

В. Г. Щербак

СРАВНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ С РАЗНЫМИ И ОДИНАКОВЫМИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ ТЕМПЕРАТУРАМИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТОВ

При входе тел в атмосферу Земли с первой космической скоростью условия обтекания на основной теплонапряженной части планирующих траекторий характеризуются отсутствием равновесия между поступательными и колебательными степенями свободы [1]. Этот результат был получен с использованием модели одной «усредненной» колебательной температуры.

В [2, 3] рассмотрена модель, когда каждому молекулярному компоненту соответствует своя колебательная температура. Было получено, что эти колебательные температуры незначительно отличаются между собой и результаты практически совпадают с результатами расчетов с «усредненной» колебательной температурой. При этом в [2, 3] сделан ряд упрощающих предположений, в том числе пренебрегалось обратным влиянием химических реакций на колебательную релаксацию, что приводит к нарушению баланса колебательной энергии из-за неучета ее изменения при возникновении и распаде молекул вследствие химических реакций.

Как показано в [1], при развитой диссоциации величина соответствующего источникового члена сравнима с величиной основного члена Ландау — Теллера и пренебрежение упомянутыми выше эффектами может приводить к значительному превышению колебательной температуры над поступательной внутри ударного слоя, что и наблюдалось в [2, 3].

В настоящей работе на примере течения в окрестности критической линии орбитального корабля «Буран» проведено сравнение результатов расчетов с использованием моделей «усредненной» и разных колебательных температур молекулярных компонентов.

1. Постановка задачи. Рассмотрим стационарное обтекание осесимметричного тела потоком вязкого химически и термодинамически неравновесного газа. Воспользуемся моделью тонкого вязкого ударного слоя, являющейся асимптотической формой уравнений Навье — Стокса при больших числах Маха, Рейнольдса и отношения плотностей за и до ударной волны, что характерно для основных теплонапряженных участков планирующих траекторий входа. При учете колебательной релаксации систему уравнений на линии торможения можно записать следующим образом (y — расстояние вдоль осп от тела):

$$(1.1) \quad \rho u + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0, \quad \rho Du = -2p_1 + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{\text{Re}_\infty} \frac{\partial u}{\partial y} \right);$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial p_1}{\partial y} = \rho u^2;$$

$$(1.3) \quad \rho c_p DT - \rho \sum_{k=1}^M DE_k^* - Dp = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu c_p}{\text{Re}_\infty \sigma} \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{k=1}^M q_k^v \right) - \\ - \sum_{i=1}^N h_i \dot{w}_i - \left(\sum_{i=1}^N c_{pi} I_i \right) \frac{\partial T}{\partial y};$$

$$(1.4) \quad \rho DE_k + \frac{\partial}{\partial y} (q_k^v) = Q_k^{vT} + Q_k^R + \bar{Q}_k^{v\bar{v}}, \quad k = 1, \dots, M;$$

$$(1.5) \quad \rho Dc_i + \frac{\partial}{\partial y} (I_i) = \dot{w}_i, \quad \frac{\partial}{\partial y} (mc_i) = \sum_{j=1}^N \frac{m_j^2}{m_j} S_{ij} (c_i I_j - c_j I_i),$$

$$p = R_A \rho T \sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i}, \quad \sum_{i=1}^N I_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1, \quad D = v \frac{\partial}{\partial y},$$

$$E_k - c_k e_k = c_k \frac{R_A}{m_k} \frac{\vartheta_k}{\exp(\vartheta_k/T_{vk}) - 1}, \quad E_k^* - E_k(T) - E_k.$$

Здесь $V_{\infty x}$ и $V_{\infty y}$ — физические составляющие вектора скорости в направлениях x и y ; $T_0 T$, $\rho_{\infty} V_{\infty}^2 p$, $\rho_{\infty} \rho$ — поступательная температура, давление и плотность смеси газов ($T_0 = V_{\infty}^2 / c_{p\infty}$); $\mu_{\infty} \mu$, $c_{p\infty} c_p$, σ , m — коэффициенты вязкости, удельной теплоемкости, число Прандтля и молекулярная масса смеси; c_i , m_i , $c_{p\infty} T_0 h_i$, $c_{p\infty} c_{pi}$, $\rho_{\infty} V_{\infty} I_i$, $\rho_{\infty} V_{\infty} w_i / R$ — массовая концентрация, молекулярная масса, термодинамически равновесные удельные энтальпия и теплоемкость, нормальная компонента вектора диффузионного потока, скорость образования массы i -го компонента; $c_{p\infty} T_0 E_k$, $T_0 \vartheta_k$, $T_0 T_{vk}$ — колебательная энергия, отнесенная к единице массы смеси, характеристическая и колебательная температура k -го молекулярного компонента; $c_{p\infty} T_0 \rho_{\infty} V_{\infty} / R Q_k$ — источниковые члены; $c_{p\infty} R_A$ — универсальная газовая постоянная; S_{ij} — числа Шмидта; V_{∞} — модуль вектора скорости набегающего потока; N — число компонентов; M — число молекулярных компонентов. Все линейные размеры отнесены к радиусу кривизны затупления \bar{R} , индекс ∞ относится к параметрам в набегающем потоке.

Поток колебательной энергии молекулярных компонентов k имеет вид

$$q_k^v = - \frac{\mu}{\text{Re}_{\infty} S_k} \frac{\partial}{\partial y} E_k^* + \frac{E_k^*}{S_k} \sum_{i=1}^N S_{ki}^0 I_i,$$

$$S_k = \frac{\mu}{\rho_{\infty}} \sum_{i=1}^N \frac{c_i S_{ki}}{m_i}, \quad S_{ki}^0 = \frac{m}{m_k} S_{ki} + \sum_{j=1}^N S_{kj} c_j \left(\frac{m}{m_j} - \frac{m}{m_i} \right).$$

Уравнения колебательной релаксации (1.4) выписаны для молекул с разными колебательными температурами, и их число соответствует числу молекулярных компонентов. Если воспользоваться моделью с «усредненной» колебательной температурой, то необходимо просуммировать уравнения (1.4) в предположении равенства колебательных температур. В этом случае искомой функцией будет колебательная температура, а уравнение колебательной релаксации и выражение для q_k^v можно записать следующим образом:

$$(1.6) \quad \rho \left(\sum_{k=1}^M c_k e_k' \right) D T_v + \left(\sum_{k=1}^M I_k e_k' \right) \frac{\partial T_v}{\partial y} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\rho}{\text{Re}_{\infty}} \left(\sum_{k=1}^M c_k D_k e_k' \right) \frac{\partial T_v}{\partial y} \right] + \sum_{k=1}^M (Q_k^{VT} - w_k e_k + Q_k^R),$$

$$q_k^v = e_k^* I_k - \frac{\rho}{\text{Re}_{\infty}} c_k D_k \frac{\partial e_k^*}{\partial y},$$

$$e_k' = \frac{\partial c_k}{\partial T_v}, \quad e_k^* = e_k(T) - e_k, \quad D_k = \frac{\mu}{\rho m} \sum_{i=1}^N \left(\frac{c_i}{m_i} S_{ik} \right)^{-1}.$$

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

$$u = v = 0, \quad I_i = -\rho k_{wi} c_i, \quad q = \frac{\varepsilon \sigma_B T_0^4}{\rho_{\infty} V_{\infty}^3} T_w^4,$$

$$q = \frac{\mu c_p}{\text{Re}_{\infty} \sigma} \frac{\partial T}{\partial y} - \sum_{i=1}^N h_i I_i + \sum_{k=1}^M q_k^v,$$

где ϵ , $V_{\infty} k_{wi}$ — коэффициенты черноты поверхности и каталитической рекомбинации; σ_B — постоянная Больцмана; T_w — равновесная температура поверхности. Тепловым потоком со стороны тела пренебрегается, так как для материала теплозащитного покрытия орбитального корабля «Буран» при $H \leq 90$ км его значение составляет лишь несколько процентов от q .

Для колебательной температуры на поверхности предполагается выполнение или условия равновесия, или условия некаталитичности стенки по отношению к внутренним степеням свободы:

$$(1.7) \quad T_{vk} = T_w;$$

$$(1.8) \quad \partial T_{vk} / \partial y = 0.$$

На ударной волне в качестве граничных условий задаются обобщенные соотношения Рэнкина — Гюгоно. В ударном слое предполагается наличие компонентов N_2 , O_2 , NO , N , O , между которыми протекают реакции диссоциации, рекомбинации и обменные реакции с константами скоростей из [4].

Воздействие неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы на скорости реакций диссоциации проявляется через двухтемпературную зависимость константы скорости диссоциации [5]:

$$K_i^D(T, T_{vi}) = K_i^D(T) V_i(T, T_{vi}), \quad i = 1, \dots, M,$$

$$V_i(T, T_{vi}) = \frac{Z_i(T) Z_i(T_{Fi})}{Z_i(T_{vi}) Z_i(-U_i)}, \quad \frac{1}{T_{Fi}} - \frac{1}{T_{vi}} - \frac{1}{T} - \frac{1}{U_i}.$$

Здесь $K_i^D(T)$ — константа диссоциации при термодинамическом равновесии, когда $T_v = T$; Z_i — статсуммы по колебательным уровням; U_i — дополнительный параметр, имеющий размерность температуры и определяющий степень преимущественной диссоциации с верхних уровней по сравнению с нижними. В расчетах полагалось $U_i = T_{Di}/6$ (T_{Di} — температура диссоциации). При определении констант скоростей рекомбинации принималось $V = 1$. На скорость обменных реакций влияние релаксации колебаний не учитывалось.

Обратное влияние химических реакций на колебательную релаксацию учитывалось через источниковый член Q_k^R [6]. Например, для молекул O_2 он выражается в виде

$$Q_k^R = -m_k \left(\frac{\rho}{m} \right)^2 \left[\left(\sum_{i=1}^N K_{1i} x_i \right) \left(e_{Dk} \frac{K_{vi}}{F} V_i x_k - e_{Rk} x_k^2 \right) - K_2 e_k (K_{p2} x_O x_{NO} - x_N x_k) \right],$$

$$k = O_2, \quad x_i = \frac{m c_i}{m_i}, \quad e_{Dk} = e_k(T_{Fk}), \quad e_{Rk} = e_k(-U_k),$$

где K_{1i} , K_{p1} — константы скоростей и константа равновесия для реакций рекомбинации кислорода, а K_2 , K_{p2} — для обменной реакции с участием кислорода; e_{Dk} — среднее значение колебательной энергии, теряемое молекулами O_2 в результате единичного акта диссоциации; e_{Rk} — среднее значение колебательной энергии, приобретаемое молекулами O_2 в результате единичного акта рекомбинации.

Перенос энергии между поступательными и колебательными степенями свободы Q_k^{VT} рассчитывался в форме Ландау — Теллера

$$Q_k^{VT} = \rho \frac{E_k(T) - E_k}{\tau_k^{VT}}.$$

Для расчета времени колебательной релаксации VT -обмена использовались аппроксимации τ_{ik}^{VT} Милликена — Уайта [7] и поправка для

$T > 8000$ К, предложенная в [8]:

$$\frac{1}{v_k} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{v_{ik}^{MW}} + \sigma v_k n.$$

Здесь и далее v_k — средняя тепловая скорость молекулы; n — число частиц в единице объема; σ — эффективное поперечное сечение столкновений, которое принималось равным 10^{-16} см².

Скорость обмена колебательной энергией за счет VV' -процессов можно записать в виде

$$Q_k^{VV} = \rho c_k \frac{\bar{r}_A \bar{v}_k}{m_k} \sum_{i=1}^M \frac{(L_k + 1) L_i \exp(t_i - t_k) - (L_i + 1) L_k}{t_i T_i(T) \tau_{ik}^{VV}},$$

$$t_i = \frac{\theta_i}{T_{vi}}, \quad L_i = (\exp(t_i) - 1)^{-1},$$

$$\tau_{ik}^{VV} = (n K_{10}^{ik})^{-1} + (\sigma v_k n)^{-1}, \quad K_{10}^{N_2-O_2} = K_{10}^{N_2-NO} = 0,1 K_{10}^{O_2-NO}.$$

Для вычисления значения константы скорости колебательной дезактивации использовалась аппроксимация экспериментальных данных, полученная в [9]:

$$K_{10}^{N_2-O_2} = 2,5 \cdot 10^{-12} \exp(-131T^{-1/3} + 489/T) T^{1/3} \text{ см}^3/\text{с}.$$

2. Анализ результатов. Рассмотрим течение в окрестности критической линии орбитального корабля «Буран» при его спуске вдоль планирующей траектории входа [10]. Условия в набегающем потоке соответствовали стандартной атмосфере. Коэффициент черноты поверхности принимался равным 0,8, $R = 0,83$ м. Молекулам N_2 , O_2 , NO соответствуют следующие значения характеристических температур и температуры диссоциации: $\theta_i = 3372, 2256, 2720$ К, $T_{Di} = 113\,000, 59\,500, 75\,500$ К. Метод численного решения аналогичен [11].

Ниже приведены некоторые результаты расчетов. На рисунках приняты обозначения: сплошные линии — результаты расчетов системы уравнений (1.1)–(1.5) с разными колебательными температурами молекулярных компонентов, штрихпунктирные — расчеты по модели с одной «усредненной» колебательной температурой (уравнение колебательной релаксации (1.6)). Результаты приведены для граничного условия (1.7), за исключением обозначенных буквой a на рис. 1, когда использовалось условие (1.8) для колебательной температуры. Штриховые линии — расчеты в предположении о термодинамическом равновесии, т. е. когда все внутренние степени свободы возбуждены равновесно и колебательная температура совпадает с поступательной, пунктирные на рис. 1, 2 — значения скорости и высоты в зависимости от времени полета.

На рис. 1 приведена зависимость теплового потока от времени спуска орбитального корабля «Буран». Представленный участок траектории охватывает диапазон высот $H = 100 \div 52$ км, поверхность тела предполагается некаталитической по отношению к химическим реакциям комбинации.

На начальном участке траектории в случае модели с одной колебательной температурой значения теплового потока выше. С уменьшением высоты полета режим течения приближается к термодинамическому равновесию. Если же рассматривать модель с разными колебательными температурами молекулярных компонентов, то термодинамически неравновесный характер течения сохраняется в большей степени. Различие между моделями в значениях теплового потока может достигать 20 %, а в равновесной температуре поверхности — 80 К. Это отличие обусловлено главным образом влиянием источников членов \dot{Q}_k^R и в меньшей степени процессами VV' -обмена, хотя они также приводят к увеличению теплового потока. Заметим, что представленное на рис. 1 характерное поведение

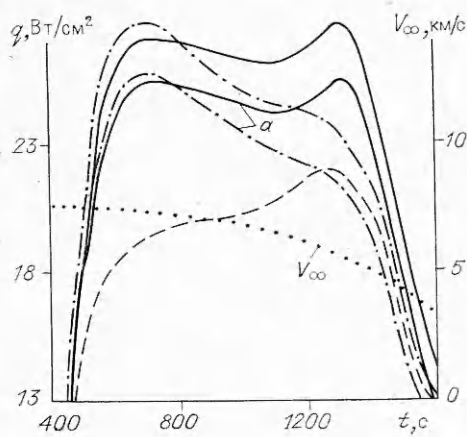


Рис. 1

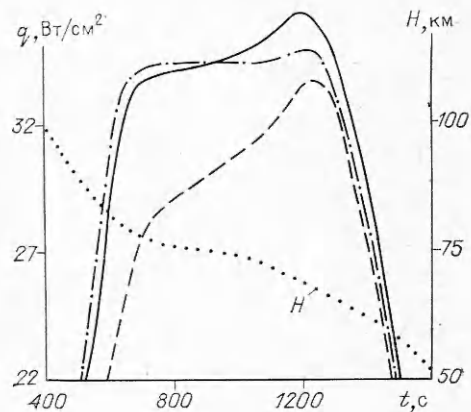


Рис. 2

теплового потока аналогично и для других рассчитанных планирующих траекторий.

Применение некаталитической по отношению к колебательным степеням свободы стенки (граничное условие (1.8)) приводит к снижению теплового потока. Для модели с одной колебательной температурой тепловой поток в нижней части траектории может оказаться меньше, чем при расчете в предположении о термодинамическом равновесии. Для модели с разными колебательными температурами тепловой поток остается выше. Из-за неопределенности граничных условий для колебательной температуры значения теплового потока могут отличаться на 10 %, а температуры поверхности — на 30 К.

На рис. 2 показана зависимость теплового потока от времени спуска для поверхности с константами скоростей гетерогенной рекомбинации $k_{wO} = k_{wN} = 3$ м/с, $k_{wNO} = 0$, что отвечает каталитической активности поверхности покрытия углерод — углерод орбитального корабля «Буран». Для этого варианта максимальное отличие между моделями составляет до 5 % в значениях теплового потока и до 20 К в равновесной температуре поверхности.

На рис. 3 представлены профили поступательной и колебательных температур при $t = 1340$ с ($H = 64,6$ км, $V_{\infty} = 5,35$ км/с). Линиями 1—3 обозначены колебательные температуры молекулярных компонентов N_2 , NO и O_2 соответственно.

Назовем моделью 1 модель с одной «усредненной» колебательной температурой, 2 — термодинамически равновесную модель, когда все внут-

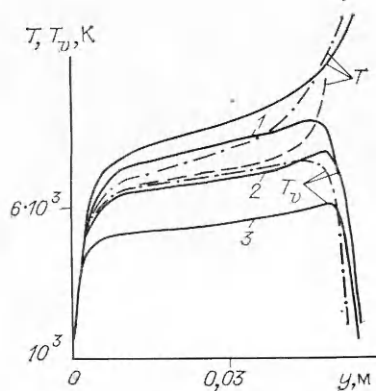


Рис. 3

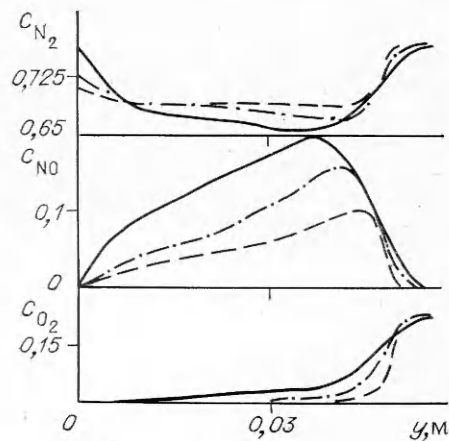


Рис. 4

ренные степени свободы возбуждены равновесно, 3 — с разными колебательными температурами молекулярных компонентов.

На начальном участке траектории колебательная температура модели 1 практически отвечает колебательной температуре молекул N_2 , температуры молекулярных компонентов O_2 и NO имеют существенно более высокие значения. Поступательная температура и толщина ударного слоя для модели 1 несколько выше, чем для модели 3. С уменьшением высоты полета относительное расположение температур изменяется: состояние молекул N_2 наиболее близко к термодинамически равновесному, а колебательная температура молекул O_2 наиболее низкая. Значения колебательных температур молекул NO и модели 1 лежат между ними. Поступательная температура модели 1 на большей части ударного слоя ниже, чем в модели 3.

На рис. 4 приведены профили массовых концентраций молекулярных компонентов в той же точке траектории. Концентрация молекул N_2 в термодинамически равновесном случае на начальном участке траектории меньше, чем в неравновесном. Затем происходит относительное увеличение содержания азота в случае модели 2 по сравнению с неравновесными моделями. На большей части траектории в случае модели 3 азот диссоциирует сильнее, чем в модели 1. Содержание молекул окиси азота в ударном слое для неравновесных моделей всегда больше, чем для модели 2. Кислород же в наибольшей степени диссоциирует в термодинамически равновесной модели. Содержание молекул O_2 для модели 1 на начальном участке траектории больше, а затем уменьшается по сравнению с моделью 3 из-за относительно более низких значений] колебательной температуры кислорода.

На рис. 5 представлены профили безразмерных источниковых членов для молекулярного компонента окиси азота при $t = 1340$ с. Как видно, источниковый член Q^R , ответственный за обратное влияние химических реакций на колебательную релаксацию, при развитой диссоциации сравним по величине с членом Q^{VT} Ландау — Теллера. В то же время процессы VV' -обмена в общем балансе сказываются значительно слабее, а относительная величина источникового члена Q^{VV} для других молекулярных компонентов существенно меньше.

Из приведенных выше результатов следует, что колебательные температуры молекулярных компонентов могут значительно отличаться между собой. При использовании в расчетах модели с разными колебательными температурами неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы оказывает большее влияние на характеристики течения на теплонатянутой части планирующей траектории входа, чем в модели с одной «усредненной» колебательной температурой. Отличие в значениях теплового потока для рассмотренных моделей может достигать 20 %.

Автор благодарен Г. А. Тирскому за помощь и внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тирский А. Г., Щербак В. Г. Взаимные влияния колебательно-диссоционной релаксации при сверхзвуковом обтекании затупленных тел вязким газом // ПМТФ.— 1990.— № 6.
2. Candler G. V., McCormack R. W. The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium.— N. Y., 1988.— (Pap./AIAA; N 511).
3. Candler G. V., Park C. The computation of radiation from nonequilibrium hypersonic flows.— N. Y., 1988.— (Pap./AIAA; N 2678).

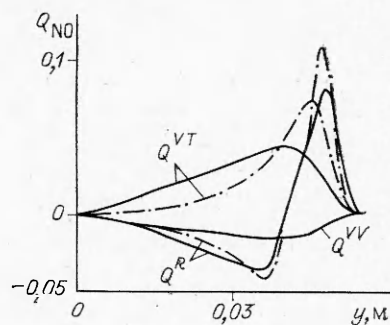


Рис. 5

4. Kang S. W., Dunn M. J. Hypersonic viscous shock layer with chemical nonequilibrium for spherically blunted cones // AIAA J.— 1972.— V. 10, N 10.
5. Marrone P. V., Treanor C. E. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids.— 1963.— V. 6, N 9.
6. Treanor C. E., Marrone P. V. Effect of dissociation of the rate of vibrational relaxation // Phys. Fluids.— 1962.— V. 5, N 9.
7. Millikan R. C., White D. R. Systematics of vibrational relaxation // J. Chem. Phys.— 1963.— V. 39, N 12.
8. Park C. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles.— N. Y., 1984.— (Pap./AIAA; N 1730).
9. Козлов В. П., Павлов В. А., Макаров В. Н. и др. Экспериментальное определение константы колебательного энергообмена в системе N_2-O_2 .— М., 1989.— (Препр./Ин-т механики МГУ; № 3876).
10. Лозино-Лозинский Г. Е. Полет Бурана // Гагаринские научные чтения по космонавтике и авиации 1989.— М.: Наука, 1990.
11. Щербак В. Г. О граничных условиях на ударной волне при сверхзвуковом обтекании // ПМТФ.— 1989.— № 1.

г. Москва

Поступила 27/VI 1991 г.,
в окончательном варианте — 18/XII 1991 г.

УДК 519.6 : 533.9 : 539.3

Н. В. Бугров, Н. С. Захаров

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛАЗЕРНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Для проведения исследований в динамической физике высоких давлений весьма перспективным инструментом могут служить мощные импульсные лазеры [1]. Выполненные к настоящему времени эксперименты по лазерной генерации ударных волн (УВ) позволили значительно расширить диапазон достижимых давлений по сравнению с применением классической техники, использующей химические взрывчатые вещества или метательные устройства [1, 2]. Кроме того, существенное отличие лазерного способа от традиционных методов заключается в том, что достигаемые при лазерном облучении высокие концентрации энергии позволяют получать новую физическую информацию об экстремальных состояниях вещества. Вместе с тем процесс формирования лазерных УВ в твердых телах, особенно на начальных его стадиях, до сих пор остается менее изученным по сравнению с такими областями исследований, как динамика плазменных факелов и сжатие термоядерных мишеней. Неясны отличия в характере ударно-волновых процессов при различных интенсивностях излучения, а также степень влияния поглощающих свойств лазерной плазмы. В связи с этим представляет интерес в рамках численного моделирования исследовать процессы формирования и распространения лазерных УВ в конденсированных средах для широкого диапазона интенсивностей излучения.

1. Рассмотрим нормальное облучение непрозрачной преграды наносекундными лазерными импульсами в области интенсивностей $q \simeq 10^8 - 10^{13}$ Вт/см². Для простоты ограничимся плоским одномерным случаем. Система уравнений, описывающих возникающее нестационарное движение образующейся плазмы и ударное сжатие материала облучаемой мишени с учетом упругопластических свойств, имеет вид

$$(1.1) \quad \frac{1}{\rho} = V = \frac{\partial x}{\partial m}, \quad m = \int_0^x \rho \, dx, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial m} (p - \sigma_1), \quad u = \frac{\partial x}{\partial t},$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = - (p - \sigma_1) \frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial q}{\partial m}, \quad \sigma_1 = \frac{4}{3} \mu \ln(V/V_0), \quad \sigma_2 = - \frac{2}{3} \mu \ln(V/V_0),$$

$$\frac{\partial q}{\partial m} = - \kappa q, \quad V_0 = V(m, 0).$$

© Н. В. Бугров, Н. С. Захаров, 1993