

УДК 537.523:538.4

А.А. ТРОПИНА, В.Ш. АВЕДЯН

*Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина***ВОСПЛАМЕНЕНИЕ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ:
НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЭФФЕКТЫ**

Приведены результаты численного моделирования воспламенения топливно-воздушной смеси комбинированными разрядами. Модель основывается на одномерных уравнениях переноса для компонент смеси и на уравнениях для колебательной и поступательной температуры газа. Было показано, что время задержки воспламенения существенно зависит от параметра неравновесности, определяемого как разность температур в конце микроволнового импульса, и выходит на режим насыщения при высоких значениях напряженности поля микроволнового разряда и высоком уровне начальной ионизации смеси, созданной лазерным импульсом.

Ключевые слова: *параметр колебательной неравновесности, комбинированные разряды, микроволновой разряд, колебательная температура, время задержки воспламенения.*

Введение

Время задержки воспламенения для большинства углеводородных топлив при атмосферном давлении и умеренных температурах изменяется в миллисекундном диапазоне, что практически неприемлемо для гиперзвуковых летательных аппаратов, работающих на высоких числах Маха, поскольку это приводит к значительному увеличению самой области воспламенения. Поэтому любые попытки уменьшить время задержки воспламенения и увеличить скорость распространения пламени представляют большой практический интерес для аэрокосмических приложений. В последние десятилетия контроль процесса сгорания топлива с помощью различного вида разрядов становится актуальной темой научных исследований во всем мире, в основном, за счет более эффективного использования топлива и снижения загрязнения окружающей среды путем организации горения обедненных смесей. Так, в частности в работе [1], в качестве источника воспламенения рассматривается наносекундный импульсный разряд, реализуемый в виде быстрой волны ионизации, что позволяет сократить время задержки воспламенения и увеличить скорость распространения пламени за счет образования активных радикалов. Лазерный разряд рассматривается как надежный источник воспламенения в качестве альтернативы традиционному искровому разряду и применяется как в двигателях внутреннего сгорания [2], так и для воспламенения в сверхзвуковом потоке. Основным достоинством лазерного разряда является возможность организации многоточечного зажигания, что в свою очередь, повышает давление

сгорания, сокращает время сгорания и время задержки воспламенения, значительно уменьшая при этом длину зоны индукции. Основными недостатками лазерного зажигания являются сложность оборудования для получения разряда, а также потери энергии, связанные с формированием сильной ударной волны. Как было показано в работе [3], применение микроволнового разряда в качестве источника зажигания может привести к повышению скорости распространения пламени до 20% при эквивалентном соотношении смеси порядка 0,5-0,7. Альтернативный способ комбинированного зажигания включает в себя как способность лазерного импульса, ионизировать смесь, так и способность микроволнового импульса нагревать смесь. Как было показано в работе [4], быстрый нагрев газа и воспламенение метано-воздушной смеси может быть достигнуто с помощью фемтосекундного лазерного импульса небольшой интенсивности, обеспечивающего сильную ионизацию при незначительном нагреве, и последующего более мощного микроволнового импульса, обеспечивающего контролируемый нагрев смеси.

2. Цель и постановка задачи

При попытке объяснить физический механизм воспламенения комбинированными лазерным и микроволновыми разрядами возникают два важных вопроса, требующих ответа. Какой уровень ионизации смеси и уровень мощности микроволнового импульса позволяет воспламенить обедненную топливно-воздушную смесь с временем задержки воспламенения в микросекунды, и какова роль ионов и

возбужденных молекул в этом процессе? И наконец, как влияют на процесс воспламенения неравновесные плазменные эффекты, т.е. какой уровень колебательной неравновесности может быть создан микроволновым разрядом и как это влияет на процесс воспламенения? Данная работа посвящена ответу на эти два вопроса.

При этом для моделирования процесса воспламенения топливно-воздушной смеси комбинированными лазерным и микроволновым разрядами, использовалась следующая двухступенчатая процедура. На первом этапе, все константы скоростей реакций, связанных с электронным ударом, такие как ионизация, диссоциация и реакции электронного и колебательного возбуждения были рассчитаны с использованием авторского программного кода S-PLASIG [5]. На втором этапе, эволюция микроволнового разряда описывалась в приближении однородности плазмы вдоль осевой координаты.

Модель включает в себя уравнения для поступательной и колебательной температуры газа и уравнения для концентраций всех компонент смеси. Кинетическая модель включает в себя реакции между нейтральными и возбужденными частицами, ионами и электронами, а также реакции, вызванные электронным ударом. Для топливно-воздушной плазмы модель включает в себя систему уравнений для нейтральных компонент, число которых зависит от выбора механизма горения углеводородов, а именно - 53 нейтральные компоненты для механизма GRI 3.0 и 87 нейтральных компонент для механизма C2. В модель также входят уравнения для положительных и отрицательных ионов, электронов, электронно-возбужденных компонент и уравнение переноса колебательно-возбужденных молекул азота в основном электронном состоянии $N_2(x^1\Sigma, v)$. Полный перечень всех реакций и компонент, входящих в кинетическую модель плазмы представлен в работе [6].

Уравнение для колебательной энергии возбужденных молекул азота было взято в виде

$$\frac{d\varepsilon_v}{dt} = \alpha_v Q_E - \frac{\varepsilon_v - \varepsilon_0(T)}{\tau_{VT}}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_0(T)$ - равновесная колебательная энергия,

α_v - часть энергии электромагнитного поля, переданная в колебательные степени свободы,

Q_E - полная энергия электромагнитного поля.

Для равновесной и неравновесной колебательной энергии использовалась формула Планка вида

$$\varepsilon_0(T) = N \frac{hw_0}{\exp(hw_0/T) - 1},$$

$$\varepsilon_v(T_v) = N \frac{hw_0}{\exp(hw_0/T_v) - 1},$$

где $hw_0 = 0,28$ эВ - энергия первого колебательного уровня молекул азота.

Для времени колебательно-поступательной релаксации использовалась следующая формула, включающая в себя коррекцию этого времени в зависимости от концентрации атомов кислорода [7]:

$$\frac{1}{\tau_{VT}} = \left[7,0 \cdot 10^{-10} N \cdot \exp\left(-\frac{141}{T^{1/3}}\right) + \alpha_o \cdot 5,0 \cdot 10^{-12} \cdot N \cdot \exp\left(-128 \cdot T^{-1/2}\right) \right],$$

где N - плотность смеси,

α_o - мольная доля атомарного кислорода.

Теплоемкость смеси рассчитывалась по следующей формуле с учетом колебательной неравновесности

$$C_p = C_p^* - \frac{N_{N_2}}{\rho} \frac{d\varepsilon_v}{dT},$$

где N_{N_2} - мольная доля азота.

Часть энергии электромагнитного поля, переданная в колебательные степени свободы молекул азота, рассчитывалась как функция приведенного электрического поля путем интерполяции данных, представленных в работе [8] с учетом процентного содержания азота в смеси. Влияние колебательного возбуждения на скорость реакций с участием электронов была учтена путем умножения соответствующих констант скоростей реакции на коэффициент усиления $k_v = 10^{Cz/\theta^2}$, как в [9], где $C = 28,3$, $\theta = E/N$ в 10^{-16} В · см².

Профиль электрического поля микроволнового импульса была выбран прямоугольным с максимальным значением напряженности электрического поля $E_{max} = \beta \cdot E_b$, где $\beta < 1$ - параметр задачи, а $E_b = 120$ Td (напряженность пробоя при атмосферном давлении). Время ввода микроволновой энергии на этом этапе моделировалось параметром t_m .

Вопрос о начальных условиях для микроволнового разряда после действия фемтосекундного лазерного импульса остается открытым. Единственное, что достоверно известно, что концентрация отрицательных ионов, образовавшихся после лазерного импульса, очень низкая и ими можно пренебречь. Учитывая то, что потенциал ионизации молекулы кислорода $U_i = 12,1$ эВ, а молекулы метана $U_i = 12,98$ эВ, то эти молекулы легче ионизируются по сравнению с молекулами азота с потенциалом ионизации $U_i = 15,6$ эВ. В обзоре [10], посвященно-

му ультракоротким лазерным импульсам, авторы утверждают, что при интенсивности лазерного филамента порядка 5×10^{13} Вт/см², плотность электронов в воздухе достигает величин порядка 10^{16} - 10^{17} см⁻³. Таким образом, можно оценить уровень ионизации смеси после фемтосекундного лазерного импульса как величину порядка 10^{-2} - 10^{-3} .

Учитывая то, что в обедненной метано-воздушной смеси содержание метана достаточно низкое, и пренебрегая образованием двухзарядных ионов из-за короткой длительности лазерного импульса, можно предположить, что основными положительными ионами, образующимися после фемтосекундного лазерного импульса, могут быть ионы O_2^+ и N_2^+ .

3. Результаты расчетов

Рассматривался случай воспламенения обедненной метано-воздушной смеси ($\phi = 0,3 - 0,8$ - эквивалентное соотношение смеси). Начальный уровень ионизации смеси для микроволнового импульса длительностью $t_{MW} = 0,5 \div 2 \mu\text{s}$, был выбран уровень ионизации 10^{-3} .

Момент воспламенения определялся по максимуму на кривой зависимости скорости тепловыделения от времени после воздействия микроволнового разряда. Этот максимум очень близок к максимумам на кривых зависимостей концентраций НСО, СН и ОН от времени после разряда действия (в пределах 2-3%). Все эти величины были использованы в качестве индикатора момента воспламенения топливно-воздушной смеси.

Расчетные зависимости поступательной и колебательной температур, в зависимости от напряженности электрического поля микроволнового разряда, представлены на рис. 1,2 для обедненной метано-воздушной смеси с эквивалентным соотношением $\phi = 0,8$ и временем ввода микроволновой

энергии $t_{MW} = 2 \mu\text{s}$. Можно отметить, что при уровне ионизации смеси $\alpha = 10^{-3}$ для всех значений напряженности микроволнового импульса, за исключением очень высоких значений $E_{MW} \geq 0,7 \cdot E_b$, наблюдается высокий уровень колебательно-поступательной неравновесности. В качестве основного показателя неравновесности вводился безразмерный параметр $\xi = \frac{T_v - T}{T}$, характеризующий отношение температур в конце микроволнового импульса.

Было получено, что, в зависимости от параметра ξ , вычисленные значения колебательной температуры в два раза (при $\xi \sim 1$) или в три раза (при $\xi \sim 2$) превышают значения поступательной температуры при эквивалентном соотношении смеси, меняющемся в диапазоне $\phi = 0,3 - 0,8$. Эта тенденция, сохраняющаяся при различных эквивалентных соотношениях смеси, является следствием распределения входной мощности микроволнового разряда, когда большая часть энергии поля тратится на колебательное возбуждение молекул азота.

Было получено, что для всех случаев успешного воспламенения метано-воздушной смеси время задержки воспламенения изменяется в микросекундном диапазоне, если параметр колебательной неравновесности $\xi \sim 1,1$, а при увеличении параметра до $\xi \sim 2$ время задержки воспламенения начинает расти до нескольких десятков микросекунд. Этот вывод иллюстрируется данными, представленными на рис.3, где показана зависимость времени задержки воспламенения от эквивалентного соотношения смеси для случая воспламенения метано-воздушной смеси с начальным уровнем ионизации $\alpha = 10^{-3}$ и временем ввода микроволновой энергии $t_{MW} = 2 \mu\text{s}$.

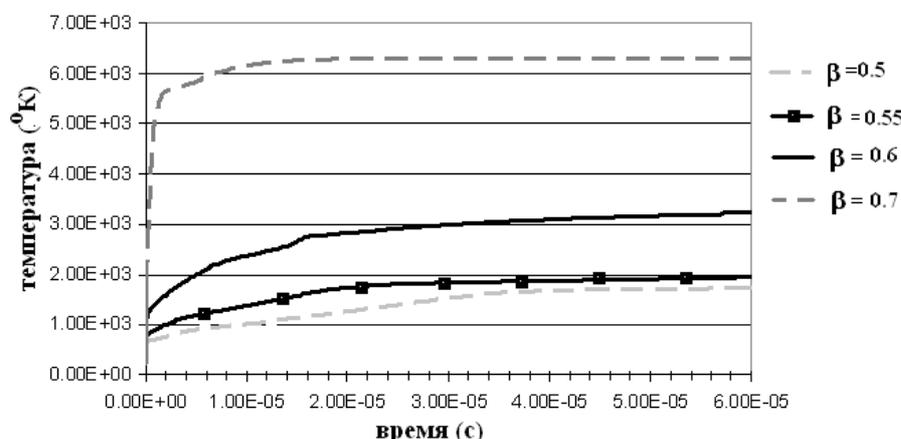


Рис. 1. Зависимость поступательной температуры от времени (начальный уровень ионизации $\alpha = 10^{-3}$)

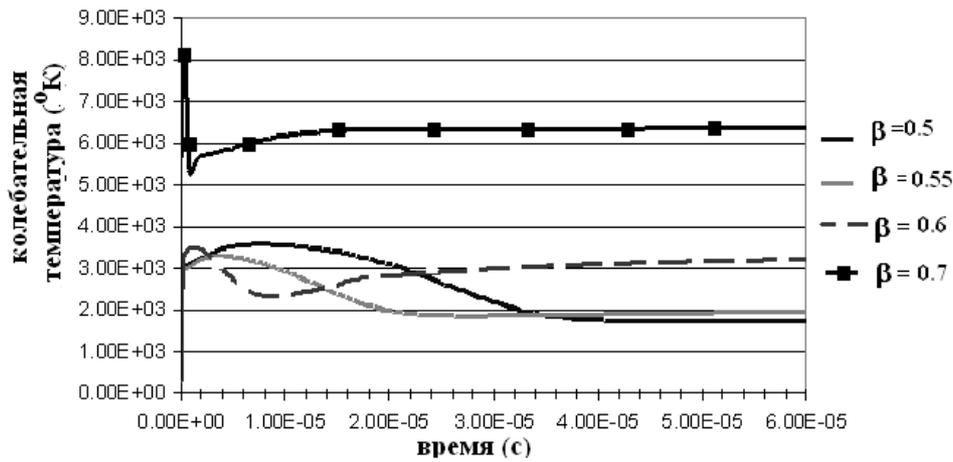


Рис. 2. Зависимость колебательной температуры от времени

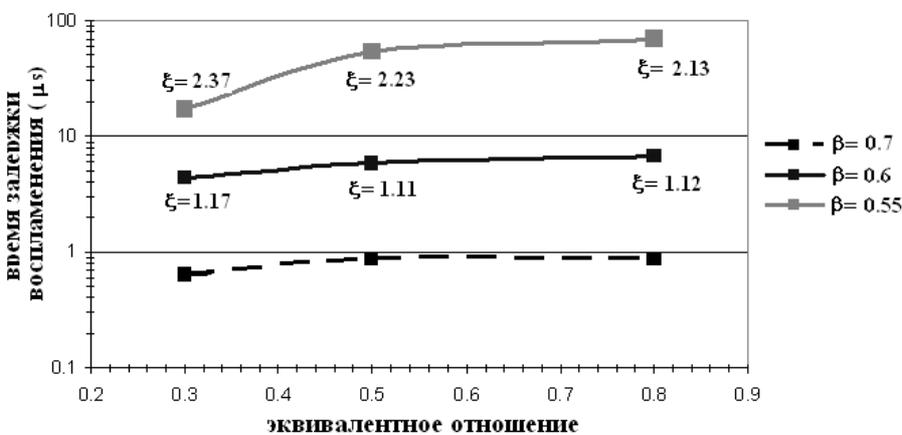


Рис. 3. Время задержки воспламенения в зависимости от эквивалентного соотношения смеси

Приведенные расчетные данные хорошо совпадают с экспериментальными данными об изменении времени задержки воспламенения в пределах $5 \mu s \leq t < 50 \mu s$, приведенными в работе [4].

Можно отметить, что численные расчеты показали, что воспламенение с помощью комбинированных разрядов может произойти даже при очень низком эквивалентном соотношении метано-воздушной смеси $\phi = 0,3$, если интенсивность напряженности микроволнового поля превышает значение $E_{MVW} > 0,5 \cdot E_b$, и начальный уровень ионизации смеси, созданный фемтосекундным лазером, составляет величину порядка $\alpha \geq 10^{-3}$. Следует отметить также, что влияние колебательного возбуждения и степени колебательной неравновесности на значения констант скоростей реакций, вызванных электронным ударом, незначительно, так как коэффициент усиления $k_V \sim 1$ в условиях рассматриваемой задачи.

Результаты расчетов показали, что при больших значениях напряженности поля микроволново-

го разряда (параметр $\beta = 0,7$), колебательно-поступательная релаксация происходит очень быстро, в течение одного микроволнового импульса, как следствие, параметр $\xi = 0$, а расчетные значения времени задержки воспламенения ниже, чем микросекунды. Было получено, что роль микроволнового разряда в процессе воспламенения, для случая воспламенения комбинированными разрядами, заключается не только в нагреве смеси до температуры самовоспламенения, а также в получении достаточного количества активных радикалов и центров, образующихся в ходе реакций, связанных с электронным ударом.

Предлагается следующий сценарий воспламенения комбинированными разрядами. На первом этапе атомы кислорода образуются в результате реакций, связанных с электронным ударом, таких как $O_2 + e^- \rightarrow 2O + e^-$ и $O_2^+ + e^- \rightarrow 2O$, затем основной канал производства атомов кислорода меняется на известный двухступенчатый механизм с участием электронно-возбужденных молекул азота

$N_2(B^3\Pi)$, $N_2(C^3\Pi)$. Это дает максимальную мольную долю кислорода около $n_o = 10^{-2} \div 10^{-3}$ для начального уровня ионизации смеси $\alpha = 10^{-4} \div 10^{-3}$. В тоже время скорость производства атомов кислорода существенно зависит от начального уровня ионизации α , создаваемого лазерным импульсом, а при низких значениях α ($\alpha = 10^{-5}$) воспламенение смеси не происходит даже при очень высоких значениях напряженности микроволнового поля.

При напряженности микроволнового импульса до 50% от напряженности пробоя ($\beta = 0,5$) воспламенение смеси достигается только для случая метано-воздушной смеси с эквивалентным соотношением $\phi = 0,8$. Для $\phi = 0,5$ и $\phi = 0,3$ при том же значении $\beta = 0,5$ максимальная поступательная температура смеси не превышает 500 °К и воспламенение смеси не происходит. Подобная же ситуация реализуется для всех случаев воспламенения обедненных смесей при $\beta < 0,5$. В тоже время увеличение продолжительности микроволнового импульса выше определенного значения не приводит к автоматическому уменьшению времени задержки воспламенения. Так, на рис. 4 представлена зависимость рассчитанных значений времени задержки воспламенения от длительности микроволнового импульса t_{MW} для случая обедненных этилено-воздушных и метано-воздушных смесей с эквивалентным соотношением $\phi = 0,5$. Анализ кривых показывает, что в этом случае мы имеем дело с так называемым эффектом насыщения, аналогичным такому же эффекту для случая искрового воспламенения.

Выводы

Приведены результаты кинетического моделирования воспламенения комбинированными лазерным и микроволновым разрядами. Получена зависимость времени задержки воспламенения от уровня колебательной неравновесности, создаваемой микроволновым разрядом. Рассчитанные значения времени задержки воспламенения для рассматриваемой задачи варьируются в микросекундном интервале, что хорошо коррелирует с имеющимися экспериментальными данными.

Литература

1. *Plasma assisted combustion [Text] / A.Yu. Starikovskii, N.B. Anilin, I.N. Kosarev, E.I. Mintousov, S.M. Starikovskaia, V.P. Zhukov // Pure and Applied Chemistry. – 2006. – Vol. 78. – P. 1265–1298.*
2. *Kroupa, G. Novel miniaturized high-energy Nd-YAG laser for spark ignition in internal combustion engines [Text] / G. Kroupa, G. Franz, E. Winkelhofer // Optical Engineering. – 2009. – Vol. 48. – P. 014202-014219.*
3. *Microwave-assisted hydrocarbon flame speed enhancement [Text] / S.H. Zaidi, S.O. Macheret, Y. Ju, R.B. Miles // Paper AIAA-2005-992, 43th AIAA Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, 06-09 January 2005, Reno, Nevada.*
4. *Subcritical microwave coupling to femtosecond and picosecond laser ionization for localized, multipoint ignition of methane/air mixtures. [Text] / J.B. Michael, A. Dogariu, M.N. Schneider, R.B. Miles // Journal of Applied Physics. – 2010. – Vol. 108. – P. 093308(10).*
5. *Тропина, А.А. Механизмы воспламенения импульсным наносекундным разрядом [Текст] / А.А. Тропина // Авиационно-космическая техника и технология. – 2010. – № 5(72). – С. 64-70.*

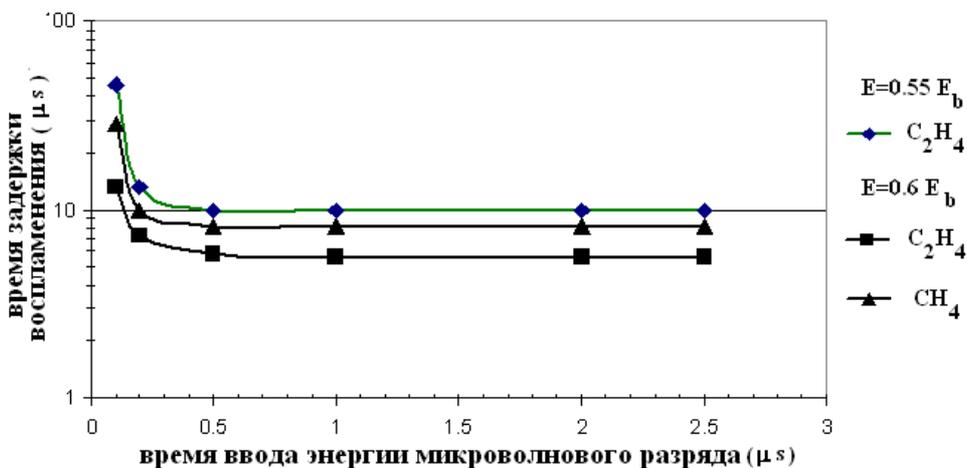


Рис. 4. Время задержки воспламенения в зависимости от времени микроволнового импульса

6. Tropina, A.A. On the effect of nonequilibrium plasma on the minimum ignition energy-Part 1: Discharge model [Text] / A.A. Tropina, M. Uddi, Y. Ju // IEEE Trans. on Plasma Science. – 2011. – Vol. 39, Issue 1. – P. 615-623.

7. Macheret, S.O. Magneto hydrodynamic control of hypersonic flows and scramjet inlets using beam ionization [Text]/S.O. Macheret, M.N. Shneider, R.B. Miles// AIAA journal. – 2002. – Vol. 40. – P. 74-81.

8. Electron distribution function in 4:1 N₂-O₂ mixture [Text] / N.L. Aleksandrov, F.I. Vysikailo, R.Sh. Islamov, I.V. Kochetov, A.P. Napartovich,

V.G. Pevgov// High Temperature. – 1981. – Vol. 19(1). – P. 17-21.

9. Son, E.E. Effect of vibrational temperature on the rate of electric excitation of diatomic molecules [Text] / E.E. Son // High Temperature. – 1978. – Vol. 16. – P. 1162-1166.

10. Ultrashort filaments of light in weakly ionized, optically transparent media [Text] / L. Berge, S. Skupin, R. Nuter, J. Kasparian, J.P. Wolf // Reports on Progress in Physics. – 2007. – Vol. 70. – P. 1633-1713.

Поступила в редакцию 5.06.2013, рассмотрена на редколлегии 12.06.2013

Рецензент: д-р техн. наук, проф., зав. каф. физики Ю.В. Батыгин, Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков.

IGNITION OF HYDROCARBONS FUELS: NONEQUILIBRIUM EFFECTS

A.A. Tropina, V.Sh. Avedyan

The results of numerical simulation of the fuel-air mixture ignition by combined discharges have been presented. The model is based on one-dimensional transport equations for the components of the mixture and on the equations for the vibrational and translational temperatures of the gas. It has been shown that the ignition delay time depends essentially on the nonequilibrium parameter, defined as the temperature difference at the end of the microwave pulse, and it reaches a saturation point at high values of the electric field strength of the microwave discharge and at a high level of the initial ionization of the mixture, created by a laser pulse.

Key words: vibrational mode parameter, combined discharges, microwave discharge, vibrational temperature, ignition delay time.

ЗАПАЛЮВАННЯ ВУГЛЕВОДНИХ ПАЛИВ: НЕРІВНОВАЖНІ ЕФЕКТИ

A.A. Тропіна, В.Ш. Аведян

Наведено результати чисельного моделювання запалювання паливно-повітряної суміші комбінованими розрядами. Модель ґрунтується на одновимірних рівняннях переносу для компонент суміші і на рівняннях для коливальної та поступальної температури газу. Було показано, що час затримки запалювання істотно залежить від параметра нерівноважності, що визначається як різниця температур в кінці мікрохвильового імпульсу, і виходить на режим насичення при високих значеннях напруженості поля мікрохвильового розряду і високому рівні початкової іонізації суміші, яку створює лазерний імпульс.

Ключові слова : параметр коливальної нерівноважності, комбіновані розряди, мікрохвильовий розряд, коливальна температура, час затримки запалювання.

Тропіна Альбіна Альбертовна – д-р техн. наук, доцент, зав. кафедрой прикладной математики, Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, г. Харьков, Украина, e-mail: albina.tropina@fulbrightmail.org.

Аведян Валерий Шаликович – науч. сотр. кафедры прикладной математики, Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, г. Харьков, Украина, e-mail: v.avedyan@mail.ru.