

微波电场作用下甲烷预混火焰的数值模拟*

任耀辉^{1, 2} 顾洪斌¹

(1. 中国科学院力学研究所 高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190

2. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049)

摘要 本文使用相对详细的输运模型和化学反应机理来模拟微波电场作用下甲烷空气预混火焰传播速度和温度等火焰参数。在微波电场之下, 电子-中性粒子的碰撞会促进焦耳热的转化并且提高火焰温度和火焰速度。在亚临界电场作用下的碳氢燃料火焰, 除了热效应, 还需要考虑动力学效应, 添加电子激发态组分的化学反应, 更新电子激发态组分的输运特性。为了提高模型的准确性, 使用电子能量分布函数来计算一些涉及电子的输运参数和反应速率常数, 耦合了微波增强燃烧的两种主要机理—热效应和动力学效应。与实验结果和以往的计算结果进行对比, 表明该模型可以更加准确地预测微波电场作用下的火焰温度、速度以及反应组分浓度。另外, 还使用本模型对可能影响微波助燃效果的一些因素进行评估, 以此确定微波助燃最佳应用工况。

关键词: 微波助燃; 火焰速度增加; 电子激发态组分; 热效应; 动力学效应

一、模型理论

1.1 引言

近来对吸气式超声速推进技术的深入研究, 在超声速燃烧点火控制和火焰稳定方面的挑战也日益增加^[1-3]。比如, 在以超过 5 马赫数飞行时, 气流滞留时间太短, 以至于点火和燃烧的达姆科勒数(气流滞留特征时间与点火延迟特征时间和燃料完全燃烧特征时间之比)都小于 1, 没有足够的时间使燃料在燃烧室内点火并完全燃烧。因此, 还必须开发新技术来增强点火、稳定火焰并完成超燃冲压发动机的燃烧。

微波助燃能够显著改善火焰稳定性, 提高火焰速度, 这对提高发动机在恶劣工况下的工作性能是极为有利的。本研究提出了一种新模型来预测一维甲烷预混火焰在微波电场下的火焰温度、速度和火焰组分分布。在亚临界电场之下, 本模型耦合了微波增强燃烧的两种主要机理—热效应和动力学效应, 其中电子对欧姆加热有主要贡献, 因为与离子相比, 电子的迁移率明显更高, 电子-中性粒子的碰撞就会促进焦耳热的转化并且提高火焰温度和火焰速度。另外, 在亚临界电场作用下, 电子能量应该足够高以用于电子振动激发, 涉及通过产生自由基或激发态化学物质来改变火焰动力学。

1.2 理论

对火焰施加足够强的电场, 影响带电组分质量通量的主要因素有两个: 扩散和漂移。根据文献^[4], 将漂移项添加到扩散通量中, 使用混合平均扩散法, 见式 1,

$$j_k^* = -\rho \frac{W_k}{\bar{W}} D_k \frac{\partial X_k}{\partial z} + s_k \mu_k \rho E Y_k \quad (1)$$

在常规的能量方程中加入了一项考虑外电场引起的欧姆加热项^[5]。假设由于火焰中

* 基金项目: 国家自然科学基金 (11772342)

电子与气体分子的高碰撞频率，从外部电场吸收的所有能量瞬间转移到气体中。内部电场引起的加热可以忽略不计。因此能量方程写为式 2，

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_k j_k c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial z} + \sum_k h_k W_k \dot{\omega}_k + e \mu_e E_{ex}^2 n_e \quad (2)$$

本研究应用强外电场，需要求解玻尔兹曼方程来确定非平衡态电子的能量分布函数，控制方程和反应速率中一些涉及电子的参数取决于电子能量分布函数。本研究模拟甲烷的燃烧反应，中性物种使用甲烷通用的 GRI-Mech 3.0 燃烧反应机理^[6]，包括 53 种中性粒子和 325 个中性粒子反应。Prager 等人^[7]的模拟中使用的离子化学反应机理包括包括 HCO^+ ， H_3O^+ ， $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+$ ， CH_3O^+ ， O_2^- ， OH^- ， O^- ， CHO_2^- ， CHO_3^- ， CO_3^- 和电子 E^- 。这是化学反应机理除中性粒子和正离子外，首次包含了负离子。与离子相关的化学反应是从其相关文献中汇编的，离子模型包含 77 个可逆反应，涉及 11 种离子。另外，还在本模型中加入了氧气分子的电子激发态组分 $\text{O}_2(\text{a}1\text{Dg})$ 和 $\text{O}_2(\text{b}1\text{Sg}^+)$ 的反应机理。

中性组分之间输入 Lennard-Jones 参数^[8]计算碰撞积分，离子和中性组分之间的输运参数使用更新的 $[n, 6, 4]$ 相互作用势能^[9]来评估，忽略离子和离子之间的碰撞。本模型对开源 Cantera 软件中^[10]的一维火焰代码进行了修改，并加入详细的离子反应和激发态组分反应，更新激发态氧分子的输运特性，以求解受微波电场作用下的甲烷空气预混火焰的火焰参数，包括火焰温度、火焰速度和火焰中粒子分布等。

二、模拟结果

2.1 模型有效性

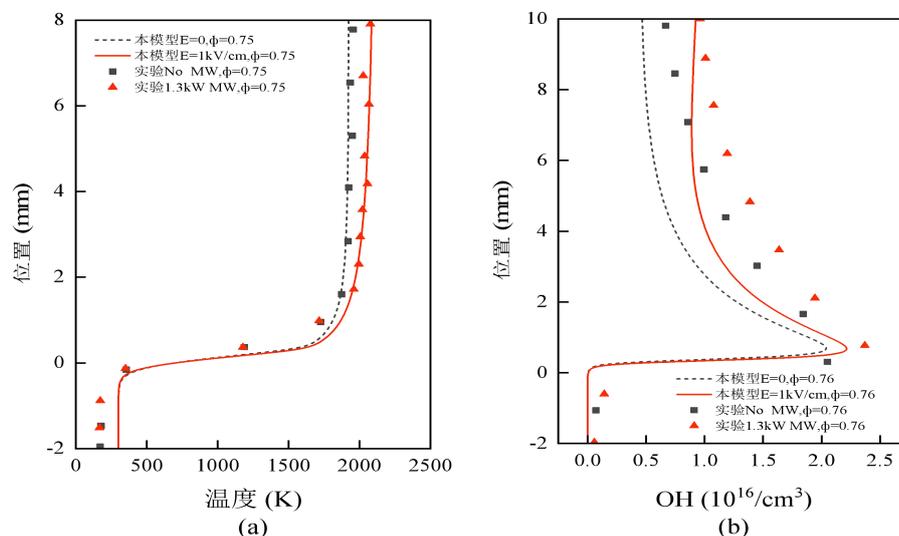


图1 微波增强燃烧的实验^[17]和模拟对比

将计算结果与文献^[11]中的实验结果进行比较，以此来验证模型的有效性。模拟的入口气体参数都和该实验设置为相同的值，其中微波频率为 2.45GHz，初始气体温度和压强分别为 300K 和 1atm，实验中没有观察到微波放电，根据 WR430 矩形波导内部谐振电场强度与输入微波功率的关系来计算电场强度，实验中 1.3kW 微波功率对应电场强度

约为 1.0kV/cm。将以上参数带入模型。在外加电场的情况下，火焰速度更快，火焰厚度更薄，因此预热区的温度略低于没有施加电场的参考火焰，反应区由于欧姆加热温度更高，过火焰区由于电场对残余电子的加热，燃烧区域的温度继续升高。计算结果如图 1 所示，实验和模拟的完整温度曲线完全一致，实验和模拟的 OH 浓度曲线也相当吻合。

2.2 模型应用

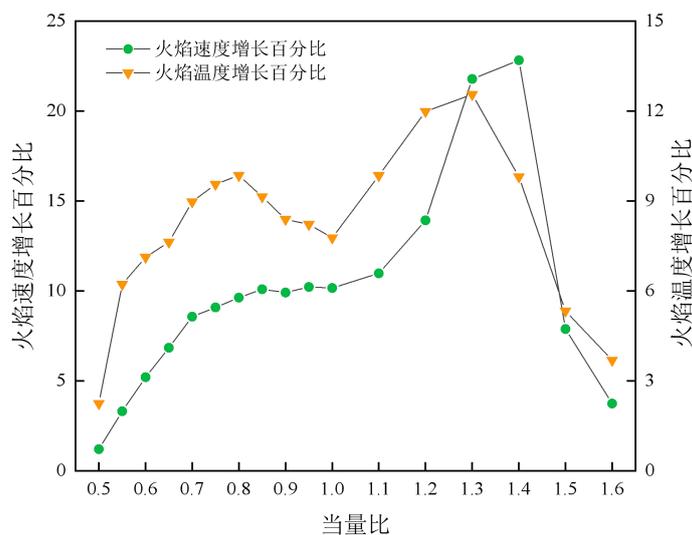


图2 不同当量比下微波增强燃烧温度和速度百分比

为了表征微波电场对不同当量比火焰的增强程度，还计算了火焰温度和速度增长百分比，如图 2 所示，尽管在当量比为 1.1 时火焰的速度和温度变化值最大，但是其增长百分比却很小，反而在其两侧各有一个增长百分比峰值。这是因为当混合物变得稀或浓时，火焰速度变慢，火焰锋面厚度增加，微波电场作用于火焰的范围更大，所以增强效果增加。当混合物变得更稀或更浓时，燃烧变弱，火焰锋面中离子浓度降低，即使火焰锋面厚度继续增加，微波电场增强燃烧的程度也不再增加。

三、结论

为了提高模拟的准确性，本模型创新地耦合了微波增强燃烧的两种主要机理—热效应和动力学效应。相比于以往的计算模型，本模型的模拟结果可以更加准确计算微波电场作用下的火焰温度、速度以及各反应组分浓度。相对于实验结果，模拟结果定性得预测了火焰速度增加，但是数值上还有一些差异，实验中火焰速度最高增强了 16%，模拟所得的速度增加值相对于实验结果较小。分析出现这些差异的原因：第一，该模型仅限于低电离度，忽略了带电粒子的相互作用。对于电离度较高的气体，库仑碰撞是不可忽视的，必须包括更多的带电物质的动量传递截面数据才能准确计算出玻尔兹曼方程。第二，本文只计算了氧气分子的电子激发态组分的生成速率和输运参数。在更高的电场强度作用下，需要添加更多激发态组分（电子激发态 N_2^* 、振动激发态 $N_2(v)$ ）的反应机理，并通过量子计算获得它们的输运参数来改进当前模型。第三，本模型激发态组分的反应机理只包括和中性组分的反应，在文献^[12]中包括了一些激发态组分和离子组分的反应，需要在后续研究评估这些反应对模型准确度的影响。

参 考 文 献

- 1 JIANG Z. Experiments and development of long-test-duration hypervelocity detonation-driven shock tunnel (LHDst); proceedings of the 52nd Aerospace Sciences Meeting, F, 2014 [C].
- 2 MOORTHY J, RAJINIKANTH B, CHARYULU B, et al. Scramjet combustor development: a review [J]. Journal of Aerospace Engineering & Technology, 2012, 2(3): 28-41.
- 3 YU G, FAN X. Supersonic combustion and hypersonic propulsion [J]. Advances in Mechanics, 2013, 43(5): 449-471.
- 4 PEDERSEN T, BROWN R C. Simulation of electric field effects in premixed methane flames [J]. Combustion and Flame, 1993, 94(4): 433-448.
- 5 CHEN B-S, GARNER A L, BANE S P M. Simulation of flame speed enhancement of a hydrocarbon flame with a microwave field [J]. Combustion and Flame, 2019, 207(250-264).
- 6 Smith G P. Gri-mech 3.0 [J]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 1999.
- 7 Prager J, Riedel U, Warnatz J. Modeling ion chemistry and charged species diffusion in lean methane-oxygen flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31(1): 1129-1137.
- 8 Jones J E. On the determination of molecular fields.—ii. from the equation of state of a gas [J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 1924, 106(738): 463-477.
- 9 Han J, Belhi M, Bisetti F, et al. Numerical modelling of ion transport in flames [J]. Combustion Theory and Modelling, 2015, 19(6): 744-772.
- 10 Goodwin D G, Moffat H K, Schoegl I, et al. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes [EB/OL]. 2022. <https://www.cantera.org>. DOI: 10.5281/zenodo.6387882.
- 11 STOCKMAN E S, ZAIDI S H, MILES R B, et al. Measurements of combustion properties in a microwave enhanced flame [J]. Combustion and Flame, 2009, 156(7): 1453-1461.
- 12 DEFILIPPO A C. Microwave-assisted ignition for improved internal combustion engine efficiency [M]. University of California, Berkeley, 2013.