

УДК 533.6.011+536.14

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО
ТЕЧЕНИЯ СМЕСИ $H_2O-H_2-O_2$ В ПРОФИЛИРОВАННОМ СОПЛЕ**

ГОРДЕЕВ В. В., ЛЕВИН В. А., СТАРИК А. М.

Возможность получения инверсии заселенностей колебательных уровней молекулы H_2O при быстром охлаждении продуктов экзотермической реакции горения молекулярного водорода в кислороде обсуждалась в работах [1, 2]. В [3] был проведен детальный анализ кинетики колебательного энергообмена в смесях $H_2O-H_2-O_2$ при их охлаждении в сверхзвуковых соплах и определены возможные значения инверсной заселенности и энергии, запасаемой в единице массы смеси на инверсных переходах. При этом расчеты проводились в приближении одномерного течения. Однако, как было показано в [4-6], особенности реального течения смесей $CO_2-N_2-H_2O(He)$ и N_2O-N_2-He в профилированных соплах могут приводить к существенной неравномерности показателя усиления в поперечном сечении сопла. Это особенно важно учитывать при экспериментальном исследовании усиливающих свойств среды внутри сопла и сравнении результатов измерений с расчетом [7]. Неравномерность показателя усиления проявляется в большей степени для смесей с малым временем релаксации [5]. Поэтому учет неоднородного характера расширения смесей $H_2O-H_2-O_2$, в которых скорости релаксации нормальных колебаний молекул аномально велики, может оказаться необходимым.

В данной работе в приближении двумерного течения неравновесного газа рассмотрены процессы формирования инверсии на колебательно-вращательных переходах молекулы H_2O при расширении смесей $H_2O-H_2-O_2$ в плоском профилированном сопле и проводится сравнение с одномерной теорией.

Для расчета поля неравновесного течения в области, ограниченной контуром сопла, как и в [5-7], использовался метод расчета двумерных неравновесных течений, основанный на решении обратной задачи теории сопла. При этом в качестве нулевого приближения использовалось распределение плотности вдоль выделенных струек тока, полученное из расчета равновесного течения, поле параметров в котором рассчитывалось так же, как в [5].

Отметим, что при вычислении распределений плотности значение показателя адиабаты принималось равным $\kappa=1,29$. Это значение было получено из оценок, проведенных для рассматриваемых в работе составов смеси и параметров торможения с учетом неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы по соотношению

$$\kappa=1+\left[\frac{3}{2}+\sum_{i=1}^l \gamma_i+\frac{3}{2}\sum_{i=l+1}^M \gamma_i+\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^M \gamma_i\left(\frac{\theta_{ij}}{T_{ij}}\right)^2 \frac{r_{ij}y_{ij}}{(1-y_{ij})^2}\right]^{-1} \quad (1)$$

Здесь γ_i — мольная доля i -го компонента в смеси, l — число молекулярных компонентов из линейных жестких молекул, M — полное число молекулярных компонентов, n — число типов колебаний в i -м компоненте, θ_{ij} и T_{ij} — характеристическая и локальная колебательные температуры для j -го типа колебаний, $y_{ij}=\exp(-\theta_{ij}/T_{ij})$, r_{ij} — кратность вырождения j -й моды.

Конкретный вид уравнений колебательной кинетики для смесей $H_2O-H_2-O_2$ приведен в [3]. Значения констант скоростей элементарных

процессов выбирались с учетом рекомендаций работ [3, 8–10]. Интегрирование одномерных уравнений вдоль выделенных струек тока проводилось с использованием неявной разностной схемы второго порядка точности [11].

Вычисленные значения неравновесных параметров позволяют определить также параметры, характеризующие способность среды излучать электромагнитные волны, — показатель усиления и энергию, запасаемую в единице массы газа на инверсном переходе. При вычислении этих величин предполагалось, что вращательные степени свободы молекулы H_2O находятся в равновесии с поступательными. Вращательная энергия $E(I, K_a, K_c)$ молекулы H_2O , которая является асимметричным волчком, характеризуется тремя квантовыми числами — I, K_a, K_c [12]. Первое из них определяет полный угловой момент вращения, а остальные — его проекции на ось вытянутого и сплюсненного симметричного волчка. Для молекулы H_2O зависимость $E(I, K_a, K_c)$ от квантовых чисел можно с хорошей точностью аппроксимировать выражением

$$E(I, K_a, K_c) \approx E(I, K_a) = \frac{1}{2}(B+C)I(I+1) + \left[A - \frac{1}{2}(B+C) \right] K_a^2 \quad (2)$$

Здесь A, B, C — вращательные постоянные: $A = 5,54 \cdot 10^{-15}$ эрг, $B = 2,89 \cdot 10^{-15}$ эрг, $C = 1,85 \cdot 10^{-15}$ эрг [12].

В дальнейшем будем интересоваться величиной показателя усиления для наиболее интенсивного перехода R -ветви $001(6_{33}) \rightarrow 020(5_{50})$. Коэффициент Эйнштейна для него был определен в [13] — $A_{mn} = 6,0 \text{ с}^{-1}$. Учитывая, что все колебательные состояния в молекуле H_2O не вырождены, выражение для показателя усиления для колебательно-вращательных переходов R -ветви можно представить в виде

$$k_v = \frac{\lambda_0^3}{8\pi} \sqrt{\frac{\mu_{\text{H}_2\text{O}}}{2\pi RT}} A_{mn} \frac{2I'-1}{Q} H(a, y) \delta N_{\gamma_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{\rho A_0}{\mu} \\ \delta N = y_3 \exp\left(-\frac{E(I', K_a')}{kT}\right) - y_2^2 \exp\left(-\frac{E(I, K_a)}{kT}\right), \\ Q = \prod_{p=1}^3 (1-y_p) 2 \sqrt{\frac{\pi}{ABC}} (kT)^3 \quad (3)$$

Здесь k — постоянная Больцмана, λ_0 — длина волны в центре линии исследуемого перехода, $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$ и μ — молекулярные веса молекул H_2O и смеси соответственно, R — универсальная газовая постоянная, T — поступательная температура, I' — вращательное квантовое число верхнего состояния лазерного перехода, $H(a, y)$ — функция Фойхта, ρ — плотность, A_0 — число Авогадро, индексы $p=1, 2, 3, 4, 5$ отвечают симметричному, деформационному, асимметричному типам колебаний молекулы H_2O и колебаниям молекул H_2 и O_2 соответственно.

При определении функции Фойхта параметр a , характеризующий отношение столкновительного и доплеровского уширения контура спектральной линии, вычислялся по формуле

$$a = \frac{\rho A_0}{\mu} \frac{2\lambda_0}{\sqrt{\pi^3}} \sum_{i=1}^M \sigma_i \gamma_i \sqrt{\frac{\mu_i + \mu_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_i}} \quad (4)$$

Сечения ударного уширения σ_i принимались равными газокинетическим. Величина выводимой из потока удельной энергии излучения опре-

делялась по соотношению

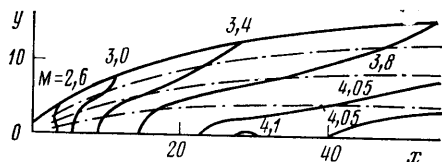
$$N_n^m = \frac{R}{\mu} \theta_{mn} \gamma_{H_2O} (e_3 - e_3')$$

$$e_3' = y_2^2 \left\{ \exp \left(\frac{E(I, K_a) - E(I', K_a')}{kT} \right) - y_2^2 \right\}^{-1}, \quad e_3 = \frac{y_3}{1 - y_3} \quad (5)$$

Здесь θ_{mn} — частота перехода в центре линии, выраженная в °К.

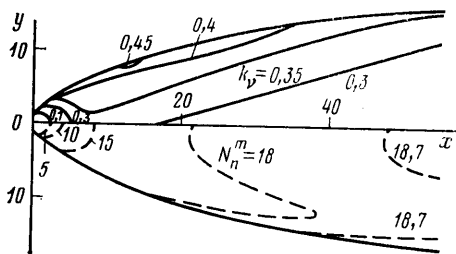
Анализ особенностей неоднородного расширения смеси $H_2O-H_2-O_2$ будем проводить на примере течения в плоском профилированном сопле с геометрической степенью расширения $\varepsilon=16$ и высотой критического сечения $h_*=0,2$ мм. Контуры дозвуковой и сверхзвуковой частей сопла

приведены в [5]. На фиг. 1 показано поле чисел Маха в сверхзвуковой части рассматриваемого сопла (штрихпунктиром показаны линии тока). В силу осевой симметрии изображена лишь верхняя область течения.

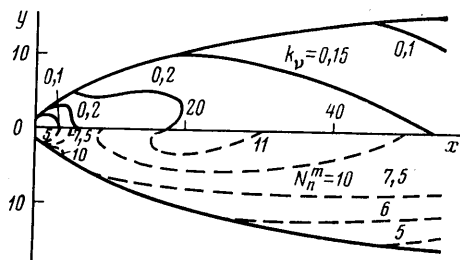


Фиг. 1

Рассмотрим сначала процессы формирования инверсии в потоке



Фиг. 2



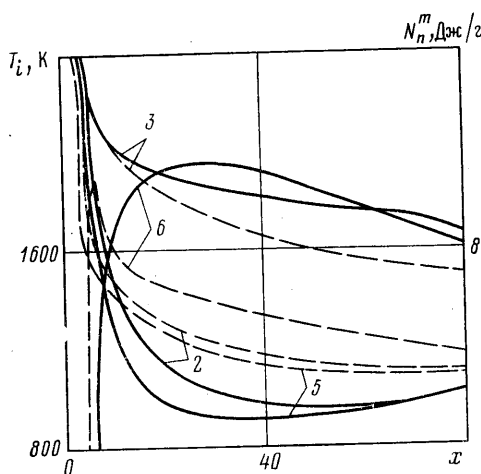
Фиг. 3

однокомпонентного газа — H_2O . На фиг. 2 представлены распределения показателя усиления (сплошные линии) и удельной энергии излучения (штриховые линии) для перехода $001(6_{33}) \rightarrow 020(5_{50}) - \lambda_0=28$ мкм в области, ограниченной контуром сопла, для водяного пара с параметрами $T^*=2500^\circ K$ и $P^*=1$ ата. Видно, что уже в начальной области сверхзвукового течения достигается значительная величина показателя усиления ($k_v \sim 0,1$ см $^{-1}$) и запасаемой на инверсном переходе удельной энергии излучения ($N_n^m \sim 5$ дж/г). Дальнейшее ускорение потока и уменьшение его поступательной температуры приводит вследствие большой скорости релаксации энергии деформационных колебаний к интенсивному расселению уровня 020 и увеличению значений k_v и N_n^m . При этом максимальное значение показателя усиления достигается на пристеночной струйке тока — $0,45$ см $^{-1}$. На осевой струйке величины k_v не превышает $0,33$ см $^{-1}$. Указанная неравномерность объясняется более высокими значениями плотности газа, а следовательно, и большей плотностью инверсных частиц в пристеночной области. Распределение N_n^m по поперечной координате более равномерно. Неравномерность показателя усиления уменьшается по мере ускорения потока и в выходном сечении сопла ($x=60$) незначительна (фиг. 2).

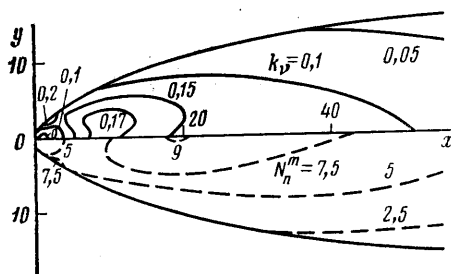
Присутствие молекулярного водорода в парах воды, как было показано в [3], приводит к резкому увеличению скорости дезактивации состоя-

ний 100 и 001 молекулы H_2O и как следствие к уменьшению значений показателя усиления и удельной энергии, запасаемой на инверсном переходе. Неоднородный характер течения в профилированных соплах приводит в этом случае к новым характерным особенностям в распределениях неравновесных параметров среды и, в частности, к резкому увеличению неравномерности k_v и N_n^m по поперечной координате. Это иллюстрирует фигура 3, на которой представлены результаты расчета течения смеси H_2O-H_2 ($\gamma_{H_2O}=0,95$; $\gamma_{H_2}=0,05$) с $T^*=2500$ К и $P^*=1$ ата в исследуемом сопле. При этом меняется и характер распределения инверсных характеристик по координате y . Так, если для чистого водяного пара максимальные значения k_v достигаются в пристеночной области, то для смеси $H_2O-H_2=0,95:0,05$, наоборот, на оси сопла. Такая закономерность характерна и для удель-

ной энергии излучения, максимальные значения которой составляют 11,5 Дж/г (на оси), а минимальные — всего ~ 5 Дж/г (на стенке). Резко увеличилась по сравнению с предыдущим случаем и неравномерность в распределениях $k_v(y)$ и $N_n^m(y)$ в выходном сечении сопла.



Фиг. 4



Фиг. 5

ной энергии излучения, максимальные значения которой составляют 11,5 Дж/г (на оси), а минимальные — всего ~ 5 Дж/г (на стенке). Резко увеличилась по сравнению с предыдущим случаем и неравномерность в распределениях $k_v(y)$ и $N_n^m(y)$ в выходном сечении сопла.

Рассмотренные особенности течения объясняются тем, что при меньшем значении скорости потока в пристеночной области (см. фиг. 1) и большей плотности сталкивающихся частиц в смесях с повышенными скоростями релаксации (H_2O-H_2) происходит значительно более интенсивная по сравнению с чистым водяным паром диссипация энергии симметричных и асимметричных колебаний молекулы H_2O . В то же время при больших значениях скорости в приосевой области потери колебательной энергии значительно меньше. Это иллюстрирует фигура 4, на которой показано изменение колебательных T_i ($i=2; 3$) и поступательной T (5) температур, а также N_n^m (6) по координате x для осевой (сплошные линии) и пристеночной (пунктирные линии) струек тока. Видно также, что большая скорость охлаждения газа в начале сверхзвуковой части сопла в пристеночной области приводит к более раннему, чем на оси сопла, возникновению инверсии на переходе 001(6₃₃) \rightarrow 020(5₅₀).

При дальнейшем увеличении молярной доли H_2 в смеси, а следовательно, и скорости релаксации энергии симметричного и асимметричного типов колебаний особенности течения, обуславливающие увеличение неравномерности параметров по координате y и уменьшение величины k_v и N_n^m на пристеночной струйке тока, проявляются более заметно. Так, при течении смеси H_2O-H_2 ($\gamma_{H_2O}=0,9$; $\gamma_{H_2}=0,1$) с теми же начальными параметрами в пристеночной области возникает зона с низким показателем уси-

ления (фиг. 5). В то же время на оси достигаются сравнительно высокие значения k_v ($k_v(\max) = 0,175 \text{ см}^{-1}$) и N_n^m ($N_n^m(\max) = 9 \text{ Дж/г}$).

Проведенные расчеты течения смесей $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ показали, что добавление молекулярного кислорода к парам воды не приводит к увеличению неравномерности инверсных характеристик потока и к значительному уменьшению величины показателя усиления и выводимой из потока энергии излучения. Картины распределения линий постоянных значений k_v и N_n^m в сопле при этом получаются такими же, как и при течении чистого водяного пара. Некоторое ухудшение инверсных характеристик среды объясняется уменьшением числа инверсных частиц с увеличением содержания O_2 в смеси.

Таким образом, проведенный в двумерном приближении анализ течения смесей $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2-\text{O}_2$ в профилированных соплах минимальной длины показал, что в смесях с большими скоростями релаксации ($\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$) существует значительная неравномерность показателя усиления и выводимой из потока удельной энергии излучения по поперечной координате, которая сохраняется вплоть до выхода из сопла.

В связи с этим представляет интерес определить, какую погрешность вносит одномерное описание движения газа при вычислении значений k_v и N_n^m . Однако сравнение указанных параметров, полученных в одномерном и двумерном приближениях, корректно проводить лишь в случае двух эквивалентных одномерных потоков. Для определения параметров осредненного потока, эквивалентного одномерному, для колебательно-неравновесных течений наряду с принятыми в газовой динамике параметрами сохранения — энергией, импульсом и расходом [13] — необходимо требовать равенства колебательных энергий для единицы массы i -х компонент в эквивалентном одномерном потоке и в осредненном двумерном. Тогда, используя теорему о среднем, систему алгебраических уравнений для вычисления параметров эквивалентного одномерного потока в каждом сечении разностной сетки можно записать в виде

$$\langle \rho(x) \rangle \langle u(x) \rangle = \frac{1}{2y_+} \int_{-y_+}^{y_+} \rho(x, y) u(x, y) dy \quad (6)$$

$$\langle p(x) \rangle + \langle \rho(x) \rangle \langle u(x) \rangle^2 = \frac{1}{2y_+} \int_{-y_+}^{y_+} [p(x, y) + \rho(x, y) u^2(x, y)] dy \quad (7)$$

$$C_p^{i+r} \langle T(x) \rangle + \sum_{i=1}^M \langle e_v^i(x) \rangle + \frac{1}{2} \langle u(x) \rangle^2 = \\ = \frac{1}{2y_+} \int_{-y_+}^{y_+} \left[C_p^{i+r} T(x, y) + \sum_{i=1}^M e_v^i(x, y) + \frac{1}{2} w^2(x, y) \right] dy \quad (8)$$

$$\langle p(x) \rangle = \frac{R}{\mu} \langle \rho(x) \rangle \langle T(x) \rangle \quad (9)$$

$$\langle e_v^i(x) \rangle = \frac{1}{2y_+} \int_{-y_+}^{y_+} \sum_{j=1}^n \frac{R\theta_{ij}}{\mu} \frac{r_{ij} y_{ij}(x, y)}{(1 - y_{ij}(x, y))} \gamma_i dy \\ C_p^{i+r} = \frac{R}{\mu} \left(\frac{5}{2} + \sum_{i=1}^l \gamma_i + \frac{3}{2} \sum_{i=l+1}^M \gamma_i \right) \quad (10)$$

Здесь $\langle \rho(x) \rangle$, $\langle p(x) \rangle$, $\langle u(x) \rangle$, $\langle T(x) \rangle$ — плотность, давление, скорость и температура эквивалентного одномерного потока, y_+ — ордината стенки сопла, $w = \sqrt{u^2 + v^2}$ (где u и v — проекции скорости на координаты x и y).

Параметры $\langle y_{ij}(x) \rangle$ для осредненного потока определяются по соотношению

$$\langle y_{ij}(x) \rangle = \frac{\langle e^{ijv}(x) \rangle}{\langle e_v^{ij}(x) \rangle + (R\theta_{ij}/\mu)\gamma_i}$$

Показатель усиления среды и величина выводимой из потока удельной энергии излучения в эквивалентном потоке рассчитываются с использованием $\langle y_{ij}(x) \rangle$, $\langle \rho(x) \rangle$, $\langle p(x) \rangle$, $\langle u(x) \rangle$, $\langle T(x) \rangle$ по формулам (3)–(5).

Расчеты показали, что для рассмотренных ранее смесей $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2(\text{O}_2)$ интегральные характеристики инверсной среды, показатель усиления k_v и удельная энергия излучения N_n^m , рассчитанные в одномерном приближении, практически совпадают с соответствующими значениями k_v и N_n^m в осредненном двумерном потоке. Максимальное расхождение для рассматриваемых в работе режимов не превышает 10% для k_v и N_n^m . Это говорит о том, что, несмотря на значительную неравномерность параметров в поперечном сечении сопла, для оценки эффективности газодинамических лазеров на парах воды с соплами, рассчитанными на безотрывное течение, можно с хорошей точностью пользоваться одномерной теорией. Однако при сравнении экспериментальных результатов, например, по измерению k_v на оси сопла с расчетом одномерное описание потока непригодно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шелепин Л. А. Некоторые тенденции в развитии лазеров. — Тр. Физ. ин-та АН СССР, 1975, т. 83.
2. Решетняк С. А. Вопросы кинетики в лазерах на плазме и вращательных переходах. — Тр. Физ. ин-та АН СССР, 1975, т. 83.
3. Левин В. А., Старик А. М. Колебательный энергообмен в смесях $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2-\text{O}_2$ при быстром охлаждении в сверхзвуковых соплах. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1980, № 2.
4. Левин В. А., Туник Ю. В. Движение релаксирующей смеси газов в двумерных плоских соплах. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1976, № 1.
5. Вирюков А. С., Сериков Р. И., Старик А. М., Шелепин Л. А. Влияние неоднородностей параметров потока на характеристики рабочих сред CO_2 - и N_2O -газодинамических лазеров. — Квантовая электроника, 1977, т. 4, № 4.
6. Бреев В. В., Минин С. Н., Пирумов У. Г., Шевченко В. Р. Течение смеси газов с релаксацией колебательной энергии в плоских и осесимметричных соплах. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1977, № 5.
7. Бриган А. Б., Сериков Р. И., Старик А. М., Хайлов В. М. Экспериментальное исследование течения колебательно-неравновесного газа в профилированном сопле. — Изв. АН СССР. МЖГ, 1980, № 1.
8. Bass H. E., Olson J. R., Amme R. C. Vibrational relaxation in H_2O vapor in the temperature range 373–946 K. — J. Acoust. Soc. America, 1974, vol. 56, No. 5.
9. Bass H. E., Shields F. D. Vibrational relaxation and sound absorption in $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ mixtures. — J. Acoust. Soc. America, 1974, v. 56, No. 3.
10. Shin H. K., Vibrational relaxation of water molecular near room temperature. — J. Chem. Phys., 1978, v. 69, No. 3.
11. Крайко А. Н. О расчете неравновесного течения газа в соплах Лаваля. — Научн. тр. Ин-та мех. МГУ, 1973, № 21.
12. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Изд-во иностр. лит., 1949.
13. Седов Л. И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1976.

Москва

Поступила в редакцию
17.III.1980