

УДК 533.6.011

## О ВЛИЯНИИ ПОСТУПАТЕЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ НА СКОРОСТЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИССОЦИАЦИИ В ГИПЕРЗВУКОВОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЕ

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

Центральный аэрогидродинамический институт, 140180 Жуковский

Рассмотрена задача о влиянии неравновесного (немаксвелловского) распределения поступательной энергии по степеням свободы молекул на скорость их диссоциации в гиперзвуковой ударной волне. Для исследования поступательной неравновесности используется приближенная модель “пучок” — сплошная среда, ранее примененная для описания гиперзвукового течения совершенного газа. Дана оценка степени диссоциации двухатомных молекул внутри фронта ударной волны, обусловленная их неравновесным распределением по поступательным степеням свободы. Показано, что эффективность первых неупругих столкновений определяется константой скорости диссоциации, экспоненциально зависящей от разности кинетической энергии молекул “пучка” и барьера диссоциации.

**Введение.** Теоретические и экспериментальные исследования, проведенные в работах [1–3], показали, что течение в ударной волне неравновесно по поступательным степеням свободы. Следствием поступательной неравновесности является значительное увеличение скоростей химических реакций [2, 3] и других релаксационных процессов за счет роста эффективности неупругих столкновений в ударных волнах.

Рассматриваемый эффект может влиять на термофизические параметры гиперзвукового обтекания тел газом низкой плотности в режимах, когда толщина ударной волны соизмерима с величиной ее отхода от поверхности обтекаемого тела. В этом случае для численного моделирования обтекания вместо модели сплошной среды на основе уравнений Навье — Стокса используется прямое численное моделирование течения на основе метода Монте-Карло. Однако применительно к задачам гиперзвукового обтекания с учетом сложных химических процессов, ионизации и излучения в вязком ударном слое использование метода прямого численного моделирования требует очень больших ресурсов памяти и быстродействия используемых компьютеров [4]. Тем не менее можно выделить ряд практически важных задач, в которых необходим учет поступательной неравновесности во фронте ударной волны в режиме обтекания тел сплошной средой, когда для численного моделирования процессов в ударном слое, за исключением зоны фронта ударной волны, применима модель Навье — Стокса. К числу этих задач относится определение интенсивности неравновесного излучения ударного слоя при входе в атмосферу Земли и других планет на высотах, соответствующих максимуму теплового потока к поверхности летательного аппарата.

На рис. 1 представлены результаты измерения интенсивности неравновесного излучения  $I$  за фронтом гиперзвуковой ударной волны молекулы CO в ультрафиолетовой части спектра (система молекулярных полос излучения CO<sup>4+</sup>), в которой содержится основная

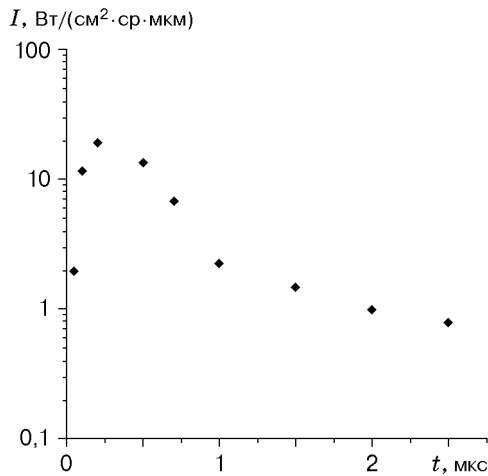


Рис. 1. Экспериментальная зависимость интенсивности излучения молекулы СО (система  $\text{CO}^{4+}$ ) от времени за фронтом сильной ударной волны ( $\lambda = (200 \pm 3,4)$  нм)

часть радиационного теплового потока к поверхности космического аппарата при входе его в атмосферу Марса. Регистрация излучения проведена в электроразрядной ударной трубе Центрального аэрогидродинамического института [5]. Газовой смесью в канале трубы моделировалась атмосфера Марса ( $\text{CO}_2$  — 97 %,  $\text{N}_2$  — 3 %). Начальное давление газа  $p_1 = 26,3$  Па. Скорость ударной волны  $V^S = 7,15$  км/с. По оси ординат отложена интенсивность излучения, по оси абсцисс — время с момента регистрации излучения в рассматриваемом сечении канала ударной трубы. Видно, что максимум излучения в системе полос  $\text{CO}^{4+}$  наблюдается при  $t \leq 0,25$  мкс, что соответствует расстоянию от “начала” фронта волны  $\bar{x} = x/\lambda_\infty \leq 10$  ( $\lambda_\infty$  — длина свободного пробега молекул перед ударной волной).

Таким образом, из эксперимента следует, что максимум интенсивности неравновесного излучения находится в области “формирования” ударной волны. Поэтому для корректного численного расчета интенсивности неравновесного теплового потока к поверхности аппарата следует учитывать эффекты поступательной неравновесности во фронте головной ударной волны, в то время как конвективная составляющая теплового потока может определяться с использованием модели Навье — Стокса. Приведенный пример показывает целесообразность разработки приближенного метода учета эффектов поступательной неравновесности в рамках модели вязкого гиперзвукового обтекания Навье — Стокса.

В работах [6–8] разработана простая физическая модель “пучок” — сплошная среда, эффективно учитывающая повышенную концентрацию высокоэнергетических молекул в ударной волне путем введения высокоэнергетической среды — “пучка”, посредством столкновений взаимодействующего с хаотически движущимися молекулами, имеющими распределение Максвелла — Больцмана с поправкой Навье — Стокса на диссипативные процессы. В процессах упругих столкновений молекулы “пучка” необратимо переходят в молекулы “хаоса”, поэтому концентрация молекул “пучка” уменьшается от значения в набегающем потоке до нуля. Концентрация же молекул “хаоса” возрастает от нуля в набегающем потоке до максимального значения на заднем фронте скачка.

Следует отметить, что модель “пучок” — сплошная среда, по существу, является упрощенным вариантом модели Тамма — Мотт-Смита, учитывающим сильную несимметрию молекулярной функции распределения в гиперзвуковой ударной волне. С физической точки зрения сильная несимметрия позволяет учесть роль “первых” высокоэнергетических столкновений, приводящих к возбуждению внутренних степеней свободы и химическим реакциям. Используемая для расчетов гиперзвуковых течений газа в работах [6–9], эта модель в первом приближении устранила многие недостатки описания процессов в ударной волне с использованием модели Навье — Стокса и позволила учесть основные кинетические эффекты, приводящие к увеличению ширины ударной волны, бо-

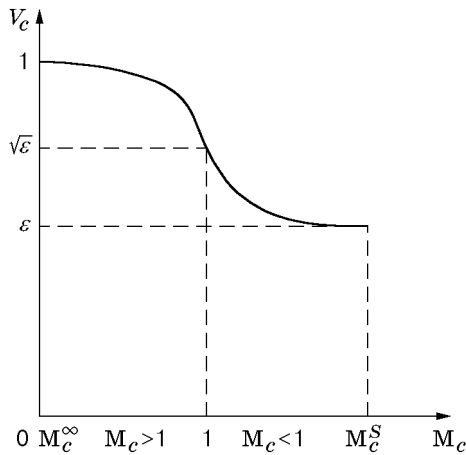


Рис. 2. Характерные зоны торможения потока в ударной волне

лее интенсивному росту локальной средней температуры и превышению так называемой продольной температуры над локальной средней температурой [9].

В данной работе модель “пучок” — сплошная среда обобщается на случай диссоциации молекул внутри ударной волны. В такой постановке с уточненными значениями констант скорости химических реакций эта модель может быть использована в точных численных расчетах гиперзвукового обтекания с приближенным учетом поступательной неравновесности в области фронта ударной волны.

**1. Постановка задачи.** При рассмотрении диссоциации внутри ударной волны, обусловленной первыми высокоэнергетическими столкновениями молекул “пучка” с молекулами, хаотически распределенными в волне, естественно считать, что диссоциация протекает одновременно с процессами вязкой и тепловой диссипации. Поэтому эти процессы целесообразно рассматривать в характерных (сверхзвуковой, звуковой и дозвуковой) зонах торможения потока в ударной волне. Схематично эти зоны показаны на рис. 2 ( $V_c = u_c/u_{b,\infty}$  — относительная скорость, индексы  $c$  и  $b$  относятся к параметрам потока хаотических молекул и “пучка” соответственно,  $M_c = u_c/\sqrt{\gamma RT_c/\mu_{A_2}}$  — число Маха,  $\gamma$  — показатель адиабаты,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $T$  — температура,  $\mu_{A_2}$  — молекулярная масса,  $\varepsilon = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$ ).

Для приближенного аналитического расчета диссоциации внутри фронта ударной волны, обусловленной поступательной неравновесностью, можно сделать следующие предположения:

- 1) диссоциация обусловлена только столкновениями с высокоэнергетическими молекулами “пучка” (температурной (“аррениусовской”) диссоциацией пренебрегается);
- 2) в сверхзвуковой части скачка (см. рис. 2) диссоциация отсутствует;
- 3) диссоциация эффективно протекает в звуковой и дозвуковой зонах скачка.

Указанные предположения основаны на следующих данных.

1. “Аррениусовская” диссоциация во всех проведенных ранее исследованиях несущественна внутри тонкого ударного фронта. В работе [10] утверждается, что предположение о “замороженном” (по диссоциации) фронте волны справедливо для гиперзвуковых течений воздуха вплоть до скоростей набегающего потока  $V_\infty \leq 7$  км/с.

2. В передней (сверхзвуковой) части скачка относительная скорость молекул “пучка”  $u_b - u_c$  мала вплоть до звуковой области, где  $u_c \neq u_b$ . Здесь значение  $u_c$  порядка скорости звука:  $u_c \simeq \sqrt{\varepsilon} u_b$  [11, 12]. Вследствие этого в сверхзвуковой части скачка ударный механизм столкновений молекул “пучка” и “хаоса” не работает, а процесс диссоциации протекает как “аррениусовский”, поэтому его роль пренебрежимо мала.

3. В звуковой и дозвуковой частях скачка скорость молекул “хаоса” мала и меняется

от звуковой ( $u_c \approx \sqrt{\varepsilon} u_b$ ) до дозвуковой ( $u_c \approx \varepsilon u_b$ ) на заднем фронте [12]. Относительная скорость молекул “пучка” и “хаоса” максимальна:  $u_b - u_c \approx u_b$ , поэтому в этой области неравновесная диссоциация, обусловленная распадом молекул “хаоса” вследствие соударений с молекулами “пучка”, максимальна. Однако следует учесть, что здесь концентрация молекул “пучка” уменьшается вследствие упругих соударений в передней зоне скачка.

Таким образом, в приближенном аналитическом исследовании задача расщепляется на две. В первой части скачка, где скорость молекул “хаоса” велика ( $u_c \approx u_b$ ), а их скорость по отношению к “пучку” мала ( $u_c - u_b \ll u_b$ ), рассматривается течение совершенного газа и вычисляются концентрации молекул “пучка”. Во второй части скачка из-за низкой среднемассовой скорости хаотически движущихся молекул ( $\varepsilon \leq V_c \leq \sqrt{\varepsilon}$ ) изменением относительной скорости пренебрегается ( $u_b - u_c \approx u_b$ ). В этой области вычисляется эффективное значение концентрации атомов вследствие неравновесной диссоциации молекул “хаоса”.

**2. Система уравнений, описывающих движение поступательно-неравновесной среды внутри фронта ударной волны (бинарная смесь атомов А и молекул А<sub>2</sub>).** Система уравнений неразрывности, движения, энергии, состояния, изменения плотности молекулярного пучка и массовой концентрации атомов имеет следующий вид:

$$\hat{\rho} + \rho V_c = 1; \quad (2.1)$$

$$\rho V_c^2 + \hat{\rho} + p - \frac{4}{3} H_c^\omega \frac{dV_c}{d\xi} = 1; \quad (2.2)$$

$$\rho V_c (H_c + \alpha_A H_A^0) + \frac{1}{2} \rho + \frac{1}{2} \rho V_c^3 - \frac{H_c^\omega}{Pr} \frac{dH}{d\xi} - \frac{4}{3} H_c^\omega \frac{dV_c^2/2}{d\xi} + \\ + (Le - 1)(H_c + \alpha_A H_A^0) \frac{d\alpha_A}{d\xi} = \frac{1}{2}; \quad (2.3)$$

$$p = \rho \frac{1 + \alpha_A}{2} \theta_c; \quad (2.4)$$

$$\frac{d\hat{\rho}}{d\xi} = -\frac{5}{8\sqrt{2}} \frac{\gamma - 1}{\gamma} H_c^{1-\omega} (F_e + F_{in}) \hat{\rho} \frac{1 - \hat{\rho}}{V_c}; \quad (2.5)$$

$$\frac{d}{d\xi} \left( \frac{H_c^\omega}{Sc_A} \right) \frac{d\alpha_A}{d\xi} + \frac{d(\rho \alpha_A V_c)}{d\xi} = \frac{5}{8\sqrt{2}} \frac{\gamma - 1}{\gamma} H_c^{1-\omega_{in}} \frac{\hat{\rho}(1 - \hat{\rho})}{V_c}. \quad (2.6)$$

Здесь  $\hat{\rho} = \rho_b/\rho_{b,\infty}$  — относительная плотность молекул “пучка”;  $\rho = \rho_c/\rho_{b,\infty}$  — относительная концентрация;  $V_c = u_c/u_{b,\infty}$ ,  $V_b = u_b/u_{b,\infty} \equiv 1$  — относительная скорость молекул “хаоса” и “пучка”;  $\rho_{b,\infty}$  — среднемассовая плотность (в соответствии с моделью “пучок” — сплошная среда среднемассовая скорость молекул “пучка” в набегающем потоке  $u_{b,\infty} = u_b = \text{const}$  [6–8]);  $p = p_c/(\rho_{b,\infty} u_b^2)$  — относительное давление в сплошной среде с хаотически движущимися молекулами;  $\theta_c = 2RT_c/\mu_{A_2}$  — безразмерная температура хаотически движущейся среды;  $\alpha_A = \rho_A/(\rho_A + \rho_{A_2})$  — массовая концентрация атомов;  $h_c$  — удельная статическая энтальпия;  $\xi = x/l$ ;  $l = k_c u_b^{2\omega-1}/\rho_b$ ;  $k_c$  — постоянная в степенной зависимости вязкости от температуры  $T_c$ ;  $H_c = h_c/u_b^2$ ;  $H_A^0 = h_A^0/u_b^2$  — безразмерная энтальпия образования атомов (или энергия диссоциации);  $Pr$ ,  $Le$ ,  $Sc_A$  — числа Прандтля, Льюиса и Шмидта для атомной составляющей. Параметры  $F_e$  и  $F_{in}$  пропорциональны упругим и неупругим соударениям молекул “пучка” с молекулами “хаоса”, приводящим к диссоциации, причем согласно [6]

$$F_e(z) = \frac{1}{2} \left[ \exp(-z^2) + \left( 2z + \frac{1}{z} \right) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(z) \right], \quad (2.7)$$

где  $z = (u_b - u_c)/\sqrt{2RT_c/\mu_{A_2}}$ ;  $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-y^2) dy$  — интеграл ошибок Гаусса.

Выражение для  $F_{in}$ , полученное в работе [2], после простейших преобразований можно привести к виду, аналогичному (2.7):

$$F_{in} = \frac{\theta_+}{2z} F_e(\theta_-) + \frac{\theta_-}{2z} F_e(\theta_+) + \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{\sqrt{\theta_{dc}}}{z} \left[ \frac{\operatorname{erf}(\theta_+)}{\theta_+} - \frac{\operatorname{erf}(\theta_-)}{\theta_-} \right]. \quad (2.8)$$

Здесь  $\theta_+ = \sqrt{\theta_{dc}} + z$ ;  $\theta_- = \sqrt{\theta_{dc}} - z$ ;  $\theta_{dc} = T_d/T_c$ ;  $T_d = E_d/k$  — характеристическая температура, соответствующая пороговой энергии диссоциации;  $E_d$  — энергия диссоциации молекул;  $k$  — постоянная Больцмана.

В работе [2] использовано два максвелловских распределения с различными средними макроскопическими скоростями и температурами. Модель “пучок” — сплошная среда является частным случаем такой аппроксимации, поскольку дельтаобразная функция распределения по скоростям молекул “пучка” получается предельным переходом из соответствующего максвелловского распределения частиц в набегающем потоке при  $T_b \rightarrow 0$ .

С учетом уравнения неразрывности (2.1) уравнение полной энергии (2.3) допускает точное решение при  $\operatorname{Pr} = \operatorname{Sc}_A = 3/4$ ,  $\operatorname{Le} = 1$ , которое имеет следующий вид:

$$H_c + \alpha_A H_A^0 + \frac{V_c^2}{2} = \frac{1}{2}. \quad (2.9)$$

Соотношение (2.9) обобщает аналогичный интеграл энергии, полученный в работе [7], для модели “пучок” — “хаос” в совершенном газе без физико-химических превращений на случай диссоциации.

С учетом соотношения (2.9) при постоянных средних теплоемкости  $c_p$  и молекулярной массе  $\bar{\mu}$  выражение для приведенной температуры  $\theta_c$  хаотической среды имеет вид

$$\theta_c = \frac{\gamma - 1}{\gamma} (1 - V_c^2 - \alpha_A \theta_d), \quad \theta_d = \frac{2R}{\bar{\mu}} \frac{T_d}{u_b^2}, \quad \bar{\mu} = \frac{\alpha_A}{\mu_A} + \frac{\alpha_{A_2}}{\mu_{A_2}}.$$

**3. Краевые условия для системы уравнений, описывающей движение поступательно-неравновесной среды внутри фронта “вязкого” скачка.** Краевыми условиями для системы уравнений (2.1)–(2.9) являются условия в набегающем на волну гиперзвуковом “пучке” молекул ( $\xi \rightarrow -\infty$ )  $V_c = \hat{\rho}_{A_2} = 1$ ,  $T_c = p_c = \alpha_A = \rho_{A_2} = 0$  и условия на заднем фронте скачка, обобщающие соответствующие известные условия Рэнкина — Гюгионо [13] на случай поступательно-неравновесной диссоциирующей смеси ( $\xi \rightarrow \infty$ ):

$$V_c = \varepsilon_s, \quad \rho_c = \frac{1}{\varepsilon_s}, \quad \hat{\rho}_s = 0, \quad p_c = \frac{1 + \alpha_s}{2\varepsilon_s} \theta_c, \quad \theta_c = \frac{\gamma - 1}{\gamma} (1 - \varepsilon_s^2 - \alpha_s \theta_d),$$

$$\alpha_s = \frac{5}{8\sqrt{2}} \frac{\gamma - 1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} H_c^{1-\omega} F_{in} \frac{\hat{\rho}(1-\hat{\rho})}{V_c} d\xi, \quad \varepsilon_c = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \left[ 1 + \frac{\alpha_s}{2} (1 + \alpha_s) \theta_d - 1 \right] + O\left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right)^2.$$

Здесь величины с индексом  $s$  соответствуют параметрам среды “пучок” — “хаос” при  $\xi \rightarrow \infty$ .

Для использования в практических приложениях формулу (2.8) приближенно можно представить в следующем виде:

$$\frac{F_{in}}{F_{e,\max}} = \left[ 2p_e \frac{(\sqrt{\theta_d} - 1)^{2s}}{\theta_c^{s+1/2}} + 1 \right] \sqrt{\frac{\theta_c}{\pi}} \exp\left(-\frac{(\sqrt{\theta_d} - 1)^2}{\theta_c}\right) \simeq \frac{2p_e D_\gamma^{2s} + \sqrt{\varepsilon_\gamma}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{D_\gamma^2}{1 - \alpha\theta_d}\right) \quad \text{при } \theta_d \geq 1; \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{F_{in}}{F_{e,max}} &= 1 - \theta_d + \frac{1 + \sqrt{\theta_d}}{2} \frac{\sqrt{\theta_c}}{\pi} \exp\left(-\frac{(1 - \sqrt{\theta_d})^2}{\theta_c}\right) = \\ &= 1 - \theta_d + \frac{1 + \sqrt{\theta_d}}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_\gamma}{\pi}} \exp\left(-\frac{D_\Gamma^2}{1 - \alpha\theta_d}\right) \quad \text{при } \theta_d \leq 1. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь  $F_{e,max} = \pi d_A^2 u_b (1 - V_c)$ ;  $D_\gamma = (\sqrt{\theta_d} - 1)/\varepsilon_\gamma$ ;  $D_\Gamma = (1 - \sqrt{\theta_d})/\varepsilon_\gamma$ .

**4. Формулы для определения степени поступательно-неравновесной диссоциации во фронте скачка.** Для определения степени неравновесной диссоциации  $\alpha_A$  сначала целесообразно рассмотреть решение уравнения (2.6) в так называемом невязком приближении, т. е. без учета процесса диффузии. В этом приближении уравнение (2.5) запишется в виде

$$\frac{d(\rho V_c \alpha_A)}{d\xi} = \frac{5}{8\sqrt{2}} \frac{\gamma - 1}{\gamma} H_c^{1-\omega} F_{in} \frac{\hat{\rho}(1 - \hat{\rho})}{V_c}. \quad (4.1)$$

В уравнении (4.1) от переменной  $\xi$  перейдем к переменной  $\hat{\rho}$ , используя соотношения (2.1) и (2.6):

$$(1 - \hat{\rho}) \frac{d\alpha_A}{d\hat{\rho}} = \alpha_A - F_e^{in}. \quad (4.2)$$

Здесь  $F_e^{in} \equiv (F_{in}/F_e)/(1 + F_{in}/F_e)$ . Уравнение (4.2) является уравнением с разделяющимися переменными и имеет следующее решение:

$$\int_0^{\alpha_A} \frac{d\alpha}{F_e^{in} - \alpha} = \ln \frac{1 - \hat{\rho}}{1 - \hat{\rho}_0}. \quad (4.3)$$

Здесь  $\hat{\rho}_0$  — относительная плотность гиперзвукового “пучка” молекул в начале зоны развитой диссоциации, где  $\alpha_A \simeq 0$ ,  $V_c \simeq \sqrt{\varepsilon}$  порядка относительной скорости звука.

Равенство, обращающее в нуль знаменатель в подынтегральном выражении (4.3):

$$F_e^{in} \equiv \frac{F_{in}/F_e}{1 + F_{in}/F_e} = \alpha_A, \quad (4.4)$$

задает максимально возможную степень неравновесной диссоциации в рассматриваемой задаче. С физической точки зрения это соответствует состоянию, когда увеличение концентрации молекул “хаоса” вследствие их упругих столкновений с молекулами “пучка” компенсируется ее уменьшением вследствие их неупругих столкновений, приводящих к неравновесной диссоциации молекул “хаоса”.

Для вычисления первообразной в левой части соотношения (4.3) воспользуемся представлением величины  $F_e^{in}$  как явной функции концентрации атомов  $\alpha_A$ . Учитывая, что  $\alpha_A \theta_d < 1$ , разложим показатель экспоненты в (3.1) в ряд и приведем к виду, удобному для интегрирования:

$$F_e^{in} \equiv \frac{F_{in}}{F_{e,max}} \simeq C_m \exp(-\omega_m \beta). \quad (4.5)$$

Здесь  $C_m = (2p_e D_\gamma^{2s} + 1) \sqrt{\varepsilon_\gamma/\pi} \exp(-D_\gamma^2)$ ;  $\varepsilon_\gamma = (\gamma - 1)/\gamma$ ;  $\omega_m = D_\gamma^2 \theta_d \alpha_m$ ;  $\alpha_m = C_m/(1 + C_m)$ ;  $\beta = \alpha/\alpha_m$ . Отсюда

$$\frac{F_e^{in}}{1 + F_e^{in}} \simeq \frac{C_m \exp(-\omega_m \beta)}{1 + C_m \exp(-\omega_m \beta)} \simeq \alpha_m \left(1 - \frac{1 - \exp(-\omega_m \beta)}{1 + C_m}\right) \equiv \alpha_m (1 - \delta_m \beta), \quad (4.6)$$

где  $\delta_m = \omega_m/(1 + C_m)$ .

При выводе соотношения (4.6) учтено, что  $\omega_m < 1$ . Величина  $1 - \exp(-\omega_m\beta)$  заменена первыми двумя членами разложения в ряд Тейлора:  $1 - \exp(-\omega_m\beta) \simeq 1 + \omega_m\beta$ .

С учетом соотношений (4.5), (4.6) формула (4.3) примет вид

$$\int_0^\beta \frac{dz}{1 - (1 + \delta_m)z} = \ln \frac{1 - \hat{\rho}}{1 - \hat{\rho}_0}. \quad (4.7)$$

Отсюда

$$\frac{\alpha_A}{\alpha_m} = (1 + \delta_m)^{-1} \left[ 1 - \left( \frac{1 - \hat{\rho}_0}{1 - \hat{\rho}} \right)^{1 + \delta_m} \right]. \quad (4.8)$$

При малых значениях параметра  $\delta_m$ , соответствующих двум предельным переходам  $D_\gamma^2 \rightarrow \infty$  и  $D_\gamma^2 \rightarrow 0$ , так как  $\delta_m \sim \omega_m \sim D_\gamma^2 \exp(-D_\gamma^2)$ , формула (4.8) сводится к более простой

$$\frac{\alpha_A}{\alpha_m} \rightarrow \frac{\hat{\rho}_0 - \hat{\rho}}{1 - \hat{\rho}}. \quad (4.9)$$

На правой стороне скачка, где  $\hat{\rho}(\xi) \rightarrow 0$  при  $\xi \rightarrow \infty$ , концентрация атомов  $\alpha_A = \alpha_s$ , причем

$$\alpha_s = \alpha_m [1 - (1 - \hat{\rho})^{1 + \delta_m}] (1 + \delta_m)^{-1}; \quad (4.10)$$

$$\alpha_s \rightarrow \alpha_m \hat{\rho}_0 \quad \text{при} \quad \delta_m \rightarrow 0. \quad (4.11)$$

Формулы (4.5)–(4.11) применимы в “добарьерном” режиме диссоциации, когда  $\theta_d \geq 1$  или  $T_d \geq T_{kin}$  ( $T_{kin} = \mu_{A_2} u_{b,\infty}^2 (1 - V_c)^2 / (2R)$ ).

Проведя аналогичную процедуру разложения показателя экспоненты в (3.2) при  $\theta_d \leq 1$  или  $T_d \leq T_{kin}$ , получим

$$\frac{\alpha_A}{\alpha_M} = (1 + \Delta_M)^{-1} \left[ 1 - \left( \frac{1 - \hat{\rho}_0}{1 - \hat{\rho}} \right)^{1 + \Delta_M} \right]. \quad (4.12)$$

Здесь  $\alpha_M = (1 - \theta_d + C_M) / (2 - \theta_d + C_M)$ ;  $C_M = ((1 + \sqrt{\theta_d}) / 2) \sqrt{\varepsilon_\gamma / \pi} \exp(-D_\Gamma^2)$ ;  $D_\Gamma^2 = (1 - \sqrt{\theta_d})^2 / 2$ ;  $\Delta_M = C_M \theta_d D_\Gamma^2 / (2 - \theta_d + C_M)^2$ .

Формулы (4.5)–(4.12) соответствуют случаю, когда при неупругих столкновениях диссоциируют как молекулы “пучка”, так и молекулы “хаоса”. Если же учитывать только диссоциацию молекул “хаоса”, то относительную скорость диссоциации  $F_e^{in} / (1 + F_e^{in})$  нужно заменить на величину  $F_e^{in} (1 - \alpha_A) / (1 + F_e^{in} (1 - \alpha_A))$ , а в формулах (4.8), (4.12) параметры  $\delta_m$ ,  $\Delta_M$ ,  $\alpha_s$  — на  $\delta'_m = \delta_m + \alpha_m (1 - \alpha_m)$ ,  $\Delta'_M = \Delta_M + \alpha_M (1 - \alpha_M)$ ,  $\alpha'_s \approx \alpha_s$ .

Из формул (4.5)–(4.12) для неравновесной диссоциации следует, что степень диссоциации  $\alpha_A$  зависит от обобщенной координаты реакции — концентрации молекул гиперзвукового “пучка”  $\hat{\rho}$  и параметров задачи  $\theta_d$ ,  $D_\gamma^2$ ,  $D_\Gamma^2$ ,  $p_e$ ,  $\gamma$ ,  $s$ . Из (4.5)–(4.12) также следует, что максимальные степени неравновесной диссоциации (4.4) не достигаются, поскольку  $\hat{\rho}_0$  всегда меньше единицы из-за уменьшения плотности молекул “пучка” при упругих столкновениях.

Уравнение для изменения концентрации атомов  $\alpha_A$  вследствие температурной диссоциации может быть записано в виде

$$\frac{d[(1 - \hat{\rho})\alpha_A]}{d\xi} = \frac{5}{8\sqrt{2}} \frac{\gamma - 1}{\gamma} H_c^{1-\omega} F_E^{in} \frac{1 - \hat{\rho}}{V_c} \left[ (1 - \alpha_A)^2 + (1 + \alpha_A)\hat{\rho} + (1 - \alpha_A)\alpha_A \frac{1 - \hat{\rho}}{V_c} \right]. \quad (4.13)$$

Здесь  $F_E^{in}$  — константа скорости равновесной температурной (“аррениусовской”) диссоциации, слагаемые в квадратных скобках соответствуют следующим типам столкновений:  $A_2^c + A_2^c$ ,  $A_2^c + A_2^b$ ,  $A^c + A_2^b$ ,  $A_2^c + A^c$ .

Переходя к переменной  $\hat{\rho}$ , уравнение (4.14) можно записать в виде

$$(1 - \hat{\rho}) \frac{d\alpha_A}{d\hat{\rho}} = -\alpha_T \exp(\omega_E(1 - \alpha_A)) \frac{(1 - \alpha_A)(1 - \hat{\rho})}{\hat{\rho}} + \alpha_A. \quad (4.14)$$

Здесь  $\alpha_T = ((2p_e D_E^{2s+1} + 1)/V_c) \sqrt{\varepsilon_\gamma/\pi} \exp(-D_E^2(1 + \theta_d))$ ;  $\omega_E = D_E^2 \theta_d$ ;  $D_E^2 = \theta_d/\varepsilon_\gamma$ ;  $V_c \simeq \varepsilon = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$ .

Пренебрегая для оценок последним слагаемым в уравнении (4.14) (поскольку в зоне развитой диссоциации  $\hat{\rho} < 1$  и  $\hat{\rho} > 1$  на правой стороне скачка), для величины  $\alpha_A$  получим следующее соотношение:

$$-\text{Ei}[-\omega_E(1 - \alpha_A)] = -\text{Ei}(-\omega_E) + \alpha_T \ln \frac{\hat{\rho}}{\hat{\rho}_0}. \quad (4.15)$$

Здесь  $-\text{Ei}(-x) = \int_x^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy$  — интегральная показательная функция.

Второе слагаемое в правой части уравнения (4.15) стремится к бесконечности при  $\hat{\rho} \rightarrow 0$ . Отсюда следует, что при  $\hat{\rho} \rightarrow 0$  температурная (“аррениусовская”) диссоциация молекул завершается их полным распадом, т. е.  $\alpha_A = 1$ . Как известно, такое состояние реализуется на расстояниях порядка многих длин свободного пробега за зоной диссоциации, примыкающей к “вязкому” скачку [13], при условии, что скорость трехчастичной рекомбинации мала.

Поскольку в рассматриваемой задаче представляет интерес определение прежде всего концентрации атомов, образующихся лишь на толщине “вязкого” скачка, ограничимся малым конечным значением отношения  $\hat{\rho}/\hat{\rho}_0$ , положив

$$\hat{\rho}/\hat{\rho}_0 \simeq \hat{\rho}_k/\hat{\rho}_0 = 0,1. \quad (4.16)$$

Концентрация атомов, образующихся вследствие температурной диссоциации  $\alpha_s^T$ , определялась по соотношениям (4.15), (4.16).

Для сравнения концентраций атомов  $\alpha_s$  и  $\alpha_s^T$  с равновесными значениями  $\alpha_e$  используем модель диссоциации Лайтхилла — Фримена [13]. В соответствии с этой моделью условие равенства скоростей молекулярной диссоциации и трехчастичной рекомбинации атомов имеет вид

$$(1 - \alpha_e) \exp\left(-\frac{T_d}{T}\right) = \frac{\rho}{\rho_d} \alpha_e^2. \quad (4.17)$$

Здесь  $\rho_d$  — параметр, зависящий от свойств молекулярного газа. С учетом введенных выше обозначений равенство (4.17) удобно записать в следующем виде:

$$\ln \frac{\alpha_e^2}{1 - \alpha_e} = \ln \frac{\rho_d}{\rho_0} + \ln \frac{\varepsilon_s}{2} + \frac{z}{7} + \ln [1 + (1 + \alpha_e)(1 - \alpha_e \theta_d)] - \frac{D_E^2}{1 - \alpha_e \theta_d}. \quad (4.18)$$

Здесь  $\varepsilon_s = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$ ;  $\rho_0 = 1,25 \text{ кг/м}^3$ ;  $\rho_d = 1,5 \cdot 10^5 \text{ кг/м}^3$ ;  $z$  [км] — высота в атмосфере Земли.

При

$$D_E^2 < \frac{z}{7} + \ln \frac{\varepsilon_s \rho_d}{2\rho_0} \quad (4.19)$$

уравнение (4.18) удобно решать по следующей итерационной схеме:

$$\alpha_{e,k+1} = 1 - D_E^2 / \{z/7 + \ln(\varepsilon_s \rho_d / (2\rho_0)) - \ln(\alpha_{e,k}^2 / (1 - \alpha_{e,k})) + \ln[1 + (1 + \alpha_{e,k})(1 - \alpha_{e,k} \theta_d)]\}. \quad (4.20)$$



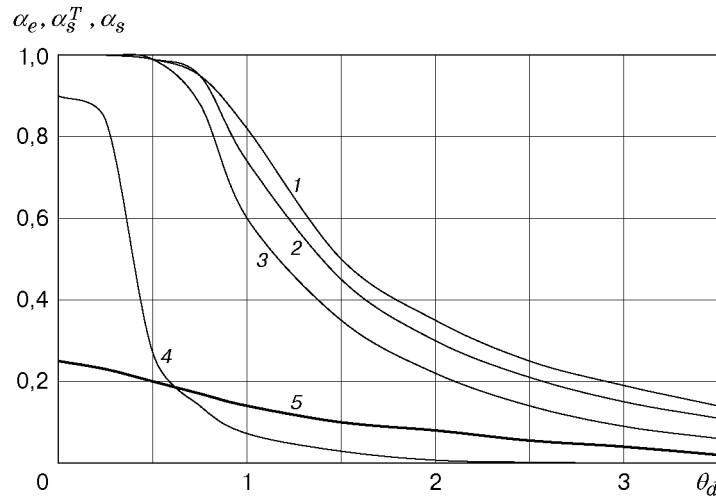


Рис. 3. Зависимости степени равновесной  $\alpha_e$ , температурной  $\alpha_s^T$  и неравновесной  $\alpha_s$  диссоциации в зависимости от безразмерной энергии диссоциации  $\theta_d$  при  $p_e = 0,1$ ,  $s = 1$ ,  $\gamma = 1,4$ ,  $\hat{\rho}_0 = 0,5$ ,  $\rho_0 = 1,25 \text{ кг/м}^3$ :  
 1 —  $\alpha_e (z = 0)$ ; 2 —  $\alpha_e (z = 40 \text{ км})$ ; 3 —  $\alpha_e (z = 80 \text{ км})$ ; 4 —  $\alpha_s^T$ ; 5 —  $\alpha_s$

При невыполнимости условия (4.19) трансцендентное уравнение (4.20) можно решать методом Ньютона, выбирая в качестве нулевого приближения  $\alpha_{e,0}$ , например, величину  $\theta_d^{-1}$ . При малых значениях параметра относительной энергии диссоциации  $\theta_d \leq 1$ , когда величина  $\alpha_e$  близка к единице и условие (4.19) не выполняется, итерации удобно проводить по схеме

$$\frac{\alpha_{e,k+1}^2}{1 - \alpha_{e,k+1}} = q_k = 10^4 \exp\left(\frac{z}{7}\right) \left\{ 1 + (1 - \alpha_{e,k})(1 - \alpha_{e,k}\theta_d) \exp\left[-\frac{D_E^2}{1 - \alpha_{e,k}\theta_d}\right] \right\},$$

$$\alpha_{e,k+1} = \frac{q_k}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4}{q_k}} - 1 \right).$$

На рис. 3 приведена зависимость степени неравновесной диссоциации  $\alpha_s$  от безразмерной энергии диссоциации  $\theta_d$ . Значения  $\alpha_s$  сравниваются с соответствующими значениями степени температурной диссоциации  $\alpha_s^T$  и равновесными значениями  $\alpha_e$  при различной высоте полета  $z$  в атмосфере Земли (плотность набегающего гиперзвукового “пучка” принималась равной  $\rho_b \simeq \rho_0 \exp(-z/7)$ ,  $\rho_0 = 1,25 \text{ кг/м}^3$  [13]).

Из рис. 3 следует, что при больших значениях параметра относительной энергии диссоциации ( $\theta_d > 1,5$ ) концентрации  $\alpha_s^T$  пренебрежимо малы по сравнению с  $\alpha_s$ . Однако при  $\theta_d \approx 1$  значения  $\alpha_s$  и  $\alpha_s^T$  становятся сравнимыми, а при  $\theta_d > 0,5$  температурная диссоциация завершается полным распадом молекул ( $\alpha_s^T = 1$  при отсутствии трехчастичной рекомбинации), а степень неравновесной диссоциации, связанной с понижением энергетического барьера (вследствие большого различия скоростей “пучка” и “хаоса”), мажорируется выражением (4.4).

Сравнение равновесных значений  $\alpha_e$  со значениями  $\alpha_s$ ,  $\alpha_e'$ ,  $\alpha_s^T$  показывает, что  $\alpha_e$  больше указанных параметров практически во всем диапазоне значений  $\theta_d$ . Однако следует учесть, что равновесная концентрация атомов  $\alpha_e$  реально достигается далеко вниз по потоку за “вязким” скачком.

Таким образом, степень диссоциации бинарной смеси газов (A и A<sub>2</sub>) в модели “пучок” — сплошная среда во фронте гиперзвуковой ударной волны в широком диапазоне

значений  $\theta_d$  оказывается достаточно высокой в отличие от “аррениусовской” модели температурной диссоциации.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Зельдович Я. Б., Генич А. П., Манелис Г. Б.** Особенности поступательной релаксации во фронте ударной волны в газовых смесях // Докл. АН СССР. 1979. Т. 248, № 2. С. 349–351.
2. **Великодный В. Ю.** О влиянии движения газа на кинетику физико-химических превращений // Журн. техн. физики. 1989. Т. 59, вып. 12. С. 126–129.
3. **Козлов П. В., Лосев С. А., Романенко Ю. В., Шаталов О. П.** Поступательная неравновесность во фронте ударной волны в аргоне. М., 1997. (Препр. / РАН. Ин-т механики Моск. гос. ун-та; № 27-97).
4. **Boyd I. D., Candlen G. V., Levin D. A.** Dissociation modeling in low density hypersonic flow of air // Phys. Fluids. 1995. V. 7. P. 1757–1763.
5. **Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., et al.** Nonequilibrium ionization and radiation behind shock wave in Marsian atmosphere // Proc. of the 3th Europ. symp. on aerothermodynamics for space vehicles, Noordwijk, Netherlands, 24–26 Nov., 1998. Noordwijk: ESTEC, 1998. P. 429–436.
6. **Turcotte D. L., Scholnick I. M.** Structure of strong shock waves // Phys. Fluids. 1969. Supplement 1. V. 12, N 5, pt 2. P. 80–82.
7. **Kot S. C., Turcotte D. L.** Beam-continuum model for hypersonic flow over a flat plate // AIAA J. 1972. V. 10, N 3. P. 291–296.
8. **Артамонов А. К., Архипов В. Н.** Обтекание сферы гиперзвуковым потоком разреженного газа // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1979. № 6. С. 85–90.
9. **Комаров В. Н., Кузнецов М. М., Юмашев В. Л.** Структура прямой ударной волны в модели “пучок” — сплошная среда // Фундаментальные исследования для гиперзвуковых технологий: Сб. тр. Всесоюз. науч.-техн. конф., Жуковский, Россия, 20–23 окт. 1998 г. М.: Центр. аэрогидродинам. ин-т, 1998. Вып. 2636. С. 382, 383.
10. **Горинов А. С., Магомедов Е. М.** Метод расщепления для решения релаксационных уравнений при наличии диффузии // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1973. Т. 13, № 5. С. 1264–1272.
11. **Bush W. C.** The hypersonic approximation for the shock structure of a perfect gas with sutherland viscosity law // J. mécanique. 1962. V. 1, N 3. P. 321–336.
12. **Кузнецов М. М., Никольский В. С.** Асимптотическая структура предельного гиперзвукового течения в ударной волне // Проблемы физической газовой динамики: Сб. науч. тр. М.: Центр. аэрогидродинам. ин-т, 1990. Вып. 2424. С. 100–110.
13. **Агафонов В. П., Вертушкин В. К., Гладков А. А., Полянский О. Ю.** Неравновесные физико-химические процессы в газодинамике. М.: Машиностроение, 1972.

*Поступила в редакцию 14/II 2000 г.*