

УДК 615.012.014

ГАЗОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСШИРЕНИЯ ИМПУЛЬСНОЙ СТРУИ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА. АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ

А.В. Лазарев, К.А. Татаренко*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,
Москва, Россия*

*kiratatarenko@yandex.ru

Поступила в редакцию 10.10.2015 г.

Рассматривается нестационарное изэнтропическое расширение в вакуум первоначально однородного сферического облака ван-дер-ваальсова газа как динамическая часть задачи моделирования импульсной струи реального газа. Получено автомодельное решение уравнений газовой динамики. Выполнен расчет параметров импульсной струи (плотности и температуры), моделирующий условия реального эксперимента.

Ключевые слова: сверхкритический диоксид углерода, импульсная сверхзвуковая струя, ван-дер-ваальсов газ, изэнтропическое расширение.

ВВЕДЕНИЕ

Импульсные газовые струи являются уникальным экспериментальным инструментом во многих исследовательских областях (динамика рассеяния молекул друг другом и поверхностью, процессы релаксации в струях, молекулярная спектроскопия, свойства кластеров и т. д.). Кроме того, они являются основой перспективных технологических разработок, таких как напыление неорганических и органических пленок с заданными свойствами (полупроводниковых, фотопроводящих, электрохромных, тонкопленочных ФЭП и т. д.) [1].

В последнее время возник интерес к изучению с помощью импульсной струи такого явления, как коллапс (переход «клубок — глобула») полимерной молекулы в среде сверхкритического (СК) диоксида углерода [2, 3]. Прежде всего, он обусловлен возможностью получения в процессе расширения струи значительно более высоких разбавлений полимера в растворе в СК-СО₂, чем в условиях традиционных экспериментов по определению температуры Флори в растворах при нормальных условиях. Это позволяет исключить взаимодействие между молекулами полимера и наблюдать практически единичные акты перехода «клубок — глобула».

Переход «клубок — глобула» является основой таких современных технологий микрокапсулирования с использованием СК флюидов, как RESS и RESS-N [4]. Поэтому изучение условий этого перехода (зависимость от температуры, концентраций соразтворителя и антирастворителя) представляет как фундаментальный, так и практический интерес. Однако имеющиеся в настоящее время работы — как теоретические [5, 6], так и выполненные вычислительными методами (метод Монте-Карло) [7, 8] — имеют достаточно отвлеченный характер и мало полезны для практического применения.

Для определения условий перехода «клубок — глобула» в экспериментах с импульсными струями необходимо построение модели струи. Вопросам изучения импульсного течения газа посвящено достаточно много работ [9]. Для этого используется модель идеального газа, что вполне соответствует обычным условиям проведения экспериментов (относительно низкие плотности и достаточно высокие температуры). При газодинамическом моделировании импульсных струй СК сред необходимо использовать уравнения состояния реальных газов: как термическое $p = p(c, T)$, так и калорическое $c_v = c_v(c, T)$, достаточно точно описывающие параметры течения в широком диапазоне условий от начальных (околокритических) до условий детектирования (низкие значения температуры и плотности). При этом не в ущерб точности они должны иметь как можно более простой вид, максимально облегчающий задачу интегрирования уравнений газовой динамики. К таким уравнениям относится, например, уравнение Редлиха — Квонга [10, 11].

При построении модели импульсной сверхзвуковой струи ключевой является задача о сферически-симметричном расширении заданной массы газа в вакуум. Для математического описания ее используются известные законы сохранения массы, количества движения (импульса) и энергии, а также термическое и калорическое уравнения состояния среды [12]. В общем случае аналитическое решение этой нестационарной системы уравнений в частных производных первого порядка невозможно. С другой стороны, процесс обработки результатов численного решения такой задачи затруднителен из-за необходимости анализа больших массивов данных, представляющих зависимости параметров задачи (плотность, скорость и температура газа) от временной и пространственной координат. В этом случае оказываются полезными частные решения, которые принято называть *точными* [13]. Такие решения позволяют выявить характерные особенности явления и выработать оптимальную схему численного счета [14]. Наиболее простым классом точных решений являются *автомодельные** решения.

Многочисленные автомодельные решения задачи о нестационарном расширении сферического облака газа были получены в случае идеального газа (см., например, [15, 16]). Для описания реальных газов используются более сложные формы уравнений состояния, в частности, относящиеся к такому обширному классу, как кубические уравнения состояния (см., например, обзор [17]). Простейшим из них является уравнение Ван-дер-Ваальса. Оно не является точным, но качественно верно отражает многие характерные черты поведения реальных газов и жидкостей, не приводя к физическим нонсенсам. Так, в [18] на его основе получены аналитические выражения для термодинамических свойств газа в околокритической области и вблизи нулевой температуры. Анализ решения газодинамической задачи на его основе оказывается полезным при решении задач с более сложными уравнениями состояния. По этой причине именно с модели ван-дер-ваальсова газа традиционно начинают рассмотрение течений реальных газов, как, например, в случае стационарных изэнтропического [19] и адиабатического [20] течений.

В настоящей работе получено автомодельное решение задачи о нестационарном изэнтропическом сферически-симметричном расширении облака ван-дер-

* *Автомодельные* (самоподобные) решения — это такие решения, профили которых в разные моменты времени получаются один из другого преобразованиями подобия (растяжения или сжатия) (см. [13, 14]). При этом часто система уравнений в частных производных сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, что во многих случаях упрощает решение.

ваальсова газа, на основе которого рассмотрен простой вариант модели импульсной струи сверхкритического диоксида углерода.

ОБЩИЕ УРАВНЕНИЯ

Система уравнений газодинамики для случая изэнтропического сферически-симметричного расширения облака газа (динамическая часть модели импульсной струи) представляет собой законы сохранения массы и импульса:

$$\frac{\partial \ln \bar{\rho}}{\partial \bar{t}} + \bar{u} \frac{\partial \ln \bar{\rho}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} + \frac{2\bar{u}}{\bar{r}} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} = 0, \quad (2)$$

замыкаемые уравнением изэнтропии $\bar{p} = \bar{p}(\bar{\rho})$. Здесь $\bar{\rho}$ — плотность; \bar{u} — скорость; \bar{p} — давление газа; \bar{t} — временная и \bar{r} — радиальная переменные. Термическое уравнение состояния ван-дер-ваальсова газа имеет вид

$$\bar{p} = \frac{\bar{\rho} R \bar{T}}{1 - b \bar{\rho}} - a \bar{\rho}^2, \quad (3)$$

где \bar{T} — температура; R , a , b — параметры, обычно определяемые экспериментально.

Условие изэнтропичности течения ($S = \text{const}$)

$$d\bar{S} = c_v \frac{d\bar{T}}{\bar{T}} - \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{T}} \right)_{\bar{\rho}} \frac{d\bar{\rho}}{\bar{\rho}^2} = 0$$

с учетом (3) дает следующее уравнение изэнтропии для ван-дер-ваальсова газа:

$$\bar{p} = \frac{\bar{\rho} R \bar{T}}{1 - b \bar{\rho}} - a \bar{\rho}^2, \quad (4)$$

где $\bar{c}_0 R = \left(\bar{p}_0 + 3\bar{\rho}_0^2 \right) \left(\frac{1 - \frac{1}{3}\bar{\rho}_0}{\bar{\rho}_0} \right)^{\delta+1}$; \bar{p}_0 и $\bar{\rho}_0$ — давление и плотность в начальный мо-

мент времени $\bar{t}_0 = 0$; $\delta = R/c_v$, а c_v — теплоемкость при постоянном объеме. В случае ван-дер-ваальсова газа c_v зависит только от температуры. В общем случае изохорная теплоемкость $c_v(T, \rho)$ является слабо меняющейся функцией температуры и плотности при любых значениях T и ρ , исключая околкритическую область, где ее поведение носит сингулярный характер по обоим переменным [21]. Из рис. 1 из [21], на котором приведены зависимости $c_v(T, \rho)$ вдоль критических изотермы (a) и изохоры (b), видно, что интервалы T и ρ существенного изменения теплоемкости (околкритическая область) весьма малы. Это позволяет выбрать такие начальные условия в реакторе, при которых изэнтропа расширения

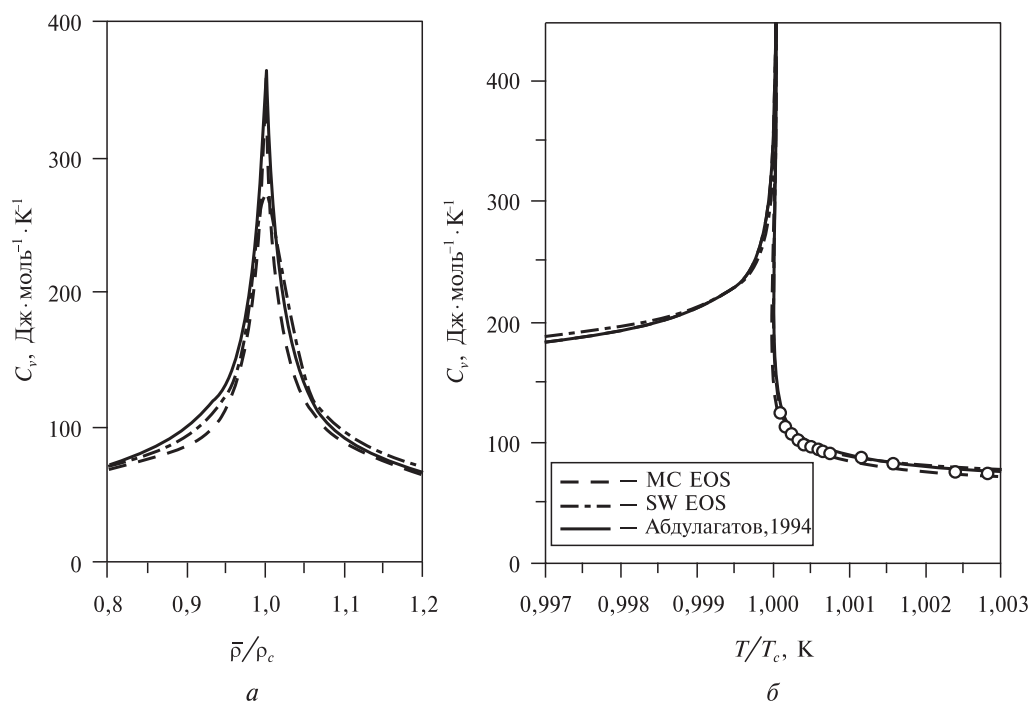


Рис. 1. Зависимости изохорной теплоемкости CO₂ вдоль критической изотермы (а) и вдоль критической изохоры (б)

будет проходить на достаточном удалении от околкритической области. В этом случае при выводе уравнения изэнтропы (4) теплоемкость с определенной погрешностью может полагаться постоянной. Так, для условий приведенного ниже расчета (с давлением $\bar{p}_0 = 100$ атм и температурой $\bar{T}_0 = 323,16$ К в реакторе) изэнтропа расширения, рассчитанная численно с зависимостью $c_v(T, \rho)$ из [21], пересекает критическую изотерму (рис. 1а) при $\rho/\rho_c = 0,85$, а критическую изохору (рис. 1б) — при $T/T_c = 1,02$ соответственно. Из рисунков видно, что изэнтропа расширения проходит вне околкритической области, что позволяет считать теплоемкость постоянной вдоль изэнтропы расширения вплоть до пересечения кривой равновесия «газ — твердое тело».

Граничные и начальные условия для уравнений (1)—(2) в случае первоначально однородного газового облака записываются в виде

$$\begin{aligned}
 \text{при } \bar{t}_0 = 0: \quad & \bar{R}(0) = \bar{R}_0, \quad \frac{d\bar{R}(\bar{t})}{d\bar{t}} = 0; \\
 \bar{t} = 0 \text{ и } \bar{r} = 0: \quad & \bar{\rho} = \bar{\rho}_0; \\
 \bar{t} \geq 0 \text{ и } \bar{r} = \bar{R}(\bar{t}): \quad & \bar{\rho} = 0; \\
 \bar{t} \geq 0 \text{ и } \bar{r} = 0: \quad & \bar{u} = 0,
 \end{aligned} \tag{5}$$

где \bar{R}_0 — радиус сферического газового пакета в начальный момент времени $\bar{t} = 0$; а $\bar{R}(\bar{t})$ — текущая координата переднего фронта газового пакета в момент времени \bar{t} .

АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ

Введем безразмерные переменные, нормированные на условия в критической точке (метятся нижним индексом «с»):

$$\rho = \frac{\bar{\rho}}{\rho_c}, u = \frac{\bar{u}}{\left(\frac{p_c}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{2}}}, p = \frac{\bar{p}}{p_c}, r = \frac{\bar{r}}{R_0} \text{ и } t = \frac{\bar{t}}{R_0} \left(\frac{p_c}{\rho_c}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Тогда параметры уравнения состояния $\bar{p} = \bar{p}(\bar{\rho}, \bar{T})$ (3) определяются из трех условий в критической точке:

$$p_c = p_c(\rho_c, T_c), \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T = 0, \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2}\right)_T = 0$$

и имеют следующие значения: $\bar{a} = 3 \frac{p_c}{\rho_c^2}$, $\bar{b} = \frac{\rho_c}{3}$ и $R = \frac{8}{3} \frac{p_c}{\rho_c T_c}$. Подстановка их в

(3) дает

$$p = \frac{\frac{8}{3} \rho T}{1 - \frac{1}{3} \rho} - 3\rho^2,$$

а уравнение изэнтропы (4) принимает вид

$$p = c_0 \left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3} \rho} \right)^{\delta+1} - 3\rho^2, \quad (6)$$

где $c_0 = (p_0 + 3\rho_0^2) \left(\frac{1 - \frac{1}{3} \rho_0}{\rho_0} \right)^{\delta+1}$; p_0 и ρ_0 — безразмерные давление и плотность при $t = 0$.

Таким образом, система уравнений (1)—(2) с учетом (6) принимает вид

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \ln \rho}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial r} + 2 \frac{u}{r} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + \left[c_0 (\delta + 1) \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3} \rho} \right)^{\delta+2} - 6 \right] \frac{\partial \rho}{\partial r} = 0 \quad (8)$$

с граничными и начальными условиями

$$\begin{aligned}
 \text{при } t = 0: \quad R(0) = 1, \dot{R}(t) = 0; \\
 t = 0 \text{ и } r = 0: \quad \rho = \rho_0; \\
 t \geq 0 \text{ и } r = R(t): \quad \rho = 0; \\
 t \geq 0 \text{ и } r = 0: \quad u = 0;
 \end{aligned} \tag{9}$$

Введем переменную подобия $\eta = r/R(t)$, где $R(t)$ — текущая координата переднего фронта газового пакета. Тогда частицы будут заключены в интервале $0 \leq r \leq R(t)$ (или $0 \leq \eta \leq 1$), а при $r \geq R(t)$ ($\eta \geq 1$) — вакуум. Система уравнений (7)—(8) в новых переменных записывается в виде

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + \frac{u - \dot{R}\eta}{R} \frac{\partial \ln \rho}{\partial \eta} + \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{2u}{R\eta} = 0, \tag{10}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u - \dot{R}\eta}{R} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{1}{R} \left[c_0 (\delta + 1) \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3}\rho} \right)^{\delta+2} - 6 \right] \frac{\partial \rho}{\partial r} = 0, \tag{11}$$

с начальными и граничными условиями

$$\text{при } t = 0: \quad R = 1, \dot{R} = 0; \tag{12.1}$$

$$t = 0 \text{ и } \eta = 0: \quad \rho = \rho_0; \tag{12.2}$$

$$t \geq 0 \text{ и } \eta = 1: \quad \rho = 0; \tag{12.3}$$

$$t \geq 0 \text{ и } \eta = 0: \quad u = 0. \tag{12.4}$$

Положим $u = \dot{R}\eta$. В этом случае условие (12.4) удовлетворяется автоматически, а из (10)—(11) получаем

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + 3 \frac{\dot{R}}{R} = 0, \tag{13}$$

$$\ddot{R}R + \left[c_0 (\delta + 1) \frac{1}{\rho^3} \left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3}\rho} \right)^{\delta+2} - 6 \right] \frac{1}{\eta} \frac{\partial \rho}{\partial \eta} = 0. \tag{14}$$

Из (13) следует, что

$$\rho(\eta, t) = A(\eta)R^{-3}(t). \tag{15}$$

С учетом этого (14) принимает следующий вид:

$$\ddot{R}R^{3\delta+1} = - \left[c_0 (\delta + 1) \frac{A^{\delta-1}}{\left(1 - \frac{1}{3}AR^{-3}\right)^{\delta+2}} - 6R^{3(\delta-1)} \right] \frac{1}{\eta} \frac{\partial A}{\partial \eta} \quad (16)$$

с начальным и граничным условиями

$$\text{при } t = 0 \text{ и } \eta = 0: A(0) = A_0 = \rho_0; \quad (17.1)$$

$$t \geq 0 \text{ и } \eta = 1: A(1) = 0. \quad (17.2)$$

Положим $\ddot{R}R^{(\sigma+1)\delta+1} = B = \text{const}$. Тогда, интегрируя один раз, получаем

$$\dot{R}^2 = C - \frac{2B}{3\delta} R^{-3\delta}. \quad (18)$$

Постоянная C определяется первым условием (12.1): $C = \frac{2B}{3\delta}$, и (18) приводится к виду

$$\frac{dR}{dt} = \left[\frac{2B}{3\delta} \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - R^{-3\delta} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (19)$$

Соответственно для (16) получаем

$$c_0 (\delta + 1) \frac{A^{\delta-1} dA}{\left(1 - \frac{1}{3}AR^{-3}\right)^{\delta+2}} - 6AR^{3(\delta-1)} = -B\eta d\eta.$$

Интегрируя это уравнение с учетом условия (17.2) и перехода согласно (15) от функции $A(\eta, t)$ к плотности, окончательно получаем для $\rho(\eta, t)$ следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{3} c_0 \left[\left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3}\rho} \right)^{\delta+1} - \left[1 - \left(\frac{r}{R(t)} \right)^2 \right] R^{-3\delta} \left(\frac{\rho_0}{1 - \frac{1}{3}\rho_0} \right)^{\delta+1} \right] + \\ & + \left(\frac{\delta+1}{\delta} \right) c_0 \left[\left(\frac{\rho}{1 - \frac{1}{3}\rho} \right)^{\delta} - \left[1 - \left(\frac{r}{R(t)} \right)^2 \right] R^{-3\delta} \left(\frac{\rho_0}{1 - \frac{1}{3}\rho_0} \right)^{\delta} \right] - \\ & - 6 \left[\rho - \left[1 - \left(\frac{r}{R(t)} \right)^2 \right] R^{-3\delta} \rho_0 \right] = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

При этом постоянная B определяется начальными значениями давления и плотности:

$$B = \frac{2}{3} c_0 \left[\left(\frac{\rho_0}{1 - \frac{1}{3} \rho_0} \right)^{\delta+1} + 3 \left(\frac{\delta+1}{\delta} \right) \left(\frac{\rho_0}{1 - \frac{1}{3} \rho_0} \right)^{\delta} \right] - 12\rho_0. \quad (21)$$

Интегрирование (19) с учетом (12.1) дает неявную зависимость $R = R(t)$, определяющую согласно уравнению (20) изменение плотности со временем. В общем случае уравнение (19) необходимо интегрировать численно. Частные случаи интегрирования в квадратурах приведены в [22].

При известной плотности температура определяется из уравнения изэнтропии, записанного в переменных $(\rho - T)$:

$$T = T_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \frac{1 - \frac{1}{3} \rho_0}{1 - \frac{1}{3} \rho} \right)^{\delta}. \quad (22)$$

УПРОЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИМПУЛЬСНОЙ СТРУИ

Следующим шагом при моделировании импульсной струи является установление связи начальных условий расширяющегося газового пакета с условиями напуска из сопла (статическая часть модели импульсной струи). Такая задача решалась авторами в работах [23–26] для случая идеального газа. Рассматривалась следующая модель формирования начального газового пакета (см. рис. 2): газ из сверхкритического реактора с давлением \bar{p}_0^0 и температурой \bar{T}_0^0 (параметры торможения) через сопло диаметром d истекает в область пониженного давления. Сопло на малый промежуток времени τ_0 открывается импульсным клапаном. Предполагается, что в момент закрытия клапана (считаем его начальным моментом расширения $t = 0$) на расстоянии \bar{l}_0 от среза сопла формируется газовый пакет в форме шара радиуса \bar{R}_0 с однородными начальными распределениями плотности $\bar{\rho}_0$ и температуры \bar{T}_0 , центр которого движется с постоянной скоростью \bar{u}_0 вдоль оси симметрии сопла. Одновременно происходит его радиальное расширение относительно этого центра. Возможность представления начальной геометрической формы газового пакета в виде шара обсуждалась в [27]. \bar{R}_0 определяется температурой \bar{T}_0^0 , диаметром сопла d и временем действия импульсного клапана τ_0 [26]:

$$\bar{R}_0 = \left[\frac{3}{16} \sqrt{\delta+1} \left(\frac{2}{\delta+2} \right)^{\frac{\delta+2}{2\delta}} \left(1 + \frac{\delta}{2} M_0^2 \right)^{\frac{1}{\delta}} \tau_0 d^2 \left(\frac{k \bar{T}_0^0}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (23)$$

где k — постоянная Больцмана; m — масса молекулы газа; $M_0 = M(\bar{l}_0)$ — число Маха в точке \bar{l}_0 . Предположение об изэнтропичности течения позволяет связать

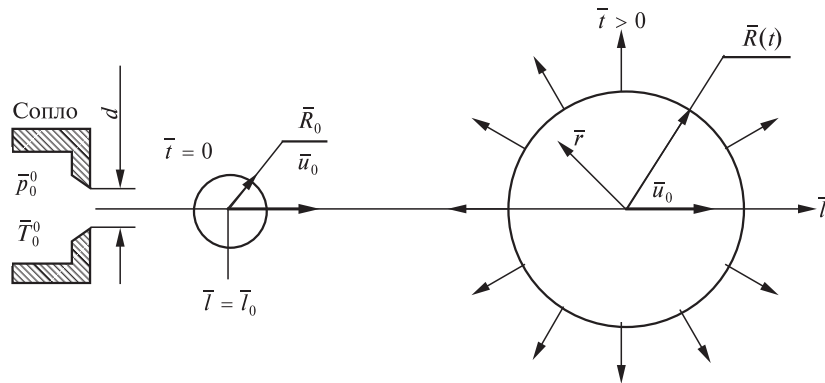


Рис. 2. Геометрия модели

начальные распределения плотности и температуры в газовом пакете, а также скорость движения его центра с условиями в реакторе непрерывными соотношениями [28]

$$\bar{\rho}_0 = \bar{\rho}_0^0 \left(1 + \frac{\delta}{2} M_0^2\right)^{-\frac{1}{\delta}}, \bar{T}_0 = \bar{T}_0^0 \left(1 + \frac{\delta}{2} M_0^2\right)^{-1} \text{ и } \bar{u}_0 = a_0^0 M_0 \left(1 + \frac{\delta}{2} M_0^2\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (24)$$

где $a_0 = \sqrt{(\delta + 1) \frac{k \bar{T}_0^0}{m}}$ — скорость звука для условий в сопле. Число Маха на расстоянии \bar{l} от среза сопла в случае идеального газа может быть вычислено по одной из эмпирических зависимостей $M = M(\bar{l})$ [29].

Строгий подход в случае реальных газов предполагает решение задачи о изэнтропическом расширении стационарной струи из сопла конкретной геометрической формы и расчет параметров струи в ближней области расширения (статическая часть модели импульсной струи). Здесь же, поскольку основной целью настоящей работы являлось изучение динамики расширения газового пакета реального газа, при модельном расчете начальных условий использовались соотношения (23) и (24) для идеального газа. Число Маха M_0 вычислялось по эмпирической формуле Ашкеназа — Шермана [30] с параметрами, полученными интерполяцией на случай $\gamma = 1 + \delta = 1,1383$.

Расчет параметров выполнялся для импульсной струи CO_2 ($p_c = 72,808$ атм; $T_c = 304,128$ К; $\rho_c = 0,4676$ г/см³; $R = 0,1383$ Дж/г·К; $c_v \approx 1$ Дж/г·К [31]; $\delta = R/c_v = 0,1383$), истекающей из сопла диаметром $2,5 \cdot 10^{-2}$ см за импульс $2 \cdot 10^{-4}$ с. Условия в сопле полагались околоскритическими: $\bar{p}_0^0 = 100$ атм, $\bar{T}_0^0 = 323,16$ К. Оценка величины числа Маха при $\bar{l}_0 = 2,5d$ дает значение $M_0(2,5d) \approx 3,26$. Плотность CO_2 в сопле, вычисленная по уравнению Ван-дер-Ваальса, равна $\bar{\rho}_0^0 = 0,5781$ г/см³. Для этих условий начальный радиус шара равен $\bar{R}_0 = 0,27$ см, скорость движения центра шара $u_0 = 6,5237 \cdot 10^4$ см/с, а относительные плотность, температура и давление в центре шара равны $\bar{\rho}_0 = \rho_0/\rho_c = 2,3015 \cdot 10^{-2}$, $\bar{T}_0 = T_0/T_c = 6,1249 \cdot 10^{-1}$ и $\bar{p}_0 = p_0/p_c = 1,4738 \cdot 10^{-2}$ соответственно (где ρ_c , T_c и p_c — критические значения параметров). Тогда $B = 11,3230$, а $c_0 = 1,1847$. Результаты расчета приведены на рис. 3—5.

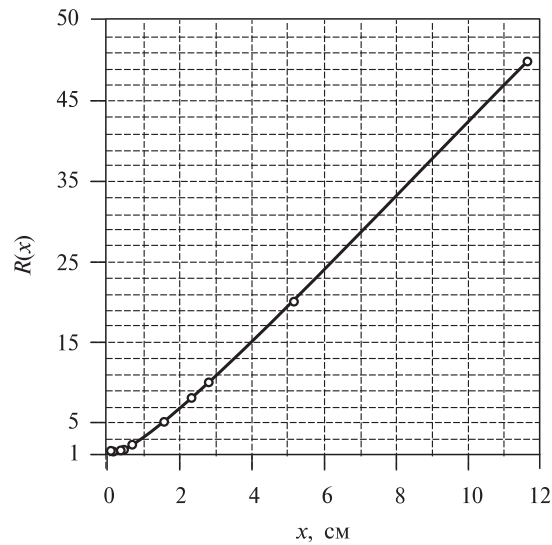


Рис. 3. Зависимость радиуса газового пакета от базы пролета

На рис. 3 представлена полученная интегрированием уравнения (19) зависимость безразмерного радиуса газового пакета $R(x)$ от базы пролета $x = \bar{l} - \bar{l}_0$ (см). Из рисунка видно, что с увеличением x скорость движения переднего фронта газового пакета асимптотически стремится к постоянной величине. Из уравнения (19)

следует, что она равна $\frac{dR(t)}{dt} = 1,4025 \frac{dR(x)}{dx} = \left[\frac{2B}{3\delta} \right]^{\frac{1}{2}} \approx 7,380$.

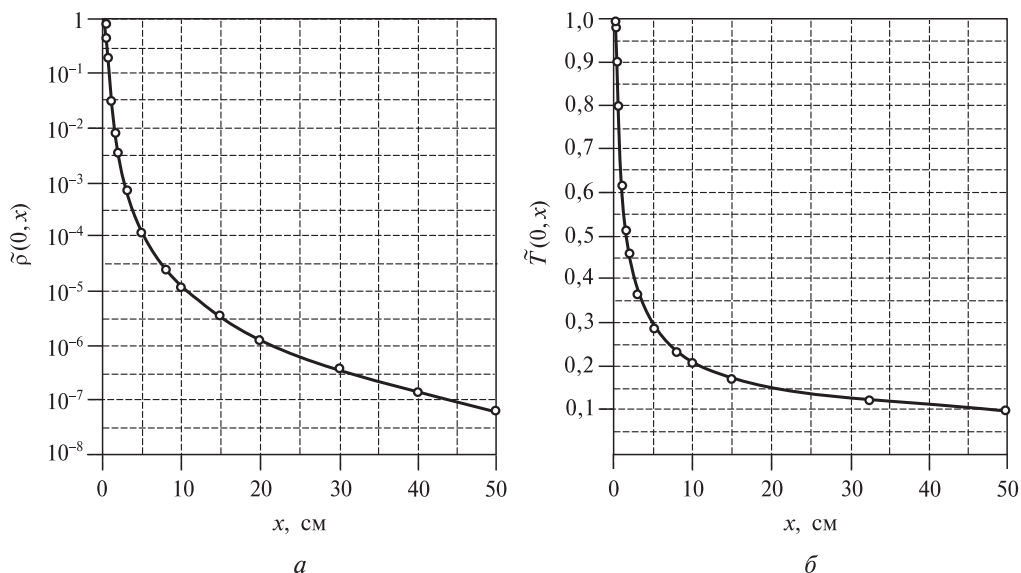


Рис. 4. Зависимость приведенной плотности (а) и температуры (б) от базового расстояния

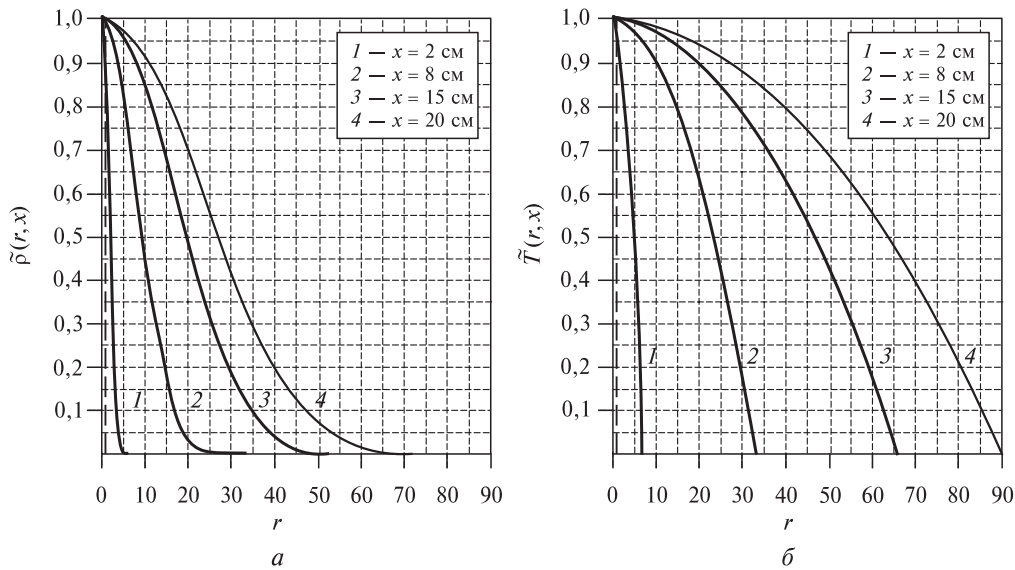


Рис. 5. Зависимости приведенных плотности (а) и температуры (б) от радиальной переменной r при различных расстояниях x от среза сопла

На рис. 4 представлены изменения приведенных плотности

$$\tilde{\rho}(0, x) = \rho(0, x) / \rho(0, 0)$$

и температуры

$$\tilde{T}(0, x) = T(0, x) / T(0, 0)$$

в центре газового пакета с расстоянием x . В условиях реального эксперимента [2, 3] напыление из импульсной струи происходит на подложку, расстояние которой от среза сопла может меняться от 2 до 20 см. При этом, как видно из рис. 4, плотность CO_2 в центре газового пакета падает на 4 порядка (плотность при $x = 2$ см составляет $\sim 2 \cdot 10^{-2}$ от плотности в реакторе $\bar{\rho}_0^0$), в то время как температура уменьшается только в 3 раза (при $x = 2$ см она составляет $\sim 0,26$ от температуры в реакторе).

На рис. 5 представлены радиальные распределения приведенных плотности

$$\tilde{\rho}(r, x) = \rho(r, x) / \rho(0, x)$$

и температуры

$$\tilde{T}(r, x) = T(r, x) / T(0, x)$$

для расстояний $x = 2, 8, 15$ и 20 см соответственно. Вертикальная пунктирная линия отмечает радиус подложки для напыления ($x = 0,25$ см). Видно, что в плоскости подложки с точностью $\approx 2\%$ распределение температуры однородно, в то время как для плотности это выполняется только при $x \geq 5$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые получено автомодельное решение задачи о нестационарном расширении сферического облака ван-дер-ваальсова газа, которая является динамической

частью модели импульсной струи [21–22] реального газа. Распределения плотности $\rho(r, t)$ и температуры $T(r, t)$ подчиняются степенным уравнениям, которые параметрически зависят от текущей координаты переднего фронта газового пакета $R(t)$. В свою очередь, $R(t)$ удовлетворяет обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка. На основе статической части в приближении идеального газа [22] выполнен расчет параметров импульсной струи сверхкритического CO_2 , моделирующий условия реального эксперимента [2, 3].

Моделирование импульсной струи сверхкритического диоксида углерода выполнено при поддержке РФФИ в рамках проекта № 14-33-00017. Решение газодинамической задачи о нестационарном расширении облака ван-дер-ваальсового газа выполнено при поддержке РФФИ, грант № 16-08-00576-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коробейщиков Н.Г., Зарвин А.Е. Вестник НГУ. Серия: Физика. 2006. Т. 1. № 2. С. 29.
2. Татаренко К.А., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. СКФ-ТП. 2014. Т. 9. № 3. С. 66.
3. Татаренко К.А., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. СКФ-ТП. 2015. Т. 10. № 4. С. 1.
4. Cocero M.J., Martin A., Mattea F., Varona S. J. *Supercrit. Fluids*. 2009. Vol. 47. P. 546.
5. Dua A., Cherayil B.J. *J. Chem. Phys.* 1999. Vol. 111. No. 7. P. 3274.
6. Sumi T., Imazaki N., Sekino H. *Phys. Rev. E*. 2009. Vol. 79. 030801(R).
7. Luna-Barsenas G., Meredith J.C., Sanches I.C., Johnston K.P. *J. Chem. Phys.* 1997. Vol. 107. No. 24. P. 10782.
8. Lisal M., Nezbeda I. *J. Chem. Phys.* 2003. Vol. 119. No. 7. P. 4026.
9. Чекмарев С.Ф. Импульсные течения газа в сверхзвуковых соплах и струях. Новосибирск: Изд-во ИТ СО АН, 1990.
10. Redlich O., Kwong J.N.S. *Chem. Rev.* 1949. Vol. 44. P. 233.
11. Morris R.W., Turek E.A. *ACS Symposium Series*. 1986. Vol. 300. P. 389.
12. Станюкович К.П. Неустановившиеся движения сплошной среды. М.: Наука, 1971.
13. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф., Журов А.И. Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики. М.: Физматлит, 2005.
14. Баренблатт Г.И. Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика. Л.: Гидрометеоиздат, 1978.
15. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1977.
16. Barenblatt G.I. *Scaling*. New York: Cambridge University Press, 2003.
17. Valderrama J.O. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003. Vol. 42. P. 1603.
18. Berberan-Santos M.N., Bodunov E.N., Pogliani L. *J. Math. Chem.* 2008. Vol. 43. No. 4. P. 1437.
19. Cramer M.S., Best L.M. *Phys. Fluids A*. 1991. Vol. 3. No. 1. P. 219.
20. Schnerr G.H., Leidner P. *Phys. Fluids A*. 1991. Vol. 3. No. 11. P. 2445.
21. Sun L., Kiselev S.B., Ely J.F. *Fluid Phase Equilib.* 2005. Vol. 233. P. 204.
22. Mirels H., Mullen J.F. *A.I.A.A. J.* 1963. Vol. 1. P. 596.
23. Lazarev A.V., Zastenker N.N., Trubnikov D.N., Tatarenko K.A., Pribytkov A.V. *Mosc. Univer. Chem. Bull.* Vol. 61. No. 6. P. 13.
24. Lazarev A.V., Zastenker N.N., Trubnikov D.N., Tatarenko K.A., Pribytkov A.V. *Mosc. Univer. Chem. Bull.* Vol. 62. No. 4. P. 191.
25. Татаренко К.А. Дис. ... канд. хим. наук. 2009.
26. Татаренко К.А., Лазарев А.В., Трубников Д.Н., Застенкер Н.Н. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-11-12-001.pdf>
27. Greenspan H.P., Butler D.S. *J. Fluid Mech.* 1962. Vol. 13. P. 101.
28. Липпман Г.В., Рошко А. Элементы газовой динамики. М.: ИЛ, 1960.
29. Дулов В.Г., Лукьянов Г.А. Газодинамика процессов истечения. Новосибирск: Наука, 1984.
30. Ashkenas H., Sherman S.F. *Proc. of the 4th Int. Symp. on RGD*. 1966. Vol. 2. P. 84.
31. National Institute of Standards and Technology. USA. NIST Chemistry WebBook.

*Газодинамическая модель расширения импульсной струи
сверхкритического диоксида углерода. Автомоделное решение*

**GAS DYNAMIC MODEL OF THE SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE
PULSE JET EXPANSION. SELF-SIMILAR SOLUTION**

A.V. Lazarev, K.A. Tatarenko

Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry

Non-stationary isentropic expansion into the vacuum of the initially homogeneous spherical cloud of van der Waals gas is considered as a dynamic part of the problem of modeling the real gas pulse jet. A self-similar solution of gas dynamic equations is obtained. The parameters of the pulse jet (density and temperature) that simulate the conditions of a real experiment are calculated.

Key words: supercritical carbon dioxide, pulse supersonic jet, van der Waals gas, isentropic expansion.
