

УДК 533  
DOI: 10.15372/PMTF202215186

## ВАЛИДАЦИЯ ДВУХТЕМПЕРАТУРНЫХ МОДЕЛЕЙ ДИССОЦИАЦИИ КИСЛОРОДА В ЗАДАЧЕ ОТРАЖЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ ОТ СТЕНКИ

Г. В. Шоев, А. А. Шершнев

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

Проведено сравнение численных распределений колебательной температуры молекулярного кислорода за отраженной ударной волной с данными экспериментальных измерений в ударной трубе. Расчеты проводились с использованием пяти двухтемпературных моделей (Парка, Кузнецова,  $\beta$ -модели, Мэрроуна — Тринора, Мачерета — Фридмана), соответственно пяти констант диссоциации и трех вариантов источникового члена, описывающего скорость изменения колебательной энергии вследствие химических реакций. Для расчета скорости поступательно-колебательного энергообмена используется модель Ландау — Теллера, при этом время колебательной релаксации вычисляется по формуле Милликена — Уайта с учетом высокотемпературной поправки Парка. Получено удовлетворительное согласие численных и экспериментальных данных. Установлено, что наибольшее различие численных и экспериментальных данных наблюдается в зоне релаксации за падающей на стенку ударной волной.

**Ключевые слова:** двухтемпературная диссоциация, многотемпературный подход, численное моделирование, неравновесное течение

**Введение.** В настоящее время компьютерное моделирование является одним из важнейших этапов проектирования новой и оптимизации существующей техники. Компьютерное моделирование течений газа средствами вычислительной гидродинамики широко применяется для исследования структуры потока вблизи возвращаемых капсул, потока внутри сопел двигателей управления и ориентации. В таких течениях перед спускаемым аппаратом формируется сильная головная ударная волна (УВ), температура за которой значительно (до десятков тысяч градусов) увеличивается. При таких больших значениях температуры в потоке происходят различные физические и химические процессы, в частности возбуждение внутренних мод молекул, химические реакции, излучение и поглощение, абляция на поверхности и др. Наиболее низкопороговыми по температуре являются процессы возбуждения колебательных (внутренних) мод молекул и химические реакции. Эти процессы могут протекать в условиях, реализующихся в ударных трубах в ходе экспериментальных исследований [1, 2] при валидации математических моделей. В настоящее время повышению степени достоверности результатов компьютерного моделирования,

---

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

т. е. валидации математических моделей, уделяется большое внимание [3–5]. Результаты численных исследований [6] свидетельствуют о существенном влиянии колебательного возбуждения газа на положение области ламинарно-турбулентного перехода (на 12–14 % ниже по потоку, чем в совершенном газе), что подтверждает важность учета этих эффектов в компьютерном моделировании.

Целью настоящей работы является валидация двухтемпературных моделей диссоциации, реализованных в программном комплексе HyCFS (hybrid compressible flow solver) [7], путем сравнения численных и экспериментальных [1] распределений колебательной температуры за отраженной от стенки УВ. В программном комплексе HyCFS численно решаются уравнения Навье — Стокса для двухтемпературной модели, описывающей течение химически реагирующей смеси газов с неравновесным поступательно-колебательным энергообменом.

**1. Уравнения Навье — Стокса для двухтемпературной модели.** Рассматривается процесс отражения УВ от изотермической стенки для бинарной смеси  $O_2-O$  с учетом химических реакций и неравновесного поступательно-колебательного энергообмена. Предполагается, что поступательная и вращательная моды находятся в термическом равновесии. Задача решается в одномерной постановке. Соответствующие уравнения Навье — Стокса для двухтемпературной модели могут быть записаны в виде

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial x} = \mathbf{S}. \quad (1)$$

Выражения для макроскопических (газо- и термодинамических) переменных  $\mathbf{Q}$ , невязких  $\mathbf{F}$  и вязких  $\mathbf{F}_v$  потоков записываются следующим образом:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho Y_O \\ \rho u \\ \rho E_{t-r} \\ \rho Y_{O_2} E_v^{O_2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho Y_O u \\ \rho u u + p \\ (\rho E_{t-r} + p)u \\ \rho Y_{O_2} E_v^{O_2} u \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ -\rho D_O \frac{\partial Y_O}{\partial x} \\ \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{4}{3} \mu u \frac{\partial u}{\partial x} - \kappa_{t-r} \frac{\partial}{\partial x} T_{t-r} + \sum_{l=O, O_2} \rho D_l h_l \frac{\partial Y_l}{\partial x} \\ \mu_{O_2} \frac{\partial}{\partial x} E_v^{O_2} - \rho D_{O_2} E_v^{O_2} \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x} \end{pmatrix}.$$

Здесь  $\rho$  — плотность смеси  $O_2-O$ ;  $Y_O$ ,  $Y_{O_2}$  — массовые доли атомарного и молекулярного кислорода соответственно;  $u$  — скорость потока;  $E_{t-r} = C_v^{t-r} T_{t-r} + u^2/2$  — поступательно-вращательная энергия газа;  $C_v^{t-r}$  — поступательно-вращательная теплоемкость газа при постоянном объеме;  $T_{t-r}$  — поступательная (статическая) температура;  $E_v^{O_2}$  — колебательная энергия компонента  $O_2$ ;  $p$  — статическое давление;  $D_O$ ,  $D_{O_2}$  — коэффициенты диффузии атомарного и молекулярного кислорода;  $\mu$  — динамическая вязкость смеси;  $\kappa_{t-r}$  — поступательно-вращательная теплопроводность;  $h_l$  — энтальпия компонента  $l$  ( $l \in \{O_2, O\}$ );  $\mu_{O_2}$  — динамическая вязкость  $O_2$ .

Источниковые члены  $\mathbf{S}$  записываются в виде

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ R_{\text{O}} \\ 0 \\ -\frac{h_{\text{O}}^0}{W_{\text{O}}} R_{\text{O}} - \omega_{\text{O}_2}^{\text{vib}} - \omega_{\text{O}_2}^{\text{chem}} \\ \omega_{\text{O}_2}^{\text{vib}} + \omega_{\text{O}_2}^{\text{chem}} \end{pmatrix},$$

где  $R_l$  — скорости изменения компонентов смеси  $\text{O}_2$  и  $\text{O}$  вследствие химических реакций ( $l \in \{\text{O}_2, \text{O}\}$ );  $h_{\text{O}}^0$ ,  $W_{\text{O}}$  — стандартная энтальпия образования и молекулярная масса атомарного кислорода  $\text{O}$ ;  $\omega_{\text{O}_2}^{\text{vib}}$  — скорость поступательно-колебательного энергообмена;  $\omega_{\text{O}_2}^{\text{chem}}$  — скорость изменения колебательной энергии вследствие химических реакций.

Система уравнений (1) замыкается уравнением состояния идеального газа с учетом закона Дальтона:

$$p = \sum_{l=\text{O}_2, \text{O}} p_l = \rho R T_{t-r}, \quad R = \sum_{l=\text{O}_2, \text{O}} Y_l \frac{\mathcal{R}}{W_l}$$

( $\mathcal{R}$  — универсальная газовая постоянная).

Коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси рассчитываются по правилу Уилки [8]

$$\xi = \sum_{i=\text{O}_2, \text{O}} \frac{x_i \xi_i}{\sum_{j=\text{O}_2, \text{O}} x_j \phi_{ij}}, \quad \phi_{ij} = \frac{(1 + \sqrt{(\mu_i/\mu_j) \sqrt{W_j/W_i}})^2}{\sqrt{8(1 + W_i/W_j)}},$$

где  $\xi$  — коэффициент динамической вязкости  $\mu$  или теплопроводности смеси  $\varkappa_{t-r}$ ;  $x_i$  — мольная доля компонента  $i$ . Вязкость и теплопроводность компонентов смеси рассчитывались по формуле Гиршфельдера и Эйкена с поправкой Гиршфельдера [9]:

$$\mu_i = 2,67 \cdot 10^{-6} \frac{(W_i T_{t-r})^{0,5}}{\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}}, \quad \Omega_i^{(2,2)*} = 1,157 T_{t-r,i}^{-0,1472}, \quad T_i = \frac{k_{\text{B}} T_{t-r}}{\varepsilon_i},$$

$$\varkappa_i = \frac{15}{4} \frac{\mathcal{R}}{W_i} \mu_i \left( \frac{4}{15} \frac{\mathcal{R}}{W_i} C_{p,i}^{t-r} + \frac{1}{3} \right),$$

где  $k_{\text{B}}$  — постоянная Больцмана;  $W_i$  — молекулярная масса компонента  $i$  ( $i \in \{\text{O}_2, \text{O}\}$ );  $C_{p,i}^{t-r}$  — теплоемкость поступательно-вращательной моды при постоянном давлении. Для значений параметров, рассматриваемых в настоящей работе, динамическая вязкость изменялась в диапазоне от значения  $\mu \approx 2,2 \cdot 10^{-5}$  Па·с вблизи стенки и перед падающей УВ до  $\mu \approx 1,7 \cdot 10^{-4}$  Па·с за отраженной УВ. Коэффициенты диффузии рассчитывались по формуле [9]

$$D_i = \frac{1 - x_i}{\sum_{i \neq j} \frac{x_i}{D_{ij}}},$$

где

$$D_{ij} = 0,00188 \frac{\sqrt{T_{t-r}^3(1/W_i + 1/W_j)}}{P\sigma_{ij}^2\Omega_{ij}^{(1,1)*}}, \quad \sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j), \quad T_{ij} = \frac{k_B T_{t-r}}{\varepsilon_{ij}},$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad \Omega_{ij}^{(1,1)*} = 1,047 T_{ij}^{-0,1604},$$

$P$  — давление, атм. В расчетах использовались следующие значения:  $\sigma_{O_2} = 3,458 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_O = 2,75 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon_{O_2}/k_B = 107,4 \text{ К}$ ,  $\varepsilon_O/k_B = 80 \text{ К}$ .

Предполагается, что в смеси происходят две реакции диссоциации и две реакции рекомбинации:  $O_2 + M \leftrightarrow O + O + M$  ( $M \in \{O_2, O\}$ ). Скорости этих химических реакций рассчитываются по соотношениям

$$R_l = W_l \sum_{r=1}^2 (\nu'_{l,r} - \nu''_{l,r})(k_{f,r} C_{O_2} C_M - k_{b,r} C_O C_O C_M), \quad l \in \{O_2, O\}, \quad (2)$$

где суммирование проводится по реакциям (индекс  $r$  соответствует номеру химической реакции);  $\nu'_{l,r}$ ,  $\nu''_{l,r}$  — стехиометрические коэффициенты реагентов и продуктов химической реакции  $r$ ;  $k_{f,r}$  — двухтемпературная константа скорости диссоциации;  $k_{b,r}$  — константа скорости рекомбинации;  $C_l$  — молярная концентрация компонента  $l$ . Для расчета двухтемпературной константы скорости диссоциации использовалось пять моделей: модель Парка [10], модель Кузнецова [11, 12],  $\beta$ -модель Лосева [13, 12], модель Мэрроуна — Тринора [14] с параметром  $U$ , модифицированным в [15], модель Мачерета — Фридмана [16].

Двухтемпературную константу скорости диссоциации  $k_{f,r}$  в уравнении (2) можно представить в виде

$$k_{f,r}(T_{t-r}, T_v) = Z_r(T_{t-r}, T_v) k_{f,r}^0(T), \quad k_{f,r}^0(T) = A_r T_{t-r}^b \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T_{t-r}}\right),$$

где  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  — фактор неравновесности;  $T_v$  — колебательная температура компонента  $O_2$ ;  $A_r$ ,  $b$  — коэффициенты в законе Аррениуса, взятые из [2]. Заметим, что для реакции  $O_2 + O \rightarrow 3O$  в [2] константа скорости реакции представлена не в аррениусовой форме, поэтому в настоящей работе использовалась аппроксимация этой константы из [3].

Для двухтемпературной модели Парка [10] фактор неравновесности  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  записывается следующим образом:

$$Z_r(T_{t-r}, T_v) = (T_{t-r}^{s-1} T_v^{1-s})^b \exp\left[-\frac{E_d}{k_B} \left(\frac{1}{T_{t-r}^s T_v^{1-s}} - \frac{1}{T_{t-r}}\right)\right].$$

Поскольку в настоящей работе  $s = 0,5$ , константа  $k_{f,r}(T_{t-r}, T_v)$  записывается в соответствии с законом Аррениуса, в котором эффективная температура равна среднему геометрическому поступательной (статической) и колебательной температур.

Для двухтемпературной модели Кузнецова [11, 12] фактор неравновесности  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  задается выражением

$$Z_r(T_{t-r}, T_v) = \frac{1 - \exp(-\theta_v/T_v)}{1 - \exp(-\theta_v/T_{t-r})} \exp\left[E_v^* \left(\frac{1}{T_{t-r}} - \frac{1}{T_v}\right)\right], \quad (3)$$

где  $\theta_v$  — характеристическая колебательная температура компонента  $O_2$ ;  $E_v^* = 0,7E_d/k_B$  — параметр модели.

Для двухтемпературной  $\beta$ -модели [12, 13] фактор неравновесности  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  записывается в соответствии с уравнением (3), а параметр  $E_v^*$  — в виде  $E_v^* = E_d/k_B - \beta T_{t-r}$  ( $\beta = 1,5$  согласно [12]).

Для модели Тринора — Маррона [12, 14] фактор неравновесности  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  задается выражением

$$Z_r(T_{t-r}, T_v) = \frac{Q(T_{t-r}) Q(T_f)}{Q(T_v) Q(-U)},$$

где

$$Q(T_m) = \frac{1 - \exp(-E_d/(T_m k_B))}{1 - \exp(-\theta_v/T_m)}, \quad T_f = \frac{1}{1/T_v - 1/T_{t-r} - 1/U},$$

параметр модели  $U$  вычисляется согласно [12, 15]:

$$U = \begin{cases} \frac{T_{t-r}(\alpha T_{t-r} + (1 - \alpha)T_v)}{(T_{t-r} - T_v)(1 - \alpha)}, & T_{t-r} \neq T_v, \\ -T_{t-r}, & T_{t-r} = T_v, \end{cases} \quad \alpha = \left( \frac{m_A}{m_A + m_M} \right)^2,$$

$m_A$  — масса атома в диссоциирующей молекуле;  $m_M$  — масса атома в налетающей частице.

Для двухтемпературной модели Мачерета — Фридмана [16] фактор неравновесности  $Z_r(T_{t-r}, T_v)$  находится из выражения

$$Z_r(T_{t-r}, T_v) = (1 - L) \frac{1 - \exp(-\theta_v/T_v)}{1 - \exp(-\theta_v/T_{t-r})} \exp \left[ -\frac{E_d}{k_B} \left( \frac{1}{T_v} - \frac{1}{T_{t-r}} \right) \right] + \\ + L \exp \left[ -\frac{E_d}{k_B} \left( \frac{1}{T_\alpha} - \frac{1}{T_{t-r}} \right) \right],$$

где  $\alpha$  определяется так же, как в модели Тринора — Маррона;  $T_\alpha = \alpha T_v + (1 - \alpha)T_{t-r}$ ; параметр  $L$  вычисляется в зависимости от того, какие частицы сталкиваются:

$$L = \begin{cases} \frac{9\sqrt{\pi(1-\alpha)} \left( \frac{k_B T_{t-r}}{E_d} \right)^{1-b} \left( 1 + \frac{5(1-\alpha)k_B T_{t-r}}{2E_d} \right), & \text{O}_2 + \text{O} \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}, \\ \frac{2(1-\alpha)}{\pi^2 \alpha^{3/4}} \left( \frac{k_B T_{t-r}}{E_d} \right)^{1,5-b} \left( 1 + \frac{7(1-\alpha)(1+\sqrt{\alpha})k_B T_{t-r}}{2E_d} \right), & \text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O} + \text{O}_2. \end{cases}$$

Константа скорости рекомбинации  $k_{b,r}$  в уравнении (2) вычисляется по формуле  $k_{b,r} = K_e(T)k_{f,r}(T_{t-r}, T_v)$ , константа равновесия  $K_e(T)$  определяется из выражения

$$K_e(T) = \frac{Z_{\text{O}_2}^t Z_{\text{O}_2}^{\text{int}}}{(Z_{\text{O}}^t Z_{\text{O}}^{\text{int}})^2} \exp \left( \frac{E_d}{k_B T_{t-r}} \right),$$

где  $Z_l^t = 2\pi m_l k_B T_{t-r} / h^2$  — поступательная статистическая сумма;  $h$  — постоянная Планка;  $Z_l^{\text{int}} = g_l Z_l^{\text{rot}} Z_l^v$  — внутренняя статистическая сумма;  $Z_l^{\text{rot}} = T_{t-r} / (\sigma \theta_{\text{rot}})$  — вращательная статистическая сумма;  $Z_{\text{O}_2}^v = \sum_{i=0}^{25} \exp \left( -\frac{i\theta_v}{T_{t-r}} \right)$  — колебательная статистическая

сумма для  $\text{O}_2$ . Для молекул кислорода характеристические вращательные и колебательные температуры равны  $\theta_{\text{rot}} = 2,06$  К,  $\theta_v = 2267,46$  К соответственно; фактор симметрии молекулы  $\sigma = 2$ , статистический вес основного электронного состояния  $g_{\text{O}_2} = 3$ . Для атомов кислорода, не обладающих вращательными и колебательными степенями свободы, выражение для внутренней статистической суммы упрощается:  $Z_{\text{O}}^{\text{int}} = g_{\text{O}} = 9$ .

Скорость колебательно-поступательного обмена  $\omega_{\text{O}_2}^{\text{vib}}$  находилась по формуле Ландау — Теллера [17]

$$\omega_{\text{O}_2}^{\text{vib}} = \frac{\rho_{\text{O}_2}(E_v^{\text{O}_2}(T_{t-r}) - E_v^{\text{O}_2}(T_v))}{\tau_{\text{O}_2}^{\text{VT}}}.$$

Время релаксации колебательно-поступательного (vibrational-translational (VT)) энергообмена  $\tau_{\text{O}_2}^{\text{VT}}$  рассчитывалось по формуле Милликена — Уайта (MW) [18] с учетом высокотемпературной поправки Парка  $\tau_{\text{O}_2}^{\text{P}}$  [10]:

$$\tau_{\text{O}_2}^{\text{VT}} = \sum_l \frac{x_l}{\tau_{\text{O}_2,l}^{\text{MW}}} + \tau_{\text{O}_2}^{\text{P}}, \quad \tau_{\text{O}_2,l}^{\text{MW}} = \frac{1}{P} \exp(A_{\text{O}_2,l} T_{t-r}^{-1/3} + B_{\text{O}_2,l}), \quad \tau_{\text{O}_2}^{\text{P}} = \frac{1}{n_{\text{O}_2} C \sigma}.$$

Здесь  $n_{\text{O}_2}$  — числовая плотность молекулярного кислорода  $\text{O}_2$ ; остальные параметры вычислялись по формулам

$$A_{\text{O}_2,l} = 1,16 \cdot 10^{-3} \sqrt{m_{\text{O}_2,l}} \theta_v^{4/3}, \quad B_{\text{O}_2,l} = -(1,74 \cdot 10^{-5} m_{\text{O}_2,l}^{3/4} \theta_v^{4/3} + 18,42),$$

$$m_{\text{O}_2,l} = \frac{W_{\text{O}_2} W_l}{W_{\text{O}_2} + W_l}, \quad C = \sqrt{\frac{8k_B T_{t-r}}{\pi \mu_{\text{O}_2}}}, \quad \mu_{\text{O}_2} = \frac{W_{\text{O}_2}}{N_A}, \quad \sigma = \frac{2,5 \cdot 10^{-12}}{T_{t-r}^2}$$

( $N_A$  — число Авогадро).

Колебательная энергия  $\text{O}_2$  рассчитывалась по модели гармонического осциллятора:

$$E_v^{\text{O}_2} = \frac{\theta_v \mathcal{R} / W_{\text{O}_2}}{\exp(\theta_v / T_v) - 1}.$$

Скорость изменения колебательной энергии вследствие химических реакций  $\omega_{\text{O}_2}^{\text{chem}}$  вычислялась по формуле

$$\omega_{\text{O}_2}^{\text{chem}} = C_{\text{dis}} \sum_{r=1}^2 (\nu'_{\text{O}_2,r} - \nu''_{\text{O}_2,r}) k_{f,r} C_{\text{O}_2} C_{\text{M}} - E_v^{\text{O}_2} \sum_{r=1}^2 (\nu'_{\text{O}_2,r} - \nu''_{\text{O}_2,r}) k_{b,r} C_{\text{O}} C_{\text{O}} C_{\text{M}}, \quad (4)$$

где  $C_{\text{dis}}$  — параметр, определяющий количество колебательной энергии, теряемой молекулой  $\text{O}_2$  при диссоциации. В настоящей работе рассматривались три случая:  $C_{\text{dis}} = 0,3E_d$ ,  $C_{\text{dis}} = 0,8E_d$  [19],  $C_{\text{dis}} = E_v^{\text{O}_2}$  [10, 20] ( $E_d$  — энергия диссоциации  $\text{O}_2$ ).

**2. Численные методы.** Система уравнений (1) решается численно в разработанном в Институте теоретической и прикладной механики СО РАН программном комплексе НуСFS, в котором используется конечно-объемный метод, при этом данные берутся в центре ячейки, когда контрольный объем совпадает с объемом ячеек. Комплекс НуСFS позволяет проводить расчеты на центральных и графических процессорных устройствах (ЦПУ и ГПУ), а также использовать их одновременно. При расчетах на нескольких ГПУ комплекс НуСFS использует многоуровневую параллелизацию. Расчетная область делится между всеми ГПУ таким образом, что каждое устройство проводит расчет только в своей области. За каждым ГПУ закрепляется центральный процессор. Передача данных между различными ГПУ осуществляется с помощью интерфейса передачи сообщений MPI между процессорами. Для расчетов только на ЦПУ расчетная область разбивается на подобласти, в которых вычисления выполняет ЦПУ. Передача данных происходит через MPI. Возможен также запуск задач на OpenMP. В настоящей работе все расчеты выполнены на одном ГПУ, поскольку при этом не требовалось больших вычислительных ресурсов.

Комплекс НуСFS использует структурированную одно- или многоблочную сетку, также возможен запуск задач на неструктурированной сетке (однако она совместима не со

всеми математическими моделями). Сетки обоих типов допускают сгущение к необходимым участкам расчетной области. В настоящей работе использовалась одноблочная сетка без сгущения, обеспечивающая необходимое пространственное разрешение.

В NuCFS реализованы различные математические модели описания течений газа, основанные на континуальном подходе: модель совершенного газа (без учета процесса возбуждения колебательных мод молекул и химических реакций), однотемпературная модель течения химически реагирующей смеси (возбуждение внутренних мод учитывается в зависимости теплоемкости от температуры, а скорости химических реакций вычисляются по закону Аррениуса). Очевидно, что эти две модели не позволяют точно описать рассматриваемое течение, поэтому выбрана многотемпературная модель, позволяющая описывать течение газа более детально.

Используемые в комплексе NuCFS численные схемы основаны на численных схемах, представленных в работе [21], а разработанный в этой работе код является основой вычислительной части NuCFS. Для реконструкции примитивных переменных на грани контрольного объема могут использоваться MUSCL-реконструкции первого, второго, третьего и четвертого порядков. В настоящее время реализован один ограничитель наклона *minmod*. Для расчета невязких потоков могут использоваться различные приближенные римановские солверы: *Roу*, гибридный *AUSM+van Leer*, *HLLC* или *HLLC*. Также возможно использование схем *WENO-5* пятого порядка. В настоящей работе для расчетов выбраны численные методы, наиболее близкие к традиционным численным методам, часто применяемым на практике.

Интегрирование по времени может быть выполнено с помощью различных схем. Явная схема Рунге — Кутты второго и третьего порядков может применяться для всех моделей. Для интегрирования уравнений, описывающих течение химически реагирующей смеси, можно использовать полунявную схему *ASIRK 2C* (химические источниковые члены и источниковые члены с межмодовым энергообменом считаются жесткими). Для совершенного газа может использоваться полностью неявная схема *DPLUR*. В настоящей работе выбрана известная схема Рунге — Кутты второго порядка, в рассматриваемом случае не требующая очень малого шага по времени.

Комплекс NuCFS позволяет использовать различные типы граничных условий: сверхзвуковой вход и выход, дозвуковой вход с определением давления и температуры торможения, дозвуковой выход, при котором задается статическое давление газа, изотермическая или адиабатическая некаталитическая стенка с условием прилипания или непротекания. В настоящей работе для моделирования потока за падающей УВ на левой границе используется граничное условие сверхзвукового входа, когда задаются все переменные на границе. Для моделирования стенки используется изотермическая некаталитическая стенка с условием прилипания. Предполагается, что процесс отражения УВ происходит достаточно быстро и стенка не успевает нагреться до высоких температур. Также предполагается, что режим течения за отраженной волной является континуальным, поэтому применяется условие прилипания. Кроме того, в NuCFS реализовано условие некаталитичности.

Интегрирование по времени проводилось с помощью явной схемы Рунге — Кутты второго порядка, при этом расщепление по физическим процессам или какие-либо дополнительные промежуточные итерации, отличающиеся от явной схемы Рунге — Кутты второго порядка, не использовались. Реконструкция примитивных переменных  $\rho$ ,  $\rho_0$ ,  $u$ ,  $p$ ,  $T_v$  на грани контрольного объема выполнялась с помощью стандартной процедуры MUSCL (*monotonic upstream-centered scheme for conservation laws*) и интерполяции второго порядка (при исследовании сходимости один расчет выполнен с интерполяцией третьего порядка). При реконструкции применяется ограничитель наклона *minmod* [22] для исключения нефизичных осцилляций численного решения. Потоки через грани контрольного

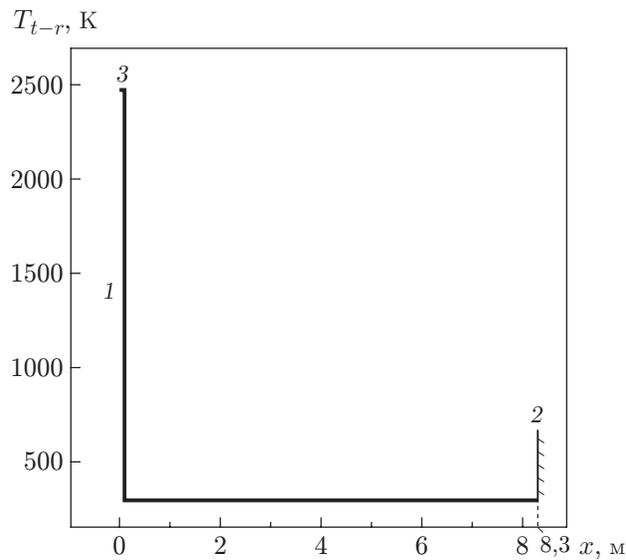


Рис. 1. Начальное распределение поступательной температуры  $T_{t-r}$ :  
 1 — область входа газа ( $x = 0$ ), 2 — стенка ( $x = 8,3$  м), 3 — разрыв в точке  $x = 0,1$  м

Начальные условия перед и за падающей УВ

Случай	$u_{ПВ}$ , м/с	$p_1$ , Па	$T_1$ , К	$Y_{O,1}$	$u_1$ , м/с	$p_2$ , Па	$T_2$ , К	$Y_{O,2} \cdot 10^2$	$u_2$ , м/с
100-8	2760	6,666	296	0	0	600,2	2472	8,74	2482
100-6	2510	9,332	296	0	0	685,3	2388	5,21	2215
100-1	2220	17,33	296	0	0	975,2	2245	1,92	1915

объема вычислялись с помощью приближенного римановского солвера HLLC (Harten-Lax-van Leer-contact) [23, 24]. Компоненты квазивектора вязких потоков  $\mathbf{F}_v$  являются первыми производными, которые вычисляются на грани контрольного объема с использованием центральной разности второго порядка.

**3. Процесс моделирования, начальные и граничные условия.** Рассматривается одномерная область длиной 8,3 м (рис. 1). В начальный момент времени задается кусочно-постоянное распределение параметров с разрывом в точке с координатой  $x = 0,1$  м. Слева от разрыва (при  $x < 0,1$  м) задаются равновесные параметры за падающей УВ, движущейся со скоростью  $u_{ПВ}$ , взятой из эксперимента [1]. На левой границе все задаваемые газодинамические параметры соответствуют условию равновесия за падающей УВ. Справа от разрыва (при  $x > 0,1$  м) задаются параметры перед падающей УВ, взятые из [1]. На правой границе задаются граничные условия прилипания для некаталитической изотермической стенки с температурой  $T_w = 300$  К (для поступательной (статической) и колебательной температур  $T_{t-r,w} = T_{v,w} = T_w$ ). Расчет начинается в момент времени  $t = 0$ . Далее падающая УВ отражается от правой стенки, отраженная УВ распространяется в противоположном направлении. В экспериментальной работе [1] представлены данные об изменении температуры  $T_v$  во времени на расстоянии 5 мм от стенки. Для сравнения с экспериментальными данными [1] в процессе расчета проводится запись значений  $T_v$  в центре ячейки, ближайшей к точке  $x = 8,295$  м. Расчет заканчивается после момента времени, для которого известно последнее экспериментальное значение колебательной температуры.

В работе рассмотрено три случая, соответствующих экспериментам [1]. В таблице представлены значения параметров перед падающей УВ (индекс 1) и параметров за падающей УВ (индекс 2). Эти параметры являются равновесными, т. е.  $T_{t-r,1} = T_{v,1} = T_1$ ,

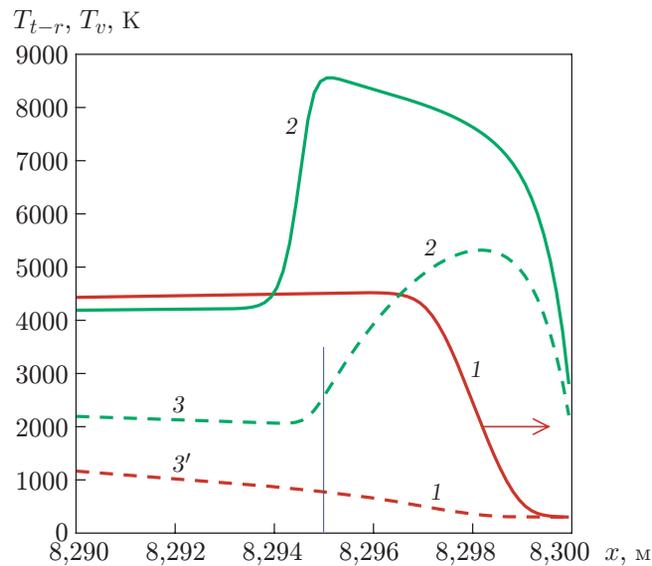


Рис. 2. Распределения поступательной (статической)  $T_{t-r}$  (сплошные линии) и колебательной  $T_v$  (штриховые линии) температур в падающей и отраженной УВ, полученные по модели Кузнецова при  $C_{dis} = 0,3E_d$  и числе ячеек 66 400: 1 — падающая УВ, 2 — отраженная УВ, 3, 3' — “хвост” падающей УВ до и после отражения соответственно; тонкая вертикальная линия — положение датчика; стрелка — направление движения падающей волны

$T_{t-r,2} = T_{v,2} = T_2$ . Обозначения случаев в таблице соответствуют обозначениям, принятым в [1].

**4. Результаты расчетов.** На рис. 2 показаны распределения поступательной (статической) и колебательной температур в падающей и отраженной УВ. Видно, что перед отражением падающей УВ от стенки ( $x = 8,3$  м), в точке  $x = 8,295$  м колебательная температура компонента  $O_2$  увеличилась до значений порядка 800 К. Также видно, что далее вниз по потоку (в направлении увеличения  $x$ ) температура  $T_v$  продолжает повышаться в “хвосте” падающей УВ. Отраженная от стенки УВ распространяется в направлении начала координат, и в точке  $x = 8,295$  м температура  $T_v$  продолжает увеличиваться. Когда отраженная волна проходит через точку  $x = 8,295$  м, скорость роста температуры  $T_v$  резко возрастает, что приводит к значительному изменению угла наклона кривой  $T_v$ .

На рис. 3 показана сходимость численного решения на последовательности измельчающихся сеток для случая 100-8 (см. таблицу) при использовании модели Кузнецова и значении параметра диссоциации  $C_{dis} = 0,3E_d$ . Во всех расчетах использовались равномерная сетка с числом ячеек от 8300 до 66 400 и MUSCL-реконструкция второго порядка (для сетки с числом ячеек 66 400 дополнительно выполнен расчет с MUSCL-реконструкцией третьего порядка).

На рис. 3,а видно, что при уменьшении размера ячеек пространственное распределение температур  $T_{t-r}$  и  $T_v$  фактически перестает изменяться, поэтому далее все расчеты проводились на сетке с числом ячеек 66 400 с использованием MUSCL-реконструкции второго порядка. На рис. 3,а также видно, что отраженная УВ распространяется по неравновесной части течения, оставшейся после падающей УВ (“хвост” падающей УВ). На стенке наблюдается пограничный слой толщиной более 5 мм, т. е. можно предположить, что вязкость и теплопроводность оказывают некоторое влияние на изменение колебательной температуры  $T_v$  во времени. Влияние вязкости в условиях рассматриваемого эксперимента, по-видимому, еще не исследовалось. В частности, в работе [25] моделирование проводилось

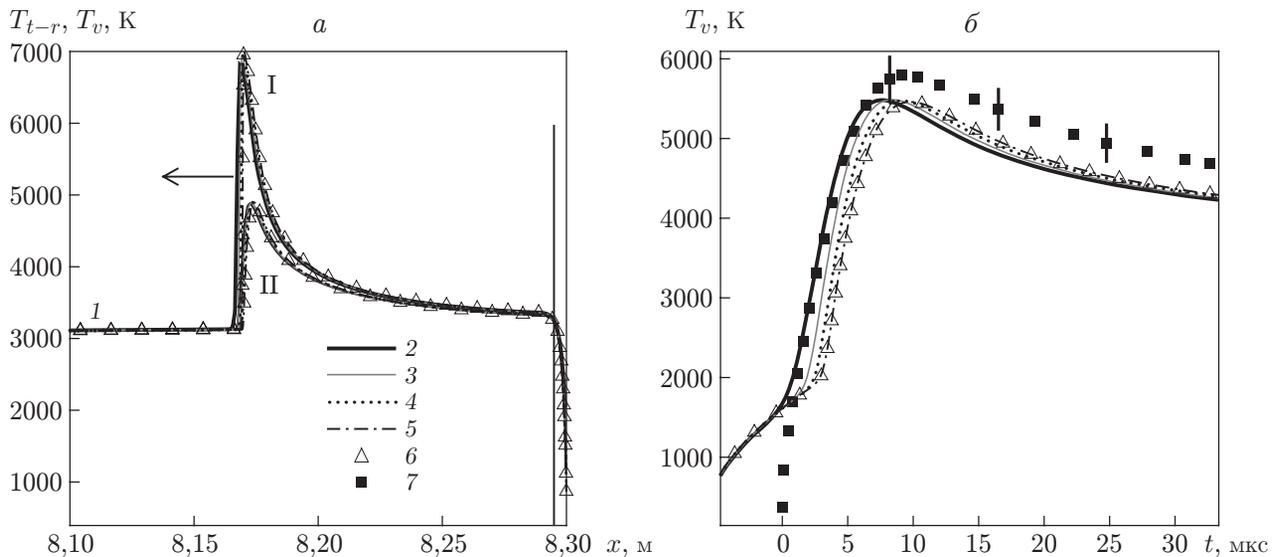


Рис. 3. Распределения поступательной (статической) температуры  $T_{t-r}$  (I) и колебательной температуры  $T_v$  (II) в момент времени  $t = 3,2$  мс (а) и зависимость колебательной температуры от времени в точке  $x = 8,295$  м (б), полученные по модели Кузнецова для случая 100-8 при  $C_{dis} = 0,3E_d$ , различном количестве ячеек в расчетной области или разном порядке MUSCL-реконструкции:

1-6 — расчет: 1-5 — с использованием MUSCL-реконструкции второго порядка (1 — “хвост” падающей УВ, 2 — сетка из 8300 ячеек, 3 — сетка из 16 600 ячеек, 4 — сетка из 33 200 ячеек, 5 — сетка из 66 400 ячеек), 6 — сетка из 66 400 ячеек с использованием MUSCL-реконструкции третьего порядка; 7 — эксперимент [1]; тонкая вертикальная линия — положение датчика ( $x = 8,295$  м); стрелка — направление отраженной волны

без учета вязкости, поэтому можно предположить, что влияние вязкости незначительно по сравнению с влиянием химических реакций.

На рис. 3,б показано изменение колебательной температуры  $T_v$  во времени в точке  $x = 8,295$  м для различных сеток. Все расчетные кривые сдвинуты на одинаковую величину времени таким образом, чтобы увеличение  $T_v$  в отраженной УВ совпадало с увеличением  $T_v$  в эксперименте. При этом расчетные кривые относительно друг друга сдвинуты менее чем на 5 мкс. Сдвиг между сетками с числом ячеек 33 200 и 66 400 составляет менее 1 мкс, что значительно меньше времени измерений ( $30 \div 50$  мкс). Сдвиг между расчетными кривыми обусловлен тем, что скорость отраженной волны зависит от разрешения сетки, а также тем, что изменение  $T_v$  во времени фиксируется в центрах ячеек, координаты которых различаются. В расчетах на всех сетках наблюдаются одинаковые увеличение колебательной температуры до максимального значения (пик) и последующее падение, поэтому дальнейшее измельчение сетки представляется нецелесообразным.

На рис. 4 представлены результаты расчетов изменения колебательной температуры  $T_v$  во времени с использованием различных моделей диссоциации, а также данные эксперимента [1]. Во всех случаях использовались значения параметра диссоциации  $C_{dis} = 0,3E_d$ ;  $E_v^{O_2}$ . Кривые сдвинуты таким образом, чтобы рост колебательной температуры в отраженной УВ совпадал с экспериментальной восходящей ветвью. При  $C_{dis} = E_v^{O_2}$  в целом результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. При низких температурах расчеты при всех значениях двухтемпературных констант скоростей диссоциации дают близкие результаты, но при увеличении температуры (случай 100-8) различия результатов моделирования увеличиваются. При  $C_{dis} = 0,3E_d$  различия

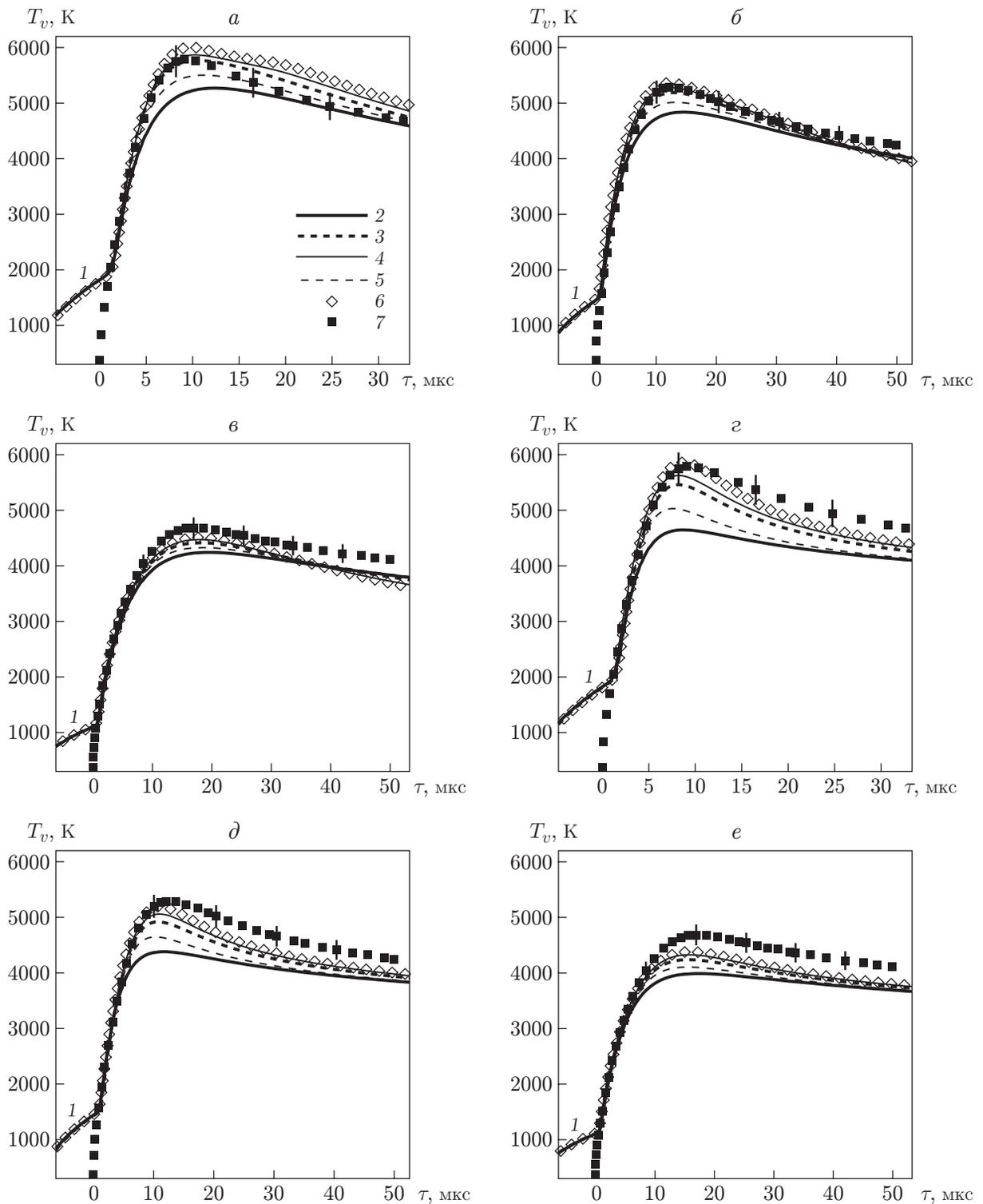


Рис. 4. Зависимость колебательной температуры  $T_v$  от времени в точке  $x = 8,295$  м для различных случаев при использовании различных двухтемпературных моделей и значений параметра диссоциации:

$a$ - $b$  —  $C_{dis} = E_v^{O_2}$ ,  $z$ - $e$  —  $C_{dis} = 0,3E_d$ ;  $a$ ,  $z$  — случай 100-8,  $b$ ,  $d$  — случай 100-6,  $в$ ,  $e$  — случай 100-1; 1-6 — расчет (1 — “хвост” падающей УВ, 2 — модель Парка, 3 — модель Кузнецова, 4 —  $\beta$ -модель, 5 — модель Мэрроуна — Тринора, 6 — модель Мачерета — Фридмана), 7 — экспериментальные данные [1]

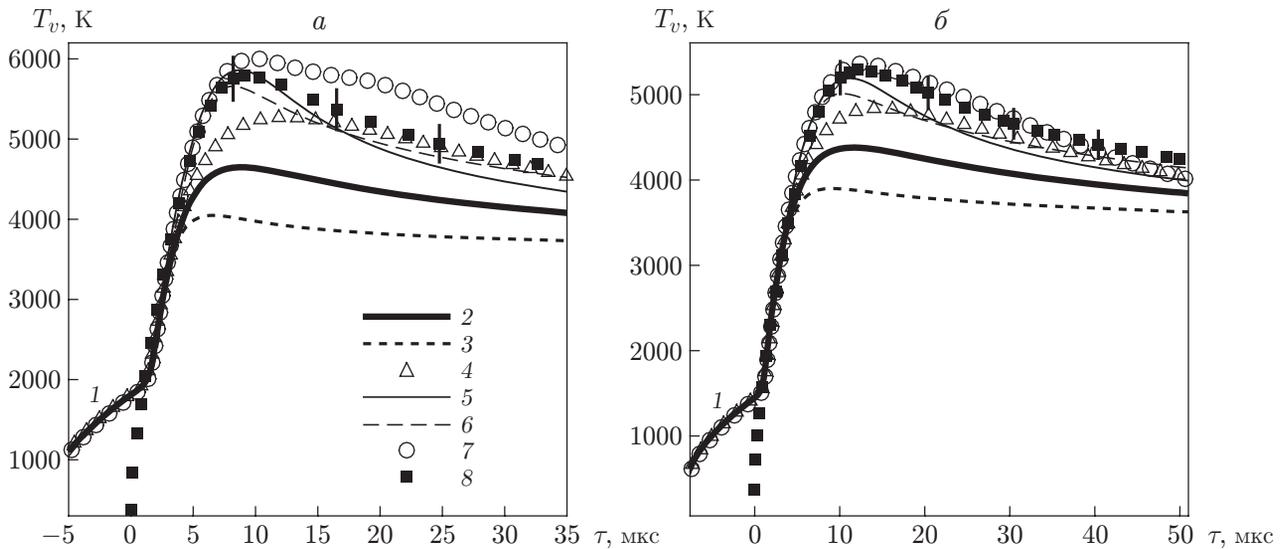


Рис. 5. Зависимость колебательной температуры  $T_v$  от времени в точке  $x = 8,295$  м для двух случаев при использовании различных моделей и значений параметра диссоциации:

$a$  — случай 100-8,  $b$  — случай 100-6; 1-7 — расчет (1 — “хвост” падающей УВ, 2 — модель Парка ( $C_{dis} = 0,3E_d$ ), 3 — модель Парка ( $C_{dis} = 0,8E_d$ ), 4 — модель Парка ( $C_{dis} = E_v^{O_2}$ ), 5 — модель Мачерета — Фридмана ( $C_{dis} = 0,3E_d$ ), 6 — модель Мачерета — Фридмана ( $C_{dis} = 0,8E_d$ ), 7 — модель Мачерета — Фридмана ( $C_{dis} = E_v^{O_2}$ )); 8 — экспериментальные данные [1]

результатов расчетов с использованием различных моделей увеличиваются по сравнению со случаем  $C_{dis} = E_v^{O_2}$ . При  $C_{dis} = 0,3E_d$  наиболее близкие к экспериментальным данным результаты получены при использовании модели Мачерета — Фридмана.

В отличие от численных расчетов в экспериментах не было “хвоста” падающей УВ, т. е. временного интервала  $\tau \approx -2 \div 0$  мкс. На рис. 4 видно, что ни одна из рассмотренных моделей даже качественно не описывает поведение экспериментальных данных для температуры  $T_v$  в диапазоне отрицательных значений  $\tau$ .

Для исследования влияния скорости изменения колебательной энергии вследствие химических реакций  $\omega_{O_2}^{chem}$  (уравнение (4)) на распределение во времени колебательной температуры были выбраны две модели — Парка и Мачерета — Фридмана — и три значения параметра диссоциации:  $C_{dis} = 0,3E_d$ ;  $0,8E_d$ ;  $E_v^{O_2}$  (рис. 5). В случае использования модели Парка при увеличении  $C_{dis}$  до  $0,8E_d$  численные и экспериментальные данные согласуются существенно хуже, при  $C_{dis} = E_v^{O_2}$  численные распределения значительно ближе к экспериментальным данным. В случае использования модели Мачерета — Фридмана увеличение  $C_{dis}$  до  $0,8E_d$  привело к занижению максимального значения колебательной температуры. Для случаев 100-8 и 100-6 использование  $C_{dis} = 0,8E_d$  приводит к большим значениям  $T_v$  на нисходящей ветви по сравнению со случаем  $C_{dis} = 0,3E_d$ . При  $C_{dis} = E_v^{O_2}$  значения колебательной температуры существенно завышаются по сравнению с экспериментальными данными в случае 100-8 и практически совпадают в случае 100-6.

Экспериментальные распределения  $T_v$  получены для расстояния 5 мм от стенки, т. е. практически на границе пограничного слоя и основного течения. В этой области возможно влияние вязкости и теплопроводности на распределение  $T_v$  во времени. Для оценки этого влияния на рис. 6 приведены численные решения уравнений Навье — Стокса (уравне-

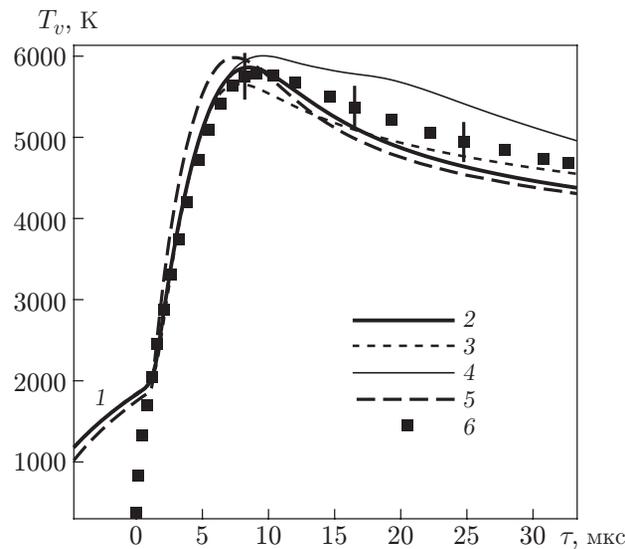


Рис. 6. Влияние вязкости, теплопроводности и диффузии на изменение колебательной температуры  $T_v$  во времени в точке  $x = 8,295$  м при использовании модели Мачерета — Фридмана и различных значений  $C_{dis}$ ,  $F_v$  в случае 100-8:

1–5 — расчет (1 — “хвост” падающей УВ, 2 —  $C_{dis} = 0,3E_d$ ,  $F_v \neq 0$ , 3 —  $C_{dis} = 0,8E_d$ ,  $F_v \neq 0$ , 4 —  $C_{dis} = E_v^{O_2}$ ,  $F_v \neq 0$ , 5 —  $C_{dis} = 0,3E_d$ ,  $F_v = 0$ ); 6 — экспериментальные данные [1]

ние (1)) и Эйлера (уравнение (1) при  $F_v = 0$ ). Видно, что на восходящей ветви в случае невязкого потока температура  $T_v$  увеличивается быстрее, чем в случае вязкого потока и в эксперименте. Однако на нисходящей ветви численные решения уравнений Эйлера и Навье — Стокса очень близки (кривые 2, 3, 5 на рис. 6). Такое поведение обусловлено тем, что на восходящей ветви УВ очень близка к стенке, и пики значений  $T_{t-r}$  и  $T_v$  находятся в пограничном слое на стенке, вследствие чего увеличиваются теплотери в стенку (см., например, кривые 2 на рис. 2). На нисходящей ветви максимальные значения  $T_{t-r}$  и  $T_v$  находятся вне пограничного слоя и удаляются от стенки, а температура на расстоянии 5 мм от стенки падает, что приводит к уменьшению теплотери в стенку (см., например, пики температур на рис. 3,а). Таким образом, вязкость оказывает большее влияние на восходящем участке распределения  $T_v$ , чем на нисходящем.

**Заключение.** В работе проведен сравнительный анализ численных и экспериментальных данных, результаты которого показывают, что двухтемпературные модели диссоциации кислорода способны адекватно прогнозировать отражение УВ от стенки. Форма источникового члена, описывающего скорость изменения колебательной энергии вследствие химических реакций  $\omega_{O_2}^{chem}$  (уравнение (4)), позволяет значительно изменить распределения колебательной температуры  $T_v$ . Фактически это свидетельствует о том, что при наличии в потоке химических реакций и неравновесного поступательно-колебательного энергообмена все источниковые члены должны быть согласованы между собой. Следующим этапом является построение и валидация согласованных математических моделей, одной из которых является модель Горбачева — Колесниченко [4].

Принципиальное различие численных и экспериментальных колебательных температур на начальном участке их роста наблюдается в области отрицательных значений времени  $\tau$  на рис. 4 для всех рассмотренных моделей диссоциации и вариантов источникового члена  $\omega_{O_2}^{chem}$ . Результаты проведенных расчетов позволяют сделать вывод, что различия на данном временном промежутке не связаны с химической кинетикой. Для дальнейше-

го анализа расхождения численных и экспериментальных колебательных температур на начальном участке роста необходимы дополнительные исследования. Также результаты сравнения численных и экспериментальных [1] данных показали, что использование программного комплекса NuCFS позволяет с удовлетворительной точностью рассчитывать распределение колебательной температуры в отраженной волне. Наибольшее расхождение рассчитанной колебательной температуры с экспериментальными данными наблюдается за падающей ударной волной. При  $C_{dis} = E_v^{O_2}$  практически все рассмотренные модели позволяют получить распределения, близкие к экспериментальным. При  $C_{dis} = 0,3E_d$  оптимальным решением для рассмотренного диапазона параметров представляется модель Мачерета — Фридмана. Варьирование источникового члена, описывающего скорость изменения колебательной энергии вследствие химических реакций, оказывает существенное влияние на профиль колебательной температуры.

Авторы выражают благодарность О. В. Куновой за плодотворную дискуссию и обсуждение рассмотренной задачи.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Streicher J. W., Krish A., Hanson R. K.** Coupled vibration-dissociation time-histories and rate measurements in shock-heated, nondilute O<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>-Ar mixtures from 6000 to 14000 K // *Phys. Fluids*. 2021. V. 33, N 5. DOI: 10.1063/5.0048059.
2. **Ibraguimova L. B., Sergievskaya A. L., Levashov V. Yu., et al.** Investigation of oxygen dissociation and vibrational relaxation at temperatures 4000–10800 K // *J. Chem. Phys.* 2013. V. 139, N 3. 034317. DOI: 10.1063/1.4813070.
3. **Wysong I., Gimelshein S., Bondar Ye., Ivanov M.** Comparison of direct simulation Monte Carlo chemistry and vibrational models applied to oxygen shock measurements // *Phys. Fluids*. 2014. V. 26, N 4. 043101. DOI: 10.1063/1.4871023.
4. **Gorbachev Yu., Kunova O., Shoev G.** A non-equilibrium dissociation and vibrational relaxation model for computational fluid dynamics simulations of flows with shock waves // *Phys. Fluids*. 2021. V. 33, N 12. 126105. DOI: 10.1063/5.0062628.
5. **Плотников М. Ю., Шкарупа Е. В.** Численная оценка констант гетерогенных реакций при течении разреженного газа через цилиндрический канал // *ПМТФ*. 2017. Т. 58, № 3. С. 30–38. DOI: 10.15372/PMTF20170304.
6. **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.
7. **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, iss. 1. 030054. DOI: 10.1063/1.5007512.
8. **Wilke C.** A viscosity equation for gas mixtures // *J. Chem. Phys.* 1950. V. 18, iss. 4. P. 517–519. DOI: 10.1063/1.1747673.
9. **Hirschfelder J. O.** *Molecular theory of gases and liquids* / J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird. N. Y.: Wiley, 1954.
10. **Park C.** *Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics*. N. Y.; Chichester; Brisbane; Toronto; Singapore: John Wiley and Sons, 1990.
11. **Кузнецов Н. М.** *Кинетика мономолекулярных реакций*. М.: Наука, 1982.
12. **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.

13. **Лосев С. А., Генералов Н. А.** К исследованию возбуждения колебаний и распада молекул кислорода при высоких температурах // Докл. АН СССР. 1961. Т. 141, № 5. С. 1072–1075.
14. **Marrone P., Treanor C.** Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. V. 6, N 9. P. 1215–1221.
15. **Лосев С. А., Сергиевская А. Л., Русанов В. Д. и др.** Фактор неравновесности в двух-температурной кинетике диссоциации за фронтом ударной волны // Докл. АН. 1996. Т. 346, № 2. С. 192–196.
16. **Macheret S., Fridman A., Adamovich I., et al.** Mechanisms of nonequilibrium dissociation of diatomic molecules. Williamsville, 1994. (Paper / AIAA; N 94-1984). DOI: 10.2514/6.1994-1984.
17. **Ландау Л., Теллер Э.** К теории дисперсии звука // Phys. Z. Sowjet. 1936. Bd 10. S. 34–43.
18. **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.
19. **Gnoffo P. A., Gupta R. N., Shinn J. L.** Conservation equations and physical models for hypersonic air flow in thermal and chemical non-equilibrium. S. l., 1989. (Paper / NASA; N 2867).
20. **Nagnibeda E.** Non-equilibrium reacting gas flows / E. Nagnibeda, E. Kustova. Berlin; Heidelberg: Springer, 2009.
21. **Кудрявцев А. Н.** Вычислительная аэродинамика сверхзвуковых течений с сильными ударными волнами: Дис. . . . д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, 2014.
22. **Yee H. C.** A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods: Tech. memorandum / NASA. N 101088. S. l., 1989.
23. **Toro E. F., Spruce M., Speares W.** Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver // Shock Waves. 1994. V. 4, N 1. P. 25–34. DOI: 10.1007/BF01414629.
24. **Batten P., Leschziner M. A., Goldberg U. C.** Average-state jacobians and implicit methods for compressible viscous and turbulent flows // J. Comput. Phys. 1997. V. 137, N 1. P. 38–78. DOI: 10.1006/jcph.1997.5793.
25. **Кравченко Д. С., Кустова Е. В., Мельник М. Ю.** Моделирование поуровневой кинетики кислорода за отраженными ударными волнами // Вестн. С.-Петерб. гос ун-та. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9, вып. 3. С. 426–439.

*Поступила в редакцию 4/VIII 2022 г.,  
после доработки — 24/X 2022 г.  
Принята к публикации 27/X 2022 г.*

---