

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ОБЛАПЕНКО Георгий Павлович

СКОРОСТЬ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ В
ВЯЗКИХ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЯХ ГАЗОВ

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2017

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
доцент КУСТОВА Елена Владимировна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Уваров Александр Викторович,
Московский государственный университет
им. М.В. Ломоносова
профессор кафедры молекулярных процессов
и экстремальных состояний вещества

доктор физико-математических наук,
профессор Кузнецов Михаил Михайлович,
Московский государственный областной
университет
профессор кафедры теоретической физики

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

Защита диссертации состоится “20” апреля 2017 года в 16 часов на засе-
дании совета Д 212.232.30 на базе Санкт-Петербургского государственного
университета по адресу: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Уни-
верситетский пр., д. 28, математико-механический факультет, ауд. 405.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. М. Горь-
кого Санкт-Петербургского государственного университета по ад-
ресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9 и на
сайте [http://spbu.ru/science/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dis-
list/details/14/1297.html](http://spbu.ru/science/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dislist/details/14/1297.html)

Автореферат разослан “___” _____ 2017 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Е.В. Кустова

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Проектирование современных высокоскоростных летательных аппаратов требует детального исследования их аэротермодинамических характеристик при полетах со сверх- и гиперзвуковыми скоростями. Перед аппаратом образуется головная ударная волна, в результате газ в области точки торможения находится в состоянии, далеком от термического и химического равновесия. В разреженных газах зоны колебательной и химической неравновесности могут быть сравнимы с характерными масштабами течения; эффекты реального газа заметно влияют на параметры течения и тепловые потоки на поверхности аппарата. В связи с этим важно исследовать влияние колебательной релаксации, а также совместное влияние колебательной релаксации и диссоциации на аэротермодинамические характеристики аппарата. Экспериментальные исследования в условиях гиперзвукового полета достаточно сложны, поэтому основным инструментом в настоящее время является численное моделирование неравновесных течений, требующее разработки точных моделей скорости физико-химических процессов в вязких газах.

Таким образом, актуальность темы в первую очередь обусловлена необходимостью точного расчета газодинамических параметров сильнонеравновесных течений для корректного моделирования полетов с гиперзвуковой скоростью и входа космических летательных аппаратов в атмосферу планет. Кроме того, для инженерных приложений актуальной является оценка границ применимости упрощенных моделей скорости физико-химических процессов, обычно применяемых при расчете неравновесных течений.

Правильное описание скорости физико-химической релаксации также важно для моделирования процессов в активной среде газодинамических лазеров, потоков в соплах реактивных двигателей, течений в ударных трубах. Построение самосогласованной модели скорости физико-химических процессов, учитывающей эффекты реального вязкого газа, необходимо и для повышения точности интерпретации экспериментальных данных по определению коэффициентов скорости неравновесных процессов.

Цель работы

1. Построение замкнутой самосогласованной модели скорости физико-химических процессов в смесях вязких газов с учетом колебательной и химической неравновесности.
2. Исследование влияния параметров газа, ангармоничности молекулярных колебаний и степени отклонения от равновесия на скорость физико-химических процессов в смесях вязких газов.
3. Изучение скорости физико-химической релаксации в течениях за

ударными волнами и в соплах, оценка роли перекрестных эффектов, связанных с взаимным влиянием колебательной релаксации и диссоциации.

4. Установление пределов применимости существующих моделей физико-химической релаксации.
5. Реализация поуровневых моделей колебательной релаксации в методе прямого статистического моделирования (ПСМ), исследование их влияния на параметры газа в задаче двумерного обтекания тел.

Научная новизна

1. Построена замкнутая самосогласованная модель и разработан алгоритм расчета скорости физико-химических процессов в смесях вязких газов с колебательной и химической неравновесностью в многотемпературном приближении, учтены перекрестные эффекты между различными физико-химическими процессами и влияние дивергенции скорости потока на скорость физико-химической релаксации.
2. Получен аналог формулы Ландау–Теллера для скорости колебательной релаксации, дающий лучшее согласие с результатами точных расчетов в условиях сильной колебательной неравновесности.
3. На основании кинетической теории газов разработан метод расчета времени колебательной релаксации, дающий корректное описание его поведения при высоких температурах; метод позволяет рассчитывать время колебательной релаксации для любых квазистационарных распределений молекул по уровням колебательной энергии и может применяться как для гармонических, так и ангармонических колебаний.
4. Проведено систематическое исследование скорости физико-химической релаксации в многотемпературных течениях смесей вязких газов в широком диапазоне условий; впервые проведены оценки перекрестных эффектов между колебательной релаксацией и диссоциацией в вязком газе; оценено влияние ангармоничности колебаний, состава смеси, степени отклонения от равновесия на скорость физико-химических процессов.
5. В рамках метода ПСМ изучено влияние поуровневых моделей колебательных переходов на параметры газа при обтекании двумерных тел; исследована роль многоквантовых переходов в процессе колебательной релаксации пространственно однородного газа и при обтекании двумерных тел.

Научная ценность

1. Построена самосогласованная теоретическая модель скорости физико-химических процессов в вязких неравновесных течениях

смесей газов в многотемпературном приближении; обнаружены перекрестные эффекты между скоростями различных неравновесных физико-химических процессов и диагональными членами тензора напряжений; для многотемпературных течений доказаны соотношения взаимности Онзагера–Казимира для кинетических коэффициентов при скалярных термодинамических силах.

2. Исследована скорость физико-химических процессов в различных смесях при различных неравновесных условиях; оценено взаимное влияние колебательной релаксации и диссоциации; изучено влияние ангармоничности колебаний на скорость релаксации в первом приближении метода Энскога–Чепмена.
3. Исследовано влияние многоквантовых колебательных переходов на обтекание двумерных тел.

Практическая значимость

1. Разработаны и реализованы алгоритмы расчета скорости физико-химической релаксации в вязких газах в многотемпературном приближении.
2. Получено обобщение формулы Ландау–Теллера на случай сильной колебательной неравновесности; уточненная формула может быть рекомендована для проведения инженерных расчетов.
3. Реализован метод расчета времени колебательной релаксации.
4. Реализованы поуровневые модели колебательной релаксации в методе ПСМ.
5. Установлены пределы применимости упрощенных моделей времени колебательной релаксации и скорости диссоциации, даны рекомендации по выбору моделей в различных неравновесных условиях.

Достоверность результатов обеспечена применением строгих подходов кинетической теории газов; использованием современных моделей межмолекулярного взаимодействия для расчета интегралов столкновений, вероятностей переходов и коэффициентов скорости физико-химических процессов; согласованием результатов расчетов с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Положения, выносимые на защиту

1. Замкнутая самосогласованная модель скорости физико-химических процессов в течениях смесей вязких газов с колебательной и химической неравновесностью в многотемпературном приближении с учетом ангармоничности молекулярных колебаний.

2. Обобщение формулы Ландау–Теллера для условий сильной колебательной неравновесности и оценка пределов применимости оригинальной и обобщенной формул.
3. Алгоритм расчета времени колебательной релаксации в газе с произвольными квазистационарными распределениям; результаты расчета времени колебательной релаксации в азоте и кислороде с использованием современных моделей сечений неупругих процессов для гармонических и ангармонических колебаний.
4. Результаты исследования взаимного влияния колебательной релаксации, химических реакций и сжимаемости газа в вязких неравновесных течениях смесей газов за ударными волнами и в соплах; сжимаемость газа (дивергенция скорости потока) слабо влияет на скорость релаксации; поправки первого порядка к скорости физико-химических процессов в кислороде играют более важную роль, чем в азоте; перекрестные эффекты в расширяющихся течениях пренебрежимо малы.
5. Программная реализация поуровневых моделей колебательной релаксации в методе прямого статистического моделирования. Результаты расчета обтекания двумерных тел с использованием поуровневых моделей.

Апробация работы. Результаты, представленные в диссертации, докладывались на следующих Всероссийских и международных конференциях: Всероссийская конференция с участием иностранных ученых “Современные проблемы динамики разреженных газов” (Новосибирск, 2013); 29 и 30 Международный симпозиумы по динамике разреженного газа (Китай, 2014; Канада, 2016); 8-10 Всероссийская школа-семинар “Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем” (Москва, 2014, 2015, 2016); Международная конференция по механике “Седьмые Поляховские чтения” (Санкт-Петербург, 2015); XXIII Всероссийский семинар с международным участием по струйным, отрывным и нестационарным течениям (Новосибирск, 2015). Результаты также докладывались на научных семинарах кафедры гидроаэромеханики Санкт-Петербургского государственного университета.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1]-[14] (см. Приложение), из них 8 в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК.

В работах [1-3, 5, 8, 9, 11-14] Кустовой Е.В. принадлежит общая постановка задачи и разработка методов кинетической теории, остальные результаты (разработка алгоритмов, проведение расчетов скорости физико-химических процессов, анализ результатов) принадлежат автору. В работе

[4] автору принадлежит обобщение формулы Ландау–Теллера и разработка метода расчета времен VT релаксации; Кустовой Е.В. и Нагнибеда Е.А. принадлежит идея исследования, постановка задачи и обобщение метода Энскога–Чепмена; Савельеву А.С. — обобщение модели Тринора–Маррона; Шарафутдинову И.З. — расчет параметров течения за фронтом ударной волны. В работе [6] автору принадлежит разработка и исследование применимости упрощенных моделей колебательной релаксации; Бондарю Е.А. — общая идея исследования и постановка задачи, Кустовой Е.В. — разработка алгоритмов расчета коэффициентов переноса; Шоеву Г.В. — реализация разработанных моделей в ANSYS Fluent и анализ результатов. В работе [7] Кустовой Е.В. принадлежит идея исследования; Байкову Б.С. и Баялиной Д.К. — метод расчета сечений переходов колебательной энергии и диссоциации; автором проведены расчеты сечений переходов колебательной энергии по существующим моделям. В работе [10] автором выполнен расчет времен колебательной релаксации по различным моделям, разработаны упрощенные модели колебательной релаксации; Кустовой Е.В. принадлежит идея исследования. Шарафутдиновым И.З. проведен расчет параметров течения за ударной волной и анализ результатов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, приложения и списка литературы из 183 наименований. Общий объем диссертации составляет 147 страниц, включая 32 рисунка и 8 таблиц.

Содержание работы

Во **введении** кратко описано современное состояние изучаемой проблемы, обоснована ее актуальность. Сформулированы цели работы, обозначена научная новизна, теоретическая ценность и практическая значимость полученных результатов, перечислены положения, выносимые на защиту.

В **Главе 1** вводятся основные определения и описывается модификация метода Энскога–Чепмена для построения замкнутого описания течения неравновесной реагирующей смеси газов с быстрыми и медленными процессами. Учитываются вращательные и колебательные степени свободы молекул, ангармонические и гармонические колебания молекул. Рассматриваются столкновения с переходами всех видов внутренней энергии и произвольными химическими реакциями. Течения неравновесных смесей газов рассматриваются в многотемпературном приближении, справедливом при следующем соотношении между характерными временами процессов:

$$\tau_{el} < \tau_{rot} < \tau_{VV_1} \ll \tau_{VV_2} < \tau_{VT} < \tau_{react} \sim \theta, \quad (1)$$

τ_{el} , τ_{rot} — характерные времена поступательной и вращательной релаксации, τ_{VV_1} , τ_{VV_2} — средние времена между столкновениями с VV-обменами колебательной энергией между молекулами одного сорта и разных сортов, τ_{VT} — время VT релаксации, τ_{react} — время химической релаксации, θ — характерное время изменения макроскопических параметров газа.

В безразмерном виде система обобщенных кинетических уравнений для функции распределения может быть записана следующим образом:

$$\frac{\partial f_{cij}}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla f_{cij} = \frac{1}{\varepsilon} J_{cij}^{rap} + J_{cij}^{sl}, \quad (2)$$

где $\varepsilon = \tau_{rap}/\tau_{sl} \sim \tau_{el}/\theta \ll 1$ — малый параметр, τ_{rap} , τ_{sl} — характерные времена быстрых и медленных процессов соответственно, f_{cij} — одночастичная функция распределения по скоростям молекул смеси разреженных газов химического сорта c , находящихся на i -м колебательном и j -м вращательном уровнях, \mathbf{u}_c — скорость частиц сорта c , J_{cij}^{rap} , J_{cij}^{sl} — интегральные операторы быстрых и медленных процессов соответственно. Приближенное решение уравнений (2) строится с помощью обобщенного метода Энского-Чепмена.

Оператор медленных процессов J_{cij}^{sl} может быть представлен как сумма столкновительных операторов отдельных неупругих процессов:

$$J_{cij}^{sl} = \sum_{\gamma} \sum_r^{N_{\gamma}} \nu_{r,ci} J_{cij}^{\gamma,r}, \quad (3)$$

где γ — тип неупругого медленного процесса, r — конкретный процесс данного типа γ , N_{γ} — число процессов типа γ , $J_{cij}^{\gamma,r}$ — столкновительный оператор процесса r , $\nu_{r,ci}$ — глобальный стехиометрический коэффициент. Скорость процесса r определяется следующим образом:

$$\dot{\xi}_r = \frac{1}{N_a} \sum_j \int J_{cij}^r d\mathbf{u}_c, \quad (4)$$

где N_a — число Авогадро.

Система уравнений переноса включает в себя уравнения химической кинетики, уравнение движения, уравнение энергии и уравнения колебательной релаксации. Релаксационные члены, входящие в уравнения химической кинетики и колебательной релаксации могут быть выражены через скорость соответствующих процессов $\dot{\xi}_r$.

В нулевом приближении метода Энского-Чепмена, соответствующем уравнениям Эйлера для невязкого нетеплопроводного газа, функция распределения имеет вид распределения Максвелла-Больцмана по скорости

и вращательной энергии и распределения Тринора по колебательной энергии. Скорость процесса r линейно зависит от соответствующего коэффициента скорости процесса $k_r^{(0)}$ и обобщенной термодинамической силы Γ^r :

$$\dot{\xi}_r^{(0)} = \Gamma^r k_r^{(0)} \prod_{c=1}^L \prod_{i=1}^{L_c} \left(\frac{n_{ci}}{N_a} \right)^{\nu_{r,ci}^{(r)}}. \quad (5)$$

Здесь n_{ci} — заселенность i -го колебательного уровня молекул сорта c , L — число химических сортов в смеси, L_c — число колебательных уровней у молекул сорта c , $\nu_{r,ci}^{(r)}$ — стехиометрический коэффициент реагентов. Обобщенные термодинамические силы определяются следующей формулой:

$$\Gamma^r = 1 - \exp\left(-\frac{A_r}{kT}\right), \quad (6)$$

где k — постоянная Больцмана, T — температура, а A_r — аналоги сродства химических реакций, обобщенные на случай колебательной неравновесности. Так, например, величина $A_{2\rightleftharpoons 3,r}$, описывающая реакции диссоциации-рекомбинации, имеет вид

$$A_{2\rightleftharpoons 3,r} = \frac{3}{2}kT \ln \frac{m_c}{m_{c',a}m_{f',a}} - \frac{3}{2} \ln(2\pi kT) + 3kT \ln h + kT \ln Z_c^{int} - \\ - kT \ln \frac{n_c}{n_{c',a}n_{f',a}} + \varepsilon_{c',a} + \varepsilon_{f',a} - \varepsilon_c - \varepsilon_0^c + i\varepsilon_1^c \left(\frac{T}{T_1^c} - 1 \right), \quad (7)$$

где T_1^c — температура первого колебательного уровня молекул сорта c , m_c — масса частиц сорта c , n_c — числовая плотность частиц сорта c , Z_c^{int} — неравновесная статистическая сумма по внутренним степеням свободы, ε_i^c — энергия i -го колебательного уровня молекул сорта c , а c', a и f', a обозначают атомарные продукты реакций диссоциации.

В первом (вязком) приближении метода Энскога-Чепмена $\dot{\xi}_r = \dot{\xi}_r^{(0)} + \dot{\xi}_r^{(1)}$. Для поправки первого порядка к скорости физико-химических процессов $\dot{\xi}_r^{(1)}$ было получено следующее выражение:

$$\dot{\xi}_r^{(1)} = kT \sum_s l_{r,s} \Gamma^s - l_{r,v} \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (8)$$

где $l_{r,s}$, $l_{r,v}$ — кинетические коэффициенты, \mathbf{v} — скорость потока. Видно, что скорость физико-химических процессов зависит от обобщенных термодинамических сил Γ^r и дивергенции скорости потока $\nabla \cdot \mathbf{v}$; при этом в первом приближении метода Энскога-Чепмена медленные процессы не являются независимыми. Показано, что поправки первого порядка к скорости

физико-химических процессов и нормальным напряжениям удовлетворяют соотношениям взаимности Онзагера–Казимира.

Для кинетических коэффициентов $l_{r,s}$, $l_{r,v}$ из интегральных уравнений получены системы линейных алгебраических уравнений, позволяющие вычислить поправки первого порядка к скорости физико-химических процессов.

В п. 1.4 рассматриваются течения, в которых колебательный спектр молекул моделируется гармоническим осциллятором.

Было проведено сравнение строгих теоретических формул, полученных для релаксационных членов $R_c^{vibr,VT}$, описывающих скорость колебательной релаксации за счет VT переходов, с широко используемой в прикладных расчетах формулой Ландау–Теллера:

$$R_c^{vibr,VT} = \rho_c \frac{E_{vibr,c}^{eq}(T) - E_{vibr,c}(T_v^c)}{\tau_c^{VT}}. \quad (9)$$

Здесь ρ_c — плотность молекул сорта c , $E_{vibr,c}(T_v^c)$ — колебательная энергия молекул сорта c , а $E_{vibr,c}^{eq}(T)$ — ее равновесное значение c , T_v^c — колебательная температура молекул сорта c , τ_c^{VT} — время VT-релаксации молекул сорта c . Показано, что вывод формулы Ландау–Теллера из общей формулы возможен при следующих предположениях: (1) рассматривается невязкий нетеплопроводный газ; (2) молекулы имеют гармонический колебательный спектр и имеют бесконечное число колебательных уровней; (3) имеет место слабое отклонение от равновесия, при этом $\Gamma^r \approx A_r/kT$ и скорость релаксации линейно зависит от A_r ; и (4) удельные теплоемкости колебательных степеней свободы являются постоянными.

При выводе формулы Ландау–Теллера была получена ее модификация, имеющая следующий вид:

$$R_c^{vibr,VT(0)} = \frac{T}{T_v^c} (T - T_v^c) \rho_c c_{v,c} \sum_d \frac{n_d}{n \tau_{cd}^{VT}}. \quad (10)$$

Здесь $c_{v,c}$ — удельная теплоемкость колебательных степеней свободы молекул сорта c , n — числовая плотность смеси, τ_{cd}^{VT} — время VT релаксации молекул сорта c при столкновении с частицами сорта d . Было введено определение времени VT релаксации через интеграл по сечению VT-переходов, позволяющее рассчитывать времена VT релаксации для произвольных квазистационарных распределений:

$$\frac{1}{\tau_{cd}^{VT}} = \frac{4kn}{m_c c_{v,c}} \left(\frac{kT}{2\pi m_{cd}} \right)^{1/2} \sum_r \frac{n_{ci}}{n_c} \int \left(\frac{\varepsilon_{i'}^c - \varepsilon_i^c}{kT} \right)^2 g_0^3 \exp(-g_0^2) \sigma_r d^2 \Omega dg_0, \quad (11)$$

где m_{cd} — приведенная масса сталкивающихся частиц, n_{ci} — заселенность i -го колебательного уровня молекул сорта c , i' — колебательный уровень после VT-перехода r , σ_r — дифференциальное сечение VT-перехода r , $d^2\Omega$ — телесный угол, в котором оказывается относительная скорость частиц g_0 после столкновения, суммирование ведется по всем возможным VT-переходам, что неявно подразумевает суммирование по всем колебательным уровням. В качестве n_{ci} можно подставить любое колебательное распределение: Тринора, Больцмана, Гордиеца.

Для случая молекул с гармоническим колебательным спектром были получены упрощенные интегральные уравнения и системы линейных уравнений для расчета поправок первого порядка к скорости физико-химических процессов.

В **Главе 2** рассматриваются модели сечений упругих и неупругих процессов, вычисляются времена вращательной и колебательной релаксации, необходимые для расчета поправок первого порядка к скорости физико-химических процессов.

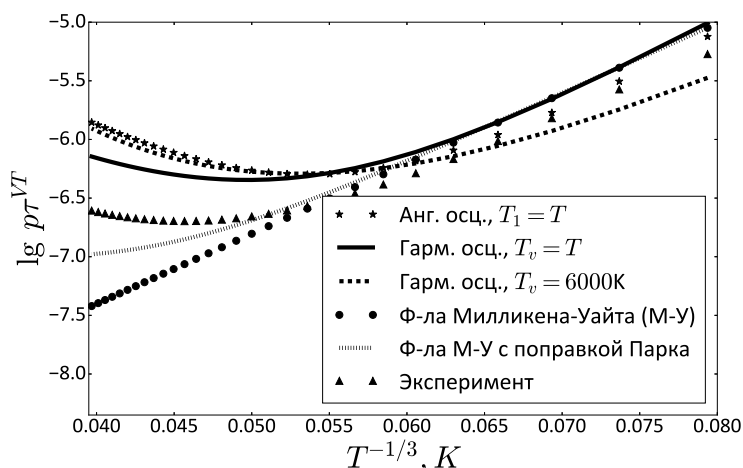


Рис. 1. Времена VT релаксации для столкновений молекул O_2 .

В **п. 2.3** рассматриваются модели расчета времени VT релаксации, обсуждается применимость широко используемой формулы Милликена-Уайта (М-У). Был произведен расчет времени VT релаксации по введенному определению (11) и проведено сравнение с расчетами по формуле М-У и экспериментальными данными О.П. Шаталова (НИИ Механики МГУ). На рис. 1 приведены результаты расчетов времени VT релаксации по формуле (11) для ангармонического и гармонического колебательного спектров (распределений Тринора и Больцмана), а также расчета по формуле М-У (с поправкой Парка и без) и аппроксимация экспериментальных данных. Расчет времени VT релаксации по определению кинетической теории (11) при низких температурах дает хорошее согласие с экспериментальными

данными и формулой М-У, при этом учет ангармоничности колебательного спектра играет роль только при высоких температурах и дает большие значения времени VT релаксации. При высоких температурах формула М-У дает заниженные значения времен релаксации, даже с учетом поправки Парка, при этом выражение (11) дает качественное согласие с результатами экспериментов. Рост времен VT релаксации при высоких температурах также подтверждается и результатами траекторных расчетов Бойда.

В **Главе 3** проведен численный расчет поправок первого порядка к скорости физико-химических процессов.

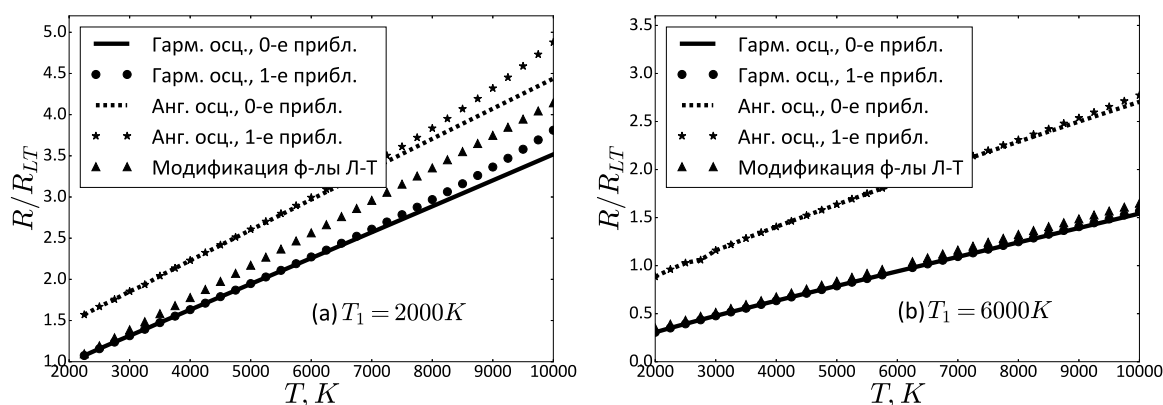


Рис. 2. Отношение релаксационных членов, рассчитанных по различным моделям, к релаксационным членам, рассчитанным по модели Ландау–Теллера.

В **п. 3.1** приведены результаты численного моделирования поправок первого порядка к скорости колебательной релаксации в однокомпонентном газе – молекулярном азоте. Расчеты производились в диапазоне температур 2000–10000 К при давлении 1 атм. На рис. 2 изображено отношение релаксационных членов к соответствующим величинам, рассчитанным по формуле Ландау–Теллера (9) (Л-Т). Видно, что формула Л-Т (9) существенно недооценивает скорость колебательной релаксации при $T > T_1$ и переоценивает ее при $T < T_1$. При этом модификация формулы Л-Т (10) дает лучшее согласие с результатами расчетов релаксационных членов по строгим формулам кинетической теории для молекул с гармоническим колебательным спектром. Учет ангармоничности колебательного спектра приводит к более высоким значениям скорости колебательной релаксации.

В **п. 3.2** приведены результаты численного моделирования поправок первого порядка к скорости колебательной и химической релаксации в бинарных смесях азота N_2/N и кислорода O_2/O . Расчеты производились в диапазоне температур 1500–15000 К при давлении 1 атм.

На рис. 3 изображено отношение релаксационных членов за счет медленных VT-переходов, рассчитанных по различным моделям, к релаксационным членам, рассчитанным по модели Л-Т. Видно, что учет влияния диссоциации на скорость колебательной релаксации за счет перекрестных

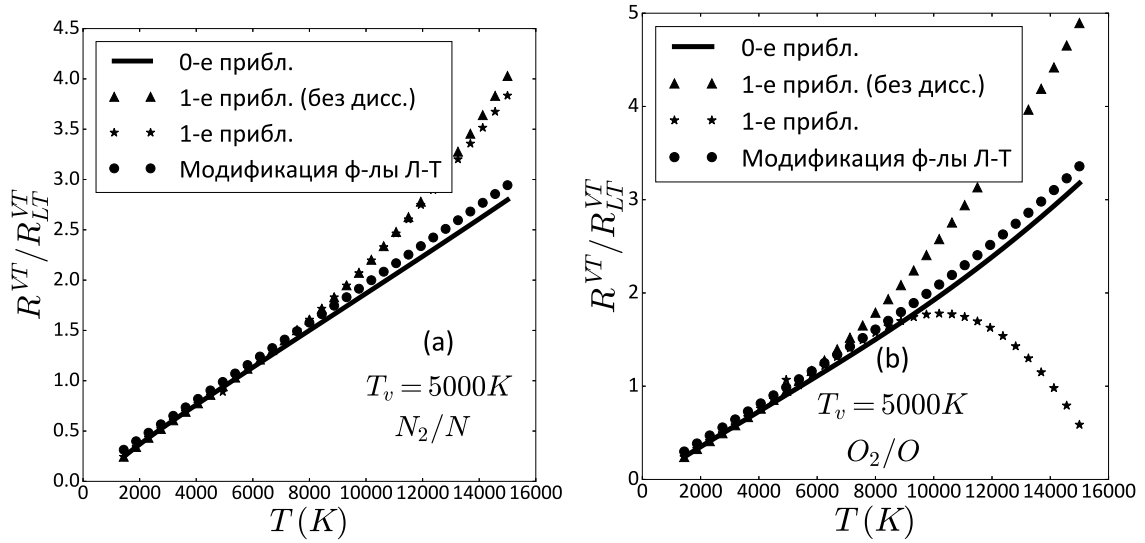


Рис. 3. Отношение релаксационных членов, к релаксационным членам, рассчитанным по модели Ландау–Теллера в N_2/N (a) и O_2/O (b). Молярная доля атомов – 50%.

эффектов в азоте слабо отражается на результатах расчетов. В кислороде же с увеличением колебательной температуры перекрестные эффекты начинают заметно влиять на скорость колебательной релаксации.

В условиях сильной неравновесности модификация формулы Л-Т не дает точных значений для скорости производства колебательной энергии, а поправки первого порядка значительны и могут составлять до 50% в азоте и 300% в кислороде, но с ростом колебательной температуры их роль уменьшается. Расчеты скорости диссоциации показали, что в азоте поправка первого порядка к скорости диссоциации не превышает 10%, в то время как в кислороде вязкая поправка к скорости химической релаксации может превышать 200%. С уменьшением доли атомов в смеси данные поправки убывают.

В п. 3.3 приведены результаты расчетов скорости физико-химической релаксации за ударными волнами в бинарных смесях азота и кислорода. Расчет течения производился в одномерном невязком приближении. На основе полученных макропараметров был произведен расчет поправок первого порядка к скорости релаксации. Были рассмотрены два набора параметров перед фронтом ударной волны: (1) температура $T_0=295\text{K}$, давление $p_0=2$ Торр и число Маха $M_0=9.3$; (2) температура $T=295\text{K}$, давление $p=0.8$ Торр и число Маха $M=13.4$.

На рис. 4 изображено отношение релаксационных членов за счет VT-переходов, рассчитанных по различным моделям, к релаксационным членам, рассчитанным в первом приближении метода Энского–Чепмена, как функция расстояния x от фронта ударной волны. Видно, что сразу за фронтом ударной волны формула Л-Т существенно переоценивает скорость колебательной релаксации, в то время как ее модифицированный вариант

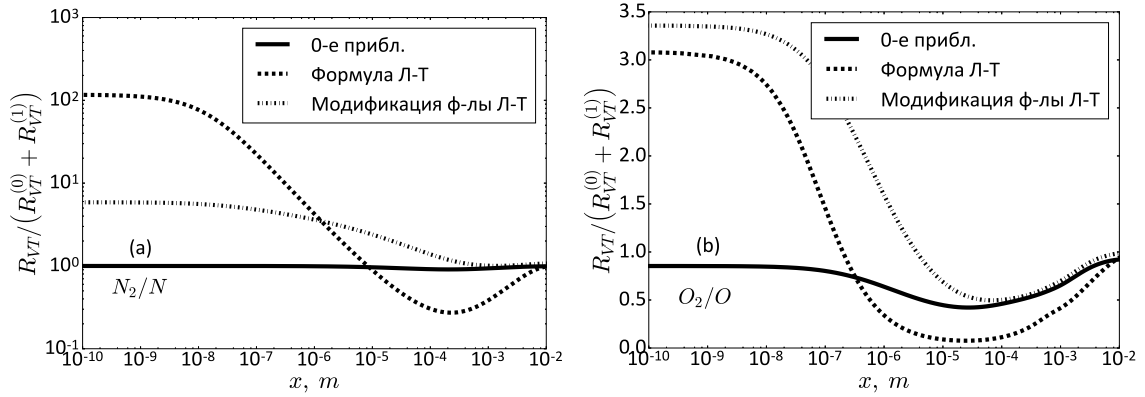


Рис. 4. Отношение релаксационных членов к релаксационному члену, рассчитанному в первом приближении метода Энского–Чепмена в N_2/N (a) и O_2/O (b) при $M = 13.4$

(10) дает результаты, намного более близкие к расчетам по строгой модели, в особенности в азоте. В кислороде же при высоких числах Маха сразу за фронтом ударной волны согласие модификации формулы Л-Т и точных расчетов хуже. С ростом T_v формула Л-Т (9) начинает недооценивать скорость колебательной релаксации. При этом поправки первого порядка к скорости VT релаксации играют существенную роль только в кислороде при высоких числах Маха.

Было получено, что поправки первого порядка к скорости диссоциации являются существенными, и их вклад растет с увеличением числа Маха. В кислороде их роль более значительна, чем в азоте; учет перекрестных эффектов за счет VT-переходов колебательной энергии в поступательную значительно увеличивает вязкие поправки.

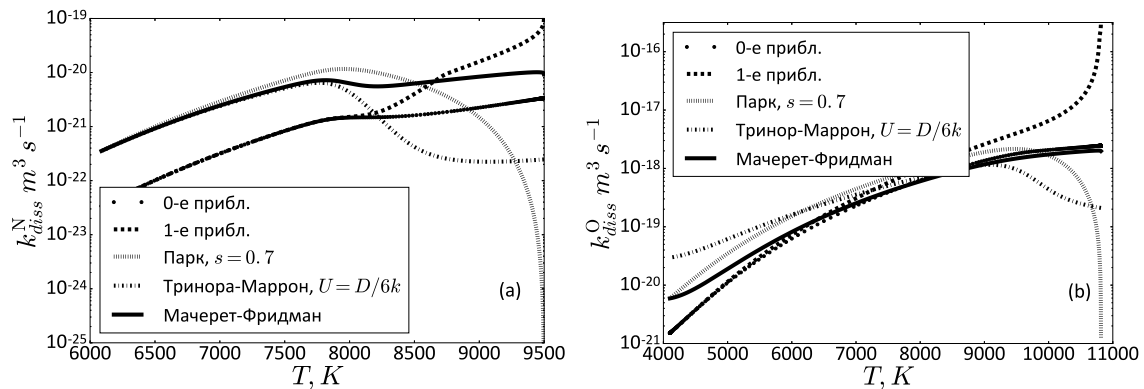


Рис. 5. Коэффициенты скорости диссоциации, рассчитанные по различным моделям как функции температуры за ударной волной при числе Маха равном 13.4 для реакции $N_2 + N \rightarrow 3N$ (a) и реакции $O_2 + O \rightarrow 3O$ (b)

На рис. 5 представлены коэффициенты скорости диссоциации, рассчитанные в нулевом и первом приближениях (поуровневые сечения диссоциации вычислялись по модели твердых сфер), а также по наиболее широко используемым в прикладных расчетах моделям. Видно, что сразу за удар-

ной волной модели Парка и Тринора–Маррона недооценивают константы скорости диссоциации. Модель Мачерета–Фридмана дает наиболее близкие к результатам расчетов по методам кинетической теории значения во всей области течения за ударной волной в кислороде и в зоне непосредственно за ударной волной в азоте. Полученные результаты показывают, что ни одна из существующих моделей не дает корректного описания скорости диссоциации в условиях сильной колебательной неравновесности в вязких течениях, так как не учитывает перекрестные эффекты. В кислороде влияние поправок первого порядка в зоне вблизи фронта ударной волны крайне велико, но быстро падает с падением температуры.

В п. 3.4 приведены результаты расчетов скорости физико-химической релаксации в течениях в соплах. Использовался тот же метод расчета, что и при исследовании скорости физико-химических процессов за ударными волнами. Было рассмотрено два случая: течение азота N_2/N с температурой и давлением в критическом сечении $T_* = 7000\text{К}$, $p_* = 100$ атм., и течение кислорода O_2/O с $T_* = 4000\text{К}$, $p_* = 1$ атм. В обоих случаях угол полураствора конического сопла принимался равным 15 градусам, а радиус критического сечения R 0.1 мм.

Результаты расчетов показали, что модифицированная формула Л-Т дает хорошее согласие с результатами расчетов релаксационных членов по определениям кинетической теории, в то время как формула Л-Т (9) существенно переоценивает скорость колебательной релаксации. Было обнаружено отсутствие существенного влияния вязких поправок на скорости физико-химических процессов.

В Главе 4 рассматривается моделирование физико-химических процессов в методе прямого статистического моделирования (ПСМ).

В п. 4.2 приводится обзор моделей переходов внутренней энергии, описан алгоритм расчета течений методом ПСМ с использованием поуровневых моделей VT-переходов.

В п. 4.4 приводятся результаты численного расчета различных течений методом ПСМ с использованием поуровневых моделей VT-переходов. Были реализованы следующие модели VT-переходов: (1) модель нагруженного гармонического осциллятора (ФНО); (2) модель, основанная на применении обратного преобразования Лапласа к результатам квазиклассических траекторных расчетов (ИЛТ). Было проведено тестирование моделей путем решения задачи о пространственно однородной колебательной релаксации и сравнения с результатами расчетов по модели Ларсена–Боргнакке (Л-Б).

На рис. 6 представлены результаты расчетов поступательной и колебательной температур в кислороде по различным моделям VT-переходов. Рассматривались следующие начальные условия: $T = 15000\text{К}$, $T_v = 300\text{К}$, молярная доля атомов 50%, числовая плотность частиц $n = 10^{20}$ 1/м³. На

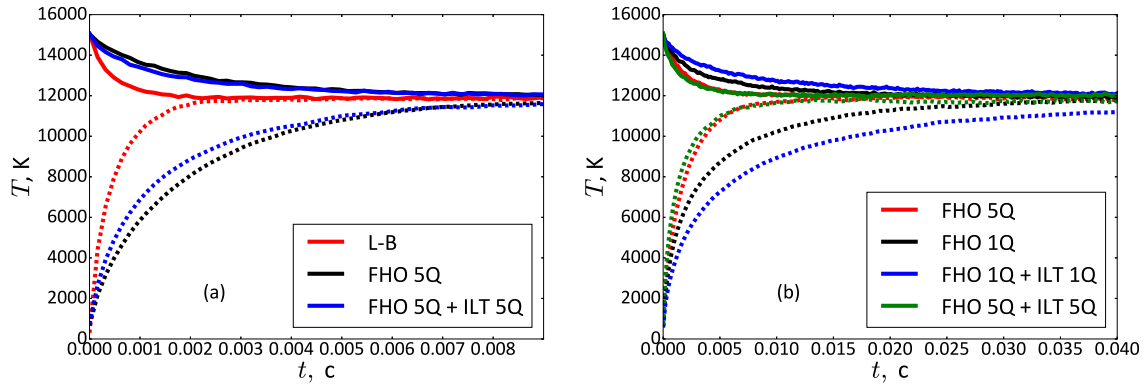


Рис. 6. Поступательная (сплошные линии) и колебательная (штрихованные линии) температуры как функции времени в O_2/O

рис. 6(b) представлены расчеты по поуровневым моделям с учетом различного числа VT-переходов — учитывались либо только одноквантовые переходы, либо все переходы вплоть до пятиквантовых включительно. Видно, что в кислороде поуровневые модели дают меньшую скорость колебательной релаксации, чем модель Л-Б, при этом пренебрежение многоквантовыми переходами приводит к существенно меньшей скорости колебательной релаксации. Расчеты показали, что в азоте роль многоквантовых переходов менее значительна, чем в кислороде.

Методом ПСМ было рассчитано времен VT релаксации. Полученные результаты находятся в качественном согласии с результатами расчетов по формуле (11). В кислороде при низких температурах модель ИЛТ дает существенно меньшие значения времен релаксации, чем остальные модели, что находится в согласии с данными траекторных расчетов.

Далее в работе рассмотрена задача о двумерном обтекании цилиндра чистым молекулярным азотом. Результаты расчетов колебательной температуры вдоль линии торможения находятся в хорошем согласии с имеющимися в литературе результатами расчетов.

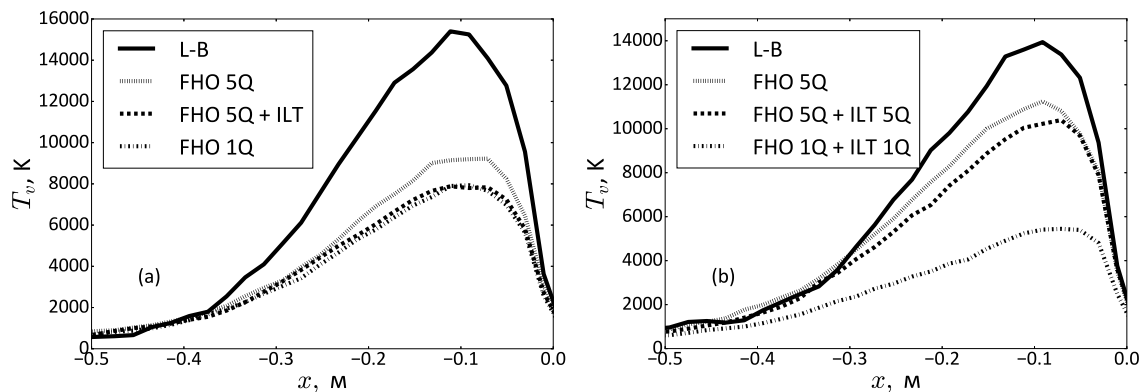


Рис. 7. Колебательная температура вдоль линии торможения как функция расстояния от точки торможения в потоке N_2/N (a) и O_2/O (b)

Рассмотрена задача о двумерном обтекании цилиндра бинарными смесями азота и кислорода. На рис. 7 представлены значения колебательной температуры вдоль линии торможения, рассчитанные с использованием различных моделей VT-переходов. Видно, что модель Л-Б дает более высокие значения колебательной температуры, чем поуровневые модели. В азоте все поуровневые модели дают схожие результаты, при этом значения колебательной температуры существенно ниже, чем при расчетах с использованием модели Л-Б, а учет многоквантовых переходов слабо влияет на колебательную температуру. В кислороде разница между расчетами по модели Л-Б и поуровневыми моделям не так сильна, как в азоте. При этом видно, что многоквантовые переходы существенно влияют на значения колебательной температуры.

В Заключение перечислены основные результаты работы.

1. На основе метода Энскога–Чепмена для смеси вязких газов с быстрыми и медленными процессами построена модель скорости физико-химических процессов. Разработан алгоритм расчета поправок к скорости физико-химических процессов. На основании кинетической теории получено обобщение формулы Ландау–Теллера на случай произвольного отклонения от колебательного равновесия.
2. Предложен алгоритм расчета времен колебательной релаксации. В широком диапазоне температур проведено сравнение рассчитанных времен релаксации с результатами экспериментальных измерений и эмпирических формулами. Показано, что предложенный в работе алгоритм дает корректное описание времен колебательной релаксации во всем рассмотренном диапазоне температур.
3. Проведен численный расчет скорости неравновесных процессов в различных смесях. В молекулярном азоте обнаружено значительное влияние ангармоничности колебаний на скорость колебательной релаксации и существенный вклад вязких поправок в релаксационные члены в условиях сильной колебательной неравновесности при высоких температурах. Дивергенция скорости потока слабо влияет на скорость колебательной релаксации. Предложенная в работе модификация формулы Ландау–Теллера дает хорошее согласие с результатами расчетов по формулам кинетической теории для молекул с гармоническим колебательным спектром. Для бинарных смесей получено, что в азоте поправки первого порядка к релаксационным членам за счет VT-переходов значительны только в условиях высокой поступательной температуры и низкой колебательной температуры; в кислороде с ростом колебательной температуры существенную роль начинают играть перекрестные эффекты между реакциями диссоциации–рекомбинации и VT-переходами. При $T < T_v$ поправки первого по-

рядка к скорости колебательной релаксации малы. Влияние вязких поправок на коэффициенты скорости диссоциации более существенно в кислороде, чем в азоте.

4. Изучены поправки к скорости физико-химической релаксации в течениях бинарных смесей за ударными волнами и в соплах. Обнаружено заметное влияние поправок первого порядка к скорости VT релаксации в течении кислорода при больших числах Маха. Учет вязких поправок дает существенно большую скорость диссоциации вблизи фронта ударной волны; значительный вклад дают перекрестные эффекты между VT-переходами и реакциями диссоциации-рекомбинации. Проведено сравнение коэффициентов скорости диссоциации, рассчитанных по различным моделям диссоциации. В нулевом приближении получено хорошее согласие результатов расчета по разработанной модели для кислорода и удовлетворительное для азота. В течениях в соплах роль вязких поправок к скорости физико-химических процессов пренебрежимо мала. Предложенная модификация формулы Ландау-Теллера дает лучшее согласие с расчетами скорости колебательной релаксации в течениях за ударными волнами и в соплах по сравнению с оригинальной формулой Ландау-Теллера.
5. В методе ПСМ реализованы поуровневые модели VT переходов. Проведено их тестирование путем решения задачи о пространственно однородной релаксации неравновесного газа. Показано сильное влияние многоквантовых обменов на скорость колебательной релаксации в кислороде и незначительное в азоте. Проведен расчет времен VT релаксации методом ПСМ, получено качественное согласие поведения времен релаксации, рассчитанных на основании данного подхода и на основании алгоритма кинетической теории.
6. Поуровневые модели применены для расчета двумерного сверхзвукового обтекания цилиндра методом ПСМ. Изучено влияние выбора модели колебательной релаксации и многоквантовых переходов на колебательную температуру вдоль линии торможения. В азоте поуровневые модели колебательной релаксации дают более низкую колебательную температуру, чем модель Ларсена-Боргнакке; многоквантовые переходы слабо влияют на T_v . В кислороде поуровневые модели дают более близкие к модели Ларсена-Боргнакке значения колебательной температуры; учет многоквантовых переходов приводит к существенно большим значениям T_v .

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант 15-08-03371, грант 15-01-02373, СПбГУ, НИР 6.37.163.2014, НИР 6.37.206.2016 и РНФ, грант 15-19-30016.

Публикации автора в журналах, рекомендованных ВАК:

- [1] *Кустова Е.В., Облапенко Г.П.* Нормальные напряжения и скорости медленных процессов в многотемпературных потоках газов с химической и колебательной неравновесностью // Вестник Санкт-Петерб. ун-та. Серия 1: Математика, Механика, Астрономия, 2013. № 2. С. 111-120
- [2] *Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Rates of VT Transitions and Dissociation and Normal Mean Stress in a Non-equilibrium Viscous Multitemperature N_2/N Flow // AIP Conference Proceedings, 2014. V. 1628. P. 602-609
- [3] *Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Reaction and internal energy relaxation rates in viscous thermochemically non-equilibrium gas flows // Phys. Fluids, 2015. Vol. 27. P. 1.4906317
- [4] *Kustova E. V., Nagnibeda E. A., Oblapenko G. P., Savelev A. S., Sharafutdinov I. Z.* Advanced models for vibrational–chemical coupling in multi-temperature flows // Chem. Phys., 2016. Vol. 464. P. 1-13
- [5] *Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Mutual effect of vibrational relaxation and chemical reactions in viscous multitemperature flows // Phys. Rev. E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2016. Vol. 93. № 033127.
- [6] *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
- [7] *Baikov B.S., Bayalina D.K., Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Inverse Laplace Transform as a Tool for Calculation of State-specific Cross Sections of Inelastic Collisions // AIP Conference Proceedings, 2016. V. 1786. P. 090005 (1–8)
- [8] *Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Vibration-dissociation Coupling in Multi-Temperature Viscous Gas Flows // AIP Conference Proceedings, 2016. V. 1786. P. 150004 (1–8)

Другие публикации:

- [9] *Кустова Е.В., Облапенко Г.П.* Скорости колебательной релаксации в многотемпературных течениях газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2014. Т. 15. С. 1-4
- [10] *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.
- [11] *Кустова Е.В., Облапенко Г.П.* Расчет нормальных напряжений и скоростей реакций в смеси N_2 , N с колебательной и химической неравновесностью // Всеросс. конф. с участием иностр. ученых “Современные проблемы динамики разреженных газов”, сборник докладов. Новосибирск. 2013. С. 131-133
- [12] *Kustova E. V., Oblapenko G.P.* Rates of VT transitions and dissociation and normal mean stress in a non-equilibrium viscous multi-temperature N_2/N flow // Abstracts of 29th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. Xi'an, China. 2014. P. 148
- [13] *Кустова Е.В., Облапенко Г.П.* Скорость колебательной релаксации в многотемпературных течениях разреженных газов // Междунар. науч. конф. по механике Седьмые Поляховские чтения. Тезисы докладов. г. Санкт-Петербург, 2015.
- [14] *Кустова Е.В., Облапенко Г.П.* Скорости физико-химической релаксации в многотемпературных течениях кислорода и азота // XXIV семинар по струйным, отрывным и нестационарным течениям: сборник трудов - г. Новосибирск, 2015.