

УДК 533.6.011.8

© 1990 г.

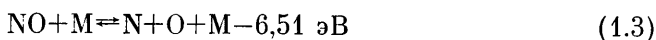
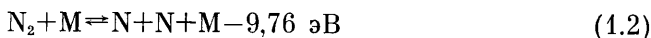
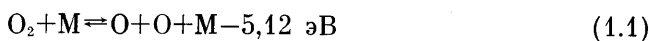
А. Г. ТИРСКИЙ, В. С. ЩЕЛИН, В. Г. ЩЕРБАК

ВЛИЯНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ НА КОНВЕКТИВНЫЙ ТЕПЛОБМЕН

В настоящее время не существует единой теории химической кинетики. Получаемая из эксперимента информация обрабатывается в рамках конкретной теоретической модели, положенной в основу интерпретации этого эксперимента. Поэтому представляемые макроскопические константы предлагаются часто в разном аналитическом виде. Иногда структура формул для констант скоростей одинакова, но параметры различаются. При решении задач гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена используют разные системы данных по константам диссоциации и рекомбинации воздуха.

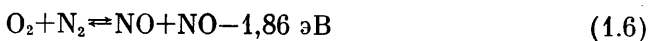
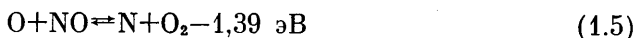
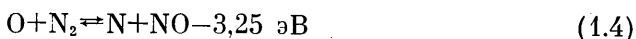
В настоящей работе рассмотрено шесть систем данных. Их надежность не анализировалась, так как такой анализ в [1-7] уже был проделан и на основе этого анализа были рекомендованы наиболее достоверные, по заявлению авторов, данные. На примере течения в окрестности критической линии космического корабля «Буран» при его спуске вдоль планирующей траектории проведена оценка влияния неопределенности химической кинетики на значения теплового потока, температуры и профили концентраций.

1. При скоростях входа в атмосферу Земли порядка первой космической реакции ионизации практически не влияют на тепловой поток к поверхности тела из-за малой степени ионизации. Поэтому рассматриваемый химический состав воздуха ограничим пятью компонентами: N_2 , O_2 , N , O , NO . В рассматриваемом диапазоне температур $10^3 \leq T \leq 2 \cdot 10^4$ К трехатомные компоненты, такие, как O_3 , NO_2 и другие многоатомные окислы азота, незначительны. Между указанными пятью компонентами происходят реакции ударной диссоциации (прямые реакции) и реакции рекомбинации (обратные реакции)



Здесь под M понимается ударная каталитическая частица, которая участвует в реакции лишь энергетически и не испытывает химического превращения. В качестве такой частицы может быть любая из частиц смеси.

Кроме реакций (1.1)–(1.3) в воздухе при высоких температурах протекают обменные бимолекулярные реакции (когда молекулярный кислород частично диссоциирован, то энергетически выгодней становится протекание атомно-молекулярных обменных реакций)



Все реакции, протекающие слева направо, являются эндотермическими.

Далее необходимо знать константы скоростей прямой k_f и обратной k_b реакций. Их представляют, как правило, в виде закона Аррениуса

$$k = aT^b \exp(-c/T) \quad (1.7)$$

Константа c связана с энергией активации. Для обратных, экзотермических, реакций ею можно пренебречь.

Константа скорости обратной реакции k_b связана с константой равновесия в случае термодинамического равновесия внутренних степеней свободы частиц соотношением

$$k_f/k_b = K(T) \quad (1.8)$$

Для рассматриваемых реакций (1.8) выполняется с достаточной точностью при $T \leq (8-10) \cdot 10^3$ К. При более высоких температурах начинает проявляться незавершенность колебательной релаксации молекул в процессе диссоциации, что приводит к нарушению соотношения (1.8).

В настоящей работе будем считать соотношение (1.8) выполняющимся и рассмотрим шесть систем литературных данных по константам скоростей для реакций (1.1)–(1.6). Назовем группами 1–5 системы данных из работ [1–5], а группой 6 – данные [6] с уменьшенными скоростями рекомбинации азота на основании экспериментальных данных [7]. Все эти данные так или иначе использовались в расчетах гиперзвуковой аэродинамики и теплообмена, а также очень широко в задаче о структуре релаксационной зоны за скачком уплотнения. Данные группы 1 получены при обработке эксперимента с учетом колебательной релаксации и в настоящей работе использовались равновесные константы скоростей реакций. Данные групп 2–6 получены в предположении о равновесии между поступательными и колебательными степенями свободы. Реакция (1.6) учитывалась только в группах 1, 6, так как в остальных системах данные по этой реакции отсутствовали.

В настоящей работе данные по константам всех реакций были представлены в графическом виде, что позволило оценить неопределенности в значениях констант скоростей реакций.

Рассмотрим прямые реакции. Для реакции (1.1) наименьший разброс около 1 порядка наблюдается при $M=O_2$, для других третьих частиц разброс может достигать 2–2,5 порядков. При $M=O$, O_2 данные группы 1 предполагают наиболее высокие значения констант скоростей, а группы 5 – наиболее низкие. Для $M=N_2$, NO , N наибольшие значения констант характерны для группы 3, а наименьшие – для группы 6.

Разброс значений для реакции (1.2) не превышает 1–1,5 порядков. Данные группы 1 практически для всех третьих частиц лежат выше остальных значений групп констант.

Реакция (1.3) экспериментально мало изучена. Вместе с ней протекают и другие реакции (например, (1.4)), что затрудняет обработку получающихся результатов. Для этой реакции наблюдается наибольший разброс, который достигает 3,5 порядков. Константы группы 1 предполагают наибольшие крайние значения, а константы групп 5 и 6 – наименьшие крайние значения скоростей диссоциации.

Данные по реакции (1.4) по всем шести группам близки и различие не превышает 0,2 порядка.

Для реакции (1.5) константы группы 1 предсказывают нижнюю границу, а константы группы 6 – верхнюю. Разброс значений – менее 1 порядка.

Диапазон неопределенности констант обратных реакций при температурах, характерных для ударного слоя, составляет не более 2 порядков, кроме констант скоростей рекомбинации окиси азота, имеющих разброс до 3,5 порядков. Отметим, что при $T \leq 10^3$ К константы скоростей рекомбинации группы 3 начинают резко возрастать, превышая значения остальных

групп систем данных. Значения констант скоростей рекомбинации групп 4 и 6 близки или совпадают, за исключением реакции (1.2).

2. Рассмотрим в окрестности критической линии обтекание тел при их движении вдоль планирующих траекторий входа. Тепловые потоки будем определять на основе модели тонкого вязкого ударного слоя. Она является асимптотической формой уравнений Навье — Стокса при больших числах Рейнольдса, Маха и отношения плотностей за и до ударной волны, что характерно для основной теплонапряженной части планирующих траекторий. При $H < 90$ км в окрестности критической линии эта модель дает практически те же результаты, что и параболизированные уравнения Навье — Стокса [8].

На поверхности тела выставляются граничные условия непротекания, прилипания, теплового баланса, и учитывается протекание гетерогенных реакций рекомбинации.

В качестве граничных условий на ударной волне используются обобщенные условия Ренкина — Гюгонио в гиперзвуковом приближении при пренебрежении химическими реакциями внутри ударной волны [9].

Метод численного решения аналогичен изложенному в [10].

В работе представлены результаты расчетов для траектории спуска космического корабля многоразового использования «Буран». Расчеты проводились и для других планирующих траекторий. Параметры атмосферы предполагались стандартными. Коэффициент черноты поверхности принимался равным 0,8, радиус затупления 0,83 м.

Рассматривались три случая каталитической активности поверхности: идеально каталитическая (модель 1), некаталитическая (модель 2) и поверхность, обладающая конечными каталитическими свойствами с константами скоростей гетерогенной рекомбинации $k_{wO} = k_{wN} = 3$ м/с, $k_{wNO} = 0$ (модель 3). Модель 3 соответствует каталитической активности поверхности углерод-углерод орбитального корабля «Буран».

На фиг. 1,2 представлены значения теплового потока в зависимости от времени спуска для некаталитической поверхности и модели 3. Линии 1–6 соответствуют использованию в расчетах групп данных 1–6. Представленный отрезок траектории соответствует диапазону высот $H = 100–52$ км.

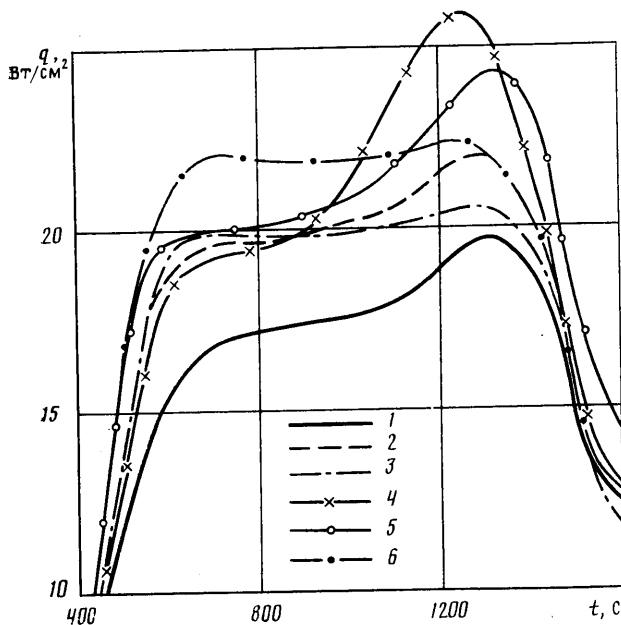
В случае идеально каталитической поверхности неопределенность констант химических реакций слабо сказывается на параметрах теплообмена: различия в значениях теплового потока не превышают 2%, а температуры поверхности — 15°.

Наиболее сильная зависимость теплового потока от используемой системы данных наблюдается в случае некаталитической поверхности. Для поверхности с постоянными каталитическими свойствами эта зависимость слабее.

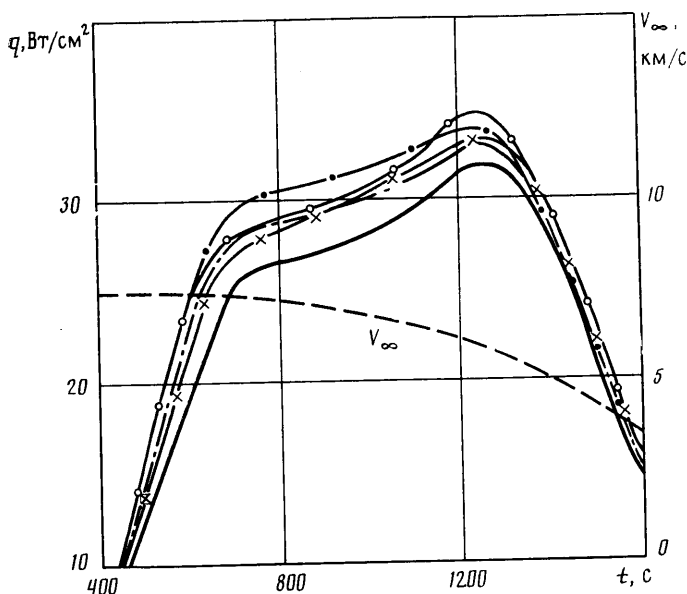
В случае некаталитической поверхности использование группы 4 может приводить к значительному увеличению максимальных тепловых потоков. Так, для рассмотренной траектории различие в значениях максимальных тепловых потоков между группами 1 и 4 составляет 32%, а температуры поверхности — 105°. Для других рассмотренных траекторий оказалось, что при использовании группы 4 степень снижения теплового потока в некаталитическую поверхность может быть существенно меньше, чем для других групп. По-видимому, в этих случаях применение констант группы 4 может приводить к неверным результатам.

Для модели 3 каталитических реакций неопределенность в значениях максимальных тепловых потоков между группами 1 и 5 составляет 9%, а температуры поверхности — 40°.

В верхней части траектории, где определяющими являются реакции диссоциации, группа 1 констант предсказывает наименьшее граничное значение теплового потока, а константы групп 5 и 6 — наибольшее. Это объясняется тем, что данные группы 1 предполагают наиболее высокую



Фиг. 1

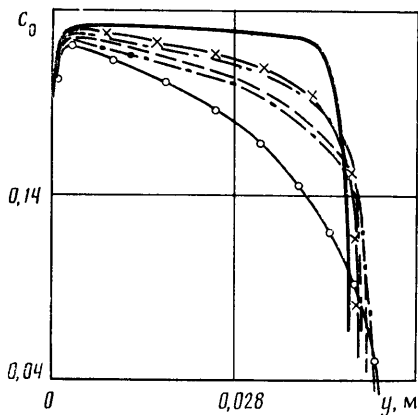


Фиг. 2

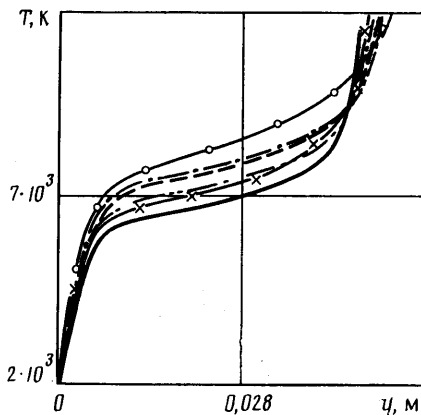
скорость диссоциации, а у групп 5, 6 диссоциация наиболее затруднена по сравнению с другими группами.

Например, при $t=700$ с тепловые потоки между группами 1 и 6 различаются на 30%, а температура поверхности — на 100° в случае некаталитической поверхности. Для модели 3 каталитических реакций эти величины соответственно принимают значения 15% и 70° .

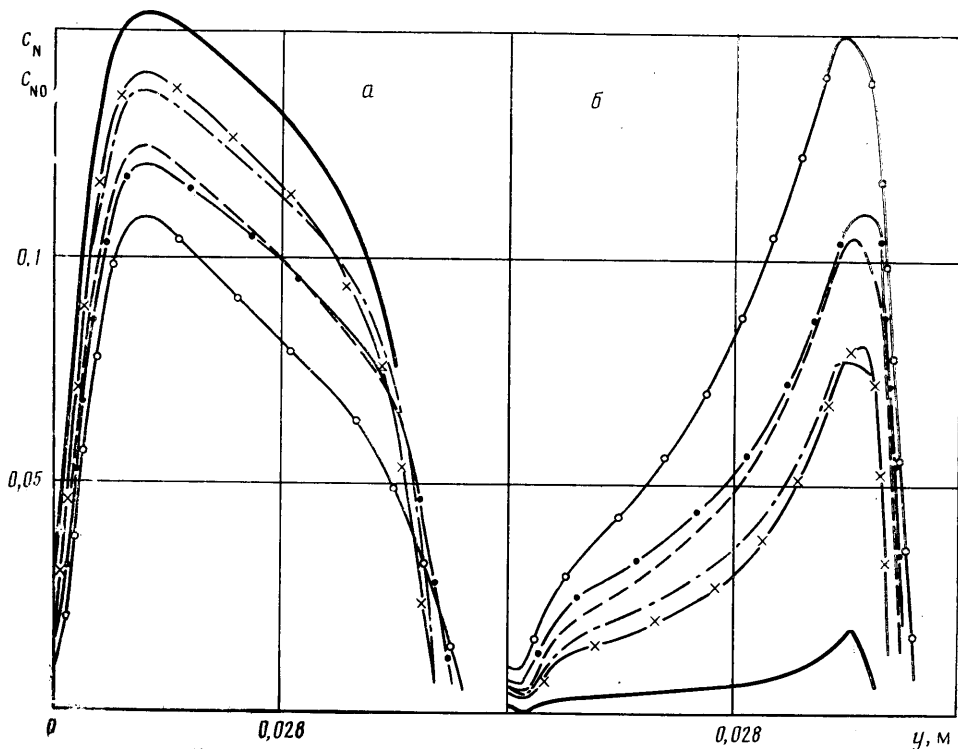
Из проведенных расчетов можно заключить, что если не рассматривать группу 4, то из остальных пяти систем данных общее количество тепла, получаемое телом при движении вдоль планирующих траекторий, оказывается максимальным при применении в расчетах групп констант 5 или 6. Наименьшие тепловые нагрузки моделируются при использова-



Фиг. 3



Фиг. 4



Фиг. 5

нии констант группы 1. Неопределенность в значениях тепловых потоков может достигать 30%, а равновесной температуры поверхности — 100°.

На фиг. 4 представлены профили температуры, на фиг. 3 — профили массовой концентрации атомов кислорода, а на фиг. 5 — профили массовой концентрации атомов азота и молекул окиси азота при $t=1240$ с для модели 3 каталитических реакций.

Из-за более высокой скорости диссоциации при использовании констант группы 1 температура газа в ударном слое оказывается самой низкой, а для групп 5, 6 — газ наиболее нагрет. Значения температуры внутри ударного слоя могут различаться на 1500–2000°. Для группы 1 происходит наиболее резкое падение температуры за ударной волной и отход ударной волны наименьший. Разница в толщине ударного слоя может превышать 10%.

Для констант группы 1 характерна наиболее высокая степень диссоциации и наименьшее содержание в ударном слое молекул окиси азота. Для констант групп 5, 6 в ударном слое содержатся максимальное количество молекул и минимальное — атомов.

В верхней части траектории концентрации атомов и молекул окиси азота для рассмотренных систем данных могут различаться в несколько раз.

В заключение заметим, что весь расчет тепловых потоков был выполнен в рамках однотемпературной кинетики, т. е. когда колебательная температура совпадает с поступательной. При этих термодинамически равновесных условиях данные [1] наиболее предпочтительны, так как остальные системы данных при $T \geq 8 \cdot 10^3$ К не учитывают влияния колебательной температуры и тем самым дают более низкие значения констант скоростей диссоциации и, как следствие, по этим данным получают более высокие значения тепловых потоков.

Авторы выражают благодарность А. М. Тумину за внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кривоносова О. Э., Лосев С. А., Наливайко В. П. и др. Рекомендуемые данные о константах скорости химических реакций между молекулами, состоящими из атомов N и O // Химия плазмы. Вып. 14. М.: Энергоатомиздат, 1987. С. 3–31.
2. Kang S.-W., Dunn M. G. Hypersonic, viscous shock layer with chemical nonequilibrium for spherically blunted cones // AIAA Journal. 1972. V. 10. № 10. P. 1361–1362.
3. Park C. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles // AIAA Pap. 1984. № 1730. 11 p.
4. Bortner M. H. A review of rate constants of selected reactions of interest in re-entry flow fields in the atmosphere. Washington: Gov. print off., 1969. 42 p. (Nat. bureau of standards. T № 484.)
5. Blottner F. G. Viscous shock layer at the stagnation point with nonequilibrium air chemistry // AIAA Journal. 1969. V. 7. № 12. P. 2281–2288.
6. Lin S.-C., Teare J. D. Rate of ionization behind shock waves in air. 2. Theoretical interpretations // Phys. Fluids. 1963. V. 6. № 3. P. 355–375.
7. Воронкин В. Г., Язлаков Ю. В. Экспериментальное исследование теплообмена в окрестности критической точки при неравновесных физико-химических превращениях и определение константы скорости рекомбинации азота // Изв. АН СССР. МЖГ. 1973. № 3. С. 128–135.
8. Щербак В. Г. Расчет неравновесного обтекания затупленных тел в рамках упрощенных моделей // Моделирование в механике. 1988. Т. 2. № 4. С. 143–153.
9. Щербак В. Г. О граничных условиях на ударной волне при сверхзвуковом обтекании // ПМТФ. 1989. № 1. С. 49–56.
10. Гершбейн Э. А., Щелин В. С., Юницкий С. А. Исследование пространственного обтекания тел с каталитической поверхностью при их движении по траектории входа в атмосферу Земли // Космич. исслед. 1985. Т. 23. № 3. С. 416–425.

Москва

Поступила в редакцию
29.XI.1989