

УДК 533.5 533.6

## **ПРЯМОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ДИССОЦИИРУЮЩЕМ ГАЗЕ\***

**Е.А. БОНДАРЬ, С.Ф. ГИМЕЛЬШЕЙН, Г.Н. МАРКЕЛОВ, М.С. ИВАНОВ**

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

Проведен анализ применимости новой модели для описания эффектов реального газа в методе прямого статистического моделирования. Модель использована для численного исследования внутренней структуры фронта сильной ударной волны и релаксационной зоны за фронтом для условий, соответствующих входу космического аппарата в атмосферу Марса. Изучено влияние параметров набегающего потока на релаксацию различных энергетических мод молекул во фронте волны и в релаксационной зоне. Исследовано влияние химических реакций на структуру течения. Детальный анализ неравновесности течения проведен на уровне функции распределения скорости и заселенности вращательных и колебательных уровней молекул.

### **ВВЕДЕНИЕ**

Для успешного выполнения маневров космического аппарата в атмосфере Марса необходима подробная информация о структуре течения около космического аппарата на различных высотах полета. Эффекты реального газа, такие как термическая неравновесность и химические реакции за фронтом головной ударной волны, существенно влияют на течение около аппарата и его термоаэродинамические характеристики. Для исследования структуры релаксационной зоны за фронтом ударной волны в многоатомных газах и газовых смесях обычно используется континуальный подход (уравнения Навье–Стокса). Однако область применения континуального подхода для таких исследований ограничивается высокой степенью неравновесности течения. Поэтому особый интерес представляют исследования структур фронта волны и релаксационной зоны на кинетическом уровне.

Единственным методом, позволяющим моделировать неравновесные течения на кинетическом уровне с учетом эффектов реального газа, является метод прямого статистического моделирования (PCM или DSMC, Direct Simulation Monte Carlo method) [1]. Метод PCM широко применяется для исследования различных задач высотной аэротермодинамики. Достоверность результатов, полученных с его использованием, неоднократно подтверждалась их сравнением с экспериментальными данными. Однако для течений с высокой степенью термохимической неравновесности такое сравнение практически не проводилось из-за отсутствия подходящих экспериментальных данных.

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке МНТЦ (2298р) и интеграционного проекта СО РАН (№ 2, 2003).

Численное исследование таких течений методом ПСМ осложняется еще и отсутствием исчерпывающей экспериментальной информации о сечениях химических реакций и энергообмена между поступательными и внутренними энергетическими модами молекул. В большинстве случаев доступны экспериментальные данные только по температурной зависимости скоростей этих процессов. По этой причине основное требование к моделям эффектов реального газа метода ПСМ заключается в том, чтобы они обеспечивали скорости вращательной и колебательной релаксации, соответствующие решениям релаксационных уравнений для вращательной и колебательной энергии с температурно-зависимыми релаксационными числами, и скорости химических реакций, совпадающие с известными скоростями реакций в аррениусовской форме.

В настоящей работе для описания эффектов реального газа использована модель метода ПСМ, недавно описанная в работе [2]. Эта модель, в отличие от обычных моделей метода ПСМ, учитывает дискретность вращательной и колебательной энергии молекул [3] и применима как к двухатомным, так и к многоатомным молекулам. Анализ применимости моделей эффектов реального газа обычно основан на сравнении скоростей процессов, полученных в результате моделирования, с известными экспериментальными и теоретическими соотношениями. Подобный анализ новой модели был начат для двухатомных молекул в работе [2] и продолжен в настоящей работе для многоатомных молекул ( $\text{CO}_2$ ).

Основной целью настоящей работы является численное исследование методом ПСМ структуры сильной ударной волны и релаксационной зоны за ней для условий, соответствующих входу космического аппарата в атмосферу Марса. Моделирование проведено в одномерной (ударная волна в нереагирующей смеси) и двумерной (нерагирующее и реагирующее течения около цилиндра для чисел Кнудсена  $\text{Kn} \sim 10^{-2} - 10^{-3}$ ) постановках для параметров набегающего потока, характерных для маневров аэроторможения. Результаты представлены как на уровне макропараметров течения, так и на уровне функций распределения скорости и заселенности вращательных и колебательных уровней.

#### ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Вычисления методом ПСМ проводились с использованием программного комплекса SMILE [4]. На поверхности тела ставились условия диффузного отражения молекул с полной аккомодацией поступательной и внутренней энергии. Модель переменных твердых сфер (Variable Hard Sphere — VHS) [1] применялась для описания межмолекулярных столкновений. Отметим, что модель переменных мягких сфер (Variable Soft Sphere — VSS), предложенная Коурой и Мацумото и подробно описанная в [1], точнее описывает процессы диффузии. Однако в связи с нехваткой данных по параметрам модели VSS для  $\text{CO}_2/\text{N}_2$ -смеси эта модель не использовалась в настоящем исследовании. Более подробно вопрос выбора столкновительной модели обсуждается в Приложении.

Для описания эффектов реального газа была использована модель из работы [2], учитывающая дискретность поступательной и вращательной энергий молекул. Эта модель включает модель Ларсена–Боргнакке (LB) для описания энергообмена между различными энергетическими модами молекул и модель полной столкновительной энергии (TCE — Total Collision Energy) для описания химических реакций (обе модели модифицированы для использования с дискретной внутренней энергией). Вращательно-вращательный и колебательно-колебательный энергообмены не рассматривались в настоящем исследовании. При моделировании столкновений применялась методология, запрещающая столкновения с одновременной релаксацией более двух энергетических мод [5].

Для всех двухатомных молекул использовались модели мягкого ротатора для описания вращений и ангармонического осциллятора с параметром ангармоничности 0,82 для описания колебаний. Приближение твердого ротатора использовалось для описания вращательной энергии CO<sub>2</sub>. Все три колебательные моды CO<sub>2</sub> моделировались как ангармонические осцилляторы с параметром ангармоничности 0,82 и значениями характеристических колебательных температур 959,66, 1918,6 и 3382 К для изгибной, симметричной и антисимметричной мод. Вырожденная изгибная мода моделировалась как два идентичных ангармонических осциллятора, обладающих одинаковой колебательной энергией.

Набор из 54 реакций диссоциации и обмена [3] для 8 компонентов (O, N, C, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, NO, CO и CO<sub>2</sub>) был использован при моделировании химических процессов в CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>-смеси.

Два следующих параграфа посвящены анализу применимости модели из работы [2] к моделированию энергообмена между поступательными и внутренними модами молекул и химических реакций в многоатомных газах на примере CO<sub>2</sub>.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ

Вращательная релаксация на макроскопическом уровне описывается уравнением Джинса [6]. Для однокомпонентного газа это уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{dE_r(t)}{dt} = \frac{E_r^*(t) - E_r(t)}{\tau_c Z_r}. \quad (1)$$

Здесь  $t$  — время,  $E_r$  — средняя вращательная энергия на одну молекулу,  $Z_r$  — характеристическое вращательное релаксационное число (в ПСМ вычислениях обычно используются как постоянные, так и температурно-зависимые релаксационные числа),  $\tau_c$  — среднее время между столкновениями и  $E_r^*$  — мгновенная равновесная вращательная энергия, определенная как

$$E_r^* = (\xi_r/2)kT_t, \quad (2)$$

где  $\xi_r$  — число вращательных степеней свободы,  $k$  — постоянная Больцмана, а  $T_t$  — поступательная температура. Средняя вращательная энергия  $E_r$  связана с вращательной температурой  $T_r$  как

$$E_r = (\xi_r/2)kT_r. \quad (3)$$

Колебательная релаксация на макроскопическом уровне описывается уравнением, имеющим вид, близкий к уравнению (1) для случая однокомпонентного двухатомного газа

$$\frac{dE_v(t)}{dt} = \frac{E_v^*(t) - E_v(t)}{\tau_c Z_v}, \quad (4)$$

где  $E_v$  — колебательная энергия и  $E_v^*$  — мгновенная равновесная колебательная энергия, которая связана с поступательной  $T_t$  и колебательной  $T_v$  температурами следующим образом:

$$E_v = \frac{\xi_v(T_v)}{2}kT_v, \quad E_v^* = \frac{\xi_v(T_t)}{2}kT_t. \quad (5)$$

Здесь  $\xi_v$  — эффективное число колебательных степеней свободы. В отличие от числа вращательных степеней свободы число колебательных степеней свободы зависит от температуры. Как и в случае вращательной релаксации, колебательная релаксация описывается с использованием и постоянных и температурно-зависимых столкновительных чисел  $Z_v$ .

В настоящем исследовании была рассмотрена релаксация в адиабатических условиях. Отметим, что уравнения (1) и (4) могут так же использоваться для описания вращательной и колебательной релаксаций в изотермических условиях. В этом случае поступательная температура постоянна в течение всего релаксационного процесса. Адиабатические условия являются более универсальными, чем изотермические, в том смысле, что они позволяют анализировать модели энергообмена между поступательной и внутренней энергией с использованием температурно-зависимых релаксационных чисел (в случае изотермических условий даже температурно-зависимые релаксационные числа фактически постоянны в течение всего релаксационного процесса). В настоящем исследовании адиабатической колебательной релаксации мы ограничиваемся более сложным случаем температурно-зависимых вращательных и колебательных релаксационных чисел.

В отличие от двухатомных молекул, обладающих единственной колебательной модой, многоатомные молекулы, такие как  $\text{CO}_2$ , имеют несколько колебательных мод с различными характеристическими температурами. В рамках обычной модели Ларсена–Боргнакке с континуальным описанием внутренней энергии используются одно значение характеристической колебательной температуры  $\theta_v$  и одно релаксационное число  $Z_v$  для всех колебательных мод многоатомной молекулы. Колебательная энергия многоатомной молекулы при использовании обычной континуальной модели не разделена по различным колебательным модам и описание энергообмена между поступательной и колебательной энергиями ничем не отличается от случая двухатомных молекул. В рамках модели с дискретным описанием внутренней энергии [2], которая используется в настоящем исследовании, колебательная энергия разделена по различным колебательным модам с различными колебательными температурами и релаксационными числами. При этом каждая колебательная мода релаксирует независимо от других со своей скоростью. Следовательно, для описания колебательной релаксации многоатомного газа на макроскопическом уровне в предположениях, соответствующих дискретной модели, необходимо решать систему уравнений вида (4), в которой каждая колебательная мода соответствует одному уравнению. При исследовании колебательной релаксации  $\text{CO}_2$  при высоких температурах нельзя считать бесконечно быстрой вращательную релаксацию и нельзя считать равными поступательную и вращательную температуры. Поэтому система уравнений релаксационных уравнений для колебательных мод  $\text{CO}_2$  дополняется уравнением Джинса (1) для вращательной моды. В адиабатических условиях эта система замыкается уравнением сохранения энергии.

Для численного интегрирования системы использовался явный метод Рунге–Кутты четвертого порядка точности по времени. Начальные условия задавались по аналогии с граничными условиями в задаче о колебательной релаксации за фронтом ударной волны в предположении, что поступательно-вращательная релаксация завершилась, а колебательная релаксация еще не начиналась (колебательная температура  $T_v$  в начальный момент времени равна нулю). Начальные значения поступательной и вращательной температур предполагались равными  $T_v = T_r = 20000$  К. Числовая плотность газа была выбрана равной  $10^{21} \text{ м}^{-3}$ .

На рис. 1 представлено сравнение результатов решения системы релаксационных уравнений (теория) и результатов ПСМ моделирования колебательной релаксации  $\text{CO}_2$  (DSMC). Около 100 000 модельных молекул использовалось в расчетах методом ПСМ. На рис. 1, *a* показана временная эволюция температур различных энергетических мод. Хорошо видно, что поступательная температура убывает быстрее, чем вращательная температура. Для выравнивания значений поступательной и вращательной температур требуется примерно 0,2 мс. В начале релаксационного процесса колебательная температура резко возрастает и отличие между поступательной и колебательной температурами в момент времени  $t = 0,2$  мс уменьшается до 8 %. Дальнейшее выравнивание поступательной и колебательной температур происходит очень медленно и требует более 1 мс. Временные зависимости поступательной, вращательной и колебательной температур, полученные методом ПСМ, находятся в отличном соответствии с решением системы релаксационных уравнений.

Колебательная релаксация  $\text{CO}_2$  может быть проиллюстрирована более подробно временными зависимостями температур различных колебательных мод: изгибной, симметричной и асимметричной (см. рис. 1, *b*). Отметим, что скорости релаксаций колебательных мод существенно различаются. Температуры изгибной и симметричной мод растут очень быстро, и их значения становятся равными быстрее, чем за 0,4 мс. Скорость релаксации антисимметричной моды намного ниже.

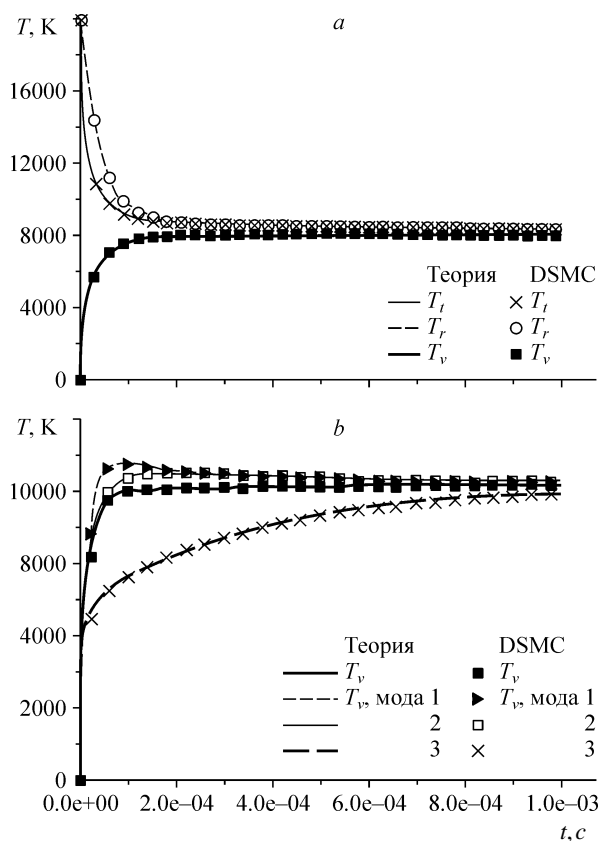


Рис. 1. Колебательная релаксация  $\text{CO}_2$  при адиабатических условиях.

*a* — поступательная, вращательная и колебательная температуры, *b* — полная колебательная температура и температура различных колебательных мод (1 — изгибной, 2 — симметричной, 3 — антисимметричной).

В момент времени  $t = 0,4$  мс температура асимметричной моды более чем на 30 % ниже температуры двух других мод. Полное выравнивание температур требует более 2 мс. Начиная с  $t = 0,4$  мс медленная релаксация антисимметричной моды приводит к медленному росту колебательной температуры (которая является полной температурой по всем колебательным модам) и очень медленному выравниванию поступательной и колебательной температур (см. рис. 1, *a*). Профили на рис. 1, *b* демонстрируют отличное совпадение решения релаксационных уравнений с результатом ПСМ моделирования для временной эволюции температур всех колебательных мод. Следовательно, можно заключить, что модель из работы [2] обеспечивает верные скорости колебательной релаксации для многоатомных газов.

### ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

Основное требование к модели для описания химических реакций в методе ПСМ заключается в том, что температурная зависимость константы скорости реакции, предсказываемая этой моделью, должна совпадать в условиях термического равновесия с константой скорости, определяемой соотношением Аррениуса

$$k_r = AT^B \exp(-E_a/kT), \quad (6)$$

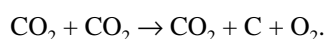
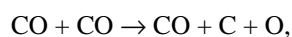
где  $A$  и  $B$  — аррениусовские константы и  $E_a$  — энергия активации реакции. Константа скоростей бимолекулярной реакции диссоциации или обмена  $k_r$  связывает скорость убывания одного реагирующего компонента  $i$  с числовыми плотностями реагирующих компонентов  $n_i$  и  $n_j$

$$dn_i/dt = -n_i n_j k_r. \quad (7)$$

Константы скоростей реакций вычислялись в процессе прямого статистического моделирования на основе уравнения (7). Около 100000 модельных молекул использовались в вычислениях. Температура изменялась от 5000 до 25000 К с шагом, равным 1000 К.

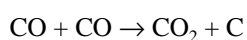
Для каждого значения температуры проводился отдельный расчет методом ПСМ. В начальный момент времени генерировался ансамбль модельных частиц в соответствии с равновесными распределениями скорости и заселенности вращательных и колебательных уровней. Молярные доли обоих реагирующих компонентов выбирались равными 0,5. В процессе моделирования подсчитывалось число пар молекул, принятых для химического столкновения в единицу времени, но сами химические столкновения не проводились для того, чтобы температура и состав смеси оставались неизменными.

В исследовании рассматривались некоторые из реакций диссоциации и обмена, играющих важную роль в течениях около космических аппаратов в атмосфере Марса. На рис. 2, *a* показаны температурные зависимости констант реакций диссоциации:



Для обеих реакций результаты расчетов методом ПСМ с использованием модели [2] находятся в отличном соответствии с аррениусовскими скоростями реакций.

Температурные зависимости констант реакций обмена, протекающих в течениях  $\text{gm CO}_2$ , а именно реакции



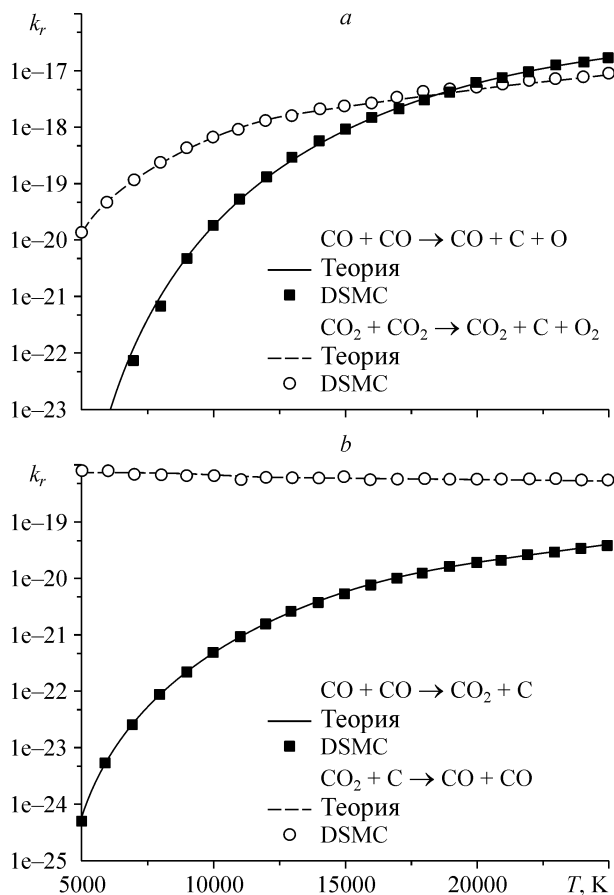
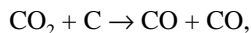


Рис. 2. Константы скорости реакций  $k_r$ ,  $\text{м}^3/\text{с}$ .

и обратной ей реакции



показаны на рис. 2, *b*. Как в случае реакции диссоциации, вычисления методом ПСМ с моделью [2] точно предсказывают скорости прямой и обратной реакций. Таким образом, рассмотренная модель обеспечивает скорости реакций, хорошо совпадающие с аррениусовскими скоростями в широком диапазоне температур.

#### СТРУКТУРА ФРОНТА УДАРНОЙ ВОЛНЫ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для изучения структуры фронта ударной волны и релаксационной зоны за фронтом в атмосфере Марса было проведено прямое статистическое моделирование гиперзвукового течения смеси  $\text{CO}_2$  и  $\text{N}_2$  около цилиндра радиуса 1 м с химическими реакциями и без них. В расчетах использовалось два значения скорости набегающего потока — 5400 и 3500 м/с (см., например, данные, использованные в работах [7], [8]) и два значения плотности набегающего потока —  $4,231 \times 10^{-6}$   $\text{кг}/\text{м}^3$  и  $4,231 \times 10^{-5}$   $\text{кг}/\text{м}^3$ . Были рассмотрены три случая, которые отличаются значениями скорости и плотности набегающего потока (см. табл. 1). Остальные параметры набегающего потока были взяты из работы [9]: температура 137,4 К и мольные доли  $\text{CO}_2$  и  $\text{N}_2$ , равные 0,9537 и 0,0463. При таких условиях значения числа Кнудсена, определенные по радиусу цилиндра, равны  $9,5 \times 10^{-3}$  для случая 1 и  $9,5 \times 10^{-4}$  для случаев 2 и 3 (см. табл. 1). Система координат была выбрана таким образом,

Таблица 1

Параметры набегающего потока для рассмотренных случаев

Случай	$V_{\infty}$ , м/с	$\rho_{\infty}$ , кг/м <sup>3</sup>	Кп
1	5400	$4,231 \times 10^{-6}$	$9,5 \times 10^{-3}$
2	5400	$4,231 \times 10^{-5}$	$9,5 \times 10^{-4}$
3	3500	$4,231 \times 10^{-5}$	$9,5 \times 10^{-4}$

что центр цилиндра расположен в точке  $(X, Y) = (1,0)$ , а точка торможения имеет координаты  $(X, Y) = (0,0)$ . Температура поверхности предполагалась равной 1000 К для всех случаев. Среднее число модельных частиц в типичном расчете было равно 16 миллионам при числе столкновительных ячеек около 4 миллионов. Большая часть расчетов проводилась на многопроцессорном кластере МВС1000М, расположенном в Межведомственном суперкомпьютерном центре (г. Москва).

Дополнительно исследовалась структура ударной волны и релаксационной зоны за ней в нереагирующей  $\text{CO}_2/\text{N}_2$ -смеси в одномерной постановке. Условия на левой сверхзвуковой границе расчетной области совпадали с условиями в набегающем потоке. Условия на правой дозвуковой границе определялись с использованием законов сохранения в предположении, что поступательные и внутренние энергетические моды находятся в равновесии (аналог соотношений Рэнкина–Гюгонио для газа с возбужденными колебательными степенями свободы).

#### РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Общая структура течения около цилиндра проиллюстрирована полями поступательной температуры для реагирующего и нереагирующего течений на рис. 3. Химические реакции существенно влияют на значение температуры за фронтом волны.

Рассмотрим более подробно структуру течения вдоль линии торможения при обтекании цилиндра нереагирующей смесью. Профили поступательной, вращательной и колебательной температур, а также плотности и давления для случаев 1 и 2 (табл. 1) представлены на рис. 4. Направление течения здесь совпадает с направлением оси  $X$ , и точка  $X = 0$  соответствует точке торможения. Значения макропараметров, представленных на графиках, здесь и далее обезразмерены на соответствующие значения в свободном потоке. Поступательная температура имеет

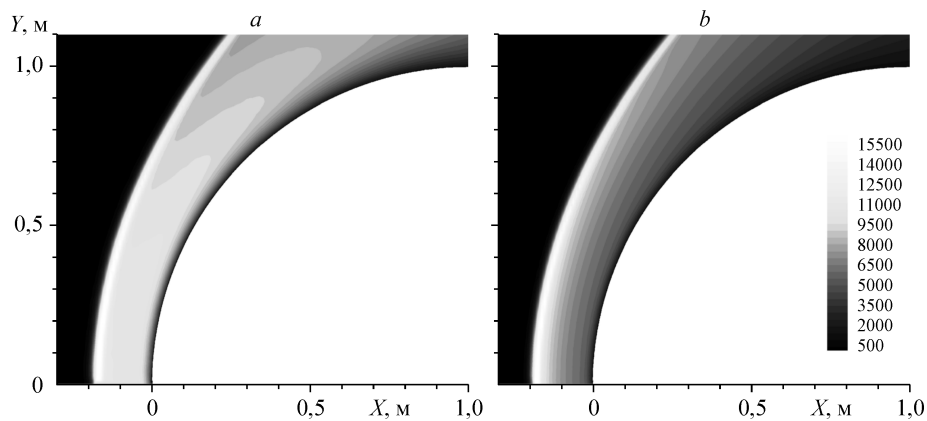


Рис. 3. Поступательная температура (случай 2).

$a$  — нереагирующее,  $b$  — реагирующее течения.



максимум внутри фронта ударной волны, ниже по потоку вращательная температура также достигает максимума, и далее вниз по потоку температуры всех мод релаксируют к одному и тому же значению. При увеличении плотности (случай 2 (см. табл. 1, рис. 4, *b*)) в распределении температур имеет место характерное “плато” за фронтом ударной волны. В этом случае течение вдоль линии торможения может быть разделено на три зоны: фронт ударной волны (до точки выравнивания поступательной и вращательной температур), вязкий ударный слой (завершение колебательной релаксации и термически равновесное вязкое течение, почти постоянные значения давления и плотности) и пограничный слой (снижение температуры, повышение плотности и постоянное давление). Для случая 1 (см. табл. 1) температурного “плато” не наблюдается и фронт ударной волны переходит непосредственно в пограничный слой (см. рис. 4, *a*).

Для сравнения распределений температур при различных числах Кнудсена профили температуры различных мод вдоль линии торможения, как функции безразмерной координаты  $X/\lambda$ , где  $\lambda$  — средняя локальная длина свободного пробега, изображены на рис. 5. Здесь точка  $X = 0$  соответствует центру ударной волны, т. е. точке, в которой плотность равна полусумме значений плотности перед волной и за волной. На этом рисунке даны результаты одномерного моделирования ударной волны. Они совпадают с результатами двухмерных расчетов за пределами пограничного слоя. Отход волны, измеренный в длинах свободного пробега, больше

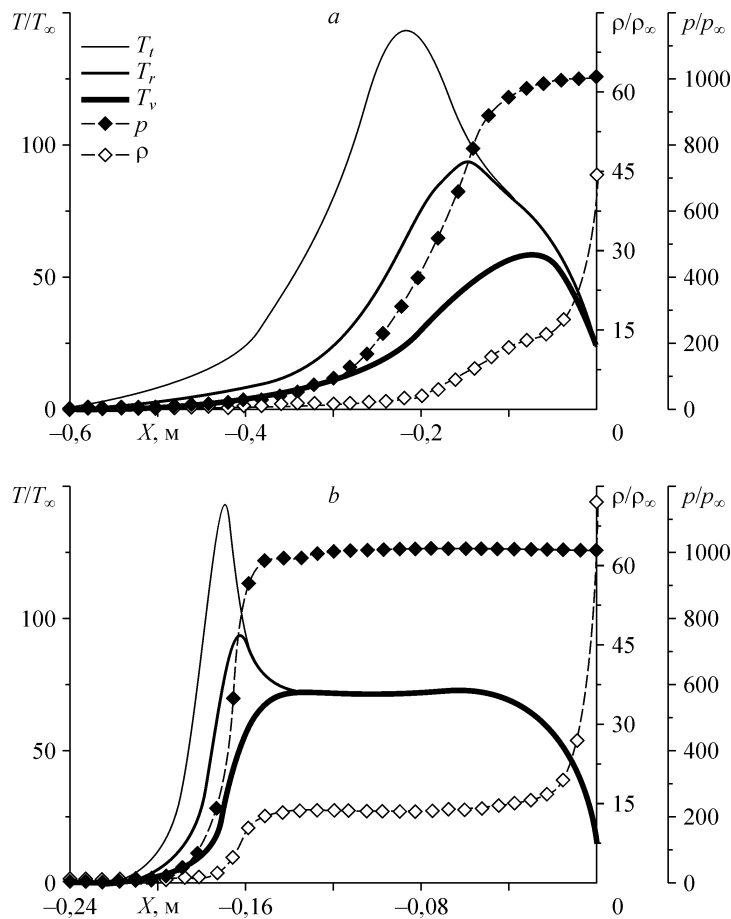


Рис. 4. Параметры течения вдоль линии торможения для случаев 1 (*a*), 2 (*b*).

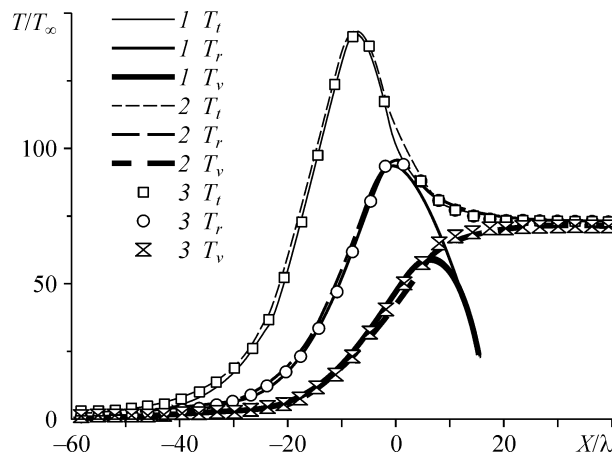


Рис. 5. Поступательная, вращательная и колебательная температуры. Случай 1 (1), случай 2 (2), одномерная ударная волна (3).

для меньшего числа Кнудсена (случай 2). Здесь значения температур всех мод становятся равными в ударном слое. Для большего числа Кнудсена (случай 1) температуры всех мод выравниваются только в пограничном слое. Следует отметить, что для данных условий колебательная релаксация протекает со скоростью, сравнимой с поступательной и вращательной релаксациями. Область поступательно-вращательной неравновесности достаточно велика и сравнима по величине с областью поступательно-колебательной неравновесности.

Результаты, представленные выше, показывают, что для достаточно низких чисел Кнудсена внутренняя структура головной ударной волны около тела в не реагирующем газе с возбужденными внутренними степенями свободы не зависит от числа Кнудсена при использовании безразмерной координаты  $X/\lambda$ . Ниже рассмотрено влияние скорости набегающего потока на структуру течения вдоль линии торможения. На рис. 6 показаны профили температуры различных мод, давления и плотности для случая 3. Хорошо видно, что снижение скорости потока приводит к качественному изменению в поведении профилей колебательной температуры. Рост колебательной температуры происходит довольно быстро внутри фронта ударной волны (от  $X = -0,22$  м до  $X = -0,18$  м), но дальше вниз по потоку во всем ударном слое колебательная температура остается примерно на 8–10 %

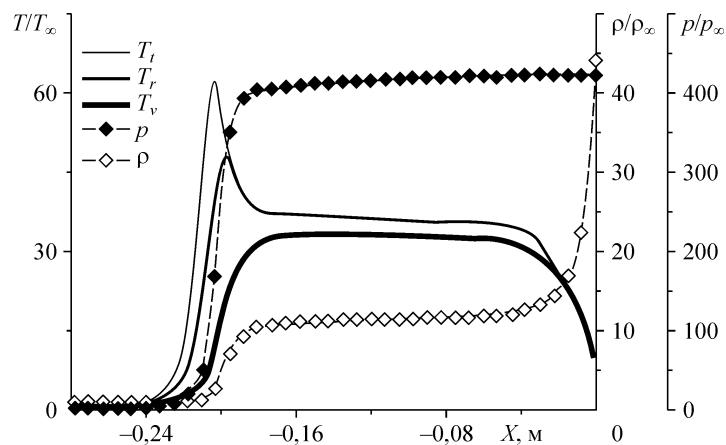


Рис. 6. Параметры течения вдоль линии торможения для случая 3.

ниже, чем поступательная и вращательная температуры, и достигает равного с ними значения только в пограничном слое.

Детально проанализировать такое поведение колебательной температуры за ударной волной можно с помощью профилей температур различных колебательных мод  $\text{CO}_2$ , которые показаны на рис. 7 (здесь и далее изгибная мода обозначена 1, симметричная мода — 2 и асимметричная мода — 3). Для скорости набегающего потока 3500 м/с (случай 3, см. табл. 1, рис. 7, а), полная релаксация изгибной и симметричной моды происходит довольно быстро (примерно в пределах 70 и 230 длин свободного пробега), и температуры этих мод выравниваются с поступательной и вращательной температурами. Антисимметричная мода, имеющая наибольшую характеристическую колебательную температуру, релаксирует значительно медленнее, чем другие моды. Максимальная температура антисимметричной моды, которая достигается в пределах 30 длин свободного пробега от точки торможения, примерно в два раза ниже, чем средние поступательная и вращательная температуры в ударном слое. Колебательная температура  $\text{CO}_2$  (средняя по всем модам) не успевает достичь значений  $T_r$  и  $T_v$  из-за медленной релаксации антисимметричной моды.

Для более высоких скоростей набегающего потока полная релаксация колебательных мод  $\text{CO}_2$  происходит на существенно меньшем расстоянии за фронтом волны. Это связано с тем, что при увеличении скорости набегающего потока

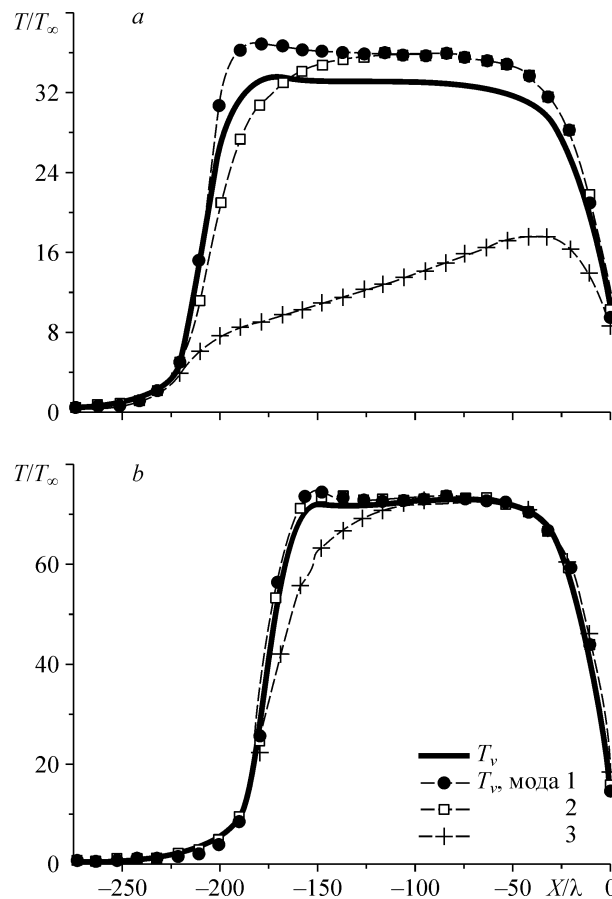


Рис. 7. Колебательная температура и температура различных колебательных мод  $\text{CO}_2$  для случаев 3 (а), 2 (б).

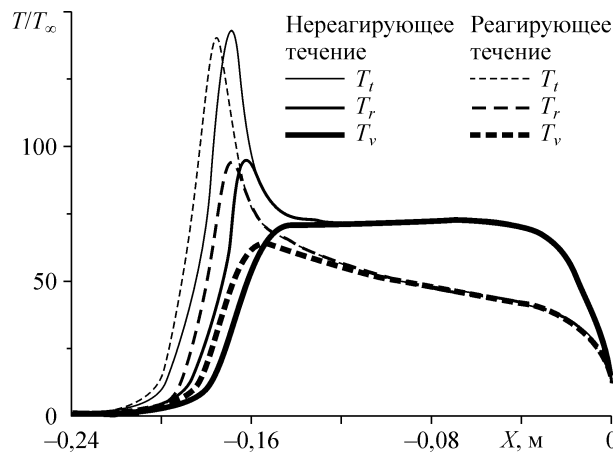


Рис. 8. Поступательная, вращательная и колебательная температуры для нереагирующего и реагирующего течений (случай 2).

увеличивается поступательная температура за фронтом ударной волны, что приводит к ускорению колебательной релаксации. На рис. 7, *b* показаны профили температуры всех трех колебательных мод  $\text{CO}_2$  для случая 2. Как ожидалось, асимметричная мода релаксирует медленней, чем изгибная и симметричная моды. Однако, в отличие от случая 3, все три колебательные моды приходят к равновесию примерно на расстоянии  $75 \lambda$  от центра ударной волны.

Рассмотрим влияние химических реакций на течение. Сравнение реагирующего и нереагирующего течений для случая 2 представлено на рис. 8. Химические реакции существенно снижают температуру внутри вязкого ударного слоя. На расстоянии 0,04 м до точки торможения температура в реагирующем случае более чем на 40 % ниже, чем в нереагирующем случае. Течение внутри ударной волны также подвержено влиянию химических реакций, что проявляется в уменьшении максимумов температур всех энергетических мод. Отметим, что химические реакции не приводят к существенным изменениям в профилях температуры для случаев 1 и 3 (эти профили на рисунках не показаны).

Интенсивность химических реакций может быть продемонстрирована профилями мольных долей  $\text{CO}_2$  для различных параметров набегающего потока (рис. 9). Профиль для случая 2 показывает, что мольная доля  $\text{CO}_2$  за волной падает с 0,95

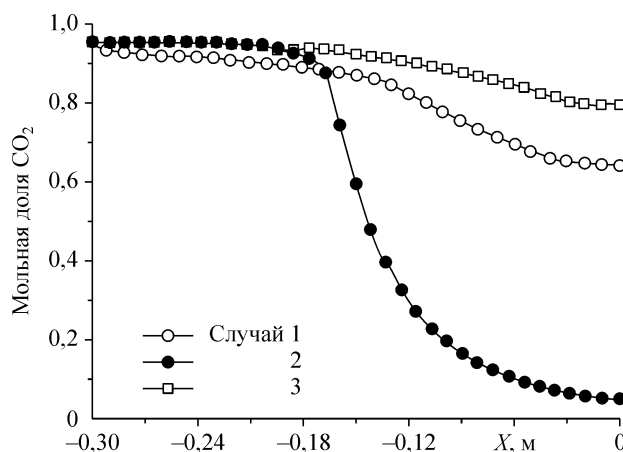


Рис. 9. Мольные доли  $\text{CO}_2$  в реагирующем течении для различных случаев.

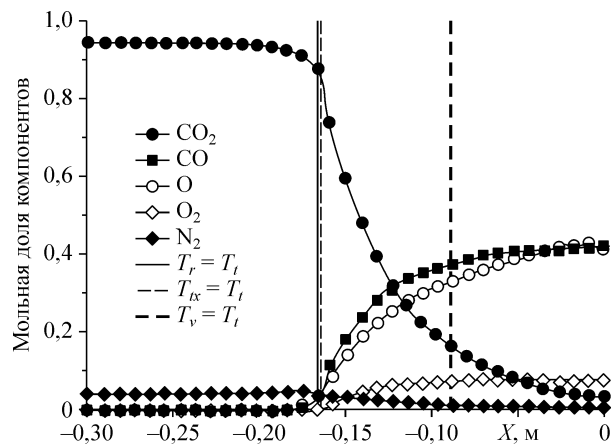


Рис. 10. Мольная доля основных компонентов вдоль линии торможения (случай 2).

до 0,05 в результате реакций диссоциации и обмена. Как хорошо видно в случаях 1 и 3, снижение мольной доли  $\text{CO}_2$  в результате химических реакций намного меньше, чем в случае 2.

Рассмотрим более подробно случай 2, где роль химических реакций наиболее выражена. На рис. 10 представлены мольные доли пяти основных компонентов для этого случая. Состав смеси меняется существенно в результате химических реакций. Например, около точки торможения в потоке присутствует 42,5 %  $\text{CO}$ , около 41 %  $\text{O}$ , и только 5,5 %  $\text{CO}_2$ . Различные области неравновесности показаны на рис. 10 вертикальными линиями. Тонкая сплошная линия здесь соответствует точке, в которой поступательная и вращательная температуры выравниваются, тонкая пунктирная линия показывает, где параллельная и перпендикулярная температуры становятся равными, а толстая пунктирная линия — где колебательная температура становится близкой к поступательной (различие не более 2 %). Видно, что химические реакции начинаются в области с колебательной, вращательной и поступательной неравновесностью. Например, в точке, в которой параллельная и перпендикулярная температуры становятся равными, мольная доля  $\text{CO}_2$  более чем на 10 % ниже таковой в набегающем потоке.

Для иллюстрации неравновесности течения во фронте волны и в релаксационной зоне на рис. 11 представлены профили параллельной, поступательной, вращательной и колебательной температур  $\text{CO}_2$ . Отметим, что поступательно-вращательная

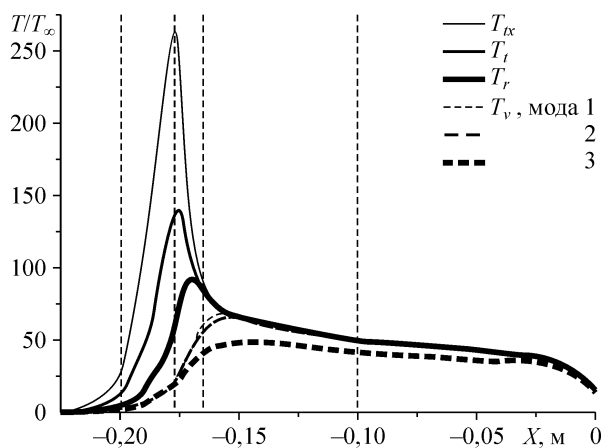


Рис. 11. Параллельная, поступательная, вращательная и колебательная температуры  $\text{CO}_2$  и точки, в которых представлена функция распределения (случай 2).

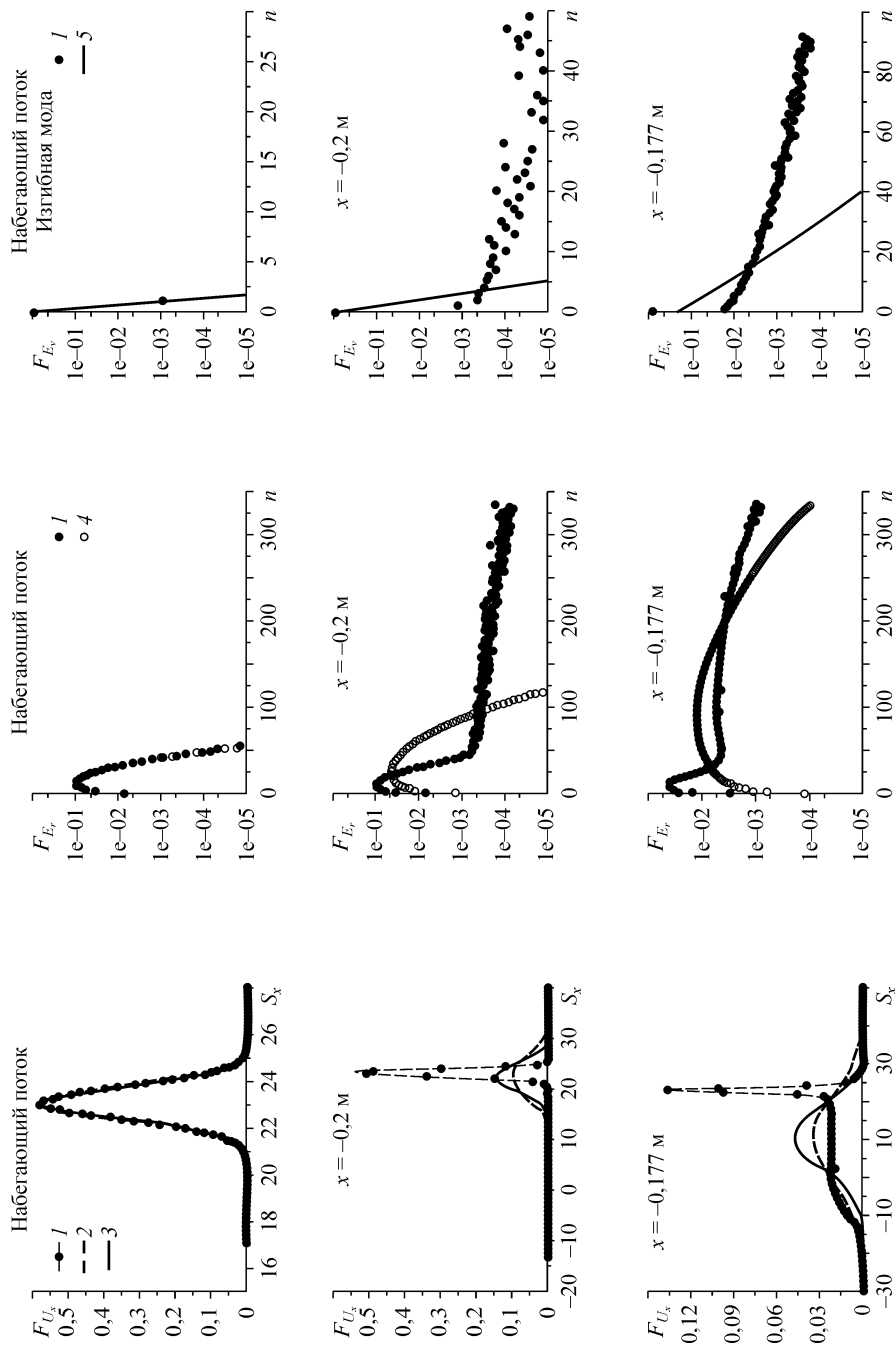


Рис. 12. Распределения  $F_{U_x}$ ,  $F_{E_v}$  и  $F_{E_p}$  компонент скорости  $U_x$  заселенности вращательных и колебательных уровней  $CO_2$ .  
 Скоростное отношение  $S_x$  определяется как  $S_x = U_x / \sqrt{2RT_\infty}$ ,  $n$  — номер уровня.

Вычисления методом ПМС (1), эллипсоидальное (2), маквелловское (3), равновесное (4) распределения.

релаксация внутри фронта ударной волны проходит на фоне поступательной неравновесности ( $T_{tx}$  не равна  $T_t$ ). Профили параллельной, поступательной и вращательной температур сходятся в точке  $X \sim -0,165$  м. В этой точке возбуждение колебательных энергетических мод уже существенно ( $T_v \sim 0,5T_t = 0,5T_r$ ). Релаксация колебательной энергии продолжается далее вниз по потоку и заканчивается только внутри пограничного слоя.

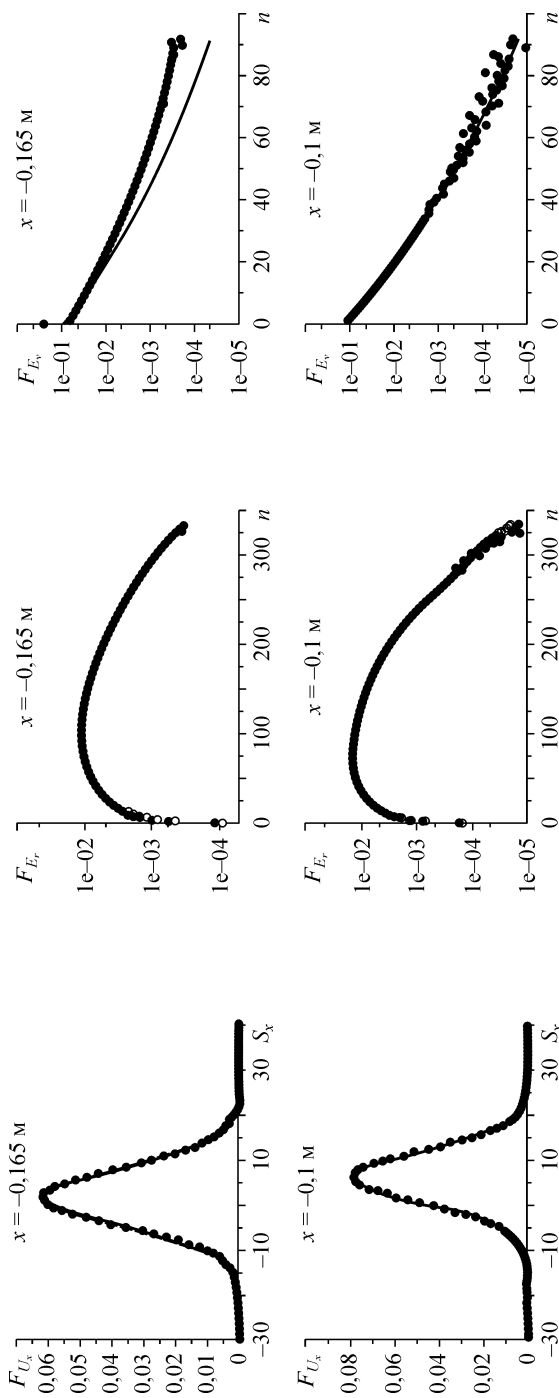


Рис. 12. Окончание.

Неравновесность течения внутри фронта ударной волны и за ним может быть исследована более детально на уровне функций распределения. Функции распределения компоненты скорости молекул  $U_x$ , заселенности вращательных уровней, а также заселенности уровней изгибающей колебательной моды  $CO_2$  были получены в различных точках вдоль линии торможения (см. рис. 11, вертикальные пунктирные линии). В набегающем потоке распределения всех мод равновесны (см. первый ряд графиков на рис. 12). В точке  $X = -0.2$  м, где вращательная и колебательная температуры начинают расти, распределения существенно неравновесны. Функция распределения скорости здесь имеет вид дельта-пика, соответствующего скорости набегающего потока. Отметим, что в потоке также присутствует небольшая доля молекул с большими отрицательными скоростями, которые движутся из горячей части ударной волны вверх по потоку. В точке  $X = -0.177$  м, которая соответствует максимуму поступательной температуры, функция распределения скоростей становится близкой к максвелловской, но пик, соответствующий скорости набегающего потока, все еще сохраняется. Заселенности вращательных и колебательных уровней также сильно неравновесны. В точке  $X = -0.165$  м, где  $T_v$ ,  $T_{v_x}$  и  $T_r$  становятся равными, распределения скорости и вращательных уровней близки к равновесному виду. Распределение заселенности колебательных уровней в этой точке не является равновесным. Эта неравновесность проявляется в перезаселенности нулевого колебательного

уровня, в то время как заселенность остальных уровней имеет почти равновесный вид. В точке  $X = -0,1$  м, где температура изгибной моды  $\text{CO}_2$  очень близка к  $T_r$  и  $T_b$ , все представленные распределения равновесны.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен анализ применимости модели эффектов реального газа метода ПСМ, представленной недавно в работе [2], на основе сравнения скоростей колебательной релаксации и химических реакций, полученных в моделировании, с известными равновесными значениями скоростей этих процессов. В расчетах методом ПСМ получено отличное совпадение временной эволюции температур различных энергетических мод молекул в процессе адиабатической колебательной релаксации  $\text{CO}_2$  с решением системы релаксационных уравнений. Расчеты методом ПСМ показали также отличное совпадение скоростей нескольких реакций диссоциации и обмена, протекающих в  $\text{CO}_2$ -течениях, с аррениусовскими скоростями в широком диапазоне температур.

Модель [2] использовалась в исследовании структуры головной ударной волны и релаксационной зоны при обтекании цилиндра для чисел Кнудсена  $9,5 \times 10^{-3}$  и  $9,5 \times 10^{-3}$  и скоростей набегающего потока 3500 и 5400 м/с в  $\text{CO}_2/\text{N}_2$ -смеси. Вычисления проводились с химическими реакциями и без них. Структура ударной волны и релаксационной зоны за ней также были промоделированы для не реагирующего случая в одномерной постановке. Профили макропараметров вдоль линии торможения как функции координаты, нормированной на длину свободного пробега в набегающем потоке, идентичны для обтекания цилиндра при различных числах Кнудсена и совпадают с соответствующими профилями для одномерной ударной волны. Для высокой скорости потока (5400 м/с) зона колебательной релаксации сравнима с зонами поступательной и вращательной релаксаций. Для меньшей скорости набегающего потока (3500 м/с) эта зона намного больше, что связано с очень медленной релаксацией антисимметричной моды  $\text{CO}_2$ .

Также исследовалось влияние химических реакций на структуру течения. Для числа Кнудсена  $\text{Kn} = 9,5 \times 10^{-4}$  и скорости набегающего потока 5400 м/с химические реакции существенно влияют на структуру течения, с уменьшением температуры приблизительно на 40 % по сравнению с не реагирующим течением. Влияние химических реакций существенно снижается при увеличении числа Кнудсена ( $9,5 \times 10^{-3}$ ) или уменьшении скорости набегающего потока (3500 м/с).

Вычисления демонстрируют сильную термическую неравновесность во фронте ударной волны и в релаксационной зоне как на уровне макропараметров (температур различных мод), так и на уровне функций распределения. Колебательная релаксация и химические реакции начинаются внутри фронта ударной волны и частично протекают на фоне поступательно-вращательной неравновесности.

#### Приложение

##### МОДЕЛИ УПРУГОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ

Как было сказано выше, в настоящем исследовании для моделирования упругих столкновений была использована модель переменных твердых сфер VHS. Также как и в модели твердых сфер, в модели VHS рассеяние сталкивающихся молекул предполагается изотропным. Отличие от модели твердых сфер заключается в том, что величина полного сечения столкновений в модели VHS зависит от скорости сталкивающихся молекул, что обеспечивает температурную зависимость коэффициента вязкости в виде степенного закона

$$\mu \sim T^\omega,$$



для любого заданного  $\omega$  из интервала  $[0,5; 1]$ . Параметрами этой модели являются эффективный диаметр  $d_{ref}$  молекулы при некотором значении температуры газа и столкновительный параметр  $\nu = \omega - 1/2$ . Значения этих параметров для столкновений молекул восьми сортов, рассмотренных в настоящем исследовании, представлены в табл. 2 и 3 на основе данных [1].

Основным недостатком модели VHS является то, что она приводит к ошибке в значении коэффициента диффузии. Этому недостатка лишена модель переменных мягких сфер VSS. В отличие от модели VHS, в этой модели рассеяние молекул в общем случае не является изотропным. Модель VSS в дополнение к двум параметрам модели VHS имеет параметр  $\alpha$ , определяющий закон рассеяния и вычисляемый по данным о коэффициенте диффузии. При значении  $\alpha = 1$  рассеяние изотропно, и взаимодействие молекул полностью соответствует модели VHS.

Отметим, что значение параметра VSS модели  $\alpha$  известны не для всех столкновений в рассматриваемой восьмикомпонентной смеси, и поэтому в настоящем исследовании была использована модель VHS. Для оценки влияния модели дополнительно проведен расчет для случая 2 (см. табл. 1) с использованием модели VSS. Значения эффективных диаметров и обратные величины параметров модели VSS представлены в табл. 2 и 4. В этом расчете использовались данные по параметрам VSS модели из [1]. При отсутствии данных по эффективному диаметру молекулы использовалось значение эффективного диаметра модели VHS. В случае отсутствия данных по параметру  $\alpha$  для столкновений между молекулами одного сорта (диагональные элементы таблицы 4, например столкновения O–O) использовалось значение  $\alpha = 1$ , что соответствует модели VHS, разных сортов — его значение принималось равным полусумме параметров  $\alpha$  для этих сортов. Значения столкновительного параметра  $\nu = \omega - 1/2$  для всех столкновений совпадало с соответствующими значениями для модели VHS (см. табл. 3, за исключением столкновений, для которых данные представлены в [1]: для столкновения CO–O<sub>2</sub>  $\nu = 0,21$ , а для столкновения N<sub>2</sub>–CO<sub>2</sub>  $\nu = 0,25$ ).

Расчеты для случая 2 (табл. 1) показали, что использование модели VSS приводит к небольшим количественным отличиям в результатах расчетах. В частности, величина отхода головной ударной волны увеличивается примерно на 5 %. На рис. 13 представлены распределения мольной доли некоторых компонентов вдоль линии торможения для расчетов с использованием моделей VSS и VHS. Отличия между результатами заключаются прежде всего в изменении величины отхода

Таблица 2

Эффективные диаметры молекул при температуре 273 К,  $10^{-10}$  м

	O	N	C	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	NO	CO	CO <sub>2</sub>
VHS	3,00	3,00	3,26	4,07	4,17	4,20	4,19	5,62
VSS	3,00	3,00	3,26	4,01	4,11	4,20	4,12	5,54

Таблица 3

Параметры столкновений  $\nu = \omega - 1/2$  для модели VHS

	O	N	C	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	NO	CO	CO <sub>2</sub>
O	0,2500	0,2500	0,1945	0,2600	0,2450	0,2700	0,2400	0,3400
N	0,2500	0,2500	0,1945	0,2600	0,2450	0,2700	0,2400	0,3400
C	0,1945	0,1945	0,1390	0,2045	0,1895	1,2145	0,1845	0,2845
O <sub>2</sub>	0,2600	0,2600	0,2045	0,2700	0,2550	0,2800	0,2500	0,3500
N <sub>2</sub>	0,2450	0,2450	0,1895	0,2550	0,2400	0,2650	0,2350	0,3350
NO	0,2700	0,2700	1,2145	0,2800	0,2650	0,2900	0,2600	0,3600
CO	0,2400	0,2400	0,1845	0,6494	0,2350	0,2600	0,2300	0,3300
CO <sub>2</sub>	0,3400	0,3400	0,2845	0,2500	0,3350	0,3600	0,3300	0,4300

Таблица 4

Обратные величины  $\alpha^{-1}$  параметров модели VSS

	O	N	C	O <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	NO	CO	CO <sub>2</sub>
O	1,0000	1,0000	1,0000	0,8333	0,8475	1,0000	0,8032	0,7663
N	1,0000	1,0000	1,0000	0,8333	0,8475	1,0000	0,8032	0,7663
C	1,0000	1,0000	1,0000	0,8333	0,8475	1,0000	0,8032	0,7663
O <sub>2</sub>	0,8333	0,8333	0,8333	0,7143	0,7246	0,8333	0,6494	0,5814
N <sub>2</sub>	0,8475	0,8475	0,8475	0,7246	0,7353	0,8475	0,6494	0,5348
NO	1,0000	1,0000	1,0000	0,8333	0,8475	1,0000	0,8032	0,7663
CO	0,8032	0,8032	0,8032	0,6494	0,6494	0,8032	0,6711	0,6211
CO <sub>2</sub>	0,7663	0,7663	0,7663	0,5814	0,5348	0,7663	0,6211	0,6211

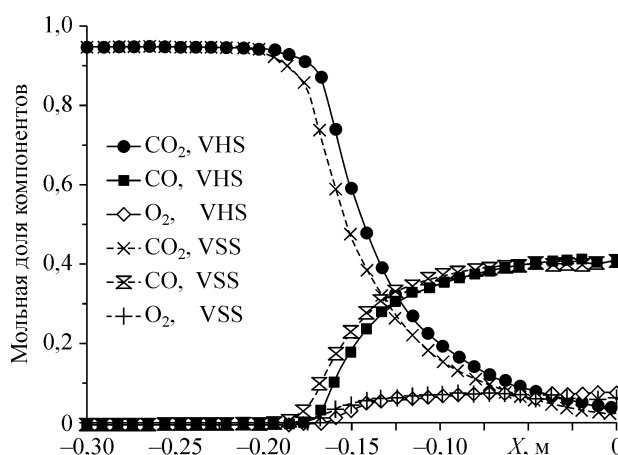


Рис. 13. Мольная доля компонентов вдоль линии торможения (случай 2).

волны и не носят качественного характера. Следовательно, использование модели VHS не приводит к существенной ошибке и оправдано в настоящем исследовании.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. — Clarendon Press, Oxford, 1994. — С. 458.
2. Gimelshein S.F., Gimelshein N.E., Levin D.A., Ivanov M.S., Wysong I.J. On the use of chemical reaction rates with discrete internal energies in the direct simulation Monte Carlo method // Physics of Fluids. — 2004. — Vol. 16, Iss. 7. — P. 2442–2451.
3. Bergemann F., Boyd I.D. DSMC simulation of inelastic collisions using the Borgnakke — Larsen method extended to discrete distribution of vibrational energy // Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations. — 1994. — Vol. 158. — P. 174–183.
4. Ivanov M.S., Markelov G.N., Gimelshein S.F. Statistical simulation of reactive rarefied flows: numerical approach and applications // AIAA Paper. — 1998. — No. 98-2669.
5. Haas B.L., Hash D., Bird G.A., Lumpkin F.E., Hassan H. Rates of thermal relaxation in direct simulation Monte Carlo methods // Phys. Fluids A. — 1994. — Vol. 6, No. 6. — P. 2191–2201.
6. Jeans J.H. The dynamical theory of gases. — Cambridge University Press, London, 1916.
7. Gorelov V.A., Gladyshev M.K., Kireev A.Yu., Shilenkov S.V. Nonequilibrium molecular radiation near a space vehicle at the Martian atmosphere entry // Proc. of the 4th European Symposium on Aerothermodynamics of Space Vehicles (Capua, Italy, 15–18 October 2001), SP-487, European Space Agency. — 2002. — P. 123–135.
8. Gromov V., Surzhikov S. Convective and radiative heating of Martian space vehicle base surface // Proc. of the 4th European Symposium on Aerothermodynamics of Space Vehicles (Capua, Italy, 15–18 October 2001), SP-487, European Space Agency. — 2002. — P. 265–269.
9. Moss J.N., Wilmoth R.G., Price J.M. DSMC simulation of blunt body flows for Mars entries: Mars Pathfinder and Mars Microprobe capsules // AIAA Paper. — 1997. — No. 97-2508.

Статья поступила в редакцию 12 сентября 2005 г.