

На правах рукописи

МЕХОНОШИНА Мария Андреевна

ПЕРЕНОС ТЕПЛА В СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЯХ
РЕАГИРУЮЩЕЙ СМЕСИ ГАЗОВ

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург
2015

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

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

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

кандидат физико-математических наук,
Бондарь Евгений Александрович,
Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН
зав. лабораторией вычислительной аэродинамики

Ведущая организация: Балтийский государственный технический
университет «Военмех» им. Д.Ф. Устинова
(Санкт-Петербург)

Защита диссертации состоится “__” _____ 2015 года в __ часов на
заседании совета Д 212.232.30 по защите докторских и кандидатских дис-
сертаций при Санкт-Петербургском государственном университете по ад-
ресу: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Университетский пр., д. 28,
математико-механический факультет, ауд. 405.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке
Санкт-Петербургского государственного университета по адре-
су: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9 и на
сайте [http://spbu.ru/science/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dis-
list/details/14/563](http://spbu.ru/science/disser/soiskatelyu-uchjonoj-stepeni/dislist/details/14/563)

Автореферат разослан “__” _____ 2015 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Е.В. Кустова

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Изучение процессов переноса в высокотемпературных газах требуется для создания эффективной тепловой защиты космических аппаратов; описания процессов в ударных трубах, в рабочей части гиперзвуковых аэродинамических установок; использования в плазменно-химических технологиях. Поскольку при высоких скоростях и температурах экспериментальное определение транспортных свойств газа реализовать практически не удастся, встает вопрос о корректном теоретическом моделировании диссипативных процессов в неравновесных условиях. Применение для этой цели хорошо апробированного аппарата кинетической теории представляется наиболее оптимальным. Кинетическая теория позволяет построить замкнутое описание течения и найти коэффициенты переноса при различных отклонениях от равновесия. Построение точных замкнутых моделей неравновесных высокотемпературных течений газов с внутренними степенями свободы является одной из главных задач данной работы.

Алгоритмы расчета коэффициентов переноса, построенные методами кинетической теории, являются наиболее корректными. Однако их применение на практике часто затруднено из-за серьезных вычислительных затрат, необходимых для решения линейных транспортных систем. В связи с этим возникает необходимость разработки упрощенных моделей, имеющих хорошую точность и пригодных для инженерных приложений. Именно такой моделью является известная поправка Эйкена для расчета коэффициента теплопроводности газов с внутренними степенями свободы. Предложенная в 1913 году, она до сих пор широко используется для расчета коэффициента теплопроводности при низких температурах. Обобщение модели Эйкена на случай высокотемпературного газа с электронным возбуждением и проверка достоверности построенного обобщения является актуальной задачей теории процессов переноса и имеет большую практическую значимость.

Применение точных и приближенных моделей расчета коэффициентов переноса для исследования особенностей тепломассопереноса за сильными ударными волнами является важной фундаментальной задачей, поскольку дает возможность понять, как влияют физико-химические процессы и неравновесные распределения молекул по внутренней энергии на диффузию и тепловые потоки в ударно-нагретом газе. Анализ вклада различных диссипативных процессов в перенос энергии позволит предсказывать тепловые потоки и в других неравновесных ситуациях, если известны основные механизмы релаксации. В настоящей работе проанализированы диффузия и поток тепла в смесях N_2/N и O_2/O .

Цель работы

1. Изучение процессов переноса в неравновесной смеси газов с учетом внутренних степеней свободы и химических реакций в однотемпературном и поуровневом приближениях.
2. Исследование коэффициентов переноса на основе точного кинетического подхода. Модификация формулы Эйкена для коэффициента теплопроводности в газах с учетом электронного возбуждения атомов и молекул.
3. Оценка влияния размера электронно возбужденных атомов на интегралы столкновений и процессы переноса. Установление пределов применимости приближенных моделей расчета коэффициентов теплопроводности при учете электронного возбуждения.
4. Изучение переноса массы и энергии в неравновесных течениях за сильными ударными волнами. Сравнение результатов, полученных при поуровневом и однотемпературном описании течений воздуха за ударными волнами. Оценка влияния неравновесности, химических реакций и условий в набегающем потоке на потоки диффузии и поток тепла за фронтом ударной волны.

Научная новизна

1. Учтено электронное возбуждение атомов и молекул в однотемпературном приближении, что впервые позволило обобщить формулу Эйкена на случай высокотемпературного неравновесного газа.
2. Проведены систематические расчеты коэффициентов теплопроводности компонентов воздуха N_2 , O_2 , NO , N , O в широком диапазоне температур (200–20000 К); на основании анализа вклада возбужденных состояний атомов в интегралы столкновений установлены пределы применимости приближенных моделей расчета коэффициентов переноса в газе с электронным возбуждением.
3. Впервые исследовано релаксационное давление в неравновесной смеси с реакцией диссоциации и электронным возбуждением; оценен вклад релаксационного давления в нормальные напряжения; изучено влияние состава смеси и температуры на диагональные члены тензора напряжений в вязкой жидкости в неравновесных условиях.
4. Сравнение тепловых потоков, рассчитанных с применением различных подходов, однотемпературного и поуровневого, позволило выявить характерные особенности процесса диффузии колебательной энергии и его вклад в перенос тепла за фронтом ударной волны.
5. Проведен систематический анализ вклада процессов теплопроводности, массовой диффузии, термодиффузии и диффузии колебательной

энергии в перенос тепла и массы в ударно-нагретых смесях N_2/N и O_2/O при различных начальных условиях; объяснены причины различного качественного поведения тепловых потоков в азоте и кислороде; обнаружен эффект компенсации тепловых потоков за счет различных диссипативных процессов.

6. Впервые исследованы процессы переноса за ударной волной, распространяющейся в колебательно-возбужденном газе.

Научная ценность и практическая значимость

1. Разработаны алгоритмы расчета поуровневых и однотемпературных коэффициентов переноса; оценка диаметров возбужденных атомов позволила установить пределы применимости моделей процессов переноса при учете электронного возбуждения.
2. Уточненная формула Эйкена для газов с электронным возбуждением может быть рекомендована для проведения инженерных расчетов коэффициента теплопроводности при высоких температурах.
3. Полученные данные для потоков тепла за фронтом ударной волны могут быть использованы для проектирования эффективной тепловой защиты обшивки сверх- и гиперзвуковых летательных аппаратов.

Достоверность результатов обеспечена применением строгих подходов кинетической теории газов, детально разработанной в литературных источниках; хорошим согласованием результатов расчета коэффициентов переноса с экспериментальными данными, доступными для ограниченного диапазона условий; использованием современных проверенных аппроксимаций интегралов столкновений, применимость которых обоснована в широком диапазоне температур.

Положения, выносимые на защиту

1. Обобщенная формула Эйкена для расчета коэффициентов теплопроводности молекул с возбужденными вращательными, колебательными и электронными степенями свободы и атомов с электронным возбуждением; оценка пределов применимости обобщенной поправки Эйкена на основании анализа диаметров возбужденных частиц.
2. Результаты расчета коэффициентов теплопроводности газов N_2 , O_2 , NO , N , O с электронным возбуждением в диапазоне температур 200 – 20000 К.
3. Результаты анализа вклада различных диссипативных процессов в тепловой поток за фронтом ударной волны в смесях N_2/N , O_2/O ; эффект компенсации потоков за счет теплопроводности, массовой диффузии и диффузии колебательной энергии ведет к существенному

уменьшению полного теплового потока; термодиффузия не вносит заметного вклада в перенос тепла.

4. Сравнение потоков тепла в ударно-нагретых смесях N_2/N , O_2/O в однотемпературном и поуровневом приближениях выявило важную роль неравновесной колебательной кинетики в переносе тепла за ударными волнами.
5. Результаты исследования влияния неравновесного набегающего потока на процессы диффузии и теплопереноса за ударной волной. Начальное колебательное возбуждение может приводить к качественному изменению полного теплового потока. Различие в скорости физико-химических процессов в азоте и кислороде определяет величину и направление теплового потока.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих Всероссийских и международных конференциях: Международная конференция по механике "Шестые Поляховские чтения" (Санкт-Петербург, 2012); XXIII Всероссийский семинар с международным участием по струйным, отрывным и нестационарным течениям (Томск, 2012); 28-ой международный симпозиум по динамике разреженного газа (Испания, 2012); 5-я Европейская конференция по астронавтике и космическим наукам (Германия, 2013); IX Международная конференция по Неравновесным процессам в соплах и струях, NPNJ'2014 (Алушта, 2014); 29-ый международный симпозиум по динамике разреженного газа (Китай, 2014); 8-я Всероссийская школа-семинар "Аэротермодинамика и физическая механика классических и квантовых систем" (Москва, 2014); Международная конференция по механике "Седьмые Поляховские чтения" (Санкт-Петербург, 2015). Результаты также докладывались на научных семинарах кафедры гидроаэромеханики Санкт-Петербургского государственного университета.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1]-[15], из них шесть ([1]-[6]) в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных журналов, рекомендованных ВАК. Список работ приведен в конце автореферата. В работах [1,11] Кустовой Е.В. принадлежит общая постановка задачи и обобщение метода Энскога-Чепмена; автору принадлежит разработка алгоритма расчетов релаксационного давления и анализ результатов. В работах [2,9] Кустовой Е.В. принадлежит общая постановка задачи и обобщение метода Энскога-Чепмена; Макаркину Д.В. принадлежит вывод, расчет и анализ дифференциальных сечений столкновений; автору принадлежит разработка алгоритма численного расчета и анализ вклада релаксационного давления в диагональные члены тензора напряжений. В работах [3,5,12,14,15] Кустовой Е.В. принадлежит общая постановка задачи, разработка методов кинетической теории; Истомин В.А.

выполнил расчет и анализ коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости, чисел Прандтля и Стокса; автору принадлежит разработка и реализация алгоритма программной части вычисления коэффициентов теплопроводности, определение фактора f_{int} в модифицированной поправке Эйкена, анализ результатов. В работах [4,13] Кустовой Е.В. и Нагнибеда Е.А. принадлежит идея исследования, постановка задачи и обобщение метода Энскога-Чепмена, Куновой О.В. разработан алгоритм и произведен расчет макропараметров за фронтом ударной волны, автору принадлежит расчет коэффициентов теплопроводности и диффузии за фронтом ударной волны, расчет и анализ потоков диффузии и потоков тепла вблизи фронта. В работе [7] Куновой О.В. принадлежит расчет макропараметров за фронтом ударной волны в поуровневом приближении, автору принадлежит расчет и анализ потоков диффузии и потоков тепла за фронтом ударной волны. В работе [6] автору принадлежит расчет потоков диффузии и потоков тепла у поверхности затупленного тела в гиперзвуковом потоке; соавторами проведен численный расчет поля течения в двумерной задаче. В работе [8] Крылову А.А. и Лашкову В.А. принадлежит описание экспериментальных установок и постановка эксперимента, Кустовой Е.В. – теоретическая модель течения, автору принадлежит проведение расчетов коэффициентов переноса.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, приложения и списка литературы из 117 наименований. Общий объем диссертации составляет 112 страниц, включая 31 рисунок и 8 таблиц.

Содержание работы

Во **введении** кратко описано современное состояние изучаемой проблемы. Рассмотрена актуальность задачи, сформулированы цели работы, обозначена их научная новизна и практическая значимость, выделены положения, выносимые на защиту.

В **главе 1** вводятся основные определения, описана модификация метода Энскога-Чепмена для построения замкнутого описания течения неравновесной реагирующей смеси газов, в которой протекают быстрые и медленные процессы. В работе учитываются вращательные, колебательные и электронные степени свободы молекул и возбужденные электронные состояния атомов. Рассмотрены упругие и неупругие столкновения с переходами всех видов внутренней энергии и произвольными химическими реакциями.

Пусть τ_{rap} , τ_{sl} — характерные времена быстрых и медленных физико-химических процессов, происходящих при столкновениях частиц. Тогда, при условии $\tau_{rap} \ll \tau_{sl} \sim \theta$ (θ — характерное время изменения макроско-

пических параметров газа), в безразмерном виде систему обобщенных кинетических уравнений для реагирующей смеси газов можно записать следующим образом:

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

$\varepsilon = \tau_{rap}/\tau_{sl} \sim \tau_{rap}/\theta \ll 1$ — малый параметр, J_{cI}^{rap} , J_{cI}^{sl} — соответственно интегральные операторы быстрых и медленных процессов, f_{cI} — функция распределения частиц сорта c с внутренним состоянием $I = (n, i, j)$, n , i , j — соответственно уровни электронной, колебательной и вращательной энергии, \mathbf{u}_c — скорость частиц сорта c . Приближенное решение уравнений (1) строится в виде обобщенного ряда Энского-Чепмена по параметру ε :

$$f_{cI}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) = \sum_r \varepsilon^r f_{cI}^r(\mathbf{u}, \rho_\lambda, \nabla \rho_\lambda, \nabla^2 \rho_\lambda, \dots). \quad (2)$$

Пространственная и временная зависимость коэффициентов этого ряда определяется макропараметрами газа $\rho_\lambda(\mathbf{r}, t)$ и их градиентами всех порядков.

В зависимости от иерархии характерных времен релаксации определяется подход для описания течения и расчета коэффициентов переноса. В данной работе строятся однотемпературный и поуровневый подходы метода Энского-Чепмена. В каждом подходе записывается система уравнений для макропараметров. На основании функции распределения в нулевом и первом приближениях модифицированного метода Энского-Чепмена для реагирующей смеси газов с быстрыми и медленными процессами получаем выражения для потоковых членов. В первом приближении поуровневого подхода выражения для тензора напряжений и теплового потока выглядят следующим образом:

$$\mathbf{P} = (p - p_{rel}) \mathbf{I} - 2\eta \mathbf{S} - \zeta \nabla \cdot \mathbf{v} \mathbf{I}, \quad (3)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda' \nabla T - p \sum_{ci} D_{T_{ci}} \mathbf{d}_{ci} + \sum_{ci} \left(\frac{5}{2} kT + \langle \varepsilon_j^{ci} \rangle_{rot} + \varepsilon_i^c + \varepsilon_c \right) n_{ci} \mathbf{V}_{ci}, \quad (4)$$

здесь p — давление, p_{rel} — релаксационное давление, η — коэффициент сдвиговой вязкости, ζ — коэффициент объемной вязкости, \mathbf{S} — тензор скоростей сдвига, \mathbf{v} — макроскопическая скорость газа, \mathbf{I} — единичный тензор, T — температура газа, λ' — коэффициент теплопроводности поступательных и вращательных степеней свободы, \mathbf{d}_{ci} — диффузионная термодинамическая сила для частицы каждого сорта c на каждом колебательном уровне i , k — постоянная Больцмана, $\langle \varepsilon_j^{ci} \rangle_{rot}$ — осредненная вращательная энергия, ε_i^c — колебательная энергия частиц сорта c , ε_c — энергия образования частиц сорта c , n_{ci} — заселенность i -го колебательного уровня, $D_{T_{ci}}$

— коэффициент термодиффузии для каждого химического сорта и колебательного уровня, скорость диффузии колебательных состояний имеет вид:

$$\mathbf{V}_{ci} = - \sum_{dk} D_{cidk} \mathbf{d}_{dk} - D_{Tci} \nabla \ln T, \quad (5)$$

D_{cidk} — коэффициент диффузии для каждого химического сорта и колебательного уровня.

В однотемпературном приближении выражение для тензора напряжений формально совпадает с (3). Поток полной энергии имеет более простой вид:

$$\mathbf{q} = -\lambda' \nabla T - p \sum_c D_{Tc} \mathbf{d}_c + \sum_c \rho_c h_c \mathbf{V}_c, \quad (6)$$

h_c — удельная энтальпия частиц сорта c . Поток характеризуется только градиентом температуры и градиентами концентраций химических компонентов, а от градиентов заселенностей колебательных уровней не зависит. Коэффициент теплопроводности λ' в однотемпературном приближении описывает перенос всех видов внутренней энергии и определяется сечениями всех упругих и неупругих столкновений без химических реакций, коэффициенты диффузии D_{cd} и термодиффузии D_{Tc} в однотемпературном приближении не зависят от колебательных состояний.

Для определения коэффициентов переноса, входящих в выражения (3)–(5), с помощью метода Энскога-Чепмена из интегральных уравнений для функции распределения первого порядка выводятся замкнутые системы линейных алгебраических уравнений. Для решения этих систем необходим расчет интегральных скобок и интегралов столкновений (так называемых $\Omega_{cd}^{(l,r)}$ -интегралов).

В диссертации проанализированы модели для расчета $\Omega_{cd}^{(l,r)}$ -интегралов в различных диапазонах условий. Проведена оценка влияния размера возбужденных атомов на интегралы столкновений. Показано, что при температурах ниже 20000 K размер электронно возбужденных атомов слабо влияет на интегралы столкновений. Однако учет размера возбужденных атомов необходим при более высоких температурах.

Во **второй главе** на основе однотемпературного подхода метода Энскога-Чепмена из кинетических уравнений получены и решены системы линейных алгебраических уравнений для релаксационного давления и коэффициентов теплопроводности, диффузии, термодиффузии.

В **п. 2.1** коэффициент теплопроводности рассчитывался в газах N , O , N_2 , O_2 , NO с помощью точной кинетической теории с учетом возбужденных колебательных, вращательных и электронных степеней свободы, а также по приближенным формулам Эйкена и Гиршфельдера. В 1913 на осно-

ве представлений о длине свободного пробега молекул Е.Эйкен предложил разделять λ на две части (коэффициенты теплопроводности поступательных и внутренних степеней свободы):

$$\lambda = \lambda_{tr} + \lambda_{int} = (c_{c,tr}f_{tr} + c_{c,int}f_{int})\eta,$$

здесь $f_{tr} = \frac{5}{2}$, $f_{int} = 1$ — безразмерные факторы, $c_{c,tr}$, $c_{c,int}$ — удельные теплоемкости поступательных и внутренних степеней свободы частиц. Дж.Гиршфельдер на основе метода Энского-Чепмена предложил модификацию формулы Эйкена: $f_{int} = \frac{\rho D}{\eta} = 1.328$, ρ — плотность, D — коэффициент самодиффузии.

Для оценки достоверности модели, предложенной в настоящей работе, было проведено сравнение полученных теоретических результатов с экспериментом при низких температурах (200-1000 К). Было показано, что при низких температурах лучше всего коррелируют с экспериментом расчеты по точной кинетической теории и по формуле, предложенной Гиршфельдером.

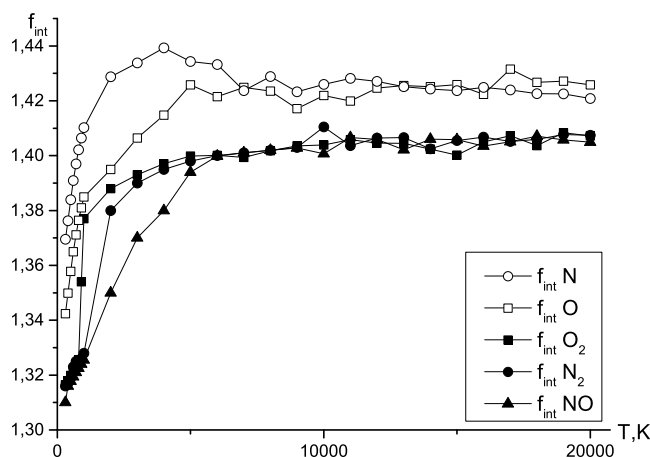


Рис. 1. Фактор Эйкена для различных сортов как функция от T

На основе точной кинетической теории были оценены факторы в формуле Эйкена. Среднее значение для f_{tr} равно $\frac{5}{2}$ во всем диапазоне рассматриваемых температур. На рис.1 представлены значения фактора внутренних степеней свободы f_{int} для всех рассмотренных химических сортов. Для молекул при низких температурах полученный фактор совпадает со значением, предложенным Гиршфельдером. При температурах выше 5000 К среднее значение фактора для молекул стремится к константе $f_{int} = 1.40$. В среднем диапазоне температур значение фактора зависит от химического

сорта и температуры и может быть аппроксимировано простыми формулами.

Для атомов без учета электронного возбуждения $f_{\text{int}} = 0$. При учете электронных степеней свободы в настоящей работе обнаружено, что при температурах выше 3000 K среднее значение f_{int} для атомов также стремится к константе, несколько большей, чем для молекул, $f_{\text{int}} = 1.42$. При низких температурах теплоемкость внутренних степеней свободы атомов близка к нулю, поэтому значение f_{int} не влияет на теплопроводность, и можно использовать предложенную константу во всем диапазоне температур.

Таким образом, для инженерных расчетов коэффициентов теплопроводности мы можем предложить значения фактора f_{int} для всего рассмотренного диапазона температур, от 200 до 20000 K . Значения f_{int} приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значение поправки f_{int} для формулы Эйкена.

с	$T < 20000 \text{ K}$		
N	1.42		
O	1.42		
с	$T < 1000 \text{ K}$	$1000 < T < 5000 \text{ K}$	$5000 < T < 20000 \text{ K}$
NO	1.328	$-2 \cdot 10^{-9}T^2 + 3 \cdot 10^{-5}T + 1.2988$	1.40
O_2	1.328	$-3 \cdot 10^{-9}T^2 + 3 \cdot 10^{-5}T + 1.3436$	1.40
N_2	1.328	$-8 \cdot 10^{-9}T^2 + 6 \cdot 10^{-5}T + 1.2783$	1.40

В п. 2.2. были решены транспортные системы линейных алгебраических уравнений для релаксационного давления для случая диссоциирующей смеси атомов и молекул азота с учетом электронного возбуждения в диапазоне температур $3000\text{--}10000 \text{ K}$. Релаксационное давление появляется вследствие быстрых неупругих обменов поступательной, электронной, вращательной и колебательной энергией и, кроме этого, замедленного процесса химических реакций, характерное время которого сравнимо с газодинамическим, то есть со временем изменения макропараметров. Релаксационное давление характеризует влияние медленных релаксационных процессов на нормальные напряжения; следует отметить, что данный эффект до настоящего времени остается практически неизученным.

Оценен вклад релаксационного давления в диагональные члены тензора напряжений. Показано, что без учета электронного возбуждения вклад релаксационного давления не превышает 8% , в то время как при учете электронного возбуждения может достигать 14% при концентрации атомов азота, равной $n_N/n = 0.5$. Интересно отметить, что знак релаксационного давления определяется направлением протекания химической реакции.

В п. 2.3 исследованы скорости диффузии и поток тепла в бинарной смеси газов за фронтом ударной волны в однотемпературном приближении

для различных начальных условий (электронное возбуждение не учитывалось). Решалась система уравнений, описывающая кинетику и динамику бинарной смеси атомов и молекул:

$$\frac{dn_m}{dt} + n_m \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_m \mathbf{V}_m) = R_m^{diss-rec}, \quad (7)$$

$$\frac{dn_a}{dt} + n_a \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_a \mathbf{V}_a) = -2R_m^{diss-rec}, \quad (8)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (9)$$

$$\rho \frac{dU}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} = 0, \quad (10)$$

где $R_m^{diss-rec}$ изменение числовой плотности молекул вследствие реакции диссоциации-рекомбинации. Выражения для скорости диффузии и теплового потока в однотемпературном приближении для бинарной смеси могут быть записаны в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_c &= \mathbf{V}_c^{MD} + \mathbf{V}_c^{TD}, & c = a, m \\ \mathbf{V}_m^{MD} &= -D_{ma} \mathbf{d}_a - D_{mm} \mathbf{d}_m, \\ \mathbf{V}_a^{MD} &= -D_{ma} \mathbf{d}_m - D_{aa} \mathbf{d}_a, \\ \mathbf{V}_c^{TD} &= -D_{Tc} \nabla \ln T, & c = a, m \end{aligned} \quad (11)$$

\mathbf{V}_c^{MD} , \mathbf{V}_c^{TD} — соответственно вклады массовой диффузии и термодиффузии.

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{HC} + \mathbf{q}^{MD} + \mathbf{q}^{TD}, \quad (12)$$

здесь \mathbf{q}^{HC} , \mathbf{q}^{MD} и \mathbf{q}^{TD} потоки тепла за счет теплопроводности (поток Фурье) поступательных и всех внутренних степеней свободы, массовой диффузии и термодиффузии, которые определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{HC} &= -\lambda' \nabla T, \\ \mathbf{q}^{MD} &= \rho_m h_m \mathbf{V}_m^{MD} + \rho_a h_a \mathbf{V}_a^{MD}, \\ \mathbf{q}^{TD} &= -p(D_{Tm} \mathbf{d}_m + D_{Ta} \mathbf{d}_a) + \rho_m h_m \mathbf{V}_m^{TD} + \rho_a h_a \mathbf{V}_a^{TD}. \end{aligned} \quad (13)$$

D_{mm} , D_{ma} , D_{aa} , D_{Tm} , D_{Ta} — бинарные коэффициенты диффузии и коэффициенты термодиффузии, \mathbf{d}_m , \mathbf{d}_a — диффузионные термодинамические силы, h_m , h_a — удельные энтальпии молекул и атомов. Такое представление удобно для анализа вклада различных диссипативных процессов в перенос тепла.

Система уравнений (7) – (10) решалась в одномерной стационарной постановке для смесей N_2/N и O_2/O . В набегающем потоке брались следующие

щие условия: $T_0 = 271$ К, $p_0 = 100$ Па, $M_0 = 10; 15; 18$, в невозмущенном потоке атомы отсутствовали. Параметры газа за фронтом ударной волны вычислялись с помощью соотношений Рэнкина-Гюгонио при условии замороженного химического состава смеси и полностью возбужденных внутренних степеней свободы во фронте. Показано, что кинетические и диссипативные процессы протекают более эффективно при высоких числах Маха. Исследована роль теплопроводности, термодиффузии и массовой диффузии в переносе тепла; обнаружено, что поведение полного потока тепла в основном определяется массовой диффузией. Все процессы в смеси O_2/O протекают заметно быстрее, чем в N_2/N , это ведет к более высоким значениям градиентов макропараметров и, следовательно, к более интенсивному переносу массы и энергии.

В **третьей главе** изучено влияние поуровневой кинетики на диффузию и перенос тепла за фронтом ударной волны в бинарных смесях N_2/N и O_2/O (электронное возбуждение не учитывалось). Решалась система уравнений за фронтом ударной волны для заселенностей колебательных уровней n_i , числовых плотностей атомов n_a , скорости v и температуры T , поток предполагался одномерным и стационарным, газ — невязким:

$$\frac{d(vn_i)}{dx} = R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}, \quad i = 0..L, \quad (14)$$

$$\frac{d(vn_a)}{dx} = -2 \sum_i R_i^{diss-rec}, \quad (15)$$

$$\rho_0 v_0 = \rho v, \quad (16)$$

$$\rho_0 v_0^2 + p_0 = \rho v^2 + p, \quad (17)$$

$$h_0 + \frac{v_0^2}{2} = h + \frac{v^2}{2}, \quad (18)$$

здесь x — расстояние от фронта ударной волны, ρ_0 , v_0 , h_0 — плотность, скорость и энтальпия газа в набегающем потоке, L — число возбужденных колебательных уровней. Правые части уравнений 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, для описания диссоциации использовалась модель Тринора-Маррона, модифицированная для поуровневого приближения. Для исследования процессов переноса применялся приближенный подход: макропараметры и их производные, полученные в результате решения уравнений (14)–(18), подставлялись в выражения для потоковых членов, полученных в первом приближении метода Энского-Чепмена.

Характерной особенностью диффузии и теплопереноса в поуровневом

приближении является зависимость теплового потока и скорости диффузии от заселенностей колебательных уровней молекул. Для бинарной смеси атомов и молекул выражения (4),(5) можно упростить:

$$\mathbf{V}_i = \mathbf{V}_i^{TD} + \mathbf{V}_i^{MD} + \mathbf{V}_i^{DVE}, \quad (19)$$

$$\mathbf{V}_a = \mathbf{V}_a^{TD} + \mathbf{V}_a^{MD}. \quad (20)$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_i^{MD} &= -D_{mm}\mathbf{d}_m - D_{ma}\mathbf{d}_a, \\ \mathbf{V}_i^{TD} &= -D_{Tm}\nabla \ln T, \end{aligned} \quad (21)$$

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

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{HC} + \mathbf{q}^{MD} + \mathbf{q}^{TD} + \mathbf{q}^{DVE}. \quad (22)$$

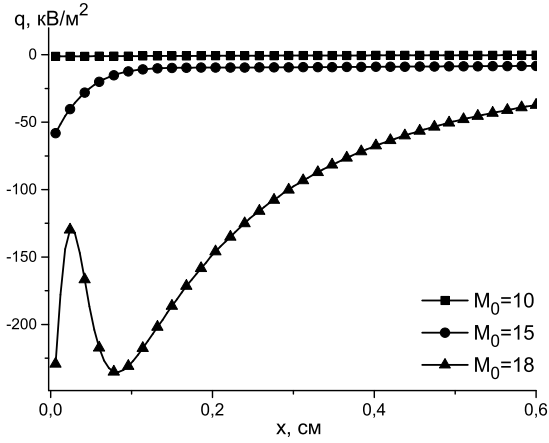
\mathbf{q}^{DVE} – поток за счет диффузии колебательной энергии:

$$\mathbf{q}^{DVE} = \sum_i \left(\frac{5}{2}kT + \langle \varepsilon^i \rangle_{rot} + \varepsilon_i \right) n_i \mathbf{V}_i^{DVE}. \quad (23)$$

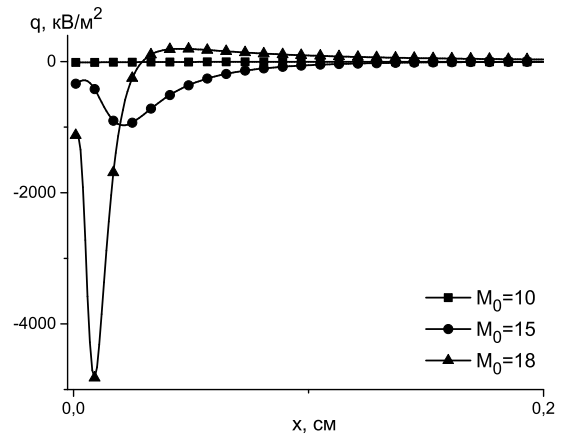
В однотемпературном подходе в выражение для полного потока не входит \mathbf{q}^{DVE} , поскольку поток Фурье включает в себя перенос колебательной энергии за счет соответствующего коэффициента теплопроводности.

Сначала рассмотрен случай равновесного набегающего потока ($T_0 = T_v$, T_v – колебательная температура); проведена оценка влияния начальных условий на перенос тепла за ударной волной при следующих начальных условиях: $T_0 = 271$ К, $p_0 = 100$ Па, $n_m = p_0/kT_0$, $n_a = 0$, $M_0 = 10, 15, 18$. На рис. 2 приведены тепловые потоки за фронтом ударной волны как функции расстояния x от фронта для смесей N_2/N и O_2/O . При $M_0 = 10$ поток тепла близок к нулю, так как градиенты всех макропараметров малы. В смеси N_2/N при $M_0 = 15$ полный поток тепла быстро меняется вблизи фронта ударной волны, затем стремится к нулю при установлении равновесного состояния. Самый интересный случай соответствует смеси N_2/N при $M_0 = 18$ и смеси O_2/O при $M_0 = 15$ и $M_0 = 18$. Полный поток тепла ведет себя немонотонно, так как основной вклад в полный поток тепла в зависимости от x вносят различные процессы. Показано, что для более высоких чисел Маха кинетические и диссипативные процессы происходят эффективнее.

Исследовано влияние различных процессов на перенос тепла за ударной волной (рис. 3). Подробно рассмотрен случай равновесного набегающего

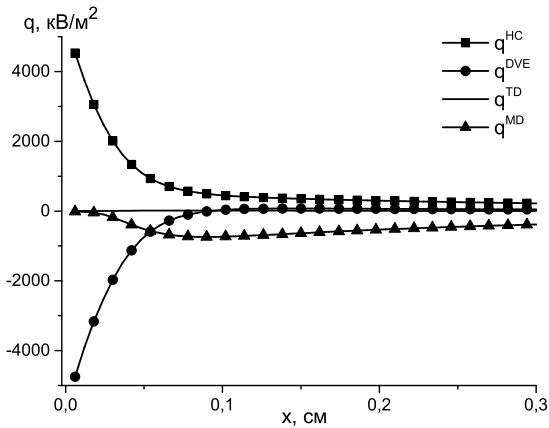


(a)

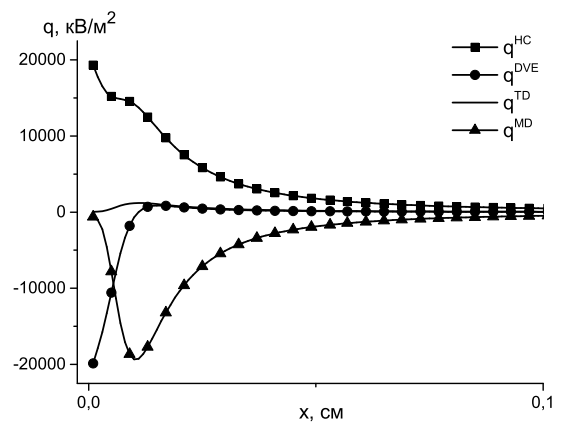


(b)

Рис. 2. Полный поток тепла за ударной волной как функция от x . $T_0 = T_v$. (a) - N_2/N , (b) - O_2/O .



(a)



(b)

Рис. 3. Вклад различных процессов в поток тепла за фронтом ударной волны как функция от x . $T_0 = T_v$. $M_0 = 18$. (a) - N_2/N , (b) - O_2/O .

потока при $M_0 = 18$. Видно, что термодиффузия практически не влияет на поток тепла за фронтом ударной волны. В смеси N_2/N (рис. 3(a)) поток Фурье и поток за счет диффузии колебательной энергии вносят вклад одного порядка сразу за фронтом ударной волны. Их абсолютные значения велики при $x < 0.1$ см. Знаки этих потоков противоположны, поэтому происходит компенсация, и значение полного потока оказывается значительно меньше. Вклад потока за счет диффузии колебательной энергии оказывается больше, что ведет к тому, что знак полного потока тепла противоположен знаку потока Фурье. Это объясняет, почему полный поток тепла – отрицательный. Влияние массовой диффузии становится значительным лишь при $x > 0.05$ см из-за задержки реакции диссоциации. Это приводит к повышению полного потока тепла при $x > 0.05$ см. Поэтому при $M_0 = 18$ поведение полного потока тепла является немонотонным. При более низких числах Маха диссоциация молекул азота недостаточна, чтобы оказать

эффект на полный поток тепла. В смеси O_2/O все процессы протекают быстрее и градиенты газодинамических параметров больше по сравнению со случаем N_2/N , что приводит к большим значениям потока; диссоциация в смеси O_2/O начинается раньше и протекает активнее, поэтому влияние массовой диффузии на полный поток тепла сильнее, чем в смеси N_2/N .

Далее рассмотрен случай неравновесного набегающего потока, когда колебательная температура $T_v = 8000$ К. В этом случае (рис. 4) в смеси N_2/N полный поток тепла меняет свой знак и становится положительным. Для смеси O_2/O поток не меняет знак, но его абсолютное значение становится на порядок больше по сравнению со случаем равновесного набегающего потока. Чтобы понять поведение полного потока тепла, проанализируем вклад теплопроводности, термодиффузии, массовой диффузии и диффузии за счет переноса колебательной энергии в q . Для смеси азота (рис. 5(a)) влияние массовой диффузии на полный поток тепла мало, а знак q определяется q^{DVE} . В случае сильной неравновесности ($T_0 = 271$ К, $T_v = 8000$ К), полный тепловой поток, поток Фурье и поток за счет диффузии колебательной энергии меняют знаки, так как процессы возбуждения заменяются деактивацией, а температура газа возрастает с ростом x . В случае кислорода (рис. 5(b)) начальная колебательная неравновесность ускоряет диссоциацию, поэтому основной вклад в полный поток тепла вносит массовая диффузия. Несмотря на то, что поток Фурье и поток за счет диффузии колебательной энергии меняют знаки, знак полного потока тепла в случае сильной неравновесности определяется q^{MD} , абсолютное значение которого значительно выше, чем значения q^{HC} и q^{DVE} . Поэтому полный тепловой поток в смеси O_2/O остается отрицательным.

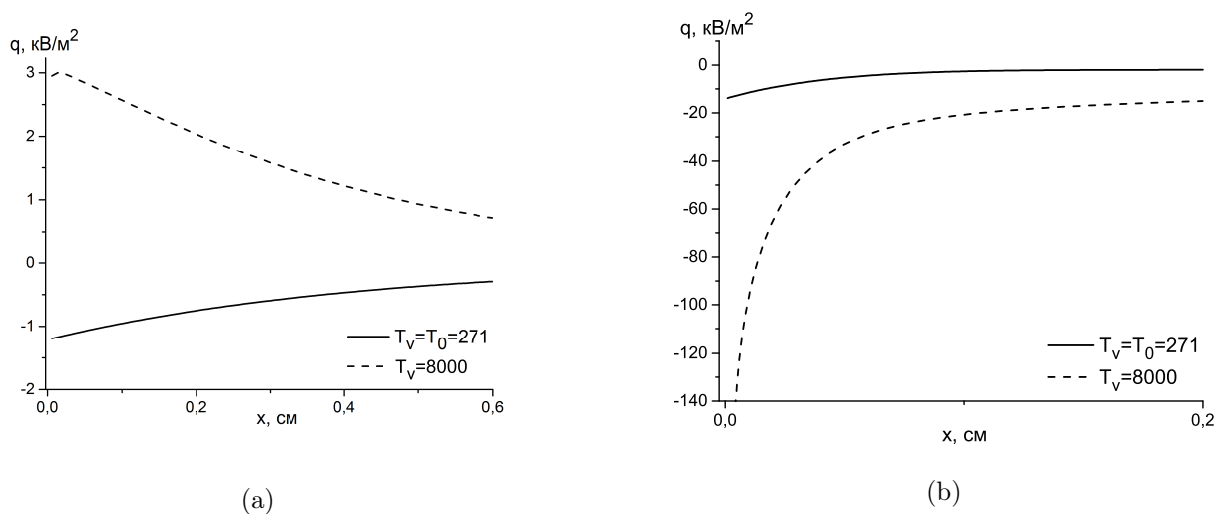
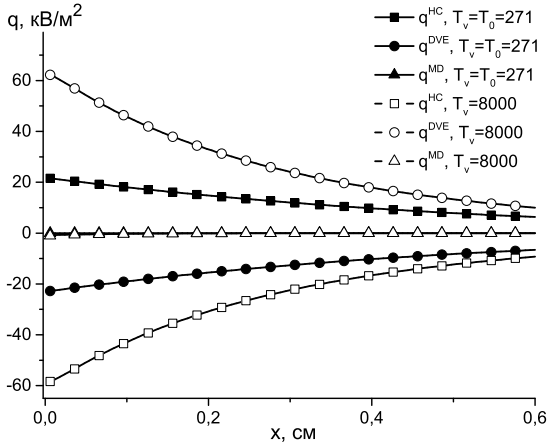
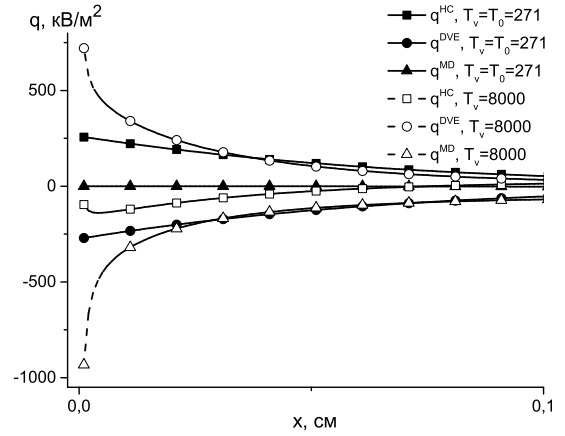


Рис. 4. Полный поток тепла смеси за ударной волной как функция от x . $M_0 = 10$. (a) - N_2/N , (b) - O_2/O .

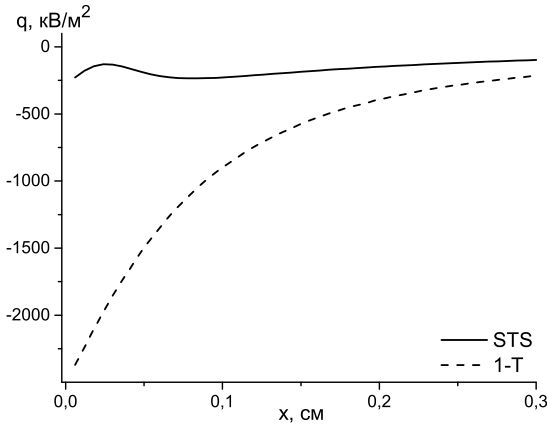


(a)

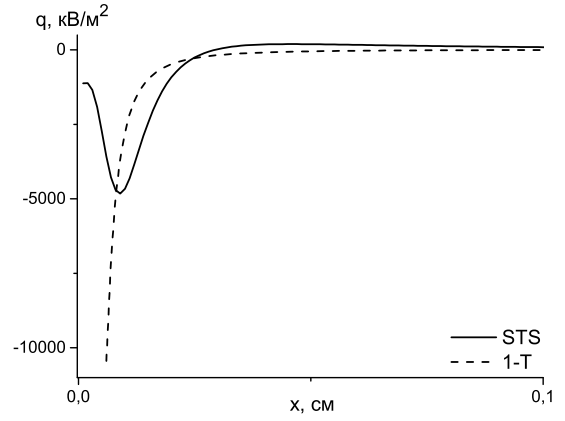


(b)

Рис. 5. Вклад различных процессов в поток тепла за фронтом ударной волны как функция от x . $M_0 = 10$. (a) - N_2/N , (b) - O_2/O .



(a)



(b)

Рис. 6. Полный поток тепла за ударной волной как функция от x . $M_0 = 18$. (a) - N_2/N , (b) - O_2/O .

Проведено сравнение результатов, полученных при использовании поровневого и однотемпературного подходов (рис. 6). Показано, что в однотемпературном приближении сразу за фронтом ударной волны наблюдается существенное завышение числовых плотностей атомов, так как нет задержки реакции диссоциации, что ведет к переоценке вклада массовой диффузии и, как следствие, завышенным значениям полного потока тепла. В смеси атомов и молекул кислорода быстрая колебательная релаксация и диссоциация ведут к резкому изменению газодинамических параметров вблизи фронта ударной волны и, следовательно, к большим значениям теплового потока, по сравнению с азотом.

Заключение содержит список основных результатов, полученных в работе.

1. В диссертации представлены результаты расчета коэффициентов пе-

реноса на основе метода Энского-Чепмена для реагирующей смеси газов с быстрыми и медленными процессами в одготемпературном и поуровневом приближениях.

2. На основе одготемпературного приближения метода Энского-Чепмена рассчитан коэффициент теплопроводности молекул N_2 , O_2 , NO с возбужденными колебательными, вращательными и электронными степенями свободы и электронно возбужденных атомов N , O . Предложена модификация поправки Эйкена для коэффициента теплопроводности в температурном диапазоне 200–20000 К, учитывающая электронное возбуждение молекул и атомов. Проведена оценка влияния размера возбужденных атомов на интегралы столкновений. Установлены пределы применимости приближенных моделей расчета коэффициентов теплопроводности при учете электронного возбуждения.
3. Изучено влияние химического состава, температуры и учета электронного возбуждения атомов и молекул на релаксационное давление в смеси N_2/N при температурах 3000-10000 К; выявлена зависимость величины релаксационного давления от типа реакции и степени отклонения от равновесия, оценен вклад релаксационного давления в диагональные члены тензора напряжений.
4. Диффузия и поток тепла при течении бинарных смесей N_2/N и O_2/O за фронтом ударной волны исследованы для различных чисел Маха в набегающем потоке ($M_0 = 10; 15; 18$) с использованием различных кинетических моделей. Проведено сравнение результатов, полученных при использовании поуровневого и одготемпературного подходов. Показано, что в одготемпературном приближении сразу за фронтом ударной волны наблюдается существенное завышение числовых плотностей атомов, что ведет к переоценке вклада массовой диффузии и, как следствие, завышенным значениям полного потока тепла.
5. Изучено влияние поуровневой кинетики на диффузию и перенос тепла за фронтом ударной волны. Проанализирован вклад теплопроводности, термодиффузии, массовой диффузии и диффузии за счет переноса колебательной энергии в полный поток тепла: обнаружены компенсационные эффекты различных диффузионных процессов. Показано, что для более высоких чисел Маха кинетические и диссипативные процессы происходят эффективнее.
6. Показано, что в случае неравновесного набегающего потока при $M_0 = 10$ в смеси N_2/N с начальным возбуждением колебательных степеней свободы тепловой поток меняет знак; в смеси O_2/O происходит заметный рост теплового потока.

Работы автора по теме диссертации

Публикации в журналах, рекомендованных ВАК:

- [1] *Кустова Е.В., Мехоношина М.А.* Релаксационное давление в смеси N_2/N с учетом неравновесной реакции диссоциации // ВЕСТНИК САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. СЕРИЯ 1: МАТЕМАТИКА, МЕХАНИКА, АСТРОНОМИЯ, 2012. № 1. С. 86-95
- [2] *Kustova E.V., Makarkin D.V., Mekhonoshina M.A.* Normal Mean Stress in Non-Equilibrium Viscous N_2/N Flows with Dissociation and Electronic Excitation // AIP Conference Proceedings, 2012. V. 1501, P. 1086-1093.
- [3] *Istomin V.A., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A.* Eucken correction in high-temperature gases with electronic excitation // Journal of Chemical Physics, 2014. V. 140, № 18. P. 184311.
- [4] *Kunova O.V., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A., Nagnibeda E.A.* The influence of state-to-state kinetics on diffusion and heat transfer behind shock waves // AIP Conference Proceedings, 2014. V. 1628, P. 1202-1209.
- [5] *Istomin V.A., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A.* Validity of Eucken formula and Stokes' viscosity relation in high-temperature electronically excited gases // AIP Conference Proceedings, 2014. V. 1628, P. 1229-1236.
- [6] *Josyula E., Burt J., Kustova E., Vedula P., Mekhonoshina M.* State-to-State Kinetic Modeling of Dissociating and Radiating Hypersonic Flows // AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2015. AIAA 2015-0475.

Другие публикации:

- [7] *Кунова О.В., Мехоношина М.А.* Влияние неравновесной кинетики на теплоперенос и диффузию за фронтом ударной волны // ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА В ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ, 2014. Т. 15. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-1/articles/106/>
- [8] *Kustova E., Krylov A., Lashkov V., Mekhonoshina M.* Experimental Facilities and Modelling for Rarefied Aerodynamics // RTO-EN-AVT-194 - Models and Computational Methods for Rarefied Flows. — von Karman Institute, Rhode St. Gense, Belgium: NATO Science and Technology Organization, 2011. 624, 20 стр.
- [9] *Kustova E.V., Makarkin D.V., Mekhonoshina M.A.* Normal Mean Stress in Non-equilibrium Viscous N_2/N Flows with Dissociation and Electronic Excitation // 28th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, Book of Abstract, Zaragoza, Spain, July 9-13, 2012 — Zaragoza, 2012. P. 134-135

- [10] *Мехоношина М.А.* Влияние неравновесной реакции диссоциации на нормальные напряжения в смеси N_2-N с электронным возбуждением // XXIII семинар по струйным, отрывным и нестационарным течениям: сборник трудов / под ред. Г.В. Кузнецова и др.; Томский политехнический университет, г. Томск, 2012. С. 430, С. 250-251.
- [11] *Кустова Е.В., Мехоношина М.А.* Релаксационное давление в смеси N_2/N с неравновесной реакцией диссоциации-рекомбинации и электронным возбуждением // Шестые Поляховские чтения: Тезисы докладов Международной научной конференции по механике, Санкт-Петербург, 31 января-3 февраля 2012г. г. Санкт-Петербург, 2012. С. 304
- [12] *Istomin V.A., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A.* Heat flux and stress tensor in plasma flow with electronic excitation // Proceedings of 5th European Conference for Aeronautics and Space Science. June 2013, Munich, Germany, 2013.
- [13] *Kunova O.V., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A., Nagnibeda E.A.* The influence of state-to-state kinetics on diffusion and heat transfer behind shock waves // Abstract book of 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. Xi'an, China, 2014. — P. 287.
- [14] *Istomin V.A., Kustova E.V., Mekhonoshina M.A.* Validity of Eucken formula and Stokes viscosity relation in high-temperature electronically excited gases // Abstract book of 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. Xi'an, China, 2014. P. 283-284.
- [15] *Истомин В.А., Кустова Е.В., Мехоношина М.А.* Теплопроводность высокотемпературных газов с электронным возбуждением: уточнение поправок Эйкена и Гиршфельдера // Материалы X Международной конференции по Неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2014), 2014.