



ВМСППС'2021

**МАТЕРИАЛЫ XXII МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
МЕХАНИКЕ И СОВРЕМЕННЫМ ПРИКЛАДНЫМ ПРОГРАММНЫМ СИСТЕМАМ**



Посвящается году Науки и Технологий

**МАТЕРИАЛЫ XXII МЕЖДУНАРОДНОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МЕХАНИКЕ
И СОВРЕМЕННЫМ ПРИКЛАДНЫМ
ПРОГРАММНЫМ СИСТЕМАМ**



ВМСППС'2021

**4–13 сентября 2021 г.
Алушта, Крым**



холодного воздуха, движущегося вниз с образованием малых циркуляционных структур вблизи угловых точек. Существенное влияние на общую картину течения оказывает приток более холодного воздуха, который движется параллельно оси x и оттесняет вниз поток нагретого от пола воздуха, что приводит к повышению температуры поверхности пола при некоторых соотношениях координат расположения зон притока и оттока воздуха.

Полученные распределения температур и скоростей воздуха обеспечивают возможность оценки влияния смешанной конвекции на эффективность работы ГИИ с целью обеспечения регламентных условий микроклимата рабочей зоны.

1. *Kuznetsov G. V., Kurilenko N. I., Maksimov V. I., Nagornova T. A.* Experimental and numerical study of heat transfer in production area heated by gas infrared source // International Journal of Thermal Sciences. — 2020. — V. 154. — P. 106396.
2. *Russell J., Cohn R.* Comsol Multiphysics. — Scotland, United Kingdom: Lennex Corp, 2012. — 79 p.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ НА ПОУРОВНЕВЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ СКОРОСТИ ДИССОЦИАЦИИ СО И О₂*

Е. В. Кустова, А. С. Савельев

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

При моделировании высокоскоростных и высокоэнтальпийных течений газовых смесей важную роль играет корректное описание химических реакций и релаксационных процессов. Современный уровень развития компьютерных технологий позволяет производить расчеты не только в однотемпературном и многотемпературном приближениях, но и в более сложном поуровневом представлении, позволяющем учитывать вклад колебательного и электронного возбуждения реагентов и продуктов реакции в реакции диссоциации и обмена.

С использованием недавних результатов квазиклассических траекторных расчетов (QCT) [1, 2] авторами ранее была разработана простая и эффективная модель коэффициентов скорости диссоциации молекул воздуха, основанная на широко известной модели Тринора–Маррона [3]. Параметр U модели был получен в виде кусочно-непрерывных функций от температуры [4]. Были изучены коэффициенты скорости обменных реакций в компонентах воздуха и атмосферы Марса (углекислом газе и продуктах его диссоциации). В результате были получены формулы для коэффициентов скорости реакций, учитывающие колебательное возбуждение всех молекул, участвующих в реакции. В работе [5] представлено подробное исследование влияния учета колебательного возбуждения различных частиц, участвующих в реакции Будуара, на величину поуровневых коэффициентов скорости реакции. Наконец, на основе предположений, представленных в работе [6], и подхода из работы [3] было получено обобщенное выражение для коэффициентов скорости химических реакций, позволяющее учитывать не только колебательное возбуждение всех молекул, участвующих в реакции, но и электронное возбуждение всех частиц, участвующих в реакции, включая атомы [4].

Данная работа посвящена исследованию поуровневых коэффициентов скорости реакций диссоциации кислорода и монооксида углерода на основании теоретиче-

*Работа выполнена при поддержке РФФ (грант №19-11-00041).

ской модели, построенной в [4]. Изучено влияние электронного возбуждения реагирующей молекулы и атома кислорода — продукта реакции на коэффициенты скорости диссоциации для условий, характерных для течений за фронтом ударной волны. Показано, что учет возбужденных электронных состояний приводит к уменьшению коэффициентов скорости диссоциации с основного электронного уровня.

1. Planetary entry integrated models. — URL: <http://phys4entrydb.ba.imip.cnr.it/Phys4EntryDB/>.
2. *Baluckram V. T., Andrienko D. A.* First-principle simulation of vibrational activation and dissociation in oxygen shock flows // AIAA Paper. — 2021. — P. 0447.
3. *Marrone P. V., Treanor C. E.* Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. — 1963. — V. 6, No. 9. — P. 1215–1221.
4. *Kustova E., Savelev A.* Generalized model for state-resolved chemical reaction rate coefficients in high-temperature air // IOP Conference Series. — 2021 (принято в печать).
5. *Kustova E., Savelev A.* State-resolved and two-temperature rate coefficients for $\text{CO} + \text{CO} = \text{CO}_2 + \text{C}$ reaction // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. — 2020. — V. 927. — P. 012001.
6. *Aliat A.* State-to-State Dissociation-Recombination and Chemical Exchange Rate Coefficients in Excited Diatomic Gas Flows // Physica A. — 2008. — V. 387. — P. 4163–4182.

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ НА ЧАСТИЧНО КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ ПОУРОВНЕВОМ ОПИСАНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ

Е. В. Кустова, Л. А. Шакурова

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

Как известно, для получения полного описания газа требуется задание начальных и граничных условий. Данная работа посвящена получению последних с помощью методов кинетической теории газов. Граничные условия для указанных макропараметров газа получаются из кинетического граничного условия методом, аналогичным получению уравнений переноса из уравнения Больцмана [1].

Условия на твердой границе для числовых плотностей компонентов смеси, температуры и скорости при течении многокомпонентных неравновесных газовых смесей можно найти в работах [2–4]; при этом учитываются химические реакции на поверхности в рамках однетемпературного подхода. В отличие от указанных работ данное исследование фокусируется на сильнонеравновесном газе с быстрыми и медленными процессами. Задачи такого плана возникают, например, при моделировании обтекания спускаемых аппаратов. В качестве модели, описывающей газ, выбрано детальное поуровневое приближение, учитывающее неравновесную колебательную и химическую кинетику. Получены граничные условия для температуры, скорости, заселенностей колебательных уровней в нулевом и первом приближениях обобщенного метода Энского–Чепмена. Учитывается дезактивация возбужденных колебательных состояний и реакции рекомбинации-диссоциации на поверхности.

1. *Nagnibeda E., Kustova E.* Non-equilibrium reacting gas flows: kinetic theory of transport and relaxation processes. — Springer Science & Business Media, 2009.
2. *Zade A., Renksizbulut M., Friedman J.* Slip/jump boundary conditions for rarefied reacting/non-reacting multi-component gaseous flows // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2008. — V. 51. — P. 5063–5071. — DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.02.044.