

УДК 537.523:538.4

А.А. ТРОПИНА

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕМНОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСИ КОМБИНИРОВАННЫМИ РАЗРЯДАМИ

Приведены результаты численного моделирования динамики плазменного филамента, формируемого фемтосекундным лазерным разрядом, и поддерживаемого разрядом постоянного тока. Модель основывается на осесимметричных уравнениях Навье-Стокса для многокомпонентной среды, состоящей из нейтральных частиц, ионов и электронов, а также электронно- и колебательно-возбужденных частиц. Модель также включает в себя уравнения для переноса колебательной и электронной температур и уравнение для электрического потенциала. Было получено, что в зависимости от времени задержки между действием фемтосекундного лазерного импульса и разрядом постоянного тока могут быть реализованы два сценария воспламенения топливно-воздушной смеси. Было показано, что оценка скорости амбиполярного распада плазменного филамента может быть проведена на основе анализа распределения электронно-возбужденных состояний кислорода.

Ключевые слова: фемтосекундный лазерный разряд, лазерный филамент, химическая кинетика, уравнения Навье-Стокса, численное моделирование.

Введение

Вопросы, связанные с формированием лазерных филаментов в воздухе в результате действия фемтосекундных лазеров высокой интенсивности, в течение последних двадцати лет стали важной темой научных исследований. Процесс филаментации, как нелинейный режим распространения лазерных импульсов, существенно зависит от мощности лазера и имеет огромное количество приложений, таких как высоковольтные технологии, вопросы контроля молний в атмосфере, дистанционное зондирование атмосферы, обнаружение и трассировка различных компонент, лазерная спектроскопия, а также вопросы, связанные с формированием волноводов для гигагерцового излучения. Наиболее полный обзор по типичным приложениям ультракоротких и ультраинтенсивных лазерных импульсов приведен в работе [1]. Более поздние исследования, посвященные действию комбинированных разрядов, показали возможность лазерного управления высоковольтными разрядами [2]. В работе [3] авторы исследуют возможность обнаружения опасных газов и паров взрывчатых веществ с помощью лазера, а в работе [4] приводят данные о дистанционном измерении концентраций атомных и молекулярных компонент с помощью разработанной технологии REMPI. Можно также отметить работу [5], где представлена концепция многоточечного воспламенения в сверхзвуковых течениях путем ввода микроволновой энергии в область ионизации, созданную в результате действия ультракороткого лазерного импульса.

1. Анализ последних публикаций

Работы, связанные с моделированием динамики плазменных каналов, генерируемых ультракороткими лазерными импульсами, не очень многочисленны. Так, например, в работе [6] для описания динамики плазменных каналов, генерируемых фемтосекундным лазером, авторы использовали модель, основанную на уравнениях химической кинетики в нульмерном приближении в сочетании с уравнением Больцмана для функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ). Было показано, что напряженность поля пробоя в таких каналах в связи с увеличенной скоростью ионизации значительно ниже, чем предсказывает теория Пашена. Более упрощенная нульмерная модель для 5-компонентной воздушной плазмы была использована в работе [7] для моделирования динамики филамента, формируемого фемтосекундным лазером и поддерживаемого наносекундным импульсом. Для анализа не только временных, но и пространственных параметров плазменного канала в приближении цилиндрической симметрии в работе [8] была предложена одномерная модель для 13-компонентной воздушной плазмы. Эта модель, однако, не включала в себя возможность формирования электронно- и колебательно-возбужденных молекул в процессе действия разряда. В литературе также нет работ, посвященных моделированию действия комбинированных разрядов, в частности фемтосекундного лазерного разряда и разряда постоянного тока, на процесс воспламенения топливно-воздушных смесей.

2. Цель и постановка задачи

Целью исследования является построение математической модели амбиполярного распада лазерного филамента, поддерживаемого и контролируемого разрядом постоянного тока в метановоздушной смеси, а также определение условий объемного воспламенения смеси такими комбинированными разрядами.

Рассматривая амбиполярный распад плазмы после фемтосекундного лазерного импульса, предположим, что этот процесс может быть объяснен в рамках цилиндрической симметрии задачи. Были использованы следующие начальные параметры: начальная температура электронов $T_e = 1$ эВ, колебательные и поступательная температуры газа были приняты равными температуре окружающей среды, $T = T_v = 300^\circ \text{K}$. Предположим, что лазерный импульс создает только положительные ионы, которые, в свою очередь, уравниваются электронами за счет квазинейтральности плазмы. Тогда начальная концентрация положительных ионов и электронов будет равна $n_{\text{O}_2^+} = 1.02 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$, $n_{\text{N}_2^+} = 4.08 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$, $n_e = 1.024 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Аналогичные начальные условия были предложены в работе [8] на основе модифицированной теории Келдыша и анализа скоростей фотоионизации молекулы кислорода и азота. Основная система уравнений, описывающих амбиполярный распад плазмы после фемтосекундного лазерного импульса, имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial r \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho u^2) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) + \frac{1}{r} \tau_{rr}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot [u(E+p)] = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (u \cdot \hat{\Pi}) + \frac{3}{2} \delta_e v_m k_B \cdot (T_e - T) + \frac{E_v(T_v) - E_0(T)}{\tau_{VT}} + Q_{ch}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e k_B T_e \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{5}{2} u \cdot n_e k_B T_e \right) = \\ & = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda_e \cdot \frac{\partial}{\partial r} T_e) + (1 - \alpha_v) \vec{j} \cdot \vec{E} - \frac{3}{2} \delta_e v_m k_B \cdot \\ & \cdot (T_e - T) - \frac{3}{2} n_e k_B (T_e - T_v) v_{ev}(T_e) - Q_e, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E_v}{\partial t} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r E_v u) \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_v \frac{\partial}{\partial r} E_v) - \\ & - \frac{E_v(T_v) - E_0(T)}{\tau_{VT}} + \frac{3}{2} n_e k_B (T_e - T_v) v_{ev}(T_e) + \\ & + \alpha_v \vec{j} \cdot \vec{E}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \right) = -\frac{e}{\epsilon_0} \left(\sum_j n_{j,+} - \sum_j n_{j,-} - n_e \right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial n_j}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \Gamma_j)}{\partial r} = \sum_j R_i = f(T, T_e), \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho (u + V_k) Y_k] = \sum_k R_k = f(T, T_e), \quad (8)$$

$$\Gamma_j = (-1)^{j-1} n_j E - D_j \frac{\partial n_j}{\partial r} + n_j u, \quad (9)$$

$$E_v(T_v) = N \epsilon_v(T_v), \quad E_0(T) = N \epsilon_0(T),$$

где ρ – плотность смеси,

u – компонента вектора скорости,

p – давление,

τ_{rr} – компонента тензора напряжений,

E – полная энергия смеси,

T_e – температура электронов,

$E_v(T_v)$ – колебательная энергия (температура),

τ_{VT} – время колебательно-поступательной релаксации,

Q_{ch} – тепловыделение в ходе химических реакций,

ϕ – потенциал электрического поля,

n_j – концентрации заряженных частиц,

Y_k – концентрации нейтральных частиц,

E – напряженность электрического поля,

α_v – доля энергии электронов, идущая на возбуждение колебательных уровней;

v_m – частота упругих столкновений электронов;

v_{ev} – частота релаксации электронно-возбужденных частиц.

Уравнения (3) - (5) описывают изменение во времени полной энергии E , температуры электронов T_e и колебательной энергии E_v с учетом процессов поступательно-колебательной релаксации, передачи энергии возбуждения молекулярных колебаний при столкновении молекул с электронами, прямого нагрева газа за счет упругих электронно-молекулярных столкновений, а также теплоту химических реакций. Для моделирования метановоздушной плазмы была использована кинетическая модель, представленная в работе [9]. Модель включает в

себя нейтральные частицы (53 нейтральные компоненты для механизма горения углеводородов GRI 3.0 и 87 нейтральных компонент для механизма C2), положительные ионы (N_4^+ , N_2^+ , NO^+ , N_3^+ , N_2O^+ , NO_2^+ , O_2^+), отрицательные ионы (NO^- , O_2^- , O^- , O_3^- , NO_3^- , NO_2^- , O_4^- , N_2O^-), электроны, возбужденные частицы $O_2(a^1\Delta)$, $O_2(b^1\Sigma)$, $O_2(c^1\Sigma)$, $O(^1D)$, $O(^3P)$, $N_2(B^3\Pi)$, $N_2(A^3\Sigma)$, $N(^2P)$, $N_2(C^3\Pi)$, $N(^2D)$, $N(^4S)$, $N_2(a^1\Sigma)$ и колебательно-возбужденные молекулы азота в основном электронном состоянии $N_2(x^1\Sigma, v)$.

Рассматривались только колебательно-возбужденные молекулы азота в основном электронном состоянии, межуровневой кинетикой (V-V обмен) пренебрегали, в силу быстроты этого процесса. Все реакции, включенные в кинетическую модель, представлены в работе [9]. Они включали в себя реакции возбуждения электронных уровней, реакции ионизации нейтральных молекул электронным ударом и ассоциативной ионизации, реакции рекомбинации заряженных частиц и электронов, реакции тушения возбужденных атомов $O(^1D)$, $O(^3P)$, $N(^2P)$, $N(^2D)$, $O(^3P)$ на нейтральных молекулах, реакций с участием колебательно-возбужденного азота и электронно-возбужденных частиц, а также реакции, описывающие кинетическую схему горения метана.

Для определения констант скоростей реакций с участием заряженных частиц, как функции температуры электронов, дополнительно решалось кинетическое уравнение для симметричной части функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) вида. Детали расчета приведены в работе [10]. На основании расчетной ФРЭЭ $f_0(\epsilon)$ температура электронов вычислялась с помощью следующего соотношения:

$$T_e = \frac{2}{3k_B} \int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} f_0(\epsilon) d\epsilon.$$

Все расчеты динамики процесса воспламенения комбинированными разрядами проводились с использованием двухступенчатой процедуры. На первом этапе, процесс амбиполярного распада плазмы после фемтосекундного лазерного импульса рассчитывался в соответствии с системой уравнений (1) - (9). Все полученные данные были использованы в качестве начальных условий для следующей задачи, описывающей действие разряда постоянного тока. На этом этапе ввод энергии разряда был смоделирован с использованием данных измерений тока, приведенных в работе [11].

Задача решалась с использованием численных методов. При этом для аппроксимации слагаемых, описывающих дрейф электронов, использовалась модифицированная схема Шарфеттеля – Гаммеля. Для конвективных слагаемых использовалась схема второго порядка точности MUSCLE-Hancock и центральные разностные схемы второго порядка для диффузионных слагаемых. Для аппроксимации жестких источников слагаемых, описывающих химическую кинетику, использовалась схема расщепления и метод дробных шагов, когда после расчета кинетики уравнения решались для однородной смеси с использованием явного метода Эйлера. После нахождения полной энергии в соответствии с уравнением (3) температура газа рассчитывалась методом итераций Ньютона. Для вычисления интегралов входящих в уравнение Больцмана, использовался алгоритм Томаса, в сочетании с методом итераций и трапеций [10]. Уравнение Пуассона для электрического потенциала (6) было проинтегрировано с использованием алгоритма Томаса. На начальном этапе для задачи амбиполярного распада плазмы после фемтосекундного лазерного импульса, шаг по времени был выбран равным $\Delta t = 10^{-14}$ с, а для расчета последующего разряда постоянного тока шаг по времени постепенно увеличивался до $\Delta t = 10^{-8}$ с.

3. Результаты расчетов

Динамика плазмы исследовалась для случая лазерно-индуцированного филамента, контролируемого разрядом постоянного тока в воздухе и метано-воздушной смеси с эквивалентным соотношением $\Phi = 0,5$. Для случая амбиполярного распада фемтосекундного лазерного филамента в воздухе были получены временные зависимости электронной, колебательной и поступательной температур газа, совпадающие с зависимостями, представленными в работе [6] для интенсивности лазерного излучения $I_L = 0$, что подтверждает согласованность предложенной модели с предыдущими работами. В данной статье все полученные данные соответствуют случаю воздействия комбинированных разрядов на метановоздушную смесь.

Верификация кинетической схемы приведена в работе [9] и осуществлялась путем сравнения расчетных данных с данными экспериментальных замеров концентраций электронно-возбужденных состояний азота $N_2(C^3\Pi_u)$ и с данными измерений поступательной и колебательной температур для случая воспламенения обедненной метановоздушной смеси наносекундным импульсным разрядом.

На основании данных расчета можно отметить, что после 50 нс амбиполярного распада плазмы, на момент начала разряда постоянного тока, концентрация электронов уменьшается до 10^{12} см^{-3} , а основным положительным ионом остаются ионы кислорода. На этом заключительном этапе распада плазменного филамента еще присутствуют электронно-возбужденные состояния азота $\text{N}_2(\text{A}^3\Sigma)$ (рис. 1), а также долгоживущие электронно-возбужденные состояния кислорода $\text{O}_2(\text{a}^1\Delta)$, $\text{O}_2(\text{b}^1\Sigma)$ (рис. 2), являющиеся одними из инициаторов процесса воспламенения в топливно-воздушных смесях. На оси филамента наблюдается быстрое уменьшение с течением времени концентраций $\text{N}_2(\text{B}^3\Pi)$, $\text{N}_2(\text{a}^1\Sigma)$ с медленным ростом концентраций возбужденных состояний кислорода.

Следует отметить, что основываясь на данных расчета, мы можем проанализировать скорость амбиполярного распада плазменного филамента, анализируя распределения компонент $\text{O}_2(\text{a}^1\Delta)$ и

$\text{O}_2(\text{b}^1\Sigma)$. Это связано с тем, что кривые зависимости концентраций этих компонент от времени на границе филамента имеют ярко выраженный максимум, соответствующий максимальной плотности электронов в данный момент времени (рис. 2). После наложения дополнительного электромагнитного поля в результате действия разряда постоянного тока концентрации электронно-возбужденных частиц азота и кислорода, а также проводимость плазменного канала начинают опять увеличиваться (рис. 1-2 в момент начала действия разряда постоянного тока). При этом возникает вопрос, можно ли управлять этим процессом путем изменения времени задержки между фемтосекундным лазерным импульсом и последующим разрядом постоянного тока или путем увеличения максимального значения тока?

Результаты расчетов показывают, что в зависимости от времени задержки между фемтосекундным лазерным импульсом и разрядом постоянного тока (при постоянных значениях тока) можно получить два режима воспламенения (рис. 3-4).

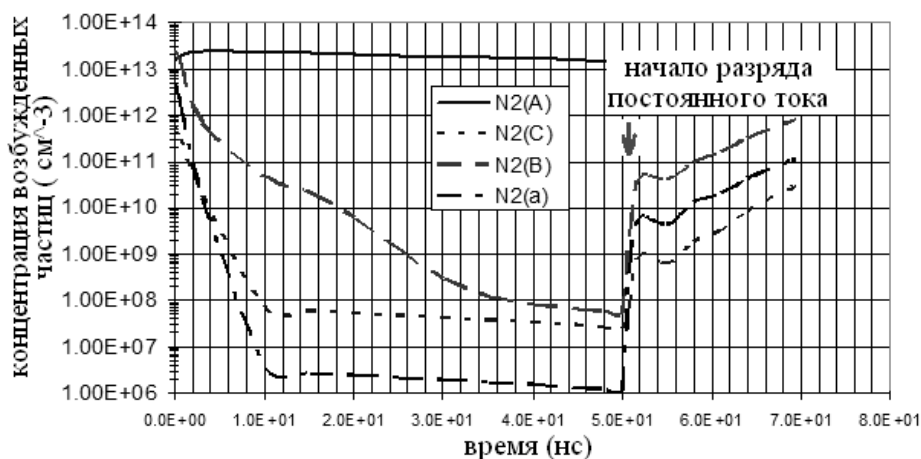


Рис. 1. Временная зависимость концентраций электронно-возбужденных частиц азота на оси лазерного филамента

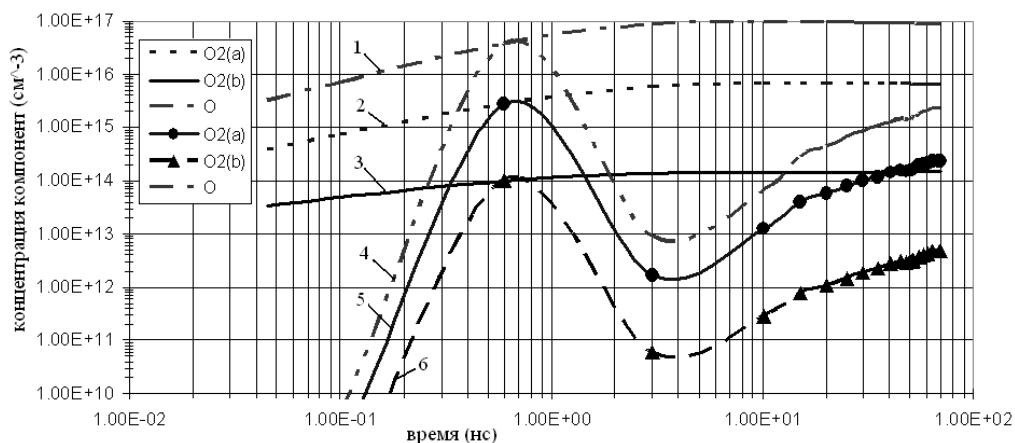


Рис. 2. Временная зависимость концентраций электронно-возбужденных частиц кислорода на оси (кривые 1, 2, 3) и на границе лазерного филамента (кривые 4, 5, 6)

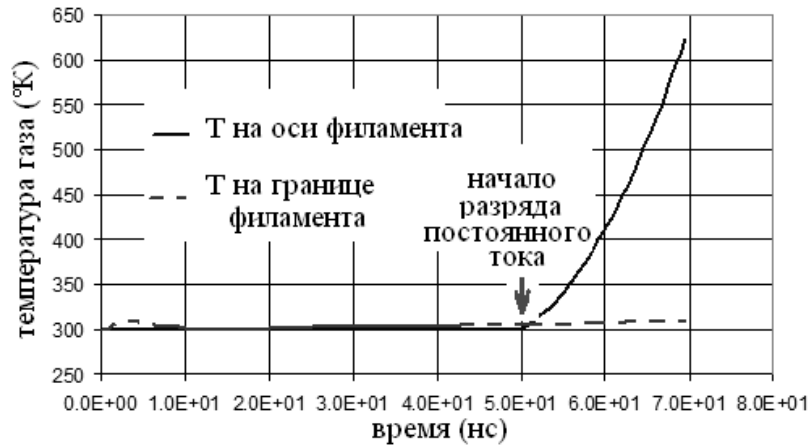


Рис. 3. Распределение поступательной температуры смеси на оси и на границе лазерного филамента

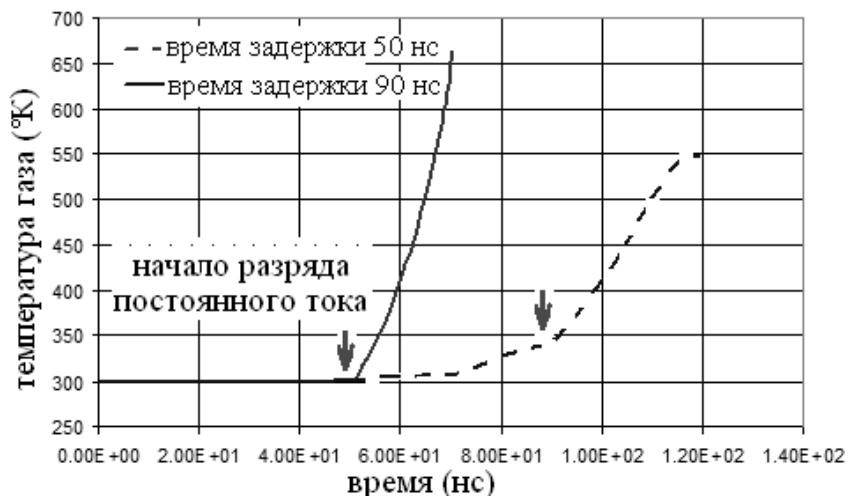


Рис. 4. Распределение поступательной температуры смеси на оси лазерного филамента

Это, так называемый, быстрый режим воспламенения (время задержки около 50 нс) с экспоненциальным ростом температуры газа за счет джоулева нагрева (рис. 4) и, так называемый, медленный режим воспламенения, характеризующийся относительно медленным повышением температуры газа с течением времени (время задержки около 90 нс). В первом случае, после некоторого периода времени разряд переходит в дуговую форму и механизм ионизации меняется. В таком случае, в следующие моменты времени после перехода предлагаемая модель (1)-(9) не может быть применима. Однако ясно, что в этом случае можно добиться воспламенения обедненной метановоздушной смеси в объеме, гораздо большем, чем начальный размер филамента, формируемого фемтосекундным лазером, т.е. реализуется сценарий объемного воспламенения смеси.

При увеличении времени задержки между формированием фемтосекундного лазерного филамента и последующим разрядом постоянного тока также наблюдается увеличение температуры газа за

счет нагрева в результате процессов релаксации электронно-возбужденных состояний азота (рис. 1), но при гораздо более низком уровне проводимости плазменного канала в связи с амбиполярным распадом плазмы. Как следствие, при тех же значениях тока мы получаем лишь незначительное увеличение температуры газа, что потенциально тоже может привести к воспламенению, но только при увеличении силы тока разряда.

Расчетная скорость снижения начальной концентрации электронов в плазменном канале для чистого воздуха и метановоздушной смеси практически одинакова, что может быть объяснено отсутствием ионов метана в кинетической модели. Механизм воспламенения метановоздушной смеси в результате действия комбинированных разрядов напрямую связан с тем, что после реакций ионизации электронным ударом метан распадается на более легко воспламеняемые фрагменты, такие как метил и атомы водорода. Расчетные зависимости концентраций этих компонент представлены на рис. 5.

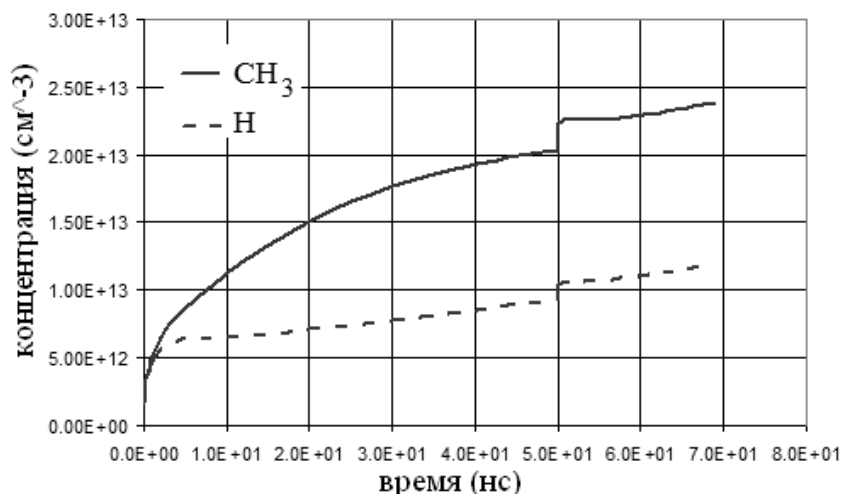


Рис. 5. Распределение концентрации метила и водорода на оси филамента (при $t=50$ нс - начало разряда постоянного тока).

Выводы

Представлена математическая модель динамики амбиполярного распада плазмы лазерного филамента, поддерживаемого и контролируемого разрядом постоянного тока, в метановоздушной смеси. Показано, что в зависимости от времени задержки между действием фемтосекундного лазерного импульса, создающего начальную область ионизации, и разрядом постоянного тока возможны два сценария воспламенения смеси.

Получено, что анализ скорости амбиполярного распада лазерного филамента и определение времени задержки между действием фемтосекундного лазерного импульса и разрядом постоянного тока, необходимого для воспламенения смеси, можно проводить на основе измерений распределения электронно-возбужденных состояний кислорода.

Литература

1. Kasparian, J. *Physics and applications of atmospheric nonlinear optics and filamentation* [Text] / J. Kasparian, J. Wolf // *Optics express*. — 2008. — Vol. 16. — P. 466-493.
2. Zvorykin, V.D. *Control of extended high-voltage electric discharges in atmospheric air by UV KrF-laser radiation* [Text] / V.D. Zvorykin, A.O. Levchenko, N.N. Ustinovskii // *Quantum electronics*. — 2011. — Vol. 41(3). — P. 227-233.
3. *High gain backward lasing in air* [Text] / A. Dogariu, J.B. Michael, M.O. Scully, R.B. Miles // *Science*. — 2011. — Vol. 331. — P. 442-447.

4. *Microwave Scattering from Laser Ionized Molecules: A New Approach to Noninvasive Diagnostics* [Text] / R.B. Miles, Z. Zhang, S.H. Zaidi, M.N. Shneider // *AIAA J.* — 2007. — Vol. 54(3). — P. 513-515.

5. *Subcritical Microwave Coupling to Femtosecond and Picosecond Laser Ionization for Localized, Multipoint Ignition of Methane/Air Mixtures* [Text] / J.B. Michael, A. Dogariu, M.N. Shneider, R.B. Miles // *J. Phys. D: Applied Physics*. — 2010. — Vol. 108. — P. 093308(10).

6. Petrova, Tz.B. *Nonequilibrium dynamics of laser-generated plasma channels* [Text] / Tz.B. Petrova, H.D. Ladouceur, A.P. Baronavski // *Phys. of Plasmas*. — 2008. — Vol. 15. — P. 053501(10).

7. *Revival of femtosecond laser plasma filaments in air by a nanosecond laser* [Text] / B. Zhou, S. Akturk, B. Prade, Y. Andre, A. Houard // *Optics Express*. — 2009. — Vol. 17. — P. 11450-11456.

8. Shneider, M.N. *Tailoring the air plasma with a double laser pulse* [Text] / M.N. Shneider, A.M. Zheltikov, R.B. Miles // *Phys. Plasmas*. — 2011. — Vol. 18. — P. 063509(9).

9. Tropina, A.A. *Non-equilibrium plasma influence on the minimum ignition energy. Part 1: Discharge model* [Text] / A.A. Tropina, M. Uddi, Y. Ju. // *IEEE Trans. on Plasma Sci.* — 2011. — Vol. 39. — P. 615-623.

10. Тропина, А.А. *Численное моделирование свойств плазменного канала, формируемого наносекундным импульсным разрядом* [Текст] / А.А. Тропина // *Радиоелектронні і комп'ютерні системи*. — 2012. — № 4 (56). — С. 63–68.

11. *Femtosecond laser guiding of a high-voltage discharge and the restoration of dielectric strength in air and nitrogen* [Text] / S.B. Leonov, A.A. Firsov, M.A. Shurupov, J.B. Michael, M.N. Shneider, R.B. Miles, N.A. Popov // *Phys. Plasmas*. — 2012. — Vol. 19. — P. 123502 (10).

Рецензент: д-р техн. наук, проф., зав. каф. автомобільної електроніки А.В. Бажинов, Харківський національний автомобільно-дорожний університет, Харків.

MODELING OF THE VOLUMETRIC IGNITION BY COMBINED DISCHARGES

A.A. Tropina

Results of the numerical modeling of the dynamics of the plasma filament generated by a femtosecond laser discharge, and supported by a direct current discharge are presented. A model is based on the axisymmetric Navier-Stokes equations for a multicomponent medium consisting of neutral particles, ions and electrons, as well as electronically and vibrationally excited particles. The model also includes transport equations for vibrational and electron temperatures and an equation for the electric potential. It was found that, depending on the delay time between a femtosecond laser pulse and a direct current discharge two scenarios of the fuel-air mixture ignition can be implemented. It has been shown that the estimation of the ambipolar decay speed of plasma filaments can be made by the analysis of the distribution of electronically excited states of oxygen.

Key words: femtosecond laser discharge, laser filament, chemical kinetics, Navier-Stokes equations, numerical modeling.

МОДЕЛЮВАННЯ ОБ'ЄМНОГО ЗАПАЛЮВАННЯ КОМБІНОВАНИМИ РОЗРЯДАМИ

A.A. Tropina

Наведено результати чисельного моделювання динаміки плазмового філаменту, який сформовано фемтосекундним лазерним розрядом і який підтримується розрядом постійного струму. Модель ґрунтується на вісесиметричних рівняннях Нав'є-Стокса для багатокомпонентного середовища, що складається з нейтральних частинок, іонів та електронів, а також електронно- та коливально-збуджених частинок. Модель також включає до себе рівняння для коливальної та електронної температури і рівняння для електричного потенціалу. Було отримано, що в залежності від часу затримки між дією фемтосекундного лазерного імпульсу і розрядом постійного струму можуть бути реалізовані два сценарії займання паливноповітряної суміші. Було показано, що оцінка швидкості амбіполярного розпаду плазмового філаменту може бути проведена на основі аналізу розподілу електронно-збуджених станів кисню.

Ключові слова : фемтосекундний лазерний розряд, лазерний філамент, хімічна кінетика, рівняння Нав'є-Стокса, чисельне моделювання.

Тропина Альбіна Альбертовна – д-р техн. наук, доцент, зав. кафедрою прикладної математики, Харківський національний автомобільно-дорожний університет, г. Харків, Україна, e-mail: albina.tropina@fulbrightmail.org.