

ЛИТЕРАТУРА

1. Левин В. А., Пилюгин Н. Н. Оптимальные аэродинамические формы по радиационному теплообмену // Актуальные проблемы механики.— М.: Изд-во МГУ, 1984.
2. Пилюгин Н. Н., Тирский Г. А. Основы динамики излучающего газа.— М.: Изд-во МГУ, 1979.
3. Кочанов В. Г., Левин В. А., Пилюгин Н. Н. Влияние формы тела на лучистый теплообмен в водородогелиевой атмосфере // Аннотации докл. VII Всесоюз. конф. по тепломассообмену.— Минск, 1984.
4. Биберман Л. М., Бронин С. Я. и др. Влияние газообразных продуктов разрушения теплозащитного покрытия на теплообмен в окрестности критической точки затупленного тела // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1978.— № 3.
5. Кочанов В. Г. Влияние формы тела на аэродинамический нагрев при движении с большими сверхзвуковыми скоростями: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Томск, 1985.
6. Гершбейн Э. А., Суходольская Э. Я. и др. О движении тел в атмосфере Юпитера с учетом изменения их массы и формы под действием аэродинамического нагрева // Космич. исслед.— 1978.— Т. 16, вып. 3.
7. Мирский В. П. Течение вязкого излучающего газа около затупленного тела при интенсивном испарении: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— М., 1979.
8. Гершбейн Э. А., Пилюгин Н. Н., Тирский Г. А. Гиперзвуковое обтекание затупленных тел произвольной формы вязким излучающим газом при наличии сильного вдува инородных газов // Докл. на XXIV Междунар. астронавтическом конгр.— Баку, 1973.
9. Гершбейн Э. А. Теория гиперзвукового вязкого ударного слоя при больших числах Рейнольдса и при сильном вдуве инородных газов // ПММ.— 1974.— Т. 38, № 6.
10. Деев А. А., Левин В. А., Пилюгин Н. Н. Форма тонкого тела с минимальным радиационным тепловым потоком к его поверхности при различных изопериметрических условиях // Аэродинамика гиперзвуковых течений при наличии вдува/Под. ред. Г. А. Тирского.— М.: Изд-во МГУ, 1979.
11. Миеле А. Теория оптимальных аэродинамических форм.— М.: Мир, 1969.
12. Пшеничный Б. П., Редковский Н. Н. Некоторые методы безусловной минимизации // ЖВММФ.— 1979.— Т. 19, № 5.
13. Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач.— М.: Наука, 1980.

Поступила 29/XII 1987 г.

УДК 541.24 : 532.5 : 621.372.8

ТЕЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ СО СПОНТАННОЙ КОНДЕНСАЦИЕЙ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ МАХА

В. Н. Васильев, А. Н. Воробьев, Г. Н. Дульнев,
С. Э. Хоружников
(Ленинград)

Медленные течения многокомпонентных химически реагирующих газовых смесей со спонтанной конденсацией продуктов реакций являются основой парофазных методов осаждения, нашедших широкое применение в промышленности (например, [1—3]). В [4] предложен метод получения уравнений для существенно дозвуковых потоков неравновесных газовых смесей при наличии произвольных конечных изменений плотности, идеи которого использованы в [5] для исследования течений с равновесной конденсацией продуктов реакций.

В настоящей работе проведено обобщение модели [5] и учтена кинетика конденсации для определения концентрации частиц конденсата и их диаметра, а также обсуждаются постановка задачи о моделировании MCVD-метода получения заготовок волоконно-оптических световодов, численный метод ее решения и результаты исследования особенностей газодинамики и массообмена.

1. Основная система уравнений динамики многокомпонентной двухфазной смеси, моделирующая методы химического парофазного осаждения, записывается в односкоростном и однотемпературном приближении, которое обосновано малыми размерами частиц конденсата ($\sim 5 \cdot 10^{-8}$ м). Дальнейшее упрощение проводится по двум малым параметрам, характерным для условий осаждения (см. [1—3]): числу Маха (характерная среднемаховая скорость смеси ≤ 1 м/с) и объемной доле конденсата.

Тогда эту систему можно записать в следующем безразмерном виде:

$$(1.1) \quad \rho_c \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \tilde{p} + \frac{1}{\text{Re}} \left[2\nabla \cdot (\mu \mathbf{S}) - \frac{2}{3} \nabla (\mu \nabla \cdot \mathbf{v}) \right] + \frac{\rho_c - 1}{\text{Fr}} \mathbf{j};$$

$$(1.2) \quad \rho_c \frac{dH}{dt} = \frac{1}{\text{Re Pr}} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \frac{1}{\text{Sc Re}} \sum_{i=1}^N \nabla \cdot (\rho Y_i h_i \mathbf{V}_i);$$

$$(1.3) \quad \rho \frac{dY_i}{dt} = W_i^x - W_i^k - \frac{1}{\text{Sc Re}} \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) + Y_i W^k, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

$$(1.4) \quad \frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_c \mathbf{v}) = 0;$$

$$(1.5) \quad \frac{\partial \rho_j^k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_j^k \mathbf{v}) = W_j^k, \quad j = 1, \dots, m;$$

$$(1.6) \quad \rho T = M_r, \quad \rho_c = \rho + \sum_{j=1}^m \rho_j^k;$$

$$(1.7) \quad \frac{dX_n}{dt} = I_0 r_{\text{кр}}^n + n B_* \dot{r}_c X_{n-1}, \quad n = 0, 1, 2;$$

$$(1.8) \quad W_j^k = D_* (B_* \dot{r}_j X_2 + (1/3) r_{\text{кр}}^3 I_0 \delta_{1j}), \quad W^k = \sum_{j=1}^m W_j^k.$$

Здесь t — время; ρ_c , \mathbf{v} , H , T , \mathbf{S} , μ , λ , c_p — плотность, вектор скорости, удельная энтальпия, температура, тензор скоростей деформации, вязкость, теплопроводность, удельная теплоемкость при постоянном давлении смеси; Y_i , h_i , \mathbf{V}_i , M_i , W_i^x — массовая доля, энтальпия, скорость диффузии, молекулярный вес, скорость химических реакций для i -го газообразного компонента; \tilde{p} — избыточное давление; M_r — молекулярный вес смеси газообразных компонентов; ρ_j^k , W_j^k — плотность и источник массы j -го компонента в конденсированной фазе; m — количество конденсирующихся компонентов; Re , Fr , Pr , Sc — числа Рейнольдса, Фруда, Прандтля и Шмидта; X_n — момент n -го порядка от функции распределения частиц конденсата по размерам; $r_{\text{кр}}$ и I_0 — радиус критического кластера и скорость их образования в единице объема; δ_{1j} — символ Кронекера; \dot{r}_j и \dot{r}_c — скорость роста частиц за счет конденсации j -го компонента и суммарная скорость роста частиц; B_* , D_* — безразмерные параметры, характеризующие процессы образования кластеров критического размера и макроскопическую конденсацию.

В уравнениях (1.7) и (1.8) $r_{\text{кр}}$ и I_0 вычисляются по соотношениям классической теории нуклеации Френкеля — Зельдовича [6, 7], а величины, характеризующие массообмен между фазами (\dot{r}_j и \dot{r}_c) — по формулам гомогенно-гетерогенной конденсации для свободномолекулярного режима обтекания частиц [8].

Моменты n -го порядка от функции распределения частиц по размерам $f(t, \mathbf{x}, r)$ определяются равенством

$$X_n = \int_{r_{\text{кр}}}^{\infty} r^n f(t, \mathbf{x}, r) dr, \quad n = 0, 1, 2,$$

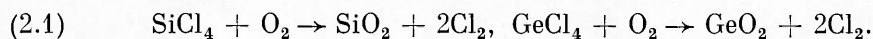
из которого следует их физический смысл: $X_0 = N_p$ — концентрация частиц конденсата, $X_1 = \langle r \rangle N_p$, $X_2 = \langle r^2 \rangle N_p$, где $\langle r \rangle$ и $\langle r^2 \rangle$ — средние значения радиуса и квадрата радиуса частиц.

2. Постановка задачи для MCVD-метода. Этот метод получил наибольшее распространение в силу своей относительной простоты. Кратко рассмотрим его основные особенности.

Исходная смесь хлоридов кремния и германия в избытке кислорода (характерные значения их массовых долей $\sim 0,2$; $0,1$ и $0,7$) при атмосфер-

ном давлении и температуре $T_0 \approx 300$ К подается во вращающуюся вокруг своей оси ($\omega \sim 5$ рад/с) опорную трубку из плавленного кварца длиной ~ 1 м и диаметром $d = 2 \cdot 10^{-2}$ м со среднерасходной скоростью $u_0 \leq 0,1$ м/с. Иницирование химических реакций обеспечивается подводом энергии от внешней перемещающейся кислородно-водородной горелки (скорость $\sim 5 \cdot 10^{-3}$ м/с и совпадает по направлению с u_0), создающей область значительных перегревов конечной протяженности (максимальная температура стенки трубки ~ 1900 К).

При локальной температуре исходной газовой смеси выше 1200 К в ней протекают реакции окисления хлоридов:



Оксиды кремния и германия находятся в пересыщенном состоянии и конденсируются в объеме с образованием высокодисперсных частиц. Их взаимодействие с несущим газом приводит к частичному осаждению на внутреннюю поверхность опорной трубки вниз по потоку от обогреваемой зоны и формированию пористого слоя толщиной $\sim 10^{-5}$ м. Повышение температуры в этом слое, обусловленное перемещением внешней горелки, приводит к спеканию и остекловыванию частиц. Изменяя расход легирующей добавки (GeCl_4) в каждом цикле перемещения горелки, можно добиться необходимого распределения показателя преломления в поперечном сечении будущей заготовки. Обычно наносится от 10 до 100 таких слоев в зависимости от типа изготавливаемого волокна.

Необходимая в дальнейшем заготовка в виде сплошного прозрачного цилиндра получается в процессе коллапса полого цилиндра за счет сил поверхностного натяжения при его разогреве до температуры ≥ 2000 К.

Невысокая эффективность осаждения и малая производительность метода стимулировали работы по его моделированию и поиску путей оптимизации. Однако в опубликованных работах исследуются либо отдельные фрагменты процесса [9, 10], либо вводятся необоснованные упрощающие предположения [11]: стационарность процесса, приближение узкого канала, отсутствие гравитационных сил и вращения опорной трубки, равновесность химических реакций и конденсации. С другой стороны, представленная в п. 1 система уравнений позволяет провести всестороннее исследование MCVF-метода.

С этой целью уравнения (1.4)–(1.8) записываются в цилиндрической системе координат и дополняются следующими граничными условиями: а) на входе в опорную трубку задается параболический профиль скорости для смеси заданного состава, имеющей безразмерную температуру, равную 1; б) на выходе ставятся мягкие граничные условия для всех неизвестных; в) на оси трубки выполняется условие симметрии для всех неизвестных; г) на внутренней поверхности опорной трубки:

для проекций вектора скорости

$$v_z = 0, \quad v_r = 0, \quad v_\varphi = \text{Re}_\omega / \text{Re},$$

для температуры

$$\lambda \partial T / \partial r = -K(t, z) [T_w - T_0(t, z)],$$

для массовой доли газообразных компонентов

$$\partial Y_i / \partial r = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

для конденсированной фазы поток на стенку определяется скоростью термофореза v_T :

$$J_w^k = \rho^k v_T.$$

Здесь $\text{Re}_\omega = \omega d^2 / (4\nu)$ — число Рейнольдса, вычисленное по угловой скорости вращения; T_w — температура внутренней поверхности; T_0 — температура внешней поверхности трубки, распределение которой по продольной координате берется из эксперимента, а зависимость от времени определяется перемещением горелки; $K(t, z) = 2\lambda_\varphi / [\lambda_0 \ln(1 + h/d)]$ —

термическая проводимость стенки трубки толщиной h ; λ_* — эффективная теплопроводность кварца с учетом лучистой составляющей.

Анализ кинетики суммарных химических реакций окисления хлоридов (2.1) показывает [12], что их с достаточной степенью точности можно моделировать кинетическими уравнениями первого порядка. Тогда скорость реакции для i -го компонента может быть вычислена из соотношения

$$W_i^x = \sum_{r=1}^{N_r} \frac{1}{\text{Dam}_r} \nu_{ir} \frac{M_i}{M_r} Y_r \frac{k_r^0(T)}{k_r^0(T_r^*)} \exp \left\{ -\frac{E_{ar}}{T_0 R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r^*} \right) \right\},$$

где Dam_r , k_r^0 , T_r^* , E_{ar} — число Дамкеллера, предэкспоненциальный множитель, критическая температура, энергия активации для r -й реакции; ν_{ir} — стехиометрический коэффициент i -го компонента в r -й реакции; k_r^0 и E_{ar} находятся при обработке экспериментальных данных [12].

Сравнение численных значений W_i^x при различных температурах позволяет сделать предположение о том, что кластеры критического размера при спонтанной конденсации продуктов реакций образуются за счет объединения молекул SiO_2 , так как скорость реакции окисления хлорида кремния имеет наибольшее значение. В связи с этим радиус зародышей и скорость их образования в единице объема вычисляются через параметры оксида кремния.

3. Численный метод. Численный метод решения поставленной задачи основан на расщеплении по физическим процессам. Обозначим через A_1 оператор, описывающий эволюцию газа при «замороженных» реакциях и конденсации, через A_2 — оператор, соответствующий химическим превращениям и фазовому переходу в отсутствие конвективного и молекулярного переноса. Тогда полный шаг интегрирования по времени можно представить в виде

$$A(2\Delta t) = A_1(\Delta t)A_2(\Delta t)A_2(\Delta t)A_1(\Delta t)$$

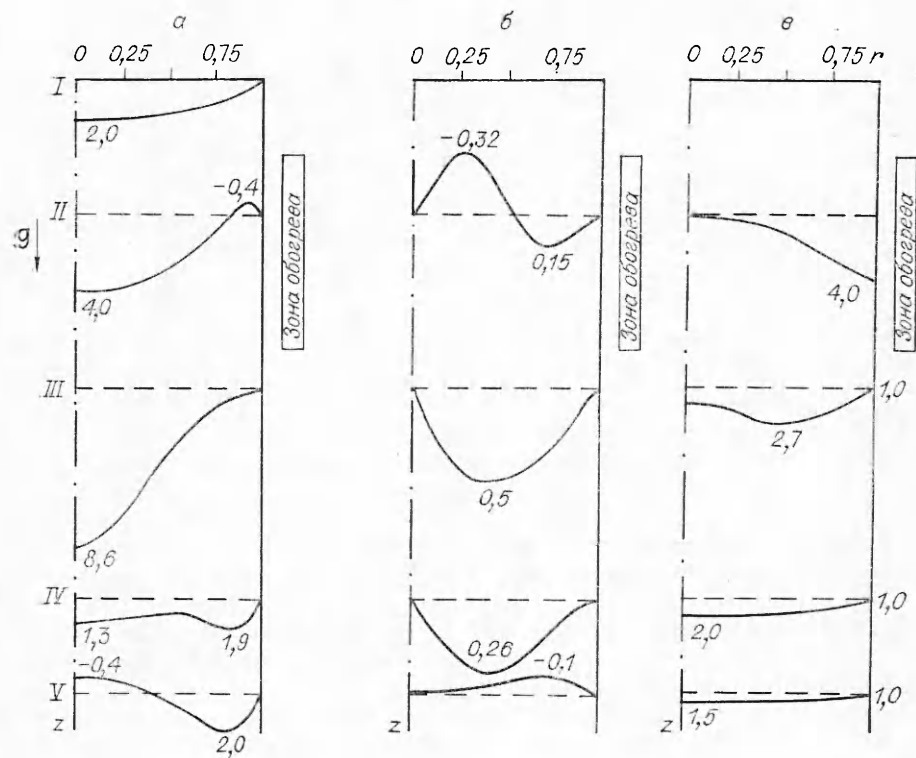
(Δt — шаг по времени).

Оператор A_1 есть модификация Чорина-Хёрта известного MAC-метода [13] и содержит три этапа. На первом этапе с использованием явной схемы вычисляются проекции скорости по заданному полю давления, на втором строится итерационный процесс, в котором корректируются найденные значения скоростей и давления до тех пор, пока уравнение неразрывности (1.4) не будет выполнено с заданной точностью. Затем по явной схеме решаются уравнения (1.2), (1.3), (1.5) и (1.7) при «замороженных» реакциях и конденсации.

Рассмотрим оператор A_2 . На этом шаге по неявной схеме совместно решаются уравнения для энтальпии смеси, массовых долей компонентов в газовой и конденсированной фазах, а также моментов от функции распределения частиц по размерам при «замороженных» конвективном и молекулярном переносах. Первое из них не содержит источника, но тем не менее включается в систему для учета изменения температуры, связанного с процессами химического реагирования и конденсации. Для решения нелинейных конечно-разностных уравнений строится итерационный процесс, основанный на линеаризации по Ньютону.

В задачах, в которых не требуется детальное описание процессов с характерными временами меньше характерного газодинамического времени, естественно выбирать шаг интегрирования порядка последнего (из условия устойчивости оператора A_1). При этом изменения температуры и массовых долей на одном временном шаге могут быть весьма значительными. Используемый метод решения состоит в ограничении приращений неизвестных в процессе итераций с учетом физической области их изменения [14].

4. Результаты расчетов. Расчеты проводились при различных ориентации опорной трубки и Re и Fr , которые в данном случае не являются критериями подобия, а определяются составом и расходом смеси на входе.



Р и с. 1

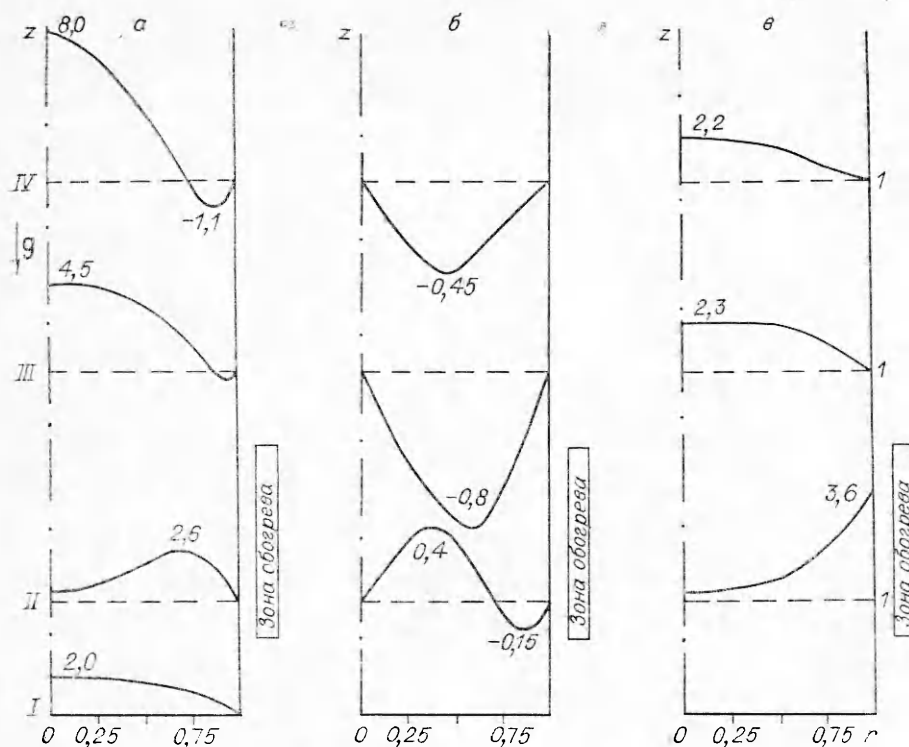
Отметим, что при горизонтальном расположении опорной трубки действие силы Архимеда приводит к трехмерному характеру течения. В связи с этим были выполнены качественные расчеты в плоском приближении для получения области значений Re и Fr , при которых естественная конвекция существенно влияет на картину течения.

Анализ результатов расчетов показывает, что при $Re < 150$ и $Fr < 0,1$ в горизонтальном канале реализуется смешанно-конвективное течение, в области значительных перепадов поперечные скорости достигают $\sim 15-20\%$ от максимальной продольной скорости, на входе и выходе из зоны обогрева соответственно у верхней и нижней стенок возникают области рециркуляционного течения (при $Re \sim 40$, $Fr \sim 0,01$). Если же условия на входе таковы, что $Re > 150$ и $Fr > 0,1$, то влиянием силы Архимеда на динамику потока можно пренебречь, а течение считать осесимметричным.

При вертикальном расположении опорной трубки структура осесимметричного потока при прочих равных условиях определяется направлением прокачивания газовой смеси. Так, рис. 1 иллюстрирует распределение продольной (а) и радиальной (б) составляющих вектора скорости, а также температуры смеси (в) в различных сечениях при опускном течении и $Re = 40$, $Fr = 0,01$.

Деформация профиля продольной скорости от параболического в сечении I объясняется действием силы Архимеда и ускорением потока за счет энергии, подведенной в зоне нагрева. Следует обратить внимание на значительные радиальные скорости в сечениях II и III, а также на формирование двух областей рециркуляции: на входе в зону обогрева у поверхности стенки и ниже этой зоны по потоку в центральной части трубы (сечения II и V). После сечения IV радиальная составляющая вектора скорости меняет знак.

При восходящем течении распределение основных газодинамических параметров потока представлено на рис. 2 при тех же значениях Re и Fr . В этом случае сила Архимеда приводит к дополнительному ускорению



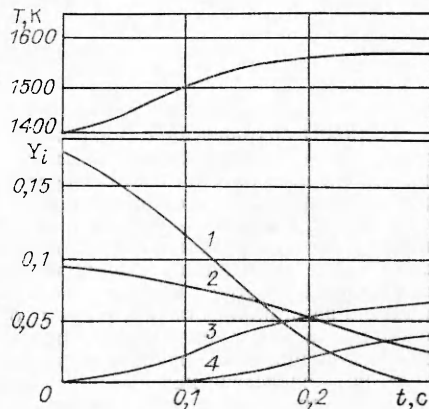
Р и с. 2

прогретых объемов смеси (рис. 2, а, сечения II—IV). Отметим, что радиальная скорость в сечениях III и IV, расположенных вниз по потоку от зоны обогрева, направлена к оси канала. Это обстоятельство делает схему, основанную на восходящем течении смеси, неперспективной для MCVD-метода получения заготовок.

Таким образом, внутри опорной трубки реализуется достаточно сложный режим течения (при определенных параметрах — смешанно-конвективный), на фоне которого протекают химические превращения с конденсацией продуктов реакций в объеме.

Химические реакции являются эндотермическими, а при фазовом переходе теплота выделяется, причем суммарный эффект положительный. Выполненные расчеты показывают, что температура смеси за счет этих процессов возрастает в среднем на 8—12 %. Наглядно этот факт можно проиллюстрировать на примере пространственно однородной задачи. Так, на рис. 3 представлены изменения температуры в системе с течением времени от начального значения $T = 1400$ К, а также массовых долей хлоридов кремния и германия и их оксидов в конденсированной фазе (линии 1—4 отвечают SiCl_4 , GeCl_4 , SiO_2 , GeO_2). Здесь отражен неравновесный характер превращений в системе, поскольку масштаб газодинамического времени равен $d/u_0 = 0,2$ с.

Исследование осажденного порошка на электронном микроскопе показало, что частицы конденсата имеют форму, близкую к сферической, а их диаметры распределены в основном в интервале от 10^{-8} до $9 \cdot 10^{-8}$ с макси-



Р и с. 3

мумом при $d_p \sim 5 \cdot 10^{-8}$ м. Сравнение с этим распределением расчетных значений диаметров частиц позволило аналогично [7] найти зависимость от температуры эмпирического параметра β , входящего в соотношение для скорости образования кластеров критического размера ($\beta = -5,75 + 0,005T$) и согласующего в количественном отношении расчет и эксперимент.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макчесни Дж. Б., О'Коннор П. Б., Пресби Г. М. Новый метод изготовления оптических волокон с плавным изменением показателя преломления и низкими потерями // ТИИЭР.— 1974.— Т. 62, № 9.
2. Идзива Т., Инагаки Н. Материалы и процессы для изготовления заготовок оптического волокна методом парофазного осевого осаждения // ТИИЭР.— 1980.— Т. 68, № 10.
3. Шульц П. К. Изготовление оптических волокон методом внешнего парофазного осаждения // Там же.
4. Кузнецов А. Е., Нехамкина О. А., Стрелец М. Х. Расчет стационарных дозвуковых течений химически неравновесных газовых смесей в каналах переменного сечения при наличии произвольных конечных изменений плотности // ТВТ.— 1984.— Т. 22, № 6.
5. Хоружников С. Э. Математическая модель MCVD-метода // Энергоперенос в конвективных потоках.— Минск: ИТМО АН БССР, 1985.
6. Стасенко А. Л. Модели дисперсных сред // Модели механики сплошных сред.— Новосибирск, 1983.
7. Горбунов В. Н., Пирумов У. Г., Рыжов Ю. А. Неравновесная конденсация в высокоскоростных потоках газа.— М.: Машиностроение, 1984.
8. Чирихин А. В. Численное исследование неравновесной гетерогенно-гомогенной конденсации в сверхзвуковых соплах // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1977.— № 12.
9. Колпащиков В. Л., Кривошеев Ю. К., Шнип А. И. Математическая модель технологического процесса формирования заготовок для оптического волокна.— Минск, 1983.— (Препр./ИТМО АН БССР; № 9).
10. Walker K. L., Homsy G. M., Geyling F. T. Thermophoretic deposition of small particles in laminar tube flow // J. Colloid Interface Sci.— 1979.— V. 69, N 1.
11. Walker K. L., Geyling F. T., Nagel S. R. Thermophoretic deposition of small particles in the modified chemical vapour deposition (MCVD) process // J. Amer. Ceram. Soc.— 1980.— V. 63, N 9—10.
12. French W. J., Pace L. J., Foermayer V. A. Chemical kinetics of the reaction of SiCl_4 , SiBr_4 , GeCl_4 , POCl_3 and BCl_3 with oxygen // J. Phys. Chem.— 1978.— V. 82, N 20.
13. Жмакин А. И., Макаров Ю. Н. Численное моделирование интенсивного теплового выделения в медленном потоке вязкого газа // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1985.— № 6.
14. Головизнин В. П., Жмакин А. И., Фурсенко А. А. Об одном численном методе исследования разрывных течений релаксирующих смесей // ДАН СССР.— 1982.— Т. 264, № 6.

Поступила 23/XI 1987 г.

УДК 532.542 : 536.73

О СВЯЗИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В ЗОНАХ ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ПОТОК

Ю. А. Дубравин

(Пермь)

Законы сохранения гидродинамики в интегральной форме в общем случае внутренних течений при характерных для квазиподномерных приближений допущениях приводят к незамкнутой системе уравнений. В различных приложениях решение этих уравнений традиционно осуществляется с привлечением дополнительных и часто противоречивых гипотез [1—4] или экспериментальных данных [5]. В [2, 6], где рассматривается течение идеального газа в каналах с уступами, отмечается взаимосвязь давления на уступе канала и скачка энтропии. Здесь для замыкания уравнений гидродинамики предлагается гипотеза о независимости термодинамической функции — коэффициента восстановления давления σ_p от скачка сечения канала. Подобная зависимость может проявляться лишь неявно при учете диссипативных эффектов, возникающих в зонах смещения при различного рода локальных воздействиях на поток. Названная гипотеза — следствие качественного анализа первого и второго начал термодинамики и в свою очередь позволяет построить дополнительное уравнение, замыкающее систему уравнений гидродинамики.