

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГЕНЕРАТОРА КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ

УДК 533.6.011:519.6

В. Н. Макаров

Институт механики МГУ, 119899 Москва

Создана система численного решения некоторых задач физико-химической газовой динамики. Основными элементами системы являются: базы физико-химических данных, генератор кинетических уравнений колебательной релаксации и химических реакций, программы прямого расчета уравнений газовой динамики с кинетическими уравнениями, программные модули для определения специфического решения прямого расчета.

На основе созданной системы решена вариационная задача физико-химической газовой динамики, связанная с определением оптимального контура сверхзвукового сопла.

В результате экспериментальных и теоретических исследований по физико-химической кинетике получено большое количество фактических данных, характеризующих процессы, которые протекают в газовой среде; эти данные в определенной мере систематизированы [1–5].

Быстрое развитие компьютерной техники и методов математического моделирования позволяет перейти на качественно новый уровень при решении задач физико-химической газовой динамики. Такой переход должен не только освободить исследователя от рутинной работы по формированию кинетических уравнений, но и обеспечить реализацию единой математической линии решения задач — от постановки задачи, выбора моделей и их полного информационного обеспечения всеми необходимыми физико-химическими данными до оперативно формируемых программных комплексов, с помощью которых можно решить поставленную задачу.

Большое количество задач физико-химической газовой динамики достаточно хорошо описывается при учете химических, плазмохимических реакций и релаксации энергии колебательных мод многоатомных молекул. При этом полагают, что: сохраняется максвелловское распределение по скоростям для поступательных степеней свободы, вращательные степени свободы находятся в равновесии с поступательными, колебательная мода моделируется гармоническим осциллятором, внутри каждой моды обмен энергией происходит намного быстрее, чем межмодовый ( $VV'$ ), колебательно-поступательный ( $VT$ ) обмен и химические реакции.

Систему кинетических уравнений, описывающих физико-химические процессы в газе, формально можно представить в виде

$$\frac{dc_i}{dt} = (1/\rho) \sum_{j=1}^m (\nu_{ij}^- - \nu_{ij}^+) W_j, \quad \frac{de_i}{dt} = Q_{VT}^i + Q_{VV'}^i + Q_{CV}^i, \quad (1)$$

где  $c_i$  — мольно-массовая концентрация химически реагирующих компонентов;  $\rho$  — плотность газовой смеси;  $\nu_{ij}^-$ ,  $\nu_{ij}^+$  — стехиометрические коэффициенты;  $W_j$  — скорость  $j$ -й реакции;  $e_i = 1/[\exp(\Theta_i/T_i) - 1]$  — колебательная энергия, характеризующая среднее число колебательных квантов  $i$ -го типа в расчете на одну молекулу;  $T_i$  — колебательная температура  $i$ -й моды;  $\Theta_i$  — характеристическая колебательная температура. Первое слагаемое в правой части изменения колебательной энергии  $Q_{VT}^i$  учитывает колебательно-

поступательный  $VT$ -обмен, второе  $Q_{VV'}^i$  — межмодовый  $VV'$ -обмен, а третье  $Q_{CV}^i$  — изменение колебательной энергии за счет химических реакций с участием колебательно-возбужденных молекул ( $CV$ -процесс). Эти слагаемые получаются из системы микрокинетических уравнений баланса в результате «свертки» (их вид приведен в [6, 7]).

Остановимся на вопросе создания генератора кинетических уравнений на основе баз данных по физико-химической кинетике. Решение конкретных задач газовой динамики с физико-химическими превращениями предполагает конкретизацию выбора как газодинамических уравнений (течение в канале, за ударной волной и т. д.), так и элементарных процессов. Однако в большинстве случаев приходится учитывать большое количество химических реакций и процессов колебательной релаксации. Формирование кинетических уравнений указанных процессов в этом случае является весьма трудоемкой задачей, и вероятность ошибки или описки велика. При переходе в программе расчета с неформализованной кинетикой к новой системе физико-химических данных или при расширении и модификации уже используемой необходимо заново написать кинетическую часть.

Необходимость автоматизации формирования кинетических уравнений привела к созданию программ-генераторов, которые формируют правые части дифференциальных уравнений, описывающих физико-химические процессы. Такие генераторы были созданы для уравнений как химической кинетики [8], так и модовой колебательной кинетики [9]. Однако решение ряда задач физико-химической газовой динамики возможно только при совместном учете уравнений химической кинетики и колебательной релаксации.

В связи с этим был создан универсальный генератор правых частей кинетических уравнений (1), учитывающий следующие процессы: химические и плазмохимические реакции, колебательно-поступательный обмен энергии ( $VT$ -процесс), колебательно-колебательный  $VV'$ -процесс между различными колебательными модами,  $CV$ -процесс с учетом влияния химических реакций на изменение колебательной энергии, переходы с учетом излучения молекул. Универсальность генератора заключается в том, что формирование правых частей кинетических уравнений производится по символической записи процессов в виде обычной молекулярной формулы. Полный перечень учитываемых процессов вместе с данными о константах скоростей хранится в виде отдельной базы данных. Таким образом, при переходе к другой системе кинетических переменных меняется только название базы данных.

В генератор вмонтирован редактор проверки используемой базы физико-химических данных. Он осуществляет диагностику правильности составления базы данных, следит за соблюдением общих законов сохранения массы, заряда, сорта частиц, а также проверяет случайное дублирование элементарных процессов.

В инфологическую схему взаимодействия генератора с остальными компонентами системы входят следующие элементы: базы физико-химических данных  $B_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ); программы прямого расчета  $\Pi_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ), использующие для формирования кинетических уравнений базы данных  $B_i$ ; программы-модули  $A_j$  ( $j = 1, 2, \dots$ ), использующие программы прямого расчета  $\Pi_k$  (соответственно и базы данных  $B_i$ ) в качестве подпрограмм и предназначенные для решения более сложных проблем физико-химической газовой динамики, чем расчет прямой кинетической задачи. Для решения проблемы программы-модули  $A_j$ , как правило, многократно обращаются к программам  $\Pi_k$ . Конкретно решаемая задача модуля  $A_j$  также связана с конкретным видом некоторого функционала, вычисляемого в отдельном блоке. В качестве модулей  $A_j$  в систему входит процедура выбора ведущих процессов [10] или процедура, позволяющая решать вариационные задачи газовой динамики с учетом релаксационных процессов. В каждую программу  $\Pi_k$  вмонтирована мини-СУБД (система управления базами данных), которая по заданным критериям может копировать из основной базы ее часть. Определенный интерес в системе представляет блок «нестандартная часть». Выход в этот блок может осуществляться как из генератора, так и из

программ  $\Pi_k$  и модулей  $A_j$ . Обращение к этому блоку происходит в тех случаях, когда отдельные фрагменты решения задачи не укладываются в стандартную схему и в блоке достраивается нестандартная часть. Как правило, этот блок системы небольшой и программируется отдельно для каждой конкретно рассматриваемой задачи.

С использованием системы, описанной выше, была решена вариационная задача газовой динамики с физико-химическими превращениями, связанная с определением контура сверхзвукового сопла, обеспечивающего максимальную удельную мощность газодинамического лазера (ГДЛ) на  $\text{CO}_2$ . Для решения вариационной задачи применялись прямые численные методы поиска оптимума, которые также вмонтированы в эту систему.

Следует отметить, что лазерная технология вступает в новый этап своего развития, характеризующийся использованием лазеров высокой мощности (10 кВт и более). В промышленности ГДЛ могут применяться для сварки толстостенных конструкций, закалки на большие глубины и резки тугоплавких материалов. Эти лазеры должны быть компактны, обладать высоким качеством луча, генерировать излучение мощностью  $10 \div 20$  кВт и выше [11].

Результаты оптимизации ГДЛ на  $\text{CO}_2$ , содержащего в качестве рабочей среды молекулы  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ , указывают на возможность получения высоких значений удельной мощности  $W$  генерации в расчете на единицу расхода газа [12]. Однако получающиеся при этом оптимальные параметры не всегда могут удовлетворить изготовителя. В частности, в оптимальном режиме у ГДЛ должны быть достаточно высокие начальные температура  $T_0$  и давление  $p_0$  перед входом в сопловую решетку, а оптимальные сопла должны иметь большие углы раскрытия в районе геометрической критики (минимального сечения сопла). Степень расширения потока на выходе из сопла составляет несколько десятков (иногда более ста) единиц.

При больших углах раскрытия в геометрической критике сопла с последующим переходом в плоскопараллельный поток газа, как правило, неизбежны проблемы профилирования сверхзвукового сопла с целью получения безударного потока газа, поскольку появление скачков уплотнения может существенно ухудшить характеристики газодинамического лазера. При большой степени расширения потока газа в сверхзвуковом сопле неизбежны проблемы выброса отработанных газов в атмосферу, например, с помощью диффузора, установленного за резонатором.

Таким образом, при изготовлении ГДЛ на  $\text{CO}_2$  неизбежно возникают реальные ограничения на физические параметры системы, которые могут уменьшить мощность лазера по сравнению с «идеальными» условиями.

В связи с этим весьма интересно исследовать возможности работы ГДЛ при меньших углах раскрытия и степени расширения потока сверхзвукового сопла, позволяющие успешнее решать проблемы, связанные с профилированием оптимального сопла. Такую задачу в теоретическом плане, по-видимому, целесообразно решать в результате оптимизации ГДЛ при низких значениях этих параметров. Постановка задачи оптимизации описана в [12]. Результаты решения указанной выше задачи приведены на рис. 1.

Сведения о том, насколько снижается удельная мощность  $W$ , если уменьшать значение параметра сопла  $\alpha = 2 \operatorname{tg} \Theta / h_*$  (т. е. если уменьшать начальный угол раскрытия  $\Theta$  или увеличивать высоту критического сечения  $h_*$ ) и степень расширения  $S$  потока на выходе из сопла, дают результаты, приведенные на рис. 1, где  $L = L_0 + L_1$  ( $L_0$  — длина сверхзвуковой части сопла,  $L_1$  — длина плоскопараллельного участка сопла),  $S = \operatorname{const}$  при  $L_0 \leq x \leq L_0 + L_1$ . В промежутке  $0 \leq x \leq L_0$  контур  $h$  задавался в виде параболы с условиями

$$\frac{h}{h_*} = 1, \quad h_* \frac{dh}{dx} = \alpha \quad \text{при} \quad x = 0, \quad \frac{h}{h_*} = S, \quad \frac{dh}{dx} = 0 \quad \text{при} \quad x = L_0.$$

В качестве исходного варианта рассматривалась газовая смесь 15,7 %  $\text{CO}_2 + 1,55$  %  $\text{H}_2\text{O} +$

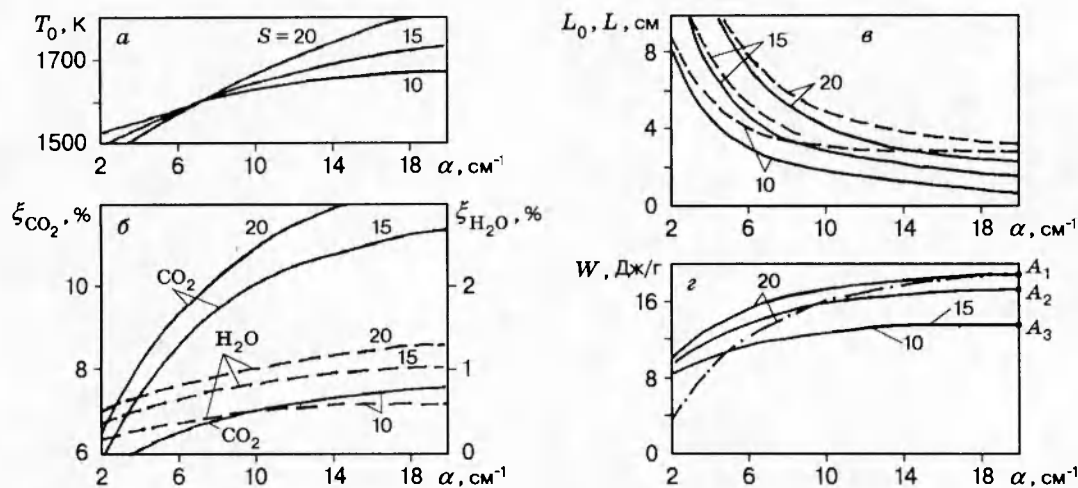


Рис. 1

82,75 %  $N_2$  при начальной температуре на входе в сопло  $T_0 = 1790$  К, что соответствует условиям оптимизации с парами воды при фиксированном значении начального давления  $p_0 = 5$  атм. В этом случае оптимальное сопло имеет  $\alpha = 21,3$   $см^{-1}$  и  $S = 35$  (при полной длине сопла 4,8 см). При этих параметрах расчеты показывают возможность получения  $W = 19,9$  Дж/г.

При моделировании лазера полагалось, что расстояние между зеркалом и противоположной стенкой, а также длина резонатора вдоль по потоку равны 50 см. Суммарные потери луча (на два прохода) составляют 3 %. Если осуществлять поиск оптимума удельной мощности  $W$ , фиксируя  $\alpha = 20$   $см^{-1}$ , но ограничивая степень расширения потока условиями  $S = 20; 15; 10$ , то максимальное значение  $W$  уменьшается всего на 4,7; 10,9; 32,4 % соответственно. На рис. 1,г данным значениям  $W$  отвечают точки  $A_1, A_2, A_3$ . При этом необходимо использовать оптимальные параметры  $T_0, \xi_i, t, L_0, L_1$ , численные значения которых определяются из рис. 1,а-в при  $\alpha = 20$   $см^{-1}$  ( $\xi_i$  — молярные доли  $CO_2, H_2O, N_2, t$  — коэффициент пропускания зеркала резонатора).

Далее рассматривались сопла при меньших значениях параметра  $\alpha$  ( $\alpha < 20$   $см^{-1}$ ), а при фиксированных его значениях решалась задача поиска максимума  $W$  с дополнительным ограничением степени расширения  $S = 20; 15; 10$ . Результаты решения этой задачи приведены на рис. 1,а-г, где цифры около кривых соответствуют варианту с указанным значением степени расширения потока (а — оптимальная начальная температура  $T_0$ , б — молярные доли молекул  $CO_2$  и  $H_2O$ , доля молекул  $N_2$  определяется при вычитании из 100 % молярных долей  $CO_2$  и  $H_2O$ , в — длина сопла  $L_0$  (сплошные кривые) и полная длина  $L = L_0 + L_1$  (штриховые), г — удельная мощность  $W$ ). Оптимальное значение коэффициента пропускания зеркал  $t$  меняется в интервале  $0,10 \div 0,12$  при  $S = 20$ ;  $0,085 \div 0,105$  при  $S = 15$ ;  $0,07 \div 0,075$  при  $S = 10$ . При решении задачи поиска максимальных  $W$  получились несколько неожиданные результаты: значение  $W$  плавно падает по мере уменьшения величины  $\alpha = 2 \operatorname{tg} \Theta / h_*$ . Например, при уменьшении  $\alpha$  на порядок от 20 до  $2 \div 3$   $см^{-1}$  и степени расширения  $S$  от 35 до 10 оптимальное значение  $W$  уменьшается всего примерно в 2 раза (рис. 1,г). Уменьшается и оптимальное значение начальной температуры  $T_0$  от 1790 до 1540 К, а длина сопла увеличивается. Для сравнения на рис. 1,г штрихпунктирной линией показано изменение  $W$  при непосредственном уменьшении  $\alpha$  ( $S = 20$ , а оптимизация по параметрам  $T_0, \xi_i, t, L, L_1$  не проводилась, и они оставались фиксированными). Слабого уменьшения  $W$  для малых значений  $2 \operatorname{tg} \Theta / h_*$  можно добиться при одновременной оптимизации по всей совокупности параметров ГДЛ.

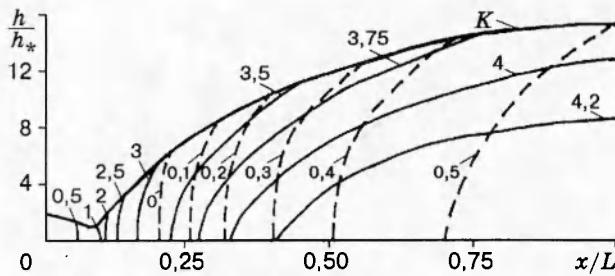


Рис. 2

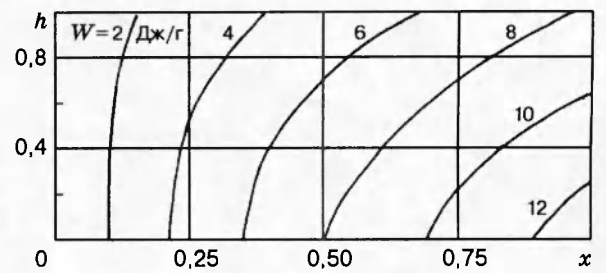


Рис. 3

На рис. 2 указаны распределения характеристик в сопле, найденные в расчете в предположении о двумерном характере течения газа. Поле течения получено в результате решения обратной задачи сопла Лавала. В качестве распределения давления на оси использовались данные решения задачи оптимизации в одномерной постановке при  $2 \operatorname{tg} \Theta / h_* = 5 \text{ см}^{-1}$  и  $S = 15$ . По оси абсцисс отложена безразмерная длина сопла, по оси ординат — отношение высоты сопла  $h$  к критическому сечению  $h_*$ . Сплошные линии соответствуют одинаковым значениям чисел Маха (рассчитанных по эффективному показателю адиабаты), а штриховые — распределению коэффициента усиления,  $\text{м}^{-1}$ . Высота сопла в минимальном сечении  $h_* = 2,51 \text{ мм}$ , а максимальный полуугол контура  $\sim 32^\circ$ . Кривая, отмеченная буквой  $K$ , определяет контур сопла при  $h_* = 2,51 \text{ мм}$ .

На рис. 3 приведены линии одинаковых значений удельной мощности  $W$ , выводимой из резонатора, по оси абсцисс отложена длина резонатора, по оси ординат — его высота (в относительных единицах).

Неоднородность в распределении поля интенсивности излучения при учете двумерности газового потока приводит к уменьшению выводимой мощности в резонаторе. Суммарная удельная мощность  $W$  меньше соответствующей мощности одномерного потока на 19 %. Если в качестве контура сопла выбрать линию тока с минимальным критическим сечением  $h_* = 2$  и 1,5 мм, то аналогичное различие в удельной мощности уменьшается до 13 и 7,5 % соответственно.

Хотя при таких углах раскрытия на выходе из сопла и в резонаторе не удастся получить равномерного потока газа, однако использование малых значений  $\alpha = 2 \operatorname{tg} \Theta / h_*$  позволяет применять сопла с большим критическим сечением ( $h_* \approx 2,5 \text{ мм}$ ). Это важно при непосредственном создании ГДЛ, поскольку при заданном расходе газа сопловая решетка лазера будет состоять из меньшего количества элементов (сопел), что, в свою очередь, уменьшает потери в ударных волнах и в следе (из-за стекания пограничного слоя со стенок сопел) за кормой сопловой решетки. При этом также уменьшаются потери, связанные с нарушением оптической однородности активной среды в резонаторе из-за изменения плотности газа.

Таким образом, при изготовлении ГДЛ на  $\text{CO}_2$  вместо сопел с большой степенью расширения и большими углами раскрытия (и малыми значениями критического сечения) можно использовать сопла с расширением  $S < 20$  и малыми значениями параметра  $\alpha = 2 \operatorname{tg} \Theta / h_*$  ( $\leq 10 \text{ см}^{-1}$ ). При небольших значениях начального давления ( $p_0 \sim 5 \text{ атм}$ ) на входе в сопло лазерная смесь имеет относительно невысокую начальную температуру ( $T_0 \sim 1500 \div 1700 \text{ К}$ ). При этом эффективность ГДЛ остается высокой.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Кондратьев В. Н. Константы скорости газозафазных реакций: Справочник. М.: На-

- ука, 1971.
- 2) Baulch D. L., Drysdale D. D., Horne D. G., et al. Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions. V. 3. Homogeneous Gas Phase Reactions of the O<sub>2</sub>-O<sub>3</sub> System, the CO-O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> System, and Sulphur-Containing Species. L.: Butterworth, 1976.
  3. Baulch D. L., Cox R. A., Hampson R. F., et al. Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry // J. Phys. and Chem. Ref. Data. 1980. V. 9, N 2. P. 295-471.
  4. Британ А. Б., Левин В. А., Старик А. М., Хмелевский А. Н. К выбору расчетной модели течения в соплах высокотемпературных ГДЛ на продуктах горения // Квантовая электроника. 1986. Т. 13, № 1. С. 86-94.
  5. Кривоносова О. Э., Лосев С. А., Наливайко В. П. и др. Рекомендуются данные по кинетике химических реакций в системе соединений атомов N-O // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. С. 5-26.
  6. Лосев С. А., Макаров В. Н., Погосбекян М. Ю. Модель физико-химической кинетики за фронтом очень сильной ударной волны в воздухе // Изв. РАН. МЖГ. 1995. № 2. С. 169-182.
  7. Лосев С. А. Газодинамические лазеры. М.: Наука, 1977.
  8. Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.
  9. Маркачев Ю. Е., Проворов Л. В. Генератор правых частей уравнений колебательной кинетики // Уч. зап. ЦАГИ. 1987. Т. 18, № 1. С. 126-133.
  10. Макаров В. Н. Разработка процедуры выделения ведущих реакций в генераторе моделей среды системы АВОГАДРО // Информатика в физико-химической газодинамике. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1992. С. 20-38.
  11. Losev S. A., Kaliuzhnyi V. V., Kobets T. I., et al. Gas-dynamic laser now // 1st Int. Conference on Nonequilibrium Processes in Nozzles and Jets. Moscow, 1995.
  12. Лосев С. А., Макаров В. Н. Многофакторная оптимизация газодинамического лазера на углекислом газе. II. Оптимизация мощности генерации // Квантовая электроника. 1976. Т. 3, № 5. С. 960-968.

*Поступила в редакцию 4/1 1996 г.*

---