

УДК 533.6.011

НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА И ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ПРИ СВЕРХЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ ТЕЛ ПОТОКОМ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА**Е.В. Кустова¹, Е.А. Нагнибеда¹, Ю.Д. Шевелев², Н.Г. Сызранова²**¹ *Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург*² *Институт автоматизации проектирования РАН, г. Москва**kustova@mail.wplus.net, e_nagnibeda@mail.ru, shevelev@icad.org.ru, nina-syzranova@ya.ru***Аннотация**

Рассматривается сверхзвуковое обтекание космического аппарата в моделирующем атмосфере Марса потоке углекислого газа. Течение около аппарата рассчитывается в рамках модели вязкого ударного слоя с учетом объемной вязкости. Считается, что в ударном слое происходят неравновесные химические реакции и имеется неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы молекул CO_2 . Проводится сравнение результатов, полученных на основании трехтемпературной модели колебательной релаксации и более простых приближений. Коэффициенты переноса многокомпонентной газовой смеси, определенные в соответствии с результатами кинетической теории, сравниваются с аппроксимационными выражениями. Анализируется влияние объёмной вязкости и термохимических процессов, происходящих в диссоциирующей и релаксирующей газовой смеси, на параметры течения в ударном слое и теплопередачу к поверхности конкретного аппарата при спуске в атмосфере Марса.

NON-EQUILIBRIUM KINETICS AND TRANSPORT PROCESSES IN SUPERSONIC CARBON DIOXIDE FLOWS AROUND BLUNT BODIES

We consider the supersonic CO_2 flow field around the space vehicle in the Martian atmosphere. A flow around the vehicle is simulated in the frame of the viscous shock layer model taking into account bulk viscosity effects. It is supposed that in the shock layer, non-equilibrium chemical reactions as well as non-equilibrium vibrational excitation of CO_2 molecules take place. The results obtained using the three-temperature vibrational relaxation model, are compared with the ones based on simpler approaches. Transport coefficients of a multi-component gas mixture determined in accordance to the kinetic theory are compared with the coefficients calculated using approximate expressions. The influence of bulk viscosity and thermo-chemical processes proceeding in a dissociating and relaxing gas mixture on the shock layer flow parameters and the heat flux to the surface of a specific vehicle reentering the Mars atmosphere is analyzed.

Введение

Известно, что при сверхзвуковых скоростях движения тел в атмосфере нагрев газа в ударном слое инициирует протекание таких физико-химических процессов как химические реакции, ионизация, излучение, возбуждение внутренних степеней свободы частиц. В результате в ударном слое образуется многокомпонентная смесь, термодинамические и переносные свойства которой существенно отличаются от свойств набегающего потока. Проведенные ранее расчетно-теоретические исследования параметров обтекания космических аппаратов в атмосфере Марса, состоящей на 97% из углекислого газа, используют, как правило, для описания неравновесных термохимических процессов одно или двухтемпературные модели. В данной работе рассматривается трехтемпературная модель [1], основанная на методах кинетической теории и учитывающая сложную структуру молекул CO_2 и различные скорости обмена колебательной энергией. Сверхзвуковое обтекание тела рассчитывается в приближении вязкого ударного слоя. Проводится сравнение результатов, полученных на основании трехтемпературной модели и одно- и двухтемпературного

приближений. Коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузионные характеристики многокомпонентной газовой смеси определяются, как в соответствии с результатами кинетической теории, так и с помощью аппроксимаций, часто используемых при практических расчетах. Оценивается влияние способов их представления на параметры обтекания. Заметим, что в большинстве работ в расчетах течений вязкого газа принимается во внимание только сдвиговая вязкость, а величиной объемной вязкости пренебрегается. В настоящей работе проведены расчеты с учетом объемной вязкости, результаты сравниваются с данными, полученными на основании подходов, в которых вкладом объемной вязкости пренебрегается. Приводятся результаты численных исследований по параметрам обтекания и теплопередачи космического аппарата MSRO (Mars Sample Return Orbiter) с учетом различных моделей и подходов.

1. Основные уравнения

Вывод гидродинамических уравнений для многокомпонентных газовых смесей, граничные условия подробно обсуждаются в ряде монографий, например, [2–4]. В дифференциальной форме в предположении отсутствия заряженных частиц и излучения уравнения баланса массы, импульса и энергии для N компонентной газовой смеси имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} c_i + \mathbf{J}_i) = \dot{w}_i, \quad i=1, \dots, N, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V} - \mathbf{T}) + \nabla p = 0, \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot [(\rho E + p) \mathbf{V} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}] = 0. \quad (1.4)$$

В уравнениях (1.1) – (1.4) использованы следующие обозначения: ρ – плотность смеси, $c_i = \rho_i / \rho$ – относительная массовая концентрация i -й компоненты смеси; \dot{w}_i – массовая скорость образования i -й компоненты в химических реакциях; \mathbf{V} – среднемассовая скорость смеси; $\mathbf{J}_i = \rho_i \mathbf{V}_i$ – вектор плотности диффузионного потока массы i -й компоненты, \mathbf{V}_i – скорость диффузии i -й компоненты; p – давление; \mathbf{T} – тензор вязких напряжений; $E = e + V^2/2$ – полная удельная энергия смеси; e – удельная внутренняя энергия; \mathbf{q} – вектор теплового потока.

Уравнение состояния газовой смеси записывается в виде:

$$p = \frac{\rho R T}{m}, \quad m = \left(\sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i} \right)^{-1} \quad (1.5)$$

где R – универсальная газовая постоянная, m , m_i – молярные массы смеси и i -й компоненты.

Диффузионная скорость i -й компоненты определяется по формуле [1]:

$$\mathbf{V}_i = - \sum_j D_{ij}^* \mathbf{d}_j - D_{Ti} \nabla \ln T$$

где D_{ij}^* – коэффициенты многокомпонентной диффузии, D_{Ti} – коэффициенты термодиффузии, \mathbf{d}_i – диффузионная термодинамическая сила.

Тензор вязких напряжений \mathbf{T} определяется выражением:

$$\mathbf{T} = 2\mu\mathbf{S} + \zeta(\nabla \cdot \mathbf{V})\mathbf{I}$$

Здесь \mathbf{S} – тензор скоростей деформаций, \mathbf{I} – тензорная единица, μ – коэффициент динамической вязкости, ζ – коэффициент объемной вязкости. В более строгой постановке [1,15] тензор вязких напряжений включает дополнительный член $p_{rel}\mathbf{I}$, где p_{rel} – релаксационное давление, характеризующее влияние химических реакций на диагональные элементы тензора вязких напряжений. Оценки показывают, что во многих случаях величина p_{rel} мала по сравнению с p , поэтому в настоящей работе эта поправка не учитывается.

Выражение для удельной внутренней энергии e_i i -й компоненты можно записать в виде:

$$e_i = e_{Ti}(T_i) + e_{Ri}(T_R) + E_{vi}(T_{vi}) + e_{Ei}(T_{Ei}) + h_i^0$$

Здесь первые четыре члена представляют составляющие удельной энергии для поступательных (T), вращательных (R), колебательных (V) и электронных (E) степеней свободы при их соответствующих температурах; h_i^0 – энергия образования i -й компоненты.

Вектор плотности теплового потока для многокомпонентной смеси реагирующих газов определяется формулой [5]

$$\mathbf{q} = -\lambda\nabla T - \sum_{i=1}^N \lambda_i^{(in)} \nabla T_i^{(in)} + \sum_{i=1}^N h_i \mathbf{J}_i \quad (1.6)$$

где h_i – удельная энтальпия компонент с учетом энергии образования, λ – коэффициент «поступательной» теплопроводности, $\lambda_i^{(in)}$ – коэффициент переноса тепла, соответствующий внутренним степеням свободы (вращательным, колебательным и электронным) i -й компоненты при температуре $T_i^{(in)}$. Формула написана без учета диффузионного термоэффекта, вклад которого при сверхзвуковом обтекании тел, как правило, незначителен.

В уравнениях неразрывности (1.2) в качестве компонент можно рассматривать и частицы одного сорта, находящиеся в разных энергетических состояниях. Однако при численном исследовании обтекания тел удобнее ограничиться вместо такого поуровневого описания дополнительными уравнениями для составляющих внутренней энергии.

В данной работе учитывается неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы молекул CO_2 , при этом считается, что поступательные и вращательные степени свободы находятся в равновесии, а степень ионизации газа мала и не вносит заметного вклада во внутреннюю энергию газа. В этом случае включается механизм релаксации колебательных степеней свободы с квази-равновесной температурой T_{vi} , и тогда можно рассмотреть соответствующее уравнение баланса для колебательной энергии.

Пусть E_{vi} – удельная колебательная энергия i -й компоненты, тогда колебательная энергия на единицу объема будет равна $E_{vi}\rho_i$. Уравнение, соответствующее изменению этой величины, имеет вид:

$$\frac{\partial(E_{vi}\rho_i)}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla(E_{vi}\rho_i) = -E_{vi}\rho_i \nabla \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot \mathbf{J}_{Evi} + R_i^{chem} + R_i^{vibr} \quad (1.7)$$

Здесь \mathbf{J}_{Ei} – диффузионный поток колебательной энергии, который находится следующим образом

$$\mathbf{J}_{Evi} = E_{vi}\rho_i \mathbf{V}_{Ei}$$

где \mathbf{V}_{Ei} – диффузионная скорость колебательной энергии, определяемая по формуле:

$$\mathbf{V}_{Ei} = -\frac{D_{Ei}}{c_i E_{vi}} \nabla(c_i E_{vi})$$

D_{Ei} – эффективный коэффициент диффузии колебательной энергии.

Величины R_i^{chem} , R_i^{vibr} в уравнении (1.7) характеризуют изменение колебательной энергии в результате химических реакций и неравновесных обменов колебательной энергией, идущих в газодинамическом масштабе времени. Точные выражения для релаксационных членов R_i^{chem} , R_i^{vibr} в смесях, содержащих углекислый газ, получены в работе [1] на основании осреднения соответствующих поуровневых релаксационных членов, зависящих от коэффициентов скорости колебательных переходов и химических реакций для каждого колебательного состояния.

Использование точных выражений для релаксационных членов требует значительных вычислительных затрат. В связи с этим при практических расчетах часто применяют упрощенное описание, основанное на ряде предположений. Так, предполагая, что сечения химических реакций не зависят от колебательных уровней реагентов, получим:

$$R_i^{chem} = E_{vi} \dot{\omega}_i$$

Кроме того, для случая умеренных отклонений от равновесия часто используется приближенная формула

$$R_i^{vibr} = \rho_i \frac{E_{eqi} - E_{vi}}{\tau_i}$$

где E_{eqi} – локально-равновесное значение колебательной энергии E_{vi} , τ_i – время релаксации.

С учетом данных предположений уравнение (1.7) можно переписать следующим образом, прибавляя и вычитая в левой части величину $E_{vi} \nabla \cdot \mathbf{J}_i$:

$$\begin{aligned} & \underline{E_{vi} \frac{\partial \rho_i}{\partial t}} + \rho_i \underline{\frac{\partial E_{vi}}{\partial t}} + \rho_i \mathbf{V} \cdot \nabla E_{vi} + \underline{E_{vi} \mathbf{V} \cdot \nabla \rho_i} + \underline{E_{vi} \rho_i \nabla \cdot \mathbf{V}} + \underline{E_{vi} \nabla \cdot \mathbf{J}_i} - E_{vi} \nabla \cdot \mathbf{J}_i + \nabla \cdot \mathbf{J}_{E_{vi}} = \\ & = \underline{E_{vi} \dot{\omega}_i} + \frac{(E_{eqi} - E_{vi}) \rho_i}{\tau_i} \end{aligned}$$

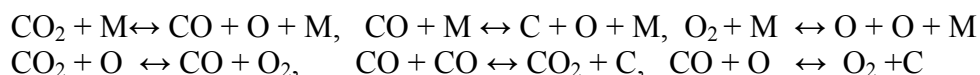
Сумма подчеркнутых членов в полученном уравнении равна нулю в силу уравнения неразрывности для компоненты (1.2), поэтому после деления на ρ_i получаем:

$$\frac{dE_{vi}}{dt} + \frac{1}{\rho_i} (\nabla \cdot \mathbf{J}_{E_{vi}}) - \frac{1}{\rho_i} E_{vi} (\nabla \cdot \mathbf{J}_i) = \frac{E_{eqi} - E_{vi}}{\tau_i} \quad (1.8)$$

Таким образом, при неравновесном возбуждении колебательных степеней свободы молекул к системе уравнений (1.1) – (1.5) добавляются уравнения для колебательной энергии в форме (1.8).

2. Модели колебательной релаксации молекул углекислого газа

Газ в ударном слое рассматривается как пятикомпонентная смесь $\text{CO}_2(1)$, $\text{CO}(2)$, $\text{O}_2(3)$, $\text{C}(4)$, $\text{O}(5)$, в которой проходят следующие реакции:



где M – любая из рассматриваемых частиц.

Моделирование течений углекислого газа вызывает значительные сложности в связи с тем, что молекула CO_2 имеет три колебательные моды: симметричную моду с частотой ν_1 , дважды вырожденную деформационную (ν_2) и асимметричную (ν_3) моды. Наличие нескольких мод ведет к возникновению ряда каналов релаксации: внутримодовые обмены

колебательными квантами (VV_m) и переходы колебательной энергии в поступательную (VT_m), а также межмодовые обмены колебательной энергией (VV_{k-m} , $k, m=1,2,3$) [1]. Известно, что скорости этих процессов существенно различаются. Это позволяет строить макроскопические описания течений CO_2 , основанные на различных квазистационарных распределениях молекул по колебательным уровням. В [1] было предложено трехтемпературное описание смеси $CO_2/CO/O$, основанное на следующем соотношении времен:

$$\tau_{tr} < \tau_{rot} < \tau_{VV_m} \sim \tau_{VV'_{1-2}} \ll \tau_{VT_2} \sim \tau_{VV'_{1-2-3}} < \tau_{VT_3} < \tau_{diss} \sim \theta, \quad m=1, 2, 3 \quad (2.1)$$

Здесь τ_{tr}, τ_{rot} – характерные времена поступательной и вращательной релаксации;

τ_{VV_m}, τ_{VT_m} – времена внутримодовых VV и VT обменов;

$\tau_{VV'_{k-m}}$ – времена межмодовых обменов;

τ_{diss} – характерное время реакции диссоциации;

θ – время установления газодинамических параметров.

В соответствии с условием (2.1) процесс колебательной релаксации CO_2 можно разделить на две стадии – быструю и медленную. В первой, быстрой стадии, перераспределение колебательной энергии между симметричной и деформационной модами происходит вследствие быстрого VV'_{1-2} обмена, который выравнивает температуру и устанавливает в симметричной и деформационной модах больцмановское распределение энергии с единой температурой T_{12} . В медленной стадии термическое равновесие с температурой T_3 устанавливается вследствие VV'_{1-2-3} межмодовых обменов между объединенной (1–2) и антисимметричной (3) модами и VT релаксации деформационной и антисимметричной мод.

В настоящей работе модель, предложенная в [1], обобщается на случай течения пятикомпонентной смеси $CO_2/CO/O_2/C/O$ и применяется для численного исследования течения данной смеси около затупленного тела. В связи с вышеизложенным уравнения для колебательной энергии молекул CO_2 можно записать следующим образом:

$$\frac{dE_{12}}{dt} + \frac{1}{\rho_1} (\nabla \cdot \mathbf{J}_{E_{12}}) - \frac{1}{\rho_1} E_{12} (\nabla \cdot \mathbf{J}_1) = \frac{E_{eq12} - E_{12}}{\tau_{12}} \quad (2.2)$$

$$\frac{dE_3}{dt} + \frac{1}{\rho_1} (\nabla \cdot \mathbf{J}_{E_3}) - \frac{1}{\rho_1} E_3 (\nabla \cdot \mathbf{J}_1) = \frac{E_{eq3} - E_3}{\tau_3} \quad (2.3)$$

Здесь E_{12}, E_3 – удельные колебательные энергии объединенной и антисимметричной мод молекул CO_2 , $\mathbf{J}_{E_{12}}, \mathbf{J}_{E_3}$ – соответствующие диффузионные потоки колебательной энергии, τ_{12}, τ_3 – времена релаксации медленных процессов, ведущих к изменению колебательной энергии в соответствующей моде.

В рамках модели гармонического осциллятора удельные колебательные энергии различных мод CO_2 имеют вид [1]:

$$E_{12} = \frac{1}{Z_{12}(T_{12})} \sum_{i_1, i_2} (i_2 + 1) (i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010}) \exp\left(-\frac{i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010}}{kT_{12}}\right)$$

$$E_3 = \frac{1}{Z_3(T_3)} \sum_{i_3} i_3 \varepsilon_{001} \exp\left(-\frac{i_3 \varepsilon_{001}}{kT_3}\right)$$

где i_1, i_2, i_3 – колебательные квантовые числа мод CO_2 , $\varepsilon_{i_1 i_2 i_3}$ – уровни колебательной энергии, k – постоянная Больцмана, $Z_i(T_i)$ – статистические суммы:

$$Z_{12}(T_{12}) = \sum_{i_1, i_2} (i_2 + 1) \exp\left(-\frac{i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010}}{kT_{12}}\right), \quad Z_3(T_3) = \sum_{i_3} i_3 \exp\left(-\frac{i_3 \varepsilon_{001}}{kT_3}\right)$$

Таким образом, удельная колебательная энергия молекул CO_2 E_v выражается как сумма двух независимых энергий объединенной и асимметричной мод:

$$E_v(T_{12}, T_3) = E_{12}(T_{12}) + E_3(T_3)$$

Колебательные энергии двухатомных молекул CO и O_2 можно представить в виде

$$E_{vi} = \frac{kT_{vi}^*}{m_i} (\exp(T_{vi}^*/T_{vi}) - 1)^{-1}, \quad i=2, 3$$

где T_{vi}^* – характеристическая колебательная температура, T_{vi} – колебательная температура компоненты i . Термически равновесные значения удельных колебательных энергий получаются при подстановке в данные выражения $T_{vi}=T$. Здесь предполагается, что колебательные степени свободы молекул CO и O_2 возбуждены равновесно в соответствии с поступательной температурой T .

Времена релаксации медленных процессов τ_{12} и τ_3 можно, например, определить с помощью результатов работы [6], в которой они задаются в виде аналитических аппроксимаций экспериментальных данных:

$$\tau = \frac{1}{p} \exp\left(a + by + cy^2 + \frac{d}{y}\right)$$

где $y = 1/T^{-1/3}$, p – давление в атм, T, K – температура. Коэффициенты a, b, c, d определяют скорость энергообмена.

С учетом рассмотренной модели вектор теплового потока в рассматриваемой колебательно неравновесной пятикомпонентной смеси газов запишется следующим образом [5]:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^5 h_i \mathbf{J}_i - \rho_1 D_{E12} \nabla E_{12} - \rho_1 D_{E3} \nabla E_3 - \sum_{i=2,3} \rho_i D_{Ei} \nabla E_{vi} \quad (2.4)$$

$$D_{Ei}^{-1} = \sum_{k=1}^N x_k D_{Eik}^{-1} \quad (2.5)$$

Здесь x_k – молярные концентрации k -й компоненты, D_{Eik} – бинарные коэффициенты для диффузионного переноса колебательной энергии. Коэффициент теплопроводности λ соответствует теплопроводности степеней свободы, находящихся в термическом равновесии.

В другой, упрощенной, модели колебательной релаксации используется предположение работы [7], в которой считается, что сначала за счет столкновений частиц возбуждается деформационная мода молекул CO_2 , а затем энергия этого вида колебаний мгновенно перераспределяется между всеми колебательными модами равновесным образом. При этом вводится единая колебательная температура T_v для всех мод CO_2 и уравнение для колебательной энергии углекислого газа сводится к одному уравнению вида (1.8). Равновесное значение удельной колебательной энергии в рамках модели гармонического осциллятора с учетом двукратного вырождения деформационной моды определяется формулой

$$E_{eq} = R^* \left[\frac{T_*^{(1)}}{\exp(T_*^{(1)}/T) - 1} + \frac{2T_*^{(2)}}{\exp(T_*^{(2)}/T) - 1} + \frac{T_*^{(3)}}{\exp(T_*^{(3)}/T) - 1} \right]$$

где R^* – удельная газовая постоянная. Характеристические температуры колебаний имеют значения $T_*^{(1)} = 1920^\circ\text{K}$, $T_*^{(2)} = 959^\circ\text{K}$, $T_*^{(3)} = 3380^\circ\text{K}$.

В приближении гармонического осциллятора время колебательной релаксации для этой модели определяется формулой

$$\tau^{-1} = fP_{10}^{(2)} \left[1 - \exp(-T_*^{(2)}/T) \right]$$

где f – число столкновений в единицу времени, $P_{10}^{(2)}$ – вероятность перехода при столкновении с первого колебательного уровня на основной, $T_*^{(2)}$ – характеристическая колебательная температура, верхний индекс (2) указывает на соответствие второй (деформационной) колебательной моде. Частота столкновений находится по формуле [8]:

$$f = p\sigma^2(8\pi/mkT)^{1/2}$$

где σ – диаметр столкновения, m – приведенная масса сталкивающихся частиц, k – постоянная Больцмана. Принимая $\sigma = 3.75A^0$, с помощью аналитической аппроксимации, приведенных в [7] результатов измерений, можно получить следующую формулу для времени колебательной релаксации:

$$\tau^{-1} = 10^9 p \exp(-107.3T^{-1/3} + 5.69)/T, \quad 1/\text{с.}$$

Здесь p – давление в кПа, T – температура в Кельвинах.

Выражение для потока тепла в этом случае принимает вид

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^5 h_i \mathbf{J}_i - \sum_{i=1}^3 \rho_i D_{E_i} \nabla E_{vi} \quad (2.6)$$

3. Модели химической кинетики

Массовая скорость образования компонент смеси \dot{w}_i определяется выражением

$$\dot{w}_i = m_i \sum_{(s)} (v_{is}'' - v_{is}') \left[k_{fs} \prod_{j=1}^5 \left(\frac{\rho}{m_j} c_j \right)^{v_{js}'} - k_{rs} \prod_{j=1}^5 \left(\frac{\rho}{m_j} c_j \right)^{v_{js}''} \right]$$

где v_i'' , v_i' – стехиометрические коэффициенты реагентов и продуктов реакций; k_f , k_r – коэффициенты скоростей прямой и обратной реакций. Суммирование проводится по всем s реакциям, в которых участвует i -я компонента смеси.

В однотемпературном приближении коэффициенты скоростей реакций аппроксимируются полуэмпирической формулой Аррениуса: $k(T) = AT^n \exp(-D_a/T)$. Значения эмпирических констант A , n , D_a для реакций с участием CO_2 приводятся в разных работах, причем наблюдается существенное отличие между собой констант скоростей реакций. В [9] проводится сравнение основных приближений [10–12], применяемых для представления констант скоростей реакций в высокотемпературном потоке углекислого газа и анализируется влияние вариации констант скоростей на характер обтекания и теплообмен затупленных тел. Установлено, что изменение скоростей реакций практически не влияет на величину теплового потока к идеально каталитической поверхности тела. В случае некаталитической поверхности отличие в величине теплового потока, полученное для разных приближений, может быть до 30% [9].

В термически неравновесной среде уравнения (1.2) содержат многотемпературные коэффициенты скоростей химических реакций. Если в рамках модели колебательной релаксации вводится единая колебательная температура для молекул CO_2 , то коэффициент скорости реакции будет зависеть от двух температур: $k_f = k_f(T, T_v)$. В этом случае он запишется в виде произведения термически равновесного коэффициента скорости реакции $k_f^{eq}(T)$ и фактора неравновесности $Z_v(T, T_v)$:

$$k_f(T, T_v) = Z_v(T, T_v) k_f^{eq}(T)$$

По определению при $T_v \rightarrow T - Z_v(T, T_v) \rightarrow 1$.

В данной работе для расчета двухтемпературных коэффициентов скорости диссоциации используется широко известная модель Парка [13,25], основанная на интуитивном учете колебательной неравновесности путем замены температуры газа T в выражении однотемпературной константы скорости на эффективную температуру $T_{eff} = T^r T_v^{1-r}$, где r – параметр модели, который варьируется от 0.5 до 0.7. Коэффициент скорости реакции описывается при помощи обычной формулы Аррениуса, в которой вместо температуры газа используется эффективная температура T_{eff} :

$$k(T_v, T) = AT_{eff}^n \exp(-D_0/T_{eff}).$$

Замена в формуле Аррениуса температуры газа на эффективную температуру приводит к снижению скорости реакции диссоциации молекул.

В трехтемпературном приближении (с температурами мод T_{12} и T_3) коэффициент скорости диссоциации углекислого газа можно записать в виде, обобщающем известную модель Тринора-Маррона для двухатомных молекул [14] на случай многоатомных молекул [1]:

$$k_f(T, T_{12}, T_3) = Z_v(T, T_{12}, T_3) k_f^{eq}(T),$$

где фактор неравновесности $Z_v(T, T_{12}, T_3)$ имеет вид

$$\begin{aligned} Z_v(T, T_{12}, T_3) &= \frac{Z(T)}{Z(-U)Z(T_{12}, T_3)} \times \\ &\times \sum_{i_1, i_2, i_3} (i_2 + 1) \exp \left(\left[\frac{i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010}}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{12}} \right) + \frac{i_3 \varepsilon_{001}}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_3} \right) + \frac{\varepsilon_{i_1 i_2 i_3}}{kU} \right] \right) \\ Z(T_{12}, T_3) &= \sum_{i_1, i_2} (i_2 + 1) \exp \left(-\frac{i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010}}{kT_{12}} \right) \sum_{i_3} \exp \left(-\frac{i_3 \varepsilon_{001}}{kT_3} \right) \\ Z(T) &= \sum_{i_1, i_2, i_3} (i_2 + 1) \exp \left(-\frac{i_1 \varepsilon_{100} + i_2 \varepsilon_{010} + i_3 \varepsilon_{001}}{kT} \right). \end{aligned}$$

Здесь U – параметр модели, $D = 64017\text{K}$ – энергия диссоциации CO_2 в Кельвинах. В расчетах U полагается равным $D/6$.

4. Коэффициенты переноса

Для расчета коэффициентов вязкости, теплопроводности и диффузии в работе рассматриваются различные подходы: применяются результаты, полученные с помощью кинетической теории газов, а также используются приближенные выражения. Кинетическая теория процессов переноса позволяет выразить коэффициенты переноса через решения линейных алгебраических уравнений, коэффициенты которых содержат интегралы от сечений столкновений. Точность получаемых формул зависит от выбора приближения, потенциалов взаимодействия и используемых вычислительных методик. Алгоритмы расчета коэффициентов переноса в многокомпонентных реагирующих смесях при разных условиях неравновесности разработаны, например, в [15–17]. В случае углекислого газа процедура вычисления коэффициентов переноса усложняется из-за наличия нескольких колебательных мод и взаимодействия между ними. В работе [1] на основании кинетической теории получены формулы для коэффициентов переноса в смесях, содержащих CO_2 , в трехтемпературном приближении. Это формулы для определения элементов диффузионной матрицы, коэффициентов термодиффузии, вязкости,

в том числе и объемной, теплопроводности. В настоящей работе при использовании алгоритмов кинетической теории [1] применяется следующая схема расчета интегралов столкновений. В случае умеренных температур ($T < 2000\text{K}$) интегралы упругих столкновений вычисляются на основании потенциала Леннард-Джонса, а в случае высоких температур – потенциала Борна-Майера. Значения параметров потенциалов, обеспечивающие наилучшее согласие с экспериментальными данными для компонент атмосферы Марса, приводятся в [1]. Кроме того, при расчете коэффициентов теплопроводности, диффузии и сдвиговой вязкости не учитываются интегралы от сечений неупругих процессов. В работе [1] даны качественные и количественные оценки, подтверждающие обоснованность данного предположения.

Коэффициент объемной вязкости определяется в виде решения системы линейных алгебраических уравнений [1], коэффициенты которой зависят от величин интегралов столкновений, молярных концентраций и удельных теплоемкостей поступательных и внутренних степеней свободы компонент. Следует отметить, что в данном случае уже нельзя пренебречь интегралами от сечений неупругих столкновений, которые вносят определяющий вклад в коэффициент объемной вязкости. В настоящей работе интегралы столкновений, зависящие от сечений переходов вращательной энергии, определяются через времена вращательной релаксации, для вычисления которых используется формула Паркера с учетом поправки Брау и Джонсмана (эти выражения приводятся, например, в [15]).

В данной работе рассматривается также упрощенная модель для вычисления параметров переноса, когда коэффициенты вязкости μ и теплопроводности λ смеси определяются с помощью аппроксимаций Уилки [18] и Масона-Саксены [19], получивших большое распространение при практических расчетах:

$$\mu = \sum_{i=1}^N \mu_i \left/ \sum_{k=1}^N G_{ik} \frac{c_k m_i}{c_i m_k} \right., \quad \lambda = \sum_{i=1}^N \lambda_i \left/ \left(1.065 \sum_{k=1}^N G_{ik} \frac{c_k m_i}{c_i m_k} - 0.065 \right) \right. \quad (4.1)$$

$$G_{ik} = \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_k} \sqrt{\frac{m_k}{m_i}}} \right]^2 \left/ \sqrt{8 \left(1 + \frac{m_i}{m_k} \right)} \right.$$

Коэффициенты вязкости и теплопроводности компонент в этом случае вычисляются следующим образом:

$$\mu_i = 0.844 \times 10^{-6} \sqrt{T m_i} / \overline{\Omega}_i^{(2,2)}(T), \quad \text{Па с} \quad (4.2)$$

$$\lambda_i = \frac{15}{4} R_i^* \mu_i \left(0.115 + 0.354 \frac{c_{pi}}{R_i^*} \right) \quad (4.3)$$

где m_i – молярная масса в кг/моль, p – давление в кПа, $\overline{\Omega}_i^{(2,2)}$ – приведенный интеграл столкновений в нм^2 , c_{pi} , R_i^* – удельная теплоемкость при постоянном давлении и удельная газовая постоянная i -й компоненты. Второе слагаемое в (4.3) представляет собой поправку Эйкена на равновесное возбуждение внутренних степеней свободы частиц. Значения приведенных интегралов столкновения для высокотемпературной газовой смеси CO_2 приводятся в работе [20].

Рассматривается еще одно приближение, в котором для определения вязкости компонент применяются корреляции Блоттнера [21]:

$$\mu_i = 0.1 \times \exp[(A_i \ln T + B_i) \ln T + C_i]$$

Значения коэффициентов A_i, B_i, C_i , для разных компонент смеси приводятся в таблице 1.

Таблица 1.

Параметры для определения вязкости компонент

Компонента	A_i	B_i	C_i
CO ₂	-0.026654	1.107305	-14.291274
CO	-0.014044	0.887198	-13.269815
O ₂	0.0229290	-0.0826158	-9.2019475
C	-0.007140	0.768602	-12.956246
O	0.0436378	-0.0335511	-9.5767430

Для вязкости газовой смеси используется закон Армали–Саттона [22]:

$$\mu = \sum_{i=1}^{ni} \mu_i \left(1 + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{ni} \frac{x_k}{x_i} \left(F_{ik} + B_{ik} \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_k} \frac{m_k}{m_i}} \right)^2 \left(\frac{m_i}{m_i + m_k} \right) \left(\frac{5}{3A_{ik}} + \frac{m_k}{m_i} \right) / \sqrt{8 \left(\frac{m_i}{m_k} + 1 \right)} \right)^{-1} \quad (4.4)$$

где $A_{ik}=1.25$, $B_{ik}=0.78$, $F_{ik}=1$.

Коэффициент теплопроводности для газовой смеси при этом находится из условия постоянства числа Прандтля во всей расчетной области: $Pr = \mu c_p / \lambda = 0.66$.

Диффузионные потоки без учета процессов баро- и термодиффузии и при отсутствии массовых сил можно определить в первом приближении из соотношений Стефана – Максвелла в форме, предложенной в [3]:

$$\sum_{j=1}^N \frac{m^2}{\rho m_i m_j D_{ij}(1)} (c_i \mathbf{J}_j - c_j \mathbf{J}_i) = \nabla \left(\frac{m}{m_i} c_i \right), \quad (i=1, 2, \dots, N-1) \quad (4.5)$$

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{J}_i = 0$$

Здесь $D_{ij}(1)$ – бинарные коэффициенты диффузии, для которых в первом приближении можно использовать следующий результат кинетической теории [8]:

$$D_{ij}(1) = 0.843 \times 10^{-4} \sqrt{\frac{T^3 (m_i + m_j)}{2 m_i m_j}} / p \bar{\Omega}_{ij}^{(1,1)}(T), \quad \text{см}^2/\text{с} \quad (4.6)$$

где m_i – молярная масса в кг/моль, p – давление смеси в кПа, $\bar{\Omega}_{ij}^{(1,1)}$ – приведенный интеграл столкновений в нм² [20].

Из соотношений (4.5) видно, что для получения явных выражений диффузионных потоков требуется обращение матрицы размерности $(N-1) \times (N-1)$. При большом числе компонент эта операция требует большого объема вычислений. Поэтому на практике обычно используют приближенные способы описания многокомпонентной диффузии. Так, например, в численных исследованиях течений газовых смесей с близкими диффузионными свойствами компонент можно применить итерационный метод учета многокомпонентной диффузии. В рамках этого метода диффузионный поток каждой компоненты выражается из соотношений (4.5) через градиент концентрации этой компоненты и диффузионные потоки всех остальных компонент, которые берутся из предыдущего приближения.

При практических расчетах для определения диффузионных потоков \mathbf{J}_i широко применяется закон Фика в форме:

$$\mathbf{J}_i = -\rho D_i \nabla c_i \quad (4.7)$$

где D_i – эффективный коэффициент диффузии, который либо полагается одинаковым для всех компонент, либо вычисляется по формуле Уилки [23]:

$$D_i = \left(\frac{1}{m} - \frac{c_i}{m_i} \right) / \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{c_j}{m_j D_{ij}}. \quad (4.8)$$

Как показывают численные исследования сверхзвукового обтекания [27], результат, полученный с использованием приближений в форме (4.7) – (4.8) для смеси компонент с близкими диффузионными свойствами, достаточно хорошо коррелирует с соответствующим решением уравнений Стефана-Максвелла.

Что касается диффузионных коэффициентов колебательной энергии D_{Eij} (формулы (2.4) – (2.6)) для молекул CO_2 , то, как показано в [24], их с удовлетворительной степенью точности можно заменить соответствующими коэффициентами массовой диффузии.

5 Результаты численных расчетов

Течение в ударном слое рассчитывается в приближении вязкого ударного слоя. Используется ортогональная система координат (s, n) , в которой координата s отсчитывается от передней критической точки вдоль контура обтекаемой поверхности, а координата n – по нормали к ней. На ударной волне используются обобщенные граничные условия Ренкина-Гюгонио. Численное решение системы уравнений вязкого ударного слоя находится методом установления с помощью неявной конечно-разностной схемы постоянного направления [4].

Проводится численный анализ неравновесного обтекания тела, моделирующего форму Марсианского аппарата MSRO, который представляет собой 120-градусный сфероконус с радиусом затупления 1м. Полагается, что невозмущенная атмосфера Марса состоит из 100% CO_2 . Поверхность аппарата считается либо идеально каталитической (максимальная скорость гетерогенной рекомбинации компонент углекислого газа), либо некаталитической (скорость гетерогенной рекомбинации компонент равна нулю), имеющей постоянную заданную температуру $T_w=1500\text{K}$. Учитывается неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы молекул CO_2 , колебательные степени свободы остальных молекул предполагаются возбужденными равновесно в соответствии с поступательной температурой. Колебательная энергия углекислого газа на поверхности принимается равной равновесному значению $E_{eq}(T_w)$.

Некоторые результаты численных исследований для типичных условий обтекания аппарата MSRO с учетом различных моделей и подходов приводятся на рис.1–21.

Профили двух составляющих удельной колебательной энергии CO_2 E_{12} и E_3 для условий обтекания $V_\infty=5223\text{м/с}$, $\rho_\infty=2.93 \cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$ (высота полета $\sim 40\text{км}$) вдоль критической линии, полученные с использованием трехтемпературной модели колебательной релаксации [1], представлены на рис.1. Они характеризуются значительными градиентами в релаксационной области вблизи ударной волны и их вид отражает особенности рассматриваемой кинетической модели колебательной релаксации CO_2 [1].

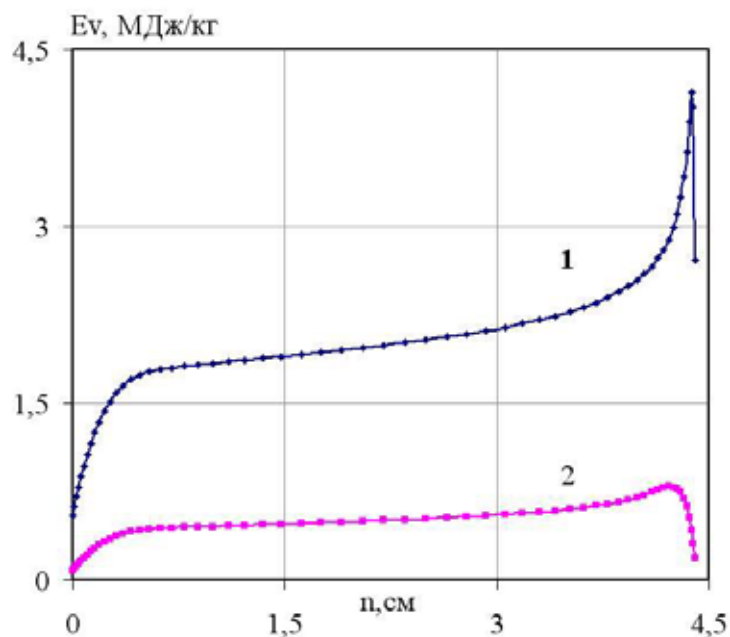


Рис.1. Распределение составляющих колебательной энергии вдоль критической линии аппарата MRSRO, модель [1], 1 – составляющая E_{12} , 2 – составляющая E_3 .
 $V_\infty=5223\text{м/с}$, $\rho_\infty=2.93\cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$

На рис. 2–3 проводится сравнение суммарной колебательной энергии $E_v=E_{12} + E_3$ и колебательной энергии E_v , рассчитанных с помощью релаксационных моделей [1] и [7] соответственно для двух условий обтекания аппарата: $V_\infty=5223\text{м/с}$, (высота полета $H \sim 40\text{км}$) и $V_\infty=5687\text{ м/с}$ ($H \sim 60\text{ км}$).

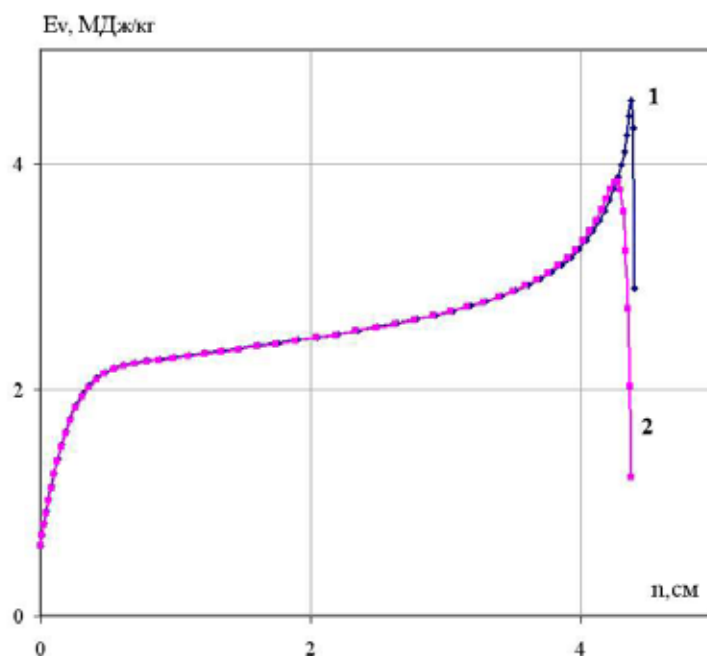


Рис.2. Распределение колебательной энергии вдоль критической линии аппарата MRSRO 1 – $E_v=E_{12} + E_3$, модель [1], 2 – E_v , модель [7].
 $V_\infty=5223\text{м/с}$, $\rho_\infty=2.93\cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$

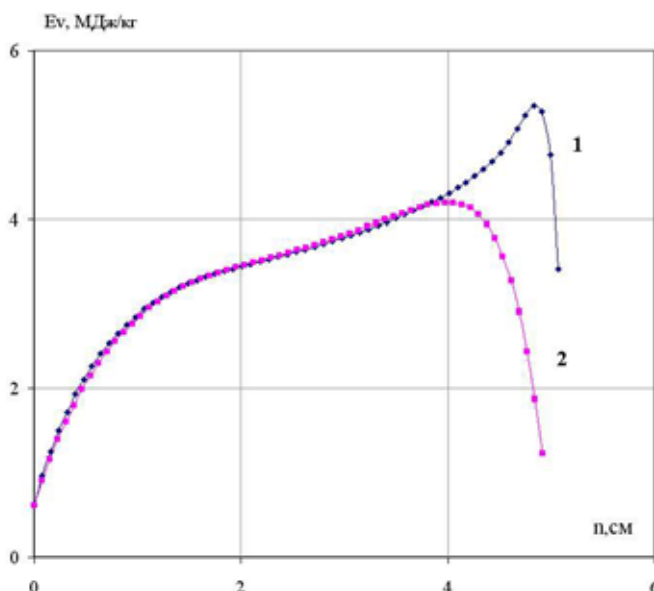


Рис.3. Распределение колебательной энергии вдоль критической линии аппарата MRSRO 1 – $E_v = E_{12} + E_3$, модель [1], 2 – E_v , модель [7]. $V_\infty = 5687 \text{ м/с}$, $\rho_\infty = 3.141 \cdot 10^{-5} \text{ кг/м}^3$

Наблюдается расхождение величин колебательной энергии вблизи ударной волны в релаксационной зоне, причем профили, полученные с помощью модели [7], имеют более «размытый» вид. Видно, что максимальные значения колебательной энергии, рассчитанные с помощью модели [1], на 15–20% превосходят соответствующие значения модели [7]. В большей части ударного слоя реализуются условия термодинамического равновесия и обе модели дают одинаковый результат. О величине зоны колебательной неравновесности можно судить по профилям поступательной и колебательных температур T_{12} , T_3 различных мод, которые получены с учетом модели [1] и для двух вариантов обтекания представлены на рис.4–5.

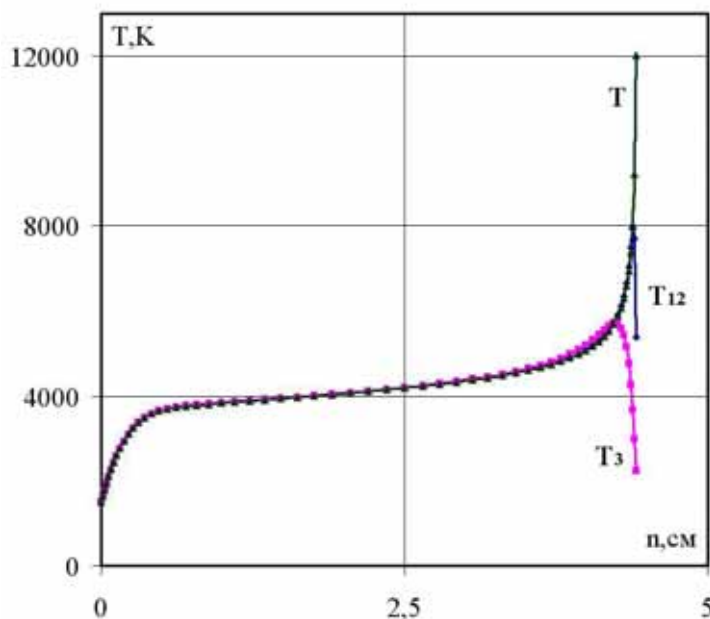


Рис.4. Профили поступательной (T) и колебательной (T_{12} , T_3) температур вдоль критической линии, модель [1]. $V_\infty = 5223 \text{ м/с}$, $\rho_\infty = 2.93 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3$

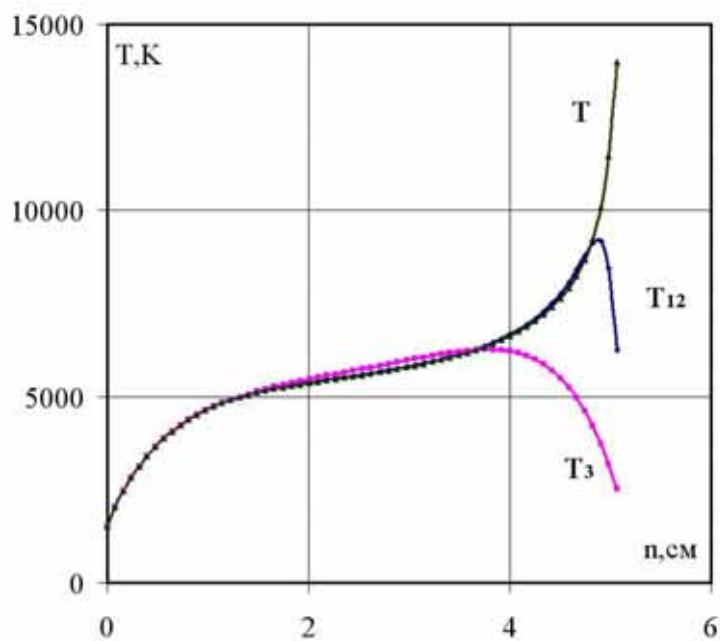


Рис.5. Профили поступательной (T) и колебательной (T_{12} , T_3) температур вдоль критической линии, модель [1]. $V_\infty=5687$ м/с, $\rho_\infty=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³

Сравнение значений поступательной температуры для условий обтекания $V_\infty=5223$ м/с, $\rho_\infty=2.93 \cdot 10^{-4}$ кг/м³ в случаях термически равновесного (кривая 1) и неравновесного газа (кривые 2, 3) вдоль критической линии представлено на рис.6. Данные для термически неравновесного случая приводятся с учетом использования моделей [1] и [7].

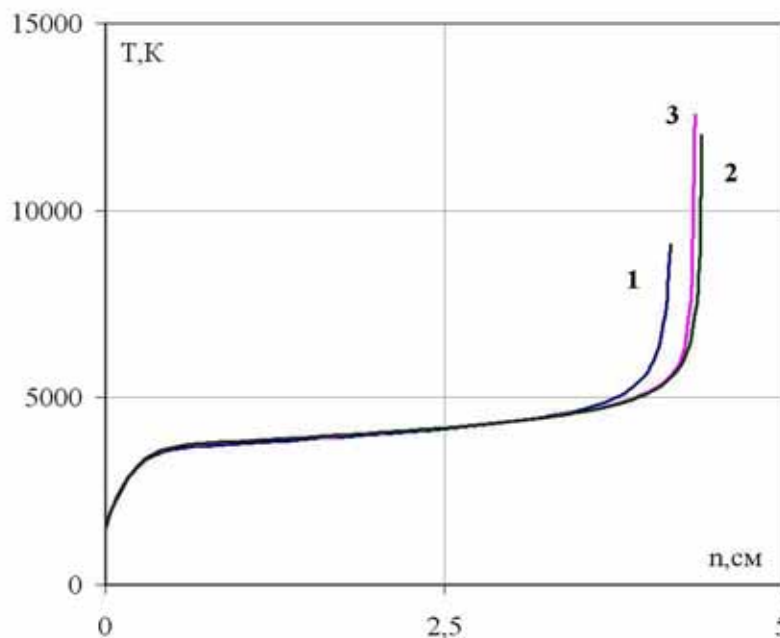


Рис.6. Профили поступательной температуры вдоль критической линии, 1 – термически равновесное течение, 2 – неравновесное течение модель [1], 3 – неравновесное течение модель [7], $V_\infty=5223$ м/с, $\rho_\infty=2.93 \cdot 10^{-4}$ кг/м³

Соответствующие релаксационным моделям профили температуры (кривые 2 и 3) для этих условий практически совпадают, расхождение не более 5%. Видно, что учет не-

равновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул CO_2 приводит к незначительному увеличению отхода ударной волны от поверхности тела и существенному повышению (~ на 25–30%) поступательной температуры в области ударной волны по сравнению с термически равновесным случаем, но не влияет на температуру газовой смеси вблизи поверхности тела. Факт повышения поступательной температуры в релаксационной зоне связан с переходом энергии внутренних степеней свободы молекул CO_2 в поступательную энергию других компонент. Этот же эффект отмечается и для земной атмосферы, например, в работе [26].

Рассматривался также вопрос о влиянии колебательной релаксации на скорость химических реакций. На фиг.7 приводятся профили массовых концентраций компонент CO_2 и CO , рассчитанные с применением модели [7] в случае использования однотемпературных ($T_v=T$) [11] и двухтемпературных [13, 25] констант скоростей химических реакций. Видно, что для рассмотренных условий обтекания влияние колебательной неравновесности на процесс диссоциации незначительное: профили массовых концентраций CO_2 и CO совпадают почти во всей области ударного слоя, небольшое расхождение наблюдается вблизи ударной волны. Из приведенных данных, видно, что процесс колебательной неравновесности не сказывается на параметрах течения вблизи поверхности тела.

Влияние неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул CO_2 на распределение теплового потока вдоль поверхности тела (координата s отсчитывается от критической точки вдоль поверхности тела) демонстрируют рис.8–10.

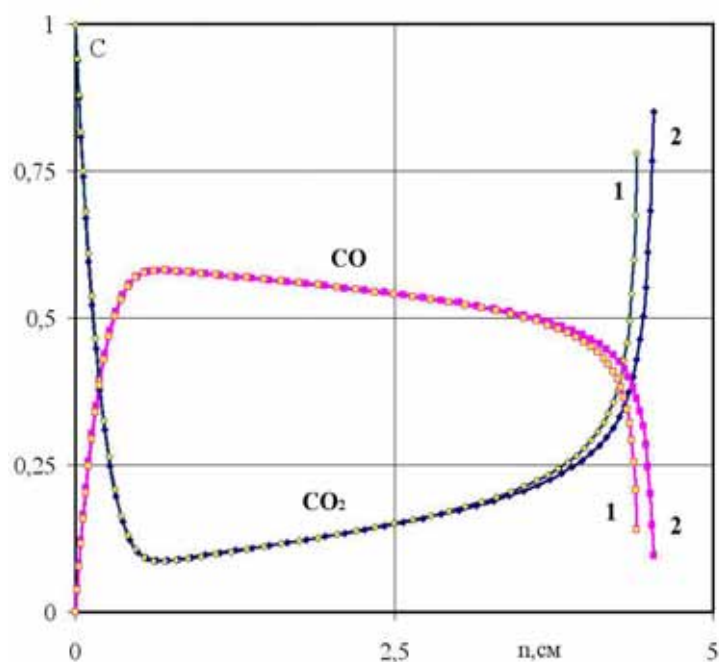


Рис.7. Массовые концентрации CO_2 и CO вдоль критической линии, 1– без учета, 2 – с учетом влияния колебательной релаксации на процесс диссоциации
 $V_\infty=5223\text{м/с}$, $\rho_\infty=2.93\cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$

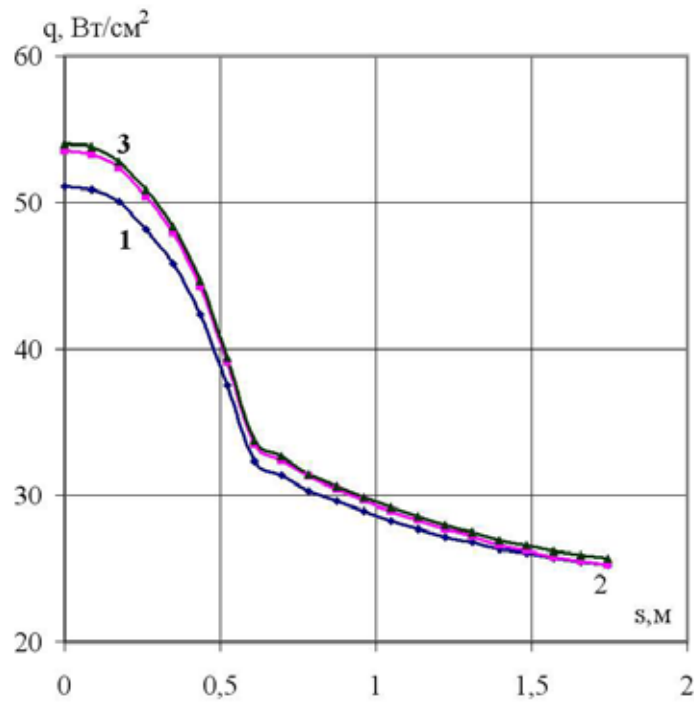


Рис.8. Тепловой поток к поверхности аппарата; идеально-каталитическая поверхность; 1–термически равновесное течение, 2 – неравновесное течение модель [1], 3 –неравновесное течение модель [7]. $V_{\infty}=5223\text{м/с}$, $\rho_{\infty}=2.93\cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$

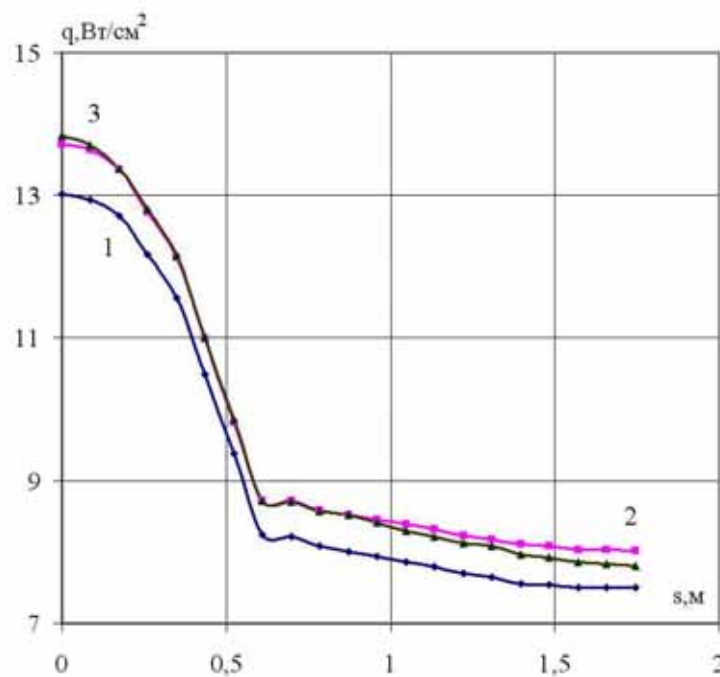


Рис.9. Тепловой поток к поверхности аппарата; некаталитическая поверхность; 1–термически равновесное течение, 2 – неравновесное течение модель [1], 3 – неравновесное течение модель [7]. $V_{\infty}=5223\text{м/с}$, $\rho_{\infty}=2.93\cdot 10^{-4}\text{кг/м}^3$

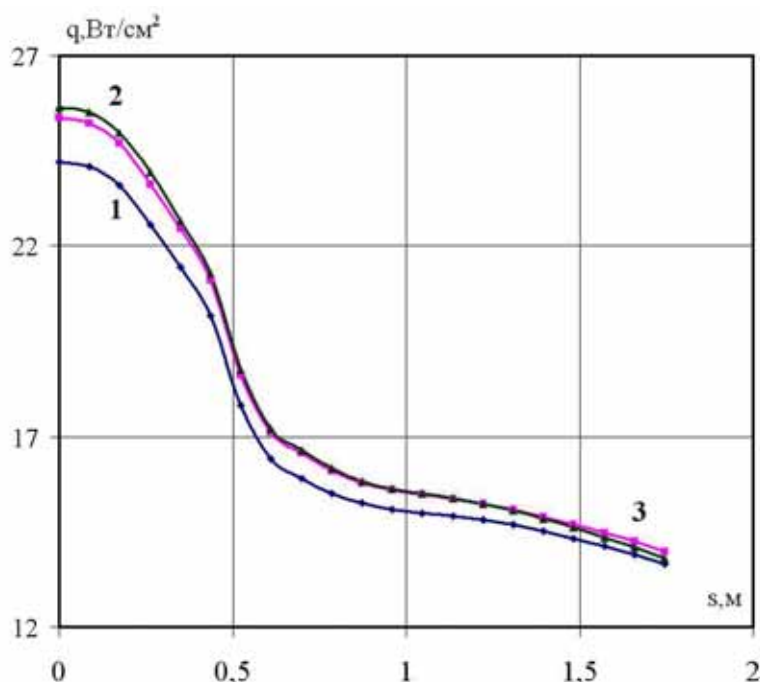


Рис.10. Тепловой поток к поверхности аппарата; идеально-каталитическая поверхность; 1–термически равновесное течение, 2 – неравновесное течение модель [1], 3 – неравновесное течение модель [7]. $V_{\infty}=5687$ м/с, $\rho_{\infty}=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³

На рис.8–10 проводится сравнение теплопередачи в предположении термически равновесного (кривые 1) и неравновесного газа (кривые 2, 3) в случаях идеально-каталитической (рис.8 и рис.10) и некаталитической поверхности (рис.9). Видно, что тепловой поток с учетом неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул CO_2 может на 10% превосходить поток для термически равновесного газа.

Сравнивая данные рис.8 и рис.9, относящиеся к одним и тем же условиям обтекания, заметим, что тепловой поток к идеально-каталитической поверхности в 3–4 раза превосходит соответствующий поток к некаталитической стенке. Этот факт объясняется тем, что в случае, когда на поверхности наблюдается максимальная скорость гетерогенной рекомбинации компонент углекислого газа (идеальная каталитичность), химическая энергия, затраченная на диссоциацию, выделяется и передается поверхности. Если рекомбинации не происходит (низкая каталитичность), то компоненты сносятся ниже по потоку, унося с собой энергию диссоциации, и дополнительной теплопередачи не происходит.

Представленные данные показывают незначительное влияние процессов колебательной релаксации на теплопередачу к поверхности аппарата. Этот факт можно объяснить тем, что для рассматриваемых условий обтекания наблюдается интенсивный процесс диссоциации молекул углекислого газа в ударном слое, а также быстрый процесс колебательной релаксации молекул CO_2 , в результате которой термодинамическое равновесие имеется почти во всем ударном слое.

Проведено сравнение результатов, полученных на основе различных представлений (моделей) коэффициентов переноса: строгой модели кинетической теории [1] – модель 1 – и двух приближенных моделей, основанных на аппроксимациях (4.1) – (4.3) (модель 2) и (4.4) – (4.5) (модель 3). На рис.11–12 приведены коэффициенты сдвиговой вязкости μ (рис.11) и теплопроводности λ (рис.12) вдоль критической линии, рассчитанные с помощью этих трех моделей. Коэффициенты вязкости, рассчитанные с помощью моделей 1 и 2 (кривые 1 и 2 соответственно), хорошо согласуются между собой по всей ширине ударного слоя и согласуются с точностью 15% с соответствующими данными 3 модели (кривая 3). Коэффициенты теплопроводности для моделей 1 и 2 (кривые 1 и 2 соответственно) практически

совпадают за исключением зоны, примыкающей к ударной волне, где расхождение достигает 15%, третья модель (кривая 3) согласуется с 1 и 2 моделями с точностью $\sim 10\%$.

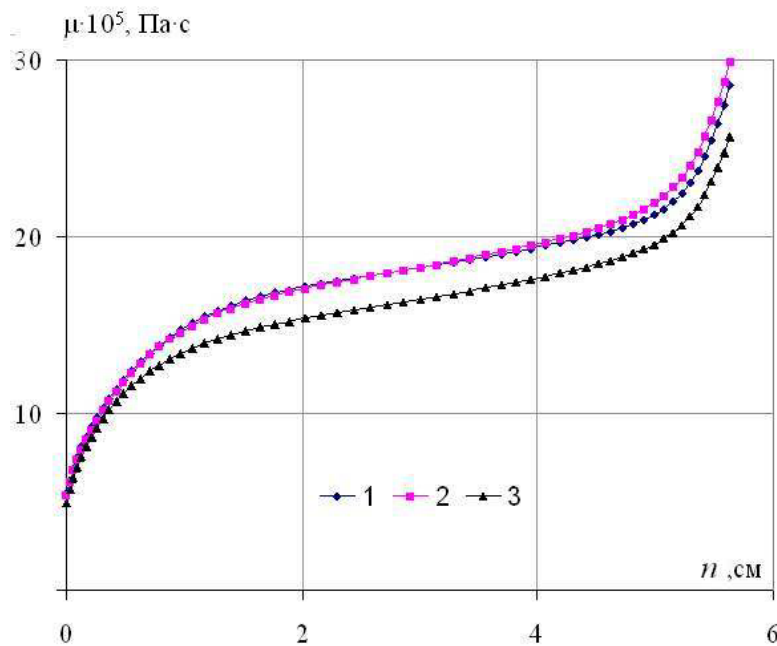


Рис.11. Вязкость газовой смеси вдоль критической линии. 1– модель [1], 2 – модель [18–19], 3 – модель [21–22]. $V_\infty=5687$ м/с, $\rho_\infty=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³

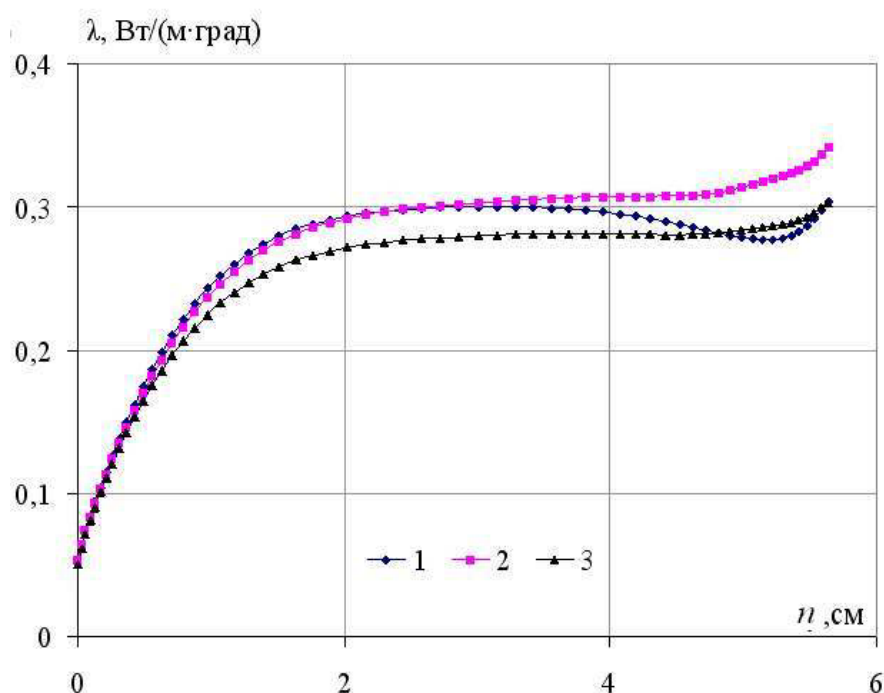


Рис.12. Коэффициент теплопроводности вдоль критической линии 1– модель [1], 2 – модель [18–19], 3 – модель [21–22].
 $V_\infty=5687$ м/с, $\rho_\infty=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³

Аналогичные тенденции имеют место и для других условий обтекания. Следует отметить, что в непосредственной близости поверхности аппарата расхождение всех трех кри-

вых (1–3 модели), соответствующих коэффициентам вязкости и теплопроводности составляет не более 10%, что является важным фактом в вопросе определения поверхностного трения и теплопередачи. В результате численных исследований установлено, что величины теплового потока к поверхности аппарата, рассчитанные с помощью разных способов представления коэффициентов вязкости и теплопроводности, согласуются с точностью до 5 % в широком диапазоне параметров обтекания.

Одной из задач работы являлось определение диффузионных характеристик, проверка правомерности использования приближенных подходов для описания процессов переноса в многокомпонентной газовой среде и уточнение значений безразмерных коэффициентов переноса. Для рассматриваемых условий обтекания с помощью кинетической теории [1] были определены феноменологические коэффициенты многокомпонентной диффузии D_{ij}^* . В качестве примера на рис.13 представлено распределение коэффициентов самодиффузии вдоль критической линии для некоторых компонент газовой смеси, то есть величин, соответствующих диагональным элементам D_{ii}^* диффузионной матрицы, а на рис.14 – недиагональным элементам D_{ij}^* ($i \neq j$). Следует отметить, что значения элементов, лежащих на главной диагонали, превосходят почти по всей ширине ударного слоя недиагональные величины, что свидетельствует о правомерности применения закона Фика для расчета диффузионного потока.

Установлено, что величины коэффициентов термодиффузии, рассчитанные с учетом результатов работы [1], значительно ниже соответствующих параметров молекулярной диффузии, что подтверждает основание считать вклад диффузионного термоэффекта незначительным. В качестве примера на рис.15 представлено распределение вдоль критической линии коэффициента термодиффузии D_T для отдельных компонент газовой смеси.

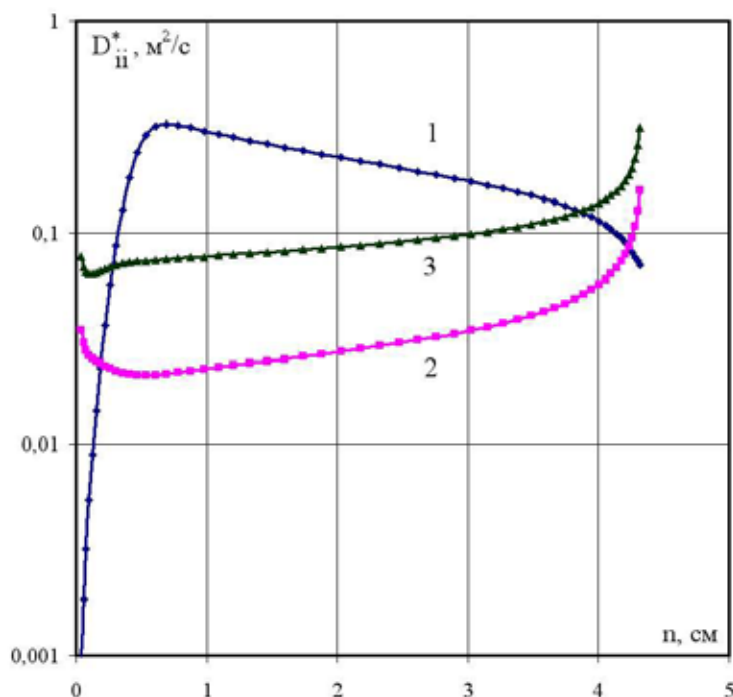


Рис.13. Распределение коэффициентов диффузии D_{ii}^* вдоль критической линии
 1 – D_{11} ($\text{CO}_2\text{-CO}_2$), 2 – D_{22} (CO-CO), 3 – D_{55} (O-O).
 $V_\infty=5223$ м/с, $\rho_\infty=2.933 \cdot 10^{-4}$ кг/м³

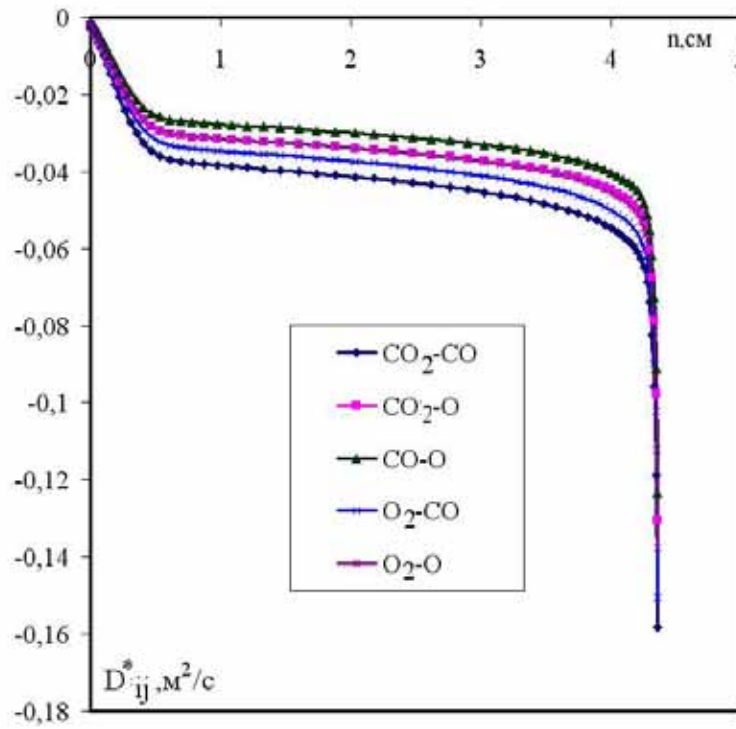


Рис.14. Распределение коэффициентов диффузии D_{ij}^* ($i \neq j$) вдоль критической линии, модель [1]. $V_\infty=5223$ м/с, $\rho_\infty=2.933 \cdot 10^{-4}$ кг/м³

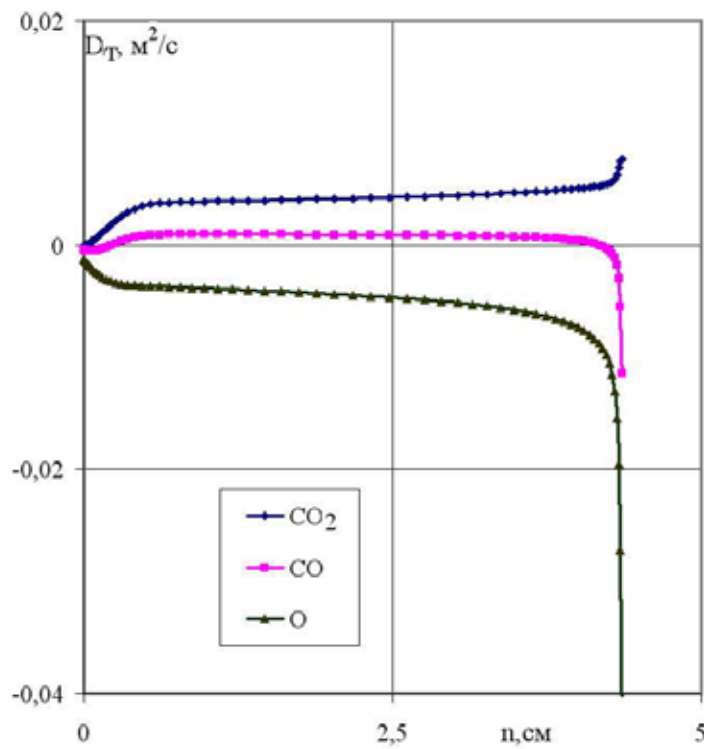


Рис.15. Распределение коэффициента термодиффузии D_T вдоль критической линии $V_\infty=5223$ м/с, $\rho_\infty=2.933 \cdot 10^{-4}$ кг/м³

В данной работе проведены также расчеты коэффициентов бинарной диффузии $D_{ij}(1)$, которые фигурируют в соотношениях Стефана-Максвелла (формула (4.5)). С помощью выражения (4.8) эти коэффициенты сводились к эффективным диффузионным характеристикам D_i , на основании которых определялись соответствующие числа Шмидта $Sc_i = \mu/\rho D_i$ для отдельных компонент газовой смеси. Значения чисел Sc_i вдоль критической линии для двух вариантов обтекания приводятся на рис.16 – 17.

Из представленных на рис.16 – 17 данных видно, что величина числа Шмидта непостоянна поперек ударного слоя, вблизи поверхности она в среднем равна 0.5, а в основной части ударного слоя – 0.8. Как показывают численные расчеты, диффузионная составляющая в формуле для теплового потока в случае идеально каталитической поверхности для рассмотренных условий обтекания составляет значительную часть (50–75%) от величины полного теплового потока, поэтому целесообразно оценить влияние числа Шмидта на теплопередачу. В связи с этим, были проведены расчеты обтекания тела для разных чисел Sc : $Sc = 0.5, 0.65, 0.8$. На рис.18 –19 демонстрируется влияние величины числа Шмидта на тепловой поток к идеально каталитической поверхности для двух условий обтекания. Видно, что для этого типа поверхности увеличение числа Sc от 0.5 до 0.8 приводит к уменьшению теплопередачи на 20–25%. Для некаталитической поверхности тепловой поток определяется в основном теплопроводностью газовой смеси, и в этом случае величина числа Шмидта не влияет на теплопередачу к поверхности.

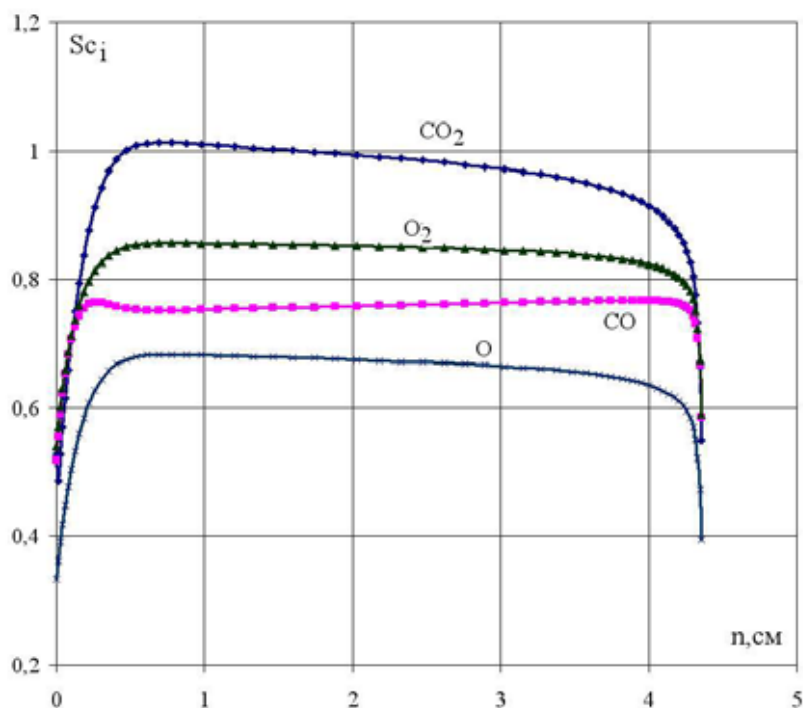


Рис.16. Величина числа Шмидта вдоль критической линии, идеально-каталитическая поверхность

$$V_{\infty} = 5223 \text{ м/с}, \rho_{\infty} = 2.933 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3$$

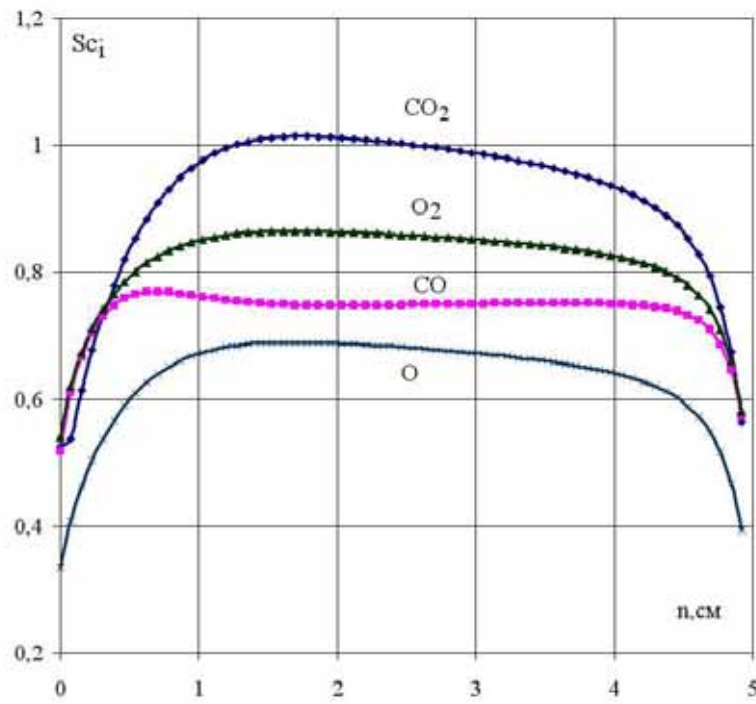


Рис.17. Величина числа Шмидта вдоль критической линии, идеально-каталитическая поверхность, $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.141\cdot 10^{-5}\text{кг/м}^3$

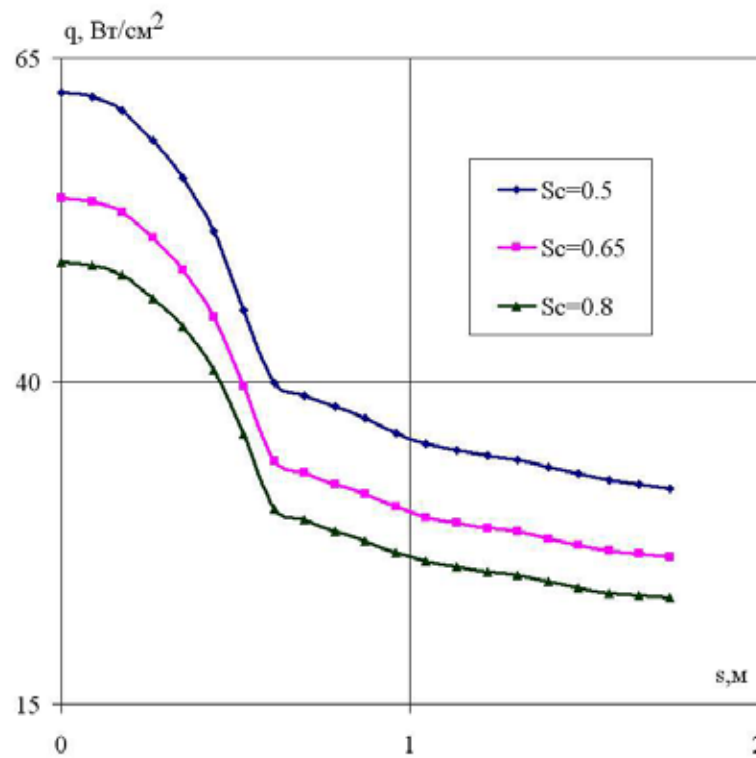


Рис.18. Влияние числа Шмидта на величину теплового потока, идеально-каталитическая поверхность $V_\infty=5223 \text{ м/с}$, $\rho_\infty=2.933\cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3$

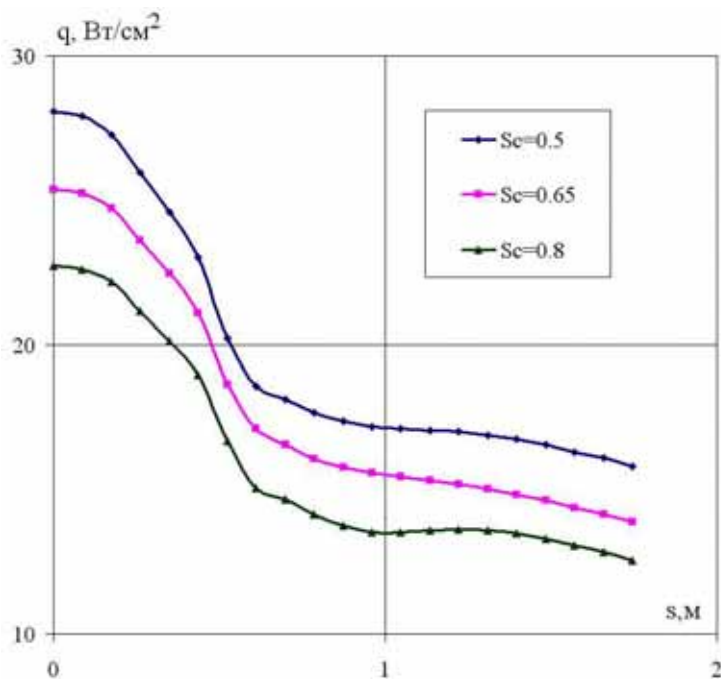


Рис.19. Влияние числа Шмидта на величину теплового потока, идеально-каталитическая поверхность
 $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.141\cdot 10^{-5}\text{кг/м}^3$

В работе проведены также оценки влияния объемной вязкости на параметры течения и тепловой поток. На рис.20 представлены коэффициенты объемной (кривая 2) и сдвиговой вязкости (кривая 1) вдоль критической линии.

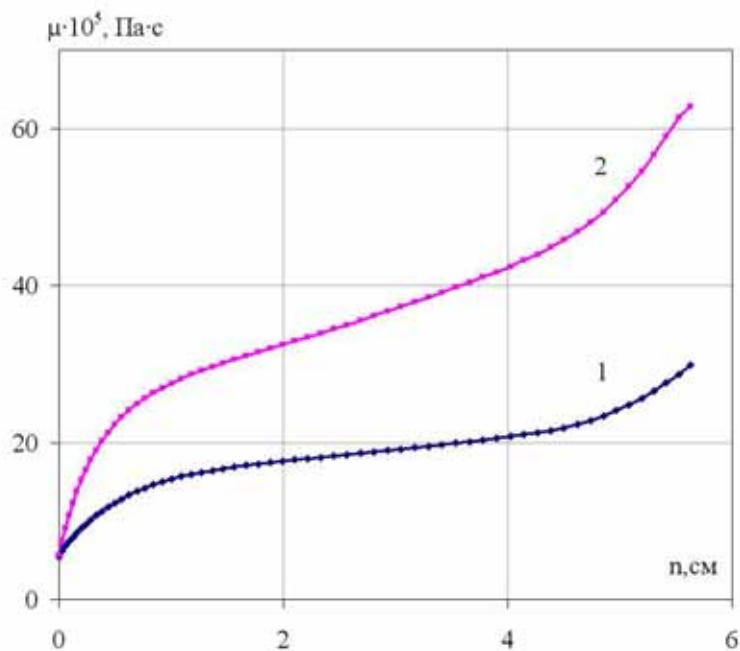


Рис.20. Профили сдвиговой (1) и объемной (2) вязкости вдоль критической линии
 $V_\infty=5687\text{м/с}$, $\rho_\infty=3.141\cdot 10^{-5}\text{кг/м}^3$

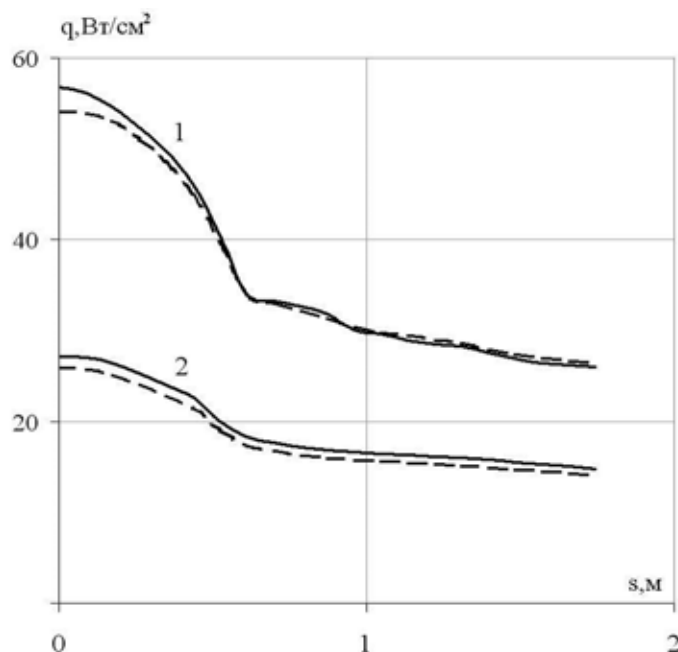


Рис.21. Тепловой поток к поверхности с учетом (—) и без учета (- - -)
объемной вязкости
1 – $V_{\infty}=5223$ м/с, $\rho_{\infty}=2.933 \cdot 10^{-4}$ кг/м³, 2 – $V_{\infty}=5687$ м/с, $\rho_{\infty}=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³

У поверхности тела величина объемной вязкости газовой смеси порядка величины сдвиговой, а в ударном слое превосходит ее примерно в 2 раза. Установлено, что механизм неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул CO_2 не сказывается на величине объемной вязкости. На рис.21 приводится тепловой поток к поверхности аппарата, рассчитанный с учетом введения в уравнения коэффициента объемной вязкости (сплошные кривые). Для сравнения приводятся данные, полученные без учета объемной вязкости (пунктирные кривые). Расчеты выполнены для идеально каталитической поверхности и условий обтекания $V_{\infty}=5223$ м/с, $\rho_{\infty}=2.93 \cdot 10^{-4}$ кг/м³ (кривые 1) и $V_{\infty}=5687$ м/с, $\rho_{\infty}=3.141 \cdot 10^{-5}$ кг/м³ (кривые 2). Для указанных параметров обтекания учет объемной вязкости приводит к росту теплового потока до 10%.

Таким образом, рассмотрены некоторые особенности неравновесного обтекания тел сверхзвуковым потоком углекислого газа. Проведен численный анализ обтекания космического аппарата MRSRO при спуске в атмосфере Марса с применением двух- и трехтемпературной моделей, учитывающих неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы молекул CO_2 . Получено, что максимальные значения колебательной энергии в релаксационной зоне, рассчитанные с помощью трехтемпературной модели, на 15–20% превосходят соответствующие значения, полученные с помощью упрощенной двухтемпературной модели. Установлено, что учет колебательной релаксации для высот полета аппарата $H < 60$ км может привести к повышению до 30% величин поступательной температуры в области ударной волны и к увеличению до 10% величины теплового потока к поверхности по сравнению с термически равновесным случаем.

Сравнение коэффициентов переноса, рассчитанных на основе кинетической теории и двух приближенных методик, показало удовлетворительную точность последних для расчета параметров течения и теплопередачи. Способы представления параметров массовой диффузии могут ~ на 20% повлиять на величину теплопередачи. Получено, что введение в исходные уравнения величины объемной вязкости при рассмотренных условиях может привести к увеличению тепловых потоков до 10%.

Установлено также, что тепловой поток к идеально-каталитической поверхности для рассмотренных условий обтекания может до 4 раз превосходит поток к некаталитической стенке.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИНТАС - 03–51–5204

Литература

1. Kustova E., Nagnibeda E. On a correct description of a multi-temperature dissociating CO₂ flow // Chem. Phys. 2006. Vol. 321. P.293–310.
2. Шевелев Ю. Д. Пространственные задачи вычислительной аэрогидродинамики. М.: Наука, 1986. 367с.
3. Пилюгин Н.Н., Тирский Г.А. Динамика ионизованного излучающего газа. М.: Изд-во МГУ, 1989. 312с.
4. Головачев Ю. П. Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. М: Наука, 1996. 376с.
5. G.A. Tirskey. Up-to date gasdynamic models of hypersonic aerodynamics and heat transfer with real gas properties.// Fluid Mech. 1993, 25, 151-181.
6. Losev S.A., Kozlov P.V., Kuznezova L.A. Makarov V.N., Romanenko Yu.V., Surzhikov S.T., Zalugin G.N. Radiation of CO₂-N₂-Ar mixture in a shock wave: experiment and modeling. Proceedings of the Third European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, ESTEC, Noordwijk. The Netherlands. ESA SP-426. 1998. P.437–444.
7. Taylor R.L., Bitterman S. Survey of vibrational relaxation data for processes important in the CO₂+Ar laser systems // Rev. Mod. Phys.1969. Vol. 41. No. 1. P.26-47.
8. Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкости. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
9. Шевелев Ю.Д., Сызранова Н.Г. Влияние различных моделей химической кинетики на сверхзвуковое обтекание затупленных тел потоком углекислого газа// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. Том 5, URL: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-12-17-001.pdf>.
10. Mc. Kenzie R.L., Arnold J.O. Experimental and theoretical investigation of the chemical kinetics and non-equilibrium CN radiation behind shock waves in CO₂-N₂-mixtures//AIAA paper, 1967, No.322.
11. C.Park, J.Howe, R.Jaffe. Review of Chemical-Kinetic Problems of future NASA Mission,II: Mars entries. Journal of Thermophysics and Transfer, 8(1) 9-23, 1994.
12. Ибрагимова Л.Б. Константы скорости химических реакций в высокотемпературном газе CO₂. Математическое моделирование, 2000. Т.12, №4. С.3–19.
13. Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. N.Y. Wiley-Intern. Publ.1990.
14. Marrone P.V., Treanor C.E. Chemical Relaxation with Preferential Dissociation from Excited Vibrational Levels // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. No. 9. P.1215.
15. Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В. Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петербур. Ун-та, 2003. 272 с.
16. Тирский Г.А. Вычисление эффективных коэффициентов диффузии в ламинарном диссоциированном многокомпонентном пограничном слое // ПММ, 1969. № 1.
17. A. Ern and V. Giovangigli. Multicomponent Transport Algorithms. New-York, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1994. 427 p.
18. Wilke C.R. A viscosity equation for gas mixture // J. Chem. Phys. 1950. Vol.18, No. 4. P.517–522.
19. Mason E.A., Saxena S.C. Approximate formula for the conductivity of gas mixture // Phus. Fluids. 1958. Vol. 1. No. 5. P.361-369.
20. Калинин А.П., Леонас В.Б., Сермягин А.В. Интегралы столкновений для компонент диссоциированных планетных атмосфер.//Теплофизика Высоких температур. 1971. Т.9. №5. С.1066-1068.
21. Blottner F.G., Curties C.F., Bird R.B. Chemically reacting viscous flow program for multicomponent gas mixtures // Report No. SC-RR-70-751, Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico. Dec. 1971.

22. Armaly B., Sutton K. Thermal conductivity of partially ionized gas mixtures // AIAA Paper. 1982. No. 469. 6p.
23. Wilke C.R. Diffusional properties of multicomponent gases // J.Chem. Eng.Progr. 1950. V.46, No,2, p.95-104.
24. L. Monchick, A.N.G. Pereira, E.A. Mason, J. Chem.Phys.42 (1965) 3241.
25. Сергиевская А.Л., Ковач Э.А., Лосев С.А. Опыт информационно-математического моделирования в физико-химической кинетике. М.: Изд-во МГУ. 1995. 253с.
26. Тирский А.Г., Щербак В.Г. Влияние колебательной релаксации при обтекании тел химически неравновесным воздухом с учетом вязкости// МЖГ. №1, 1990. С.151-157
27. P.A. Gnoffo, K.J. Wielmuenster, H.H. Hamilton. Computational aerothermodynamics design issues for hypersonic vehicles.// AIAA-Paper, 97-2473 P.1-35.

Статья поступила в редакцию 28.02.2008 г.