

О ВЛИЯНИИ МОДЕЛЕЙ ОБМЕННЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ НА ПАРАМЕТРЫ ТЕЧЕНИЯ ВОЗДУХА ЗА СИЛЬНЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ*

О. В. Кунова, Е. А. Нагнибеда

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9

В работе численно исследованы неравновесные течения пятикомпонентной воздушной смеси $N_2/O_2/NO/N/O$ за сильными ударными волнами на основе наиболее строгого поуровневого приближения. Уравнения для заселенностей колебательных уровней молекул и числовых плотностей атомов совместно с уравнениями сохранения численно решались для одномерного квазистационарного течения. Учитывались различные переходы колебательной энергии, диссоциация, рекомбинация и обменные реакции. На основе полученного решения показано влияние разных реакций на изменение колебательных распределений и макроскопических параметров в релаксационной зоне за фронтом ударной волны. В вычислениях использовались разные модели для зависящих от колебательных уровней коэффициентов скоростей обменных реакций. Изучено влияние выбора модели обменных реакций на заселенности колебательных уровней, состав смеси и температуру газа. Библиогр. 14 назв. Ил. 6.

Ключевые слова: неравновесная кинетика в воздухе, колебательные распределения, химический состав, диссоциация, рекомбинация, обменные реакции.

Введение. Одним из наиболее важных вопросов при решении практических задач о движении тел в атмосфере Земли с гиперзвуковыми скоростями становится учет физико-химических превращений. Данному вопросу посвящено множество работ, авторы которых используют различные модели для определения коэффициентов скоростей химических процессов. В настоящей работе проводится сравнение моделей обменных химических реакций в воздухе и исследуется влияние этих моделей на характер течения реагирующей смеси компонентов воздуха за сильными ударными волнами.

В рамках поуровневого приближения рассматривается течение пятикомпонентной воздушной смеси (N_2, O_2, NO, N, O) за ударной волной с учетом возбуждения колебательных уровней молекул; принимаются во внимание следующие химические реакции диссоциации, рекомбинации и обмена:



($M = N_2, O_2, NO, N, O$; i, i' — колебательный уровень молекулы).

Поуровневая модель динамики неравновесного газа основана на совместном решении уравнений газовой динамики и уравнений, описывающих релаксационные процессы. Данный подход является наиболее точным и в то же время требует больших

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 11-01-00408, 12-08-00826) и СПбГУ (НИР 6.38.73.2012).

вычислительных ресурсов. В настоящее время детальное поуровневое описание неравновесных процессов вызывает большой интерес. Однако применению данного подхода при изучении различных течений многокомпонентных смесей посвящено небольшое число работ (см., например, [1, 2, 3]). В настоящей работе изучены особенности колебательных распределений и макропараметров воздуха в релаксационной зоне за фронтом ударной волны при использовании разных моделей для определения коэффициентов скоростей реакций (1)–(2), зависящих от колебательных уровней молекул.

Основные уравнения. Система уравнений, описывающих течение воздушной смеси газов в поуровневом приближении, состоит из уравнений кинетики для заселенностей колебательных уровней молекул (n_{N_2i} , n_{O_2i} , n_{NOi}) и числовых плотностей атомарных компонентов (n_N , n_O), а также уравнений сохранения массы, импульса и энергии смеси [4].

В работе при изучении течения за фронтом ударной волны поток считается одномерным и квазистационарным, эффекты вязкости и теплопроводности не учитываются. Используется часто принимаемое предположение (см., например, [2, 3]), что в результате реакций (1)–(2) молекулы NO образуются в основном колебательном состоянии и остаются в нем в процессе релаксации. В этом случае система уравнений принимает вид

$$\frac{d(vn_{N_2i})}{dx} = R_{N_2i}^{vibr} + R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 2} + R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 3}, \quad i = 0, 1, \dots, L_{N_2} - 1, \quad (6)$$

$$\frac{d(vn_{O_2i})}{dx} = R_{O_2i}^{vibr} + R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 2} + R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 3}, \quad i = 0, 1, \dots, L_{O_2} - 1, \quad (7)$$

$$\frac{d(vn_{NO})}{dx} = - \sum_{i=0}^{L_{N_2}-1} R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 2} - \sum_{i=0}^{L_{O_2}-1} R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 2} + R_{NO}^{2\leftrightarrow 3}, \quad (8)$$

$$\frac{d(vn_N)}{dx} = -2 \sum_{i=0}^{L_{N_2}-1} R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2\leftrightarrow 3} - \sum_{i=0}^{L_{N_2}-1} R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 2} + \sum_{i=0}^{L_{O_2}-1} R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 2}, \quad (9)$$

$$\frac{d(vn_O)}{dx} = -2 \sum_{i=0}^{L_{O_2}-1} R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 3} - R_{NO}^{2\leftrightarrow 3} - \sum_{i=0}^{L_{O_2}-1} R_{O_2i}^{2\leftrightarrow 2} + \sum_{i=0}^{L_{N_2}-1} R_{N_2i}^{2\leftrightarrow 2}, \quad (10)$$

$$\rho_0 v_0 = \rho v, \quad (11)$$

$$\rho_0 v_0^2 + p_0 = \rho v^2 + p, \quad (12)$$

$$h_0 + \frac{v_0^2}{2} = h + \frac{v^2}{2}. \quad (13)$$

Здесь индекс «0» обозначает параметры газа в набегающем потоке, L_{N_2} и L_{O_2} — число колебательных уровней молекул, x — расстояние от фронта ударной волны, v — скорость, ρ — плотность, p — давление, h — энтальпия в расчете на единицу массы:

$$h = \sum h_c Y_c,$$

$Y_c = \rho_c / \rho$ — массовая доля компонента смеси сорта c ,

$$h_c = \frac{5}{2} \bar{R}_c T + \frac{\varepsilon_c}{m_c} \quad \text{для } c = N, O,$$

$$h_c = \frac{7}{2} \bar{R}_c T + \frac{1}{\rho_c} \sum \varepsilon_i^c n_{ci} + \frac{\varepsilon_c}{m_c} \quad \text{для } c = N_2, O_2, NO.$$

Здесь ε_i^c — колебательная энергия i -го уровня молекулы сорта c , \bar{R}_c , ε_c — удельная газовая постоянная и энергия образования частиц сорта c .

Запишем выражения для релаксационных членов уравнений (6)–(10). Для реакции обмена ($R_{ci}^{2 \leftrightarrow 2}$), диссоциации и рекомбинации ($R_{ci}^{2 \leftrightarrow 3}$) имеем

$$\begin{aligned} R_{N_2 i}^{2 \leftrightarrow 2} &= n_{NO} n_N k_{NO, N_2 i}^{N, O} - n_{N_2 i} n_O k_{N_2 i, NO}^{O, N}, \\ R_{O_2 i}^{2 \leftrightarrow 2} &= n_{NO} n_O k_{NO, O_2 i}^{O, N} - n_{O_2 i} n_N k_{O_2 i, NO}^{N, O}, \\ R_{N_2 i}^{2 \leftrightarrow 3} &= \sum_M n_M (n_N n_N k_{rec, N_2 i}^M - n_{N_2 i} k_{diss, N_2 i}^M), \\ R_{O_2 i}^{2 \leftrightarrow 3} &= \sum_M n_M (n_O n_O k_{rec, O_2 i}^M - n_{O_2 i} k_{diss, O_2 i}^M), \\ R_{NO}^{2 \leftrightarrow 3} &= \sum_M n_M (n_N n_O k_{rec, NO}^M - n_{NO} k_{diss, NO}^M), \end{aligned}$$

(M = N₂, O₂, NO, N, O).

Колебательный энергообмен ($R_{ci}^{vibr} = R_{ci}^{VV} + R_{ci}^{VV'} + R_{ci}^{VT}$) включает VV - и VV' -обмены колебательными энергиями молекул одного и того же химического сорта и разных сортов соответственно, и VT -обмены поступательной и колебательной энергий:

$$\begin{aligned} R_{N_2 i}^{VV} &= \sum_{m=0}^{L_{N_2}-1} \sum_{\substack{i'=i\pm 1 \\ (m'=m\mp 1)}} \left(n_{N_2 i'} n_{N_2 m'} k_{N_2, i' \rightarrow i}^{m' \rightarrow m} - n_{N_2 i} n_{N_2 m} k_{N_2, i \rightarrow i'}^{m \rightarrow m'} \right), \\ R_{O_2 i}^{VV} &= \sum_{m=0}^{L_{O_2}-1} \sum_{\substack{i'=i\pm 1 \\ (m'=m\mp 1)}} \left(n_{O_2 i'} n_{O_2 m'} k_{O_2, i' \rightarrow i}^{m' \rightarrow m} - n_{O_2 i} n_{O_2 m} k_{O_2, i \rightarrow i'}^{m \rightarrow m'} \right), \\ R_{N_2 i}^{VV'} &= \sum_{m=0}^{L_{O_2}-1} \sum_{\substack{i'=i\pm 1 \\ (m'=m\mp 1)}} \left(n_{N_2 i'} n_{O_2 m'} k_{N_2, i' \rightarrow i}^{O_2, m' \rightarrow m} - n_{N_2 i} n_{O_2 m} k_{N_2, i \rightarrow i'}^{O_2, m \rightarrow m'} \right), \\ R_{O_2 i}^{VV'} &= \sum_{m=0}^{L_{N_2}-1} \sum_{\substack{i'=i\pm 1 \\ (m'=m\mp 1)}} \left(n_{O_2 i'} n_{N_2 m'} k_{O_2, i' \rightarrow i}^{N_2, m' \rightarrow m} - n_{O_2 i} n_{N_2 m} k_{O_2, i \rightarrow i'}^{N_2, m \rightarrow m'} \right), \\ R_{ci}^{VT} &= \sum_M n_M \left(n_{c, i-1} k_{c, i-1 \rightarrow i}^M + n_{c, i+1} k_{c, i+1 \rightarrow i}^M - n_{c, i} \left(k_{c, i \rightarrow i-1}^M + k_{c, i \rightarrow i+1}^M \right) \right), \\ & \quad c = N_2, O_2, \quad M = N_2, O_2, NO, N, O, \quad i = 0, 1 \dots L_c - 1. \end{aligned}$$

Здесь $k_{N_2 i, NO}^{O, N}$, $k_{O_2 i, NO}^{N, O}$, $k_{N_2 i, diss}^M$, $k_{O_2 i, diss}^M$, $k_{NO, diss}^M$, $k_{c, i \rightarrow i\pm 1}^{M, m \rightarrow m\mp 1}$ и $k_{c, i \rightarrow i\pm 1}^M$ — коэффициенты скоростей обменных реакций, реакций диссоциации и энергообмена с размерностью м³/сек; $k_{rec, N_2 i}^M$, $k_{rec, O_2 i}^M$, $k_{rec, NO}^M$ — коэффициенты скоростей рекомбинации с

размерностью м⁶/сек. В расчетах учитывались только одноквантовые переходы колебательной энергии.

Для описания коэффициентов скоростей энергообмена использовались формулы теории Шварца, Славского, Герцфельда, приведенные в [5]. Коэффициенты скорости диссоциации определялись с помощью модели Тринора–Маррона [6], обобщенной в [4] для поуровневого приближения. Коэффициенты скоростей обменных реакций рассмотрены ниже.

Модели химической кинетики. Поуровневые модели термически неравновесных химических реакций предложены в ряде работ на основе аппроксимации экспериментальных данных, результатов траекторных расчетов, обобщения модели Тринора–Маррона для обменных реакций и других соображений. Однако вопрос о выборе адекватной модели для решения конкретных газодинамических задач изучен недостаточно. В настоящей работе изучается влияние моделей обменных реакций на параметры потока воздуха за ударной волной. Для определения коэффициентов скоростей обменных химических реакций (1)–(2) в работе рассматриваются три модели, приведенные в [7, 8, 9].

1. α -модель [7] учитывает эффективность вклада колебательной энергии в энергию активации:

$$k_{\text{N}_2(\text{O}_2)_i, \text{NO}}^{\text{O(N),N(O)}}(T) = A(T) \exp \left[-\frac{E_a - \alpha \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}}{kT} \Theta(E_a - \alpha \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}) \right], \quad (14)$$

где α — коэффициент эффективности колебательной энергии, Θ — функция Хэвисайда, E_a — энергия активации реакции. Предэкспоненциальный множитель $A(T)$ имеет значение, близкое к частоте столкновений при единичной концентрации $Z = \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$, R_0 — газокинетический радиус столкновений, μ — приведенная масса сталкивающихся частиц, $\alpha = 0.51$ для реакции (1), $\alpha = 0.24$ для реакции (2).

2. В описанной Полаком и др. модели (см. [8]) предлагается формула, основанная на аппроксимации результатов траекторных расчетов:

$$k_{\text{N}_2(\text{O}_2)_i, \text{NO}}^{\text{O(N),N(O)}}(T) = A \exp \left[-\frac{E_a - \gamma \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}}{\beta kT} \Theta(E_a - \gamma \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}) \right]. \quad (15)$$

Здесь $A \approx \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$, параметры β и γ характеризуют участие поступательной и колебательной энергий в реакции: $\beta = 0.90$, $\gamma = 0.52$ для реакции (1), $\beta = 0.46$, $\gamma = 0.12$ для реакции (2).

3. Варнатцем [9] предложено выражение для коэффициента скорости обменных реакций, основанное на теории химически активных столкновений:

$$k_{\text{N}_2(\text{O}_2)_i, \text{NO}}^{\text{O(N),N(O)}}(T) = C(i+1)T^\beta \exp \left[-\frac{E_a - \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}}{kT} \Theta(E_a - \varepsilon_i^{\text{N}_2(\text{O}_2)}) \right], \quad (16)$$

где

$$C = 4.17 \cdot 10^{12}, \quad \beta = 0 \quad \text{для реакции} \quad \text{N}_2(i) + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{N},$$

$$C = 1.15 \cdot 10^9, \quad \beta = 1.0 \quad \text{для реакции} \quad \text{O}_2(i) + \text{N} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}.$$

Все представленные выше коэффициенты скоростей реакций имеют размерность см³/(моль·сек). Некоторые другие уровневые модели приведены в [10, 11], однако их

применение в данной конкретной задаче затрудняется либо ограниченностью данных о исследуемых реакциях, либо отсутствием универсальности предлагаемых формул в рассматриваемом температурном диапазоне.

Сравнение коэффициентов скоростей реакций, рассчитанных с помощью представленных выше моделей, показано на рис. 1, 2. На рис. 1 показано сравнение температурной зависимости коэффициентов $k_{N_2 i, NO}^{O, N}$ и $k_{O_2 i, NO}^{N, O}$ при фиксированном колебательном уровне реагента. Видно, что соответствующие коэффициенты α -модели и модели [8] имеют близкие значения и совпадают на верхних уровнях. В то же время коэффициенты, рассчитанные по модели Варнатца, отличаются от найденных с учетом [7], [8] до двух порядков величины, однако с ростом номера уровня эта разница уменьшается. Видно, что во всех трех случаях с увеличением уровня i растут и коэффициенты скоростей реакций.

Далее на рис. 2 приведено сравнение осредненных по Больцмановскому распределению коэффициентов скоростей прямых и обратных реакций в зависимости от температуры. Заметим, что в работе [12] показано удовлетворительное согласие коэффициентов прямых реакций (1), (2), найденных на основе осредненной модели Варнатца и по формуле Аррениуса [10]. Отметим также, что в термически равновесном газе обратная реакция (1) с молекулами азота протекает быстрее, чем прямая, а вероятность прямой реакции (2) с молекулами кислорода гораздо выше обратной. Расчеты также показали, что обменные реакции протекают более активно, чем реакции диссоциации и рекомбинации (3)–(5).

Результаты численных расчетов. В ходе численного решения задача об ударной волне разбивалась на два этапа. На первом этапе определялись газодинамические параметры непосредственно за фронтом ударной волны. При этом обмен колебательной энергией и химические реакции внутри фронта считались замороженными с неизменным составом смеси и заселенностями колебательных уровней молекул. На следующем этапе полученные значения использовались в качестве начальных данных при решении системы уравнений (6)–(13), состоящей из $L_{N_2} + L_{O_2} + 3$ уравнений ки-

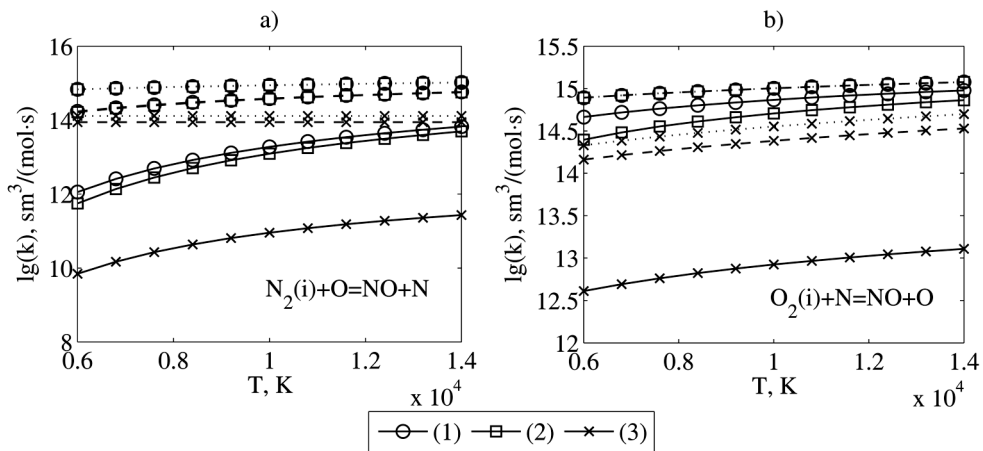


Рис. 1. Коэффициенты скорости прямых обменных реакций в зависимости от температуры. Сплошные линии — $i = 0$, пунктирные — $i = 20$, штриховые — $i = 30$. Маркеры соответствуют трем рассматриваемым моделям. Здесь и далее на графиках: (1) — α -модель, (2) — модель [8], (3) — модель Варнатца.

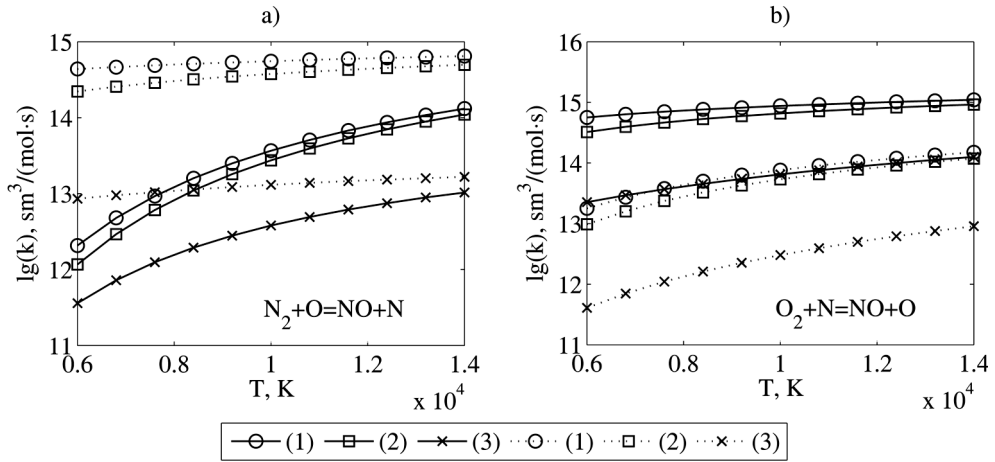


Рис. 2. Осредненные по бoльцмановскому распределению коэффициенты скорости прямых (сплошные линии с маркерами) и обратных (штриховые линии с маркерами) обменных реакций в зависимости от температуры.

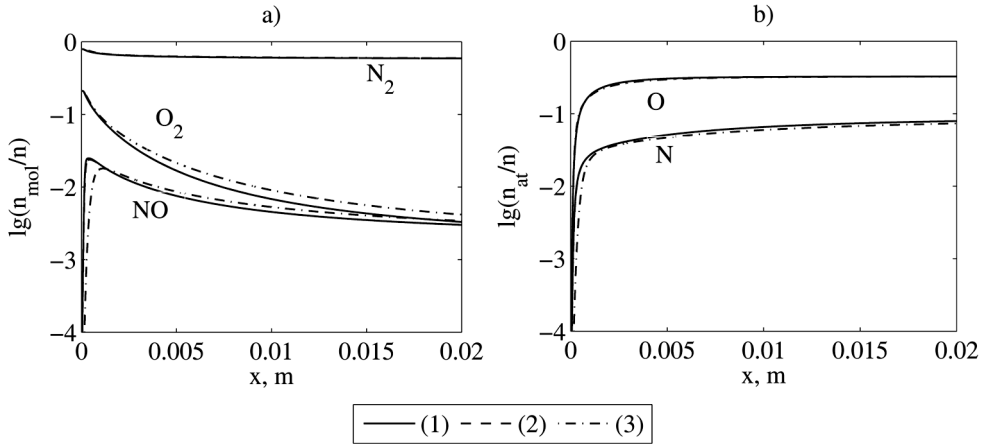


Рис. 3. Относительная числовая плотность компонент смеси в зависимости от расстояния от фронта ударной волны. а) — молекул N_2 , O_2 и NO ; б) — атомов N и O .

нетики и двух уравнений сохранения импульса и полной энергии. Для численного решения использовался неявный метод Гира.

На рис. 3–5 представлены результаты расчетов при следующих условиях в невозмущенном потоке: $T_0 = 293$ К, $p_0 = 100$ Па, $M_0 = 15$. Предполагалось, что в набегающем потоке смесь состоит только из молекул азота $n_{N_2} = 0.79n_0$ и кислорода $n_{O_2} = 0.21n_0$ (n_0 — числовая плотность смеси в набегающем потоке), а распределения считались равновесными с температурой газа T_0 . Спектр колебательной энергии моделировался осциллятором Морзе, при этом $L_{N_2} = 48$ и $L_{O_2} = 37$.

Численное решение получено с использованием трех моделей обменных химических реакций. Сначала остановимся на обсуждении общих особенностей изменения макропараметров и колебательных распределений.

На рис. 3, 4 показано изменение состава газа и его температуры в зависимости от расстояния от фронта ударной волны. При удалении от фронта волны уменьша-

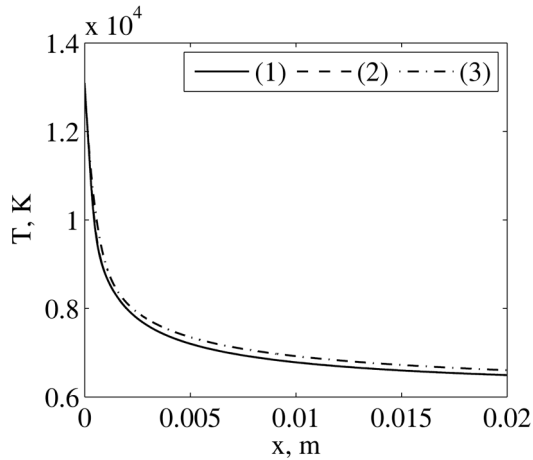


Рис. 4. Температура T в зависимости от расстояния x .

ется температура газа и числовые плотности молекул азота и кислорода, и, соответственно, увеличиваются числовые плотности атомов. Можно отметить немонотонное изменение числовой плотности молекул окиси азота. Этот факт объясняется тем, что на ранней стадии релаксации быстрая диссоциация молекул кислорода (4) и более медленная диссоциация азота (3) приводят к появлению свободных атомов и увеличению молекул NO за счет прямых реакций (1)–(2). Дальнейшее накопление атомов азота вызывает активную обратную реакцию (1), приводящую к уменьшению числовой плотности окиси азота. Немонотонный характер изменения числовой плотности молекул NO за фронтом ударной волны отмечался и при рассмотрении химической релаксации в термически равновесном газе (см., например, [13]). Сравнение макропараметров и колебательных распределений в пятикомпонентной воздушной смеси за фронтом ударной волны, найденных в поуровневом и однотемпературном (термически равновесном) приближениях, показано в [14].

На рис. 5 представлено изменение заселенностей фиксированных колебательных уровней молекул N_2 и O_2 в зависимости от расстояния от фронта ударной волны. Наблюдается немонотонность изменения заселенностей колебательных уровней $n_{N_2,i}$ и $n_{O_2,i}$ при возрастании x : уменьшение и последующее возрастание заселенности 0-го уровня молекул азота (заселенность нулевого уровня молекул кислорода постоянно уменьшается) и, наоборот, увеличение, а затем уменьшение заселенностей уровней $i > 0$ молекул N_2 и O_2 . Это объясняется переходом поступательной энергии ударно нагретого газа в колебательную, что приводит к резкому возбуждению колебательных уровней молекул N_2 и O_2 . Затем при уменьшении температуры газа происходит уменьшение числовой плотности возбужденных молекул вследствие дезактивации и химических реакций.

На рис. 6 показаны относительные заселенности колебательных уровней молекул азота и кислорода при различных значениях x . Отметим разный характер распределений $n_{N_2,i}$ и $n_{O_2,i}$. Связано это с более высокой скоростью колебательного энергообмена молекул O_2 , в результате чего стадия возбуждения молекул кислорода за фронтом волны протекает в более узкой зоне, нежели молекул азота.

Теперь рассмотрим влияние моделей обменных реакций на макропараметры и колебательные распределения. Результаты расчетов показывают, что α -модель и модель

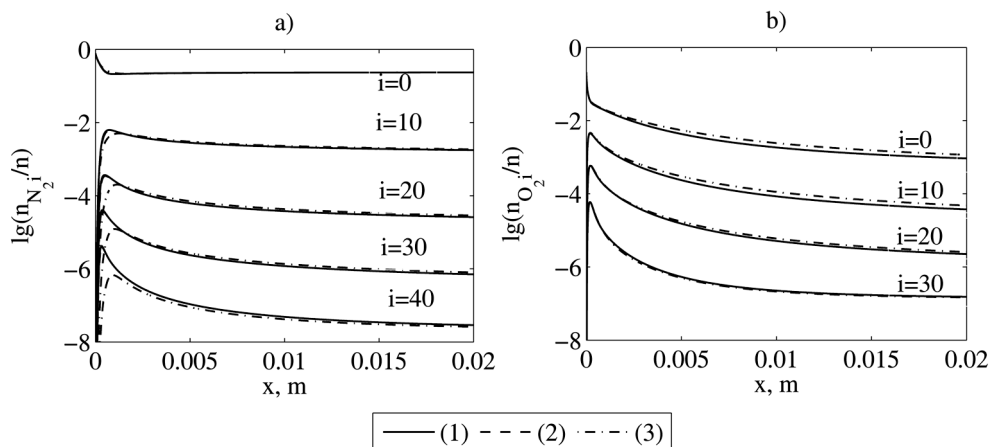


Рис. 5. Относительные заселенности отдельных уровней молекул в зависимости от расстояния x : а — N_2 ; б — O_2 . Сплошные линии — модель (1), штриховые — модель (2), штрих-пунктирные — модель (3).

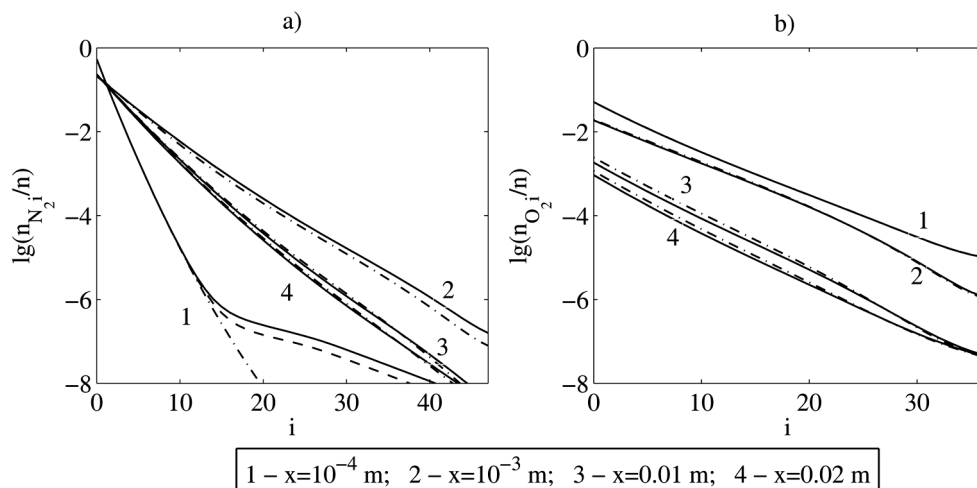


Рис. 6. Относительные заселенности молекул в зависимости от уровня i для различных значений x : а — N_2 ; б — O_2 . Сплошные линии — модель (1), штриховые — модель (2), штрих-пунктирные — модель (3).

[8] дают очень близкие значения макропараметров течения (рис. 3, 4) и заселенностей колебательных уровней молекул (рис. 5, 6). Связано это с тем, что коэффициенты скоростей реакций со средних и высших уровней практически не отличаются (верхние кривые на рис. 1, а, б), а невозбужденные молекулы гораздо менее активно участвуют в реакциях (1)–(2).

Существенно меньшую величину имеют скорости прямых и обратных обменных реакций, рассчитанные при помощи модели Варнатца. Это приводит к тому, что в узкой зоне за фронтом ударной волны медленнее возрастают числовая плотность окиси азота (недооценка до 70% по сравнению с двумя другими моделями) и заселенности возбужденных уровней молекул азота (недооценка до трех порядков величины). Также существенно различаются заселенности колебательных уровней и числовые

плотности молекул кислорода (25% и 22% соответственно). Наименьшие различия — в распределении температур (1.5%), числовых плотностей молекул и атомов азота (1% и 8% соответственно) и атомов кислорода (3%).

Заключение. В работе численно исследована поуровневая колебательная и химическая кинетика в потоке воздуха за сильной ударной волной. Проанализировано влияние химических реакций и обменов колебательной энергии на изменение макропараметров потока и колебательных распределений.

В расчетах использованы три модели поуровневых коэффициентов скоростей обменных реакций. Показано, что в рассматриваемом интервале температур модели, предложенные в [7], [8], дают близкие значения макропараметров потока и заселенностей колебательных уровней молекул азота и кислорода за ударной волной. Использование модели [9] приводит к заметным отличиям макропараметров и колебательных распределений.

Наиболее заметно выбор модели обменных реакций оказывает влияние на изменение колебательных распределений и числовых плотностей молекул O_2 и NO , влияние на температуру газа и числовые плотности атомов и молекул N_2 оказывается более слабым.

Литература

1. *Capitelli M., Colonna G., Kustova E., Nagnibeda E.* State-to-state kinetics and transport properties in supersonic air nozzle flows // Proceedings of the 4th European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles. ESTEC, Noordwijk, The Netherlands, ESA Publication Division, ESA SP-487. P. 137–143.
2. *Bazilevich S. S., Sinitsyn K. A., Nagnibeda E. A.* Non-Equilibrium Flows of Reacting Air Components in Nozzles // AIP Conference Proceedings, 2009. Vol. 1084, N1. P. 843–848.
3. *Capitelli M., Armenise I., Gorse C.* State-to-state approach in the kinetics of air components under re-entry conditions // J. Thermophys. Heat Transfer. 1997. Vol. 11. N4. P. 570–578.
4. *Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В.* Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2003. 270 с.
5. *Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И.* Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
6. *Marrone P., Treanor C.* Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N9. P. 1215–1221.
7. *Русанов В. Д., Фридман А. А.* Физика химически активной плазмы. М.: Наука, 1984. 415 с.
8. *Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левичкий А. А.* Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984.
9. *Warnatz J., Riedel U., Schmidt R.* // Advanced in Hypersonic. Vol. 2: Modeling Hypersonic Flows. Birkhauser, Boston, 1992. P. 67–103.
10. Физико-химические процессы в газовой динамике / под ред. Г. Г. Черного и С. А. Лосева. М.: Науч. мир, 2007. Т. 1. 399 с.
11. *Ковач Э. А., Лосев С. А., Сергиевская А. Л., Храпак Н. А.* Каталог моделей физико-химических процессов. 4. Химические реакции в уровневом представлении // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. № 2. С. 413–443.
12. *Кунова О. В., Нагнибеда Е. А.* Поуровневое описание колебательной и химической релаксации в воздухе // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1: математика, механика, астрономия. 2013. № 3. С. 103–112.
13. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике / под. ред. Г. И. Майкапара. М.: Машиностроение, 1972. 344 с.
14. *Кунова О. В., Нагнибеда Е. А., Шарафутдинов И. З.* Неравновесная колебательная и химическая кинетика в потоках воздуха за сильными ударными волнами // Всероссийская конференция с участием иностранных ученых «Современные проблемы динамики разреженных газов». Новосибирск, 2013. С. 127–129.

Статья поступила в редакцию 24 октября 2013 г.

Сведения об авторах

Кунова Ольга Владимировна — аспирант; kunova.olga@gmail.com

Нагнибеда Екатерина Алексеевна — доктор физико-математических наук, профессор;
e_nagnibeda@mail.ru

THE INFLUENCE OF EXCHANGE CHEMICAL REACTIONS MODELS ON THE PARAMETERS OF AIR FLOWS BEHIND STRONG SHOCK WAVES

Olga V. Kunova, Ekaterina A. Nagnibeda

St.Petersburg State University, Universitetskaya nab., 7/9, St.Petersburg, 199034, Russian Federation;
kunova.olga@gmail.com, e_nagnibeda@mail.ru

In the paper non-equilibrium flows of the 5-component air mixture $N_2/O_2/NO/N/O$ behind strong shock waves are numerically studied using the most accurate state-to-state approach. This approach describes strongly non-equilibrium vibrational and chemical kinetics in a flow under the assumption of equilibrium distributions over translation and rotation degrees of freedom. The characteristic times of vibrational and chemical relaxation are supposed to be of the same order as macroscopic parameters changing. The equations for vibrational level populations of molecular species and atomic number densities are coupled to the conservation equations for impulse and total energy and solved numerically for a 1-D quasi-stationary flow. Various vibrational energy transitions as well as dissociation, recombination and exchange reactions are taken into account. Four different models for state-depending rate coefficients of exchange reactions for NO formation are used in numerical calculations and the comparison of the results obtained using various models is presented. The influence of a choice of a model for exchange reactions on level populations, mixture composition and gas temperature in the shock heated air mixture flow behind a shock wave is studied. Refs 14. Figs 6.

Keywords: non-equilibrium kinetics in the air, vibrational distributions, chemical composition, dissociation, recombination, exchange reactions.