

УДК 532.5

Эволюция акустических возмущений в химически реагирующей газовой смеси $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}^*$

Ю.Н. Григорьев¹, И.В. Ершов^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр информационных
и вычислительных технологий, Новосибирск

²Новосибирский государственный аграрный университет

E-mail: grigor@ict.nsc.ru

На основе полной системы уравнений акустики исследована эволюция акустических возмущений в высокотемпературной реагирующей смеси углекислого и угарного газов и кислорода $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}$ в реакции диссоциации – рекомбинации, а также в неравновесных эндотермической реакции диссоциации CO_2 и экзотермической реакции дожигания угарного газа в кислороде. Использовалась реалистичная однотемпературная модель Аррениуса химической кинетики. В качестве стационарных условий среды принимались значения термодинамических параметров на траектории гиперзвукового полета в атмосфере Марса. Для реакции диссоциации – рекомбинации с отрицательным тепловым эффектом вблизи химического равновесия в асимптотическом высокочастотном пределе показано затухание акустических возмущений. В тех же условиях на фоне неравновесной экзотермической реакции имеет место усиление, а на фоне неравновесной эндотермической реакции — затухание акустических колебаний.

Ключевые слова: акустические возмущения, неравновесные химические реакции, усиление (ослабление) высокочастотных колебаний, влияние знака теплового эффекта реакции.

Введение

В высокотемпературных химически реагирующих газовых средах возникают различного рода неустойчивости, такие как вибрация и срыв пламени, детонационные волны, переход к турбулентности и др. Все они связаны с генерацией и развитием акустических возмущений на фоне неравновесных химических реакций. В частности, представляет интерес вопрос о влиянии химических реакций на восприимчивость к внешним акустическим возмущениям и ламинарно-турбулентный переход (ЛТП) в гиперзвуковом пограничном слое, происходящий через усиление акустических мод Мэка [1]. Применительно к ЛТП на пластине в условиях посадки на Марс эта задача рассматривалась в [2].

* Исследование выполнено за счет Российского научного фонда (грант № 23-11-00027, <https://rscf.ru/project/23-11-00027/>).

В акустическом приближении эволюция акустических волн в химически реагирующем газе изучалась в работах [3, 4]. В [3] на качественном уровне была показана возможность усиления (ослабления) высокочастотных колебаний на фоне экзотермической (эндотермической) реакции. Результат был получен в асимптотическом пределе $\omega\tau_{ch} \gg 1$, где ω — частота акустической волны, τ_{ch} — характерное время химической реакции.

В [4] в общем виде выведено условие усиления акустической волны безотносительно к знаку теплового эффекта реакции и отношению характерного времени τ_{ch} к периоду волны. Это связано с тем, что рассматривалась простейшая реакция первого порядка, кинетика которой не конкретизировалась. Еще более упрощенная модель реакции использовалась в [3], где в системе уравнений было опущено уравнение для производства реагента, а кинетика описывалась степенной зависимостью от температуры.

В настоящей работе рассматривается эволюция акустических возмущений в высокотемпературной реагирующей смеси углекислого и угарного газов и кислорода $CO_2/CO/O$ в реакции диссоциации – рекомбинации, а также в неравновесных эндотермической реакции диссоциации CO_2 и экзотермической реакции дожигания угарного газа в кислороде.

Модель $CO_2/CO/O$ в двухтемпературной постановке использовалась в работе [2] для исследования устойчивости гиперзвукового пограничного слоя на пластине при полете в атмосфере Марса. В этих условиях данная модель, в которой отсутствуют обменные реакции, показала малое отличие от более сложных моделей [5]. При этом принималось, что все колебательные моды молекулы CO_2 характеризуются единым временем релаксации, а молекула CO , образующаяся при диссоциации, мгновенно приходит в термодинамическое равновесие со средой. В рассматриваемой задаче об эволюции акустических возмущений первоначально также использовалась двухтемпературная постановка [2]. Но предварительные расчеты показали, что это приводит к громоздким выкладкам и трудно обозримым формулам. Вместе с тем из анализа более простой задачи с учетом только колебательного возбуждения следовало, что, по крайней мере для системы $CO_2/CO/O$, вклад химической неравновесности является определяющим. Это позволило ограничиться рассмотрением только химических реакций. В отличие от предшествующих работ [3, 4], использовалась полная система уравнений акустики для реагирующей смеси и реалистичная однотемпературная модель Аррениуса химической кинетики.

В качестве стационарных условий принимались значения термодинамических параметров на траектории посадки в атмосфере Марса [2]. Для рассмотренных реакций получены асимптотические оценки эволюции высоко- и низкочастотных акустических возмущений, подтвердившие результаты, полученные в [3] для упрощенной модели. Показано, что реакция диссоциации – рекомбинации $CO_2/CO/O$ в условиях [2] может только препятствовать нарастанию акустической моды Мэка.

Основные уравнения

Рассматривается распространение акустических возмущений в течении углекислого газа, где протекают реакции диссоциации – рекомбинации с образованием молекул угарного газа CO и атомарного кислорода O по схеме



В (1) частица-партнер по столкновению M представляет собой один из компонентов смеси $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}$.

Система гидродинамических переменных включает скорость потока (u), плотность смеси (ρ), массовые доли частиц CO_2 (Y_1), CO (Y_2) и O (Y_3), статическое давление смеси (p), удельную внутреннюю энергию смеси, связанную с квазиравновесными внутренними степенями свободы (e_t), статическую температуру (T). Поскольку сумма массовых долей компонентов смеси равна единице, массовая доля любого компонента может быть выражена через массовые доли двух других компонентов, в частности $Y_3 = 1 - Y_1 - Y_2$. С учетом этого одномерные уравнения газовой динамики для химически реагирующей смеси $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}$ принимают вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\rho \frac{dY_1}{dt} = -W_1, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dY_2}{dt} = W_2, \quad (4)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad (5)$$

$$\frac{de_t}{dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{\rho} [h_{01}W_1 - h_{02}W_2 - h_{03}W_3], \quad (6)$$

$$p = \rho RT \left(\frac{Y_1}{M_1} + \frac{Y_2}{M_2} + \frac{Y_3}{M_3} \right), \quad Y_3 = 1 - Y_1 - Y_2, \quad (7)$$

где

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x},$$

$R = 8,314$ Дж/(моль·К) — универсальная газовая постоянная, h_{0i} и M_i ($i = 1, 2, 3$) — стандартные удельные энтальпии образования и молярные массы i -го компонента смеси.

Скорости производства молекул CO_2 , CO и O в реакциях диссоциации и рекомбинации имеют вид:

$$\begin{aligned} W_1 &= M_1 \rho^2 \left(k_f \frac{Y_1}{M_1} - k_b \rho \frac{Y_2}{M_2} \frac{Y_3}{M_3} \right) \left(\frac{Y_1}{M_1} + \frac{Y_2}{M_2} + \frac{Y_3}{M_3} \right), \\ W_2 &= M_2 \rho^2 \left(k_f \frac{Y_1}{M_1} - k_b \rho \frac{Y_2}{M_2} \frac{Y_3}{M_3} \right) \left(\frac{Y_1}{M_1} + \frac{Y_2}{M_2} + \frac{Y_3}{M_3} \right) = W_1 \left(\frac{M_2}{M_1} \right), \\ W_3 &= M_3 \rho^2 \left(k_f \frac{Y_1}{M_1} - k_b \rho \frac{Y_2}{M_2} \frac{Y_3}{M_3} \right) \left(\frac{Y_1}{M_1} + \frac{Y_2}{M_2} + \frac{Y_3}{M_3} \right) = W_1 \left(\frac{M_3}{M_1} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Константы скорости диссоциации и рекомбинации для реакции вида (1) в рамках однотемпературной модели химической кинетики (модели Аррениуса) приняты одинаковыми для всех партнеров по столкновениям и определяются как [6, 7]

$$k_f(T) = C_f T^n \exp\left(-\frac{\theta_f}{T}\right), \quad k_b(T) = C_b T^m \exp\left(-\frac{\theta_b}{T}\right).$$

Для реакции вида (1) в расчетах использованы параметры [7, 8]:

$C_f = 3,7 \cdot 10^{11} \text{ м}^3/(\text{кмоль} \cdot \text{с})$, $C_b = 6,1 \cdot 10^3 \text{ м}^6/(\text{кмоль}^2 \cdot \text{с})$, $n = 0$, $m = 0,75$, $\theta_f = 52500 \text{ К}$ и $\theta_b = -10240 \text{ К}$.

Удельная внутренняя энергия смеси имеет вид

$$e_i(T) = Y_1 e_{i1}(T) + Y_2 e_{i2}(T) + Y_3 e_{i3}(T) = \\ = (c_{V1} Y_1 + c_{V2} Y_2 + c_{V3} Y_3) T + Y_1 e_{V1}(T) = \hat{c}_V T + Y_1 e_{V1}(T). \quad (9)$$

Здесь выделены энергии квазиравновесных степеней свободы и колебательных мод молекул CO_2 . При этом суммарная теплоемкость квазиравновесных степеней свободы определена как

$$\hat{c}_V = c_{V1} Y_1 + c_{V2} Y_2 + c_{V3} Y_3,$$

где

$$c_{V1} = c_{V1}^{\text{tr}} + c_{V1}^{\text{rot}}, \quad c_{V2} = c_{V2}^{\text{tr}} + c_{V2}^{\text{tr}} + c_{V2}^{\text{vib}}, \quad c_{V3} = c_{V3}^{\text{tr}},$$

c_{Vi}^{tr} , c_{Vi}^{rot} и c_{Vi}^{vib} ($i = 1, 2, 3$) — теплоемкости при постоянном объеме, связанные, соответственно, с квазиравновесными поступательными, вращательными и колебательными степенями свободы молекул i -го сорта и равные:

$$c_{V1}^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{R}{M_1}, \quad c_{V1}^{\text{rot}} = \frac{R}{M_1}, \quad c_{V2}^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{R}{M_2}, \quad c_{V2}^{\text{rot}} = c_{V2}^{\text{vib}} = \frac{R}{M_2}, \quad c_{V3}^{\text{tr}} = \frac{3}{2} \frac{R}{M_3}.$$

В теплоемкость угарного газа c_{V2} в соответствии с принятым в [2, 5] предположением включена теплоемкость колебательной моды. Удельная квазиравновесная колебательная энергия молекул CO_2 в (9) описывается в рамках модели гармонического осциллятора [6, 7]:

$$e_{V1}(T) = \frac{R}{M_1} \left(\frac{\theta_1}{\exp(\theta_1/T) - 1} + \frac{2\theta_2}{\exp(\theta_2/T) - 1} + \frac{\theta_3}{\exp(\theta_3/T) - 1} \right),$$

где $\theta_1 = 1903 \text{ К}$, $\theta_2 = 945 \text{ К}$, $\theta_3 = 3329 \text{ К}$ — характеристические температуры, соответственно, симметричной, дважды вырожденной деформационной и антисимметричной колебательных мод.

Хотя при диссоциации CO_2 , в отличие от двухатомной молекулы, образуются разные компоненты, их молярные концентрации остаются равными:

$$\frac{Y_2}{M_2} = \frac{Y_3}{M_3}. \quad (10)$$

Используя соотношения между компонентами $Y_1 + Y_2 + Y_3 = 1$, $M_1 = M_2 + M_3$ и равенство (10), текущие концентрации CO и O можно выразить через концентрацию углекислого газа CO_2 :

$$Y_2 = (1 - Y_1) \left(\frac{M_2}{M_1} \right), \quad Y_3 = \frac{M_3}{M_2} Y_2 = (1 - Y_1) \left(\frac{M_3}{M_1} \right).$$

Из равенства (11) получаем

$$\hat{c}_V = c_{V1} Y_1 + c_{V2} Y_2 + c_{V3} Y_3 = \frac{5R}{2M_1} Y_1 + \frac{7R}{2M_2} Y_2 + \frac{3R}{2M_3} Y_3 = \\ = \frac{5R}{2M_1} Y_1 + \frac{7R}{2M_2} (1 - Y_1) \left(\frac{M_2}{M_1} \right) + \frac{3R}{2M_3} (1 - Y_1) \left(\frac{M_3}{M_1} \right) = \frac{5R}{M_1} \left(1 - \frac{Y_1}{2} \right). \quad (12)$$

Подставив (11) и (12) с учетом (9) в равенства (8) и уравнения (4) и (6), получаем подсистему уравнений, замкнутую относительно Y_1 . Это позволяет исключить из системы (2)–(7) уравнение (4) и перейти к системе вида

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad \frac{dY_1}{dt} = -w_1, \quad \rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad \frac{de_t}{dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} = q_0 w_1, \quad (13)$$

$$p = \frac{2\rho RT}{M_1} \left(1 - \frac{Y_1}{2}\right), \quad Y_2 = \frac{(1-Y_1)M_2}{M_1}, \quad Y_3 = \frac{(1-Y_1)M_3}{M_1}, \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}.$$

Здесь

$$w_1 = \frac{W_1}{\rho} = (2 - Y_1) \left(\frac{Y_1}{\tau_f} - \frac{(1 - Y_1)^2}{\tau_b} \right), \quad (14)$$

где для удобства дальнейшего анализа введены характерные времена реакций диссоциации и рекомбинации:

$$\tau_f(\rho, T) = \frac{M_1}{\rho k_f(T)}, \quad \tau_b(\rho, T) = \frac{M_1^2}{\rho^2 k_b(T)}.$$

Плотность внутренней энергии запишем как

$$e_t(T) = \hat{c}_v T + Y_1 e_{v1}(T) = \frac{5RT}{M_1} \left(1 - \frac{Y_1}{2}\right) + \frac{RY_1}{M_1} \left(\frac{\theta_1}{\exp(\theta_1/T) - 1} + \frac{2\theta_2}{\exp(\theta_2/T) - 1} + \frac{\theta_3}{\exp(\theta_3/T) - 1} \right),$$

$$q_t = \sum_{i=1}^3 h_{0i} W_i = \frac{1}{M_1} (h_{01} M_1 + h_{02} M_2 + h_{03} M_3) w_1 = q_0 w_1.$$

Уравнения для возмущений

Представим гидродинамические переменные в звуковой волне в виде

$$\mathbf{g}(x, t) = \mathbf{g}_0 + \mathbf{g}'(x, t), \quad (15)$$

где $\mathbf{g}(x, t) = (u, \rho, p, T, Y_1, Y_2, Y_3)$ — мгновенные значения гидродинамических переменных, $\mathbf{g}_0 = (u_0 = 0, \rho_0, p_0, T_0, Y_{10}, Y_{20}, Y_{30})$ — стационарные однородные средние значения гидродинамических переменных, соответствующие невозмущенному состоянию среды, $\mathbf{g}'(x, t)$ — малые возмущения. Подстановка (15) в систему (13) позволяет перейти к системе уравнений для возмущений (уравнений акустики):

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u'}{\partial x} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial Y_1'}{\partial t} = -w_1', \quad (17)$$

$$\frac{\partial u'}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial e_t'}{\partial t} - \frac{p_0}{\rho_0^2} \frac{\partial \rho'}{\partial t} = q_0 w_1', \quad (19)$$

$$Y_2' = -\left(\frac{M_2}{M_1}\right)Y_1', \quad Y_3' = -\left(\frac{M_3}{M_1}\right)Y_1',$$

$$\frac{p'}{p_0} = \frac{\rho'}{\rho_0} + \frac{T'}{T_0} - \frac{Y_1'}{1-Y_{10}}, \quad p_0 = \rho_0 T_0 R \frac{(2-Y_{10})}{M_1}. \quad (20)$$

Возмущения сложных функций вычисляются как полные дифференциалы по возмущениям газодинамических переменных, в которых производные берутся на стационарном решении:

$$w_1 = \left. \frac{\partial w_1}{\partial Y_1} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} Y_1' + \left. \frac{\partial w_1}{\partial \rho} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} \rho' + \left. \frac{\partial w_1}{\partial T} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} T', \quad (21)$$

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial Y_1} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} = \frac{2(1-Y_{10})}{\tau_{f0}} \left[1 + \frac{(5-3Y_{10})}{2} \frac{\tau_{f0}}{\tau_{b0}} \right] = \frac{d_Y}{\tau_{f0}},$$

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial \rho} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} = -\frac{Y_{10}(2-Y_{10})}{\tau_{f0}^2} \left[\frac{\partial \tau_{f0}}{\partial \rho_0} - \frac{(1-Y_{10})^2}{Y_{10}} \left(\frac{\tau_{f0}}{\tau_{b0}} \right)^2 \frac{\partial \tau_{b0}}{\partial \rho_0} \right] = \frac{d_\rho}{\tau_{f0}^2},$$

$$\left. \frac{\partial w_1}{\partial T} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} = -\frac{(2-Y_{10})Y_{10}}{\tau_{f0}^2} \left[\frac{\partial \tau_{f0}}{\partial T_0} - \frac{(1-Y_{10})^2}{Y_{10}} \left(\frac{\tau_{f0}}{\tau_{b0}} \right)^2 \frac{\partial \tau_{b0}}{\partial T_0} \right] = \frac{d_T}{\tau_{f0}^2},$$

$$e_t' = \left. \frac{\partial e_t}{\partial T} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} T' + \left. \frac{\partial e_t}{\partial Y_1} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}_0} Y_1' = c_V T' + e_{t0} Y_1', \quad (22)$$

где

$$c_V = \hat{c}_V + Y_{10} c_{V1}^{\text{vib}} = \frac{5}{2} \frac{R(2-Y_{10})}{M_1} \left\{ 1 + \frac{2Y_{10}}{5(2-Y_{10})T_0^2} \left[\frac{\theta_1^2 \exp(\theta_1/T_0)}{(\exp(\theta_1/T_0)-1)^2} + \frac{2\theta_2^2 \exp(\theta_2/T_0)}{(\exp(\theta_2/T_0)-1)^2} + \frac{\theta_3^2 \exp(\theta_3/T_0)}{(\exp(\theta_3/T_0)-1)^2} \right] \right\},$$

$$e_{t0} = -\frac{5}{2} \frac{RT_0}{M_1} + e_{v1}(T_0) = -\frac{5}{2} \frac{RT_0}{M_1} \left\{ 1 - \frac{2}{5T_0} \left(\frac{\theta_1}{\exp(\theta_1/T_0)-1} + \frac{2\theta_2}{\exp(\theta_2/T_0)-1} + \frac{\theta_3}{\exp(\theta_3/T_0)-1} \right) \right\}. \quad (22)$$

Предполагая, что акустическая волна не влияет на стационарные характеристики среды, в качестве малых возмущений $\mathbf{g}'(x, t)$ будем рассматривать бегущие плоские волны:

$$\mathbf{g}'(x, t) = \mathbf{g}'_a \exp[-i(\omega t - kx)], \quad (23)$$

где $\mathbf{g}'_a = (u'_a, \rho'_a, p'_a, T'_a, Y'_{1a})$ — амплитуды возмущений, которые являются постоянными величинами и в общем случае могут быть комплексными, ω — частота акустической волны, которая принимается вещественной величиной, $k = k_1 + ik_2$ — комплексное волновое число, i — мнимая единица. Действительная часть волнового числа k_1 обратно пропорциональна длине волны λ ($k_1 = 2\pi/\lambda$) и определяет фазовую скорость звука $c_s = \omega/k_1$. Мнимая часть k_2 представляет собой коэффициент поглощения (усиления) звука.

Учитывая, что для возмущений вида (23) имеют место равенства

$$\frac{\partial \mathbf{g}'}{\partial t} = -i\omega \mathbf{g}', \quad \frac{\partial \mathbf{g}'}{\partial x} = ik \mathbf{g}',$$

из уравнений (16)–(20) получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$-i\omega \rho'_a + ik \rho_0 u'_a = 0, \quad (24)$$

$$-i\omega Y'_{1a} + w_{1a} = 0, \quad (25)$$

$$-i\omega \rho_0 u'_a + ik p'_a = 0, \quad (26)$$

$$i\omega \left(e'_{ta} - \frac{P_0}{\rho_0^2} \rho'_a \right) - q_0 w'_{1a} = 0, \quad (27)$$

$$\frac{p'_a}{p_0} = \frac{\rho'_a}{\rho_0} + \frac{T'_a}{T_0} - \frac{Y'_{1a}}{2 - Y_{10}}. \quad (28)$$

Здесь выражения для e'_{ta} , w'_{1a} получаются из (21), (22) заменой обозначений возмущений на обозначения соответствующих амплитуд.

Дисперсионное соотношение

Из уравнений (24) и (26), исключив u'_a , получаем выражение

$$p'_a = \left(\frac{\omega}{k} \right)^2 \rho'_a = c^2 \rho'_a, \quad (29)$$

где $c = \omega/k$ — комплексная скорость звука.

Возмущение уравнения состояния (28) перепишем в виде

$$p'_a = \frac{P_0}{\rho_0} \left[\rho'_a + \left(\frac{\rho_0}{T_0} \right) T'_a - \left(\frac{\rho_0}{2 - Y_{10}} \right) Y'_{1a} \right]. \quad (30)$$

Чтобы получить из (29), (30) дисперсионное соотношение, выразим амплитуды T'_a , Y'_{1a} через ρ'_a . Для этого рассмотрим подсистему уравнений (25), (27). Исключив из последнего возмущение теплового эффекта реакции $q_0 w'_{1a}$, приведем подсистему к виду

$$\begin{aligned} \frac{d_T}{\tau_{f0}} T'_a + (d_Y - i\omega \tau_{f0}) Y'_{1a} &= -\frac{d_\rho}{\tau_{f0}} \rho'_a, \\ c_V T'_a + (q_0 + e_{t0}) Y'_{1a} &= \frac{P_0}{\rho_0^2}. \end{aligned}$$

Отсюда методом исключения последовательно получаем

$$Y'_{1a}(\rho'_a) = \frac{A}{B} \rho'_a, \quad T'_a(\rho'_a) = \frac{C}{B} \rho'_a, \quad (31)$$

где

$$A = \frac{d_\rho}{\tau_{f0}} c_V + \frac{P_0}{\rho_0^2} \frac{d_T}{\tau_{f0}}, \quad B = (i\omega \tau_{f0} - d_Y) c_V + \frac{d_T}{\tau_{f0}} Q_0,$$

$$C = (d_Y - i\omega\tau_{f0}) \frac{p_0}{\rho_0^2} + \frac{d_\rho}{\tau_{f0}} Q_0, \quad Q_0 = q_0 + e_{f0}.$$

Подставляя выражения (31) в (30), получаем дисперсионное соотношение

$$p'_a = \frac{p_0}{\rho_0} \left[1 + \left(\frac{\rho_0}{T_0} \right) \frac{C}{B} - \left(\frac{\rho_0}{2 - Y_{10}} \right) \frac{A}{B} \right] \rho'_a$$

или

$$\left(\frac{\omega}{k} \right)^2 = \tilde{c}^2 = \gamma \frac{p_0}{\rho_0}, \quad (32)$$

где γ — комплексный «показатель адиабаты», который удобно представить в виде

$$\gamma = \frac{\tilde{c}_p - i\omega\tau_{f0}c_p}{\tilde{c}_V - i\omega\tau_{f0}c_V}. \quad (33)$$

Здесь

$$c_p = c_V + \frac{R(2 - Y_{10})}{M_1}, \quad \tilde{c}_V = c_V d_Y - \frac{T_0 d_T}{\tau_{f0}} \left(\frac{Q_0}{T_0} \right),$$

$$\tilde{c}_p = c_p d_Y - \frac{T_0 d_T}{\tau_{f0}} \left(\frac{Q_0}{T_0} - \frac{R}{M_1} \right) + \frac{\rho_0 d_\rho}{\tau_{f0}} \left(\frac{c_V}{2 - Y_{10}} + \frac{Q_0}{T_0} \right).$$

Из (32), (33) с учетом введенных выражений получаем формулы для комплексной скорости звука

$$c = \tilde{c} \sqrt{\frac{1 - i\omega\tau_{f0}(c_p / \tilde{c}_p)}{1 - i\omega\tau_{f0}(c_V / \tilde{c}_V)}}$$

и комплексного волнового числа

$$k(\omega) = k_r(\omega) + ik_i(\omega) = \frac{\omega}{c} = \left(\frac{\omega}{\tilde{c}} \right) \sqrt{\frac{1 - i\omega\tau_{f0}(c_V / \tilde{c}_V)}{1 - i\omega\tau_{f0}(c_p / \tilde{c}_p)}}, \quad (34)$$

где введены обозначения

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{\tilde{\gamma} p_0}{\rho_0}}, \quad \tilde{\gamma} = \frac{\tilde{c}_p}{\tilde{c}_V}. \quad (35)$$

Асимптотические оценки

Приближение малых частот

В приближении малых частот $\omega\tau_{f0} \ll 1$ из (34) получаем, что волновой вектор с точностью до членов порядка $O(\omega^2\tau_{f0}^2)$ имеет вид

$$k(\omega) = k_1(\omega) + ik_2(\omega) = \frac{\omega}{c} = \left(\frac{\omega}{\tilde{c}} \right) \sqrt{\frac{1 - i\omega\tau_{f0}(c_V / \tilde{c}_V)}{1 - i\omega\tau_{f0}(c_p / \tilde{c}_p)}} \approx$$

$$\approx \frac{\omega}{\tilde{c}} + i \frac{\omega^2\tau_{f0}}{2\tilde{c}} \left(\frac{c_p}{\tilde{c}_p} - \frac{c_V}{\tilde{c}_V} \right). \quad (36)$$

Из (35) и (36) следует, что в первом приближении по $\omega\tau_{f0} \ll 1$ показатель адиабаты $\tilde{\gamma}$, скорость звука \tilde{c} и волновое число $k = \omega/\tilde{c}$ являются вещественными величинами, затухание (усиление) акустических возмущений отсутствует и они распространяются со скоростью $c_s = \tilde{c}$.

Приближение больших частот

В приближении больших частот $\omega\tau_{f0} \gg 1$ из (34) получаем, что с точностью до членов порядка $O(\omega^{-2}\tau_{f0}^{-2})$ волновой вектор выражается как

$$k(\omega) = k_1(\omega) + ik_2(\omega) = \frac{\omega}{c} = \left(\frac{\omega}{c_0}\right) \sqrt{\frac{1 - \tilde{c}_V/(i\omega\tau_{f0}c_V)}{1 - \tilde{c}_P/(i\omega\tau_{f0}c_P)}} \approx \frac{\omega}{c_0} + \frac{i}{2c_0\tau_{f0}} \left(\frac{\tilde{c}_V}{c_V} - \frac{\tilde{c}_P}{c_P}\right), \quad (37)$$

где

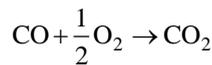
$$c_0 = \sqrt{\frac{\gamma_0 P_0}{\rho_0}}, \quad \gamma_0 = \frac{c_P}{c_V}. \quad (38)$$

Из (37) следует, что в приближении больших частот ($\omega\tau_{f0} \gg 1$) мнимая часть волнового вектора (инкремент/декремент волны) k_2 не зависит от частоты звуковой волны ω :

$$k_2 = \frac{1}{2c_0\tau_{f0}} \left(\frac{\tilde{c}_V}{c_V} - \frac{\tilde{c}_P}{c_P}\right).$$

Эволюция звуковых волн на больших частотах

В работах [3, 4] показано, что в газах, где протекают необратимые химические реакции, возможно усиление (подавление) акустических колебаний. При этом результаты были получены в достаточно общем виде для случаев простых модельных реакций. Для нас представляет интерес получить конкретные оценки инкремента усиления для реакции диссоциации – рекомбинации (1) в смеси $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}$ для условий гиперзвукового полета в атмосфере Марса. Это связано с возможностью негативного воздействия данного эффекта на усиление акустической моды Мэка, наиболее опасной с точки зрения потери устойчивости в таких условиях [1]. Кроме того, рассматривая отдельно реакцию диссоциации CO_2 и обратную реакцию



как пределы в результате смещения химического равновесия, мы можем выделить влияние знака теплового эффекта реакции на фоне сильной химической неравновесности.

Поскольку $\mathbf{g}'(x, t) \sim \exp(-k_2 x)$, условие усиления звуковых волн на больших частотах ($\omega\tau_{f0} \gg 1$) имеет вид

$$k_2 = \frac{1}{2c_0\tau_{f0}} \left(\frac{\tilde{c}_V}{c_V} - \frac{\tilde{c}_P}{c_P}\right) < 0. \quad (40)$$

При этом обратный знак неравенства в (40) соответствует подавлению акустических колебаний.

Поскольку $\tau_{f0} > 0$, $c_p > 0$, $c_V > 0$ и $c_0 > 0$, условие (40) будет иметь место, если

$$F = \frac{\tilde{c}_V}{c_V} - \frac{\tilde{c}_p}{c_p} < 0. \tag{41}$$

Результаты расчетов усиления звуковых волн на больших частотах

В качестве стационарных условий для распространения акустических колебаний были выбраны параметры набегающего потока за косым скачком уплотнения на головной части аппарата в форме клина с углом $\alpha = 40^\circ$ на траектории посадки на Марс, соответствующие двум режимам на 66-й и 87-й секундах полета спускаемого аппарата [9], которые использовались нами в расчетах устойчивости [2]. Параметры потока за косым скачком уплотнения рассчитывались на основе асимптотических формул теории косоугольного скачка [10] при больших числах Маха.

Расчеты значений концентраций Y_{10} проводились для параметров обоих режимов из условия химического равновесия в реакции (1)

$$w_{10} = (2 - Y_{10}) \left(\frac{Y_{10}}{\tau_{f0}} - \frac{(1 - Y_{10})^2}{\tau_{b0}} \right) = 0, \tag{42}$$

раскрывая которое, получаем

$$Y_{10} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + K}}, \quad K = \frac{C_b p_0}{C_f R} T_0^{-1/4} \exp\left(\frac{\theta_f - \theta_b}{T_0}\right).$$

Значения p_0 , ρ_0 , T_0 и Y_{10} приведены в табл. 1. Можно заметить, что в режиме 2 диссоциация практически отсутствует. Стандартные энтальпии образования (h_{0i}) и молярные массы компонентов даны в табл. 2 [11].

Расчеты знака коэффициента усиления/поглощения k_2 в представлении (40) показали следующее.

Для реакции диссоциации–рекомбинации



Таблица 1
Параметры набегающего потока за косым скачком уплотнения

| Параметр | Режим 1 | Режим 2 |
|------------------------------|---------|---------|
| t , с | 66 | 87 |
| p_0 , Па | 1549,5 | 1062,8 |
| T_0 , К | 2583 | 946 |
| ρ_0 , кг/м ³ | 0,00254 | 0,00595 |
| Y_{10} | 0,7519 | 0,9999 |

Таблица 2
Стандартные энтальпии образования и молярные массы

| Параметр | Компонент смеси | | |
|---------------------|-----------------|---------|--------|
| | CO ₂ | CO | O |
| h_{0i} , кДж/моль | -393,51 | -110,52 | 249,18 |
| M_i , кг/моль | 0,044 | 0,028 | 0,016 |

Таблица 3
Значения выражения $F \cdot 10^{-7}$

| Режим | Реакция | | |
|---------|---------|--------|--------|
| | (43) | (44) | (45) |
| Режим 1 | 3,7537 | 1,5477 | -3,501 |
| Режим 2 | 12,4411 | 6,2225 | -8,010 |

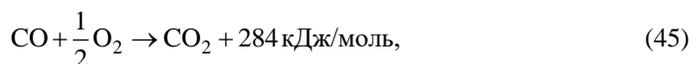
с отрицательным тепловым эффектом $-532,17$ кДж/моль, которая в соответствии с (42) идет вблизи химического равновесия и эндотермична, в обоих режимах $k_2 > 0$. Таким образом, реакция (1) в данных условиях может только усиливать затухание акустической волны, в частности акустической моды Мэка.

Аналогично для эндотермической реакции



вдали от химического равновесия в обоих режимах $k_2 > 0$, и реакция может только усиливать затухание акустической волны.

Для экзотермической реакции



которая в данных условиях также сильно неравновесна, в обоих режимах $k_2 < 0$, и происходит усиление высокочастотных акустических колебаний.

Числовые значения выражения F в (41), определяющего знак k_2 , приведены в табл. 3.

Поскольку режим 2 соответствует большей химической неравновесности по сравнению с режимом 1, данные табл. 3 позволяют предположить, что большей неравновесности соответствует большее подавление (усиление) акустических возмущений. Возможно, это является проявлением предложенного в [12] механизма положительной обратной связи между акустическим возмущением и неравновесным объемным тепловыделением. В частности, на фоне экзотермической реакции с положительной энергией активации звук будет усиливаться, если максимум давления в акустической волне вызывает локальное повышение температуры. Это увеличивает скорость реакции, приводя к дальнейшему повышению температуры и, следовательно, давления (росту амплитуды акустической волны).

Полученные для реальной химической кинетики результаты подтверждают оценки, найденные в [3] на качественном уровне для упрощенной модели.

Заключение

На основе полной системы уравнений акустики рассмотрен процесс эволюции акустических возмущений в высокотемпературной реагирующей смеси $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{O}$ в реакции диссоциации – рекомбинации, а также в неравновесных эндотермической реакции диссоциации CO_2 и экзотермической реакции дожигания угарного газа в кислороде. Производство реактантов описывалось реалистичной однотемпературной моделью Аррениуса. В качестве стационарных условий среды принимались значения термодинамических параметров на траектории гиперзвукового полета в верхней и нижней атмосфере Марса. Получены выражение для комплексного волнового числа и его асимптотики в пределах малых и больших частот. Для реакции диссоциации – рекомбинации

с отрицательным тепловым эффектом вблизи химического равновесия в асимптотическом высокочастотном пределе расчеты показали затухание акустических возмущений. В тех же условиях на фоне неравновесной экзотермической реакции показано, что имеет место усиление, а на фоне неравновесной эндотермической реакции — затухание акустических колебаний.

Список литературы

1. Mack L.M. Boundary layer stability theory. Preprint of JPL Technical Report, Document 900–277, Rev. A. Pasadena: California Institute of Technology, 1969. 272 p.
2. Григорьев Ю.Н., Ершов И.В. Оценка начала ламинарно-турбулентного перехода на пластине при полете в атмосфере Марса // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2024. № 2. С. 3–16.
3. Toong T.T. Chemical effects on sound propagation // Combustion and Flame. 1972. Vol. 18, No. 2. P. 207–218.
4. Молевич Н.Е. Дисперсия скорости звука и вторая вязкость в средах с неравновесными химическими реакциями // Акуст. журн. 2003. Т. 49, № 2. С. 229–232.
5. Armenise I., Reynie Ph., Kustova E. Advanced models for vibrational and chemical kinetics applied to Mars entry aerothermodynamics // J. Thermophys. Heat Transf. 2016. Vol. 30, No. 4. P. 705–720.
6. Candler G.V. Computation of thermo-chemical nonequilibrium Martian atmospheric entry flows // AIAA Paper. 1990. No. 90-1695. P. 1–10.
7. Rock S.G., Candler G.V., Hornung H.G. Analysis of thermochemical nonequilibrium models for carbon dioxide flows // AIAA J. 1993. Vol. 31. P. 2255–2262.
8. Park Ch., Howe J.T., Jaffe R.L., Candler G.V. Chemical-kinetic problems of future NASA missions // AIAA Paper. 1991. No. 91-0464. P. 1–31.
9. Milos F.S., Chen Y.-K., Congdon W.M., Thomas J.M. Mars Pathfinder entry temperature data, aerothermal, and heatshield material response // AIAA Paper. 1998. No. 98-2681. P. 1–16.
10. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.; Л.: Гостехтеориздат, 1950. 676 с.
11. Краткий справочник физико-химических величин. Справочник / Под ред. К.П. Мищенко, А.А. Равделя. Л.: Химия, 1974. 200 с.
12. Молевич Н.Е., Ораевский А.Н. Волны в среде с отрицательной второй вязкостью // Тр. ФИАН им. П.Н. Лебедева. 1992. Т. 222. С. 45–95.

*Статья поступила в редакцию 23 апреля 2024 г.,
после доработки — 4 июня 2024 г.,
принята к публикации 13 июня 2024 г.*