

УДК 533.6.011

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ С ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ В СИЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЕ С ПРИБЛИЖЕННЫМ УЧЕТОМ ПОСТУПАТЕЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ

В. А. Горелов, М. М. Кузнецов, В. Л. Юмашев

Центральный аэрогидродинамический институт, 140180 Жуковский

На основе модели пучок — газ, обобщенной на случай многокомпонентного газа, исследовано влияние поступательной неравновесности на протекание химических реакций в ударной волне. Для аррениусовских реакций общего вида получено видоизмененное выражение для их скоростей при соударениях молекул пучка и газа, учитывающее относительное движение двух сред. Рассматривается процедура численного решения задачи и приводятся результаты расчета ударной волны в диссоциирующем воздухе при скорости набегающего потока 6000 м/с.

**Введение.** Исследование течений с химическими реакциями в сильных ударных волнах представляет практический интерес и проводится как экспериментальными методами, так и путем численного моделирования. Для численного моделирования этих процессов существуют подходы, различающиеся по сложности и степени соответствия реальной картине.

Наиболее простой и часто используемой является модель бесконечно тонкой ударной волны [1], в которой течение считается невязким, скачок параметров на ударной волне соответствует замороженному течению, а физико-химические процессы рассматриваются только в реакционном слое за ударной волной. Данная модель позволяет вводить детальные сложные схемы физико-химических процессов. Однако при этом не учитываются конечная толщина ударной волны, обусловленная эффектами молекулярного переноса, и реакции, протекающие как в самой ударной волне, так и перед ее фронтом (см. [2]). Все это ограничивает область применимости модели тонкой ударной волны.

Простейшим способом учета конечной толщины ударной волны является использование уравнений Навье — Стокса, описывающих течение вязкого многокомпонентного газа с химическими реакциями. Этот подход требует применения более сложного математического аппарата, но позволяет вводить практически такую же детальную схему физико-химических процессов, что и модель тонкой ударной волны. В частности, расчеты ударной волны в диссоциирующем воздухе в приближении уравнений Навье — Стокса [3] показали существенное отличие профилей газодинамических функций и концентраций компонентов по сравнению со случаем тонкой ударной волны.

Однако известно, что уравнения Навье — Стокса неточно описывают структуру ударной волны из-за сильной неравновесности статистического распределения молекул по энергиям в области резкого изменения параметров газа. Это относится также к описанию кинетики физико-химических процессов во фронте ударной волны.

Наиболее адекватным методом расчета структуры ударной волны считается метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (см., например, [4, 5]), с помощью

которого во многих работах исследовано течение с неравновесностью статистической природы. Прямое статистическое моделирование применяется и для расчета течений с химическими реакциями [6, 7]. Однако в случае высокопороговых реакций значительно возрастает вычислительная трудоемкость метода из-за низкой вероятности актов реакций, приводящей к необходимости многократного увеличения числа рассматриваемых частиц.

Сказанное выше обуславливает поиск способов приближенного учета поступательной неравновесности в ударной волне и ее влияния на кинетику химических реакций. Так, в [8, 9] для решения уравнения Больцмана в ударной волне используется приближенное аналитическое выражение для функции распределения молекул Тамма — Мотт-Смита, представляющее собой комбинацию двух максвелловских распределений. Другой подход основан на модели пучок — газ [10, 11], в которой набегающий поток рассматривается как молекулярный пучок, входящий в сплошную среду за ударной волной. Поступательная неравновесность в этой модели определяется первыми высокоэнергетическими столкновениями молекул пучка с молекулами сплошной среды. В исходном варианте модель пучок — газ построена для однокомпонентного газа без химических реакций. В настоящей работе рассматривается обобщение этой модели на случай многокомпонентного газа и вводятся соответствующие изменения в закономерности кинетики химических реакций. В результате для достаточно общего набора реакций, подчиняющихся закону Аррениуса, получено видоизмененное выражение для скоростей реакций при соударениях молекул пучка и газа, учитывающее относительное движение двух сред.

Численная реализация модели выполнена методом, ранее применявшимся для решения уравнений Навье — Стокса [3] и основанным на неявной разностной схеме с чередованием узлов [12, 13]. Для проверки метода проведено сравнение результатов расчета ударной волны в аргоне с результатами расчета методом Монте-Карло. Выполнены расчеты ударной волны в диссоциирующем воздухе при скорости набегающего потока 6000 м/с, результаты которых показывают существенные отличия протекания физико-химических процессов в ударной волне по сравнению с моделью Навье — Стокса.

**Постановка задачи и система уравнений.** Считается, что в модели пучок — газ течение в ударной волне состоит из двух сред. Одной средой является набегающий поток, трактуемый как молекулярный пучок, в котором частицы движутся с постоянной скоростью и проникают в однокомпонентный газ за ударной волной. Другая среда — однокомпонентный газ (континуум) за ударной волной, движение которого описывается уравнениями Навье — Стокса (в дальнейшем будем называть его газом). Структура такого течения приведена на рис. 1.

При  $x \rightarrow -\infty$  задаются параметры пучка: скорость, давление, плотность и химический состав набегающего потока. При входе пучка в зону ударной волны его молекулы сталкиваются с молекулами газа. Предполагается, что при первом же столкновении молекула пучка переходит в газ с соответствующим переносом массы, импульса и энергии. При этом скорость остальных молекул пучка (не испытавших столкновений) не изменя-

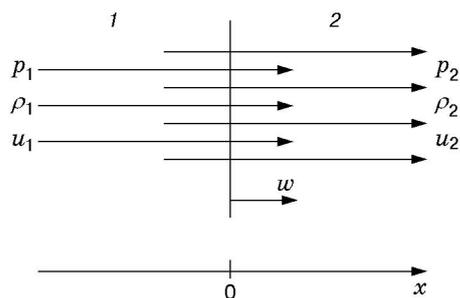


Рис. 1. Схема ударной волны в модели пучок — газ:

1 — набегающий поток в виде молекулярного пучка, 2 — однокомпонентный газ за ударной волной

ется и равна скорости набегающего потока. В результате столкновений плотность пучка постепенно уменьшается до нуля, так что на некоторой глубине в газе пучок практически исчезает. Аналогично плотность газа асимптотически стремится к нулю в противоположном направлении.

Для численного решения задачи используется метод установления по времени, поэтому все процессы рассматриваются как нестационарные. Система уравнений, описывающих совместное одномерное нестационарное движение многокомпонентных пучка и газа, имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho_b \\ \rho_b b_j \\ \rho \\ \rho u \\ \rho(E + E_k) \\ \rho c_i \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho_b u_b \\ \rho_b u_b b_j \\ \rho u \\ \rho u^2 + p - f \\ \rho u(E + E_k) + up - uf - q \\ \rho u c_i - \rho d_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -G \\ -G_j \\ G \\ G J_0 \\ G E_0 \\ r_i + g_i \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$u_b = \text{const} \equiv u_1, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad j = 1, \dots, N_b - 1.$$

Здесь  $x$  — координата;  $t$  — время;  $u$ ,  $p$ ,  $\rho$ ,  $E$ ,  $E_k$  — скорость, давление, плотность, внутренняя энергия, кинетическая энергия газа;  $u_b$ ,  $\rho_b$  — скорость и плотность пучка;  $u_1$  — скорость набегающего потока;  $J_0$  — удельный импульс набегающего потока;  $E_0$  — полная энергия набегающего потока;  $c_i$  — массовые доли компонентов газа;  $b_j$  — массовые доли компонентов пучка;  $r_i$  — массовые скорости образования компонентов газа в результате химических реакций;  $G_j$  — массовые скорости оттока компонентов из пучка в газ в результате соударений молекул пучка и газа;  $g_i$  — массовые скорости притока компонентов из пучка в газ;  $G$  — суммарная скорость перетока массы из пучка в газ;  $f$  — напряжение вязкой силы;  $q$  — тепловой поток;  $d_i$  — диффузионные потоки;  $i$  — номер компонента газа;  $j$  — номер компонента пучка;  $N$  — суммарное число компонентов газа;  $N_b$  — суммарное число компонентов пучка. Число уравнений переноса компонентов на единицу меньше числа компонентов в силу условий

$$c_1 + c_2 + \dots + c_N = 1, \quad b_1 + b_2 + \dots + b_{N_b} = 1.$$

Следует отметить, что все компоненты, имеющиеся в пучке, присутствуют также в газе, при этом нумерация компонентов в пучке и газе одинаковая. Однако в газе возможно появление дополнительных компонентов в результате химических реакций, поэтому  $N \geq N_b$ . Если рассматривать только обычные реакции между молекулами газа и не учитывать реакции при столкновениях молекул пучка и газа, то приток компонентов в газ равен их оттоку из пучка, так что  $g_i = G_i$  при  $i \leq N_b$  (имеются в виду компоненты, присутствующие как в пучке, так и в газе),  $g_i = 0$  при  $i > N_b$  (имеются в виду компоненты, присутствующие только в газе). Учет реакций между молекулами пучка и газа приводит к более сложным зависимостям, которые будут рассмотрены ниже.

Справедливы соотношения

$$p = \rho T \sum_{i=1}^N c_i R_i, \quad \rho E + p = \sum_{i=1}^N c_i h_i, \quad h_i = h_{0i} + C_{pi} T + E_{vi}, \quad E_k = \frac{u^2}{2},$$

$$f = \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad q = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{i=1}^N h_i d_i, \quad d_i = D_i \frac{\partial c_i}{\partial x}, \quad G = \sum_{j=1}^{N_b} G_j = \sum_{i=1}^N g_i,$$

$$E_{vi} = \frac{R_i \vartheta_i}{\exp(\vartheta_i/T) - 1}, \quad J_0 = u_1 + \frac{p_1}{\rho_1 u_1}, \quad E_0 = \frac{u_1^2}{2} + E_1 + \frac{p_1}{\rho_1}.$$

Здесь  $T$  — температура;  $h_i$  — энтальпии компонентов;  $h_{0i}$  — энтальпии их образования;  $E_{vi}$  — равновесные колебательные энергии;  $\vartheta_i$  — дебаевские температуры;  $\mu$ ,  $\lambda$ ,  $D_i$  — коэффициенты вязкости, теплопроводности, диффузии;  $R_i$ ,  $C_{pi}$  — газовые постоянные и теплоемкости компонентов; индекс 1 соответствует параметрам набегающего потока.

Отметим, что в отличие от [10] в настоящей работе учитываются давление и внутренняя энергия набегающего потока в общем балансе импульса и энергии, чтобы соотношения Гюгонио на ударной волне выполнялись так же, как в других моделях ударной волны, с которыми проводится сравнение. Однако при расчете взаимодействия молекул пучка и газа скорость собственного теплового движения молекул пучка считается пренебрежимо малой по сравнению со скоростью их общего поступательного движения и полагается равной нулю, так же как в работе [10]. Следовательно, столкновения молекул пучка между собой не учитываются.

**Определение источниковых членов.** В отсутствие химических реакций при соударениях молекул пучка и газа массовая скорость перехода компонентов из пучка в газ определяется на основе модели упругого столкновения молекул как твердых сфер:

$$G_j = \rho \rho_b (u_b - u) b_j \sum_{i=1}^N \sigma_{ij} \frac{c_i}{m_i}, \quad \sigma_{ij} = N_A \sqrt{\pi} \left( \frac{\delta_i + \delta_j}{2} \right)^2 F(z_{ij}),$$

$$F(z) = \frac{1}{z} e^{-z} + \left( 2 + \frac{1}{z^2} \right) \int_0^z e^{-x^2} dx, \quad z_{ij} = (u_b - u) \sqrt{\frac{m_i m_j}{R_0 T (m_i + m_j)}}.$$

Здесь  $m_i$  — молекулярная масса компонента  $i$ ;  $\sigma_{ij}$  — эффективное сечение столкновения компонентов  $i$  и  $j$  в расчете на 1 моль;  $\delta_i$  — диаметр молекулы сорта  $i$ ;  $N_A$  — число Авогадро;  $R_0$  — универсальная газовая постоянная.

При наличии химических реакций следует различать два случая: реакции при столкновениях молекул газа между собой и реакции при столкновениях молекул пучка и газа. В первом случае энергия столкновений молекул, влияющая на скорость реакций, зависит только от температуры газа; кинетика таких реакций считается изученной. Во втором случае энергия столкновения молекул зависит не только от температуры, но и от скорости движения пучка относительно газа. Это приводит к существенному изменению кинетических зависимостей [14, 15].

Предположим, что между  $N$  компонентами газа может происходить  $K$  реакций, причем реакция с номером  $k$  описывается обобщенной формулой

$$\alpha_{k1} Z_1 + \alpha_{k2} Z_2 + \dots + \alpha_{kN} Z_N = \beta_{k1} Z_1 + \beta_{k2} Z_2 + \dots + \beta_{kN} Z_N. \quad (2)$$

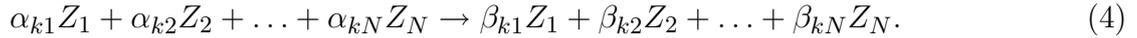
Здесь  $\alpha_{ki}$ ,  $\beta_{ki}$  — стехиометрические коэффициенты (на практике только некоторые из них отличны от нуля);  $Z_i$  — компоненты газа. Считаем, что скорости реакций подчиняются закону Аррениуса, так что скорость образования  $i$ -го компонента имеет вид

$$r_i = m_i \sum_{k=1}^K (\beta_{ki} - \alpha_{ki}) (Q_{fk} - Q_{rk}),$$

$$Q_{fk} = A_{fk} T^{n_{fk}} \exp \left( - \frac{\Theta_{fk}}{T} \right) \prod_{i=1}^N \left( \frac{\rho c_i}{m_i} \right)^{\alpha_{ki}}, \quad Q_{rk} = A_{rk} T^{n_{rk}} \exp \left( - \frac{\Theta_{rk}}{T} \right) \prod_{i=1}^N \left( \frac{\rho c_i}{m_i} \right)^{\beta_{ki}}.$$

Здесь  $Q$  — скорость реакции;  $A$ ,  $n$ ,  $\Theta$  — коэффициент, показатель степени и нормированная энергия активации в законе Аррениуса; индекс  $f$  обозначает прямую реакцию,  $r$  — обратную.

Реакции, происходящие при соударении молекул пучка и газа, отличаются тем, что в них участвуют только две частицы и отсутствуют обратные реакции, так как нет обратного перехода вещества из газа в пучок. Следовательно, из множества реакций (2) пучок непосредственно участвует только в тех реакциях (из правой или левой части формулы), где присутствуют только два компонента, один из которых изначально содержится в пучке. Формально реакции с участием пучка образуют самостоятельное множество в дополнение к (2) и описываются аналогичной обобщенной формулой



Очевидно, пучковый компонент всегда находится в левой части (4), даже если исходная реакция была взята из правой части (2); в последнем случае коэффициенты  $\alpha_{ki}$  и  $\beta_{ki}$  меняются местами.

Пусть имеется  $L$  реакций вида (4) (причем  $L$  может оказаться как меньше, так и больше  $K$ ). Тогда скорость убывания  $i$ -го компонента пучка в результате всех реакций (4) имеет вид

$$B_i = m_i \sum_{k=1}^L \alpha_{ki} Q_k,$$

а скорость образования  $i$ -го компонента газа —

$$s_i = m_i \sum_{k=1}^L (\beta_{ki} - \alpha_{ki}) Q_k.$$

Новое обозначение  $s_i$  здесь введено для того, чтобы отличать реакции с участием пучка от аналогичных реакций в газе (3).

Пусть для определенности реакция с номером  $k$  происходит между  $i$ -м компонентом пучка и  $j$ -м компонентом газа. Из молекулярно-кинетических соображений с учетом поступательного движения молекул пучка для вычисления скорости реакции  $Q_k$  необходимо знать сечение столкновения молекул. В качестве исходных данных для определения сечения столкновения примем известную скорость той же реакции в газе: предполагаем такую зависимость сечения от относительной скорости молекул, которая в случае равновесного теплового движения приводит к закону Аррениуса с известными параметрами  $A$ ,  $n$ ,  $\Theta$ . Исходя из этого по аналогии с [14, 15] можно получить видоизмененное выражение для скорости реакции, учитывающее относительное движение двух сред. Если дополнительно принять, что скорость теплового движения молекул пучка пренебрежимо мала по сравнению со скоростью поступательного движения, то скорость реакции примет вид

$$Q_k = A_k T^{n_k} \Phi(z, \varepsilon_k, n_k) (1 + m_j/m_i)^{-1} \rho_b \rho_i c_j / (m_i m_j), \quad (5)$$

где

$$z = (u_b - u) \sqrt{m_j / (2R_0 T)}, \quad \varepsilon_k = \sqrt{(1 + m_j/m_i) \Theta_k / T},$$

$$\Phi(z, \varepsilon, n) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(n + 3/2)} \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{\exp(-(x-z)^2) - \exp(-(x+z)^2)}{2z} (x^2 - \varepsilon^2)^{n+1/2} dx.$$

В формуле (5) учтено влияние на процесс поступательной неравновесности, связанной с высокой энергией первых столкновений молекул набегающего потока. Формула (5) соответствует предельному случаю распределения Тамма — Мотт-Смита, когда температура

одного из максвеллианов (пучка) стремится к нулю. При определенных условиях она дает существенное увеличение скорости реакции по сравнению с законом Аррениуса, поскольку из-за относительного движения пучка и газа происходит как бы сдвиг барьера активации в сторону меньших энергий. Полученные ранее результаты для случая  $n = 0,5$  [14] здесь распространяются на случай произвольного  $n > -1,5$ , что имеет значение при использовании реальных схем реакций.

Заметим, что наличие реакций не влияет на скорости оттока компонентов из пучка  $G_i$ , поскольку молекула пучка при столкновении с молекулой газа в любом случае покидает пучок. Однако в результате реакций состав компонентов, поступающих в газ, отличается от состава компонентов, покидающих пучок. Действительно, в результате реакций в газ поступает только часть компонента, покинувшего пучок, определяемая скоростью  $G_i - B_i$ , но при этом добавляется часть того же компонента, образовавшегося в других реакциях, определяемая скоростью  $s_i$ . В итоге  $g_i = G_i - B_i + s_i$  при  $i \leq N_b$  и  $g_i = s_i$  при  $i > N_b$ .

**Процедура численного решения.** Для решения системы уравнений (1) требуется постановка граничных условий и рассмотрение смешанной задачи. При выборе граничных условий необходимо учитывать, что параметры набегающего потока  $p_1, \rho_1, u_1$ , параметры газа на большом расстоянии за ударной волной  $p_2, \rho_2, u_2$  и скорость ударной волны  $w$  (рис. 1) удовлетворяют системе трех уравнений Гюгонио. Следовательно, любые четыре из этих параметров могут задаваться независимо, а остальные три параметра находятся из решения задачи.

Сказанное выше справедливо и при наличии химических реакций, в этом случае необходимо задавать также химический состав набегающего потока.

При численном интегрировании системы (1) удобно задавать значения  $p_1, \rho_1, u_1$  на левой границе и  $p_2$  на правой. В результате решения получено некоторое значение скорости ударной волны  $w$  (в общем случае  $w \neq 0$ ). Скорость набегающего потока относительно ударной волны равна  $u_1 - w$ , что не соответствует начальным условиям задачи.

В случае совершенного газа несложно предсказать точное значение  $p_2$ , при котором  $w = 0$ . Однако в случае обобщенной модели газа при наличии сложных физико-химических процессов сделать это трудно. Здесь применяются глобальные итерации: краевая задача решается для последовательности значений  $p_2$ , в результате чего определяется последовательность значений  $w$ , сходящаяся к нулю. На каждой глобальной итерации для решения краевой задачи используется метод установления по времени: задается некоторое начальное поле течения и рассматривается его эволюция к конечному стационарному состоянию при фиксированных граничных условиях.

Численное интегрирование системы (1) выполняется методом, который использовался в [3] для расчета ударной волны на основе уравнений Навье — Стокса. В основе метода лежит неявная разностная схема с чередованием узлов [12, 13], которая обладает безусловной устойчивостью, монотонностью, вторым порядком точности и не вносит искажений в решение из-за схемной вязкости. Решение строится на подвижной сетке, автоматически отслеживающей перемещение ударной волны; это упрощает анализ результатов, так как профили параметров течения оказываются неподвижными относительно расчетной сетки.

Особенность задачи состоит в том, что граничные условия при  $x \rightarrow -\infty$  относятся к пучку, при  $x \rightarrow +\infty$  — к газу. Рассмотрим противоположные граничные условия для каждой из двух сред. Уравнения движения пучка таковы, что для них не требуются граничные условия при  $x \rightarrow +\infty$ . Граничными условиями для газа при  $x \rightarrow -\infty$  будут скорость набегающего потока и асимптотическое стремление давления и плотности к нулю, при этом температура стремится к температуре набегающего потока.

На практике численное решение строится в области конечного размера, а условия, справедливые на  $\pm\infty$ , сносятся на границы конечной области. Размеры области выбира-

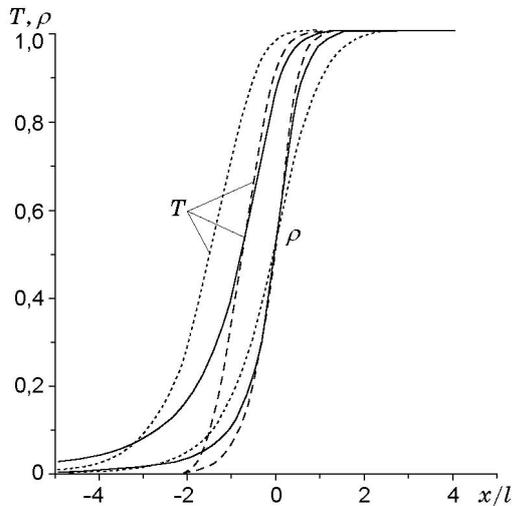


Рис. 2. Профили плотности и температуры в ударной волне в аргоне: сплошные кривые — модель пучок — газ, штриховые — модель Навье — Стокса, пунктирные — метод Монте-Карло

ются такими, чтобы градиенты всех параметров на границах оказывались пренебрежимо малыми; обычно эти размеры могут составлять до нескольких десятков длин свободного пробега молекул. Заметим, что задавать нулевые граничные значения давления и плотности газа нельзя, так как это вызовет ошибку типа деления на нуль в вычислительном алгоритме. Поэтому предполагается, что набегающий поток в дополнение к молекулярному пучку содержит небольшое количество однокомпонентного газа (0,01–0,02 %) с такими же скоростью и температурой, что и у пучка. Такое количество газа согласуется с оценкой асимптотического поведения решения системы (1) при  $x \rightarrow -\infty$ .

Одна из вычислительных трудностей рассматриваемой задачи связана с тем, что функция  $\Phi(z, \varepsilon, n)$  в (5) имеет вид интеграла, который не выражается через элементарные функции, удобные для вычислений, за исключением немногих частных случаев. В общем случае значения интеграла должны находиться численно. Однако это весьма трудоемкая процедура, которая многократно увеличивает вычислительные затраты при решении задачи в целом. Поэтому функция  $\Phi(z, \varepsilon, n)$  представлялась в табличном виде и использовалась интерполяция по таблицам. При построении таблиц приходится вычислять интеграл для сетки значений  $z, \varepsilon, n$ , но это делается один раз в начале решения задачи и незначительно увеличивает вычислительные затраты.

**Условия и результаты численного эксперимента.** В качестве тестового примера в изложенной постановке выполнен расчет ударной волны в инертном газе (аргоне) при числе Маха набегающего потока  $M_\infty = 11$ . На рис. 2 сплошными линиями показаны профили плотности и температуры в ударной волне, нормированные на интервал (0, 1), координата  $x$  отнесена к длине свободного пробега молекул  $l$  в набегающем потоке. Штриховыми линиями представлены результаты расчета на основе уравнений Навье — Стокса по методике [3], пунктирными — результаты прямого статистического моделирования методом Монте-Карло, приведенные в [4].

Как и следовало ожидать, модель Навье — Стокса примерно вдвое завышает градиенты параметров во фронте ударной волны по сравнению с методом Монте-Карло, а также дает вдвое меньшее смещение фронта температуры вверх по потоку относительно фронта плотности. Модель пучок — газ несколько уменьшает градиенты параметров в ударной волне, но этого оказывается недостаточно для согласования с результатами метода Монте-Карло; смещение фронта температуры вверх по потоку не увеличивается. Вместе с тем наблюдается более раннее увеличение параметров перед фронтом ударной волны, так что на расстоянии двух-четырех длин свободного пробега вверх по потоку значения парамет-

Таблица 1

Компонент	$m$	$h_0/R$ , К	$\vartheta$ , К	$\delta$ , м
O <sub>2</sub>	32	0	2256	$2 \cdot 10^{-10}$
O	16	29 760	—	$10^{-10}$
N	14	56 600	—	$10^{-10}$
NO	30	10 810	2710	$2 \cdot 10^{-10}$
N <sub>2</sub>	28	0	3354	$2 \cdot 10^{-10}$

Таблица 2

Реакция	$A_f$	$n_f$	$\Theta_f$ , К	$A_r$	$n_r$	$\Theta_r$ , К
N <sub>2</sub> + M = N + N + M	$1,86 \cdot 10^{14}$	-0,5	113 200	$6,0 \cdot 10^5$	0,5	0
O <sub>2</sub> + M = O + O + M	$3,6 \cdot 10^{15}$	-1,0	59 370	$1,8 \cdot 10^7$	0	0
NO + M = N + O + M	$5,0 \cdot 10^{12}$	0	75 500	$8,5 \cdot 10^4$	1,0	0
O + NO = N + O <sub>2</sub>	$3,2 \cdot 10^6$	1,0	19 700	$9,62 \cdot 10^8$	0,5	3600
O + N <sub>2</sub> = N + NO	$6,4 \cdot 10^{14}$	-1,0	38 370	$1,4 \cdot 10^{14}$	-1,0	620

ров близки к полученным методом Монте-Карло. Таким образом, модель пучок — газ уточняет описание течения в передней части фронта ударной волны по сравнению с моделью Навье — Стокса, приближенно учитывая эффект поступательной неравновесности, проявляющийся в более сильном нагреве газа из-за энергообмена с пучком.

В настоящей работе расчеты выполнены для случая ударной волны в диссоциирующем воздухе при параметрах набегающего потока  $u_1 = 6000$  м/с,  $\rho_1 = 1,681 \cdot 10^{-4}$  кг/м<sup>3</sup>,  $p_1 = 13,158$  Па. Предполагается, что воздух состоит из пяти компонентов: N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N, O, NO (табл. 1), при этом в набегающем потоке присутствуют только N<sub>2</sub> и O<sub>2</sub> в соотношении 77 : 23. Между компонентами происходят пять реакций, параметры которых приведены в табл. 2 (размерности  $A_f$ ,  $A_r$  соответствуют системе СИ). В реакциях диссоциации-рекомбинации учитываются коэффициенты эффективности разных сортов молекул, рассматриваемых в качестве пассивной частицы M (табл. 3). Следует отметить, что для одних и тех же реакций в литературе приводятся различные значения параметров закона Аррениуса, которые, впрочем, дают близкие значения скоростей реакций, так или иначе аппроксимируя реальные процессы. Поэтому выбор параметров реакций обычно в некоторой степени субъективен. В данном случае выбирались такие сочетания параметров, в которых нет больших отрицательных значений показателя степени  $n$ , при этом выполнялось приведенное ранее ограничение  $n > -1,5$ .

Из пяти реакций (см. табл. 2) получаются семь реакций между молекулами пучка и газа. В приведенных ниже формулах реакций первый компонент в левой части соответствует пучку, второй компонент — газу: N<sub>2</sub> + M → N + N + M, O<sub>2</sub> + M → O + O + M, O<sub>2</sub> + N → O + NO, M + N<sub>2</sub> → N + N + M, M + O<sub>2</sub> → O + O + M, N<sub>2</sub> + O → N + NO, M + NO → N + O + M.

При определении коэффициентов переноса необходимо учитывать, что взаимодействие молекул пучка и газа рассчитывается по модели твердых сфер. Из соображений концептуального единства вязкость газа также следует определять по модели твердых сфер, иначе сопоставление разных процессов и моделей будет некорректным. Размеры молекул, приведенные в табл. 1, выбраны таким образом, чтобы значения вязкости мало отличались от вязкости воздуха. В этом случае вязкость определяется формулой  $\mu = 6,24 \cdot 10^{-5} (T/273)^{0,5}$  кг/(м·с), отличие от вязкости воздуха составляет менее 30 % во всем диапазоне температуры. Коэффициенты теплопроводности и диффузии получаются

Таблица 3

Молекула	Коэффициент эффективности для частиц М				
	N	O	NO	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>
N <sub>2</sub>	2,5	1	1	2,5	1
O <sub>2</sub>	1,0	25	1	2,0	10
NO	22,0	22	22	1,0	1

путем задания чисел Прандтля и Шмидта. Последнее оправдано тем, что преобладающим компонентом является молекулярный азот с массовой долей порядка 0,7, поэтому можно говорить о бинарной диффузии других компонентов в азоте.

На рис. 3–5 профили параметров в ударной волне, рассчитанные по модели пучок — газ, показаны сплошными линиями, по модели Навье — Стокса — штриховыми. Координата  $x$  отнесена к длине свободного пробега молекул  $l$  в набегающем потоке. За начало отсчета  $x$  принята точка, соответствующая среднему давлению  $p = (p_1 + p_2)/2$ . Заметим, что при наличии химических реакций положение фронта ударной волны удобнее контролировать по давлению, а не по плотности, которая значительно изменяется в реакционном слое за ударной волной. По тем же причинам по осям ординат отложены размерные значения параметров, их нормирование малоэффективно в условиях, когда функции немонотонны, а асимптотические значения слабо связаны с процессами в ударной волне.

О взаимодействии пучка и газа можно судить по изменению их плотности, представленной на рис. 3 кривыми 1 и 2 соответственно. Основное поглощение пучка в газе происходит во фронте ударной волны на расстоянии порядка одной длины свободного пробега. В то же время уменьшение плотности пучка и увеличение плотности газа начинаются на достаточно большом расстоянии выше по течению. В этой же области суммарная плотность пучка и газа (кривая 3) оказывается несколько больше плотности в модели Навье — Стокса (штриховая кривая).

Сопоставление с моделью Навье — Стокса естественно проводить по суммарным параметрам смеси пучок — газ. На рис. 4 представлены профили суммарных скорости, давления и температуры в ударной волне. О существенных отличиях от модели Навье — Стокса можно судить по наклонам профилей скорости и температуры, а также по их протяженности, равной нескольким длинам свободного пробега вверх по течению. Растяжение зоны ударной волны в пучковой модели приводит к небольшому снижению максимума температуры.

Об особенностях протекания реакций в модели пучок — газ можно судить по поведению концентраций компонентов. На рис. 5,а приведены профили массовых долей атомарного азота и кислорода (кривые 1 и 2 соответственно). В градиентной зоне ударной волны профиль 2 в модели пучок — газ немного смещен вверх по течению по сравнению с моделью Навье — Стокса. В области выше по течению на расстоянии нескольких длин свободного пробега присутствует только атомарный кислород пучковой модели.

Поведение профиля атомарного азота противоположное: в градиентной зоне ударной волны кривая 1 смещена вниз по течению по сравнению с моделью Навье — Стокса, а выше по течению массовая доля азота примерно равна нулю. Это происходит потому, что весь атомарный азот, образующийся в результате диссоциации, немедленно расходуется в обменной реакции  $O_2 + N \rightarrow O + NO$ , эффективность которой многократно возрастает в пучковой модели. Это объясняет отмеченное выше увеличение количества атомарного кислорода, но особенно сильно влияет на поведение профиля оксида азота (кривые 3 на рис. 5,б). В пучковой модели наблюдается резкий максимум профиля 3 во фронте ударной волны, отсутствующий в модели Навье — Стокса, а также значительное количество NO

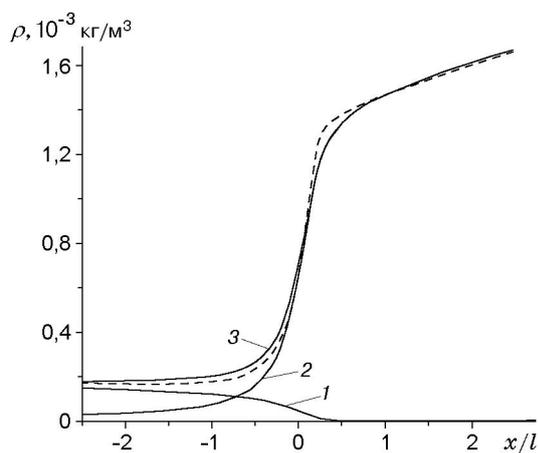


Рис. 3

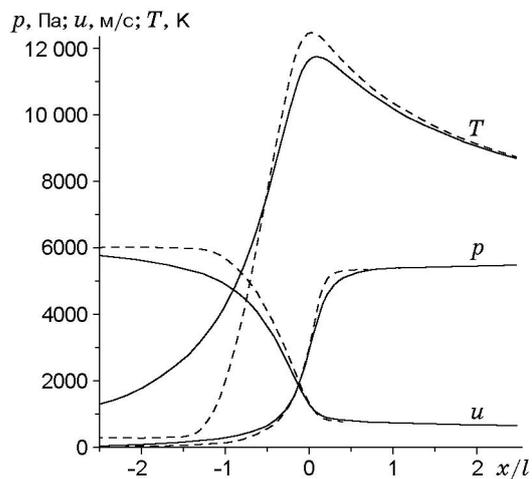


Рис. 4

Рис. 3. Профили плотности в ударной волне в воздухе:

сплошные кривые: 1 — пучок, 2 — газ, 3 — пучок — газ; штриховая — модель Навье — Стокса

Рис. 4. Профили скорости, давления и температуры в ударной волне в воздухе:

сплошные кривые — модель пучок — газ, штриховые — модель Навье — Стокса

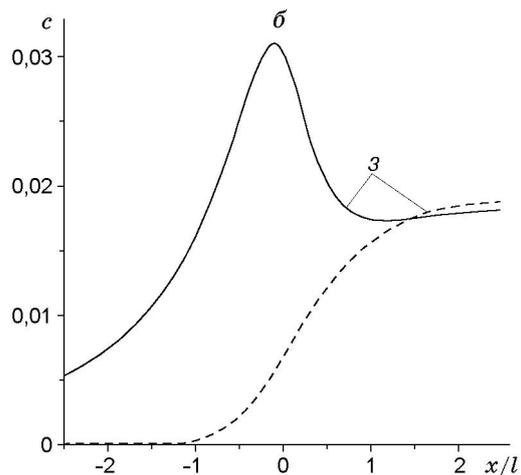
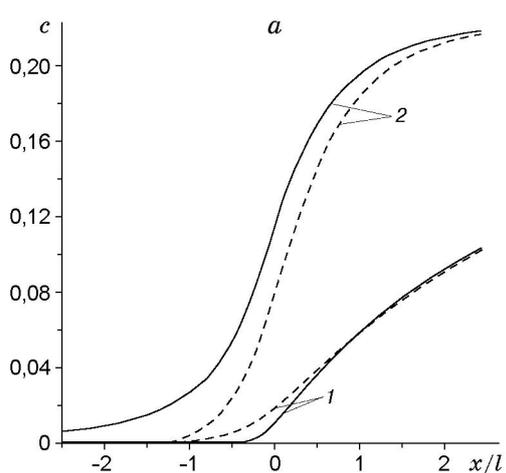


Рис. 5. Массовые доли N, O (а) и NO (б) в ударной волне в воздухе:

сплошные кривые — модель пучок — газ, штриховые — модель Навье — Стокса; 1 — N, 2 — O, 3 — NO

в области выше по течению. Поскольку возбуждение молекул NO служит одним из источников излучения, этим может объясняться наблюдаемое в экспериментах свечение перед фронтом ударной волны [2].

**Выводы.** Модель пучок — газ обобщена на случай многокомпонентного газа и использована для оценки влияния поступательной неравновесности на протекание химических реакций в ударной волне. Для обобщенного набора реакций, подчиняющихся закону Аррениуса, получено видоизмененное выражение для скоростей реакций при соударениях молекул пучка и газа, учитывающее относительное движение двух сред. Разработана процедура численного решения задачи, основанная на неявной разностной схеме с чередованием узлов и табличной аппроксимации скоростей пучковых реакций. Выполнены расчеты ударной волны в диссоциирующем воздухе при скорости набегающего потока 6000 м/с, показавшие существенные отличия протекания физико-химических процессов в ударной волне в модели пучок — газ по сравнению с моделью Навье — Стокса.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И.** Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1966.
2. **Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., et al.** Experimental and numerical study of nonequilibrium ultraviolet NO and N<sub>2</sub><sup>+</sup> emission in shock layer // J. Thermophys. Heat Transfer. 1998. V. 12, N 2. P. 172–180.
3. **Киреев А. Ю., Юмашев В. Л.** Численное моделирование вязкого неравновесного течения воздуха за сильной ударной волной // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2000. Т. 40, № 10. С. 1563–1570.
4. **Бузыкин О. Г., Галкин В. С., Ерофеев А. И., Носик В. И.** Макроскопическая модель структуры сильной ударной волны // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1999. № 4. С. 125–135.
5. **Горелов С. Л., Русаков С. В.** Структура ударной волны для газа с внутренними степенями свободы // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1999. № 3. С. 121–125.
6. **Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б., Черемиев С. Л.** Поступательная релаксация в ударных волнах в газах / АН СССР. Ин-т хим. физики. Препр. Черногловка, 1991.
7. **Karlson A. B., Bird G. A.** Implementation of a vibrationally linked chemical reaction model for DSMC // Proc. of the 19th Intern. symp. on rarefied gas dynamics, Oxford, 25–29 July 1994. Oxford: Oxford Univ. Press, 1995. V. 1. P. 434–440.
8. **Великодный В. Ю., Емельянов А. В., Еремин А. В.** Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны // Журн. техн. физики. 1999. Т. 69, вып. 10. С. 23–28.
9. **Козлов П. В., Лосев С. А., Романенко Ю. В.** Поступательная неравновесность во фронте ударной волны в смеси аргона и гелия. М., 2000. (Препр. / РАН. Ин-т механики Моск. гос. ун-та; № 59-2000).
10. **Turcotte D. L., Scholnick I. M.** Structure of strong shock waves // Phys. Fluids. 1969. V. 12, N 5, pt 2. P. 80–82.
11. **Артамонов А. К., Архипов В. Н.** Обтекание сферы гиперзвуковым потоком разреженного газа // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1979. № 6. С. 85–90.
12. **Ворожцов И. И., Юмашев В. Л.** Об аппроксимационных свойствах одной неявной разностной схемы для уравнений газовой динамики // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1990. Т. 30, № 7. С. 1093–1102.

13. **Vorozhtsov I. I., Yumashev V. L.** Application of an implicit staggered grid scheme for compressible flow computations // Proc. of the 4th Intern. symp. on comput. fluid dynamics, Davis, California, 9–12 Sept. 1991. Davis: Univ. of California, 1991. V. 2. P. 1167–1172.
14. **Великодный В. Ю.** О влиянии движения газа на кинетику физико-химических превращений // Журн. техн. физики. 1989. Т. 59, вып. 12. С. 126–129.
15. **Кузнецов М. М.** Кинетические эффекты в предельных гиперзвуковых течениях вязкого газа // XV сессия Междунар. школы по моделям механики сплошной среды: Сб. тр. СПб.: Науч.-исслед. ин-т химии С.-Петербур. гос. ун-та, 2001. С. 33–42.

*Поступила в редакцию 20/IX 2001 г.,  
в окончательном варианте — 20/II 2002 г.*

---