

УДК 532.5

Модель пограничного слоя колебательно возбужденного диссоциирующего газа *

Ю.Н. Григорьев¹, А.Г. Горобчук¹, И.В. Ершов²

¹ФИЦ информационных и вычислительных технологий, Новосибирск

²Новосибирский государственный аграрный университет

E-mail: grigor@ict.nsc.ru

Представлена физико-математическая модель плоского сверхзвукового пограничного слоя в приближении Прандтля колебательно возбужденного диссоциирующего газа. Рассматривается простейший случай двухатомного газа, параметризованный по данным для азота. Обосновывается ряд упрощенных формул расчета коэффициентов переноса и скорости реакций диссоциации-рекомбинации для молекулярно-атомной смеси, допустимых для характерных условий сверх- и гиперзвуковых пограничных слоев. Проведены сравнительные расчеты численных и локально автомодельных решений уравнений пограничных слоев на пластине для типичных условий эксперимента в высокоэнтальпийной аэродинамической трубе и гиперзвукового полета в верхней атмосфере. Показано, что рассчитанные на основе этих подходов профили концентраций атомов существенно различаются. В этой связи для адекватного учета влияния химических реакций в расчетах устойчивости пограничных слоев необходимо использовать профили гидродинамических параметров, рассчитанные численно в полной постановке. Локально автомодельные решения могут служить начальными условиями для численных расчетов.

Ключевые слова: модель пограничного слоя, колебательное возбуждение, диссоциация, локально автомодельные решения, численный метод.

Введение

Прогресс в области сверх- и гиперзвуковых летательных аппаратов порождает новые требования к теоретическим моделям в соответствующих разделах аэродинамики, в частности, к теории устойчивости высокоскоростных высокоэнтальпийных течений. Для повышения адекватности подходов необходим последовательный учет свойств реального газа — многокомпонентность состава, возбуждение внутренних степеней свободы молекул, наличие процессов диссоциации-рекомбинации и химических реакций в объеме и на обтекаемых поверхностях, а также излучения, ионизации и т.д.

Важным этапом исследований устойчивости является предварительный расчет характеристик изучаемого стационарного течения, который должен включать соответствующие эффекты. В общем случае, особенно для сложных течений, для этого следует

* Работа выполнена при финансовой поддержки РФФИ (грант № 20-01-00168а).

использовать полные уравнения многокомпонентных сред, учитывающие все существенные физико-химические процессы [1, 2]. Распространенным упрощением является переход к погранслоному приближению в основной системе уравнений, как это было сделано в работе [3], где был выполнен комплекс исследований устойчивости течений диссоциирующего газа. Для плоских течений вместо численного решения системы уравнений пограничного слоя можно использовать локально автомодельные решения, получаемые из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, параметризованной по продольной координате потока. При этом взаимное соответствие численных и локально автомодельных решений в зависимости от учитываемых факторов может либо достигаться [4], либо не достигаться [5]. Отсутствие выхода на локально автомодельные решения является существенным аргументом к использованию численных решений уравнений пограничного слоя (ПС). Тем не менее, при каждом усложнении физико-математической модели исследование взаимного соответствия этих двух подходов представляет несомненный интерес, в первую очередь, с точки зрения адекватности последующих расчетов устойчивости.

В настоящей работе вводится модель плоского ПС, включающая процессы колебательного возбуждения и диссоциации-рекомбинации, на основе простейшей двухатомной молекулы азота. Исследуются некоторые упрощения расчета коэффициентов переноса и реакций диссоциации-рекомбинации, допустимые для характерных условий сверх- и гиперзвуковых ПС. Проводятся сравнительные расчеты численных и локально автомодельных решений уравнений ПС для типичных условий эксперимента в высокоэнтальпийной аэродинамической трубе и гиперзвукового полета в верхней атмосфере.

Основные уравнения и характеристики модели

Уравнения пограничного слоя

Для предлагаемой модели ПС в качестве исходной служит полная система двумерных уравнений колебательно возбужденного диссоциирующего газа [1], записанная в координатной форме, которая удобна как для получения уравнений ПС в приближении Прандтля, так и при выводе уравнений линейной теории устойчивости для двумерных возмущений. Для простоты ограничимся случаем одномодовой колебательной релаксации и диссоциации-рекомбинации двухатомного газа по схеме



где N_2 означает молекулу, N — атом, а M — партнер по соударению (третье тело при рекомбинации), которым может быть либо молекула, либо атом. Таким образом, рассматривается бинарная реагирующая газовая смесь. Для конкретизации все числовые характеристики газа будем брать для азота.

Пусть $x_1 = x$, $u_1 = u$ и $-x_2 = y$, $u_2 = v$ — декартовы координаты и скорости смеси соответственно вдоль и поперек потока. Система гидродинамических уравнений записывается в терминах плотности смеси ρ , массовой концентрации свободных атомов c , плотности внутренней энергии E_{in} и плотности колебательной энергии E_v . Соответствующие уравнения имеют следующий вид.

Уравнение неразрывности для смеси в целом:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0.$$

Уравнение неразрывности для атомарной компоненты:

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho c u}{\partial x} + \frac{\partial \rho c v}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{12} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{12} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \dot{w}_a.$$

Уравнения импульсов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho u}{\partial x} + v \frac{\partial \rho u}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xj}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial \tau_{xj}}{\partial x_j} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{2}{3} \mu - \mu_b \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right], \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + u \frac{\partial \rho v}{\partial x} + v \frac{\partial \rho v}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yj}}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial \tau_{yj}}{\partial x_j} &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{2}{3} \mu - \mu_b \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right]. \end{aligned}$$

Уравнение для плотности внутренней энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{in}}{\partial t} + \frac{\partial u E_{in}}{\partial x} + \frac{\partial v E_{in}}{\partial y} + p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) &= -\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} \right) - \\ &- \left(\frac{\partial q_{dx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{dy}}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial q_{dvx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{dvy}}{\partial y} \right) - J + \frac{1}{2} e_v \dot{w}_a - Q_{tr-v}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} E_{in} &= \rho [c C_{Va} + (1-c) C_{Vm} T], \\ \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= -2\mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{2}{3} \mu - \mu_b \right) \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Уравнение для плотности колебательной энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_v}{\partial t} + \frac{\partial u E_v}{\partial x} + \frac{\partial v E_v}{\partial y} &= - \left(\frac{\partial q_{vx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{vy}}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial q_{dvx}}{\partial x} + \frac{\partial q_{dvy}}{\partial y} \right) - \frac{1}{2} e_v \dot{w}_a + Q_{tr-v}, \\ E_v(T) &= (1-c) \rho e_v(T_v). \end{aligned}$$

Уравнение состояния:

$$p = \frac{R}{2M_a} \rho (1+c) T.$$

Здесь t — время, p , T — статические давление и температура в потоке, R — универсальная газовая постоянная, M_a — атомарный вес азота. Для коэффициентов переноса и теплоемкостей используются общепринятые обозначения.

Для перехода к безразмерным уравнениям ПС в приближении Прандтля выбираем следующие характерные величины:

$$\begin{aligned} x \rightarrow L, \quad y \rightarrow \delta, \quad \rho \rightarrow \rho_\infty, \quad T \rightarrow T_\infty, \quad u \rightarrow u_\infty, \quad v \rightarrow \frac{\delta u_\infty}{L}, \quad t \rightarrow \frac{L}{u_\infty}, \\ \mu \rightarrow \mu_\infty, \quad \lambda \rightarrow \lambda_\infty, \quad p \rightarrow \rho_\infty u_\infty^2, \quad \dot{w}_a \rightarrow \mu_\infty / \delta^2, \quad \gamma \rightarrow \gamma_\infty, \\ E_{in}, E_v, h \rightarrow \rho_\infty R / (2M_a) T_\infty, \quad \delta = \sqrt{\frac{L \nu_\infty}{u_\infty}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Параметры с индексом « ∞ » обозначают соответствующие характеристики для величин на условной верхней границе ПС. Для асимптотического вывода уравнений ПС в (2) выбраны разные масштабы координат вдоль (L) и поперек (δ) потока и соответствующих скоростей, для которых принимается, что $\delta \ll L$.

В безразмерной с помощью (2) исходной системе сохраняются только члены нулевого порядка по δ . В результате система ПС, в которой для безразмерных переменных используются исходные обозначения, в стационарном случае имеет вид:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0, \quad (3)$$

$$\rho u \frac{\partial c}{\partial x} + \rho v \frac{\partial c}{\partial y} = \frac{1}{Sc} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \dot{w}_a, \quad (4)$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (5)$$

$$\partial p / \partial y = 0, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial e_{in}}{\partial x} + \rho v \frac{\partial e_{in}}{\partial y} + \gamma_\infty M_\infty^2 p \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \gamma_\infty M_\infty^2 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{\alpha_\infty}{Pr} \frac{\partial q_{hy}}{\partial y} - \\ - \frac{\partial q_{dy}}{\partial y} + \frac{\partial q_{dvy}}{\partial y} - J + \frac{1}{2} e_v \dot{w}_a - Q_{tr-v}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\rho u \frac{\partial (1-c)e_v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial (1-c)e_v}{\partial y} = -\frac{\alpha_\infty}{Pr} \frac{\partial q_{vhy}}{\partial y} - \frac{\partial q_{dvy}}{\partial y} - \frac{1}{2} e_v \dot{w}_a + Q_{tr-v}, \quad (8)$$

$$\rho T = \frac{1+c_\infty}{1+c}, \quad (9)$$

$$e_{in} = [cC_{Va} + (1-c)C_{Vm}] T. \quad (10)$$

Следует отметить, что в нулевом приближении по δ в уравнениях импульсов (5), (6) отсутствуют члены с коэффициентом объемной вязкости μ_b , которые появляются только в уравнениях ПС высших приближений, учитывающих непараллельность течения. Для безградиентных ПС в уравнении (5) $\partial p / \partial x = 0$. Вместе с тем в системе (3)–(9) сохраняются вклады всех физико-химических процессов, учитываемых в исходной системе.

Входящие в систему (3)–(9) критерии подобия определены следующим образом:

число Шмидта $Sc = \left(\frac{\rho_\infty D_{12\infty}}{\mu_\infty} \right)^{-1}$, число Маха $M_\infty = \frac{u_\infty}{\sqrt{\gamma_\infty R / (2M_a T_\infty)}}$, число Прандтля

$Pr = \frac{\mu_\infty c_{p\infty}}{\lambda_\infty}$, параметр $\alpha_\infty = \frac{c_{p\infty}}{R / (2M_a)}$. Для смеси атомов и двухатомных молекул азота принималось [6]

$$Sc = 0,5, \quad Pr = 0,7, \quad \alpha_\infty = 4,0.$$

Безразмерные слагаемые в правых частях уравнений ПС записываются в следующем виде:

— безразмерная скорость производства атомов

$$\dot{w}_a = (1+c_\infty) \frac{v_\infty}{\gamma_\infty p_\infty} \cdot \frac{Re_\infty}{M_\infty^2} \dot{w}_a^*,$$

где $Re_\infty = L u_\infty / \nu_\infty$, $p_\infty = (1+c_\infty) \rho_\infty R / (2M_a) T_\infty$, \dot{w}_a^* — размерная скорость производства атомов;

— безразмерный тепловой поток

$$q_{\text{hy}} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y};$$

— безразмерный диффузионный тепловой поток

$$q_{\text{dy}} = -\frac{3\mu T}{2Sc} \cdot \frac{\partial c}{\partial y};$$

— безразмерный поток энергии колебательных квантов

$$q_{\text{vhy}} = -\lambda_v \frac{\partial T_v}{\partial y};$$

— безразмерный диффузионный поток энергии колебательных квантов

$$q_{\text{dvy}} = -\frac{\mu e_v}{Sc} \cdot \frac{\partial c}{\partial y};$$

— безразмерный тепловой эффект реакций диссоциации-рекомбинации

$$J = h_a^0 \dot{w}_a,$$

где $h_a^0 = \frac{h_a^{0*}}{RT_\infty / 2M_a}$ — безразмерная энтальпия образования атомов азота, а размерная

энтальпия образования атомов азота $h_a^{0*} = 472,71$ кДж/моль [7];

— безразмерный релаксационный член в форме Ландау–Теллера [8]

$$Q_{\text{tr-v}} = (1-c)\rho \frac{e_v(T) - e_v(T_v)}{\tau}.$$

Коэффициенты переноса и термодинамика

Для типичных условий сверх- и гиперзвуковых ПС на основе формул кинетической теории газов, выражающих коэффициенты переноса через так называемые Ω^* -интегралы [9], было показано, что с точностью порядка 3–5 % коэффициенты динамической вязкости атомов и молекул азота и кислорода совпадают:

$$\mu_a \approx \mu_m. \quad (11)$$

На основе тех же формул было получено, что температурная зависимость коэффициентов вязкости в диапазоне $T \leq 10^4$ К с точностью 3–5 % приближается формулой Сазерленда [10, 11]:

$$\mu(T) = \mu_0 \frac{T_0 + C}{T + C} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2},$$

$$\mu_0 = 1778 \cdot 10^{-8} \text{ кг/(м} \cdot \text{с)}, \quad T_0 = 300 \text{ К}, \quad C = 104,3.$$

Параметры σ и ε потенциала Леннарда–Джонса в этих оценках были взяты из работы [10]. Как показано в монографии [7], для расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности смеси атомов и молекул вместо приближенных формул Уилки [12] в пределах выбранной здесь точности можно использовать простое «взвешивание» по молярным долям компонент:

$$x_a = \frac{2c}{1+c}, \quad x_m = \frac{1-c}{1+c}. \quad (12)$$

Тогда для коэффициента динамической вязкости смеси с учетом (11) получим

$$\mu = x_a \mu_a + x_m \mu_m = \mu_m. \quad (13)$$

Аналогично коэффициент теплопроводности смеси вычисляется с помощью (12) как

$$\lambda = x_a \lambda_a + x_m \lambda_m.$$

Коэффициенты теплопроводности отдельных компонент и коэффициент переноса энергии колебательных квантов λ_v выражаются через коэффициент динамической вязкости с помощью приближенных соотношений Эйкена [9] и имеют вид:

$$\lambda_a = \frac{5}{2} C_{V_a} \mu_a(T), \quad \lambda_m = \left(\frac{5}{2} C_{V_{m,tr}} + \frac{6}{5} C_{V_{m,r}} \right) \mu_m(T), \quad \lambda_v = \frac{6}{5} C_{V_{m,r}} \mu_m(T),$$

здесь $C_{V_a} = 3R/(2M_a)$ — коэффициент теплоемкости при постоянном объеме атомарной компоненты, $C_{V_{m,tr}} = 3R/(4M_a)$ и $C_{V_{m,r}} = R/(2M_a)$ — коэффициенты теплоемкости при постоянном объеме. Коэффициенты теплоемкости смеси выражаются через эти парциальные коэффициенты теплоемкости с помощью формулы вида (13). В частности, для показателя адиабаты смеси имеет место выражение

$$\gamma = \frac{7-2c}{5-2c}.$$

Модель процессов диссоциации-рекомбинации

Рассматривались три варианта моделирования скорости производства/гибели атомов.

1. Модель, включающая обе пары реакций диссоциации-рекомбинации (1), в которых в качестве партнера по соударению (третьего тела при рекомбинации) участвует соответственно либо молекула, либо атом:

$$\dot{w}_a^* = R_1 + R_2, \quad (14)$$

где

$$R_1 = k_d^{(1)} \frac{(1-c)^2 \rho^2}{4M_a} - k_r^{(1)} \frac{(1-c)c^2 \rho^3}{2M_a^2},$$

$$R_2 = k_d^{(2)} \frac{(1-c)c \rho^2}{2M_a} - k_r^{(2)} \frac{c^3 \rho^3}{M_a^2}. \quad (15)$$

2. Приближенная модель [3], полученная в предположении, что

$$k_d^{(1)} \approx k_d^{(2)} = k_d, \quad k_r^{(1)} \approx k_r^{(2)} = k_r.$$

При этом

$$\dot{w}_a^* = \frac{\rho^3}{2M_a} (1+c) k_r \left[K \frac{(1-c)}{2} - \frac{c^2 \rho}{M_a} \right]. \quad (16)$$

3. Модель, включающая одну реакцию диссоциации-рекомбинации (1)

$$\dot{w}_a^* = R_1. \quad (17)$$

В формулах (15), (16) константы диссоциации и рекомбинации выражаются соотношениями

$$k_d^{(i)} = a_i T^{-1/2} \exp(-\theta_d/T), \quad i = 1, 2,$$

$$k_r^{(1)} = b_1/T^{1/2}, \quad k_r^{(2)} = b_2/T^{3/2}.$$

Константа равновесия $K = k_d/k_r$, энергия диссоциации молекул азота $\theta_d = 113100$ К. Выражение для константы равновесия K и числовые коэффициенты в константах, приведенные в табл. 1, взяты для азота из работ [13, 14].

Таблица 1
Значения параметров a_i и b_i в формулах констант диссоциации и рекомбинации

i	Реакция	$a_i, \text{ м}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	$b_i, \text{ м}^6/(\text{моль} \cdot \text{с})$
1	R_1	$1,920 \cdot 10^{11}$	$1,090 \cdot 10^4$
2	R_2	$4,150 \cdot 10^{16}$	$2,320 \cdot 10^9$

Расчеты скорости производства/гибели атомов, выполненные для профилей температуры для типичных условий рассматриваемых ПС, где превалирует гибель атомов (рекомбинация), показали, что распределения, полученные на моделях (14) и (17), совпадают в пределах нескольких процентов. В то же время распределение, полученное на основе модели (16), существенно отклоняется от них. В этой связи в дальнейших расчетах будет использоваться модель (14) или (17).

В условиях равновесия $\dot{w}_a^* = 0$, и константа равновесия выражается как

$$K = \frac{k_d^{(1)}}{k_r^{(1)}} = \frac{k_d^{(2)}}{k_r^{(2)}} = \frac{2c_e^2 M_a}{(1 - c_e^2) RT}.$$

Тогда формула для расчета равновесной концентрации атомов имеет вид:

$$c_e = \sqrt{\frac{A}{1 - A}}, \quad A = \frac{k_d^{(1)}}{k_r^{(1)}} \cdot \frac{RT}{2M_a}. \quad (18)$$

Колебательная кинетика

Колебательная энергия двухатомных молекул на единицу массы в уравнениях (7) и (8) вычисляется в приближении гармонического осциллятора:

$$e_v(T_v) = \frac{R}{2M_a} \cdot \frac{\theta}{\exp(\theta/T_v) - 1}, \quad (19)$$

где характеристическая температура для молекул азота $\theta = 3371$ К [15]. По рассчитанной функции $e_v(T_v)$ находится локальная колебательная температура T_v .

Характерное время релаксации колебательной моды τ в релаксационном слагаемом (10) описывается полуэмпирической формулой Милликена–Уайта [16]:

$$\ln(p\tau) = A(T^{-3/2} - 0,015M_r) - 18,420,$$

здесь размерности входящих величин выражаются в следующих единицах: время τ — в секундах, давление p — в атмосферах, приведенная масса M_r сталкивающихся частиц в атомных единицах массы. Для азота $M_r = 14$, эмпирическая константа $A = 220$.

Численные методы

Для численных расчетов профилей гидродинамических параметров ПС предлагается использовать два альтернативных метода. Наиболее распространенный подход при расчетах устойчивости ПС основан на переходе от полной системы уравнений (3)–(9) к системе локально автомодельных уравнений [3].

Локально автомодельные уравнения

Преимущество локально автомодельных решений связано с простотой их расчета из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, параметризованной по продольной координате потока. Вывод соответствующих уравнений из системы (3)–(9) аналогичен выводу автомодельных уравнений для колебательно возбужденного газа [3]. В данном случае в принятой безразмерной форме они имеют вид

$$(\mu\rho\varphi''(\zeta))' + \varphi\varphi'' = 0, \tag{20}$$

$$\left(\frac{\mu\rho}{Sc}c'(\zeta)\right)' + \varphi c' + \frac{4\xi}{\rho}\dot{w}_a = 0, \tag{21}$$

$$\frac{\alpha_\infty}{Pr}(\lambda\rho T')' + \left(\frac{3}{2}T\frac{\mu\rho}{Sc}c'(\zeta)\right)' - \left[(1-c)e_v\frac{\mu\rho}{Sc}c'(\zeta)\right]' + \frac{\gamma_\infty}{4}M_\infty^2\mu\rho\varphi''^2 + e'_{in}\varphi = -\frac{4\xi}{\rho}J + 4\xi\left(q_{tr-v} - \frac{1}{2\rho}e_v\dot{w}_a\right), \tag{22}$$

$$\frac{\alpha_\infty}{Pr}(\lambda_v\rho T'_v)' + \left(\frac{\mu\rho(1-c)e_v}{Sc}c'(\zeta)\right)' + [(1-c)e_v]'\varphi = 4\xi\left(\frac{e_v\dot{w}_a}{2\rho} - q_{tr-v}\right), \tag{23}$$

$$q_{tr-v} = (1-c)\frac{e_v(T) - e_v(T_v)}{\tau}.$$

Здесь штрихи означают дифференцирование по поперечной автомодельной координате $\zeta = \eta/(2\sqrt{\xi})$, величины

$$\xi \equiv x, \quad \eta = \int_0^y \rho dy$$

представляют собой переменные Дородницына–Хоуарта [17], вспомогательная функция, связанная с функцией тока, записывается как

$$\varphi(\zeta) = 2\int_0^\zeta u(t) dt.$$

Можно отметить, что уравнение импульсов (20) аналогично соответствующему автомодельному уравнению для совершенного газа [17], а уравнения для концентрации атомов (21) и энергий (22), (23) из-за наличия источника \dot{w}_a , тепловыделения реакций и релаксационных слагаемых, где координата $\zeta \equiv x$ входит как параметр, имеют локально автомодельную форму. При $\zeta = 0$ система (20)–(23) переходит в систему автомодельных уравнений совершенного газа [17].

Для численных расчетов локально автомодельных решений система уравнений (20)–(23) приводится к нормальной форме введением вспомогательных функций

$$Z_1 = \varphi, \quad Z_2 = \varphi', \quad Z_3 = \varphi'', \quad Z_4 = c, \quad Z_5 = T, \quad Z_6 = T', \quad Z_7 = T_v, \quad Z_8 = T'_v.$$

Для полученной системы методом «стрельбы» с помощью процедуры Рунге–Кутты четвертого порядка на интервале $[0, \delta]$ решается двухточечная краевая задача. Точкой «прицеливания» служит середина интервала $\zeta_c = \delta/2$, где требовалось совпадение значений вычисляемых величин с точностью до 10^{-8} .

Численная схема для полной системы уравнений (3)–(9)

Для численного решения полной системы уравнений стационарного ПС используется обобщение алгоритма, предложенного авторами [18] для случая простого совершенного газа. В работе [19] алгоритм был применен и апробирован для модели однокомпо-

нентного колебательно возбужденного газа. В основе численного метода лежит представление системы уравнений ПС (3)–(8) в следующем обобщенном виде:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0, \quad (24)$$

$$a_i \frac{\partial f_i}{\partial x} + b_i \frac{\partial f_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(g_i \frac{\partial f_i}{\partial y} \right) + h_i f_i + d_i, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (25)$$

Здесь уравнения (4), (5), (7), (8) записаны в форме системы квазилинейных параболических уравнений, в которых времени подобной (маршевой) переменной служит координата x . Для этого уравнения (7), (8) с помощью подстановки выражений для плотностей внутренней (10) и колебательной (19) энергий разрешаются относительно производных статической и колебательной температур по переменным (x, y) . Кроме того, в предположении относительной малости вклада от диффузионных потоков соответствующие члены формально включаются в свободные слагаемые d_3, d_4 .

Для аппроксимации уравнений (25) используется явно-неявная конечно-разностная схема Кранка–Николсон [19], реализуемая на основной и вспомогательной прямоугольных сетках с целыми и полужелыми индексами узлов. Схема приводится к виду

$$\alpha_{i,j} f_{i,j-1}^n + \beta_{i,j} f_{i,j}^n + \gamma_{i,j} f_{i,j+1}^n = \delta_{i,j}, \quad (26)$$

Система разностных уравнений (26) имеет трехдиагональную матрицу и эффективно решается методом скалярной прогонки. В процессе прогонки используется схема Зейделя. В частности, рассчитанная на данном шаге концентрация атомов c^n включается далее в диффузионные потоки в уравнения энергий. При вычислении коэффициентов переноса и плотности смеси в пределах данного шага используются внутренние итерации. Поперечная компонента скорости находится из разностного уравнения, аппроксимирующего уравнение неразрывности (24). В результате, на очередном шаге по маршевой переменной x находятся все значения гидродинамических переменных по толщине пограничного слоя. Порядок аппроксимации численной схемы исследовался на основе сравнения численных решений на последовательности вложенных сеток с изменяемым в два раза шагом. Расчеты показали, что по пространственным переменным схема имеет порядок аппроксимации, близкий ко второму. Основные расчеты проводились на отрезке $0 \leq x \leq 40$ с шагом $h_x = 0,025$. Высота пограничного слоя изменялась в пределах $0 \leq x \leq 160$, при этом шаг сетки в поперечном направлении составлял $h_y = 0,022$.

Результаты численных расчетов

Для апробации предложенной модели были проведены сравнительные расчеты численных и локально автомоделных решений уравнений ПС на пластине для типичных условий эксперимента в высокоэнтальпийной аэродинамической трубе и гиперзвукового полета в верхней атмосфере.

Граничные условия в невозмущенном потоке

Для случая обтекания пластины в высокоэнтальпийной аэродинамической трубе (режим I) в качестве граничных условий в невозмущенном потоке на верхней границе ПС были взяты данные реального эксперимента [19]:

$$M_\infty = 7,7, \quad T_\infty = T_{v\infty} = 1100 \text{ К}, \quad p_\infty = 940,3 \text{ Па}, \quad c_\infty = 0,1.$$

Для случая гиперзвукового полета (режим II) в качестве граничных условий на верхней границе ПС использовались параметры потока за косым скачком уплотнения на головной части в форме полуклина с углом $\alpha = 15^\circ$, летящей с числом Маха $M = 15$ на высоте $h = 34$ км, где давление $p \approx 940,3$ Па. Параметры рассчитывались на основе формул теории косого скачка [17]. В рассматриваемых условиях угол наклона скачка $\varphi = 19^\circ$, остальные параметры имели следующие значения:

$$M_\infty = 4,88, \quad T_\infty = T_{v\infty} = 1271,3 \text{ К}, \quad p_\infty = 28067,5 \text{ Па}, \quad c_\infty = c_e = 0.$$

Здесь концентрация атомов рассчитывалась как равновесная при температуре T_∞ по формуле (18). Видно, что в выбранных характерных условиях полета диссоциация незначительна.

В безразмерной форме граничные условия на верхней границе ПС имеют вид:

$$U(\delta) = 1, \quad c(\delta) = c_\infty, \quad T(\delta) = T_v(\delta) = 1.$$

Граничные условия на пластине

В каждом из режимов на поверхности пластины рассматривалось три типа граничных условий. В безразмерной форме они записываются следующим образом.

1. Адиабатическая некаталитическая стенка:

$$U(0) = 0, \quad T'(0) = 0, \quad T_v(0) = 1 + \frac{\gamma-1}{2} \text{Pr} M_\infty^2, \quad \frac{\partial c}{\partial y}(0) = 0.$$

2. Адиабатическая абсолютно каталитическая стенка:

$$U(0) = 0, \quad T'(0) = 0, \quad T_v(0) = 1 + \frac{\gamma-1}{2} \text{Pr} M_\infty^2, \quad c(0) = c_e(0).$$

3. Изотермическая абсолютно каталитическая стенка:

$$U(0) = 0, \quad T(0) = T_v(0) = 1, \quad c(0) = c_e(0).$$

Анализ полученных локально автомодельных решений показал, что во всех рассмотренных режимах имеет место сходимость локально автомодельных профилей продольной скорости, плотности смеси и температур к некоторым предельным значениям при координате ζ , которая в каждом случае определяется относительно более медленной сходимостью профиля концентрации атомов азота. Характеристикой сходимости служило относительное отклонение профилей от предельных значений, которое вычислялось по формуле

$$\varepsilon_\varphi(\zeta, \xi) = \left| 1 - \frac{\varphi(\zeta, \xi)}{\varphi(\zeta, \xi_l)} \right| \cdot 100 \text{ \%}.$$

Для профилей U , ρ , T , T_v максимальные относительные отклонения не превышали 3 %, при этом, например, в режиме II эти отклонения были на уровне 0,01 %. В качестве иллюстрации на рис. 1 показана сходимость профилей U , T , T_v в режиме I.2 (режим I с граничными условиями 2). На рис. 2 приведены аналогичные профили концентрации атомов азота в режиме I для трех вариантов граничных условий (режимы I.1, I.2, I.3).

Процесс сходимости локально автомодельных профилей массовой концентрации c атомов азота N можно проследить на рис. 3, где показаны относительные отклонения $\varepsilon_c(\zeta)$. Видно, что в пределе максимальные относительные отклонения составляют порядка 5 %.

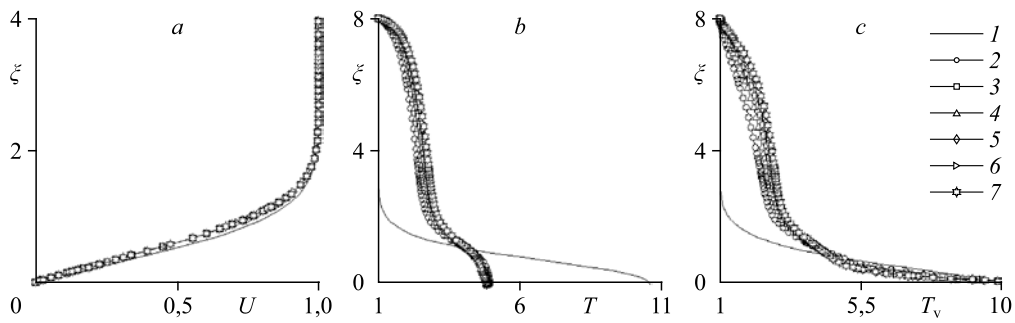


Рис. 1. Локально автомодельные профили гидродинамических параметров в режиме I.2.

a — скорость U , b — статическая температура T , c — колебательная температура T_v ;
 $\zeta = 0$ (1), 2 (2), 3 (3), 4 (4), 4,5 (5), 5 (6), 5,5 (7).

Следует заметить, что в режиме II.3 сходимость профилей массовой концентрации вообще не достигалась. Аналогичная ситуация отмечалась для более простой модели в работе [4].

Сравнение локально автомодельных решений с численными расчетами гидродинамических параметров ПС в полной постановке для режима II приведено на рис. 4, где нижняя ось абсцисс относится к режиму II.1, а верхняя — к режиму II.3.

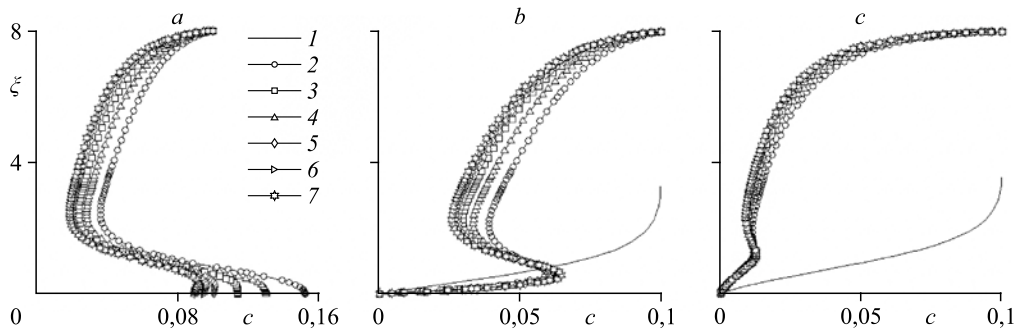


Рис. 2. Локально автомодельные профили массовой концентрации c атомов азота N.

Режимы: I.1 (a), I.2 (b), I.3 (c); $\zeta = 0$ (1), 2,75 (2), 4,75 (3), 6,75 (4), 8,75 (5), 9,75 (6), 10,75 (7).

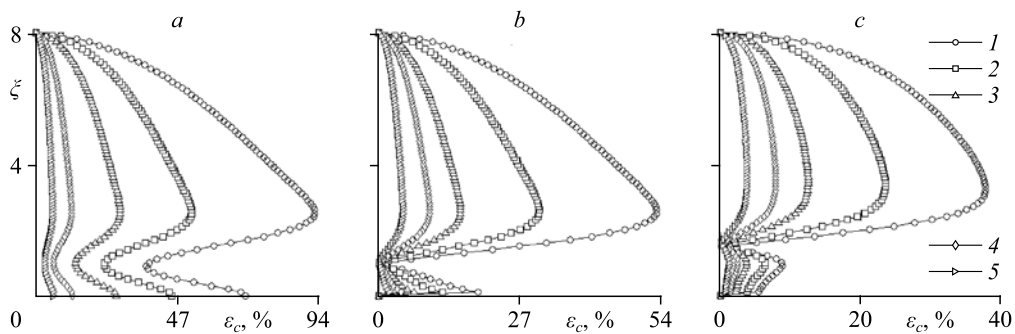


Рис. 3. Относительные отклонения $\epsilon_c(\zeta)$.

Режимы: I.1 (a), I.2 (b), I.3 (c); $\zeta = 2,75$ (1), 4,75 (2), 6,75 (3), 8,75 (4), 9,75 (5).

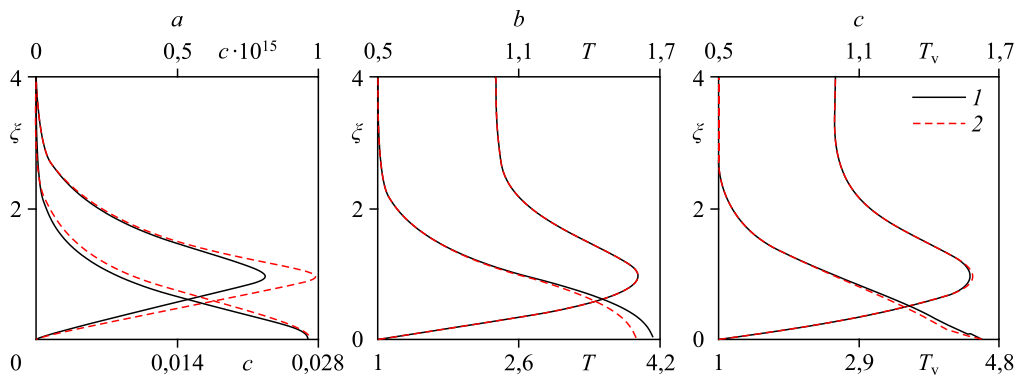


Рис. 4. Сравнение профилей гидродинамических параметров.

a — массовая концентрация c атомов азота N, b — статическая температура T ,
 c — колебательная температура T_v ;

1 — приближение локальной автомодельности, 2 — численное решение полной задачи.

В табл. 2 приведены величины максимальных относительных расхождений между результатами расчетов в двух постановках, рассчитанные по формуле

$$\varepsilon_q(\zeta) = \left| 1 - \frac{\mathbf{q}_l(\zeta, x_0)}{\mathbf{q}(\zeta, \xi_0)} \right| \cdot 100 \%,$$

Таблица 2

Максимальные относительные отклонения профилей гидродинамических параметров

Режим	$\varepsilon_U, \%$	$\varepsilon_\rho, \%$	$\varepsilon_T, \%$	$\varepsilon_{T_v}, \%$	$\varepsilon_c, \%$
П.1	0,58	4,91	4,71	3,38	21,59
П.2	0,48	4,01	3,83	4,11	8,77
П.3	0,07	0,15	0,15	0,49	17,51

здесь вектор $\mathbf{q}(\xi_0) = (U, c, \rho, T, T_v)$ — предельные локально автомодельные профили при $\xi = \xi_0$ и вектор $\mathbf{q}_l(\xi_0) = (U_l, c_l, \rho_l, T_l, T_{v,l})$ — предельные профили, полученные из численного решения полной задачи при $x = x_0$.

Можно констатировать, что расхождение профилей U, ρ, T, T_v не превышает 5 %, что вполне приемлемо для использования локально автомодельных решений в расчетах устойчивости ПС. В то же время профили массовой концентрации c атомов азота существенно расходятся. Есть основания предполагать, что для газов с большим числом реакций диссоциации-рекомбинации, например, воздуха или углекислого газа, и при больших температурах расхождение будет еще более существенным. В этой связи для адекватного учета влияния химических реакций на устойчивость течения необходимо использовать профили гидродинамических параметров, рассчитанные численно в полной постановке. При этом локально автомодельные решения могут служить в качестве начальных условий для численных расчетов, как это делалось в данной работе.

Заключение

Представлена физико-математическая модель плоского сверхзвукового пограничного слоя колебательно-возбужденного диссоциирующего газа, предназначенная для расчета параметров стационарного течения в задачах устойчивости. Рассмотрен простейший случай двухатомного газа и одномодовой колебательной релаксации, параметризованный по данным для азота. Обоснован ряд упрощенных формул расчета коэффициентов переноса и реакций диссоциации-рекомбинации для молекулярно-атомной смеси, допустимых для характерных условий сверх- и гиперзвуковых пограничных слоев. Проведены

сравнительные расчеты численных и локально автомодельных решений уравнений пограничного слоя на пластине для типичных условий эксперимента в высокоэнтальпийной аэродинамической трубе и гиперзвукового полета в верхней атмосфере. Показано, что рассчитанные на основе этих подходов профили концентраций атомов существенно различаются. В этой связи для адекватного учета влияния химических реакций в расчетах устойчивости пограничного слоя необходимо использовать профили гидродинамических параметров, рассчитанные численно в полной постановке. Локально автомодельные решения могут служить начальными условиями для численных расчетов.

Список литературы

1. MacCormac R.W. Algorithm development for hypersonic flow // AIAA Paper. 2009. No. 7320.
2. Шоев Г.В., Бондарь В.Е., Облапенко Г.П., Кустова Е.В. Разработка и апробация численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в ANSYS Fluent // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23, № 2. С. 159–171.
3. Гапонов С.А., Петров Г.В. Устойчивость пограничного слоя неравновесного диссоциирующего газа. Новосибирск: Наука, 2013. 95 с.
4. Григорьев Ю.Н., Горобчук А.Г., Ершов И.В. Расчеты сверхзвукового пограничного слоя в полной и локально автомодельной постановках // Вычислительные технологии. 2020. Т. 25, № 2. С. 50–62.
5. Blottner F.G. Similar and nonsimilar solutions for nonequilibrium laminar boundary layer // AIAA J. 1963. Vol. 1, No. 9. P. 2156–2157.
6. Термические константы веществ. Справочник. / Под ред. В.П. Глушко. Вып. I-X. М.: ВИНТИ АН СССР, 1965–1981.
7. Дорренс У.Х. Гиперзвуковые течения вязкого газа. М.: Мир. 1966. 440 с.
8. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во СПб. гос. ун-та, 2003. 272 с.
9. Гиршфельдер Дж., Кергис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 930 с.
10. Алемасов В.Е., Дрегалли А.Ф., Тишин А.П., Худяков В.А., Костин В.Н. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. III. М.: ВИНТИ АН СССР, 1973. 624 с.
11. Таблицы физических величин. Справочник. / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
12. Wilke C.R. A viscosity equation for gas mixtures // J. of Chemical Physics. 1950. Vol. 18. P. 517–519.
13. Blottner F.G., Johnson M., Ellis M. Chemically reacting viscous flow program for multi-component gas mixtures // Research Report No. SC-RR-70-754. Albuquerque, New Mexico: Sandia Laboratories, December 1971. 316 p.
14. Gupta R.N., Yos J.M., Thompson R.A., Lee K.-P. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K // Technical Report No. NASA-RP-1232. Washington, D.C.: NASA, 1990. 89 p.
15. Vincenti W.G., Kruger C.H. Introduction to physical gas dynamics. Malabar, Florida: Krieger Publishing Co, 1986. 538 p.
16. Monchik L., Yun K.S., Mason E.A. Relaxation effects in transport properties of a sough spheres // J. of Chemical Physics. 1963. Vol. 38. P. 1282–1287.
17. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.-Л.: Гос. изд-во технико-теорет. лит., 1950. 676 с.
18. Браиловская И.Ю., Чудов Л.А. Решение уравнений пограничного слоя разностным методом // Вычислительные методы и программирование. М.: МГУ, 1962. С. 167–182.
19. Hornung H.G., Smith G.H. The influence of relaxation on shock detachment // J. of Fluid Mechanics. 1979. Vol. 93, Pt. 2. P. 225–239.

*Статья поступила в редакцию 2 июня 2021 г.,
после доработки — 22 июля 2021 г.,
принята к публикации 30 июля 2021 г.*