

01;03

Численное исследование неравновесных течений с помощью различных моделей колебательной релаксации

© Н.В. Петров^{1,2}, С.В. Кириловский^{1,3}, Т.В. Поплавская^{1,3},
Г.В. Шоев^{1,3}

¹ Новосибирский государственный университет

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

³ Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

E-mail: nikita.ppk@gmail.com, shoev@itam.nsc.ru

Поступило в Редакцию 27 января 2016 г.

На основе численного моделирования проведены сравнительный анализ широко используемой формулы Ландау–Теллера для малых отклонений от термического равновесия и ее обобщение для произвольного отклонения от термического равновесия, полученное методами кинетической теории газов. Рассмотрены термически неравновесные течения углекислого газа около острой пластины, течения чистого азота между двумя симметрично расположенными клиньями, а также течение смеси N_2/N с учетом колебательной релаксации и диссоциации около конуса. Проведено сравнение с доступными экспериментальными данными.

В гиперзвуковых течениях за сильными ударными волнами происходит возбуждение колебательных степеней свободы молекул и диссоциация. Это приводит к возникновению областей течения с термической и химической неравновесностью, которые могут сильно влиять на структуру потока.

Для описания неравновесных течений на основе уравнений движения механики сплошных сред часто используется двухтемпературная модель релаксационных течений, в рамках которой вращательная и поступательная моды находятся в равновесии, а изменение колебательной энергии моделируется дополнительным уравнением релаксации с учетом конечного времени энергообмена между колебательными и поступательно-вращательными степенями свободы молекул.

В большинстве исследований для моделирования колебательной релаксации используется формула Ландау–Теллера [1] для малого отклонения от термического равновесия. В [2] методами кинетической теории газов была получена формула, которая фактически является обобщением формулы Ландау–Теллера на случай произвольного отклонения от термического равновесия. При решении тестовых задач в [2] было показано, что предложенная формула является более точной. Задача данной работы — апробация этой новой модели в численных расчетах неравновесных двумерных и осесимметричных течений.

Рассматриваются течения углекислого газа CO_2 , чистого азота N_2 и смеси N_2/N (течение с диссоциацией). В общем виде уравнения движения этих газовых смесей в двухтемпературном приближении могут быть записаны в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho v) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho Y_a}{\partial t} + \nabla(\rho Y_a v) = -\nabla J_a + R_a, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla(\rho v v) = -\nabla p + \nabla(\tau), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E_{t-r}) + \nabla(v(\rho E_{t-r} + p)) = \nabla(\lambda_{t-r} \nabla T + (\tau v) - \sum_i h_i J_i) \\ - \sum_{i=a,m} \frac{h_i^0}{M_{w,i}} R_i - \sum_{i=0}^{N_v} \dot{e}_{v,i}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_m e_{v,i}) + \nabla(Y_m p v e_{v,i} - \mu_i \nabla e_{v,i}) = -\nabla(e_{v,i} J_i) + \dot{e}_{v,i}, \quad i = 1 \dots N_v, \quad (5)$$

где ρ , v , p , T — плотность, скорость, давление, поступательная температура газовой смеси; Y_a , Y_m — массовая доля атомарного и молекулярного сорта; J — плотность диффузионного потока; R — скорость изменения компонента газовой смеси за счет химических реакций, τ — тензор вязких напряжений, E_{t-r} — удельная поступательно-вращательная энергия, λ , μ — коэффициент теплопроводности и вязкости, h_i^0 — энтальпия образования. Индекс „a“ соответствует атомарному сорту, а индекс „m“ — молекулярному. Число колебательных

мод обозначено N_v и зависит от рассматриваемого газа ($N_v = 4$ для CO_2 и $N_v = 1$ для N_2 или N_2/N). Для описания связи колебательной энергии e_v и колебательной температуры используется модель гармонического осциллятора. Для замыкания системы уравнений (1)–(5) использовалось уравнение состояния совершенного газа.

Энергообмен между поступательно-вращательной и колебательной модой описывается источниковым членом — $\sum_{i=0}^{N_v} \dot{e}_{v,i}$ в (4) и источниковыми членами $\dot{e}_{v,i}$ в (5). Для течений без диссоциации $\dot{e}_{v,i} = \dot{e}_{v,i}^{VT}$, а для течений с диссоциацией $\dot{e}_{v,1} = \dot{e}_{v,1}^{VT} + e_{v,1}R_1$.

Для описания колебательной релаксации (VT -обмена) используются две модели — модель Ландау–Теллера (6) и ее обобщение (7), полученное в [2]:

$$\dot{e}_{v,i}^{VT} = \rho Y_m (e_{v,i}(T) - e_{v,i}(T_v)) \sum_j \frac{x_j}{\tau_{j,i}}, \quad (6)$$

$$\dot{e}_{v,i}^{VT} = \frac{T}{T_{v,i}} \rho Y_m (T - T_{v,i}) c_{vibr,i} \sum_j \frac{x_j}{\tau_{j,i}},$$

где

$$c_{vibr,i} = \frac{R}{M_{w,m}} \frac{\theta_{v,i}^2}{T_{v,i}^2} \frac{\exp(\theta_{v,i}/T_{v,i})}{(\exp(\theta_{v,i}/T_{v,i}) - 1)^2}. \quad (7)$$

В (6) и (7) x_j соответствует мольной доле, $\tau_{j,i}$ — времени колебательной релаксации, а $\theta_{v,i}$ — характеристическая колебательная температура i -й колебательной моды.

При моделировании течения CO_2 время колебательной релаксации вычислялось по формуле, предложенной в [3], а при моделировании течений N_2 и смеси N_2/N — по формуле Милликена–Уайта [4]. Для моделирования течения с диссоциацией (N_2/N) учитывались две реакции: 1) $\text{N}_2 + \text{N}_2 \rightarrow 2\text{N} + \text{N}_2$, 2) $\text{N}_2 + \text{N} \rightarrow 3\text{N}$. Для расчета скорости диссоциации использовалась модель Кузнецова [5], а для определения параметров термически равновесной константы использовались данные из работы [6].

Уравнения (1)–(5) решались численно с использованием пакета ANSYS Fluent и дополнительного программного модуля, позволяющего учитывать колебательную релаксацию и диссоциацию по вышеуказанным моделям.

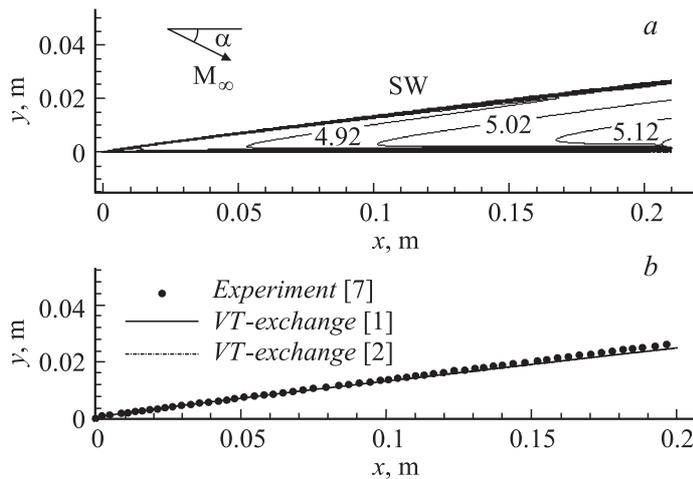


Рис. 1. Результаты численного моделирования обтекания плоской пластины с температурой $T_w = 300$ К гиперзвуковым потоком CO_2 под углом $\alpha = 10.2^\circ$ при $M_\infty = 6.29$, $T_\infty = 396.4$ К и $p_\infty = 646$ Па. Поле чисел Маха (a) и положение ударной волны (b) в сравнении с экспериментальными данными [7].

На рис. 1 представлены результаты расчета обтекания плоской пластины гиперзвуковым потоком CO_2 . На рис. 1, a показано поле числа Маха при использовании (7) для описания колебательной релаксации. На поле течения хорошо видна присоединенная косая ударная волна SW. На рис. 1, b показано сравнение ее положения, полученного в расчетах с использованием моделей (6) и (7), с экспериментальными данными [7]. Применение обеих моделей дает результат, согласующийся с экспериментальными данными. Различие моделей колебательной релаксации для такого течения практически не влияет на численное решение. Это объясняется тем, что в данном случае реализуется малое отклонение от термического равновесия ($T/T_v \approx 1.3$).

Для сопоставления моделей VT-обмена (6) и (7) в условиях сильной термической неравновесности проведены расчеты с маховским и регулярным отражением ударных волн между двумя клиньями (рис. 2). На рис. 2, a показаны результаты расчетов маховского отражения для течения N_2 , где хорошо видны падающий (IS), отраженный (RS) и маховский (MS) скачки. При использовании в расчетах (6) и (7) наблю-

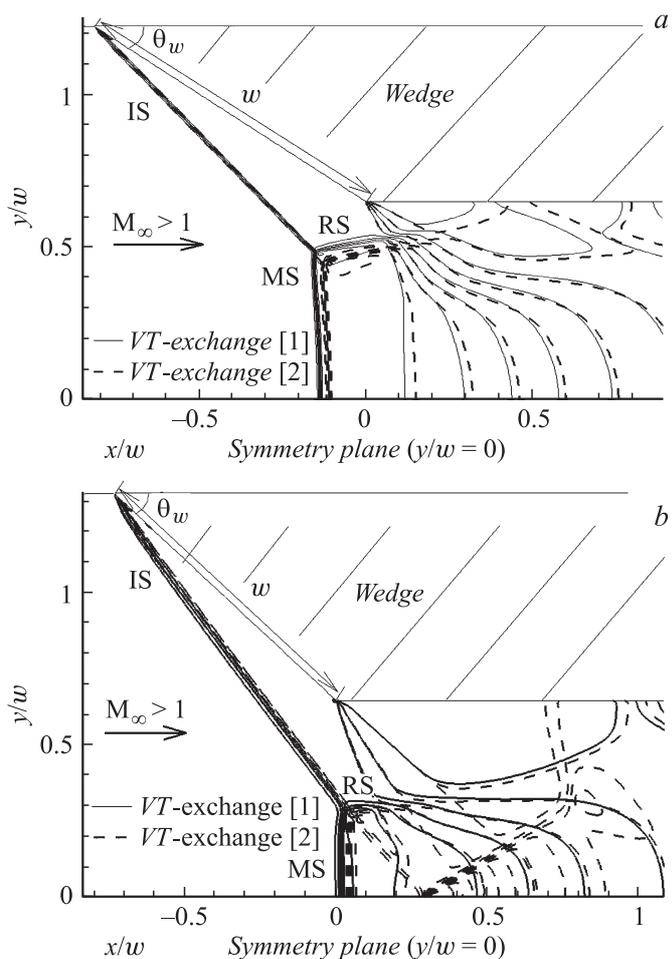


Рис. 2. Результаты расчетов отражения ударных волн между двумя симметрично расположенными клиньями. Поле давления при $M_\infty = 6$, $Re = 1000$, $T_{in} = 700$ К, $\theta_w = 35^\circ$ (a) и $M_\infty = 20$, $Re = 1000$, $T_{in} = 700$ К, $\theta_w = 43^\circ$ (b). Формула (1) — расчет по модели [1], (2) — расчет по модели [2] (трехскачковая конфигурация), (3) — расчет по модели [2] (двухскачковая конфигурация).

дается маховское отражение, но видны количественные расхождения по высоте маховского скачка и положению точки ветвления скачков. Для данного течения максимальное отклонение от термического равновесия достигает $T/T_v \approx 7$.

На рис. 2, *b* представлены результаты расчетов с числом Маха $M_\infty = 20$. Расчет с использованием формулы (6) дает единственное решение (маховское отражение), а использование формулы (7) приводит к неединственности решения. При использовании в качестве начального условия поля течения с трехволновой конфигурацией (рис. 2, *b*, решение (1)) расчет с использованием (7) дает маховское отражение (см. решение (2) на рис. 2, *b*). При использовании равномерного потока с параметрами набегающего потока в качестве начального условия реализуется регулярное отражение, взаимодействующее с веером волн разрежения. В результате этого взаимодействия угол падающего скачка и параметры потока за ним изменяются так, что возможно регулярное отражение (см. решение (3) на рис. 2, *b*). Разница в результатах расчетов с различными моделями VT -обмена вызвана различием в механизме колебательной релаксации для случая сильного отклонения от термического равновесия.

Область двойного решения впервые была обнаружена численно в [8] и подтверждена экспериментально в [9]. Позднее области двойного решения были найдены и в ряде других случаев, например при взаимодействии веера волн разрежения с падающим скачком [10] и в неравновесных течениях [11]. Исследование неоднозначности при отражении скачков уплотнения продолжается (например, [12]) для газов с различным показателем адиабаты. Влияние показателя адиабаты γ на структуру маховского отражения исследовано в [13–15] и показана возможность возникновения трехволновой конфигурации с отрицательным углом отраженной волны по отношению к направлению набегающего потока (при $\gamma < 1.4$). Изменение показателя адиабаты происходит из-за возбуждения колебательных степеней свободы, химических реакций, поэтому актуальным является вопрос существования такой трехволновой конфигурации в неравновесных течениях, где показатель адиабаты не является постоянным. В данной работе таких конфигураций обнаружено не было, и вопрос их существования в неравновесных течениях остается открытым.

На рис. 3 представлены результаты расчетов течения диссоциирующей смеси N_2/N около конуса. На рис. 3, *a* показано поле числа

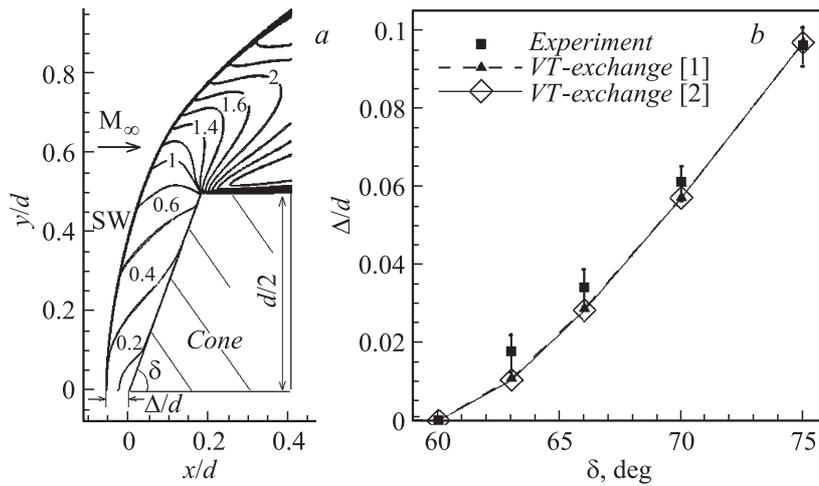


Рис. 3. Результаты расчетов течения около конуса с диаметром $d = 4$ см и угла раствора $\delta = 70^\circ$ при $M_\infty = 5.565$, $T_\infty = 1416$ К, $\rho_\infty = 0.437$ кг/м³, $Y_m = 0.9994$. Поле числа Маха (а) и зависимость отхода головной ударной волны от угла раствора конуса (b).

Маха, где видна отошедшая на Δ/d от носика конуса головная ударная волна SW. На рис. 3, b представлено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [6]. Результаты расчетов с использованием формул (6) и (7) для описания VT-обмена совпадают друг с другом, поскольку отклонение от термического равновесия невелико и достигает максимума только в очень узкой области в ударной волне ($T/T_v \approx 3$). Небольшое расхождение численных и экспериментальных данных вызвано, с одной стороны, погрешностью экспериментальных измерений параметров свободного потока, а с другой — влиянием модели диссоциации на численное решение в целом и на отход ударной волны в частности. С учетом этих факторов можно заключить, что результаты численного моделирования находятся в хорошем качественном и количественном согласии с экспериментальными измерениями.

Таким образом, в численном моделировании неравновесных течений с малым отклонением от термического равновесия ($T/T_v < 3$) использование классической формулы Ландау–Теллера [1] и ее обобщения [2] приводит к одинаковым результатам; при этом результаты расчетов

согласуются с доступными экспериментальными данными. Различия в результатах расчетов с использованием этих моделей наблюдались при значительном отклонении от термического равновесия ($T/T_v > 7$).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-31-51262) и гранта правительства РФ (договор № 14.Z50.31.0019) для поддержки исследований под руководством ведущих ученых. Численное моделирование проводилось на кластерах Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН (ССКЦ СО РАН) и Новосибирского государственного университета.

Список литературы

- [1] Ландау Л.Д., Теллер Е. Собрание трудов. М.: Наука, 1969. Т. 1.
- [2] Kustova E.V., Oblapenko G.P. // Phys. Fluids. 2015. V. 27. P. 016102.
- [3] Camac M. // Fundamental Phenomena in Hypersonic Flow. 1966. P. 195–218.
- [4] Millikan R.C., White D.R. // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. N 12. P. 3209–3213.
- [5] Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982. 221 с.
- [6] Leyva I.A. // PhD Thesis. California Institute of Technology, Pasadena, California, 1999. <http://thesis.library.caltech.edu/15641>
- [7] Кириловский С.В., Маслов А.А., Поплавская Т.В., Цырюльников И.С. // ЖТФ. 2015. Т. 85. В. 5. С. 12–22.
- [8] Ivanov M.S., Gimelshein S.F., Beylich A.E. // Phys. Fluids. 1995. V. 7. P. 685. <http://dx.doi.org/10.1063/1.868591>.
- [9] Chrouin A., Passerel D., Li H., Ben-Dor G. // J. Fluid Mech. 1995. V. 301. P. 19–35.
- [10] Khotyanovsky D.V., Kudryavtsev A.N., Knight D.D., Ivanov M.S. // ECCOMAS. 2004. Jyväskylä, Finland, 24–28 July 2004.
- [11] Gimelshein S., Ivanov M., Markelov G. // AIAA. Paper 98-0877. Reno, 1998.
- [12] Булат П.В., Упырев В.В. // Письма в ЖТФ. Т. 42. В. 1. С. 33–41.
- [13] Гавренков С.А., Гвоздева Л.Г. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 8. С. 39–45.
- [14] Гавренков С.А., Гвоздева Л.Г. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. Вып. 12. С. 74–80.
- [15] Martelli E., Betti B., Nasuti F., Onofri M. // ISSW30. Tel Aviv, Israel, July 19–24, 2015.