

А.С. Петрусёв

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Трёхмерная численная модель для химически активного тлеющего разряда в воздухе

Предложена трёхмерная численная модель тлеющего разряда постоянного тока в воздухе в геометрии с бесконечными плоскопараллельными электродами. Модель включает уравнения неразрывности для концентраций электронов и ионов, связанные с уравнением Пуассона для электрического потенциала. В модели учтены процессы ионизации, электрон-ионной рекомбинации, а также колебательного возбуждения молекул воздуха. Для описания колебательной кинетики молекул воздуха учтены процессы колебательного возбуждения электронным ударом, колебательного обмена и колебательно-поступательной релаксации. Описана конечно-разностная схема решения кинетических уравнений модели. Результаты получены для трёхмерной модели тлеющего разряда в воздухе при давлении 5 Торр и ЭДС 2000 В. Проанализированы полученные поля распределения электронной температуры и заселённости колебательных уровней азота.

Ключевые слова: тлеющий разряд, ионизация, электрон-ионная рекомбинация, колебательное возбуждение, электронный удар, численная трёхмерная модель, электронная температура, заселённость колебательных уровней.

В работе рассматривается численное моделирование тлеющего разряда постоянного тока в воздухе между двумя плоскопараллельными электродами (рис. 1). Используемая программа является результатом последовательного развития численных моделей, описанных в работах [1–3]. Данная численная модель, построенная на основе диффузионно-дрейфовой модели разряда, позволяет рассчитать параметры тлеющего разряда, согласующиеся с имеющимися экспериментальными данными. В том числе концентрации электронов и ионов как в положительном столбе, так и в приэлектродных областях, распределение напряжённости электрического поля, проводимость газа, плотности тока на электродах, полный ток через разряд и внешнюю цепь. В данной численной модели также добавлен расчёт многокомпонентной диффузии и колебательной кинетики в молекулярном азоте (N_2), кислороде (O_2) и окиси азота (NO) в тлеющем разряде. Это позволяет предсказать распределение указанных молекул по колебательным уровням, что представляет интерес для использования в различных аэрокосмических приложениях и лазерной физике.

Модель процесса включает в себя трёхмерные уравнения неразрывности элект-

ронной и ионной концентраций, уравнение Пуассона для электростатического поля, уравнение теплопроводности, а также уравнения химической кинетики для колебательно возбуждённых молекул:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div } \Gamma_e = \alpha(|E|) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div } \Gamma_i = \alpha(|E|) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e$$

$$\Delta \varphi + \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e) = 0$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \nabla T) + Q$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \text{div } J_k = W_k, \quad k = 0 \dots m$$

$$W_k = \frac{M_k}{Na} \left[\sum_s K_s^+ \prod_{j_s} n_{j_s} - \sum_s K_s^- \prod_{j_s} n_{j_s} \right]$$

$$\frac{M_\Sigma^2}{\rho} \sum_{j \neq k} \frac{Y_j J_k - Y_k J_j}{M_k M_j D_{kj}} = \frac{\nabla M_\Sigma Y_k}{M_k}, \quad k = 1 \dots m$$

$$D_{jk} = \frac{3}{8\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\hat{R}T(M_k + M_j)/(M_k M_j)}}{n \sigma_{kj}^2 \Omega^{(1,1)}(T/\varepsilon_{jk})}$$

С краевыми условиями:

$$z = 0 :$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial z} = 0, \quad \Gamma_e = \gamma \Gamma_i, \quad \varphi = 0; \quad J_{k,z} = 0$$

$$z = H_c :$$

$$n_i = 0, \quad \frac{\partial n_e}{\partial z} = 0, \quad \varphi = V; \quad J_{k,z} = 0$$

$$x = 0, \quad x = d_C :$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0; \quad J_{k,x} = 0$$

$$y = 0, \quad y = d_C :$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial y} = \frac{\partial n_i}{\partial y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0; \quad J_{k,y} = 0$$

Здесь $H_C \times d_C \times d_C$ — размеры расчётной области, $n_e, n_i, \Gamma_e, \Gamma_i$ — концентрации и потоки заряженных частиц, $\alpha(E)$ — первый коэффициент Таунсенда, β — константа рекомбинации, φ — потенциал, T — температура нейтралов, Y_k, J_k , — массовые доли и потоки нейтральных компонентов, D_{jk} — коэффициенты бинарной диффузии, M_k, M^Σ — молярные веса компонентов и смеси, K_j^\pm — константы скорости колебательных и вторичных реакций.

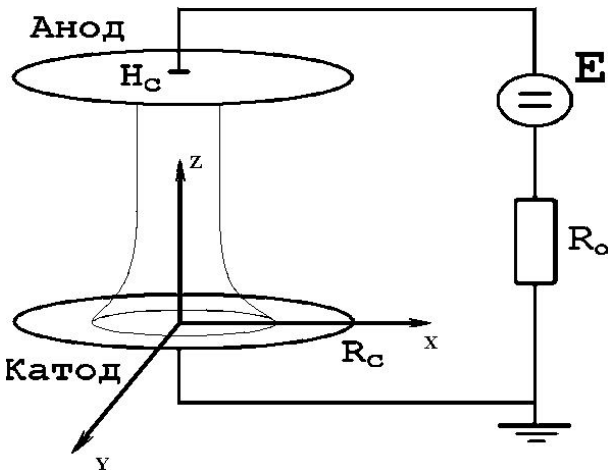


Рис. 1. Схема тлеющего разряда

Учёт электронной температуры производился с помощью эмпирической зависимости, получающейся аппроксимацией экспериментальных данных Таунсенда и Байли [4]: $T_e/T = 14,5 \ln(|E|/p) + 16,0$. Колебательная кинетика моделировалась в рамках поуровневого описания с учётом процессов колебательного возбуждения молекул электронным ударом, колебательного обмена и колебательно-поступательной релаксации. Учитывались 30 колебательных уровней азота и по 2 уровня кислорода и окиси азота. Заселённость колебательных уровней определяется балансом процессов возбуждения колебаний электронным ударом (эВ), перераспределением колебательной энергии между уровнями (VV

обмен) и процессами релаксации. В модели учтена только преобладающая VT релаксация. Кинетическая схема аналогична описанной в [2, 3].

Решение указанной системы уравнений представляет значительные вычислительные трудности [1], связанные с жёсткостью уравнений дрейфово-диффузионной модели, химической кинетики, а также с большим числом химических компонентов и большой размерностью задачи. При этих условиях особое значение имеет вычислительная эффективность алгоритма. В данной работе для решения использована полуживная вычислительная схема, сочетающая вычислительную экономичность с достаточно быстрой сходимостью. Учитывая наличие выделенного направления вдоль оси Z , естественно решать уравнения неразрывности вдоль оси Z более точно, чем в радиальном направлении. Соответствующий алгоритм основан на комбинации прогонки в продольном (ось Z) и релаксации в поперечных (оси X и Y) направлениях. Подстановкой уравнения Пуассона в уравнения неразрывности заряженных частиц и использованием эмпирической зависимости $\delta E/E \approx -\delta n_e/n_e$ удалось ослабить зависимость потоков зарядов и частоты ионизации от напряжённости электрического поля. В результате уравнения неразрывности электронов и ионов приводятся к виду, удобному для численного решения. Аналогичный вид принимают уравнения теплопроводности и Пуассона. Уравнения неразрывности нейтральных компонентов приводятся к виду, удобному для итерационного решения, следуя методике, описанной в [5]:

$$\begin{aligned} & \left(-\bar{\Lambda}_z D_e \Lambda_z + \frac{\alpha_e}{h_x} D_e \Lambda_x + \frac{\alpha_e}{h_y} D_e \Lambda_y \right) \xi_e + \\ & + \frac{e}{\varepsilon_0} \mu_e [(2n_e - n_i) \xi_e - n_e \xi_i] + \\ & + (E\Lambda) \mu_e \xi_e + \left(E \frac{\partial \omega_{ion}}{\partial E} - \omega_{ion} \right) \xi_e + \\ & + \beta n_i \xi_e + \beta n_e \xi_i = f_e - \mu_e n_e f_\varphi, \\ f_e = & (\bar{\Lambda} D_e \Lambda) n_e - (\bar{\Lambda} \mu_e n_e \Lambda \varphi) + \omega_{ion} n_e - \beta n_i n_e, \\ & \left(-\bar{\Lambda}_z D_i \Lambda_z + \frac{\alpha_i}{h_x} D_i \Lambda_x + \frac{\alpha_i}{h_y} D_i \Lambda_y \right) \xi_i + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{e}{\varepsilon_0} \mu_i [(2n_i - n_e) \xi_i - n_i \xi_e] - \\
& - (E\Lambda) \mu_i \xi_i + \left(E \frac{\partial \omega_{ion}}{\partial E} - \omega_{ion} \right) \xi_e + \\
& + \beta n_i \xi_e + \beta n_e \xi_i = f_i + \mu_i n_i f_\varphi, \\
f_i & = (\bar{\Lambda} D_i \Lambda) n_i + (\bar{\Lambda} \mu_i n_i \Lambda \varphi) + \omega_{ion} n_e - \beta n_i n_e, \\
\left(\bar{\Lambda}_z \Lambda_z - \frac{\alpha_\varphi}{h_x} \Lambda_x - \frac{\alpha_\varphi}{h_y} \Lambda_y \right) \xi_\varphi + \frac{e}{\varepsilon_0} (\xi_i - \xi_e) & = f_\varphi, \\
f_\varphi & = - (\bar{\Lambda} \Lambda) \varphi - \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e), \\
\alpha_c \omega_k \xi_k - \left(\alpha_{cz} \bar{\Lambda}_z B_k \Lambda_z - \right. \\
& \left. - \alpha_{cxy} B_k \left(\frac{\Lambda_x}{h_x} + \frac{\Lambda_y}{h_y} \right) \right) \xi_k = \\
& = - \bar{\Lambda}_x J_{k,x} - \bar{\Lambda}_y J_{k,y} - \bar{\Lambda}_z J_{k,z} + W_k, \\
\left(\bar{\Lambda}_z \lambda \Lambda_z - \lambda \frac{\alpha_T}{h_x} \Lambda_x - \lambda \frac{\alpha_T}{h_y} \Lambda_y \right) \xi_T & = \\
& = - (\bar{\Lambda} \lambda \Lambda) T - \eta (jE).
\end{aligned}$$

Здесь ξ_e , ξ_i , ξ_k , ξ_φ , ξ_T — приращения концентраций электронов, ионов и k -го нейтрального компонента, потенциала и температуры соответственно, Λ — оператор конечной разности, α_e , α_i , α_φ , α_c , α_{cxy} , α_{cz} и α_T — релаксационные коэффициенты. Преобладание дрейфовых членов над диффузионными в уравнениях неразрывности заряженных компонентов приводит к необходимости использования направленных разностей при аппроксимации конвективных слагаемых [1], поэтому алгоритм имеет первый порядок пространственной аппроксимации. Уравнения неразрывности электронов и ионов решались совместно векторной прогонкой, а все остальные уравнения — независимо, скалярной прогонкой.

Вычисления проводились для воздуха (79%N₂, 21%O₂) при давлении $p = 5$ Торр на сетке $100 \times 100 \times 200$ узлов. Использовалась прямоугольная сетка, равномерная вдоль направлений X и Y . Вдоль направления Z сетка имела вдвое большее число узлов и сгущения в приэлектродных областях. Алгоритм тестировался при различных значениях релаксационных параметров: $\alpha_\varphi = 0,52-1,0$, $\alpha_e = \alpha_i = 1,0-3,0$, $\alpha_C \geq 1,0$, $\alpha_{Cxy} = 1,0-3,0$, $\alpha_{Cz} = 1,5-5,0$,

$\alpha_T = 0,55-2,5$. Сходимость контролировалась по изменениям счётных полей $(\varphi, n_e, n_i, T, Y_k)$ на глобальной итерации. Найдено, что устойчивость алгоритма и его скорость сходимости сильно зависят от значений коэффициентов релаксации. При оптимальных значениях этих параметров ($\alpha_\varphi = 0,53$, $\alpha_e = \alpha_i = 2,2$, $\alpha_C = 2,0$, $\alpha_{Cxy} = 1,5$, $\alpha_{Cz} = 3,5$, $\alpha_T = 0,55$) стационарное решение получалось за $(0,5-3) \times 10^3$ итераций, что на 1–2 порядка величины меньше необходимого числа итераций по методу [1, 2].

Численное моделирование показывает узкую прикатодную область пространственного заряда (около 0,1 см). Разряд горит в режиме «нормальной плотности тока», когда катодное пятно занимает только часть площади электрода.

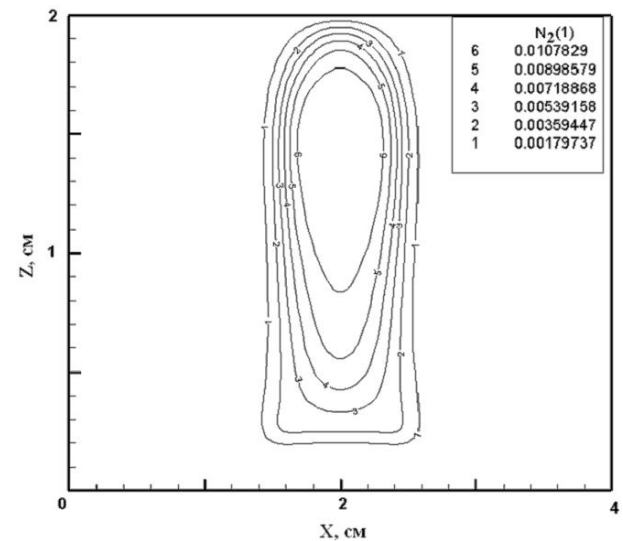


Рис. 2. Массовая доля N₂ ($v = 1$)

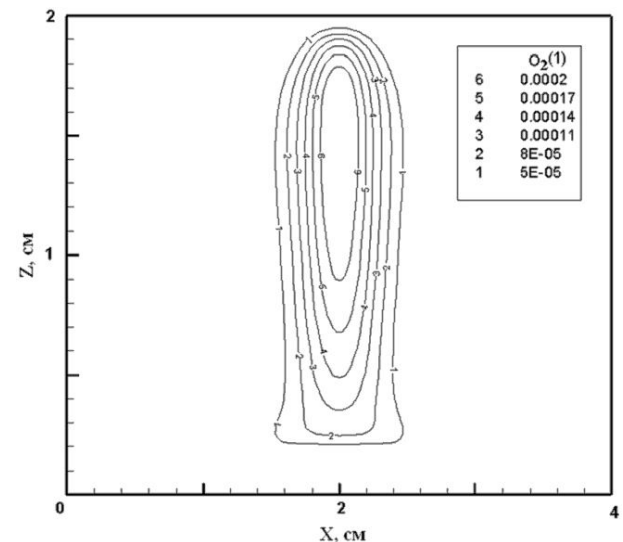


Рис. 3. Массовая доля O₂ ($v = 1$)

Вычисленные поля массовых долей N_2 , O_2 в плоскости XOZ в колебательном состоянии $v = 1$ представлены на рис. 2, 3. На рис. 2 видно, что наибольшая доля колебательно-возбуждённых молекул N_2 и O_2 достигается в центральной области разряда, где высока концентрация электронов. Основная часть колебательно-возбуждённых молекул занимает нижние уровни, с ростом номера уровня его заселённость падает.

Модель может быть использована для исследования различных процессов в тлеющем разряде, что представляет практический интерес для аэрокосмических приложений.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН (координатор академик Д.М. Климов) и программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН (координатор академик Г.Г. Чёрный).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Surzhikov S.T., Shang J.S.* Two-component plasma model for two-dimensional glow discharge in magnetic field // *J. Comp. Phys.* — 2004. V. 199. — P. 437.
2. *Petrusev A.S., Surzhikov S.T., Shang J.S.* Chemical Processes in Air Glow Discharge for Aerospace Applications // AIAA-2006-1460, 2006.
3. *Петрусёв А.С., Суржиков С.Т., Шенг Дж. С.* Двумерный тлеющий разряд с учётом колебательного возбуждения молекулярного азота // *Теплофизика высоких температур.* — 2006. — Т. 44, №6. — С. 814.
4. *Townsend J.S., Bailey V.A.* // *Philos. Mag.* — 1921. — V. 42. — P. 874.
5. *Лапин Ю.В., Стрелец М.Х.* Внутренние течения газовых смесей. — М.: Наука, 1989.

Поступила в редакцию 23.01.2009.