

УДК 533.6.011

ВЛИЯНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ КИНЕТИКИ НА ТЕПЛОПЕРЕНОС И ДИФФУЗИЮ ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

Кунова О.В., Мехоношина М.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
kunova.olga@gmail.com

Аннотация

В настоящей работе исследуется влияние поуровневой колебательной и химической кинетики на теплоперенос и диффузию за ударными волнами, образующимися в сверхзвуковых потоках бинарных смесей газов N_2/N и O_2/O . Показано влияние неравновесных процессов на макропараметры течения. Оценивается вклад различных диссипативных процессов в поток полной энергии и скорость диффузии.

THE INFLUENCE OF NON-EQUILIBRIUM KINETICS ON THE HEAT TRANSFER AND DIFFUSION BEHIND SHOCK WAVE

Kunova O.V., Mekhonoshina M.A.

St. Petersburg State University, Russia, St. Petersburg

In the paper the influence of state-to-state vibrational and chemical kinetics on heat transfer and diffusion behind shock waves formed in supersonic flows of binary gas mixtures N_2/N and O_2/O is studied. The influence of non-equilibrium processes on flow macroscopic parameters is shown. The contribution of different dissipative processes to the total energy flux and diffusion velocity is estimated.

1. Введение

В работе исследуется неравновесная колебательная и химическая кинетика и процессы переноса за сильными ударными волнами в рамках поуровневого приближения. Данная модель дает наиболее точное описание течения смеси, основанное на решении уравнений газовой динамики совместно с уравнениями, описывающими релаксационные процессы. Влияние колебательных распределений на массо- и теплоперенос было впервые рассмотрено в [1]. Теория процессов переноса в реагирующих смесях с учетом детальной колебательной и химической кинетики была предложена в [2]. Упрощенные алгоритмы расчета коэффициентов переноса предложены в [3], особенности диффузии и теплопереноса в рамках детального кинетического описания обсуждаются в [4].

2. Поуровневое описание колебательной и химической кинетики

В работе рассматривалось течение бинарной смеси двухатомного газа A_2 и атомов A за фронтом плоской ударной волны. Поток предполагается одномерным и стационарным, газ – невязким. Во внимание принимались следующие кинетические процессы: VV и VT переходы колебательной энергии, реакции диссоциации и рекомбинации. При сделанных предположениях система уравнений для заселенностей колебательных уровней n_i , числовых плотностей атомов n_a , скорости v и температуры T имеет вид

$$\frac{d(vn_i)}{dx} = R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}, \quad i = 0, 1, \dots, l, \quad \frac{d(vn_a)}{dx} = -2 \sum_i R_i^{diss-rec}, \quad (1)$$

$$\rho_0 v_0^2 + p_0 = \rho v^2 + p, \quad h_0 + \frac{v_0^2}{2} = h + \frac{v^2}{2}, \quad (2)$$

где x – расстояние от фронта ударной волны; p – давление смеси, индексом «0» обозначены параметры в набегающем потоке; $h = \rho_m / \rho h_m + \rho_a / \rho h_a$; ρ – плотность смеси; ρ_m , ρ_a , h_m , h_a – плотность и энтальпия молекулярных и атомарных компонентов,

$$h_a = \frac{5}{2} \bar{R}_a T + \frac{\varepsilon}{m_a}, \quad h_m = \frac{7}{2} \bar{R}_m T + \frac{1}{\rho_m} \sum \varepsilon_i n_i.$$

Здесь \bar{R}_a и \bar{R}_m – удельные газовые постоянные атомов и молекул, m_a и ε – масса и энергия образования атомов, ε_i – колебательная энергия молекул.

Правые части уравнений (1) содержат поуровневые коэффициенты скорости VT и VV переходов колебательной энергии, диссоциации и рекомбинации. Вероятности колебательных переходов вычислялись на основе обобщенной SSH-теории для ангармонических осцилляторов [5], для описания диссоциации использовалась модель Тринора – Маррона [6], модифицированная для поуровневого приближения [7, 8].

3. Теплоперенос и диффузия

Выражения для скорости диффузии и потока полной энергии получены в [2, 3] в первом приближении обобщенного метода Энского – Чепмена для сильнонеравновесных течений. Они могут быть записаны в виде [9, 4]

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{V}_i^{TD} + \mathbf{V}_i^{MD} + \mathbf{V}_i^{DVE}, \quad \mathbf{V}_a = \mathbf{V}_a^{TD} + \mathbf{V}_a^{MD}, \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{HC} + \mathbf{q}^{MD} + \mathbf{q}^{TD} + \mathbf{q}^{DVE}. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{V}_i^{MD} , \mathbf{V}_a^{MD} , \mathbf{V}_i^{TD} , \mathbf{V}_a^{TD} и \mathbf{V}_i^{DVE} – вклады в скорость диффузии, соответственно, процессов массовой диффузии, термодиффузии и диффузии колебательной энергии:

$$\mathbf{V}_i^{MD} = -D_{mm} \mathbf{d}_m - D_{ma} \mathbf{d}_a, \quad \mathbf{V}_i^{TD} = -D_{Tm} \nabla \ln T, \quad \mathbf{V}_i^{DVE} = -n \left(\frac{n_m}{D_{mm}} + \frac{n_a}{D_{ma}} \right)^{-1} \nabla \ln \frac{n_i}{n_m},$$

$$\mathbf{V}_a^{MD} = -D_{ma} \mathbf{d}_m - D_{aa} \mathbf{d}_a, \quad \mathbf{V}_a^{TD} = -D_{Ta} \nabla \ln T, \quad (5)$$

\mathbf{q}^{HC} , \mathbf{q}^{MD} , \mathbf{q}^{TD} и \mathbf{q}^{DVE} – потоки энергии, обусловленные теплопроводностью поступательных и вращательных степеней свободы, массовой диффузией, термодиффузией и переносом колебательной энергии:

$$\mathbf{q}^{HC} = -\lambda' \nabla T, \quad \mathbf{q}^{MD} = \rho_m h_m \mathbf{V}_m^{MD} + \rho_a h_a \mathbf{V}_a^{MD}, \quad \mathbf{q}^{TD} = -p (D_{Tm} \mathbf{d}_m + D_{Ta} \mathbf{d}_a) + \rho_m h_m \mathbf{V}_m^{TD} + \rho_a h_a \mathbf{V}_a^{TD},$$

$$\mathbf{q}^{DVE} = \sum_i \left(\frac{5}{2} k_B T + \langle \varepsilon^i \rangle_{rot} + \varepsilon_i \right) n_i \mathbf{V}_i^{DVE}. \quad (6)$$

В выражениях (5)–(6) D_{mm} , D_{ma} , D_{aa} , D_{Tm} и D_{Ta} – бинарные коэффициенты диффузии и коэффициенты термодиффузии; \mathbf{d}_m и \mathbf{d}_a – диффузионные термодинамические силы, зависящие от градиентов заселенностей колебательных уровней n_i и давления p ; λ' – коэффициент теплопроводности.

4. Результаты

Система уравнений (1)–(2) интегрировалась численно при следующих условиях в набегающем потоке: $T_0 = 293$ К, $p_0 = 100$ Па, $n_m = p_0 / k_B T_0$, $n_a = 0$, $M_0 = 15$. Распределение по уровням в набегающем потоке считалось больцмановским с колебательной температурой $T_v = T_0$.

На рис. 1(*a*, *б*) представлено сравнение температуры и числовых плотностей молекул и атомов рассматриваемых смесей за фронтом ударной волны.

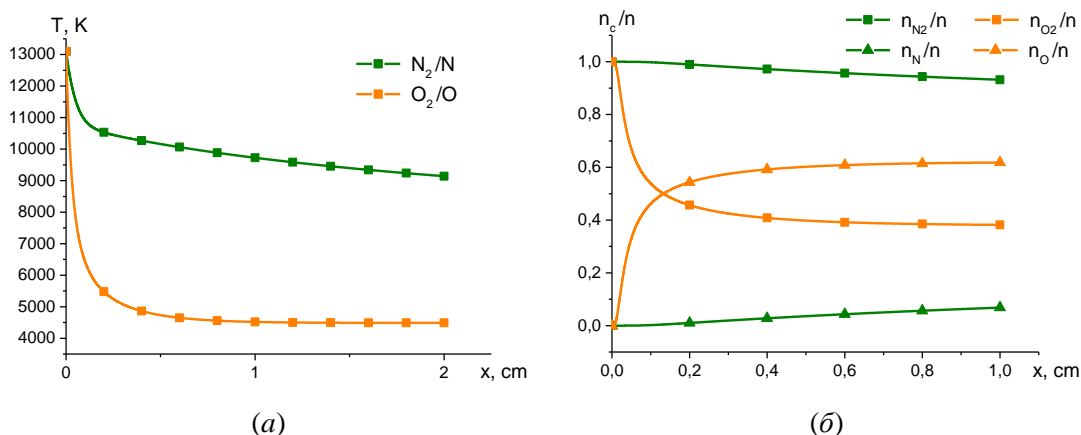


Рис. 1. Температура (*a*) и химический состав смеси газов (*б*) за фронтом ударной волны в зависимости от расстояния x

Можно заметить, что релаксационный процесс в смеси O_2/O протекает значительно быстрее и активнее, чем в смеси молекул и атомов азота. В частности, значение температуры смеси N_2/N в два раза превышает температуру смеси O_2/O , а число свободных атомов в 5.6 раз меньше. Такое различие связано, во-первых, с более высокой скоростью колебательного энергообмена молекул O_2 , вследствие чего стадия возбуждения молекул кислорода протекает в более узкой зоне за фронтом волны, нежели молекул азота, во-вторых, диссоциация кислорода происходит быстрее диссоциации азота. Данные факты иллюстрирует рис. 2, на котором представлены заселенности колебательных уровней молекул азота и кислорода при различных значениях x .

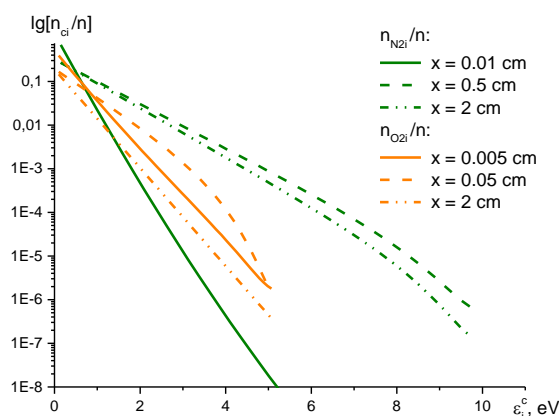


Рис. 2. Относительные заселенности молекул N_2 и O_2 для нескольких значений x

На рис. 3(*a*) представлено изменение полного теплового потока в релаксационной зоне за фронтом ударной волны для смесей N_2/N и O_2/O . Полный поток тепла быстро меняется вблизи фронта ударной волны, затем устанавливается равновесное состояние. Видно, что полный поток тепла для смеси O_2/O вблизи фронта ударной волны значительно больше, чем для смеси N_2/N , за счет вклада массовой диффузии.

На рис. 3(*б*) показан вклад различных процессов в тепловой поток. Для смеси N_2/N тепловой поток Фурье и тепловой поток за счет диффузии колебательной энергии вносят вклад одного порядка вблизи фронта ударной волны, причем влияние диффузии немного больше. Для смеси O_2/O тепловой поток за счет диффузии колебательной энергии вносит незначительный вклад, так как диссоциации происходит активнее, чем в случае азота, и чи-

словая плотность молекул быстро уменьшается. Большой вклад массовой диффузии также обусловлен быстрым изменением числовых плотностей вблизи фронта ударной волны.

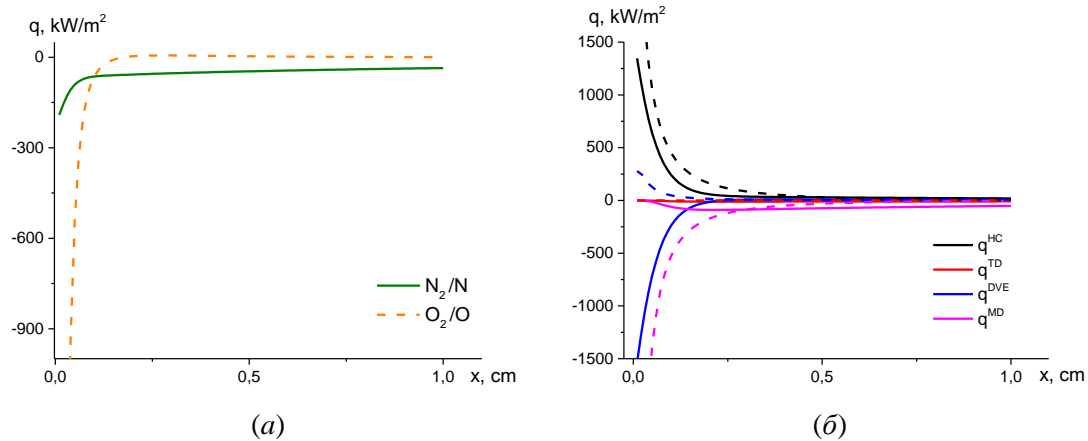


Рис. 3. Полный поток тепла (а) и вклад различных процессов в поток тепла (б) за фронтом ударной волны как функция от x (N_2/N – сплошные линии, O_2/O – пунктирные линии)

Заключение

Исследовано влияние поуровневой неравновесной кинетики на полный поток тепла за фронтом ударной волны. В смеси N_2/N компенсирующий эффект теплопроводности и диффузии колебательной энергии приводит к значительному уменьшению полного потока тепла. В смеси O_2/O вклад теплопроводности компенсируется за счет массовой диффузии, а эффект диффузии колебательной энергии сравнительно мал.

Литература

1. Kustova E., Nagnibeda E., The Effect of Level Nonequilibrium Kinetics on Transport Properties of Dissociating Gas Flow behind a Shock Wave // Proceedings of the 21st International Symposium on Shock Waves, edited by A. Houwing (The University of Queensland, Brisbane, 1997), Paper 4231.
2. Kustova E., Nagnibeda E. // Chem. Phys., 1998, Vol. 233, Pp. 57–75.
3. Kustova E. // Chem. Phys., 2001, Vo. 270, Pp. 177–195.
4. Kustova E., Nagnibeda E., State-to-State Kinetic Theory Approach for Transport and Relaxation Processes in Viscous Reacting Gas Flows // Rarefied Gas Dynamics, edited by D. Levin et al., 2011, Vol. 1333 of AIP Conference Proceedings, Pp. 1371–1376.
5. Schwartz R.N., Slawsky Z.I., Herzfeld K.F. // J. Chem. Phys. 1952, Vol. 20, Pp. 1591–1599.
6. Marrone P.V., Treanor C.E. // Phys. Fluids. 1963, Vol. 6, № 9, Pp. 1215–1221.
7. Lordet F., Meolans J., Chauvin A., and Brun R. // Shock Waves, 1995, № 4, Pp. 299–312.
8. Nagnibeda E., Kustova E. Nonequilibrium Reacting Gas Flows. Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009.
9. Kustova E., Nagnibeda E., Alexandrova T., and Chikhaoui A. // Chem. Phys., 2002, Vol. 276, Pp. 139–154.

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2014 г.