

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ХИМИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЗА ОТРАЖЕННЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

Д.С. Кравченко^{1,2}, Е.В. Кустова^{1,2}, М.Ю. Мельник^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

²ФИЦ ИУ РАН, Москва

kravchenk06.denis@gmail.com

Аннотация. Исследуется колебательно-химическая релаксация кислорода O_2 и смеси NO/Ar за отраженными ударными волнами (УВ) в условиях экспериментов. Для численного моделирования используется поуровневый подход, наиболее подробный из континуальных подходов. Результаты расчета сравниваются с экспериментом, оценивается точность теоретических моделей. Ключевой особенностью данной задачи является моделирование как падающей, так и отраженной ударных волн. Отраженная УВ проходит через нагретый, неравновесный газ, что и составляет основную сложность при моделировании. Показана важность учета колебательной релаксации между волнами для корректного расчета газодинамических параметров за отраженной волной.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 22-11-00078.

Во многих современных задачах газовой динамики условия течения далеки от равновесных. При сильных отклонениях от равновесия описание газа требует детальных моделей кинетики. Одним из примеров задач, где возникает подобная неравновесность, является задача моделирования течения за ударной волной (УВ). УВ возникают вблизи поверхности спускаемых аппаратов или объектов, движущихся с большой скоростью в атмосфере Земли. Поэтому моделирование связанной задачи колебательно-химической релаксации является актуальным для современных аэрокосмических приложений. Для таких задач удобно использовать континуальные подходы, одним из наиболее подробных континуальных подходов является поуровневый подход [1], основанный на совместном решении уравнений газовой динамики и уравнений баланса заселенностей каждого колебательного состояния.

В течение последнего десятилетия валидацию моделей проводили на основе данных эксперимента [2], однако интерпретация данных эксперимента вызывала некоторые вопросы. Недавние эксперименты с исследованием релаксации кислорода O_2 [3] и оксида азота NO [4] за отраженными ударными волнами дают хорошую возможность для проверки различных кинетических моделей в широком диапазоне температур. Эта возможность уже использовалась нами в работе [5], где были представлены данные по моделированию течения кислорода за отраженной УВ и проведено сравнение с экспериментом [3]. Наиболее полные данные для кислорода, а также сравнение с другим численным экспериментом [6], основанным на методе квазиклассического траекторного моделирования QCT, были представлены в статье [7].

Особенностью экспериментов [3, 4] является проведение всех измерений за отраженной УВ. В таких экспериментах газ нагревается значительно сильнее, что позволяет проводить валидацию при более высоких температурах, однако теоретическое описание таких течений вызывает некоторые сложности. Так, отраженная волна проходит через уже нагретый падающей УВ неравновесный газ, в котором не завершились процессы релаксации. Следовательно, требуется предварительное моделирование частичной, т.е. незавершенной релаксации за падающей УВ в течение промежутка времени t_r между прохождением падающей и отраженной УВ. В то же время, при интерпретации эксперимента [3] полагалось, что время t_r и температура за падающей УВ недостаточны для значительной колебательно-химической релаксации, и авторы эксперимента использовали предположение о замороженной релаксации за падающей УВ. Поэтому в [5, 7] задача моделировалась и в такой упрощенной постановке. В эксперименте [4], вследствие чрезвычайно быстрой колебательной релаксации NO , частичной релаксацией между УВ не пренебрегали.

Целью настоящей работы являлось моделирование процессов связанной колебательно-химической релаксации, происходящих в кислороде и в смеси NO/Ar за отраженной УВ в условиях экспериментов [3, 4], сравнение с экспериментальными данными и выбор моделей, дающих лучшее согласие с экспериментом.

Релаксация моделировалась на основе нулевого приближения метода Чепмена–Энскога в точной поуровневой постановке [1], позволяющей детально описать сильнонеравновесную физико-химическую кинетику. Колебательные энергообмены описывались с использованием обобщенной теории Шварца–Славского–Герцфельда (SSH – теория) и модели нагруженного гармонического осциллятора (ФНО) с учётом только одноквантовых переходов. Процессы диссоциации описывались с использованием модели Маррона–Тринора с наиболее распространёнными в литературе значениями параметра U . Более подробно кинетическая схема и используемые модели реакций описаны в [8].

Рассмотрим подробнее результаты моделирования течения кислорода за отраженной УВ. На рис. 1 показано сравнение колебательной температуры за отраженной УВ с учетом частичной релаксации между УВ с экспериментальными данными [3] и численным моделированием на основе QCT из работы [6]. Видно, что начальные значения сильно расходятся, что указывает на важность учета колебательной релаксации между волнами из-за наличия начальной неравновесности газа в момент прохождения отраженной УВ. Наилучшее

совпадение с экспериментальными данными в чистом кислороде обеспечивает комбинация моделей SSH и Маррона–Тринора с параметром $U=3T$.

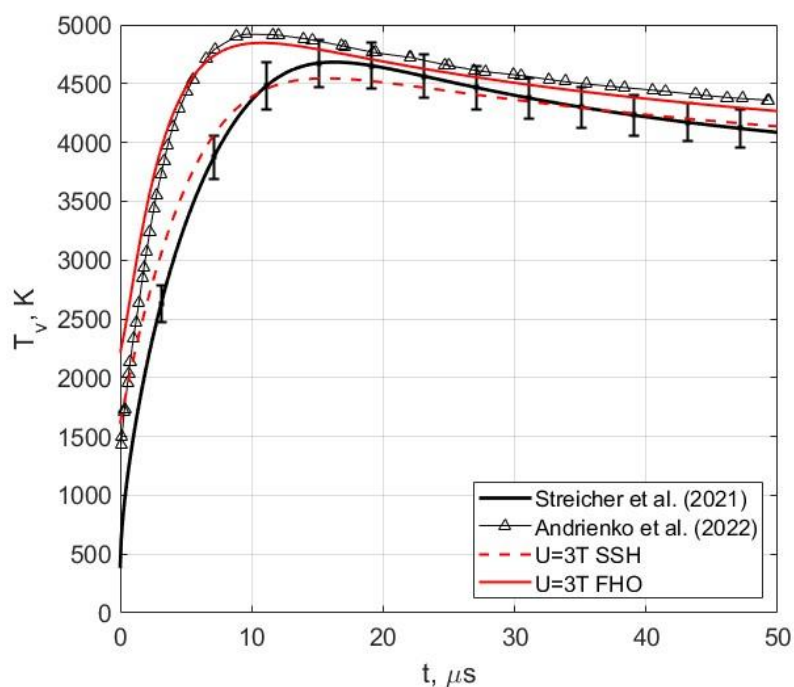


Рис. 1. Колебательная температура за отраженной УВ в кислороде с учетом релаксации между падающей и отраженной УВ.

Анализ результатов показал, что учет колебательной релаксации важен для моделирования течения кислорода за отраженной УВ, и без учета частичной колебательной релаксации такие макропараметры газа как давление и концентрация довольно сильно отличаются от экспериментальных данных. В то же время химическими реакциями между падающей и отраженной волнами вполне можно пренебрегать, вследствие низких температур.

В новом эксперименте с NO [4] при интерпретации измерений колебательной релаксацией между УВ не пренебрегали из-за высокой скорости колебательных энергообменов. Поэтому представляет интерес провести моделирование колебательно-химической релаксации NO за отраженной УВ и сравнить результаты с новыми экспериментальными данными [4], чтобы оценить влияние колебательной релаксации между падающей и отраженной УВ на газодинамические параметры и определить наиболее точные теоретические модели для описания кинетики оксида азота.

Литература

1. Е.А. Нагнибеда, Е.В. Кустова // Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2003
2. L.B. Ibragimova, A.L. Sergievskaya, V.Y. Levashov, O.P. Shatalov, Y.V. Tunik, I.E. Zabelinskii // Investigation of oxygen dissociation and vibrational relaxation at temperatures 4000-10800 K, *J. Chem. Phys.* 139:3 2013. P. 034317
3. J.W. Streicher, A. Krish, R.K. Hanson // Coupled vibration-dissociation time-histories and rate measurements in shock-heated, nondilute O₂ and O₂-Ar mixtures from 6000 to 14000 K, *Phys. Fluids.* 33 2021. P. 056107
4. J.W. Streicher, A. Krish, R.K. Hanson // High-temperature vibrational relaxation and decomposition of shock-heated nitric oxide. I. Argon dilution from 2200 to 8700 K, *Phys. Fluids.* 34 2022. P. 116122
5. Д.С. Кравченко, Е.В. Кустова, М.Ю. Мельник // Моделирование поуровневой кинетики кислорода за отраженными ударными волнами, *Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия*, 9:3 2022. 426–439
6. V.T. Baluckram, A.J. Fangman, D.A. Andrienko // Simulation of Oxygen Chemical Kinetics Behind Incident and Reflected Shocks via Master Equation, *J. Thermophys. Heat Transf.* 37 2022. 198–212
7. D.S. Kravchenko, O.V. Kunova, E.V. Kunova and M.Yu.Melnik // State-to-State Oxygen Kinetics behind Reflected Shock Waves: Assessment of Different Approaches, *Rarefield Gas Dynamics 32th*, accepted in AIP Conference Proceedings, 2023
8. L. Campoli, O. Kunova, E. Kustova, M. Melnik // Models validation and code profiling in state-to-state simulations of shock heated air flows, *Acta Astronautica*, 75 2020. 493–509