

Рис. 2 отражает изменение безразмерного значения лучистого потока  $q$  поперек ударного слоя на расчетных лучах. С увеличением угла  $\theta$  максимум лучистого потока из околоравновесной области резко убывает. В области максимальных градиентов  $\alpha$  линейный характер изменения нормальной составляющей скорости нарушается. Так на верхнем луче ( $\theta=1$  рад) вблизи поверхности тела  $u$  меняет знак и приближается к нулю из положительной области.

Подведем итоги проведенной работы.

Рассмотрено гиперзвуковое обтекание сферического затупления неравновесно-ионизованным одноатомным невязким излучающим газом с учетом опережающего излучения. Для расчета параметров течения была решена система газодинамических уравнений совместно с уравнениями переноса излучения. В интервале рассмотренных параметров учет резонансного излучения слабо влияет на положение ударной волны и газодинамические поля в ударном слое. Показано, что из-за сравнительно малой скорости рекомбинации значения степени ионизации на верхних лучах могут значительно превышать соответствующие равновесные значения.

Поступила в редакцию  
21/V 1973

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Е. Petschek, S. Вугон. *Ann. of Phys.*, 1957, 1, 270.
2. Ю. Рихтер. В сб. «Методы исследования плазмы». Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. М., «Мир», 1971.
3. С. Е. Chapin. *Purdue Univ. Report AA&ES*, 1967, 67, 9.
4. Т. I. McLaren, R. M. Hobson. *Phys. Fluids*, 1968, 11, 10.
5. Л. М. Биберман, И. Т. Якубов. *ЖТФ*, 1963, 33, 11.
6. Л. Б. Гавин, Ю. П. Лунькин. *ПМТФ*, 1972, 1.
7. H. F. Nelson, R. Goulard. *Phys. Fluids*, 1969, 12, 8.
8. J. H. Clarke, C. Ferrari. *Phys. Fluids*, 1965, 8, 12.
9. М. Д. Кременецкий, Н. В. Леонтьева, Ю. П. Лунькин. *ПМТФ*, 1971, 4.
10. Р. А. Доббинс. *Ракетная техника и космонавтика*, 1970, 8, 3.
11. Г. Грим. *Спектроскопия плазмы*. М., Атомиздат, 1969.
12. Р. Эмрих, Р. И. Солоухин. *ФГВ*, 1972, 8, 1.
13. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. М., «Наука», 1966.
14. А. К. Кондря, Н. В. Леонтьева. *ПМТФ*, 1972, 4.
15. S. S. R. Murthy. *JQSRT*, 1968, 8.

УДК 566.468+532.5

#### О РЕШЕНИИ НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ АЭРОТЕРМОХИМИИ

*А. М. Гришин, А. Я. Кузин*

(Томск)

Для расчетов процессов воспламенения, горения и теплообмена реагирующего твердого тела с высокоэнтальпийным потоком газа необходимо знать термокинетические постоянные (энергии активации и предэкспоненты) гетерогенных химических реакций.

Из обзора методов определения термокинетических постоянных [1] следует, что в настоящее время определяют термокинетические постоянные при помощи характеристик воспламенения, анализа кривых

«разогрев — время» и термографического метода. К числу недостатков первого метода следует отнести его ограниченность<sup>1</sup> и большую трудоемкость [2]. Последние два приема требуют постановки специальных экспериментов, в частности создают такие условия, чтобы температура во всех точках реакционного объема была практически одинаковой.

В работах [2, 3] предложен способ определения эффективных термокинетических постоянных, при котором используется информация о поведении кривой «разогрев — время» и не требуется обеспечивать одинаковость температуры по объему. В данной работе даются два алгоритма численной реализации этого способа в случае одной гетерогенной реакции. Доказывается существование и единственность решения этой обратной задачи, а также даны примеры численного определения энергии активации и предэкспонента.

### § 1. Постановка обратной задачи

В работах [2—6], посвященных анализу гетерогенного воспламенения реагирующих веществ, показано, что задачи о воспламенении реагирующей пластины в атмосфере неподвижного окислителя [4], реагирующего тела вращения в окрестности лобовой критической точки [5] и реагирующей пластины [6] при обтекании потоком нагретого окислителя сводятся к решению следующего нелинейного интегрального уравнения для температуры раздела сред  $T_w$ :

$$T_w(t) = T_{sh} + A_i \int_0^t \frac{Q_i(\tau) d\tau}{\sqrt{\pi(t-\tau)}}. \quad (1.1)$$

Здесь  $T_w$  — температура раздела сред в любой момент времени, для первой задачи  $T_{sh}$  — начальная температура раздела сред, а  $A = (\varepsilon_h + \varepsilon_s)^{-1}$ , где  $\varepsilon_h = \sqrt{\lambda_h \rho_h c_{ph}}$ ,  $\varepsilon_s = \sqrt{\lambda_s \rho_s c_{ps}}$  — тепловые активности газовой и конденсированных фаз соответственно,  $\lambda$  — теплопроводность,  $\rho$  — плотность,  $c_p$  — теплоемкость; для остальных задач, рассматриваемых в данной работе,  $T_{sh}$  — начальная температура конденсированной фазы, а  $A = 1/\varepsilon_s$ ; индекс  $s$  — относится к параметрам конденсированной, а индексы  $h$  и  $\omega$  употребляются для обозначения значений параметров в момент  $t=0$  и на границе раздела сред соответственно.

Функция  $Q(\tau)$  в случае воспламенения реагента в атмосфере неподвижного окислителя при наличии гетерогенных реакций определяется по формуле [2, 3]

$$Q_1 = \sum_{i=1}^n q_i k_{0i} (\rho_\omega c_h)^{\nu_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT_w}\right), \quad (1.2)$$

где  $\nu$  — порядок реакции;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $C_h$  — начальная концентрация окислителя.

Для задачи о зажигании реагента в окрестности лобовой критической точки имеем [1, 2]

$$Q_2 = 0,57(1+k) \text{Pr}^{-0,6} l_e^{-0,06} \sqrt{\beta_x \mu_e \rho_e c_{pe}} (T_e - T_w) + \sum_{i=1}^n q_i k_{0i} (\rho_\omega c_h)^{\nu_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT_w}\right) - \sigma_R \varepsilon (T_w^4 - T_e^4). \quad (1.3)$$

Здесь  $k=1$ ; 2 для плоского и осесимметричного течений соответ-

<sup>1</sup> В частности, при помощи этого метода можно определять  $qk_0$ , но не  $q$  и  $k_0$  в отдельности, где  $q$  — тепловой эффект, а  $k_0$  — предэкспонент.

ственно,  $Pr$  — число Прандтля;  $l_e = \sqrt{\frac{\mu_w \rho_w}{\mu_e \rho_e}}$  — безразмерная функция,  $\mu$  — динамическая вязкость,  $\beta_x = \frac{3}{2} u_\infty / r_w$ ,  $u_\infty$  — скорость потока нагретого окислителя,  $r_w$  — радиус кривизны образца в лобовой критической точке,  $\sigma_R$  — постоянная Стефана — Больцмана,  $\varepsilon$  — коэффициент черноты (индекс  $e$  употребляется для обозначения параметров на внешней границе пограничного слоя).

Наконец, в случае гетерогенного воспламенения пластины в потоке нагретого окислителя  $Q(\tau)$  определяется по формуле

$$Q_3 = 0,332 Pr^{1/3} \sqrt{\frac{\hat{\rho}_e \dot{\mu}_e}{\mu_e x}} (T_w - T_e) + \sum_{i=1}^n q_i k_{0i} (\rho_w c_h)^{v_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT_w}\right) - \sigma_R \varepsilon (T_w^4 - T_e^4), \quad (1.4)$$

где  $0,6 < Pr < 10$ .

При выводе формул (1.2) — (1.4) использовалось обычное для теории воспламенения допущение о малости изменения концентрации окислителя за время воспламенения, а при получении формул (1.3) — (1.4) — выражения теплового потока из газовой фазы в твердую, которые получены в работах [7] и [8] соответственно.

Следует также отметить, что к решению уравнения типа (1.1) при определенных допущениях [2] сводится и задача о зажигании смешанного твердого топлива тепловым потоком. В этом случае  $A = 1/\varepsilon_s$ , а

$$Q_4 = q_s(t) + \frac{q k_0 \lambda_s R T_w^2(\tau)}{q_s(t) E} \exp\left(-\frac{E}{RT_w}\right), \quad (1.5)$$

где  $q_s(t)$  — заданный тепловой поток на границе раздела сред.

Упомянутые выше прямые задачи теории воспламенения и теплообмена физически ставятся следующим образом: определить температуру раздела сред, макрохарактеристики воспламенения (время и предел воспламенения) и теплообмена в функции от времени, начальных температур и концентраций компонентов, скорости потока на бесконечности.

Эти задачи могут быть решены, как теоретически, так и экспериментально. В первом случае для эффективного решения задач необходимо знать термокинетические и теплофизические постоянные. Во втором случае функцию  $T_w(t)$  определяют при помощи термопарных измерений и нет необходимости знать энергии активации и предэкспоненты. В связи с этим в работах [2, 3] предложено определять энергию активации и предэкспоненты путем сопоставления температур границы раздела сред, полученных теоретически и экспериментально.

Ввиду единообразия постановок прямых задач обратные задачи также формулируются одинаковым образом: найти интенсивность источников тепла, которая обеспечивает при  $0 < t < t_0$  заданное изменение температуры поверхности. Поскольку функциональная зависимость скорости химической реакции от температуры определяется законом Аррениуса, то решение обратной задачи фактически сводится к определению эффективных значений энергии активации и предэкспонентов. Величина  $t_0$  в случае воспламенения реагирующих веществ должна быть больше времени воспламенения и в то же время меньше значения времени, при котором становится существенным изменение концентрации окислителя на поверхности раздела сред или разложение реагента для последней задачи. Это утверждение остается в силе и для случая, когда определяются термокинетические постоянные эндотермических реакций.

Успешное решение обратной задачи невозможно без корректного физического моделирования процессов воспламенения и теплообмена, которое для сформулированных выше задач реализовано на установках, описанных в работе [9].

## § 2. Первый алгоритм решения обратной задачи

Если температура раздела сред известна из эксперимента, то уравнение (1.1) можно рассматривать как уравнение Абея [10] относительно неизвестной интенсивности источника  $Q_i$ :

$$Q_i = \frac{1}{A_i} \int_0^t \frac{T'_w}{\sqrt{\pi(t-\xi)}} d\xi, \quad (2.1)$$

где штрих означает дифференцирование по  $\xi$ .

В дальнейшем в целях конкретности рассмотрим решение обратной задачи, соответствующей гетерогенному воспламенению реагента в атмосфере неподвижного окислителя. Предположим для простоты, что на границе раздела сред имеет место гетерогенная реакция первого порядка, следующая закону Аррениуса. Тогда соотношение (2.1) примет вид:

$$qk_0\rho_w c_h \exp\left(-\frac{E}{RT_w}\right) = (\varepsilon_e + \varepsilon_s) \int_0^t \frac{T'_w}{\sqrt{\pi(t-\xi)}} d\xi. \quad (2.2)$$

Поскольку наряду с температурой раздела сред изменяется и давление  $p_w$  в газовой фазе [9], то плотность выразим через давление и  $T_w$  из уравнения состояния

$$\rho_w = \frac{p_w M}{RT_w}, \quad (2.3)$$

где  $M$  — молекулярный вес, который, в связи с принятым в § 1 допущением, считается постоянным.

Подставляя (2.3) в (2.2) и приводя результат подстановки к безразмерному виду, получим

$$\frac{aP_w}{\theta_w} \exp\left(-\frac{\beta}{\theta_w}\right) = f(\tau), \quad f = \int_0^\tau \frac{\theta'_w}{\sqrt{\pi(\tau-x)}} dx, \quad (2.4)$$

$$\beta = \frac{E}{RT_0}, \quad a = \frac{qk_0 c_h \rho_0 \sqrt{t_0}}{T_0 (\varepsilon_e + \varepsilon_s)}, \quad P_w = \frac{p_w}{p_0},$$

$$\tau = \frac{t}{t_0}, \quad \theta_w = \frac{T_w}{T_0}.$$

Здесь  $\beta$  и  $a$  — безразмерные параметры,  $T_0 = T_w(t_0)$ ,  $P_w$  и  $Q_w$  — безразмерные давление и температура,  $p_0 = P_w(t_0)$ ;  $\tau$  — безразмерное время.

Если в обе части соотношения (2.4) подставить точное решение задачи о гетерогенном воспламенении, полученное теоретически, то оно обратится в тождество, так как это соотношение получено в результате решения уравнения (2.1). В то же время при подстановке значения  $Q_w$ , полученного при помощи термопарных измерений, результат подстановки — невязка не равна 0. Логарифмируя (2.4), получим

$$\ln P_w + \alpha - \ln \theta_w(\tau) - \beta/\theta_w(\tau) = \ln f(\tau), \quad (2.5)$$

где  $\alpha = \ln a$ . Очевидно, что при подстановке в (2.5) значений  $\theta_w$ , найденных из эксперимента, невязка также будет отлична от 0. Будем считать, что параметры  $\alpha$  и  $\beta$ , однозначно связанные с термокинетическими постоянными  $qk_0$  и  $E$ , заранее неизвестны и потребуем, чтобы средне-

квадратичное отклонение  $\delta_1$  невязки от 0 на отрезке  $[0,1]$  было минимальным.

Эта задача сводится к отысканию минимума функции двух переменных  $\alpha$  и  $\beta$

$$\delta_1 = \alpha^2 - 2\alpha\beta \int_0^1 \theta_w^{-1}(\tau) d\tau + \beta^2 \int_0^1 \theta_w^{-2} d\tau - 2\alpha \int_0^1 F(\tau) d\tau + 2\beta \int_0^1 \frac{F(\tau)}{\theta_w(\tau)} d\tau + \int_0^1 F^2(\tau) d\tau, \quad (2.6)$$

$$F(\tau) = \ln \frac{\theta_w(\tau) f(\tau)}{P_w(\tau)}.$$

Используя необходимые условия экстремума функции двух переменных [11], получим систему двух линейных уравнений для определения  $\alpha_*$  и  $\beta_*$ , при которых достигается экстремум  $\delta_1$ . Решая эту систему уравнений, получим

$$\alpha_* = \frac{\left( \int_0^1 \theta_w^{-2}(\tau) d\tau \right) \int_0^1 F(\tau) d\tau - \left( \int_0^1 \theta_w^{-1}(\tau) d\tau \right) \int_0^1 F(\tau) \theta_w^{-1} d\tau}{\int_0^1 \theta_w^{-2} d\tau - \left( \int_0^1 \theta_w^{-1} d\tau \right)^2}, \quad (2.7)$$

$$\beta_* = \frac{\left( \int_0^1 F(\tau) d\tau \right) \int_0^1 \theta_w^{-1}(\tau) d\tau - \int_0^1 F(\tau) \theta_w^{-1} d\tau}{\int_0^1 \theta_w^{-2} d\tau - \left( \int_0^1 \theta_w^{-1} d\tau \right)^2}. \quad (2.8)$$

Знаменатель выражений (2.7), (2.8) на основании известного неравенства Шварца — Буняковского [11] всегда больше 0, поэтому величины  $\alpha_*$  и  $\beta_*$  существуют и единственны. Возникает вопрос о типе экстремума среднеквадратичного отклонения  $\delta_1$ . Используя известные [11] достаточные условия, легко показать, что при  $\alpha = \alpha_*$  и  $\beta = \beta_*$  имеет место собственный минимум функции  $\delta_1 = \delta_1(\alpha, \beta)$ .

Таким образом, решение поставленной в § 1 обратной задачи существует единственно и получено в виде явных формул (2.7), (2.8).

При вычислении  $\alpha_*$  и  $\beta_*$  необходимо знать функцию  $F(\tau)$ , а следовательно, и функцию  $f(\tau)$  при  $\tau \in [0,1]$ . Обычно  $\theta_w$  задается на основании экспериментальных данных либо графически, либо в виде таблицы. В связи с этим функцию  $\theta_w(\tau)$  удобно аппроксимировать кубическими сплайнами [12]. Если на отрезке  $[0,1]$  ввести равномерную сетку с шагом  $h^1$ , то «моменты»  $M_k$  сплайна  $S_\Delta(\tau)$  необходимо определить, решая следующую систему линейных уравнений

$$M_{k-1} + 4M_k + M_{k+1} = 6 \frac{(\theta_{k-1} - 2\theta_k + \theta_{k+1})}{h^2}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1. \quad (2.9)$$

Здесь  $M_k = S''_\Delta(\tau_k)$ ,  $\tau_k = kh$ ,  $\theta_k = \theta_w(\tau_k)$ , а  $N$  — число элементарных отрезков  $[x_{k-1}, x_k]$  на отрезке  $[0,1]$ .

Для решения системы уравнений (2.9) необходимо задать граничные условия. Вид этих условий зависит от вида функции  $\theta_w(\tau)$  и должен выбираться для каждой конкретной задачи по-разному. В данной работе использовались граничные условия первого рода, причем сплайн-аппроксимация  $\theta_w(\tau)$  употреблялась на отрезке  $[h_0, 1]$ , а на

<sup>1</sup> Допущение о равномерности сетки не является принципиальным. Соответствующие уравнения для определения «моментов» сплайна в случае неравномерной сетки даны в работе [12]. Оптимальный выбор шага неравномерной сетки может составить предмет самостоятельного исследования.

отрезке  $[0, h_0]$  использовалось асимптотическое представление

$$\theta_w = 1 + b\sqrt{\tau}, \quad (2.10)$$

где постоянная  $b$  определялась из условия равенства выражения (2.10) и экспериментально найденного значения безразмерной температуры при  $\tau = h_0$ .

С учетом (2.10) граничные условия для моментов сплайна принимают вид

$$M(h_0) = -\frac{b}{4h_0^{3/2}}, \quad M(1) = M_N = \frac{\theta_{N-2} - 2\theta_{N-1} + \theta_N}{h^2}. \quad (2.11)$$

Систему уравнений (2.9) удобно решать известным методом прогонки [13]. После определения моментов на каждом из элементарных отрезков  $[\tau_{k-1}, \tau_k]$  сплайн представляется в виде полинома в третьей степени [12] с известными числовыми коэффициентами. Поэтому на каждом из элементарных интервалов интеграл, определяющий функцию  $f(\tau)$ , легко вычисляется аналитически. В результате удается найти  $F(\tau)$ , что в свою очередь позволяет вычислить интегралы, входящие в формулы (2.7), (2.8), а следовательно, и величины  $\alpha_*$  и  $\beta_*$ .

### § 3. Второй алгоритм решения обратной задачи

Термокинетические постоянные можно определить и не используя точное решение уравнения Абеля. С этой целью перепишем нелинейное интегральное уравнение (1.1) для первой из упомянутых в § 1 прямых задач в безразмерном виде:

$$\theta_w = 1 + a \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi. \quad (3.1)$$

Если подставить в (3.1) функцию  $\theta_w(\tau)$ , полученную в результате термопарных измерений, то, очевидно, результат подстановки — невязка — будет отличной от нуля. Тогда постоянные  $a$  и  $\beta$ , однозначно связанные с  $qk_0$  и  $E$ , можно определить из условия минимума среднеквадратичной невязки

$$\delta_2 = \int_0^1 \left[ \theta_w(\tau) - 1 - a \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi \right]^2 d\tau. \quad (3.2)$$

Очевидно, что  $\delta_2$  представляет собой функцию параметров  $a$  и  $\beta$ . Используя известные условия экстремума функции двух переменных [11], получим систему двух уравнений для определения  $\alpha_*$  и  $\beta_*$ , при которых достигается экстремум  $\delta_2$

$$\begin{aligned} a_* &= I_2/I_3, \quad I_4 = a_* I_5, \\ I_2 &= \int_0^1 [\theta_w(\tau) - 1] \left( \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi \right) d\tau, \\ I_3 &= \int_0^1 \left( \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi \right)^2 d\tau, \\ I_4 &= \int_0^1 [\theta_w(\tau) - 1] \left( \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w^2(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi \right) d\tau, \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$I_5 = \int_0^1 \left( \int_0^\tau \frac{P_w(\xi)}{\theta_w(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} \exp\left(-\frac{\beta}{\theta_w(\xi)}\right) d\xi \right) \left( \int_0^\tau \frac{P_w(\xi) \exp(-\beta/\theta_w(\xi))}{\theta_w^2(\xi) \sqrt{\pi(\tau-\xi)}} d\xi \right) d\tau.$$

Исключая из системы уравнений (3.3) величину  $a_*$ , получим одно трансцендентное уравнение для определения  $\beta_*$ .

$$I_2 I_5 = I_3 I_4. \quad (3.4)$$

Это уравнение может быть решено одним из численных методов, например известным методом Ньютона [14], после чего величина  $a_*$  определяется по формуле (3.3).

Данный алгоритм выгодно отличается от ранее изложенного тем, что в данном случае не используется операция дифференцирования<sup>1</sup> функции  $\theta_w$ , которая задается на основе экспериментальных данных либо графически, либо в виде таблицы.

Следует отметить, однако, что в этом случае не удастся доказать существование и единственность экстремума функции  $\delta_2$ , а также определить тип экстремума.

#### § 4. Результаты численных экспериментов и их анализ

Описанные выше алгоритмы решения обратных задач были апробированы на примере решения модельной задачи об определении термокинетических постоянных некоторой гипотетической гетерогенной реакции. С этой целью при  $E=50\,242$  Дж/моль,  $qk_0=8,374 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с для  $T_n=486^\circ\text{K}$ ,  $T_{sn}=427^\circ\text{K}$ ,  $\varepsilon_e=0,519 \cdot 10^2$  Дж/(м<sup>2</sup>·град·с<sup>1/2</sup>),  $\varepsilon_s=0,603 \cdot 10^3$  Дж/(м<sup>2</sup>·град·с<sup>1/2</sup>) и  $P_n=785$  н/м<sup>2</sup> было решено уравнение (3.1) на ЭВЦМ БЭСМ-4 при помощи метода, изложенного в работах [4, 15]; была получена зависимость  $\theta_w(\tau)$ . Эта зависимость считалась полученной из эксперимента, и определялись термокинетические постоянные  $E$  и  $qk_0$ . Сопоставляя исходные значения  $E$  и  $qk_0$  и значения, полученные в результате решения обратной задачи, легко находим погрешность решения обратной задачи.

В частности, при  $t_0=6,5$  с при помощи первого алгоритма при  $N=62$  удалось получить  $E=50\,166$  Дж/моль и  $qk_0=8,198 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с (погрешности этих величин  $\varepsilon_E=0,15\%$  и  $\varepsilon_{qk_0}=2,1\%$ ). Значения  $E$  и  $qk_0$ , вообще говоря, изменяются с изменением величины  $t_0$ . Например, при  $t_0=7$  с имеем  $E=49\,517$  Дж/моль и  $qk_0=6,929 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с ( $\varepsilon_E=1,44\%$ ,  $\varepsilon_{qk_0}=17,25\%$ ), а при  $t_0=6$  с получаем  $E=47\,914$  Дж/моль,  $qk_0=4,538 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с ( $\varepsilon_E=4,63\%$ ,  $\varepsilon_{qk_0}=45,8\%$ ). Из приведенных данных следует, что для получения  $E$  и  $qk_0$  с достаточной степенью точности нецелесообразно выбирать  $t_0$  больше или меньше, чем 6,5 с. В первом случае погрешность обусловлена быстрым изменением  $\theta_w$  при  $t_0 > 6,5$  с, в результате чего ухудшается точность сплайн-аппроксимации функции  $\theta_w$ . Во втором случае большая погрешность в определении  $E$  и  $qk_0$  обусловлена тем, что скорость гетерогенной химической реакции при  $t_0=6$  с меньше, чем при  $t_0=6,5$  с, и ее влияние на профиль  $\theta_w(\tau)$  оказывается менее существенным<sup>2</sup>.

Точность решения обратной задачи зависит также от числа элементарных отрезков  $N$ . Например, при  $N=20$ ,  $t_0=6,5$  с значения  $E$  и  $qk_0$  определяются с погрешностями  $\varepsilon_E=3,07\%$ ,  $\varepsilon_{k_0}=33,25\%$ ; соответственно. Таким образом, с ростом числа  $N$  точность определения  $E$  и

<sup>1</sup> Операцию дифференцирования обычно относят к числу некорректных математических операций, так как малые исходные погрешности величины  $\theta_w(\tau)$  могут существенно возрастать после выполнения дифференцирования.

<sup>2</sup> При определении  $E$  и  $qk_0$  использовались следующие значения шагов для вычисления внутренних и внешних интегралов:  $h_1=0,02$  с,  $h_2=0,04$  с.

$qk_0$ , как и следовало ожидать, повышается, что связано с большей точностью сплайн-аппроксимации функции  $\theta_w(\tau)$ .

Если известно значение  $\theta_w(\tau)$ , то расчет одного варианта обратной задачи занимает на ЭВМ-М-220 1—2 минуты машинного времени.

При применении второго алгоритма для вычисления внутренних интегралов использовались формулы

$$I_i = 2 \sum_{m=1}^k Q_i \left( \frac{t_{m-1} + t_m}{2} \right) (V\tau_k - \tau_{m-1} - V\tau_k - \tau_m); \quad k=1, 2, \dots, N; \\ i=2, 3, 4, 5,$$

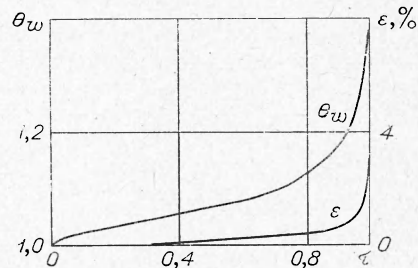
где  $Q_i$  — коэффициенты при  $(V\tau - \xi)^{-1/2}$  в соответствующих подынтегральных выражениях, а внешние интегралы вычислялись по формуле трапеций.

В результате вычислений на ЭВМ БЭСМ-4 для тех же значений теплофизических параметров и профиля  $\theta_w(\tau)$  при  $t_0=7$  с, используя второй алгоритм, удалось получить  $E=49\,195$  Дж/моль,  $qk_0=6,435 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с, ( $\varepsilon_E=2,1\%$ ,  $\varepsilon_{qk_0}=23,1\%$ ). Было установлено также, что тип экстремума — функции  $\delta_2(a, \beta)$  — минимум. При изменении  $E$  в пределах от 20 934 до 167 472 Дж/моль другого минимума функции  $\delta_2$ , кроме отмеченного выше, не было обнаружено.

Точность определения  $E$  и  $qk_0$  при использовании второго алгоритма слабо зависит от точности вычисления интегралов. В частности, при  $h_1=0,5$  и  $h_2=1$ ,  $E=51\,498$  Дж/моль,  $qk_0=12,51 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с.

Таким образом, точность определения  $E$  и  $qk_0$  при помощи второго алгоритма ниже, чем при помощи первого. К числу достоинств второго алгоритма следует отнести его общность. При помощи этого алгоритма можно определять термокинетические постоянные при одновременном протекании нескольких гетерогенных реакций.

Следует отметить также, что довольно значительные погрешности при определении величин  $E$  и  $qk_0$  не приводят к существенным погрешностям решения прямой задачи. На рисунке дан график функции  $\theta_w(\tau)$  при  $E=50\,242$  Дж/моль,  $qk_0=8,374 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с и график относительной погрешности  $\varepsilon=\varepsilon(\tau)$  функции  $\theta_w(\tau)$ , полученный в результате решения интегрального уравнения (3.1) методом, указанным в работах [4, 15], при  $E=49\,195$  Дж/моль,  $qk_0=6,435 \cdot 10^{10}$  Дж/м<sup>2</sup>·с. Видно, что  $\varepsilon(\tau)$  не превышает 7%, несмотря на то, что  $E_{qk_0}=23,1\%$ .



Поступила в редакцию  
3/IV 1973

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Мержанов. ФГВ, 1973, 9, 1.
2. А. М. Гришин. Докл. АН СССР, 1972, 205, 1.
3. А. М. Гришин. ИФЖ, 1973, 24, 3.
4. А. М. Гришин, Н. А. Игнатенко. ФГВ, 1971, 7, 4.
5. А. М. Гришин, В. И. Зинченко и др. Тепло- и массоперенос. Т. 2, ч. 2. Минск, 1972.
6. А. М. Гришин, А. Я. Кузин. Горение и взрыв. М., «Наука», 1972.
7. Г. А. Тирский. ПМТФ, 1965, 1.
8. Г. Шлихтинг. Теория пограничного слоя. М., «Наука», 1969.
9. А. М. Гришин, Г. Н. Исаков, В. А. Лошкарёв. Тепло- и массоперенос. Т. 2, ч. 2. Минск, 1972.
10. С. Г. Михлин. Линейные интегральные уравнения. М., Физматгиз, 1959.



11. Г. М. Фихтенгольц. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 1. М., Физматгиз, 1958.
12. Дж. Алберг, Э. Нильсон, Дж. Уолш. Теория сплайнов и ее приложения. М., «Мир», 1972.
13. С. К. Годунов. Уравнения математической физики. М., «Наука», 1971.
14. И. С. Березин, И. П. Жидков. Методы вычислений. Т. 1. М., Физматгиз, 1962.
15. А. М. Гришин, Н. А. Игнатенко. ИФЖ, 1972, 23, 2.

УДК 532.5+536.24

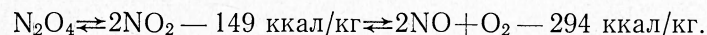
## ГИДРОДИНАМИКА И ТЕПЛООБМЕН ПРИ ТЕЧЕНИИ РЕАГИРУЮЩЕГО ГАЗА В ТРУБАХ

В. Д. Виленский, Б. С. Петухов, В. К. Шиков

(Москва)

В качестве одного из возможных путей решения задачи о поиске теплоносителей для ядерных реакторов на быстрых нейтронах предлагаются химически реагирующие (диссоциирующие) газовые системы [1]. Наличие в них обратимых химических реакций, сопровождающихся изменением числа молей и тепловыми эффектами, ведет к увеличению эффективности термодинамического цикла, обеспечивает высокие тепловые свойства газов и значительное увеличение теплоотдачи к ним.

Одной из возможных химически реагирующих систем, представляющих интерес для использования их в качестве теплоносителей и рабочих тел, является азотный тетраоксид



Температурный диапазон этой реакции  $300 \div 1200^\circ \text{K}$  при  $p=1$  атм и  $450 \div 1500^\circ \text{K}$  при  $p=100$  атм.

В настоящее время имеется значительное число работ, посвященных исследованию теплоотдачи при течении в трубах диссоциирующих газов. Это позволяет уже сейчас говорить об основных особенностях теплоотдачи в этих условиях, о своеобразии в постановке таких задач и некоторых результатах их решения.

### Особенности постановки задачи о течении в круглой трубе химически реагирующего газа

Течение и теплообмен химически реагирующего газа в круглой трубе рассматриваются на основании системы уравнений гидродинамики типа уравнений пограничного слоя. В этом приближении не учитывается изменение давления в поперечном сечении трубы [2].

Пусть в газе между  $m$  компонентами протекает  $N$  независимых гомогенных химических реакций (в общем случае неравновесных):

$$\sum_{i=1}^m \nu'_{in} A_i \rightleftharpoons \sum_{i=1}^m \nu''_{in} A_i, \quad n = 1, 2, \dots, N.$$

Уравнение пограничного слоя для этого случая в наиболее полном виде даны в [3]. Для течения несжимаемого химически реагирующего газа без учета действия внешних сил они имеют вид:

$$\rho \omega_x \frac{\partial \omega_x}{\partial x} + \rho \omega_r \frac{\partial \omega_x}{\partial r} = - \frac{dp}{dx} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \mu \frac{\partial \omega_x}{\partial r} \right), \quad (1)$$