

УДК: 533

Предварительное численное исследование трехтемпературной модели гиперзвукового течения кислорода с вращательной неравновесностью

И. Жезали¹, Р. Хаюй¹, А. Чпоун²

¹Университет науки и технологии им. Хуари Бумедьена, Алжир, Алжир

²Университет Эври, Эври, Франция

E-mail: ghezali_youcef@yahoo.fr

Исследовано влияние неравновесности вращательных степеней свободы на макропараметры течения за нормальной ударной волной в потоке газообразного кислорода в предположении термического равновесия электронов, когда их температура равна колебательной температуре в соответствии с предположением Парка. Исходя из постановки, анализировалось только влияние вращательной неравновесности на поступательную и колебательную температуры. В ходе исследования использовались вращательное и колебательное времена релаксации для столкновений O_2-O_2 и O_2-O , предложенные Андриенко и Бойдом. Кроме того, использовались скорости диссоциации O_2 , предложенные Кимом и Парком. Результаты, полученные с помощью трехтемпературной модели, хорошо воспроизводят данные, полученные в ударной трубе для скорости ударной волны 4,44 км/с.

Ключевые слова: гиперзвуковой, неравновесность, ударная волна, вращение, колебание, поток кислорода.

В наши дни многие авторы предпочитают использовать в гиперзвуковых расчетах двухтемпературную модель Парка, основанную на приближении равновесия поступательных и вращательных мод [1–4]. В настоящем исследовании изучается влияние вращательной неравновесности в области за нормальной ударной волной для случая течения кислорода. При моделировании поток рассматривался как реагирующая смесь частиц пяти сортов (O_2 , O , O_2^+ , O^+ , e^-) с восемью элементарными реакциями, включая реакции диссоциации, перезарядки, ассоциативной ионизации и ионизации электронным ударом. Скорости реакций рассчитывались с использованием модифицированной модели химической кинетики [5], включая скорость диссоциации молекулы O_2 , впервые рассмотренную авторами [6]. Одномерные уравнения Эйлера с вращательными и колебательными неравновесными источниковыми членами решались непосредственно в области за нормальной ударной волной с использованием метода конечных разностей. Уравнения сохранения для рассматриваемого течения приводятся ниже.

Уравнения неразрывности, импульса и энергии имеют вид:

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0, \quad \frac{d(\rho u^2 + p)}{dx} = 0, \quad \frac{d(p + \rho e)u}{dx} = 0. \quad (1)$$

Уравнение релаксации компонентов смеси и уравнения сохранения вращательной

и колебательной энергий записываются как

$$\frac{d(\rho_s u)}{dx} = \omega_{c,s}, \quad \frac{d(\rho_s e_{r,s} u)}{dx} = \omega_{RT,s} + \omega_{CR,s}, \quad \frac{d(\rho_s e_{v,s} u)}{dx} = \omega_{VT,s} + \omega_{CV,s}. \quad (2)$$

Давление газовой смеси определяется законом парциальных давлений Дальтона:

$$p = \sum_{s \neq e}^4 p_s + p_e = \sum_{s \neq e}^4 \rho_s \frac{R}{M_s} T + \rho_e \frac{R}{M_e} T_v, \quad (3)$$

где e — полная энергия на единицу массы, которая включает поступательную, вращательную и колебательную энергии, энтальпии образования частиц, электронную энергию частиц, энергию электронов и кинетическую энергию [4]. Модель, использованная для расчета обмена энергии между поступательно-колебательными модами $\omega_{VT,s}$ и поступательно-вращательными модами $\omega_{RT,s}$, имеет ландау–теллеровскую форму с высокотемпературной поправкой Парка [7]:

$$\omega_{VT,s} = \rho_s \left((1-f) \frac{e_{v,s}(T) - e_{v,s}}{\tau_{MW,s} + \tau_{p,s}} \left(\frac{T_{ch} - T_{v,s}}{T_{ch} - T_{v,s,ch}} \right)^{s-1} + f \frac{e_{v,s}(T_{r,s}) - e_{v,s}}{\tau_{MW,s}} \right), \quad (4)$$

где $s = 3,5 \exp(-5000/T_{ch})$, а T_{ch} и $T_{v,s,ch}$ — поступательная и вращательная температуры, рассчитываемые в области непосредственно за ударной волной, и

$$\omega_{RT,s} = \rho_s \left(\frac{e_{r,s}(T) - e_{r,s}}{\tau_{r,s}} + f \frac{e_{v,s} - e_{v,s}(T_{r,s})}{\tau_{MW,s}} \right). \quad (5)$$

Учет колебательно-химического $\omega_{CV,s}$ и вращательно-химического обмена $\omega_{CR,s}$ проводился с использованием формулы Кандлера и МакКормака [8]:

$$\omega_{CV,s} = e_{v,s} \omega_{c,s}, \quad \omega_{CR,s} = e_{r,s} \omega_{c,s}. \quad (6)$$

В выражениях (4) и (5) f — вклад передачи энергии вращения в колебания и в общую передачу энергии. В работе [9] была предложена формула для f

$$f = \frac{(\xi_{vib,s}/2)RT}{(\xi_{rot,s}/2)RT + 1,5RT}, \quad (7)$$

где $\xi_{vib,s} = 2(\theta_{v,s}/T)/(\exp(\theta_{v,s}/T) - 1)$ и $\xi_{rot,s} = 2$ — число степеней свободы колебательных и вращательных мод соответственно. Для столкновений O_2-O_2 вместо времени релаксации Милликена–Уайта использовалось время релаксации предложенное в [10]:

$$p\tau_{v,O_2-O_2} = 8,8 \cdot 10^{-14} \exp(172,7T^{-1/3})T^{0,5} / (1 - \exp(\theta_{v,s}/T)), \quad (8)$$

где давление p измеряется в атмосферах. Предложенное в [11] вращательное время релаксации для столкновений O_2-O_2 имеет вид

$$p\tau_{r,O_2-O_2} = 3,0173 \cdot 10^{-10} T^{0,611}, \quad (9)$$

Для столкновений O_2-O время вращательной и колебательной релаксации, предложенное в работе [12], рассчитывалось по формуле

Таблица

Коэффициенты времен колебательной и вращательной релаксации [12]

x	A	B	C	D
$p\tau_{v, O_2-O}$	$1,576 \cdot 10^{-4}$	$-9,543 \cdot 10^{-3}$	2,232	1,385
$p\tau_{r, O_2-O}$	$-3,764 \cdot 10^{-5}$	$-6,211 \cdot 10^{-3}$	1,331	$2,451 \cdot 10^{-1}$

$$p\tau_{x, O_2-O} = 10^{-8} \left[A \left(\frac{T}{1000} \right)^3 + B \left(\frac{T}{1000} \right)^2 + C \left(\frac{T}{1000} \right) + D \right]. \quad (10)$$

Значения коэффициентов, используемых в (10) приведены в таблице.

На рис. 1а показана эволюция поступательной (T), вращательной (T_r) и колебательной температур непосредственно за ударной волной (T_v) с использованием двух- и трехтемпературной моделей (2Т и 3Т). В качестве тестового случая выбраны экспериментальные условия [10] с наибольшей скоростью ударной волны 4,44 км/с (число Маха $M = 13,4$) при давлении 0,8 Торр (106,66 Па). Используя соотношения Рэнкина–Гюгонио, получим, что поступательная температура достигает 14000 К за ударной волной, а затем она медленно снижается до равновесного значения, в отличие от сильной вращательной и колебательной неравновесности. Это снижение в основном является результатом поглощения кинетической энергии молекул, определяемой их молекулярным вращением и колебанием, а также результатом эндотермическими химическими реакциями, таких как диссоциация и ионизация. В неравновесной области время вращательной релаксации имеет меньшее значение, чем время колебательной релаксации, поэтому вращательная температура превышает колебательную. Что касается сравнения результатов, здесь следует отметить, что диссоциация в трехтемпературной модели протекает медленнее, чем в двухтемпературной и, следовательно, зона релаксации расширяется по мере того, как температура поступательных и колебательных мод приближается к измеренным значениям.

Поправка на колебательную релаксацию была предложена Парком для учета диффузионного характера процесса при высоких температурах (выше 5000 К для N_2). Связующая формула между моделью Ландау–Теллера ($s = 1$) и диффузионной моделью ($s = 3,5$ ([5]) для течения азота имеет вид $s = s' \exp(-5000/T_{ch})$ с $s' = 3,5$. Согласно этой формуле, общая колебательная температура уменьшается при увеличении s' . Например, как показано на рис. 1b, изменение s' от 3,5 до 2 значительно увеличивает амплитуду

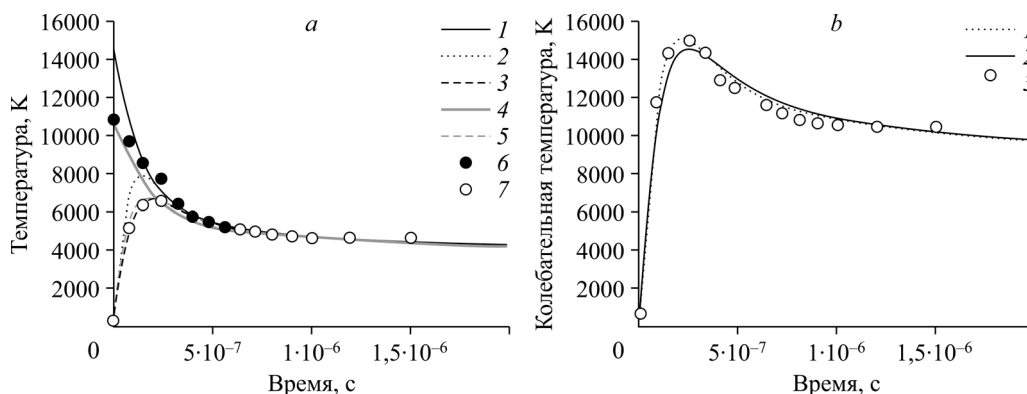


Рис. 1. Сравнение эволюции температурных профилей, полученных по моделям 2Т и 3Т, с экспериментальными результатами [10] (а) и профиль колебательной температуры с различными значениями произвольного параметра s (б).

a : расчеты для T по моделям 3Т (1) и 2Т (4) и для T_r по модели 3Т (2), а также для T_v по моделям 3Т (3) и 2Т (5), экспериментальные данные [10] для T (6) и T_v (7);
 b : расчет при $s' = 2$ (1), 3,5 (2), экспериментальные данные [10] для T_v (3).

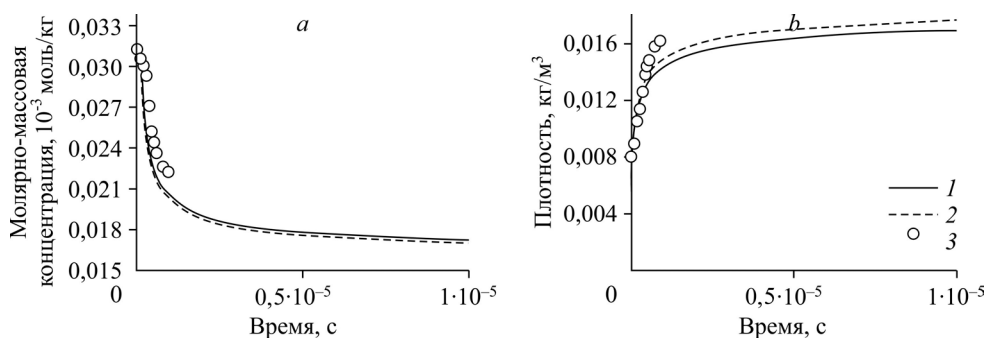


Рис. 2. Концентрация O_2 , рассчитанная из молярной массы, и профили плотности.

Расчеты по моделям 3Т (1) и 2Т (2), экспериментальные данные [10] (3).

пика колебательной температуры, что приводит к хорошей согласованности с экспериментальными данными.

Молярно-массовая концентрация O_2 и профили плотности приведены на рис. 2. Начальная концентрация O_2 , рассчитанная по величине молярной массы в работе [10], составляет $0,0625/2 = 0,03125$ моль/г. Это значение эквивалентно значению $1/0,03125 = 32$ г/моль, которое является молярной массой O_2 , поэтому в качестве контрольного примера использовался чистый кислород. Результаты показывают удовлетворительное согласование в терминах концентрации, определенной по величине молярной массы. Тем не менее, рассчитанная плотность отклоняется от измеренных значений как для модели 2Т, так и для модели 3Т, но результаты можно считать приемлемыми с учетом более низкой плотности. В модели 2Т диссоциация происходит быстрее, чем в модели 3Т. По мнению авторов работы [13], колебательные и вращательные степени свободы не полностью приходят в равновесие перед высокотемпературной (выше 5000 К) диссоциацией. Это означает, что в условиях вращательной и колебательной неравновесности (модель 3Т) диссоциация происходит более медленно по сравнению с моделью 2Т (с колебательной неравновесностью и вращательным равновесием).

Таким образом, результаты, полученные в состоянии гиперзвуковой скорости среды, показывают, что неравновесное вращение несколько увеличивает толщину зоны релаксации, при этом значения поступательной и колебательной температур приближаются к экспериментальным данным. Следовательно, наличие вращательной неравновесности важно для гиперзвукового потока, при этом необходимо учитывать вид рабочего газа (кислород, азот или воздух). В представленной работе используется трехтемпературная модель, предполагающая больцмановское распределение заселенности колебательного уровня, что является стандартным допущением. Однако работы [14–16] показывают некоторое отклонение реальной заселенности колебательного уровня от больцмановского значения. Фактически в этих экспериментах заселенность наивысшего колебательного уровня энергии во внимание не принималась. Более эффективный численный метод, использующий приближение поуровневой кинетики, станет предметом рассмотрения будущей работы.

Список литературы

1. Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Облапенко Г.П., Кустова Е.В. Разработка и апробация методики численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в ANSYS Fluent // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23, № 2. С. 159–171.
2. Бондарь Е.А., Шевырин А.А., Сан К., Шумакова А.Н., Кашковский А.В., Иванов М.С. Прямое статистическое моделирование высокотемпературных химических реакций в воздухе // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 20, № 5. С. 561–573.
3. Кунова О.В., Шоев Г.В., Кудрявцев А.Н. Численное моделирование неравновесных течений на основе поуровневого описания в коммерческих пакетах программ // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24, № 1. С. 7–18.

4. **Жезали И., Хаюй Р., Чпоун А.** Исследование физико-химических процессов в неравновесном гиперзвуковом течении воздушной смеси за сильной ударной волной // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Т. 26, № 5. С. 741–759.
5. **Park C.** Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions. I. Earth entries // J. Thermophysics and Heat Transfer. 1993. Vol. 7. P. 385–398.
6. **Kim J.G., Park G.** Thermochemical nonequilibrium parameter modification of oxygen for a two-temperature model // Physics of Fluids. 2018. Vol. 30, No. 1. Art. 016101.
7. **Park C.** Rotational relaxation of N_2 behind a strong shock wave // J. Thermophysics and Heat Transfer. 2004. Vol. 18, No. 4. P. 527–533.
8. **Candler G., MacCormack R.** Computation of weakly ionized hypersonic flows in thermochemical nonequilibrium // J. Thermophysics and Heat Transfer. 1991. Vol. 5, No. 3. P. 266–273.
9. **Kim J., Boyd I.** Master equation analysis of post normal shock waves of nitrogen // J. Thermophysics and Heat Transfer. 2015. Vol. 29, No. 2. P. 241–252.
10. **Ibragimova L.B., Sergievskaya A.L., Levashov V.Y., Shatalov O.P., Tunik Y.V., Zabelinskii I.E.** Investigation of oxygen dissociation and vibrational relaxation at temperatures 4000–10800 K // J. Chem. Phys. 2013. Vol. 139, No. 3. Art. 034317.
11. **Hanquist K., Boyd I.** Modeling of excited oxygen in post normal shock waves // Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference. 2018. AIAA Paper. No. 2018–3769.
12. **Andrienko D., Boyd I.** Rovibrational energy transfer and dissociation in O_2-O // J. Chem. Phys. 2016. Vol. 144, No. 10. Art. 104301.
13. **Andrienko D., Boyd I.** High fidelity modeling of thermal relaxation and dissociation of oxygen // 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting. 2016. AIAA Paper. No. 2016-0736.
14. **Wysong I.J., Gimelshein S.F., Bykova N.E., Shatalov O.P., Zabelinskii I.E.** Impact of flow non-equilibrium in oxygen shock absorption analysis // AIP Conference Proceedings. 2019. Vol. 2132, No. 1. Art. 180008.
15. **Hao J., Wen C.Y.** Maximum entropy modeling of oxygen vibrational excitation and dissociation // Phys. Rev. Fluids. 2019. Vol. 4, Iss. 5. P. 053401.
16. **Hao J., Wang J., Lee C.** State-specific simulation of oxygen vibrational excitation and dissociation behind a normal shock // Chem. Phys. Lett. Vol. 681. P. 69–74.

*Статья поступила в редакцию 2 сентября 2019 г.,
после доработки — 19 декабря 2019 г.,
принята к публикации 10 февраля 2020 г.*