

On the influence of discharge parameters on the kinetics of plasma-assisted combustion of synthesis gas in air

I.V. Arsentiev

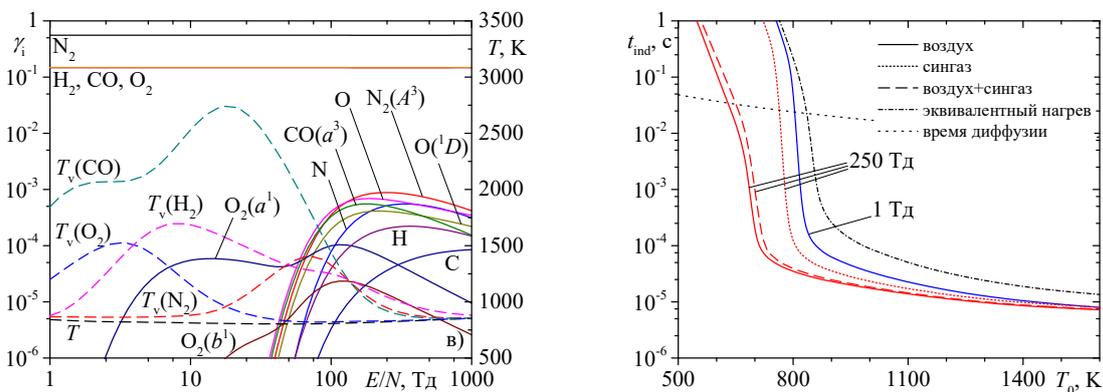
Central Institute of Aviation Motors,
Moscow, 111116, Russia

ivarsentev@ciam.ru

Abstract

Plasma-assisted combustion of syngas-air mixture is considered, when either air, or syngas, or their mixture is exposed to the discharge. Optimal reduced electric field values of the discharge in various configurations in terms of shortening the induction time are determined. It is shown that the afterglow processes taking place in the discharge products prior to mixing with other components of the combustible mixture can essentially vary the mechanism of the discharge action on the ignition.

Keywords: syngas, discharge, vibrational nonequilibrium, ignition, combustion.



Plasma composition and parameters at the outlet of the discharge in syngas-air mixture vs. E/N in the discharge (on the left). Reduction of induction time of syngas-air mixture with various discharge configurations and optimal E/N values (on the right).

УДК 544.452

О влиянии параметров разряда на кинетику плазменно-стимулированного воспламенения синтез-газа в воздухе

И.В. Арсентьев

ФАУ «ЦИАМ им. П.И. Баранова»,
Россия, Москва, 111116, Авиамоторная, 2

ivarsentev@ciam.ru

Аннотация

Рассмотрено плазменно-стимулированное воспламенение синтез-газа в воздухе, когда воздействию электрического разряда подвергается либо отдельно воздух или синтез-газ, а затем происходит их смешение и воспламенение, либо заранее перемешанная топливо-воздушная смесь. Определены оптимальные величины приведенной напряженности электрического поля разряда с точки зрения сокращения времени воспламенения. Показано, что процессы, происходящие за время доставки продуктов разряда в зону смешения, могут существенно изменить механизм влияния разряда на воспламенение.

Ключевые слова: сингаз, разряд, колебательная неравновесность, воспламенение, горение.

1. Введение

Рост стоимости ископаемого топлива и ужесточение экологических ограничений на выбросы в атмосферу вызывают в последнее время повышенный интерес к альтернативным видам топлив, в том числе продуктам переработки биомассы и водородсодержащим топливам. В связи с этим, в качестве перспективного топлива для различных транспортных систем рассматривается синтез-газ – смесь водорода и монооксида углерода с возможными примесями воды и углекислого газа. Этим объясняется необходимость правильного моделирования характеристик воспламенения синтез-газа в широком диапазоне газодинамических параметров и соотношений H_2/CO , в том числе при использовании перспективных способов воспламенения, таких как применение резонансного лазерного излучения или специально организованного электрического разряда. Такие способы дают возможность стабилизации пламени, повышения полноты сгорания топлива, расширения бедного предела воспламенения, снижения температуры пламени и, как следствие, эмиссии вредных компонентов.

Изучению воздействия неравновесной плазмы электрического разряда на воспламенение ряда топлив посвящено множество работ, результаты которых хорошо описаны в обзорах [1–4]. Данное воздействие, в зависимости от особенностей организации разряда, имеет разные механизмы, такие как возбуждение колебательных степеней свободы компонентов, возбуждение низколежащих электронных состояний кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, диссоциация начальных компонентов топлива и окислителя непосредственно электронным ударом в разряде, образование активных компонентов (таких, как NO) и радикалов за счет процессов, происходящих после выхода плазмы из разряда, например при диссоциативном тушении высоколежащих электронно-возбужденных компонентов, таких как $N_2(A^3\Sigma_u^+, B^3\Pi_g, C^3\Pi_u, a^1\Sigma_u^-)$ и $O(^1D)$.

В частности, возможность ускорения воспламенения синтез-газа исследовалась в [5, 6], где рассматривалось влияние возбуждения колебаний CO, H_2 или N_2 на время индукции, и в [7], где изучалась кинетика воспламенения в присутствии синглетных состояний кислорода

$O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$. Показано, что данные способы ускорения воспламенения действительно энергетически более эффективны, чем простой нагрев смеси.

Однако, ранее не рассматривался случай комплексного воздействия разряда, когда происходит возбуждение всех возможных (как колебательных, так и электронных) состояний компонентов смеси, а также диссоциация и вторичные плазмохимические реакции в продуктах разряда. Целью работы было исследовать кинетику воспламенения синтез-газа в воздухе при подобном воздействии, выяснить возможность более энергетически выгодного по сравнению с нагревом ускорения воспламенения, а также определить оптимальные параметры разряда с точки зрения сокращения времени индукции.

2. Модель разряда

В данной работе для расчета состава и параметров плазмы использовалось приближение идеального разряда. Эта приближение предполагает, что характерные времена вторичных плазмохимических процессов намного больше, чем у исходных процессов образования колебательно и электронно-возбужденных молекул, ионов и атомов электронным ударом. Подробно методология описана в [8, 9] и ранее использовалась для моделирования состава на выходе из разряда в кислороде и воздухе при изучении возможности ускорения воспламенения метана в кислороде [8,], водорода, монооксида углерода и метана в кислороде [9], ускорения конверсии в синтез-газ влажного сероводорода [10] и сернистого природного газа [11], а также при изучении плазменно-стимулированного воспламенения водорода в воздухе [12].

Исследовались три варианта использования разряда: когда воздействию подвергается отдельно воздух ($N_2/O_2 = 3.76/1$) либо синтез-газ ($H_2/CO = 1/1$), а затем происходит их мгновенное смешение в стехиометрическом соотношении, и когда разряд воздействует сразу на перемешанную топливовоздушную смесь. При этом начальные температуры компонентов смеси были одинаковы и равны T_0 , давление $P_0 = 1$ атм, а подведенная энергия одинакова во всех трех случаях и равна $E_s = 0.1$ Дж/нсм³ в расчете на единицу количества конечной смеси топлива и воздуха. Величина приведенной напряженности электрического поля E/N варьировалась от 1 до 1000 Тд (1 Тд = 10^{-17} В см²).

Для решения уравнения Больцмана для электронов использовалась программа Bolsig+ [13]. Помимо упругого рассеяния электронов, в качестве первичных учитывались процессы возбуждения вращательных, колебательных степеней свободы исходных компонентов смеси, а также электронное возбуждение и диссоциация электронным ударом. Модель включала 15 процессов с O_2 и 25 процессов с N_2 из [14], 21 процесс с CO и 17 процессов с H_2 из [15]. В отличие от работ [10, 11], в которых для учета вторичных плазмохимических процессов на пути подвода продуктов разряда к реактору смешения в схему течения был добавлен постразрядный реактор с временем пребывания $t_p = 0.1$ мс, в данной работе считалось, что короткоживущие электронные состояния компонентов после выхода из разряда мгновенно тушатся до состояний, соответствующих самым быстрым спонтанным переходам с выделением разницы энергии в тепло, возбуждение состояний азота с энергией выше 13 эВ приводит к диссоциации, а положительные ионы рекомбинируют с электронами. Таким образом, в качестве продуктов разряда рассматривались следующие компоненты: $O_2(V)$, $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, O , $O(^1D)$, $N_2(V)$, $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, N , $CO(V)$, $CO(a^3\Pi)$, C , $H_2(V)$, H .

На рис. 1 показаны состав, поступательная и колебательные температуры молекул после смешения продуктов разряда с остальными компонентами топливовоздушной смеси при возбуждении соответственно воздуха (рис. 1, а), синтез-газа (рис. 1, б), а также смеси воздуха и синтез-газа (рис. 1, в) при начальной температуре всех компонентов $T_0 = 800$ К.

Видно, что при $E/N < 50$ Тд энергия разряда во всех случаях в основном тратится на возбуждение колебаний молекул смеси, за исключением образования электронно-возбужденных молекул $O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ при наличии кислорода.

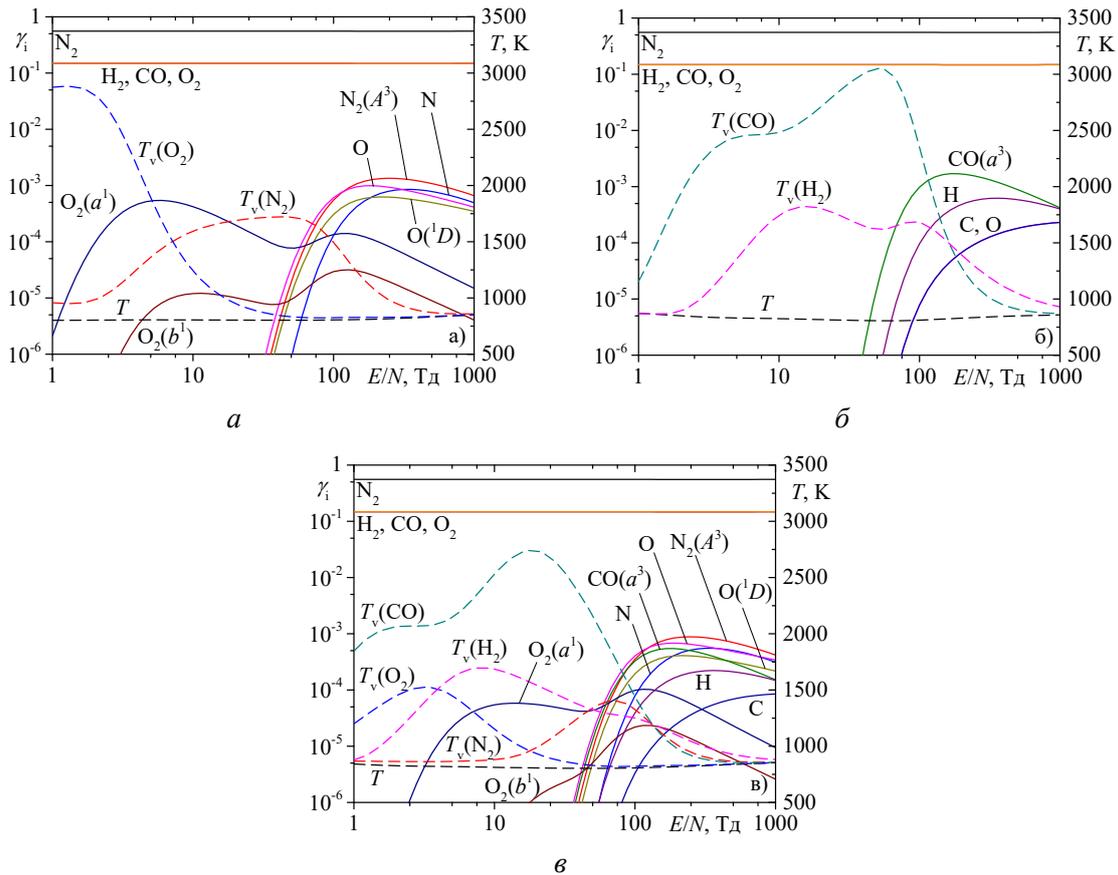


Рис. 1. Состав (сплошные линии), поступательная и колебательные температуры (штриховые линии) после смешения продуктов разряда с остальными компонентами топливоздушной смеси при возбуждении в разряде воздуха (а), сингаза (б) и смеси воздуха и сингаза (в)

При больших E/N в воздухе происходит возбуждение электронных состояний молекул азота, образование атомов O и N , а в синтез-газе – электронное возбуждение состояний $CO(A^3\Pi)$ и диссоциация компонентов с образованием атомов C , O , H . При воздействии разряда на смесь сингаза и воздуха перечисленные процессы происходят одновременно.

3. Модель воспламенения

Моделирование воспламенения проводилось в одномерной постановке с учетом влияния неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул и наличия электронно-возбужденных компонентов и радикалов на выходе из разряда. Использовалось приближение проточного реактора при давлении $P_0 = 1$ атм. Время индукции определялось по моменту повышения поступательной температуры на 200 К от начального значения. Подробнее об использованной системе уравнений (за исключением модели колебательной неравновесности), описывающих течение термически неравновесного реагирующего газа см., например, в [16].

Для правильного описания ускорения воспламенения за счет возбуждения колебательных степеней свободы в разряде была использована методология, разработанная ранее в [17]. Моделирование неравновесного колебательного возбуждения проводилось в модовом приближении, при этом неравновесно возбужденными считались колебания молекул CO , H_2 , O_2 и N_2 . Учитывались междумодовые колебательные $V-V'$ обмены, $V-T$ релаксация, а также взаимное влияние колебаний и химических реакций. Константы скорости $V-T$ релаксации всех компонентов на различных партнерах рассчитывались по формуле Милликена – Уайта [18]

за исключением пар $N_2(V) + H_2O$ и $H_2(V) + H_2$, для которых данные взяты из [19] и [20], соответственно, так как для них приближение Милликена – Уайта дает завышенные результаты.

Базовая кинетическая модель горения сингаза взята из [21]. Данная модель учитывает наличие электронно-возбужденных молекул кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$. Барьеры реакций $N + O_2(X^3\Sigma_g^-, a^1\Delta_g, b^1\Sigma_g^+)$ были уточнены по данным работы [22]. Также, модель содержит реакции с N-содержащими компонентами, которые могут быть важны из-за наличия в разряде электронно-возбужденных молекул кислорода и азота и дальнейшего образования оксидов NO_x , которые, как известно, ускоряют процесс воспламенения [23]. Для учета других электронных состояний кинетическая схема была дополнена реакциями с атомами $O(^1D)$ из [24], с молекулами $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ из [25–27], с молекулами $CO(a^3\Pi)$ из [28] и [29] (каналы реакции $CO(a^3\Pi + O_2)$). Таким образом, в модели воспламенения учитывались следующие электронно-возбужденные компоненты: $O(^1D)$, $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ и $CO(a^3\Pi)$.

3. Результаты моделирования воспламенения

С целью определения оптимальных параметров разряда были проведены параметрические расчеты времени воспламенения сингаза в зависимости от начальной температуры компонентов до воздействия разряда T_0 и приведенной энергии электрического поля E/N . Результаты данных расчетов приведены на рис. 2 для трех описанных выше случаев, когда разряд воздействует отдельно на воздух, синтез-газ или их смесь, соответственно. Для оценки эффективности использования разряда на рисунках штрихпунктирными линиями также приведены времена индукции, когда такой же энергосклад $E_s = 0.1$ Дж/нсм³ тратится на нагрев смеси.

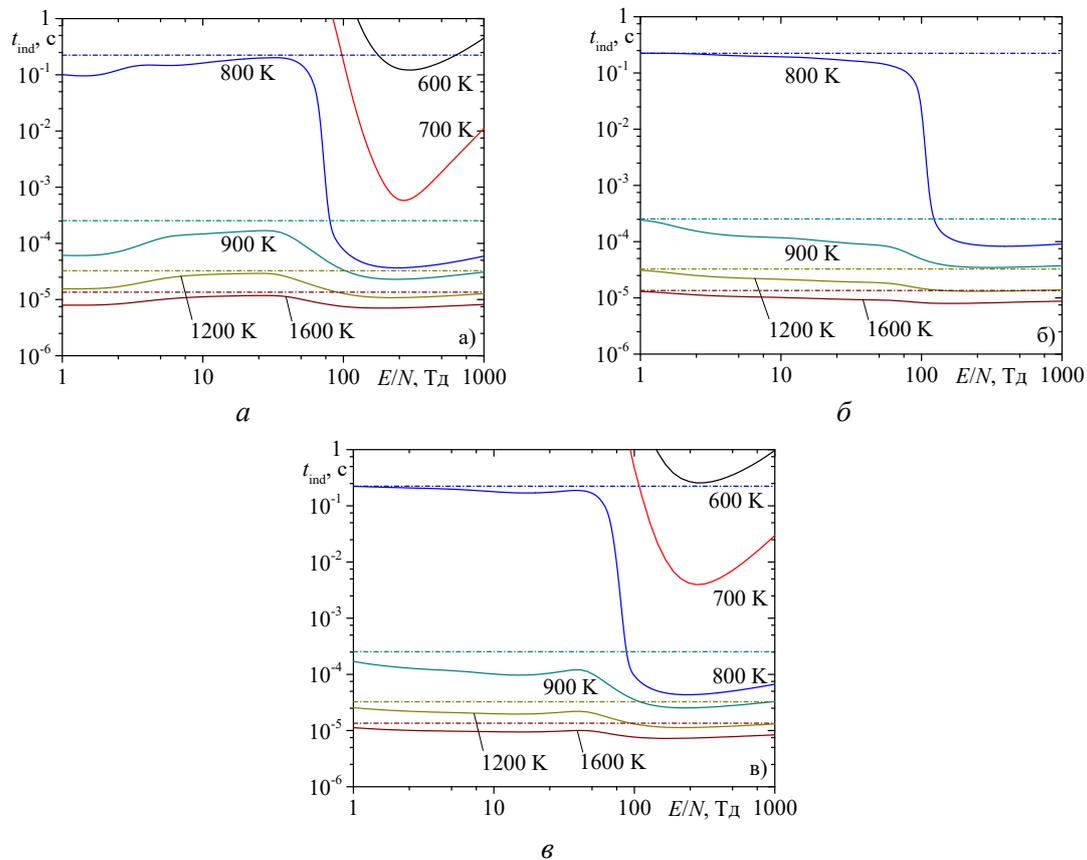


Рис. 2. Время индукции смеси синтез-газ-воздух в зависимости от E/N разряда при возбуждении в разряде воздуха (а), сингаза (б) и смеси воздуха и сингаза (в) для различных начальных температур (сплошные линии). Штрихпунктирными линиями обозначено время индукции при эквивалентном нагреве смеси

Во-первых, из приведенных результатов можно сделать вывод, что воздействие разряда оказывается эффективнее нагрева почти во всем рассмотренном диапазоне параметров. Однако для всех трех случаев существуют диапазоны E/N , когда воздействие разряда наиболее эффективно, причем эти оптимальные значения слабо зависят от температуры.

3.1 Разряд в воздухе

Так, например, при воздействии на воздух, некоторое ускорение воспламенения наблюдается при $E/N < 2$ Тд. Эта область соответствует преимущественному возбуждению колебаний молекул O_2 . Большая колебательная температура кислорода сильно ускоряет реакции подмеханизма воспламенения с участием Н-содержащих компонентов, главным образом следующие:



Из-за большой скорости релаксации колебаний O_2 на H_2 возбуждение этой степени свободы оказывается не очень эффективным [30]. Но несмотря на то, колебания кислорода релаксируют раньше, чем происходит воспламенение, некоторое количество радикалов успевает наработаться за то время, пока колебательная температура O_2 превышает поступательную. За счет этих радикалов происходит некоторое ускорение воспламенения.

Максимальное сокращение времени воспламенения наблюдается при $E/N \approx 250$ Тд. Эта точка соответствует наибольшей концентрации $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ на выходе из разряда. Также, заметными являются концентрации атомов O , $O(^1D)$ и N . Механизм влияния перечисленных компонентов заключается в том, что электронно-возбужденные молекулы азота участвуют в диссоциативном тушении на молекулах кислорода и водорода



с образованием радикалов O и H , которые участвуют в цепном механизме воспламенения. Меньший вклад в ускорение воспламенения вносят атомы N , наработавшиеся в разряде, которые реагируют с молекулярным кислородом с образованием NO и атомов O . Наличие даже малого количества оксида азота может при низких температурах существенно повлиять на воспламенение водородосодержащих смесей [23], так как он участвует в последовательных реакциях



приводящих к увеличению концентрации важного для процесса воспламенения радикала OH .

Также стоит заметить, что область $10 < E/N < 50$ Тд, в которой энергия разряда преимущественно тратится на возбуждение колебаний азота, оказывается самой невыгодной с точки зрения ускорения воспламенения, там воздействие разряда при низких температурах практически эквивалентно нагреву смеси. Это объясняется тем, что азот не участвует в ключевых реакциях, за счет ускорения которых может произойти более раннее воспламенение.

На рис. 3 показаны зависимости времени воспламенения синтез-газа от начальной температуры при воздействии разряда на воздух для $E/N = 1$ и 250 Тд, а также для случая эквивалентного нагрева смеси. Также на рисунке нанесено время диффузии радикалов H из области диаметром 1 см. Для оценки, критерием самовоспламенения смеси будем считать условие, что время диффузии самых легких радикалов из области воспламенения должно быть больше времени их наработки в ходе химических реакций, которое приблизительно

равно времени индукции [5]. Видно, что разряд позволяет снизить температуру самовоспламенения на 65 и 160 К относительно нагрева при соответствующих напряженностях электрического поля, а, например, при $T_0 = 1000$ К – ускорить воспламенение в 2.3 и 5.0 раза, соответственно.

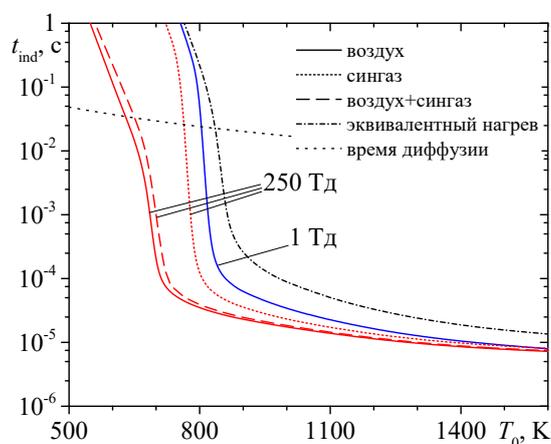
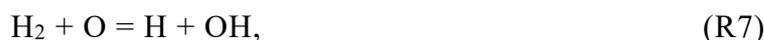


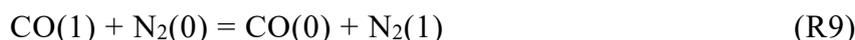
Рис. 3. Время индукции смеси синтез-газ-воздух в зависимости от начальной температуры до воздействия разряда T_0 при возбуждении в разряде воздуха (сплошные линии) при $E/N=1$ и 250 Тд, сингаза (короткие штрихи) при $E/N=250$ Тд и смеси воздуха и сингаза (штриховые линии) при $E/N=250$ Тд. Штрихпунктирной линией обозначено время индукции при эквивалентном нагреве смеси, а пунктиром – время диффузии атомов Н из области 1 см

3.2 Разряд в синтез-газе

Из рис. 1, б и 2, б видно, что возбуждение колебаний СО и Н₂ ($2 < E/N < 40$ Тд) также оказывается отчасти эффективным с точки зрения ускорения воспламенения при $T_0 > 800$ К. При более низкой температуре время воспламенения оказывается заметно больше времени колебательной релаксации, и воспламенение протекает в термически равновесных условиях, что равнозначно эквивалентному нагреву смеси. Но в том случае, когда колебательные температуры компонентов сингаза не успевают срелаксировать за время индукции, их возбуждение приводит к ускорению реакций



а также реакции R2, и, соответственно, к ускорению воспламенения. Хотя возбуждение обоих компонентов происходит при примерно одних и тех же значениях E/N , анализ показал, что возбуждение колебаний Н₂ более эффективно, так как, во-первых, водород участвует в реакции R2 и R7, оказывающих большее влияние на время воспламенения сингаза [31], а во-вторых, энергия из колебательной моды СО активно тратится на возбуждение колебаний N₂ в процессе междумодового V-V' обмена



Как уже было сказано, возбуждение колебаний азота не приводит к сколь-нибудь заметному ускорению воспламенения.

Несмотря на то, что возбуждение колебаний сингаза действительно оказывается эффективнее эквивалентного нагрева, оптимальная удельная напряженность поля разряда соответствует $E/N \approx 250$ Тд, при которой основным продуктом является электронно-возбужденный СО($a^3\Pi$). Данный компонент с близкими скоростями реагирует с молекулярным кислородом с образованием атомов О



и тушится на различных компонентах смеси. Причем тушение, согласно принятой модели колебательной неравновесности, сопровождается выделением энергии в колебания CO так, что $T_v(\text{CO})$ становится существенно выше начального значения. Таким образом, оба канала расходования $\text{CO}(a^3\Pi)$ способствуют ускорению воспламенения.

На рис. 3 показано времени индукции сингаза в зависимости от начальной температуры при воздействии разряда на сингаз при $E/N = 250$ Тд. Как видно, в данном случае использование разряда с подведенной энергией $E_s = 0.1$ Дж/нсм³ позволяет снизить температуру самовоспламенения на 70 К и сократить время индукции при $T_0 = 1000$ К в 3.9 раза.

3.3 Разряд в смеси сингаза и воздуха

Третьим рассмотренным случаем является разряд в готовой стехиометрической смеси синтез-газа и воздуха. Как видно из рис. 1в, параметры плазмы на выходе из разряда не являются простой комбинацией параметров, отвечающих случаям разряда в чистом воздухе и чистом синтез-газе. В частности, колебания кислорода возбуждаются гораздо слабее, а максимум концентрации $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$ смещаются в сторону больших E/N . Этим объясняется то, что в данном случае один из минимумов времени индукции на рис. 2, в соответствует $E/N = 15$ Тд, в отличие от 1 Тд в случае разряда в воздухе. При этом эффективность такого разряда определяется исключительно присутствием $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$ в смеси и оказывается ниже, чем разряда с $E/N = 250$ Тд, когда, как и в случае воздуха, основными продуктами разряда являются электронно-возбужденный азот и атомарный кислород. На рис. 3 показано время индукции при воздействии на смесь разряда с $E/N = 250$ Тд. При низких температурах ($T_0 < 800$ К) разряд с $E/N = 15$ Тд сравнивается по эффективности с простым нагревом смеси, в то время как наработка электронно-возбужденных компонентов и радикалов при $E/N = 250$ Тд все еще позволяет заметно ускорить воспламенение. При более высокой температуре, $T_0 = 1000$ К, разряд с $E/N = 15$ Тд позволяет сократить время индукции в 1.6 раза, а с $E/N = 250$ Тд – в 4.5 раза.

4 Выбор оптимальных параметров разряда

Исходя из проведенного выше анализа можно сделать вывод, что в принятой постановке преимущественное возбуждение колебаний O_2 в воздухе при $E/N = 1$ Тд и дальнейшее смешение с синтез-газом позволяет при некоторых условиях ($T_0 > 900$ К) получить определенное сокращение времени индукции, хоть и не такое существенное, как при больших E/N .

Однако в случае, если процесс организован таким образом, что предположение о мгновенном смешении воздушной плазмы и сингаза нарушается, важную роль могут играть плазмохимические процессы, происходящие за время доставки продуктов разряда до основного реактора и время смешения. Например, на рис. 4 показан состав и параметры смеси сразу после смешения, в случае, когда воздушная плазма с $T_0 = 900$ К перед смешением с сингазом прошла через постразрядный реактор с временем пребывания $t_p = 1$ мс. Как видно, колебательные температуры O_2 и N_2 за это время успевают практически полностью срелаксировать, концентрации $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$ и O незначительно снижаются, а электронно-возбужденный $\text{N}_2(A^3\Sigma_u^+)$ и атомарный азот преобразуются в оксиды NO и NO_2 .

Это приводит к тому, что диапазоны E/N , соответствующие расходованию энергии разряда на возбуждения колебаний, становятся совершенно невыгодными (рис. 5). В то же время, образовавшийся NO вместе с оставшимися радикалами O и электронно-возбужденным $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$ оказывает сравнимый эффект, что и присутствующий изначально электронно-возбужденный азот, хотя механизмы этого влияния различны.

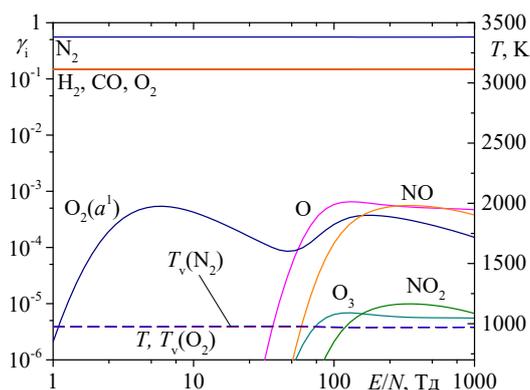


Рис. 4. Состав (сплошные линии), поступательная и колебательные температуры (штриховые линии) после прохождения продуктов разряда в воздухе при $T_0 = 900$ К через постразрядный реактор с временем пребывания $t_p = 1$ мс и смешения с синтез-газом

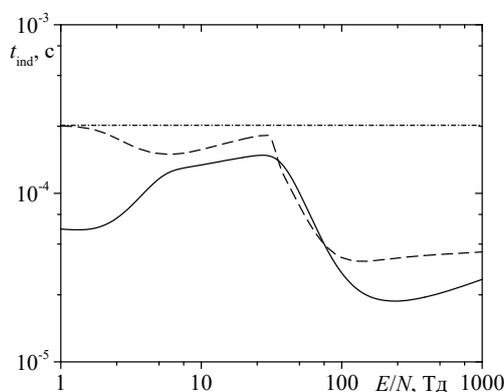


Рис. 5. Время индукции смеси синтез-газ-воздух в зависимости от E/N разряда в воздухе при $T_0 = 900$ К в случае прохождении продуктов разряда через реактор с временем пребывания $t_p = 1$ мс (штриховая линия) и при мгновенном смешении с синтез-газом (сплошная линия). Штрихпунктирной линией обозначено время индукции при эквивалентном нагреве смеси

Также отметим, что небольшой эффект ускорения воспламенения все-таки наблюдается при $E/N = 6$ Тд, что целиком объясняется наличием электронно-возбужденного кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$. Но его образование при помощи разряда в воздухе не выгодно (в отличие от разряда в чистом кислороде [10]), так как оптимальные для этого области E/N как раз совпадают с областями активного возбуждения колебаний компонентов (преимущественно азота), на что тратится основная доля энергии разряда.

Аналогичные выводы о снижении эффективности применения разряда можно сделать и для случая возбуждения синтез-газа, если смешение с воздухом происходит с задержкой. В этом случае в области послесвечения быстро релаксируют колебания компонентов, тушится состояние $CO(a^3\Pi)$, атомы Н рекомбинируют, а атомы О реагируют с водородом, входящим в состав сингаза, с образованием воды.

Таким образом, с учетом неизбежных процессов релаксации и тушения в случае, когда разряд воздействует только на одну из частей смеси, лучшим из рассмотренных способов ускорения воспламенения синтез-газа в воздухе видится организация разряда в уже перемешанной смеси. При этом оптимальным значением приведенной напряженности электрического поля разряда является $E/N = 250$ Тд при котором энергия разряда в основном тратится на возбуждение состояний $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ и $CO(a^3\Pi)$, а также образование атомов О, $O(^1D)$ и N. Ранее, подобные выводы об оптимальных параметрах разряда для случаев воспламенения водорода и углеводородов в воздухе были сделаны в работах [2, 3].

5. Заключение

Построена модель, позволяющая в приближении идеального разряда определять состав и параметры плазмы при воздействии на синтез-газ, воздух или их компоненты и моделировать влияние такого воздействия время индукции синтез-газа. Была исследована кинетика воспламенения сингаза при возбуждении колебаний компонентов и наличии радикалов и основных электронно-возбужденных компонентов, образующихся в разряде, в том числе с учетом возможных постразрядных процессов перед воспламенением.

Было показано, что при различных схемах организации плазменно-стимулированного воспламенения (разряд в воздухе, сингазе или их смеси), существуют несколько оптимальных значений приведенной напряженности электрического поля разряда, при которых удастся добиться существенного сокращения времени индукции и снижения температуры воспламенения. При этом механизмы воздействия разряда на воспламенение оказываются существенно разными.

Было проведено исследования влияния процессов послесвечения в случаях, когда воздействию разряда подвергается либо отдельно воздух, либо синтез-газ, а их смешение происходит не мгновенно после воздействия разряда, а с задержкой по времени. Показано, что в этом случае как сами механизмы воздействия продуктов разряда на воспламенение, так и оптимальные значения E/N могут существенно измениться, а эффективность применения разряда несколько снижается. С учетом того, что при реализации раздельного возбуждения компонентов в разряде задержки перед смешением неизбежны, по-видимому, оптимальной схемой организации воздействия является разряд в перемешанной смеси сингаза и воздуха при $E/N \approx 250$ Тд, когда основными продуктами разряда являются электронно-возбужденный азот и атомарный кислород.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-38-70014).

Литература

1. Starikovskaia S.M. Plasma assisted ignition and combustion // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006. Vol. 39. Pp. R265–R299.
2. Popov N.A. Kinetics of plasma-assisted combustion: effect of non-equilibrium excitation on the ignition and oxidation of combustible mixtures // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2016. Vol. 25. P. 043002 (31pp)
3. Starikovskiy A.Y., Aleksandrov N.L. Plasma-assisted ignition and combustion // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2013. Vol. 39. Pp. 61–110.
4. Sun W., Ju Y. Nonequilibrium plasma-assisted combustion: a review of recent progress // *J. Plasma Fusion Res.* 2013. Vol. 89. No. 4. P. 208–219.
5. Starik A.M., Sharipov A.S., Titova N.S. Intensification of syngas ignition through the excitation of CO molecule vibrations: a numerical study // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2010. Vol. 43. P. 245501.
6. Starik A.M., Sharipov A.S., Titova N.S. The effect of the vibrational excitation of molecules on the shock-induced combustion in a syngas-air mixture // *Combust. Sci. and Tech.* 2011. Vol. 183. Pp. 75–103.
7. Sharipov A.S., Starik A.M. Kinetic mechanism of CO–H₂ system oxidation promoted by excited singlet oxygen molecules // *Combust. Flame.* 2012. Vol. 159. Pp. 16–29.
8. Starik A.M., Loukhovitski B.I., Chernukho A.P. Comprehensive analysis of combustion enhancement mechanisms in a supersonic flow of CH₄–O₂ mixture with electric-discharge activated oxygen molecules // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2012. Vol. 21. No. 3. P. 035015.
9. Starik A.M., Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., Titova N.S. Physics and chemistry of the influence of excited molecules on combustion enhancement // *Phil. Trans. R. Soc. A.* 2015. Vol. 373. P. 20140341.

10. Arsentiev I.V., Savelieva V.A., Titova N.S. Numerical analysis of H₂ formation during partial oxidation of H₂S–H₂O upon activation of oxidizer by an electric discharge // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2018. Vol. 43. No. 41. P. 374001.
11. Savelieva V.A., Titova N.S., Arsentiev I.V. Numerical study of syngas production during partial oxidation of sour natural gases upon activation of oxygen by an electric discharge // *Energy and Fuels*. 2019. Vol. 33. No. 11. Pp. 11887–11898.
12. Арсентьев И.В., Кадочников И.Н. Описание воспламенения водородно-воздушной смеси за ударной волной и в электрическом разряде с учетом неравновесного возбуждения внутренних степеней свободы молекул. // *Тезисы международной научно-технической конференции по авиационным двигателям ICAM-2020*, 18–21 Мая 2021 г., Москва. С. 210–213.
13. Hagelaar G.J.M., Pitchford L.C. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2005. Vol. 14. P. 722.
14. Phelps A.V., Pitchford L.C. Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport. // *Phys. Rev.* 1985. Vol. 31. Pp. 2932–49. http://jila.colorado.edu/~avp/collision_data/electronneutral/electron.txt
15. Alves L.L. The IST-Lisbon database on LXCat//*J. Phys. Conf. Series*. 2014 Vol. 565. No. 1. P. 012007.
16. Арсентьев И.В., Лосев С.А., Титова Н.С., Старик А.М. Неравновесные процессы в плазме азота за фронтом сильной ударной волны // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2010. Т. 10. С. 161–176. <https://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/329/>
17. Arsentiev I.V., Loukhovitski B.I., Starik A.M. Application of state-to-state approach in estimation of thermally nonequilibrium reaction rate constants in mode approximation//*Chem. Phys.* 2012. Vol. 398. Pp. 73–80.
18. Millikan R.C., White D.R. Systematics of vibrational relaxation//*J. Chem. Phys.* 1963. Vol. 39. P. 3209.
19. Center R.E., Newton J.F. Vibrational relaxation of N₂ by H₂O//*J. Chem. Phys.* 1978. Vol. 68. Pp. 3327–3333.
20. Matveyev A.A., Silakov V.P. Kinetic processes in a highly-ionized non-equilibrium hydrogen plasma // *Plasma Sources Sci. Technol.* 1995. Vol. 4. P. 606.
21. Starik A.M., Korobov A.N., Titova N.S. Combustion improvement in HCCI engine operating on synthesis gas via addition of ozone or excited oxygen molecules to the charge: modeling study // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2017. Vol. 42. No 15. Pp. 10475–10484.
22. Пелевкин А.В., Кадочников И.Н., Шарипов А.С. Теоретическое исследование взаимодействия атомарного азота с электронно-возбужденным молекулярным кислородом // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2019. Т. 20. № 2. <https://chemphys.edu.ru/issues/2019-20-2/articles/837/>
23. Slack M., Grillo A. Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen dioxide. NASA Report CR-2896. 1977.
24. Starik A.M., Pelevkin A.V., Titova N.S. Modeling study of the acceleration of ignition in ethane-air and natural gas-air mixtures via photochemical excitation of oxygen molecules // *Combust. Flame*. 2017. Vol. 176. Pp. 81–93.
25. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V. Modelling of vibrational nonequilibrium effects on the H₂-air mixture ignition under shock wave conditions in the state-to-state and mode approximations // *Shock Waves*. 2020. Vol. 30. No. 5. Pp. 491–504.
26. Pelevkin A.V., Sharipov A.S. Reactions of electronically excited molecular nitrogen with H₂ and H₂O molecules: theoretical study // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2018. Vol. 51. No. 18. P. 184003.
27. Herron J.T. Evaluated chemical kinetics data for reactions of N(²D), N(²P), and N₂(A³Σ_u⁺) in the gas phase // *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 1999. Vol. 28. Pp. 1453–1483.
28. Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Loukhovitski B., Sharipov A., Yatsenko P. Experimental study of high temperature oxidation of dimethyl ether, n-butanol and methane // *Combust. Flame*. 2020. Vol. 218. Pp. 121–133.

29. Silva A.F., Morillo-Candas A.S., Tejero-del-Caz A., Alves L.L., Guaitella O., Guerra V. A reaction mechanism for vibrationally-cold low-pressure CO₂ plasmas // *Plasma Sources Sci. Technol.* 2020. Vol. 29. P. 125020 (16pp).
30. Попов Н.А. Влияние неравновесного возбуждения на воспламенение водород-кислородных смесей // *ТВТ.* 2007. Т. 45. № 2. С. 296–315.
31. Арсентьев И.В., Шарипов А.С., Луховицкий Б.И. Уточнение модели колебательной неравновесности с использованием однотоаекторных молекулярно-динамических расчетов применительно к воспламенению синтез-газа за ударной волной // *Авиационные двигатели.* 2021. № 2(11). С. 61–69.

References

1. Starikovskaia, S. M., “Plasma assisted ignition and combustion,” *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 39, 2006, pp. R265–R299.
2. Popov, N. A., “Kinetics of plasma-assisted combustion: effect of non-equilibrium excitation on the ignition and oxidation of combustible mixtures,” *Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 25, 2016, P. 043002 (31pp).
3. Starikovskiy, A. Y., Aleksandrov, N. L., “Plasma-assisted ignition and combustion,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 39, 2013, pp. 61–110.
4. Sun, W., Ju, Y., “Nonequilibrium plasma-assisted combustion: a review of recent progress,” *J. Plasma Fusion Res.*, Vol. 89, No. 4, 2013, pp. 208–219.
5. Starik, A. M., Sharipov, A. S., Titova, N. S., “Intensification of syngas ignition through the excitation of CO molecule vibrations: a numerical study,” *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 43, 2010, pp. 245501.
6. Starik, A. M., Sharipov, A. S., Titova, N. S., “The effect of the vibrational excitation of molecules on the shock-induced combustion in a syngas-air mixture,” *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 183, 2011, pp. 75–103.
7. Sharipov, A. S., Starik, A. M., “Kinetic mechanism of CO–H₂ system oxidation promoted by excited singlet oxygen molecules,” *Combust. Flame*, Vol. 159, 2012, pp. 16–29.
8. Starik, A. M., Loukhovitski, B. I., Chernukho, A. P., “Comprehensive analysis of combustion enhancement mechanisms in a supersonic flow of CH₄–O₂ mixture with electric-discharge activated oxygen molecules,” *Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 21, No. 3, 2012, P. 035015.
9. Starik, A. M., Loukhovitski, B. I., Sharipov, A. S., Titova, N. S., “Physics and chemistry of the influence of excited molecules on combustion enhancement,” *Phil. Trans. R. Soc. A.*, Vol. 373, 2015, P. 20140341.
10. Arsentiev, I. V., Savelieva, V. A., Titova, N. S., “Numerical analysis of H₂ formation during partial oxidation of H₂S–H₂O upon activation of oxidizer by an electric discharge,” *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 43, No. 41, 2018, P. 374001.
11. Savelieva, V. A., Titova, N. S., Arsentiev, I. V., “Numerical study of syngas production during partial oxidation of sour natural gases upon activation of oxygen by an electric discharge,” *Energy and Fuels*, Vol. 33, No. 11, 2019, pp. 11887–11898.
12. Arsentiev, I. V., Kadochnikov, I. N. *Proceedings of International Conference on Aviation Motors ICAM-2020*, 18–21 May 2021, Moscow, pp. 210–213.
13. Hagelaar, G. J. M., Pitchford, L. C., “Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models,” *Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 142005, P. 722.
14. Phelps, A. V., Pitchford, L. C., “Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport,” *Phys. Rev.*, Vol. 31, 1985, pp. 2932–49. http://jila.colorado.edu/~avp/collision_data/electronneutral/electron.txt
15. Alves, L. L., “The IST-Lisbon database on LXCat,” *J. Phys. Conf. Series.*, Vol. 565, No. 12014, P. 012007.

16. Arsentiev, I. V., Losev, S. A., Titova, N. S., Starik, A. M., “Non-equilibrium processes in nitrogen plasma behind strong shock wave front,” *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 10, 2010, <https://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/329/>
17. Arsentiev, I. V., Loukhovitski, B. I., Starik, A. M., “Application of state-to-state approach in estimation of thermally nonequilibrium reaction rate constants in mode approximation,” *Chem. Phys.*, Vol. 398, 2012, pp. 73–80.
18. Millikan, R. C., White, D. R., “Systematics of vibrational relaxation,” *J. Chem. Phys.*, Vol. 39, 1963, P. 3209.
19. Center, R. E., Newton, J. F., “Vibrational relaxation of N₂ by H₂O,” *J. Chem. Phys.*, Vol. 68, 1978, pp. 3327–3333.
20. Matveyev, A. A., Silakov, V. P., “Kinetic processes in a highly-ionized non-equilibrium hydrogen plasma,” *Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 4, 1995, P. 606.
21. Starik, A. M., Korobov, A. N., Titova, N. S., “Combustion improvement in HCCI engine operating on synthesis gas via addition of ozone or excited oxygen molecules to the charge: modeling study,” *Int. J. Hydrogen Energy*, Vol. 42, No. 152017, pp. 10475–10484.
22. Pelevkin, A. V., Kadochnikov, I.N., Sharipov, A. S., “Interaction of Atomic Nitrogen with Electronically Excited Molecular Oxygen: a Theoretical Study,” *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 20, No. 2, 2019. <https://chemphys.edu.ru/issues/2019-20-2/articles/837/>
23. Slack, M., Grillo, A., “Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen dioxide,” NASA Report CR-2896, 1977.
24. Starik, A. M., Pelevkin, A. V., Titova, N. S., “Modeling study of the acceleration of ignition in ethane-air and natural gas-air mixtures via photochemical excitation of oxygen molecules,” *Combust. Flame*, Vol. 176, 2017, pp. 81–93.
25. Kadochnikov, I. N., Arsentiev, I. V., “Modelling of vibrational nonequilibrium effects on the H₂-air mixture ignition under shock wave conditions in the state-to-state and mode approximations,” *Shock Waves*, Vol. 30, No. 5, 2020, pp. 491–504.
26. Pelevkin, A. V., Sharipov, A. S., “Reactions of electronically excited molecular nitrogen with H₂ and H₂O molecules: theoretical study,” *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol. 51, No. 18, 2018, P. 184003.
27. Herron, J. T., “Evaluated chemical kinetics data for reactions of N(²D), N(²P), and N₂(A³Σ_u⁺) in the gas phase,” *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Vol. 28, 1999, pp. 1453–1483.
28. Bystrov, N., Emelianov, A., Eremin, A., Loukhovitski, B., Sharipov, A., Yatsenko, P., “Experimental study of high temperature oxidation of dimethyl ether, n-butanol and methane,” *Combust. Flame*, Vol. 218, 2020, pp. 121–133.
29. Silva, A. F., Morillo-Candas, A. S., Tejero-del-Caz, A., Alves, L. L., Guaitella, O., Guerra, V., “A reaction mechanism for vibrationally-cold low-pressure CO₂ plasmas,” *Plasma Sources Sci. Technol.*, Vol. 29, 2020, P. 125020 (16 pp).
30. Popov, N. A., “The effect of nonequilibrium excitation on the ignition of hydrogen-oxygen mixtures,” *High Temp.*, Vol. 45, No. 2, 2007, pp. 261–279.
31. Arsentiev, I. V., Sharipov, A. S., Loukhovitski, B. I., “Utochnenie modeli kolebatel'noj neravnovesnosti s ispol'zovaniem odnotraektornyh molekuljarno-dinamicheskikh raschetov primenitel'no k vosplameneniju sintez-gaza za udarnoj volnoj,” *Aviatsionnie dvigateli*. No. 2(11), 2021, pp. 61–69.

Статья поступила в редакцию 30 июля 2021 г.