

**О ПРЕДСТАВЛЕНИИ ДИССОЦИИРОВАННОГО ВОЗДУХА  
В КАЧЕСТВЕ БИНАРНОЙ СМЕСИ ГАЗОВ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ  
ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ**

***H. A. Андимов***

(Москва)

При исследовании теплообмена и трения на поверхности тел, движущихся в атмосфере Земли с большими сверхзвуковыми скоростями, диссоциированный воздух обычно рассматривается как двухкомпонентная смесь атомов и молекул [1,2]. Для бинарной смеси газов диффузионный поток каждой компоненты определяется производной концентрации лишь собственной компоненты, поэтому сделанное допущение существенно упрощает решение уравнений пограничного слоя.

Однако очевидно, что данное упрощение следует рассматривать лишь как некоторое приближение, причем погрешность такого приближения невозможна оценить до тех пор, пока не будут получены точные решения исходной системы дифференциальных уравнений многокомпонентного пограничного слоя. Ниже сравниваются точные решения уравнений многокомпонентного пограничного слоя в диссоциированном воздухе с приближенными решениями, получаемыми при представлении воздуха в качестве бинарной смеси атомов и молекул.

**§ 1. Основные уравнения.** Рассматривается ламинарный пограничный слой в смеси  $O, O_2, N, N_2$  и  $NO$  для окрестности критической точки осесимметричного затупленного тела. Химическими реакциями внутри пограничного слоя и термодиффузией пренебрегается. Состояние газа на внешней границе пограничного слоя и на стенке считается равновесным.

После введения преобразования

$$\xi = \int_0^x \rho_w \mu_w u_e r^2 dx, \quad \eta = \frac{r u_e}{V^2 \xi} \int_0^y \rho dy$$

уравнения пограничного слоя принимают вид

$$(l f'')' + f f'' + \frac{1}{2} \left( \frac{\rho_e}{\rho} - f'^2 \right) = 0 \quad (1.1)$$

$$\left( \frac{c_p l}{P} \theta' \right)' + (c_p f - \sum c_{p_i} v_i) \theta'' = 0 \quad (1.2)$$

$$v_i' - f c_i' = 0 \quad (i = 1, \dots, N-1) \quad (1.3)$$

$$c_1 + \dots + c_N = 1, \quad v_1 + \dots + v_N = 0 \quad (1.4)$$

$$l = \frac{\rho \mu}{\rho_w \mu_w}, \quad \theta = \frac{T}{T_e}, \quad v_i = \frac{l \rho c_i V_i}{\mu \partial \eta / \partial y}$$

Здесь  $x$  и  $y$  — координаты, направленные вдоль поверхности и по нормали к ней;  $u$  — составляющая скорости вдоль оси  $x$ ;  $r$  — расстояние до оси симметрии тела;  $\rho$ ,  $T$ ,  $\mu$  и  $c_p$  — плотность, температура, вязкость и теплоемкость газа при постоянном давлении;  $c_i$  — весовая концентрация  $i$ -й компоненты;  $f$  — безразмерная функция тока;  $V_i$  — скорость диффузии  $i$ -й компоненты;  $v_i$  — безразмерный диффузионный поток  $i$ -й компоненты;  $P$  — число Прандтля. Штрихом обозначены производные по  $\eta$ , индекс  $w$  относится к значениям параметров на стенке, индекс  $e$  — на внешней границе пограничного слоя.

Связь между градиентами концентраций и скоростями диффузии дается соотношением Стефана — Максвелла [3], которое после перехода к весовым концентрациям и принятым в настоящей работе безразмерным переменным записывается в виде

$$c_i' + \frac{c_i}{M} M' = \kappa \sum_{j=1}^N \frac{M}{M_j} \frac{c_i v_j - c_j v_i}{D_{ij}} \quad (\kappa = \frac{\mu}{l\rho}) \quad (1.5)$$

где  $M$  — молекулярный вес,  $D_{ij}$  — коэффициенты бинарной диффузии.

Границные условия на непроницаемой поверхности и во внешнем потоке записываются следующим образом:

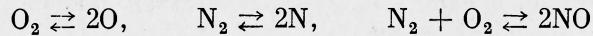
при  $\eta = 0$

$$\begin{aligned} f = 0, \quad f' = 0, \quad \theta = \theta_w, \quad \frac{c_O}{V^{c_{O_2}}} &= K_1 \sqrt{\frac{M_O}{2pM}} \\ \frac{c_N}{V^{c_{N_2}}} &= K_2 \sqrt{\frac{M_N}{2pM}}, \quad \frac{c_{NO}}{V^{c_{O_2} c_{N_2}}} = K_3 \sqrt{\frac{M_{NO}}{V^{M_{O_2} M_{N_2}}}} \\ v_O + v_{O_2} + \frac{M_O}{M_{NO}} v_{NO} &= 0 \end{aligned} \quad (1.6)$$

при  $\eta \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} f' \rightarrow 1, \quad \theta \rightarrow 1, \quad \frac{c_O}{V^{c_{O_2}}} &\rightarrow K_1 \sqrt{\frac{M_O}{2pM}}, \quad \frac{c_N}{V^{c_{N_2}}} \rightarrow K_2 \sqrt{\frac{M_N}{2pM}} \\ \frac{c_{NO}}{V^{c_{O_2} c_{N_2}}} &\rightarrow K_3 \sqrt{\frac{M_{NO}}{V^{M_{O_2} M_{N_2}}}}, \quad c_O + c_{O_2} + \frac{M_O}{M_{NO}} c_{NO} \rightarrow 0.231 \end{aligned} \quad (1.7)$$

Здесь  $K_1(T)$ ,  $K_2(T)$  и  $K_3(T)$  — константы равновесия реакций



При численном решении системы уравнений (1.1) — (1.5) для нахождения концентраций отдельных компонент использовались дифференциальные уравнения второго порядка, получаемые дифференцированием соотношений (1.5) с последующей подстановкой  $v_i'$  из уравнений (1.3):

$$c_i'' + a_i c_i' + b_i = 0 \quad (1.8)$$

где

$$\begin{aligned} a_i &= -B - f k_{ii}, \quad B = M \sum_{i=1}^N \frac{c_i'}{M_i} \\ b_i &= -\left( c_i B' + \sum_{j=1}^{N-1} k_{ij}' v_j + f \sum_{j \neq i} k_{ij} c_j' \right) \end{aligned}$$

Коэффициенты  $k_{ij}$  определяются из системы уравнений

$$c_i' - c_i B = \sum_{j=1}^{N-1} k_{ij} v_j$$

к которой сводится система (1.4) — (1.5).

В случае представления многокомпонентной смеси газов в качестве бинарной связь между диффузионным потоком и производной концентрации существенно упрощается

$$\kappa v_i = -D_{AM} c_i' \quad (1.9)$$

где  $D_{AM}$  — коэффициент бинарной диффузии атомно-молекулярной смеси.

В этом случае уже нет необходимости использовать уравнение (1.8), так как, подставляя соотношение (1.9) в уравнение (1.3), получим уравнение неразрывности  $i$ -й компоненты в обычной форме

$$\left( \frac{l}{P} L_{AM} c_i' \right)' + f c_i' = 0 \quad (1.10)$$

Также отпадает необходимость в использовании в качестве граничного условия на стенке условия непроницаемости поверхности для кислорода. Предположение о постоянстве коэффициента диффузии для всех компонент ликвидирует возможность диффузионного разделения воздуха [4] и поэтому можно рассчитывать равновесный состав из условия, что содержание кислорода у стенки равно его содержанию во внешнем потоке, т. е. граничное условие на поверхности тела принимает вид:

при  $\eta = 0$

$$\begin{aligned} f &= 0, \quad f' = 0, \quad \theta = \theta_w, \quad \sqrt{\frac{c_O}{c_{O_2}}} = K_1 \sqrt{\frac{M_O}{2pM}} \\ \frac{c_N}{\sqrt{c_{N_2}}} &= K_2 \sqrt{\frac{M_N}{2pM}}, \quad \frac{c_{NO}}{\sqrt{c_{O_2} c_{N_2}}} = K_3 \frac{M_{NO}}{\sqrt{M_{O_2} M_{N_2}}} \\ c_O + c_{O_2} + \frac{M_O}{M_{NO}} c_{NO} &= 0.231 \end{aligned} \quad (1.11)$$

Таким образом, в настоящей работе для получения точного решения разрешалась система уравнений (1.1), (1.2), (1.4), (1.5) и (1.8) с граничными условиями (1.6) и (1.7), а для получения так называемого «бинарного» решения разрешалась система уравнений (1.1), (1.2), (1.4), (1.5) и (1.10) с граничными условиями (1.7) и (1.11). При этом в качестве коэффициента бинарной диффузии атомно-молекулярной смеси рассматривался коэффициент диффузии атомарного кислорода в молекулярный

$$D_{AM} = D_{OO},$$

**§ 2. Термодинамические свойства и коэффициенты переноса.** Оба решения основывались на одинаковом способе расчета термодинамических свойств и коэффициентов переноса смеси. Для расчета энталпии отдельных компонент и логарифмов констант равновесия использовались данные работы [5], которые были аппроксимированы полиномами четвертой степени.

Коэффициенты переноса рассчитывались тем же способом, который использовался в работах [4, 6]. При расчете коэффициентов вязкости отдельных компонент и коэффициентов бинарной диффузии интегралы соударений определялись на основании предположения, что взаимодействие и атомов, и молекул описывается потенциалом Леннарда — Джонса. Коэффициенты теплопроводности отдельных компонент рассчитывались по вязкости этих компонент с учетом поправки Эйкена на передачу энергии колебательными и вращательными степенями свободы

$$\lambda_i = 0.857 \mu_i \left( \frac{1}{M_i} + 1.55 c_{p_i} \right)$$

Коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси в целом определялись по соответствующим свойствам отдельных компонент при помощи приближенных формул

$$\mu = \left( \sum \frac{c_i}{\mu_i} \right)^{-1}, \quad \lambda = 0.5 \left[ \sum x_i \lambda_i + \left( \sum \frac{x_i}{\lambda_i} \right)^{-1} \right] \quad (2.1)$$

где  $x_i$  — молярные концентрации.

Использовать для расчета вязкости и теплопроводности смеси более строгие формулы, предлагаемые в работе [3], нецелесообразно. Это объясняется тем, что в результирующие уравнения (1.1), (1.2) и др. входит вязкость и теплопроводность смеси в целом, но не отдельных компонент. Коэффициенты переноса отдельных компонент при высоких температурах не могут быть рассчитаны в настоящее время с большой степенью точности, и вносимая при этом погрешность заведомо превышает погрешность, вносимую при расчете вязкости и теплопроводности смеси по приближенным формулам (2.1).

**§ 3. Результаты расчета теплообмена и трения.** Численные расчеты проводились в диапазоне изменения температуры торможения от  $300^\circ$  до  $6000^\circ$  К для двух значений температуры поверхности —  $300^\circ$  и  $3000^\circ$  К и для двух значений давления торможения за ударной волной — 0.1 и 10 атм.

По результатам численных расчетов строился комплекс

$$N^o = \frac{N}{R^{0.5} P^{0.4} l_e^{0.4}}, \quad N = \frac{\alpha x}{\lambda_w}, \quad R = \frac{\rho_w u_e x}{\mu_w}$$

характеризующий теплообмен, а также вторая производная функции тока на стенке, характеризующая поверхностное трение. Здесь  $N$ ,  $R$  — числа Нуссельта и Рейнольдса. В таблице приведены значения  $N^o$  и  $f_w''$ , полученные с помощью точного решения и с помощью бинарного решения. Там же приведены значения  $N^o$ , рассчитанные по известной формуле Фэя—Ридделла, полученной в работе [2] в результате аппроксимации численных решений при постоянных числах Прандтля и Льюиса  $L$  с использованием формулы Сатерленда для вязкости воздуха

$$N^o = 0.763 \left[ 1 + (L^{0.63} - 1) \frac{h_d}{h_e - h_w} \right] \quad (h_d = \sum (c_{i_e} - c_{i_w}) h_{iw})$$

Здесь  $h_d$  — «энталпия диссоциации».

Входящее в эту формулу число Льюиса находилось по значению коэффициента бинарной диффузии атомарного кислорода в молекулярный при условиях на стенке

$$L = \left( \frac{\rho D_{O_2} c_p}{\lambda} \right)_w$$

Расчеты показали, что при  $T_w = 300^\circ$  К,  $L = 1.38$  и не зависит от давления, в то время как при  $T_w = 3000^\circ$  К  $L = 1.32$  в случае  $p = 0.1$  атм и  $L = 1.43$  в случае  $p = 10$  атм.

Приведенные в таблице результаты показывают, что с точки зрения расчета теплообмена представление воздуха в качестве бинарной смеси атомов и молекул приводит к погрешности, не превышающей 3%. Если принять во внимание неопределенность коэффициентов переноса воздуха при высоких температурах, то указанная погрешность представляется несущественной. Точность аппроксимации численного решения формулой Фэя — Ридделла (3.1), в которую подставляется значение числа Льюиса для бинарной диффузии атомарного кислорода в молекулярный при условиях на стенке, составляет 4—7%, причем последнее значение соответствует случаям, когда тепловой поток направлен от поверхности к газу, а также низким давлениям, когда степень диссоциации азота велика.

Что касается погрешности расчета трения в случае представления воздуха в виде бинарной смеси, то во всем диапазоне проведенных расчетов она не превышает 0.5%.

В работе [6] для расчета коэффициентов диффузии в многокомпонентном воздухе использовалась формула Уилке. Эта формула по своей природе не обеспечивает выполнения условий (1.4). Однако при введении соответствующих поправок (одна из которых предлагалась в работе [6]) указанный метод дает коэффициенты теплообмена, близкие к точному решению.

**§ 4. Диффузионное разделение воздуха.** В работе [4] уже отмечался факт диффузионного разделения воздуха в пограничном слое при наличии диссоциации. В той же табл. 1 приведена суммарная концентрация кислорода на стенке

$$c_{O^*} = c_O + c_{O_2} + \frac{M_O}{M_{NO}} c_{NO}$$

Таблица 1

$p$ , атм	$T_e$ , °К	$T_w$ , °К	№			$f_w''$		$c_{\theta}^* w$
			точное решение	бинарное решение	(Ф-ла 3.1)	точное решение	бинарное решение	
0.1	4000	300	0.803	0.807	0.836	0.453	0.455	0.272
0.1	6000	300	0.814	0.792	0.872	0.405	0.405	0.248
0.1	300	3000	0.862	0.882	0.810	3.157	3.159	0.217
0.1	2500	3000	0.843	0.861	0.854	0.984	0.984	0.219
0.1	4000	3000	0.837	0.849	0.856	0.762	0.762	0.257
0.1	6000	3000	0.840	0.822	0.873	0.612	0.613	0.234
10	1000	300	0.755	0.755	0.763	0.616	0.616	0.231
10	2000	300	0.746	0.746	0.765	0.535	0.535	0.231
10	3000	300	0.744	0.745	0.776	0.505	0.505	0.233
10	4000	300	0.771	0.773	0.806	0.473	0.474	0.245
10	5000	300	0.787	0.790	0.822	0.447	0.448	0.265
10	6000	300	0.793	0.790	0.827	0.432	0.433	0.267
10	300	3000	0.838	0.850	0.777	3.064	3.070	0.230
10	1000	3000	0.793	0.805	0.782	1.491	1.495	0.230
10	2000	3000	0.784	0.803	0.794	1.059	1.061	0.230
10	2500	3000	0.791	0.811	0.806	0.961	0.962	0.231
10	3500	3000	0.825	0.845	0.845	0.832	0.833	0.237
10	4000	3000	0.840	0.857	0.860	0.778	0.779	0.247
10	5000	3000	0.846	0.857	0.864	0.697	0.699	0.264
10	6000	3000	0.849	0.853	0.863	0.647	0.649	0.267

полученная в результате точного решения исходной системы уравнений. Как уже отмечалось, представление многокомпонентной смеси газов в качестве бинарной не позволяет заметить этот эффект.

Относительно диффузионного разделения воздуха можно сделать следующие выводы:

1) Если температура торможения превышает температуру поверхности, то концентрация кислорода на стенке выше концентрации кислорода во внешнем потоке и наоборот.

2) При условии, что степень диссоциации азота невелика, эффект диффузионного разделения возрастает с увеличением степени диссоциации кислорода вне пограничного слоя.

3) Диссоциация азота, которая всегда начинается после диссоциации кислорода, приводит к уменьшению эффекта диссоционного разделения.

4) В случае, когда температура торможения превышает температуру стенки, эффект диффузионного разделения весьма слабо зависит от температуры поверхности, если степень диссоциации на стенке невелика.

В заключение оценим роль термодиффузии для диссоциированного воздуха, так как термодиффузия может привести к некоторому увеличению содержания азота у поверхности. При оценке этого эффекта воспользуемся представлением воздуха в качестве бинарной смеси атомов и молекул. В этом случае выражение для суммарного диффузионного потока атомов имеет вид

$$v_A = \frac{D_{AM}}{\kappa} \left( c_A' + k_T \frac{T'}{T} \right) \quad (4.1)$$

где  $k_T$  — термодиффузионное отношение.

Рассчитаем «дополнительный» перепад концентрации атомов в пограничном слое, при котором термодиффузия компенсируется концентрационной диффузией.

Подобное условие означает, что внутри пограничного слоя

$$c_A' + k_T \frac{T'}{T} = 0 \quad (4.2)$$

Здесь через  $c_A^{\circ}$  обозначена та часть производной концентрации атомов, которая обеспечивает компенсацию термодиффузии. Проинтегрировав уравнение (4.2) поперек пограничного слоя, получим

$$c_{A_e}^{\circ} - c_{A_w}^{\circ} = - \int_0^{\infty} k_T \frac{T'}{T} d\eta = - \int_{T_w}^{T_e} \frac{k_T(T)}{T} dT \quad (4.3)$$

Для бинарной смеси величина термодиффузионного отношения дается выражением [3]

$$k_T = \frac{x_A x_M}{6\lambda} \frac{S_A x_A - S_M x_M}{X_\lambda + Y_\lambda} (6C_{AM} - 5) \quad (4.4)$$

где  $C_{AM}$  определяется характером межмолекулярного взаимодействия, а величины  $S_A$ ,  $S_M$ ,  $X_\lambda$  и  $Y_\lambda$  зависят также от свойств отдельных компонент.

Оценка  $k_T(T)$  по формуле (4.4) на основании численных решений уравнений пограничного слоя, полученных без учета термодиффузии, и последующая подстановка этой величины в выражение (4.3) показывают, что для рассмотренного в настоящей работе диапазона изменения параметров разность  $c_{A_e}^{\circ} - c_{A_w}^{\circ}$  составляет максимум 0.003.

Таким образом, термодиффузия в воздухе полностью компенсируется «дополнительным» перепадом концентрации, который на порядок ниже отмеченного выше эффекта разделения при концентрационной диффузии и, следовательно, роль термодиффузии в процессе диффузионного разделения воздуха невелика. Можно ожидать, что поправка за счет термодиффузии к величине теплового потока также будет несущественной.

Поступила 18 VII 1963

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Lee L. Laminar Heat Transfer Over Blunt - Nosed Bodies at Hypersonic Flight Speeds. Jet Propulsion, 1956, vol. 26, No. 4, pp. 259—269, 274. Имеется русск. пер. Лиз Л. Ламинарный теплообмен на тупоносых телах при больших сверхзвуковых скоростях. В сб. Научные проблемы искусственных спутников, ИЛ, 1959.
2. Gay J. A., Riddell F. R. Theory of Stagnation Point Heat Transfer in Dissociated Air. J. Aeronaut. Sci., 1958, vol. 25, No. 2, pp. 73—85. Имеется русск. пер. Фэй Дж., Ридделл Ф. Теоретический анализ теплообмена в лобовой точке, омываемой диссоциированным воздухом. В сб. Проблемы движения головной части ракет дальнего действия, ИЛ, 1959.
3. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. ИЛ, 1962.
4. Анифимов Н. А. О некоторых эффектах, связанных с многокомпонентным характером газовых смесей. Изв. АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение, 1963, № 5.
5. Гурвиц Л. В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Изд. АН СССР, 1962.
6. Анифимов Н. А. Ламинарный пограничный слой в многокомпонентной смеси газов. Изв. АН СССР, ОТН, Механика и машиностроение, 1962, № 1.