Теплофизика и аэромеханика, 2016, том 23, № 2

УДК 533.2

Разработка и апробация методики численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в ANSYS Fluent*

Г.В. Шоев[1,2,3], Е.А. Бондарь[1,2], Г.П. Облапенко[3], Е.В. Кустова[3]

[1]*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

[2]*Новосибирский государственный университет*

[3]*Санкт-Петербургский государственный университет*

E-mail: shoev@itam.nsc.ru

Обсуждаются вопросы численного моделирования сверхзвуковых течений газа с учетом термохимической неравновесности на основе уравнений движения механики сплошных сред в двухтемпературном приближении. В качестве вычислительного инструмента для расчета течений с термохимической неравновесностью использовался коммерческий пакет программ ANSYS Fluent с дополнительным пользовательским модулем с открытым кодом. Проводится сравнительный анализ численных результатов, полученных с использованием различных моделей колебательно-диссоциативного взаимодействия в бинарных газовых смесях азота и кислорода. Результаты численного моделирования сравниваются с доступными экспериментальными данными.

Ключевые слова: численное моделирование, термическая неравновесность, диссоциация, колебательная релаксация, ударные волны, эффекты реального газа.

Введение

При разработке перспективных космических аппаратов необходимо проводить детальные исследования их аэротермодинамических характеристик вдоль траектории спуска. Одной из главных отличительных особенностей высокоскоростного течения около возвращаемого аппарата является сильная термохимическая неравновесность, возникающая в области за сильной головной ударной волной. В частности, размер зоны колебательной релаксации может быть сопоставим с характерным размером течения. Термическая неравновесность не только ведет к существенной перестройке течения [1–6], но и оказывает существенное влияние на скорость диссоциации молекул. В результате колебательно-диссоциативного взаимодействия и других сопутствующих эффектов реального газа может происходить значительное изменение поверхностных характеристик, в частности теплового потока.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 15-38-50617, № 14-07-00065) и НИР СПбГУ 6.37.163.2014. Расчеты проводились на кластерах Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН (ССКЦ СО РАН) и Новосибирского государственного университета.

© Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Облапенко Г.П., Кустова Е.В., 2016

Хорошо известно, что в условиях, когда поступательная и колебательная температуры отличаются, классическая однотемпературная формула Аррениуса для описания диссоциации неприменима. Для более корректного предсказания скорости диссоциации молекул в таких неравновесных течениях существует большое количество физико-химических моделей [3, 4, 7–9], учитывающих колебательную температуру. Выбор модели диссоциации существенно влияет на предсказание структуры течения и теплового потока на поверхности обтекаемого тела, поэтому валидация различных моделей диссоциации сравнением с экспериментальными данными по высокоэнтальпийным течениям является актуальной задачей.

Для моделирования высокоэнтальпийных течений около космических аппаратов на умеренных высотах полета (ниже 80 км), как правило, используются уравнения Навье–Стокса. При этом часто применяется двухтемпературное приближение, т.е. считается, что поступательная и вращательная моды находятся в равновесии, а неравновесные колебательные моды имеют отличную температуру [1, 3, 5]. Главным преимуществом двухтемпературного приближения является его вычислительная эффективность по сравнению с другими моделями, такими как поуровневое приближение, в котором учитываются переходы между различными колебательными уровнями [5]. При этом в большинстве расчетных программ, основанных на уравнениях Навье–Стокса, в двухтемпературном приближении используются достаточно простые и численно эффективные модели, такие как модель Ландау–Теллера для описания энергетического обмена между поступательной и колебательной модами. Настоящая работа посвящена численному исследованию высокоэнтальпийных неравновесных течений в двухтемпературном приближении; при этом в расчетах на основе уравнений Навье–Стокса впервые использована модификация модели Ландау–Теллера, полученная строгими методами кинетической теории газов [10]. Эта модель используется в сочетании с различными моделями для описания диссоциации в двухтемпературном приближении. Проводится анализ применимости модели путем сравнения численных результатов друг с другом и доступными экспериментальными данными.

В настоящее время в мире известен ряд программ для численного моделирования течений с термохимической неравновесностью, основанных на уравнениях Навье–Стокса (см., например, [11–16]). Во многих случаях эти программы недоступны широкому кругу пользователей, и их использование за пределами авторского коллектива является затруднительным. Коммерческие пакеты программ становятся доступной альтернативой авторским программам. Современные коммерческие пакеты позволяют конечному пользователю достаточно легко добавлять различные физико-математические модели, существенно расширяющие начальные возможности коммерческого пакета программ ANSYS Fluent, в частности, для моделирования термохимической неравновесности в высокоскоростных газовых течениях. Необходимо отметить, что благодаря большому числу встроенных функций время, затрачиваемое на разработку таких подпрограмм, существенно меньше, чем время, необходимое на разработку авторской программы с аналогичными возможностями. Выбранный пакет программ отличается универсальностью и подходит для моделирования несжимаемых [17] и сжимаемых [18] течений. Однако для решения специфических задач аэромеханики таких, например, как моделирование ламинарно-турбулентного перехода [19], предпочтительнее использовать исследовательские программы, основанные на схемах высокого порядка точности с низкой диссипацией. В настоящей работе в качестве численного инструмента используется пакет программ ANSYS Fluent как простая и гибкая среда, позволяющая достаточно быстро и удобно реализовывать модели различных физико-химических процессов в рамках решателя, основанного на уравнениях Навье–Стокса.

Основные уравнения и численные методы

Уравнения движения и состояния. Строгие самосогласованные уравнения для описания неравновесных течений с колебательной релаксацией и химическими реакциями могут быть получены из уравнения Больцмана методами кинетической теории [2, 5]. Для построения многотемпературного описания используется предположение о том, что времена поступательной и вращательной релаксации, а также характерное время обмена колебательными квантами (VV-релаксации) много меньше характерных времен VT-обмена между поступательными и колебательными степенями свободы и химических реакций. VT-релаксация и химические реакции протекают в газодинамическом масштабе времени и, следовательно, существенно влияют на гидродинамические переменные.

Рассмотрим движение бинарной газовой смеси, состоящей из двухатомных молекул — гармонических осцилляторов и атомов. В смеси происходит неравновесная колебательная релаксация и реакции диссоциации-рекомбинации. При таких условиях набор макроскопических переменных, обеспечивающих замкнутое описание системы, содержит [5]: плотность ρ, массовые доли атомов Y_0 и молекул Y_1, скорость v, удельную поступательно-вращательную (E_{t-r}) и удельную колебательную ($e_{v,1}$) энергии молекул. Система уравнений для этих переменных имеет вид (1)–(5) и замыкается уравнением состояния совершенного газа (6):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho Y_0}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_0 \vec{v}) = -\nabla \cdot \vec{J}_0 + R_0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v}\vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\overline{\overline{\tau}}), \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E_{t-r}) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E_{t-r} + p)) = \nabla \cdot \left(\lambda_{t-r} \nabla T + (\overline{\overline{\tau}} \cdot \vec{v}) - \sum_i h_i \vec{J}_i \right) - \sum_i \frac{h_i^0}{M_{w,i}} R_i - \dot{e}_{v,1}, \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_1 e_{v,1}) + \nabla \cdot (Y_1 \rho \vec{v} e_{v,1} - \mu_1 \nabla e_{v,1}) = -\nabla \cdot (e_{v,1} \vec{J}) + \dot{e}_{v,1}, \tag{5}$$

$$p = \rho T R \sum_i \left(Y_i / M_{w,i} \right). \tag{6}$$

Уравнение неразрывности смеси (1) записывается в классическом виде. Уравнение неразрывности (2) одного из компонентов смеси (для определенности рассматривается одноатомный компонент) в правой части содержит член ($-\nabla \cdot \vec{J}_0$), соответствующий диффузионному потоку, и источниковый член (R_0), описывающий образование/исчезновение этого компонента за счет химических реакций. Плотность диффузионного потока вычисляется согласно закону Фика: $\vec{J}_0 = -\rho D_0 \nabla Y_0$, где D_0 — эффективный коэффициент диффузии, Y_0 — массовая доля одноатомного компонента. Отметим, что массовая доля Y_1 другого компонента смеси вычисляется с учетом того, что сумма всех массовых долей равна 1, т.е. $Y_1 = 1 - Y_0$.

Уравнение сохранения импульса (3) записывается в классическом виде с тензором вязких напряжений: $\overline{\overline{\tau}} = \mu \left[\left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^{\mathrm{T}} \right) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right]$, где μ — коэффициент динамической вязкости газовой смеси. Отметим, что в рассматриваемой модели не учитываются объемная вязкость и релаксационное давление.

Предполагается, что поступательная и вращательная моды находятся в равновесии, поэтому вместо уравнения сохранения полной энергии фактически записываются два релаксационных уравнения: для поступательно-вращательной и колебательной энергии. В уравнении (4) энергия, соответствующая поступательно-вращательному движению частиц, записывается в следующем виде: $E_{t-r} = \sum_i Y_i h_i - p/\rho + v^2/2$, где $h_i = \int_{T_{\text{ref}}}^{T} C_{p,i} dT$, $C_{p,i}$ — удельная теплоемкость при постоянном давлении, связанная с поступательными и вращательными степенями свободы i-го компонента смеси. В дополнение к классическим членам $\nabla \cdot \left(\lambda_{t-r} \nabla T + (\bar{\bar{\tau}} \cdot \vec{v}) - \sum_i h_i \vec{J}_i \right)$ и $-\sum_i \left(h_i^0 / M_{w,i} \right) R_i$, описывающим изменение энергии газа за счет теплопроводности, работы сил трения, диффузии и протекания химических реакций, уравнение сохранения поступательной энергии (4) содержит дополнительный источниковый член $-\dot{e}_{v,1}$, описывающий колебательно-диссоциативное взаимодействие. Уравнение релаксации колебательной энергии (5) также содержит этот источниковый член, но с обратным знаком.

Коэффициенты переноса. Для вычисления коэффициентов динамической вязкости и теплопроводности газовой смеси используется зависимость Уилки [20]: $\xi = \sum_i \frac{x_i \xi_i}{\sum_j x_j \phi_{ij}}$, где $\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\xi_i / \xi_j \right)^{0,5} \left(M_{w,j} / M_{w,i} \right)^{0,25} \right]^2}{\left[8 \left(1 + M_{w,i} / M_{w,j} \right) \right]^{0,5}}$, x_i — мольная доля i-го компонента, ξ_i — коэффициент динамической вязкости или коэффициент теплопроводности i-го компонента, $M_{w,i}$ — молекулярный вес i-го компонента газовой смеси.

Коэффициент динамической вязкости отдельных компонентов смеси вычисляется на основе модели Гиршфельдера [21]: $\mu_i = 2,67 \cdot 10^{-6} \cdot \sqrt{M_{w,i} T} \Big/ \left(\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*} \right)$, где $\Omega_i^{(2,2)*} = 1,157 T_i^{-0,1472}$, $T_i = kT/\varepsilon_i$. Параметры потенциала Леннарда–Джонса σ_i и ε_i, используемые в настоящей работе, представлены в табл. 1 [5].

Коэффициент теплопроводности отдельных компонентов вычислялся по формуле, учитывающей поправку Эйкена [21]: $\lambda_i = \frac{15}{4} \cdot \frac{R}{M_{w,i}} \mu_i \left[\frac{4}{15} \cdot \frac{C_{p,i} M_{w,i}}{R} + \frac{1}{3} \right]$.

Эффективный коэффициент диффузии D_i рассчитывается по формуле $D_i = (1 - x_i) \Big/ \sum_{j \neq i} (x_i / D_{ij})$, а бинарные коэффициенты диффузии D_{ij} вычисляются по формуле [21]

$$D_{i,j} = 0,00188 \left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,i}} + \frac{1}{M_{w,j}} \right) \right]^{0,5} \Big/ \left(P \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*} \right),$$ где $\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j)$, $T_{ij} = kT/\varepsilon_{ij}$,

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad \Omega_{ij}^{(1,1)*} = 1,074 T_{ij}^{-0,1604}.$$

Таблица 1

Параметры Леннарда–Джонса

Компоненты смеси	σ_i, Å	ε_i/k, K
N_2	3,621	97,5
N	3,298	71,4
O_2	3,458	107,4
O	2,75	80,0

Модель колебательно-диссоциативного взаимодействия описывается источниковым членом $\dot{e}_{v,1}$, который присутствует в правых частях уравнений (4) и (5) с разными знаками и может быть

записан в следующей форме: $\dot{e}_{v,1} = \dot{e}_{v,1}^{\mathrm{VT}} + \dot{e}_{v,1}^{\mathrm{react}}$, где первое слагаемое описывает релаксацию между поступательными и колебательными модами, а второе слагаемое описывает связь между колебательной релаксацией и химическими реакциями.

Зависимость колебательной энергии $e_{v,1}$ двухатомного компонента газовой смеси от колебательной температуры записывается в приближении гармонического осциллятора:

$$e_{v,1} = \left(\theta_v R / M_{w,1}\right) \Big/ \left(\exp(\theta_v / T_v) - 1\right), \tag{7}$$

где θ_v — характеристическая колебательная температура двухатомного компонента смеси ($\theta_v = 3371$ K для N_2 и $\theta_v = 2275$ K для O_2).

В настоящей работе VT-релаксация описывается с помощью двух моделей: широко известной формулы Ландау–Теллера [22]:

$$\dot{e}_{v,1}^{\mathrm{VT}} = \rho Y_1 (e_{v,1}(T) - e_{v,1}(T_v)) \sum_i \left(x_i / \tau_{i,1}\right), \tag{8}$$

и ее модификации, полученной методами кинетической теории для сильных отклонений от равновесия [10]:

$$\dot{e}_{v,1}^{\mathrm{VT}} = \frac{T}{T_v} \rho Y_1 (T - T_v) c_{\mathrm{vibr},1} \sum_i \frac{x_i}{\tau_{i,1}}, \text{ где } c_{\mathrm{vibr},1} = \frac{\partial e_{v,1}}{\partial T_v} = \frac{R}{M_{w,1}} \cdot \frac{\theta_v^2}{T_v^2} \cdot \frac{\exp(\theta_v / T_v)}{(\exp(\theta_v / T_v) - 1)^2}. \tag{9}$$

Данная формула получена путем разложения в ряд (с последующим сохранением линейных членов) выражения для $\dot{e}_{v,1}^{\mathrm{VT}}$, получаемого в рамках кинетической теории. В предположении постоянства теплоемкостей и малости разности поступательной и колебательной температур ($T / T_v \approx 1$) из формулы (9), как частный случай, получается формула Ландау–Теллера (8). В работе [10] было показано, что модифицированный вариант формулы Ландау–Теллера намного точнее описывает скорость колебательной релаксации вдали от точки колебательного равновесия ($T = T_v$), в то время как оригинальная формула Ландау–Теллера существенно недооценивает скорость колебательной релаксации при $T >> T_v$, либо переоценивает ее при $T << T_v$.

Время релаксации $\tau_{i,1}$ вычисляется по формуле Милликена–Уайта [23]:

$$\tau_{i,1} = (1/p) \exp(A T^{-1/3} + B),$$

где
$$A = 1{,}16 \cdot 10^{-3} (m_R)^{1/2} \theta_v^{4/3}, \; B = -(1{,}74 \cdot 10^{-5} (m_R)^{3/4} \theta_v^{4/3} + 18{,}42),$$

$$m_R = M_{w,i} M_{w,1} \big/ (M_{w,i} + M_{w,1}). \tag{10}$$

Связь между колебательной релаксацией и химическими реакциями приближенно представляется в виде $\dot{e}_{v,1}^{\mathrm{react}} = e_{v,1} R_1$, где R_1 — скорость образования/гибели двухатомной компоненты за счет химических реакций. Более строгие модели связи диссоциации и колебательной релаксации рассмотрены в работах [4, 5, 7].

Химические реакции. В настоящей работе рассматривается четыре реакции: две реакции диссоциации и две — рекомбинации, которые можно записать в следующем виде:

$$A_2 + M \underset{k_{b,\gamma}}{\overset{k_{f,\gamma}}{\longleftrightarrow}} 2A + M, \tag{11}$$

где A_2 соответствует двухатомному компоненту (N_2 или O_2), A соответствует атомарному компоненту (N или O), а M соответствует атомарному или молекулярному компоненту, k_f и k_b — константы скоростей прямых и обратных реакций соответственно.

Скорость превращения отдельного компонента смеси в уравнениях (2) и (4) записывается в виде:

$$R_i = M_{w,i} \sum_{\gamma=1}^{2} (\upsilon''_{i,\gamma} - \upsilon'_{i,\gamma}) \left(k_{f,\gamma} C_{A_2} C_M - k_{b,\gamma} C_A C_A C_M \right), \tag{12}$$

где C_{A_2}, C_A, C_M — молярные концентрации отдельных компонентов смеси, вступающих в реакцию, $\upsilon''_{i,\gamma}, \upsilon'_{i,\gamma}$ — стехиометрические коэффициенты продуктов и реагентов из (11), а суммирование выполняется по всем реакциям.

В настоящей работе использовались три модели диссоциации: однотемпературная модель Аррениуса и двухтемпературные модели Парка [3] и Кузнецова [8]:

$$k^0_{f,\gamma}(T) = AT^B \mathrm{e}^{-E_d/RT}, \tag{13}$$

$$k_{f,\gamma}(T, T_v) = A\left(\sqrt{TT_v}\right)^B \mathrm{e}^{-E_d/R\sqrt{TT_v}}, \tag{14}$$

$$k_{f,\gamma}(T, T_v) = \frac{1 - \mathrm{e}^{-\theta_v/T_v}}{1 - \mathrm{e}^{-\theta_v/T}} \cdot \exp(E^*_v(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_v})) \cdot AT^B \mathrm{e}^{-E_d/RT}, \text{ где } E^*_v = 0,7\frac{E_d}{R}, \tag{15}$$

здесь E_d — энергия активации, т.е. порог, ниже которого реагенты не должны вступать в реакцию. Энергия, выделяемая в результате реакций, учитывается в слагаемом $-\sum_i \left(h^0_i / M_{w,i} \right) R_i$ в уравнении (4), где в качестве энтальпии образования h^0_i использовались значения из базы данных ANSYS Fluent ($h^0_1 = 0$ Дж/кмоль для N_2 и O_2, $h^0_0 =$ $= 4{,}728949 \cdot 10^8$ Дж/кмоль для N, $h^0_0 = 2{,}491815 \cdot 10^8$ Дж/кмоль для O).

Константа скорости обратных реакций (рекомбинации) вычислялась с помощью константы равновесия K_e:

$$k_{b,\gamma}(T) = k^0_{f,\gamma} / K_e, \text{ где } K_e = A_{K_e} T^{B_{K_e}} \mathrm{e}^{-E_d/RT}. \tag{16}$$

В табл. 2 представлены параметры, используемые при моделировании химических реакций.

Таблица 2

Параметры химических реакций [24, 25]

Реакции	A, м^3/(кмоль·с)	B	E_d, Дж/кмоль	A_{Ke}, кмоль/м^3	B_{Ke}
$N_2 + N_2 \underset{k_{b,\gamma}}{\overset{k_{f,\gamma}}{\longleftrightarrow}} 2N + N_2$	$4{,}797 \cdot 10^{14}$	–0,5	$9{,}4 \cdot 10^8$	$6{,}527 \cdot 10^5$	0,0
$N_2 + N \underset{k_{b,\gamma}}{\overset{k_{f,\gamma}}{\longleftrightarrow}} 2N + N$	$4{,}154 \cdot 10^{19}$	–1,5	$9{,}4 \cdot 10^8$	$6{,}527 \cdot 10^5$	0,0
$O_2 + O_2 \underset{k_{b,\gamma}}{\overset{k_{f,\gamma}}{\longleftrightarrow}} 2O + O_2$	$3{,}8 \cdot 10^{24}$	–3,1	$4{,}9368 \cdot 10^8$	$4{,}353 \cdot 10^6$	–0,5
$O_2 + O \underset{k_{b,\gamma}}{\overset{k_{f,\gamma}}{\longleftrightarrow}} 2O + O$	$2{,}7 \cdot 10^{15}$	–0,53	$4{,}9368 \cdot 10^8$	$4{,}353 \cdot 10^6$	–0,5

Реализация и численные методы. В настоящей работе рассматривается метод численного решения уравнений (1)–(5) с использованием коммерческого пакета ANSYS Fluent. Уравнения сохранения массы (1), (2), импульса (3) и поступательно-вращательной энергии (4) решаются основным решателем, а уравнение релаксации колебательной энергии (5) многоатомных компонентов газовой смеси добавляется с использованием опции уравнения переноса скалярной величины (user-defined scalar transport equation). Уравнение релаксации колебательной энергии решается относительно $e_{v,1}$, а затем для определения колебательной температуры решается уравнение (7) относительно T_v. Отметим, что число уравнений релаксации колебательной энергии в общем случае может варьироваться в зависимости от числа компонентов газовой смеси с колебательными степенями свободы.

Источниковые члены $-\dot{e}_{v,1}$ в уравнении (4) и $\dot{e}_{v,1}$ в уравнении (5) вычисляются с помощью UDF-функций (User Defined Functions, см. ANSYS Fluent UDF Manual), а именно с использованием стандартного макроса DEFINE_SOURCE. Скорость протекания химических реакций также вычисляется разработанной программой с использованием макроса DEFINE_VR_RATE. После добавления уравнения релаксации колебательной энергии (5) к основной системе уравнений требуется определить начальные и граничные условия для переменной $e_{v,1}$, которые реализованы в макросах DEFINE_PROFILE. Однако, как правило, начальные и граничные условия определяются для колебательной температуры T_v. Поэтому для корректной постановки задачи в начальный момент времени во всей расчетной области и на границах задавалась колебательная энергия $e_{v,1}$, вычисленная по формуле (7) при фиксированной колебательной температуре T_v. Эти граничные условия также вычислялись в UDF-функциях.

В настоящей работе задачи решаются методом установления с использованием решателя, основанного на плотности (специально разработанного для сверх- и гиперзвуковых течений), с неявной схемой первого порядка с разностями против потока. Разработанная программа полностью совместима с коммерческим пакетом программ ANSYS Fluent для двумерных, осесимметричных и трехмерных задач, и ее можно использовать в однопроцессорных или параллельных расчетах для изучения высокоскоростных неравновесных течений с колебательной релаксацией и диссоциацией. В следующих двух параграфах представлены результаты расчетов с использованием вышеописанной методики.

Обтекание клина сверхзвуковым потоком бинарной смеси азота (N_2-N)

Начальные и граничные условия. Рассматривается задача о двухмерном обтекании клина стационарным сверхзвуковым (M_∞ = 7,7) потоком бинарной смеси азота (N_2-N) с массовыми долями двухатомной и одноатомной компонентов, равными Y_{N_2} = 0,8925 и Y_N = 0,1075. Набегающий поток считался термически равновесным при температуре $T_\infty = T_{v\infty}$ = 1100 K и давлении p_∞ = 940,3 Па. Длина наклонной части клина w = 5,1 см. В рассматриваемых условиях числа Рейнольдса и Кнудсена, вычисленные по параметрам в набегающем потоке и длине клина w (рис. 1), равны Re_w = 14485 и $Kn_w = 6{,}52\cdot10^{-4}$. Небольшое значение числа Кнудсена и достаточно большое значение числа Рейнольдса позволяют говорить о справедливости применения уравнений механики сплошных сред для моделирования данного течения. Расчеты проводились для различных углов раствора клина δ_w в диапазоне от 47° до 68°. Представленные случаи соответствуют случаям, рассмотренным в работе [26]. Описанные выше условия ставились на входной (левой) границе, а на выходной (правой) границе задавался снос всех переменных из расчетной области. Задача решалась в симметричной постановке, поэтому на нижней границе ставилось условие

Рис. 1. Расчетная область около клина.
$M_\infty = 7{,}7$, $P_\infty = 940{,}3$ Па, $T_\infty = 1100$ K, $Y_{N_2} = 0{,}8925$,
температура на стенке $T_w = 300$ K.

симметрии. На самом клине ставились условия прилипания, и стенка считалась изотермической при температуре $T_w = 300$ K. В качестве начальных условий использовался равномерный поток с параметрами, соответствующими параметрам набегающего потока, а затем расчет продолжался до момента установления.

Результаты расчетов. На рис. 2 показаны поля поступательных температур, полученные в расчетах для случая без учета реакций диссоциации (рис. 2*a*) и для трех случаев с различными моделями диссоциации (рис. 2*b*–2*d*). Во всех этих случаях для описания VT-обмена использовалась модель Ландау–Теллера. Учет диссоциации приводит к существенному уменьшению отхода головной ударной волны от клина (волна почти присоединена к нему) и значительному снижению поступательной температуры за волной вне зависимости от выбранной модели диссоциации.

Количественную оценку уменьшения отхода головной ударной волны из-за влияния химических реакций можно сделать из распределений температур в плоскости симметрии, которые показаны рис. 3*a*. Хорошо видно, что в расчете с реакциями диссоциации (однотемпературная модель Аррениуса) наблюдается уменьшение отхода головной ударной волны примерно на 0,1*w*. На рис. 3*b* показано сравнение распределений температур в плоскости симметрии, полученных в расчетах с разными моделями диссоциации. В расчетах с использованием зависимости Парка и Кузнецова, учитывающих колебательную температуру в скорости диссоциации, наблюдается более высокая температура, чем в расчете с использованием классической однотемпературной Аррениусовской зависимости. Отметим, что в зависимости от выбранной формы константы диссоциации получается различная величина отхода головной ударной волны, но эта разница не очень велика (~0,003*w*).

Для оценки точности численного решения проводилась серия расчетов на последовательности измельчающихся сеток. Сеточная сходимость продемонстрирована на рис. 4,

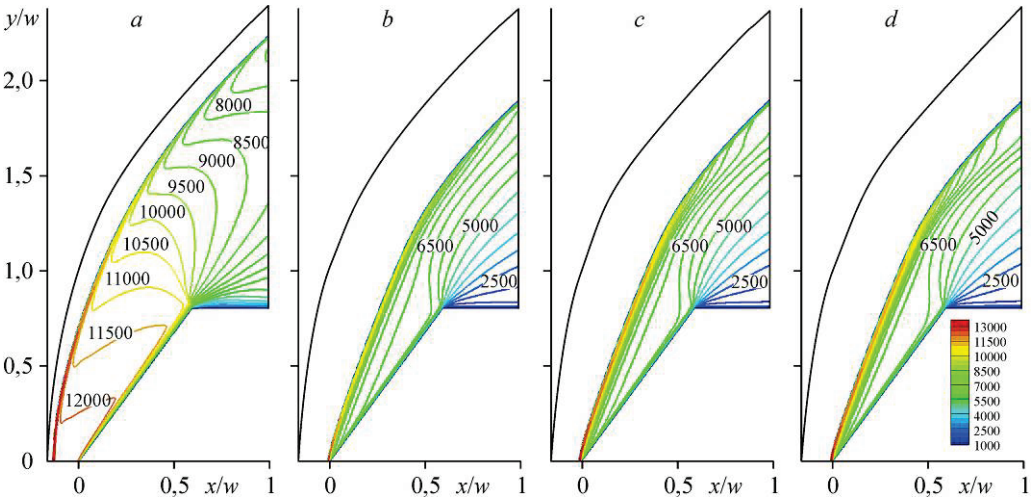


Рис. 2. Изолинии поступательной температуры около клина ($\delta_w = 53{,}5°$) без диссоциации (*a*) и с учетом диссоциации согласно зависимости Аррениуса (*b*), Парка (*c*) и Кузнецова (*d*).

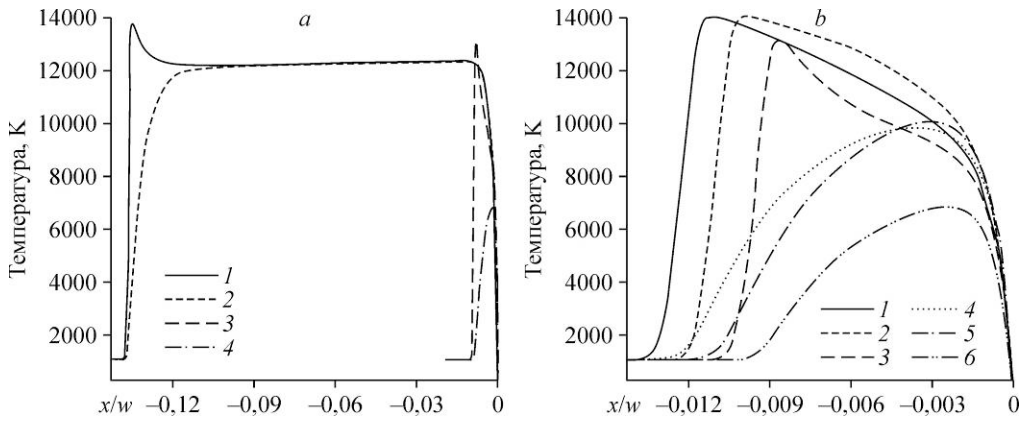


Рис. 3. Распределение поступательной и колебательной температур в плоскости симметрии на линии торможения перед клином ($\delta_w = 53{,}5°$) в случае без реакций (*a*) и с различными моделями диссоциации (*b*).

a — T без реакции (*1*), T_v без реакции (*2*), T по модели Аррениуса (*3*), T_v по модели Аррениуса (*4*); *b* — с использованием моделей диссоциации: $T_{\text{Парк}}$ (*1*), $T_{\text{Кузнецов}}$ (*2*), $T_{\text{Аррениус}}$ (*3*), $T_{v\ \text{Парк}}$ (*4*), $T_{v\ \text{Кузнецов}}$ (*5*), $T_{v\ \text{Аррениус}}$ (*6*).

где показаны распределения температур на плоскости симметрии в расчете с использованием модели Кузнецова для диссоциации и модели Ландау–Теллера для VT-обмена. Отметим, что при моделировании использовалась структурированная гексаэдральная сетка со сгущением к клину для разрешения пограничного слоя. Измельчение сетки осуществлялось делением ячейки пополам в каждом направлении с использованием встроенной функции решателя, при этом измельчалась только часть сетки, включающая ударную волну и зону за ней. На рисунке хорошо видно, что распределения температур практически не зависят от шага пространственной дискретизации. В расчетах с другими углами клина использовались сетки с такими же ячейками как в показанном расчете в случае 241800 ячеек.

Решение рассматриваемой системы уравнений (1)–(6) в существенной мере может зависеть от члена $\dot{e}_{v,1}^{\text{VT}}$, соответствующего энергетическому обмену между поступательной и колебательной модами. В первую очередь это влияние будет заметно на распределении температур, которое в свою очередь будет влиять на скорость химических реакций через их константы (13)–(15), а изменение в скорости химических реакций приведет к изменению состава смеси. В результате можно ожидать значительную перестройку структуры потока из-за изменений в механизме колебательно-диссоциативного взаимодействия. Анализ влияния модели колебательной релаксации на распределение температур представлен на рис. 5. В случае отсутствия химических реакций (рис. 5*a*) при использовании модели [10] наблюдается

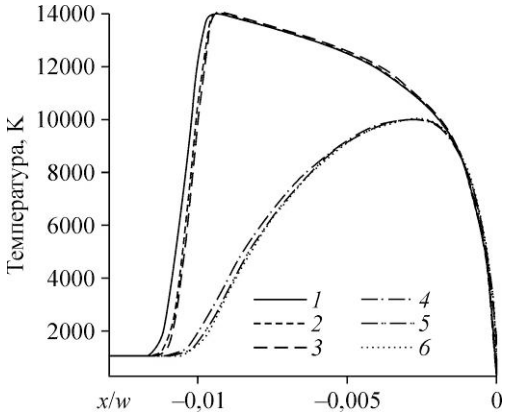


Рис. 4. Распределение поступательной и колебательной температур на плоскости симметрии перед клином ($\delta_w = 53{,}5°$), полученное в расчетах с использованием различных сеток.

Количество ячеек для T (*1*, *2*, *3*) и T_v (*4*, *5*, *6*) — 75200 (*1*, *4*), 241800 (*2*, *5*), 894600 (*3*, *6*).

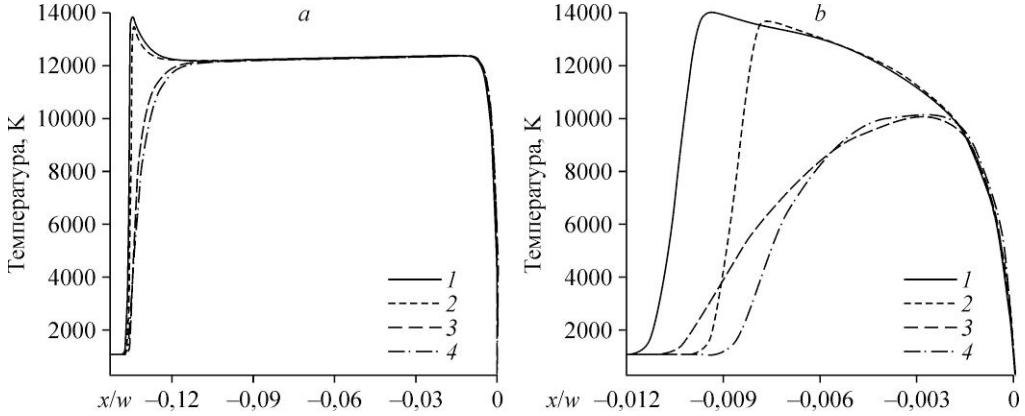


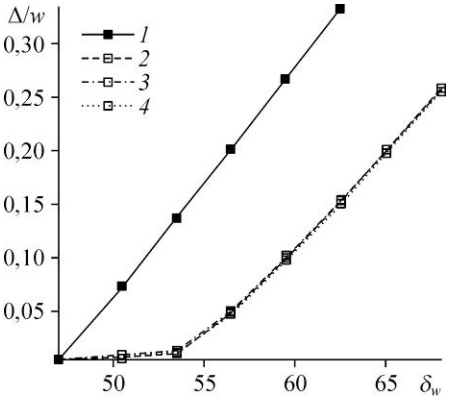
Рис. 5. Сравнение распределений температур, полученных с использованием различных моделей колебательной релаксации из работ [9] и [18], на плоскости симметрии перед клином (δ_w = 53,5°) в случае отсутствия химических реакций (*a*) и с учетом диссоциации согласно модели Кузнецова (*b*).

a: T (*1*) и T_v (*2*) — VT-обмен по модели [18], T (*3*) и T_v (*4*) — VT-обмен по модели [9];
b: T (*1*) и T_v (*3*) — VT-обмен по модели [18], T (*2*) и T_v (*4*) — VT-обмен по работе [9].

уменьшение зоны колебательной релаксации по сравнению с классической моделью Ландау–Теллера, при этом пик поступательной температуры становится ниже, а скорость колебательной релаксации за фронтом ударной волны увеличивается. Отход ударной волны почти не зависит от используемой модели колебательной релаксации. Для течения с диссоциацией (рис. 5*b*), при использовании модели [10] происходит уменьшение отхода головной ударной волны по сравнению с моделью Ландау–Теллера, и наблюдается увеличение максимума колебательной температуры. Такое поведение объясняется тем, что при использовании модели [10] колебательная релаксация идет быстрее, в результате чего увеличивается скорость диссоциации и, следовательно, уменьшается отход ударной волны.

Величина отхода головной ударной волны, полученная в расчетах с различными углами клина, представлена на рис. 6. В расчетах в качестве положения ударной волны выбиралась *x*-координата точки на плоскости симметрии, где поступательная температура равна T = 2000 K. Результаты расчетов без учета реакций диссоциации дают существенно больший отход ударной волны по сравнению с расчетами с учетом диссоциации (рис. 6). Отметим, что при использовании модели колебательной релаксации [10] отход головной ударной волны почти не меняется.

Расчет колебательной температуры в зоне релаксации за прямой ударной волной в кислороде (O_2-O)



Начальные и граничные условия. Сравниваются результаты расчетов с экспериментальными измерениями [27] колебательной температуры молекулярного кислорода в зоне колебательной релаксации за нормальной ударной волной в бинарной смеси реагирующего кислорода (O_2-O). В работе [27] ударная

Рис. 6. Величина отхода головной ударной волны.

Расчеты без учета реакций (*1*), расчеты с учетом диссоциации с использованием зависимостей Аррениуса (*2*), Парка (*3*) и Кузнецова (*4*).

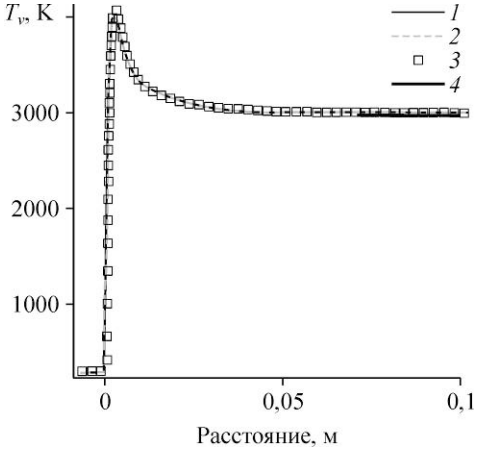


Рис. 7. Распределения колебательной температуры молекулярного кислорода (O_2), полученные с использованием различных сеток.

Число ячеек: 500 (*1*), 1000 (*2*), 2000 (*3*); температура, вычисленная по соотношениям Ренкина–Гюгонио в условиях равновесия (*4*).

волна генерировалась в ударной трубе разрывом диафрагмы, разделяющей области низкого и высокого давления в начальный момент времени. Измерения проводились в области, где течение можно считать одномерным, поэтому в настоящей работе расчеты проводились в одномерной постановке в системе отсчета, связанной с фронтом ударной волны.

Для решения рассматриваемой задачи использовалась прямоугольная расчетная область, в которой строилась равномерная ортогональная сетка. На левой входной границе задавались граничные условия, соответствующие одному из экспериментов [27], а именно: $M_\infty = 9{,}3$, $p_\infty = 266{,}6$ Па, $T_\infty = 295$ K, при этом в набегающем потоке был чистый молекулярный кислород. На правой выходной границе задавалось давление, рассчитанное из соотношений Ренкина–Гюгонио для условий химического равновесия. Все остальные переменные экстраполировались из расчетной области. На верхней и нижней границах ставилось условие симметрии. Во всех расчетах между верхней и нижней границами (плоскостями симметрии) определялись две расчетные ячейки. В качестве начального условия использовалось разрывное решение (скачок). Перед скачком задавались условия, соответствующие набегающему потоку, а за скачком задавались условия, соответствующие условиям Ренкина–Гюгонио для химического равновесия.

Результаты расчетов. Распределения колебательной температуры, полученные в расчетах с использованием различных сеток, представлены на рис. 7. Здесь же приводится число ячеек от входной (левой) до выходной (правой) границы. Расстояние между этими границами составляло 0,12 м. Хорошо видно, что результаты численного моделирования не зависят от шага пространственной дискретизации. Начиная с расстояния, равного 0,07 м, колебательная температура выходит на постоянное значение, которое совпадает со значением, рассчитанным по соотношениям Ренкина–Гюгонио на прямом скачке за зоной колебательной и химической релаксаций.

На рис. 8 результаты расчетов, проведенных с использованием сеток с 1000 ячеек, сравниваются с результатами измерений [27]. Профили, полученные в расчетах, совмещались с экспериментальными данными по фронту ударной волны. Хорошо видно, что в случае, когда скорость химических реакций зависит только от поступательной температуры (модель Аррениуса), численное моделирование фактически не воспроизводит величину максимума колебательной температуры, наблюдаемого в эксперименте. Учет колебательной температуры

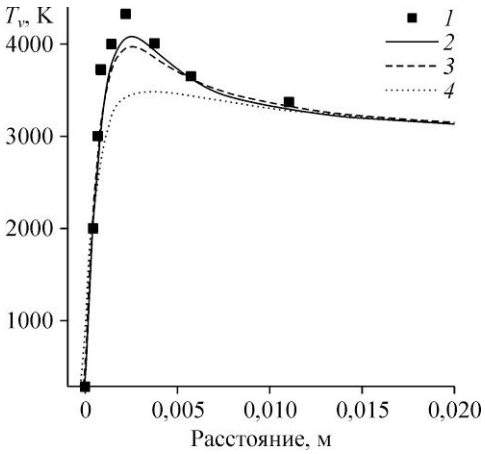


Рис. 8. Сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными измерениями.

Экспериментальные данные [27] (*1*), расчеты по моделям Кузнецова (*2*), Парка (*3*), Аррениуса (*4*).

в скорости химических реакций (модели Парка и Кузнецова) приводит к значительно лучшему согласованию численных и экспериментальных данных, однако в окрестности максимума колебательной температуры наблюдаются небольшие расхождения (~10 % от максимального значения). Стоит отметить, что использование модели VT-обмена [10], полученной из кинетического уравнения Больцмана, почти не приводит к изменению колебательной температуры по сравнению с моделью Ландау–Теллера [22]: разница составляет ~5 % от величины максимума. В целом можно заключить, что результаты численного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными измерениями.

Заключение

Продемонстрирована возможность использования коммерческого пакета программ ANSYS Fluent для моделирования течений с термохимической неравновесностью. С использованием интерфейса UDF-функций разработаны вычислительные инструменты для моделирования высокоскоростных неравновесных течений с колебательной релаксацией и диссоциацией.

Проведено численное исследование течения бинарной смеси азота (N_2-N) около клина и кислорода (O_2-O) при расчете структуры ударной волны и релаксационной зоны. Впервые в расчетах на основе уравнений Навье–Стокса в двухтемпературном приближении была использована новая модель VT-обмена, являющаяся обобщением известной модели Ландау–Теллера и полученная строгими методами кинетической теории газов. В рассмотренных случаях использование новой модели колебательной релаксации приводит к ускорению колебательной релаксации по сравнению с моделью Ландау–Теллера. Для учета влияния поступательно-колебательной неравновесности на скорость диссоциации наряду с однотемпературной зависимостью Аррениуса использовались двухтемпературные модели Парка и Кузнецова. Показано, что модель диссоциации Кузнецова позволяет добиться наилучшего согласования с экспериментальными данными по колебательной температуре в сильной ударной волне в кислороде.

Список литературы

1. **Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И.** Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965. 484 с.
2. **Brun R.** Transport et relaxation dans les écoulements gazeux. Paris, N.Y.: Masson, 1986. 204 p.
3. **Park C.** Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics. N.Y., Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore: J.Wiley and Sons, 1990. 359 p.
4. **Черный Г.Г., Лосев С.А.** Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник: в 3 т. Т. 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: Изд-во МГУ, 1995. 350 с.
5. **Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В.** Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб: Изд-во С.-Пб. гос. ун-та, 2003. 272 с.
6. **Григорьев Ю.Н., Ершов И.В.** Диссипация вихревых возмущений в колебательно-неравновесном двухатомном газе // Теплофизика и аэромеханика. 2012. Т. 19, № 3. С. 291–300.
7. **Marrone P.V., Treanor C.E.** Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6, No. 9. P. 1215–1221.
8. **Кузнецов Н.М.** Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982. 221 с.
9. **Kolesnichenko E., Gorbachev Yu.** Chemical reactions in non-equilibrium gas mixtures and mass action law breakdown // Shock Waves. 2013. Vol. 23. P. 635–648.
10. **Kustova E.V., Oblapenko G.P.** Reaction and internal energy relaxation rates in viscous thermochemically non-equilibrium gas flows // Physics of Fluids. 2015. Vol. 27, No. 1. P. 016102-1–016102-20. DOI: 10.1063/1.4906317.
11. **Scott T., Dieudonne W., Spel M.** Mistral: conus debut flow field and heat transfer calculations // 34th AIAA Fluid Dynamics Conf. and Exhibit, 2004. AIAA Paper. 2004. No. 2423.
12. **Candler G.V., Johnson H.B., Nompelis I., Gidzak V.M., Subbareddy P.K., Barnhardt M.** Development of the US3D code for advanced compressible and reacting flow simulations // 53rd AIAA Aerospace Sci. Meeting, 2015. DOI: 10.2514/6.2015-1893.

13. **Sarma G.S.R.** Physico-chemical modelling in hypersonic flow simulation // Progress in Aerospace Sci. 2000. Vol. 36, No. 3–4. P. 281–349.
14. **Sakharov V., Kolesnikov A., Gordeev A., Verant J.** CFD modeling of thermally and chemically nonequilibrium flows in discharge channel and in subsonic plasmatron jets around of the flat-face model // European Space Agency, (Special Publication) ESA SP. Proc. of the 6th European Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles. 2009.
15. **Суржиков С.Т.** Пространственная компьютерная модель неравновесной аэрофизики спускаемых марсианских космических аппаратов // Вычислительная механика сплошных сред. 2010. Т. 3, № 4. С. 96–111.
16. **Druguet M.-C., Candler G.V., Nompelis I.** Effects of numerics on Navier–Stokes computations of hypersonic double-cone flows // AIAA J. 2005. Vol. 43, No. 3. P. 616–623.
17. **Буакказ Р., Талби К., Хелил И., Салхи Ф., Уазизи М.** Численное исследование течения несжимаемой жидкости и теплообмена вокруг вращающегося кругового цилиндра // Теплофизика и аэромеханика. 2014. Т. 21, № 1. С. 89–99.
18. **Гунько Ю.П., Мажуль И.И., Нурутдинов В.И.** Численное исследование разрушения сверхзвукового потока при дросселировании канала воздухозаборника // Теплофизика и аэромеханика. 2014. Т. 21, № 2. С. 163–178.
19. **Кудрявцев А.Н., Хотяновский Д.В.** Прямое численное моделирование перехода к турбулентности в сверхзвуковом пограничном слое // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22, № 5. С. 581–590.
20. **Wilke C.R.** A viscosity equation for gas mixtures // J. of Chemical Physics. 1950. Vol. 18. P. 517–519.
21. **Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р.** Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961. 929 с.
22. **Ландау Л.Д., Теллер Е.** Собрание трудов. М.: Наука, 1969. Т. 1. 181 с.
23. **Millikan R. C., White D.R.** // J. of Chemical Physics. 1963. Vol. 39, No. 12. P. 3209–3213.
24. **Moss J.N., Bird G.A., Dogra V.K.** Nonequilibrium thermal radiation for an aeroassist flight experiment vehicle // AIAA Paper. 1988. No. 88–0081.
25. **Забелинский И.Е., Ибрагимова Л.Б., Шаталов О.П.** Измерение колебательной температуры кислорода за фронтом ударной волны в условиях термической и химической неравнолвесности // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2010. № 3. С. 159–167.
26. **Hornung H.G., Smith G.H.** The influence of relaxation on shock detachment // J. of Fluid Mechanics. 1979. Vol. 93, Pt. 2. P. 225–239.
27. **Ibraguimova L.B., Sergievskaya A.L., Levashov V.Yu., Shatalov O.P., Tunik Yu.V., Zabelinskii I.E.** Investigation of oxygen dissociation and vibrational relaxation at temperatures 4000–10800 K // J. of Chemical Physics. 2013. Vol. 139, No. 3. P. 034317-1–034317-10.

Статья поступила в редакцию 9 сентября 2015 г.