

На правах рукописи

ШАРАФУТДИНОВ Ильдар Закирович

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ И ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА
В МНОГОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОТОКАХ
ВОЗДУХА ЗА УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург

2016

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Нагнибеда Екатерина Алексеевна

Официальные оппоненты: **Циркунов Юрий Михайлович**
доктор физико-математических наук, профессор,
Балтийский государственный технический
университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова (БГТУ),
профессор кафедры плазмогазодинамики
и теплотехники

Погосбемян Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник 109 Лаборатории
кинетических процессов в газах
Научно-исследовательского института механики
МГУ имени М.В. Ломоносова

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН

Защита состоится «_____» _____ 2016 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 212.232.30 на базе Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр., 28, математико-механический факультет, аудитория 405.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. М. Горького Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9 и на сайте <https://disser.spbu.ru/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dis-list/details/14/1070.html>.

Автореферат разослан «_____» _____ 2016 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета

Е.В. Кустова

Общая характеристика работы

Актуальность темы. При численном моделировании потоков воздуха за ударными волнами у поверхностей высокоскоростных летательных аппаратов, в соплах и струях важен учет неравновесного возбуждения внутренних степеней свободы молекул и химических реакций. Наиболее строгий подход основан на совместном решении уравнений газовой динамики и уравнений для заселенностей уровней внутренних энергий молекул смеси. В этом направлении в последние годы достигнуты большие успехи. Однако применение поуровневого описания в расчетах течений многокомпонентных смесей вызывает трудности, связанные, во-первых, с необходимостью интегрирования большого числа уравнений для заселенностей энергетических уровней молекул смеси в каждом конкретном случае и, во-вторых, с недостатком данных о коэффициентах скорости химических реакций и энергетических переходов, зависящих от внутренних энергий молекул разных сортов. Поэтому разработка эффективного упрощенного подхода для описания течений высокотемпературного воздуха, учитывающего основные неравновесные эффекты и в то же время пригодного для выполнения серийных расчетов при решении практических задач, является актуальной современной проблемой. Переход от поуровневого к многотемпературному описанию течений ударно нагретого воздуха позволяет сократить число неизвестных параметров течения и соответственно число решаемых уравнений. При этом важен выбор многотемпературных колебательных распределений, обеспечивающий наилучшую точность упрощенных моделей в разных условиях неравновесности. До настоящего времени не изученным оставалось влияние неравновесных колебательных распределений на параметры многокомпонентного воздуха в релаксационной зоне за ударной волной и не оценивались упрощения, принимаемые при выводе уравнений многотемпературной колебательной и химической кинетики. В связи с этим актуальной проблемой является создание обоснованных моделей многотемпературной кинетики в потоках воздуха и их применение в расчетах течений за ударными волнами при разных условиях в набегающем потоке.

Цель работы:

1. Разработка квазистационарных моделей, описывающих течения воздуха при высоких температурах с учетом сильной химической и колебательной неравновесности.
2. Исследование коэффициентов скорости неравновесных химических реакций в пятикомпонентном воздухе на основе двухтемпературных и одготемпературных колебательных распределений, справедливых в разных условиях неравновесности.
3. Применение разработанных моделей для решения задачи о течении пятикомпонентной воздушной смеси $N_2/O_2/NO/N/O$ за сильными ударными волнами.
4. Оценка влияния колебательной неравновесности, выбора моделей энергообменов и химических реакций на колебательные распределения и газодинамические параметры за фронтом ударной волны на основе сравнения результатов, полученных при трехтемпературном и одготемпературном описании.

Научная новизна определяется, во-первых, использованием многотемпературного подхода, учитывающего сильные и умеренные отклонения от равновесия, при численном моделировании течений пятикомпонентного воздуха за ударными волнами. Предложенный подход сочетает упрощения многотемпературных моделей при выводе уравнений для макропараметров и строгость поуровневого описания при вычислении осредненных коэффициентов скорости реакций. Во-вторых, новыми являются оценки влияния колебательных распределений на осредненные коэффициенты скорости обменных реакций при разных отклонениях от равновесия, а также введение факторов неравновесности для обменных реакций и их расчет. В-третьих, новыми являются оценки влияния двухтемпературных колебательных распределений и моделей переходов энергии и реакций на эволюцию макропараметров за фронтом ударной волны в воздухе. В-четвертых, впервые показано сильное влияние колебательной неравновесности в набегающем потоке на макропараметры воздуха за фронтом ударной волны при трехтемпературном описа-

нии. В-пятых, новым является сравнение колебательной температуры молекул кислорода, найденной в расчетах, с имеющимися экспериментальными данными.

Достоверность обеспечивается сравнением результатов диссертации с данными, полученными при использовании наиболее строгого подхода, учитывающего детальную поуровневую колебательную и химическую кинетику. Получено удовлетворительное согласие результатов, найденных в рамках предложенного в диссертации трехтемпературного подхода и поуровневого описания. Использованное в диссертации многотемпературное приближение имеет строгое обоснование в кинетической теории газов.

Достоверность результатов подтверждается также использованием в расчетах моделей переходов энергии и реакций, которые основаны на аппроксимациях экспериментальных данных и на строгих траекторных расчетах. Колебательные спектры молекул воздуха рассчитывались на основе строгой модели с учетом ангармоничности колебаний. На основе выполнения законов сохранения массы, импульса и полной энергии проверялась погрешность численного решения уравнений, которая не превышала 0.05%. Также достоверность результатов подтверждается их сравнением с экспериментальными данными.

Научная и практическая ценность диссертации. Разработан многотемпературный подход для описания течений воздуха за ударными волнами при разных отклонениях от равновесия в диапазоне температур от 2000 К до 14000 К: представлены замкнутые системы уравнений для макропараметров, детально изучены двухтемпературные коэффициенты скорости диссоциации и обменных реакций Зельдовича, показано влияние колебательных распределений на эти коэффициенты.

Трехтемпературная модель использована для численного решения задачи о течении пятикомпонентного воздуха за ударными волнами, возникающими в равновесном и колебательно возбужденном газе. Разработана численная схема и программный код для расчета параметров ударно нагретого воздуха в трехтемпературном приближении. Результаты расчетов показали влияние колебательных распределений, моделей энергообменов и химических реакций, условий в набегающем потоке на изменение температуры, скорости

потока, состава воздуха и колебательных температур молекул азота и кислорода в релаксационной зоне за ударным фронтом. Представлено сравнение полученных результатов с данными экспериментов на ударных трубах. Также показано сравнение с результатами, найденными при поуровневом описании неравновесной кинетики и в одготемпературном термически равновесном газе. Даны рекомендации по выбору моделей переходов колебательной энергии, химических реакций и колебательных распределений при моделировании течений воздуха за ударными волнами.

Результаты проведенного исследования могут быть использованы при моделировании течений не только ударно нагретого воздуха, но и потоков в соплах и струях, а также при решении задач лазерной и химической физики.

Положения, выносимые на защиту:

1. Четырехтемпературная и трехтемпературные модели течений ударно нагретого воздуха, учитывающие неравновесные реакции диссоциации, рекомбинации, обмена атомами и переходы колебательной энергии в разных условиях неравновесности.
2. Двухтемпературная модель обменных реакций Зельдовича, основанная на осреднении уровневых коэффициентов скорости реакций по неравновесным колебательным распределениям. Результаты расчета факторов неравновесности и двухтемпературных коэффициентов скорости обменных реакций на основе разработанной модели с учетом разных колебательных распределений и их анализ.
3. Результаты применения трехтемпературных моделей, учитывающих сильные и умеренные отклонения от равновесия, при численном моделировании течений воздуха за ударными волнами при $M = 10, 13, 16$. Оценки влияния колебательных распределений, моделей энергообменов и химических реакций в пятикомпонентном воздухе на изменение скорости, температуры и состава воздуха за фронтом ударной волны.
4. Модифицированные условия совместности на фронте ударной волны с учетом обменов колебательными квантами внутри фронта.

5. Оценка влияния колебательной неравновесности набегающего потока на параметры воздуха за фронтом ударной волны в трехтемпературном приближении.

Апробация результатов. Результаты, представленные в диссертации, докладывались на следующих Всероссийских и международных конференциях:

1. Международная конференция по механике "Шестые Поляховские чтения" (Санкт-Петербург, 2012);
2. Всероссийская конференция с участием иностранных ученых "Современные проблемы динамики разреженных газов" (Новосибирск, 2013);
3. 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (Xi'an, China, 2014);
4. 21st International Shock Interaction Symposium (Riga, Latvia, 2014);
5. Международная конференция по механике "Седьмые Поляховские чтения" (Санкт-Петербург, 2015);
6. XIX Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам, ВМСППС'15 (Алушта, 2015);
7. XXIV Всероссийский семинар с международным участием по струйным, отрывным и нестационарным течениям (Новосибирск, 2015);
8. 9-я Всероссийская школа-семинар «Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем» (Москва, 2015);
9. XI Международная конференция Неравновесные процессы в соплах и струях, NPNJ'2016 (Алушта, 2016).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 15 работах, из них три статьи в изданиях, индексируемых в SCOPUS (1, 3, 4), и одна статья (2) в журнале, входящем в перечень рецензируемых научных

журналов, рекомендованных ВАК. Зарегистрирована программа (16) в государственном Реестре программ для ЭВМ Российской Федерации. Список работ приведен в конце автореферата.

В совместных публикациях автором получены системы уравнений для трехтемпературного, двухтемпературного и одготемпературного описания потока воздуха и бинарных смесей за ударными волнами, написана расчетная программа, получены численные решения рассмотренных в работе задач, их сравнение с существующими в литературе данными, автор принимал участие в обсуждении результатов, подготовке печатных работ и докладов на конференциях. В работах (1, 4 – 10, 12, 14, 15) Нагнибеда Е.А. принадлежат основная идея исследований, постановка задач и обсуждение результатов. В работах (1, 7 – 9) Куновой О.В. принадлежит расчет макропараметров воздуха за фронтом ударных волн в поуровневом приближении. В публикациях (4, 11) Кустовой Е.В. принадлежит основная идея работ, постановка задачи и обсуждение результатов. Савельеву А.С. принадлежит разработка модели описания коэффициентов скорости диссоциации молекул кислорода и азота в (4). В работах (4, 11) Облапенко Г.П. принадлежит обобщение модели Ландау – Теллера и выражений для времен релаксации.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы из 69 наименования. Общий объем диссертации составляет 99 страниц, включая 42 рисунка и 6 таблиц.

Основное содержание работы

Во Введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели работы, перечислены полученные новые результаты, их практическая ценность и положения, выносимые на защиту. Кратко описано современное состояние изучаемой проблемы.

В Главе 1 представлены многотемпературные модели колебательной и химической кинетики в высокотемпературных потоках пятикомпонентного воздуха $N_2/O_2/NO/N/O$ и одготемпературная модель химически неравновесных течений. Модели основаны на соотношениях между характерными временами релаксации процессов, происходящих в высокотемпературной

смеси. Учитываются переходы колебательной энергии, диссоциация, рекомбинация и обменные реакции, приводящие к образованию молекул NO .

В п. 1.1, 1.2 рассмотрены модели, описывающие умеренное колебательное возбуждение, основанные на неравновесных распределениях Тринора (в газе из ангармонических осцилляторов), распределениях Больцмана (для гармонических осцилляторов) и однотемпературной модели неравновесной химической кинетики в термически равновесном воздухе. В разделе 1.3 представлена модель течений воздуха при сильном колебательном возбуждении, учитывающая составные распределения Гордиеца, имеющие разный характер на разных группах колебательных уровней.

В рамках каждой модели представлена замкнутая система уравнений для макропараметров течения, включающая уравнения сохранения массы, импульса, энергии и уравнения неравновесной кинетики.

В Главе 2 изучены коэффициенты скорости химических реакций диссоциации и обмена, входящие в релаксационные члены уравнений кинетики. Эти коэффициенты определялись на основе строгого подхода: коэффициенты скорости реакций, зависящие от колебательных уровней реагентов, осреднялись по двухтемпературным колебательным распределениям Тринора и составному распределению ангармонических осцилляторов и по однотемпературным распределениям Больцмана. Для уровневых коэффициентов скорости реакций использовались аналитические представления, предложенные в ра-

ботах Варнаца; Русанова, Фридмана; Полака. Также использованы двухтемпературные модели Парка, Мачерета и Тринора-Маррона. Введены уровневые и двухтемпературные факторы неравновесности для обменных реакций. Представлены результаты расчетов неравновесных факторов и коэффициентов скорости реакций. Обсуждается влияние неравновесных колебательных

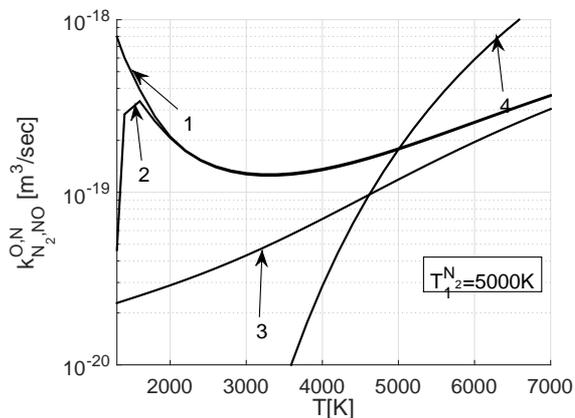


Рис. 1: Зависимость $k_{N_2,NO}^{O,N}$ от T на основе: (1) – составного распределения, (2) – распределения Тринора, (3) – неравновесного распределения Больцмана (гармонические осцилляторы), (4) – равновесного распределения Больцмана.

распределений и уровневых моделей реакций на двухтемпературные коэффициенты скорости химических реакций в воздухе. Сравнение двухтемпературных коэффициентов скорости реакции $N_2 + O \rightarrow NO + N$, полученных на основе разных распределений, представлено на рисунке 1 (T – температура газа, $T_1^{N_2}$ – температура первого колебательного уровня молекул N_2).

В области $T < T_1^{N_2}$ двухтемпературные коэффициенты (кривые 1, 2) превышают равновесный коэффициент (кривая 4), а при $T > T_1^{N_2}$ оказываются меньше равновесного. При уменьшении T заметно влияние составного распределения на коэффициенты скорости (кривая 1), с ростом T это влияние уменьшается и кривые 1, 2 совпадают. Коэффициенты, осредненные по составному и триноровскому распределениям, изменяются с ростом T немонотонно и превосходят коэффициент, осредненный по неравновесному больцмановскому распределению (кривая 3).

В Главе 3 течения ударно нагретого воздуха численно исследованы в трехтемпературном приближении с учетом неравновесных колебательных распределений Тринора и составного (ангармонических осцилляторов), Больцмана (гармонических осцилляторов), а также в рамках однотемпературной модели химически неравновесной смеси.

В п. 3.1 приведена система уравнений, описывающих изменение макропараметров течения в релаксационной зоне и условия на фронте ударной волны.

В соответствии с данными о временах релаксации разных процессов в воздухе считается, что внутри фронта ударной волны происходит быстрая релаксация поступательных, вращательных степеней свободы, а также обмены колебательными квантами между молекулами одного и того же сорта, приводящие к установлению распределений Тринора непосредственно за фронтом ударной волны:

$$n_{ci}(T, T_1^c) = \frac{n_c}{Z_c^{vibr}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^c - i\varepsilon_1^c}{kT} - \frac{i\varepsilon_1^c}{kT_1^c}\right), \quad c = N_2, O_2, \quad (1)$$

здесь n_{ci} – заселенности колебательных уровней молекул сорта c , n_c – числовые плотности, T , T_1^c – температура первого колебательного уровня молекул сорта c , Z_c^{vibr} – колебательная статистическая сумма.

Более медленные обмены колебательными энергиями между молекулами разных сортов, обмены колебательной и поступательной энергией и химиче-

ские реакции внутри ударного фронта предполагаются замороженными.

Рассматриваются одномерные стационарные течения пятикомпонентного воздуха за прямой ударной волной. В трехтемпературном приближении система уравнений для макропараметров течения $n_{N_2}(x), n_{O_2}(x), n_{NO}(x), n_N(x), n_O(x)$ (числовые плотности), $T(x), v(x)$ (скорость), $T_1^{N_2}(x)$ и $T_1^{O_2}(x)$ приводится к виду:

$$\frac{d(n_{N_2}v)}{dx} = R_{N_2}^{2\leftrightarrow 2} + R_{N_2}^{2\leftrightarrow 3}, \quad \frac{d(n_{O_2}v)}{dx} = R_{O_2}^{2\leftrightarrow 2} + R_{O_2}^{2\leftrightarrow 3}, \quad (2)$$

$$\frac{d(n_{NO}v)}{dx} = -R_{N_2}^{2\leftrightarrow 2} - R_{O_2}^{2\leftrightarrow 2} + R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \quad (3)$$

$$\frac{d(n_Nv)}{dx} = -R_{N_2}^{2\leftrightarrow 2} + R_{O_2}^{2\leftrightarrow 2} - 2R_{N_2}^{2\leftrightarrow 3} + R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \quad (4)$$

$$\frac{d(n_Ov)}{dx} = R_{N_2}^{2\leftrightarrow 2} - R_{O_2}^{2\leftrightarrow 2} - 2R_{O_2}^{2\leftrightarrow 3} + R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \quad (5)$$

$$\frac{d(\rho_{N_2}W_{N_2}v)}{dx} = R_{N_2}^W, \quad \frac{d(\rho_{O_2}W_{O_2}v)}{dx} = R_{O_2}^W, \quad (6)$$

$$\rho v^2 + p = \rho^{(0)}v^{(0)2} + p^{(0)}, \quad h + \frac{v^2}{2} = h^{(0)} + \frac{v^{(0)2}}{2}, \quad (7)$$

где релаксационные члены $R_c^{2\leftrightarrow 2}, R_c^{2\leftrightarrow 3}$ описывают химические реакции обмена, диссоциации и рекомбинации, R_c^W характеризуют изменение средних чисел колебательных квантов W_c молекул сорта c :

$$W_c(T, T_1^c) = \frac{1}{\rho_c} \sum_i i n_{ci}(T, T_1^c), \quad c = N_2, O_2. \quad (8)$$

В расчетах заселенности колебательных уровней молекул в релаксационной зоне описываются распределениями Тринора, двухтемпературным составным распределением, равновесным больцмановским распределением с температурой газа и неравновесным распределением Больцмана с колебательной температурой $T_v^c = T_1^c$, через x обозначено расстояние от фронта ударной волны, индекс (0) обозначает параметры перед ударным фронтом, h – энтальпия единицы массы, ρ, ρ_c – плотность воздуха и компоненты c . Заселенности уровней молекул в равновесном набегающем потоке описываются распределениями Больцмана с температурой $T^{(0)}$.

Значения макропараметров непосредственно за ударным фронтом находятся из условий сохранения массы, импульса, энергии и общего числа колебательных квантов молекул азота и молекул кислорода с учетом постоянного состава смеси:

$$\rho^{(1)}v^{(1)} = \rho^{(0)}v^{(0)}, \quad \rho^{(1)}v^{(1)^2} + p^{(1)} = \rho^{(0)}v^{(0)^2} + p^{(0)}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{7}{2}RT^{(1)} \left(\frac{1}{\mu_{N_2}} + \frac{1}{\mu_{O_2}} \right) + \frac{1}{\rho_{N_2}^{(1)}} \sum_i \varepsilon_i^{N_2} n_{N_2i}(T^{(1)}, T_1^{N_2(1)}) + \\ + \frac{1}{\rho_{O_2}^{(1)}} \sum_i \varepsilon_i^{O_2} n_{O_2i}(T^{(1)}, T_1^{O_2(1)}) + \frac{v^{(1)^2}}{2} = \frac{7}{2}RT^{(0)} \left(\frac{1}{\mu_{N_2}} + \frac{1}{\mu_{O_2}} \right) + \\ + \frac{1}{\rho_{N_2}^{(0)}} \sum_i \varepsilon_i^{N_2} n_{N_2i}(T^{(0)}) + \frac{1}{\rho_{O_2}^{(0)}} \sum_i \varepsilon_i^{O_2} n_{O_2i}(T^{(0)}) + \frac{v^{(0)^2}}{2}, \quad (10) \end{aligned}$$

$$n_{N_2}^{(1)}v^{(1)}W_{N_2}(T^{(1)}, T_1^{N_2(1)}) = n_{N_2}^{(0)}v^{(0)}W_{N_2}(T^{(0)}, T_1^{N_2(0)}), \quad (11)$$

$$n_{O_2}^{(1)}v^{(1)}W_{O_2}(T^{(1)}, T_1^{O_2(1)}) = n_{O_2}^{(0)}v^{(0)}W_{O_2}(T^{(0)}, T_1^{O_2(0)}). \quad (12)$$

Индекс (1) обозначает значения параметров непосредственно за фронтом ударной волны.

В п.3.2 приведены результаты расчетов макропараметров потока воздуха в релаксационной зоне за ударными волнами. Задача решалась при условиях в набегающем потоке, соответствующих высоте 48 км: $T^{(0)} = 271$ К, $p^{(0)} = 100$ Па, при числах Маха $M^{(0)} = 16, 13, 10$ и химическом составе $n_{N_2}^{(0)} = 0.79n^{(0)}$, $n_{O_2}^{(0)} = 0.21n^{(0)}$ ($n^{(0)}$ – общая числовая плотность смеси в набегающем потоке). В п.3.2.1 приводится сравнение результатов, полученных в трехтемпературном и одготемпературном приближениях, с учетом и без учета ангармоничности колебаний молекул при разных числах M . Показано влияние колебательных распределений и моделей переходов энергии и химических реакций на параметры воздуха за ударной волной.

На рисунках 2а,б показано изменение температуры T и скорости потока в релаксационной зоне при числах Маха $M = 16, 13, 10$ в трехтемпературном и одготемпературном приближениях. Использование одготемпературного приближения приводит к недооценке температуры и скорости в релаксационной зоне, что проявляется более заметно при больших числах Маха. Это связано

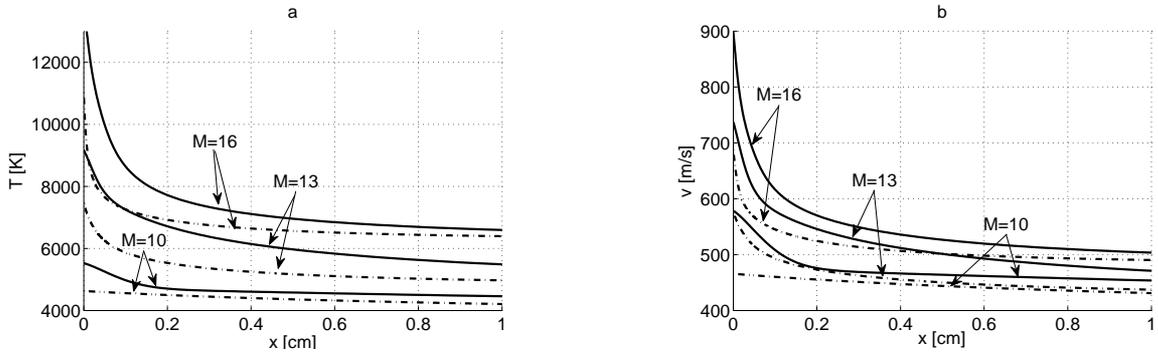


Рис. 2: Зависимость температуры воздуха T (а) и скорости v (б) от x . При использовании распределения Тринора (—), распределения Больцмана анг. осц. (— · —).

с тем, что при однотемпературном описании колебательная релаксация является быстрым процессом и переход поступательной энергии в колебательную происходит уже внутри ударного фронта. Разница между значениями температуры, найденными в трехтемпературном и однотемпературном приближениях, достигает 19.9% при $M = 16$, а недооценка скорости в однотемпературном приближении достигает 23.85%. Расчеты показали, что пренебрежение ангармоничностью колебаний приводит в начале релаксационной зоны к завышенным, а затем (с ростом x) заниженным значениям температуры газа, а также к недооценке колебательных температур $T_1^{N_2}$ и $T_1^{O_2}$. Также следует отметить, что в случае равновесного набегающего потока значения параметров в релаксационной зоне, полученные на основе распределений Тринора и сильнонеравновесного составного распределения, практически совпадают. Поэтому распределение Тринора может быть рекомендовано для моделирования течений воздуха за ударными волнами, возникающими в равновесном набегающем потоке.

Представлено сравнение параметров воздуха за ударным фронтом, полученных в диссертации в рамках трехтемпературного приближения и при использовании детального поуровневого описания. Температура в квазистационарных приближениях уменьшается быстрее, чем в поуровневом. Недооценка значений температуры при использовании трехтемпературного приближения в рассмотренных условиях не превосходит 3%. Эти результаты подтверждают, что использование распределения Тринора приводит к удовлетворительной точности при определении параметров воздуха за ударными волнами.

Приведено сравнение значений макропараметров, полученных при исполь-

зовании пяти моделей обменных химических реакций, рассмотренных в главе 2, и четырех моделей переходов колебательной энергии: обобщенной модели Шварца, Славского, Герцфельда SSH, модели нагруженного гармонического осциллятора FHO и аппроксимационных формул Капителли. Также в расчетах использовалась классическая формула Ландау-Теллера LT для изменения колебательной энергии, в которой время релаксации вычислялось по формуле Милликена-Уайта, для коэффициентов скорости диссоциации использовалась модель Тринора-Маррона.

Задача о течении воздуха за ударной волной решена как при условии равновесных распределений молекул азота и кислорода перед ударным фронтом, так и с учетом колебательного возбуждения молекул набегающего потока. Изучено влияние колебательного возбуждения молекул воздуха перед фронтом ударной волны на изменение параметров в релаксационной зоне. Эффект начального колебательного возбуждения ранее обсуждался Осиповым, Уваровым при изучении газодинамических процессов за ударным фронтом в однокомпонентном газе. Особенности поуровневой колебательной и химической кинетики в воздухе за ударными волнами, возникающими в неравновесном набегающем потоке, исследованы в работах Куновой, Нагнибеда. В настоящей диссертации этот эффект рассмотрен в рамках трехтемпературного описания.

Результаты были получены при $M^{(0)} = 10$, $p^{(0)} = 100\text{Па}$, $T^{(0)} = 271\text{К}$ при четырех условиях для колебательных температур молекул набегающего потока: (1) $T_1^{N_2^{(0)}} = 8000\text{К}$, $T_1^{O_2^{(0)}} = 4000\text{К}$, (2) $T_1^{N_2^{(0)}} = 4000\text{К}$, $T_1^{O_2^{(0)}} = 8000\text{К}$ – сильное колебательное возбуждение; (3) $T_1^{N_2^{(0)}} = 2400\text{К}$, $T_1^{O_2^{(0)}} = 1150\text{К}$ – умеренное колебательное возбуждение; (4) $T_1^{N_2^{(0)}} = T_1^{O_2^{(0)}} = T^{(0)}$ – равновесный набегающий поток. Учитывая, что рассматриваются условия сильного возбуждения при колебательных температурах, значительно превосходящих температуру газа перед ударным фронтом, заселенности колебательных уровней в набегающем потоке и за фронтом волны описывались составными распределениями, рассмотренными в гл. 1.

На рисунке 3 показано изменение температуры газа в зависимости от расстояния x за фронтом ударной волны в четырех случаях. В случае равновесного набегающего потока (кривая 4) и умеренного колебательного возбужде-

ния молекул перед ударным фронтом (кривая 3) температура уменьшается с ростом x за счет переходов поступательной энергии в колебательную и химических реакций. Значительное возбуждение молекул набегающего потока приводит к существенному изменению температуры за фронтом ударной волны (кривые 1 и 2). Суммарная колебательная энергия молекул N_2 и O_2 непосредственно за фронтом ударной волны оказывается в этом случае больше поступательной. Переход колебательной энергии в поступательную приводит к немонотонному изменению температуры в релаксационной зоне, сначала она возрастает вблизи фронта, а с уменьшением колебательной энергии и с протеканием химических реакций температура газа уменьшается. Температура газа уменьшается в релаксационной зоне значительно медленнее в случае колебательного возбуждения молекул в набегающем потоке, чем в случае равновесного набегающего потока.

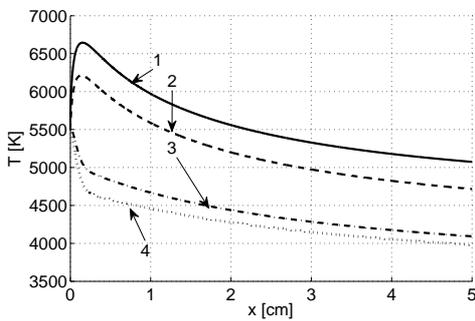


Рис. 3: Температура T в зависимости от x . (1) – $T_1^{N_2(0)} = 8000\text{K}$, $T_1^{O_2(0)} = 4000\text{K}$, (2) – $T_1^{N_2(0)} = 4000\text{K}$, $T_1^{O_2(0)} = 8000\text{K}$, (3) – $T_1^{N_2(0)} = 2400\text{K}$, $T_1^{O_2(0)} = 1150\text{K}$, (4) – $T_1^{N_2(0)} = T_1^{O_2(0)} = T^{(0)}$.

и показано сравнение значений, полученных в расчетах и в эксперименте. В набегающем потоке рассматриваются условия: (1) $M = 9.3$, $v^{(0)} = 3070$ м/с, $T^{(0)} = 295$ К, $p^{(0)} = 2$ торр; (2) $M = 13.4$, $v^{(0)} = 4440$ м/с, $T^{(0)} = 295$ К, $p^{(0)} = 0.8$ торр.

В численных расчетах для вычисления релаксационных членов R^W в уравнениях использовались три модели: 1) SSH, 2) LT, 3) FHO.

На рисунке 4а,б представлены значения колебательной температуры $T_1^{O_2}$ в зависимости от x и от значений $T^{(1)}$ непосредственно за ударным фронтом.

Проведение экспериментов по исследованию зоны релаксации за ударными волнами при больших скоростях в воздухе затруднительно на сегодняшний день, эксперименты в основном проводятся в чистом кислороде или в смеси с инертным газом. В статье Ибрагимовой и соавторов (2013) представлены экспериментальные данные, полученные для смеси O_2/O . Для валидации моделей, рассмотренных в диссертации, были проведены расчеты колебательной температуры кислорода в условиях эксперимента

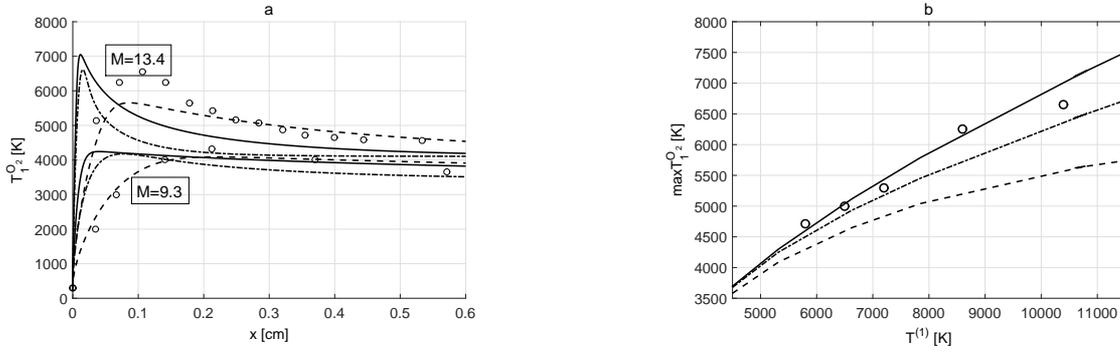


Рис. 4: Зависимость $T_1^{O_2}$ от x (а) и зависимость $T_1^{O_2}$ от температуры $T^{(1)}$ непосредственно за фронтом ударной волны (б): экспериментальные данные (о), модель SSH (—), модель FHO (---), модель LT (-·-).

Колебательные температуры, полученные по моделям SSH (сплошная линия) и LT (штрих-пунктир), достигают максимума значительно быстрее по сравнению с экспериментом (рис. 4а). Лучшее согласие с экспериментальными результатами при определении положения максимума $T_1^{O_2}$ дает FHO модель (штриховая линия). При $M = 9.3$ колебательные температуры, полученные на основе модели FHO и в эксперименте, практически совпадают.

На рисунке 4б представлены максимальные значения колебательной температуры в релаксационной зоне в зависимости от температуры непосредственно за ударной волной $T^{(1)}$. Видно, что наилучшее согласие при определении максимальных значений $T_1^{O_2}$ с экспериментальными данными дает SSH модель. Модели FHO и LT дают заниженные значения максимумов колебательной температуры $T_1^{O_2}$.

В Заключение кратко сформулированы основные результаты диссертационной работы, которые сводятся к следующему:

1. Разработаны четырехтемпературная и трехтемпературные модели для описания неравновесных процессов в высокотемпературном пятикомпонентном воздухе $N_2/O_2/NO/N/O$ с учетом диссоциации, рекомбинации, обменных химических реакций и переходов колебательной энергии. Модели основаны на колебательных распределениях, справедливых в разных условиях неравновесности.
2. Детально исследованы двухтемпературные коэффициенты скорости обменных реакций Зельдовича, показано влияние колебательных распределений на эти коэффициенты. Введены уровневые и двухтемпературные факто-

ры неравновесности для реакций обмена, представлены результаты расчетов неравновесных факторов и коэффициентов скорости реакций в разных температурных условиях.

3. На основе трехтемпературного описания разработан программный код и численно решена задача о течении пятикомпонентного воздуха за ударными волнами, возникающими в равновесном и колебательно возбужденном газе. На основе полученных результатов показано: влияние колебательных распределений на макропараметры смеси в релаксационной зоне; влияние моделей переходов колебательной энергии и химических реакций на макропараметры; влияние условий в набегающем потоке на изменение температуры, скорости потока, состава воздуха и колебательных температур молекул азота и кислорода в релаксационной зоне за ударным фронтом. Приведены оценки влияния эффектов ангармоничности молекул на параметры потока и скорость релаксации.

4. Показано удовлетворительное согласие результатов, полученных в трехтемпературном и поуровневом приближениях. Использование одготемпературной модели приводит к существенным отличиям значений макропараметров и времени релаксации от полученных в трехтемпературном приближении.

5. Решена задача о течении бинарных смесей N_2/N и O_2/O за ударными волнами, показано значительное различие результатов, найденных для пятикомпонентного воздуха и бинарных смесей.

6. Проведено сравнение полученных в диссертации численных результатов для релаксирующего ударно нагретого кислорода с данными экспериментов на ударных трубах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант N 15-01-02373, и СПбГУ, НИР 6.37.163.2014.

Список работ по теме диссертации

1. *Kunova O.V., Nagnibeda E.A., Sharafutdinov I.Z.* State-to-state and simplified models for shock heated reacting air flows // AIP Conference Proceedings, 2014. Vol. 1628, № 1. P. 1194-1201. (SCOPUS)
2. *Шарафутдинов И.З.* Многотемпературная колебательная и химическая кинетика в

- воздухе за ударными волнами // Вестник Московского Государственного Областного университета. серия: физика-математика, 2014. № 4. С. 80-93. **(Из перечня ВАК)**
3. *Sharafutdinov I. Z.* Two-Temperature Rate Coefficients of Chemical Reactions in Shock Heated Air // 2015 International Conference on Mechanics - Seventh Polyakhov's Reading, 2015. Article number 7106778.
doi: 10.1109/polyakhov.2015.7106774 **(SCOPUS)**
 4. *Kustova E., Nagnibeda E., Oblapenko G., Savelev A., Sharafutdinov I.* Advanced models for vibrational-chemical coupling in multi-temperature flows // Chemical Physics, 2016. Vol. 464, P. 1-13. **(SCOPUS)**
 5. *Нагнибеда Е.А., Шарафутдинов И.З.* Химическая кинетика в пяти-компонентной воздушной смеси // Избранные труды международной научной конференции по механике, Шестые Поляховские чтения, 2012. С. 224-231.
 6. *Нагнибеда Е.А., Шарафутдинов И.З.* Химическая кинетика в пяти-компонентной воздушной смеси // Тезисы докладов Международной конференции по механике "Шестые Поляховские чтения". г. Санкт-Петербург, 2012. С. 303, стр. 166.
 7. *Кунова О.В., Нагнибеда Е.А., Шарафутдинов И.З.* Неравновесная колебательная и химическая кинетика в потоках воздуха за сильными ударными волнами // Всероссийская конференция с участием иностранных ученых "Современные проблемы динамики разреженных газов". Новосибирск, 2013. С. 127-129
 8. *Kunova O.V., Nagnibeda E.A., Sharafutdinov I.Z.* State-to-state and simplified models for shock heated reacting air flows // Abstract book of 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics — Xi'an, China, 2014. P. 285-286.
 9. *Kunova O.V., Nagnibeda E.A., Sharafutdinov I.Z.* Vibrational-chemical coupling in air flows behind shock waves // 21st International Shock Interaction Symposium. Book of proceedings. Riga, Latvia, 2014. P. 179-184.
 10. *Нагнибеда Е. А., Шарафутдинов И. З.* Трехтемпературное описание течений ударно нагретого воздуха // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2015. Т. 16.
 11. *Кустова Е. В., Облапенко Г. П., Шарафутдинов И. З.* Модели колебательной релаксации в неравновесных многотемпературных течениях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2015. Т. 16.

12. *Нагнибеда Е. А., Шарафутдинов И. З.* Трехтемпературная модель неравновесной кинетики в потоках воздуха за ударными волнами // Струйные, отрывные и нестационарные течения. Тезисы докладов XXIV Всероссийского семинара с международным участием — г. Новосибирск, 2015. — С. 117-118.
13. *Шарафутдинов И.З.* Двухтемпературные скорости химических реакций в ударно нагретом воздухе // Международная конференция по механике "Седьмые Поляховские чтения". Сборник тезисов. г. Санкт-Петербург, 2015. С. 151
14. *Нагнибеда Е. А., Шарафутдинов И. З.* Трехтемпературная модель неравновесной кинетики в потоках воздуха за ударными волнами // Струйные, отрывные и нестационарные течения. Тезисы докладов XXIV Всероссийского семинара с международным участием — г. Новосибирск, 2015. — С. 117-118.
15. *Нагнибеда Е. А. , Шарафутдинов И. З.* Трехтемпературное описание течений воздуха за ударными волнами, возникающими в неравновесном потоке. // Материалы XI Международной конференции по Неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016), 25-31 мая 2016 г., Алушта., 2016. С. 148-150
16. *Шарафутдинов И.З.* Программа для расчета параметров воздуха за ударными волнами (MTFBSW). Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2016613228, программа зарегистрирована 21 марта 2016 г.