МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ТЕРМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ А. А. Тропина

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков, Украина

Введение

Оптимизация энергетической эффективности процессов воспламенения и горения различных топлив может быть достигнута за счет использования неравновесной низкотемпературной плазмы, одним из преимуществ которой является обеспечение селективности и управляемости химических реакций. На сегодняшний день существует значительное количество работ, посвященных экспериментальному исследованию неравновесных разрядов, обзор которых приведен в работе [1]. В тоже время, работ, связанных с теоретическим моделированием поведения неравновесной плазмы с учетом тепловой и ионизационной неравновесности, взаимодействия с турбулентным потоком газа, практически нет. Общепринятым подходом к моделированию неравновесной плазмы, является двухтемпературное приближение, при котором плазма рассматривается, как среда, состоящая из тяжелых частиц с поступательной температурой и электронов с отличной от поступательной электронной температурой [2], [3].

Основным каналом передачи энергии электромагнитного поля в молекулярных газах является передача энергии через колебательные степени свободы, что приводит к необходимости рассмотрения дополнительной колебательной температуры И соответствующих кинетических уравнений с учетом колебательно-возбужденных молекул. Использование кинетического подхода к моделированию явлений в такой неравновесной плазме, предложенного в работах [4], [5], не является перспективным с точки зрения приложений в силу своей трудоемкости. В тоже время, появление новых технологических устройств [6], [7], основанных на использовании неравновесной плазмы газовых разрядов в воздухе, и обеспечивающих эффективное воспламенение и поддержание стабильного горения обедненных газовоздушных смесей, а также необходимость совершенствования таких устройств приводит к задаче численного моделирования основных параметров плазмы с учетом турбулентного движения газа и конкретной геометрии расчетной области. В таких условиях более приемлемыми являются модели плазмы, основанные на гидродинамическом приближении.

Плазма молекулярных газов, в гидродинамическом описании представляется четырехжидкостной средой, состоящей из нейтральных частиц и ионов с поступательной температурой, электронов с электронной температурой и колебательно-возбужденных молекул с общей для всего газа колебательной температурой, совпадающей с колебательной температурой молекул азота. Предполагается, что колебательная температура молекул кислорода и оксидов азота вследствие быстрой колебательно-поступательной релаксации этих компонент близка к поступательной температуре газа. Тестирование трехтемпературной четырехжидкостной модели неравновесной плазмы проведено в работе [8] для случая поперечного разряда в потоке газа с учетом турбулентного характера движения газа и трехмерной геометрии расчетной области.

В настоящей работе на основе предложенной модели проводится анализ основных характеристик нестационарного горения разряда в канале плазменного воспламенителя, работающего на малых силах тока (до 1А).

Постановка задачи

Основная система уравнений, описывающая нестационарное горение разряда постоянного тока в турбулентном потоке газа с учетом колебательно-поступательной релаксации молекул образующейся неравновесной плазмы, в рамках трехтемпературного приближения имеет вид:

$$c_{pe}n_e\frac{dT_e}{dt} + p_e\nabla\cdot\overline{\upsilon}_e = \nabla\cdot\lambda_e\nabla T_e + \overline{j}\cdot\overline{E} - \frac{3}{2}\delta_{\flat\phi\phi}\nu_{\flat\phi\phi}k_Bn_e(T_e - T) - Q_e,$$
(1)

$$c_{p}\rho\frac{dT}{dt} + p\nabla\cdot\overline{\upsilon} = \nabla\cdot\lambda_{h}\nabla T + \rho\frac{\varepsilon_{V}-\varepsilon_{0}}{\tau_{VT}} + \frac{3}{2}\delta_{s\phi\phi}v_{s\phi\phi}k_{B}n_{e}(T_{e}-T) + Q_{T}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon_V}{dt} = \nabla \cdot \frac{\lambda_V}{c_V^V} \nabla \varepsilon_V - \rho \frac{\varepsilon_V - \varepsilon_0}{\tau_{VT}} + k_{eV} n_e hw - \alpha \cdot \sigma E^2, \qquad (3)$$

$$\nabla \cdot \varepsilon E = 4\pi e (n_+ - n_e - n_-), \qquad (4)$$

$$\overline{E} = -\nabla \varphi, \tag{5}$$

$$Q_T = q_{ei} + q_{ii} + q_{at} + q_r, \qquad Q_e = q_\varepsilon + q_i + q_{ex},$$

где $\varepsilon_V(T_V)$ – колебательная энергия; $\varepsilon_0(T)$ – равновесное значение колебательной энергии, соответствующее температуре газа T; $\delta_{_{}^{}\phi\phi}$ – эффективный коэффициент рассеяния электронов на молекулах; $v_{_{}^{}\phi\phi\phi}$ – сечение упругих столкновений электронов; T_e

электронная температура; c_{pe} коэффициент электронной теплоемкости; λ_e коэффициент электронной теплопроводности, $q_{ei}, q_{ii}, q_{att}, q_e$ тепловыделение в реакциях электронионной, ион-ионной рекомбинаций, диссоциативного прилипания и электронного возбуждения.

Система уравнений (1)-(5) дополняется стандартными уравнениями Навье-Стокса. В качестве модели турбулентности была выбрана двухпараметрическая RNG k - ε модель [9]. В уравнение для поступательной температуры дополнительно включен источник, прямо пропорциональный полной энергии электромагнитного поля с коэффициентом $\alpha = 0.2$, что соответствует оценкам постоянной части энергии, которая тратится на нагрев газа, приведенным в работе [10].

Были проанализированы основные химические реакции в ионизированном воздухе, и составлена редуцированная кинетическая схема, включающая в себя следующие реакции (в скобках указаны константы скоростей реакций в м³/с, м⁶/с):

$$O_2^- + N_2^* \left(A^3 \Sigma_u^+ \right) \to N_2 + O_2 + e \ (2.1 \cdot 10^{-15})$$
, (6)

$$O_2^- + N_2^* \left(B^3 \Pi_g \right) \to N_2 + O_2 + e \quad (2.5 \cdot 10^{-15}),$$
 (7)

$$O^{-} + N_{2}^{*} \left(A^{3} \Sigma_{u}^{+} \right) \to N_{2} + O_{2} + e \quad (2.2 \cdot 10^{-15}),$$
(8)

$$O^{-} + N_{2}^{*} \left(B^{3} \Pi_{g} \right) \rightarrow N_{2} + O + e \quad (1.9 \cdot 10^{-15}),$$
(9)

$$O_2^+ + e \to O + O \ (k = 2 \cdot 10^{-7} \left(\frac{300}{T_e}\right)^{1/2}),$$
 (10)

$$N_2^+ + e \to N + N \ (k = 2.8 \cdot 10^{-7} \left(\frac{300}{T_e}\right)^{1/2}),$$
 (11)

$$e + O_2 + O_2 \to O_2^- + N_2 \quad (v_{a3} = f(T_e, N)),$$
 (12)

$$O_{-} + N_{2}^{+} \to O + N_{2} \quad (k = 2. \cdot 10^{-7} \left(\frac{300}{T}\right)^{1/2}),$$
 (13)

$$O_2^- + N_2^+ \to O + N_2 \ (k = 1.6. \cdot 10^{-7} \left(\frac{300}{T}\right)^{1/2}),$$
 (14)

$$O_2 + e \to O^- + O \ (v_{a2} = f(T_e, N))$$
, (15)

где реакции (6)-(9) – реакции отлипания электронов при столкновении отрицательных ионов с колебательно-возбужденными молекулами; реакции (10),(11) – реакции диссоциативной рекомбинации; реакция (12)– реакция трехчастичного прилипания электронов; реакции (13)-

(14) реакции ион-ионной рекомбинации; реакция (15) реакция двухчастичного прилипания электронов.

Константы скоростей реакций были взяты из работ [11],[12]. В силу громоздкости выражений для частот двухчастичного v_{a2} и трехчастичного прилипания v_{a3} электронов их значения в данной работе не приводятся. Константы скоростей реакций с участием колебательно-возбужденных молекул (6)-(9) варьируются в пределах $1.9 \div 2.5 \cdot 10^{-15} \ m^3/c$, что позволило ввести эффективную концентрацию колебательно-возбужденных молекул n^* и среднюю константу скорости реакции отлипания, равную $2 \cdot 10^{-15} \ m^3/c$.

Излучением плазмы и вкладом колебательной моды в изменение давления газа пренебрегали. Кроме того, возбуждением большого количества колебательных уровней пренебрегали вследствие малого значения параметра $\xi = \frac{T - T_V}{T} = 1 \div 2$, определяющего уровень возбуждения колебательной моды. Уравнения (1)-(5) замыкаются уравнением состояния газа (16) и системой уравнений переноса для компонент плазмы следующего вида:

$$p = k_B (n_+ + n_- + N)T + n_e k_B T_e,$$
(16)

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{I_e} = v_i n_e - v_a n_e - k_{ei} n_e n_+ + v_d n_- n^*, \qquad (17)$$

$$\frac{\partial n_{-}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{I}_{-} = \nu_{a} n_{e} - k_{ei} n_{e} n_{+} - k_{ii} n_{+} n_{-} - \nu_{d} n_{-} n^{*}, \qquad (18),$$

$$\frac{\partial n_{+}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{I}_{+} = v_{i} n_{e} - k_{ii} n_{+} n_{-} - k_{ei} n_{e} n_{+}, \qquad (19)$$

$$\frac{\partial n_*}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{I}_* = \mathbf{v}_{ex} n_e - \mathbf{v}_d n_n^*, \qquad (20)$$

где $\bar{I}_{-}, \bar{I}_{e}, \bar{I}^{*}$ – потоки отрицательных ионов, электронов и колебательно-возбужденных молекул, включающие в себя конвективную, диффузионную и дрейфовую составляющие; v_i частота ионизации электронным ударом; v_a = v_{a2} + v_{a3} – частота прилипания; α_{ei} – константа скорости электрон-ионной рекомбинации; α_{ii} константа скорости ион-ионной рекомбинации; α_{ii} константа скорости ион-ионной рекомбинации; α_{ii} константа скорости ион-ионной рекомбинаций, v_{ex} частота возбуждения электронных уровней молекул.

При записи системы уравнений (16)-(20) предполагалось, что отлипание электронов происходит при столкновении отрицательных ионов с колебательно-возбужденными молекулами, эффективная концентрация которых *n** определяется из дополнительного уравнения (20). Диффузия заряженных компонент предполагается амбиполярной. Частота

ионизации электронным ударом $v_i = v_i (E/N)$ при предположении о том, что процесс идет из основного состояния, определялась согласно выражениям, приведенным в монографии [13]. Дополнительно был учтен эффект усиления процесса ионизации за счет колебательного возбуждения [14] с помощью умножения частоты ионизации на эмпирический множитель k_V , определяемый следующим образом:

$$k_V = 10^{\frac{28.3 \cdot Z}{\theta^2}}; Z = \exp\left(-\frac{hw_0}{k_B T_V}\right); \theta = \frac{E}{N},$$

где T_V колебательная температура; hw_0 энергия колебательного кванта; Е напряженность электрического поля; N концентрация нейтральных молекул.

Поскольку рассматривается случай малых токов, магнитное число Рейнольдса и число Стюарта достаточно малы, что позволило пренебречь индуцированными токами и силой Лоренца в уравнении моментов.

Модель дополняется отдельным блоком для определения переносных свойств неравновесной трехтемпературной плазмы. Все диффузионные коэффициенты и коэффициенты теплопроводности как для нейтральных, так и для заряженных компонент плазмы предполагались равными сумме ламинарных и турбулентных составляющих:

$$D = D_{lam} + D_{turb}, \quad D_{turb} = \frac{\mathbf{v}_{turb}}{\mathbf{Pr}_D}, \quad \lambda = \lambda_{lam} + \lambda_{turb},$$
$$\lambda_{turb} = \frac{c_p \rho \mathbf{v}_t}{\mathbf{Pr}_t}, \quad \mathbf{Pr}_t = 0.8, \quad \mathbf{Pr}_D = 1.$$

Вкладом неупругих переходов на коэффициенты диффузии и подвижности для электронов и ионов пренебрегали. Наличие внутренних степеней свободы газа учитывалось в определении коэффициента колебательной теплопроводности, который с учетом модифицированной поправки Эйкена [15], принимает вид

$$\lambda_V = \frac{6\gamma_V \mu c_V}{5} ,$$

где $\gamma_V \approx 2/7$ часть внутренней энергии, содержащейся в колебательных степенях свободы.

Решение уравнений осуществлялось итерационным методом с использованием нижней релаксации и процедуры SIMPLE на основе авторского модуля NON-EQU-PLASMA. Предлагалась следующая процедура расчета. На первой стадии проводился расчет турбулентного течения в канале плазмотрона при отсутствии разряда. При этом расчетная область включала в себя как область, занятую плазмой и нейтральным газом, так и твердые тела-электроды. Инициации разряда осуществлялась путем инжекции электронов в зону

разряда. Так как процессы релаксации энергии являются очень быстрыми по сравнению с процессами движения газа и химическими процессами, все источниковые члены в уравнениях переноса были линеаризованы и разделены на явную и неявную части для увеличения скорости сходимости и улучшения устойчивости решения. Итерационный процесс включал в себя внешний цикл, в котором проводился расчет турбулентного течения газа (с шагом по времени $\Delta t = 10^{-4} c$), и внутренний цикл расчета электрических характеристик разряда ($\Delta t = 10^{-7} c$). Вследствие наличия больших градиентов заряженных компонент применялась процедура перестройки сетки с ее сгущением в области максимальных градиентов. Вне области условной границы плазмы ($T \le 350^0 K$) предполагалось отсутствие заряженных компонент.

Результаты расчетов

Расчетная область включает в себя электроды, анодную полость плазмотрона, а также область вне плазмотрона (рис.1). Граничные условия для поступательной температуры газа Т и потенциала электрического поля φ формулировались на внешней границе расчетной области (ABCDEF), а граничные значения всех остальных зависимых переменных задавались по внутренней границе области (ABOSRPCDEF).



Рис.1. Расчетная область.

Граничные условия для температуры тяжелых частиц потенциала электрического тока на поверхности электродов определялись автоматически в ходе решения сопряженной задачи. Сформулированные таким образом граничные условия имеют вид (рис.1):

AB:
$$n_e = n^* = n_- = 0$$
, $T = T_e = T_V = 300^{\circ} K$, AB: $G = G_0$; GH: $\varphi = 0$, $T = 300^{\circ} K$,

. . .

Стенки:
$$u = v = w = k = 0$$
, $\frac{dT_e}{dn} = \frac{dT_V}{dn} = 0$, $n_e = n^* = n_- = 0$; BC: $\varphi = \varphi_0$, $T = 300^{-0}K$,

EF:
$$\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial n^2} = 0$$
, OSRP: $\left(-D_a \frac{dn_e}{dn} \right) = \frac{1}{4} e n_e \left[\frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \right]^{1/2}$, $\frac{dT_e}{dn} = \frac{dT_V}{dn} = 0$
NQVW: $I_{en} = \gamma j_0 / e$, $n_- = 0$, $\frac{dT_e}{dn} = \frac{dT_V}{dn} = 0$,

где G_0 расход газа на входе в плазмотрон; j_0 значение плотности тока; γ коэффициент вторичной эмиссии; *е* заряд электрона; I_{en} проекция потока электронов I_e на нормаль к поверхности электрода.

В качестве начального приближения задавалось значение концентрации электронов $n_{e0} = 2 \cdot 10^{20} \ 1/m^3$ и начальный радиус токопроводящего канала 0.0003 *м*, что соответствует данным для пробоя в воздухе, приведенным в работе [1].



Рис.2. Профили концентрации электронов вдоль поверхности анода:

 $1-t = 10^{-3}$ c, $2-t = 1.5 \cdot 10^{-3}$ c, $3-t = 2 \cdot 10^{-3}$ c, $4-t = 3.2 \cdot 10^{-3}$ c.

Расчеты проводились для силы тока I = 0.4 A и расхода газа на входе в плазмотрон $G = 10^{-4} \div 5 \cdot 10^{-4}$ кг/с. Для всех расходов газа было получено, что основной вклад в образование электронов и ионов вносят области, непосредственно, примыкающие к электродам. В большей части положительного столба разряда роль процесса ионизации мала, поскольку процессы ионизации уравновешиваются процессами прилипания и рекомбинации электронов. Таким образом, центральная часть анодной полости плазмотрона оказывается обедненной электронами, а в основном объеме положительного столба преобладают положительные ионы и отрицательные ионы, образующиеся в процессе отлипания.

Распределение характеристик разряда существенно неоднородно, как в радиальном, так и в аксиальном направлении и зависит от начального состояния газа. Так, при наличии предварительно ионизированного газа в анодной полости (начальные концентрации заряженных частиц в анодной полости не равны нулю) наблюдаются следующие закономерности развития разряда. Максимум концентрации электронов, который на начальных стадиях горения разряда фиксировался в самом узком месте межэлектродного промежутка, по мере горения разряда перемещается по внутренней стороне анода (рис.2). При этом можно отметить, что на движение анодного пятна (места контакта разряда с анодом) непосредственно влияет турбулентное течение плазмообразующего газа, так как при увеличении расхода газа G скорость перемещения максимума n_e возрастает.



Рис.3. Профили температуры электронов вдоль оси плазмотрона:

 $1-t = 8 \cdot 10^{-5} \text{ c}, \quad 2-t = 1.8 \cdot 10^{-4} \text{ c}; \quad 3-t = 9 \cdot 10^{-4} \text{ c}, \quad 4-t = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ c}.$

В процессе распространения разряда проводимость и ток первоначального канала уменьшается. При этом температура электронов падает, а ее максимум сдвигается в направлении выхода из плазмотрона (рис.3). При достижении времени $t = 3 \cdot 10^{-3}$ с вблизи катодной вставки плотность тока и проводимость плазмы начинает снова возрастать, что приводит к новому пробою. Причиной этого является кинетический механизм, связанный с накоплением отрицательных ионов и колебательно-возбужденных молекул и с изменением баланса между скоростью генерации и потерями электронов.

При распространении разряда по неионизированному холодному газу максимумы электронной, колебательной и поступательной температур газа фиксируются вблизи катодной вставки (рис.4). Увеличение расхода газа и интенсивности турбулентности на входе в плазмотрон, при прочих равных условиях, приводит к увеличению максимума электронной температуры, к снижению максимума колебательной температуры и к более быстрому выравниванию колебательной и поступательной температур газа, кроме того прямо пропорционально увеличивается время наступления очередного пробоя. При этом средние концентрации электронов в анодной полости варьируются в пределах $10^{17} - 10^{18} 1/m^3$, что соответствует экспериментальным данным для тлеющего разряда атмосферного давления в воздухе.

Таким образом, при работе на малых силах тока в плазмотроне реализуется существенно нестационарный режим горения разряда, при котором фиксируется значительный отрыв температуры электронов ($0.4 \pm T_e \pm 1.8$ эВ) от поступательной температуры газа ($0.03 \pm T \pm 0.25$ эВ) и от колебательной температуры ($0.15 \pm T_V \pm 0.8$ эВ).

Несмотря на нестационарный режим работы, использование плазмотрона, работающего на малых силах тока, в качестве воспламенителя является перспективным, вследствие того, что формирующаяся в анодной полости неравновесная плазма с горячими электронами и колебательно-возбужденными молекулами, а также переход разряда в искровую форму образуют среду, благоприятную для процесса воспламенения. При этом, более перспективным, с точки зрения автора, является подача горючего газа непосредственно в анодную полость



Рис.4. Профили температуры электронов (1,2), колебательной температуры (3,4) и поступательной температуры (5,6) вдоль оси плазмотрона через $t = 10^{-4}$ с после включения разряда: 2,4,6 G = 0.1 г/с; 1,3.5 G = 0.7 г/с.

Выводы

1. Турбулентное течение газа оказывает существенное влияние на перенос заряженных частиц в канале плазмотрона, вызывая отрыв температуры электронов от температуры газа и колебательной температуры и вызывая движение анодного пятна по поверхности анода.

2. По мере накопления колебательно-возбужденных молекул и отрицательных ионов вблизи катодной вставки разряд переходит в искровую форму, температура и концентрация электронов резко возрастает, приводя к очередному пробою межэлектродного промежутка, время наступления которого прямо пропорционально расходу и интенсивности турбулентности на входе в плазмотрон.

3. В диапазоне рассматриваемых малых токов наблюдаются значительные отклонения температуры электронов и колебательной температуры от температуры газа, при этом уровень неизотермичности не является постоянным и меняется при изменении расхода газа и средней плотности тока.

Работа проведена в рамках гранта МОН Украины 0107U001007 " Разработка теории

управления процессами горения с помощью электрического поля ".

Литература

1. Starikovskaia S.M. Plasma assisted ignition and combustion. J.Phys.D.Appl.Phys. 2006. V.39. R.265-299.

2. Лелевкин В.М., Семенов В.Ф. Численный анализ характеристик дуги в ламинарном и турбулентном потоках газа.// ТВТ. 2003. Т.41. №6. С.839-847.

3. Dvinin S.A., Ershov A.P., Timofeev I.B., Chernikov V.A., Shibkov V.M. Simulation of a DC discharge in a transverse supersonic gas flow. High Temperature. 2004. V.42. №2. P.157-167.

4. Hingana H., Teuler Ph., Cressault Y. Influence of thermal non-equilibrium on air and water plasma composition//Proc. of the XXVIII Int. Conf. on Phenomenon in Ionized Gases, 15-20 July . Prague, Czech Republic, 2007. P. 214-217.

5. Laux C., Pierrot L. Ionization mechanisms of 2T plasma// AIAA Paper. N.99-3476.

6. Korolev Yu. D., Matveev I.B. Non-steady processes in a plasma pilot for ignition and flame //IEEE Trans. Plasma Sci. 2006. V.34. №6. P.2507-2513.

7. Memarzadeh S., Colgrove J., Ronney P. Transient Plasma Discharge Ignition for Internal Combustion Engines// Abstracts of the 3-nd Int. Workshop and Exhibition on Plasma Assisted Combustion, 18-21 Sept., Falls Church, USA. 2007. P.47-48.

8. Тропина А.А. Разработка математической трехтемпературной модели неравновесного разряда. Вестник двигателестроения. 2007. №3. С.51-55.

9. Yakhot V., Orszag S.A., Thangam S., Gatski T.B., Speziale C.G. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. Phys. of Fluids A. 1992. V.4. N 7. P. 1510-1520.

10. Popov N.A. Investigation of the mechanism for rapid heating of nitrogen and air in gas discharges// Plasma Phys. Reports. 2001. V.27. N 10. P.886-896.

11. Kossyi I.A., Kostinsky A.Yu., Matveyev A.A., Silakov V.P. Kinetic sheme of the nonequilibrium discharge in nitrogen-oxygen mixtures// Plasma Sources Sci. Technol. 1992. V.1. №3. P.207-220.

12. Ивановский А.В. Об установившемся лидерном пробое. Журнал технической физики. 1998. Т.68. №6. С.37-44.

13. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.:Наука, 1987. 592 с.

14. Macheret S.O., Shneider M.N., Miles P.B. Modeling of air plasma generation by repetitive high-voltage nanosecond pulse//IEEE Trans. on Plasma Sci. 2002. V.30. №3. P.1301-1314.

15. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989.