

УДК 533.6.011.8

© 1994 г. В. Г. ЩЕРБАК

СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ПОДХОДОВ К РАСЧЕТУ ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УЧЕТОМ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

На примере течения в окрестности критической линии орбитального корабля «Буран» при его движении вдоль траектории входа проведено численное исследование химически неравновесных течений с учетом колебательной релаксации в рамках уравнений гиперзвукового вязкого ударного слоя. Получено, что колебательные температуры молекулярных компонентов в значительной степени различаются между собой и для этой модели характерно более сильное влияние на характеристики течения на теплонапряженной части траектории, чем для модели с одной усредненной колебательной температурой.

Проведено сравнение предложенных в литературе моделей диссоциации с эффективным колебательного уровня и модели диссоциации с определенной вероятностью со всех колебательных уровней. Показано, что использование аппроксимации суммарной константы диссоциации как функции только от поступательной температуры может приводить к значительному отличию от результатов расчетов с учетом колебательной релаксации на основе равновесной константы скорости диссоциации.

При движении тел вдоль планирующих траекторий входа в атмосферу Земли химические реакции в ударном слое при $H \geq 50$ км протекают на фоне еще не завершенной колебательной релаксации [1]. Температура в ударном слое достигает $2 \cdot 10^4$ К. При таких условиях суммарная константа скорости диссоциации представляется обычно в виде произведения равновесной константы диссоциации (при $T_v = T$) и функции, зависящей от поступательной и колебательной температур. Вид этой функции зависит от принимаемой модели диссоциации. В [2] на основе модели диссоциации, предложенной в [3], при обработке экспериментальных данных была выделена равновесная часть константы диссоциации. Кроме того, в [2] были также предложены аппроксимации суммарной константы диссоциации в зависимости только от поступательной температуры.

В настоящей работе проводится сравнение результатов, полученных с использованием как этих аппроксимаций, так и равновесной константы с поправочной функцией. Рассматриваются модели диссоциации, предложенные в [3—5]. При этом принимается, что колебательные температуры молекулярных компонентов или совпадают, или различаются между собой.

1. Рассмотрим стационарное обтекание осесимметричного тела потоком вязкого химически и термодинамически неравновесного газа. Воспользуемся моделью тонкого вязкого ударного слоя, являющейся асимптотической формой уравнений Навье — Стокса при больших числах Маха, Рейнольдса и отношения плотностей за и до ударной волны, что характерно для основных теплонапряженных участков планирующих траекторий входа. При учете колебательной релаксации систему уравнений на линии торможения можно записать следующим образом (y — расстояние вдоль оси от тела):

$$\rho u + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0, \quad \rho Du = -2p_1 + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{Re_\infty} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial p_i}{\partial y} = \rho u^2 \quad (1.2)$$

$$\rho c_p D T - \rho \sum_{k=1}^M D E_k^* - D p = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu c_p}{\text{Re}_\infty \sigma} \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{k=1}^M q_k^v \right) - \sum_{i=1}^N h_i \dot{w}_i - \left(\sum_{i=1}^N c_{p_i} I_i \right) \frac{\partial T}{\partial y} \quad (1.3)$$

$$\rho D E_k + \frac{\partial}{\partial y} (q_k^v) = Q_k^{VT} + Q_k^R + Q_k^{VV}, \quad k = 1, \dots, M \quad (1.4)$$

$$\rho D c_i + \frac{\partial}{\partial y} (I_i) = \dot{w}_i, \quad \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial}{\partial y} (m c_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m^2}{m_j} S_{ij} (c_i I_j - c_j I_i) \quad (1.5)$$

$$p = R_A \rho T \sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i}, \quad \sum_{i=1}^N I_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1, \quad D = v \frac{\partial}{\partial y}$$

$$E_k = c_k e_k = c_k \frac{R_A}{m_k} \frac{\theta_k}{\exp(\theta_k/T_{uk}) - 1}, \quad E_k^* = E_k(T) - E_k$$

Здесь $V_\infty u$ и $V_\infty v$ — физические составляющие вектора скорости в направлениях x и y ; $T_0 T$, $\rho_\infty V_\infty^2 p$, $\rho_\infty \rho$ — поступательная температура, давление и плотность смеси газов ($T_0 = V_\infty^2/c_{p\infty}$); $\mu_\infty \mu$, $c_{p\infty} c_p$, σ , m — коэффициенты вязкости, удельной теплоемкости, число Прандтля и молекулярная масса смеси; c_i , m_i , $c_{p\infty} T_0 h_i$, $c_{p\infty} c_{p_i}$, $\rho_\infty V_\infty I_i$, $\rho_\infty V_\infty \dot{w}_i / R$ — массовая концентрация, молекулярная масса, термодинамически равновесные удельные энтальпия и теплоемкость, нормальная компонента вектора диффузионного потока, скорость образования массы i -го компонента; $c_{p\infty} T_0 E_k$, $T_0 \theta_k$, $T_0 T_{uk}$ — колебательная энергия, отнесенная к единице массы смеси, характеристическая и колебательная температура k -й молекулярной компоненты; $c_{p\infty} T_0 \rho_\infty V_\infty / R Q_k$ — источниковые члены; $c_{p\infty} R_A$ — универсальная газовая постоянная; S_{ij} — числа Шмидта; V_∞ — модуль вектора скорости набегающего потока; N — число компонентов, M — число молекулярных компонентов. Все линейные размеры отнесены к радиусу кривизны затупления R , индекс ∞ относится к параметрам в набегающем потоке.

Поток колебательной энергии молекулярных компонентов k имеет вид

$$q_k^v = - \frac{\mu}{\text{Re}_\infty S_k} \frac{\partial}{\partial y} E_k^* + \frac{E_k^*}{S_k} \sum_{i=1}^N S_{ki} I_i$$

$$S_k = m \sum_{i=1}^N \frac{c_i S_{ki}}{m_i}, \quad S_{ki} = \frac{m}{m_k} S_{ki} + \sum_{j=1}^N S_{kj} c_j \left(\frac{m}{m_j} - \frac{m}{m_i} \right)$$

Уравнения колебательной релаксации (1.4) выписаны для молекул с разными колебательными температурами и их число соответствует числу молекулярных компонентов. Если воспользоваться моделью с усредненной колебательной температурой, то необходимо просуммировать уравнения (1.4) в предположении равенства колебательных температур. В этом случае искомой функцией будет колебательная температура, а уравнение колебательной релаксации и выражение для q_k^v можно записать следующим образом:

$$\rho \left(\sum_{k=1}^M c_k e_k' \right) D T_v + \left(\sum_{k=1}^M I_k e_k' \right) \frac{\partial T_v}{\partial y} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\rho}{\text{Re}_\infty} \left(\sum_{k=1}^M c_k D_k e_k' \right) \frac{\partial T_v}{\partial y} \right] + \sum_{k=1}^M (Q_k^{VT} - \dot{w}_k e_k + Q_k^R) \quad (1.6)$$

$$q_k^v = e_k^* I_k - \frac{\rho}{\text{Re}_\infty} c_k D_k \frac{\partial e_k^*}{\partial y}$$

$$e_k' = \frac{\partial e_k}{\partial T_v}, \quad e_k^* = e_k(T) - e_k, \quad D_k = \frac{\mu}{\rho m} \sum_{i=1}^N \left(\frac{c_i}{m_i} S_{ik} \right)^{-1}$$

Граничные условия на поверхности тела, выражающие условия непротекания, прилипания, гетерогенного протекания реакций рекомбинации, условие теплового баланса и условие термодинамического равновесия для колебательной температуры будут

$$u = v = 0, \quad I_i = -\rho k_{wi} c_i, \quad q = \frac{\varepsilon \sigma_B T_0^4}{\rho_\infty V_\infty^3} T_w^4, \quad T_{ik} = T_w$$

$$q = \frac{\mu c_p}{\text{Re}_\infty \sigma} \frac{\partial T}{\partial y} - \sum_{i=1}^N h_i I_i + \sum_{k=1}^M q_k^v$$

Здесь ε , $V_\infty k_{wi}$ — коэффициенты черноты поверхности и каталитической рекомбинации, σ_B — постоянная Больцмана, T_w — равновесная температура поверхности.

На ударной волне в качестве граничных условий задаются обобщенные соотношения Ренкина — Гюгонио.

В ударном слое предполагается наличие пяти компонентов: N_2 , O_2 , NO , N , O , между которыми протекают реакции диссоциации, рекомбинации и обменные реакции.

Перенос энергии между поступательными и колебательными степенями свободы Q_k^{VT} рассчитывался в форме Ландау — Теллера

$$Q_k^{VT} = \rho \frac{E_k(T) - E_k}{\tau_k^{VT}}$$

Для расчета времени колебательной релаксации VT -обмена использовались аппроксимации τ_{ik}^{MW} Милликена — Уайта [6] и поправка для $T > 8000$ К, предложенная в [7]

$$\frac{1}{\tau_k^{VT}} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\tau_{ik}^{MW}} + \sigma v_k n$$

Здесь и далее v_k — средняя тепловая скорость молекулы, n — число частиц в единице объема, σ — эффективное поперечное сечение столкновений, которое принималось равным 10^{-16} см².

Скорость обмена колебательной энергией за счет VV' -процессов можно записать в виде

$$Q_k^{VV} = \rho c_k \frac{R_A \theta_k}{m_k} \sum_{i=1}^M \frac{(L_k + 1) L_i \exp(t_i - t_k) - (L_i + 1) L_k}{t_i L_i(T) \tau_{ik}^{VV}}$$

$$t_i = \frac{\theta_i}{T_u}, \quad L_i = (\exp(t_i) - 1)^{-1}$$

$$\tau_{ik}^{VV} = (n K_{10}^{ik})^{-1} + (\sigma v_k n)^{-1}, \quad K_{10}^{N_2-O_2} = K_{10}^{N_2-NO} = 0,1 K_{10}^{O_2-NO}$$

Для вычисления значения константы скорости колебательной дезактивации использовалась аппроксимация экспериментальных данных, полученная в [8]

$$K_{10}^{N_2 - O_2} = 2,5 \cdot 10^{-12} \exp(-131T^{-1/3} + 489/T) T^{1/3} \text{ см}^3/\text{с}$$

Обратное влияние химических реакций на колебательную релаксацию учитывалось через источникный член Q_k^R [9]. Например, для молекул O_2 он выражается следующим образом:

$$Q_k^R = -m_k \left(\frac{p}{m}\right)^2 \left[\left(\sum_{i=1}^N K_{1i} x_i\right) \left(e_{Dk} \frac{K_{p1}}{p} V_{r_k} x_k - e_{Rk} x_{O_2}^2\right) - K_2 e_k (K_{p2} x_{O_2} x_{NO} - x_N x_k) \right],$$

$$k = O_2, \quad x_i = \frac{m c_i}{m_i}$$

где K_{1i} , K_{p1} — константы скоростей и константа равновесия для реакций рекомбинации кислорода, K_2 , K_{p2} — для обменной реакции с участием кислорода; e_{Dk} — среднее значение колебательной энергии, теряемое молекулами O_2 в результате единичного акта диссоциации; e_{Rk} — среднее значение колебательной энергии, приобретаемое молекулами O_2 в результате единичного акта рекомбинации.

Согласно классической модели диссоциации, при условии равновесия между всеми внутренними степенями свободы диссоциация молекул происходит с верхних колебательных уровней, лежащих в интервале kT от предела диссоциации (k — постоянная Больцмана). Тогда скорость диссоциации определяется только температурой поступательных степеней свободы молекул. В условиях незавершенной колебательной релаксации суммарная константа скорости диссоциации будет зависеть уже от многих факторов, в том числе и от колебательной температуры. При предположениях, что сечения столкновений не зависят от колебательного уровня сталкивающихся частиц и их относительной скорости, химические реакции не нарушают максвелловского распределения по скоростям, а заселенность уровней квазибольцмановская, можно получить поправку к равновесной константе диссоциации $K(T, T_v) = K^0(T) V(T, T_v)$, где K^0 , K — равновесная (при $T_v = T$) и суммарная константы скорости диссоциации, V — функция, вид которой зависит от принимаемой модели диссоциации.

В большинстве предложенных в литературе групп констант для диссоциирующего воздуха скорости реакций представлены как функции только от поступательной температуры. При этом значения этих скоростей могут различаться на несколько порядков [10]. Это связано с тем, что эксперименты проводились в разных условиях, соответственно при разных давлениях и колебательных температурах, что при обработке данных не учитывалось. В [2] была проведена обработка результатов экспериментов с учетом колебательной релаксации на основе модели [3] и выделена равновесная часть константы диссоциации $K^0(T)$, соответствующая более быстрому возбуждению колебаний в сравнении с диссоциацией. Но в [2] была также предложена аппроксимация суммарной константы диссоциации в зависимости только от поступательной температуры $K(T)$. В настоящей работе проводится сравнение результатов расчетов, полученных на основе этой аппроксимации, и расчетов с учетом колебательной релаксации и двухтемпературной константы скорости $K(T, T_v)$ по моделям диссоциации [3—5].

Рассмотрим эти модели.

Модель 1. Диссоциация не нарушает больцмановского распределения и протекает путем перехода молекул с эффективного колебательного уровня, отстоящего от предела диссоциации на величину βkT [3]. Выражения для искомых функций имеют вид

$$V(T, T_w) = \frac{Z(T)}{Z(T_w)} \exp \left[-\frac{D - \beta kT}{k} \left(\frac{1}{T_w} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

$$e_{D_i} = e_{R_i} = \frac{R_A}{m_i} \frac{D_i - \beta kT}{k}, \quad i = 1, \dots, M$$

где D_i — энергия диссоциации молекулы, β_i — параметр, характеризующий снижение порога диссоциации с ростом температуры T , Z — статсуммы по колебательным уровням. Для модели образованного гармонического осциллятора имеем

$$Z_k(T_w) = [1 - \exp(-\theta_k/T_w)]^{-1}$$

В опытах по исследованию неравновесной диссоциации в ударных трубах получено, что для молекул N_2 и NO $\beta = 3$, O_2 — $\beta = 1,5$.

Модель 2. Диссоциация происходит с определенной вероятностью из любого колебательного состояния и не нарушает распределения молекул по колебательным уровням. Распределение вероятности предполагается экспоненциальным с одним параметром подгонки U , имеющим размерность температуры и определяющим степень преимущественной диссоциации с верхних уровней по сравнению с нижними [4]

$$F(v) = \exp [-(D - E_v)/kU]$$

где E_v — энергия уровня.

В предположении о больцмановском распределении с температурой T_w , искомые функции имеют вид

$$V(T, T_w) = \frac{Z(T) Z(T_F)}{Z(T_w) Z(-U)}, \quad \frac{1}{T_F} = \frac{1}{T_w} - \frac{1}{T} - \frac{1}{U}$$

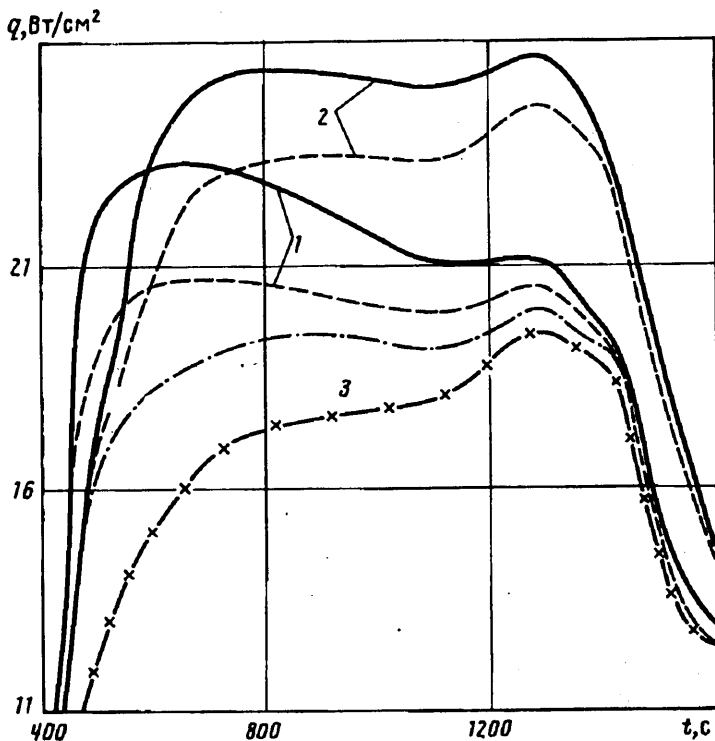
$$e_{Dk} = \frac{R_A}{m_k} \frac{\theta_k}{\exp(\theta_k/T_{Fk}) - 1}, \quad e_{Rk} = e_k(-U_k), \quad k = 1, \dots, M$$

Здесь, как и в [4], предполагалось, что $U = D/kg$, где $g \approx 3$ — константа. В [5] сопоставление с решением классической динамической задачи для реакции $O_2 + Ar \rightarrow 2O + Ar$ показало, что $g \sim T^{-1}$, и предлагалось принять, что $U = T/1,7$.

2. Рассмотрим течение в окрестности критической линии орбитального корабля «Буран» при его спуске вдоль планирующей траектории входа [11]. Условия в набегающем потоке соответствовали стандартной атмосфере. Коэффициент черноты поверхности принимался равным 0,8, $R = 0,83$ м. Для молекул N_2 , O_2 , NO принимались соответственно следующие значения характеристических температур и температуры диссоциации: $\theta_i = 3372, 2256, 2720$ К; $D_i/k = 11\ 3000, 59\ 500, 75\ 500$ К. Метод численного решения аналогичен [12].

Ниже приведены некоторые результаты расчетов.

На фигурах приняты следующие обозначения. Сплошные линии соответствуют результатам расчетов с учетом колебательной релаксации и двухтемпературной константы скорости диссоциации $K(T, T_w)$ из [2] с использованием модели 2, штриховые — модели 1. Расчеты по модели с одной усредненной колебательной температурой (уравнение колебательной релаксации (1.6)) обозначены цифрой 1, расчеты системы уравнений (1.1)–(1.5) с разными колебательными температурами — цифрой 2. Штрихпунктирные линии соответствуют расчетам с использованием однотемпературного приближения для констант скорости диссоциации $K(T)$ из [2], описывающих неравновесную среду. Линии 3 получены с применением равновесных констант скорости диссоциации $K^0(T)$ из [2], что соответствует предельному случаю равновесной среды, в которой колебания молекул возбуждаются всегда намного быстрее, чем происходит диссоциация (при температурах $T > 6000$ – 8000 К это предположение не выполняется).



Фиг. 1

На фиг. 1 приведена зависимость теплового потока от времени спуска орбитального корабля «Буран». Представленный отрезок траектории охватывает диапазон высот $H = 100-52$ км, поверхность тела предполагается некаталитической по отношению к химическим реакциям рекомбинации.

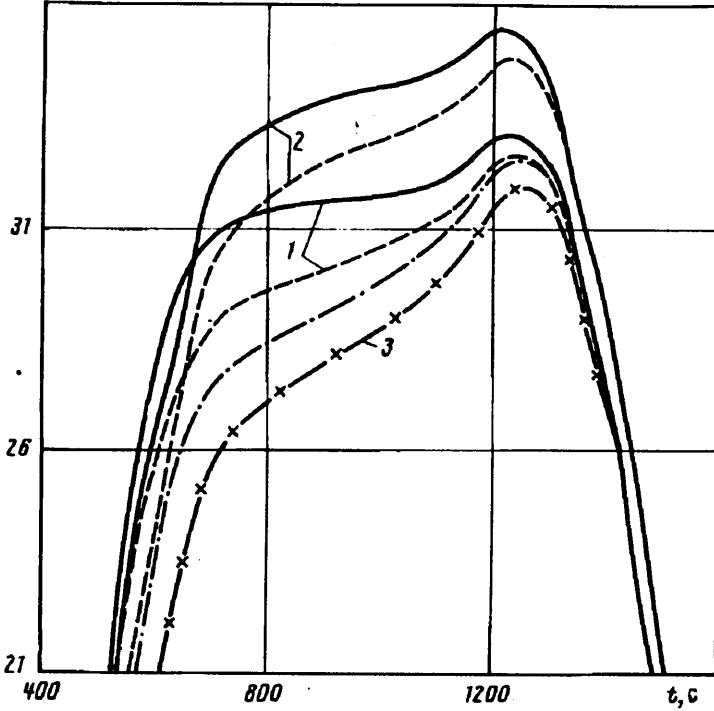
Наравновесное возбуждение колебательных степеней свободы существенно сказывается на всем теплонапряженном участке траектории. Если сравнивать с результатами расчетов по модели 2 с разными колебательными температурами, то отличие от расчетов без учета колебательной релаксации (с использованием K^0) достигает 50% в тепловом потоке и 250 К в равновесной температуре поверхности. Использование аппроксимации $K(T)$ также приводит к увеличению теплового потока, но результаты лежат ниже, чем при расчетах с учетом колебательной релаксации.

На начальном участке траектории модель с усредненной колебательной температурой приводит к большим значениям теплового потока, но затем для модели с разными колебательными температурами термодинамически неравновесный характер течения сохраняется в большей степени и тепловые потоки могут различаться на 20%, а равновесная температура поверхности — на 190 К.

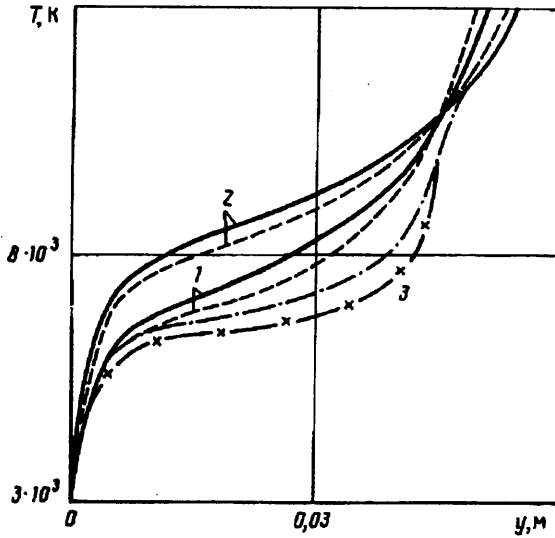
Использование моделей диссоциации 1 и 2 приводит к разным результатам. Различие в значениях теплового потока между моделями может составлять до 15%, а в равновесной температуре поверхности — до 50 К.

На фиг. 2 представлены зависимости теплового потока от времени спуска для поверхности с константами скоростей гетерогенной рекомбинации $k_{wO} = k_{wN} = 3$ м/с, $k_{wNO} = 0$, что соответствует каталитической активности покрытия углерод — углерод орбитального корабля «Буран». В этом случае учет колебательной релаксации приводит к увеличению теплового потока до 25%, а отличие между моделями 1 и 2 составляет до 7%.

На фиг. 3, 4 приведены профили поступательной и колебательных температур

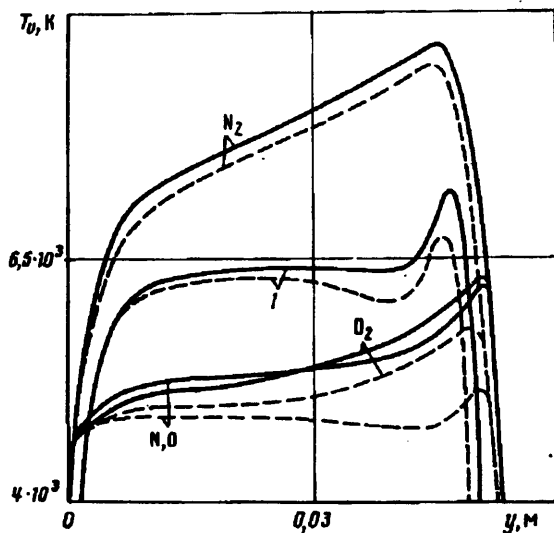
$Q, \text{BT}/\text{CM}^2$ 

Фиг. 2

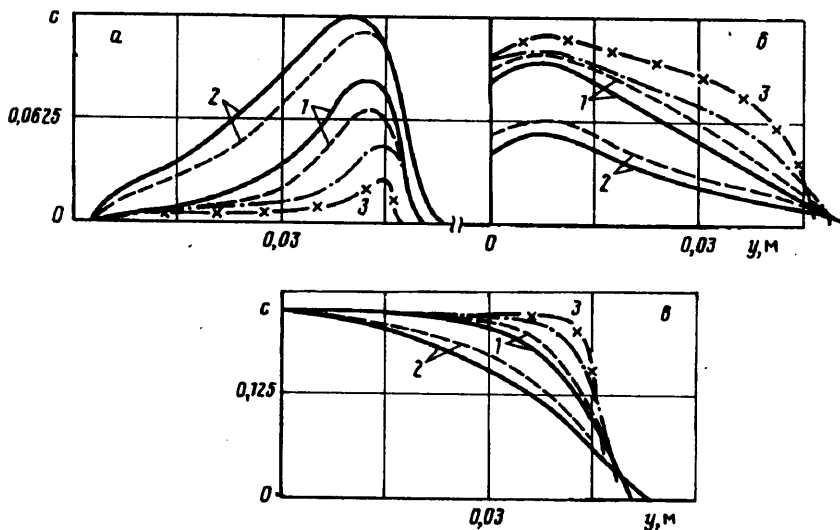


Фиг. 3

при $t = 1300$ с ($H = 65,6$ км, $V_{\infty} = 5,6$ км/с). Колебательные температуры молекулярных компонентов значительно различаются между собой. На начальном участке траектории усредненная температура близка к T_{v, N_2} , а $T_{v, NO}$ и T_{v, O_2} имеют существенно большие значения. С уменьшением высоты полета состояние молекул N_2 наиболее близко к термодинамически равновесному, а усредненная колеба-



Фиг. 4



Фиг. 5

тельная температура расположена между T_{v,N_2} и $T_{v,NO}$, T_{v,O_2} . Для модели 2 диссоциации характерны более высокие значения как поступательной, так и колебательных температур внутри ударного слоя и больший отход ударной волны по сравнению с моделью 1 диссоциации.

На фиг. 5 представлены профили массовой концентрации с молекул NO и атомов N и O (а, б, в) в той же точке траектории. Профили иллюстрируют сильную зависимость состава воздуха от выбранной модели диссоциации и влияние разных колебательных компонентов.

Приведенные результаты показывают, что необходимо дальнейшее уточнение модели диссоциации при отсутствии равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы. Представление суммарной константы диссоциации как функции только от поступательной температуры не отслеживает изменение режимов течения при движении вдоль планирующей траектории входа.

Автор благодарен Г. А. Тирскому за помощь и внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тирский А. Г., Щербак В. Г. Влияние колебательной релаксации при обтекании тел химически неравновесным воздухом с учетом вязкости//Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 1. С. 151—157.
2. 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.: Энергоиздат, 1987. С. 3—31.
3. Лосев С. А., Генералов Н. А. К исследованию явлений возбуждения колебаний и распада молекул кислорода при высоких температурах//Докл. АН СССР. 1961. Т. 141. № 5. С. 1072—1075.
4. Marrone P. V., Treanor C. E. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels//Phys. Fluids. 1963. V. 6. № 9. P. 1215—1221.
5. Куксенко Б. В., Лосев С. А. Возбуждение колебаний и распад двухатомных молекул при атом-молекулярных столкновениях в газе высокой температуры//Докл. АН СССР. 1969. Т. 185. № 1. С. 69—72.
6. Millikan R. C., White D. R. Systematics of vibrational relaxation//J. Chem. Phys. 1963. V. 39. № 12. P. 3209—3213.
7. Park C. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles//AIAA Pap. 1984. № 1730. 11 p.
8. Козлов П. В., Павлов В. А., Макаров В. Н. и др. Экспериментальное определение константы колебательного энергообмена в системе $N_2 - O_2$ //Отчет Ин-та механ. МГУ. 1989. № 3876. 21 с.
9. Treanor C. E., Marrone P. V. Effect of dissociation of the rate of vibrational relaxation//Phys. Fluids. 1962. V. 5. № 9. P. 1022—1026.
10. Тирский А. Г., Щелин В. С., Щербак В. Г. Влияние неопределенности химической кинетики на конвективный теплообмен//Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 6. С. 146—151.
11. Лозино-Лозинский Г. Е. Полет «Бурана»//Гагаринские научные чтения по космонавтике и авиации 1989. М.: Наука, 1990. С. 6—21.
12. Щербак В. Г. О граничных условиях на ударной волне при сверхзвуковом обтекании//ПМТФ. 1989. № 1. С. 49—56.

Москва

Поступила в редакцию
5.VI.1991