

УДК 532.529:541.12

© 2001 г. А.М. САВЕЛЬЕВ, А.М. СТАРИК

ДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ СУЛЬФАТНЫХ АЭРОЗОЛЕЙ В СТРУЯХ РЕАКТИВНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Проведен численный анализ влияния образования SO_2 , SO_3 , HSO_3 и H_2SO_4 в тракте реактивного двигателя на динамику формирования сульфатных $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$ аэрозолей в спутной струе дозвукового самолета. Показано, что присутствие на срезе сопла помимо SO_2 также SO_3 , HSO_3 и H_2SO_4 приводит к увеличению скорости нуклеации и интенсификации процесса коагуляции. При этом в струе образуется значительное количество крупных (с радиусом более 9 нм) частиц, которое зависит от содержания серы в топливе.

Исследования процессов образования аэрозольных частиц в струях до- и сверхзвуковых самолетов получили широкое развитие в последнее время в связи с проблемой антропогенного загрязнения атмосферы и влиянием авиации на атмосферные процессы и климат. Измерения, проведенные в следе самолета в полетных условиях, показали, что более 75% всех эмитируемых в атмосферу аэрозольных частиц составляют жидкие сульфатные аэрозоли [1–5]. Для определения роли эмитируемых реактивными двигателями аэрозолей необходимо иметь детальную информацию об их количестве, размерах и составе. В силу сложности экспериментального измерения этих характеристик в полетных условиях основным инструментом исследования является численное моделирование. При этом для адекватного описания экспериментальных данных используемые в расчетах физические модели должны включать все основные механизмы формирования не только аэрозольных частиц, но и кинетику образования S-содержащих соединений как во внутреннем тракте двигателя, так и в ближнем поле струи [6–8].

Несмотря на значительное число работ, посвященных анализу механизмов формирования сульфатных аэрозолей в струе двигателя [8–11], это вопрос еще не решен. Так, до сих пор не выяснены причины значительного расхождения между значениями степени конверсии SO_2 в SO_3 и H_2SO_4 (ϵ) и плотностью сульфатных аэрозолей, измеренных в полетных экспериментах [2] и полученных при численном моделировании [7–9]. Экспериментальные значения ϵ лежат в пределах (12–45)%, а расчетные – в пределах (0,5–2)%. Одной из возможных причин этого несоответствия является неправильный учет образования SO_3 в тракте двигателя [10].

Однако вплоть до настоящего времени детального численного анализа влияния этого эффекта на величину степени конверсии SO_2 в SO_3 и H_2SO_4 и динамику образования достаточно крупных (с диаметром ~10 нм) аэрозолей проведено не было. Исследованию этих вопросов посвящена данная работа.

1. Основные уравнения для описания физико-химических процессов. Рассмотрим процессы в спутной изобарической струе, которая характерна для реактивных двигателей дозвуковой авиации. В общем случае модели, применяемые для анализа физико-химических превращений в струях реактивных двигателей, должны включать не только достаточно подробное описание турбулентного перемешивания горячих газов,

истекающих из сопла двигателя, со спутным потоком атмосферного воздуха, но и детальное описание микрофизики конденсации и кинетики химических реакций.

При этом в случае значительных пересыщений водяного пара и образования достаточно крупных (~1 мкм) водных аэрозолей и частиц льда необходимо принимать во внимание изменение газодинамических параметров вследствие процессов конденсации. Подробная классификация различных режимов конденсации в турбулентных изобарических струях в этом случае проведена в [12]. Однако в широком диапазоне режимов полета современных самолетов реализуются условия, при которых пересыщение по парам H₂O либо меньше, либо незначительно больше единицы [8–11]. Нуклеация здесь идет только за счет присутствия в смеси паров H₂SO₄, пересыщение по которым существенно выше. Основную долю аэрозольных частиц в струе при этом составляют сульфатные аэрозоли и изменением температуры и других газодинамических параметров среды из-за малой доли конденсирующихся паров воды, а также небольшого числа льдовых частиц можно пренебречь [7–10]. Кроме того, в струе химические реакции протекают только с участием малых составляющих продуктов сгорания и атмосферного воздуха и тепловыделение в этих реакциях мало [13].

В данной работе рассматриваются именно такие режимы. Поэтому для расчета динамики физико-химических процессов в спутной струе использовался квазиодномерный подход, в котором полагается, что изменение газодинамических параметров потока вследствие протекания неравновесных химических реакций и процессов конденсации пренебрежимо мало [8–11]. Для вычисления распределений плотности и температуры вдоль оси струи использовалась методика, разработанная в [14] для расчета спутных турбулентных струй, истекающих из сопла с дозвуковой или сверхзвуковой скоростью. Эта методика позволяет также рассчитать изменение площади поперечного сечения струи $F(x)$ и проводить анализ как для одноконтурных, так и двухконтурных двигателей.

Расчет кинетики образования и роста сульфатных аэрозолей проводится на основе эйлера метода фракций. Суть метода заключается в том, что весь возможный спектр образующихся капель разбивается на фракции с номером γ ($\gamma = 1, \dots, \Gamma$) так, чтобы радиус капли γ -й фракции r удовлетворял условию $r_\gamma < r < r_{\gamma+1}$. В рамках рассматриваемого квазиодномерного подхода уравнения сохранения массы i -го компонента в газовой фазе и сохранения массы γ -й фракции имеют вид

$$\frac{d}{dx}(\rho_i u F) = \frac{d}{dx}(\rho_{i\infty} u F) + F m_i (G_i - J_{ci}) \quad (1.1)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho_\gamma u F) = \frac{d}{dx}(\rho_{\gamma\infty} u F) + F \Psi_\gamma \quad (1.2)$$

$$G_i = \sum_{q=1}^L S_{iq} + \sum_{l=1}^{L_1} J_{il}, \quad S_{iq} = (\alpha_{iq}^- - \alpha_{iq}^+) [R_q^+ - R_q^-]$$

$$R_q^{+(-)} = k_q^{+(-)} \prod_{j=1}^{n_q^{+(-)}} N_j^{\alpha_{iq}^{+(-)}}, \quad J_{il} = \sum_k \beta_{il} I_{lk} N_k$$

$$\Psi_\gamma = \chi_0 \delta_{1\gamma} + \chi_\gamma + \omega_\gamma, \quad N_i = \rho_i / m_i$$

Здесь m_i – масса молекул (атомов) i -го компонента; ρ_i и ρ_γ – осредненные по площади струи парциальная плотность i -го компонента и плотность γ -й фракции; $\rho_{i\infty}$ – постоянная парциальная плотность i -го компонента на границе струи (в окружающей атмосфере); u – постоянная скорость воздуха в системе координат, связанной с летательным аппаратом; L и L_1 – число химических реакций и реакций фотодиссоциации, приводящих к образованию (уничтожению) i -го компонента; α_{iq}^+ , α_{iq}^- и β_{il} – стехиометрические коэффициенты q -й химической реакции и l -й реакции фото-

диссоциации; $n_q^{+(-)}$ – число компонентов, участвующих в прямой (+) и обратной (–) реакция; I_{lk} – скорость фотодиссоциации k -го компонента в l -й реакции; J_{ci} – скорость трансформации i -го компонента из газовой фазы в конденсированную; χ_0 , χ_γ и ω_γ определяют соответственно скорость изменения массы капель вследствие нуклеации (она отлична от нуля только для первой фракции), конденсации и коагуляции в γ -й фракции. В рамках эйлерова метода фракций выражения для χ_0 , χ_γ и ω_γ можно представить в виде [11]

$$\chi_0 = m_* I, \quad m_* = \frac{4}{3} \pi r_*^3$$

$$\chi_\gamma = \frac{2m_{\gamma-1} J(m_{\gamma-1}) Z_{\gamma-1}}{m_{\gamma-1}^2 - m_{\gamma-2}^2} - \frac{2m_\gamma J(m_\gamma) Z_\gamma}{m_\gamma^2 - m_{\gamma-1}^2} + \frac{2J(\langle m_\gamma \rangle) Z_\gamma}{m_{\gamma-1} + m_\gamma}$$

$$\langle m_\gamma \rangle = \frac{m_\gamma + m_{\gamma-1}}{2}$$

$$\omega_\gamma = \frac{1}{2} \sum_{\gamma_1=1}^{\Gamma} \sum_{\gamma_2=1}^{\Gamma} \alpha_{\gamma_1 \gamma_2} A_{\gamma_1 \gamma_2} Z_{\gamma_1} Z_{\gamma_2} - Z_\gamma \sum_{\gamma_1=1}^{\Gamma} B_{\gamma_1} Z_{\gamma_1}$$

$$A_{\gamma_1 \gamma_2} = \frac{K(\langle m_{\gamma_1} \rangle, \langle m_{\gamma_2} \rangle)}{(m_{\gamma_1}^2 - m_{\gamma_1-1}^2)(m_{\gamma_2}^2 - m_{\gamma_2-1}^2)}, \quad B_{\gamma_1} = \frac{1}{\langle m_{\gamma_1} \rangle} K(\langle m_\gamma \rangle, \langle m_{\gamma_1} \rangle)$$

$$\alpha_{\gamma_1 \gamma_2} = \int_{m_{\gamma_1-1}}^{m_{\gamma_1}} dm_1 \int_{m_{\gamma_2-1}}^{m_{\gamma_2}} \varphi(m_1, m_2) dm_2$$

$$\varphi(m_1, m_2) = \begin{cases} m_1 + m_2 & \text{при } (m_1 + m_2) \in [m_{\gamma-1}, m_\gamma] \\ 0, & \text{при } (m_1 + m_2) \notin [m_{\gamma-1}, m_\gamma] \end{cases}$$

Здесь I – скорость бинарной нуклеации, r_* – радиус критического зародыша, $J(m_\gamma)$ – скорость конденсационного роста капель в γ -й фракции, $K(m_\gamma, m_{\gamma_1})$ – ядро коагуляции при столкновении капель с массами m_γ и m_{γ_1} . Значения I и r_* вычислялись с учетом образования гидратов на основе теории бинарной нуклеации [15–17]. Скорость конденсационного роста капель рассчитывалась в предположении мгновенного установления равновесного состава капли [11]. Ядро коагуляции для броуновской диффузии (анализ показал, что другие возможные механизмы столкновений капель заметного вклада в скорость коагуляции не вносят) записывается в виде [18]

$$K(m_1, m_2) = 4\pi[D_B(r_1) + D_B(r_2)](r_1 + r_2)$$

$$D_B = \frac{kT}{6\pi\eta r} f(\text{Kn})$$

Здесь k – постоянная Больцмана; T и ρ – температура и плотность газа; η – коэффициент кинематической вязкости. Функция $f(\text{Kn})$ учитывает влияние разреженности газовой среды по мере уменьшения размера капли ($\text{Kn} = l/r$, l – длина свободного пробега молекулы, r – радиус капли); она вычислялась так же, как и в [11].

Кинетическая модель неравновесных химических процессов в струе двигателя включала 237 реакций с участием 70 компонентов: H_z , N_z ($z = 1, 2$), O_x ($x = 1, \dots, 3$), H_2O_z , H_2O , NO_x , HNO_y ($y = 1, \dots, 4$), $\text{O}(\text{1D})$, $\text{O}(\text{3P})$, N_2O , N_2O_5 , CO_z , CH_q ($q = 3, 4$), CH_zO_x , HCN , CN , NCO , $\text{CH}_3\text{NO}_{z+1}$, SO_x , HSO_3 , H_2SO_4 , Cl_z , ClO_z , CF_2Cl_x , CCl_q , ClNO_3 , CH_{z+1}Cl , $\text{Cl}_2(\text{F})\text{CO}$, F_2 , ClF , HCl , HOCl [13]. Эта модель позволяет рассматривать химические превращения в струе, обусловленные не только охлаждением продуктов сгорания, эмитируемых из сопла двигателя, но и смешением этих компонентов с воздухом,

содержащим малые атмосферные компоненты. Значения J_{ci} отличны от нуля только для уравнений, характеризующих изменение концентрации H_2O ($i = 1$) и H_2SO_4 ($i = 2$) в газовой фазе

$$J_{ci} = J_{ip} + J_{id}$$

$$J_{1p} = \frac{F\chi_0}{1+C}, \quad J_{2p} = \frac{FC\chi_0}{1+C}, \quad C = \frac{\mu_2 x_*}{\mu_1(1-x_*)}, \quad J_{id}(i=1,2) = F \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \frac{\rho_{\gamma} J_{i}(m_{\gamma})}{\langle m_{\gamma} \rangle}$$

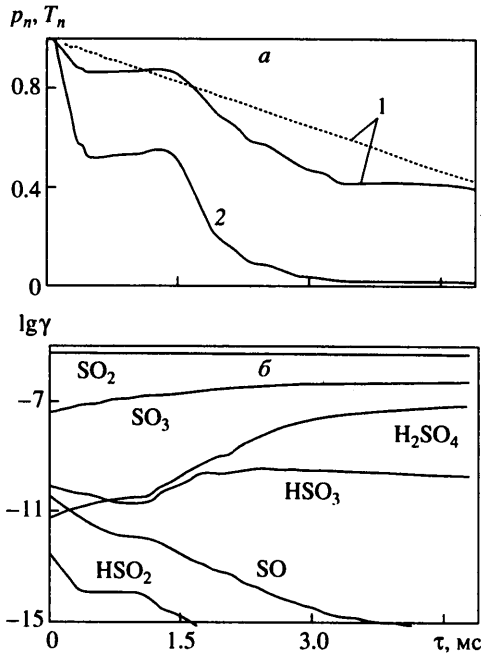
Здесь μ_i – молекулярная масса i -го компонента; x_* – мольная доля H_2SO_4 в за­родыше.

Граничными условиями для уравнений (1.1), (1.2) являются значения концентраций компонентов в газовой фазе и концентраций аэрозолей с радиусом r_{γ} соответственно на среде сопла и в атмосфере. Проблема правильного задания граничных условий является ключевой в рассматриваемой задаче. Как будет показано ниже, степень конверсии SO_2 в SO_3 и H_2SO_4 ($\epsilon = (N_{SO_3} + N_{H_2SO_4}) / N_{SO_2}$), а также скорость образования сульфатных аэрозолей и их распределение по размеру существенно зависят от соотношения концентраций SO_2 и SO_3 на срезе сопла. Важным параметром, определяющим скорость образования H_2SO_4 в газовой фазе, является концентрация ОН. Поскольку гидроксил участвует в различных химических реакциях образования Н-, N-, S- и даже С-содержащих компонентов, то для правильного определения концентрации SO_3 и H_2SO_4 необходимо либо экспериментальное измерение этих величин в выходном сечении сопла в полетных условиях, что в настоящее время не представляется возможным, либо численное моделирование трансформации химического состава продуктов сгорания во внутреннем тракте газотурбинного двигателя (турбина и сопло).

Для такого моделирования в данной работе использовалась методика, разработанная в [19]. Эта методика основана на совместном интегрировании одномерных уравнений газовой динамики и химической кинетики в каналах специальной формы, геометрически отображающих межлопаточный профиль рабочего колеса турбины и направляющего аппарата. Кинетическая схема, используемая для анализа неравновесных химических процессов в турбине и сопле, включает 273 обратимые реакции с участием следующих компонентов: H_2 , N_2 , O_x , NO_x , H_2O_2 , NO_x , HNO_y , N_xH_y , CO_2 , CH_x , CH_xO_2 , CN , HCN , NCO , H_2S , SO_x , S , HSO_3 , SO_3 , H_2SO_4 , CS_2 и COS .

Поскольку пересыщение по H_2O и H_2SO_4 в тракте двигателя не достигается, то аэрозоли в выходном сечении сопла отсутствуют. Концентрация сульфатных аэрозолей в стратосферном воздухе составляет менее 10^2 см^{-3} и их вкладом в образование аэрозолей в струе можно пренебречь [7–9]. Поэтому в данной работе полагалось $\rho_{\gamma\infty} = 0$. Значения γ_{∞} , соответствующие составу атмосферного воздуха, взяты из [20, 21].

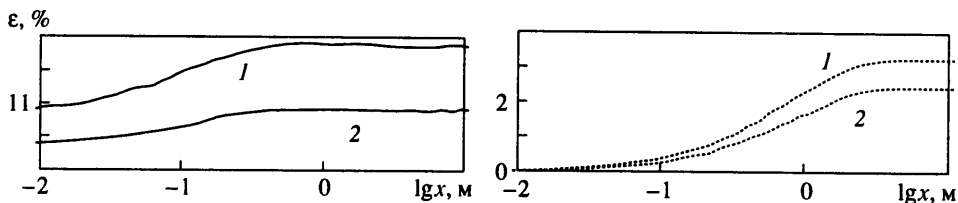
2. Результаты численного моделирования. Анализ влияния образования S-содержащих компонентов в тракте газотурбинного двигателя на динамику образования сульфатных аэрозолей в спутной струе проведем на примере использующегося на самолете В-747 двигателя RB211-524В в полетном режиме: высота $H = 10,7$ км и число Маха $M_{\infty} = 0,8$. Этот двигатель – двухконтурный с диаметром основного (первого) контура $d_1 = 87,6$ см, а внешнего (второго) контура $d_{II} = 175,1$ см. Газодинамические параметры на срезе сопла для первого контура (они получаются из расчета) равны: $T_1 = 598$ К, $u_1 = 473$ м/с, а для второго $T_{II} = 253,4$ К, $u_{II} = 316,3$ м/с. Давление на срезе сопла равно атмосферному $p_1 = p_{II} = p_{\infty} = 23,45$ кПа. Температура $T_{\infty} = 219,2$ К и скорость воздуха $u = 237$ м/с. Отметим, что такая конкретизация не налагает сколько-нибудь заметных ограничений на общность получаемых результатов. Все полученные выводы будут справедливы и для других дозвуковых реактивных самолетов, использующих в качестве топлива авиационный керосин.



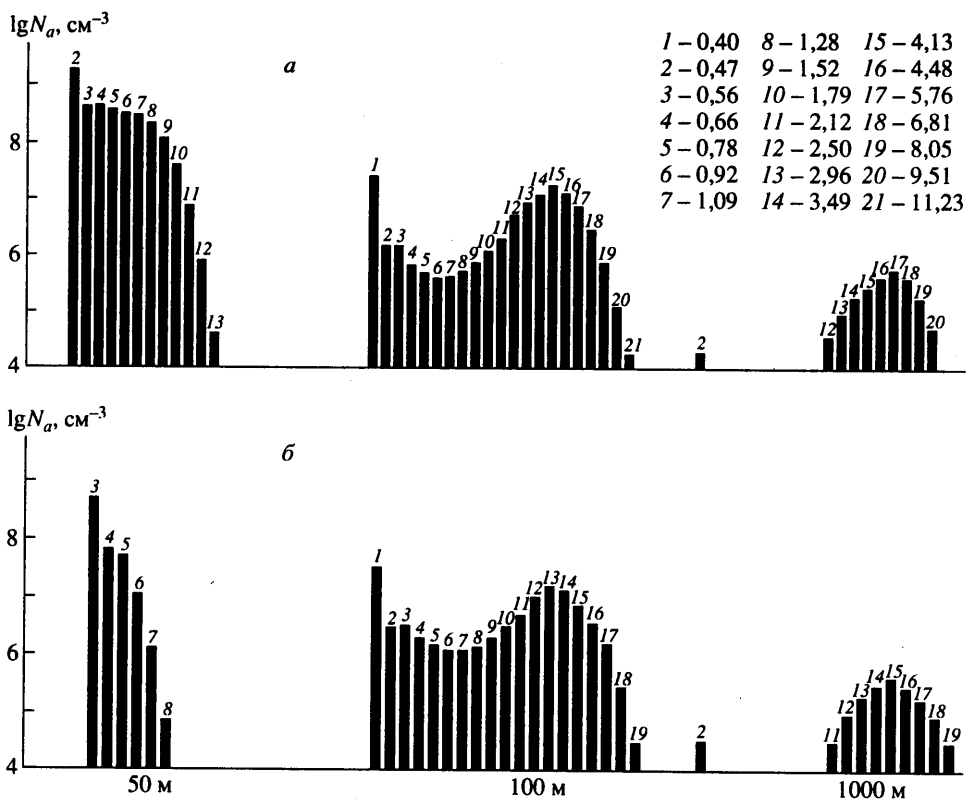
Фиг. 1. Относительное изменение температуры и давления (а) и мольных долей SO , SO_2 , SO_3 , HSO_2 , HSO_3 , H_2SO_4 (б) во внутреннем тракте основного контура газотурбинного двигателя при $S_f = 0,04\%$

Рассмотрим сначала, как меняются параметры и состав газа во внутреннем тракте основного контура на участке от среза камеры сгорания до выходного сечения сопла. Температура и состав смеси на срезе камеры сгорания были взяты из расчета неравновесного горения продуктов деструкции n -октана (топливо, моделирующее авиационный керосин) с воздухом при коэффициенте избытка воздуха $\alpha = 4$ в замкнутом адиабатическом реакторе при начальной температуре $T_C = 1000$ К и давлении $p_C = 1$ МПа. Содержание серы в топливе моделировалась введением в горючую смесь H_2S . Расчеты проводились для двух характерных значений весовой концентрации серы в топливе – минимального $S_f = 0,04\%$ и максимального $0,3\%$. Отметим, что при таком расчете получаемые значения индекса эмиссии (количество данного компонента в граммах на 1 кг топлива) NO_x ($\text{NO} + \text{NO}_2$) и SO_x ($\text{SO}_2 + \text{SO}_3$) достаточно хорошо соответствуют экспериментальным данным для авиационных двигателей [7, 21]. На фиг. 1 показано изменение безразмерных температуры $T_n = T/T_0$ (1), давления $p_n = p/p_0$ (2) и концентраций γ_i ($i = \text{SO}, \text{SO}_2, \text{SO}_3, \text{HSO}_2, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$) на участке от среза камеры сгорания до выходного сечения сопла (τ – время пребывания газа в элементах турбины и сопле) при содержании серы в топливе $S_f = 0,04\%$. Индекс ноль относится к значению параметров на срезе камеры сгорания: $T_0 = 1540$ К, $p_0 = 1,1$ МПа. Пунктирной прямой на фиг. 1, а показано изменение температуры по линейному закону, которое за недостатком информации используется при расчетах изменения состава в тракте двигателя по так называемым "ящичным" моделям.

Видно, что в тракте основного контура от камеры сгорания до среза сопла происходит существенное увеличение концентрации SO_3 , HSO_3 , H_2SO_4 и уменьшение концентраций SO_2 , SO , HSO_2 . При этом степень конверсии $\text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4$ возрастает с 0,7 до 11,7%. Наряду с изменением концентраций S-содержащих ком-



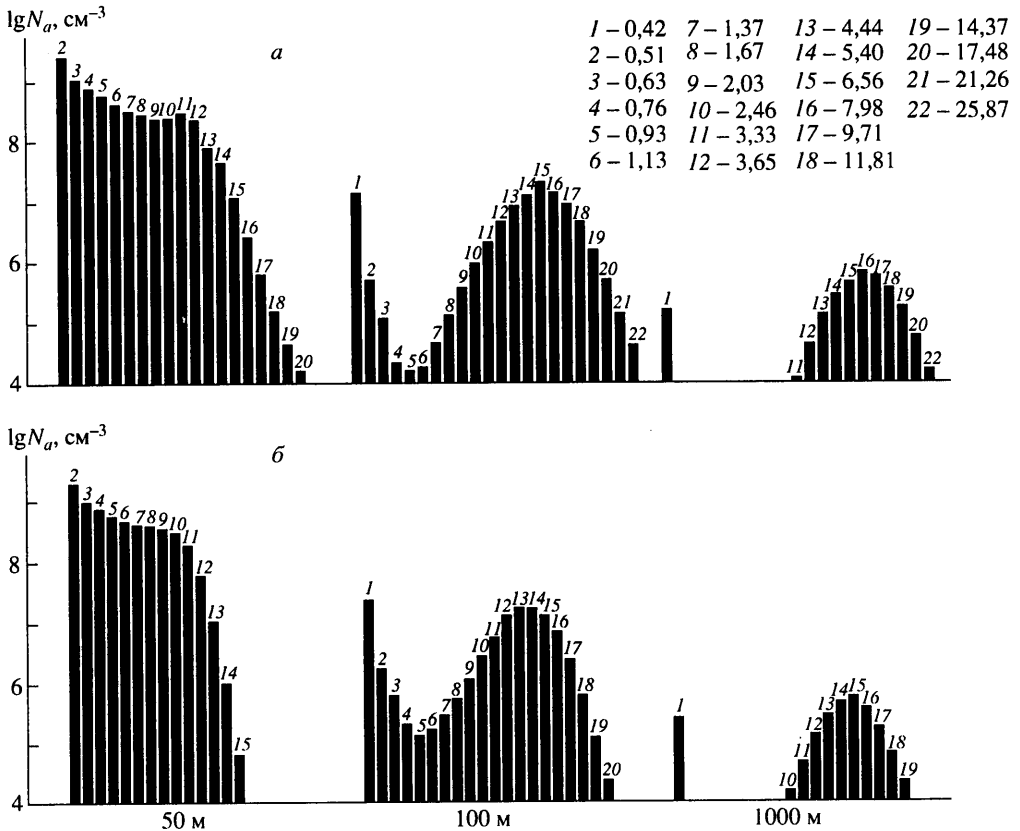
Фиг. 2. Изменение вдоль оси струи степени конверсии $\text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4$, когда все S-содержащие компоненты содержатся в выхлопе двигателя (сплошные кривые) и когда содержится только SO_2 (штриховые кривые) при $S_f = 0,04$ и $0,3\%$ (1 и 2)



Фиг. 3. Распределение сульфатных аэрозолей по размерам на различных расстояниях от среза сопла в струе самолета В-747 при $S_f = 0,04\%$, когда все S-содержащие компоненты присутствуют в выхлопе двигателя (а) и когда присутствует только SO_2 (б)

понентов в тракте двигателя значительно уменьшается концентрация таких сильных окислителей, как OH , HO_2 , O и возрастают концентрации NO_3 и HNO_2 .

Весьма важным при моделировании неравновесных химических процессов в тракте двигателя является корректное вычисление изменения температуры смеси в турбине и сопле. Анализ показывает, что расчет по "ящичной" модели с линейным профилем изменения T вдоль тракта приводит к значительному занижению концентраций SO_3 (в 3,5 раза), H_2SO_4 (в 4 раза) и ϵ (в 3,5 раза) и завышению концентраций OH , O и HO_2 (более чем в 2 раза) по сравнению с результатами вычисления изменения всех газодинамических параметров, состава газа и скорости газа по методике [19], которая дает профили $T(x)$ и $p(x)$, близкие к реальным (~10-15%).



Фиг. 4. То же, что на фиг. 3 при $S_f = 0,3\%$

Рассмотрим теперь, как влияет образование SO_3 и H_2SO_4 в тракте двигателя на степень конверсии SO_2 в SO_3 и H_2SO_4 и на динамику формирования сульфатных аэрозолей в реактивной струе. В более ранних работах [8–11] анализ динамики формирования аэрозольных частиц в струе проводился в предположении, что из всех S-содержащих компонентов только SO_2 эмитируется из сопла двигателя, а образование SO_3 , HSO_3 и H_2SO_4 в газовой фазе происходит вследствие охлаждения газа в спутной струе. Поэтому анализ проведем в сравнении именно с этим подходом. При этом будем полагать, что значения индекса эмиссии SO_2 и $SO_y = (SO_2 + SO_3 + HSO_3 + H_2SO_4)$ для рассматриваемых случаев одинаковы.

На фиг. 2 показано изменение вдоль оси струи величины ϵ для случая, когда все S-содержащие компоненты присутствуют на срезе сопла и когда в выхлопных газах содержится только SO_2 для двух значений $S_f = 0,04\%$ (1) и $0,3\%$ (2). Видно, что учет образования SO_3 , HSO_3 и H_2SO_4 в тракте двигателя приводит к увеличению степени конверсии $SO_2 \rightarrow SO_3 + H_2SO_4$ по сравнению со случаем, когда считается, что из всех S-содержащих компонентов только SO_2 присутствует на срезе сопла. Максимальная величина ϵ при этом достигается для $S_f = 0,04\%$ и составляет 13%, что вполне сопоставимо со значениями ϵ , соответствующими экспериментально измеренной плотности сульфатных аэрозолей в полетных условиях. Увеличение степени конверсии ϵ вниз по потоку связано с увеличением концентрации H_2SO_4 в результате химических превращений $SO_2 \rightarrow SO_3 \rightarrow H_2SO_4$. При этом возникают условия, при которых парциальное давление H_2SO_4 становится больше давления насыщения паров серной кисло-

Фиг. 5. Изменение плотности сульфатных аэрозолей с радиусом $r > 5, 9$ и 20 нм (1–3) при $S_f = 0,3\%$ (а) и $0,04\%$ (б), когда в выхлопе двигателя содержатся все S-содержащие компоненты (сплошные кривые) и когда содержится только SO_2 (штриховые кривые)

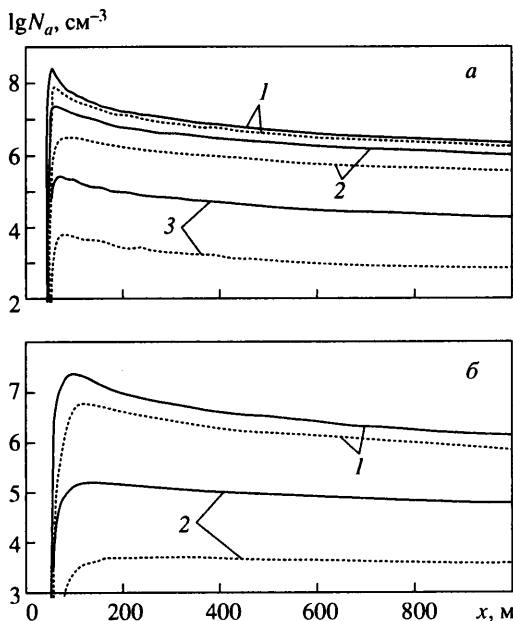
ты. В то же время пересыщение по парам воды на оси струи не достигается, т.е. нуклеация (образование зародышей) без присутствия H_2SO_4 на оси струи невозможна.

Следует отметить, что изменение полного числа аэрозольных частиц N_t слабо зависит от присутствия на срезе сопла $\text{SO}_3, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$, так же, впрочем, как и концентрации газовых составляющих смеси. Так, на расстоянии 70 м от среза сопла, где уже идет интенсивная коагуляция образовавшихся аэрозолей, значения N_t в случае, когда все S-содержащие компоненты присутствуют в выхлопе (первый подход) и когда присутствует только SO_2 (второй подход), различаются всего на 11% . Учет образования $\text{SO}_3, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$ в тракте двигателя влияет в основном на эволюцию функции распределения образующихся сульфатных аэрозолей по размерам.

На фиг. 3 и 4 показаны спектры частиц в различных сечениях струи самолета В-747 для двух рассматриваемых случаев (а соответствует первому подходу, б – второму) при $S_f = 0,04$ и $0,3\%$. Цифры 1–21 на гистограммах соответствуют номерам фракций, средние радиусы которых в нанометрах приведены в фигурах. Заметим, что при расчетах интервал размеров капель $[0, r_\Gamma]$, где $r_\Gamma = 224$ нм, разбивался по закону геометрической прогрессии со знаменателем 2. При этом сходимость достигается уже при $\Gamma = 30$. Из представленных на фиг. 3 и 4 распределений следует, что учет образования $\text{SO}_3, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$ в тракте двигателя приводит к тем же результатам, что и увеличение содержания серы в топливе – увеличению полного числа частиц в области интенсивной нуклеации ($x = 50$ м) и росту размера капель. Первое объясняется увеличением скорости нуклеации и конденсационного роста частиц вследствие повышения парциального давления паров H_2SO_4 , а второе – интенсификацией процесса коагуляции.

Поскольку в полетных экспериментах регистрируются обычно достаточно крупные частицы ($r > 5$ нм), то представляет интерес влияние образования $\text{SO}_3, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$ в тракте двигателя на концентрацию частиц с $r > 5$ нм в струе.

На фиг. 5 показано изменение плотности сульфатных аэрозолей N_a с $r > 5, 9, 20$ нм вдоль оси струи для $S_f = 0,3$ (а) и $0,04\%$ (б) в случае, когда на срезе сопла присутствуют все S-содержащие компоненты и когда в выхлопе присутствуют только SO_2 (сплошные и штриховые кривые). Видно, что учет образования $\text{SO}_3, \text{HSO}_3, \text{H}_2\text{SO}_4$ в тракте двигателя приводит к существенному (до 50 раз) увеличению плотности сульфатных аэрозолей с радиусом $r > 9$ нм. При большом содержании серы в топливе ($S_f = 0,3\%$) в струе образуются в значительном количестве ($N_a \approx 10^5 \text{ см}^{-3}$) крупные частицы с $r > 20$ нм. Максимальное количество крупных частиц формируется непосредственно за областью максимума скорости нуклеации ($x \approx 60\text{--}80$ м), а затем начинает медленно уменьшаться вниз по потоку вследствие значительного уменьшения скорости нуклеа-



ции и разбавления струи. Экстраполяция полученных в расчете значений N_a для частиц с $r > 9$ нм в область больших расстояний x (~5–10 км) показывает, что измеренная на этих расстояниях плотность крупных аэрозольных частиц $\sim(1,6-4,8) \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ удовлетворительно соответствует рассчитанным значениям N_a ($r > 9$ нм) только при учете образования SO_3 , HSO_3 , H_2SO_4 в тракте двигателя.

Заключение. При горении авиационных керосинов в продуктах сгорания помимо SO_2 могут присутствовать также SO_3 , SO , HSO_3 , H_2SO_4 и другие S-содержащие компоненты. Охлаждение продуктов сгорания в турбине и сопле приводит в результате целого комплекса химических реакций к окислению SO_2 и увеличению концентрации SO_3 , HSO_3 и H_2SO_4 при одновременном уменьшении концентрации OH , O , HO_2 к выходному сечению сопла. Степень конверсии SO_2 в SO_3 и H_2SO_4 может достигать при этом 11%. Присутствие в выхлопе двигателя помимо SO_2 также и SO_3 , HSO_3 , H_2SO_4 приводит к увеличению скорости нуклеации, последующей интенсификации коагуляции образовавшихся мелких частиц ($r \approx 1-2$ нм) и, как следствие, к формированию значительного количества крупных сульфатных аэрозолей с $r > 9$ нм даже при малом содержании серы в топливе ($S_f = 0,04\%$) и частиц с размером $r > 20$ нм при большом содержании серы в топливе ($S_f = 0,3\%$). При уточнении используемых в настоящее время моделей образования сульфатных аэрозолей в струях реактивных двигателей (например, учет возможного влияния ионов на процессы конденсации) необходимо принимать во внимание образование S-содержащих соединений в тракте двигателя.

Работа выполнена при финансовой поддержке Европейского Сообщества (Contract № ENV4-CT97-0620-CHEMICON).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hofmann D.J., Rosen J.M. Balloon observations of a particle layer injected by stratospheric aircraft at 23 km // *Geophys. Res. Lett.* 1978. V. 5. № 6. P. 511–514.
2. Fahey D.W., Keim E.R., Boering K.A. et al. Emission measurements of the Concorde supersonic aircraft in the lower stratosphere // *Science*. 1995. V. 270. № 5233. P. 70–74.
3. Shumann U., Ström J., Busen R. et al. In situ observations of particles in jet aircraft exhausts and contrails for different sulfur-containing fuels // *J. Geophys. Res.* 1996. V. 101. № D6. P. 6853–6869.
4. Poeschel R.F., Verma S., Ferry G.V. et al. Sulfuric acid and soot particles formation in aircraft exhaust // *Geophys. Res. Lett.* 1998. V. 25. № 10. P. 1685–1688.
5. Schroder F.P., Kärcher B., Petzold A. et al. Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes: In situ observations // *Geophys. Res. Lett.* 1998. V. 25. № 15. P. 2789–2792.
6. Lukachko S.P., Waitz I.A., Miake-Lye R.C. et al. Production of sulfate aerosol precursors in the turbine and exhaust nozzle of an aircraft engine // *J. Geophys. Res.* 1998. V. 103. № D13. P. 16.159–16.174.
7. Kärcher B., Fahey D.W. The role of sulfur emission in volatile particle formation in jet aircraft exhaust plume // *Geophys. Res. Lett.* 1997. V. 24. № 4. P. 389–392.
8. Brown R.C., Miake-Lye R.C., Anderson M.R. et al. Aerosol dynamics in near field aircraft plumes // *J. Geophys. Res.* 1996. V. 101. № D17. P. 22.939–22.953.
9. Gleitsmann G., Zellner R. The effects of ambient temperature and relative humidity on particle formation in the jet regime of commercial aircraft: A modelling study // *Atmosph. Environ.* 1998. V. 32. № 18. P. 3079–3087.
10. Brown R.C., Miake-Lye R.C., Anderson M.R., Kolb C.E. Effect of aircraft exhaust sulfur emissions on near field plume aerosols // *Geophys. Res. Lett.* 1996. V. 23. № 24. P. 3607–3610.
11. Зайчик Л.И., Лебедев А.Б., Савельев А.М., Старик А.М. Моделирование бинарной конденсации $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$ на основе эйлерова метода фракций // *Теплофизика высоких температур*. 2000. Т. 38. № 1. С. 81–90.
12. Ватажин А.Б., Лебедев А.Б., Мареев В.А. Математическое моделирование различных режимов конденсации в турбулентных изобарических струях // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1985. № 1. С. 59–67.

13. Лебедев А.Б., Старик А.М., Титова Н.С. Численное исследование неравновесных фотохимических процессов в спутной струе дозвукового самолета // Теплофизика высоких температур. 1998. Т. 36. № 1. С. 79–93.
14. Kozlov V.E., Secundov A.N., Smirnova I.P. Axisymmetric turbulent compressible jets in subsonic wakes // Fluid Mechanics-Soviet Research. 1988. V. 17. № 1. P. 93–101.
15. Jaecker-Voirol A., Mirabel P., Reiss H. Hydrates in supersaturated binary sulfuric acid-water vapor: A reexamination // J. Chem. Phys. 1987. V. 87. № 8. P. 4849–4852.
16. Jaecker-Voirol A., Mirabel P. Nucleation rate in a binary mixture of sulfuric acid and water vapor // J. Chem. Phys. 1988. V. 92. № 12. P. 3518–3521.
17. Kulmala M., Laaksonen A. Binary nucleation of water-sulfuric acid system: Comparison of classical theories with different H₂SO₄ saturation vapor pressures // J. Chem. Phys. 1990. V. 93. № 1. P. 696–701.
18. Волощук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 320 с.
19. Савельев А.М., Старик А.М., Титова Н.С. Исследование динамики образования экологически вредных газов в элементах газотурбинного двигателя // Теплофизика высоких температур. 1999. Т. 37. № 3. С. 495–503.
20. Shimazaki T. The photochemical time constants of minor constituents and their families in the middle atmosphere // J. Atmosph. Terr. Phys. 1984. V. 46. № 2. P. 173–191.
21. Tremmel H.G., Schlager H., Konopka P. et al. Observations and model calculations of jet aircraft exhaust products at cruise altitude and inferred initial OH emissions // J. Geophys. Res. 1998. V. 103. № D9. P. 10.803–10.816.

Москва

Поступила в редакцию
15.XII.1999