

ТРЕХМЕРНАЯ ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОГО ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА В АЗОТЕ

А.С. Петрусёв

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

Аннотация

Рассмотрена трёхмерная модель тлеющего разряда постоянного тока с параллельными электродами. Модель включает уравнения неразрывности для концентраций электронов и ионов, связанные с уравнением Пуассона для электрического потенциала, а также уравнения неразрывности для колебательно-возбуждённых молекул в модовом приближении.

Для указанной модели предложен численный алгоритм решения конечно-разностных уравнений на основе многосеточного метода. Проанализированы основные особенности построения и реализации численного алгоритма. Для случая нормального тлеющего разряда в азоте при давлении 5 Торр, результаты, даваемые численной моделью, сопоставлены с аналогичными результатами других моделей тлеющего разряда.

3D NUMERICAL MODEL FOR CHEMICALLY ACTIVE GLOW DISCHARGE IN AIR

3D computing model of direct current discharge (DCD) in a parallel-plate configuration is presented. The model consists of equations for electron and ion continuity, Poisson's equation for coupled with charged particles distributions electric field with the continuity equation for vibrationally excited N_2 molecules.

A finite-difference numerical simulation method for governing equations solving has been proposed, based on multi-grid method. The main characteristic features of the algorithm have been discussed.

For normal glow discharge in nitrogen at pressure 5 Torr the numeric data obtained by the model are compared with similar one, obtained by another model.

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе рассматривается численное моделирование тлеющего разряда постоянного тока в азоте между двумя плоскопараллельными электродами в трёхмерной постановке. Предлагаемая программа является результатом последовательного развития численных моделей, описанных в работах [1–4]. Особенностью данной модели является её направленность на моделирование тлеющих разрядов сложной геометрии, что весьма существенно для аэрокосмических приложений.

2. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

2.1. Основные уравнения модели

Предлагаемая численная модель, построенная на основе диффузионно-дрейфовой модели разряда, позволяет рассчитать основные параметры тлеющего разряда: 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.

Модель процесса включает в себя трёхмерные уравнения неразрывности электронной и ионной концентраций (1), (2), уравнение Пуассона (3) для электростатического поля, уравнение энергоданса (4) и уравнения неразрывности концентраций нейтральных компонент с соответствующими краевыми условиями.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div} \Gamma_e = \alpha(|\mathbf{E}|) \Gamma_e - \beta n_e n_e \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \text{div} \Gamma_i = \alpha(|\mathbf{E}|) \Gamma_i - \beta n_i n_e \quad (2)$$

$$\Gamma_e = -D_e \nabla n_e - \mu_e n_e \mathbf{E}$$

$$\Gamma_i = -D_i \nabla n_i + \mu_i n_i \mathbf{E}$$

$$\Delta \varphi + \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) = 0 \quad (3)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = (\nabla \lambda \nabla) T + \eta e (\Gamma_i - \Gamma_e, \mathbf{E}) \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \text{div} \mathbf{J}_k = W_k, \quad k = 0..m \quad (5)$$

Краевыми условиями являются:

$$z = 0: \frac{\partial n_i}{\partial z} = 0, \quad \Gamma_{ez} = \gamma \Gamma_{iz}, \quad \varphi = 0;$$

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

$$x = 0, x = d_C: \frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0;$$

$$y = 0, y = d_C: \frac{\partial n_e}{\partial y} = \frac{\partial n_i}{\partial y} = \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0$$

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; ρ, c_p – плотность и теплоёмкость нейтрального газа; φ – потенциал; T – температура нейтралов; γ – коэффициент вторичной ион-электронной эмиссии катода; η – доля джоулева энергодвыделения, идущая на нагрев газа; V – потенциал анода; Y_k – массовая доля k -й нейтральной компоненты (соответствует k -му колебательному уровню

N_2); \mathbf{J}_k – массовая плотность потока k -й компоненты; W_k – скорость возникновения (исчезновения) массы k -й компоненты.

Для вычисления констант скоростей колебательных реакций использованы данные [5, 6]. Выражения для электронной и ионной подвижностей, плотностей потоков, теплопроводности газа, коэффициентов ионизации, рекомбинации, диффузии, подвижности, коэффициента Таунсенда и химических скоростей аналогичны использованным в [1–4].

2.2. Конечно-разностные уравнения

Используемая система уравнений сложна для численного решения. Как отмечено в [1], одна из причин этих трудностей состоит в сильном различии характерных времён процессов в тлеющем разряде. Вторая причина состоит в большом числе учитываемых химических компонентов. Для преодоления первого ограничения, связанные уравнения неразрывности для заряженных компонентов решались совместно.

Следуя, в основном, процедуре преобразования описанной в [3, 4], конечно-разностные уравнения представляются в полуявной линеаризованной форме приращений:

$$(\bar{\Lambda}, \Lambda) \xi_\varphi = f_\varphi; \quad f_\varphi = (\bar{\Lambda}, \Lambda) \varphi + \frac{e}{\varepsilon_0} (n_+ - n_e) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\xi_e}{\tau} - (\bar{\Lambda}, D_e \Lambda) \xi_e + \mu_e (\mathbf{E}, \Lambda) \xi_e + \\ & + \frac{e\mu_e}{\varepsilon_0} [(2n_e - n_+) \xi_e - n_e \xi_+] + \\ & + \left(E \frac{\partial \omega_{ion}}{\partial E} - \omega_{ion} \right) \xi_e = f_e - \mu_e n_e f_\varphi; \\ f_e & = (\bar{\Lambda}, D_e \Lambda n_e + \mu_e n_e \Lambda \varphi) + \omega_{ion} n_e \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\xi_+}{\tau} - (\bar{\Lambda}, D_+ \Lambda) \xi_+ - \mu_e (\mathbf{E}, \Lambda) \xi_+ + \\ & + \frac{e\mu_+}{\varepsilon_0} [(2n_+ - n_e) \xi_+ - n_+ \xi_e] + \\ & + \left(E \frac{\partial \omega_{ion}}{\partial E} - \omega_{ion} \right) \xi_e = f_+ - \mu_+ n_+ f_\varphi; \\ f_+ & = (\bar{\Lambda}, D_+ \Lambda n_+ + \mu_+ n_+ \Lambda \varphi) + \omega_{ion} n_e \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\xi_i}{\tau} - (\bar{\Lambda} B_i \Lambda) \xi_i + \omega_i \xi_i = f_i; \quad f_i = -(\bar{\Lambda}, \mathbf{J}_i) + W_i; \\ W_i & = \sum_j \left[K_{j+} \prod_{s_{j+}} n_{s_{j+}}^{vs_{j+}} - K_{j-} \prod_{s_{j-}} n_{s_{j-}}^{vs_{j-}} \right]; \\ \omega_i(n) & = -\frac{\partial W_i}{\partial n_i} = \sum_j K_{j-} \frac{\partial}{\partial n_i} \prod_{s_{j-}} n_{s_{j-}}^{vs_{j-}} \end{aligned} \quad (9)$$

$$-(\bar{\Lambda} \lambda \Lambda) T = Q \quad (10)$$

Путём подстановки в уравнения (7), (8) уравнения (6), удаётся ослабить численную зависимость потоков заряженных частиц и частоты ионизации от напряжённости электрического поля, что даёт возможность решения уравнения Пуассона отдельно от уравнений неразрывности заряженных частиц. Уравнения неразрывности для нейтральных частиц, совместно с урав-

нениями Стефана–Максвелла (9), представлялись в форме удобной для итерационного численного решения, следуя процедуре, описанной в [7].

2.3. Решение конечно-разностных уравнений

Для решения конечно-разностных уравнений (7), (8) использован многосеточный метод. В каждом узле пространственной сетки жёсткие члены, не содержащие пространственных производных, отвечающие за процессы ионизации, рекомбинации и поляризации учитывались неявно, а соответствующие системы уравнений решались методом Гаусса. Члены, содержащие пространственные производные учитывались явно, аналогично обычному многосеточному методу.

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}}{\tau} - (\bar{\Lambda}, D \Lambda) \mathbf{u} + (\mathbf{v}, \Lambda) \mathbf{u} - \mathbf{A} \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{F} \\ \mathbf{u} & = \begin{pmatrix} u_e \\ u_{ion} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{e,e} & a_{e,ion} \\ a_{ion,e} & a_{ion,ion} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Превосходство дрейфовых членов над диффузионными для заряженных частиц приводит к необходимости использования направленных разностей, из-за чего алгоритм имеет первый порядок пространственной аппроксимации. Все остальные уравнения (6), (9), (10) решались независимо друг от друга. Использование многосеточного метода при их решении особенностей не имело.

Наличие в уравнениях (7), (8), (9) химических источников членов приводит к появлению неустойчивых мод, что, в свою очередь, приводит к ограничению на допустимый шаг пространственной сетки при решении уравнений. В самом деле, рассмотрим модельное уравнение переноса с диффузией и химическим источником:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial u}{\partial x} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Au$$

Исследование решения этого уравнения на устойчивость подстановкой возмущения $\delta u \sim \exp(\gamma t + ikx)$, даёт инкремент в виде $\gamma = \lambda - ikv - k^2 D$, $\text{Re}(\gamma) = \text{Re}(\lambda) - k^2 D$ (здесь λ – собственное число химической моды). При наличии неустойчивых химических мод $\text{Re}(\lambda) > 0$, решение устойчиво при условии $k^2 D > \text{Re}(\lambda)$.

Переходя к конечно-разностным уравнениям, получаем условие устойчивости типа:

$$h < \sqrt{D/\text{Re}(\lambda)},$$

которое ограничивает максимально возможный шаг сетки многосеточного метода. По этой причине в многосеточном методе укрупнение сетки возможно только до определённого предела.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТОВ

При численном моделировании использовались следующие значения параметров: давление $P = 5$ Тор, ЭДС источника питания 2кВ, балластное сопротивление $R_0 = 300$ кОм, коэффициент вторичной эмиссии катода $\gamma = 0.1$, размеры расчётной области $H_c = 2$ см, $d_c = 2.5$ см. В качестве начального приближения для массовых долей, электронной и ионной концентраций использовались однородные распределения со значениями $n_e = n_i = 2 \times 10^{11}$ см⁻³, $Y_{N_2} = 1$, все остальные

доли Y_k полагались равными нулю. Начальное распределение электрического потенциала линейное. Сходимость контролировалась по изменениям вычисляемых полей ($\varphi, n_e, n_i, T, Y_k$) на глобальной итерации.

Многосеточный метод был реализован с использованием вложенных сеток трёх уровней, включавших $257 \times 129 \times 129$, $129 \times 65 \times 65$, $65 \times 33 \times 33$ узлов. Это вызывало существенное снижение скорости сходимости по сравнению с классическим многосеточным методом для уравнения Пуассона. Тем не менее, сходимость оказалась сравнительно быстрой, стационарное решение достигалось за $(1-3) \times 10^3$ итераций, что близко к скорости сходимости алгоритма [4].

Вычисленные значения величин были сопоставлены с полученными в [4] и было найдено хорошее совпадение.

4. ВЫВОДЫ

Предложен численный алгоритм, позволяющий в рамках дрейфово-диффузионной модели предсказать основные параметры тлеющего разряда, включая распределение молекул азота по колебательным уровням.

Важным преимуществом алгоритма является его применимость для моделирования разрядов сложной формы со сложной конфигурацией электродов. Модель может использоваться для изучения различных процессов в тлеющих разрядах постоянного тока.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Surzhikov S.T., Shang J.S. Two-component plasma model for two-dimensional glow discharge in magnetic field // *Journal of Computational Physics*. — 2004. — V199. — 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. А.С. Петрусёв, С.Т. Суржиков. Эффективный алгоритм для моделирования многомерного тлеющего разряда // *Физика плазмы*. — 2008. — Т.34, №3. — С. 269-274.
4. А.С. Петрусёв, С.Т. Суржиков, Дж.С. Шенг. Двумерный тлеющий разряд с учётом колебательного возбуждения молекулярного азота. // *Теплофизика высоких температур* — 2006. — Т.44, '6, — С.814.
5. Schulz G.J. Principles of Laser Plasma. chap. II. Excitation of Molecules Vibration States by Electron Impact at Low Energies. — New York: John Wiley & Sons Inc., 1976.
6. Русанов В.Д., Фридман А.А. Физика химически активной плазмы — М.: Наука, 1984.
7. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. — М.: Наука, 1989.