

УДК 533.6.011

РАСЧЕТ ИОНИЗАЦИОННЫХ И ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОЗДУХА В УДАРНОМ СЛОЕ НА ОСНОВЕ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ДИССОЦИАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

С. В. Шиленков

Центральный аэрогидродинамический институт, 140180 Жуковский

На основе результатов численного моделирования неравновесного течения воздуха в ударном слое вблизи аппаратов, совершающих полет в атмосфере, и данных летного и трубного экспериментов по измерению ионизационных и излучательных характеристик ударного слоя проведена верификация моделей колебательно-диссоциационного взаимодействия.

Введение. Важным элементом численного моделирования неравновесных течений в вязком ударном слое вблизи аппарата, совершающего полет в атмосфере, является выбор модели физико-химических превращений. Модель должна описывать основные процессы в высокотемпературном ударном слое, оказывающие влияние на газотермодинамические и кинетические характеристики течения. Известно достаточно много моделей (часто противоречивых) того или иного физико-химического процесса, что затрудняет математическое описание течения.

Нередко предположения, сделанные при создании модели физического процесса, не выполняются в условиях реального полета. Взаимовлияние различных физико-химических процессов в неравновесных течениях также может быть настолько велико, что погрешность в описании одного из них оказывает влияние практически на все параметры течения. Сказанное выше в полной мере относится к исследованию колебательно-диссоциационного взаимодействия (КДВ). В настоящее время известно большое количество моделей этого процесса. Формально их можно разделить на три группы.

1. Эмпирические модели (например, модель Парка [1]), не содержащие теоретических предположений о структуре КДВ. Расчеты по ним дают лишь уменьшение скорости диссоциации при низких колебательных температурах. В модели Парка это достигается осреднением поступательной и колебательной температур с использованием различных значений эмпирического показателя степени s , за счет чего модель можно адаптировать к различным моделируемым условиям полета.

2. Полуэмпирические модели, к числу которых относится β -модель [2], основанная на предположении о том, что молекулы начинают диссоциировать с некоторого колебательного уровня $D - \beta kT$ (D — энергия диссоциации; k — постоянная Больцмана; T — поступательная температура; параметр β определяется экспериментально для каждой исследуемой молекулы и для молекул кислорода и азота равен соответственно 1,5 и 3).

3. Модели, не содержащие эмпирических параметров и являющиеся полностью теоретическими (например, модель Кузнецова [3]).

Несмотря на большое количество моделей КДВ, невозможно заранее ответить на вопрос, насколько справедливо использование какой-либо из них при численном моделировании параметров неравновесного потока реагирующей смеси газов.

В то же время при определении ионизационных параметров вязкого ударного слоя вблизи аппарата на траектории полета в атмосфере необходимо не только правильно описать сам процесс неравновесной ионизации или реакции с участием электронов и ионов, но и корректно определить температуру и концентрации нейтральных компонентов газа, поскольку изменение этих параметров приводит к значительной вариации концентраций электронов и ионов. Таким образом, неравновесная ионизация оказывается чрезвычайно чувствительной к выбору модели КДВ. Сказанное выше о неравновесной ионизации относится и к спектроскопическим характеристикам неравновесного излучения в системах полос молекулы NO. Это связано с зависимостью концентраций электронно-возбужденных состояний молекулы окиси азота, определяющих неравновесное излучение в системах молекулярных полос NO, от температуры и концентраций атомов азота и кислорода, определяемых, в частности, выбором модели КДВ. При существующей неопределенности в выборе модели процесса необходимо провести сравнение численных данных, полученных с использованием различных моделей, с данными трубного или летного экспериментов. Такой подход применялся, в частности, в работах [4, 5] при разработке моделей формирования неравновесного излучения в ударном слое вблизи космических аппаратов, совершающих полет в атмосферах Земли [4] и Марса [5].

В настоящей работе проводится верификация моделей КДВ путем сравнения ионизационных и излучательных характеристик течения, полученных при численном моделировании, с данными летных экспериментов, проведенных в различное время в США, целью которых являлось измерение ионизационных и излучательных параметров течения в ударном слое для отработки математических и физических моделей обтекания космических аппаратов. В частности, при полете аппарата "Bow Shock-2" [6] измерена интенсивность излучения ударного слоя в спектральном интервале (230 ± 25) нм, что соответствует излучению в молекулярных системах полос окиси азота. При полетах аппаратов серии RAM [7] проведены детальные исследования неравновесной ионизации в зоне ударного слоя. Измерены значения концентраций электронов поперек ударного слоя, что позволяет провести отработку ионизационной модели в численных программах моделирования неравновесного обтекания аппаратов при полете в атмосфере Земли.

Помимо данных летного эксперимента для дополнительной верификации физической модели в данной работе используются результаты трубного эксперимента по исследованию неравновесных ионизационных и излучательных характеристик течения за сильной ударной волной в воздухе, полученные на электроразрядной ударной трубе ТЭР Центрального аэрогидродинамического института (ЦАГИ).

Численное моделирование неравновесного течения воздуха в ударном слое.

При численном моделировании неравновесного течения в ударном слое вблизи космического аппарата, совершающего полет в атмосфере Земли, использовался комплекс программ, реализующий численную и физическую модели, основанные на полных уравнениях Навье — Стокса и подробно описанные в работе [4].

В кинетической модели учитываются многокомпонентность газа в ударном слое, представляющего собой смесь молекул (N_2 , O_2 , NO), атомов (N, O), ионов (NO^+ , N_2^+ , O_2^+) и электронов; различие между температурами поступательных T и колебательных степеней свободы молекул N_2 , NO, O_2 (T_{vN_2} , T_{vNO} , T_{vO_2}); диссоциация (рекомбинация) молекул N_2 , NO, O_2 ; обменные процессы с образованием молекул NO; колебательно-диссоциационное

взаимодействие; реакции ионизации, включающие ассоциативную ионизацию (реакции формирования ионов NO^+ , N_2^+ , O_2^+ и электронов) и обмен зарядами между ионизованными и нейтральными атомами и молекулами смеси.

При расчетах характеристик излучения ударного слоя вблизи аппарата учитывается неравновесный характер формирования излучения в наиболее интенсивных в условиях полета аппарата молекулярных системах полос (ультрафиолетовый диапазон: $\text{NO}(\beta)$, $\text{NO}(\delta)$, $\text{NO}(\varepsilon)$, $\text{NO}(\gamma)$). При численном моделировании излучательных процессов применяется уровневая модель заселения (разрушения) электронно-колебательных излучающих состояний молекул, в которой их концентрация определяется из решения “балансных” дифференциальных уравнений, описывающих процессы резонансного обмена энергией возбуждения между различными компонентами, столкновительные процессы с участием тяжелых частиц и электронов, реакции диссоциации и рекомбинации, а также радиационное обеднение этих состояний. Более подробно физическая модель этих процессов рассмотрена в работе [4], там же приведены данные по константам скоростей.

Расчет интенсивности неравновесного излучения ударного слоя проводился для всех исследуемых систем молекулярных полос на основе базы данных спектроскопических постоянных и коэффициентов Эйнштейна для электронно-колебательных переходов, разработанной в [8]. В данной работе не рассматривалось атомарное излучение, излучение в свободно-свободных и свободносвязанных переходах, поскольку при скоростях полета $V_\infty \leq 7$ км/с эти процессы играют незначительную роль в общем излучательном балансе.

В работе анализировались следующие модели КДВ:

1. Модель Парка [1]. Эмпирический параметр s вначале полагался равным 0,5, затем было рекомендовано использовать значение $s = 0,7$, что лучше согласуется с результатами численного моделирования процессов колебательного возбуждения и диссоциации.

2. β -модель [2]. Используются значения параметра β , полученные в экспериментах по диссоциации двухатомных молекул в сильных ударных волнах.

3. Модель распределенной вероятности диссоциации (модель CVDV) [9]. Скорость диссоциации существенно зависит от параметра $U = D/q$ (значение q изменяется в диапазоне $q = 3 \div 8$). В случае равновероятного протекания диссоциации со всех колебательных уровней $U = \infty$, что соответствует модели Хаммерлинга [10]. С уменьшением U вероятность диссоциации растет с увеличением номера уровня.

4. Модель диссоциации ангармонического осциллятора (модель Кузнецова [3]). Модель основана на предположении о том, что диссоциация молекул происходит с верхних колебательных уровней. Эффективный колебательный уровень $v = n^*$ разграничивает в пространстве колебательной энергии области быстрого и медленного VV -обмена колебательными квантами по сравнению с колебательно-поступательными переходами.

5. Модель Мачерета — Фридмана [11]. Модель основана на применении общетеоретических представлений о кинетике диссоциации колебательно-возбужденных молекул с учетом результатов решения динамической задачи столкновения диссоциирующей молекулы с атомом или другой двухатомной гомоядерной молекулой. Модель показывает важную роль поступательной энергии сталкивающихся частиц в процессе диссоциации двухатомных молекул при высокой температуре газа.

На рис. 1 показано изменение параметра неравновесности $Z(T, T_v) = k_d(T, T_v)/k_d^0(T)$ [2] ($k_d(T, T_v)$, $k_d^0(T)$ — соответственно неравновесная (двухтемпературная) и равновесная константы скорости диссоциации молекулы, полученные при использовании различных моделей диссоциации молекулы N_2): кривая 1 — модель Парка [1] ($s = 0,5$), 2 — модель Парка [1] ($s = 0,7$), 3 — β -модель [2], 4 — модель CVDV [9] ($U = \infty$), 5 — модель CVDV [9] ($U = D/3$), 6 — модель CVDV [9] ($U = D/8$), 7 — модель Кузнецова [3], кривая 8 — модель Мачерета — Фридмана [11]. Колебательная

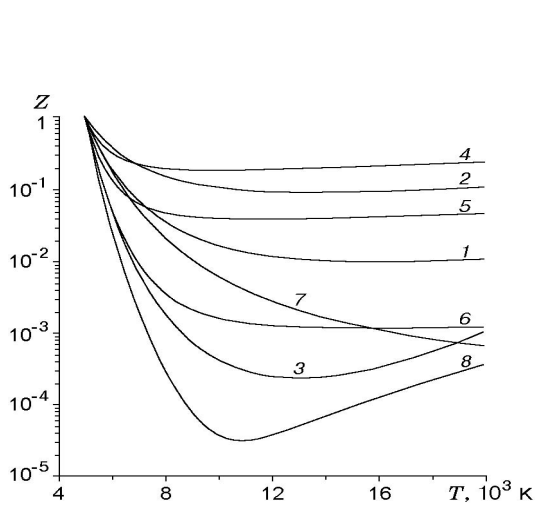


Рис. 1

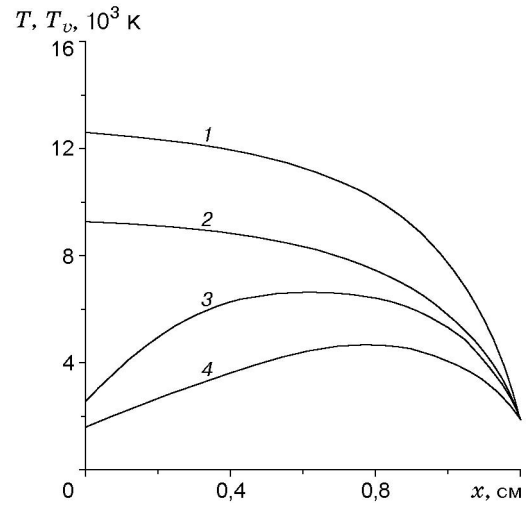


Рис. 2

температура полагалась равной 5000 К, поступательная температура варьировалась от 5000 до 20 000 К. Различие значений параметра неравновесности, определяемых по различным моделям КДВ, достигает четырех порядков при $T = 10\,000$ К, что приводит к существенному различию концентраций атомов и молекул при моделировании неравновесных течений. Из рис. 1 следует, что с увеличением температуры газа (при $T_v < T$) для некоторых моделей зависимость $Z(T, T_v)$ имеет минимум. Если поступательная температура незначительно превышает колебательную, то в этих моделях основную роль в диссоциации играют переходы с верхних колебательных уровней. С ростом температуры газа значения $Z(T, T_v)$ уменьшаются из-за относительного уменьшения заселенности колебательно-возбужденных состояний, с которых возможна диссоциация. Если поступательная температура газа становится большей, то возрастает роль прямой диссоциации невозбужденных молекул и значения $Z(T, T_v)$ увеличиваются. Положение минимума $Z(T, T_v)$ соответствует переходу к диссоциации преимущественно с нижних уровней.

На рис. 2 представлены результаты расчетов, полученные с использованием полных уравнений Навье — Стокса и кинетической схемы, включающей модель CVDV ($U = D/3$) [9]: распределения поступательной температуры T (кривая 1) и колебательных температур молекул NO, O₂, N₂ (кривые 2–4) вдоль критической линии тока при обтекании тела со сферическим затуплением радиуса $R = 10$ см потоком воздуха (координата $x = 0$ соответствует положению ударной волны, находящейся на расстоянии 1,2 см от обтекаемого тела). Скорость $V_\infty = 5,1$ км/с и высота полета $H = 71$ км соответствуют одной из точек траектории движения аппарата “Bow Shock-2”. На рис. 2 видна существенная колебательная неравновесность молекул азота, кислорода и окиси азота в ударном слое. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о сильном влиянии КДВ на ионизационные и излучательные характеристики течения в ударном слое, что подтверждается данными расчета интенсивности неравновесного излучения I , проинтегрированной поперек ударного слоя вдоль критической линии тока, представленными на рис. 3. Расчеты выполнены для условий полета аппарата “Bow Shock-2” (постоянная скорость полета $V_\infty = 5,1$ км/с, $H = 71 \div 80$ км) с использованием различных моделей КДВ: кривая 1 — модель Парка [1] ($s = 0,5$), 2 — модель Парка [1] ($s = 0,7$), 3 — β -модель [2], 4 — модель равновесной диссоциации, 5 — модель CVDV [9] ($U = D/3$), 6 — модель CVDV [9] ($U = D/8$), 7 — модель Кузнецова [3], кривая 8 — модель Мачерета — Фридмана [11]. Точками представлены результаты экспериментов [6].

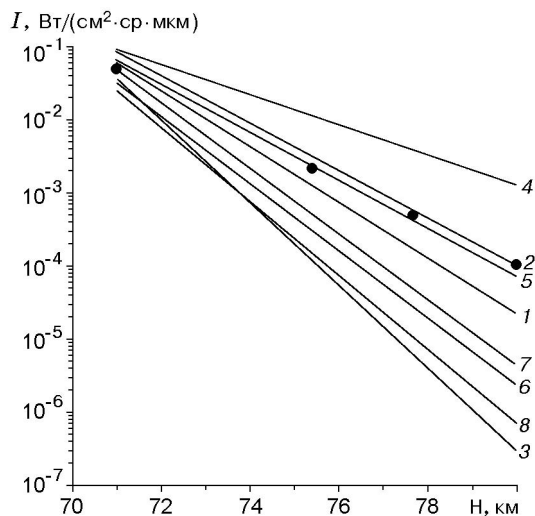


Рис. 3

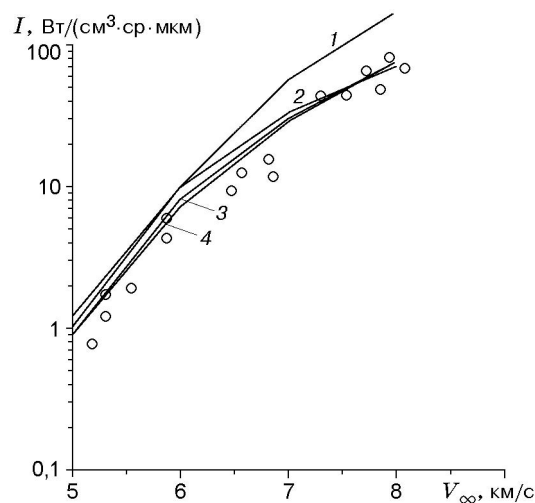


Рис. 4

Лучшее соответствие результатам летного эксперимента получено при использовании в расчетах модели колебательно-диссоциационного взаимодействия Парка [1] ($s = 0,7$) и модели CVDV [9] ($U = D/3$). Интенсивности излучения в системе полос $\text{NO}(\gamma)$, полученные, например, с использованием модели Мачерета — Фридмана [11], отличаются от экспериментальных значений более чем на два порядка на высоте $H = 80$ км. С уменьшением высоты полета влияние выбора модели КДВ на излучательные характеристики ударного слоя уменьшается, и большинство исследованных моделей КДВ дают близкие значения интенсивности излучения.

Аналогичные результаты получены при численном моделировании течения за сильными ударными волнами, проведенном в [4] при изучении каналов формирования неравновесного излучения $\text{NO}(\gamma)$ в зоне релаксации, с использованием результатов измерений в ТЭР ЦАГИ. На рис. 4 показана зависимость максимальной интенсивности излучения в спектральном диапазоне $\lambda = (235 \pm 7)$ нм от скорости ударной волны. Давление перед фронтом ударной волны $P_1 = 13,3322$ Па. Точки — данные эксперимента, кривая 1 — модель Парка [1] ($s = 0,5$), 2 — модель CVDV [9] ($U = D/3$), 3 — модель CVDV [9] ($U = D/8$), кривая 4 — модель Кузнецова [3].

На рис. 5 представлены результаты численного расчета концентраций электронов n_e с использованием различных моделей КДВ, а также результаты измерений, проведенных при полете аппарата RAM-SII [7]. Аппарат RAM-SII представлял собой затупленный конус с полууглом раствора $\varphi = 9^\circ$ и радиусом сферического затупления $R = 10$ см. Скорость полета $V_\infty = 7,65$ км/с. Измерения проводились при $H = 71; 76; 80; 83,5$ км на задней кромке аппарата на расстоянии, отсчитываемом по оси x от критической точки и равном 1,3 м. Представленные на рис. 5 результаты подтверждают сделанные ранее выводы об усилении влияния выбора модели КДВ с увеличением высоты полета на ионизационные и излучательные параметры. На высоте $H = 71$ км все используемые модели (штриховые кривые — модель CVDV [9] ($U = D/3$), сплошные — β -модель [2], штрихпунктирные — модель CVDV [9] ($U = D/8$), пунктирные — модель Парка [1]) дают значения n_e , практически совпадающие между собой и с результатами измерений (точки и кривые 1). С увеличением высоты полета наблюдается расхождение численных данных с результатами измерений (точки и кривые 2 — $H = 76$ км, 3 — $H = 80$ км, 4 — $H = 83,5$ км). С результатами летных экспериментов при всех значениях H хорошо согласуются лишь численные результаты, полученные с использованием моделей КДВ из работ [2, 9].

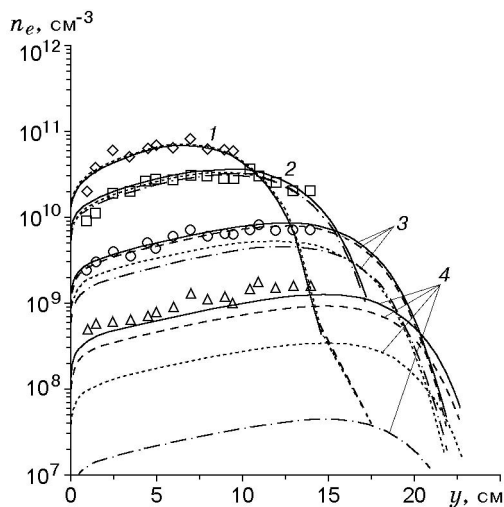


Рис. 5

Обобщая результаты верификации модели КДВ по ионизационным параметрам с аналогичной верификацией по излучательным характеристикам, следует отметить наилучшее соответствие численных данных, полученных с использованием модели КДВ из работы [9], результатам летных экспериментов [6, 7].

Выводы. При численном моделировании неравновесного течения в ударном слое вблизи аппарата, совершающего полет в воздухе, выбор модели колебательно-диссоциационного взаимодействия оказывает сильное влияние на кинетические процессы, а следовательно, на ионизационные и излучательные параметры течения. Это влияние наиболее существенно для исследуемых в работе аппаратов ($R \approx 10$ см, $V_\infty = 5 \div 8$ км/с) при $H > 75$ км.

Автор выражает благодарность В. А. Горелову, М. К. Гладышеву и А. Ю. Кирееву за помощь в работе, а также С. А. Лосеву и Г. Д. Смехову за полезные обсуждения результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Park C. Nonequilibrium hypersonic aerodynamics. N. Y.: John Wiley and Sons, 1990.
2. Физико-химические процессы в газовой динамике. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1995.
3. Кузнецов Н. М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
4. Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., et al. Experimental and numerical study of nonequilibrium ultraviolet NO and N_2^+ emission in shock layer // J. Thermophys. Heat Transfer. 1998. V. 12, N 2. P. 172–180.
5. Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., et al. Nonequilibrium ionization and radiation behind shock wave in the Martian atmosphere // Proc. of the 3rd Europ. symp. on aerothermodynamics for space vehicles. Noordwijk (Netherlands): ESA Publ., 1998. P. 429–436.
6. Levin D. A., Candler G. V., Collins R. L., et al. Examination of ultraviolet radiation theory for bow shock rocket experiments. N. Y., 1992. (Paper / AIAA; N 92-2871).
7. Evans J. S., Schexnayder C. J., Huber P. W. Boundary layer electron profiles for high-altitude entry of a blunt slender body // AIAA J. 1973. V. 11, N 10. P. 1371, 1372.
8. Кузнецова Л. А., Суржиков С. Т. Атлас спектральных сечений поглощения электронных и колебательных систем полос двухатомных молекул. М., 1997. (Препр. / Ин-т пробл. механики РАН; № 603).

-
9. **Treanor C. E., Marrone P. V.** Effect of dissociation on the rate of vibrational relaxation // Phys. Fluids. 1962. V. 5, N 9. P. 1022–1026.
 10. **Hammerling P., Teare J., Kivel B.** The radiation from luminous shock waves in nitrogen // Phys. Fluids. 1959. V. 2, N 10. P. 356–359.
 11. **Macheret S. O., Fridmann A. A., Adamovich I. V., et al.** Mechanism of nonequilibrium dissociation of diatomic molecules. N. Y., 1994. (Paper / AIAA; N 94-1984).

*Поступила в редакцию 10/I 2002 г.,
в окончательном варианте — 14/III 2002 г.*
