

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКРУЧЕННОГО ПОТОКА ПЛАЗМЫ ВОДЯНОГО ПАРА С МИКРОЧАСТИЦАМИ АЛЮМИНИЯ

**И. П. Завершинский,
Д. П. Порфирьев.**

Самарский национальный
исследовательский университет
имени С.П. Королева,
Московское шоссе, д. 34,
г. Самара, 443086.

Учреждения Российской академии
наук Физического института им.
П.Н. Лебедева РАН, ул. Ново-
Садовая 221 г. Самара, 443011.

ipzav63@mail.ru

Проведены исследования плазмы разряда с вихревым потоком смеси аргон + водяной пар с частицами алюминия в трубке плазменного вихревого реактора (ПВР). Измерены параметры разряда, плазмы и рабочего потока в ПВР. Для оценки электронной температуры, вращательной и колебательной температур возбужденных молекулярных комплексов, температуры металлических кластеров, электронной концентрации плазмы использованы спектральные методы. Предложена кинетическая схема для расчета рабочих режимов в реакторе, при использовании разряда на водяных парах с частицами алюминия. Проведено численное моделирование вихревого потока чистого водяного пара с частицами алюминия в присутствии источника нагрева.

Ключевые слова: *закрученный поток, алюминий, кинетическая схема, параметры разряда*

1 Введение

Водород считается одним из лучших носителей чистой энергии, благодаря его малому весу, высокой плотности энергии и нулевому загрязнению. Однако на пути к его экономически выгодному производству и безопасному хранению должны быть преодолены значительные технические проблемы. Водород может быть получен различными способами, такими как электролитическое разложение воды, электролиз водных растворов солей, паровая конверсия природного газа [1,2], расщепление воды с использованием металла (с применением металлических добавок с сопутствующей инъекцией металла), в реакциях металлического алюминия или цинка с водными щелочными растворами и т.д.

Методы, основанные на горении металлических частиц – это эффективный способ преобразования химической энергии различных неорганических соединений в тепловую энергию. Металлическое топливо имеет значительно большее объемное энерговыделение, чем традиционные углеводородные смеси, включая жидкие

углеводороды и даже в большей степени водород. Кроме того, в процессе окисления металлических частиц достигается высокая температура продуктов. Особое место среди таких методов отводится алюмоводородной энергетике [3,4], в области которой в течение последних десяти лет активно ведутся экспериментальные и теоретические исследования. На сегодняшний день достигнут заметный прогресс в области относительно низких рабочих температур, когда реакция окисления алюминия протекает при высоких степенях избытка окислителя в жидкой фазе. Однако для многих применений скорость реакции в этих условиях недостаточна.

Другой перспективный способ производства водорода основан на реакции гидратации катодных эрозионных кластеров или нанопорошка алюминия, введенного в зону реакции в водяном паре, стимулируемого плазменными образованиями [5,6]. Достижения в этой новой области энергии весьма ощутимы. Но в указанном направлении имеются известные проблемы и трудности, связанные с низкой полнотой реакции окисления паров металла в водяном паре, низкой скоростью

этой реакции и сложностью накопления и хранения полученного взрывоопасного водорода.

Однако, было показано, что возможны устойчивые режимы генерации в вихревых установках с использованием гетерогенной плазмы, созданной в разряде со значительной эрозией твердых электродов и при использовании паровых смесей аргон-водород или аргон-вода [5]. В таких режимах возле катода образовывается гетерогенная плазма, состоящая из жидких металлических микрокапель и наноразмерных частиц электродного материала. Закрутка потока позволяет локализовать области высокой температуры, что помогает управлять параметрами, при которых протекают физико-химические процессы, и уменьшить износ оборудования. В таких плазменно-вихревых реакторах (ПВР) могут быть достигнуты значения тепловой энергии выходного плазменного потока, заметно превышающие значение электрической энергии, затрачиваемой на создание электроразрядной плазмы. Кроме того, достигается существенный выход водорода. Стоимость произведенного водорода с учетом стоимости избыточного тепла составляет (при текущих ценах алюминиевого порошка около \$1.7 за килограмм) около \$1 за килограмм водорода, что является лучшим среди известных показателей.

В настоящей работе решается модельная задача в упрощенной постановке – пароводяная плазма, разрядная трубка без держателей и упрощенная кинетическая схема.

Цель работы - разработать основы перспективной технологии для ряда важных применений в областях, где требуются мобильные источники энергии, в частности те, которые работают на водороде, и технологии, которые обеспечили бы производство водорода в обычных условиях.

2 Численное моделирование

В данном разделе будет проведен численный расчет упрощенной модели ПВР.

Реализованный подход предполагает учет следующих факторов: геометрии экспериментальной установки, турбулентной динамики потока, тепловыделения вследствие протекания химических реакций и энерговыделения в газовом разряде без учета аргона, и химической кинетики алюмо-водяной смеси. Геометрия рабочей секции установки показана на рисунке 1. Расчет проводился без учета наличия держателей.

Через завихритель могут независимо осуществляться как осевая, так и тангенциальная подача газа. Длина трубки, считая от выхода из завихрителя, из которого подаётся газ 50 см, радиус 2.5 см.

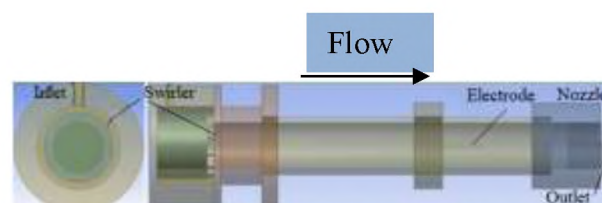


Рисунок 1. Схема расчетной модели.

Анод представляет собой цилиндр длиной 10.5 см и радиусом 0.25 см, у которого ближайший к завихрителю торец расположен на расстоянии 34 см. Источник тепла, моделирующий нагрев в разряде, расположен между анодом и катодом и представляет собой эллипсоид с полуосями 0.5 см, 0.5 см и 2 см, вытянутый вдоль оси симметрии системы. Подвод алюминия осуществлялся через осевую трубку радиусом 0.5 см, выход которой находится на расстоянии 31 см от выхода завихрителя, непосредственно впрыскивающую алюмо-водяную смесь в поток. Отвод газа из системы осуществляется через сходящееся до радиуса 0.6 см сопло, которое переходит в трубку длиной 4.5 см.

Мы проанализировали несколько случаев расположения и формы электродов: два толстых сплошных цилиндрических электрода, толстый сплошной анод и тонкий сплошной катод, толстый сплошной анод и трубчатый катод и тонкий сплошной анод и трубчатый катод. Численное моделирование показало, что существует комбинация

формы и расположения электродов, при которой практически отсутствует противоток и энергия передается вниз по потоку. Это может быть достигнуто с помощью комбинации тонкого анода и трубчатого катода, расположенного на выходе из разрядной трубки, что подтверждено экспериментально.

Газовая динамика многокомпонентного реагирующего потока описывалась при помощи модели смешения с применением RANS – подхода (уравнения Навье-Стокса, осреднённые по Рейнольдсу)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i v_j)}{\partial x_j} &= \\ &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (1) \\ P &= \frac{\rho T}{M} \quad E = h - \frac{P}{\rho} + \frac{v^2}{2} \end{aligned}$$

По индексам i, j, k в уравнениях (1) и уравнении для энергии идет суммирование, $i, j, k = 1, 2, 3$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[v_i(\rho E + P)]}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\kappa_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[v_i \mu_{eff} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{2\delta_{ij}}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \right] &+ \nabla \left(\sum_{i=1}^n h_i \vec{j}_i \right) + N \end{aligned}$$

Для молярной концентрации i -й компоненты значение массовой доли каждой компоненты Y_i определялось на основе решения системы

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \vec{j}_i + R_i \quad (2)$$

где E, P и T – объемная плотность энергии, давление и температура газа; N – объемная плотность мощности источника нагрева, c_p – теплоемкость при постоянном давлении, μ, μ_{eff} – коэффициенты турбулентной и эффективной вязкости, κ_{eff} – коэффициент эффективной теплопроводности, M – молярная масса смеси, R_i – слагаемое, ответственное за

генерацию i – й компоненты в ходе химических реакций, \vec{j}_i – диффузионный поток. В уравнение для энергии включено слагаемое, описывающее диффузионный перенос энтальпии h_i .

Оценки и молекулярно-динамические расчёты [7, 8] показывают, что для некрупных частиц алюминия разрушение поверхностного слоя и испарение происходят очень быстро, что в свою очередь позволяет рассматривать алюминий как полностью находящийся в жидкой или газовой фазе. Вся информация о стимулированной реакции окисления алюминия изложена в работах [5, 15, 16].

В данном расчете в качестве рабочей смеси рассматривалась смесь водяного пара с алюминием. Набор использованных для расчета реакций выбран в соответствии с результатами работ [9-17]. Соответствующие константы скоростей реакций, представленные в виде

$$k(T) = A \left(\frac{T}{298} \right)^n e^{-\frac{E_a}{RT}},$$

где A – предэкспоненциальный множитель, E_a – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная, T – температура в градусах Кельвина, приведены в таблице 1.

Схема соответствует конечному этапу формирования разряда в водяных парах, когда наработка металлических частиц велика и основным источником нагрева плазмы являются экзотермические реакции, идущие между металлическими частицами и водородом, температура нейтральной компоненты достигает 4000 К, так что в разряде имеет место практически полная термическая диссоциация водяного пара, рис. 2. Это дает возможность не рассматривать плазмохимическую кинетику, что сильно упрощает расчет. Численное моделирование нестационарного трехмерного турбулентного закрученного потока было выполнено с использованием пакета программ ANSYS FLUENT 15.0, который решает основные уравнения с использованием метода конечных объемов. Для пространственной дискретизации плотности, импульса, энергии и

турбулентных величин используется схема второго порядка. Применение схем высшего порядка не изменило скоростей и профилей концентрации.

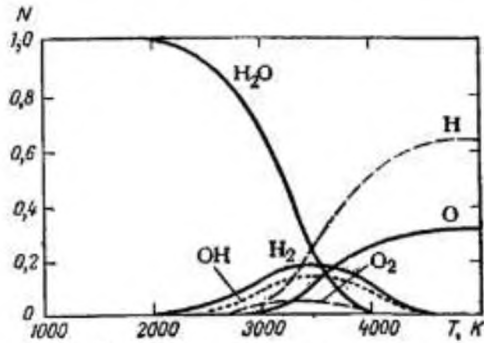


Рисунок 2. Относительное содержание продуктов термической диссоциации водяного пара по данным [9].

Диффузионные члены рассчитывались с использованием центральной разностной схемы второго порядка точности. Значения давления на гранях интерполируются, используя схему PRESTO! из-за вихревого характера потока.

Вид коэффициентов μ_{eff} и K_{eff} определяется используемой моделью турбулентности.

Таблица 1. Газофазные реакции и константы скоростей

№	Реакция	$A, \text{см}^3 \text{с}^{-1} \text{моль}^{-1}$	n	$E_a, \text{кДж}$
1	$\text{Al} + \text{O} + \text{O}_2 = \text{AlO} + \text{O}_2$	$3.30\text{E}+17$	-1	0
2	$\text{Al} + \text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlO} + \text{H}_2\text{O}$	$8.40\text{E}+17$	-1	0
3	$\text{Al} + \text{O} + \text{H}_2 = \text{AlO} + \text{H}_2$	$3.30\text{E}+17$	-1	0
4	$\text{Al} + \text{O}_2 = \text{AlO} + \text{O}$	$2.31\text{E}+13$	0.17	0
5	$\text{AlO} + \text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{O}$	$4.62\text{E}+14$	0	83166480
6	$\text{O}_2 + \text{M} = \text{O} + \text{O} + \text{M}$	$1.20\text{E}+14$	0	$4.51\text{E}+08$
7	$\text{O}_2 + \text{O}_2 = \text{O} + \text{O} + \text{O}_2$	$9.80\text{E}+24$	-2.5	$4.93\text{E}+08$
8	$\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{O} + \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$1.20\text{E}+19$	-1	$4.93\text{E}+08$
9	$\text{Al} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH} + \text{H}$	$3.24\text{E}+08$	1.5637	9106929
10	$\text{Al} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlO} + \text{H}_2$	$6.29\text{E}+10$	0.8406	9670347
11	$\text{H} + \text{O} + \text{M} =$	$6.20\text{E}+16$	-0.6	0

	$\text{OH} + \text{M}$			
12	$\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	$4.71\text{E}+18$	-1	0
13	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	$1.59\text{E}+17$	0.927	70568520
14	$\text{H}_2 + \text{O} = \text{OH} + \text{H}$	$3.87\text{E}+04$	2.7	26188965
15	$\text{H}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$2.16\text{E}+08$	1.51	14393751
16	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$2.10\text{E}+08$	1.4	-1659507
17	$\text{H} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O}$	$1.05\text{E}+14$	0.23	648180
18	$\text{H} + \text{OH} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$1.40\text{E}+23$	-2	0
19	$\text{H} + \text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	$8.34\text{E}+15$	0	0
20	$\text{H} + \text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2$	$2.00\text{E}+20$	-1	0
21	$\text{H}_2\text{O} = \text{H} + \text{OH}$	$3.95\text{E}+14$	0	$4.46\text{E}+08$
22	$\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{H} + \text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	$1.60\text{E}+17$	0	$4.78\text{E}+08$
23	$\text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 = \text{H} + \text{OH} + \text{O}_2$	$3.50\text{E}+15$	0	$4.4\text{E}+08$
24	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$7.00\text{E}+17$	-0.8	0
25	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{O}_2$	$2.70\text{E}+18$	-1	0
26	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$2.09\text{E}+18$	-0.8	0
27	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$1.56\text{E}+18$	-0.8	0
28	$\text{HO}_2 + \text{H} = 2\text{OH}$	$1.50\text{E}+14$	0	4198212
29	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2 + \text{O}_2$	$2.50\text{E}+13$	0	2898528
30	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$5.00\text{E}+12$	0	5896776
31	$\text{HO}_2 + \text{O} = \text{O}_2 + \text{OH}$	$2.00\text{E}+13$	0	0
32	$\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$6.02\text{E}+13$	0	0
33	$2\text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	$4.20\text{E}+14$	0	50109300
34	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = 2\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	$1.85\text{E}+18$	0	$1.9\text{E}+08$
35	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}_2 = 2\text{OH} + \text{H}_2$	$2.90\text{E}+17$	0	$1.9\text{E}+08$
36	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 = 2\text{OH} + \text{O}_2$	$1.20\text{E}+17$	0	$1.9\text{E}+08$
37	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	$1.70\text{E}+12$	0	15693435
38	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} =$	$1.00\text{E}+13$	0	14992902

	$H_2O + OH$								
39	$H_2O_2 + O = HO_2 + OH$	2.80E+13	0	26788116					
40	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$	7.00E+12	0	5997327					
41	$Al_2O_3 = Al_2O_2 + O$	3.00E+15	0	4.08E+08					
42	$Al_2O_3 = AlO_2 + AlO$	3.00E+15	0	5.31E+08					
43	$Al_2O_2 = 2AlO$	1.00E+15	0	4.93E+08					
44	$Al_2O_2 = Al + AlO_2$	1.00E+15	0	6.23E+08					
45	$Al_2O_2 = Al_2O + O$	1.00E+15	0	4.36E+08					
46	$Al_2O = AlO + Al$	1.00E+15	0	5.57E+08					
47	$AlO_2 = AlO + O$	1.00E+15	0	3.7E+08					
48	$AlOH = AlO + H$	1.00E+15	0	4.8E+08					
49	$AlOH = Al + OH$	1.00E+15	0	5.52E+08					
50	$Al + HO_2 = AlO + OH$	1.33E+13	0.17	0					
51	$Al + HO_2 = AlH + O_2$	1.33E+13	0.17	0					
52	$AlO + H + M = AlOH + M$	1.99E+15	0.5	0					
53	$Al + OH + M = AlOH + M$	2.16E+15	0.5	0					
54	$AlOH + H = AlO + H_2$	2.66E+08	0.82	65183640					
55	$Al + H + M = AlH + M$	9.43E+14	0.5	0					
56	$AlH_2 = AlH + H$	1.46E+15	0	1.94E+08					
57	$AlH_3 = AlH + H_2$	1.48E+13	0	2.56E+08					
58	$AlH + H = Al + H_2$	7.15E+13	0.17	0					
59	$AlH_2 + H = AlH + H_2$	2.00E+13	0	0					
60	$AlH_3 + H = AlH_2 + H_2$	4.75E+09	1.5	0					
61	$AlOH + O = AlO + OH$	7.53E+12	0.5	36979500					
62	$AlO + OH + M = AlO_2H + M$	2.62E+15	0.5	0					
63	$AlO + AlH = AlOH + Al$	2.54E+13	0.17	0					
64	$AlO_2 + H + M = AlO_2H + M$	2.19E+15	0.5	0					
65	$AlOH + O + M = AlO_2H + M$	2.94E+15	0.5	0					
66	$AlO + HO_2 = AlOH + O_2$	2.19E+14	-0.08	-290850					
67	$AlOH + HO_2 = AlO_2H + OH$	3.76E+13	0.14	0					
68	$AlO_2 + H_2O = AlO_2H + OH$	2.63E+02	3.26	28503300					
69	$AlO_2 + H_2 = AlO_2H + H$	4.62E+10	1.39	24431400					
70	$AlO_2 + OH = AlO_2H + O$	2.57E+13	0.17	0					
71	$AlO_2H + O = AlOH + O_2$	2.14E+13	0.17	0					
72	$H + H + M = H_2 + M$	6.40E+17	-1	0					
73	$H + H + H_2 = H_2 + H$	9.72E+16	-0.6	0					
74	$H + H + H_2O = H_2 + H_2O$	1.00E+19	-1	0					
75	$H + H + H = H_2 + H$	3.20E+15	0	0					
76	$H_2 + M = H + H + M$	5.88E+18	-1.1	4.36E+08					
77	$H_2 + H_2 = H + H + H_2$	3.46E+14	0	4.02E+08					
78	$H_2 + O_2 = H + H + O_2$	3.46E+14	0	4.02E+08					
79	$H_2 + H_2O = H + H + H_2O$	8.48E+19	-1.1	52530					
80	$H_2O + O = OH + OH$	5.75E+13	0	75222120					
81	$H + H_2O = H_2 + OH$	1.87E+14	0	86698230					
82	$H_2 + OH = H + H_2O$	2.53E+18	0.48	14127000					
83	$O + OH = H + O_2$	8.91E+12	0	-2085810					
84	$H + O_2 = O + OH$	8.65E+14	-0.24	68142000					
85	$O + H_2 = OH + H$	5.10E+04	2.67	26259600					
86	$OH + H = O + H_2$	4.88E+03	2.8	16204500					
87	$HO_2 + O_2 = H + O_2 + O_2$	2.80E+15	0	1.91E+08					
88	$H_2O + O_2 = HO_2 + OH$	5.60E+13	0.17	3.04E+08					
89	$2OH = HO_2 + H$	1.20E+13	0	1.68E+08					
90	$H_2 + O_2 = H + HO_2$	1.94E+14	0	2.47E+08					
91	$O_2 + OH = O + HO_2$	2.23E+13	0	2.2E+08					
92	$H_2 + HO_2 = H_2O_2 + H$	3.01E+13	0	1.09E+08					
93	$OH + H_2O = H + H_2O_2$	2.40E+14	0	3.37E+08					

94	$H_2O + HO_2 =$ $OH + H_2O_2$	2.80E+13	0	1.37E+08
----	----------------------------------	----------	---	----------

Здесь для замыкания системы (1), (2) применялась модель турбулентности Спаларта–Аллмараса [18] в модификации, позволяющей учитывать кривизну линий тока. Выбор этой модели обосновывается рядом численных экспериментов продемонстрировавших хорошее согласие с экспериментальными данными [19,20]. Изменения давления в реакторе не превышают нескольких процентов и зависимостью скоростей реакций от давления можно пренебречь. На входе завихрителя задавался массовый расход газа в 2 г/с и его температура $T = 300$ К. Массовый расход через осевой подвод устанавливался равным 1 г/с, а массовая доля алюминия – 0.01. Давление газа на выходе из трубы приравнивалось атмосферному. На боковых стенках и поверхностях электродов ставились условия прилипания.

Учитывая незначительное содержание частиц алюминия и их ультра- и нанодисперсный размер, дополнительно принималось допущение о равенстве скоростей и температур газовой и конденсированной фаз, а также не учитывалось влияние фазовых переходов в уравнении неразрывности.

Расчетная сетка состояла из $4 \cdot 10^6$ (от $3.6 \cdot 10^6$ до $4.25 \cdot 10^6$) ячеек, около стенок была структурированной и сгущалась для минимизации влияния численной диффузии и устойчивого расчета структуры течений с большими градиентами. Дальнейшее ее измельчение не приводило к изменению результатов более чем на 1–2%. Сетка состоит из гексаэдрических ячеек. Максимальная скошенность ячеек равна 0.9, минимальная ортогональность 0.11. Средние значения ортогональности и скошенности равны 0.59 и 0.21 соответственно. Такие показатели являются достаточными для проведения расчета рабочих режимов в реакторе. У сетки нет инфляции по границам, т.к. ячейки достаточно мелкие и для начального этапа

расчета инфляция не нужна.

Для связи поля скоростей с полем давления при расчете несжимаемых течений широко используется процедура SIMPLE. Согласно этому методу, сначала задается некоторое приближенное поле давления, используя которое определяется приближенное поле скоростей. Затем решается так называемое уравнение для поправки давления, которое выводится из уравнения неразрывности и уравнений движения. С учетом этой поправки давления определяется поправка к полю скоростей. После этого решается уравнение переноса для других величин (температура, турбулентность и др.). Эта процедура итеративно повторяется до тех пор, пока не будет достигнуто условие сходимости решения. Основным критерием сходимости является достижение выполнения уравнения неразрывности с заданной точностью, также проверяются невязки поля скоростей и остальных величин, для которых решаются уравнения (1), (2). Сходимость расчета контролировалась с использованием мониторинга невязок и выполнением условия сохранения массового расхода газа. Обработка результатов и визуализация решений проводилась в пакете Ansys CFD-post.

Результаты расчетов полей температуры и молярной концентрации некоторых компонент смеси показаны на рисунках 3-7.

Все рисунки соответствуют мощности, вкладываемой в разряд, равной 1000 Вт.

На рисунке 8 показано, что при создании оптимальной конфигурации установки практически удалось исключить появление зон противотока, наличие которых отрицательно сказывается на эффективности установки, так как приводит к заметному нагреву элементов конструкции. Газовая смесь в центре прогревается до высоких температур порядка 4000 К, рисунке 3), что совпадает с экспериментальными данными [5].

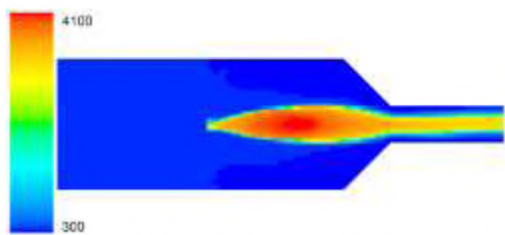


Рисунок 3. Распределение температуры потока, К

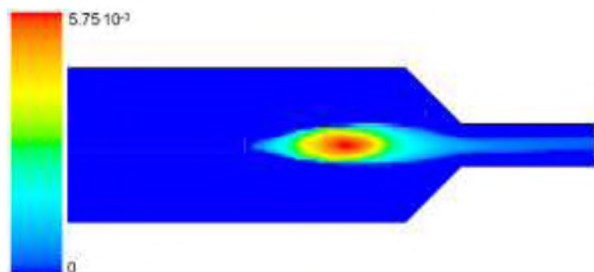


Рисунок 4. Распределение молярной концентрации атомарного водорода в потоке, кмоль/м³

На выходе концентрация водорода в соответствии с расчетами равнялась 10.14 мг/с. На эксперименте наблюдалась выходная концентрация водорода, равная 15,84 мг/с. Таким образом, мы имеем достаточно удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных.

Также видно, что горение разряда продолжается и в выводящей трубке, что тоже совпадает с экспериментальными данными. Концентрации реагирующих компонент смеси (рисунках 4-6), кроме водяного пара (рисунке 5) объяснимо имеют максимальные значения в разрядной области.

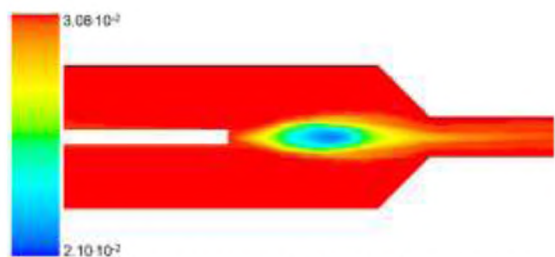


Рисунок 5. Распределение молярной концентрации водяного пара в потоке, кмоль/м³.

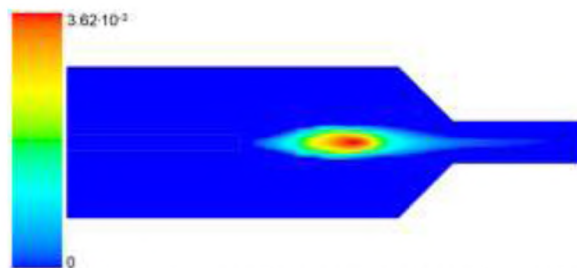


Рисунок 6. Распределение молярной концентрации атомарного кислорода в потоке, кмоль/м³

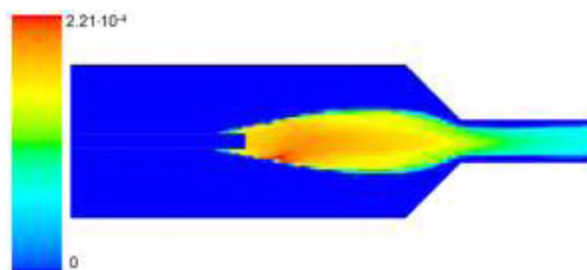


Рисунок 7. Распределение молярной концентрации алюминия в потоке, кмоль/м³

Суммарная через выходное отверстие мощность составила 2155 Вт при подаваемых 1000 Вт. Таким образом, коэффициент преобразования энергии COP в рамках данного расчета равен $COP \approx 2.16$, что качественно совпадает с экспериментальными результатами.

3 Заключение

В работе приведены результаты экспериментальных и теоретических исследований гетерогенного разряда в смеси водяных паров и микрочастиц алюминия в закрученном потоке при атмосферном давлении. Создан диагностический комплекс, позволяющий измерять параметры плазмы и потока. Найдены электронная и газовая температуры, концентрация электронов в плазме установки, определена величина избытка тепловой мощности COP.

Теоретически найдена комбинация формы и расположения электродов, при которой практически отсутствует противоток и энергия передается вниз по потоку. Создана математическая модель кинетики плазмохимических реакций для расчета рабочих режимов в реакторе при использовании разряда на водяных парах с

частицами алюминия. Проведено численное моделирование вихревого потока чистого водяного пара с частицами алюминия в присутствии источника нагрева. Отметим, что вместо алюминия возможно использование и порошков других металлов, например никеля. Получены пространственно-временные распределения параметров потока, таких как скорость, температура и давление, а также распределения концентраций компонентов разрядной смеси.

Работа поддержана Минобрнауки РФ в рамках Государственного задания вузам и научным организациям в сфере научной деятельности, проект № FSSS-2020-0014.

Список использованных источников

- [1] Palo D.R., Dagle R.A., Holladay J.D. Methanol steam reforming for hydrogen production // *Chem. Rev.* 2007. V. 107. N 10. P. 3992.
- [2] Астановский Д.Л., Астановский Л.З., Кустов П.В. Энергосберегающее, экологически чистое получение водорода из углеводородного сырья // *Нефтегазохимия*. 2016. № 3. С. 10.
- [3] Шейндлин А.Е. Алюмоводородная энергетика // *Вестник РАН*. 2010. Т.80. № 3. С. 218.
- [4] Bityurin V. Assessment of Characteristics of MHD Generators on Aluminum Oxidation Products // *AIAA Paper* 2011-1074.
- [5] Klimov A., Bityurin V., Grigorenko A. et.al. Plasma Assisted Combustion of Heterogeneous Fuel in High-Speed Airflow // *AIAA Paper*. 2009-1411.
- [6] Klimov A., Kazanskii P., Belov N., Tolkunov B., Zavershinskii I., Molevich N. Thermal Energy Release and Hydrogen Production in Swirl Heterogeneous Plasma-Chemical Reactor // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2018. V.1112. 012024.
- [7] Starik A.M., Kuleshov P.S., Sharipov A.S., Titova N.S., Tsai C.-J. Numerical analysis of nanoaluminum combustion in steam // *Combustion and Flame*. 2014. V. 161. №6. P. 1659-1667.
- [8] Campbell T.J., Aral G., Ogata S., Kalia R.K., Nakano A., Vashishta P. Oxidation of aluminum nanoclusters // *Phys. Rev.* 2005. V. B.71. № 20. 205413.
- [9] Kireev V.A. Practical calculation methods in the thermodynamics of chemical reactions. [2nd ed. rev. and additional] M.: Nauka, 1975. 536 p.
- [10] Ibragimova L.B. Recommended rate constants of chemical reactions in an H₂-O₂ gas mixture with electronically excited species O₂(1Δ), O(1D), OH(2Σ) involved. M.: Institute of Mechanics of Lomonosov Moscow State University, 2003. 31 p.
- [11] Starik A.M., Savelyev A.M., Titova N.S. Features of ignition and combustion of composite fuels containing

- aluminum nanoparticles (review) // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 2015. Vol. 51.No. 2.P. 64.
- [12] Washburn E.B., Trivedi J.N., Catoire L., Beckstead M.W. The simulation of the combustion of micrometer-sized aluminum particles with steam // *Combust. Sci. and Tech.* 2008. V. 180. P. 1502.
- [13] Коршунов О.В., Чиннов В.Ф., Кавыршин Д.И. Кинетическая модель окисления Al в гетерогенной алюмо-водяной плазме. Отрицательные ионы // *ТВТ*. 2017. Т. 55, № 2. С. 189–196.
- [14] Бычков В.Л., Юровский В.А. Моделирование пучковой плазмы паров воды // *ТВТ*. 1993. Т.31. №. 1. С. 8.
- [15] Битюрин В.А., Григоренко А.В., Ефимов А.В., Климов А.И., Коршунов О.В., Кутузов Д.С., Чиннов В.Ф. Спектральный и кинетический анализ газоразрядной гетерогенной плазмы в потоке смеси Al, H₂O, Ar // *ТВТ*. 2014. Т. 52. № 1. С. 3.
- [16] Битюрин В.А., Климов А.И., Коршунов О.В., Чиннов В.Ф. Кинетическая модель окисления Al парами воды в гетерогенной плазме. Газофазная кинетика // *ТВТ*. 2014. Т. 52. № 5. С. 657.
- [17] Битюрин В.А., Климов А.И., Коршунов О.В., Чиннов В.Ф. Кинетическая модель окисления Al парами воды в гетерогенной плазме. Гетерофазная кинетика // *ТВТ*. 2015. Т. 53. №1. С. 23.
- [18] Spalart P.R. Strategies for Turbulence Modelling and Simulations // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2000. V. 21. P. 252.
- [19] Gorbunova A., Klimov A., Molevich N., Moralev I., Porfiriev D., Sugak S., Zavershinskii I. Precessing vortex core in a swirling wake with heat release // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2016. V. 59. P. 100.
- [20] Завершинский И.П. Климов А.И., Молевич Н.Е., Сугак С.С. Акустически индуцированное формирование спиральных структур в закрученном потоке аргона в присутствии импульсно-периодического ВЧЕ-разряда // *ТВТ*. 2018. Т. 56. № 3. С. 472.

NUMERICAL SIMULATION OF THE SWIRLED FLOW OF WATER STEAM PLASMA WITH ALUMINUM MICROPARTICLES

**I. P. Zavershinskii,
D. P. Porfirev**

Samara University,
Moskovskoe shosse 34,
Samara, 443086

Samara Branch of Physical Institute,
Novo-Sadovaya str., 221,
Samara, 443011

ipzav63@mail.ru

A study of the discharge plasma with a vortex flow of an argon + water vapor mixture with aluminum particles in a tube of a plasma vortex reactor (PVR) was carried out. The parameters of the discharge, plasma, and working flow in the PVR have been measured. Spectral methods were used to estimate the electron temperature, rotational and vibrational temperatures of excited molecular complexes, the temperature of metal clusters, and the electron density of plasma. A kinetic scheme is proposed for calculating the operating modes in a reactor using a water vapor discharge with aluminum particles. Numerical simulation of a vortex flow of pure water vapor with aluminum particles in the presence of a heating source is carried out.

Keywords Swirling flow, aluminum, kinetic scheme, discharge parameters

References

- [1] Palo D.R., Dagle R.A., Holladay J.D. Methanol steam reforming for hydrogen production // Chem. Rev. 2007. V. 107. N 10. P. 3992.
- [2] Astanovskii D.L., Astanovskii L.Z., Kustov P.V. Energy-saving, environmentally friendly production of hydrogen from hydrocarbon raw materials // Neftegazokhimiya. 2016. № 3. P. 10.
- [3] Sheindlin A.E. Aluminum-hydrogen energy // Herald of the RAS. 2010. V.80. № 3. P. 218.
- [4] Bityurin V. Assessment of Characteristics of MHD Generators on Aluminum Oxidation Products // AIAA Paper 2011-1074.
- [5] Klimov A., Bityurin V., Grigorenko A. et.al. Plasma Assisted Combustion of Heterogeneous Fuel in High-Speed Airflow // AIAA Paper. 2009-1411.
- [6] Klimov A., Kazanskii P., Belov N., Tolkunov B., Zavershinskii I., Molevich N. Thermal Energy Release and Hydrogen Production in Swirl Heterogeneous Plasma-Chemical Reactor // Journal of Physics: Conf. Series. 2018. V.1112. 012024.
- [7] Starik A.M., Kuleshov P.S., Sharipov A.S., Titova N.S., Tsai C.-J. Numerical analysis of nanoaluminum combustion in steam // Combustion and Flame. 2014. V. 161. №6. P. 1659-1667.
- [8] Campbell T.J., Aral G., Ogata S., Kalia R.K., Nakano A., Vashishta P. Oxidation of aluminum nanoclusters // Phys. Rev. 2005. V. B.71. № 20. 205413.
- [9] Kireev V.A. Practical calculation methods in the thermodynamics of chemical reactions. [2nd ed. rev. and additional] M.: Nauka, 1975. 536 p.
- [10] Ibraguimova L.B. Recommended rate constants of chemical reactions in an H₂-O₂ gas mixture with electronically excited species O₂(1Δ), O(1D), OH(2Σ) involved. M.: Institute of Mechanics of Lomonosov Moscow State University, 2003. 31 p.
- [11] Starik A.M., Savelyev A.M., Titova N.S. Features of ignition and combustion of composite fuels containing aluminum nanoparticles (review) // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2015. Vol. 51.No. 2.P. 64.
- [12] Washburn E.B., Trivedi J.N., Catoire L., Beckstead M.W. The simulation of the combustion of micrometer-sized aluminum particles with steam // Combust. Sci. and Tech. 2008. V. 180. P. 1502.
- [13] Korshunov O.V., Chinnov V.F., Kavyrshin D.I. Kinetic model of Al oxidation in heterogeneous aluminum-water plasma. Negative ions // High Temperatures. 2017.Vol. 55, No. 2, pp. 189–196.
- [14] Bychkov V.L., Yurovsky V.A. Simulation of a beam plasma of water vapor // High Temperatures. 1993. T. 31. No. 1, p. 8.
- [15] Bityurin V.A., Grigorenko A.V., Efimov A.V., Klimov A.I., Korshunov O.V., Kutuzov D.S., Chinnov V.F. Spectral and kinetic analysis of a gas-discharge heterogeneous plasma in a flow of a mixture of Al, H₂O, Ar // High Temperatures. 2014.Vol. 52.No. 1.P. 3.
- [16] Bityurin V.A., Klimov A.I., Korshunov O.V., Chinnov V.F. Kinetic model of Al oxidation by water vapor in a heterogeneous plasma. Gas-phase kinetics // High Temperatures. 2014.Vol. 52.No. 5.P. 657.
- [17] Bityurin V.A., Klimov A.I., Korshunov O.V., Chinnov V.F. Kinetic model of Al oxidation by water vapor in a heterogeneous plasma. Heterophase kinetics // High Temperatures. 2015. T. 53. No. 1. P. 23.

- [18] Spalart P.R. Strategies for Turbulence Modelling and Simulations // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2000. V. 21. P. 252.
- [19] Gorbunova A., Klimov A., Molevich N., Moralev I., Porfiriev D., Sugak S., Zavershinskii I. Precessing vortex core in a swirling wake with heat release // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2016. V. 59. P. 100.
- [20] Zavershinsky I.P. Klimov A.I., Molevich N.E., Sugak S.S. Acoustically induced formation of spiral structures in a swirling argon flow in the presence of a repetitively pulsed RFC discharge // High Temperatures. 2018.Vol. 56.No. 3. P. 472.