

**ВЗАИМНЫЕ ВЛИЯНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ДИССОЦИОННОЙ
РЕЛАКСАЦИИ ПРИ СВЕРХЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ
ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛ ВЯЗКИМ ГАЗОМ**

При движении тел с большими сверхзвуковыми скоростями в верхних слоях атмосферы наряду с неравновесными химическими реакциями происходит возбуждение внутренних степеней свободы частиц. При спуске по планирующей траектории в атмосферу Земли с начальной скоростью $V_\infty \approx 8$ км/с реакции ионизации и электронные степени свободы не вносят существенного вклада в термодинамику и состав газа. Но из-за низкой плотности колебательная релаксация затягивается. Реакции диссоциации, протекая на термодинамически неравновесном фоне (при отсутствии теплового равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы), в свою очередь влияют на релаксацию колебательных степеней свободы. Происходит колебательно-диссоционное взаимодействие.

В [1] предложена феноменологическая модель, включающая влияние релаксации колебаний на химические реакции, выражающееся в появлении в константах скоростей реакций диссоциации поправочных множителей, зависящих от поступательной и колебательной температуры (модель CVD). В [2] учтено обратное влияние диссоциации на колебательную релаксацию (модель CVDV), связанное с появлением (рекомбинация) и исчезновением (диссоциация) молекул — носителей колебательной энергии. Модель CVDV использовалась ранее, как правило, для изучения течений в релаксационной зоне за прямым скачком уплотнения. В задачах обтекания тел вязким газом колебательно-диссоционное взаимодействие учитывалось в [3—5] в рамках модели ударного слоя с тонкой ударной волной (УВ). В то же время в литературе описываются упрощенные подходы. В [6, 7] рассматривалась модель, когда изменение колебательной энергии происходит только за счет $V-T$ -обмена, что описывается членом Ландау — Теллера, и не учитывалось взаимное влияние колебательной релаксации и диссоциации. В [8—10] расчеты проводились на основе модели CVD.

При движении по планирующей траектории максимальное проявление эффектов термодинамической неравновесности происходит в режиме размытой УВ. Поэтому в настоящей работе в рамках упрощенных уравнений Навье — Стокса с учетом структуры вязкого скачка уплотнения проведено сравнение вышеупомянутых моделей и показано влияние термодинамической неравновесности на характеристики течения. При этом применяется уравнение переноса колебательной энергии, предложенное в [11].

1. Постановка задачи. Стационарные уравнения Навье — Стокса для химически и термодинамически неравновесного газа при пренебрежении эффектами молекулярного переноса в продольных (маршевых) направлениях имеют вид

$$(1.1) \quad \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\rho u^i \sqrt{\frac{g}{g_{(ii)}}} \right) = 0, \quad g_{33} = 1, \quad g_{3\alpha} = g_{\alpha 3} = 0;$$

$$(1.2) \quad \rho Du^\alpha + \rho A_{jh}^\alpha u^j u^h = -\sqrt{g_{(\alpha\alpha)}} g^{\alpha\beta} \frac{\partial P}{\partial x^\beta} + \sqrt{\frac{g_{(\alpha\alpha)}}{g}} \frac{\partial}{\partial x^3} \left(\frac{\mu \sqrt{g}}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial u^\alpha / \sqrt{g_{(\alpha\alpha)}}}{\partial x^3} \right);$$

$$(1.3) \quad \rho Du^3 + \rho A_{jh}^3 u^j u^h = -\frac{\partial P}{\partial x^3} + \frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^3} \left(\frac{\mu \sqrt{g}}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial u^3}{\partial x^3} \right);$$

$$(1.4) \quad \rho c_p DT = DP + \rho \sum_{k=M} c_k D\bar{e}_k +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^3} \left(\frac{\mu c_p \sqrt{g}}{\text{Re}_\infty \sigma} \frac{\partial T}{\partial x^3} - \frac{\sqrt{g}}{\text{Re}_\infty} \rho \sum_{k=M} c_k D_k \frac{\partial \bar{e}_k}{\partial x^3} \right) + \frac{\mu g_{\alpha\beta}}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial u^\alpha / \sqrt{g_{(\alpha\alpha)}}}{\partial x^3} \frac{\partial u^\beta / \sqrt{g_{(\beta\beta)}}}{\partial x^3} +$$

$$+ \frac{4}{3} \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \left(\frac{\partial u^3}{\partial x^3} \right)^2 - \sum_{i=1}^N h_i w_i - \left(\sum_{i=1}^N c_{pi} I_i \right) \frac{\partial T}{\partial x^3} + \sum_{k=M} \left(w_k \bar{e}_k + I_k \frac{\partial \bar{e}_k}{\partial x^3} \right);$$

$$(1.5) \quad \rho \left(\sum_{k=M} c_k e'_k \right) DT_v + \left(\sum_{k=M} I_k e'_k \right) \frac{\partial T_v}{\partial x^3} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^3} \left[\frac{\sqrt{g}}{\text{Re}_\infty} \rho \left(\sum_{k=M} c_k D_k e'_k \right) \frac{\partial T_v}{\partial x^3} \right] +$$

$$(1.6) \quad + \sum_{k=M} \left(c_k \rho \frac{c_k^0 - c_k}{\tau_k} - \dot{w}_k e_k + R_k \right);$$

$$\rho D c_i + \frac{1}{V \sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} I_i}{\partial x^3} = \dot{w}_i, \quad i = 1, \dots, N;$$

$$(1.7) \quad \frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial m c_i}{\partial x^3} = \sum_{j=1}^N \frac{m^2}{m_j} S_{ij} (c_i I_j - c_j I_i);$$

$$(1.8) \quad P = R_G \rho \frac{T}{m}, \quad \sum_{i=1}^N I_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1, \quad m = \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i} \right)^{-1},$$

$$c_p = \sum_{i=1}^N c_i c_{pi}, \quad D_k = \frac{\mu}{\rho} \sum_{i=1}^N (x_i S_{ik})^{-1}, \quad x_i = \frac{c_i m}{m_i},$$

$$\bar{e}_k = e_k^0 - e_k, \quad e_k^0 = \frac{R_G}{m_k} \frac{\theta_k}{\exp(\theta_k/T) - 1}, \quad c_k = \frac{R_G}{m_k} \frac{\theta_k}{\exp(\theta_k/T_v) - 1},$$

$$e_k' = \frac{\partial e_k}{\partial T_v}, \quad D = \frac{u^\alpha}{\sqrt{g(\alpha\alpha)}} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} + u^3 \frac{\partial}{\partial x^3},$$

$$A_{jk}^i = \frac{1}{2 \sqrt{g(jj)g(hk)}} \left[\sqrt{g(ii)} g^{il} \left(\frac{\partial g_{kl}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{jl}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{jh}}{\partial x^l} \right) - \delta_j^i \frac{\partial \sqrt{g(jj)}}{\partial x^k} - \delta_k^i \frac{\partial \sqrt{g(hk)}}{\partial x^j} \right].$$

Здесь по одинаковым индексам производится суммирование; по индексам, заключенным в круглые скобки, суммирование отсутствует; латинские индексы, если специально не оговорено противное, принимают значения 1, 2, 3, греческие — 1, 2; $k = M$ означает суммирование только по молекулам; $g_{\alpha\beta}$ — компоненты метрического тензора; $V_\infty u^i$ — физические составляющие вектора скорости; $T T_0$, $T_v T_0$ — поступательная и колебательная температуры смеси газов, состоящей из N химических компонентов ($T_0 = V_\infty^2 / c_{p\infty}$); $c_{p\infty} T_0 e_k$, $T_0 \theta_k$ — удельная колебательная энергия и характеристическая температура k -й молекулы; $V_\infty \tau_k / R$ — время релаксации; $c_{p\infty} T_0 \rho_\infty V_\infty R_k / R$ — источниковый член. Обозначения остальных величин приведены в [12].

Граничные условия на поверхности тела, выражающие условия непротекания, прилипания, гетерогенного протекания реакций рекомбинации и условие теплового баланса, будут

$$x^3 = 0, \quad u^\alpha = u^3 = 0, \quad I_i = -\rho k_{wi} c_i, \quad i = 1, \dots, N,$$

$$q = \frac{\varepsilon \sigma_\infty T_v^4}{\rho_\infty V_\infty^3} T_v^4; \quad q = \frac{\mu c_\nu}{\sigma \text{Re}_\infty} \frac{\partial T}{\partial x^3} - \sum_{i=1}^N h_i I_i + \sum_{k=M} \left(e_k I_k - \frac{\rho}{\text{Re}_\infty} c_k D_k \frac{\partial \bar{e}_k}{\partial x^3} \right).$$

Для колебательной температуры предполагаем на теле

$$(1.9) \quad T_v = T_w,$$

а в случае некаталитической стенки используем также условие

$$(1.10) \quad \partial T_v / \partial x^3 = 0.$$

На внешней границе задаются условия, отвечающие параметрам набегающего потока.

При рассмотрении химических реакций в возмущенной области течения берется пять компонентов: N_2 , O_2 , N , O , NO , между которыми протекают реакции диссоциации — рекомбинации и обменные реакции.

В связи с тем что для молекул частично диссоциированного воздуха характеристические колебательные температуры одного порядка, отличающиеся друг от друга не более чем в 1,5 раза, под колебательной температурой T_v в уравнениях (1.1)–(1.8) понимается некоторая средняя температура, одинаковая для всех молекул. Уравнение (1.4) записано в

форме, в которой явно выделены члены, связанные с релаксацией колебательных степеней свободы. При приближении к термодинамическому равновесию $e_k \rightarrow 0$ эти члены исчезают, и уравнение притока тепла (1.4) принимает обычный вид, когда колебательные степени свободы находятся в равновесии с поступательными степенями свободы. Входящие в (1.4) удельные энтальпии и теплоемкости компонентов должны вычисляться при термодинамическом равновесии, и они брались из таблиц [13], в которых учитывается также равновесное состояние по электронным степеням свободы. Уравнение (1.5) представляет результат суммирования уравнений баланса колебательной энергии молекул при предположении равенства их колебательных температур.

Влияние релаксации колебаний на реакции диссоциации проявляется в видоизменении константы скорости диссоциации

$$k_D(T, T_v) = k_D(T)V(T, T_v),$$

где $k_D(T)$ — константа диссоциации при термодинамическом равновесии, когда $T_v = T$; $V(T, T_v)$ — функция, явный вид которой зависит от задаваемой в модели CVD вероятности перехода молекул с колебательных уровней v в непрерывный спектр. В настоящей работе эта вероятность взята равной [14]

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

(E_D, E_v — энергия диссоциации и уровня v , U — параметр, имеющий размерность температуры и определяющий степень преимущественной диссоциации с верхних уровней по сравнению с нижними). Обратное влияние химических реакций на колебательную релаксацию учитывалось через источник член R_k в рамках модели CVDV [2]. Время колебательной релаксации рассчитывалось по формуле Милликена—Уайта для смеси газов с поправкой для высоких температур, предложенной в [9]. Метод численного решения аналогичен изложенному в [12, 15].

2. Анализ результатов. Ниже приведены результаты расчетов для тела с радиусами главных кривизн 0,5 и 1,25 м, $\varepsilon = 0,85$. Условия в набегающем потоке отвечают движению вдоль планирующей траектории из [16]. Для молекул N_2 , O_2 и NO задавались следующие значения характеристических температур и температуры диссоциации: $\hat{\theta}_i = 3372, 2256, 2720$ К; $T_{Di} = 113\,000, 59\,500, 75\,500$ К.

На рис. 1 показаны профили поступательной и колебательной температур на критической линии для идеально-каталитической поверхности при $H = 75$ км ($Re_\infty = 6,95 \cdot 10^3$). Здесь и далее приняты обозначения: сплошные линии отвечают расчетам модели CVDV с граничным условием (1.9) для колебательной температуры, штриховые — расчетам термодинамически равновесного обтекания, т. е. в предположении, что колебательная температура совпадает с поступательной. Цифры 1—3 соответствуют значениям $T_D/U = 6; 3; 2$.

Учет колебательной релаксации приводит к существенному повышению поступательной температуры. При увеличении вероятности диссоциации молекул с верхних колебательных уровней (параметр U уменьшается) поступательная и колебательная температуры растут, увеличи-

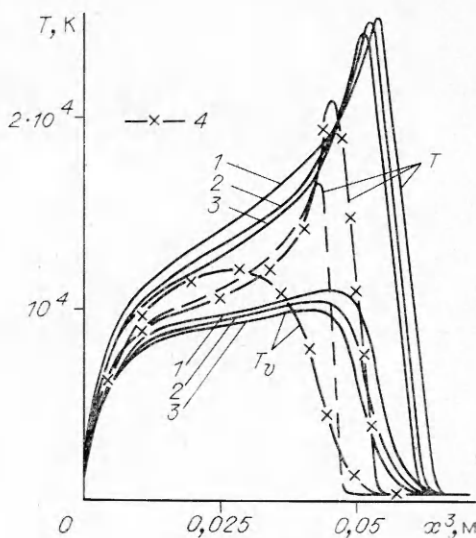


Рис. 1

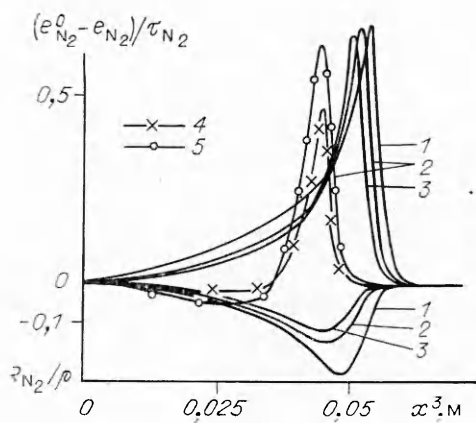


Рис. 2

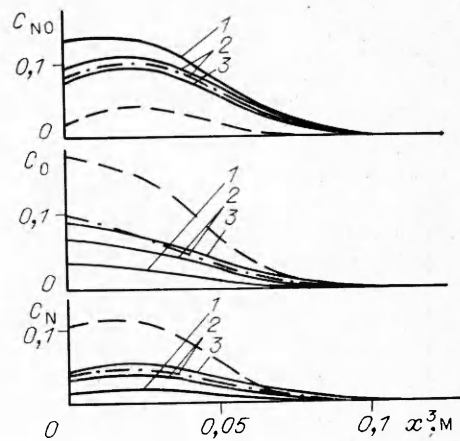


Рис. 3

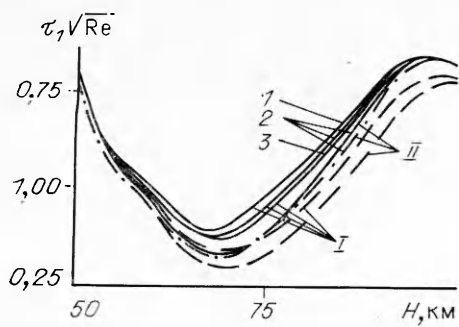
вается возмущенная область течения. Это сопровождается уменьшением плотности в ударном слое, давление же на теле в критической точке снижается не более чем на 2%. Из-за наличия зоны релаксации в переднем фронте УВ происходит более плавное торможение потока (с меньшими градиентами), чем в термодинамически равновесном случае.

На рис. 2 для тех же условий приведены профили источника колебательной энергии за счет $V-T$ -обмена (член Ландау—Теллера) и профили источника колебательной энергии R_{N_2}/ρ за счет реакций. Выбор модели перехода молекул из дискретного спектра в непрерывный слабо сказывается на максимальной величине источника колебательной энергии за счет $V-T$ -обмена. Параметр U существен для профиля источника R_h/ρ , ответственного за обратное влияние диссоциации на колебательную релаксацию.

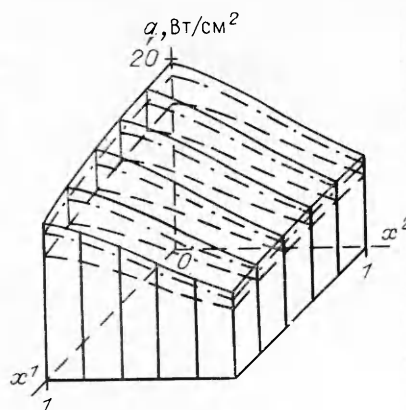
Рассмотрим некоторые упрощенные модели учета внутренних степеней свободы, используемые ранее в литературе применительно к задаче внешнего обтекания. На рис. 1, 2 линии 4 соответствуют модели, когда колебательная энергия изменяется только за счет члена Ландау—Теллера без учета колебательно-диссоционного взаимодействия. В этом случае поправочные множители V полагаются равными единице и в уравнении (1.5) отсутствует член $\sum_{h=M} R_h$. Линия 5 рис. 2 отвечает модели CVD, когда учитывается влияние колебаний на скорости химических реакций, но пренебрегается обратным влиянием диссоциации на изменение колебательной энергии (членом $\sum_{h=M} R_h$). Обе эти модели приводят при развитой

диссоциации к нефизичному превышению колебательной температуры над поступательной внутри ударного слоя (область отрицательных значений члена Ландау—Теллера). При использовании модели CVDV с граничным условием (1.9) на стенке колебательная температура в расчетах не превышала поступательную. Как следует из рис. 2, при развитой диссоциации пренебрежение влиянием химических реакций на колебания приводит к отбрасыванию членов, равных по порядку величины членам Ландау—Теллера. Эта ошибка возрастает с уменьшением U .

На рис. 3 приведены профили концентраций на критической линии для некаталитической поверхности при $H = 90$ км ($Re_\infty = 845$). Здесь и далее штрихпунктирная линия соответствует расчетам модели CVDV с граничным условием (1.10) для колебательной температуры. В расчетах обнаружено, что практически для всей планирующей траектории входа процесс диссоциации протекает на термодинамически неравновесном фоне. Эффект влияния колебательных степеней свободы на диссоциацию приводит к снижению скорости диссоциации из-за недостатка высоковозбужденных и, тем самым, легко диссоциирующих молекул. Наличие



Р и с. 4



Р и с. 5

термодинамической неравновесности ведет к повышению поступательной температуры и, следовательно, к увеличению равновесной константы скорости реакций диссоциации k_D . Но множитель V , равный отношению действительной константы диссоциации к равновесной, из-за разницы между значениями колебательной и поступательной температур становится существенно меньше единицы, и в результате скорость образования атомов уменьшается.

В верхней части траектории, где поступательная и колебательная температуры сильно отличаются, поправочный множитель $V \ll 1$, что приводит к сильному подавлению диссоциации, и концентрации атомов уменьшаются в несколько раз. С падением высоты полета и сближением профилей колебательной и поступательной температур V увеличивается и степень диссоциации уменьшается не столь существенно. Учет колебательной неравновесности повышает содержание молекул окиси азота в ударном слое. Это связано с тем, что релаксация колебаний на реакции рекомбинации не влияет, а скорость реакции диссоциации окиси азота падает за счет влияния колебаний.

Уменьшение U сильнее подавляет диссоциацию. Параметр U , характеризующий степень уменьшения вероятности диссоциации с более низких колебательных уровней, отражает неопределенность в конкретном механизме диссоциации и должен находиться из эксперимента. В [17] использовалось значение $U_{O_2} = T_{DO_2}/6$, соответствующее 300-кратному превышению вероятности перехода молекул O_2 в непрерывный спектр с верхних колебательных уровней над вероятностью перехода с нижних уровней. $U = T_D/2$ отвечает 7-кратному превышению вероятности. В диапазоне $T_D/6 \leq U \leq T_D/2$ находится, по-видимому, реальное значение U .

Использование модели, в которой изменение колебательной энергии обусловлено только членом Ландау—Теллера и принято $V = 1$, приводит к увеличению скорости реакций диссоциации из-за повышения поступательной температуры. В результате концентрации атомов возрастают, а содержание молекул окиси азота уменьшается по сравнению с термодинамически равновесным случаем.

На рис. 4 показано влияние термодинамической неравновесности в критической точке на величину безразмерного коэффициента трения $\tau_1 \sqrt{Re}$, вычисляемого по формуле $\tau_1 = \tau^1/x^1$, $Re = \rho_\infty V_\infty R/\mu(T_0)$. Линии I соответствуют идеально-каталитической поверхности, линии II — некаталитической. Учет релаксации колебательных степеней свободы увеличивает коэффициенты трения до 5—10 %.

На рис. 5 представлено распределение теплового потока вдоль боковой поверхности эллиптического параболоида для некаталитической поверхности при $H = 95$ км ($Re_\infty = 415$). Учет колебательной релаксации с граничным условием (1.9) приводит к увеличению теплового потока для всей планирующей траектории. Для стенки с граничным условием (1.10) на высотах, где происходит интенсивная рекомбинация, тепловой

поток может снижаться по сравнению с расчетом в предположении о равновесном возбуждении внутренних степеней свободы. На относительный тепловой поток колебательная релаксация оказывает слабое влияние в верхней части траектории. Следует отметить, что в верхней части траектории (при $H \geq 90$ км) важен учет процессов в кнудсеповском слое около тела, и для расширения пределов применимости модели сплошной среды необходимо использовать граничные условия скольжения на теле.

В заключение сделаем вывод, что используемая в литературе модель, учитывающая только $V - T$ -обмен (член Ландау—Теллера), а также модель CVD при расчетах задач обтекания могут привести к нефизичному превышению колебательной температуры над поступательной. При развитой диссоциации пренебрежение обратным влиянием химических реакций на колебания приводит к отбрасыванию членов, по порядку величины соответствующих величине релаксационных членов Ландау—Теллера. Эта ошибка возрастает с уменьшением параметра U , характеризующего вероятность диссоциации с разных колебательных уровней. Таким образом, учет взаимовлияния колебательной релаксации и химических реакций необходим для правильного качественного и количественного моделирования сверхзвуковых течений с физико-химическими превращениями в тех режимах, когда время релаксации колебаний становится сравнимым с временем протекания реакций диссоциации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hamerling P., Teare J. D., Kivel B. Theory of radiation from luminous shock waves in nitrogen // Phys. Fluids.— 1962.— V. 5, N 4.
2. Treanor C. E., Marrone P. V. Effects of dissociation on the rate of vibrational relaxation // Phys. Fluids.— 1962.— V. 5, N 9.
3. Tong H. Effects of dissociation energy and vibrational relaxation on heat transfer // AIAA J.— 1966.— V. 4, N 1.
4. Ладнова Л. А. Неравновесный вязкий ударный слой на теле с произвольной каталитической активностью поверхности // Вестн. Ленингр. ун-та.— 1969.— № 13.
5. Жлуктов С. В. Гиперзвуковое обтекание тел термодинамически и химически неравновесным вязким газом: Дис. канд. физ.-мат. наук.— М., 1987.
6. Афонина Н. Е., Громов В. Г. Исследование вязкого обтекания сферы гиперзвуковым потоком углекислого газа // Тр. Ин-та механики МГУ.— 1973.— № 30.
7. Воронкин В. Г. Неравновесный вязкий ударный слой на притупленных конусах // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1979.— № 6.
8. Залогин Г. Н. Колебательно-диссоционная релаксация азота в гиперзвуковом ударном слое при умеренных числах Рейнольдса // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1976.— № 6.
9. Park C. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles.— N. Y., 1984.— (Pap./AIAA; N 1730).
10. Brown K. G. Chemical and thermal nonequilibrium heat transfer analysis for hypervelocity low Reynolds number flow.— N. Y., 1985.— (Pap./AIAA; N 1033).
11. Тирский Г. А. Полуфеноменологический вывод уравнений гидродинамики смесей многокомпонентных газов с возбужденными внутренними степенями свободы // Механика, современные проблемы.— М.: Изд-во МГУ, 1987.
12. Щербак В. Г. О граничных условиях на ударной волне при сверхзвуковом обтекании // ПМТФ.— 1989.— № 1.
13. Гурвич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. изд. В. 4-х тт.— М.: Наука, 1978.— Т. 1, кн. 2.
14. Marrone P. V., Treanor C. E. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids.— 1963.— V. 6, N 10.
15. Щербак В. Г. Численное исследование структуры неравновесного течения около затупленных тел при гиперзвуковом пространственном обтекании // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1987.— № 5.
16. Masek R. V., Hender D., Forney J. A. Evaluation of aerodynamic uncertainties for Space Shuttle.— N. Y., 1973.— (Pap./AIAA; N 737).
17. Camac M., Vaughan A. O. dissociation rates in $O_2 - Ar$ mixtures // J. Chem. Phys.— 1961.— V. 34, N 2.

г. Москва

Поступила 23/XII 1988 г.,
в окончательном варианте — 25/V 1989 г.