

УДК 532.5:537.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭГД-СТРУКТУРЫ ТЕЧЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ С НЕОДНОРОДНЫМ ИСТОЧНИКОМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

© 2022 г. П. А. Власов^а, И. Л. Панкратьева^б, В. А. Полянский^{б,*}

^а Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

^б МГУ им. М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт механики, Москва, Россия

*E-mail: ilpan@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 02.07.2022 г.

После доработки 20.07.2022 г.

Принята к публикации 20.07.2022 г.

Рассматривается электрогидродинамическая (ЭГД) структура течения высокотемпературной частично ионизированной химически реагирующей газовой смеси в плоском канале. Примером такого течения может служить факел углеводородного пламени при атмосферном давлении. Известно, что в процессах горения источником заряженных частиц служат реакции хемоионизации. На границах зоны горения, очевидно, имеется сильная пространственная неоднородность источника ионизации. В статье показано, что при этом вблизи границ образуются узкие области объемного электрического заряда (типа биполярных двойных слоев) и даже при отсутствии внешнего приложенного поля появляются кулоновские силы, действующие на поведение горячей среды. Обнаружен режим горения, когда большая часть факела получает положительный заряд.

Ключевые слова: высокотемпературная газовая смесь, молекулярные газы, хемоионизация, объемный электрический заряд, кулоновская сила, электрогидродинамика

DOI: 10.31857/S0568528122600461

Горение различного типа многокомпонентных газовых смесей является одним из самых распространенных технологических процессов, поэтому повышение его эффективности различными способами привлекает большое внимание ученых и инженеров. Один из таких способов связан с воздействием на пламя приложенным постоянным или переменным электрическим полем [1–3]. Однако процесс взаимодействия поля и квазинейтральной частично ионизированной среды, образующей наблюдаемое пламя, до сих пор остается до конца не выясненным. Имеющиеся в литературе ссылки на “ионный ветер” как движущую силу в такой среде недостаточно убедительны. Поэтому представляет интерес первоначальное исследование электрической структуры пламени при отсутствии приложенных внешних электрических полей.

В типичном углеводородно-воздушном пламени, в зависимости от конкретных условий, концентрация заряженных частиц (положительных и отрицательных ионов и свободных электронов) может достигать значений 10^9 – 10^{12} см^{–3}. В настоящее время механизм образования первичных ионов и свободных электронов хорошо известен [4]. Это механизм химической (ассоциативной) ионизации, где наибольший вклад в образование заряженных частиц вносят реакции ионизации с радикалами в основном электронном состоянии. Участие электронно-возбужденных частиц в процессах ассоциативной ионизации не оказывает существенного влияния на конечную концентрацию ионов и электронов [5]. Возможный вклад процессов термической ионизации легкоионизируемых примесей в полную концентрацию заряженных частиц также мал [6]. Процесс ассоциативной ионизации образования первичных ионов и свободных электронов с последующими реакциями переноса заряда и рекомбинации ионов и электронов дает возможность объяснить разнообразие сортов и высокие концентрации заряженных частиц, экспериментально наблюдаемых в бедных, стехиометрических и богатых пламенах.

Химическая (ассоциативная) ионизация — это процесс образования заряженных частиц в результате выделения энергии в реакциях между нейтральными компонентами при образовании химических связей в новом соединении [6]. Образующаяся при этом новая частица должна об-

ладать достаточно низким потенциалом ионизации. В настоящее время существует консенсус, что первичные положительные ионы и свободные электроны образуются в реакции $\text{CH} + \text{O} = \text{CHO}^+ + \text{e}^-$ с последующим быстрым переносом положительного заряда (протона) в реакции $\text{CHO}^+ + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}$ [4]. Ионы гидроксония H_3O^+ преобладают в бедных, стехиометрических и даже не очень богатых углеводородно-кислородных пламенах [7, 8]. В богатых пламенах доминируют ионы C_3H_3^+ [9]. Происхождение ионов C_3H_3^+ до сих пор остается предметом обсуждения. Они могут возникать в быстрых реакциях перезарядки или в реакциях химической ионизации. Наиболее вероятными реакциями образования первичных ионов C_3H_3^+ являются следующие реакции [9]: $\text{CH} + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{e}^-$, $\text{CH}^* + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{C}_3\text{H}_3^+ + \text{e}^-$.

Из приведенного выше обзора видно, что в углеводородном пламени при давлениях порядка атмосферного и температурах в диапазоне 1200–4000 К присутствуют электроны и несколько сортов положительных ионов с концентрацией порядка 10^{10} – 10^{12} см⁻³. Степень ионизации достаточно мала, газовая смесь квазинейтральна, поэтому непосредственным влиянием заряженных частиц на движение среды в отсутствие приложенных электромагнитных полей можно пренебрегать. Кроме того, хорошим упрощением для ЭГД-описания пламени служит объединение всех сортов ионов в одну компоненту газовой смеси с положительным зарядом и коэффициентами переноса, характерными для преобладающего ионного сорта. Для исследования электрической структуры пламени детальный учет всей сложной цепочки химических реакций, приводящей к ионизации, представляется излишним. Эту совокупность реакций можно заменить некоторым эффективным источником заряженных частиц, неоднородно распределенным по всему объему смеси. Неоднородность источника связана с неоднородностью распределения температуры, обусловленной экзотермическими химическими реакциями в области горения. В дальнейшем будет использоваться модельная зависимость источника от пространственной координаты, которая, хотя и приближенно, отражает реальный химический процесс горения, но при этом позволяет выявить основные ЭГД-особенности структуры пламени. Цель настоящей работы – методами ЭГД исследовать механизм экспериментально наблюдаемого воздействия электрического поля на электрически квазинейтральную область горения неравновесных высокотемпературных газовых смесей и тем самым разъяснить природу распространенного в литературе представления об “ионном ветре” как причины этого явления.

1. ОПИСАНИЕ ЭГД МОДЕЛИ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается неизотермическое течение в плоском канале химически реагирующей многокомпонентной газовой смеси, содержащей заряженные частицы двух сортов: с положительным и отрицательным знаком заряда. Движение среды в целом описывается обычными уравнениями сохранения импульса и энергии для вязкой жидкости, в которые добавлена объемная кулоновская сила. В уравнениях для заряженных частиц учитываются диффузия и дрейф в электрическом поле, объемные реакции ионизации и рекомбинации, а также возможные поверхностные электрохимические процессы. Объемный источник заряженных частиц зависит от концентраций реагирующих компонент смеси (радикалов CH и атомов O) и от кинетической скорости реакции хемоионизации, величина которой определяется температурой. В окрестности границ пламени, очевидно, имеются большие градиенты указанных выше параметров, а следовательно, существует сильная неоднородность источника. В работе для анализа ЭГД-характеристик среды пространственная неоднородность задается в виде некоторой модельной ступенчатой функции W . Эта функция $W(x)$, зависящая только от координаты x , поперечной к стенкам плоского канала, показана ниже штриховыми линиями на рисунках с распределениями параметров среды для разных вариантов высоты и ширины ступеньки. Везде далее координата x отнесена к ширине канала L , функция W – к некоторой характерной величине эффективной скорости ионизации w_0 . По порядку величины в области максимальных значений использованная модельная функция соответствует наблюдаемым в экспериментах значениям. Для качественной оценки электрогидродинамических свойств выбрана следующая упрощенная схема течения: область тепловыделения за счет экзотермических реакций располагается между пристеночными холодными слоями, где величина ионизационного источника мала, хотя там и содержатся заряженные частицы из-за переноса их из горячей области.

Запишем систему уравнений для параметров среды, характеризующих ее электрические свойства, а именно, для концентраций ионов и электронов, электрического потенциала и напряженности электрического поля [10]

$$\frac{\partial}{\partial x}(n_i U_i) = W(x) - a n_1 n_2, \quad i = 1, 2 \quad (1.1)$$

$$n_i U_i = \text{sign}(e_i) b_i n_i E - D_i \frac{\partial}{\partial x} n_i \quad (1.2)$$

$$E = -\frac{\partial F}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial x} \right) = -4\pi q, \quad q = \sum_i e_i n_i, \quad e_1 > 0, \quad e_2 < 0 \quad (1.3)$$

$$J_s = \sum_i e_i n_i U_i$$

Здесь величины n_i , U_i , D_i , b_i — соответственно, концентрации ионов ($i = 1$) и электронов ($i = 2$), нормальные к стенкам компоненты диффузионной скорости этих частиц, коэффициенты диффузии и подвижности, F — электрический потенциал, E — поперечная компонента напряженности поля, q — плотность объемного заряда, J_s — плотность полного тока, e_i — заряд частицы. Функция $W(x)$ представляет собой модельную эффективную скорость объемной реакции ионизации, основанную на обработке экспериментальных измерений, a — задаваемая по литературным данным константа скорости объемной электрон-ионной диссоциативной рекомбинации.

При записи уравнений сделано предположение, что процесс стационарный, несущая среда движется по плоскому каналу с постоянной скоростью, вязкими эффектами вблизи стенок пренебрегается. В этих предположениях параметры среды зависят только от координаты x , поперечной стенкам канала.

Рассматриваются два случая стенок: проводящих, идеально каталитических для заряженных частиц, и изолированных, когда отсутствуют потоки заряженных частиц на стенку. Электрический потенциал обеих стенок во всех случаях принимается нулевым. Конструктивно изолированные стенки могут быть металлическими заземленными пластинами, покрытыми непроводящей керамикой. Граничные условия для уравнений (1.1)–(1.3) запишем в виде ($x = 0, 1$ — координаты стенок канала)

$$F(0) = F(1) = 0$$

$$n_i(0) = n_i(1) = 0, \quad i = 1, 2 \quad (\text{для проводников}) \quad (1.4)$$

$$n_i(0)U_i(0) = n_i(1)U_i(1) = 0, \quad i = 1, 2 \quad (\text{для изоляторов})$$

Задача (1.1)–(1.4) решается численно методом установления с явно-неявными разностными схемами с применением матричной прогонки (использовался разработанный авторами пакет CELL).

Уравнения и граничные условия записаны в безразмерном виде с характерными значениями входящих в задачу параметров: концентрации заряженных частиц отнесены к $n_0 = (w_0/a_0)^{-0.5}$, где $w_0 = 10^{15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, $a_0 = 6 \times 10^{-7} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$, скорость ионизации — к величине w_0 , объемный заряд — к en_0 , электрический потенциал к тепловому kT_0/e , поле — к kT_0/eL , $T_0 = 1600 \text{ К}$.

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты решения задачи (1.1)–(1.4) приведены ниже на рисунках для нескольких вариантов задаваемой функции $W(x)$ и условий на стенках.

На рис. 1 показаны распределения концентраций ионов n_1 (линия 1), электронов n_2 (линия 2) и плотности объемного заряда q (линия 3) поперек канала.

На рис. 2 представлены распределения потенциала F (линия 1), нормальных к стенкам компонент напряженности электрического поля E (линия 2) и кулоновской силы $FK = qE$ (линия 3). Штриховая линия 4 на рис. 2 — ступенчатое распределение $W(x)$ с $\max W = 10$ в области горения $0.4 < x < 0.6$. На проводящих стенках заданы нулевые значения концентраций заряженных частиц.

Из рис. 1 видно, что на внутренних границах области горения возникают положительно заряженные слои. Механизм образования областей объемного электрического заряда, связанный с

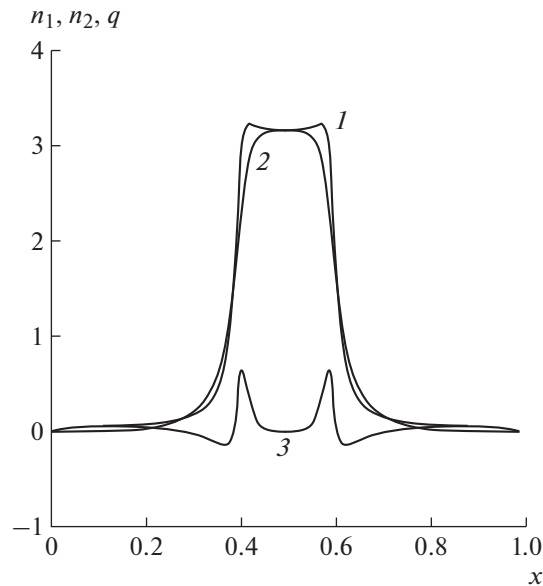


Рис. 1. Распределения концентраций ионов n_1 — 1, электронов n_2 — 2 и плотности объемного электрического заряда q — 3 в поперечном сечении в случае проводящих стенок. $W = 10$ в интервале $0.4 < x < 0.6$, вне этого интервала $W = 0$.

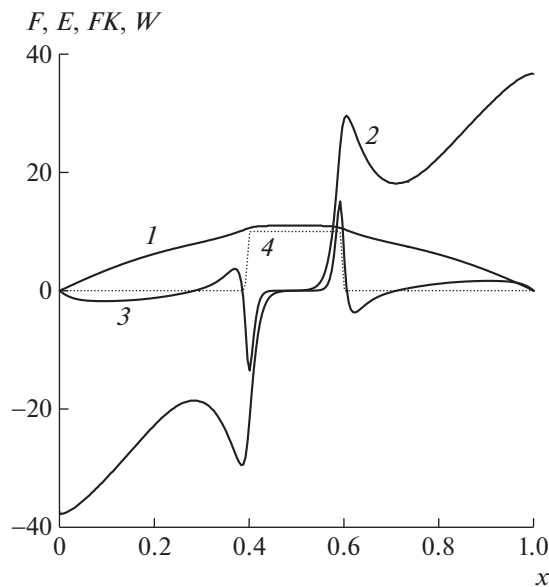


Рис. 2. Распределения электрического потенциала F (линия 1), поперечных составляющих, соответственно, напряженности электрического поля E — 2 и кулоновской силы FK — 3 для проводящих стенок. Штриховой линией 4 показано распределение объемного источника заряженных частиц $W(x)$. $W = 10$ в интервале $0.4 < x < 0.6$, вне этого интервала $W = 0$.

неоднородностью источника, обсуждается в [11]. Внутри области горения среда квазинейтральна — объемный заряд здесь отсутствует. Можно также видеть, что вблизи внешних границ пламени образуются узкие области отрицательного заряда. Фактически на границах формируются двойные электрические слои. Заряженные слои генерируют собственное электрическое поле (рис. 2, линия 2) и собственный неоднородный электрический потенциал (линия 1), при этом в квазинейтральной области величина напряженности поля мала и здесь происходит изменение знака поля. Немонотонное распределение напряженности поля отслеживает наличие

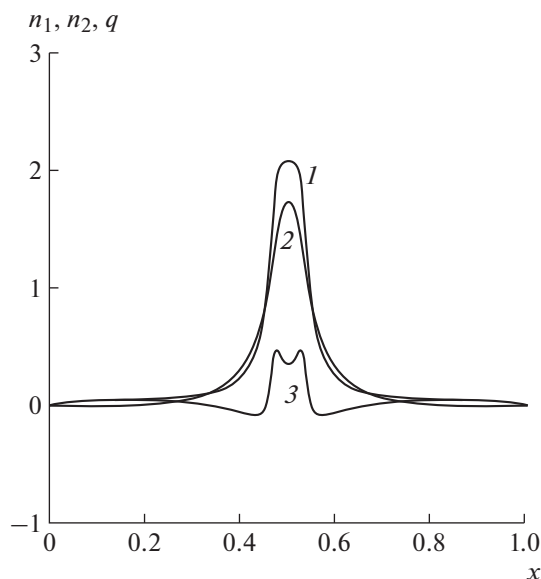


Рис. 3. Распределения концентраций ионов n_1 — 1, электронов n_2 — 2 и плотности объемного электрического заряда q — 3 в поперечном сечении в случае проводящих стенок. $\bar{W} = 4$ в интервале $0.47 < x < 0.53$, вне этого интервала $\bar{W} = 0$.

двойных слоев на границах области горения. Вне этих границ индуцированное поле направлено к стенкам. Линия 3 на рис. 2 представляет распределение кулоновских сил FK , формирующихся в области с неоднородным источником заряженных частиц. У стенок эти силы прижимают среду к ним. Но особый интерес представляет распределение кулоновских сил на границах факела пламени, где располагаются двойные слои. Можно видеть, что вне границ силы направлены внутрь факела, а в областях, прилежащих к границам изнутри, направление сил противоположное. Такая конфигурация сил на границах пламени создает ситуацию, которая может привести к рэлей-тейлоровской неустойчивости состояния среды [12]. Отметим, что при наличии внешних приложенных вдоль канала электрических полей конфигурация областей индуцированного неоднородностью $\bar{W}$ объемного заряда также создает в окрестности границ факела противоположно направленные продольные составляющие кулоновских сил и предпосылки появления сдвиговых гидродинамических неустойчивостей.

Распределения ЭГД-параметров с приграничными двойными слоями, рассмотренные выше, характерны для областей горения с шириной, достаточной для установления внутри области ионизационного равновесия процессов хемоионизации и рекомбинации, когда правая часть в уравнениях (1.1) близка к нулю. В условиях, когда для химического равновесия ширины не хватает, можно наблюдать другой интересный, ранее не отмеченный эффект образования положительно заряженной струи (рис. 3, вариант проводящих стенок). Здесь $\bar{W} = 4$ в диапазоне $0.47 < x < 0.53$, в остальной области $\bar{W} = 0$. Видно, что положительные ионы больше электронов практически во всей области горения (линия 1), квазинейтральность среды отсутствует, небольшое преобладание электронов имеет место только в узких внешних слоях (линия 2). Подобная конфигурация объемного заряда (линия 3) дает возможность продольным внешним сильным электрическим полем управлять поведением тонкой струи горения. Неравновесность ионизационных процессов обуславливает определяющую роль ионов в продольной объемной кулоновской силе, создающей “ионный ветер”, действующий на среду.

Распределения остальных ЭГД-параметров в случае тонкой области горения и проводящих стенок показаны на рис. 4. Поперечная составляющая напряженности индуцированного электрического поля (линия 2) обращается в нуль только в одной точке в середине струи. Отметим, что высота ступеньки ($W_{\max} = 10$ на рис. 1, 2, $W_{\max} = 4$ на рис. 3, 4) влияет только на количественные характеристики ЭГД параметров, качественная картина распределений не меняется. Существенным является только ширина реагирующей зоны.

Влияние изолированных стенок канала можно видеть на рис. 5, 6. Здесь представлен расчет с граничными условиями (1.4) для изоляторов и параметрами источника $W(x)$ с $\max W = 4$ в широ-

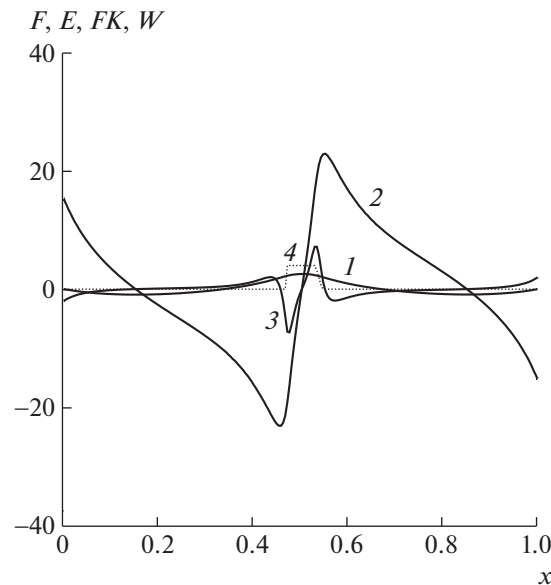


Рис. 4. Распределения электрического потенциала F (линия 1), поперечных составляющих, соответственно, напряженности электрического поля E – 2 и кулоновской силы FK – 3 для проводящих стенок. Штриховой линией 4 показано распределение объемного источника заряженных частиц $W(x)$. $W = 4$ в интервале $0.47 < x < 0.53$, вне этого интервала $W = 0$. $\text{Max } F = 10.7$ при $x = 0.5$.

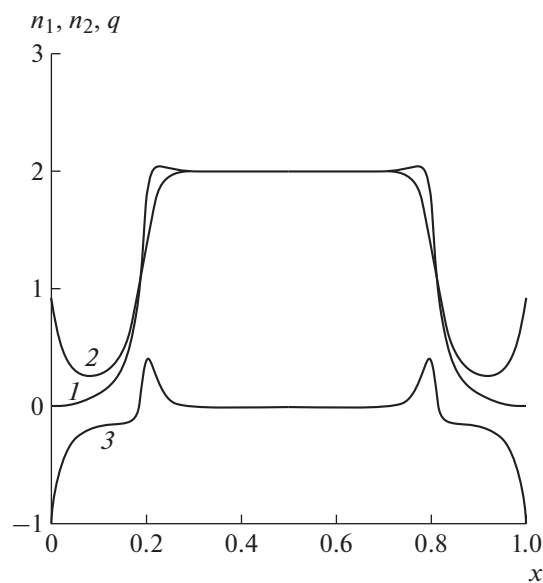


Рис. 5. Распределения концентраций ионов n_1 – 1, электронов n_2 – 2 и плотности объемного электрического заряда q – 3 в поперечном сечении в случае изолированных стенок. $W = 4$ в интервале $0.2 < x < 0.8$, вне этого интервала $W = 0$.

кой области $0.2 < x < 0.8$. Видно из рис. 6, что у диэлектрических стенок канала, как и следовало ожидать, образуются вследствие большой подвижности электронов отрицательно заряженные слои в холодной по сравнению с факелом газовой смеси, при этом изменяются (по сравнению с проводящими стенками) знак объемного пристеночного заряда (линия 3 на рис. 5) и направление поперечной составляющей напряженности индуцированного поля (линия 2 на рис. 6).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что вблизи границ пламени, где имеются большие градиенты источника заряженных частиц, образуются области пространственного электрического заряда и возникают (даже в

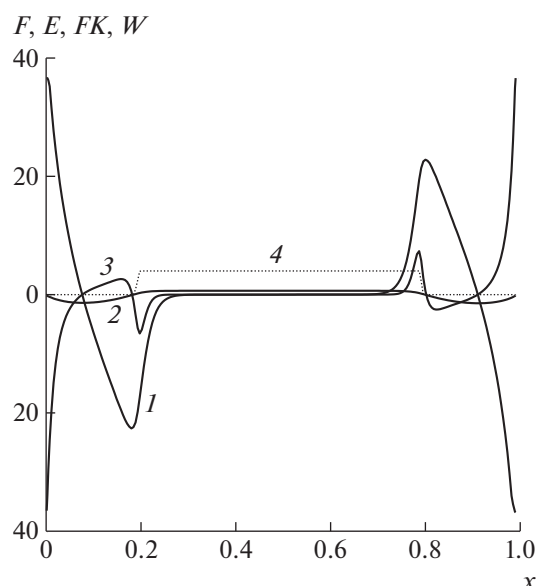


Рис. 6. Распределения электрического потенциала F (линия 2), поперечных составляющих, соответственно, напряженности электрического поля E — 1 и кулоновской силы FK — 3 для изолированных стенок. Штриховой линией 4 показано распределение объемного источника заряженных частиц $W(x)$. $W = 4$ в интервале $0.2 < x < 0.8$, вне этого интервала $W = 0$.

отсутствие внешних приложенных электрических полей) кулоновские силы, влияющие на поведение пламени.

Также обнаружен эффект положительной зарядки большей части горячей струи в условиях, когда ширина струи недостаточна для установления ионизационного равновесия в области горения. Дано физическое объяснение распространенного в литературе представления об “ионном ветре” как причины наблюдаемого в эксперименте воздействия внешнего сильного электрического поля на пламя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ватажгин А.Б., Лухтер В.А., Сенин В.А., Шульгин В.И. Влияние электрического поля на эмиссию окислов азота и структуру диффузионного ламинарного пропанового пламени // Изв. РАН. МЖГ. 1995. № 2. С. 13–23.
2. Karnani S., Dunn-Rankin D. Detailed characterization of DC electric field effects on small non-premixed flames // Combust. Flame. 2015. V. 162 (7). P. 2865–2872.
3. Gan Y.H., Wang M., Luo Y.L., Chen X.W., Xu J.L. Effects of direct-current electric fields on flame shape and combustion characteristics of ethanol in small scale // Adv. Mech. Eng. 2016. V. 8 (1). P. 1–14.
4. Calcote H.F. Mechanisms for the formation of ions in flames // Combust. Flame. 1957. V. 1 (3). P. 385–403.
5. Schofield K. The enigmatic mechanism of the flame ionization detector: Its overlooked implications for fossil fuel combustion modeling // Prog. Energy Combust. 2008. V. 34. P. 330–350.
6. Lawton J., Weinberg F.J. Electrical aspects of combustion. Clarendon Press. 1969. 355 p.
7. Lewis B., Elbe G. Combustion, flames and explosions of gases / 3rd ed. N.Y.:Academic Press Inc, 1987. 731 p.
8. Brown R.C., Eraslan A.N. Simulation of ionic structure in lean and close-to-stoichiometric acetylene flames // Combust. Flame. 1988. V. 73. № 1. P. 1–21.
9. Chen B., Wang H., Wang Zh., Han J., Alquaity A., Wang H., Hansen N., Sarathy S. Ion chemistry in premixed rich methane flames // Combust. Flame. 2019 V. 202. P. 208–18.
10. Pankratieva I.L., Polyanskii V.A. Modeling electrohydrodynamic flows in slightly conducting liquids // J. Applied Mechanics and Technical Physics. 1995. V. 36. № 4. P. 513–519.
11. Апфельбаум М.С., Полянский В.А. Об образовании объемного заряда в слабопроводящих средах // Магнитная гидродинамика. 1982. № 2. С. 71–76.
12. Панкратьева И.Л., Полянский В.А. Исследование механизмов возникновения неустойчивости в слабопроводящих средах в электрических полях // Изв. РАН. МЖГ. 2015. № 6. С. 63–70.