

О МОДЕЛИ «ПОВЕРХНОСТИ РЕАКЦИЙ»  
В ТЕОРИИ ГОРЕНИЯ НЕПЕРЕМЕШАННЫХ ТОПЛИВ.  
АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТЕЧЕНИЯ

М. Н. КОГАН, Н. К. МАКАШЕВ

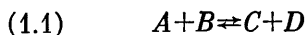
(Москва)

При описании процесса горения предварительно не перемешанных с окислителями топлив широко используется модель «поверхности реакций» [1-4]. Первоначально полученная из чисто качественных соображений, эта модель впоследствии подвергалась довольно тщательному анализу [5, 6]. Однако при этом практически не рассматривались область применимости модели и ее точность.

В работе рассмотрена структура потока и сделаны оценки величин основных газодинамических параметров в течении, возникающем при смешении двух потоков, в которых содержатся реагенты, вступающие в необратимую химическую реакцию. Рассмотрен вопрос об учете обратной химической реакции, имеющей меньшую константу скорости. Определены условия применимости модели «поверхности реакций» в ее обычном виде. Осуществлен анализ погрешностей, возникающих в решении соответствующей газодинамической задачи при принятии тех или иных предположений о характере течения.

При этом оказалось, что точность модели «поверхности реакций» в ряде случаев явно недостаточна. Тогда для получения решения с погрешностями, величина которых может быть приемлемой, необходим более строгий учет всех особенностей течения, с одной стороны, а с другой — может оказаться целесообразным построение высших приближений к решению. Соответственно оказывается необходимым знание уравнений для этих высших приближений, которые могут выходить за рамки уравнений Навье — Стокса и включать в себя ряд барнеттовских и им подобных членов. Поэтому целесообразно привлечение к решению этой проблемы уравнения Больцмана, следствием которого являются как уравнения Навье — Стокса, так и уравнения Барнетта и т. д. Решению этой задачи посвящена вторая часть работы.

1. Рассмотрим ламинарное смешение двух потоков с температурой  $\sim T_e$ , содержащих кроме разбавителя соответственно реагенты  $A$  и  $B$  с концентрациями  $Y_{Ae}$  и  $Y_{Be}$ . Реагенты при смешении потоков вступают в реакцию



Пусть условия в потоке таковы, что константы скорости прямой  $K_f$  и обратной  $K_b$  реакций удовлетворяют неравенству  $K_f \gg K_b$ . Тогда в первом приближении обратную реакцию можно не учитывать.

Обозначим через  $\delta$  и  $\Delta$  соответственно толщины области реакций и слоя смешения ( $\delta \ll \Delta$ ). Количество прореагировавшего вещества связано с величиной диффузионных потоков в слое смешения и области реакций соотношениями

$$(1.2) \quad c_s \alpha \sigma_{ei} n_s^2 Y_{A_i} Y_{B_j} \delta \sim n_s c_s l_s Y_{ij} \delta^{-1} \sim n_s c_s l_s Y_{ie} \Delta_i^{-1}, \quad \Delta_A + \Delta_B = \Delta, \quad i = A, B$$

Здесь  $n_s$ ,  $c_s$ ,  $l_s$  — числовая плотность, тепловая скорость и длина пробега молекул в области реакций и слое смешения. В (1.2) учтено, что температура газа  $T_s$  в слое смешения и в области реакций имеет один и тот же порядок, а давление почти постоянно поперек течения.

Кроме того, в (1.2) использованы такие обозначения:  $\Delta_A$  и  $\Delta_B$  — толщины слоя смешения с разных сторон от области реакций;  $Y_{ij}$  — концентрации

молекул реагентов в области реакций;  $\sigma_{el}$  и  $\alpha$  — сечение столкновения и вероятность реакции при столкновении молекул  $A$  и  $B$ .

Из (1.2) следует, что

$$(1.3) \quad Y_{Af} \sim Y_{Bf} \sim Y_{ie} \frac{\delta}{\Delta_i} \sim \frac{l_s^2}{\alpha \delta^2}, \quad \frac{\Delta_A}{\Delta_B} \sim \frac{Y_{Ae}}{Y_{Be}}$$

$$\delta \sim \frac{l_s^{3/2} \Delta^{1/2}}{\alpha^{1/2} (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^{1/2}}, \quad \beta = O(1)$$

Соотношение между  $Y_{Ae}$  и  $Y_{Be}$  и толщинами слоя смешения с разных сторон от области реакций  $\Delta_A$  и  $\Delta_B$  хорошо известно и отмечалось, например, в [7].

Так как для толщины ламинарного слоя смешения имеем оценку

$$(1.4) \quad \Delta \sim l_s^{1/2} x^{1/2} M^{-1/2} \tau^{-1/2}$$

где  $M$  — число Маха, определенное по условиям вне слоя смешения,  $\tau = T_e/T_s$ ,  $x$  — продольная координата, то

$$(1.5) \quad \delta \sim \frac{l_s^{5/6} x^{1/6}}{\alpha^{1/2} M^{1/6} \tau^{1/12} (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^{1/2}}$$

При этом пренебрегается влиянием пограничных слоев, стекающих со стенок каналов, по которым текут смешиваемые газы.

Из (1.5) видно, что при достаточно большой вероятности реакции и конечных начальных концентрациях реагентов толщина области реакций весьма мала и приближается по величине к длине свободного пробега молекул.

Если отсутствует разбавитель, то для  $\delta$  имеем оценку, аналогичную (1.5), с той лишь разницей, что  $Y_{Ae}$  и  $Y_{Be}$  здесь необходимо считать величинами порядка единицы.

Действительно, при  $\delta \ll \Delta$  основную массу газа в области реакций составляют продукты, причем эта область является их источником. Вследствие этого можно записать соотношения

$$n_i u \Delta x^{-1} \sim c_s \alpha \sigma_{ei} n_s^2 Y_{Af} Y_{Bf} \delta \sim n_s l_s c_s Y_{if} \delta^{-1}, \quad i = A, B$$

откуда следует, что

$$\delta \sim \frac{l_s^{5/6} x^{1/6}}{\alpha^{1/2} M^{1/6} \tau^{1/12}}, \quad Y_{Af} \sim Y_{Bf} \sim \frac{l_s^{1/2}}{\alpha^{1/2} x^{1/2}} M^{1/2} \tau^{1/6}$$

Здесь  $u$  — скорость потока в слое смешения.

Об области реакций можно говорить как о «поверхности» внутри слоя смешения, если только  $\delta \ll \Delta$ .  $\Delta = \min(\Delta_A, \Delta_B) \sim \Delta_A \Delta_B \Delta^{-1} \sim \Delta Y_{Ae} Y_{Be} (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^{-2}$ , что в случае ламинарного смешения приводит к неравенству

$$(1.6) \quad x \gg x_* \sim \frac{l_s}{\alpha} M \tau^{1/2} \frac{(Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^5}{Y_{Ae}^3 Y_{Be}^3}$$

т. е. модель «поверхности реакций» в ее классическом виде даже при достаточно сильной реакции справедлива не всегда. Если  $Y_{Ae} \ll Y_{Be}$ , например, то при  $x \sim x_*$  имеем

$$\delta \sim \Delta_A \ll \Delta_B \sim \Delta, \quad Y_{Ae} \sim Y_{Af} \sim Y_{Bf} \sim Y_{Be} \delta \Delta^{-1} \ll Y_{Be}$$

но такое течение, очевидно, имеет мало общего с моделью «поверхности реакций» в ее обычном виде.

Для упрощения вида выписываемых соотношений здесь и далее комбинацию  $M\tau^{1/2}$  принимаем за величину порядка единицы, т. е. предполагаем, что  $u \sim c_s$ . Отметим, что это предположение не является принципиальным и полученные далее выражения могут быть без труда обобщены на случай произвольной величины  $M\tau^{1/2}$ .

С учетом сказанного в сечении  $x \sim x_*$  для  $\Delta$  и  $\Delta_*$  имеем оценки

$$\Delta \sim \frac{l_s (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^{5/2}}{\alpha^{1/2} Y_{Ae}^{3/2} Y_{Be}^{3/2}}, \quad \Delta_* \sim \frac{l_s (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^{1/2}}{\alpha^{1/2} Y_{Ae}^{1/2} Y_{Be}^{1/2}}$$

Отсюда видно, что при  $\alpha = O(1)$  и  $Y_{ie} = O(1)$  модель «поверхности реакций» справедлива там, где справедливы сами уравнения газодинамики ( $x \gg l_s$ ). Однако часто параметры течения таковы, что  $\Delta$  и  $\Delta_*$  существенно превышают  $l_s$  — длину пробега молекул. В этом случае в слое смешения необходимо учитывать область выше по потоку от сечения  $x \sim x_*$ , которую можно описать с помощью уравнений газодинамики, но в которой реакции имеют существенно объемный характер.

Сделанные оценки объясняют экспериментальные результаты работы [8], в которой, несмотря на то что реакция  $H_2 + F \rightarrow HF(v) + H$  в условиях этой работы была существенно необратимой и весьма быстрой, не удалось обнаружить «поверхность реакции». Химический процесс шел по всему объему слоя смешения, так как величина  $x_*$  согласно (1.6) превышала размеры исследуемой области течения.

Посмотрим теперь, к чему приводит учет обратной реакции. Если считать толщину области реакций  $\delta \ll \Delta_*$ , то нетрудно показать справедливость соотношений, следующих из уравнений сохранения числа частиц и энергии

$$(1.7) \quad \begin{aligned} & | [K_{eq}(T_s) Y_{Cs} Y_{Ds} - Y_{Af} Y_{Bf}] | n_s^2 \alpha \sigma_{ei} c_s \delta \sim \\ & \sim n_s c_s l_s Y_{if} \delta^{-1} \sim n_s c_s l_s Y_{ie} \Delta_i^{-1} \sim n_s c_s l_s Y_{js} \Delta_*^{-1} \sim \\ & \sim n_s c_s l_s k (T_s - T_e) Q^{-1} \Delta_*^{-1}; \quad i = A, B; \quad j = C, D \end{aligned}$$

Здесь  $K_{eq}(T_s)$  — константа равновесия,  $Q$  — тепловой эффект прямой реакции,  $k$  — постоянная Больцмана,  $n_s c_s l_s k$  — коэффициент теплопроводности,  $Y_{Cs}$  и  $Y_{Ds}$  — концентрации продуктов реакции, сохраняющие порядок величины поперек всего слоя смешения.

Отсюда в дополнение к оценкам  $\Delta_A Y_{Be} \sim \Delta_B Y_{Ae}$ ,  $Y_{Af} \sim Y_{Bf} \sim Y_{Ae} \delta \Delta_A^{-1} \sim Y_{Be} \delta \Delta_B^{-1}$  имеем

$$(1.8) \quad \begin{aligned} & \left| \left[ K_{eq}(T_s) - \left( \frac{\delta}{\Delta} \right)^2 \right] \right| \sim \frac{l_s^2 \Delta}{\alpha \delta \Delta_*^2 (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})}, \quad \beta = O(1) \\ & T_s \sim T_e + \frac{Q}{k} \frac{Y_{Ae} Y_{Be}}{Y_{Ae} + \beta Y_{Be}}, \quad Y_{Cs} \sim Y_{Ds} \sim \frac{Y_{Ae} Y_{Be}}{Y_{Ae} + \beta Y_{Be}} \end{aligned}$$

Первое соотношение в (1.8) определяет толщину области реакций с учетом обратного химического процесса, второе — уровень температуры газа в этой области.

Обычно в приближении «поверхности реакций» обратную реакцию не учитывают. Как видно из (1.8), это справедливо, если  $K_{eq}(T_s) \ll (\delta/\Delta_*)^2$ . Это неравенство выполняется, если

$$(1.9) \quad x \ll x_* \sim \frac{l_s (Y_{Ae} + \beta Y_{Be})^5}{\alpha Y_{Ae}^3 Y_{Be}^3 K_{eq}^{5/2}} \sim \frac{x_*}{K_{eq}^{5/2}}$$

Таким образом, условия применимости модели «поверхности реакций» в ее обычном виде заключаются в неравенствах

$$(1.10) \quad x_* \ll x \ll x_{**} \sim x_* K_{eq}^{-1/2}$$

Из (1.6), (1.9) и (1.10) видно, что определяющее значение для структуры потока имеет величина  $K_{eq}(T_s)$ . Если  $K_{eq}(T_s) \ll 1$ , то при соблюдении обоих неравенств (1.10) для толщины области реакций согласно (1.8) получаем оценку (1.5).

Если же  $K_{eq}(T_s) = O(1)$ , то единственно возможный случай здесь заключается в соотношении  $\delta \sim \Delta_*$ , причем для  $x \gg x_*$  концентрации компонентов в области реакций являются почти равновесными, так как здесь

$$\left| \left[ K_{eq}(T_s) - \left( \frac{\delta}{\Delta_*} \right)^2 \right] \right| \sim \left| \left[ K_{eq}(T_s) - \frac{Y_{Af} Y_{Bf}}{Y_{Cs} Y_{Ds}} \right] \right| \sim \left( \frac{x_*}{x} \right) \ll 1$$

Выражение для константы равновесия  $K_{eq}(T)$ , как известно, имеет структуру  $K_{eq}(T) = a(T) \exp(-Q/kT)$ . Поэтому неравенство  $K_{eq}(T) \ll 1$  справедливо, если или  $Q/kT \gg 1$ , или  $a(T) \ll 1$ .

Рассмотрим течение, когда  $Y_{Ae} \sim Y_{Be} \sim 1$ . Пусть  $Q/kT_e \gg 1$ , а величина  $a = O(1)$ . Кажется, что в данном случае речь должна идти о существенно необратимой реакции в потоке. Однако выделение энергии в зоне реакций так повышает температуру газа, что согласно (1.8)  $T_s \sim Q/k$  и в слое смешения  $K_{eq}(T_s) = O(1)$ .

Таким образом, видим, что для  $Y_{Ae} \sim Y_{Be} \sim 1$  реакция необратима и вследствие этого возможно ее протекание в узком слое  $\delta \ll \Delta$  (на «поверхности реакций») только в тех случаях, когда для  $T_s \sim Q/k$  мал предэкспоненциальный множитель  $a(T)$ . Это может иметь место, например, при малом отношении произведений масс реагентов и продуктов реакции, поскольку для реакций рассматриваемого типа  $a(T) \sim (m_A m_B / m_C m_D)^{1/2}$ , где  $m_i$  — масса молекулы  $i$ -го сорта.

Действительно, предполагая, что

$$m_A / m_B = \gamma \ll 1, \quad m_{C,D} / m_B = O(1), \quad Y_{Ae} \sim Y_{Be} \sim 1$$

нетрудно получить такие оценки для характеристик области реакций и слоя смешения

$$\Delta_A \sim \Delta, \quad \Delta_B \sim \gamma^{1/2} \Delta, \quad \delta \sim l_s^{2/3} \Delta^{1/3} \gamma^{1/6} \alpha^{-1/6} \\ Y_{Af} \sim \delta \Delta^{-1}, \quad Y_{Bf} \sim \delta \Delta_B^{-1} \gg Y_{Af}, \quad Y_{Cs} \sim Y_{Ds} \sim 1, \quad T_s \sim T_e + Qk^{-1}$$

Здесь толщина слоя смешения  $\Delta \sim l_s^{1/2} x^{1/2}$ , если скорость газа  $u \sim c_s^0 \sim \sqrt{2kT_s/m_B}$  и длина пробега  $l_s$  имеет величину длины пробега тяжелых молекул на тяжелых или легких на легких.

Условия применимости обычной модели «поверхности реакций» (1.10) в данном случае имеют вид

$$x_* \sim \frac{l_s}{\alpha \gamma} \ll x \ll x_{**} \sim \frac{l_s}{\alpha \gamma^{1/2} K_{eq}^{3/2}}$$

Поскольку здесь  $K_{eq}(T_s) \sim \gamma^{3/2}$ , эти условия могут выполняться в широком диапазоне значений координаты  $x$  от  $x_*$  до  $x_{**} \sim x_* \gamma^{-3/2}$ . В дальнейшем для простоты считаем  $\gamma$  величиной порядка единицы.

<sup>1</sup> Для  $\alpha \ll 1$ , когда  $x_* \gg l_s$ , можно указать закон нарастания температуры газа в начальной части слоя смешения (при  $x \lesssim x_*$ ), где в данном случае реакции идут по всему его объему:  $T_s \sim T_e + Qk^{-1} \alpha x l(T_s)^{-1}$ ,  $x \lesssim x_* \sim \alpha^{-1} l(T_s \sim Qk^{-1})$ .

Если при тех же условиях, что и выше ( $Q/kT_e \gg 1$ ,  $a=O(1)$ ), реакция идет при большом количестве разбавителя в смешиваемых потоках, то согласно (1.8)  $T_s \ll Q/k$  и вследствие этого  $K_{eq}(T_s) \ll 1$ . Везде ниже будем считать, что в силу тех или иных причин константа равновесия  $K_{eq}(T)$  при температуре  $T_s$  газа внутри слоя смешения и области реакций мала. Кроме этого далее для простоты примем, что  $Y_{Ae}$  и  $Y_{Be}$  сравнимы между собой:  $Y_{Ae} \sim Y_{Be} \sim Y_e$ .

Весьма своеобразное течение получается вне тонкой области реакций в районе точки на оси  $x \sim x_{**}$ , где  $K_{eq}(T_s) \sim (\delta/\Delta)^2 \ll 1$ . Следует, очевидно, считать, что концентрация, например, компонента  $B$ , поступающего к области реакций через часть слоя смешения с толщиной  $\Delta_B$ , по другую сторону от области реакций различна от нуля. Этому способствует как диффузия в поперечном направлении, так и обратная реакция, которая вне области реакций протекает с объемной скоростью того же порядка величины, что и внутри этой области. Таким образом, в этой части течения для концентраций компонентов имеем

$$n_A \sim n_s Y_e, \quad n_C \sim n_D \sim n_s Y_e, \quad n_B \sim n_s Y_e \varphi$$

где  $\varphi \ll 1$ , но порядок величины  $\varphi$  пока неизвестен.

Из уравнений сохранения для компонентов в этой части потока трудно получить соотношения для компонентов  $A, C, D$

$$(1.11) \quad Y_e \left( \frac{l_s}{\alpha x} + \frac{l_s^2}{\alpha \Delta^2} \right) \sim [K_{eq}(T_s) Y_e^2 - Y_e^2 \varphi]$$

и для компонента  $B$

$$(1.12) \quad Y_e \varphi \left( \frac{l_s}{\alpha x} + \frac{l_s^2}{\alpha \Delta^2} \right) \sim [K_{eq}(T_s) Y_e^2 - Y_e^2 \varphi]$$

Единственным непротиворечивым следствием этих оценок являются выражения

$$(1.13) \quad \varphi \sim K_{eq}(T_s), \quad [K_{eq}(T_s) - \varphi] \sim l_s \varphi \alpha^{-1} x^{-1} Y_e^{-1} \sim \\ \sim K_{eq} x_* x^{-1} \sim K_{eq}^{3/2}, \quad x \sim x_{**}$$

Поэтому, несмотря на то что интенсивности как прямой, так и обратной реакций в этом районе потока много больше интенсивности диффузионных процессов

$$(1.14) \quad \frac{Y_e l_s^2}{\alpha \Delta^2 K_{eq} Y_e^2} \sim \frac{l_s^2}{\alpha \Delta^2 Y_e} \left( \frac{\Delta_{**}}{\delta_{**}} \right)^2 \sim K_{eq}^{1/2} \left( \frac{x_{**}}{x} \right) \sim K_{eq}^{1/2}, \quad x \sim x_{**}$$

в уравнения для «обильных» компонентов (т. е. для  $A, C, D$ ) в главном приближении реакционные члены не входят, представляя собой поправку порядка  $\varphi \sim K_{eq} \sim (\delta_{**}/\Delta_{**})^2$  по сравнению с единицей. При этом диффузионные потоки этих компонентов компенсируются конвективными процессами.

С другой стороны, в уравнении для компонента  $B$  (1.12) реакционные члены согласно (1.13) в главном приближении определяют концентрацию этого реагента, так как скорость реакций в каждом из направлений имеет величину  $O(K_{eq})$ , а их разность —  $O(K_{eq}^{1/2})$ .

В остальной части слоя смешения при  $x \ll x \ll x_{**}$  также справедливы оценки (1.11) — (1.13). Однако здесь в (1.13) необходимо учесть, что  $K_{eq}(x_*/x) \gg K_{eq}^{3/2}$ . Отношение интенсивности диффузионных процессов к интенсивности реакций вновь дается формулой (1.14) с той лишь разни-

цей, что в данном случае это отношение имеет величину

$$K_{eq}^{1/2} x_{..}/x \gg K_{eq}^{1/2}.$$

Таким образом, здесь также имеем дело со скомпенсированными реакциями, интенсивность которых в каждом из направлений может быть как больше, так и меньше интенсивности диффузионных процессов в зависимости от величины отношения  $x_{..}/x$ .

В этой связи интересно сравнить величину  $\Sigma R_f$  — суммарную интенсивность реакций, протекающих в узкой области реакций, и  $\Sigma R_s$  — суммарную интенсивность реакций в одном из направлений в остальной части слоя смешения. Используя полученные выше оценки, нетрудно получить, что

$$\Sigma R_f \sim n_s^2 c_s \alpha \sigma_{el} \delta^3 Y_e^2 \Delta^{-2}, \quad \Sigma R_s \sim n_s^2 c_s \alpha \sigma_{el} K_{eq}(T_s) Y_e^2 \Delta$$

В результате имеем

$$R = \frac{\Sigma R_s}{\Sigma R_f} \sim \frac{K_{eq}(T_s) \Delta^3}{\delta^3} \sim K_{eq}(T_s) \frac{x}{x_0}$$

Следовательно, для  $x \gg x_0$  реакции происходят в основном в области толщиной  $\delta$  (которая, правда, близка здесь к толщине всего слоя смешения). При  $x \sim x_0 \sim x_0/K_{eq} \gg x_0$ ,  $x_0 \ll x_{..}$  интенсивности реакций сравниваются по порядку величины. При  $x \sim x_{..}$  величина  $R \sim K_{eq}^{-1/2} \gg 1$ , и, несмотря на это, вследствие отмеченной выше скомпенсированности, реакции вне области толщиной  $\delta$  очень слабо влияют на течение.

Наконец, рассмотрим течение ниже по потоку от сечения  $x \sim x_{..} \gg x_0 \gg x_0$ , где в области реакций становится необходимым учет обратной реакции.

В этом случае оценки (1.7) и (1.8) остаются, очевидно, без изменений. Не изменятся при этом и оценки (1.11) — (1.13). В результате анализа всех этих выражений можно заключить, что здесь имеют место соотношения

$$\delta \sim K_{eq}^{1/2} \Delta, \quad Y_{A_f} \sim Y_{B_f} \sim K_{eq}^{1/2} Y_e, \quad Y_{C_s} \sim Y_{D_s} \sim Y_e \\ T_s \sim T_e + Y_e Q h^{-1}, \quad |[K_{eq}(T_s) - (\delta/\Delta)^2]| \sim K_{eq}(T_s) x_{..} x^{-1} \ll K_{eq}(T_s)$$

Таким образом, концентрации компонентов в области реакций при таких  $x$  являются почти равновесными. Отличие течения в области реакций с толщиной  $\delta$  от течения в остальной части слоя смешения здесь заключается в основном в том, что согласно (1.11) — (1.13) вне области реакций степень отклонения концентраций от равновесных существенно меньше, чем внутри, и определяется так:

$$|[K_{eq}(T_s) - \varphi]| \sim K_{eq}^{1/2} x_{..} x^{-1} \ll K_{eq}^{1/2}$$

2. Проанализируем теперь к каким погрешностям в решении приводит принятие тех или иных предположений при расчете процесса смешения реагирующих газов.

Чтобы нагляднее был ход рассуждений, разберем прежде всего классический пример. Пусть обтекается тело с характерным размером  $L$  потоком газа при  $M = O(1)$ . Если бы не было пограничного слоя, то во внешнем течении неучет вязкости вносил погрешность  $\epsilon \sim l/L = O(Re^{-1})$ . Если теперь рассмотреть пограничный слой в первом приближении, то неучет взаимодействия слоя с внешним потоком вносит погрешность  $O(Re^{-1/2})$ . Чтобы в решении получить ту же погрешность, что и в отсутствие пограничного слоя, т. е.  $O(\epsilon)$ , необходимо учитывать эффекты второго порядка: взаимодействие слоя с невязким потоком, скольжение, кривизну поверхности и т. п. При учете во внешнем течении членов  $O(\epsilon)$ , обусловленных вязкостью газа,

в пограничном слое уравнений Навье – Стокса уже недостаточно и необходим учет ряда барнеттовских и супербарнеттовских слагаемых в переносных свойствах. Такое положение обусловлено, как известно, тем, что характерный размер слоя (его толщина) в  $Re^{1/2}$  раз меньше характерного размера внешнего течения.

Аналогичная ситуация имеет место и в рассматриваемом течении. Толщина слоя смешения  $\Delta \sim x\epsilon^{1/2}$ ,  $\epsilon = l_s x^{-1}$ , а толщина области реакций  $\delta \sim x\epsilon^{3/2} (\alpha Y_e)^{-1/2}$ . Поэтому присутствие этой области в течении должно привести к существенному возрастанию величины ошибок в решении в случае принятия тех или иных упрощающих предположений. Если реакций в слое смешения нет или тонкая область реакций отсутствует (например, совпадает со всем слоем смешения), то в расчете течения в первом приближении, как и в случае с пограничным слоем, была бы допущена ошибка  $O(\epsilon^{1/2})$ .

Возникающие при наличии тонкой области реакций погрешности в решении априори можно разделить на два класса, как обусловленные принципиально различными причинами.

Во-первых, при конечных концентрациях реагентов  $Y_{Ae}$  и  $Y_{Be}$  и конечной вероятности реакций  $\alpha$  толщина области реакций  $\delta$  приближается по величине к длине пробега молекул ( $\delta \sim l_s^*$ ). В этом случае точность самого макроскопического описания на основе газодинамических уравнений низка. Поэтому величина погрешности из-за пренебрежения не навье-стоксовскими членами в переносных свойствах должна расти с увеличением  $\alpha_1 = \alpha Y_e$ , что подтверждается более детальным рассмотрением (см. ниже).

Во-вторых, в случае «размытой» области реакций, когда  $\alpha_1 \ll 1$ , введение модели «поверхности реакций» или модели тонкой области реакций с соответствующими упрощениями в газодинамических уравнениях, очевидно, может сильно огрублять картину течения. Это должно приводить к росту величины погрешностей, связанных с подобными упрощениями, при уменьшении  $\alpha_1$ .

Действительно, согласно полученному выше концентрации реагентов в узкой области реакций имеют величину порядка  $(\delta / \Delta)$  по отношению к концентрациям в слое смешения и во внешнем течении, что для ламинарного смешения совпадает по величине с

$$l_s^{1/2} x^{-1/2} \alpha_1^{1/2} \simeq (\epsilon / \alpha_1)^{1/4}.$$

В классической модели «поверхности реакций» концентрации реагентов на этой поверхности полагаются равными нулю [2]. Тем самым неучет структуры узкой области реакций приводит в решении к ошибкам порядка  $(\epsilon / \alpha_1)^{1/4}$  по сравнению с единицей.

Аналогичную оценку можно получить, рассматривая энергетический баланс области реакций: ошибка в определении температуры внутри нее и, следовательно, на самой «поверхности реакций» имеет величину порядка  $(\epsilon / \alpha_1)^{1/4}$ , если пользоваться упомянутой моделью [6].

Из-за весьма сильной зависимости констант скоростей реакций от температуры указанная ошибка может привести к погрешностям основного порядка. Например, если  $Y_e \sim (\epsilon / \alpha_1)^{1/2} \ll 1$ , то согласно (1.8) в определении скорости обратной реакции будет допущена конечная ошибка.

Поскольку  $\alpha_1 \ll 1$ , то нетрудно видеть, что в случае использования модели «поверхности реакций» достичь точности решения  $O(\epsilon^{1/4})$  принципиально невозможно. Поэтому в такой постановке теряет смысл, например, построение упомянутого выше второго приближения к решению, обладающего указанной точностью.

Если учесть в первом приближении структуру тонкой области реакций толщиной  $\delta$ , но не учитывать химические реакции в остальной части слоя смешения, а также не учитывать концентрацию того реагента, кото-

рого с данной стороны от области реакций мало, то, как было показано выше, в решении может быть допущена ошибка порядка  $(\varepsilon/\alpha_1)^{2/3}$ .

Такая же по величине ошибка в решении будет допущена, если в уравнениях, описывающих структуру области реакций, не учитывать конвективные члены и члены, обусловленные вязкостью газа.

Ошибка  $O((\varepsilon/\alpha_1)^{2/3})$  может быть больше или меньше ошибки  $O(\varepsilon^{1/4})$ , допускаемой в решении без учета взаимодействия слоя смешения с внешним потоком. Обе ошибки равны, если  $\alpha_1 \sim \varepsilon^{1/4}$ . Поэтому для  $\alpha_1 < \varepsilon^{1/4}$  при получении решения в целом с погрешностью  $O(\varepsilon^{1/4})$ , необходим учет перечисленных выше факторов.

Если принять во внимание, что даже для очень быстрых реакций  $\alpha \sim 10^{-2}$ , а типичное значение  $\varepsilon \sim 10^{-4} - 10^{-6}$ , то становится ясным, что учет не только структуры области реакций, но и реакций в остальной части слоя смешения и т. д. может быть весьма важен.

В [5], например, учет структуры был проведен на основе решения уравнений, полученных в результате соответствующих упрощений уравнений Навье — Стокса. Однако точность получаемого таким образом решения не была проанализирована.

При  $\alpha_1 > \varepsilon^{1/4}$  построение решения с точностью до членов  $O(\varepsilon^{1/4})$  возможно при учете лишь первого приближения к решению о структуре области реакций. Однако точность его будет существенно хуже точности соответствующего решения в слое смешения без реакций.

Для построения решения с погрешностью  $O(\varepsilon)$  для описания области реакций уже недостаточно навье-стоксовских уравнений и необходимо учитывать барнеттовские и супербарнеттовские слагаемые в переносных свойствах.

В [9-13] были получены некоторые результаты по барнеттовскому и супербарнеттовскому приближениям к функции распределения молекул простого газа и газовой смеси. Основываясь на этих результатах, и в частности на результатах работ [12, 13] по супербарнеттовскому приближению для вектора потока тепла, оценим вклад супербарнеттовских членов в решение рассматриваемой задачи<sup>1</sup>.

Обозначим через  $\lambda \sim n l c k$  коэффициент теплопроводности. Тогда величина градиента по  $y$  от  $y$ -компоненты вектора потока тепла в области реакций определяется в основном выделением тепла в химической реакции, т. е.

$$\frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \sim n_s l_s c_s k \frac{\Delta T_0}{\delta^2} \sim n_s^2 c_s \sigma_s \alpha Y_s^2 \frac{\delta^2}{\Delta^2} Q$$

откуда  $\Delta T_0 \sim T_s (\varepsilon/\alpha_1)^{1/4}$  (этот результат уже приводился выше). Здесь  $\Delta T_0$  — характерная величина изменения температуры поперек области реакций.

Величину супербарнеттовских членов, входящих в уравнение энергии и зависящих от градиента температуры, в соответствии с этим оценим следующим образом:

$$\frac{m T_s}{k p_s^2} \frac{\partial}{\partial y} \lambda^3 \frac{\partial^3 T}{\partial y^3} \sim \frac{n_s l_s k c_s \Delta T_0}{\delta^2} \left( \frac{l_s^2}{\delta^2} \right) \sim \frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \left( \frac{\varepsilon}{\alpha_1} \right)^{1/4} \alpha_1$$

Поэтому их вклад  $(\Delta T_0)_{SB}$  в изменение температуры поперек области реакций определится следующим образом:

$$(\Delta T_0)_{SB} \sim \Delta T_0 (l_s/\delta)^2 \sim T_s (\varepsilon/\alpha_1)^{3/4} \alpha_1 \sim T_s \varepsilon^{3/4} \alpha_1^{1/4}$$

<sup>1</sup> Исходя из результатов работ [9-11], можно показать, что барнеттовские члены здесь менее существенны.



В результате видим, что при  $\alpha_1 \gg \epsilon$  решение, полученное без учета супербарнеттовских членов в уравнениях, описывающих область реакций, является менее точным, чем точность уравнений Прандтля, справедливых с погрешностью порядка  $\epsilon$  в остальной части слоя смешения (если в этих уравнениях учесть химические реакции и присутствие реагента, поступающего в рассматриваемую часть слоя смешения из течения с противоположной стороны области реакций). Рассмотрение решения уравнения Больцмана в области реакций, которое проведено во второй части работы, полностью подтвердило высказанные здесь соображения о роли супербарнеттовских членов.

3. В результате проведенного выше анализа можно сделать следующие выводы:

1) классическая модель «поверхности реакций» справедлива, если параметры течения таковы, что константа равновесия  $K_{eq}$  при температуре  $T_s$ , определяемой соотношением (1.8), много меньше единицы, и если выполняются оба неравенства (1.10);

2) если условие  $K_{eq}(T_s) \ll 1$  выполнено, то в случае сильного разбавления реагентов нейтральным по отношению к реакции компонентом или в случае малой по сравнению с единицей величины вероятности реакции  $\alpha$  химические процессы сначала протекают во всем объеме слоя смешения и лишь существенно ниже по потоку (см. неравенства (1.6) и (1.10)) область реакций становится значительно тоньше слоя смешения;

3) в течении существует сечение  $x_*$ , ниже которого по потоку необходим учет обратной реакции при решении задачи о структуре тонкой области реакций;

4) химическая реакция (1.1) протекает не только внутри тонкой области с толщиной  $\delta$ , определяемой соотношениями (1.3) и (1.5), но и вне этой области в слое смешения, однако взаимная скомпенсированность прямой и обратной реакций приводит к тому, что реакционные члены выпадают из уравнений, описывающих главное приближение к решению в слое смешения вне области реакций;

5) использование для решения рассматриваемой задачи классической модели «поверхности реакций», в случае выполнения условий ее применимости (см. 1)), приводит к погрешностям в решении  $\sim (\epsilon/\alpha_1)^{1/2}$ , что существенно превышает по величине точность уравнений, описывающих слой смешения вне области реакций;

6) пренебрежение химическими процессами вне тонкой области реакций, равно как и пренебрежение величиной концентрации того реагента, которого с данной стороны от области реакций мало, приводит в решении к ошибкам порядка  $(\epsilon/\alpha_1)^{1/2}$ ;

7) пренебрежение в уравнениях, описывающих структуру области реакций, конвективными членами и членами, ответственными за влияние вязкости, также приводит в решении к ошибкам порядка  $(\epsilon/\alpha_1)^{1/2}$ ;

8) неучет в уравнениях, описывающих структуру области реакций, членов, соответствующих более высоким приближениям к решению уравнения Больцмана, чем навье-стоксовское (именно барнеттовских и супербарнеттовских), приводит к погрешностям порядка  $\epsilon^{1/2} \alpha_1^{-1}$ .

Поступила 18 X 1977

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Зельдович Я. Б. К теории горения неперемешанных газов. Ж. техн. физ., 1949, т. 19, вып. 10.
- 2. Вильямс Ф. А. Теория горения. М., «Наука», 1971.
- 3. Денисон М., Дулей Д. Горение химически активных возгоняющихся поверхно-

- стей при образовании ламинарного пограничного слоя. В сб. Газодинамика и теплообмен при наличии химических реакций. М., Изд-во иностр. лит., 1962.
4. *Hofland R., Mirels H.* Flame-sheat analysis of C. W. diffusion type chemical lasers. I. Uncoupled radiation. II. Coupled radiation. *AIAA Journal*, 1972, vol. 10, No. 4, 10.
  5. *Linan A.* On the structure of laminar diffusion flames. Inst. Nac. Techn. Aeronaut. Techn. Rept. № FM 63-2. (Clearing-house Feder. Scient. and Techn. Inform. No. AD-432822), Madrid, 1963.
  6. *Williams F. A.* Theory of combustion in laminar flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, vol. 3, Palo Alto, Calif, 1971.
  7. *Абрамович Г. Н., Крашенинников С. Ю., Секундов А. Н., Смирнова И. П.* Турбулентное смещение газовых струй. М., «Наука», 1974.
  8. *Shackleford W. L., Witte A. B., Broadwell J. E., Trost J. E., Jacobs T. A.* Experimental measurements in supersonic reacting, (F+H<sub>2</sub>) mixing layers, *AIAA Journal*, 1974, vol. 12, No. 8.
  9. *Burnett D.* The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas. *Proc. London Math. Soc., Ser. 2.*, 1935, vol. 40, No. 5.
  10. *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
  11. *Шавалиев М. Ш.* Барнеттовское приближение в многокомпонентных газовых смесях. Тр. 3-й Всесоюзной конференции по динамике разреженных газов. Новосибирск, 1969.
  12. *Рудяк В. Я.* О высших приближениях метода Чепмена – Энскога. Тр. 4-й Всесоюзной конференции по динамике разреженного газа и молекулярной газовой динамике. М., ЦАГИ, 1977.
  13. *Шавалиев М. Ш.* Некоторые результаты по барнеттовскому и супербарнеттовскому приближениям. Тр. 4-й Всесоюзной конференции по динамике разреженного газа и молекулярной газовой динамике. М., ЦАГИ, 1977.
-