

УДК 537.523:538.4

А.А. ТРОПИНА

*Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина***ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЛАЗМЕННОГО КАНАЛА, ФОРМИРУЕМОГО НАНОСЕКУНДНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ РАЗРЯДОМ**

Приведены результаты численного моделирования свойств плазменного канала, формируемого наносекундным импульсным разрядом. Модель основывается на численном решении уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям и уравнений переноса для заряженных и нейтральных компонент топливно-воздушной смеси. Проведено тестирование модели путем сравнения расчетных результатов с экспериментальными данными. Используя расчетную функцию распределения электронов по энергиям, рассчитаны константы скоростей реакций с участием электронов, как функции приведенного электрического поля разряда для различного состава смеси. Определена зависимость времени задержки воспламенения от приведенного электрического поля разряда.

Ключевые слова: наносекундный импульсный разряд, химическая кинетика, уравнение Больцмана, численное моделирование

Введение

Исследование различного рода разрядов и их свойств является достаточно актуальной задачей в связи с возможностями их применения в различных областях науки и техники. Контроль процесса горения и управление потоком, генерация акустических волн являются одними из широко распространенных аэрокосмических приложений различных разрядов, формирующих равновесную или неравновесную плазму. Наносекундный импульсный разряд является одним из лидеров в различных аэрокосмических приложениях, обеспечивая, в частности, возможность воспламенения топливно-воздушной смеси в сверхзвуковых течениях и управление потоком на сверхкритических режимах. В большинстве работ, посвященных исследованию плазменно-стимулированного горения, авторы ограничиваются рассмотрением процесса горения смесей стехиометрического и обедненного состава. Зачастую, при этом, для топливно-воздушной смеси используются полуэмпирические соотношения для констант скоростей реакций с участием электронов, полученные для плазмы воздуха. В настоящей работе отмечается, что подобный подход приводит к большой погрешности при рассмотрении процесса воспламенения однородной обогащенной смеси или в областях, обогащенных топливом, при горении неоднородной смеси. На основе полученной, в результате численного решения уравнения Больцмана, функции распределения электронов по энергиям в работе приводятся данные расчета констант реакций, как функции приведенного электрического поля разряда для

различного состава и давления смеси и определяется зависимость времени задержки воспламенения от приведенного электрического поля разряда.

1. Анализ последних публикаций

Существует целый ряд аэрокосмических приложений, где использование неравновесной плазмы разряда наносекундного или микроволнового диапазона является более предпочтительным по сравнению с искровым разрядом. Недавние работы в этом направлении [1,2] продемонстрировали возможность поджига топливно-воздушной смеси, а также возможность контроля процесса горения в сверхзвуковых течениях с помощью неравновесной плазмы за счет стабилизации фронта пламени и увеличения скорости распространения пламени. Одним из основных лидеров в технологиях процессов горения, стимулированных плазмой, по праву считается импульсный наносекундный разряд [3,4].

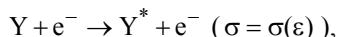
Анализ последних работ, посвященных кинетическим аспектам процесса горения и воспламенения неравновесной плазмой, приведен в обзоре [5]. Экспериментальные данные о времени задержки воспламенения для случая воспламенения импульсным наносекундным разрядом приведены в работе [6]. Несмотря на огромное количество публикаций в этой области (в основном, экспериментального характера) до сих пор остается неисследованным целый ряд закономерностей процесса воспламенения топливно-воздушных смесей неравновесной плазмой импульсного наносекундного разряда при высоких давлениях. Сложности экспериментальных

измерений в таких условиях приводят к тому, что основным источником получения информации становится математическое моделирование. При этом математическая модель такого воспламенения должна учитывать, как детальную химическую кинетику с участием нейтральных частиц, что существенно для высоких давлений, так и кинетические процессы с участием заряженных, электронно- и колебательно возбужденных компонент, которые зависят от функции распределения электронов по энергиям и определяются из решения уравнения Больцмана.

2. Цель и постановка задачи

Целью исследования является построение математической модели плазменного канала, формируемого импульсным наносекундным разрядом, определение констант скоростей реакций с участием электронов для различного состава смеси и определение влияния формирующейся неравновесной плазмы на время задержки воспламенения.

Математическая модель включает в себя уравнение движения, уравнения химической кинетики для заряженных и нейтральных компонент. Кроме того, для определения констант скоростей реакций с участием электронов вида



где Y^* – возбужденный или ионный компонент смеси,

$\sigma(\varepsilon)$ – сечение взаимодействия электрона с молекулой Y ,

ε – энергия электронов.

Дополнительно решалось кинетическое уравнение для экспоненциальной части функции распределения электронов по энергиям $f_0(\varepsilon)$, нормализованной согласно следующему выражению $\int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \cdot f_0(\varepsilon) \cdot d\varepsilon = 1$. При этом использовались экспериментальные значения сечений взаимодействия $\sigma(\varepsilon)$ (процессов электронного и колебательного возбуждения, ионизации электронным ударом, трехчастичного и диссоциативного прилипания) и транспортных сечений упругих столкновений $Q_{Ti}(\varepsilon)$. Константы скоростей реакций определялись по следующей формуле

$$k = \left(\frac{2 \cdot e}{m_e} \right) \int \sigma(\varepsilon) \cdot \varepsilon \cdot f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1)$$

где ε – энергия электронов,

m_e – масса электрона,

e – заряд электрона.

Экспериментальные значения сечений процессов с участием электронов $\sigma(\varepsilon)$ для топливно-воздушной плазмы были взяты из работы [7]. Функция распределения электронов по энергиям f_0 находилась путем решения стационарного уравнения Больцмана вида

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \cdot N \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{q_t(\varepsilon)} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) + \\ & + \sum_i \frac{2m}{M_i} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^2 q_{ti}(\varepsilon) \cdot N \left(f_0 + \frac{kT}{e} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right) + \\ & + N \sum_k \left\{ \sigma_k(\varepsilon + \varepsilon_i) \cdot f_0(\varepsilon + \varepsilon_i) \cdot (\varepsilon + \varepsilon_i) \right\} + \\ & + \sum_i B_i \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\varepsilon \cdot q_{ti}(\varepsilon) \cdot N \cdot \left(f_0 + \frac{kT}{e} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где E – напряженность электрического поля,

N – концентрация нейтральных молекул,

$q_t(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_i q_{ti}(\varepsilon) \cdot n_i$ – эффективное транспортное сечение,

$q_{ti}(\varepsilon)$ – транспортные сечения отдельных компонент смеси,

$\sigma_k(\varepsilon)$ – сечения процессов электронного возбуждения,

ε_i – энергия возбужденного состояния.

Уравнение (2) последовательно включает в себя следующие слагаемые: Джоулев нагрев электронов электрическим полем; слагаемое, учитывающее потери энергии электронов в упругих столкновениях электронов с тяжелыми частицами; слагаемые, учитывающие потери энергии электронов в неупругих столкновениях за счет электронного, вращательного и колебательного возбуждений и ионизации электронным ударом. При этом процесс ионизации электронным ударом тоже трактовался, как процесс электронного возбуждения, т.е. предполагалось, что второй электрон, который рождается в процессе ионизации, не влияет на форму функции распределения электронов по энергиям.

Также предполагалось, что функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) за время наносекундного импульса выходит на квазистационарное состояние и вкладом нестационарного слагаемого в уравнении Больцмана вида

$N \left(\frac{m_e \varepsilon}{2} \right) \frac{\partial}{\partial t} [f_0(\varepsilon)]$ можно пренебречь. Это условие

выполняется, если временной масштаб превышает время между столкновениями электронов с нейтральными молекулами, равное

$$\tau = 1 / (N \cdot \sqrt{k_B T_e / m} \cdot \sigma),$$

где $\sigma \cong 10^{-15}$ – транспортное сечение, $v_e = \sqrt{k_B T_e / m} \cong 10^8 \cdot \text{см} / \text{с}$. При $T = 300 \text{ К}$, $p = 1 \text{ атм}$, $N = 2,44 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ $\tau \cong 10^{-10} \text{ с}$, следовательно, для всех импульсов, длительность которых десятки наносекунд и больше, это условие выполняется.

На основе вычисленной ФРЭЭ определяются константы скоростей реакций согласно выражению (2), дрейфовая скорость электронов V_e и электронная температура T_e :

$$V_e = -\frac{E}{3N} \left(\frac{2e}{m_e} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sum_k Y_k Q_{Tk}} \frac{d}{d\varepsilon} [f(\varepsilon)] d\varepsilon,$$

$$T_e = -\frac{1}{k_B} \left[\frac{\int \frac{\varepsilon}{\sigma(\varepsilon)} [f(\varepsilon)] d\varepsilon}{\int \frac{\varepsilon}{\sigma(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} [f(\varepsilon)] d\varepsilon} \right]. \quad (3)$$

Уравнение (2) представляет собой обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка для f_0 и решается методом итераций, при этом в качестве исходных параметров используются экспериментальные значения сечений и приведенное электрическое поле разряда E/N .

Для решения уравнения Больцмана (2) выбиралась равномерная сетка по энергиям, и уравнение интегрировалось по одному интервалу сетки от ε_k до ε_{k+1} , при этом все интегралы вычислялись с использованием метода трапеций. Полученная система разностных уравнений принимает стандартный вид:

$$a_k f_{k-1}^0 - b_k f_k^0 + c_k f_{k+1}^0 = d_k. \quad (4)$$

Значения коэффициентов a_k, b_k, c_k, d_k приведены в таблице 1. На границах сетки по энергиям, т.е. при $\varepsilon = \varepsilon_1, \varepsilon = \varepsilon_N$, система уравнений замыкается двумя граничными условиями, отражающими отсутствие потока электронов в пространстве энергий вида

$$a_2 \cdot f_1^0 - \left(a_2 + \sum_{i=1}^{i_m} \frac{2m_e}{M_i} \left(\varepsilon_2^2 Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} B_i \left[\varepsilon_2 \cdot Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) \right] \right) \right) \cdot f_2^0 = 0$$

$$\left(a_N + \sum_{i=1}^{i_m} \frac{2m_e}{M_i} \left(\varepsilon_N^2 Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} B_i \left[\varepsilon_N \cdot Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) \right] \right) \right) \cdot f_N^0 - a_N \cdot f_{N-1}^0 = 0.$$

Таблица 1

Коэффициенты a_k, b_k, c_k, d_k в уравнении (4)

Коэф.	Значения коэффициентов
a_k	$\frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon_k \cdot N}{Q_T} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} \frac{2m_e}{M_i} \left(\varepsilon_k^2 Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} B_i \left[\varepsilon_k \cdot Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) \right] \right)$
b_k	$a_k + a_{k+1} + \frac{\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k}{2} \sum_{i=1}^{i_m} \sum_j \left(Q_{i,k}^j \right) \cdot Y_j \cdot \varepsilon_k + \sum_{i=1}^{i_m} \frac{2m_e}{M_i} \left(\varepsilon_k^2 Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} B_i \left[\varepsilon_k \cdot Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) \right] \right)$
c_k	$a_k - \frac{\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k}{2} \sum_{i=1}^{i_m} \sum_j \left(Q_{i,k+1}^j \right) \cdot Y_j \cdot \varepsilon_{k+1} + \sum_{i=1}^{i_m} \frac{2m_e}{M_i} \left(\varepsilon_{k+1}^2 Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) + \sum_{i=1}^{i_m} B_i \left[\varepsilon_{k+1} \cdot Q_{Ti} \cdot N \cdot \left(\frac{kT}{e} \right) \right] \right)$
d_k	$-\frac{\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k}{2} \cdot \left(\sum_{i=1}^{i_m} \sum_j Y_j \cdot \left(Q_{i,k+1+m_i}^j \cdot \varepsilon_{k+1+m_i} \cdot f_{k+1+m_i}^0 + Q_{i,k+m_i}^j \cdot \varepsilon_{k+m_i} \cdot f_{k+m_i}^0 \right) \right)$

В таблице 1 индекс m_i определяется как

$$m_i = (\varepsilon_i - \varepsilon_1) / (\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k) + 1.$$

Разработанный на языке FORTRAN, программный пакет S-PLASIG для расчета процесса воспламенения импульсным наносекундным разрядом включает в себя следующие программные блоки: блок расчета констант скоростей реакций с участием электронов на основе решения уравнения Больцмана (2); блок расчета констант скоростей реакций с

участием нейтральных частиц на основе соотношений Аррениуса, блок расчета термодинамических свойств смеси и программный модуль DLSODE для решения системы дифференциальных уравнений переноса.

3. Результаты расчетов

При моделировании процесса воспламенения импульсным наносекундным разрядом использовались следующие кинетические схемы горения углеводородов: GRI 3.0 механизм, содержащий 53 нейтральные компоненты и 322 реакции, и C2 механизм, содержащий 87 компонент и 435 реакций. Дополнительно учитывалось наличие положительных ионов N_4^+ , N_2^+ , N_2O^+ , NO^+ , O^+ , N^+ , O_4^+ , O_2^+ , N_3^+ , NON_2^+ , $O_2N_2^+$, NO_2^+ , NOO_2^+ , $NONO^+$, отрицательных ионов O_2^- , O^- , NO^- , O_3^- , NO_3^- , O_4^- , NO_2^- , N_2O^- , электронов, возбужденных частиц $O_2(a^1\Delta)$, $O_2(b^1\Sigma)$, $O_2(c^1\Sigma)$, $O(^1D)$, $O(^3P)$, $N_2(A^3\Sigma)$, $N_2(B^3\Pi)$, $N_2(C^3\Pi_u)$, $N(^2D)$, $N(^2P)$, $N(^4S)$, $N_2(a^1\Sigma)$, а также колебательно возбужденных молекул азота в основном электронном состоянии $N_2(x^1\Sigma, v)$. Используемая кинетическая схема приведена в работе [8].

Верификация кинетической схемы приведена в работе [8] и осуществлялась путем сравнения расчетных данных с данными экспериментальных замеров концентраций электронно-возбужденных состояний азота $N_2(C^3\Pi_u)$ и с данными измерений поступательной и колебательной температур для случая воспламенения обедненной метано-воздушной смеси наносекундным импульсным разрядом.

Верификация расчета электрических характеристик разряда, в частности дрейфовой скорости электронов, проводилась путем сравнения расчетных данных при различных значениях приведенного электрического поля разряда с экспериментальными данными, приведенными в работах [9, 10]. Анализ результатов сравнения (рис. 1) позволяет говорить об адекватности приведенной процедуры расчета функции распределения электронов по энергиям и правомочности реализованного программного кода.

Проведем сравнение одних из наиболее значимых для процесса воспламенения неравновесной плазмой реакций: реакций формирования электронно-возбужденных состояний азота электронным ударом, для разряда в обогащенной топливно-воздушной смеси и в воздухе.

Анализ проведем на примере реакций формирования электронно-возбужденных состояний азота $N_2(B^3\Pi)$ для разряда в этилено-воздушной смеси (Рис.2) и на примере реакций формирования состояний азота $N_2(A^3\Sigma)$ в метано-воздушной смеси (рис.3). Данные расчетов приведены для стехиометрического состава смеси (эквивалентное отношение $\Phi = 1$), для обедненной смеси - $\Phi = 0,5$ и для обогащенной смеси - $\Phi = 1,5$; $\Phi = 2,2$.

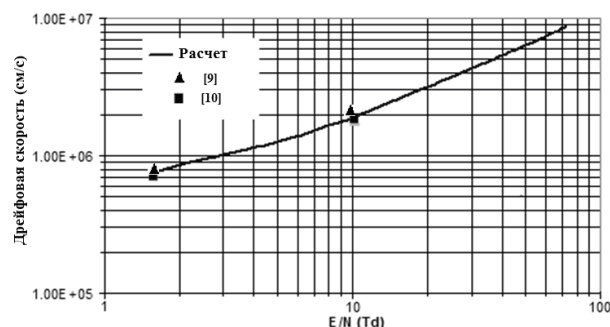


Рис. 1. Сравнение расчетных и экспериментальных значений дрейфовой скорости электронов

Введем нормализованную скорость реакции \hat{R} (в %) вида

$$\hat{R} = (R_{f,a} - R_a) \cdot 100 / R_a,$$

где $R_{f,a}$ – константа скорости реакции для разряда в топливно-воздушной смеси,

R_a – константа скорости реакции для плазмы воздуха.

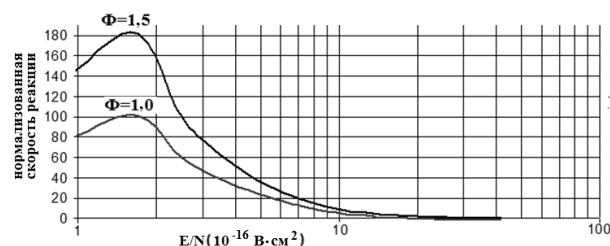


Рис. 2. Зависимость нормализованной скорости реакции \hat{R} от приведенного электрического поля разряда E/N (этилено-воздушная смесь)

Можно отметить следующее. Если для обедненной топливно-воздушной смеси различия в константах скоростей, по сравнению с плазмой воздуха, не являются очень существенными и стремятся к нулю при увеличении приведенного электрического поля разряда, то для обогащенных смесей и метана, и этилена эти различия могут достигать порядка 180%. Ясно, что в таких условиях использование для разряда в топливно-воздушной смеси таких же эмпирических зависимостей, как для плазмы воздуха не является правомочным.

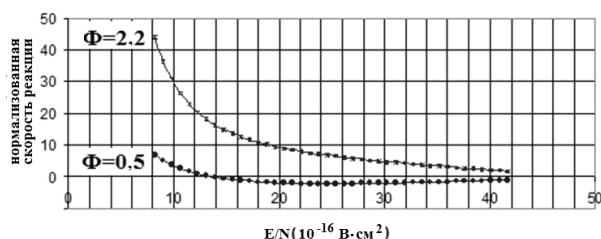


Рис. 3. Зависимость нормализованной скорости реакции \hat{R} от приведенного электрического поля разряда E/N (метано-воздушная смесь)

Не меньший интерес представляет оценка влияния приведенного электрического поля наносекундного импульсного разряда на время задержки воспламенения. На рис.4 представлена расчетная зависимость времени задержки воспламенения от E/N для разряда в стехиометрической этиленовоздушной смеси при атмосферном давлении и умеренных температурах. Можно отметить, что наличие разряда существенно снижает время задержки воспламенения по сравнению со временем самовоспламенения в таких же условиях. И величина такого снижения тем больше, чем выше приведенное электрическое поле разряда, что объясняется увеличением всех констант скоростей реакций (1) при росте напряженности электрического поля разряда и температуры электронов.

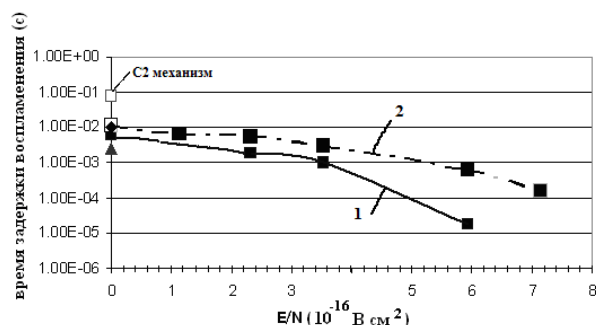


Рис. 4. Период задержки воспламенения:
 1 - $10000/T = 9,2$: \blacksquare – GRI 3.0 механизм, \blacktriangle – экспериментальные данные [6],
 2 - $10000/T = 8,8$, \blacksquare – GRI 3.0 механизм, \blacklozenge – экспериментальные данные [6]

Выводы

Предложена модель процесса воспламенения топливно-воздушной смеси наносекундным импульсным разрядом.

Проведена верификация расчета электрических характеристик разряда на основе авторского пакета S-PLASIG для расчета процесса воспламенения неравновесной плазмой.

Получены результаты о константах скоростей реакций формирования электронно-возбужденных состояний азота для обогащенных смесей при атмосферном давлении.

Получены зависимости времени задержки воспламенения от приведенного электрического поля разряда.

Литература

1. Simulation of a DC discharge in a transverse supersonic gas flow [Text] / S.A. Dvinin, A.P. Ershov, I.B. Timofeev, V.A. Chernikov, V.M. Shibkov // High Temperature. - 2004. - Vol. 42, N 2. - P. 157-167.
2. Plasma discharge stabilization of jet diffusion flame [Text] / W. Kim, H. Do, M.G. Mungal, M.A. Capelli // IEEE Trans. on Plasma Sci. - 2006. - Vol. 34. - P. 2545-2551.
3. Puchkarev, V. Energy efficient plasma processing of gaseous emission using a short pulse discharge [Text] / V. Puchkarev, M. Gundersen // Appl. Phys. Lett. - 1997. - Vol. 71(23). - P. 3364-3366.
4. Comparative analysis of engine ignition systems [Text] / A.A. Tropina, L. Lenarduzzi, S.V. Marasov, A.P. Kuzmneko // IEEE Trans. on Plasma Science. - 2009. - Vol. 37. - P. 2286-2292.
5. Starikovskaia, S.M. Plasma assisted ignition and combustion [Text] / S.M. Starikovskaia // J. Phys.D: Applied Physics. -, 2006. - Vol. 39. - R265-R299.
6. Starikovskii, A.Yu. Plasma supported combustion [Text] / A.Yu. Starikovskii // Proc. of Comb. Inst. - 2005. - Vol. 30. - P. 2405-2417.
7. Janev, R.K. Collision processes of $C_{2,3}H_y$ and $C_{2,3}H_y^+$ hydrocarbons with electrons and protons [Text] / R.K. Janev, D. Reiter // Phys. Plasmas. - 2004. - Vol. 11. - P. 781-829.
8. Tropina, A.A. Non-equilibrium plasma influence on the minimum ignition energy. Part I: Discharge model [Text] / A.A. Tropina, M. Uddi, Y. Ju. // IEEE Trans. on Plasma Sci. - 2011. - Vol. 39. - P. 615-623.
9. Smirnov, B.M. Fundamentals of ionized gases: basic topics in plasma physics [Text] / B.M. Smirnov. - NY: Willey, 2012. - 450 p.
10. Petrova, T.B. Numerical modeling of the electrical breakdown and discharge properties of laser generated plasma channels [Text] / T.B. Petrova, H.D. Ladouceur, A.P. Baronavski // Phys. Review, E. - 2007. - Vol. 76. - P. 066405-11.

Поступила в редакцию 28.11.2012 г.

Рецензент: д-р техн. наук, проф., зав. каф. автомобильной электроники А.В. Бажинов, Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков.

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПЛАЗМОВОГО КАНАЛУ, ЯКИЙ ФОРМУЄТЬСЯ НАНОСЕКУНДНИМ ІМПУЛЬСНИМ РОЗРЯДОМ

А.А. Тропіна

Приведені результати чисельного моделювання властивостей плазмового каналу, що формується наносекундним імпульсним розрядом. Модель ґрунтується на чисельному розв'язанні рівняння Больцмана для функції розподілу електронів по енергіям та рівнянь переносу для заряджених та нейтральних компонент паливно-повітряної суміші. Проведено тестування шляхом порівняння розрахункових даних з експериментальними даними. Використовуючи розрахункову функцію розподілу електронів по енергіям, проведено розрахунки констант швидкостей реакцій за участю електронів, як функції приведенного електричного поля розряду для різного складу суміші. Отримана залежність часу затримки запалювання від приведенного електричного поля розряду.

Ключові слова : імпульсний наносекундний розряд, хімічна кінетика, рівняння Больцмана, чисельне моделювання.

NUMERICAL MODELING OF THE PROPERTIES OF THE PLASMA CHANNEL FORMED BY THE NANOSECOND PULSED DISCHARGE

A.A. Tropina

Results of the numerical modeling of the properties of the plasma channel formed by the nanosecond pulsed discharge have been presented. A model is based on the numerical solution of the Boltzmann equation for the electron energy distribution function and on transport equations for charged and neutral species of the fuel-air mixture. The model has been tested by a comparison of the calculated data with the experimental ones. Using the calculated electron energy distribution function rate constants with the electron participation were calculated as a function of the discharge reduced electric field for the different mixture composition. The ignition delay time dependence on the reduced electric field of the discharge was determined.

Key words: repetitive nanosecond pulsed discharge, chemical kinetics, Boltzmann equation, numerical modeling.

Тропіна Альбіна Альбертовна – д-р техн. наук, доцент, зав. кафедрою прикладної математики Харківського національного автомобільно-дорожного університета, Харків, Україна, e-mail: albina.tropina@fulbrightmail.org.