

УДК 621.43.056+519.6

В.А. БОГУСЛАЕВ¹, А.И. ДОЛМАТОВ, Д.А. ДОЛМАТОВ, А.В. КУКУРУДЗА²¹АО «Мотор Сич», Украина²Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина

АНИЗОТРОПНОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ СТИМУЛЯЦИИ В ДВИЖУЩЕЙСЯ РЕАГИРУЮЩЕЙ СРЕДЕ

Статья посвящена численному моделированию стимулированного электрическим разрядом стационарных гомогенного метано-воздушного пламени. Установлено наличие анизотропных относительно движения среды эффектов, заключающихся в неоднородном характере распространения возбужденных и ионизированных частиц в плоскости, перпендикулярной оси разряда. Исследованы характерные и вторичные реакции на различном удалении от оси разряда, обнаружены принципиальные различия в производстве-расходе важнейших реагентов и характере пульсаций полей параметров в окрестности разряда.

Ключевые слова: электрический разряд, возбужденные частицы, пульсации температуры, перестройка кинетической схемы, перепроизводство реагентов.

Основы моделирования электрохимических процессов горения и генерации NO_x

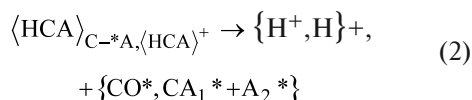
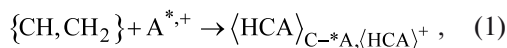
При стимуляции углеводородных пламен электрическими разрядами различных типов возникает большое количество химически активных частиц, оказывающих существенное влияние на процесс горения и формирование вредных веществ. В частности, в ходе электрохимических реакций за счет ударной ионизации образуются ионы O_2^+ , N_2^+ , NO_2^+ , O^+ , H^+ и др., являющиеся сильнейшими окислителями и агрессивно атакующие электронейтральные частицы топлива и топливных радикалов с последующим дополнительным ветвлением кинетических цепей [1, 2]. В то же время концентрация ионов и интенсивность ионно-электронных реакций за пределами основного ствола разряда и зоны вторичной ионизации стремятся к нулю, тогда как интенсивность реакций возбужденных частиц, напротив, существенно возрастает [3]. Как при натуральных, так и при численных экспериментах неоднократно наблюдалась анизотропия структуры пламени относительно разряда. Наиболее очевидным и естественным фактором, обуславливающим данный эффект, является газодинамический снос вещества движущейся средой, деформирующий зону вторичной ионизации и создающий возбужденно-ионизированный след разряда, протяженность и интенсивность которого зависит от многих факторов [4]. Однако наряду с этим очевидным влиянием существуют до

конца не изученные криптонестационарные и развитые нестационарные эффекты, вызывающие периодические и аperiodические пульсации пламени как в окрестности СВЧ, так и вблизи стационарных дуговых разрядов, исследование которых — одна из первоочередных задач современной физической химии и физики горения.

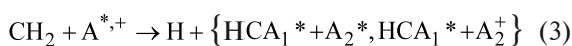
В настоящей работе в качестве объекта исследования выбрано метано-воздушное пламя, стимулируемое стационарным дуговым и СВЧ-разрядом при различной средней энергии свободных электронов ϵ_e и зоне размещения разрядного устройства. Генеральный баланс термических и электрохимических реакций горения метана в присутствии электрического разряда при помощи фильтрации по смешанным коэффициентам чувствительности [5] был сведен к 641 реакции. Поскольку процессы в стволе разряда очень мало подвержены внешним воздействиям и вполне определяются параметрами разряда и химическим составом движущейся сквозь разряд среды, расчетная зона выбрана в некоторой окрестности разряда с внутренней границей по внешней границе ствола.

За счет высокого химического потенциала некоторых возбужденных частиц, вблизи разрядов наблюдаются нехарактерные для термического горения реакции, оказывающие существенное влияние на горение — в частности, реакции ионизированного молекулярного и атомарного кислорода, молекулярного возбужденного азота, ионов NO^+ и возбужденных

выше первого триплетного состояния кислород-кислородных связей (включая O_2) с высоко расщепленными метильными радикалами CH и CH_2 (не CH_3 и не метан), приводящие к образованию промежуточных компонент с быстрым последующим распадом либо ударной быстрой реакции по механизмам:



для образования сверхкритических промежуточных соединений с очень малым периодом жизни, и



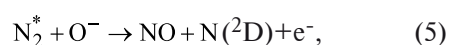
для одностадийного процесса, при этом в (3), в отличие от (1) и (2), соединение вида HCA_1^* – стабильное. Для менее расщепленных углеводородов оба механизма являются запрещенными, поскольку вероятность рекомбинации электронных облаков возбужденной частицы с атомом углерода крайне низка из-за сильного экранирования последнего водородными атомами. Оба механизма весьма экзотермичны и приводят к цепной реакции образования возбужденных частиц, существенно (в 1,45 и более раза) увеличивающих скорость горения. В зонах с меньшим содержанием остаточных CH_x не набирается достаточного количества метильных радикалов для реакций с возбужденными частицами, а при кислородном горении отсутствует важнейший источник цепного механизма – возбужденный азот и нитрозный ион.

При моделировании использовался программный пакет высокого уровня для расчетов реагирующих 3D-течений вязкой среды с помощью высокопроизводительной вычислительной станции.

Поля параметров в окрестности разряда

Поскольку интенсификация метановых пламен представляет собой перспективный метод усовершенствования процесса горения для широкого спектра энергоустановок, проблема химической кинетики и физики горения в непосредственной окрестности и теле разряда в зоне с высоким содержанием остаточных углеводородов была подвергнута численному моделированию с повышенной точностью. Исследованы поля температуры, скорости горения

и отдельных реакций, а также концентраций характерных веществ. Для периодического СВЧ-разряда исследованы наносекундные процессы при квазистационарных значениях ϵ . Для увеличения достоверности получаемых результатов численного моделирования наряду с основным термическим механизмом Зельдовича использовались дополнительные механизмы данного типа; под дополнительными механизмами в данном случае понимаются реакции образования монооксида азота, морфологически сходные с основной стадией базового механизма Зельдовича, например:

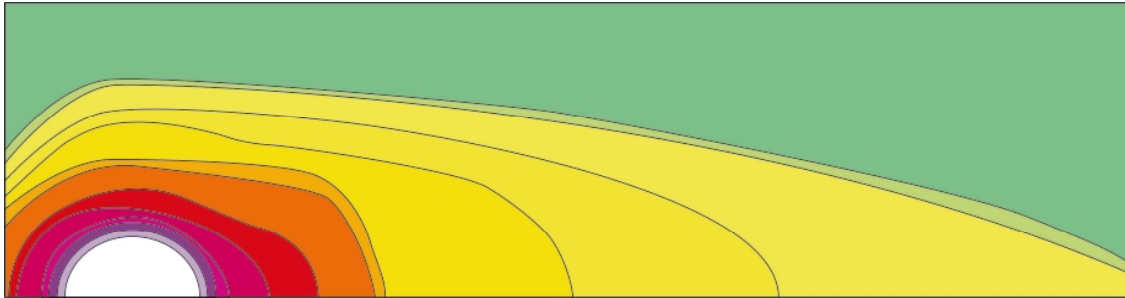


и другие процессы этого типа, всего 63 реакции. Учитывая высокую долю вклада электрохимических реакций в образование NO и корреляцию максимума NO с максимумом ионизированных частиц, был проведен анализ возможных кинетических схем реакций для установления иерархии значимости условий горения для образования NO вблизи тела разряда. Установлено, что соотношение вкладов классического термического расщепления молекулярного азота (включая реакции частиц в возбужденном состоянии) и электрохимических процессов вида (4), (5) и др. не является постоянной величиной и зависит от наличия и концентраций в реакционной зоне следующих компонент (разумеется, помимо атомарного кислорода как непосредственного реагента): $N_2(B^3P_g, C^3P_u, X^1\Sigma)$, O^+ , $C-O(\pi\pi^*, \pi\pi^*)$, $CN(S_2, T_2, T_3, M)$, CN^- (очевидная взаимосвязь с циановым синтезом оксидов азота, слабо выраженный для основного состояния вследствие высокой энергии активации детерминирующей стадии), O_2^+ . Факты взаимосвязи выхода установлены с помощью анализа по смешанным коэффициентам чувствительности [5].

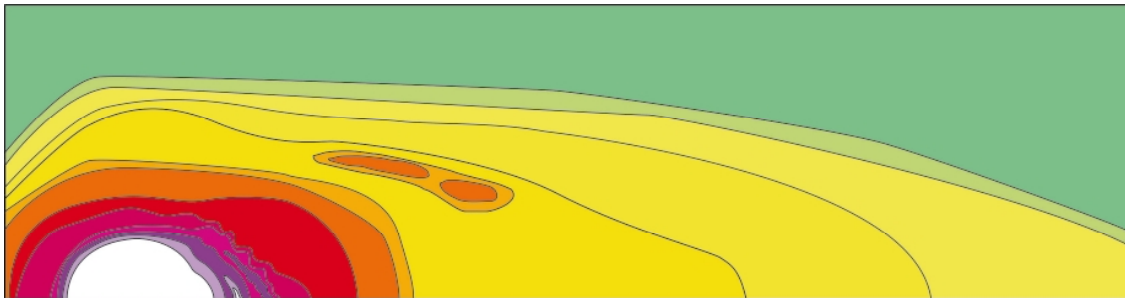
Для получения возможно более полной информации о взаимодействии разряда с потоком и формировании нестационарной структуры течения были исследованы несколько вариантов размещения разряда в зонах с характерным содержанием метильных радикалов, а именно – участках с суммарной мольной долей метана и алкильных радикалов (без учета кислород-содержащих соединений) соответственно 0; 0,05 и 0,2; последний случай соответствует

начальному участку горения. Также варьировалась частота СВЧ-разряда, составившая при двух экспериментах соответственно 0,87 и 1,35 ГГц. Базовая температура среды (т.е., температура при термическом горении предварительно перемешанной смеси) – выбрана из характерного для зоны зажигания и первич-

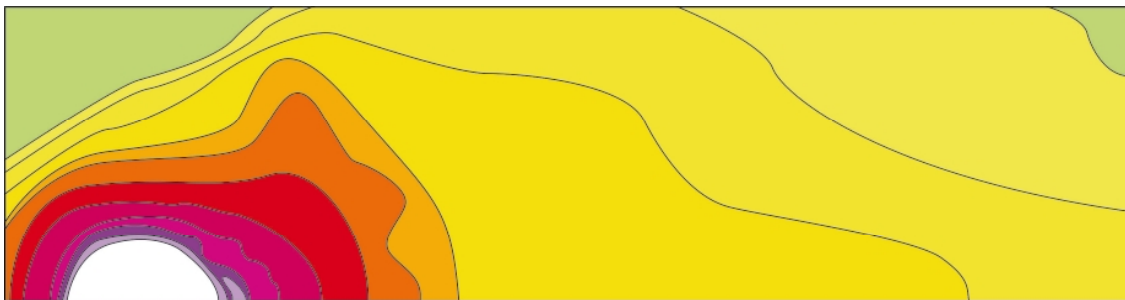
ного горения около-стехиометрических смесей диапазона 1800 – 2100 К. При моделировании учитывалась конечная скорость релаксации колебательной температуры возбужденной электронным ударом частицы. Результаты расчетов представлены на рис. 1, 2 в виде полей температуры и скоростей окисления.



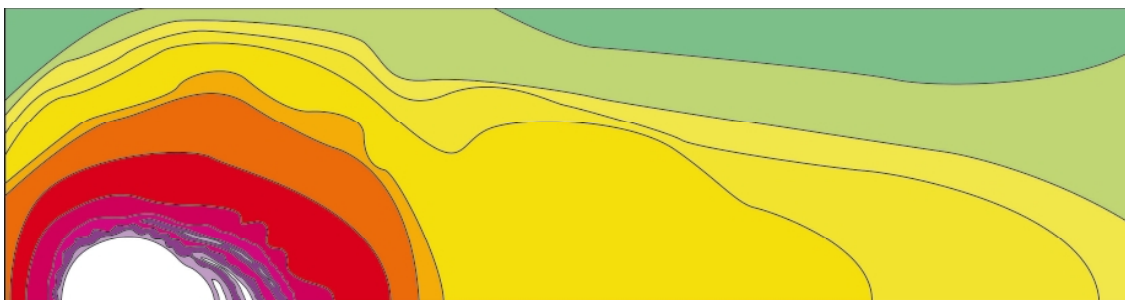
а) дуга, 1,5 А; $d_e = 2$ мм; $\omega_{CH_X} = 0,05$; $\varepsilon_{0,05} \in [5;60]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 22,8$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К



б) дуга, 1,5 А; $d_e = 2$ мм; $\omega_{CH_X} = 0,2$; $\varepsilon_{0,05} \in [10;65]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 27,6$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К

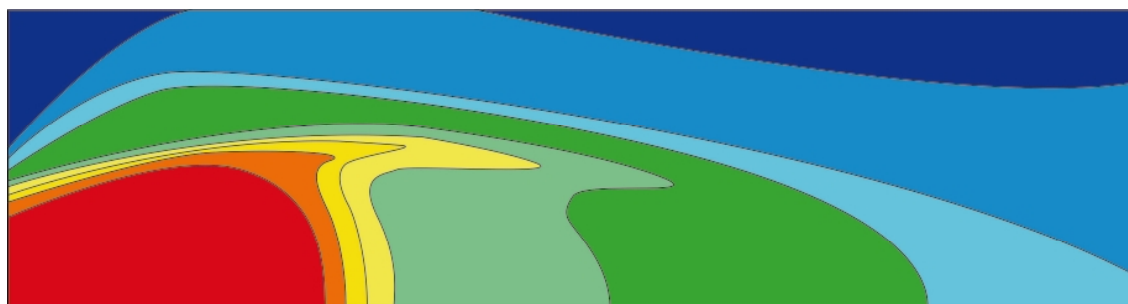


в) дуга, 1,5 А; $d_e = 2$ мм; $\omega_{CH_X} = 0,2$; $\bar{\varepsilon} = 27,6$ эВ; $T_{e,z} = 2100$ К

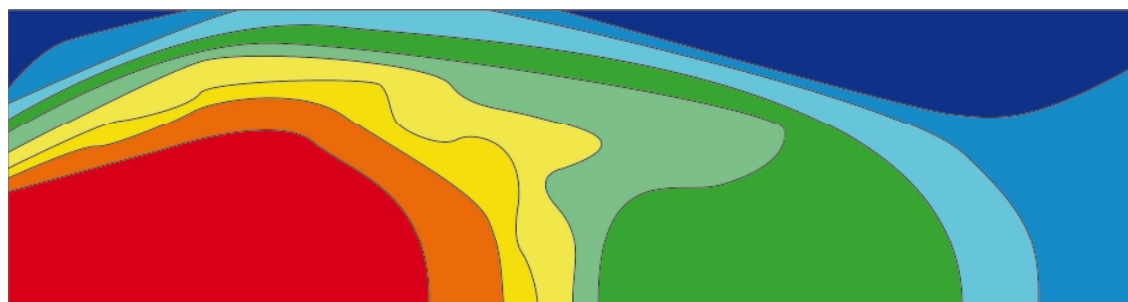


г) СВЧ-разряд, 2 А; $f = 1,35$ ГГц; $\varepsilon_{0,05} \in [3,5;110]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 32,4$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К

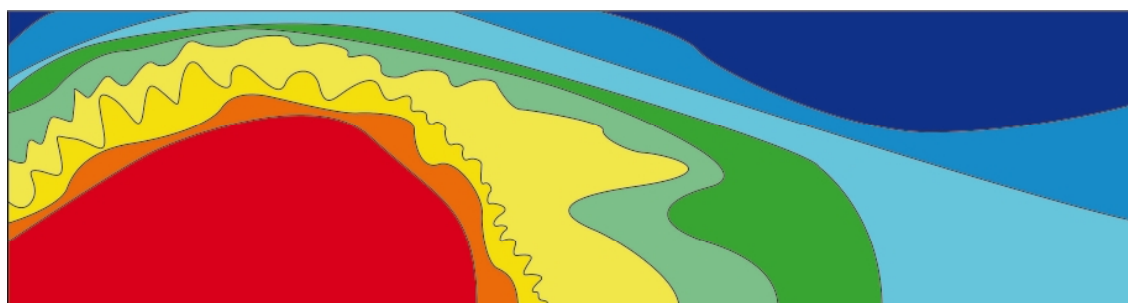
Рис. 1. Температурные поля при дуговом и СВЧ-разряде



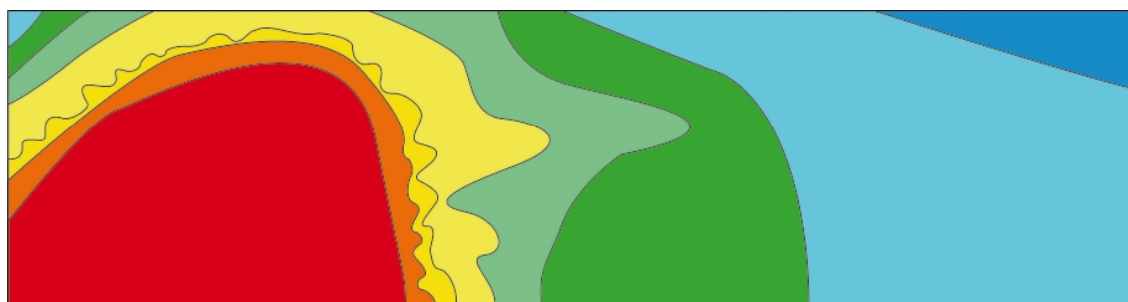
а) дуга, 1,5 А; $d_e = 2$ мм; $\omega_{CH_4} = 0,2$; $\varepsilon_{0,05} \in [10;65]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 27,6$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К



б) дуга, 1,5 А; $d_e = 2$ мм; $\omega_{CH_4} = 0,2$; $\bar{\varepsilon} = 27,6$ эВ; $T_{e,z} = 2100$ К



в) СВЧ, 2 А; $\varepsilon_{0,05} \in [3,5;110]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 32,4$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К, $f = 0,87$ ГГц



г) СВЧ, 2 А; $\varepsilon_{0,05} \in [3,5;110]$ эВ; $\bar{\varepsilon} = 32,4$ эВ; $T_{e,z} = 1800$ К, $f = 1,35$ ГГц

Рис. 2. Поля скорости окисления в окрестности дугового и СВЧ-разряда

Результаты моделирования демонстрируют существенный вклад механизма (1) – (3) в формирование итоговой кинетической схемы горения и эмиссии NO. При этом ярко выражена взаимосвязь механизма блокировки производства NO и дополнительного ускорения горения метана с типом, энергией и частотой разряда. Продемонстрировано смещение и

интенсификация особо высокотемпературной зоны с $T > 4500$ К при наличии резонанса частоты колебаний поля с частотами возбужденных S_2 и T_1 -форм связи C – H. Нестационарная постановка задачи при стационарных граничных условиях позволила установить наличие отходящих от разряда (как постоянной дуги, так и СВЧ) односторонних волн с повышенной

температурой и увеличенным производством атомарного кислорода. Данный эффект наблюдается при медианных значениях энергии свободных электронов, соответствующих экстремуму в 27,6 эВ и выше, но не превышающих экстремальных для разряда по O^+ , O_2^+ значений (≈ 50 эВ). Весьма важным фактом, подтверждающим наличие эффекта резонансного возбуждения квантовых состояний карбонводородной связи как причины увеличения интенсивности горения, является отсутствие смещения особо высокотемпературной зоны при малых остаточных концентрациях CN_x . Численные эксперименты демонстрируют также наличие криптонестационарных эффектов, причем частота генерируемых термических волн крайне слабо коррелирует с частотой самого разряда. Осредненные по сравнительно большому интервалу (250 мс) параметры, демонстрируют незначительные различия между условной «длиной» термических (а, следовательно, и реакционных) волн и, таким образом, физическое подобие природы их генерации для дуги и высокочастотного разряда. Разумеется, в отличие от процессов гетерогенного горения, настоящий эффект не может быть основан на прохождении через контрольные поверхности границ (-ы) раздела фаз, поскольку в данном случае имеет место гомогенное горение метана, а в качестве граничного условия при численном моделировании было задано отсутствие топливных кластеров с относительным градиентом концентраций более 0,2 и размером свыше 1 мкм. Вместе с тем характерные частоты процесса ($10^4 - 10^5$ Гц) свидетельствуют о схожем порядке размеров характерных газодинамических объектов, вызывающих криптонестационарные проявления, т.е. 5 – 35 мкм.

Очевидно, причиной возникновения данного эффекта следует признать влияние электрического разряда на процессы в присоединенной зоне и предшествующих ей областях термического горения, а именно – разрядное ускорение горения вверх по потоку на некотором эффективном расстоянии. Так, при прохождении в некоторый момент времени сквозь ствол разряда реагирующей среды с нормальным, т.е. соответствующим термодинамически обусловленному распределению, ансамблем частиц, происходит генерация химически активных соединений (возбужденных и ионизированных) согласно рассмотренным выше закономерностям. Стимуляция углерод-углеродных связей,

высокое производство атомарного кислорода в возбужденных состояниях, а также образование промежуточных активных комплексов вида продуктов механизмов (1) – (3) приводит к увеличению мгновенной скорости горения, что приблизительно осесимметрично относительно разрядного столба сдвигает фронт пламени и изотермы зоны максимума реакций, в том числе – против направления потока. Хотя массообмен между телом разряда и присоединенной зоной возбуждения-ионизации против потока весьма затруднен из-за анизотропно низкой подвижности соответствующих частиц, скорость перемещения характерных изотермических и изокинетических поверхностей против потока происходит со скоростью звука и выше (в случаях развития местных детонаций и/или политропного пламени). При этом рассматриваемые скорости движения потока (менее 100 м/с), разумеется, не могут компенсировать скорость распространения возмущений. Значительную роль в энергообмене при этом играет резко возрастающий в стволе и присоединенных участках лучистый перенос энергии, свойственный как высокоэнергетическим газовым разрядам, так и вообще средам с высоким содержанием возбужденных частиц.

Таким образом, происходит локальная перестройка течения вверх по потоку вблизи разряда, сопровождающаяся увеличением концентрации продуктов сгорания и снижением – нерасщепленных метильных радикалов. Вследствие этого спустя некоторое время в тело разряда и присоединенную зону поступает реагирующая среда пониженной реакционной способности, которая при взаимодействии со свободными электронами генерирует меньшее количество активных частиц, что в свою очередь приводит к снижению интенсивности лучистого энергообмена, понижению общей реакционной способности смеси и уменьшению скорости горения. Описанное состояние является состоянием неустойчивого равновесия с периодическим криптонестационарным процессом, обусловленным электронным возбуждением смеси, невозможным для обыкновенного термического горения.

Для верификации вышеизложенной гипотезы были проведены дополнительные численные эксперименты по изучению структуры пламени в непосредственной окрестности разряда с повышенной плотностью расчетной сетки и малым шагом по времени. Результаты расчетов представлены на рис. 3.

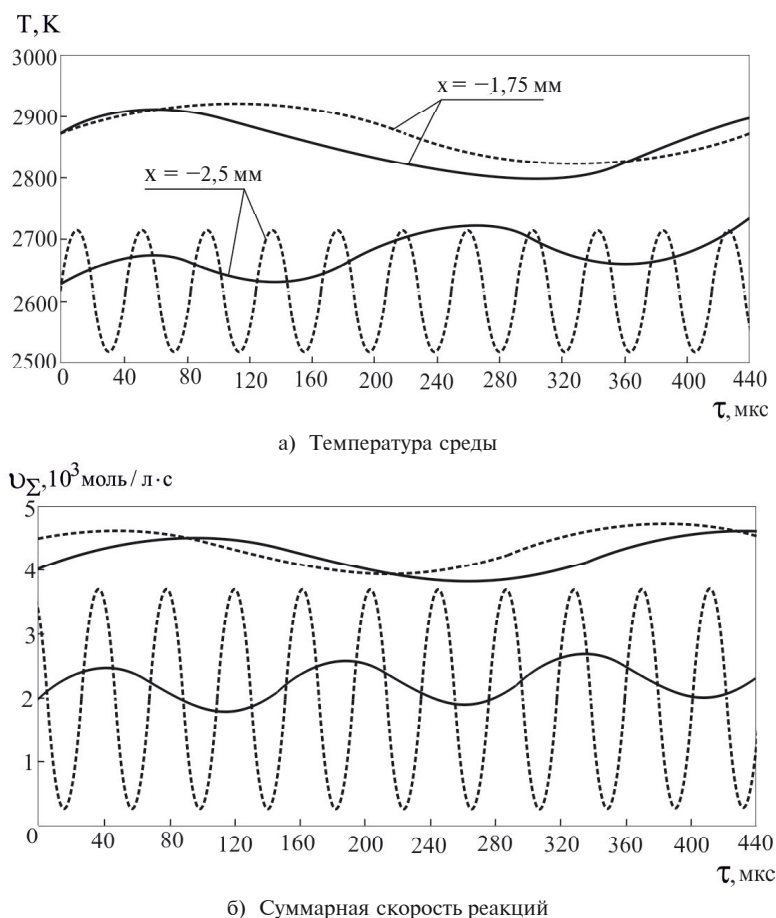


Рис.3. Результаты моделирования течения в окрестности разряда

Как следует из анализа полученных результатов, пульсации температуры и концентраций слабо выражены в более близком к разряду сечении, где наблюдается относительно постоянство условий и основной вклад в реакционную кинетическую схему вносят электронные и термические реакции. Это вполне согласуется с соотношением вероятностей реакций электронного/термического типа и реакций, индуцированных излучением, для осредненных по ансамблю энергий частиц.

В более удаленном сечении с пониженной температурой, напротив, наблюдаются более выраженные пульсации температурного поля и суммарной скорости реакций даже при использовании огрубленной модели с ограниченной зоной лучистой инициации реакций (сплошные линии). При учете нелинейного характера рассеивания и возможности иницирования реакций за пределами вторичной ионизационной зоны наблюдаются пульсации с периодом ≈ 40 мкс, причем температурные и концентрационные пульсации сдвинуты относительно друг друга на 28 мкс. Это, с учетом характерного времени релаксации колебательных температур и средней теплопроводности среды в

зоне реакции, соответствует описанному выше эффекту периодической перестройки течения под воздействием иницирующего влияния лучистого энергообмена. Следует также отметить существенно большую относительную амплитуду колебаний суммарной скорости реакции в сечении $x = -2,5$ мм по сравнению с температурной (188 К или 7,2% относительно средней температуры; 3360 моль/л·с или 161,2% относительно средней суммарной скорости реакции). Очевидно, процесс периодической перестройки потока сопровождается большим количеством взаимно компенсационных эндо- и экзотермических реакций с незначительным преобладанием последних, что и обуславливает некоторое увеличение температуры по сравнению с полностью стационарным режимом горения.

Выводы

В ходе численных экспериментов по изучению влияния на реагирующую среду постоянного дугового и СВЧ-разряда с различными параметрами и химическим составом среды в месте размещения разрядников, были выявлены криптонестационарные эффекты, связанные с

характерными реакциями возбужденных частиц, не наблюдаемых при термическом горении, а также лучистым энергообменом вблизи разрядной зоны. Также следует отметить наличие взаимосвязи между обнаруженным криптонестационарным эффектом и минимумом производства NO за счет блокировки механизма в обоих направлениях от ствола разряда. Дальнейшие исследования процессов предполагается проводить с использованием более детализированной кинетической схемы, максимально мощных вычислительных станций, а также планируется проведение натуральных экспериментов по изучению химического состава газа вблизи разряда.

Литература

1. Долматов, Д.А. Регулирование воздушного горения углеводородов разрядами малой длины [Текст] / Д.А. Долматов // Вестник двигателестроения. — 2011. — №2. — С. 41 — 51.

2. Влияние электрического поля на концентрационные пределы распространения пламени

пропана в воздухе [Текст] / А.Ф. Пантелеев, Г.А. Попков, Ю.Н. Шебеко и др. // Физика горения и взрыва. — 1991. — № 1. — С. 26 — 28.

3. Долматов, Д.А. Химическая кинетика реакций возбужденных частиц при слабой ионизации среды [Текст] / Д.А. Долматов, А.В. Кукурудза, М. Хадживанд // Авиационно-космическая техника и технология. — 2012. — 8/95. — С. 73 -78.

4. Максимов, Н.Н. Исследование распространения пламени в электрическом поле [Текст] / Н.Н. Максимов, Н.А. Медведев, М.П. Михеев // Физико-технические проблемы. — Чебоксары, 1969. — С. 34—36.

5. Долматов, Д.А. Метод формирования детализированной кинетической схемы при воздушном горении керосина [Текст] / В.А. Богуслаев, Д.А. Долматов // Авиационно-космическая техника и технология. — 2012. — 10/97. — С. 113 -117.

Поступила в редакцию 3.07.2014

В.О. Богуслаев, А.І. Долматов, Д.А. Долматов, А.В. Кукурудза. Анізотропне розповсюдження електромагнітної стимуляції в рухомому реагуючому середовищі

Стаття присвячена числовому моделюванню стимульованих електричним розрядом стаціонарних гомогенного полум'я метано-повітряного типу. Встановлено наявність анізотропних щодо ліній току середовища ефектів, що проявляють себе у різноманітній характері розповсюдження збуджених та іонізованих часток в площині, що є перпендикулярною до вісі розряду. Досліджено первинні та вторинні реакції на різноманітній відстані контрольного розрізу від вісі розряду, виявлено принципові розбіжності у генерації — витратах найважливіших реагентів та характері пульсацій полів параметрів у зоні розряду.

Ключові слова: електричний розряд, збуджені частки, пульсації температури, перебудова кінетичної схеми, надмірне утворення реагентів.

V.A. Boguslaev, A.I. Dolmatov, D.A. Dolmatov, A.V. Kukurudza. Propagation anisotropy of electromagnetic stimulation in the reacting moving domain

The article is dedicated to numerical investigation of methane — air stationary flame which is stimulated by arc discharge. There has been discovered some anisotropic effects that lead to difference in ion and excited particles propagation in normal to discharge axis cut. The primary and secondary reactions on different distance from arc axis have been studied, the principal difference between control components generation-consuming and parameter filed pulsation for difference distance was discovered.

Key words: electrical discharge, excited particle, temperature pulsation, kinetic scheme change, reagent overproduction.