

УДК 533.7

Численное моделирование неравновесных течений на основе поуровневого описания в коммерческих пакетах программ *

О.В. Кунова^{1,2}, Г.В. Шоев^{1,3}, А.Н. Кудрявцев^{1,3}

¹Новосибирский государственный университет

²Санкт-Петербургский государственный университет

³Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

E-mail: kunova.olga@gmail.com

Исследуются неравновесные течения двухкомпонентной смеси кислорода O_2/O за скачком уплотнения с учетом поуровневой колебательной и химической кинетики. Система уравнений газовой динамики дополнялась уравнениями кинетики, включающими вклады процессов VT (TV)-обмена и диссоциации. Предложен метод численного решения данной системы с помощью пакета ANSYS Fluent, который использовался совместно с разработанной программой для учета неравновесной кинетики. Результаты расчетов сравнивались с параметрами, полученными при решении задачи в постановке с выделенным скачком уплотнения. Проведено сравнение колебательной температуры с экспериментальными данными. С использованием предложенного в настоящей работе численного инструментария проведено исследование течения около цилиндра.

Ключевые слова: поуровневая кинетика, численное моделирование, неравновесная диссоциация, колебательная релаксация, ударная волна.

Введение

Процессы неравновесной колебательной и химической кинетики являются важными для описания течений за ударными волнами, возникающими около спускаемых летательных аппаратов, в соплах, в высокоэнтальпийных установках и камерах сгорания. В условиях сильного отклонения от термического равновесия характерные времена кинетических процессов становятся сравнимы с временем изменения газодинамических параметров. Поэтому при моделировании таких течений кинетика неравновесных процессов и уравнения газовой динамики должны рассматриваться совместно.

На основе кинетической теории [1, 2] были разработаны подходы к описанию неравновесных течений реагирующих смесей газов при различных отклонениях от термического и химического равновесия. Наиболее детальный поуровневый подход описывает колебательную релаксацию и химические реакции при сохранении равновесных или

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 15-31-51260, № 15-01-02373) и СПбГУ (НИР~6.50.2522.2013).

слабонеровесных распределений по скоростям и вращательным энергиям. При этом характерные времена релаксации удовлетворяют условию

$$\tau_{tr} \leq \tau_{rot} \leq \tau_{vibr} < \tau_{react} \sim \theta, \quad (1)$$

здесь τ_{tr} , τ_{rot} , τ_{vibr} , τ_{react} и θ — соответственно времена релаксации поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы, время химической релаксации и среднее время изменения макроскопических параметров газа.

В последние десятилетия поуровневый подход использовался для численного моделирования различных течений: за ударной волной [3–6], в соплах [7–9], в пограничном слое [10, 11], течения около поверхности спускаемого аппарата [12, 13] и т.д. Однако большинство работ посвящалось исследованию установившихся течений невязкого газа или оценке влияния неравновесной кинетики на процессы переноса [6, 13] с использованием упрощенного подхода, основанного на обработке полученных невязких численных решений. Связано это с тем, что поуровневое описание в вязкой постановке требует решения большого числа уравнений для заселенностей колебательных уровней молекулярных компонентов смеси и числовых плотностей атомарных компонентов, а также включения в вычислительный код выражений для расчета коэффициентов скорости процессов и коэффициентов переноса, которые в свою очередь зависят от колебательного уровня молекул и макропараметров течения [14, 15]. В такой постановке задача является трудной для вычисления.

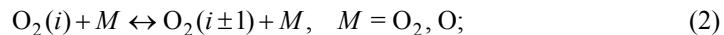
Цель представленной работы заключается в разработке вычислительного инструмента, который позволил бы исследовать двух- и трехмерные течения реагирующей смеси газов в рамках поуровневого подхода, а также учитывать процессы переноса в последующих расчетах. В качестве решателя был выбран программный пакет ANSYS Fluent, который успешно использован для численного моделирования задач внешнего [16] и внутреннего [17] обтекания, для исследований многотемпературных течений газа CO_2 в ударном слое при обтекании пластины [18], течений около клина смеси N_2/N и течения O_2/O через одномерный скачок с VT-обменом и диссоциацией [19]. Однако до настоящего времени пакет ANSYS Fluent не использовался для решения задач в поуровневом приближении, поскольку в нем учитываются отклонения от равновесных распределений по всем внутренним степеням свободы.

Настоящая работа посвящена разработке математической модели описания течений бинарных смесей с учетом колебательной и химической кинетики и программы, совместимой с основным решателем выбранного пакета. Для верификации полученного численного инструментария была решена задача о течении газа через одномерный скачок уплотнения, также для его апробации в приложении к многомерным задачам было промоделировано двухмерное течение около цилиндра.

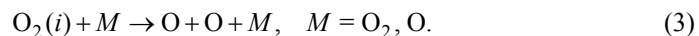
1. Теоретическая модель

В работе рассматривалось течение ударно нагретой смеси $\text{O}_2(i)/\text{O}$ (i — колебательный уровень молекул) со следующими кинетическими процессами:

– VT(TV)-обмены энергией между поступательными и колебательными степенями свободы



– реакции диссоциации



Так как в ударно нагретом газе переходы поступательной энергии в невозбужденные колебательные степени свободы играют доминирующую роль в процессе колебательной

релаксации, то VV-обмены колебательной энергией между молекулами в расчетах не учитывались.

С учетом требований основного решателя и при условии (1) система уравнений, описывающая течения бинарной смеси, содержит уравнения для массовых долей заселенностей колебательных уровней молекул Y_i , массовых долей атомарных компонентов Y_a , а также уравнения для макроскопической скорости \mathbf{v} , поступательной температуры газа T и в приближении невязкого нетеплопроводного газа имеет вид

$$\partial\rho/\partial t + \nabla\cdot(\rho\mathbf{v}) = 0, \quad (4)$$

$$\partial\rho Y_i/\partial t + \nabla\cdot(\rho Y_i \mathbf{v}) = R_i, \quad i = 1, \dots, l, \quad (5)$$

$$\partial\rho Y_a/\partial t + \nabla\cdot(\rho Y_a \mathbf{v}) = R_a, \quad (6)$$

$$\partial\rho\mathbf{v}/\partial t + \nabla\cdot(\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) - \nabla p = 0, \quad (7)$$

$$\partial(\rho E)/\partial t + \nabla\cdot(\mathbf{v}(\rho E + p)) = S_h, \quad (8)$$

здесь ρ и p — плотность и давление смеси, l — число возбужденных уровней молекул,

$E = \frac{3}{2}\bar{R}_a T \cdot Y_a + \frac{5}{2}\bar{R}_m T \cdot Y_m + \frac{v^2}{2}$ — сумма поступательной, вращательной и кинетической

энергий смеси на единицу массы, где $Y_m = \sum_{i=0}^l Y_i$ — массовая доля молекулярного компонента смеси, \bar{R}_a , \bar{R}_m — удельные газовые постоянные атомарных и молярных компонентов смеси. В выбранном пакете система основных уравнений включает уравнение неразрывности (4), в связи с чем уравнение кинетики для Y_0 было исключено. Массовая

доля молекул нулевого уровня вычислялась как $Y_0 = 1 - \sum_{i=1}^l Y_i - Y_a$.

Правые части уравнений (5)–(6) содержат релаксационные члены, описывающие происходящие в смеси кинетические процессы, и имеют вид

$$R_i = R_i^{\text{VTm}} + R_i^{\text{VTa}} + R_i^{\text{diss}} = \mathcal{M}_m \left(\hat{R}_i^{\text{VTm}} + \hat{R}_i^{\text{VTa}} + \hat{R}_i^{\text{diss}} \right), \quad (9)$$

$$R_a = -2\mathcal{M}_a \sum_i \hat{R}_i^{\text{diss}}, \quad (10)$$

$$\hat{R}_i^{\text{VTm}} = C_m \sum_{i'=i\pm 1} \left(C_{i'} k_{i'i}^{\text{m}} - C_i k_{ii'}^{\text{m}} \right), \quad (11)$$

$$\hat{R}_i^{\text{VTa}} = C_a \sum_{i'=i\pm 1} \left(C_{i'} k_{i'i}^{\text{a}} - C_i k_{ii'}^{\text{a}} \right), \quad (12)$$

$$\hat{R}_i^{\text{diss}} = -C_i (C_m k_{i,\text{diss}}^{\text{m}} + C_a k_{i,\text{diss}}^{\text{a}}), \quad (13)$$

здесь \mathcal{M}_m и \mathcal{M}_a — молярные массы молекул и атомов смеси, C_i — молярная концентрация молекул на i -ом уровне, C_m и C_a — молярные концентрации молекул и атомов, $k_{ii'}^{\text{m}}$, $k_{i'i}^{\text{a}}$, $k_{i,\text{diss}}^{\text{m}}$, $k_{i,\text{diss}}^{\text{a}}$ — коэффициенты скорости энергообменов (2) и диссоциации (3) при столкновении с молекулами и атомами (индексы “m” и “a” соответственно).

Коэффициенты скорости диссоциации были найдены с помощью модели Тринора–Маррона [20], модифицированной в работе [2] для поуровневого подхода:

$$k_{i,\text{diss}}^{\text{m,a}} = Z_i(T, U) k_{\text{diss-eq}}^{\text{m,a}}(T), \quad (14)$$

где Z_i — фактор неравновесности, имеющий вид

$$Z_i(T, U) = \frac{Z^{\text{vibr}}(T)}{Z^{\text{vibr}}(-U)} \exp\left(\frac{\varepsilon_i}{k} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U}\right)\right), \quad (15)$$

здесь ε_i — колебательная энергия i -го уровня молекулы, k — постоянная Больцмана, U — параметр модели (в расчетах принималось $U = D/6k$, $D = 8,197 \cdot 10^{-19}$ Дж — энергия диссоциации), $Z^{\text{vibr}}(T) = \sum_i \exp(-\varepsilon_i/kT)$ — колебательная статистическая сумма. Рав-

новесный коэффициент скорости диссоциации $k_{\text{diss-eq}}^{\text{m,a}}$ ($\text{м}^3/\text{с}$) описывался законом Аррениуса

$$k_{\text{diss-eq}}^{\text{m,a}}(T) = AT^b \exp(-D/(kT)) \quad (16)$$

с параметрами: $A = 5,33 \cdot 10^{-11}$ и $b = -1$ — при столкновении с молекулой, $A = 1,5 \cdot 10^{-10}$ и $b = -1,05$ — при столкновении с атомом [21]. В расчетах колебательная энергия ε_i описывалась моделью гармонического осциллятора, для кислорода число возбужденных уровней $l = 25$. Число возбужденных колебательных уровней l находилось из условия, что колебательная энергия последнего уровня не превышает энергию диссоциации молекул кислорода.

Коэффициенты скорости VT-обменов для гармонического осциллятора имеют вид

$$k_{i i'}^{\text{m,a}} = i k_{10}^{\text{m,a}}(T) \quad \text{при } i' = i - 1, \quad (17)$$

$$k_{i i'}^{\text{m,a}} = (i + 1) k_{10}^{\text{m,a}}(T) \exp\left(-\frac{\theta_v}{T}\right) \quad \text{при } i' = i + 1, \quad (18)$$

где $\theta_v = 2267,5$ К — характеристическая температура колебаний молекул кислорода, $k_{10}^{\text{m,a}}(T)$ — коэффициенты скорости перехода молекулы с 1-го на 0-ой колебательный уровень, зависящие от поступательной температуры газа и партнера по столкновению. В работе для расчета коэффициентов $k_{10}^{\text{m,a}}(T)$ использовались формулы SSH-теории [22, 23].

Правая часть уравнения (8) описывает изменение колебательной энергии и энергии образования смеси в результате процессов (2)–(3) и может быть записана в виде

$$S_h = -\sum_i \frac{\varepsilon_i}{m_m} R_i - \frac{\varepsilon_a}{m_a} R_a, \quad (19)$$

где ε_a — энтальпия образования атомов, m_m и m_a — массы молекул и атомов кислорода.

2. Реализация

Моделирование поуровневого описания неравновесной кинетики в пакете ANSYS Fluent осуществлялось следующим образом. Молекулы кислорода, находящиеся на разных колебательных уровнях, моделировались как независимые компоненты газовой смеси (см. (5)). Процессы перехода на верхние и нижние уровни интерпретировались решателем как химические реакции:



Всего рассматривалось 50 переходов между колебательными уровнями молекулярного кислорода. Моделирование энергообмена между колебательными и поступательными степенями свободы при соударении молекулы O_2 , находящейся на i -ом уровне, с любой другой частицей осуществлялось по аналогии с химическими реакциями. Для каждого колебательного уровня в свойствах материала решателя определялась стандартная энтальпия образования h_i^0 , равная колебательной энергии уровня. В этом случае учитывалось, что при переходе с уровня i на уровень $i+1$ поступательная энергия уменьшается на разницу энергий между соседними колебательными состояниями, а при переходе с верхнего уровня на нижний поступательная энергия увеличивается на эту величину.

Для корректного описания VT-обмена скорости переходов (20) и (21) имеют вид:

$$\hat{R}_i^{VT,up} = C_m C_i k_{i,i+1}^m + C_a C_i k_{i,i+1}^a, \quad (22)$$

$$\hat{R}_i^{VT,down} = C_m C_i k_{i,i-1}^m + C_a C_i k_{i,i-1}^a. \quad (23)$$

Соотношения (22), (23) дают абсолютные значения релаксационных членов, а знак определяет решатель с учетом стехиометрических коэффициентов реакций.

Коэффициенты скорости энергообменов в общем случае описываются функцией, отличной от формулы Аррениуса, используемой решателем по умолчанию для расчета коэффициентов скорости химических реакций. Поэтому расчет коэффициентов скорости VT-обменов согласно (22) и (23) реализовывался в макросе DEFINE_VR_RATE. При этом решатель использовал программу пользователя, а не встроенную по умолчанию функцию.

Диссоциация моделировалась как набор химических реакций



каждая из которых описывала распад находящихся на i -ом уровне молекул на атомы. При этом вероятность диссоциации зависела от номера колебательного уровня, соответственно рассматривалось 26 реакций. Для учета потери энергии за счет диссоциации

для атомарного сорта использовалась стандартная энтальпия образования $h_a^0 = \frac{M_a}{m_m} \varepsilon_a$

($h_a^0 = 2,4682 \cdot 10^8$ Дж/кмоль для O). Релаксационные члены \hat{R}_i^{diss} также рассчитывались с помощью функции, определяемой пользователем.

При реализации VT-переходов и диссоциации частица M была исключена из (2) и (3), поскольку она оставалась неизменной, но коэффициенты скорости процессов рассчитывались с учетом наличия партнера по столкновению. Такой подход позволяет использовать стандартный механизм решателя для расчета источниковых членов в уравнениях (5) при моделировании химически реагирующих течений, поэтому исчезает необходимость реализовывать эти источниковые члены в пользовательских функциях. Необходимо отметить, что запись VT-переходов в виде (20), (21) и реакций диссоциации в виде (24) значительно уменьшает вычислительную трудоемкость по сравнению с записью (2) и (3). Это связано с тем, что в уравнениях (20), (21) и (24) скорость перехода с или на i -й уровень вычисляется в одной реакции, а при использовании записи (2) и (3) необходим перебор всех частиц M , с которыми возможны столкновения.

Для описанных выше химических реакций источниковый член, реализованный в решателе для учета стоков/источников энергии за счет химических реакций, имеет вид

$$S_{h,default} = - \sum_{i=0}^l \frac{h_i^0}{M_m} (R_i^{VTm} + R_i^{VTa}) - \frac{h_a^0}{M_a} R_a, \quad (25)$$

а источниковый член, необходимый для расчета течений на основе поуровневого подхода, —

$$S_h = - \sum_{i=0}^l \frac{h_i^0}{\mathcal{M}_m} (R_i^{\text{VTm}} + R_i^{\text{VTa}}) - \sum_{i=0}^l \frac{h_i^0}{\mathcal{M}_m} R_i^{\text{diss}} - \frac{h_a^0}{\mathcal{M}_a} R_a, \quad (26)$$

где $h_a^0 = \frac{\mathcal{M}_a}{m_a} \varepsilon_a$ и $h_i^0 = \frac{\mathcal{M}_m}{m_m} \varepsilon_i$, источниковый член (25) записан именно в том виде, в каком его по умолчанию интерпретирует решатель для описанных выше реакций, источниковый член (26) получен из соотношения (19) с учетом (9).

Сравнение выражений (25) и (26) показывает, что слагаемое $-\sum_{i=0}^l \frac{h_i^0}{\mathcal{M}_i} R_i^{\text{diss}}$ не учитывается решателем по умолчанию при использовании встроенного механизма учета стока/источников энергии. Это слагаемое вычислялось в макросе DEFINE_SOURCE и затем использовалось как дополнительный источниковый член в правой части уравнения (8).

Таким образом, был реализован подход поуровневого описания для моделирования невязких нетеплопроводных течений газа с VT-обменами и диссоциацией. Аналогичным образом можно рассчитывать и течения более сложных газовых смесей. Отметим, что описанный выше подход может быть использован также и для других коммерческих пакетов программ, решающих такую же систему уравнений (4)–(8) движения сплошных сред.

3. Приложения предложенного подхода

Рассматривались три задачи:

I — VT (TV)-релаксация чистого кислорода за скачком уплотнения;

II — релаксация кислорода с VT (TV)-обменами и реакциями диссоциации за скачком уплотнения;

III — обтекание цилиндра радиусом $R = 1$ см сверхзвуковым потоком кислорода с учетом колебательной и химической релаксации.

Для моделирования течения через одномерный скачок уплотнения строилась двумерная прямоугольная область, так как выбранный пакет изначально не предназначен для решения одномерных задач. На верхней и нижней границах задавались плоскости симметрии, между которыми строилось две ячейки. На левой границе ставились граничные условия набегающего потока (граничное условие «pressure-far-field»), а на правой (выходной) границе задавалось давление (граничное условие «pressure-outlet»), рассчитанное в конце релаксационной зоны. В расчетной области строилась равномерная структурированная прямоугольная сетка, при этом от левой до правой границы размещалось 500 ячеек. Расстояние от левой до правой границы задавалось равным 0,12 м.

В качестве начальных условий задавалось разрывное решение. До разрыва задавались параметры набегающего потока, а за разрывом задавались равновесные значения в конце зоны релаксации. Эти начальные условия определялись в макросе DEFINE_INIT. В набегающем потоке задавались условия, соответствующие одному из экспериментов [24]: $M_0 = 9,3$, $T_0 = 299$ К, $p_0 = 266,6$ Па, где M_0 , T_0 , p_0 — числа Маха, поступательно-вращательная температура, статическое давление соответственно.

Предполагалось, что изначально смесь состояла только из молекул кислорода, а заселенности колебательных уровней считались больцмановскими с заданной температурой газа T_0 :

$$Y_i^B = \frac{Y_m}{Z^{\text{vibr}}(T_0)} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT_0}\right), \quad (27)$$

$$\text{где } Z^{\text{vibr}}(T_0) = \sum_{i=0}^I \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT_0}\right).$$

Расчеты проводились методом установления с использованием решателя, основанного на плотности и предназначенного для моделирования высокоскоростных сжимаемых течений с неявной схемой второго порядка с разностями против потока. Вычисление потоков через грани контрольного объема производилось с использованием солвера AUSM [25].

Для расчета течения около цилиндра строилась расчетная область около четверти цилиндра. В этой расчетной области строилась структурированная сетка 50×40 ячеек. В качестве начального условия использовался равномерный сверхзвуковой поток с параметрами набегающего потока. На левой границе ставились условия набегающего потока (в терминологии выбранного пакета — граничное условие «pressure-far-field»). Ввиду симметрии задачи на нижней границе задавалось условие симметрии. На стенке цилиндра ставилось граничное условие непротекания (граничное условие «wall»), т.е. не учитывался пограничный слой. На правой выходной границе реализовывалось сверхзвуковое течение, поэтому все неизвестные экстраполировались из расчетной области (граничное условие «pressure-outlet»).

Результаты расчета, полученные с использованием предложенного в настоящей работе численного инструментария, сравнивались со значениями параметров течения, рассчитанными в постановке с выделенным скачком уплотнения. Такая постановка задачи предполагает, что скачок состоит из узкого ударного фронта и продолжительной зоны релаксации. Внутри ударного фронта протекают только быстрые процессы (1) с сохранением химического состава смеси и распределения по колебательным уровням. Решение задачи делится на два этапа: первый — нахождение параметров газа сразу за ударным фронтом (они могут быть получены из соотношений Рэнкина–Гюнио); второй — численное интегрирование системы (4)–(8), переписанной для стационарного одномерного течения, с полученными данными в начале релаксационной зоны. В такой постановке задача была решена ранее одним из авторов статьи (см., например, [6]).

На рис. 1 изображено изменение поступательной температуры и массовых долей отдельных колебательных уровней с удалением от ударного фронта, полученное при моделировании течения через скачок уплотнения для чистого кислорода с учетом VT (TV)-релаксации (задача I). Там же показано сравнение параметров газа, полученных в настоящей работе и при решении задачи с выделенным скачком уплотнения. Видно,

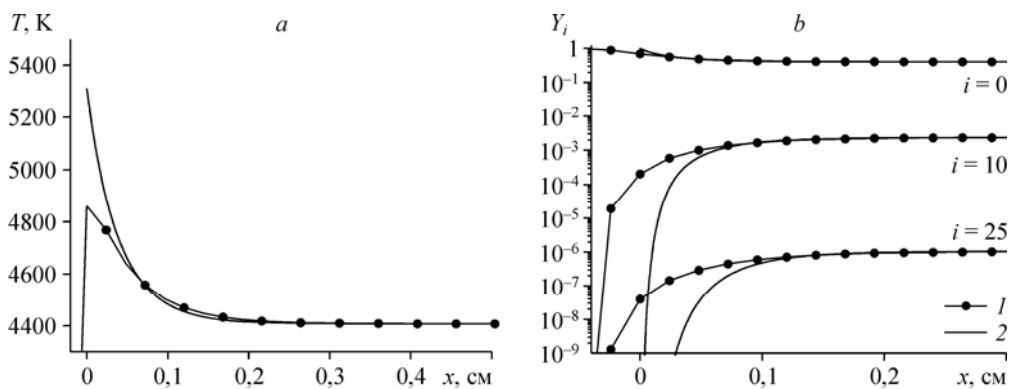


Рис. 1. Поступательная температура газа (а) и массовые доли заселенностей колебательных уровней (б) как функции от x .

1 — результаты расчета в предложенном численном инструментарии,
2 — результаты, полученные при расчетах с выделенным скачком уплотнения.

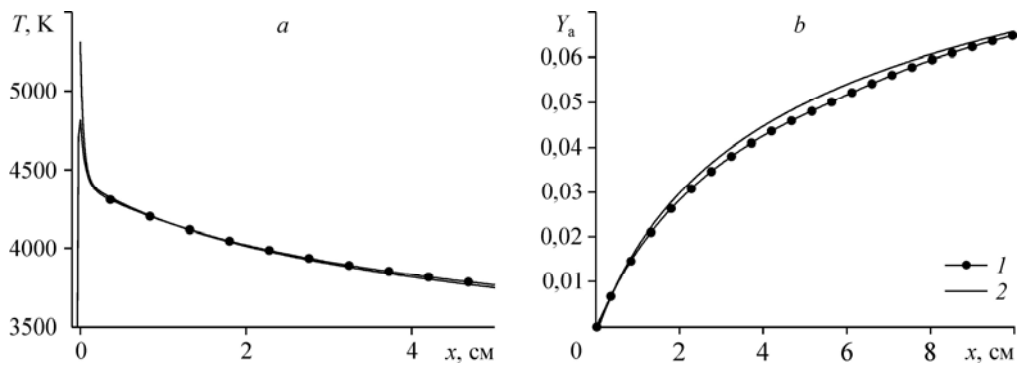


Рис. 2. Поступательная температура газовой смеси (а) и массовая доля атомарного кислорода (b) как функции от x .

Обозначения см. на рис. 1.

что температура газа падает с ростом расстояния x , увеличивается число молекул на ненулевом уровне вследствие TV-активации газа. С удалением от фронта параметры газа приближаются к постоянным значениям, соответствующим термическому равновесию.

Отличия между параметрами, найденными двумя численными способами, связаны с различными численными подходами к решению рассматриваемой задачи. В случае с выделением скачка поступательная температура изменяется мгновенно, а в случае сквозного счета скачок размывается на две расчетные ячейки. В результате такого численного эффекта (артефакта) энергообмены начинаются раньше, чем в случае с выделением скачка. В результате более ранних TV-переходов происходит уменьшение поступательной температуры, которое в свою очередь приводит к отличиям в заселенности уровней (см. рис. 2b).

Необходимо отметить численные осцилляции на скачках, характерные для невязких численных решений в выбранном пакете. Несмотря на небольшую амплитуду таких численных осцилляций они могут оказывать некоторое влияние на распределения заселенностей последних уровней (их значения очень малы). При $x > 0,1$ см параметры течения, полученные двумя способами, полностью совпадают, что подтверждает корректность реализации, рассмотренной в предыдущем параграфе.

Сравнение макропараметров, рассчитанных двумя численными методами, в постановке задачи с колебательной и химической релаксацией (задача II) представлены на рис. 2, 3. Можно видеть, что полученные значения оказываются близкими. Отличие

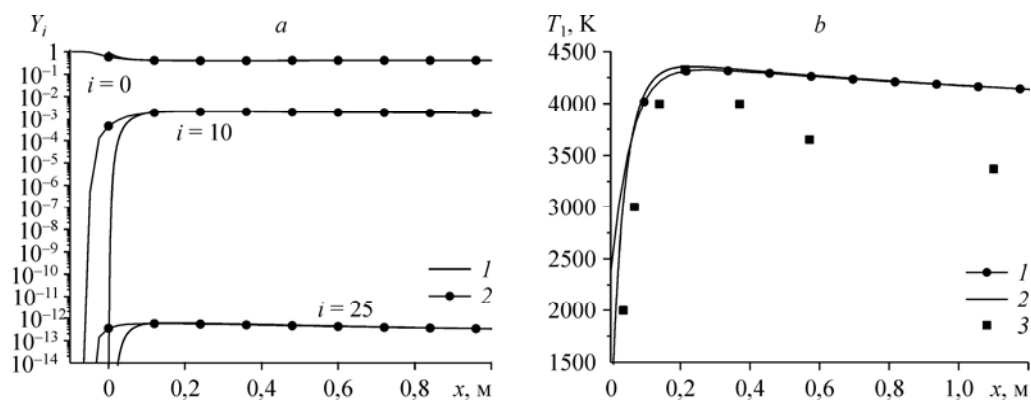


Рис. 3. Массовые доли заселенностей отдельных колебательных уровней молекул (а) и колебательной температуры (b) как функции от x .

1 — результаты расчета в предложенном численном инструментарии, 2 — результаты, полученные при расчетах с выделенным скачком уплотнения, 3 — экспериментальные данные.

в начале релаксационной зоны при $x = 0$ также связано с различными численными подходами к данной задаче: выделение скачка и использование схемы сквозного счета. Механизм этих отличий полностью совпадает с описанным выше в задаче I, однако здесь необходимо выделить процесс диссоциации, который влияет на характер изменения заселенностей Y_i при $i > 0$ (см. рис. 3a): сначала они возрастают в результате колебательного возбуждения молекул, а затем уменьшаются вследствие процесса диссоциации.

Для валидации используемой модели было проведено сравнение (см. рис. 3b) колебательной температуры, полученной в расчете, и измеренной колебательной температуры в эксперименте [24]. Расчет проводился при условиях, когда распределения молекул по колебательным уровням далеки от равновесных. Вследствие этого в поуровневой постановке задачи определение колебательной температуры не является очевидным. Для оценки этой величины использовалось соотношение для температуры первого колебательного уровня, введенной в многотемпературном подходе, основанном на использовании квазистационарных распределений, и связанной с общим числом колебательных квантов. Таким образом, в настоящей работе в качестве колебательной температуры T_1 , рассчитанной для поуровневого подхода, использовалось соотношение $T_1 = \varepsilon_1 / k \ln(Y_0 / Y_1)$.

Сравнение с экспериментом (см. рис. 3b) при рассматриваемых условиях показывает хорошую согласованность в зоне возбуждения газа, в зоне дезактивации с ростом x отличие увеличивается и достигает 23 %. Однако за максимумом колебательной температуры наблюдается качественно схожее поведение численных и экспериментальных данных. Отличие полученных результатов от экспериментальных может быть связано с выбором моделей расчета коэффициентов скорости кинетических процессов и требует дополнительных исследований. Ранее подобное исследование было проведено в работе [26] в рамках многотемпературного кинетического подхода и в работе [27] методом прямого статистического моделирования.

На рис. 4 и 5 показаны поля течений около цилиндра, полученные в расчетах предложенным численным инструментарием (задача III). На рис. 4a хорошо видна головная ударная волна, расположенная перед цилиндром. На плоскости симметрии она фактически является прямым скачком, за которым возникает дозвуковое течение. При удалении от плоскости симметрии головная ударная волна начинает искривляться, что приводит к уменьшению числа Маха по нормали к волне. В результате этого искривления уменьшается интенсивность скачка, и за ним начинает реализовываться сверхзвуковое течение. На поле течения черной сплошной линией показана звуковая линия, ограничивающая

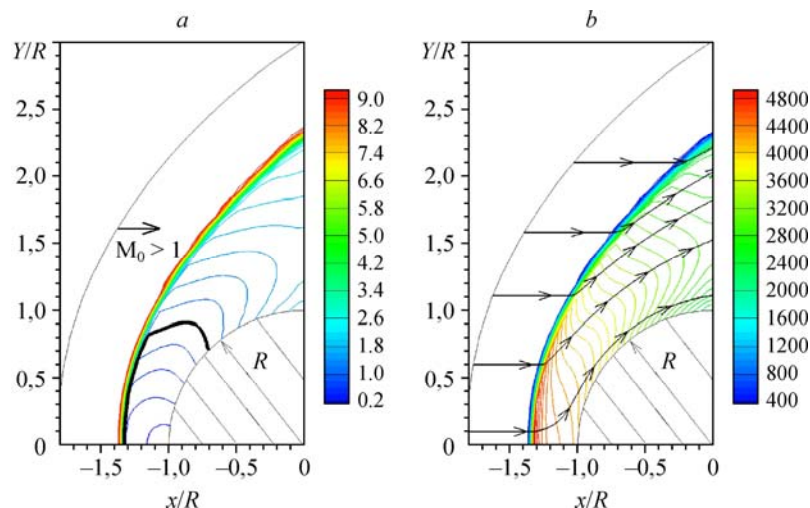


Рис. 4. Распределение числа Маха (a) и поступательной температуры газа (b).

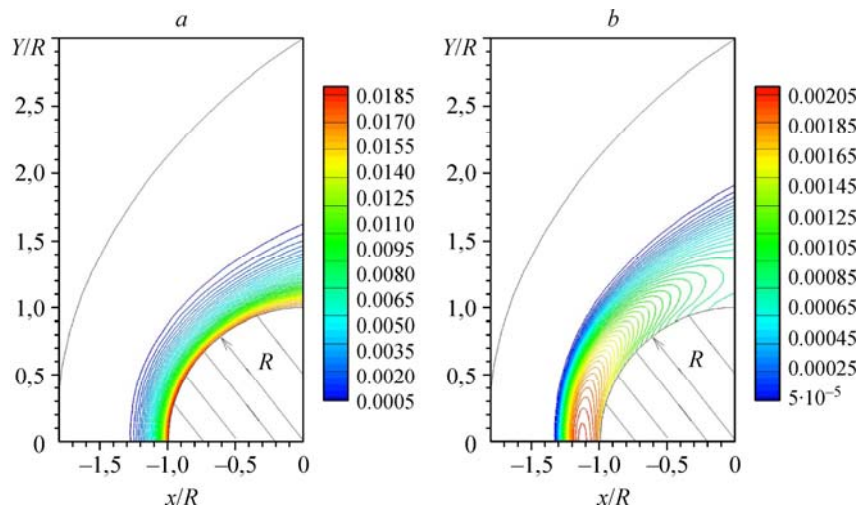


Рис. 5. Распределение массовых долей атомов (а) и молекул на десятом колебательном уровне (б).

дозвуковую область. На выходной (правой) границе реализуется сверхзвуковое течение, что подтверждает корректность экстраполяции всех переменных из расчетной области. На рис. 4б представлено поле поступательной температуры, где черными стрелками показаны линии тока. Сразу за головной ударной волной на плоскости симметрии наблюдается максимум поступательной температуры из-за наибольшей интенсивности скачка. Затем происходит уменьшение температуры, связанное с TV-переходами и диссоциацией. При отдалении от плоскости симметрии происходит уменьшение поступательной температуры вследствие уменьшения интенсивности скачка.

На рис. 5 показана массовая доля атомов и молекул на 10-м колебательном уровне. Хорошо видно, что происходит рост массовой доли атомов (рис. 5а) — от 0 в набегающем потоке до 0,0185 в области около цилиндра. Это связано с конечной скоростью диссоциации и TV-переходов. Заселенности ненулевых уровней меняются немонотонно: возрастают из-за TV-обменов и убывают вследствие диссоциации, как видно из рис. 5б. В результате задержки диссоциации максимум массовой доли атомарного компонента наблюдается только вблизи цилиндра.

В целом, можно отметить, что предложенный в настоящей работе численный инструментальный может быть использован для дальнейших численных исследований высокоэнтропийных течений газа на основе поуровневого описания.

Заключение

Предложен метод расчета неравновесных течений на основе поуровневого описания в программном пакете ANSYS Fluent, который базируется на включении пользовательского кода для расчета коэффициентов скоростей VT (TV)-переходов, диссоциации и дополнительного источников члена в уравнение сохранения поступательной энергии для корректного описания поуровневой кинетики.

Выполнена верификация предложенного численного инструментария. Для этого было рассчитано течение через скачок уплотнения и проведено сравнение полученных параметров с численным решением на основе авторского кода. Получено хорошее согласование численных данных. Проведена апробация предложенного численного инструментария на решение классической задачи об обтекании цилиндра. Представленные результаты позволяют сделать вывод, что рассмотренный численный инструментальный может быть использован в будущем для расчета более сложных задач — исследования вязких теплопроводных течений с новыми алгоритмами расчета коэффициентов переноса.

Проведено сравнение распределений колебательной температуры молекулярного кислорода за прямым скачком, полученных в расчетах и измеренных в эксперименте. Обнаружено хорошее совпадение максимумов колебательной температуры, за которым наблюдаются расхождения численных и экспериментальных данных. Такое различие связано с реализованными моделями энергообменов и диссоциации. Валидация различных моделей поуровневой кинетики посредством сравнения с экспериментальными данными будет проведена в дальнейшем для различных одно-, двух- и трехмерных течений с использованием предложенной и апробированной в этой статье методики.

Список литературы

1. Brun R. Introduction to reactive gas dynamics. Oxford University Press, 2009. 408 с.
2. Nagnibeda E., Kustova E. Nonequilibrium reacting gas flows. Kinetic theory of transport and relaxation processes. Springer, Berlin, 2009. 252 p.
3. Lordet F., Meolans J., Chauvin A., Brun R. Nonequilibrium vibration-dissociation phenomena behind a propagating shock wave: vibrational population calculation // Shock Waves. 1995. Vol. 4. P. 299–312.
4. Adamovich I., Macheret S., Rich J., Treanor C. Vibrational relaxation and dissociation behind shock waves // AIAA J. 1995. Vol. 33, No. 6. P. 1064–1075.
5. Kustova E., Nagnibeda E. The influence of the state-to-state distributions behind shock wave on the dissociation rates // Proc. of the 22nd Intern. Symp. on Shock Waves. 2000. Vol. 1. P. 783–788.
6. Kunova O., Kustova E., Mekhonoshina M., Nagnibeda E. Non-equilibrium kinetics, diffusion and heat transfer in shock heated flows of N_2/N and O_2/O Mixtures // Chemical Physics. 2015. Vol. 463. P. 70–81.
7. Shizgal B., Lordet F. Vibrational nonequilibrium in a supersonic expansion with reactions: Application to O_2-O // J. of Chemical Physics. 1996. Vol. 104, No. 10. P. 3579–3597.
8. Colonna G., Tuttafesta M., Capitelli M., Giordano D. Influence of $O_2(v)+N=NO+O$ on NO formation in one-dimensional air nozzle flow // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2000. Vol. 14, No. 3. P. 455–456.
9. Kustova E., Nagnibeda E., Alexandrova T., Chikhaoui A. On the non-equilibrium kinetics and heat transfer in nozzle flows // Chemical Physics. 2002. Vol. 276. P. 139–154.
10. Armenise I., Capitelli M., Gorse C. Nonequilibrium vibrational kinetics in the boundary layer of re-entering bodies // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 1996. Vol. 10, No. 3. P. 397–405.
11. Armenise I., Esposito F., Capitelli M. Dissociation-recombination models in hypersonic boundary layer // Chemical Physics. 2007. Vol. 336. P. 83–90.
12. Josyula E., Kustova E., Vedula P., Burt J.M. Influence of state-to-state transport coefficients on surface heat transfer in hypersonic flows // Proc. of the 52nd Aerospace Sci. Meeting. AIAA paper. 2014. No. 2014–0864.
13. Josyula E., Burt J.M., Kustova E., Vedula P., Mekhonoshina M. State-to-state kinetic modeling of dissociating and radiating hypersonic flows // Proc. of the 53rd AIAA Aerospace Sci. Meeting. AIAA paper. 2015. No. 2015–0475.
14. Kustova E., Nagnibeda E. Transport properties of a reacting gas mixture with strong vibrational and chemical nonequilibrium // Chemical Physics. 1998. Vol. 233. P. 57–75.
15. Kustova E., Kremer G. Chemical reaction rates and non-equilibrium pressure of reacting gas mixtures in the state-to-state approach // Chemical Physics. 2014. Vol. 445. P. 82–94.
16. Гунько Ю.П., Мажуль И.И. Численное моделирование обтекания системы из двух стреловидных клиньев сжатия при $M = 4$ и 6 // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 20, № 2. С. 181–196.
17. Гунько Ю.П., Мажуль И.И. Численное моделирование условий реализации режимов течения в сверхзвуковых осесимметричных конических воздухозаборниках внутреннего сжатия // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22, № 5. С. 567–580.
18. Кириловский С.В., Маслов А.А., Поплавская Т.В., Цырюльников И.С. Влияние колебательной релаксации на развитие возмущений в ударном слое на пластине // Журнал технической физики. 2015. Т. 85, вып. 5. С. 12–22.
19. Шоев Г.В., Бондарь Е.А., Облапенко Г.П., Кустова Е.В. Разработка и апробация методики численного моделирования термически неравновесных диссоциирующих течений в ANSYS Fluent // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23, № 2. С. 159–171.
20. Marrone P., Treanor C. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. P. 1215–1221.
21. Scanlon T.J., White C., Borg M.K., Palharini R.C., Farbar E., Boyd I.D., Brown R.E. Open-source direct simulation monte carlo chemistry modeling for hypersonic flows // AIAA J. 2015. Vol. 53, No. 6. P. 1670–1680.
22. Schwartz R., Slawsky Z., Herzfeld K. Calculation of vibrational relaxation times in gases // J. of Chemical Physics. 1952. Vol. 20. P. 1591–1599.
23. Chernyi G., Losev S., Macheret S., Potapkin B. Physical and chemical processes in gas dynamics. Vol. 1. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2002. 311 p.

24. **Ibraguimova L.B., Sergievskaya A.L., Levashov V.Y., Shatalov O.P., Tunik Y.V., Zabelinskii I.E.** Investigation of oxygen dissociation and vibrational relaxation at temperatures 4000–10800 K // *J. of Chemical Physics*. 2013. Vol. 139. P. 034317-1–034317-10.
25. **Liou M.S., Steffen Jr. C.J.** A new flux splitting scheme // *J. of Computational Physics*. 1993. Vol. 107, Iss. 1. P. 23–39.
26. **Kustova E., Nagnibeda E., Oblapenko G., Savelev A., Sharafutdinov I.** Advanced models for vibrational–chemical coupling in multi-temperature flows // *Chemical Physics*. 2016. Vol. 464. P. 1–13.
27. **Wysong I., Gimelshein S., Bondar Ye., Ivanov M.** Comparison of direct simulation Monte Carlo chemistry and vibrational models applied to oxygen shock measurements // *Physics of Fluids*. 2014. Vol. 26. P. 043101-1–043101-15.

Статья поступила в редакцию 12 января 2016 г.