

3. Башкин А. С., Игошин В. И., Ораевский А. Н., Щеглов В. А. Химические лазеры. М.: Наука, 1982.
4. Кузнецов Н. М. К кинетике диссоциации многоатомных молекул при неравномерном распределении колебательной энергии. — ДАН СССР, 1972, т. 202, № 6.
5. Кузнецов Н. М. Вопросы теории мономолекулярного распада однокомпонентного газа и константа скорости диссоциации CO_2 при высоких температурах. — ПМТФ, 1972, № 3.
6. Никитин Е. Е., Осипов А. И. Колебательная релаксация в газах. М., 1977. (Итоги науки и техники/ВИНИТИ. Кинетика и катализ, т. 4.)

Поступила 1/1 1984 г.

УДК 533.6.011

ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОВЕСНОСТИ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ГАЗА НА ЕГО ДВИЖЕНИЕ

Б. А. Клумов, И. В. Немчинов

(Москва)

Рассмотрим газовое облако, в котором нарушено химическое равновесие, что можно осуществить, например, импульсом ионизирующего или диссоциирующего излучения. При этом удельная тепловая энергия e_T может быть намного меньше удельной химической энергии e_x , т. е. энергии, затраченной на разрыв химических связей, возбуждение уровней и ионизацию.

В процессе релаксации неравновесного состояния газа химическая энергия переходит в тепловую, и первоначально неподвижный газ начинает расширяться. Падение плотности при разлете вызывает падение скоростей химических реакций, и переход химической энергии в тепловую замедляется, что в свою очередь влияет на интенсивность разлета. В подобных явлениях газодинамические процессы и процессы химической кинетики тесно связаны друг с другом. Для их правильного описания необходимо совместное решение уравнений газовой динамики (ГД) и химической кинетики (ХК). При этом решение даже только одних лишь уравнений ХК вызывает значительные трудности, так как соответствующая система является «жесткой» [1]. В последнее время были разработаны достаточно эффективные методы решения таких систем [2, 3]. Однако для движущегося газа возникают дополнительные трудности, связанные с неоднородностью распределения плотности по пространству.

1. Выпишем систему уравнений, описывающую движение газа в отсутствие равновесия:

$$(1.1) \quad \frac{\partial x_j}{\partial t} = u_j, \quad \rho \frac{\partial u_j}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial x_j}, \quad \frac{\rho}{\rho_0} = \frac{\partial x_1 \partial x_2 \partial x_3}{\partial \xi_1 \partial \xi_2 \partial \xi_3}, \quad \frac{\partial e}{\partial t} + p \frac{\partial (1/\rho)}{\partial t} = 0;$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial n_i}{\partial t} = Q_i - \alpha_i n_i + n_i \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho, \quad \frac{\partial n_j^i}{\partial t} = -n_j^i \sum_Y \sum_k (R_{jk}^i)_Y + \\ + \sum_Y \sum_k n_k^i (R_{kj}^i)_Y;$$

$$(1.3) \quad e = e_T + e_x, \quad e_T = \sum C_{V_i} n_i T, \quad p = \sum n_i k T, \quad \rho = \sum n_i \mu_i, \quad n_i = \\ = \sum_j n_j^i, \quad e_x = \sum_i D_i (n_i - n_i^p) + \sum_i \sum_k \varepsilon_k^i (n_k^i - n_k^{ip}).$$

Здесь T — температура; t — время; x_j — эйлеровы координаты; ξ_i — лагранжевы координаты; u_j — компоненты скорости ($j = 1, 2, 3$); p — давление; ρ — плотность; C_{V_i} — средняя теплоемкость частиц сорта i в интервале температур до T ; D_i — потенциал диссоциации частиц сорта i ; n_i — концентрация частиц сорта i ; n_k^i — концентрация частиц i , находящихся в состоянии k с энергией ε_k^i ; n_i^p, n_k^{ip} — соответствующие равновесные концентрации; $(R_{jk}^i)_Y$ — вероятность перехода с уровня j на уровень k в результате процесса Y для i -й частицы; $Q_i, \alpha_i n_i$ — члены, определяющие рождение и исчезновение частиц сорта i ; μ_i — молекулярный вес i -й частицы. Общая система замыкается начальными и граничными усло-

виями, которые для случая разлета первоначально неподвижного газа в пустоту имеют вид

$$x_j|_{t=0} = \xi_j, u_j|_{t=0} = 0, T|_{t=0} = T_0(\xi_j), \\ n_i|_{t=0} = n_i^0(\xi_j), n_k^i|_{t=0} = n_k^{i0}(\xi_j), p(\xi_0^*) = 0,$$

где индексом * отмечены граничные точки; n_i^0, n_k^{i0} — начальные концентрации и заселенности уровней частиц сорта i .

При решении уравнений ХК для движущегося газа необходимо знать плотность $\rho(t, \xi_j)$. Сильно усложняет задачу и то, что уравнения ХК необходимо решать в большом числе точек пространства в соответствии с «газодинамическим» разбиением рассматриваемой области газа. Понятно, что в таком случае даже при применении эффективных методов решения «жестких» систем расчет всей задачи будет слишком трудоемким.

Предложим метод решения таких задач, который условно можно назвать методом «эффективного показателя адиабаты». Эффективный показатель адиабаты γ определяется по аналогии с равновесной термодинамикой:

$$(1.4) \quad \gamma = 1 + pv/e, v = 1/\rho.$$

Сущность метода заключается в расщеплении системы (1.1) — (1.3) по физическим факторам, которые считаются отдельно. В данном случае уравнения (1.1), (1.4), или уравнения ГД и система (1.2), (1.3), или уравнения ХК считаются отдельно. Связаны они посредством функций $\gamma(t, \xi_j)$ и $\rho(t, \xi_j)$. Зависимость $\rho(t, \xi_j)$ используется для счета уравнений ХК и получения зависимости $\gamma(t, \xi_j)$ по (1.4), а $\gamma(t, \xi_j)$ — для расчета уравнений ГД и определения функции $\rho(t, \xi_j)$, используемой в системе ХК. Таким образом, общая система разбивается на два блока, которые обмениваются сравнительно небольшим объемом информации в процессе расчета. Когда величина γ слабо зависит от лагранжевых координат ξ_j , нет необходимости считать ХК в каждой точке пространства, в которой находится плотность $\rho(t, \xi_j)$. Система ХК считается в избранных точках ξ_j . В этих же точках определяется зависимость $\gamma(t, \xi_j)$. В остальных точках значение $\gamma(t, \xi_j)$ определяется интерполяцией. Если значение $\gamma(t, \xi_j)$ в соседних точках ξ_j меняется мало, то интервал между ними увеличивается. В некоторых случаях, например при распространении по газу ударной волны, во фронте нарушается равновесие, и целесообразно проводить интерполяцию величины γ не по ξ_j при заданном значении t , а по определенным комбинациям $\omega_s(\xi_j, t)$, связанным с движением фронта ударной волны. В других случаях, например в задачах разлета, достаточно интерполировать по ξ_j , причем довольно очевидно, что число «опорных» точек ξ_j может быть невелико.

Иногда бывает удобно сразу определить эффективный показатель адиабаты $\gamma(t, \xi_j)$ на некотором значительном интервале времени, чтобы исключить обмен между блоками на каждом шаге по времени.

Для нахождения такой зависимости $\gamma(t, \xi_j)$ удобно пользоваться методом последовательных приближений. В качестве первого приближения можно взять зависимость $\gamma_1(t)$, полученную при счете уравнений ХК с заданным законом изменения плотности (например, соответствующим инерционной стадии разлета $\rho \sim t^{-3}$). Считая затем систему уравнений ГД с зависимостью $\gamma_1(t)$ и уточнив закон $\rho(t, \xi_j)$, получим второе приближение $\gamma_2(t, \xi_j)$ и т. д. Применение таких приемов, ускоряющих расчеты, требует предварительного анализа конкретных задач.

2. Методом «эффективного показателя адиабаты» была решена модельная задача о разлете в пустоту газового облака, в котором в момент $t = 0$ полностью диссоциирован кислород. Исходный состав соответствовал реальной атмосфере в диапазоне плотностей: $2 \cdot 10^{-2} - 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³, что, согласно [4], позволяет ограничиться реакциями, приведенными в таблице. Ионизация и колебательная релаксация не учитывались. Задача

№ п/п	Реакция	Константа	Энерговывод, эВ
1	$O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$	$K_1 = 6,6 \cdot 10^{-35} \exp(510/T)$	+1
2	$O + O + M \rightarrow O_2 + M$	$K_2 = 3,8 \cdot 10^{-30} T^{-1} \exp(-170/T)$	+5,1
3	$O_2 + O_2 \rightarrow O + O + O_2$	$K_3 = (18/T^{5/2}) \exp(-59300/T)$	-5,1
4	$O_2 + N_2 \rightarrow O + O + N_2$	$K_4 = (6 \cdot 10^{-6}/T) \exp(-59300/T)$	
5	$O_2 + O \rightarrow O + O + O$	$K_5 = (1,5 \cdot 10^{-4}/T) \exp(-59300/T)$	-3,3
6	$O + N_2 \rightarrow N + NO$	$K_6 = 1,16 \cdot 10^{-10} \exp(-37900/T)$	
7	$O + NO + M \rightarrow NO_2 + M$	$K_7 = 2,9 \cdot 10^{-33} \exp(941/T)$	+3,2
8	$O + NO \rightarrow NO_2 + hv$	$K_8 = 6,4 \cdot 10^{-17}$	~
9	$O + N + M \rightarrow NO + M$	$K_9 = 1,8 \cdot 10^{-311} / \sqrt{T}$	+6,5
10	$O + NO \rightarrow N + O_2$	$K_{10} = 2,5 \cdot 10^{-13} T \exp(-19500/T)$	-1,4
11	$NO + N_2 \rightarrow N_2 + O$	$K_{11} = 1,5 \cdot 10^{-12} \sqrt{T}$	+3,3
12	$NO + O_2 \rightarrow N + O + O_2$	$K_{12} = (6,6 \cdot 10^{-4} T^{3/2}) \exp(-75377/T)$	-6,5
13	$NO + N_2 \rightarrow N + O + N_2$	$K_{13} = K_{12}$	-6,5
14	$NO + O \rightarrow N + O + O$	$K_{14} = 20K_{12}$	-6,5
15	$NO + NO \rightarrow N + O + NO$	$K_{15} = 20K_{12}$	-6,5
16	$NO + N \rightarrow N + O + N$	$K_{16} = 20K_{12}$	-6,5
17	$N + O_2 \rightarrow NO + O$	$K_{17} = 1,1 \cdot 10^{-14} T \exp(-3150/T)$	+1,4
18	$NO + NO + O_2 \rightarrow NO_2 + NO_2$	$K_{18} = 9 \cdot 10^{-39} \exp(413/T)$	1,2
19	$NO + NO \rightarrow N_2 + O_2$	$K_{19} = (0,8 T^{5/2}) \exp(-42960/T)$	1,9
20	$NO + NO \rightarrow N_2O + O$	$K_{20} = 2,2 \cdot 10^{-12} \exp(-32100/T)$	
21	$N_2 + O_2 \rightarrow NO + NO$	$K_{21} = (15,1/T^{5/2}) \exp(-64570/T)$	-1,9
22	$NO_2 + O \rightarrow NO + O_2$	$K_{22} = 3,2 \cdot 10^{-11} \exp(-300/T)$	2
23	$NO_2 + O_2 \rightarrow NO + O_3$	$K_{23} = 2,8 \cdot 10^{-12} \exp(-23400/T)$	-2,2
24	$NO_2 + NO_2 \rightarrow NO + NO + O_2$	$K_{24} = 3,3 \cdot 10^{-12} \exp(-13540/T)$	1,3
25	$NO_2 + O + M \rightarrow NO_3 + M$	$K_{25} = 5 \cdot 10^{-31}$	
26	$O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2$	$K_{26} = 1,1 \cdot 10^{-11} \exp(-2150/T)$	4,1
27	$O_3 + M \rightarrow O + O_2 + M$	$K_{27} = 1,65 \cdot 10^{-9} \exp(-11400/T)$	-1
28	$O_3 + N \rightarrow NO + O_2$	$K_{28} = 3 \cdot 10^{-11} \exp(-1200/T)$	5,5
29	$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$	$K_{29} = 9,5 \cdot 10^{-13} \exp(-1200/T)$	2,2
30	$O_3 + NO_2 \rightarrow NO_3 + O_2$	$K_{30} = 9,8 \cdot 10^{-12} \exp(-3520/T)$	1,1

решалась в предположении сферической симметрии с однородными начальными данными. Система уравнений (1.1) — (1.3) в этом случае принимает вид

$$\frac{\partial r}{\partial t} = u, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = -r^2 \frac{\partial p}{\partial m}, \quad \frac{\partial}{\partial t} (\dot{r}/\rho) = \frac{\partial u}{\partial m}, \quad \frac{\partial e}{\partial t} + p \frac{\partial v}{\partial t} = 0,$$

$$e = e_T + e_x, \quad e_T = \frac{1}{\rho} \sum_i C_{V_i} n_i T, \quad e_x = \frac{1}{\rho} \sum_i D_i (n_i - n_i^p),$$

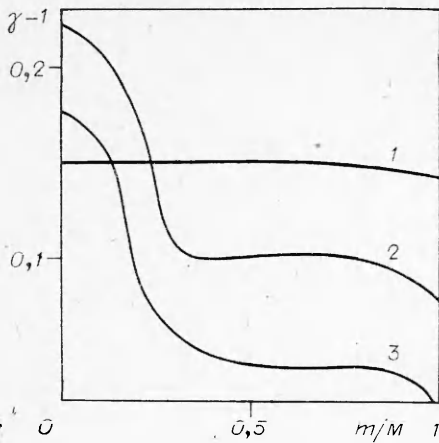
$$p = \sum_i n_i T, \quad \frac{\partial n_i}{\partial t} = Q_i - \alpha_i n_i + n_i \frac{\partial}{\partial t} \ln \rho,$$

где m — лагранжева массовая координата. Начальные и граничные условия:

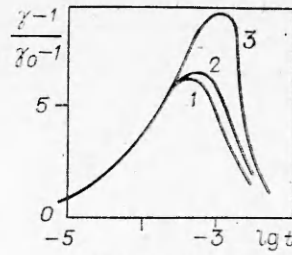
$$r^*|_{t=0} = R_0, \quad u|_{t=0} = 0, \quad T|_{t=0} = T_0, \quad n_i|_{t=0} = n_i^0, \quad p^* = 0.$$

Расчеты проводились для начального размера шара $R_0 = 1$ м и начальной температуры $T_0 = 200$ К при плотностях $2 \cdot 10^{-2} - 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³.

Проведем некоторые оценки. Пусть в кинетическую энергию переходит лишь начальная тепловая энергия газа, а энергия, затраченная на диссоциацию, оказывается неиспользованной. Тогда максимальная скорость разлета $v_m \approx 10$ м/с. Наоборот, если вся внутренняя энергия пере-



Фиг. 1



Фиг. 2

ходит в кинетическую, то $v_m \approx 10^3$ м/с. Таким образом, по значению v_m можно судить о степени равновесности в процессе разлета.

Анализ скоростей химических реакций позволяет сделать вывод о том, что при $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-3}; 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³ доминирующей является реакция рекомбинации в тройных столкновениях: $O + O + M^h \rightarrow O_2 + M$, где M — любая третья частица. По порядку величины характерное время рекомбинации равно

$$(2.1) \quad \tau_x \sim \frac{n_{O_2}^3}{K \rho^2 N_A^2}.$$

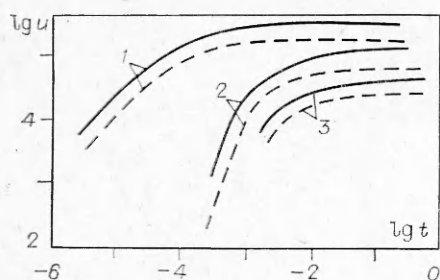
Здесь K — константа скорости рекомбинации. Для $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³ $\tau_x \sim 10$ с, для $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-2}$ кг/м³ $\tau_x \sim 3 \cdot 10^{-4}$ с. Следует учесть, что в этом случае соотношение (2.1) дает заниженное значение τ_x из-за отбрасывания эндотермических реакций. Характерное время разлета $\tau_p \sim R_0 / \sqrt{e_T}$. В нашем случае $\tau_p \sim 3 \cdot 10^{-3}$ с. Сравнивая характерные времена ХК и ГД, получаем, что облако с $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³ разлетается с закалкой степени диссоциации. При этом эффективный показатель адиабаты $\gamma \rightarrow 1$. Если $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-2}$ кг/м³, то $\tau_x \leq \tau_p$, а за $t \sim \tau_p$ химическая энергия переходит в тепловую, и начинается разлет. Эффективный показатель адиабаты γ в этом случае монотонно возрастает с течением времени и выходит на «плато». Если же осуществляется режим частичной закалки, то выхода на «плато» не происходит: величина γ достигает максимума и начинает падать. При $t \gg \tau_p$ $\gamma \rightarrow 1$.

Следует ожидать, что граничные точки ($m \approx M$) разлетаются с полной «закалкой», центральные точки ($m \approx 0$) разлетаются со значением γ , более близким к равновесному.

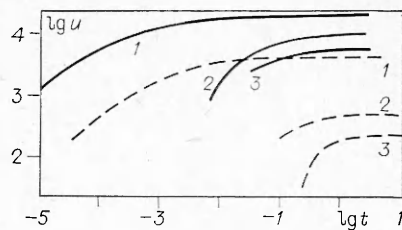
В промежуточных точках осуществляется режим «частичной закалки». С уменьшением ρ_0 эффекты, связанные с неравновесностью, усиливаются. Это проявляется в увеличении закалки, уменьшении энерговыделения и соответственно интенсивности разлета. В пределе $t \gg \tau_p$ шар расширяется в режиме инерционного разлета.

На фиг. 1 и 2 представлена расчетная зависимость $\gamma(t, m)$ для $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-2}$ кг/м³. На фиг. 1 кривые 1 — 3 соответствуют $t = 10^{-4}; 10^{-3}; 10^{-2}$ с. На фиг. 2 $\gamma_0 = \gamma(t=0)$, кривая 1 — $m = M$, 2 — $0,5 M$, 3 — $0,1 M$ (то же и на фиг. 3, 4), $M = (1/3)\rho_0 R_0^3$ — массовая лагранжева координата границы шара (его масса равна $4\pi M$). В данном примере расчета осуществляется режим «частичной» закалки для всех точек шара. Видно, что качественное поведение $\gamma(t, m)$, описанное выше, находится в согласии с расчетной зависимостью.

На фиг. 3 результаты расчета скорости u , найденной в процессе решения задачи с «точной» зависимостью $\gamma(t, m)$ (штриховые линии) сравниваются с расчетами при равновесном значении $\gamma = 1,4$ (сплошные линии) для случая $\rho_0 = 2 \cdot 10^{-2}$ кг/м³. Как и оценивалось выше, эффекты, связанные с неравновесностью, проявляются слабо.



Фиг. 3



Фиг. 4

На фиг. 4 показаны результаты аналогичного расчета, но для более низкой начальной плотности ($\rho_0 = 2 \cdot 10^{-4}$ кг/м³). В данном случае осуществляется режим, близкий к режиму «полной закалки». Видно, что время начала разлета при реальном значении $\gamma(t, m)$ увеличилось на порядок по сравнению с расчетом для $\gamma = 1,4$, а скорости разлета при $\gamma = 1,4$ в 5 раз выше, чем при реальной зависимости $\gamma(t, m)$.

В рассмотренных примерах метод оказался достаточно эффективным. Зависимость $\gamma(t, m)$ определялась методом последовательных приближений. Две итерации обеспечили точность $\sim 5\%$, что свидетельствует о быстрой сходимости. Расчет системы уравнений ХК велся в пяти точках по пространству, что было достаточно для достижения точности $\sim 5\%$ при интерполяциях величины γ . Представляет интерес распространить описанный метод для более широкого класса газодинамических задач с сильной неравновесностью.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность И. А. Девяттерикову, Е. А. Иванову и В. П. Кудрявцеву за полезные обсуждения в процессе выполнения данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
2. Гольберг С. М., Захаров А. Ю., Филиппов С. С. О некоторых численных методах решения жестких систем ОДУ. Препринт ИПМ АН СССР, 1976.
3. Gear C. W. Dfsub for solution of ordinary differential equations.— Comm. ACM, 1971, v. 14, p. 176.
4. Мак-Ивен М., Филипп А. Химия атмосферы. М.: Мир, 1978.

Поступила 28/II 1984 г.

УДК 532.584:537.24

ЭЛЕКТРОГИДРОДИНАМИЧЕСКОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ АЭРОЗОЛЬНЫХ ПОТОКОВ ПРИ ПОМОЩИ КОРОННОГО РАЗРЯДА

Н. Л. Васильева, Л. Т. Черный

(Москва)

В [1] исследована зарядка дисперсных частиц аэрозоля при движении последнего через область одномерного униполярного коронного разряда с электрическим полем, направленным вдоль аэрозольного потока. При этом учитывалось влияние движения газа на характеристики коронного разряда, что существенно при скоростях аэрозоля $u \geq bE$, где E — напряженность электрического поля, b — подвижность ионов. В данной работе на основании полученных в [1] результатов изучаются макроскопические электрогидродинамические методы расчета средних параметров высокоскоростных аэрозольных потоков в одномерном коронном разряде, не требующие проведения сложных микроскопических измерений.

1. Рассмотрим стационарное течение аэрозоля, состоящего из газа и жидких дисперсных частиц, между двумя плоскими круглыми сетками-электродами, расположенными перпендикулярно аэрозольному потоку.