

## ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫЙ ЛАМИНАРНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ В ДИССОЦИИРОВАННОМ ВОЗДУХЕ

В. Г. ГРОМОВ

(Москва)

Для решения уравнений химически неравновесного пограничного слоя применена разностная схема, позволяющая проводить расчеты без изменения параметров сетки во всем диапазоне от равновесного до замороженного режима течения. Приведены результаты расчета пограничного слоя в смеси N, O, NO, O<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> с учетом шести реакций в газовой фазе.

**§ 1. Основные уравнения.** Рассматривается ламинарный пограничный слой на осесимметричном затупленном теле в смеси N (1), O (2), NO (3), O<sub>2</sub> (4), N<sub>2</sub> (5) с учетом неравновесных гомогенных химических реакций. Предполагается, что внутренние степени свободы компонент смеси возбуждены равновесно. Для получения решения используется система уравнений пограничного слоя в безразмерной форме

$$\frac{1}{r(x)} \frac{\partial}{\partial x} r \rho u_e w + \frac{\partial V}{\partial \zeta} = 0 \quad (1.1)$$

$$u_e w \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{V}{\varphi} \frac{\partial w}{\partial \zeta} = \frac{1}{\varphi^2} \left( \frac{\partial \rho \mu}{\partial \zeta} \frac{\partial w}{\partial \zeta} + \rho \mu \frac{\partial^2 w}{\partial \zeta^2} \right) + u_{ex} \left( \frac{\rho_e}{\rho} - w^2 \right) \quad (1.2)$$

$$u_e w \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{V}{\varphi} \frac{\partial c_i}{\partial \zeta} = - \frac{1}{S_\infty} \frac{1}{\varphi} \frac{\partial}{\partial \zeta} K_i + \frac{\omega_i}{\rho} \quad (i=1, 2, 3) \quad (1.3)$$

$$u_e w \frac{\partial c_0}{\partial x} + \frac{V}{\varphi} \frac{\partial c_0}{\partial \zeta} = - \frac{1}{S_\infty} \frac{1}{\varphi} \frac{\partial}{\partial \zeta} K_0 \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} u_e w \left[ \langle c_p \rangle \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{i=1}^4 (h_i - h_5) \frac{\partial c_i}{\partial x} \right] + \frac{V}{\varphi} \left[ \langle c_p \rangle \frac{\partial T}{\partial \zeta} + \sum_{i=1}^4 (h_i - h_5) \frac{\partial c_i}{\partial \zeta} \right] = \\ = \frac{1}{P_\infty} \frac{1}{\varphi^2} \left[ \frac{\partial \rho \lambda}{\partial \zeta} \frac{\partial T}{\partial \zeta} + \rho \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial \zeta^2} \right] - \frac{1}{S_\infty} \frac{1}{\varphi} \sum_{i=1}^4 (h_i - h_5) \frac{\partial}{\partial \zeta} K_i - \\ - \frac{1}{S_\infty} \frac{1}{\varphi} \frac{\partial T}{\partial \zeta} \sum_{i=1}^4 (c_{pi} - c_{p5}) K_i + [M_\infty (\gamma_\infty - 1) u_e^2 \left[ -w u_{ex} + \frac{\rho \mu}{\varphi^2} \left( \frac{\partial w}{\partial \zeta} \right)^2 \right]] \quad (1.5) \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^5 c_i = 1, \quad p = \frac{\rho T}{m}, \quad \zeta = \frac{1}{\varphi(x)} \int_0^y \rho dy, \quad w = \frac{u}{u_e}$$

$$V = \rho v + u \frac{\partial}{\partial x} \int_0^y \rho dy, \quad \langle c_p \rangle = \sum_{i=1}^5 c_{pi} c_i$$

$$m = \left[ \sum \frac{c_i}{m_i} \right]^{-1}, \quad c_0 = c_2 + \frac{m_2}{m_3} c_3 + c_4$$

$$K_0 = K_2 + \frac{m_2}{m_3} K_3 + K_4, \quad K_i = - \frac{1}{\varphi} \sum_{j=1}^4 \rho D_{ij} \frac{\partial c_j}{\partial \zeta}, \quad u_{ex} = \frac{du_e}{dx}$$

Здесь  $x$  и  $y$  — координаты, направленные вдоль поверхности и по нормали к ней,  $u$  и  $v$  — соответствующие компоненты вектора скорости,  $c_i$  — весовая концентрация  $i$ -й компоненты смеси,  $T$  — температура,  $\rho$  — плотность,  $p$  — давление,  $\mu$  и  $\lambda$  — коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси,  $c_{pi}$ ,  $h_i$  и  $m_i$  — удельная теплоемкость, удельная энтальпия и молекулярный вес  $i$ -й компоненты,  $\omega_i$  — массовая скорость образования  $i$ -й компоненты в результате химических реакций,  $K_i$  — массовый диффузионный поток  $i$ -й компоненты по нормали к поверхности,  $D_{ij}$  — обобщенный коэффициент диффузии,  $r(x)$  — расстояние от точки поверхности с координатой  $x$  до оси симметрии тела,  $\phi(x)$  — нормирующая функция, определяемая в процессе решения уравнений,  $P_\infty$ ,  $S_\infty$ ,  $M_\infty$  и  $\gamma_\infty$  — характерные значения чисел Прандтля, Шмидта, Маха и показателя адиабаты. Индекс  $e$  относится к параметрам на внешней границе пограничного слоя.

Предполагая, что поверхность обтекаемого тела непроницаема, имеет заданную температуру и в химических реакциях принимает участие только как катализатор, получим систему граничных условий при  $\zeta = 0$ :

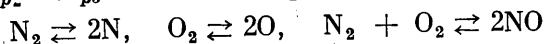
$$w = 0, \quad V = 0 \quad (1.6)$$

$$\frac{K_{p1} c_5}{m m_5} - p \left( \frac{c_1}{m_1} \right)^2 = 0, \quad \frac{K_{p2} c_4}{m m_4} - p \left( \frac{c_2}{m_2} \right)^2 = 0 \quad (1.7)$$

$$\frac{K_{p3} c_4 c_5}{m m_4 m_5} - \left( \frac{c_3}{m_3} \right)^2 = 0, \quad K_0 = 0$$

$$T = T_w \quad (1.8)$$

Здесь  $K_{p1}$ ,  $K_{p2}$  и  $K_{p3}$  — константы равновесия реакций



Значения искомых функций на внешней границе пограничного слоя определяются по заданному распределению давления из системы уравнений

$$w = 1, \quad \rho u_e \frac{du_e}{dx} = - \frac{dp}{dx} \quad (1.9)$$

$$u_e \frac{dc_{ie}}{dx} = \frac{\omega_i}{\rho} \quad (1.10)$$

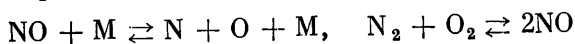
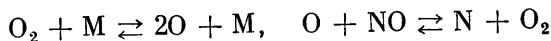
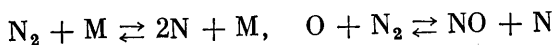
$$c_{0e} = \text{const} \quad (1.11)$$

$$\langle c_p \rangle \frac{dT_e}{dx} + \sum_{i=1}^4 (h_i - h_5) \frac{dc_{ie}}{dx} = - u_e \frac{du_e}{dx} \quad (1.12)$$

§ 2. Коэффициенты переноса, термодинамические свойства и химические реакции. Коэффициенты переноса и массовые диффузионные потоки рассчитывались по формулам [1], аппроксимирующим формулы строгой кинетической теории газов [2] (термодиффузия не учитывалась). Аппроксимация производилась на основе таблиц интегралов столкновений, приведенных в работе [3].

Удельные энтальпии  $h_i$ , теплоемкости  $c_{pi}$  и логарифмы констант равновесия химических реакций  $\ln K_{pk}$  рассчитывались по интерполяционным формулам, полученным на основе таблиц значений этих функций [4].

При расчетах учитывались шесть химических реакций



Константы скоростей прямых реакций были заимствованы из работы [5]. Было принято, что отношение констант скоростей прямой и обратной реакций равно константе равновесия этой реакции. Входящее в уравнение (1.3) безразмерное отношение  $\omega_j / \rho$  было представлено в виде

$$\frac{\omega_i}{\rho} = m_i \sum_{k=1}^6 \nu_{ik} \Phi_k T_k$$

где  $\nu_{ik}$  — стехиометрический коэффициент  $i$ -й компоненты в  $k$ -й реакции, а  $\Phi_k$  и  $T_k$  — некоторые функции температуры, давления и концентраций. Величина  $\Phi_k$  пропорциональна отношению характерного времени течения к характерному времени  $k$ -й реакции и может изменяться в широких пределах в зависимости от параметров течения.

При  $\Phi_k \ll 1$  ( $k = 1, 2, \dots, 6$ ) режим течения близок к замороженному, при  $\Phi_k \gg 1$  — к равновесному. Величина  $T_k$  характеризует отклонение  $k$ -й реакции от равновесия. Например, функция  $T_1$  имеет вид

$$T_1 = \frac{K_{p1}}{m} \frac{c_5}{m_5} - p \left( \frac{c_1}{m_1} \right)^2$$

При химическом равновесии  $T_k = 0$ .

§ 3. Метод решения. Уравнения (1.1) — (1.5) с граничными условиями (1.6) — (1.12) решались разностным методом. Была применена 9-точечная трехслойная разностная схема [1]. Отдельные члены уравнений (1.1) — (1.12) были аппроксимированы следующим образом (сетка и сеточные обозначения совпадают с принятыми в [1]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &\sim \frac{f_m^{n+1} - f_m^{n-1}}{2\Delta x}, & \frac{df_e}{dx} &\sim \frac{f_e^{n+1} - f_e^{n-1}}{2\Delta x} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} &\sim (1-s) \frac{f_{m+1}^{n-1} - 2f_m^{n-1} + f_{m-1}^{n-1}}{\Delta \xi^2} + s \frac{f_{m+1}^{n+1} - 2f_m^{n+1} + f_{m-1}^{n+1}}{\Delta \xi^2} \\ \frac{\partial f}{\partial \xi} &\sim (1-s) \frac{f_{m+1}^{n-1} - f_{m-1}^{n-1}}{2\Delta \xi} + s \frac{f_{m+1}^{n+1} - f_{m-1}^{n+1}}{2\Delta \xi} && \text{(в операторах конвек-)} \\ &&& \text{тивного переноса)} \\ \frac{\partial f}{\partial \xi} &\sim \frac{f_1^{n+1} - f_{-1}^{n+1}}{2\Delta \xi} && \text{(в граничных условиях и при вычислении)} \\ &&& \text{теплового потока и трения на стенке)} \\ \frac{\partial f}{\partial \xi} &\sim \frac{f_{m+1}^n - f_{m-1}^n}{2\Delta \xi} && \text{(в остальных случаях)} \end{aligned}$$

$$w^2 \sim w_m^n [(1-s)w_m^{n-1} + sw_m^{n+1}] \quad \text{(в уравнении (1.2))}$$

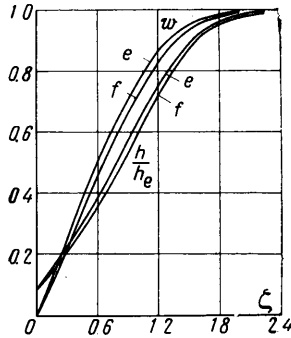
$$\omega_i / \rho \sim m_i \sum_{k=1}^6 (\Phi_k)_m^n [(1-s)(T_k)_m^{n-1} + s(T_k)_m^{n+1}] \nu_{ik} \quad \text{(в уравнении (1.3)).}$$

Все остальные коэффициенты в уравнениях (1.1) — (1.5) и (1.9) — (1.12) вычислялись в точке  $(n, m)$ . Условия химического равновесия на стенке (1.7) были выписаны для точки  $(n+1, 0)$ . Значения функций в точке  $(n+1, -1)$  определялись из разностной аппроксимации уравнений (1.2) — (1.5) при  $\xi = 0$ .

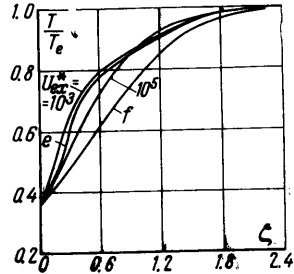
При такой аппроксимации разностные уравнения, аппроксимирующие уравнения (1.1), (1.2), (1.6) и (1.9), образуют систему нелинейных уравнений относительно значений  $w_m^{n+1}$  и  $V_m^n$  ( $m = 0, 1, \dots, M_1$ ). Эта система решалась методом работы [6]. При решении этой системы определялось также значение  $\varphi(x_{n+1})$  из условия постоянства толщины динамического пограничного слоя в переменных  $x, \xi$ .

Разностные уравнения, аппроксимирующие уравнения (1.3) — (1.5), (1.7), (1.8), (1.10) — (1.12), образуют систему нелинейных алгебраических уравнений относительно значений  $(c_i)_m^{n+1}$  и  $T_m^{n+1}$  ( $m = -1, 0, \dots, M_2$ ). Эта система решалась методом

Ньютона. Система линейных уравнений, образующаяся при применении метода Ньютона, решалась методом матричной прогонки. В качестве нулевого приближения для метода Ньютона использовался результат линейной экстраполяции по  $(n-1)$ -му и  $n$ -му слоям. При таком выборе нулевого приближения достаточно было проводить только одну итерацию по Ньютону на каждом шаге по  $x$ .

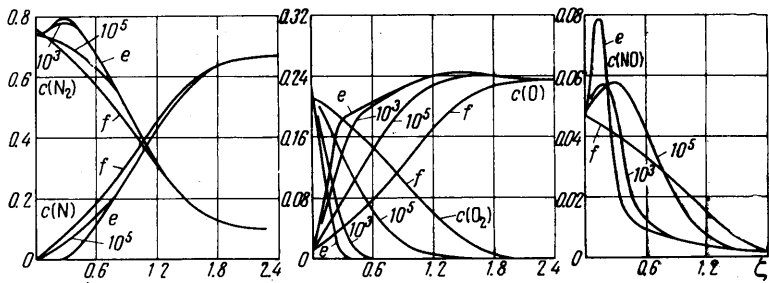


Фиг. 1



Фиг. 2

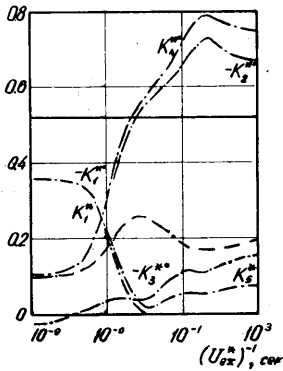
Все расчеты были проведены при  $M_2 \sim 40$ ,  $\Delta x = 0.01 - 0.02$ ,  $s = 0.7$ . Значения искомых функций на двух начальных слоях были взяты из решения в передней критической точке.



Фиг. 3

Для получения решения в критической точке использовалась описанная выше система разностных уравнений при  $u_e = 0$  и  $s = 1$ . Решение определялось методом простых итераций; при этом верхний индекс сеточных обозначений указывал не номер слоя, а номер итерации. При каждой простой итерации производилась одна итерация по Ньютону.

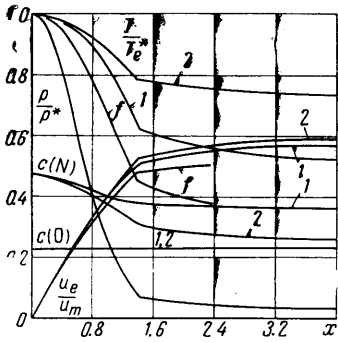
Для исследования зависимости течения в пограничном слое от степени химической неравновесности в критической точке проводилась серия расчетов, соответствующих ряду последовательно возрастающих значений  $\Phi_k$ , начиная от значений  $\Phi_k \ll 1$  («замороженное» решение) и кончая значениями  $\Phi_k \gg 1$  («равновесное» решение). В этой серии результат предыдущего расчета использовался как нулевое приближение для последующего. Для получения «замороженного» решения в качестве нулевого приближения использовались линейные профили искомых функций. Значение функции  $\Phi^*$  в критической точке выбиралось равным  $\sqrt{(\rho\mu)_w^* (u_{ex}^*)^{-1}}$  (индекс \* относится к значениям параметров в критической точке,  $w - k$  значениям параметров на стенке).



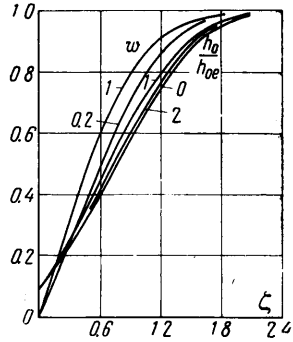
Фиг. 4

§ 4. Результаты расчета. На фиг. 1—4 приведены некоторые результаты расчета пограничного слоя в передней критической точке при  $p = 0.1$  атм,  $T_e = 7000^\circ$  К,  $T_w = 2500^\circ$  К и различных значениях  $u_{ex}^*$  ( $\text{сек}^{-1}$ ). Профили энтальпии  $h/h_e$  и скорости  $w$  (фиг. 1) мало меняются при переходе от замороженного к равновесному режиму тече-

ния, несмотря на значительное изменение при этом распределения температуры (фиг. 2) и химического состава газа (фиг. 3) в пограничном слое (буквами *f* и *e* на графиках обозначены соответственно «замороженное» и «равновесное» решения). Теплообмен практически не зависит от степени неравновесности течения, хотя механизм передачи тепла в случаях замороженного и равновесного течений различен (фиг. 4). Сплошная линия



Фиг. 5



Фиг. 6

на фиг. 4 соответствует фактору теплообмена  $N / \sqrt{R}$ , вычисленному через полный тепловой поток по формуле

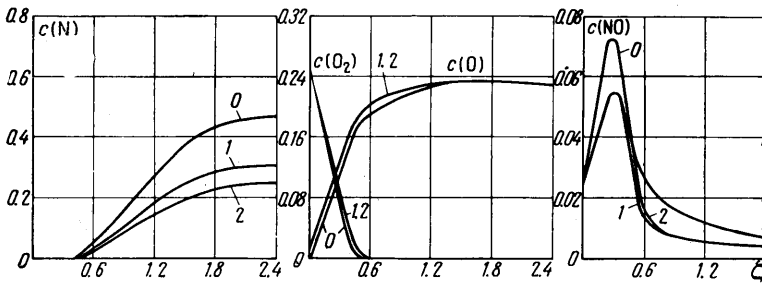
$$\frac{N}{\sqrt{R}} = \frac{q \langle c_{pw} \rangle \sqrt{(\rho\mu)_w}}{(\rho\lambda)_w (h_e - h_w)} (u_{ex}^*)^{-0.5}, \quad q = \left[ \frac{\rho\lambda}{\Phi} \frac{\partial T}{\partial \zeta} - \sum_{i=1}^5 h_i K_i \right]_{\zeta=0}$$

Пунктирная линия соответствует фактору теплообмена, вычисленному через часть теплового потока, обусловленную теплопроводностью.

Изменение приведенных диффузионных потоков

$$K_{iw}^* = K_{iw} / \sqrt{(\rho\mu)_w u_{ex}^*}$$

в зависимости от  $u_{ex}^*$ , показанное на фиг. 4 штрих-пунктирными линиями, иллюстрирует изменение характера массообмена при переходе от замороженного к равновесному режиму течения. При замороженных химических реакциях массообмен в основном



Фиг. 7

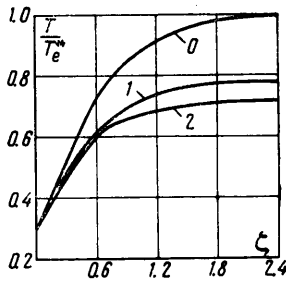
определяется значениями параметров на границах пограничного слоя. «Движущей силой» массообмена является различие химического состава смеси на внешней границе пограничного слоя и на стенке. При скорости химических реакций, отличной от нуля, массообмен сложным образом зависит от распределения температуры и концентраций внутри пограничного слоя.

Изменение распределения концентраций в пограничном слое, вызванное химическими реакциями, приводит к изменению диффузионного разделения смеси. Ниже приведены значения  $\Delta c_0 = c_{ew} - c_{oe}$ , полученные при различных значениях  $u_{ex}^*$ .

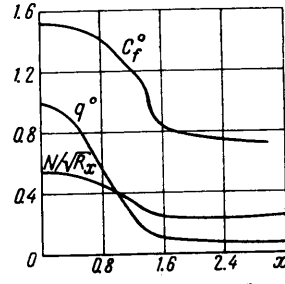
$u_{ex}^* [сек^{-1}] = 10^8$	$10^6$	$10^5$	$10^4$	$10^3$	$10^2$	$10^1$
$\Delta c_0 = 0.0028,$	$0.0064,$	$0.0140,$	$0.0179,$	$0.0152,$	$0.0164$	

На фиг. 5—9 приведены результаты расчета пограничного слоя на конусе со сферическим затуплением с углом полураствора конуса  $10^\circ$ . Распределение давления, соответствующее равновесному режиму вязкого течения, было получено методами работ [7, 8]. Расчеты были проведены при  $p^* = 8.495 \text{ атм.}$ ,  $T_e^* = 8340^\circ \text{ К}$  ( $M = 25$ ,  $p = 10^{-2} \text{ атм.}$ ,  $T = 250^\circ \text{ К}$  перед ударной волной),  $T_w = 2500^\circ \text{ К}$  и двух значениях радиуса сферы  $L = 0.017$  и  $1.7 \text{ м}$ . При этих условиях режим течения в пограничном слое вблизи передней критической точки близок к равновесному. Было получено также решение при замороженных химических реакциях.

Распределение параметров течения на внешней границе пограничного слоя приведено на фиг. 5 (по оси абсцисс отложено расстояние вдоль поверхности тела от перед-



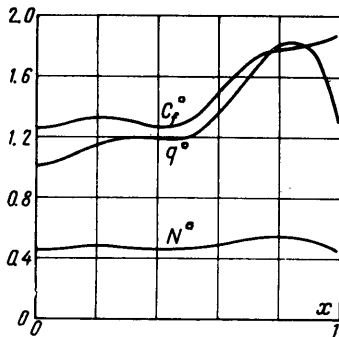
Фиг. 8



Фиг. 9

ней критической точки, отнесенное к радиусу сферы). Цифра 1 соответствует решению при  $L = 0.017 \text{ м}$ , 2 — при  $L = 1.7 \text{ м}$ . Значения скорости на внешней границе пограничного слоя отнесены к максимальной скорости течения  $u_m = 7984 \text{ м/сек.}$

На фиг. 6—8 приведены профили скорости  $w$ , полной энтальпии  $h_0 / h_{0e}$ , концентраций и температуры  $T / T_e^*$ , полученные из решения при  $L = 1.7 \text{ м}$  для различных значений  $x$ . Ноль соответствует  $x = 0$ , 1 —  $x = 1.396$ , 2 —  $x = 4.298$ .



Фиг. 10

В трех решениях было получено практически одинаковое распределение теплового потока вдоль поверхности тела (различие не превышает 2%). Отклонение распределения параметра трения  $c_f \sqrt{R_x}$  при  $L$  равном  $0.017 \text{ м}$ ,  $1.7 \text{ м}$  от «замороженного» распределения этого параметра не превышает 12%. На фиг. 9 приведено распределение величин

$q^0 = q(x) / q^*$ ,  $N^0 = N / \sqrt{R_x}$ ,  $c_f^0 = c_f \sqrt{R_x}$  вычисленных по формулам при  $L = 0.017 \text{ м}$

$$\frac{N}{\sqrt{R_x}} = \frac{q \langle c_{pw} \rangle \sqrt{(\rho\mu)_w}}{(\rho\lambda)_w (h_e - h_w + 0.5u_e^2)} \left( \frac{u_e}{x} \right)^{-0.5}$$

$$c_f \sqrt{R_x} = \frac{2}{\Phi(x)} \left( \frac{\partial w}{\partial \zeta} \right)_{\zeta=0} \left( \frac{(\rho\mu)_w x^{1/2}}{u_e} \right)$$

Ниже приведены значения величины  $q(x)/q^*$ , полученные в результате расчета при  $L = 0.017 \text{ м}$  и по методу работы [9], основанному на предположении о локальном подобии

$x$	$= 0.3096$	$0.6899$	$1.024$	$1.324$	$1.469$	$1.778$	$2.405$	$3.030$
$q(x)/q^*(\text{расчет})$	$= 0.936$	$0.662$	$0.354$	$0.172$	$0.122$	$0.0960$	$0.0711$	$0.0595$
$q(x)/q^*[r]$	$= 0.925$	$0.647$	$0.344$	$0.163$	$0.117$	$0.0939$	$0.0704$	$0.0599$

Как видно из сравнения, результаты приближенного метода хорошо согласуются с результатами расчета. Были проведены также расчеты пограничного слоя на теле вращения, контур которого в декартовых координатах задан уравнением

$$(x/L)^{10} + (y/L)^{10} = 1$$

(тело, по форме близкое к цилиндрическому торцу со скругленными углами)

Распределение давления при равновесном режиме невязкого течения было получено методом работы [7]. Расчеты проведены при  $p^* = 8.495 \text{ атм.}$ ,  $T_c^* = 8340^\circ \text{ К.}$ ,  $T_w = 1000^\circ \text{ К}$  и двух значениях  $L = 1.7$  и  $0.017 \text{ м.}$  Кроме того, было найдено решение при замороженных химических реакциях.

Как и в случае затупленного конуса, в трех решениях было получено практически одинаковое распределение вдоль тела теплового потока. Значения параметра трения  $c_f \sqrt{R_x}$  при учете химических реакций отличаются от соответствующих значений этого параметра без учета химических реакций не более чем на 12%. На фиг. 10 представлено найденное в результате расчета при  $L = 0.017 \text{ м}$  распределение величин

$$q^\circ = q(x) / q^*, N^\circ = N / \sqrt{R_x}, c_f^\circ = c_f \sqrt{R_x}$$

Распределение теплового потока, полученное по методу [9], в данном случае также близко к расчетному.

В заключение выражаю глубокую благодарность Г. И. Петрову, под руководством которого выполнена настоящая работа.

Поступило 14 X 1965

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Громов В. Г. Применение трехслойной разностной схемы для решения уравнений пограничного слоя. Изв. АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение, 1963, № 5.
2. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. Изд. иностр. лит., 1962.
3. Уин, Мэсон. Collision Integrals for the Transport Properties of Dissociating Air at High Temperatures. Phys. Fluids, 1962, vol. 5, No. 4.
4. Сб. «Термодинамические свойства индивидуальных веществ». Изд-во АН СССР, 1962.
5. Рей К. Химическая кинетика воздуха при высокой температуре. Сб. «Исследование гиперзвуковых течений». Изд-во «Мир», 1964.
6. Браиловская И. Ю., Чудов Л. А. Решение уравнений пограничного слоя разностным методом. Сб. «Вычислительные методы и программирование». Изд-во МГУ, 1962, № 1.
7. Гилинский С. М., Теленин Г. Ф., Тиняков Г. П. Метод расчета сверхзвукового обтекания затупленных тел с отошедшей ударной волной. Изв. АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение, 1964, № 4.
8. Дьяконов Ю. Н., Зайцева Н. А. Обтекание затупленного тела сверхзвуковым потоком идеального газа. Изв. АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение, 1963, № 1.
9. Кемп, Роуз, Детра. Ламинарный теплообмен тупых тел с потоком диссоциированного воздуха В сб. «Газодинамика и теплообмен при наличии химических реакций». Изд. иностр. лит., 1962.