate and Final Combustion Products in the HCCI Engine // *Plasma Chem Plasma Process* (2019) 39: 683-694. Volume 39, Issue 3.
23. Filimonova, E.A., Dobrovolskaya, A.S., Bocharov, A.N., Bityurin, V.A., Naidis, G.V. Formation of combustion wave in lean propane-air mixture with a non-uniform chemical reactivity initiated by nanosecond streamer discharges in the HCCI engine // *Combustion and Flame*, 2020. 215, pp. 401-416.

Главы в монографиях и книгах

1. Amirov R.H., Filimonova E.A. and Zhelezniak M.B., Modeling of NO_x, SO₂, VOC removal by pulsed corona and dielectric barrier discharge”, // *Advances in Plasma Physics Research*, Volume I, Editor: Francois Gerard, **Nova Science**, 2001, p.207-254.
2. Bityurin V.A., Bocharov A.N. and Filimonova E.A. Simulation of the physical and chemical processes in the chemical compression reactor / In: *Combustion and atmospheric pollution*, Edited by G.D. Roy, S.M. Frolov, A.M. Starik - Moscow: Torus Press Ltd., 2003. p.188-191.
3. Амиров Р.Х., Филимонова Е.А. Плазменно-каталитическая очистка выброса дизельного двигателя от оксидов азота. / Обзор в Энциклопедии низкотемпературной плазмы под ред. Ю.А.Лебедева, Н.А. Платэ, В.Е. Фортова, том VIII-1 «Химия низкотемпературной плазмы», И. Москва: Янус-К. 2005. С.502-556.
4. Filimonova E.A. and Zhelezniak M.B. Formation and removal of toxic impurities in the automobile exhaust gases / In: *Combustion and atmospheric pollution*, Edited by G.D. Roy, S.M. Frolov, A.M. Starik - Moscow: Torus Press Ltd., 2003. p.483-488

5. V.A. Bityurin, E.A. Filimonova and G.V. Naidis. Mechanisms of conversion of heavy hydrocarbons in biogas initiated by pulsed corona discharges / Plasma Assisted Decontamination of Biological and Chemical Agents, NATO ASI Series, Ed. by S.Gucery and V. Smirnov, Springer, 2008. 135-142.
6. Амиров Р.Х., Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование синтеза озона и конверсии оксидов серы и азота, используя стримерную корону / В Сб. Теория и практика электрических разрядов в энергетике. Под ред. А.Ф. Дьякова. ЮЦПК РП "Южэнерготехнадзор", 1997. с.287-313.
7. Битюрин В.А., Бочаров А.Н., Филимонова Е.А. Влияние электрического разряда на многостадийность воспламенения: химическая кинетика и практическое применение / В: Энциклопедия низкотемпературной плазмы, серия Б, т. IX-4 "Магнитоплазменная аэродинамика", под редакцией В.А. Битюрин и В.Е. Фортова. Из-во: Янус-К, Москва, 2014, стр. 229-240.
8. Bityurin V.A. and Filimonova E.A. Plasma-assisted mechanism of multystage self-ignition onset / In the book: "Transient combustion and detonation phenomena: fundamentals and applications", edited by G.D. Roy and S.M. Frolov, M: Torus Press, 2014. p. 83-89.
9. R. H. Amirov, E.A. Filimonova Modeling of NO_x, VOC, SO₂ removal and ozone synthesis by streamer discharges. / Chapter · in book: Recent Developments in Applied Electrostatics, pp.108-111. January 2004. Edited by: Sun Keping and Yu Gefei ISBN: 978-0-08-044584-7, Copyright © 2004 Elsevier Ltd.

Препринты

1.Амиров Р.Х., Железняк М.Б., Филимонова Е.А. Моделирование процессов очистки в дымовых газах, инициируемых периодическим коронным разрядом // Препринт ИВТАН № 1-403. -М: 1997. 62С.

Тезисы докладов

1. Zhelezniak M.B., Filimonova E.A. Using pulse discharge for removal of nitrogen oxides from combustion products of hydrocarbon fuel // Proc. of Conf. by Physics Low Temperature Plasma, Petrozavodck, 20-25 June, 1995, pp.395-398 (in Russian).
2. Amirov R.H, Filimonova E.A., Zhelezniak M.B., Chemical kinetics model of ozone synthesis and SO₂/NO_x removal by streamer corona // Proc. of the XII Int. Conf. on Gas Discharges and Their Applications, September 8-12, Greifswald, Germany, 1997, v.1, pp.386-389.
3. Filimonova E.A. and Amirov P.H. Modelling of nitrogen oxides conversion in barrier discharge // Proc. of Conf. by Physics Low Temperature Plasma, Petrozavodck, June 22-27, 1998, p.555. (in Russian).
4. Filimonova E.A., Amirov R.H. Kim H.T. Comparative simulation of efficiency of pulsed corona and dielectric barrier discharges for treatment of pollutant gases // Proc.of 14th Int. Symp. on Plasma Chemistry, Prague, Czech Republic, August 2-6, 1999, pp.2649-2654.
5. Kim H.T, Chung Y.S. and Filimonova E.A. Efficiency of NO_x removal in N₂ for several types of barrier discharge depending on electrode configurations and electrical power supply // Contributed papers of 7th Int. Symp. on High Pressure, Low Temperature Plasma Chemistry (Hakone 7), September 10-13, Greifswald, Germany, 2000, pp.214-218.

6. Filimonova E.A., Amirov R.H. "Comparative modelling of toxic impurities conversion in pollutant gases for different streamer discharges" // Proc. of the Third Int. Sym. on Non-Thermal plasma technology for pollution control, 2001, April 23-27, Seogwipo, Cheju island, Korea.
7. Filimonova E.A., Hong S.H., Kim Y.H., Han S.Y., Song Y.H. "Multyparametric investigation of NO_x removal from diesel-like exhaust gas by pulsed corona discharge in the presence of hydrocarbons" // Proc. of the 15th Int. Sym. on Plasma chemistry, July 9-13, Orleans, France, 2001, p.3041-3046.
8. Filimonova E.A., Amirov R.H., Hong S.H., Kim Y.H., and Song Y.H. Influence of temperature and hydrocarbons on removal of NO_x and SO₂ in a diesel exhaust gas activated by pulsed corona discharge // Contributed papers of 8th Int. Symp. on High Pressure, Low Temperature Plasma Chemistry (Nakone 8) , July 21-25, 2002, Puhajarve, Estonia, p.337-341.
9. Филимонова Е.А. и Амиров Р.Х. Моделирование конверсии оксидов азота и серы в стримерной короне в присутствии углеводородов // Сборник материалов 3-го Международного симпозиума по теоретической и прикладной плазмохимии, 2002 . 16-21 сентября, Плес, Россия, сс.179-182.
10. Filimonova E.A and Zhelezniak M.B. Formation and removal of toxic impurities in the automobile exhaust gases // In: International conference on physics of low temperature plasma PLTP-03, Kyiv, Ukraine, May 11-15, 2003.
11. V.A. Bityurin, A.N. Bocharov and E.A. Filimonova. Numerical investigation of NO effect on the ignition of hydrogen and hydrocarbons in non-premixed layers of cold fuel and hot air // In Proc. of The 17 Inter. Symp on Plasma Chemistry, Aug. 7-12, 2005, Toronto, Canada.
12. В.А. Битюрин, А.Н. Бочаров, Е.А. Филимонова. Влияние NO на воспламенение водорода и углеводородов в не перемешанных слоях холодного топлива и горячего воздуха // В сборнике Трудов 4-го Международного Симпозиума по теоретической и Прикладной Плазмохимии, 13-18 мая, 2005, Иваново, С. 208-212.
13. V.A. Bityurin, A.N. Bocharov, E.A. Filimonova // Effects of arc discharge products on ignition of non-premixed system // In Proc. of 15th Int. Conf. on MHD Conversion and 6th Int. Workshop on Magnetoplasma aerodynamics, May 24-27, 2005, Moscow, Russia, P.359-364.
14. V.A. Bityurin, E.A. Filimonova, R.A.B.P. Kerst, G.V. Naidis and A.J.M. Pemen. The modeling of tar removal from biogas stimulated by a pulse corona discharge // In Proc. of XVIth International Conference on Gas Discharges and Their Applications, China, September 11-15, 2006.
15. V.A. Bityurin, E.A. Filimonova and G.V. Naidis. Mechanisms of conversion of heavy hydrocarbons in biogas initiated by pulsed corona discharges // Proc. 18 Int. Symp. on Plasma Chemistry, Kyoto, Japan, August, 26-31, 2007 p. 152.
16. A. Bityurin., А.Н. Бочаров, Е.А. Filimonova. About low temperature inflammation of propane and acetaldehyde under assisted combustion // 17th Int. Conf. on MHD Conversion and 8th Inter. Workshop on Magnetoplasma aerodynamics, Mach 31-April 2, 2009, Moscow, Russia. P. 101-106.
17. V.A. Bityurin., Е.А. Filimonova. Modeling of low temperature inflammation initiated by discharge in hydrocarbon-air mixtures // III Central European Symposium on Plasma Chemistry, August 23 – 27, 2009, Kyiv, UKRAINE. P. 47-48.
18. Bityurin V.A. and Filimonova E.A. Plasma-assisted mechanism of cool flame appearance // 9th Inter. Workshop on Magnetoplasma Aerodynamics, April 13-15, 2010, Moscow, Russia. P.112-114.
19. E. A. Filimonova F.J.C.M. Beckers, R.W.J. Smulders, A.J.M. Pemen, W.F.L.M. Hoeben and E.J.M. Van Heesch. Pulsed corona oxidation of low NO and NO₂ concentrations: semi-industrial tests and

- model simulations to illustrate the process // ICRP-7 / SPP-28 / GEC-63, - 63rd gaseous Electronics Conference and 7th International Conference on Reactive plasmas, October 4-8, 2010, Paris, France. V.55, No.7, PR3; Paper 0303.
20. E.A. Filimonova, F.J.C.M. Beckers, W.F.L.M. Hoeben, C. Li, A.J.M. Pemen, E.J.M. van Heesch, and U. Ebert. Limitations of NO_x removal by pulsed corona reactors // The Fourth Central European Symposium on Plasma Chemistry, August 21-25, 2011, Zlatibor, Serbia, p.37-38.
 21. Bityurin V.A., Bocharov A.N. Filimonova E.A. Electrical discharge effect on a multistage inflammation and combustion: a chemical kinetics mechanism and practical application // Сборник трудов VI Международного симпозиума по теоретической и прикладной плазмохимии, 5-9 сентября 2011, г. Иваново, Россия. с.с. 173-176.
 22. E.A. Filimonova, F.J.C.M. Beckers, W.F.L.M. Hoeben, C. Li, A.J.M. Pemen, E.J.M. van Heesch, and U. Ebert. Investigation of NO_x production and removal at a low NO level concentration in a pulsed corona reactor // 19th Int. Conference on Gas Discharges and their Applications, September 2-7, 2012, Beijing, China. Editor. prof. Z.C. Guan, V.38
 23. E.A. Filimonova, V.A. Bityurin. Effect of primary radicals coming from discharge operation on negative temperature coefficient in C₃H₈ –air mixture / 31 Inter. conference on phenomena in ionized gases (ICPIG), 2013, July 14-19, Spain, PS4-068.
 24. К.В. Артемьев, Н.К. Бережецкая, С.И. Грицинин, И.А. Косый, Н.И. Малых, М.А. Мисакян, Н.А. Попов, Н.М. Тарасова, Е.А. Филимонова. Неравновесная плазма, сопровождающая горение метан-кислородной смеси //Звенигородская (Международная) конференция по физике плазмы и УТС, 11-15 февраля 2013г. Звенигород. С. 142.
 25. Filimonova E., Bityurin V., Bocharov A. Numerical investigation of plasma assisted ignition of non-premixed combustible mixture // Book of contributions. “14th Inter. Symp. on High Pressure Low Temperature Plasma Chemistry (Hakone XIV)”, Zinnowitz, Germany, 2014, p. 578-582 (Oral-09-48. 5pp)
 26. Filimonova E.A and Bityurin V.A. Discharge effect on the chemical kinetics of negative temperature coefficient in propane-air mixture // In Proceedings of “The XXth International Conference on Gas Discharges and their Applications”. Orléans, France, 2014. p.670-673.
 27. Филимонова Е.А., Битюрин В.А., Бочаров А.Н. Влияние разряда на стабилизацию воспламенения в химическом реакторе сжатия // Сборник материалов “Всероссийской (с международным участием) конференции «Физика низкотемпературной плазмы ФНТП - 2014». Казань. 2014, Т.2. С. 123-127
 28. Е.А. Филимонова. Расчет уровня эмиссии оксидов азота при подаче пара с природным газом в камеру сгорания газотурбинной установки // Всероссийская научно-техническая конференция «АВИАДВИГАТЕЛИ XXI ВЕКА». Москва, 24-27 ноября 2015.
 29. E. A. Filimonova, A.N. Bocharov, A.S. Dobrovolskaya, V.A. Bityurin. Influence of nanoseconds pulsed discharges on the composition of intermediate and final combustion products in the HCCI engine // Proceedings of 11th International Symposium on Non-Thermal/Thermal Plasma Pollution Control Technology & Sustainable Energy. Padova, Italy, July 1-5. 2018. O-07 paper.
 30. E.A. Filimonova, A.N. Bocharov, V.A. Bityurin. Formation of combustion wave in a hydrocarbon-air mixture in near high-voltage electrode of surface dielectric barrier discharge // Technical program and book of abstracts of International Conference on Combustion Physics and Chemistry. Samara, Russian Federation, July 24-28, 2018. P.43.

31. Филимонова Е.А., Бочаров А.Н., Битюрин В.А. Моделирование плазмохимических процессов в компрессионном двигателе, иницированных неравновесным электрическим разрядом // VIII Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии. Иваново. 10-15 сентября 2018 г. с.62
32. E. Filimonova, A. Dobrovolskaya and G. Naidis. Evaluation of temperature and concentrations of chemically active particles in the area activated by a high-frequency corona discharge in the HCCI engine // Proceedings of 24th International Symposium on Plasma Chemistry, Naples, Italy, June 9-14, 2019, P1-44.
33. E. Filimonova, A. Dobrovolskaya, S. Starikovskaia, A. Bocharov, V. Bityurin. Changing the chemical kinetic mechanism of ignition under the influence of SDBD in a rapid compression machine // Abstracts of XXXIV ICPIG&ICRP-10, July 14-19, 2019, Sapporo, Japan, p. PO18AM-009
34. Dobrovolskaya A.S., Filimonova E.A., Bocharov A.N., Bityurin V.A. Parametric study of the combustion acceleration in lean air-C₃H₈ mixtures activated by nonequilibrium discharge // XXXIV International conference on interaction of intense energy fluxes with matter. Book of Abstracts, March 1-6 2019, Elbrus, Russia, p. 161.
35. Филимонова Е.А., Добровольская А.С., Бочаров А.Н., Битюрин В.А. Управление горением обедненной пропано-воздушной смеси высокочастотным коронным разрядом в компрессионном двигателе // XV Всероссийский симпозиум по горению и взрыву, Москва, Россия, 29 ноября – 4 декабря 2020 г, В сборнике «Тезисы XV Всероссийского симпозиума по горению и взрыву», Т.1, стр. 134, 2020.