

АНАЛИЗ ЭНТРОПИЙНЫХ ВКЛАДОВ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОБЛАСТИ РАВНОВЕСНОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ ИОНИЗАЦИИ КОМПОНЕНТОВ В ПОТОКЕ РЕАГИРУЮЩЕЙ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

АННОТАЦИЯ

На основе представленных фрагментов модифицированной математической модели процессов переноса в многокомпонентной реагирующей среде – газофазной смеси взаимодействующих соединений и радикалов группы элементов H-N-O проведены исследования и анализ влияния состояний равновесной ионизации компонентов на интенсивность процессов теплопереноса в структуре турбулентного потока газофазного горения. Проведен сравнительный анализ результатов численных решений с данными существующих моделей.

На фоне исследуемых процессов газодинамического переноса в турбулентной структуре потока с химической неоднородностью проанализированы зависимости тепловых вкладов равновесной ионизации компонентов, распределений электропроводимости и структурной неоднородности (радиусов Дебая) формируемой ион-электронной структуры, сформулирована гипотеза о механизме теплопереноса в среде слабоионизированного состояния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические исследования неравновесных состояний газовых компонентов, анализ параметров макропереноса и комплексов физико-химических реакций в зонах интенсивных тепловых потоков представляют существенный научный интерес для ряда фундаментальных областей и направлений изучения релаксационных процессов в молекулярной газовой динамике, физике высокотемпературных процессов и состояний, химической и физической кинетике, теории релаксационных процессов [1–3].

Наиболее важными областями исследований с точки зрения практического использования результатов, представляются направления изучения процессов переноса в реагирующих средах различного компонентного и фазового состояний с учетом совокупности физико-химических реакций в пограничном слое разложения. К проблемным задачам данной области следует отнести исследования в теории процессов твердо- и газофазного горения и детонации с оценкой тепловой устойчивости фронта и условий переходных режимов, процессов тепловой деструкции (абляции, пиролиза, сублимации и др.) конденсированных материалов и диффузионной неустойчивости горения воспламеняемых (активных) газофазных сред и смесей [1,4].

Известно [2], что процессы горения газовой фазы рабочей смеси (или продуктов разложения среды исходного конденсированного состояния), в ряде случаев, сопряжены с явлениями формирования

свойств электропроводимости, электростатической напряженности и потенциала.

Температурный механизм активации данных процессов реализуется в создании необходимых термодинамических условий реакций расщепления связей в структуре нейтральных атомов и молекул, протекающих с формированием неравновесной области ионизированного состояния.

Исследования структуры источника горения позволяют изучать динамические характеристики пограничного слоя реакций, ширины и толщины данного слоя, характеристики интенсивности и градиентов переноса, а также непосредственно параметры ионизированного состояния: скорость образования и потоков переноса электронов, концентрацию свободных носителей, характеристики процессов ион-электронной рекомбинации и релаксации [4,9,10], условия их взаимодействия и взаимного влияния.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЙ

Известные алгоритмы и модели [9–11] рассматривают процесс термической ионизации как некоторое автомодельное явление изменения нейтральной структуры молекул и атомов, не имеющее обратного влияния на исходный генерирующий процесс и протекающее в условиях адиабатической изоляции.

При этом существуют немногочисленные варианты моделей переноса в ион-электронной области [1], учитывающие процессы конвекции и диффузии многокомпонентной ионизированной среды, основанные на применении аппарата молекулярной газодинамики — аналитических представлений столкновительных интегралов Больцмана [2].

В работе предложен вариант сквозной математической модели процессов переноса в реагирующей газофазной смеси, учитывающей турбулентную динамику изменения коэффициентов и характеристик переноса, тепловые вклады химических реакций и кинетические особенности процессов формирования ион-электронного континуума в области термической ионизации.

В двумерной системе декартовых координат $\{X, Y\}$ рассматривается процесс формирования вязкого, высокотемпературного течения молекулярного водорода H_2 с диссоциацией и окислением в двухкомпонентной среде смеси кислорода O_2 и азота N_2 (воздуха) с учетом схемы кинетических механизмов диссоциации молекул N-N, O-O, реакций замещения

и формирования первичных связей атомов N-O в условиях процесса газозафазного горения с выделением особенностей кинетических механизмов организации внутренней ион-электронной структуры компонентов при термической ионизации.

Формируемая система определяющих уравнений процесса состоит из динамически связанных подсистем дифференциальных законов переноса:

– уравнений газовой динамики вязкой, сплошной среды в постановке Навье-Стокса с дополнительным включением уравнения гипотезы переноса турбулентной вязкости;

– уравнений сохранения концентраций компонентов с учетом турбулентных диффузионных процессов и реакций химической кинетики;

– уравнений процессов формирования ион-электронной структуры в области сплошного течения с выделением кинетических особенностей и тепловых эффектов явлений термической ионизации.

2.1. Особенности математического аппарата и алгоритма реализации предлагаемой модели

В данном разделе приведены особенности алгоритмической схемы решения уравнения переноса тепловой энергии (энтальпии) и соотношения теории равновесной термической ионизации.

Для данных исследований немаловажным фрагментом модели является рассмотрение турбулентного характера движения потока. Для сжимаемых жидкостей в условиях горения в моделях необходимо применение, по возможности, предельно экономичных схем, обеспечивающих при этом достаточно высокую точность.

В решении поставленной задачи предлагается использовать однопараметрическое уравнение для турбулентной вязкости в форме дифференциальной модели Болдуина-Ломакса [3,6], которая в отличие от известной и широко применяемой трехпараметрической k - ε -модели Колмогорова—Прандля [4] обладает преимуществом физической выраженности членов уравнения параболического типа, а следовательно, возможностью эмпирического выбора наиболее экономичной схемы численной реализации алгоритма. В результате анализа ряда схем решения уравнений параболического типа выбор был остановлен на алгоритме П. Лакса с аппроксимацией вязкостных членов центральными разностями.

Турбулентные составляющие коэффициентов переноса определялись в соответствии с зависимостью:

$$\tilde{f} = f(T) \frac{\tilde{v}}{v(T)}, \quad (1)$$

где $f = [\lambda, D]^T$ — транспонированная матрица-вектор коэффициентов переноса; ламинарные составляющие коэффициентов переноса тепла и массы $\lambda(T)$, $D(T)$ определялись с применением табличных распределений значений коэффициентов от температуры и зависимостей типа формулы Сазерленда [8].

Подробно рассмотрим уравнение переноса энтальпии в основной системе законов сохранения.

Данное уравнение запишется в виде дифференциальной формы закона Фурье-Кирхгофа.

Для исследуемой задачи анализа многокомпонентного реагирующего течения предлагается структуру решения данного уравнения представить в виде следующей процедуры:

$$c_p \rho \frac{DT^{(1)}}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \left[\frac{\partial}{\partial X} \left(\tilde{\lambda} \frac{\partial T}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\tilde{\lambda} \frac{\partial T}{\partial Y} \right) + \frac{1}{Y} \frac{\partial}{\partial Y} \left(\tilde{\lambda}_Y \frac{\partial T}{\partial Y} \right) \right] + \sum_k \sigma_k(\tilde{v}, T) \frac{dW}{dr_k}, \quad (2)$$

$$c_p \rho \frac{DT^{(2)}}{Dt} = c_p \rho \frac{DT^{(1)}}{Dt} - \sum_a \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \tau_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} H[\tau_1 - t] \right) h_a \right] - \left(\frac{\partial T}{\partial X} + \frac{\partial T}{\partial Y} + \frac{1}{Y} \frac{\partial}{\partial Y} (YT) \right) c_{p\alpha} J_\alpha + \left[c_\alpha \left(\frac{\partial n_e}{\partial t} - \tau_2 \frac{\partial^2 n_e}{\partial t^2} H[\tau_2 - t] \right) I_\alpha \right]. \quad (3)$$

На втором этапе — уравнение (3), распределение температуры (решение (2)) уточняется суммой компонентных вкладов тепловой энергии химических реакций, массопереноса и тепловых потоков термической ионизации. Существование решений уравнения энтальпии в форме расщепления (2,3) доказано в работах А.А. Самарского, А.Н.Тихонова.

Показательным примером реализации подобного алгоритма является решение задачи о двумерных термоконвективных возмущениях в газозафазной среде, предложенное У. Харлоу в 1973 году.

Значения времени релаксации процессов τ_1, τ_2 определяются из анализа экспериментальных распределений как значения, соответствующие времени установления предельного значения концентрации компонента или плотности электронов [1,9].

Очевидно, что величины τ_1, τ_2 также являются функциями температуры и давления.

Рассмотрим условия термической ионизации компонентов газовой фазы. В соответствии с теорией М. Саха [2] для данного процесса справедливы аналитические выражения, следующие из решения релаксационного уравнения Больцмана:

$$K_P^{(n)}(\hat{T}) = \frac{g_{n-1}}{2g_n} \left(\frac{2\pi}{m_e} \right)^{3/2} \cdot \frac{\hbar^3}{\hat{T}^{5/2}} \exp\left(\frac{I_n}{\hat{T}} \right), \quad (4)$$

и степени ионизационного насыщения (степени ионизации):

$$\xi(\hat{T}, p) = \frac{n_e}{N} = \frac{1}{\sqrt{1 + pK_P^1(\hat{T})}}. \quad (5)$$

При этом скорость изменения количества свободных носителей определится сложной функцией аргументов:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t}(\hat{T}, p) = \frac{\partial n_e}{\partial \hat{T}} \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \frac{\partial n_e}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (6)$$

Таким образом, плотность электронов и скорость ее изменения зависят от приведенной температуры среды \hat{T} и давления p , которые, в свою очередь, являются определяющими величинами газодинамического состояния среды.

Процесс релаксации в ион-электронной структуре газовой фазы описывается эволюционным уравнением вида [9]:

$$\frac{\partial \hat{n}_e}{\partial t}(\hat{T}, p) = \frac{\partial n_e}{\partial t}(\hat{T}, p) - \beta n_e^2(\hat{T}, p), \quad (7)$$

где β — коэффициент рекомбинации электронов и ионов, $\text{м}^3/\text{с}$.

Оценка структурных и динамических изменений в области процессов термической ионизации компонентов в период релаксации проводилась на основе анализа расчетных распределений электропроводности [2,11]:

$$\Sigma(\hat{T}, p) = \frac{\bar{\lambda} e^2}{m_e w_e} \hat{n}_e(\hat{T}, p), \quad (8)$$

и функции размеров дебаевских сфер [11]:

$$r_D^2(\hat{T}, p) = \frac{k\hat{T}}{8\pi e^2 \hat{n}_e(\hat{T}, p)}, \quad (9)$$

функционально зависящих от формируемой плотности электронов и параметров состояния.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

На первом этапе исследований были проведены операции предварительного вычислительного эксперимента. Целью данных исследований явился анализ работоспособности созданного алгоритма и программного комплекса модели процессов переноса в целом.

На рис. 1 и в табл. 1 приведены некоторые результаты проведенного анализа.

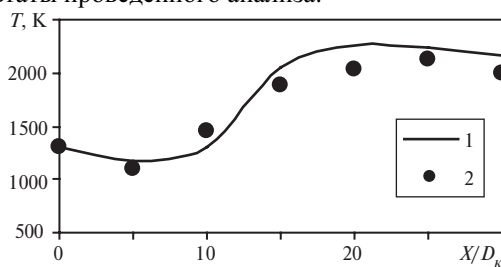


Рис. 1. Графики распределений статической температуры вдоль оси симметрии течения: 1 — расчет по предлагаемой модели; 2 — контрольные точки расчета по модели [4]

В табл. 1 приведены установившиеся значения массовых концентраций некоторых компонентов горения водорода c_k , соответствующие характерным сечениям потока: $X = 4D_k$; $Y = 0.5D_k$, где $D_k = 0.0127$ м. Условия по давлению и температуре формирования струи соответствуют режимам [4]: $T_0 = 1275$ К, $u_0 = 950$ м/с; $p_0 = 10^5$ Па.

Таблица 1. Сравнительный анализ массовых концентраций компонентов в структуре смеси

Компонент	Массовая концентрация	
	— предлагаемая модель	— модель [4]
H ₂ O ₂	$5.42 \cdot 10^{-7}$	$6 \cdot 10^{-7}$
ОН	$0.751 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-6}$
О	$4.17 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$
НО ₂	$1.35 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$

В результате проведенного анализа расчетных значений массовых концентраций определены следующие значения коэффициентов корреляции, составившие: 0.872 — для выборки атомарных компонентов Н, N, O; 0.764 — для смеси молекулярных компонентов и радикалов рассматриваемой системы элементов. Умеренный уровень статистической воспроизводимости результатов модели [4] в предлагаемом варианте является следствием особенностей алгоритма применяемой численной схемы.

На рис. 2, 3 графически представлены результаты исследований распределений логарифмов статической плотности электронов вдоль оси симметрии потока и в поперечном сечении $\lg(n_e)$.

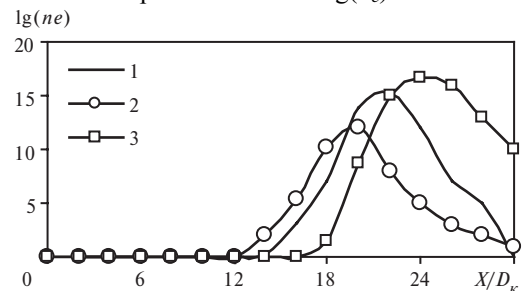


Рис. 2. Графики распределений статической плотности электронов вдоль оси симметрии потока: 1 — $u_0 = 1500$ м/с; 2 — $u_0 = 950$ м/с; 3 — $u_0 = 2500$ м/с

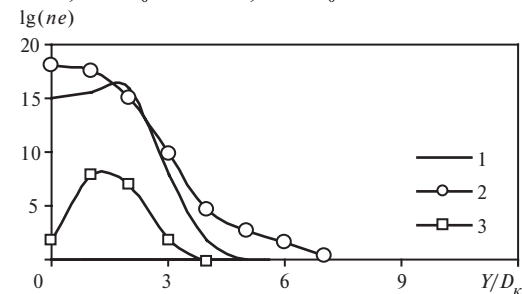


Рис. 3. Графики распределений статической плотности электронов в поперечном сечении (Y) при $u_0 = 950$ м/с: 1 — $X = 14D_k$; 2 — $X = 20D_k$; 3 — $X = 40D_k$

В результате проведенного анализа результатов моделирования для предельных расчетных температур газозафазного горения водорода в воздушной среде 2000...2450 К, логарифм степени ионизации активной смеси соответствует диапазону $\lg(\xi)$ от -8.4 до -5.2 .

Максимальный вклад в количество свободных электронов суммарного ионизированного состояния смеси создается компонентами NO, NO₂ и H₂O₂ с минимальным потенциалом ионизации. При этом

предельная скорость тепловыделения составляет $10^2 \dots 10^5$ Дж/(м³·с).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований подтверждена принципиальная возможность качественного и количественного моделирования процессов теплопереноса в газофазной области горения с учетом явлений термической ионизации.

Реализуемый механизм теплового переноса связан с конвективными и диффузионными процессами передачи энергии активных источников в многокомпонентной реагирующей системе. При этом потоки электронов, обладающих высокой температурой и скоростью, в структуре смеси интенсифицируют теплофизическую и реакционную релаксацию, способствуя выходу характеристик и режимов течения смеси на установившиеся значения.

Показано, что предлагаемый к учету источник энтальпии (при термической ионизации) является значимой величиной периода релаксационного процесса, определяющей тепловое состояние области на начальном этапе формирования реагирующего струйного течения.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

X, Y — координаты исследуемой системы, м;
 \vec{f} — вектор коэффициентов ламинарного переноса;
 $\vec{\tilde{f}}$ — вектор коэффициентов турбулентного переноса;
 $\lambda, \tilde{\lambda}$ — ламинарный и турбулентный коэффициенты теплопроводности смеси, Вт/(м·К);
 D, \tilde{D} — ламинарный и турбулентный коэффициенты массовой диффузии смеси, м²/с;
 $D_{\alpha\gamma}$ — бинарный коэффициент диффузии массы, м²/с;
 $\nu, \tilde{\nu}$ — коэффициенты кинематической ламинарной и турбулентной вязкости смеси, м²/с;
 c_p — изобарная теплоемкость смеси, Дж/(кг·К);
 $c_{p\alpha}$ — изобарная теплоемкость α -компонента, Дж/(кг·К);
 ρ — эффективная плотность смеси, кг/м³;
 T — эффективная температура смеси, К;
 p — эффективное давление смеси, Па;
 $D \dots /Dt$ — полная (субстанциональная) производная:

$$\frac{D}{Dt}(\dots) = \frac{\partial}{\partial t}(\dots) + u \frac{\partial}{\partial X}(\dots) + v \frac{\partial}{\partial Y}(\dots),$$
 u, v — осевая и радиальная компонента скорости, м/с;
 σ_k — компоненты тензора вязких напряжений, кг/м·с²;
 \mathbf{W}_k — главный вектор скорости смеси, м/с;
 φ_α — молярно-объемная концентрация α -компонента, моль/м³;
 τ_1 — время релаксации процесса химических реакций, с;
 τ_2 — время релаксации процесса ионизации, с;
 $H[\dots]$ — единичная функция Хевисайда;
 h_α — тепловой эффект реакции образования α -компонента в химических реакциях, Дж/моль;
 J_α — плотность диффузионного потока массы, кг/м³·с;
 c_α — массовая концентрация α -компонента;
 N_α — полное число частиц (атомов) α -компонента в единице объема (плотность), м⁻³;
 n_e — плотность ионизированных частиц, м⁻³;

\hat{n}_e — плотность ионизированных частиц с учетом процессов рекомбинации, м⁻³;
 I_α — потенциал ионизации α -компонента, Дж;
 x_α — молярная концентрация α -компонента;
 $K_p^{(n)}$ — константа равновесия реакции n -й ионизации, Па⁻¹;
 g_n — статистический вес n -го электрона;
 \hat{T} — приведенная температура (энергия) процесса, Дж;
 k — постоянная Больцмана, $1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К;
 m_e — масса частицы (электрона), $9 \cdot 10^{-31}$ кг;
 h — постоянная Планка, $6.626 \cdot 10^{-34}$ Па·с;
 ξ — степень ионизации (насыщения);
 β — коэффициент рекомбинации электронов и ионов, м³/с;
 Σ — электропроводность, (Ом·м)⁻¹;
 $\bar{\lambda}$ — длина свободного пробега электрона, м;
 e — элементарный заряд, $1.62 \cdot 10^{-19}$ Кл;
 w_e — тепловая скорость электрона, м/с;
 r_D — радиус дебаевской сферы, м.

Подстрочные индексы:

k — номер компонента в тензоре вязких напряжений;
 α, γ — номер компонента смеси;
 e — величина, относящаяся к состоянию электрона.

Надстрочные индексы:

(1), (2) — слагаемые суперпозиции уравнения энергии;
 (n) — порядок процесса ионизации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гришин А.М., Фомин В.М. Сопряженные и нестационарные задачи механики реагирующих сред. Новосибирск, Сиб. отд-ние. 1984. 312 с.
2. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. 1 / Под ред. Л.П. Питаевского. М.: Физматлит, 2002. 616 с.
3. Компаниец В.З., Овсянников А.Л., Полак Л.С. Химические реакции в турбулентных потоках газа и плазмы. М.: Наука, 1979. 312 с.
4. Горение в сверхзвуковом потоке / В.К. Баев, В.И. Головицкий, П.К. Третьяков и др. — Новосибирск, Сиб. отд-ние. 1984. 290 с.
5. Николаев Ю.Н. Обобщенная модель кинетики химических реакций в водородно-кислородных газовых смесях // Физика горения и взрыва. 1994. № 1 (1). С. 66–72.
6. Гуськов О.В., Копченов В.И. Численное исследование структуры течения в канале при сверхзвуковых условиях на входе // Аэромеханика и газовая динамика. 2001. № 1. С. 28–39.
7. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродства к электрону. Справочник. М.: Наука, 1974. 412 с.
8. Таблицы физических величин. Справочник. / Под ред. И.К. Кокоина. М.: Энергоатомиздат, 1976. 1008 с.
9. Калкоут Х.Ф. Релаксационные процессы в плазме // Сб. статей «Ионные, плазменные и дуговые ракетные двигатели»: Пер. с англ. М., Мир, 1961. С. 330–346.
10. Уэлл Р.Дж., Пирс К. Низкотемпературная плазма // Сб. статей «Ионные, плазменные и дуговые ракетные двигатели»: Пер. с англ. М., Мир, 1961. С. 249–261.
11. Dawson J.M., Nakayama T. Kinetic Structure of a Plasma. // Phys. Fluids. № 9. February 1966. P. 252–264.