

УДК 533
DOI: 10.15372/PMTF202215211

РЕАЛИЗАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ЭНЕРГООБМЕНА МЕЖДУ МОДАМИ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ ГАЗА

Г. В. Шоев

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Россия
E-mail: shoev@itam.nsc.ru

Обсуждается реализация модели Кандлера колебательно-колебательного энергообмена между двухатомными молекулами при их неупругом столкновении. На примере взаимодействия кислорода O_2 и азота N_2 проанализированы метод простой итерации, метод Ньютона, метод деления отрезка пополам и приближенная формула для расчета равновесной колебательной температуры, необходимой в модели Кандлера. Для проведения расчетов рекомендован метод Ньютона или деления отрезка пополам. Тестирование модели колебательно-колебательного энергообмена проводилось на примере нульмерной колебательной релаксации, течения вблизи цилиндра и течения в клиновидном сопле. Показано, что колебательно-колебательный энергообмен оказывает влияние на распределение колебательных температур.

Ключевые слова: многотемпературный подход, неравновесное течение, колебательно-колебательный энергообмен

Введение. При нагреве смеси газов начинают происходить различные процессы, такие как вращательная и колебательная релаксация, возбуждение электронных состояний, химические реакции, радиационное излучение и т. д. [1]. Эти процессы оказывают значительное влияние на структуру потока и на его взаимодействие с поверхностью тела, поэтому их необходимо учитывать при компьютерном моделировании течений газа. Например, в работе [2] численно показано, что колебательное возбуждение газа может приводить к смещению положения ламинарно-турбулентного перехода (ЛТП) на 12–14 % вниз по потоку по сравнению со случаем отсутствия колебательного возбуждения. Вращательная релаксация может рассматриваться как быстрый процесс, если время, в течение которого она происходит, меньше, чем время колебательной релаксации. Согласно расчетам [3] время вращательной релаксации меньше времени колебательной релаксации при температурах, меньших 12 000 К. Следовательно, можно предположить, что в этом диапазоне вращательная и поступательная моды находятся в равновесии. Колебательная релаксация является более медленным процессом, т. е. время, за которое колебательная и поступательная моды достигают термического равновесия, может быть соизмеримо с характерным временем

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 22-19-00750). Численные расчеты проведены с использованием ресурсов вычислительного центра Новосибирского национального исследовательского государственного университета и Института теоретической и прикладной механики СО РАН.

рассматриваемого течения. Поэтому для увеличения точности численного моделирования учитывается конечная скорость колебательной релаксации.

В многотемпературных (модовых) моделях неравновесных течений [4] в зависимости от количества молекулярных компонентов смеси можно выделить два типа энергообмена: поступательно-колебательный и колебательно-колебательный. В случае поступательно-колебательного энергообмена энергия поступательной моды преобразуется в колебательную и наоборот, поэтому он может возникнуть при наличии в смеси даже одного молекулярного компонента. Колебательно-колебательный энергообмен (vv -обмен) происходит между различными колебательными модами молекулярных компонентов смеси.

Настоящая работа посвящена программной реализации модели колебательно-колебательного энергообмена, предложенной Г. Кандлером [5], и исследованию влияния vv -обмена на структуру потока вблизи цилиндра и в плоской струе, истекающей из клиновидного сопла.

1. Модель Кандлера колебательно-колебательного энергообмена. В смеси с произвольным количеством молекулярных компонентов скорость колебательно-колебательного энергообмена ($\text{Вт}/\text{м}^3$) компонента s можно вычислить по формуле Кандлера [5]

$$\omega_s^{vv} = \sum_{s \neq r}^N \omega_{sr}^{vv} = \sum_{s \neq r}^N P_{sr} Z_{sr} (\varepsilon_{vs}(T'_{vsr}) - \varepsilon_{vs}(T_{vs})), \quad (1)$$

где верхний индекс “ vv ” указывает на тип энергообмена (колебательно-колебательный), нижний индекс “ v ” — на принадлежность к колебательной моде; индексы s и r указывают, какие молекулы сталкиваются; N — общее число молекул с колебательной модой; P_{sr} — вероятность передачи колебательной энергии от молекулы s молекуле r ; Z_{sr} — число столкновений пары s и r в единицу времени и единицу объема, $1/(\text{с} \cdot \text{м}^3)$; ε_v — колебательная энергия молекулы, Дж/частица; T'_{vsr} — равновесная колебательная температура пары молекул s и r ; T_{vs} — текущая колебательная температура компонента s (в общем случае неравновесная). К ограничениям модели можно отнести использование гармонического осциллятора.

Из формулы (1) следует, что основной задачей, не уменьшающей общности постановки, является определение скорости энергообмена ω_{sr}^{vv} между парой s и r . Для расчета ω_{sr}^{vv} необходимо найти температуру T'_{vsr} из решения уравнения

$$\varepsilon_{vs}(T_{vs}) + \varepsilon_{vr}(T_{vr}) = \varepsilon_{vs}(T'_{vsr}) + \varepsilon_{vr}(T'_{vsr}). \quad (2)$$

Согласно (2) текущая неравновесная колебательная энергия обеих молекул должна быть равна некоторой равновесной колебательной энергии при T'_{vsr} . Из уравнения (2) также следует, что при колебательно-колебательном энергообмене суммарная колебательная энергия всех колебательных мод строго сохраняется (дефект энергии колебательного перехода не учитывается). В общем случае решение уравнения (2) невозможно представить в аналитическом виде.

2. Метод расчета скорости колебательно-колебательного обмена в смеси N_2 – O_2 . Рассмотрим метод расчета скорости ω_s^{vv} с использованием численного решения уравнения (2) для модели гармонического осциллятора на примере пары молекул N_2 и O_2 . Вероятность передачи колебательной энергии от молекулы s молекуле r будем считать функцией поступательной температуры, аппроксимирующей экспериментальные данные [6, 7]:

$$P_{\text{N}_2-\text{O}_2} = 3 \cdot 10^{-6} \left(\frac{T}{1000} \right)^{2,87}.$$

Число столкновений Z_{sr} пары s и r в единицу времени и единицу объема может быть рассчитано по формуле [8]

$$Z_{sr} = n_s n_r d_{s-r}^2 \sqrt{8\pi k_B T / \mu_{s-r}},$$

где n_s, n_r — числовые плотности компонентов s и r , $1/\text{м}^3$; $d_{s-r} = (d_s + d_r)/2$; d_s, d_r — диаметры молекул s и r , м^2 ; k_B — постоянная Больцмана; T — поступательная температура; $\mu_{s-r} = \mu_s \mu_r / (\mu_s + \mu_r)$ — приведенная масса сталкивающихся частиц, кг .

Колебательная энергия $\varepsilon_v(T_v)$ рассчитывается по формуле гармонического осциллятора

$$\varepsilon_v(T_v) = \frac{k_B \theta_v}{e^{\theta_v/T_v} - 1} \quad (3)$$

(θ_v — колебательная характеристическая температура).

С учетом уравнения (3) уравнение (2) принимает вид

$$\varepsilon_{vs}(T_{vs}) + \varepsilon_{vr}(T_{vr}) - \left(\frac{k_B \theta_{vs}}{e^{\theta_{vs}/T'_{vsr}} - 1} + \frac{k_B \theta_{vr}}{e^{\theta_{vr}/T'_{vsr}} - 1} \right) = 0, \quad (4)$$

где $\varepsilon_{vs}(T_{vs}), \varepsilon_{vr}(T_{vr})$ — известные колебательные энергии пары s и r ; равновесная колебательная температура T'_{vsr} является неизвестным параметром.

В настоящей работе уравнение (4) решается численно с использованием метода деления отрезка пополам, метода простой итерации, метода Ньютона. При использовании метода Ньютона необходимо знать производную целевой функции, представляющую собой теплоемкость колебательной моды с противоположным знаком при постоянном объеме. Эту теплоемкость находим в виде

$$c_v = \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial T_v} = k_B \frac{\theta_v}{T_v^2} \frac{e^{\theta_v/T_v}}{(e^{\theta_v/T_v} - 1)^2}.$$

Рассмотрим выражения для равновесной колебательной энергии пары s и r

$$f(T'_{vsr}) = \frac{k_B \theta_{vs}}{e^{\theta_{vs}/T'_{vsr}} - 1} + \frac{k_B \theta_{vr}}{e^{\theta_{vr}/T'_{vsr}} - 1}$$

и для суммы колебательных теплоемкостей этих компонентов $f'(T'_{vsr}) = c_{vs} + c_{vr}$, полагая $s = \text{N}_2, r = \text{O}_2$. На рис. 1 видно, что функция f является монотонной, т. е. уравнение (4) имеет один корень. При использовании метода Ньютона производная f' не должна обращаться в нуль, поскольку f' является суммой теплоемкостей колебательных мод (которые не должны обращаться в нуль согласно физическому смыслу). На рис. 1 видно, что f' стремится к нулю при малых значениях T'_{vsr} , которые в приложениях, по-видимому, не встречаются.

В большинстве течений, встречающихся на практике, колебательные температуры в несколько раз превышают характеристические колебательные температуры. Поэтому можно предположить, что экспоненты в знаменателях уравнения (4) раскладываются в ряд до линейного члена, если считать $T_{vi} \gg \theta_{vi}$, а уравнение (4) сводится к линейному уравнению. В результате равновесную колебательную температуру можно вычислить по формуле

$$T'_{vsr} = \frac{\varepsilon_{vs}(T_{vs}) + \varepsilon_{vr}(T_{vr})}{2k_B}. \quad (5)$$

Однако это приближение справедливо только в диапазоне очень больших колебательных температур, в котором молекулы существовать, по-видимому, не могут.

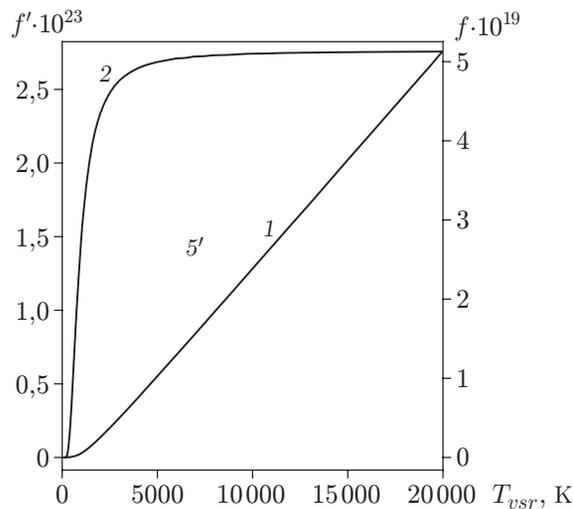


Рис. 1. Распределения равновесной колебательной энергии f (1) и суммы колебательных теплоемкостей f' (2) для пары азот ($s = \text{N}_2$) — кислород ($r = \text{O}_2$)

Результаты расчетов $\omega_{\text{N}_2\text{O}_2}^{vv}$ с использованием различных численных методов для нахождения равновесной колебательной температуры

Метод	T'_{vsr}	$(\varepsilon_{vs}(T_{vs}) + \varepsilon_{vr}(T_{vr})) \cdot 10^{19}$	$f(T'_{vsr}) \cdot 10^{19}$	$\omega_{\text{N}_2\text{O}_2}^{vv} \cdot 10^{-3}$	n
Простой итерации	7997,24	1,84	1,84	-4,81	25 159
Ньютона	7997,18	1,84	1,84	-4,81	2
Деления отрезка пополам	7997,19	1,84	1,84	-4,81	15
Формула (5)	6666,26	1,84	1,47	-11,10	—

Результаты расчетов $\omega_{\text{N}_2\text{O}_2}^{vv}$, выполненных с помощью специального кода на языке Си++ и различных методов при $T = 10\,000$ К, $n_{\text{N}_2} = 10^{20}$ 1/м³, $n_{\text{O}_2} = 10^{21}$ 1/м³, $T_{v\text{N}_2} = 9000$ К, $T_{v\text{O}_2} = 7000$ К, представлены в таблице (n — число итераций). Из таблицы следует, что метод простой итерации требует большого количества итераций для нахождения решения. Метод Ньютона требует наименьшего числа итераций, обеспечивая высокую точность результата. Метод деления отрезка пополам требует сравнительно небольшого числа итераций, сохраняя высокую точность. Расчет с использованием приближенной формулы (5) является наиболее быстрым и неточным способом расчета $\omega_{\text{N}_2\text{O}_2}^{vv}$. Для применения на практике можно рекомендовать методы Ньютона и деления отрезка пополам.

3. Основные уравнения и численные методы. Представленный метод расчета источника члена ω_s^{vv} реализован в программном комплексе HyCFS (hybrid compressible flow solver) [9] с использованием метода Ньютона и метода деления отрезка пополам для нахождения равновесной колебательной температуры. Комплекс HyCFS разработан в Институте теоретической и прикладной механики СО РАН и предназначен для численного решения уравнений Навье — Стокса — Фурье. Для тестирования реализованной модели колебательно-колебательного энергообмена решается задача нульмерной колебательной релаксации, рассчитываются параметры течения вблизи цилиндра и течения в клиновидном сопле. Во всех трех задачах рассматривается смесь $\text{N}_2\text{—O}_2$ в отсутствие химических

реакций. Соответствующие уравнения в рамках многотемпературной модели можно представить в виде

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_\alpha - \mathbf{F}_{v\alpha}}{\partial x_\alpha} = \mathbf{S}, \quad \alpha = z, x. \quad (6)$$

Выражения для консервативных переменных \mathbf{Q} , невязких потоков \mathbf{F}_α , источниковых членов \mathbf{S} и вязких потоков $\mathbf{F}_{v\alpha}$ записываются следующим образом:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho Y_{\text{O}_2} \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E_{t-r} \\ \rho Y_{\text{O}_2} E_v^{\text{O}_2} \\ \rho Y_{\text{N}_2} E_v^{\text{N}_2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_\alpha = \begin{pmatrix} \rho u_\alpha \\ \rho Y_{\text{O}_2} u_\alpha \\ \rho \mathbf{u} u_\alpha + p \mathbf{e}_\alpha \\ (\rho E_{t-r} + p) u_\alpha \\ \rho Y_{\text{O}_2} E_v^{\text{O}_2} u_\alpha \\ \rho Y_{\text{N}_2} E_v^{\text{N}_2} u_\alpha \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\omega_{\text{O}_2}^{vt} - \omega_{\text{N}_2}^{vt} \\ \omega_{\text{O}_2}^{vt} + \omega_{\text{O}_2}^{vv} \\ \omega_{\text{N}_2}^{vt} + \omega_{\text{N}_2}^{vv} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_{vz} = (0, J_z^{\text{O}_2}, \tau_{zx}, \tau_{xz}, \beta_z, \Gamma_z^{\text{O}_2}, \Gamma_z^{\text{N}_2})^\top, \quad \beta_z = w\tau_{zz} + u\tau_{zx} - q_z - \sum_{l=\text{O}_2, \text{N}_2} J_z^l h^l,$$

$$\mathbf{F}_{vx} = (0, J_x^{\text{O}_2}, \tau_{xz}, \tau_{zx}, \beta_x, \Gamma_x^{\text{O}_2}, \Gamma_x^{\text{N}_2})^\top, \quad \beta_x = w\tau_{xz} + u\tau_{zx} - q_x - \sum_{l=\text{O}_2, \text{N}_2} J_x^l h^l,$$

$$\Gamma_\alpha^l = \mu_l \frac{\partial E_v^l}{\partial x_\alpha} + J_{x_\alpha}^l E_v^l, \quad \alpha = z, x, \quad l = \text{O}_2, \text{N}_2.$$

Здесь ρ — плотность смеси; Y_{O_2} , Y_{N_2} — массовые доли кислорода и азота; $\mathbf{u} = (w, u)$ — вектор скорости; $E_{t-r} = C_v^{t-r} T$ — поступательно-вращательная энергия; C_v^{t-r} — поступательно-вращательная теплоемкость газа при постоянном объеме; $E_v^{\text{O}_2}$, $E_v^{\text{N}_2}$ — колебательные энергии кислорода и азота, приходящиеся на единицу массы; p — давление; \mathbf{e}_α — единичные векторы в направлениях z , x ; $\omega_{\text{O}_2}^{vt}$, $\omega_{\text{N}_2}^{vt}$ — скорости поступательно-колебательного обмена, вычисляемые по формуле Ландау — Теллера [10]; t — время релаксации, вычисленное по формуле Милликена — Уайта [11] с учетом высокотемпературной поправки Парка [12]; колебательные энергии рассчитываются по модели гармонического осциллятора, источниковые члены $\omega_{\text{O}_2}^{vv}$, $\omega_{\text{N}_2}^{vv}$ — по формуле (1); диффузионный поток J_α^l ($l = \text{O}_2, \text{N}_2$, $\alpha = z, x$) вычисляется согласно закону Фика; $\tau_{\alpha\beta}$ — компоненты тензора вязких напряжений; q_α — компоненты вектора теплового потока согласно закону Фурье; h^l — энтальпия; μ_l — динамическая вязкость. Заметим, что форма компонент квазивектора $\mathbf{F}_{v\alpha}$ оказывает косвенное влияние на скорость колебательно-колебательного обмена, поэтому в настоящей работе несущественна. В силу этого используется грубое приближение для теплового потока колебательной энергии $\mu_l \partial E_v^l / \partial x_\alpha$, код для расчета которого верифицирован и протестирован. В дальнейшем для применения в расчетах будут реализованы более точные модели.

Для замыкания системы уравнений (6) использовалось уравнение состояния идеального газа.

Уравнения (6) решаются численно. Интегрирование по времени выполняется с помощью явной схемы Рунге — Кутты второго порядка. Невязкие потоки вычисляются с использованием приближенного риманова солвера HLLE (harten Lax-van Leer Einfeldt). Реконструкция на грани контрольного объема выполняется с помощью стандартной схемы MUSCL (monotonic upstream-centered scheme for conservation laws) — формулы ван

Леера второго порядка с применением ограничителя наклона minmod для расчета течения вблизи цилиндра и первого порядка для расчета течения в клиновидном сопле. Вязкие потоки вычисляются с помощью центральных разностей второго порядка.

4. Нульмерная колебательная релаксация в смеси $\text{N}_2\text{--O}_2$. Расчет нульмерной колебательной релаксации выполняется следующим образом. В начальный момент времени задаются разные значения поступательной и колебательной температур, которые релаксируют к некоторому равновесному значению. В задаче все пространственные производные считаются равными нулю, т. е. при численном решении уравнений (6) полагается, что $\mathbf{F}_\alpha = 0$, $\mathbf{F}_{v\alpha} = 0$.

Рассмотрим два случая при различных начальных условиях, соответствующих течению за ударной волной, когда поступательная температура больше, чем колебательные температуры, и течению в сопле, когда колебательные температуры больше (замораживаются) поступательной температуры. В первом случае плотность и массовая доля кислорода задавались равными $\rho = 3,593 \cdot 10^{-7}$ кг/с, $Y_{\text{O}_2} = 0,5$, а температуры в начальный момент времени — $T_0 = 10\,000$ К, $T_{v,\text{O}_2} = T_{v,\text{N}_2} = 300$ К; во втором случае $\rho = 7,185\,98 \cdot 10^{-7}$ кг/с, $Y_{\text{O}_2} = 0,5$, $T_0 = 5000$ К, $T_{v,\text{O}_2} = 9000$ К, $T_{v,\text{N}_2} = 12\,000$ К.

Результаты расчетов для первого и второго случаев представлены на рис. 2. Кривые 1–3 соответствуют результатам расчетов в отсутствие колебательно-колебательного энергообмена при $\omega_{\text{O}_2}^{vv} = \omega_{\text{N}_2}^{vv} = 0$ в источниковом члене \mathbf{S} . На рис. 2 видно, что в обоих случаях первым релаксирует кислород, а релаксация азота происходит значительно позднее. Кривыми 4–6 показаны результаты расчетов при наличии колебательно-колебательного энергообмена. Разность температур, полученных в расчетах с использованием метода Ньютона и метода деления отрезка пополам, составила менее 0,01 К, что не влияет на конечные распределения температур. Отметим два результата: 1) метод простой итера-

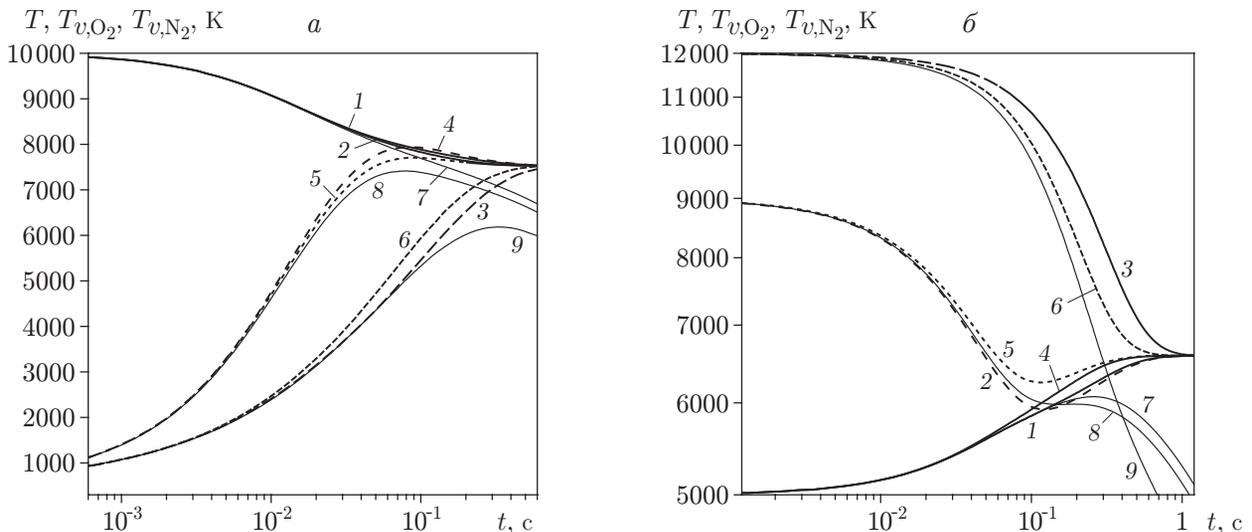


Рис. 2. Зависимости поступательно-вращательной и колебательной температур от времени, полученные с помощью различных методов при следующих значениях параметров, заданных в начальный момент времени:

a — $\rho = 3,593 \cdot 10^{-7}$ кг/с, $Y_{\text{O}_2} = 0,5$, $T_0 = 10\,000$ К, $T_{v,\text{O}_2} = T_{v,\text{N}_2} = 300$ К, b — $\rho = 7,185\,98 \cdot 10^{-7}$ кг/с, $Y_{\text{O}_2} = 0,5$, $T_0 = 5000$ К, $T_{v,\text{O}_2} = 9000$ К, $T_{v,\text{N}_2} = 12\,000$ К; 1–3 — в отсутствие vv -обмена (1 — T , 2 — T_{v,O_2} , 3 — T_{v,N_2}), 4–9 — при наличии vv -обмена: 4–6 — с использованием метода Ньютона (4 — T , 5 — T_{v,O_2} , 6 — T_{v,N_2}), 7–9 — с использованием формулы (5) (7 — T , 8 — T_{v,O_2} , 9 — T_{v,N_2})

ции также дает достаточно точные результаты, однако требует значительно большего времени для вычислений; 2) использование формулы (5) приводит к неправильной релаксации. Из данных, приведенных в таблице, следует, что значения $\omega_{N_2O_2}^{vv}$, полученные с использованием приближенной формулы (5) и с использованием других методов, значительно различаются. Вследствие этого в задаче о нульмерной релаксации не достигается равновесное состояние (кривые 7–9 на рис. 2) при расчете поступательно-вращательной и колебательных температур. Поэтому использование такого приближения на практике нецелесообразно.

Учет колебательно-колебательного энергообмена между N_2 и O_2 позволяет уменьшить время колебательной релаксации, при этом значение равновесной температуры совпадает со значением равновесной температуры, рассчитанной для релаксации с $\omega_{O_2}^{vv} = \omega_{N_2}^{vv} = 0$. Также на рис. 2 видно, что в результате энергообмена между колебательными модами N_2 и O_2 разность значений соответствующих колебательных температур уменьшается.

5. Колебательно-колебательный обмен в потоке N_2 – O_2 вблизи цилиндра.

Для моделирования течения вблизи цилиндра уравнения (6) решались численно в расчетной области, показанной на рис. 3. На входной границе 1–2 задавались параметры набегающего потока: $w_\infty = 2760,0$ м/с, $u_\infty = 0$, $T_\infty = T_{v,O_2} = T_{v,N_2} = 219,692$ К, $p = 3,54986$ Па, $Y_{O_2} = 0,21$. На выходных границах 1–3 и 2–4 задавался снос всех газодинамических параметров из расчетной области (так называемый сверхзвуковой выход). Граница 3–4 является стенкой цилиндра, на которой используется граничное условие прилипания с постоянной температурой 300 К и нулевым диффузионным потоком (некаталитическая стенка). В расчетной области строилась структурированная сетка, состоящая из четырехугольных ячеек. Вдоль поверхности цилиндра использовалась 641 ячейка, по нормали к цилиндру — 240 ячеек со сгущением к поверхности цилиндра. Высота первой ячейки над поверхностью цилиндра составляет $3,4 \cdot 10^{-5}$ м. На рис. 3 показаны также изолинии температуры и линии тока вблизи цилиндра, полученные в расчете с учетом колебательно-колебательного энергообмена.

На рис. 4 приведены расчетные распределения температур вдоль линии торможения с учетом и без учета vv -обмена. Видно, что энергообмен между колебательными модами кислорода и азота не приводит к изменению положения головной ударной волны, однако наблюдается перераспределение колебательных температур O_2 и N_2 . В частности, максимальная колебательная температура O_2 уменьшилась с $T_{v,O_2} \approx 3700$ К до $T_{v,O_2} \approx 3500$ К, а максимальная колебательная температура N_2 увеличилась с $T_{v,N_2} \approx 1700$ К до $T_{v,N_2} \approx 1950$ К. Это объясняется тем, что горячая колебательная мода O_2 нагревает холодную колебательную моду N_2 , в результате при учете vv -обмена температуры этих мод становятся близки. После изменения распределений колебательных температур вследствие изменения разности энергий поступательно-вращательной и колебательных мод скорость vt -обмена также изменяется. В результате наблюдается незначительное изменение распределения поступательно-вращательной температуры.

6. Колебательно-колебательный обмен в потоке N_2 – O_2 в клиновидном сопле. Для расчета течения смеси N_2 – O_2 в клиновидном сопле использовалась геометрия, показанная на рис. 5. Высота входной границы 1–2 составляет 4,5 см, полувисота критического сечения — 1,5 см, полувисота выходного сечения — 15 см, величина полуугла клиновидного сопла — 7° . На входной границе 1–2 задаются давление торможения $P_{stag}^{1-2} = 20000$ Па, температура торможения $T_{stag}^{1-2} = 7000$ К, колебательные температуры $T_{v,O_2}^{1-2} = T_{v,N_2}^{1-2} = 7000$ К, массовая доля кислорода $Y_{O_2}^{1-2} = 0,21$. Граница 2–3 является невязкой стенкой, т. е. считается адиабатной, на которой задано условие непротекания. На границе 3–4 происходит выход сверхзвукового потока и снос всех параметров потока из расчетной области. Граница 4–1 является плоскостью симметрии. В расчетной обла-

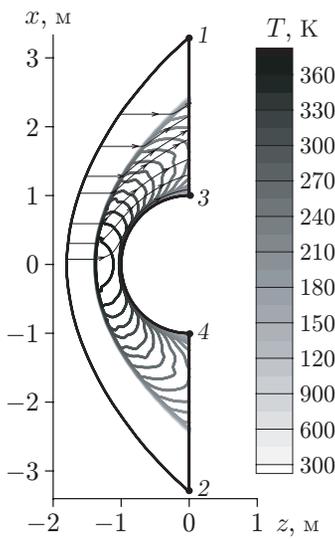


Рис. 3

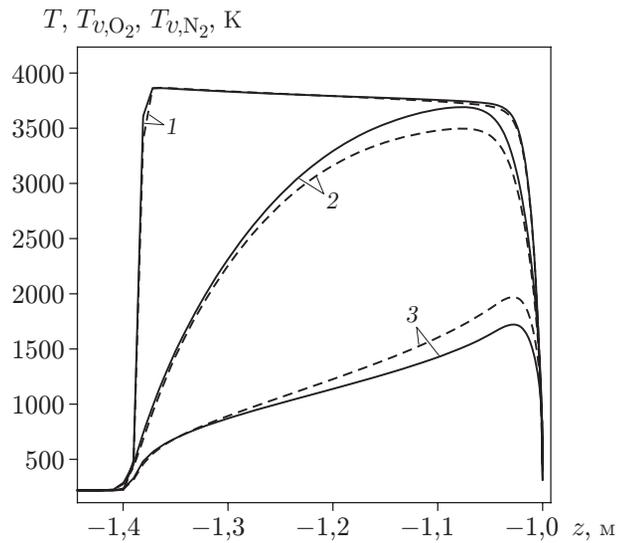


Рис. 4

Рис. 3. Расчетная область течения смеси N_2-O_2 , изолинии температуры и линии тока вблизи цилиндра в расчете с учетом колебательно-колебательного энергообмена при $w_\infty = 2760,0$ м/с, $T_\infty = T_{v,O_2} = T_{v,N_2} = 219,692$ К, $p = 3,54986$ Па, $Y_{O_2} = 0,21$:

1-2 — входная граница с набегающим потоком, 1-3, 2-4 — сверхзвуковой выход, 3-4 — стенка цилиндра

Рис. 4. Распределения поступательно-вращательной и колебательных температур вдоль линии торможения при наличии (сплошные линии) и в отсутствие (штриховые линии) колебательно-колебательного энергообмена:

1 — T , 2 — T_{v,O_2} , 3 — T_{v,N_2}

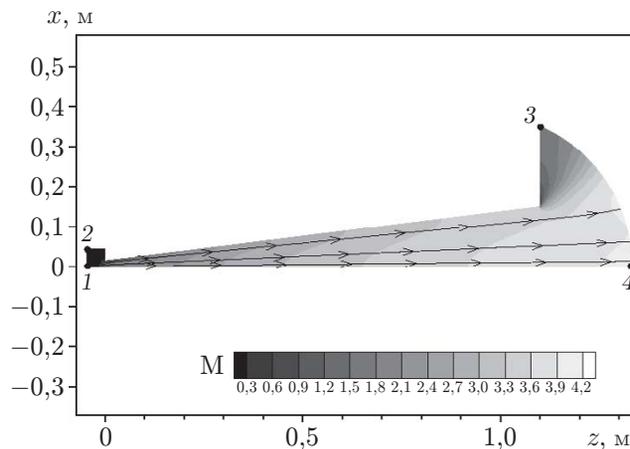


Рис. 5. Расчетная область течения смеси N_2-O_2 в клиновидном сопле, поле числа Маха и линии тока в случае учета колебательно-колебательного энергообмена при $P_{stag}^{1-2} = 20\,000$ Па, $T_{stag}^{1-2} = 7000$ К, $T_{v,O_2}^{1-2} = T_{v,N_2}^{1-2} = 7000$ К, $Y_{O_2}^{1-2} = 0,21$

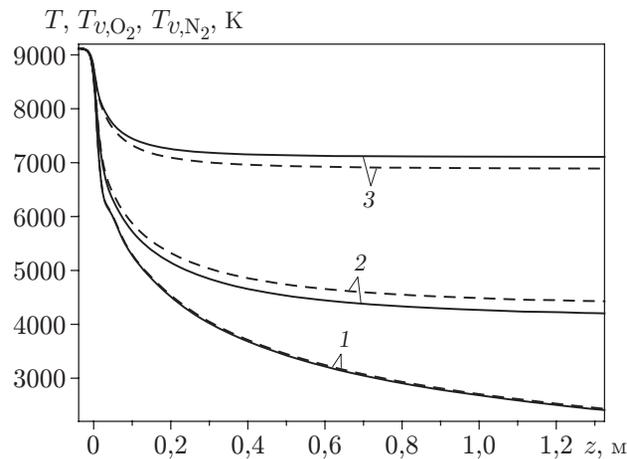


Рис. 6. Распределения поступательно-вращательной и колебательных температур вдоль плоскости симметрии с учетом (штриховые линии) и без учета (сплошные линии) колебательно-колебательного энергообмена:

1 — T , 2 — T_{v,O_2} , 3 — T_{v,N_2}

сти используется структурированная сетка, состоящая из четырехугольников. По нормали к стенке сетка состоит из 100 ячеек без сгущения, вдоль стенки — из 350 ячеек. Поле числа Маха, полученное в расчетах с учетом vv -обмена, также показано на рис. 5. Видно, что в расширяющемся сопле число Маха изменяется от 1,0 до 3,9.

На рис. 6 показаны распределения поступательно-вращательной температуры и колебательных температур N_2 и O_2 вдоль плоскости симметрии, полученные в расчетах с учетом и без учета vv -обмена. Видно, что в случае без учета vv -обмена колебательная температура N_2 не меняется начиная со значения $z \approx 0,3$ м, а колебательная температура O_2 фактически не выходит на постоянное значение. При этом на всем протяжении клиновидного сопла поступательно-вращательная температура уменьшается. В случае учета vv -обмена распределения колебательных температур N_2 и O_2 перестают меняться начиная со значения $z \approx 1,1$ м. В результате vv -обмена разность колебательных температур N_2 и O_2 уменьшается по сравнению со случаем без учета vv -обмена. Разность значений колебательной температуры в сечении $z = 1,2$ м не превышает 300 К как для N_2 , так и для O_2 . Изменение распределения колебательных температур привело к незначительному изменению распределения поступательно-вращательной температуры (соответствующие распределения практически совпадают).

Заключение. В работе представлена реализация модели Кандлера для расчета скорости колебательно-колебательного энергообмена между двухатомными молекулами, в которой используется равновесная колебательная температура сталкивающихся молекулярных компонентов. Для расчета равновесной колебательной температуры необходимо численно решить уравнение баланса колебательной энергии сталкивающихся молекул. Показано, что использование метода Ньютона позволяет находить равновесную колебательную температуру за наименьшее количество итераций по сравнению с методами простой итерации и деления отрезка пополам. Также показано, что использовать приближенное аналитическое решение уравнения баланса энергии (через разложение экспонент в ряд Тейлора) нецелесообразно.

На примере решения задачи нульмерной колебательной релаксации течения вблизи цилиндра и потока в клиновидном сопле смеси N_2 – O_2 показано, что vv -обмен оказывает незначительное влияние на распределение колебательных температур. В нульмерной

колебательной релаксации равновесная температура достигается быстрее при учете vv -обмена. В потоке вблизи цилиндра и в клиновидном сопле разность значений колебательных температур N_2 и O_2 уменьшается, однако остальные параметры течения практически не меняются.

Автор выражает благодарность А. А. Шершневу за техническую поддержку при реализации модели vv -обмена в NuCFS.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Физико-химические** процессы в газовой динамике: Компьютеризир. справ.: В 3 т. Т. 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме / Под ред. Г. Г. Черного, С. А. Лосева. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1995.
2. **Григорьев Ю. Н., Ершов И. В.** Влияние колебательного возбуждения газа на положение зоны ламинарно-турбулентного перехода на пластине // ПМТФ. 2021. Т. 62, № 1. С. 14–21. DOI: 10.15372/PMTF20210102.
3. **Park C.** Rotational relaxation of N_2 behind a strong shock wave // J. Thermophys. Heat Transfer. 2004. V. 18, N 4. P. 527–533. DOI: 10.2514/1.11442.
4. **Nagnibeda E.** Non-equilibrium reacting gas flows / E. Nagnibeda, E. Kustova. Berlin; Heidelberg: Springer, 2009. DOI: 10.1007/978-3-642-01390-4.
5. **Candler G. V., MacCormack R. W.** Computation of weakly ionized hypersonic flows in thermochemical nonequilibrium // J. Thermophys. Heat Transfer. 1991. V. 5, N 3. P. 266–273. DOI: 10.2514/3.260.
6. **Park C., Lee S.-H.** Validation of multitemperature nozzle flow code // J. Thermophys. Heat Transfer. 1995. V. 9, N 1. P. 9–16. DOI: 10.2514/3.622.
7. **Nishida M., Matsumoto M.** Thermochemical nonequilibrium in rapidly expanding flows of high-temperature air // Z. Naturforsch. Ser. A. 1997. Bd 52, N 4. S. 358–368. DOI: 10.1515/zn-1997-0411.
8. **Vincenti W. G.** Introduction to physical gas dynamics / W. G. Vincenti, C. H. Kruger (Jr). Malabar: Krieger Publ. Co, 1965.
9. **Kudryavtsev A. N., Kashkovsky A. V., Borisov S. P., Shershnev A. A.** A numerical code for the simulation of non-equilibrium chemically reacting flows on hybrid CPU-GPU clusters // AIP Conf. Proc. 2017. V. 1893. 030054. DOI: 10.1063/1.5007512.
10. **Ландау Л., Теллер Э.** К теории дисперсии звука // Phys. Z. Sowjet. 1936. Bd 10. S. 34–43.
11. **Millikan R. C., White D. R.** Systematics of vibrational relaxation // J. Chem. Phys. 1963. V. 39, N 12. P. 3209–3213. DOI: 10.1063/1.1734182.
12. **Park C.** Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics. N. Y.: J. Wiley and Sons, 1990.

*Поступила в редакцию 27/IX 2022 г.,
после доработки — 18/XI 2022 г.
Принята к публикации 28/XI 2022 г.*