

## Моделювання згорання водню в двигунах внутрішнього згорання автомобільного транспорту

Шкідливі викиди від автомобільного транспорту, що споживає викопні палива, спонукає людство використовувати альтернативні палива. Україна розглядається як перспективний виробник «зеленого водню», тобто водню, який виробляється з води шляхом електролізу і використовує для цього електрику з відновлюваних джерел.

Водень, як джерело енергії для автомобільного транспорту, може використовуватися різними способами: для автомобілів з ДВЗ, для якого водень є моторне паливо; для автомобілів з паливними комірками, які перетворюють хімічну енергію водню безпосередньо в електрику та тепло. Оскільки в сучасних автомобілях водневі паливні комірочки працюють за температури приблизно 80 °С, єдиними побічними продуктами є водяна пара та тепло.

Двигуни з запалюванням від стиснення мають обмеження щодо роботи на водневому паливі. Температура стиснення в цих двигунах недостатньо висока для початку згорання водню. Існує кілька викликів при впровадженні водневих двигунів, зокрема викиди NOx, які залежать від робочих граничних умов. EGR є одним із ефективних методів зниження рівня NOx. Традиційний EGR не підходить для водневого ДВЗ. Тому важливо вивчати вплив гарячого EGR на згорання водню в ДВЗ. Метою даної роботи є моделювання згорання водню в ДВЗ автомобільного транспорту з врахуванням EGR.

Для цього були проаналізовані фізичні властивості водню, включаючи його теплоємність та ентальпію. Водень має суттєві відмінності порівняно з поширеними вуглеводнями: високий рівень вивільнення енергії на одиницю маси, дуже високу дифузійність та високу реактивність.

Були проаналізовані рівняння збереження маси, збереження енергії і збереження складових частин, які використовуються для моделювання згорання водню в ДВЗ в програмному середовищі *Cantera*.

Було виконано моделювання викидів оксидів азоту в залежності від EGR та ступеню стиску. Було виявлено, що викиди оксидів азоту при роботі ДВЗ на водні за різних температур мають експоненціальну залежність від відсотку EGR. Хоча EGR сильно знижує NOx це призводить до суттєвих втрат енергії, особливо при підвищеній температурі. Оптимальна зона знаходиться при помірному EGR (5–10 %), де NOx ефективно знижується, але це відбувається при втраті потужності.

**Ключові слова:** альтернативне паливо; водень; згорання палива; моделювання; ДВЗ; автомобільний транспорт.

**Постановка проблеми.** Автомобілі з двигунами внутрішнього згорання, які працюють на викопному паливі, дають значний відсоток шкідливих викидів в атмосферу. І саме цей факт змушує задуматися про альтернативні палива.

Одним із найперспективніших видів альтернативного палива є водневе паливо, оскільки водень є одним із найпоширеніших елементів у Всесвіті. Україна розглядається як перспективний виробник «зеленого водню», тобто водню, який виробляється з води шляхом електролізу і використовує для цього електрику з відновлюваних джерел, як то сонячна чи вітрова енергетика. Україна має значний потенціал стати експортером «зеленого водню» до Європейського Союзу. Завдяки географічній близькості до ЄС, розгалуженій газотранспортній системі, яку можна адаптувати для транспортування водню, а також значним потужностям відновлюваних джерел енергії, Україна розглядається як стратегічний партнер у декарбонізації європейської економіки.

Водень, як джерело енергії для автомобільного транспорту, може використовуватися різними способами: для автомобілів з ДВЗ, для яких водень є моторне паливо; для автомобілів з паливними комірками, які перетворюють хімічну енергію водню безпосередньо в електрику та тепло.

Оскільки в сучасних автомобілях водневі паливні комірочки працюють за температури приблизно 80 °С, єдиними побічними продуктами роботи автомобілю є водяна пара та тепло [1].

Двигуни з запалюванням від стиснення, також відомі як дизельні двигуни, мають обмеження щодо роботи на водневому паливі. Температура стиснення в цих двигунах зазвичай недостатньо висока для початку згорання водню. Існує кілька викликів при впровадженні водневих двигунів, зокрема викиди NOx, які залежать від робочих граничних умов. Для вирішення цієї проблеми дослідники працюють над розробкою моделей для прогнозування викидів NOx у водневих двигунах [2]. Водень також потребує

меншої енергії запалювання і може працювати у більшому діапазоні співвідношення повітря до палива. Звісно, є й недоліки, такі як дуже низька густина, проблеми з транспортуванням і зберіганням, що збільшує вартість цього палива [2].

**Аналіз останніх досліджень.** Дослідження процесів згоряння, включаючи альтернативні палива, проводяться в лабораторіях Університету Кембриджу, Великобританія. В роботі [3] досліджувалось випаровування та згоряння ацетону. Для більших крапель випаровування відбувається повільніше і проходить всередині зони продукту, що призводить до вищої температури порівняно зі стехіометричними значеннями, але також до вищих рівнів CO та меншого перетворення на CO<sub>2</sub>. Більші краплі не повністю випаровуються і повертаються з протилежним потоком назад до полум'я [3].

В роботі [4] досліджувалось згоряння біодизельного та дизельного палив. Було показано, що для моделювання згоряння палива потрібно знати значення його ентальпії. Експериментальні дослідження показали, що обидва палива мали однакову довжину полум'я. Але полум'я біодизеля мало центральну верхню зону, що з'єднувало дві сторони реакційної зони. В експериментальних дослідженнях [4] максимальна інтенсивність OH\* дизельного палива була в два рази менша, ніж OH\* інтенсивність біодизеля. Це доводить, що швидкість вивільнення тепла (heat release rate) центральної верхньої реактивної зони є більшою за величиною в порівнянні з цією ж характеристикою для дизельного палива.

В проєкті [5] університеті Кембридж, Великобританія відмічено, що водень має схильність утворювати нестабільні поверхні полум'я через термодифузійні нестабільності, пов'язані з дуже легкою природою молекул водню. Ці термодифузійні нестабільності утворюють довгі пальцеподібні передні краї і дуже товсті зони реакцій. Це означає, що методи, за допомогою яких описується полум'я для вуглеводнів, погано працюють для водню [5].

В роботі [6] досліджувалося використання водню як палива в ДВЗ. Використовуючи динамічну модель, спочатку розроблену для бензинових ДВЗ, це дослідження мало на меті адаптувати та розширити її з урахуванням унікальних характеристик і операційних параметрів, пов'язаних із горінням водню. Потрібно створити комплексну та точну динамічну модель використання водню в ДВЗ (H<sub>2</sub>-ICE), яка здатна моделювати його роботу в різних умовах експлуатації [6].

В Mississippi State University, США [7] виконувалося дослідження за допомогою віртуального ДВЗ, який працював на n-додекані та водні. Умови впуску при рециркуляції вихлопних газів (EGR) були створені шляхом змішування свіжого потоку повітря з часткою вихлопних продуктів двигуна. Для кожної робочої точки склад вихлопних газів (N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, NO<sub>x</sub>) та температура поєднувалися з базовим впускним повітрям (суміш O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> при рекомендованій температурі впуску). Фракція EGR визначала відносну вагу вихлопних газів і повітря, так що вищий EGR підвищував температуру вхідного простору, розбавляючи концентрацію кисню та вводячи продукти згоряння, такі як H<sub>2</sub>O і NO<sub>x</sub>. Кінцева суміш нормалізувалася для представлення ефективного складу впуску, що подається до циліндра. Ця процедура відображає фізичну роль EGR у підвищенні температури впуску, зменшенні доступності кисню та модифікації хімії заряду [7].

Специфіка роботи двигуна на водні [7] полягала в тому, що як температура впуску, так і ступень стиснення були високими. Робота оцінювалася за температурами впуску 400–600 K та ступенями стиснення (CR) 20–28 та рівнями рециркуляції вихлопних газів (EGR) 0–15 %. Оптимальний робочий діапазон визначався за температури впуску приблизно 400K, CR = 24–28, а EGR – між 5 % і 10 %, де потужність залишалася високою (20–18 кВт), підвищення ефективності (понад 50 %), а викиди NO<sub>x</sub> суттєво зменшувалися (з 332 ppm при нульовому EGR до 48 ppm при 5 % EGR і 10 ppm при 10 % EGR), з лише незначним витоком водню (0,07–0,11).

В роботі [8] було проаналізовано характеристики згоряння водню при гарячому EGR, що свідчить, що EGR не мало позитивний вплив на згоряння та викиди NO<sub>x</sub> при низькому навантаженні; однак значне зниження NO<sub>x</sub> можна досягти для збагачених сумішей, коригуючи швидкість EGR для більшого навантаження з незначною втратою потужності.

**Метою статті** є моделювання згоряння водню в ДВЗ автомобільного транспорту з врахуванням EGR.

**Викладення основного матеріалу.**

### 1. Властивості водню.

Хоча водень і найпростіше паливо, але має суттєво відмінні характеристики порівняно з поширеними вуглеводнями: високий рівень вивільнення енергії на одиницю маси, дуже високу дифузійність та високу реактивність [5]. Властивості водню можна знайти в [9].

Теплоємність водню (Дж/ (моль K)) в залежності від температури може бути знайдена за наступним рівнянням [9]:

$$C_p = A + B \cdot t + Ct^2 + Dt^3 + E/t^2.$$

Ентальпія водню може бути знайдена, використовуючи наступні рівняння (кДж/моль):

$$H - H_{298.15} = A \cdot t + \frac{Bt^2}{2} + \frac{Ct^3}{3} + \frac{Dt^4}{4} - \frac{E}{t} + F - H,$$

де  $A, B, C, D, E, F, H$  – коефіцієнти;

$$t = \frac{T}{1000}, \text{ де } T - \text{температура, К.}$$

Значення коефіцієнтів можна знайти, використовуючи данні, що приведені в [9]. В таблиці 1 наведені значення коефіцієнтів для визначення теплоємності водню.

Таблиця 1

Значення коефіцієнтів для визначення теплоємності водню

Температура (К)	298К до 1000К	1000К до 2500К	2500К до 6000К
<i>A</i>	33,066178	18,563083	43,413560
<i>B</i>	-11,363417	12,257357	-4,293079
<i>C</i>	11,432816	-2,859786	1,272428
<i>D</i>	-2,772874	0,268238	-0,096876
<i>E</i>	-0,158558	1,977990	-20,533862

На рисунку 1 показана теплоємність водню залежно від температури, що розрахована за рівнянням, що приведено вище.

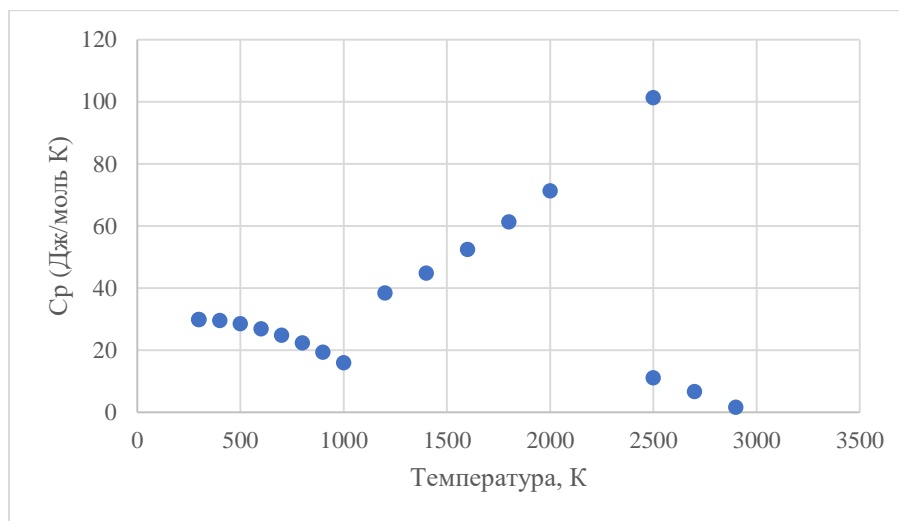


Рис. 1. Теплоємність водню в залежності від температури

## 2. Моделювання згоряння водню.

**Рівняння моделі та програмного середовища Cantera.** Моделювання згоряння водню в ДВЗ може бути виконано в програмному середовищі Cantera, де використовуються наступні рівняння:

Рівняння збереження маси:

$$\frac{dm}{dt} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} + \dot{m}_{wall},$$

де  $m$  – загальна маса всередині циліндра;

$t$  – час;  $\dot{m}_{in}$  і  $\dot{m}_{out}$  – масові витрати (mass flow rate) на вході та виході, відповідно;

$\dot{m}_{wall}$  – позначає будь-який обмін масою зі стінками циліндра.

Рівняння збереження енергії:

$$m c_p \frac{dT}{dt} = \dot{Q} - \sum_k h_k \dot{m}_{k,gen} + \sum \dot{m}_{in} h_{in} - \sum \dot{m}_{out} h_{out},$$

де  $T$  – температура газу в циліндрі;

$c_p$  – питома теплоємність суміші;

$\dot{Q}$  – швидкість теплопередачі між газом і стінками циліндра.

Рівняння збереження складових частин (species):

$$\frac{d(mY_k)}{dt} = \sum \dot{m}_{in} Y_{k,in} - \sum \dot{m}_{out} Y_{k,out} + \dot{m}_{k,gen},$$

де  $Y_k$  – питома ентальпія складових частин  $k$ ;

$\dot{m}_{k,gen}$  – швидкість утворення складових частин  $k$  внаслідок хімічних реакцій та горіння;

$\dot{h}_{in}$ ,  $\dot{h}_{out}$  – питомі ентальпії вхідних і вихідних потоків;

$Y_k$  – масова частка складових частин  $k$  у циліндрі;

$Y_{k,in}$ ,  $Y_{k,out}$  – частки маси впуску та виходу складових частин  $k$ .

Контрольний об'єм може бути визначений за наступним рівнянням:

$$V = K(P_{left} - P_{right}) + V_0(t),$$

де  $V_0(t)$  – залежний від часу контрольний об'єм;

$K$  – коефіцієнт пропорційності;

$P_{left}, P_{right}$  – граничні тиски.

Швидкість теплопередачі може бути знайдена як:

$$q = U(T_{left} - T_{right}) + \epsilon\sigma(T_{left}^4 - T_{right}^4) + q_0(t),$$

де  $U$  – коефіцієнт конвективної теплопередачі;

$T_{left}, T_{right}$  – температура стінок і газу, відповідно;

$\epsilon$  – емісивність (emissivity);

$\sigma$  – постійна Стефана–Больцмана;

$q_0(t)$  – додатковий тепловий член.

### 3. Вхідні дані.

Вхідні дані для розрахунків згоряння водневого палива в ДВЗ показані в таблиці 2.

Таблиця 2

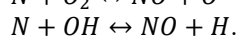
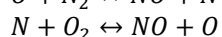
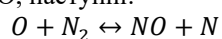
Порівняння вхідних даних для дизельних і водневих двигунів (адаптовано з [7])

Параметр	Дизельний двигун (n-додекан)	Водневий двигун
Механізм реакції	ndodecane_Reitz.yaml	gri30.yaml
Склад палива	C12H26:1 (n-додекану)	H2:1 (водень)
Температура впуску (К)	300	400
Ступінь стиснення	20	20
Оберти двигуна (об/хв)	3000	3000
Робочий об'єм (м <sup>3</sup> ) (Displaced Volume)	$5,00 \times 10^{-4}$	$5,00 \times 10^{-4}$
Діаметр поршня (м)	0,083	0,083
Потужність розширення (кВт) (Expansion Power)	18,5	19,5
Коефіцієнт виділення тепла (кВт) (Heat Release Rate)	33,6	37,2
ККД (%)	55,2	52,3
Викиди CO (ppm)	8,9	0
Кут впускного клапана (град) (Inlet Valve Angle)	-18 (відкрито) до 198 (закрито)	-18 (відкрито) до 198 (закрито)
Кут вихідного клапана (град) (Outlet Valve Angle)	522 (відкриття) до 18 (закриття)	522 (відкрито) до 18 (закрито)
Кут впорскування (град) (Injector Angle)	350 (відкрито) до 365 (закрито)	350 (відкрито) до 365 (закрито)

### 4. Моделювання викидів оксидів азоту та EGR.

NO<sub>x</sub> – це єдині шкідливі викиди водневого двигуна внутрішнього згоряння. Як правило, розглядають три процеси утворення NO<sub>x</sub> внаслідок згоряння палива – це паливний, термічний і швидкий. Паливний NO<sub>x</sub> утворюється з азоту, що з'єднується з паливом, який зазвичай міститься у вугіллі або сирій нафті. Термічний NO<sub>x</sub> утворюється внаслідок реакції атмосферного азоту та O<sub>2</sub> у димових газах при підвищеній температурі [10]. Швидкий (prompt NO<sub>x</sub>) утворюється на ранній стадії горіння внаслідок взаємодії азоту з радикалами вуглеводнів.

Згоряння вуглеводневого палива може призвести до утворення трьох типів NO<sub>x</sub>, тоді як згоряння водню не утворює паливний NO<sub>x</sub>, а відсутність вуглецю запобігає утворенню швидкого NO<sub>x</sub>. Проте, оскільки термічний NO<sub>x</sub> не залежить від палива, він може генеруватися при роботі ДВЗ на водні. Швидкість утворення термічного NO<sub>x</sub> залежить від температури горіння, співвідношення палива до повітря, а також часу перебування газів у зоні високих температур [10]. Основні реакції, що регулюють утворення термічного NO, наступні:



Отже, рівняння, що приведені вище, обмежує швидкість реакції через дуже сильний потрійний зв'язок молекули азоту. Оскільки відкрите полум'я  $H_2$  може підніматися до температури понад  $2100\text{ }^\circ\text{C}$ , досягається необхідна енергія активації  $315\text{ кДж/моль}$  і відбувається значне утворення  $NO_x$  [10].

Кінетику системи  $C/H/N$  можна описати за допомогою рівняння Арреніуса, яке показує коефіцієнти швидкості реакцій:

$$k = AT^{\beta} \exp(-E/R_0T),$$

де  $E$  – енергія активації;  $R_0$  – газова постійна;  $T$  – температура, К;  $A$  та  $\beta$  – постійні.

В таблиці 3 показані коефіцієнти для трьох реакцій термічного механізму [11].

Таблиця 3

Коефіцієнти швидкості для термічного механізму  $NO$ 

	Реакція	$A$	$\beta$	$E/R_0$
R1	$N_2+O \rightarrow NO+N$	1.6E +13	0	0
		3.3E+12	0.3	0
		3.8E +13	0	370
R2	$N+O_2 \rightarrow NO+O$	6.4E +09	1	3150
		6.4E +09	1	3160
		1.6E +10	1	4470
R3	$N+OH \rightarrow NO+H$	4.1E +13	0	0
		3.8E+13	0	0
		5.4E +13	0	1720

Таким, чином, наприклад, для термічного виходу  $NO$  можна застосувати наступне рівняння:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k[O][N_2],$$

де  $[NO]$  – концентрація окислу азоту;

$[O]$  – концентрація атомарного кисню;

$[N_2]$  – концентрація молекул азоту;

$k$  – коефіцієнт швидкості реакції.

EGR є одним із ефективних методів зниження рівня  $NO_x$  в ДВЗ автомобільного транспорту. Система EGR (Exhaust Gas Recirculation) – це технологія рециркуляції відпрацьованих газів, яка повертає частину вихлопних газів у впускний колектор. Це знижує температуру згоряння, суттєво зменшує викиди шкідливих оксидів азоту. Традиційний EGR не підходить для водневого двигуна внутрішнього згоряння. Тому важливо вивчати вплив гарячого EGR на згоряння водню в ДВЗ [8]. Для оптимізації діаметра та розташування гарячого EGR (hot EGR) в роботі [8] використовувався водневий ДВЗ об'ємом  $2,0\text{ л}$  із системою гарячого EGR. Дослідження показало, що і температура горіння, і  $NO_x$  зростають зі збільшенням EGR через підвищення температури впуску при низькому навантаженні.

Використання EGR показує різке зниження  $NO_x$ . При обох значеннях CR,  $NO_x$  різко падає від  $0\%$  до  $5\%$  EGR, зі зменшенням понад  $10\%$ . Наприклад, при  $T_{in} = 400\text{ К}$ ,  $CR = 20$ ,  $NO_x$  падає з  $\sim 430\text{ ppm}$  (без EGR) до  $\sim 65\text{ ppm}$  ( $5\%$  EGR) і до  $\sim 15\text{ ppm}$  ( $10\%$  EGR). В таблиці 4 показано порівняння викидів  $NO_x$  за різних режимів роботи водневого двигуна. Дані таблиці 4 отримані на основі моделювання, що виконано в [7].

Таблиця 4

Порівняння викидів  $NO_x$  за різних режимів

N	$T_{in}$ (К)	CR	EGR (%)	Потужність (КВт)	ККД (%)	$NO_x$ (ppm)	$H_2$
1	400	28	5	20,04	55,7	48	0,07
2	400	28	10	18,11	57,24	10	0,11
3	400	28	15	16,13	58,95	2	0,15
4	450	28	5	18,64	57,25	21	0,1
5	450	28	10	16,82	58,2	4	0,14
6	400	24	5	19,35	53,79	55	0,07
7	400	24	10	17,41	55,94	12	0,11

На рисунку 2 показана залежність викидів оксиду азоту від EGR за різних температур та  $CR = 20$ . Для аналізу були використані результати моделювання, що отримані в роботі [7].

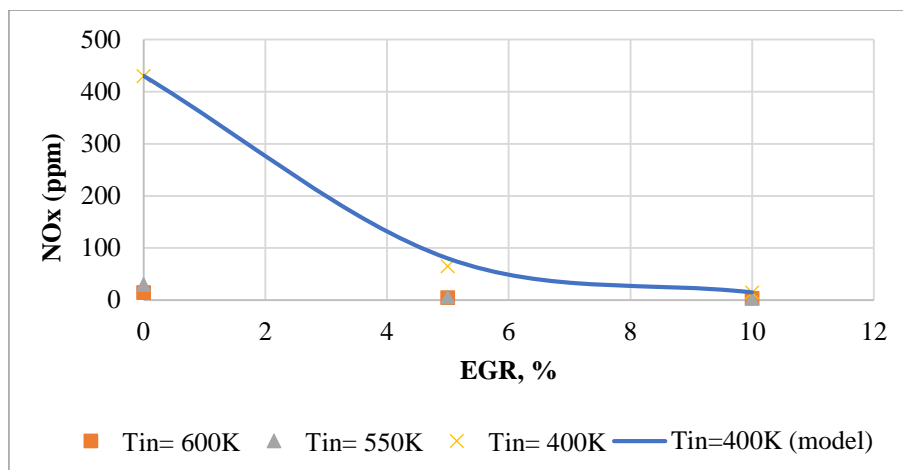


Рис. 2. Залежність викидів оксиду азоту від EGR за різних температур ( $CR = 20$ )

Залежність оксидів азоту від EGR для різних температур має експоненціальну залежність від відсотку EGR. Одна із таких кривих для температури  $T_{in} = 400K$  показана на рисунку 2.

Викиди  $NO_x$  (ppm) можна знайти в залежності від EGR і температури наступним чином:

$$NO_{x,EGR} = N_{x,0} \exp(-n_{T,EGR} \cdot EGR),$$

де  $N_{x,0}$  – значення оксидів азоту за  $EGR = 0$  (ppm);

$n_{T,EGR}$  – коефіцієнт, що залежить від температури;

$EGR$  – рециркуляція відпрацьованих газів, %.

Були знайдені наступні значення коефіцієнтів  $n_{T,EGR}$  ( $CR = 20$ ) в залежності від температури: 0,336 ( $T_{in} = 400K$ ); 0,259 ( $T_{in} = 500K$ ); 0,2 ( $T_{in} = 550K$ ) та 0,132 ( $T_{in} = 600K$ ).

Відмітимо, що в нашій роботі [11] була проаналізована температура полум'я, а також отримані кореляції для  $NO_x$  при використанні біодизельного палива як для стаціонарного двигуна, так і для автомобільного двигуна. Викиди оксидів азоту при використанні водню в ДВЗ автомобільного транспорту вивчені ще не в достатній мірі. В моделях, що описані в роботі [11], як вхідний параметр використовується температура полум'я палива, яка ще недостатньо вивчено, коли паливом є водень. В [5] відмічено, що згоряння водню в ДВЗ супроводжується дуже високими швидкостями розповсюдження полум'я, які приблизно в десять раз більші за швидкість вуглеводнів, і надзвичайно широким меж легкозаймистості – від 3 до 95 відсотків у повітрі [5]. Отже, вивчення особливостей розповсюдження полум'я в ДВЗ автомобільного транспорту для водню може бути темою наступних досліджень.

#### Висновки.

1. Водень має фізико-хімічні та термодинамічні характеристики, які дуже відрізняються від традиційних вуглеводнів.

2. Водневі автомобілі з паливними комірками викидають тільки воду у випадку використання низькотемпературних паливних комірок; згоряння водню в ДВЗ приводить до викидів оксидів азоту.

3. Викиди оксидів азоту при використанні водню в ДВЗ залежать від вхідної температури, ступеню стиску та EGR.

4. Хоча EGR сильно знижує  $NO_x$  це призводить до суттєвих втрат енергії, особливо при підвищеній температурі. Оптимальна зона знаходиться при помірному EGR (5–10 %), де  $NO_x$  ефективно знижується, але це відбувається при втраті потужності.

5. Було виявлено, що викиди оксидів азоту при роботі ДВЗ на водні за різних температур мають експоненціальну залежність від відсотку EGR.

#### References:

1. Kolodnytska, R.V. and Shumliakivskyi, V.P. (2023), «Avtomobili na vodnevnykh palyvnykh komirkakh: suchasnyi stan i perspektyvy», *Tekhnichna inzheneriia*, No. 2 (92), pp. 9–15, [Online], available at: <http://ten.ztu.edu.ua/issue/view/17300>
2. Barış, O. (2024), «Prediction of NOX emissions for hydrogen combustion engines using thermodynamical model in steady and transient conditions», *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 110, pp. 138–143, doi: 10.1016/j.ijhydene.2025.02.113.

3. Ni, S., Cho, T.Y. and Hochgreb, S. (2025), «Effect of liquid droplets on premixed laminar acetone flames», *Applications in Energy and Combustion Science*, Vol. 23, doi: 10.1016/j.jaecs.2025.100354.
4. Mohd Yasin, M.F., Cant, R.S., Chong, C.T. and Hochgreb, S. (2014), «Discrete multicomponent model for biodiesel spray combustion simulation», *Fuel*, Vol. 126, pp. 44–54, [Online], available at: <https://app.dimensions.ai/details/grant/grant.13027985>
5. Dam, Q.T., Haidar, F., Mama, N. and Chennapalli, S.J. (2024), «Modeling and Simulation of an Internal Combustion Engine Using Hydrogen: A MATLAB Implementation Approach», *Eng. Perspect.*, Vol. 4, pp. 108–118.
6. Abbass, A. (2026), «Numerical Transition from Diesel to Hydrogen in Compression Ignition Engines: Kinetics, Emissions, and Optimization with Exhaust Gas Recirculation», *Fuels*, Vol. 7, 9 p.
7. Yao, H., Sun, B., Tian, H. et al. (2014), «A Study of Hydrogen Internal Combustion Engine EGR System», *SAE Technical Paper*, Vol. 1, doi: 10.4271/2014-01-1071.
8. Fumeu, B., Buetler, T. and Vogt, U.F. (2018), «Ultra-low NOx emissions from catalytic hydrogen combustion», *Applied Energy*, Vol. 213, pp. 334–342, doi: 10.1016/j.apenergy.2018.01.042.
9. Kolodnytska, R., Kravchenko, O., Gerlici, J. and Kravchenko, K. (2022), «The Effects of Biodiesel on NOx Emissions for Automotive Transport», *Communications, Scientific Letters of the University of Zilina*, Vol. 24 (1), pp. B59–B66, doi: 10.26552/com. C.2022.1.B59-B66.

**Колодницька** Руслана Віталіївна – кандидат технічних наук, доцент Державного університету «Житомирська політехніка».

<https://orcid.org/0000-0002-6943-3731>.

Наукові інтереси:

- альтернативні палива для автомобільного транспорту, включаючи водень;
- автомобілі з паливними комірками на водні;
- транспортні технології;
- композитні матеріали на основі натуральних волокон.

E-mail: [ruslanakolod2017@gmail.com](mailto:ruslanakolod2017@gmail.com).

#### **Kolodnytska R.V.**

##### **Modeling of hydrogen combustion in internal combustion engines of road transport**

Harmful emissions from road transport consuming fossil fuels encourage humanity to use alternative fuels. Ukraine is seen as a promising producer of «green hydrogen», i.e. hydrogen, which is produced from water by electrolysis and uses electricity from renewable sources for this.

Hydrogen, as an energy source for road transport, can be used in different ways: for cars with internal combustion engines, for which hydrogen is a motor fuel; for vehicles with fuel cells that convert hydrogen chemical energy directly into electricity and heat. Since hydrogen fuel cells operate at around 80 °C in modern cars, the only by-products are water vapor and heat.

Compression-ignition engines have limitations on hydrogen fuel. The compression temperature in these engines is not high enough to start hydrogen combustion. There are several challenges in the implementation of hydrogen engines, in particular NOx emissions, which depend on operating conditions. EGR is one of the effective methods of lowering NOx levels. Traditional EGR is not suitable for hydrogen internal combustion engines. Therefore, it is important to study the effect of hot EGR on hydrogen combustion in internal combustion engines.

To do this, the physical properties of hydrogen, including its heat capacity and enthalpy, were analyzed. Hydrogen has significant differences compared to common hydrocarbons: high levels of energy release per unit mass, very high diffusion, and high reactivity.

The equations of mass conservation, energy conservation and conservation of constituent parts used to simulate hydrogen combustion in internal combustion engines in the Cantera software environment were analyzed.

Modeling of nitrogen oxide emissions depending on EGR and compression ratio was performed. It was found that nitrogen oxide emissions during the operation of internal combustion engines on hydrogen at different temperatures have an exponential dependence on the percentage of EGR. Although EGR greatly reduces NOx, it leads to significant energy losses, especially at elevated temperatures. The optimal zone is at moderate EGR (5–10 %), where NOx is effectively reduced, but this occurs when power is lost.

**Keywords:** alternative fuel; hydrogen; fuel combustion; modelling; internal combustion engine; road transport.

Стаття надійшла до редакції 24.12.2025.