

Анализ поуровневой модели для описания колебательной релаксации в газе O₂ за фронтом ударной волны

О.Ю. Оболонская^{1,2}, А.С. Дикалюк^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Процесс релаксации энергии, запасенной в колебательных степенях свободы молекул (колебательная релаксация), относится к числу наиболее изученных неравновесных явлений, протекающих за фронтом сильных ударных волн [1]. Для теоретического описания этого процесса в настоящее время можно выделить два подхода: модовый и поуровневый.

Основу модового подхода, развитого во второй половине XX века, составляло предположение о том, что заселенность колебательных степеней свободы молекул за фронтом ударной волны в каждый момент времени подчиняется распределению Больцмана с некоторой температурой, отличной от температуры поступательного движения частиц в газовой смеси [1]. Эту температуру называют колебательной. В случае сложных газовых смесей для расчета температур рассматриваемых колебательных мод формулируется уравнение, учитывающее различные процессы, например, обмен энергией между поступательными и колебательными степенями свободы (VT-релаксация), между колебательными степенями свободы различных мод (VV-релаксация), сток колебательной энергии за счет процессов диссоциации, приток колебательной энергии за счет процессов рекомбинации [2-4]. При включении указанных выше процессов в вычислительную модель необходимы соответствующие параметры, которые в большинстве случаев являются эмпирическими.

Альтернативу модовым моделям составляют поуровневые модели [5, 6]. В них рассматривается эволюция функции распределения молекул по колебательным уровням. Для этого кинетическим образом учитываются переходы между рассматриваемыми колебательными уровнями. Считается, что детальное описание поведения заселенности каждого рассмотренного колебательного уровня позволит также лучше описывать эволюцию макроскопических параметров системы. Также отличительной особенностью этих моделей можно считать отсутствие подгоночных коэффициентов после того, как рассчитаны параметры процессов, учтенных в модели. Недостатком этих моделей является необходимость определения констант скоростей большого количества процессов, описывающих переходы между рассматриваемыми уровнями с помощью различных моделей (SSH-модель, FHO-модель, QCT-модель).

В данной работе поуровневая модель процесса колебательной релаксации в газе молекулы O₂, основанная на данных [7, 8], будет проанализирована, а также численно исследована на примере задачи расчета структуры релаксационной зоны за фронтом ударной волны при различных параметрах.

Литература

1. Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И. Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965, 484 с.
2. Лосев С.А., Макаров В.Н., Погосбекян М.Ю. Модель физико-химической кинетики за фронтом очень сильной ударной волны в воздухе // Изв. РАН МЖГ. № 2. 1995. С. 169–182.
3. Millikan R.C. White D.R. Systematic of Vibrational Relaxation // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. N. 12. Pp. 3209–3212.
4. Treanor C.E., Marrone P.V. Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Relaxation // Phys. Fluids. 1962. V. 5. N. 9. Pp. 1022–1026.
5. Munafò A., Panesi M., Jaffe R.L., Colonna G., Bourdon A., Magin T.E. QCT-based vibrational collisional models applied to nonequilibrium nozzle flows // Eur. Phys. J. D. V. 66, 2012.

6. *M. Capitelli, I. Armenise, and C. Gorse* State-to-State Approach in the Kinetics of Air Components Under Re-Entry Conditions // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. Vol. 11, No. 4, 1997.
7. *F. Esposito, I. Armenise, G. Capitta, M. Capitelli* O–O₂ state-to-state vibrational relaxation and dissociation rates based on quasiclassical calculations // *Chemical Physics*. № 351. 2008. Pp. 91–98.
8. *Lino da Silva M., Loureiro J., Guerra V.* A multiquantum dataset for vibrational excitation and dissociation in high-temperature O₂–O₂ collisions // *Chemical Physics Letters*. № 531. 2012. Pp. 28–33.