

И. Л. Панкратьева, В. А. Полянский (Москва, Институт механики МГУ). **Об использовании вычислительных экспериментов для решения обратной задачи кинетики ионизации в молекулярных газовых смесях.**

Повышение эффективности процессов горения углеводородных топлив, процессов переработки нефти и нефтепродуктов и т.п. остается в современном мире актуальной проблемой. В связи с этим продолжается интенсивное исследование весьма сложной и неоднозначной кинетики химических реакций в плотных высокотемпературных смесях молекулярных газов. Поскольку в литературе до сих пор нет единого мнения о кинетических механизмах протекания химических процессов в таких газовых смесях, любая дополнительная экспериментальная информация о них является важной. Авторами доклада в 80-е годы совместно с Г. С. Аравиным, П. А. Власовым, Ю.К.Карасевичем (ИХФ РАН) была разработана методика определения эффективной скорости процесса ионизации в плотных реагирующих молекулярных газах. Методика основывалась на СВЧ и зондовых измерениях нестационарного процесса хемоионизации за отраженной ударной волной вблизи торца ударной трубы в различных газовых смесях. Измерялся ток на зонд и одновременно с помощью СВЧ-интерферометра измерялась зависящая от времени концентрация электронов. По временному профилю электронов находилась нестационарная скорость ионизации, которая затем использовалась для численного решения задачи о зонде. В результате было получено соотношение, связывающее эффективную скорость ионизации с током на зонд в высокотемпературной частично ионизованной газовой смеси атмосферного давления. При этом, однако, было обнаружено систематическое расхождение между теорией и экспериментом в широком диапазоне параметров (исследовались газовые смеси различного состава, разные интервалы температур и давлений и т. д.) расчетный ток на зонд был всегда в 15–20 раз меньше экспериментально измеренного, что учитывалось в методике поправочным эмпирическим коэффициентом. Предпринятое в то время усложнение теоретической модели для описания работы зонда (учет отрицательных ионов, двухтемпературность плазмы, охлаждение среды холодной поверхностью зонда, вклад конвекции заряда в ток и т.п.) не выявило физически обоснованных причин расхождения.

В данной работе в связи с появлением в литературе новых усложненных механизмов химических процессов в рассматриваемых средах за счет учета частиц в возбужденных состояниях, сделана попытка выяснить физическую природу процессов в окрестности зонда, вынуждающих вводить в методику поправочный коэффициент. Предполагается, что имеющиеся в среде возбужденные частицы могут ионизоваться в сильном электрическом поле зонда. При этом в окрестности зонда возникает дополнительный источник ионизации, интенсивность которого зависит от напряженности поля. В работе проведена серия вычислительных экспериментов в предположении, что этот источник линейно зависит от модуля напряженности поля. Полученные распределения заряженных частиц в окрестности цилиндрического зонда существенно отличаются от известных из стандартной теории. Показано, что наличие локального дополнительного источника заряженных частиц приводит к существенному увеличению тока на отрицательный зонд и позволяет устранить расхождение теоретических и экспериментальных значений тока. Фактически решена обратная задача — получено косвенное экспериментальное доказательство влияния сильных электрических полей на процесс ионизации в высокотемпературных газовых смесях атмосферного давления.

Работа поддержана РФФИ (проект № 07-01-00026).