

**О РЕШЕНИИ ВАРИАЦИОННЫХ ЗАДАЧ
ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ
С ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ**

УДК 533.6.01

В. Н. Макаров

Институт механики МГУ, 119899 Москва

Многие задачи, связанные с движущимся газом с физико-химическими превращениями, сводятся к поиску экстремальных значений функционалов по некоторым наборам определяющих систему параметров. Такими являются задачи нахождения контура сверхзвукового сопла, обладающего максимумом тяги, контура тела, обладающего минимальным сопротивлением при обтекании газом, задачи планирования эксперимента с целью получения констант скоростей реакций и т. д. Любую задачу целенаправленного планирования, управления или принятия необходимого решения можно свести к задаче поиска экстремума некоторого функционала в пространстве параметров поиска.

Математически такие задачи могут быть сформулированы как задачи нелинейного программирования, для решения которых, как правило, применяют методы численного поиска.

1. Рассматривается вариационная задача газовой динамики с учетом физико-химических превращений, связанная с определением оптимального контура сверхзвукового сопла. Выберем в качестве независимых переменных декартову координату вдоль оси сопла x и функцию тока ψ в виде $d\psi = -\rho v y^r dx + \rho u y^r dy$ (y — декартова координата, перпендикулярная к оси x).

Исходная система уравнений с учетом процессов колебательной релаксации и химических реакций имеет вид (в стационарной постановке, без учета вязкости и теплопроводности (см., например, [1]))

$$\frac{\partial y^{1+r}}{\partial \psi} = \frac{1+r}{\rho u}; \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho y^{1+r})}{\partial \psi} = \frac{(1+r)p}{\rho u} - y \frac{\partial v}{\partial x}; \quad (1.2)$$

$$\frac{w}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0; \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial x} = Z_i(e_j, c_k, u, p, T), \quad i = 1, \dots, n; \quad j = 1, \dots; \quad k = 1, \dots; \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial x} = Q_i(e_j, c_k, u, p, T), \quad i = n+1, \dots, n+nv; \quad j = 1, \dots; \quad k = 1, \dots; \quad (1.5)$$

$$\frac{w^2}{2} + H = H_0; \quad (1.6)$$

$$p = \rho R_0 T \Sigma c_i; \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{v}{u}; \quad (1.8)$$

$$w^2 = u^2 + v^2. \quad (1.9)$$

Здесь уравнение (1.1) — следствие уравнения неразрывности; (1.2), (1.3) — уравнения движения; (1.4) — уравнения изменения концентраций при химических реакциях; (1.5) — уравнение релаксации колебательной энергии; (1.6) — уравнение энергии; (1.7) — уравнение состояния; (1.8), (1.9) — уравнения линии тока y ; u, v — проекции скорости потока w на оси прямоугольной декартовой системы координат; p, T, ρ — соответственно давление, температура и плотность газа; R_0 — универсальная газовая постоянная; H, H_0 — энтальпия единицы массы газа в произвольной точке и энтальпия торможения; e_i — энергия колебательных степеней свободы; c_i — мольно-массовые концентрации компонентов ($c_i = N_i/(N_A \rho)$, N_i — концентрации частиц, см^3 ; N_A — число Авогадро); n — количество химически реагирующих компонентов; nv — количество колебательных мод; $r = 0$ и $r = 1$ — плоское течение газа и осесимметричное.

Если в газе учитываются только поступательные, вращательные и колебательные степени свободы, а колебательная мода моделируется гармоническим осциллятором, то система допускает конкретизацию

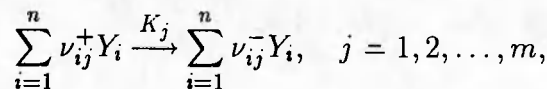
$$e_i = 1/[\exp(\Theta_i/T_i) - 1], \quad H = \sum_{i=1}^n c_i h_i^0 + R_0 T \sum_{i=1}^n c_i (5/2 + r_i) + R_0 \sum_{i=n+1}^{n+nv} a_i \Theta_i c_{j(i)} e_i,$$

где h_i^0 — энтальпия образования i -й частицы; r_i — число вращательных степеней свободы i -й частицы; e_i — колебательная энергия i -й моды в расчете на одну молекулу и на один квант; T_i, Θ_i — колебательная и характеристическая температуры i -й моды; a_i — фактор вырождения i -й колебательной моды; $c_{j(i)}$ — мольно-массовая доля i -й моды в j -й частице. Выражение энтальпии можно также представить в виде

$$H = \sum_{i=1}^n c_i h_i^0 + \frac{R_0}{\mu T} \left(\frac{5}{2} + \sum_{i=1}^n \xi_i r_i \right) + \frac{R_0}{\mu} \sum_{i=n+1}^{n+nv} a_i \Theta_i \xi_{j(i)} e_i.$$

Здесь $1/\mu = \sum_{k=1}^n c_k$; $\xi_i = c_i / \sum_{k=1}^n c_k = c_i \mu$; μ — молекулярный вес смеси; ξ_i — молярная доля i -го компонента.

2. Предположим, что в газе, состоящем из n компонентов, могут протекать m реакций типа



где K_j — константа скорости (прямой) реакции; ν_{ij}^+, ν_{ij}^- — стехиометрические коэффициенты; Y_i — исходные вещества и продукты реакции. Аналогичным образом записывается обратная реакция с константой скорости K_{-j} . Если для определения концентрационной характеристики данного вещества использовать мольно-массовые концентрации c_i , то феноменологические уравнения химической кинетики имеют вид

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^m \beta_{ij} W_j = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^m \beta_{ij} K_j \prod_{k=1}^n (\rho c_k)^{\nu_{jk}^+},$$

где $i = 1, 2, \dots, n$; t — время; $\beta_{ij} = \nu_{ij}^- - \nu_{ij}^+$; ρ — плотность газовой смеси; K_j — константа скорости j -й реакции; W_j — скорость прямой реакции.

Если выделить слагаемые, характеризующие изменение количества вещества как за

счет прямой, так и обратной реакции, то последнее уравнение примет вид

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{\rho} \sum_j \beta_{ij} (W_j - W_{-j})$$

(W_{-j} — скорость обратной реакции (записывается аналогично W_j)).

Уравнения релаксации для колебательной энергии моды i , моделируемой гармоническим осциллятором, будем использовать при следующих предположениях:

- внутри каждой моды обмен энергией происходит намного быстрее, чем межмодовый VV' -обмен, колебательно-поступательный VT -обмен и химические реакции;
- вращательные степени свободы находятся в равновесии с поступательными степенями свободы;
- сохраняется максвелловское распределение по поступательным степеням свободы.

Система релаксационных уравнений для колебательной энергии записывается относительно e_i (среднего числа колебательных квантов i -го типа в расчете на одну молекулу) в виде [2]

$$\frac{de_i}{dt} = Q_{VT}^i + Q_{VV'}^i + Q_{CV}^i.$$

Здесь слагаемое Q_{VT}^i учитывает колебательно-поступательный VT -обмен, $Q_{VV'}^i$ — межмодовый VV' -обмен, Q_{CV}^i — изменение колебательной энергии за счет химических реакций с участием колебательно-возбужденных молекул (CV -процесс);

$$Q_{VT}^i = (e_i^0 - e_i)/\tau_i; \quad \tau_i = \left[\sum_{j=1}^n c_j / (\tau_{ij} \sum_k c_k) \right]^{-1};$$

$$Q_{VV'}^i = k_{im} [e_m (e_i + 1) \exp(\Theta_m/T - \Theta_i/T) - (e_m + 1)e_i],$$

где e_i^0 — равновесное значение колебательной энергии e_i при $T_i = T$; τ_{ij} — время колебательной релаксации моды i при столкновении с молекулами типа j ; k_{im} — константа скорости VV' -обмена между молекулами (модами) i и m ; Θ_i, Θ_m — соответствующие характеристические колебательные температуры; выражение $Q_{VV'}^i$ записано для одноквантового обмена между молекулами.

Для многоквантового обмена вид $Q_{VV'}^i$ несколько усложняется. Пусть при многоквантовом VV' -обмене s квантов моды i обменивается с q квантами моды m . Тогда выражение для $Q_{VV'}^i$ имеет вид [3]

$$Q_{VV'}^i = k_{im} (s/a_i) [e_m^q (e_i + 1)^s \exp(q\Theta_m/T - s\Theta_i/T) - (e_m + 1)^q e_i^s]$$

(a_i — фактор вырождения моды i). Согласно принципу детального равновесия, константа скорости обратного процесса $k_{mi} = k_{im} \exp[(q\Theta_m - s\Theta_i)/T]$.

Изменение колебательной энергии e_i i -го типа колебаний в j -й молекуле в результате протекания химических реакций учитывается слагаемым Q_{CV}^i в виде [2]

$$Q_{CV}^i = \frac{1}{\rho c_{j(i)}} \sum_{k=1}^m (\nu_{jk}^- - \nu_{jk}^+) (e_{ik}^* - e_i) W_k,$$

где W_k — скорость k -й химической реакции; e_{ik}^* — среднее значение колебательной энергии, теряемой (или приобретаемой) модой типа i при каждом акте химической реакции типа k .

Была создана программа интегрирования уравнений (1.1)–(1.9) при течении релаксирующего газа в сопле. Программа универсальна с точки зрения трудоемкости процедуры формирования кинетических уравнений (1.4) и (1.5). Универсальность ее заключается в том, что формирование правых частей кинетических уравнений производится по символической записи реакций в виде обычной молекулярной формулы (например, $O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$). Аналогичным образом формируются слагаемые Q_{VT}^i , $Q_{VV'}^i$, Q_{CV}^i , определяющие изменение колебательной энергии e_i при VT -, VV' - и CV -процессах. 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 программу вмонтирован редактор проверки используемой базы физико-химических данных. Редактор проверяет правильность записи формул процессов. В частности, он выявляет те процессы, в записи которых присутствует не заявленный в базе компонент. Редактор также следит за выполнением закона сохранения массы или зарядов (для реакций с участием заряженных частиц) для каждой реакции из базы. Такая простая проверка базы позволяет избавиться от случайных описок при составлении базы данных на ЭВМ.

3. Предположим, что необходимо определить специфическое решение, описываемое системой (1.1)–(1.9), эквивалентное нахождению экстремума функционала $F(A_i)$ по определяющим параметрам A_i при некоторых (вообще говоря, нелинейных) ограничениях на параметры A_i :

$$g_m(A_i) = 0, \quad m = 1, 2, \dots; \quad g_k(A_i) \geq 0, \quad k = 1, 2, \dots$$

Для нахождения параметров оптимизации модели необходимо переходить к безразмерным переменным в уравнениях (1.1)–(1.9), в начальных и граничных условиях, в функционале $F(A_i)$ и в ограничениях на параметры A_i .

Анализ размерности задачи показывает, что поле течения определяется следующими параметрами: T_0 , Π_i , ξ_i^0 , a_k , y_0/L_0 , L/L_0 . Здесь L_0 — характерная длина задачи; T_0 — начальная температура перед входом в сопло; ξ_i^0 — начальные концентрации компонентов в точке $x = x_0$ (например, начальные значения молярных долей); a_k — безразмерные параметры, определяющие распределение безразмерного давления на оси сопла $p/p_0 = p_1(x/L_0, a_k)$; y_0 — характерный размер по y ; Π_i — параметры, появляющиеся при переходе к безразмерным переменным в кинетических уравнениях (1.4) и (1.5). Если выбрать в качестве характерной длины L_0 длину сопла L , то $L/L_0 = 1$.

Решение задачи в одномерной постановке не зависит от параметра $d = y_0/L$. Зависимость от него появляется только при двумерном характере протекания процесса.

Конкретный вид параметров Π_i зависит от конкретного вида кинетических уравнений. Для уравнений VT - и VV' -релаксаций $\Pi_i = \Pi_1 = p_0 L_0$. Для мономолекулярных реакций $\Pi_1 = L_0$, для бимолекулярных $\Pi_1 = p_0 L_0$, для тримолекулярных $\Pi_1 = p_0^2 L_0$. Таким образом, если при расчете используются уравнения колебательной релаксации (с учетом VT - и VV' -процессов) и/или бимолекулярные реакции, то определяющим параметром является комбинация $p_0 L_0$ (т. е. течение будет одинаковым при сохранении комплекса $\Pi_1 = p_0 L_0$). При дополнительном учете мономолекулярных и тримолекулярных реакций параметры p_0 и L_0 становятся определяющими параметрами оптимизации.

Иногда учет мономолекулярных, бимолекулярных и тримолекулярных реакций (и реакций высшего порядка) одновременно может создавать дополнительные математические трудности при фактическом определении оптимума. Это можно пояснить на следующем

примере. Предположим, что исходная система кинетических уравнений определяется бимолекулярными реакциями. В этом случае комплекс $p_0 L_0$ будет параметром оптимизации. Если к такой системе формально добавить несущественную мономолекулярную (или тримолекулярную) реакцию с малым значением константы скорости реакции, то с формальной точки зрения мы должны рассматривать два параметра оптимизации: p_0 и L_0 , хотя фактически параметром оптимизации по-прежнему остается комплекс $\Pi_1 = p_0 L_0$. В этом случае на многомерной гиперповерхности исследуемого функционала, имеющего среди параметров поиска p_0 и L_0 , наблюдается почти вырожденный «овраг» вдоль линии $p_0 L_0 = \text{const}$, что существенно может усложнять поиск оптимума.

В связи с этим при решении вариационных задач газовой динамики прямыми методами становится весьма важным решение проблемы выбора наиболее существенных физико-химических процессов [4]. С одной стороны, выбранные ведущие процессы позволяют быстрее рассчитывать поле течения (с точки зрения уменьшения времени счета на ЭВМ), с другой — будут содержать необходимую структуру по типам реакций и процессов, определяющих конкретный набор параметров оптимизации.

Как уже указывалось выше, полный набор определяющих параметров оптимизации находится после перехода к безразмерным переменным в исследуемом функционале и в ограничениях на параметры.

4. В теории сопла Лавала различают две задачи: прямую и обратную. Прямая задача состоит в определении поля течения при заданном контуре сопла и при некоторых условиях в начальном и конечном сечении сопла. Она сводится к краевой задаче для уравнений газовой динамики. Обратная задача состоит в определении поля течения при условиях, заданных на известной поверхности, и условиях, заданных в начальном сечении сопла. Обратная задача сводится к задаче Коши. Для определения поля течения в сопле будем решать обратную задачу сопла Лавала. В этом случае поле течения в области $G\{x_0 \leq x \leq x_k, \psi_0 \leq \psi \leq \psi_k\}$ находится, если, например, задано распределение давления на линии $\psi = \psi_0$ ($\psi_0 = 0$ на оси) и значения параметров в сечении $x = x_0$. Применение подходящей конечно-разностной схемы позволяет найти поле течения в области G .

Общая схема получения численного решения описана, например, в [1]; она использовалась нами для расчета поля течения газа с физико-химическими превращениями при разработке оптимального газодинамического генератора озона, основным элементом которого является сверхзвуковое сопло Лавала. Перспективность такого озонатора обсуждалась в [5], где получены оптимальные характеристики такого озонатора в одномерной стационарной постановке.

Общая схема газодинамического озонатора следующая. Нагретый до температуры T_0 и давления p_0 кислородосодержащий газ пропускается через сверхзвуковое сопло. При охлаждении в сопле атомы О, образовавшиеся на входе в сопло в результате термической диссоциации молекул O_2 , способствуют образованию молекулы озона O_3 (прежде всего за счет реакции $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$).

Для увеличения эффективности озонатора в [5] предполагалось, что в некотором сечении сопла дополнительно создается избыточная концентрация атомов О (например, с помощью электрического разряда). В [5] определены оптимальные параметры такого озонатора.

Реальный двумерный характер течения газа в сопле может существенно изменить некоторые характеристики такого оптимального озонатора. В связи с этим нами рассматривалась задача получения максимальных значений концентрации озона O_3 с учетом

двумерности газового потока. Задавалось параметрическое распределение давления p на оси сопла в виде

$$p_1(x/L, a_k) = p/p_0 = (1 + \beta)^{-1} [\exp(-\alpha(x/L)^{1+q}) + \beta] = p_1(x/L, \alpha, q, \beta),$$

где $\alpha > 0$, $q > 0$, $\beta > 0$ — параметры, определяющие распределение давления ($a_1 = \alpha$, $a_2 = q$, $a_3 = \beta$). Смысл введенных параметров следующий. При $x \rightarrow L$ и стремлении экспоненты к нулю параметр β определяет степень расширения потока на оси и $p_1 \rightarrow \beta/(1 + \beta)$, а параметр α — градиент давления (значит, и температуры) при переходе от дозвукового к сверхзвуковому режиму. Величина q является дополнительным параметром для варьирования давления между 0 и L .

Далее будем полагать, что на плоскости $l = l(\psi)$ в области G появляются дополнительные атомы O (например, в разряде) при следующих дополнительных ограничениях:

а) атомы O появляются в результате разложения молекул O_2 , так что на плоскости скачка $l = l(\psi)$ выполняется естественное условие $z(O)_1 + z(O_2)_1 = z(O)_2 + z(O_2)_2$, $z(O)_2 > z(O)_1$, где $z(O)_1$, $z(O_2)_1$, $z(O)_2$, $z(O_2)_2$ — массовые доли компонентов O и O_2 до и после скачка;

б) величина скачка $\Delta O = z(O)_2 - z(O)_1$ одинакова на всей плоскости $l(\psi)$;

в) тепло, затрачиваемое на скачке Δq , непосредственно идет только на разложение молекул O_2 , т. е. $\Delta q = \Delta c_1 h_1^0 + \Delta c_2 h_2^0 = \Delta c_1 h_1^0$ (c_1 , c_2 , h_1^0 , h_2^0 — мольно-массовые концентрации и энтальпии образования атомов O и молекул O_2 соответственно, по определению $h_2^0 = 0$). Предполагалось также, что колебательная температура молекулярного кислорода T_V на скачке не меняется. Значения газодинамических переменных находились из обычных соотношений на скачке (см., например, [6]). Нетрудно убедиться, что такой «кинетический» скачок при малых значениях ΔO является слабой поверхностью разрыва газодинамических переменных.

Определим плоскость $l(\psi)$ тремя параметрами:

$$l(\psi)/L = (x_*/L)(1 + \gamma_1 \psi + \gamma_2 \psi^2) = x'_*(1 + \gamma'_1 \psi + \gamma'_2 \psi^2).$$

Здесь $x'_* = x_*/L$; ψ' — нормированная функция тока: $\psi' = \psi/(\rho_0 u_0 L) = y_1/L$; $y_1 = y|_{x=0}$. Таким образом, определяющими параметрами оптимизации для молярной доли озона ξ_3 являются следующие:

$$T_0, p_0, \xi_i^0, \alpha, q, \beta, L, x'_*, \gamma'_1, \gamma'_2, \Delta O, d. \quad (4.1)$$

В нашем случае p_0 и L — самостоятельные параметры поиска, поскольку в системе учитываются существенные бимолекулярные и тримолекулярные реакции $O + O_3 \rightleftharpoons O_2 + O_2$, $O + O_2 + M \rightleftharpoons O_3 + M$, $O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$, а также VT-релаксация колебательной энергии кислорода $O_2(v) + M \rightarrow O_2 + M$ (M — любая из частиц).

Константы скоростей учитываемых реакций, представленные в обобщенной аррениусовской форме $K = AT^n \exp(-E/T)$ (A , n , E — параметры), а также точность приводимой рекомендации указаны в [5]. Колебательно-поступательная релаксация молекулярного кислорода изучена достаточно хорошо. Использованные нами данные времен VT-релаксации приведены в [7]. Расчеты показали, что в рассматриваемых условиях колебательная температура O_2 близка к поступательной. Это подтверждают и эксперименты по исследованию рекомбинации кислорода в соплах [8].

Оптимизация по всем параметрам с целью получения максимальных значений концентрации озона (в предположении двумерности газового потока) требует значительных

затрат времени на ЭВМ. В связи с этим рассматривалось решение задачи поиска по некоторой части из параметров (4.1), представляющих больший интерес с точки зрения двумерности газового потока. Предполагается, что в ресивере равновесный состав определяется для исходного чистого молекулярного кислорода O_2 при заданной температуре $T_0 = 1500$ К и давлении $p_0 = 20$ атм, а поиск оптимума осуществляется по параметрам

$$\alpha, q, \beta, L, x'_*, \gamma'_1, \gamma'_2, \quad (4.2)$$

где первые четыре параметра определяют параметрическую зависимость поля течения в сопле, а последние три — форму плоскости скачка концентрации молекул O . Значение скачка концентрации ΔO полагалось заданным и равным 0,1 %.

При поиске оптимума на параметры (4.2) были наложены ограничения $\alpha > 0$, $q \geq 0$, $0 < \beta \leq 1$, $0 < L < 20$, $0 < x'_* \leq 1$, $-50 \leq \gamma'_1/L \leq 50$, $-50 \leq \gamma'_2/L \leq 50$.

Поиск максимальных значений концентрации озона проводился по следующей схеме. Чтобы сократить ресурсы времени на ЭВМ и определить наилучшую начальную точку в пространстве параметров оптимизации (4.2), вначале осуществлялся поиск оптимума по модели, соответствующей одномерности газового потока на оси. В этом случае параметрами поиска являются $\alpha, q, \beta, L, x'_*$. Программа оптимизации представляла синтез случайного и детерминированного поиска. Случайный поиск применялся в начальной стадии поиска оптимума. В качестве детерминированного алгоритма использовался метод конфигураций, основы которого изложены в [9]. В результате поиска оптимума для одномерного газового потока были определены оптимальные параметры

$$\alpha = 25,97, \quad q = 0,25, \quad \beta = 0,0588, \quad L = 11,7 \text{ см}, \quad x'_* = 0,21, \quad (4.3)$$

которые обеспечивают максимальное значение молярной доли озона на выходе из сопла $\xi_3 = 0,10349$ %. Количество обращений к функционалу, необходимое для определения оптимального набора параметров (4.3), составляло 232. Полагая полученные значения в качестве начальной точки, далее осуществляли поиск оптимума по параметрам (4.2) в предположении двумерности газового потока. В качестве функционала взят интеграл от концентрации молекул озона на выходном сечении сопла:

$$F(A_i) = \xi'_3 = \frac{1}{\psi'_k} \int_0^{\psi'_k} \xi_3 d\psi'.$$

При этом рассматривали фиксированное конечное значение функции тока $\psi'_k = 1,56 \cdot 10^{-2}$ ($0 \leq \psi' \leq \psi'_k$). Поиск оптимума в данном случае дает $\alpha = 34,87$, $q = 0,28$, $\beta = 0,0542$, $L = 13,47$ см, $x'_* = 0,202$, $\gamma'_1 = 22,14$, $\gamma'_2 = -174,2$, $\xi'_3 = 0,1136$ %.

Необходимое количество обращений к функционалу $F(A_i)$ на этом этапе поиска составило 48, что намного меньше аналогичного показателя при определении параметров (4.3). Такая последовательность организации процедуры оптимизации позволяет значительно сократить общее время поиска на ЭВМ, поскольку время расчета на машине, необходимое для получения поля течения в сопле в предположении двумерности газового потока, примерно на 1,5–2 порядка больше времени определения поля для одномерного потока.

На рис. 1 приведен контур сверхзвукового газодинамического сопла, полученного в результате решения задачи оптимизации. По оси абсцисс отложена безразмерная длина x/L , а по оси ординат — y/y_* (y_* — высота сопла в минимальном сечении). Здесь показаны линии тока при разных значениях $\psi = \text{const}$, а также линии одинаковых значений

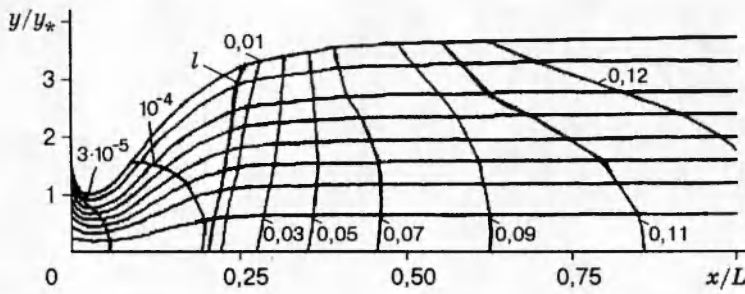


Рис. 1

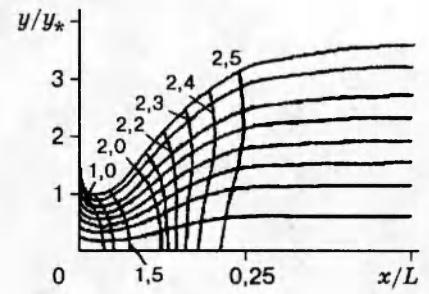


Рис. 2

молярной доли озона. Кривая, отмеченная буквой l , соответствует поверхности скачка концентрации атомарного кислорода $l(\psi)/L$. Максимальное значение угла наклона контура сверхзвуковой части сопла достигается в точке $x/L \approx 0,1$ и равно 18° . Видно, что вслед за быстрым расширением сопло должно иметь протяженный плоскопараллельный участок, и озон образуется в основном в этой части сопла. На рис. 2 представлена аналогичная картина одинаковых значений чисел Маха для первой половины того же оптимального сопла.

В процессе решения задачи поиска оптимума одновременно с оптимальной точкой можно определить топографическое расположение уровней постоянных значений исследуемого функционала (в нашем случае — молярной доли озона). Для этого выбирались и варьировались два разных параметра поиска: A_1 и A_2 (из числа оптимизируемых). Значения остальных параметров были фиксированы и полагались равными оптимальным значениям, соответствующим поиску по всей совокупности параметров. Далее в плоскости (A_1, A_2) находились линии одинаковых значений исследуемого функционала. Это позволило получить не только наглядное представление о найденном оптимуме, но и иметь количественные сведения о неоптимальных режимах вблизи оптимума. Такие сведения представляют интерес при постановке эксперимента и оценке «крутизны» изменения функционала в окрестности оптимума.

На рис. 3 приведена такая карта линий одинаковых значений концентрации озона по параметрам, характеризующим расположение плоскости поверхности скачка концентрации атомарного кислорода $l(\psi)$ в сопле. Варьировались x'_* и γ'_1 , определяющие плоскость скачка. За единицу здесь принято значение молярной доли озона ξ_3 в оптимальной точке. Для удобства интерпретации на рисунке линии уровня построены для величин x_* и $x_*\gamma_1\psi_k$. Видно, что в окрестности оптимума функционал имеет пологий характер, однако по мере удаления от оптимума значение концентрации озона сильно уменьшается.

Существующая в настоящее время неопределенность в константах скоростей учитываемых процессов может повлиять на форму оптимального сопла и максимальную концентрацию озона. В связи с этим вначале был проведен расчет (в одномерной постановке) с целью выяснения влияния вариации констант скоростей на величину концентрации озона для оптимального набора параметров (4.3). Для этого вариация константы скорости K_j проводилась в виде

$$K_j = m_j K_j^0 \quad \text{и} \quad K_j = 1/m_j \cdot K_j^0, \quad (4.4)$$

где m_j — константа; K_j^0 — рекомендуемая константа из [5]. Далее рассчитывалась концен-

Номер варианта	$m_j^{(1)}$	$m_j^{(2)}$	O_3	$O_3^{(0)}$
0	1	1	1	1
1	0,5	2	0,47	0,45
2	0,5	0,5	0,89	0,82
3	2	2	1,12	1,05
4	2	0,5	1,54	1,52

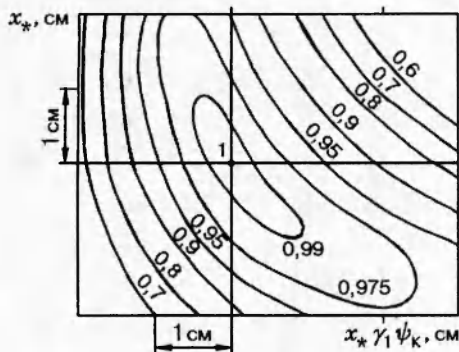


Рис. 3

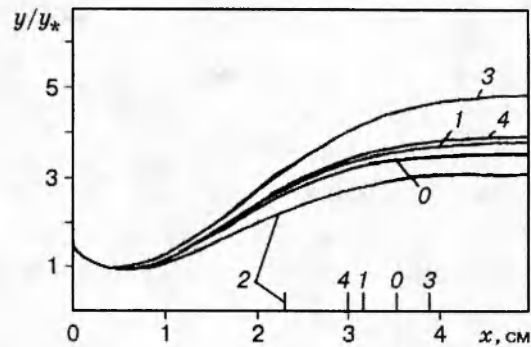


Рис. 4

трация озона (на выходе из сопла) при таком варьировании константы K_j . Выяснилось, что наибольшее влияние на изменение концентрации озона оказывают реакция образования озона $O + O_2 + (M = O_2) \rightarrow O_3 + M$ (+33 и -34,4% при $m_j = 2$ и $1/m_j = 1/2$) и реакция разложения озона $O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2$ (-26,2 и +21,6% при $m_j = 2$ и $1/m_j = 1/2$). Влияние констант скоростей других процессов при таком варьировании составило менее 2%, и, следовательно, указанные выше две реакции являются основными в наших условиях.

Согласно [5], возможный разброс констант этих процессов не превышает 150 ÷ 200%, и в связи с этим далее проводилось решение задачи оптимизации (в одномерной постановке) при максимальных отклонениях значений констант K_j от рекомендуемых K_j^0 . Основные результаты решения задачи приводятся в таблице и на рис. 4. В таблице $m_j^{(1)}$ соответствует множителю m_j в (4.4) для реакции $O + O_2 \rightarrow O_3$ ($M = O_2$), $m_j^{(2)}$ — реакции $O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2$, O_3 — оптимальной концентрации озона, нормированной на ее значение в (4.3), т. е. при $m_j \equiv 1$.

На рис. 4 приведены получающиеся при решении задачи поиска оптимальные контуры сверхзвуковых сопел (при вариации констант скоростей процессов). Здесь по оси абсцисс отложено расстояние x , а по оси ординат — безразмерная степень расширения потока y/y_* . Номера кривых отвечают номерам вариантов из таблицы, цифрой 0 обозначен основной контур при $m_j \equiv 1$. Вертикальные черточки над осью абсцисс соответствуют координате скачка x_* в сопле с тем же номером. На рисунке не указана плоскопараллельная часть сопла, которая составляет ~ 10 см при всех вариациях констант. Приведенные в таблице и на рис. 4 результаты показывают, что учет неопределенности в значениях констант скоростей может заметно повлиять на результаты решения задачи поиска газодинамического озонатора, и в связи с этим становится естественным проведение исследований по уточнению этих констант. С другой стороны, численные значения концентраций получающегося

озона не столь критичны к выбору формы сопла. Об этом свидетельствует таблица (значения $O_3^{(0)}$), где приведены данные концентрации озона при течении газа в исходном сопле, контур которого на рис. 4 выделен цифрой 0.

Таким образом, изложенная программа позволяет решать вариационные задачи газовой динамики с физико-химическими превращениями с учетом двумерности газового потока.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пирумов У. Г., Росляков Г. С. Течение газа в соплах. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1978.
2. Losev S. A., Makarov V. N., Pogosbekjan M. Ju., et al. Thermochemical nonequilibrium kinetic models in strong shock waves on air // 6th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, June 1994, Colorado Springs.
3. Лосев С. А. Газодинамические лазеры. М.: Наука, 1977.
4. 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.
5. Макаров В. Н., Шаталов О. П. Газодинамический генератор озона // Изв. АН СССР. МЖГ. 1994. № 6. С. 139–148.
6. Седов Л. И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1971.
7. Молчанов Ю. С., Старик А. М. Анализ кинетики колебательного энергообмена в продуктах сгорания углеводородов в воздухе и в закиси азота при расширении в сверхзвуковых соплах // Тр. ЦИАМ. 1987. № 1162.
8. Душин В. К., Забелинский И. Е., Шаталов О. П. Рекомбинация кислорода в сверхзвуковом охлаждающемся потоке // Изв. АН СССР. МЖГ. 1987. № 4. С. 160–165.
9. Уайлд Д. Дж. Методы поиска экстремума. М.: Наука, 1967.

*Поступила в редакцию 22/II 1995 г.,
в окончательном варианте — 28/VI 1995 г.*
