

УДК 533.6.011.8:532.526.2

© 1999 г. О.Г. БУЗЫКИН, **В.И. НОСИК****О ВЛИЯНИИ НЕРАВНОВЕСНОСТИ КОЛЕБАНИЙ НА ДИССОЦИАЦИЮ
И ТЕЧЕНИЕ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ**

На примере течения бинарной смеси молекул и атомов азота в окрестности критической точки затупленного тела в приближении поуровневой колебательной кинетики рассмотрено влияние неравновесного распределения колебательной энергии на скорость диссоциации и распределение макропараметров в пограничном слое.

При расчете параметров химически неравновесного пограничного слоя при гиперзвуковом обтекании некаталитической по отношению к химической реакции поверхности важное значение имеют модели химической кинетики и колебательной релаксации. В настоящее время нет общепринятых моделей. Использование различных двухтемпературных моделей химической кинетики приводит к заметному разбросу рассчитанных параметров, в частности теплового потока к поверхности, в зависимости от вида модели, значения входящих в нее параметров и степени каталитичности поверхности по отношению к колебательной релаксации [1–3].

Разнообразие макроскопических моделей и разброс численных значений констант реакций могут быть вызваны неравновесностью колебательных степеней свободы, не описываемой в рамках двухтемпературного приближения. Поскольку условия, в которых измеряются константы, могут существенно отличаться от тех, при которых они используются, а также не соответствовать предположениям, сделанным при теоретическом рассмотрении, такой разброс неудивителен.

Лучший результат можно получить путем использования более детального, чем макроскопическое, описания – например, приближения поуровневой колебательной кинетики. Такой подход применен в [4–7] для исследования влияния неравновесного распределения колебательной энергии на параметры течения в пограничном и вязком ударном слое. При этом скорость химической реакции считалась функцией макроскопических параметров – поступательной температуры, плотности и степени диссоциации, и не зависела от функции распределения колебательной энергии. Подробный анализ кинетических моделей [4–7] будет дан ниже.

Значение моделей поуровневой колебательной кинетики подчеркивается тем обстоятельством, что для высокопороговых реакций, идущих преимущественно с верхних колебательных уровней (например, диссоциации), в течениях с диффузионным переносом частиц влияние неравновесного, возмущенного полем течения, распределения колебательной энергии на константу скорости диссоциации может сказаться даже при малых, по сравнению с газодинамическим временем, временах колебательной релаксации [8–10]. Согласно [11], это может заметно уменьшить тепловой поток к некаталитической поверхности; однако приближенные локальные модели [8–10] не способны дать правильную количественную оценку эффекта.

В [12] предложена модель поуровневой колебательной кинетики, согласующаяся с экспериментальными данными по диссоциации азота за ударной волной. В этой модели учитывалось влияние неравновесного распределения колебательной энергии на скорость диссоциации. В настоящей работе на основе этой модели проводится

расчет параметров пограничного слоя в окрестности критической точки затупленного тела, обтекаемого диссоциированным азотом. Проводится сравнение результатов с расчетом по различным одно- и двухтемпературным макроскопическим моделям.

1. Рассмотрим течение смеси атомов и колебательно-возбужденных молекул азота вблизи критической точки затупленного тела. Следуя распространенному подходу [13, 14], применим к уравнениям пограничного слоя преобразование Дородницына – Лиза. На линии симметрии течение в пограничном слое описывается уравнениями

$$(ff'')' + ff' + \frac{1}{1+j} \left[\frac{\rho_\delta}{\rho} - (f')^2 \right] = 0 \quad (1.1)$$

$$(j_{li})' - f\alpha'_i - R_i = 0 \quad (1.2)$$

$$q' - fH' = 0 \quad (1.3)$$

$$f' = \frac{u}{u_\delta}, \quad l = \frac{\rho\mu}{\rho_\delta\mu_\delta}$$

$$j_{li} = -dl_\alpha Y'_i - j_2 Y_i, \quad j_2 = -l_\alpha \alpha', \quad l_\alpha = \frac{\rho^2 D_{12}}{\rho_\delta \mu_\delta}, \quad Y_i = \frac{\alpha_i}{(1-\alpha)}, \quad d = \frac{1-\alpha^2}{(1-\alpha)D_{12}/D + 2\alpha}$$

$$q = q_t + q_{ch}, \quad q_{ch} = q_v + q_{ch1} + q_{ch2}, \quad q_t = -l_T \left(\frac{T}{T_\delta} \right)', \quad l_T = \frac{\rho\lambda}{\rho_\delta \mu_\delta c_{p\delta}}$$

$$q_v = -\sum_{i=0}^N dl_\alpha Y'_i h_i, \quad q_{ch1} = -\sum_{i=0}^N j_2 Y_i h_i, \quad q_{ch2} = j_2 h_2$$

$$H = \sum_{i=0}^N \alpha_i h_i + h_2, \quad h_2 = \frac{\alpha}{c_{p\delta} T_\delta} (c_{p2} T + Q), \quad h_i = \frac{1}{c_{p\delta} T_\delta} (c_{p1} T + E_i)$$

Здесь f – безразмерная функция тока; u , ρ и T – тангенциальная компонента скорости, плотность и температура газа соответственно; α_i – относительная массовая концентрация, $\alpha = 1 - \sum_{i=0}^N \alpha_i$ – степень диссоциации; μ , D_{12} , D и λ – коэффициенты

вязкости, бинарной диффузии, самодиффузии и теплопроводности; H – безразмерная энтальпия смеси, c_p – удельная теплоемкость поступательных и вращательных степеней свободы, Q и E_i – энергия диссоциации и колебательная энергия на единицу массы; R_i – безразмерная скорость заселения колебательного уровня. Здесь и далее индекс 1 относится к молекулам, индекс 2 – к атомам, $i = 0, \dots, N$ – номер колебательного уровня, индекс δ относится к внешней границе пограничного слоя. Параметр $j = 0$ для плоского и $j = 1$ для осесимметричного течения. Безразмерный диффузионный поток j_{li} записан согласно [15]. Полный безразмерный тепловой поток q представлен суммой теплопроводностной q_t и химической q_{ch} составляющих. Штрихом здесь и далее обозначено дифференцирование по безразмерной переменной

$$\eta = \left[\frac{\beta(1+j)\rho_\delta}{\mu_\delta} \right]^{1/2} \int_0^\eta \frac{\rho}{\rho_\delta} dy, \quad \beta = \frac{du_\delta}{dx}$$

где x – тангенциальная координата. Для гиперзвукового обтекания $\beta = R_b^{-1} [2(p - p_\infty)/\rho_\delta]^{1/2}$, R_b – радиус кривизны тела в окрестности критической точки, p – давление в критической точке, p_∞ – давление перед ударной волной.

Вне пограничного слоя газ будем считать равновесным, при этом условия на его внешней границе имеют вид

$$\eta \rightarrow \infty: f' = 1, \quad \alpha_i = Y_i^0(T_\delta)(1 - \alpha_\delta), \quad H = H^0(T_\delta)$$

где $Y_i^0(T)$ – равновесное бoльцмановское распределение, $H^0(T)$ – равновесная энтальпия.

На поверхности

$$\eta = 0: f = 0, f' = 0, H = H^0(T_w)$$

индекс w здесь и далее обозначает параметры на стенке.

Рассмотрены четыре сочетания предельных случаев граничных условий для α_i на стенке: идеальная каталитичность или идеальная некаталитичность по отношению к рекомбинации (далее обозначаются как CR и NR соответственно) и по отношению к колебательной релаксации (CV, NV). При $\eta = 0$ для CV-поверхностей $\alpha_i = (1 - \alpha)Y_i^0(T_w)$, для NV-поверхностей $[\alpha_i/(1 - \alpha)]' = 0$. В этих формулах для CR-поверхностей α равно равновесному значению при температуре стенки T_w , для NR – должно быть найдено из условия $\alpha' = 0$.

С учетом приведенных соотношений уравнения (1.2) удобно преобразовать к отдельным уравнениям для степени диссоциации α и относительной населенности колебательных уровней Y_i

$$(l_\alpha \alpha')' + f \alpha' + R_a = 0, R_a = - \sum_{i=0}^N R_i \quad (1.4)$$

$$(dl_\alpha Y_i)' + [j_2 + f(1 - \alpha)]Y_i' + R_i + R_a Y_i = 0 \quad (1.5)$$

при этом уравнение сохранения энергии в тех же обозначениях примет вид

$$(l_T \theta')' + [f c_p - j_2(c_{p2} - c_{p1})] \frac{1}{c_{p\delta}} \theta' - \sum_{i=0}^N R_i h_i - R_a h_2 = 0 \quad (1.6)$$

$$c_p = \alpha c_{p2} + (1 - \alpha)c_{p1}, \theta = T / T_\delta$$

Аналогичные уравнения использованы также при расчетах по макроскопическим моделям. В случае однотемпературной модели уравнение (1.5) переходит в равенство $Y_i = Y_i^0(T)$, а в случае двухтемпературной сводится путем суммирования по i к уравнению для колебательной энергии $E_v = \sum_{i=1}^N E_i Y_i$, в котором аппроксимация члена

$\sum_{i=0}^N E_i R_i$ зависит от конкретной модели.

Коэффициенты переноса бинарной смеси выражаются через парциальные коэффициенты переноса μ_k, λ_k ($k = 1, 2$) и для случая диссоциирующего двухатомного газа имеют вид [14]

$$\mu = \frac{\mu_1(1 - \alpha)}{(1 - \alpha) + 2G_{12}\alpha} + \frac{\mu_2\alpha}{\alpha + (\mu_2/\mu_1)G_{12}(1 - \alpha)}$$

$$\lambda = \frac{\lambda_1(1 - \alpha)}{(1 - \alpha) + 2aG_{12}\alpha} + \frac{\lambda_2\alpha}{\alpha + (\mu_2/\mu_1)aG_{12}(1 - \alpha)}$$

$$a = 1,065, G_{12} = 0,204(1 + 0,841\sqrt{\mu_2/\mu_1})^2, \lambda_k = \lambda_k^0 + \rho D c_{vk}$$

где λ_k^0 – парциальный коэффициент теплопроводности k -го компонента смеси без учета внутренних степеней свободы, c_{vk} – равновесное значение удельной теплоемкости вращательных степеней свободы. Парциальные коэффициенты переноса вычисляются через приведенные Ω -интегралы [16]. Данные по сечениям взаимодействия и аппроксимации Ω -интегралов заимствованы из [17].

Скорость реакции R_i можно представить в виде

$$R_i = \frac{p}{kT\beta(1+j)(1+\alpha)} \left\{ \sum_{k=1}^2 (J_{i+1}^k - J_i^k) + (J_{i+1}^{VV} - J_i^{VV}) + \right. \\ \left. + [(1+\alpha)k_{fi}^1 + 2\alpha(k_{fi}^2 - k_{fi}^1)] \left(Y_i^0 K_c^{-1} \frac{\alpha^2}{1+\alpha} - \alpha_i \right) \right\}$$

$$J_i^1 = (k_{i,i-1}^1 \alpha_i - k_{i-1,i}^1 \alpha_{i-1})(1-\alpha), \quad J_i^2 = 2(k_{i,i-1}^2 \alpha_i - k_{i-1,i}^2 \alpha_{i-1})\alpha$$

$$J_i^{VV} = \sum_j (k_{i,i-1}^{j,j+1} \alpha_i \alpha_j - k_{i-1,i}^{j+1,j} \alpha_{i-1} \alpha_{j+1})$$

Здесь предполагается, что уровневые константы скорости прямой k_{fi}^k и обратной k_{ri}^k реакций связаны согласно принципу микроскопической обратимости соотношением $k_{fi}^k Y_i^0(T) = k_{ri}^k K_c [4p/(kT)]$, а величину K_c можно представить в виде [18, 12]

$$K_c = \rho_d \frac{k}{2m} \frac{T}{p} \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right), \quad \rho_d = 3,702 T^{1/2} [1 - \exp(-E_1/kT)], \quad \text{г/см}^3$$

где m – масса атома, k – постоянная Больцмана. Энергии колебательных уровней вычислялись по формуле ангармонического осциллятора Морзе. Параметры осциллятора и константы скорости VT-, VT⁻-, VV-обменов $k_{i,i-1}^i$, $k_{i-1,i}^i$, $k_{i,i-1}^{j,j+1}$ и $k_{i-1,i}^{j+1,j}$ приведены в [12].

Для вычисления распределения вероятности диссоциации по колебательным уровням использована предложенная в [12] модель, согласно первому варианту которой

$$k_{fi}^k = s \sigma^k g^k \exp(E_i/kT) \exp(E_i/kU^k(T)) \exp(-Q/kT) \quad (1.7)$$

во втором варианте

$$k_{fi}^k = C^k(T) k_f^k(T) \exp(E_i/kT + E_i/U) \quad (1.8)$$

Здесь σ^k – газокинетическое сечение столкновения, g^k – средняя относительная скорость сталкивающихся частиц, $k_f^k(T)$ – макроскопическая константа скорости диссоциации. Параметры $U^k(T)$ и U аналогичны использованному в [19] параметру U , введенному для учета предпочтительной диссоциации с верхних уровней.

Использованы четыре набора параметров модели, в равной степени согласующихся с имеющимися экспериментальными данными по диссоциации за ударной волной и отличающихся друг от друга скоростью убывания вероятности диссоциации с уменьшением энергии колебательного уровня, а также характером температурной зависимости распределения вероятности

$$C^k(T) = -A_1^k + A_2^k T \cdot 10^{-4}, \quad U^k(T) = Q(B_1^k - B_2^k T \cdot 10^{-4})^{-1}$$

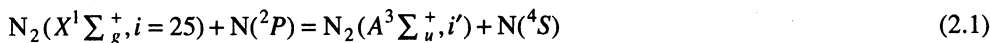
Для $U = Q/3$: $A_1^1 = 0,0271$, $A_2^1 = 0,655$, $A_1^2 = 0,0711$, $A_2^2 = 0,903$; для $U = Q/6$: $A_1^1 = 0,307$, $A_2^1 = 3,08$, $A_1^2 = 0,783$, $A_2^2 = 5,31$; для $s = 0,1$: $B_1^1 = 6,19$, $B_2^1 = 3,77$, $B_1^2 = 8,85$, $B_2^2 = 0,56$; для $s = 0,03$: $B_1^1 = 8,01$, $B_2^1 = 3,09$, $B_1^2 = 11,18$, $B_2^2 = 0,66$. Эти аппроксимации пригодны в температурном диапазоне 1500–9000 К.

В однотемпературном приближении константа скорости диссоциации бралась из [20] при $T = T_v$ (T_v – колебательная температура). В двухтемпературных моделях константа скорости диссоциации представлялась в виде $k_f^k(T, T_v) = k_f^k(T) V(T, T_v)$, где $V(T, T_v)$ – поправка, учитывающая различие температур T_v и T . Для всех рассмотренных макроскопических моделей значения $k_f^k(T)$ и времени колебательной

релаксации в настоящей работе одинаковы, они же использовались в [12] при выводе количественных параметров многоуровневой модели. Это обеспечило корректность сравнения результатов расчетов.

2. Другая модель [4, 5], учитывающая роль электронных уровней в кинетике диссоциации N_2 , использовалась, в частности, в [7]. Подчеркнем, что в [4–7, 21] и в других известных авторам работах скорость химической реакции считалась функцией температуры и концентрации и не зависела от функции распределения по колебательным степеням свободы молекул.

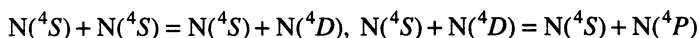
Согласно модели [4, 5], основным каналом диссоциации является диссоциация с верхних колебательных уровней электронно-возбужденной молекулы, образующейся при столкновении с атомом, находящимся во втором электронном состоянии. Атом при столкновении с молекулой, находящейся на 25-м колебательном уровне основного электронного состояния, переходит в основное электронное состояние, а убыль электронно-возбужденных атомов восполняется в реакциях столкновений атом – атом. При такой резонансной схеме колебательные переходы электронно-возбужденной молекулы не существенны, роль процессов на колебательных уровнях основного состояния при $i > 25$ невелика. Кинетическая схема процессов описывается реакциями



Для констант реакций в [4, 5] использованы значения $k_f^1 \approx k_r^1 = 5 \cdot 10^{-11}$ см/с, $k_f^2 = 1,8 \cdot 10^{-12}$ см³/с. Константа k_f^2 в [4, 5] не приводится, но может быть определена по константе равновесия $k_f^2 \approx k_r^2 \exp[-\epsilon_e(^2P)/kT] = k_r^2 \exp(-41300/T) \ll k_r^2$. По утверждению авторов [4, 5], использованные ими константы заимствованы из [22], где они определены для $T = 300$ К и нижних колебательных уровней электронно-возбужденной молекулы ($i' < 8$). В [4, 5] эти константы без коррекции перенесены в диапазон 300–8000 К и больших i' .

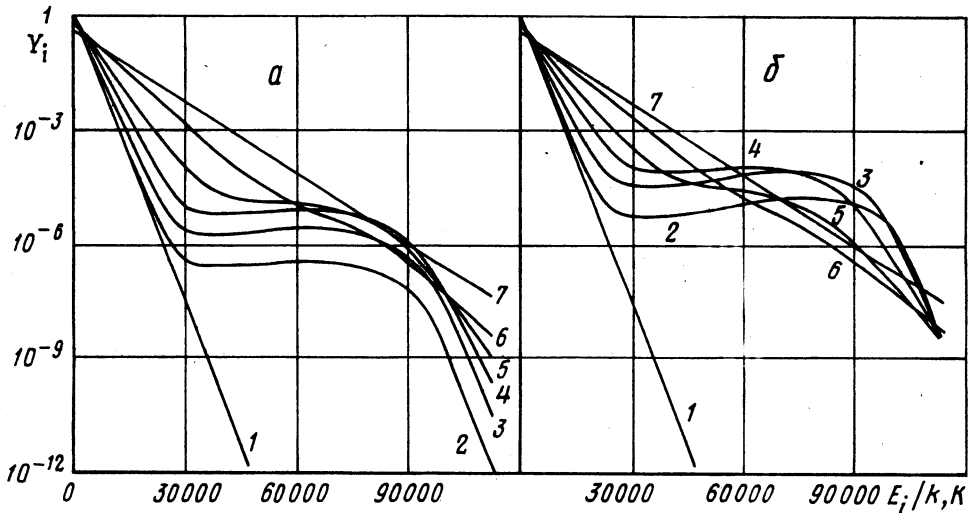
Для данного набора констант скорости обратных реакций (2.1), (2.2) значительно выше скорости рекомбинации, так что описанная выше модель может отражать процессы, в которых преобладает рекомбинация. Для процессов, где существенна также и диссоциация (в пограничном слое скорость диссоциации в приближении поуровневой колебательной кинетики не мала даже вблизи поверхности и сравнима со скоростью рекомбинации), эта модель неприменима, так как, несмотря на то, что скорость реакции (2.1) в прямом направлении больше скорости диссоциации, скорость прямой реакции (2.2) мала, вследствие чего цепочка реакций (2.1), (2.2) рвется и убыль $N(^2P)$ в процессе диссоциации не восполняется.

В действительности схема (2.1), (2.2) и основанные на ней модели диссоциации-рекомбинации, по-видимому, не реализуются ни при каких обстоятельствах. В цитируемой в [4, 5] литературе, в современных обзорах [6, 23] константа k_r^2 реакции (2.2) отсутствует. Есть основания считать, что реакция (2.2) идет в две стадии [23]

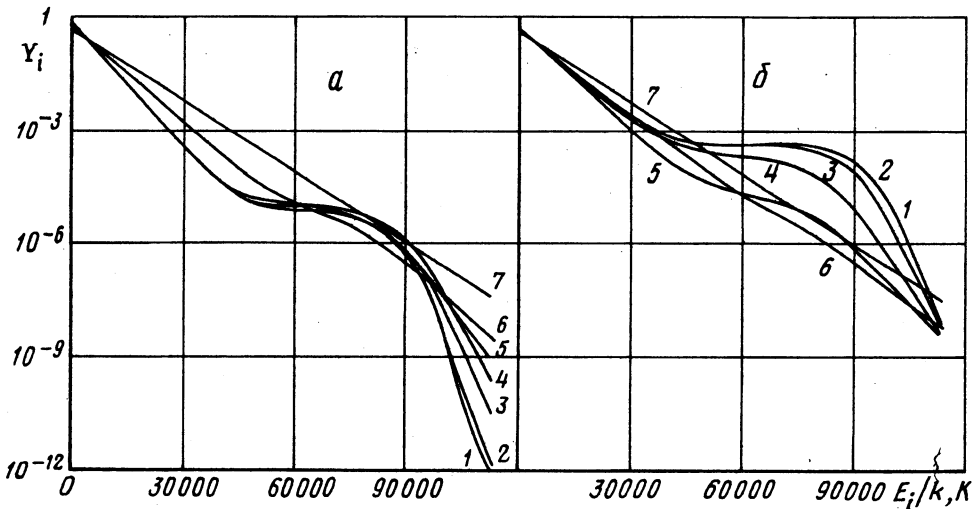


причем для константы k_r^4 в [6, 23] приведено значение $1,8 \cdot 10^{-12}$ см³/с. Константа k_r^3 из-за большего дефекта энергии существенно меньше k_r^4 , так что константа k_r^2 итоговой двухстадийной реакции очень мала. В более поздних работах [6, 21] модель, базирующаяся на реакциях (2.1), (2.2), не используется.

3. Система уравнений (1.4)–(1.6) с описанным выше набором кинетических параметров решалась численно при $R_b = 1$ м, $T_8 = 7000$ К, $\theta_w = 0,25$, $p = 10^5$ Па, что



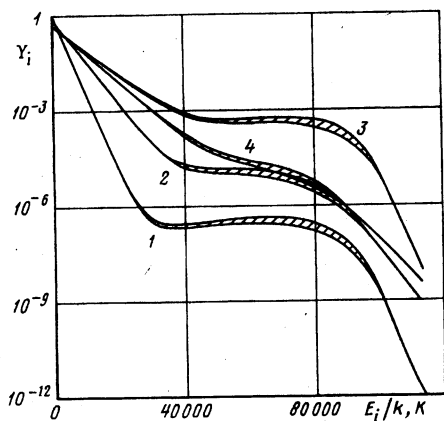
Фиг. 1. Функции распределения по колебательным степеням свободы Y_i для поверхностей типа CV: а – CR-поверхность, б – NR-поверхность. Кривые 1 – $\eta = 0$, 2 – 0,01, 3 – 0,06, 4 – 0,2, 5 – 0,5, 6 – 1,1, 7 – 6,0



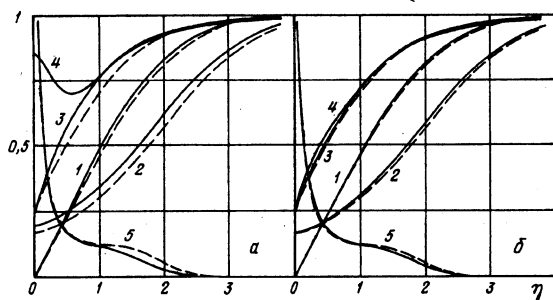
Фиг. 2. Функции распределения по колебательным степеням свободы Y_i для поверхностей типа NV: а – CR-поверхность, б – NR-поверхность. Обозначения кривых см. на фиг. 1

приблизительно соответствует условиям полета на высоте 45 км со скоростью 7 км/с (число Маха около 20).

Для решения использовалась итерационная схема, существенно учитывающая специфику данной задачи. Линейные операторы переноса импульса, энергии и населенностей колебательных уровней молекул аппроксимировались со вторым порядком точности на неравномерной сетке, сгущающейся по направлению к стенке. Операторы записывались в неявной форме, а их коэффициенты (за исключением j_2) – в явной. Поток j_2 получался в результате расчета очередного приближения распределения степени диссоциации (уравнение (1.4)), в динамике установления которого наиболее быстрые процессы в значительной степени компенсируются и слабо влияют на устойчивость алгоритма в целом. Неявная схема позволяет снять весьма жесткие



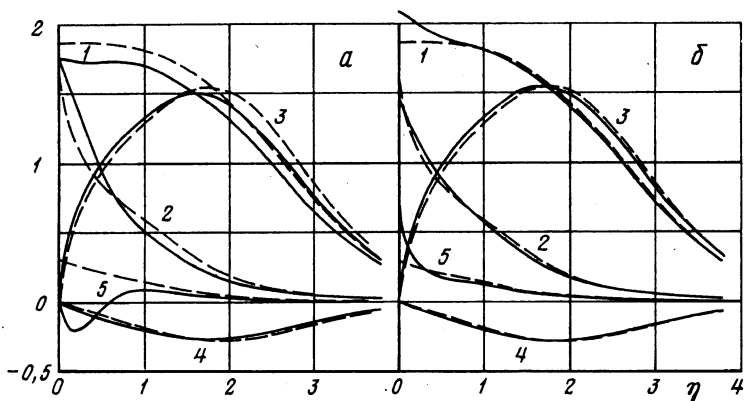
Фиг. 3



Фиг. 4

Фиг. 3. Функции распределения по колебательным степеням свободы Y_i при различных вариантах модели поуровневой колебательной кинетики для поверхностей типа CR (1,2) и NR (3, 4); $\eta = 0,01$ (1, 3), 0,5 (2, 4)

Фиг. 4. Зависимости u/u_0 (1), α/α_0 (2), T (3), T_V (4) и суммарной скорости реакции (5) от координаты η для поверхностей типа NRNV (а) и NRCV (б). Сплошные кривые – поуровневая колебательная кинетика, штриховые – однотемпературная модель



Фиг. 5. Полный безразмерный тепловой поток q (1), его теплопроводная составляющая q_t (2), тепловые потоки за счет диффузии атомов q_{ch2} (3), "химическая" q_{ch1} (4) и "колебательная" q_V (5) составляющие потока тепла за счет переноса молекул для поверхностей типа NRNV (а) и NRCV (б)

ограничения на величину шага итерации, связанные с быстрыми VV-процессами. К уравнениям для Y_i применен метод расщепления оператора переноса на пространственную и релаксационную части, аналогичный методу суммарной аппроксимации для нестационарных уравнений. Такой подход позволил использовать при решении системы линейных уравнений на шаге итерации стандартный алгоритм прогонки. Поскольку в этом случае точность аппроксимации исходного уравнения зависит не только от пространственной сетки, но и от шага итерации, влияние обоих этих факторов на результат расчета проверялось для всех вариантов. Все представленные ниже результаты имеют точность не хуже 1%.

Функции распределения по колебательным степеням свободы в различных сечениях пограничного слоя для второго варианта модели [12] поуровневой колебательной кинетики (формула (1.8) при $U = Q/6$) приведены на фиг. 1, 2. Во всех случаях при $\eta \leq 1$ функции распределения существенно неравновесны. Для всех кривых при этом характерно наличие трех областей. При относительно малых энергиях функции распределения близки к больцмановским с колебательной температурой, при высоких – к больцмановским с поступательной температурой и переменным числом частиц, в промежуточной области – слегка возрастающее плато, т.е. функции распределения по колебательным уровням инверсно заселены. Населенности средних и верхних уровней для NV-поверхности при $\eta \leq 1$ оказываются на 2–3 порядка выше, чем для CV. При этом для NV-поверхности в области плато Y_i убывают по мере удаления от поверхности, в то время как для CV-поверхности – возрастают. Таким образом, распределение по внутренним степеням существенно неравновесное и, следовательно, связанные с ним явления могут неверно описываться в рамках макроскопических моделей.

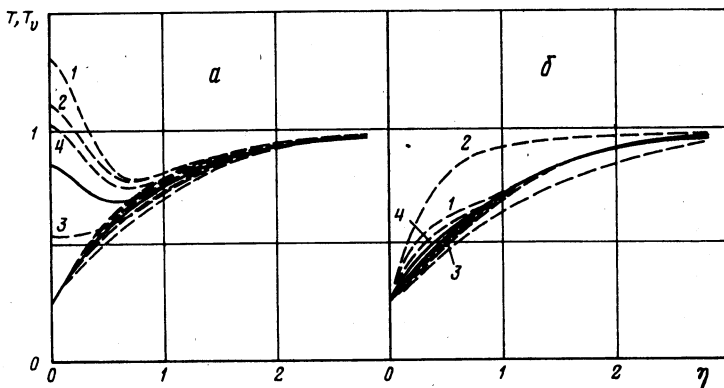
Для поверхностей типа NV при $\eta \leq 1$ колебательная температура заметно превышает поступательную, а степени диссоциации близки. Это должно приводить к увеличению теплового потока на CV-поверхности по сравнению с NV-поверхностью, так как в последнем случае часть энергии остается в колебательных степенях свободы и уносится потоком.

Сравнение различных вариантов модели многоуровневой колебательной кинетики показало, что в рассматриваемой задаче, как и в неподвижном газе или в ударной волне [12], они дают близкие результаты (фиг. 3). Поэтому в дальнейшем приводятся только данные для второго варианта модели [12] поуровневой колебательной кинетики (формула (1.8)) при $U = Q/6$.

Типичные результаты расчетов распределения макропараметров для NR-поверхностей представлены на фиг. 4 в виде зависимостей параметров пограничного слоя от координаты η . Из представленных данных видно, что для распределения макропараметров однотемпературная модель и поуровневое описание дают близкие результаты, за исключением распределения колебательной температуры для NV-поверхности. Это объясняется тем, что хотя вблизи поверхности скорость диссоциации, вычисленная в приближении поуровневой колебательной кинетики, существенно выше, чем в однотемпературном приближении, суммарная скорость реакции изменяется незначительно (кривые 5). Аналогичная ситуация наблюдалась и в неподвижном газе при скачкообразном уменьшении температуры [12]. Размер области, в которой колебательная температура отлична от поступательной ($\eta \approx 1$ в рассматриваемом случае), соответствует оценкам [8–11].

На фиг. 5 приведен полный безразмерный тепловой поток q , его теплопроводностная составляющая q_p , тепловые потоки за счет диффузии атомов q_{ch2} и молекул q_{chl} , а также "колебательная" составляющая потока тепла за счет переноса молекул q_v в зависимости от координаты η . Для NV-поверхности распределение q_v имеет немонотонный характер и при $\eta \leq 1$ заметно отличается от распределения соответствующей компоненты в однотемпературной модели. Причина этого та же, что и причина немонотонного характера изменения колебательной температуры – рост числа сильно-возбужденных молекул вблизи поверхности (см. фиг. 2, б). Изменение q_v практически компенсируется изменением теплопроводностной составляющей, так что суммарный тепловой поток оказывается меньше на 5%, чем в однотемпературном приближении. Как отмечалось выше, ситуация аналогична случаю скачкообразного изменения температуры в неподвижном газе, так как в рассматриваемом случае поверхность не вносит возмущений, а роль диффузии возбужденных молекул незначительна.

Отметим, что, согласно модели [4,5], уменьшение теплового потока за счет конечности скорости колебательной релаксации на NV-поверхности достигает 30%, однако сама эта модель, как уже было сказано, вызывает сомнения.



Фиг. 6. Зависимости поступательной и колебательной температур от координаты η в случае поверхностей типа NRNV (а) и NRCV (б) для различных двухтемпературных моделей (штриховые кривые: 1 – модель Парка [20], 2 – β -модель [24], 3 – модель Мачерета – Рича [25], 4 – модель Мэрона – Тринора [19]). Сплошные кривые – поуровневая колебательная кинетика, штрихпунктирные – однетемпературная модель

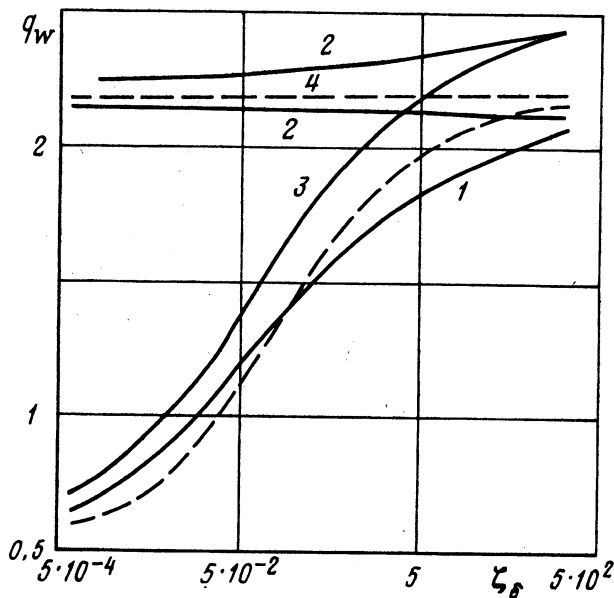
Для CV-поверхности распределение теплового потока и его составляющих в приближении поуровневой колебательной кинетики и в однетемпературном приближении близки, за исключением узкой пристеночной области. Вблизи поверхности составляющая потока тепла q_v резко возрастает вследствие роста градиента колебательной энергии (см. фиг. 4, б). Некоторое уменьшение градиента поступательной температуры и связанное с ним уменьшение теплопроводностной составляющей теплового потока q_t , не компенсируют этого увеличения, вследствие чего суммарный тепловой поток у поверхности в рассматриваемом случае увеличивается на 10%.

Таким образом, однетемпературное приближение в пограничном слое не описывает эффекты, связанные с каталитичностью поверхности по отношению к колебательной релаксации, в частности изменение теплового потока при изменении степени такой каталитичности, и не дает адекватного описания неравновесных по колебательным степеням свободы процессов.

Использование известных двухтемпературных моделей в случае поверхностей NR-типа приводит к существенному отличию распределения колебательной температуры для NV-поверхности (фиг. 6, а) и заметному изменению профилей колебательных и поступательных температур для CV-поверхности (фиг. 6, б). Распределения остальных макропараметров, за исключением теплового потока на NV-поверхности для всех рассмотренных моделей и степени диссоциации для модели [24], близки. Значения полного теплового потока на поверхности с различной степенью каталитичности по отношению к колебательной релаксации для рассмотренных моделей приведены ниже:

Модель	Некаталитическая	Каталитическая
Поуровневая	1,751	2,086
Однетемпературная	1,870	1,870
Парк [20]	1,669	1,890
β -модель [24]	1,580	1,815
Мачерет – Рич [25]	1,813	1,867
Мэрон – Тринор [19]	1,698	1,886

На CV-поверхности все рассмотренные двухтемпературные модели дают практически те же значения теплового потока, что и однетемпературная модель. На NV-поверхности значения теплового потока на 5–15% меньше, чем в однетемпературном



Фиг. 7. Тепловой поток q_w в зависимости от числа ζ_δ на поверхностях типа NRNV (1), CRCV (2), NRCV (3) и CRNV (4). Сплошные кривые – поуровневая колебательная кинетика, штриховые – однотемпературная модель

приближении, причем те модели, которые лучше совпадали с однотемпературным приближением в пространственно однородном случае, дают завышенные значения теплового потока. Тот факт, что разброс меньше, чем в [1–3], можно объяснить другим температурным диапазоном и составом газа.

Двухтемпературные модели дают меньшее значение теплового потока, чем поуровневая модель, как для CV-, так и для NV-поверхности. Разница составляет 10%, причем для некаталитической поверхности разброс больше, потому что при двухтемпературном описании увеличение колебательной температуры влечет такое понижение поступательной температуры, что увеличение составляющей теплового потока q_v компенсируется снижением его теплопроводностной составляющей q_t . При поуровневом описании снижение поступательной температуры меньше, чем при двухтемпературном, так что уменьшение q_t не компенсирует полностью роста q_v . Большее снижение температуры сильно изменило бы скорость реакции, которая определяется в основном населенностью верхних уровней (а не средней энергией колебательных степеней свободы, как в двухтемпературных моделях) и относительно слабо населенностью нижних, дающих основной вклад в среднюю колебательную энергию.

Изменение теплового потока на поверхности тепла q_w в зависимости от числа Дамкелера газовой фазы ζ_δ , определенного для гиперзвукового обтекания затупленного тела как [11,14]

$$\zeta_\delta = \frac{4}{\beta(1+j)} \left(\frac{p}{k T_\delta} \right)^2 \left[k_{r\delta}^1 + \frac{2\alpha_\delta}{1+\alpha_\delta} (k_{r\delta}^2 - k_{r\delta}^1) \right]$$

приведено на фиг. 7 (в условиях, представленных на фиг. 1–6, $\zeta_\delta = 2,1$). В пограничном слое в случае поверхностей типа NR при $\zeta_\delta \leq 10^{-3}$ реакцию можно считать замороженной. Тепловой поток при этом минимален. С увеличением ζ_δ тепловой поток возрастает. Для однотемпературной кинетики при $\zeta_\delta \geq 10^2$ реакция прак-

тически равновесна, q_w совпадает с тепловым потоком к каталитической поверхности (в рассматриваемом случае равновесная концентрация на поверхности значительно меньше единицы и вблизи равновесия решения задачи для каталитической и некаталитической поверхности совпадают). Для NV-поверхности поуровневая колебательная кинетика и однотемпературная модель дают довольно близкие результаты, в то время как для CV-поверхности тепловой поток, вычисленный в приближении поуровневой колебательной кинетики, больше. Для NR-поверхностей эта разница практически не зависит от числа ζ_8 , а для CR-поверхностей уменьшается с уменьшением ζ_8 . Таким образом, предложенные в [11] приближенные модели неарениусовой кинетики не реализуются на практике. Результаты [8–11] могут быть использованы только для оценки границы области неравновесного колебательного распределения.

Заключение. В случае обтекания затупленного тела равновесно диссоциированным азотом с температурой 7000 К при характерном радиусе затупления около 1 м и давлениях порядка 1 атм в значительной части пограничного слоя, прилегающей к поверхности на линии симметрии, функция распределения колебательной энергии существенно неравновесна и отлична от больцмановской с колебательной температурой или триноровской. Разные варианты поуровневых моделей [12] дают близкие результаты, как и в случае течения газа без диффузионного переноса частиц. В то же время различные двухтемпературные модели дают разные распределения колебательной температуры и значения теплового потока на некаталитической по колебательной релаксации поверхности. Тепловой поток на поверхности в приближении поуровневой кинетики оказывается на 10–15% больше, чем в двухтемпературном приближении.

Учет влияния неравновесного распределения колебательной энергии на скорость диссоциации в пограничном слое в приближении поуровневой колебательной кинетики оказывает слабое влияние на профили скорости, поступательной температуры, плотности и степени диссоциации. Хотя скорости диссоциации и рекомбинации в таком приближении существенно отличаются от тех, что дают макроскопические модели, отличие суммарной скорости реакции оказывается весьма малым. При этом тепловой поток на каталитической по отношению к колебательной релаксации поверхности оказывается на 15–20% больше, чем для некаталитической.

Как показано в [12], двухтемпературные модели, дающие неплохие результаты в неравновесных условиях, вызванных понижением температуры, плохо работают при ее повышении и наоборот. В отличие от них приближение поуровневой колебательной кинетики способно корректно описывать течения, в которых наблюдаются как понижение, так и повышение поступательной температуры, например вязкий ударный слой. В последнем случае учет неравновесности распределения колебательной энергии может оказаться особенно существенным, поскольку диагностику таких течений часто осуществляют путем измерения излучательных характеристик газа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 95-01-00236).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тирский Г.А., Шелин В.С., Шербак В.Г. Влияние неопределенности химической кинетики на конвективный теплообмен // Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 6. С. 146–151.
2. Тирский Г.А., Шербак В.Г. Влияние колебательной релаксации при обтекании тел химически неравновесным воздухом с учетом вязкости // Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 1. С. 151–157.
3. Шербак В.Г. Сравнение моделей диссоциации при отсутствии равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы // ПМТФ. 1992. № 4. С. 26–32.

4. Дорошенко В.М., Кудрявцев Н.Н., Новиков С.С., Сметанин В.В. Влияние на теплопередачу образования колебательно-возбужденных молекул азота при рекомбинации атомов в пограничном слое // Докл. АН СССР. 1988. Т. 301. № 5: С. 1131–1135.
5. Дорошенко В.М., Кудрявцев Н.Н., Новиков С.С., Сметанин В.В. Влияние на теплопередачу образования колебательно-возбужденных молекул азота при рекомбинации атомов в пограничном слое // Теплофизика высоких температур. 1990. Т. 28. № 1. С. 82–89.
6. Дорошенко В.М., Кудрявцев Н.Н., Сметанин В.В. Равновесность внутренних степеней свободы молекул и атомов при гиперзвуковых полетах в верхней атмосфере // Теплофизика высоких температур. 1991. Т. 29. № 5. С. 1013–1027.
7. Armenise I., Capitelli M., Celiberto R., Colonna G., Gorse C. Non-equilibrium vibrational distributions of N_2 under re-entry conditions: the role of atomic nitrogen // AIAA Paper. 1994. № 94–1987. 8p.
8. Макашев Н.К. О влиянии движения газа на кинетику реакций колебательно-возбужденных молекул // Изв. АН СССР. МЖГ. 1984. № 6. С. 100–105.
9. Макашев Н.К., Страхов Л.Б. Термическая диссоциация ангармонических осцилляторов в пограничном слое // Изв. АН СССР. МЖГ. 1987. № 5. С. 130–136.
10. Носик В.И. Неравновесная термическая диссоциация двухатомных молекул с учетом VV-, VT- и VT'-обменов // Изв. РАН. МЖГ. 1994. № 1. С. 171–179.
11. Носик В.И. О влиянии неравновесной диссоциации на течение в пограничном слое // Изв. РАН. МЖГ. 1995. № 4. С. 168–178.
12. Бузыкин О.Г., Носик В.И. К моделированию колебательно-диссоционного взаимодействия // Изв. РАН. МЖГ. 1996. № 6. С. 145–154.
13. Хейз У.Д., Пробстин Р.Ф. Теория гиперзвуковых течений. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. 607 с.
14. Гладков А.А., Полянский О.Ю., Агафонов В.П., Вертушкин В.К. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике. М.: Машиностроение, 1972. 344 с.
15. Галкин В.С., Макашев Н.К. Вычисление переносных свойств многоатомных газов при произвольной неравновесности течения // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1989. Т. 29. № 6. С. 867–877.
16. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
17. Андриатис А.В., Жлуктов С.А., Соколова И.А. Транспортные коэффициенты смеси воздуха химически неравновесного состава // Мат. моделирование. 1992. Т. 4. № 1. С. 44–64.
18. Кларк Дж., Макчесни М. Динамика реальных газов. М.: Мир, 1967. 566 с.
19. Marrone P.V., Treanor C.E. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. V. 6. № 9. P. 1215–1221.
20. Park C. Two-temperature interpretation of dissociation rate data for N_2 and O_2 // AIAA Paper. 1988. № 88–0458. 23p.
21. Дорошенко В.М., Кудрявцев Н.Н., Сметанин В.В. Теплообмен при сверхзвуковом обтекании диссоциированным азотом с учетом образования колебательно-возбужденных молекул // Мат. моделирование. 1989. Т. 1. № 12. С. 13–21.
22. Словецкий Д.И. Механизмы химических реакций в неравновесной плазме. М.: Наука, 1980. 310 с.
23. Kossyi I.A., Kostinsky A.Yu., Matveyev A.A., Silakov V.P. Kinetic scheme of the non-equilibrium discharge in nitrogen-oxygen mixtures // Plasma Sources. Sci. and Technol. 1992. V. 1. № 3. P. 207–220.
24. Кривоносова О.Э., Лосев С.А., Наливайко В.П., Мукосеев Ю.К., Шаталов О.П. Рекомендуемые данные о константах скорости химических реакций между молекулами, состоящими из атомов N и O // Химия плазмы. М: Энергоатомиздат, 1987. Вып. 14. С. 3–31.
25. Macheret S.O., Rich J.W. Theory of nonequilibrium dissociation rates behind strong shock waves // AIAA Paper. 1993. № 93–2860. 18p.