

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ТЕРМИЧЕСКИ И ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНОГО ВОЗДУХА ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

А.И. Брызгалов

bryzgalov@ipmnet.ru

ИПМех РАН, Москва, Российская Федерация

Аннотация

На основе модели течения пятикомпонентной воздушной смеси за фронтом одномерной ударной волны проведен расчет потока с температурой на скачке до 7000 К с учетом переменного состава, поступательной и колебательной температуры и давления в релаксационной зоне. Заселенность колебательных уровней кислорода и азота подчиняется распределению Больцмана с одной общей колебательной температурой. Влияние температурной неравновесности на скорость протекания химических реакций учитывается введением фактора неравновесности при константе скорости реакции, который зависит от колебательной и поступательной температуры. Проведено сравнение расчета диссоциации за скачком с литературными данными при наличии температурной неравновесности в потоке чистого кислорода за ударной волной с двумя разными интенсивностями. Продемонстрировано хорошее совпадение колебательной температуры с экспериментом и расчетами, основанными на экспериментальных значениях колебательной температуры и мольно-массовых концентраций. Выполнен расчет термодинамически неравновесной диссоциации воздуха за ударной волной в сравнении с равновесной диссоциацией и расчетами, проведенными другими авторами. Показано постепенное сближение рассчитанных и полученных в литературе значений концентраций по мере удаления от скачка. Перечислены причины расхождения результатов расчета с имеющимися в литературе данными

Ключевые слова

Диссоциация, неравновесность, колебательная температура, ударная волна, релаксация

Поступила 04.08.2020

Принята 25.12.2020

© Автор(ы), 2021

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант РФФИ №19-31-90114)

Введение. Развитие современной аэрокосмической техники тесно связано с созданием теплозащитных покрытий для космических летательных аппаратов [1]. Теплостойкость материалов в основном изучается экспериментально. В ИПМех РАН такие исследования проводятся на двух уникальных научных установках (УНУ) — индукционных плазмотронах ВГУ-3 (1000 кВт) и ВГУ-4 (100 кВт), позволяющих проводить испытания на термостойкость с температурой в канале индуктора 10 000 и 8000 К [2]. Однако не все характеристики теплового воздействия поддаются прямым измерениям. Например, на плазмотронах нельзя непосредственно измерить такое важное свойство материала, как каталитичность [3], а измерение столь высоких значений температуры возможно только спектро-метрическими термометрами, которые имеют невысокую точность [4]. Поэтому с развитием вычислительной техники все более мощным инструментом, дополняющим эксперимент, становится математическое моделирование.

Одними из ключевых свойств потока, проявляющихся при исследованиях на плазмотроне при достаточно низких давлениях, являются химическая [5] и температурная неравновесность плазмы [6]. Характерное время температурной неравновесности обратно пропорционально давлению, поэтому в разреженных условиях оно может быть сравнимо со временем химических реакций. При разработке вычислительных моделей необходимо совместное решение уравнений химической кинетики и баланса колебательной части внутренней энергии. Простейшей задачей, которая может быть использована для верификации расчетного модуля, является нахождение характеристик потока за ударной волной с наличием температурной и химической неравновесности. В эксперименте такая задача возникает при исследовании обтеканий тел со сверхзвуковыми скоростями с наличием скачков уплотнения либо при использовании ударных труб. При температуре на фронте ударной волны до 7000 К (например, для условий полета с гиперзвуковой скоростью в верхних слоях атмосферы на высотах более 20 км) расчеты можно проводить без учета ионизации.

В настоящей работе приведены результаты верификационных расчетов, демонстрирующие адекватность работы вычислительного модуля, разрабатываемого для моделирования неравновесных течений газов применительно к плазмотронам ВГУ-3 и ВГУ-4 ИПМех РАН.

Цель работы — отработка численных моделей кинетики при наличии температурной неравновесности. Рассмотрено одномерное течение, характеристики которого находятся из законов сохранения, представленных в эволюционной форме для лагранжевой частицы за фронтом

ударной волны, что позволяет проводить расчеты, не используя численное решение уравнений Эйлера.

Математическая модель. Воздух — пятикомпонентная смесь газов N_2 , O_2 , NO , N , O , наблюдающаяся до температуры 7000 К, пока не начнется процесс ионизации. Рассматривались ударные волны при $M < 11$ и давлении перед фронтом 1...2 мм рт. ст. Эти параметры соответствуют высоте 40...60 км. При таких значениях давления газ представляет собой сплошную среду, поскольку $T < 7000$ К, в работе не учитывались ионизация и излучение. Прекурсорные эффекты становятся существенными при ионизации газа и появлении электронной теплопроводности. Эти эффекты будут изучены в дальнейшей работе, где планируется использование модели ионизованного газа.

Рассмотрим стационарное одномерное течение за ударной волной, параметры газа за скачком удовлетворяют законам сохранения [7]:

$$\rho u = \dot{M}; \quad (1)$$

$$p + \rho u^2 = P_0; \quad (2)$$

$$h + \frac{u^2}{2} = i^* \quad (3)$$

и уравнению состояния

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^{N_{el}} \frac{Y_i}{\mu_i}, \quad (4)$$

где $\dot{M} = \rho_0 u_0$ — массовый расход через поверхность разрыва; R — универсальная газовая постоянная; Y_i — массовые доли; μ_i — молярная масса компонента. Для определения давления, температуры и состава газа в релаксационной зоне представим уравнения (1)–(3) в эволюционной форме, применив их к газовой (лагранжевой) частице, движущейся по потоку от фронта ударной волны. Координата лагранжевой частицы описывается кинематическим уравнением

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\dot{M}}{\rho}. \quad (5)$$

Продифференцируем закон сохранения импульса (2) и уравнение состояния (4) по времени, а также учтем, что изменение массовых долей компонентов определяется протеканием химических реакций [8]:

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{\dot{W}_i}{\rho}. \quad (6)$$

Здесь \dot{W}_i — скорость химической реакции. Исключая dp/dt , получаем закон изменения давления

$$\frac{dp}{dt} = \left[1 - \frac{p\rho}{M^2} \right]^{-1} \left(\frac{p}{T} \frac{dT}{dt} + RT \sum_{i=1}^{N_{el}} \frac{\dot{W}_i}{\mu_i} \right). \quad (7)$$

Введем колебательную составляющую внутренней энергии e_v :

$$e_{vi}(T^v) = \frac{R\theta_i}{\mu_i} \frac{1}{e^{\theta_i/T^v} - 1}, \quad (8)$$

где T^v — колебательная температура; θ_i — характеристическая температура ($\theta_{N_2} = 3354$ К, $\theta_{O_2} = 2240$ К).

Скорость изменения колебательной составляющей внутренней энергии представлена скоростью обмена между колебательной и поступательной модами для молекул N_2 и O_2 с окружающим газом (формула Ландау — Теллера) [9]. Влиянием диссоциации на скорость колебательной релаксации пренебрегаем, поскольку при такой температуре ее вклад составляет менее 1 % [10]:

$$\frac{de_v}{dt} = \sum_i Y_i \frac{e_{vi}^0(T) - e_{vi}(T^v)}{\tau_i}, \quad i = N_2, O_2, \quad (9)$$

где $e_{vi}^0(T)$ — равновесная колебательная энергия (8), вычисленная при поступательной температуре.

Время релаксации определяется как

$$\frac{1}{\tau_i} = \sum_j \frac{X_j}{\tau_{ij}}.$$

Здесь τ_{ij} — время релаксации при столкновении между партнерами i и j , рассчитываемое полуэмпирически по экспериментальным данным [11, 12], j пробегает все атомы и молекулы-партнеры при столкновении с i -й молекулой, $i = N_2, O_2$. Дифференцируя уравнение энергии (3), закон сохранения импульса (2) и исключая скорость, получаем уравнение для энтальпии

$$\rho \frac{dh}{dt} - \frac{dp}{dt} = 0.$$

Удельная энтальпия в неравновесном случае имеет вид

$$h = \sum_{i=1}^{N_{el}} Y_i h_i(T) - \sum_{i=N_2, O_2} Y_i (e_{vi}^0 - e_{vi}).$$

Здесь равновесные значения удельной энтальпии $h_i(T)$ и теплоемкости при постоянном давлении $c_{pi}(T)$ для компонент взяты из [13]. Колебательная неравновесность учитывается вычитанием равновесной колебательной энергии e_{vi}^0 , полученной из (8) при поступательной температуре T , и прибавлением неравновесной e_{vi} , рассчитанной из (8) по колебательной температуре T^v .

Введем обозначения $c_v = \frac{de_v}{dT}$, $c_v^{mix} = \sum_{i \in N_2, O_2} Y_i \frac{de_{vi}}{dT}$, $c_p^{mix} = \sum_{i=1}^{N_{el}} Y_i c_{pi}$, запишем уравнение, описывающее изменение поступательной температуры

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\sum_{i=1}^{N_{el}} h_i \dot{W}_i - \sum_{i=N_2, O_2} (e_{vi}^0 - e_{vi}) \dot{W}_i + \left[1 - \frac{p\rho}{\dot{M}^2}\right]^{-1} RT \sum_{i=1}^{N_{el}} \frac{\dot{W}_i}{\mu_i} - \sum_{i=N_2, O_2} \frac{de_{vi}}{dt}}{c_p^{mix} - c_v^{mix} - \frac{p}{\rho T} \left[1 - \frac{p\rho}{\dot{M}^2}\right]^{-1}}. \quad (10)$$

Скорость химической реакции для i -го вещества имеет вид

$$\dot{W}_i = \sum_{i=1}^{N_r} v_i^r \left(k_r^{forw} \prod_{j \in reag} c_i^{v_j^r} - k_r^{rear} \prod_{j \in prod} c_i^{v_j^r} \right), \quad (11)$$

где v_i — стехиометрический коэффициент; k_r — константа скорости реакции; c_i — мольная концентрация. В работе использовалась кинетическая схема с 17 реакциями [14], кинетические константы для скорости прямой ($k_r^{forw} = AT^n e^{-E_a/(RT)}$) и обратной ($k_r^{rear} = k_r^{forw} / K_c^{eq}$) реакций принимались в соответствии с данными, приведенными в [14] (таблица). Константа равновесия K_c^{eq} , выраженная через концентрации, вычисляется с использованием термодинамических таблиц [8] для удельной энтальпии и энтропии [15] ($p_0 = 1$ атм):

$$K_c^{eq} = \frac{p_0}{(RT)^{\sum v_i}} e^{-\sum v_i \frac{H_i - TS_i}{RT}}.$$

Термодинамические данные для удельной энтальпии H_i и удельной энтропии S_i взяты из [15]. Диссоциация происходит с колебательных уровней и при их недостаточной заселенности константы скорости для реакций распада колеблющейся молекулы оказываются меньше равновесных.

При температуре ударной волны за фронтом, превышающей в 2–3 раза характеристическую колебательную температуру $\theta(\text{N}_2) = 3354 \text{ K}$, $\theta(\text{O}_2) = 2238 \text{ K}$, время колебательной релаксации становится сравнимым со временем диссоциации. Это делает необходимым рассмотрение процесса диссоциации в рамках двухтемпературной химической модели, в которой константа скорости прямой реакции в (11) зависит от T и T^v :

$$k_r^{forw} = Z(T, T^v) A T^n e^{-E_a/(RT)}. \quad (12)$$

Фактор неравновесности $Z(T, T^v)$ зависит от T, T^v и содержит характеристическую температуру θ и два параметра $\alpha \approx 0,9$, $U \approx E_a/3$. Согласно [10, 13],

$$Z(T, T^v) = \frac{Q^D(T) Q^{\alpha D}(F) \exp(-\alpha D/T) + Q^D(T^0) - Q^{\alpha D}(T^0)}{Q^D(T^v) Q^{\alpha D}(-U) \exp(-\alpha D/T) + Q^D(T^*) - Q^{\alpha D}(T^*)};$$

$$Q^A(T_m) = \frac{1 - \exp(-A/T_m)}{1 - \exp(-\theta/T_m)}, \quad T_m = T, T^v, F, T^0, T^*, -U, \quad A = D, \alpha D;$$

$$F = \left(\frac{1}{T^v} - \frac{1}{T} - \frac{1}{U} \right)^{-1}, \quad T^0 = \left(\frac{1}{T^v} - \frac{1}{U} \right)^{-1}, \quad T^* = \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{U} \right)^{-1}.$$

Кинетическая схема для воздуха [14]

Номер реакции	Реакция	A	n	E_a
1	$\text{O}_2 + \text{N} = 2\text{O} + \text{N}$	$3,6 \cdot 10^{18}$	-1	59 500
2	$\text{O}_2 + \text{NO} = 2\text{O} + \text{NO}$			
3	$\text{O}_2 + \text{O} = 2\text{O} + \text{O}$			
4	$\text{O}_2 + \text{O}_2 = 2\text{O} + \text{O}_2$			
5	$\text{O}_2 + \text{N}_2 = 2\text{O} + \text{N}_2$	$7,2 \cdot 10^{18}$		
6	$\text{N}_2 + \text{O} = 2\text{N} + \text{O}$	$1,9 \cdot 10^{17}$	-0,5	113 000
7	$\text{N}_2 + \text{NO} = 2\text{N} + \text{NO}$			
8	$\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{N} + \text{O}_2$			
9	$\text{N}_2 + \text{N} = 2\text{N} + \text{N}$			
10	$\text{N}_2 + \text{N}_2 = 2\text{N} + \text{N}_2$	$4,7 \cdot 10^{17}$	-0,5	
11	$\text{NO} + \text{O}_2 = \text{N} + \text{O} + \text{O}_2$	$3,9 \cdot 10^{20}$		
12	$\text{NO} + \text{N}_2 = \text{N} + \text{O} + \text{N}_2$			
13	$\text{NO} + \text{O} = \text{N} + \text{O} + \text{O}$	$7,8 \cdot 10^{21}$	-1,5	75 500
14	$\text{NO} + \text{N} = \text{N} + \text{O} + \text{N}$			
15	$\text{NO} + \text{NO} = \text{N} + \text{O} + \text{NO}$			
16	$\text{NO} + \text{O} = \text{O}_2 + \text{N}$			
17	$\text{N}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{N}$	$7,0 \cdot 10^{13}$	0	38 000

Следовательно, для нахождения характеристик лагранжевой частицы, движущейся за скачком, задача сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений (4)–(7), (9), (10). Начальные значения массовых концентраций принимаются равными значениям перед скачком $Y_i' = Y_{i0}$, колебательная энергия вычисляется из (8) при поступательной температуре перед скачком. Начальными условиями для (5), (7), (10) служат параметры на скачке p' , u' и T' . Их можно получить в явной форме, зная число Маха набегающего потока [7]. Поскольку сразу за фронтом ударной волны колебательные степени свободы еще не возбуждены [9], теплоемкость $c_p = \frac{\gamma}{\gamma-1} R \sum_{i=1}^{N_{el}} \frac{Y_i}{\mu_i}$ постоянна, для двухатомных газов ($\gamma = 1,4$ и энтальпия $h = c_p T$) запишем:

$$\begin{aligned} \frac{\rho'}{\rho_0} &= \left[\frac{\gamma-1}{\gamma+1} + \frac{2}{\gamma+1} \frac{1}{M^2} \right]^{-1}; \\ \frac{p'}{p_0} &= -\frac{\gamma-1}{\gamma+1} + \frac{2\gamma}{\gamma+1} M^2; \\ \frac{T'}{T_0} &= \left[1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \left(1 - \left(\frac{\rho'}{\rho_0} \right)^2 \right) \right]^{-1}; \\ u'^2 &= \frac{2\gamma}{\gamma-1} \left(\frac{p_0}{\rho_0} - \frac{p'}{\rho'} \right) + u_0^2. \end{aligned}$$

Уравнения для колебательной энергии, поступательной температуры и давления решаются совместно с уравнениями химической кинетики как жесткая система дифференциальных уравнений. Используется решатель VODE [16], основанный на методах Адамса — Мултона с переменными коэффициентами и BDF-методе с возможностью численного вычисления якобиана.

Результаты. Для верификации вычислительного модуля проведены расчеты ударной волны в молекулярном кислороде O_2 и сравнение колебательной температуры с экспериментальными данными [17] при температуре на скачке 5300 и 6470 К. Кинетическая схема включает в себя две реакции № 3 и 4 (см. таблицу) с рекомендованными в [17] постоянными. Константа скорости термически равновесной диссоциации кислорода в столкновениях O_2 – O_2 для двух температурных интервалов описывается соотношениями

$$k_r^{forw} (O_2 - O_2) = 2 \cdot 10^{15} \frac{T^{0,3}}{1 - e^{-2238/T}} e^{-59380/T}, \quad 2000 \leq T \leq 6000;$$

$$k_r^{forw} (O_2 - O_2) = 3,87 \cdot 10^{27} \frac{T^{-3,1}}{1 - e^{-2238/T}} e^{-59380/T}, \quad T \geq 6000.$$

Константа скорости диссоциации кислорода при взаимодействии с атомом кислорода $k_r^{forw} (O_2 - O) = 3,5 k_r^{forw} (O_2 - O_2)$.

Фактор неравновесности $Z(T, T^v)$ рассчитывался по модели Кузнецова [13, 17], применимой при низкотемпературной диссоциации.

Важный момент — выбор модели для времени колебательной релаксации, входящего в соотношение Ландау — Теллера (9). Для этого времени используется полуэмпирическое соотношение [9]

$$\tau = \frac{C_1 T^{C_2} \exp(C_3 T^{-1/3})}{p},$$

в котором константы C_1 , C_2 , C_3 подбираются из условия наилучшей аппроксимации экспериментальных данных в заданном интервале значений температуры.

Расчет времени колебательной релаксации в (9) состоит из двух типов столкновений: 1) $\tau_{O_2-O_2}$; 2) τ_{O_2-O} . Проведено сравнение нескольких известных моделей с экспериментальными данными, результаты которого приведены на рис. 1. Данные по столкновениям O_2-O_2 взяты из [11, 17–20], для O_2-O — из [21, 22]. Для условий задачи, рассматриваемой в работе, предложенные зависимости [16] подходят наилучшим образом. Сильнее всего отклоняется от экспериментальных данных кривая, построенная по модели, сформулированной для высоких значений температуры и при наличии ионизации [23].

Зависимости, предложенные в [12, 17] (кривая 1 на рис. 1, а и б),

$$p\tau_{O_2-O_2} = 8,8 \cdot 10^{-14} \frac{T^{0,5}}{1 - e^{-2238/T}} e^{172,7T^{-1/3}};$$

$$p\tau_{O_2-O} = 1,5 \cdot 10^{-12} \frac{T^{0,5}}{1 - e^{-2238/T}} e^{86,4T^{-1/3}}$$

проходят ближе всего к экспериментальным точкам.

Сравнение колебательной температуры с экспериментом и расчетами из [12, 17] при двух режимах ударной волны приведено на рис. 2:

1) температура на скачке $T_0 = 5300$ К, скорость перед скачком $u_0 = 3070$ м/с, давление перед скачком $p_0 = 2$ торр;

2) $T_0 = 6470$ К, $u_0 = 3400$ м/с и $p_0 = 1$ торр. Время берется в лабораторной системе координат $t = x / u_0$, где x определяется из уравнения (5).

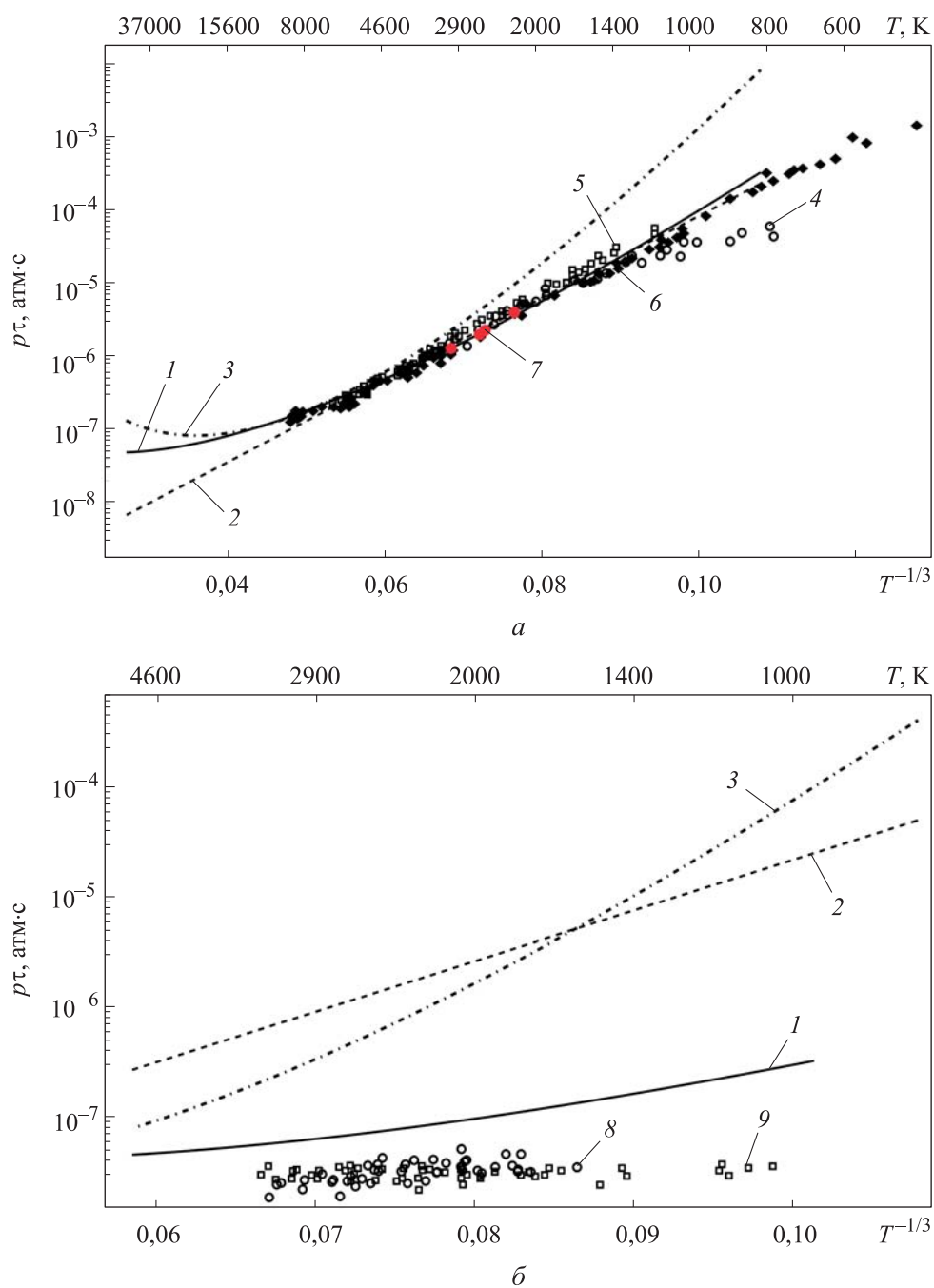


Рис. 1. Время релаксации $p\tau_{O_2-O_2}$ (а) и $p\tau_{O_2-O}$ (б):

кривые соответствуют аппроксимационным формулам, взятым из работ [17] (1), [11] (2), [23] (3); экспериментальные точки — из [18] (4), [19] (5), [11] (6), [20] (7), [21] (8), [22] (9)

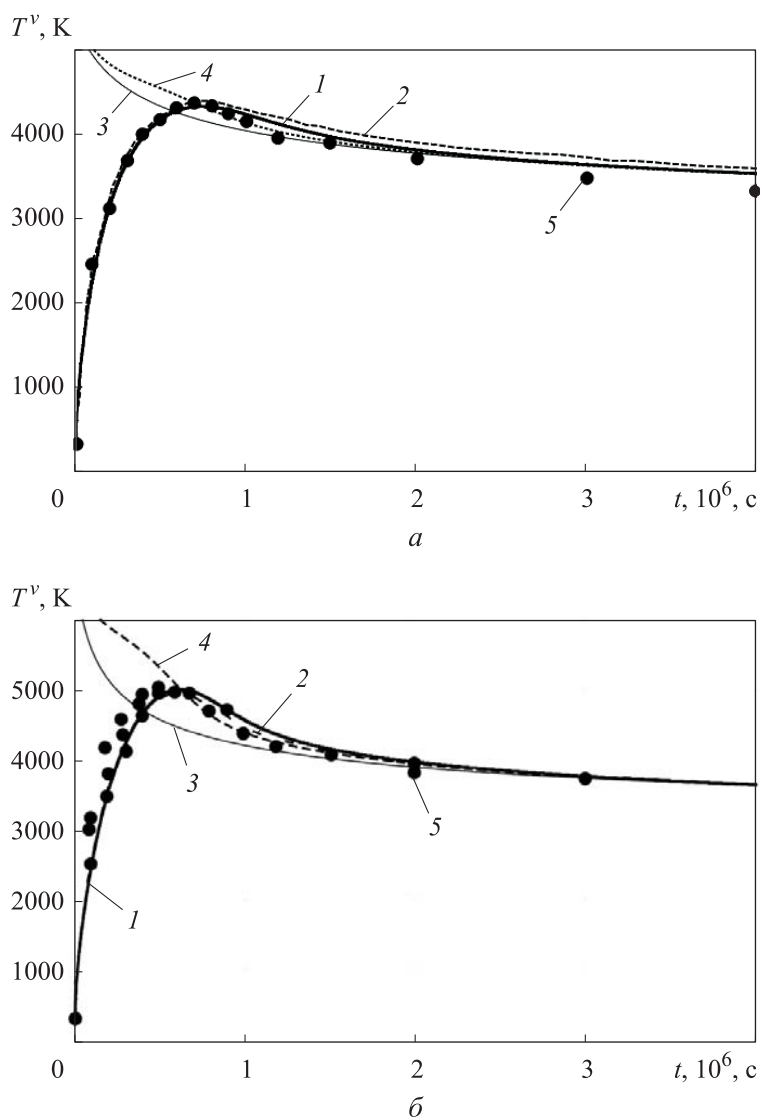


Рис. 2. Экспериментальные и рассчитанные профили колебательной температуры $T_0 = 5300$ К, $u_0 = 3070$ м/с, $p_0 = 2$ торр, $M = 9,3$ (а) и $T_0 = 6470$ К, $u_0 = 3400$ м/с, $p_0 = 1$ торр, $M = 10,3$ (б):

1 — расчет; 2 — расчет из [17]; 3 — поступательная температура в одностепенном приближении; 4 — поступательная температура; 5 — эксперимент

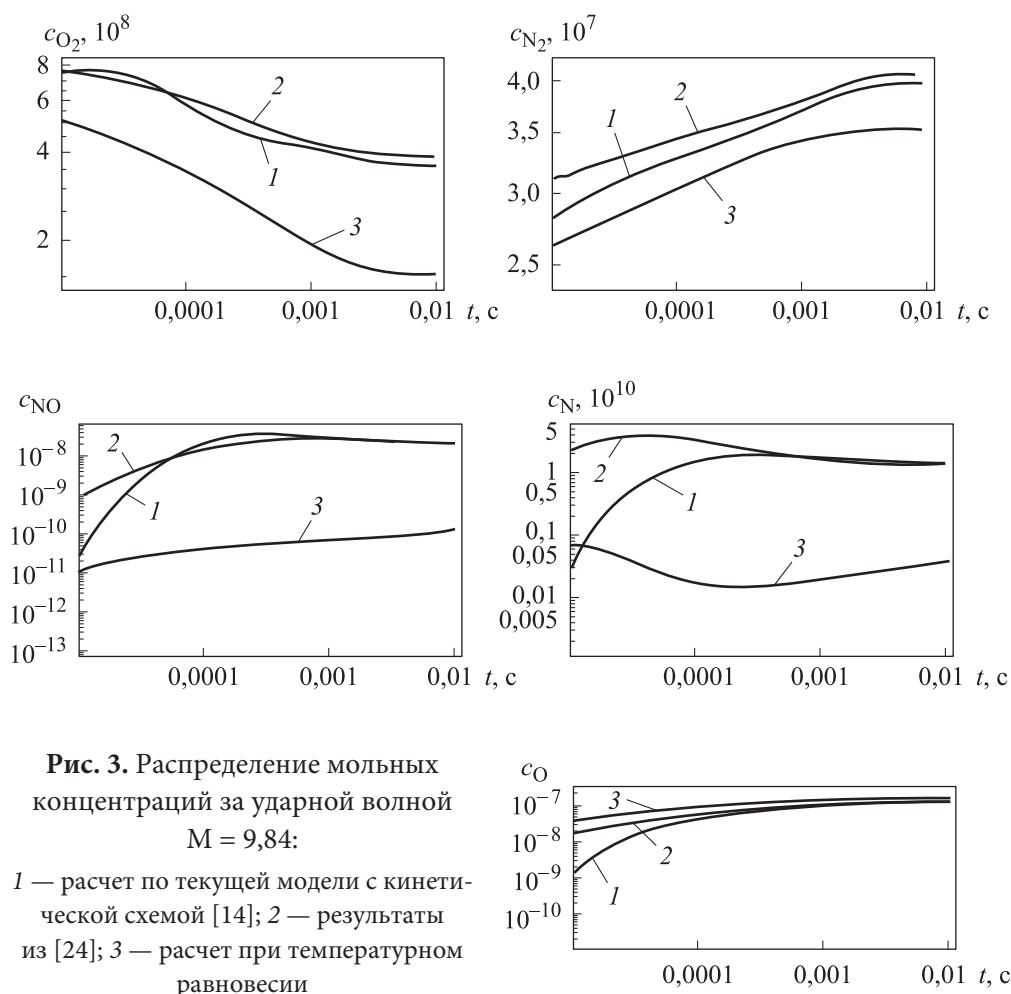
Результаты расчетов хорошо совпадают с экспериментальными данными [12]. На участке от начального значения температуры до максимального, когда различие поступательной и колебательной температуры существенно, наблюдается полное совпадение. По характеру изменения поступательной температуры в одно- и двухтемпературном приближе-

ниях можно судить о влиянии термической неравновесности на протекание химических реакций. Кривая поступательной температуры при наличии термической неравновесности до момента установления равновесия с колебательной температурой более пологая относительно равновесной поступательной температуры. Это объясняется замедлением протекания реакций вследствие неполной заселенности при температурной неравновесности верхних колебательных уровней, с которых и происходит диссоциация. В модели это уменьшение скорости прямой реакции учитывается умножением константы скорости прямой реакции на фактор неравновесности (12), существенно меньший единицы. Исходя из данных, представленных на рис. 1, следует, что с увеличением интенсивности ударной волны уменьшается время колебательной релаксации и, согласно данным на рис. 2, уменьшается зона релаксации за скачком.

Выше рассмотрен случай, когда изначально газ содержит единственный компонент — молекулярный кислород. Проведем теперь верификацию расчетов, выполненных для газовой смеси (воздуха) путем сравнения с расчетами, приведенными в [24], где получено распределение мольных концентраций за ударной волной при разных числах Маха в предположении температурной и химической неравновесности. Воздух рассматривается как смесь идеальных газов ($X_{O_2} = 0,21153$, $X_{N_2} = 0,78847$). Начальные условия перед ударной волной ($T_0 = 300$ К, $p_0 = 133$ Па, $u_0 = 3420$ м/с) соответствуют числу Маха $M = 9,84$. Рассчитанные мольные концентрации c_i приведены на рис. 3.

В момент времени $t = 10^{-6}$ с, соответствующий левой границе оси абсцисс, концентрации промежуточных веществ N, O, NO значительно отличаются от концентраций, приведенных в [24]. Вероятная причина этого состоит в различном подходе к расчету термически и химически неравновесных течений. Возбуждение колебаний в [24] описывается реакциями возбуждения, заселенность возбужденных колебательных уровней соответствует распределению Больцмана при поступательной температуре. В принятой здесь модели заселенность колебательных уровней описывается распределением Больцмана с промежуточной колебательной температурой.

Ниже по потоку кривые сближаются и при установлении равновесия практически совпадают. Это свидетельствует о влиянии температурной неравновесности, модель которой не была описана в [24], на скорость протекания реакций, которая при установлении дает одинаковые результаты с кинетической схемой, взятой из [14].



Заключение. Проведенные в работе численные расчеты одномерного термически и химически неравновесного течения за ударной волной подтвердили адекватность работы вычислительного модуля, осуществляющего решение уравнений химической кинетики с учетом температурной неравновесности. Выполнена верификация работы модуля и валидация используемых моделей путем сравнения с литературными экспериментальными и расчетными данными для ударной волны в чистом кислороде. Сравнительный расчет течения за воздушной ударной волной также показал удовлетворительное совпадение с расчетами, выполненными другими авторами, с учетом различий в используемых моделях. Дальнейшее развитие вычислительной модели будет включать в себя учет ионизации газа, что необходимо для расчета ударных волн с температурой за скачком бо-

лее 7000 К, а также для моделирования течения в индукционном плазмотроне ВГУ-3 при наличии сильной неравновесности плазмы. Одномерная постановка задачи является традиционной для исследования газодинамических течений [23, 24], поскольку она является научным инструментом при упрощенном описании течения. Анализ имеющихся экспериментальных данных, полученных в ударной трубе, также проводится на основе одномерного решения. Далее будет реализована возможность описания неоднородных течений применительно к плазмотрону.

Благодарности

Автор выражает благодарность С.А. Васильевскому, А.Ф. Колесникову и С.Е. Якушу за постановку задачи и ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Полежаев Ю.В., Юревич Ф.Б. Тепловая защита. М., Энергия, 1976.
- [2] Гордеев А.Н., Колесников А.Ф. Высокочастотные индукционные плазмотроны серии ВГУ. В кн.: *Актуальные проблемы механики. Физико-химическая механика жидкостей и газов*. М., Наука, 2010, с. 151–177.
- [3] Kolesnikov A.F., Gordeev A.N., Vasil'evskii S.A. Effects of catalytic recombination on the surface of metals and quartz for the conditions of entry into the Martian atmosphere. *High Temp.*, 2016, vol. 54, iss. 1, pp. 29–37.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0018151X1505017X>
- [4] Williamson J.M., DeJoseph C.A. Jr. Determination of gas temperature in an open-air atmospheric pressure plasma torch from resolved plasma emission. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, iss. 4, pp. 1893–1898. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1536736>
- [5] Гордеев А.Н., Колесников А.Ф., Сахаров В.И. Экспериментальное и численное исследование теплообмена высокоэнтальпийных недорасширенных струй воздуха с цилиндрическими моделями. *Изв. РАН. МЖГ*, 2018, № 5, с. 125–133.
- [6] Сахаров В.И. Численное моделирование течений в индукционном плазмотроне и теплообмена в недорасширенных струях воздуха для условий экспериментов на установке ВГУ-4 (ИПМех РАН). *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*, 2007, № 5. URL: <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/38>
- [7] Черный Г.Г. Газовая динамика. М., Наука, 1988.
- [8] Варнац Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М., ФИЗМАТЛИТ, 2003.
- [9] Зельдович Я.П., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., Наука, 1966.
- [10] Knab O., Fruehauf H.-H., Messerschmid E.W. Theory and validation of the physically consistent coupled vibration-chemistry-vibration model. *J. Thermophys. Heat Trans.*, 1995, vol. 9, iss. 2, pp. 219–226. DOI: <https://doi.org/10.2514/3.649>

- [11] Millikan R.C., White D.R. Systematics of vibrational relaxation. *J. Chem. Phys.*, 1963, vol. 39, iss. 12, pp. 3209–3213. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1734182>
- [12] Ibraguimova L.B., Shatalov O.P., Tunik Yu.V., et al. Shock tube investigation of molecular oxygen dissociation at temperatures of 4000 to 10800 K. In: Kontis K. (eds). *28th Int. Symp. Shock Waves*. Springer, Berlin, Springer, 2011, pp. 125–130. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-25688-2_19
- [13] Ковач Э.А., Лосев С.А., Сергиевская А.Л. Модели двухтемпературной химической кинетики для описания диссоциации молекул в сильных ударных волнах. *Химическая физика*, 1995, т. 14, № 9, с. 44–76.
- [14] Gnoffo P.A., Gupta R.N., Shinn J.L. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. *NASA TP-2867*, 1989.
- [15] Глушко В.П., ред. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. М., Наука, 1979.
- [16] Born P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. VODE: a variable coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1989, vol. 10, no. 5, pp. 1038–1051. DOI: <https://doi.org/10.1137/0910062>
- [17] Ибрагуимова Л.Б., Левашов В.Ю., Сергиевская А.Л. и др. Моделирование колебательно-диссоциационной кинетики кислорода при температурах 4000–11000 К. *Изв. РАН. МЖГ*, 2014, № 1, с. 131–140.
- [18] Blackman V. Vibrational relaxation in oxygen and nitrogen. *J. Fluid Mech.*, 1956, vol. 1, iss. 1, pp. 61–85. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0022112056000056>
- [19] Generalov N.A., Losev S.A. Vibration, excitation, and molecular dissociation of gaseous oxygen and carbon dioxide in a shock wave. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 1966, vol. 6, iss. 1, pp. 101–104. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(66\)90066-5](https://doi.org/10.1016/0022-4073(66)90066-5)
- [20] Owen K.G., Davidson D.F., Hanson R.C. Oxygen vibrational relaxation times: shock tube/laser absorption measurements. *J. Thermophys. Heat Trans.*, 2015, vol. 30, iss. 4, pp. 791–798. DOI: <https://doi.org/10.2514/1.T4505>
- [21] Kiefer J.H., Lutz R.W. The effect of oxygen atoms on the vibrational relaxation of oxygen. *Symp. (Int.) Combust.*, 1967, vol. 11, iss. 1, pp. 67–76. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(67\)80134-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(67)80134-6)
- [22] Breen J.E., Quy R.B., Glass G.P. Vibrational relaxation of O₂ in the presence of atomic oxygen. *J. Chem. Phys.*, 1973, vol. 59, iss. 1, pp. 556–557. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1679846>
- [23] Лосев С.А., Макаров В.Н., Погосбемян М.Ю. Модель физико-химической кинетики за фронтом очень сильной ударной волны в воздухе. *Изв. РАН. МЖГ*, 1995, № 2, с. 169–182.
- [24] Duff R.E., Davidson N. Calculation of reaction profiles behind steady state shock waves. II. The dissociation of air. *J. Chem. Phys.*, 1959, vol. 31, iss. 4, pp. 1018–1027. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1730497>

Брызгалов Андрей Иванович — младший научный сотрудник лаборатории термогазодинамики и горения ИПМех РАН (Российская Федерация, 119526, Москва, пр-т Вернадского, д. 101, корп. 1).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Брызгалов А.И. Численное моделирование течения термически и химически неравновесного воздуха за фронтом ударной волны. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2021, № 3 (96), с. 94–111.

DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2021-3-94-111>

NUMERICAL SIMULATION OF AIR FLOW IN THE STATE OF THERMAL AND CHEMICAL NONEQUILIBRIUM BEHIND A SHOCK WAVE FRONT

A.I. Bryzgalov

bryzgalov@ipmnet.ru

**Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russian Federation**

Abstract

We used the model of a five-component air mixture flow behind the front of a one-dimensional shock wave to compute the flow parameters for shock front temperatures of up to 7000 K, taking into account the variable composition, translational and vibrational temperatures and pressure in the relaxation zone. Vibrational level population in oxygen and nitrogen obeys the Boltzmann distribution with one common vibrational temperature. We consider the effect that temperature nonequilibrium has on the chemical reaction rate by introducing a nonequilibrium factor to the reaction rate constant, said factor depending on the vibrational and translational temperatures. We compared our calculation results for dissociation behind the shock front to the published data concerning temperature nonequilibrium in a pure oxygen flow behind a shock wave front for two different intensities of the latter. The comparison shows a good agreement between the vibrational temperature, experimental data and calculations based on the experimental values of vibrational temperature and molality. We computed the parameters of thermodynamically nonequilibrium dissociation in the air behind the shock wave front, comparing them to those of equilibrium dissociation

Keywords

Dissociation, nonequilibrium, vibrational temperature, shock wave, relaxation

and calculation results previously published by others. The study demonstrates that the molality values computed converge gradually with those found in published data as the distance from the shock front increases. We list the reasons for the discrepancy between our calculation results and previously published data

Received 04.08.2020

Accepted 25.12.2020

© Author(s), 2021

The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (RFBR grant no. 19-31-90114)

REFERENCES

- [1] Polezhaev Yu.V., Yurevich F.B. *Teplovaya zashchita* [Thermal protection]. Moscow, Energiya Publ., 1976.
- [2] Gordeev A.N., Kolesnikov A.F. Vysokochastotnye induktsionnye plazmotrony serii VGU [High-frequency induction plasmatron of IPG-series]. V kn.: Aktual'nye problemy mekhaniki. Fiziko-khimicheskaya mekhanika zhidkostey i gazov [In: Actual Problems of Mechanics. Physical-Chemical Liquid Mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 2010, pp. 151–177 (in Russ.).
- [3] Kolesnikov A.F., Gordeev A.N., Vasil'evskii S.A. Effects of catalytic recombination on the surface of metals and quartz for the conditions of entry into the Martian atmosphere. *High Temp.*, 2016, vol. 54, iss. 1, pp. 29–37. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0018151X1505017X>
- [4] Williamson J.M., DeJoseph C.A. Jr. Determination of gas temperature in an open-air atmospheric pressure plasma torch from resolved plasma emission. *J. Appl. Phys.*, 2003, vol. 93, iss. 4, pp. 1893–1898. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1536736>
- [5] Gordeev A.N., Kolesnikov A.F., Sakharov V.I. Experimental and numerical investigation of heat exchange between underexpanded high-enthalpy air jets and cylindrical models. *Fluid Dyn.*, 2018, vol. 53, no. 5, pp. 702–710. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0015462818050105>
- [6] Sakharov V.I. CFD flows modelling in inductive plasmatron and heat transfer in under expanded air jets under IPG-4 (IPM RAS) facility test conditions. *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoy dinamike* [Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics], 2007, no. 5 (in Russ.). Available at: <http://chemphys.edu.ru/issues/2007-5/articles/38>
- [7] Chernyy G.G. *Gazovaya dinamika* [Gas dynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1988.
- [8] Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. *Combustion*. Berlin, Heidelberg, Springer, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-45363-5>
- [9] Zeldovich Ya.P., Rayzer Yu.P. *Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy* [Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena]. Moscow, Nauka Publ., 1966.
- [10] Knab O., Fruehauf H.-H., Messerschmid E.W. Theory and validation of the physically consistent coupled vibration-chemistry-vibration model. *J. Thermophys. Heat Trans.*, 1995, vol. 9, iss. 2, pp. 219–226. DOI: <https://doi.org/10.2514/3.649>

- [11] Millikan R.C., White D.R. Systematics of vibrational relaxation. *J. Chem. Phys.*, 1963, vol. 39, iss. 12, pp. 3209–3213. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1734182>
- [12] Ibraguimova L.B., Shatalov O.P., Tunik Yu.V., et al. Shock tube investigation of molecular oxygen dissociation at temperatures of 4000 to 10800 K. In: Kontis K. (eds). *28th Int. Symp. Shock Waves*. Springer, Berlin, Springer, 2011, pp. 125–130. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-25688-2_19
- [13] Kovach E.A., Losev S.A., Sergievskaya A.L. Two-temperature models for dissociation description in strong shock waves. *Khimicheskaya fizika*, 1995, vol. 14, no. 9, pp. 44–76 (in Russ.).
- [14] Gnoffo P.A., Gupta R.N., Shinn J.L. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. NASA TP-2867, 1989.
- [15] Glushko V.P., ed. *Termodinamicheskie svoystva individual'nykh veshchestv* [Thermodynamical properties of individual substances]. Moscow, Nauka Publ., 1979.
- [16] Born P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. VODE: a variable coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1989, vol. 10, no. 5, pp. 1038–1051. DOI: <https://doi.org/10.1137/0910062>
- [17] Ibraguimova L.B., Levashov V.Yu., Sergievskaya A.L., et al. Modeling of vibration-dissociation oxygen kinetics at temperatures of 4,000–11,000 K. *Fluid Dyn.*, 2014, vol. 49, no. 1, pp. 112–119. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0015462814010141>
- [18] Blackman V. Vibrational relaxation in oxygen and nitrogen. *J. Fluid Mech.*, 1956, vol. 1, iss. 1, pp. 61–85. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0022112056000056>
- [19] Generalov N.A., Losev S.A. Vibration, excitation, and molecular dissociation of gaseous oxygen and carbon dioxide in a shock wave. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 1966, vol. 6, iss. 1, pp. 101–104. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(66\)90066-5](https://doi.org/10.1016/0022-4073(66)90066-5)
- [20] Owen K.G., Davidson D.F., Hanson R.C. Oxygen vibrational relaxation times: shock tube/laser absorption measurements. *J. Thermophys. Heat Trans.*, 2015, vol. 30, iss. 4, pp. 791–798. DOI: <https://doi.org/10.2514/1.T4505>
- [21] Kiefer J.H., Lutz R.W. The effect of oxygen atoms on the vibrational relaxation of oxygen. *Symp. (Int.) Sombus.*, 1967, vol. 11, iss. 1, pp. 67–76. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(67\)80134-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(67)80134-6)
- [22] Breen J.E., Quy R.B., Glass G.P. Vibrational relaxation of O₂ in the presence of atomic oxygen. *J. Chem. Phys.*, 1973, vol. 59, iss. 1, pp. 556–557. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1679846>
- [23] Losev S.A., Makarov V.N., Pogosbekyan M.Yu. Model of the physico-chemical kinetics behind the front of a very intense shock wave in air. *Fluid Dyn.*, 1995, vol. 30, no. 2, pp. 299–309. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02029844>
- [24] Duff R.E., Davidson N. Calculation of reaction profiles behind steady state shock waves. II. The dissociation of air. *J. Chem. Phys.*, 1959, vol. 31, iss. 4, pp. 1018–1027. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1730497>

Bryzgalov A.I. — Research Assistant, Laboratory of Thermal Gas Dynamics and Combustion, Ishlinsky Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences (Vernadskogo prospekt 101/1, Moscow, 119526 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Bryzgalov A.I. Numerical simulation of air flow in the state of thermal and chemical nonequilibrium behind a shock wave front. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2021, no. 3 (96), pp. 94–111 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2021-3-94-111>

В Издательстве МГТУ им. Н.Э. Баумана
вышла в свет монография авторов
М.П. Галанина, Е.Б. Савенкова

**«Методы численного анализа
математических моделей»**

Изложены методы решения задач линейной алгебры, систем нелинейных алгебраических уравнений, интерполяция функций, методы численного интегрирования и дифференцирования, численные методы решения задачи Коши и краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Приведены основы общей теории разностных схем и ее применение к построению и анализу методов численного решения эллиптических, параболических и гиперболических уравнений, а также численные методы решения интегральных уравнений. Представлены методы генерации сеток для многомерных задач математической физики, многосеточные методы решения, численные методы для решения уравнения переноса и уравнений газовой динамики, алгоритмические основы метода конечных элементов.

По вопросам приобретения обращайтесь:
105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, корп. 1
+7 (499) 263-60-45
press@bmstu.ru
<https://bmstu.press>

