

文章编号: 1000-8055(2010)02-0326-05

活性粒子对 H_2/Air 混合物燃烧的影响

兰宇丹, 何立明, 丁伟, 郭向阳
(空军工程大学 工程学院, 西安 710038)

摘 要: 建立 H_2/Air 混合物燃烧的化学动力学模型, 计算与分析了在非平衡等离子体条件下, 气体放电产生的活性粒子(O, H)和活性基(OH)在不同当量比下对参与燃烧的组分以及温度和压力的影响, 为航空发动机燃烧室等离子体助燃(PAC)实验研究和实际应用提供理论依据. 计算结果表明等离子体助燃可以提高反应效率、燃烧温度和火焰传播速率, 减少燃烧上升时间, 强烈影响 H_2/Air 混合物燃烧.

关 键 词: 等离子体; 助燃; 化学动力学模型; 活性粒子

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

Study of active particles' influences on combustion of H_2/Air mixture

LAN Yur dan, HE Li ming, DING Wei, GUO Xiang yang

(The Engineering Institute, Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China)

Abstract: The chemical kinetic model of H_2/Air mixture combustion was established in this article. With the non-equilibrium plasma, this paper calculated and analyzed how the active particle (O, H) and radical (OH) produced by gas discharge influenced the components in the combustion, the temperatures and pressures at different equivalent ratios. Therefore, this paper can provide a theoretical foundation for the experimental research and practical application of plasma assisted combustion (PAC) in the aero-engine combustion chamber. The results show that PAC can improve reaction efficiency, combustion temperature and flame spread velocity, reduce the rise time of combustion and strongly influence H_2/Air mixture combustion.

Key words: plasma; assisted combustion; chemical kinetic model; active particles

等离子体助燃(PAC)是航空动力领域中的一项新技术, 通过气体放电, 引起热电离, 光电离, 裂解和重新合成、扩散, 形成局部均匀的带有化学活性组分(活性粒子、离子和激发态分子)的离子化气体, 以此改变等离子体射流及其相邻区域内的燃烧状态, 产生化学和气动双重效应. 其中活性粒子可提高燃烧和点火的效率, 形成开始连锁反应的自由基. 由于自由基的活化能很低, 一旦开始燃烧反应的自由基形成, 后来的连锁反应继续下去简直没有活化障碍, 燃烧速度成倍增长.

根据文献[1-2], 在 CH_4/Air 混合物气体放

电产生的非平衡等离子体活性粒子中, H, O 原子和活性基 OH 对影响 CH_4/Air 混合物燃烧起主要作用. 在持续时间 480ns, 电压 4~6kV 的气体放电条件下, 可电离产生 $(10\sim 22)\times 10^{15} cm^{-3}$ 的活性粒子、离子, 约 4% 的 CH_4/Air 混合物被分解, 电离能量利用率可达 50%, 而发生器功率仅占燃烧总能量的 0.01%, 并不改变燃烧的稳定性. 因此, 本文仅计算等离子体助燃中 H, O 原子和活性基 OH 对 H_2/Air 混合物燃烧过程中参与燃烧的组分以及温度和压力的影响.

然而, 活性粒子在等离子体助燃计算中一直

收稿日期: 2009-02-18; 修订日期: 2009-07-10

基金项目: 国家自然科学基金(50776100)

作者简介: 兰宇丹(1983-), 男, 河南洛阳人, 博士生, 主要从事等离子体点火与助燃数值分析与实验研究.

是一个难题,国外在活性粒子对燃烧反应的影响计算中主要考虑了等离子体助燃对燃料/空气的加热效应^[3,4],针对活性粒子计算的工作较少,因而很难有效分析活性粒子在等离子体助燃中的作用.本文从化学动力学效应的角度,在导入 H₂/Air 混合物的燃烧机理以后,加入了活性粒子(原子,带电离子,电子),对等离子体中的活性粒子在 H₂/Air 混合物燃烧过程中的助燃作用及其影响做了数值计算和分析,为航空发动机燃烧室等离子体助燃实验研究和实际应用提供理论依据.

1 物理模型和计算方法

在 H₂/Air 气体放电非平衡等离子体助燃过程中会发生一系列复杂的、剧烈的物理化学反应,流动中带有气体的高温裂解、回流和湍流^[5].在等离子体流动中进行激烈的化学反应,这些过程强烈耦合在一起相互影响,使计算困难重重,故这里将气体放电非平衡等离子体助燃数学模型建立在静止的 H₂/Air 混合物上.

为了便于运用化学动力学原理进行等离子体助燃的计算,对燃烧过程作如下假设:

- 1) 混合气体及其组分视为理想气体,它们的比定压热容、焓和熵是温度的多项式;
- 2) 燃烧过程是绝热的;
- 3) 空气由 21% 氧气和 79% 氮气组成.

对 H₂/Air 气体混合的各种不同当量比,本文中等离子体助燃的化学动力学机理采用包括 4 种元素(O, H, N, E), 19 种燃烧组分、51 种化学反应的动力学模型^[6].其中包括中性成份 O, O₂, H, H₂, OH, HO₂, H₂O, H₂O₂, O₃, 阳离子 O⁺, O₂⁺, H⁺, H₂⁺, OH⁺, H₂O⁺, 阴离子 O⁻, O₂⁻, H⁻, 而且在建立化学动力学模型时考虑电子对燃烧的影响.

根据 Arrhenius 公式,对于可逆反应,如果正逆反应速率常数均符合 Arrhenius 方程,则有

$$\frac{d\ln k_f}{dT} = \frac{E_f}{RT^2}, \quad \frac{d\ln k_b}{dT} = \frac{E_b}{RT^2} \tag{1}$$

式中 k_f 和 k_b 为正逆反应的反应速率常数, A 为指前因子, m 为无因次温度指数, T 为气体温度, R 为气体常数, E_f 及 E_b 分别为正逆反应的活化能.

由式(1)可知,化学反应速率总是随反应活化能、温度的升高而升高,而且呈强烈的非线性关系,即温度、反应活化能稍有改变,反应速率的改变甚为剧烈.所以温度和反应活化能是影响化学

反应速率的一个敏感因素,成为燃烧中的关键调节量.

H₂/Air 气体混合物有 19 种组分、51 种化学动力学方程,计算时需要考虑所有方程与能量、密度方程联立同时迭代计算.混合物化学动力学与能量、密度迭代方程如下:

$$\Delta \ln n_j - \sum_{i=1}^l a_{ij} \pi_i - \Delta \ln n - \left[\frac{(H_T^\circ)_j}{RT} \right] \Delta \ln T = - \frac{E_j}{RT} \quad (j = 1, \dots, m) \tag{2}$$

$$- \sum_{i=1}^l a_{ij} \pi_i - \left[\frac{(H_T^\circ)_j}{RT} \right] \Delta \ln T = - \frac{E_j}{RT} \quad (j = m + 1, \dots, n) \tag{3}$$

$$\sum_{j=1}^m a_{kj} n_j \Delta \ln n_j + \sum_{j=m+1}^n a_{kj} \Delta n_j = b_k^\circ - b_k \quad (k = 1, \dots, l) \tag{4}$$

$$\sum_{j=1}^m n_j \Delta \ln n_j - n \Delta \ln n = n - \sum_{j=1}^m n_j \tag{5}$$
$$\sum_{j=1}^m \left[\frac{n_j (H_T^\circ)_j}{RT} \right] \Delta \ln n_j + \sum_{j=m+1}^n \left[\frac{(H_T^\circ)_j}{RT} \right] \Delta n_j + \left[\sum_{j=1}^n \frac{n_j (c_p^\circ)_j}{R} \right] \Delta \ln T = \frac{h_o - h}{RT} \tag{6}$$

式中 n_j 为每千克混合物中物质 j 的摩尔数, E_j 为物质 j 的活化能,化学计量系数 a_{ij} 为每千克物质 j 中元素 i 的原子数, b_k° 为给定的每千克总的反应物中元素 i 的原子数, h 为混合物的焓, H_T° 为温度为 T 时反应物的焓, c_p° 为反应物的比定压热容.

参加燃烧反应的各种成分热力学数据是通过最小二乘法拟合出热力学函数关于温度的多项式来计算的,即认为每种反应物质的热力学函数:比定压热容 c_p 、焓 H_T 和熵 S_T 等,都是温度的多项式.对于气体,首先通过气体分子常数 R 计算出热力学函数值,然后化简为温度的多项式形式;而对于非气态物质,由于不能用气体分子常数 R 来计算,因此必须直接化简为温度的多项式形式.对于每种物质,都有两套系数,一个温度范围是 300~ 1000 K,另一个的温度范围则为 1000~ 5000K,在 1000 K 时两套系数算出的值相等,系数见文献[7].

2 计算结果与讨论

考虑到在气体放电产生的非平衡等离子体中 H, O 原子和活性基 OH 在 H₂/Air 混合物等离子体助燃中起主要作用,本文计算主要考虑 H, O

原子和活性基 OH 对燃烧效果的影响, 根据参考文献[8] 气体放电实验中活性粒子的量来设定离子密度. 燃烧过程计算为绝热等容过程, 计算时, H_2/Air 混合气体点火温度起始值为 2000 K, 压强为 1×10^5 Pa 开始迭代计算, 不考虑能量损失和周围的活性颗粒的扩散, 分别计算在正常燃烧和电离度为 0.04 时的等离子体助燃时, H_2/Air 混合物燃烧组分, 温度和压力随不同当量比 (0.7~ 1.1) 的变化, 通过对最终反应物的计算, 分析等离子体中 H, O 原子和活性基 OH 对 H_2/Air 混合气体燃烧的影响. 根据参考文献[8], 当电离度为 4% 时, 设混合物中活性粒子的量 O 为 1%, H 为 2%, CH_3 为 1%, OH 为 0.9% .

H_2/Air 混合物燃烧在正常燃烧和电离度为 0.04 时的等离子体助燃条件下, 燃烧过程中反应物和产物的量随当量比 (0.7~ 1.1) 和反应时间的变化如图 1~ 图 6 所示.

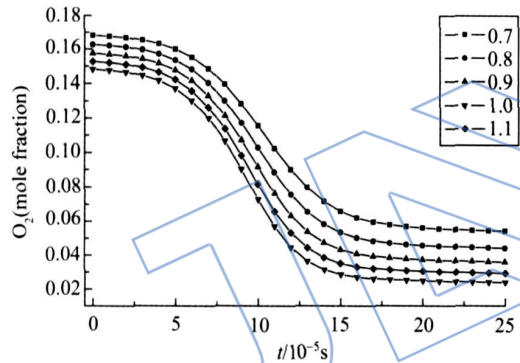


图 1 正常燃烧时 O_2 随时间的变化
Fig. 1 O_2 changes with time during normal combustion

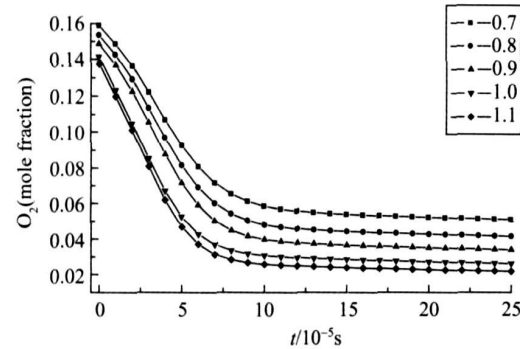


图 2 等离子体助燃时 O_2 随时间的变化
Fig. 2 O_2 changes with time during PAC

图 1~ 图 6 分别为 H_2/Air 混合物在不同当量比下, 有无等离子体助燃时, 燃烧反应物 O_2 , H_2 和产物 H_2O 的量随时间的变化. 由图 1~ 图 6

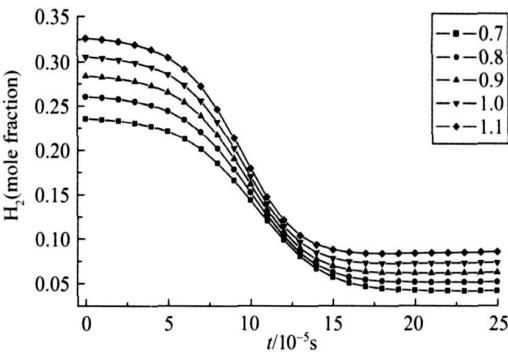


图 3 正常燃烧时 H_2 随时间的变化
Fig. 3 H_2 changes with time during normal combustion

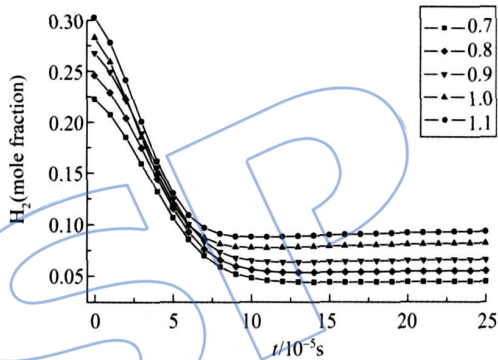


图 4 等离子体助燃时 H_2 随时间的变化
Fig. 4 H_2 changes with time during PAC

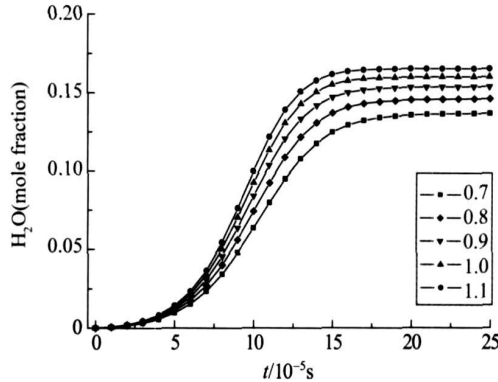


图 5 正常燃烧时 H_2O 随时间变化
Fig. 5 H_2O changes with time during normal combustion

可知, 无论是正常燃烧还是等离子体助燃, 不同当量比下 H_2/Air 混合物计算结果都符合文献[9] 关于 H_2/Air 混合物化学动力学反应理论的推理: H_2/Air 混合物燃烧生成 H_2O , 随着时间的增加, O_2 , H_2 的量减少, H_2O 的量增加, 而且随当量比的增大曲线上移, O_2 , H_2 , H_2O 的量都随之增大, 这是由于随当量比的增大, 参加反应的 O_2 , H_2 的量增加形成的.

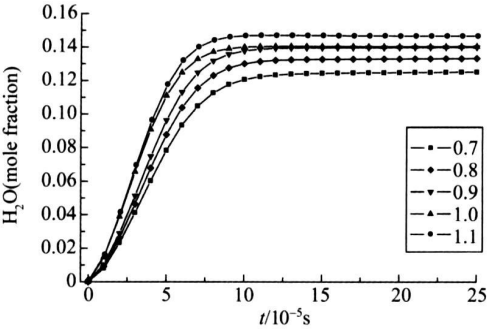


图 6 等离子体助燃时 H₂O 随时间变化

Fig. 6 H₂O changes with time during PAC

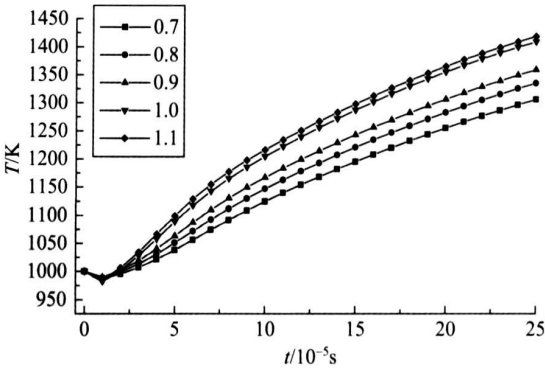


图 8 等离子体助燃时燃烧温度随时间变化

Fig. 8 Combustion temperature changes with time during PAC

但是, H₂/ Air 混合物在等离子体助燃情形下, O₂, H₂, H₂O 的反应速率要比正常燃烧时的反应速率大, H₂/ Air 混合物燃烧时化学反应达到平衡时所用的时间比正常燃烧时的更短. 在正常燃烧时, H₂/ Air 混合物的燃烧化学反应需要 0.2 ms 才能达到平衡, 而在等离子体助燃时, H₂/ Air 混合物的燃烧化学反应仅需要 0.1 ms, 而且点火的延迟时间(压力由初始压力上升到燃烧最高压力的 10% 时所使用的时间)有所减小, 正常燃烧时燃烧延迟 0.1 ms, 而等离子体助燃时燃烧反应延迟要小得多, 立即开始. 可知, H₂/ Air 混合物在不同当量比下, 等离子体助燃时反应物随时间的变化斜率大于正常燃烧时, 可以提高化学反应速率, 加快燃烧反应的进行, 同时具有比正常燃烧更好的燃烧效果, 更短的点火延迟时间.

在等离子体助燃前后, H₂/ Air 混合物的燃烧温度和压力随当量比和时间的变化曲线如图 7~图 10 所示.

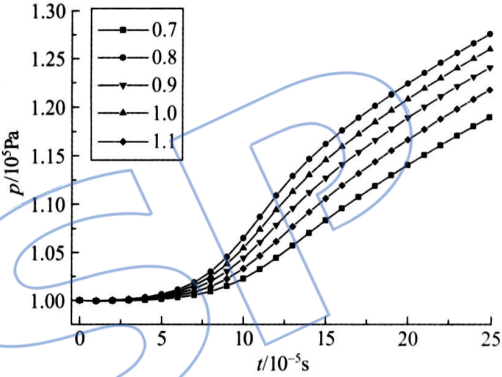


图 9 正常燃烧时压力随时间变化

Fig. 9 Pressure changes with time during normal combustion

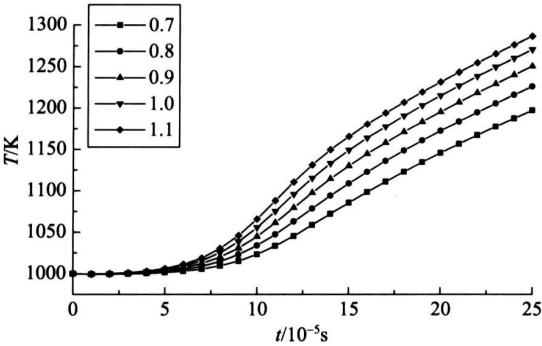


图 7 正常燃烧时燃烧温度随时间变化

Fig. 7 Combustion temperature changes with time during normal combustion

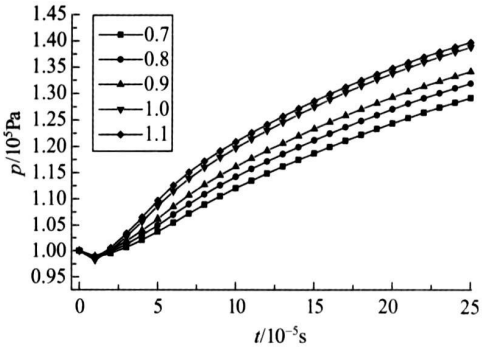


图 10 等离子体助燃时压力随时间变化

Fig. 10 Pressure changes with time during PAC

由图 7~图 10 可以看出, H₂/ Air 混合物的燃烧温度和压力随着反应时间 t 的增长逐渐升

高, 而且随当量比的增加有所上升, 这是由于 H₂/ Air 混合物的燃烧放热过程, H₂/ Air 混合物中反应物总量不变, 当量比增加意味着参加化学反应的 H₂ 的量增加, 燃烧反应放出的能量也就更多, 而混合物的气体常数变化较小, 根据气体状态方程, 燃烧温度和压力随之增加. 在 H₂/ Air 混合物燃烧开始初期表现并不明显, 而且温度和压力会有一定下降, 这是由于在等离子体助燃时, 燃烧初

期的活性粒子较多, 连锁反应进行较快, 其中的一部分为吸热反应, 使吸热暂时大于放热, 温度和压力降低, 但是随着时间的增长, 不同当量比对燃烧温度和压力的贡献也就更大.

由图 7~ 图 10 还可看出, 在不同当量比情况下, H_2/Air 混合物在有等离子体助燃时, 燃烧温度、压力上升时间相对正常燃烧时较早(有等离子体助燃时为 0.01 ms, 正常燃烧时为 0.05 ms), 燃烧温度和压力的最大值也相对较高, 分别多出 130 K, 0.12×10^5 Pa, 但各种情形下温度和压力几乎同时在 0.25 ms 达到最高值. 相对而言, 等离子体助燃时, 混合物燃烧反应速度较快, 压力与温度变化先快后慢, 稳定时间与正常燃烧时大致相同, 这是由于燃烧后期反应物密度减小造成的. 可见, 等离子体助燃可增加 H_2/Air 混合物的反应速率, 提高燃烧效率和火焰传播速度, 使 H_2/Air 混合物燃烧放出更多热量, 使燃烧温度、压力达到更高值, 但对混合物达到平衡时的最终时间影响不大.

3 结 论

根据以上不同当量比情形下, H_2/Air 混合物气体放电产生的非平衡等离子体助燃的动力学模型计算与分析, 可以得出以下结论:

1) 等离子体可以提供燃烧开始的自由基(H , O 原子和活性基 OH), 加快连锁反应的快速进行, 并且连锁反应速度在不同当量比下都提高了;

2) 等离子体中的 H , O 原子和活性基 OH 是活性中间体, 可减少燃料混合气的平均活化能, 增加燃烧反应速率;

3) 等离子体助燃技术, 可以缩短燃烧上升时间和延迟时间, 改善 H_2/Air 燃烧效率.

等离子体助燃是航空动力领域中的一项新技术, 基于等离子体中的活性粒子对燃烧过程的影

响, 因此可以通过控制等离子激励器的参数变化来控制等离子体中活性粒子密度, 调节 H_2/Air 混合物的燃烧速度、效率及反应时间, 达到最佳能效比.

参考文献:

- [1] Kosarev I N, Mintoussov E I, Starikovskaya S M, et al. Control of combustion and ignition of hydrocarbon-air mixtures by nanosecond pulsed discharges [R]. AIAA-2005-3429
- [2] Parish J W, Ganguly B N. Absolute H atom density measurement in short pulse methane discharge [R]. AIAA-2004-182
- [3] Bocharov A N, Bityurin V A, Filimonova E A, et al. Numerical study of plasma assisted mixing and combustion in non-premixed flows [R]. AIAA-2004-1017
- [4] Tsuchiya S, Negishi J, Ohkawa Y, et al. Ignition characteristics of laser induced plasmas in supersonic combustion [R]. AIAA-2003-5049
- [5] 杨阳, 邢建文, 乐嘉陵, 等. 湍流燃烧模型对氢燃料超燃室流场模拟的影响 [J]. 航空动力学报, 2008, 23(4): 605-610.
YANG Yang, XING Jianwen, LE Jialing, et al. Effect of turbulent combustion model on simulation of hydrogen supersonic combustion [J]. Journal of Aerospace Power, 2008, 23(4): 605-610. (in Chinese)
- [6] Gordon S, McBride B J. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet detonations [R]. NASA SP-273, 1971
- [7] Shirkov V M, Konstantinovskij R S. Kinetic model of ignition of hydrogen-oxygen mixture under conditions of non-equilibrium plasma of the gas discharge [R]. AIAA-2005-987
- [8] Bozhenkov S M, Kykaev E N, Kuksin A Y, et al. Plasma control of ignition of hydrogen-air and methane-air mixtures [R]. AIAA-2003-5045
- [9] 严传俊, 范玮. 燃烧学 [M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005