

когда поверхности мишени не подвергались никакой обработке в целях очистки от загрязнений, за исключением естественного облучения набегающим потоком плазмы. Полученные при этом значения $\alpha_i^{N_2^+}$ на поверхности Nb показаны на фиг. 6 штриховой линией. Аналогичные измерения проведены и для других материалов, использованных в данной серии. По результатам этих измерений α_i в потоке азотной плазмы значение β в (3) может быть принято равным $\beta \approx 18^\circ$.

Поступила 6 VII 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Грановский В. Л. Электрический ток в газе. М., Гостехиздат, 1952.
2. Sammartin I. R. End effect in Langmuir probe response under ionospheric satellite conditions.— Phys. Fluids, 1972, vol. 15, N 6.
3. Шувалов В. А., Резниченко Н. П., Губин В. В. Применение термоанемометрических зондов для измерения коэффициентов аккомодации энергии ионов потока разреженной плазмы.— ТВТ, 1978, т. 16, № 5.
4. Гуревич А. В., Пятаевский Л. П., Смирнова В. В. Ионосферная аэродинамика.— УФН, 1969, т. 99, № 1.
5. Гуревич А. В., Смирнова В. В. К теории зондовых измерений в движущейся плазме.— Геомагн. и аэронавигация, 1970, т. 10, № 5.
6. Физико-химические свойства элементов. Киев, Наукова думка, 1965.
7. Добрецов Л. Н., Гомоюмова Н. П. Электронная и ионная эмиссия. М., Наука, 1968.
8. Каминский М. Атомные и ионные столкновения на поверхности металла. М., Мир, 1967.
9. Oman R. Calculation of the interactions of diatomic molecules with solid surfaces.— In: Rarefied Gas Dynamics. Vol. 1. N. Y.— L., Acad. Press, 1967.
10. Жук В. И. О захвате атомов газа на поверхности твердого тела.— ПМТФ, 1979, № 1.
11. Варакин Г. К., Фарафонов В. Г. Аэродинамические характеристики элемента поверхности, обтекаемой высокоскоростным свободномолекулярным потоком.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1975, № 4.
12. Грунич Д. Д., Ермаков Г. Е., Арифов У. А. Исследование вторичной ионной эмиссии с W и Mo в зависимости от угла падения медленных щелочных ионов.— В кн.: Взаимодействие газа с поверхностью твердого тела. Новосибирск, изд. ИТПМ СО АН СССР, 1971.
13. Варакин Г. К., Фарафонов В. Г. О применении диффузной схемы отражения при обтекании поверхности свободномолекулярным потоком со скоростью 10 км/с.— Изв. АН СССР. МЖГ, 1974, № 5.

УДК 533.6.011.8

РАСЧЕТ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГИПЕРЗВУКОВЫХ СЛЕДАХ ЗА АЭРОЗОЛЬНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

Л. М. Дмитриев, Ю. Е. Маркачев
(Жуковский)

Для многих технических проблем представляет интерес задача организации быстрого смешения реагирующих компонентов за времена, сравнимые с характерными временами химических реакций. Одним из возможных способов быстрого смешения реагирующих веществ является способ, описанный в работе [1], в котором один из компонентов впрыскивается в виде аэрозоля в гиперзвуковой поток другого реагирующего компонента.

Химические и газокинетические процессы, происходящие в следах за аэрозольными частицами, представляют собой сложные для теоретического описания явления.

Трудности обусловлены тем, что течение газовой смеси за частицами из-за малого размера частиц, сравнимого с длиной свободного пробега молекул газа, меняется в широких пределах от течения сплошной среды, описываемого уравнениями Навье — Стокса, до свободномолекулярного течения, описываемого уравнением Больцмана. Область течения около частицы и за ней условно можно разбить на две зоны (фиг. 1, I — частица, 2 — ударная волна, 3 — след). В зоне I течение описывается уравнением Больцмана, в зоне II уравнениями сплошной среды. На достаточном удалении от частицы ($x \gg d$) поперечные составляющие скорости будут намного меньше продольных, и в этом случае в зоне II течение описывается уравнениями типа пограничного слоя.

Если пренебречь изменением скорости частицы за счет торможения на масштабах, на которых возмущения за частицами в газе затухают, то в системе координат, движущейся вместе с частицей, уравнения имеют вид [2]

$$(1) \quad \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho v r) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) = 0,$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right),$$

$$\rho u \frac{\partial H}{\partial x} + \rho v \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{Pr} r \left[\frac{\partial H}{\partial r} + (Pr - 1) \frac{\partial}{\partial r} (u^2/2) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \sum_i \left(\frac{\rho D_i}{\mu} Pr - 1 \right) T c_{p_i} M_i \frac{\partial F_i}{\partial r} \right] \right) + \sum_j Q_j.$$

Уравнения (1) должны быть дополнены уравнениями переноса для различных компонентов смеси

$$(2) \quad \rho u \frac{\partial F_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial F_i}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho D_i r \frac{\partial F_i}{\partial r} \right) + \rho W_i$$

и уравнением состояния

$$(3) \quad p = \rho R T \sum_i F_i, \quad \sum_i M_i F_i = 1.$$

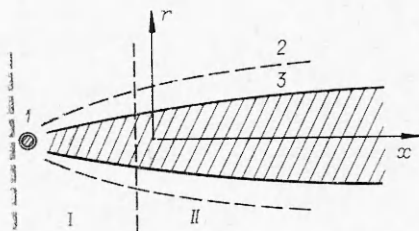
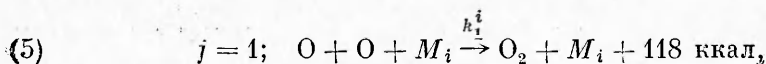
Энтальпия H определяется соотношением

$$(4) \quad H = \sum_i M_i F_i c_{p_i} T + u^2/2.$$

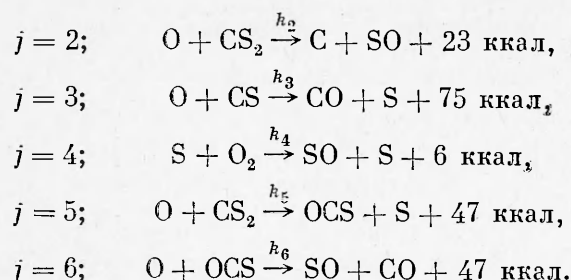
Кроме того, входящие в уравнения (1), (2) члены Q_j , соответствующие тепловыделению в единице объема в результате реакции типа j , и W_i , соответствующие изменению компонента F_i в результате всех химических реакций, должны быть определены из уравнений химической кинетики.

Ниже анализ процессов будет иллюстрироваться на примере расчета горения CS_2 в аэродинамическом следе, образующемся за отдельной частицей

жидкого (твердого) CS_2 в гиперзвуковом потоке смеси $He + O + O_2$ (3,9 : 0,1 : 1). При этом используются следующие основные химические реакции, протекающие в смеси $CS_2 + O_2 + O + He$ [3]:



Ф и г. 1



Здесь M_i ($i = 1, \dots, 9$) означают частицы (молекулы, атомы) соответственно O_2 , CS_2 , CS , SO , OCS , CO , O , He , S .

Константы скоростей химических реакций k_1^i , k_j ($i = 1, \dots, 9$, $j = 2, \dots, 6$) взяты из работы [3]. Величины Q_j в уравнениях (1) могут быть выражены через концентрации F_i следующим образом:

$$(6) \quad Q_1 = c^3 \sum_{i=1}^9 k_1^i F_i F_7^2 e_1 / N_A, \quad Q_j = c^2 k_j \frac{F_j}{N_A} F_i F_k, \quad j = 2, \dots, 6, \quad c = \rho N_A.$$

Выражения для $W_i \sim (dF_i/dt)_{\text{хим}}$ приведены в работе [3]. В соотношениях (6) величины e_j представляют собой теплоту реакции j , выраженную в Дж/кмоль.

Для решения уравнений (1)–(6) необходимо знание коэффициентов переноса (μ , Pr , D_i) в смеси и их зависимости от температуры и давления. Коэффициенты D_i в смеси определялись по соотношениям [4]

$$(7) \quad D_i = \frac{1 - \bar{c}_i}{N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}} \bar{c}_j / D_{ij}},$$

где D_{ij} — бинарные коэффициенты диффузии. Величины D_{ij} для смесей $\text{He}-\text{O}$, $\text{He}-\text{CO}$, $\text{He}-\text{O}_2$, $\text{CO}-\text{O}_2$, $\text{O}-\text{O}_2$ приведены в [6]. В остальных случаях коэффициенты D_{ij} вычислялись из соотношений [5]

$$(8) \quad D_{ij} = \text{const} \left[\frac{M_i + M_j}{M_i M_j} \right]^{1/2} T^{3/2} / p \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \right)^2 \Omega_D.$$

Величины эффективных диаметров σ_i молекул и интегралов столкновений Ω_D для потенциала Леннарда — Джонса, полученные по данным о вязкости в чистых газах, приведены в [4]. Для компонентов CS , SO , S (для которых данные по вязкости авторам неизвестны) силовые постоянные потенциала Леннарда — Джонса предполагались такими же, как соответственно для CO , O_2 , O .

Зависимость коэффициентов D_{ij} от температуры аппроксимировалась функцией $T^{1,7}$ [5]. Значения D_{ij} , вычисленные при $T = 300 \text{ К}$ и $p = 10^5 \text{ Па}$, приводятся в таблице.

Вязкость смеси μ вычислялась по формуле [6]

$$(9) \quad \mu = \left(\sum_{i=1}^N \bar{c}_i / \mu_i \right)^{-1},$$

а зависимость $\mu_i(T)$ аппроксимировалась функцией $T^{0,65}$. В тех случаях, когда неизвестны экспериментальные значения μ_i , последние вычислялись по рекомендациям [4]. Число Прандтля в расчетах принято равным 0,75. Вклад колебаний молекул в теплоемкости $c_{p,i}$ в уравнении (4) не учитывал-

$i \backslash j$	CO	O	CS ₂	CS	SO	O ₂	S	OCS
He	0,73	1,09	0,49	0,71	0,72	0,74	1,04	0,53
CO		0,33	0,11	0,22	0,21	0,23	0,31	0,13
O			0,24	0,31	0,30	0,32	0,33	0,25
CS ₂				0,09	0,10	0,11	0,19	0,06
CS					0,19	0,21	0,25	0,11
SO						0,24	0,31	0,10
O ₂							0,32	0,12
S								0,21

ся, так как рассматриваемые в данной работе характерные температуры не превышали 600 К.

Таким образом, уравнения (1)–(9) позволяют полностью описать процессы переноса и кинетики в аэродинамическом следе за частицами.

Для решения этой системы уравнений необходимы начальные значения параметров p , $\rho(r)$, $u(r)$, $H(r)$, $F_i(r)$, которые в общем случае могут быть получены только из решения уравнения Больцмана в области I . Тем не менее эти параметры можно задать приближенно, используя интегральные законы сохранения. Для этого будем искать величины $H(r)$, $\rho u(r)$, $\rho_{CS_2}(r)$ в начальном сечении в виде гауссовых профилей:

$$(10) \quad \rho(r) u(r) = \rho_e u_e + \xi \exp(-br^2), \quad H(r) = H_e + \eta \exp(-br^2),$$

$$\frac{\rho_{CS_2}}{\rho} = \gamma \exp(-br^2).$$

Используя интегралы сохранения для потоков $\rho_{CS_2} u$, ρu , $\rho u H$, между граничными сечениями области I и полагая, что $\rho_e \simeq \rho_0$, $H_e \simeq H_0$, $u_e \simeq u_0$, можно получить следующие соотношения, связывающие величины ξ , η , b , γ :

$$(11) \quad \xi = \frac{\rho_0 u_0 \eta}{q + c_{pm} T_m + H_0 - \eta/2}, \quad b = \frac{\pi}{m}, \quad \gamma = \frac{\xi}{\rho_0 u_0 + \xi/2}.$$

Скорость испарения \dot{m} массы частицы аэрозоля в предположении гиперзвукового свободномолекулярного обтекания частицы может быть определена из выражения [1]

$$(12) \quad \dot{m} = \frac{\rho_0 u_0^3}{2} \alpha \cdot S/q.$$

Величина α в расчетах была принята равной 0,5, а величина $q = 5 \cdot 10^5$ Дж/кг.

Далее при определении начальных условий будем предполагать, что состав газа в начальном сечении, за исключением компонента CS₂, остается таким же, как в набегающем потоке. Это допущение справедливо в том случае, если характерные времена химических реакций меньше времени нахождения газа в зоне I , и будет оправдано после проведения окончательных расчетов. При известных значениях коэффициентов ξ , η , γ , b из равенств (3), (4), (10) и очевидного соотношения $F_{CS_2} = \frac{\rho_{CS_2}}{\rho} \frac{1}{M_2}$

находятся начальные профили всех переменных задачи. Однако для нахождения 4 неизвестных констант соотношений (11) недостаточно, и необходимо дополнительное физическое условие, в качестве которого использовалось следующее соотношение

$$(13) \quad H(0, 0) \ll H_e,$$

являющееся следствием того, что из-за малой первоначальной скорости испарившегося CS_2 полная энтальпия $H(0, 0)$ на оси следа в начальном сечении намного меньше полной энтальпии набегающего потока. Неопределенность выбора $H(0, 0)$ по соотношению (13) соответствует неопределенности расстояния начального сечения от частицы, поэтому в пределах соотношения (13) величина $H(0, 0)$ задавалась параметрически, и, как подтвердилось в результате расчетов, при изменении $H(0)$ в пределах $0,1\text{He} - 0,5\text{He}$ параметры в следе на достаточном удалении от начального сечения не зависят (с точностью $\sim 10\%$) от величины $H(0, 0)$, что, по-видимому, является следствием автомодельных свойств течения в следе [7].

Для того чтобы не изменять сетку конечно-разностного разбиения по координате r при изменении радиуса следа, уравнения (1), (2) записывались в новых координатах x', r' :

$$(14) \quad x' = x, \quad r' = r/R(x)$$

с помощью преобразований

$$(15) \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{r'}{R(x)} \frac{dR}{dx} \frac{\partial}{\partial r'}, \quad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{R(x)} \frac{\partial}{\partial r'}.$$

Преобразованные с помощью соотношений (14), (15) уравнения (1), (2) записывались в виде, подготовленном к использованию численного метода для решения системы параболических уравнений [8, 9]:

$$(16) \quad a_i \frac{\partial f_i}{\partial x} + b_i \frac{\partial f_i}{\partial r'} = g_i \frac{\partial}{\partial r'} \left(c_i \frac{\partial f_i}{\partial r'} \right) + e_i f_i + d_i,$$

где под величинами f_i подразумеваются любые из функций $H(r', x)$, $u(r', x)$, $F_i(r', x)$. При использовании преобразований (14), (15) необходимо задавать зависимость $R(x)$, которая, вообще говоря, может быть выбрана произвольной монотонно возрастающей функцией, например, подчиняющейся условию $R(x) = \delta(x)$, где $\delta(x)$ — размер следа, определяемый из сохранения импульса (толщина вытеснения импульса).

В настоящих расчетах функция $R(x)$ задавалась следующим образом:

$$(17) \quad R^2(x) \int_0^1 F_2(r', x) \rho(r') dr' = R^2(0) \int_0^1 F_2(r', 0) \rho(r', 0) u(r', 0) r' dr'.$$

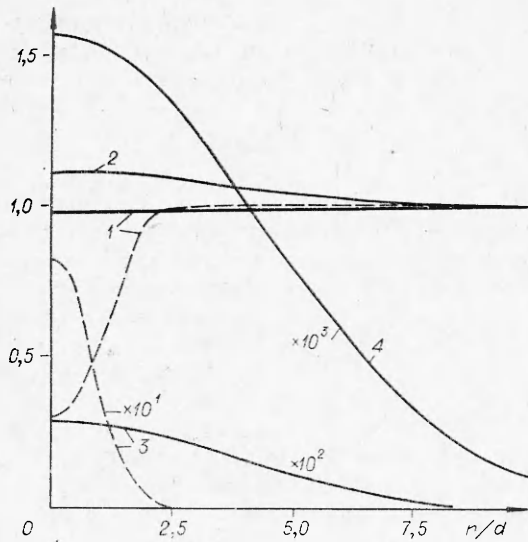
Очевидно, что величина $R(x)$, вычисляемая по соотношению (17), будет больше радиуса диффузионного следа для компонента CS_2 , определяемого соотношением (17) при отсутствии химических реакций в следе. Граничные условия для системы уравнений (1), (2) (или (16)) записываются в виде

$$\text{при } r' = 0 \quad \partial/\partial r' = 0,$$

$$\text{при } r' = 1 \quad F_i(1, x) = F_{ie} = F_{i\infty}, \quad H(1, x) = H_e, \quad u(1, x) = u_e.$$

Величины H_e , u_e (по значениям близкие к H_∞ , u_∞) определяются из свойств решений уравнений (1) при $r \rightarrow \infty$ (вывод приводится в приложении).

Для численного интегрирования системы уравнений типа (16) применялся метод, описанный в работе [9]. Шаг конечно-разностного разбиения



Ф и г. 2

составляло 6—8 мин машинного времени БЭСМ-6.

На фиг. 2 представлены характерные профили концентраций, температуры, энтальпии на расстояниях $x = 0$ и $830 d$ для размера вбрасываемой частицы $d = 1,5 \cdot 10^{-5}$ м, скорости частицы относительно потока 3000 м/с и при параметрах потока $p = 10^4$ Па, $T_\infty = 300$ К ($1 - H/H_\infty$; $2 - T/T_\infty$; $3 - F_{CS_2} \rho_\infty R T_\infty / p_\infty$; $4 - F_{CO} \rho_\infty R T_\infty / p_\infty$).

На фиг. 3 представлена зависимость температуры на оси следа, энтальпии H , а также концентрации CO на оси следа от расстояния x при различных значениях величины $\eta = H_e - H(0, 0)$ ($1 - H/H_\infty$; $2 - T/T_\infty$; $3 - F_{CS_2} \rho_\infty R T_\infty / p_\infty$; $4 - F_{CO} \rho_\infty R T_\infty / p_\infty$ при $p_\infty = 10^4$ Па, $T_\infty = 300$ К, $d = 15$ мкм, штриховые кривые соответствуют $H(0, 0) = 0,1 H_e$, сплошные — $H(0, 0) = 0,3 H_e$).

Как следует из приведенных зависимостей, параметры в следе на больших расстояниях $x \gg R(0)$ мало чувствительны к заданию начальных профилей $H(r', 0)$. Кроме того, характерный размер, на котором проходят химические реакции, оказывается большим, чем размер для газодинамических процессов.

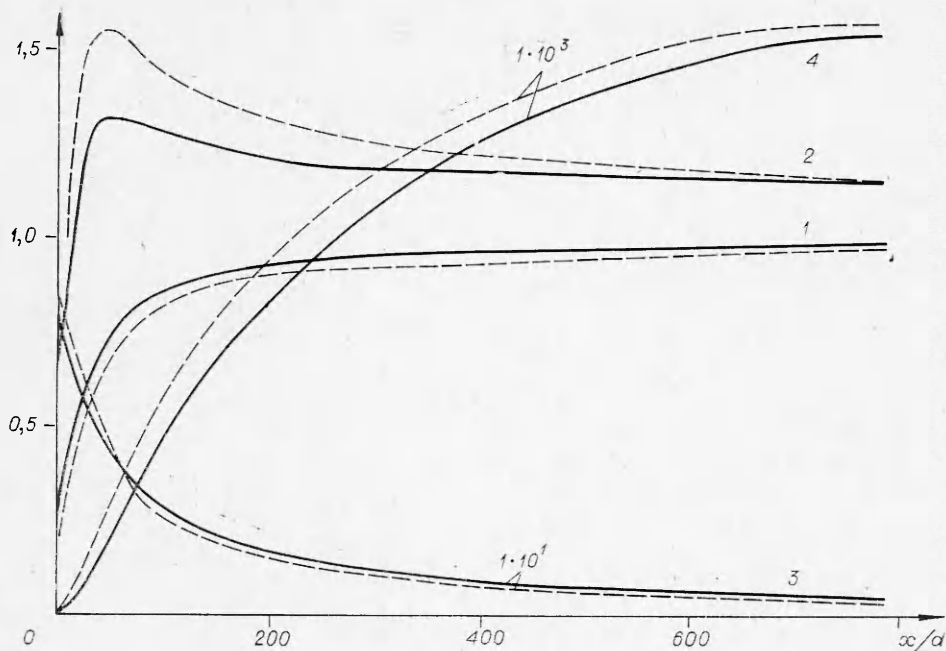
Представляет интерес также эффективность процесса сгорания CS_2 в следе за испаряющейся частицей. На фиг. 4 приводится зависимость величины

$$\beta = 2\pi \int_0^\infty \rho_{CS_2}(r) u(r) r dr / \dot{m},$$

представляющей собой долю непрореагировавшего CS_2 на больших расстояниях x , где из-за остывания газа в следе реакции замедляются, от давления и температуры газа в набегающем потоке ($1 - p = 5 \cdot 10^3$ Па; $2 - p = 10^4$ Па; $3 - p = 2 \cdot 10^4$ Па, штриховые кривые соответствуют $T_\infty = 250$ К, сплошные — $T_\infty = 300$ К, $d = 15$ мкм). Как и следовало ожидать, эффективность сгорания существенно зависит от температуры и давления, тем не менее сравнение с результатами расчетов горения CS_2 в той же смеси в расширяющемся сопле при предположении мгновенного смешения [3] показывает, что эффективность сгорания в следе может быть такой же, что и в случае [3].

по оси r' был выбран $h_r = 1/30$, шаг интегрирования вдоль оси x был переменным и менялся от значения $h_x = 0,05 R(0)$ при $x = 0$ до значения $h_x = 0,2 R(x)$ при $x \gg R(0)$.

Значения радиальной компоненты v определялись рекуррентным образом из интеграла сохранения потока массы в кольцевом объеме, ограниченном координатами $x, x + h_x$ и $r' - h_r, r' + h_r$. Число итераций, необходимых для установления с заданной относительной точностью (10^{-3}) решений f_i на слое $x + h_x$ по известным решениям на слое x , не превышало 6. Время решения задачи на масштабе $x = 1000 d$



Ф и г. 3

Таким образом, организация смешения путем впрыска одного из активных компонентов в виде частиц аэрозоля в гиперзвуковой газовой поток другого компонента может служить эффективным средством получения неравновесных компонентов в химически реагирующих газовых потоках.

Приложение. В общем случае, когда величина $R(x)$ выбирается независимо от толщины δ вытеснения импульса в следе (например, может оказаться, что $R(x) < \delta$), для повышения точности решений необходимо «подправить» граничные условия для H и u . Эти условия могут быть уточнены из асимптотических свойств решений уравнений (1). Используя уравнения сохранения импульса и массы (1), можно выписать следующие интегралы:

$$(П.1) \quad \int_0^{R(x)} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) r dr = \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} - \rho v u r \right) \Big|_{r=R(x)},$$

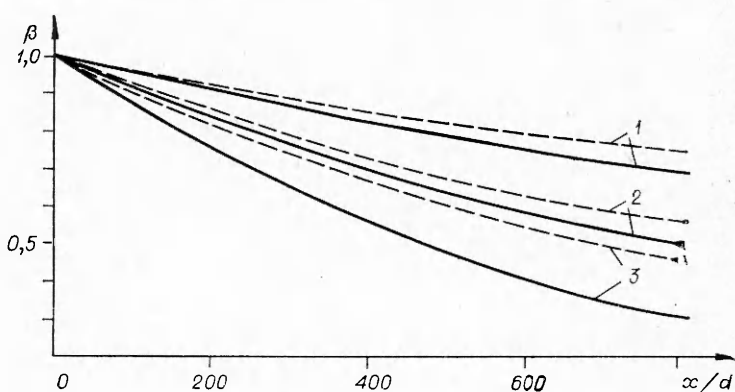
$$\int_0^{R(x)} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) r dr = - (\rho v r) \Big|_{r=R(x)}.$$

Так как при $r \rightarrow \infty$ правые части равенств (П.1) обращаются в нуль, то из соотношений (П.1), учитывая, что при $r \geq R(x)$ $|u - u_\infty| \ll u_\infty$, $|\rho u - \rho_\infty u_\infty| \ll \rho_\infty u_\infty$, можно получить линейризованное уравнение

$$(П.2) \quad \rho_\infty u_\infty \frac{d}{dx} \int_{R(x)}^\infty (u - u_\infty) r dr = \left[-\mu r \frac{\partial u}{\partial r} + \rho_\infty r (u - u_\infty) \left(v - u_\infty \frac{dR}{dx} \right) \right] \Big|_{r=R(x)}.$$

Если локальное решение при $r \geq R(x)$ искать в виде

$$(П.3) \quad \varepsilon(r, x) = u - u_\infty = c(x) \exp(-br^2),$$



Ф и г. 4

то из соотношений (П.2), (П.3) следует

$$(П.4) \quad \rho_{\infty} u_{\infty} \frac{d \varepsilon_e}{dx} \frac{1}{b} = - \mu R(x) \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=R(x)} + \varepsilon_e \rho_{\infty} R(x) \left(v_e - \frac{dR}{dx} u_{\infty} \right),$$

$$2bR(x) \varepsilon_e = - \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=R(x)}.$$

Дифференциальные соотношения (П.4) позволяют выразить значение $\varepsilon_e = u_e - u_{\infty}$ через значения $\partial u / \partial r (r = R(x), x)$, v_e , $R(x)$ и тем самым в каждом сечении $x + h_x$ включать в итерационный процесс уточненное значение u_e . Величина H_e определяется по известному значению u_e из соотношения

$$H_e = H_{\infty} + (u_e - u_{\infty}) u_e.$$

В случае, если величина $R(x)$ определяется, например, из интеграла сохранения импульса (т. е. $R(x) \equiv \delta(x)$), а масштаб диффузионного следа больше, чем величина $R(x)$, аналогичным образом могут быть уточнены граничные значения для концентраций F_{ie} .

Поступила 25 V 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Алферов В. И., Бирюков А. С., Божкова Е. А., Дмитриев Л. М., Марченко В. М. Исследование газодинамических процессов при взаимодействии аэрозоля углекислоты с гиперзвуковым потоком воздуха. Препринт ФИАН, № 275, 1978.
2. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике. Под ред. Г. И. Майкапара. М., Машиностроение, 1972.
3. Бирюков А. С., Кулагин Ю. А., Шелепин Л. А. Кинетика физических процессов в химическом СО-лазере на смешении потоков частично диссоциированных O_2 и CS_2 . Препринт ФИАН, № 40, 1977.
4. Greid R., Sherwood T. K. The properties of gases and liquids, 1966. Рус. пер. Свойства газов и жидкостей. М., Химия, 1971.
5. Margero T. R., Mason E. A. — J. Phys. Chem., 1972, vol. 1, N 1.
6. Голубев И. Ф. Вязкость газов и газовых смесей. М., Физматгиз, 1959.
7. Gold H. Laminar wake with arbitrary initial profiles. — AIAA J., 1964, vol. 2, N 5. Рус. пер. — Ракетн. техника и космонавтика, 1964, № 5.
8. Браиловская И. Ю., Чудов Л. А. Решение уравнений пограничного слоя разностным методом. — В кн.: Вычислительные методы и программирование. М., изд. МГУ, 1962.
9. Пасконов В. М. Стандартная программа для решения задач пограничного слоя. — В кн.: Численные методы в газовой динамике. М., изд. МГУ, 1963.