

## РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В $\text{CO}_2$ С УЧЕТОМ ОБЪЕМНОЙ ВЯЗКОСТИ\*

*И. В. Алексеев, Е. В. Кустова*

Санкт-Петербургский государственный университет,

Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

В работе исследуется изменение макропараметров углекислого газа  $\text{CO}_2$  при его прохождении через ударную волну. Новизна работы заключается в корректном учете объемной вязкости при расчете структуры ударной волны. Предполагается, что во фронте волны происходит возбуждение поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы молекул газа. Процессы переноса моделируются методами кинетической теории газов. Подробно изучается влияние колебательных степеней свободы на коэффициенты переноса при разных числах Маха. Численно решается система уравнений Навье–Стокса с учетом тензора вязких напряжений и теплового потока. Диагональные члены тензора напряжений содержат коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, а коэффициент теплопроводности определяется вкладом поступательных и внутренних степеней свободы. Учитывается сложная структура колебательных мод молекул углекислого газа при расчете его удельной теплоемкости и показателя адиабаты. Показано, что показатель адиабаты заметно меняется при прохождении через ударную волну, поэтому обычно используемое предположение о его постоянстве значительно влияет на точность расчета равновесных значений макропараметров газа за ударной волной. Получены распределения следующих макропараметров: давления, плотности, скорости и температуры при прохождении ударной волны с числами Маха, равными 2 и 5; исследованы коэффициенты переноса в зависимости от расстояния от фронта волны. Установлено, что учет колебательных степеней свободы и объемной вязкости значительно влияет на ширину фронта и параметры ударной волны в многоатомных газах. Для азота учет объемной вязкости приводит к заметному улучшению согласования расчетных и экспериментальных данных по измерению плотности. Библиогр. 7 назв. Илл. 7.

*Ключевые слова:* объемная вязкость, колебательные степени свободы, ударная волна, углекислый газ.

**1. Введение.** В настоящей работе исследуется неравновесное течение газа при прохождении через ударную волну, возникающую, например, при движении тел в атмосфере планет с гиперзвуковыми скоростями. В ударно нагретом газе происходит возбуждение внутренних степеней свободы молекул, которое может заметно влиять на ширину релаксационной зоны за ударной волной. Поэтому при моделировании ударных волн необходимо учитывать роль внутренних степеней свободы.

В условиях резкого сжатия газа с внутренними степенями свободы в ударной волне важную роль может играть объемная вязкость, характеризующая конечную скорость передачи энергии между поступательными и внутренними степенями свободы. Так, в работе [1] показано, что в углекислом газе объемная вязкость может превышать сдвиговую на несколько порядков. Однако при описании процессов, происходящих в ударных волнах, объемную вязкость чаще всего не учитывают. Исключения составляют недавние работы [2, 3], в которых релаксация в ударной волне в азоте моделируется с помощью континуального подхода, и [4], где использовано модельное уравнение. Однако в перечисленных работах используются упрощенные представления для коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости, теплопроводности, удельных теплоемкостей и показателя адиабаты.

\*Работа выполнена при финансовой поддержке СПбГУ (проект 6.37.206.2016) и РФФИ (грант № 15-08-03371).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2017

Целью данной работы является численное моделирование ударной волны с учетом объемной вязкости с использованием алгоритмов строгой кинетической теории [5] в однотемпературном приближении. Методами кинетической теории вычислены все коэффициенты переноса как функции температуры газа. Проведен корректный расчет удельных теплоемкостей и показателя адиабаты, который в случае многоатомных газов существенно меняется при прохождении через ударную волну. Численно рассчитана структура ударной волны в азоте и углекислом газе. Проведено сравнение с экспериментами [6], а также с результатами расчетов по упрощенным моделям и без учета объемной вязкости. Показана роль колебательных степеней свободы при моделировании ударной волны в углекислом газе.

**2. Модель течения.** В работе изучается неравновесное течение однокомпонентного углекислого газа  $\text{CO}_2$  в однотемпературном приближении. Так как газ имеет вращательные и колебательные степени свободы, в дальнейшем будем учитывать их при расчетах коэффициентов переноса.

В однотемпературном приближении определяющими макропараметрами течения реагирующей смеси являются [5]: числовая плотность  $n_c$  частиц сорта  $c$ , температура газа  $T$  и макроскопическая скорость  $\mathbf{v}$ . Мы будем рассматривать течения при умеренных температурах, когда химическими реакциями можно пренебречь. В этом случае в однокомпонентном газе вместо  $n_c$  макропараметром является плотность газа  $\rho$ . Макроскопическими уравнениями для этих параметров являются уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии. В общем случае их можно записать в форме

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (2)$$

$$\rho \frac{dE}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} = 0. \quad (3)$$

В этих уравнениях  $E$  — энергия единицы массы газа,  $\mathbf{P}$  — тензор вязких напряжений:

$$\mathbf{P} = (p - \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} - 2\eta \mathbf{S}, \quad (4)$$

где  $p$  — давление,  $\eta$  и  $\zeta$  — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости соответственно,  $\mathbf{I}$ ,  $\mathbf{S}$  — единичный тензор и бездивергентный тензор скоростей деформации.

Вектор теплового потока  $\mathbf{q}$  выражается формулой

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T, \quad (5)$$

$\lambda$  — коэффициент теплопроводности.

Как уже говорилось, молекулы  $\text{CO}_2$  помимо поступательных имеют вращательные и колебательные степени свободы, следовательно полная энергия  $E$  включает поступательную  $E_{\text{tr}}$ , вращательную  $E_{\text{rot}}$  и колебательную  $E_{\text{vibr}}$  энергии. Через энергию этих степеней свободы определяется такая важная термодинамическая характеристика, как теплоемкость. Удельная теплоемкость, или теплоемкость единицы массы газа при постоянном объеме, задается выражением

$$c_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial E_{\text{tr}}}{\partial T} + \frac{\partial E_{\text{rot}}}{\partial T} + \frac{\partial E_{\text{vibr}}}{\partial T} = c_{\text{tr}} + c_{\text{rot}} + c_{\text{vibr}}, \quad (6)$$

где  $c_{tr}$ ,  $c_{rot}$ ,  $c_{vibr}$  — составляющие удельной теплоемкости, соответствующие поступательной, вращательной и колебательной энергиям.

В случае максвелловского распределения частиц по скоростям, энергия поступательных степеней свободы имеет вид

$$\rho E_{tr} = \frac{3}{2}nkT,$$

и, следовательно, можем записать

$$c_{tr} = \frac{3}{2} \frac{k}{m}, \quad (7)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана,  $m$  — масса молекулы.

Теплоемкость вращательных степеней свободы при температурах выше комнатной с несущественной потерей точности можно считать постоянной:

$$c_{rot} = \frac{k}{m}. \quad (8)$$

Теплоемкость колебательных степеней свободы задается выражением

$$c_{vibr} = \frac{\partial E_{vibr}}{\partial T}. \quad (9)$$

Колебательная энергия молекул для однотемпературного приближения определяется из формулы

$$\rho E_{vibr} = \frac{n}{Z^{vibr}(T)} \sum_i s_i \varepsilon_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right), \quad (10)$$

где  $\varepsilon_i$  — колебательная энергия молекулы, находящейся на  $i$ -м колебательном уровне,  $s_i$  — статистический вес, характеризующий вырождение состояния молекулы с внутренней энергией  $\varepsilon_i$ ,  $n$  — числовая плотность, а  $Z^{vibr}(T)$  — равновесная колебательная статистическая сумма, выражающаяся формулой

$$Z^{vibr}(T) = \sum_i s_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right). \quad (11)$$

Следует отметить, что для многоатомных газов квантовое число  $i$  представляет собой набор квантовых чисел, соответствующих разным колебательным модам. Так, молекула  $\text{CO}_2$  имеет три колебательные моды с различными частотами: симметричную валентную моду (с частотой  $\nu_1$ ), дважды вырожденную деформационную моду ( $\nu_2$ ) и антисимметричную моду ( $\nu_3$ ). Соответственно, состояние  $i$  определяется набором чисел  $(i_1, i_2, i_3)$ , и суммирование в последних выражениях ведется по трем индексам. Статистический вес невырожденных первой и третьей мод равен единице, а для деформационных колебаний имеем  $s_{i_2} = 2i_2 + 1$ . Наличие нескольких мод колебаний ведет к большему запасу колебательной энергии, чем в случае двухатомного газа и, следовательно, более высоким значениям колебательной теплоемкости  $c_{vibr}$ .

Для расчета ударной волны рассмотрим одномерную стационарную волну в потоке термодинамически совершенного многоатомного газа. Уравнения Навье—Стокса для стационарного одномерного потока имеют вид

$$\begin{cases} \frac{d(\rho u)}{dx} = 0, \\ \frac{d(\rho u^2)}{dx} + \frac{dp}{dx} = \frac{dP}{dx}, \\ \frac{d(\rho u H)}{dx} + \frac{dq}{dx} = \frac{d(Pu)}{dx}, \end{cases} \quad (12)$$

где  $u$  — проекция вектора скорости на ось  $x$ ,  $p = \rho RT$  — давление,  $R$  — газовая постоянная,  $H = E + \frac{p}{\rho}$  — полная удельная энтальпия единицы массы,  $\rho E = \frac{\rho u^2}{2} + \frac{p}{\gamma-1}$  — полная энергия на единицу объема и  $\gamma$  — показатель адиабаты.

В данной постановке компоненты тензора напряжений и теплового потока принимают вид

$$P = -P_{xx} + p = \left(\frac{4}{3}\eta + \zeta\right) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad q = q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (13)$$

Проинтегрировав систему (1), получаем

$$\begin{cases} \rho u = c_0, \\ \rho u^2 + p = P + c_1, \\ \rho u H + q = Pu + c_2, \end{cases} \quad (14)$$

где  $c_0, c_1, c_2$  — константы. Используя соотношения (13), полученную систему можно свести к системе двух уравнений для  $\rho$  и  $p$  [2]:

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{dx} = \frac{\rho^2}{\left(\frac{4}{3}\eta + \zeta\right) c_0} \left(c_1 - p - \frac{c_0^2}{\rho}\right), \\ \frac{dp}{dx} = \frac{d\rho}{dx} \frac{p}{\rho} - \frac{R\rho}{\lambda} \left(c_2 - \left(\frac{4}{3}\eta + \zeta\right) \frac{c_0^2 d\rho}{\rho^3 dx} - \frac{c_0^3}{2\rho^2} - \frac{c_0 p \gamma}{\rho(\gamma-1)}\right). \end{cases} \quad (15)$$

Система (15) формально совпадает с полученной в [2], однако в настоящей работе коэффициенты переноса рассчитываются с помощью строгих методов кинетической теории. Проблема состоит в нахождении решения системы с учетом асимптотических левых и правых граничных условий Ранкина—Гюгонио:

$$p_R = \frac{(\gamma+1)M^2}{2 + (\gamma-1)M^2} \rho_L, \quad p_R = \frac{2\gamma M^2 - (\gamma-1)}{(\gamma+1)} p_L, \quad (16)$$

$M$  — число Маха набегающего потока.

Константы для системы (15) можно получить из граничных условий:

$$c_0 = M\sqrt{\gamma p_L \rho_L}; \quad c_1 = p_L \gamma \left(M^2 + \frac{1}{\gamma}\right); \quad c_2 = \gamma p_L \sqrt{\frac{\gamma p_L}{\rho_L}} \left(\frac{M^3}{2} + \frac{M}{\gamma-1}\right).$$

Численное решение системы с граничными условиями имеет две трудности:

- 1) если две функции  $p(x)$  и  $\rho(x)$  являются решением системы, то любые две функции  $\tilde{p}(x_c) = p(x+c)$ ,  $\tilde{\rho}(x_c) = \rho(x+c)$ , где  $c$  — произвольная постоянная, также являются решением системы, т. е. решение системы не единственно, и имеется целое семейство решений;
- 2) дополнительные трудности возникают из асимптотических граничных условий.

Проблема решается с помощью следующего алгоритма [2, 3]. Выберем точку  $x_c = 0$  и дополнительное условие в этой точке, например,  $p(x_c) = (p_R + p_L)/2$ . Таким образом мы обеспечиваем единственное решение для проблемы 1 и не асимптотическое условие для проблемы 2. Возьмем  $\rho(x_c) = \rho_c$  как параметр. Для каждого такого значения  $\rho_c$  мы имеем начальную задачу для системы двух уравнений с двумя начальными условиями в точке  $x_c$ . Система решается методом Рунге—Кутты влево и вправо от заданной точки  $x_c$ . Необходимо найти такой параметр  $\rho_c$ , при котором решение вправо от заданной точки удовлетворяло бы асимптотическому условию на правой границе, при этом при любом выборе  $x_c$  решение влево от этой точки автоматически удовлетворяет условию на левой границе. Параметр  $\rho_c$  определяется итерационным путем.

**3. Удельные теплоемкости и коэффициенты переноса.** Как уже говорилось выше, для численного моделирования используются алгоритмы строгой кинетической теории. В расчетах мы не используем обычных упрощений, таких как постоянство показателя адиабаты, отношения коэффициентов объемной и сдвиговой вязкости, постоянства числа Прандтля, а также эмпирических формул для коэффициентов переноса. Поэтому результаты данной работы являются более точными, чем в [2, 3].

Удельные теплоемкости при постоянном давлении и объеме, а также показатель адиабаты

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}, \quad (17)$$

где  $c_p = c_v + R$ , вычисляются на каждом шаге итераций, а не считаются константами.

Коэффициент теплопроводности  $\lambda$  вычисляется как сумма коэффициентов  $\lambda_{tr}$  и  $\lambda_{int}$ , связанных с переносом поступательной и внутренней энергий молекул [5]:

$$\lambda = \lambda_{tr} + \lambda_{int}, \quad (18)$$

$$\lambda_{tr} = \frac{75k^2T}{32m\Omega^{(2,2)}}, \quad \lambda_{int} = \frac{3kT}{8\Omega^{(1,1)}}c_{int}. \quad (19)$$

Здесь  $\Omega^{(1,1)}$  и  $\Omega^{(2,2)}$  — это интегралы столкновений. Для удобства вычислений часто используют приведенные интегралы

$$\Omega^{(l,r)*} = \frac{\Omega^{(l,r)}}{(\Omega^{(l,r)})_{r.s.}}, \quad (20)$$

где  $(\Omega^{(l,r)})_{r.s.}$  —  $\Omega$ -интегралы для модели твердых сфер. Для них существует аналитическая формула

$$(\Omega^{(l,r)})_{r.s.} = \left(\frac{kT}{\pi m}\right)^{1/2} \frac{(r+1)!}{2} \left[1 - \frac{1+(-1)^l}{2(l+1)}\right] \pi\sigma^2, \quad (21)$$

где  $\sigma$  — расстояние между центрами двух молекул в момент столкновения.

Приближенные формулы расчета приведенных интегралов по потенциалу Леннарда—Джонса имеют вид

$$\Omega^{(l,r)*} = \left(f_1^{(l,r)} + \frac{f_2^{(l,r)}}{x_{l,r}^2} + \frac{f_3^{(l,r)}}{x_{l,r}} + f_4^{(l,r)}x_{l,r} + f_5^{(l,r)}x_{l,r}^2 + f_6^{(l,r)}x_{l,r}^3\right)^{-1}, \quad (22)$$

здесь  $x_{l,r} = \ln(kT/\varepsilon) + a_{l,r}$ ,  $\varepsilon$  — глубина потенциальной ямы; коэффициенты  $a_{l,r}$ ,  $f_k^{(l,r)}$  получены в результате аппроксимации численных данных и приведены в [5]. В работе использованы следующие значения параметров потенциала Леннарда—Джонса:  $\sigma = 3.621 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon/k = 97.5 \text{ К}$  для молекулы  $N_2$ ;  $\sigma = 3.763 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon/k = 244 \text{ К}$  для молекулы  $CO_2$ . Коэффициент сдвиговой вязкости выражается следующим образом [5]:

$$\eta = \frac{5kT}{8\Omega(2,2)}. \quad (23)$$

Коэффициент объемной вязкости позволяет учесть релаксацию внутренних степеней свободы, т. е. переход энергии между внутренними и поступательной модами в случае, когда отклонения от равновесного состояния незначительны.

Коэффициент объемной вязкости дается выражением

$$\zeta = \frac{kT}{\beta} \left( \frac{c_{\text{int}}}{c_V} \right)^2, \quad (24)$$

где  $\beta$  — интеграл столкновений, зависящий от дефекта резонанса внутренней энергии при неупругих столкновениях [5].

Интеграл  $\beta$  представлен в виде

$$\beta = \frac{3}{2nc_V} \left( \frac{c_{\text{rot}}}{\tau_{\text{rot}}} + \frac{c_{\text{vibr}}}{\tau_{\text{vibr}}} \right), \quad (25)$$

где  $\tau_{\text{rot}}$ ,  $\tau_{\text{vibr}}$  — времена релаксации вращательных и колебательных степеней свободы.

Время вращательной релаксации можно найти из соотношений для числа столкновений, необходимых для установления равновесия по вращательным степеням свободы:

$$\zeta^{\text{rot}} = \frac{4p\tau_{\text{rot}}}{\pi\eta}; \quad \zeta^{\text{rot}}(T) = \frac{\zeta^\infty}{F(T)}, \quad (26)$$

где величина  $\zeta^\infty$  определяется из соответствия теоретических и экспериментальных значений, а функция  $F(T)$  в соответствии с теорией Паркера представляется в виде [5]

$$F(T) = 1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left( \frac{kT}{\varepsilon} \right)^{-1/2} + \left( \frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left( \frac{kT}{\varepsilon} \right)^{-1} + \pi^{3/2} \left( \frac{kT}{\varepsilon} \right)^{-3/2}. \quad (27)$$

Варьируя величину  $\zeta^\infty$ , можно изучить влияние объемной вязкости за счет неупругих обменов вращательной энергией на параметры течения в релаксационной зоне ударной волны. Для углекислого газа имеем действительное значение  $\zeta^\infty = 20.39$ .

Время колебательной релаксации  $\tau_{\text{vibr}}$  для молекулы  $CO_2$  определяется временем VT-обмена в деформационной моде. Аппроксимация экспериментальных данных, проведенная в статье [7], дает выражение

$$p\tau_{\text{vibr}} = \exp(a + bx + cx^2 + d/x) \quad (28)$$

где  $x = T^{1/3}$ .

В работе использованы следующие значения коэффициентов:  $a = -18.19$ ,  $b = 40.47$ ,  $c = 0$ ,  $d = 0.00423$ , при этом величина  $p\tau_{\text{vibr}}$  имеет размерность атм·с. Для удобства вычислений в данной работе времена релаксации переводятся в секунды.

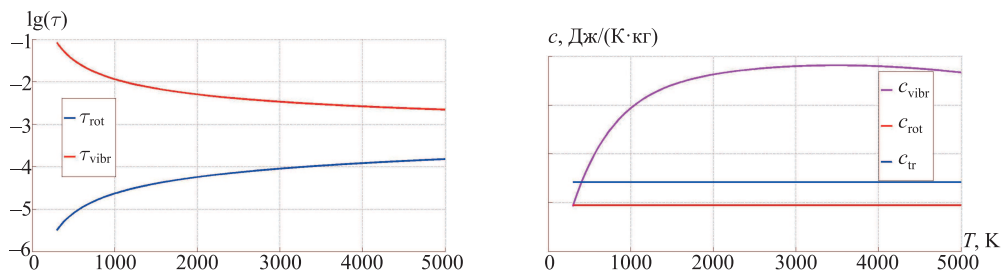


Рис. 1. Времена релаксации и удельные теплоемкости  $\text{CO}_2$  как функции температуры.

На рис. 1 приведены времена вращательной и колебательной релаксации и удельные теплоемкости как функции температуры при значениях  $T$  от 300 до 5000 К. Как видно из рисунка, время вращательной релаксации при низких температурах на несколько порядков меньше времени колебательной релаксации. С другой стороны, в силу наличия в молекуле  $\text{CO}_2$  нескольких колебательных мод теплоемкость колебательных степеней свободы  $c_{vibr}$  значительно превышает  $c_{rot}$ . Поэтому с ростом температуры отношения  $c_{vibr}/\tau_{vibr}$  и  $c_{rot}/\tau_{rot}$ , входящие в формулу (25), становятся одного порядка, и колебательное возбуждение может вносить заметный вклад в коэффициент объемной вязкости. Отметим, что для двухатомных газов отношением  $c_{vibr}/\tau_{vibr}$  чаще всего можно пренебречь по сравнению с  $c_{rot}/\tau_{rot}$ , и объемная вязкость определяется в основном вращательными степенями свободы.

**4. Результаты.** Вычисления производились в системе Matlab путем решения системы уравнений встроенным алгоритмом решения задачи Коши методом Рунге—Кутты 4-го порядка. В ходе решения искался такой параметр  $\rho_c$ , при котором исходная система уравнений удовлетворяла правым и левым граничным условиям. Необходимое значение данного параметра было получено последовательным использованием метода простого деления на два: метода «дихотомии». Правое граничное условие выполнялось с относительной точностью  $\Delta\rho/\rho < 10^{-3}$ , что соответствует неопределенности параметра  $\Delta\rho_c/\rho_c < 10^{-9}$ . Таким образом нас удовлетворяли значения, при которых погрешность вычислений составляла не более 0.1%.

Для валидации метода был проведен предварительный расчет ударной волны в азоте и сравнение с экспериментом [6] и результатами [2, 3] при следующих условиях в набегающем потоке:  $T_0 = 300$  К,  $p_0 = 6.66$  Па,  $M_0 = 6.1$ . На рис. 2 представлены профили плотности и температуры как функции от расстояния  $x$ , отнесенного к длине свободного пробега  $l$ . В работе принималось  $l = 10^{-3}$  м. Здесь и далее на рисунках представлены значения давления, плотности, температуры и скорости газа, нормированные таким образом:

$$\hat{\rho} = \frac{\rho - \rho_L}{\rho_R - \rho_L}, \quad \hat{p} = \frac{p - p_L}{p_R - p_L}, \quad \hat{T} = \frac{T - T_L}{T_R - T_L}, \quad \hat{u} = \frac{u - u_R}{u_L - u_R}. \quad (29)$$

Видим хорошее совпадение рассчитанного профиля плотности с измеренным экспериментально. Погрешность экспериментальных данных, приведенных в работе [6], для плотности составляет 1%. Следует отметить также хорошее совпадение полученных профилей с результатами теоретических расчетов [2, 3].

Далее рассматриваем течение углекислого газа при следующих условиях в набегающем потоке:  $T_0 = 300$  К,  $p_0 = 6.66$  Па, числа Маха брались разные:  $M_0 = 2$ ,  $M_0 = 5$ . На рис. 3 представлены профили скорости, плотности и температуры как

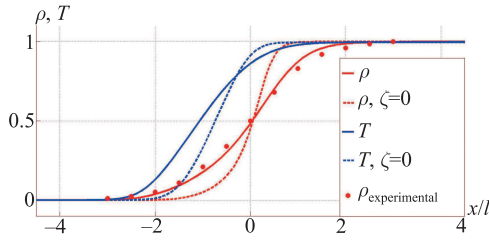


Рис. 2. Профили нормированных макропараметров как функции  $x/l$  для  $N_2$ :  $M_0 = 6.1$ ,  $\gamma = 7/5$ ,  $P_R = 14/19$ .

функции  $x/l$  для разных чисел Маха. Профили давления совпадают с профилями плотности, поэтому на рисунке не приведены.

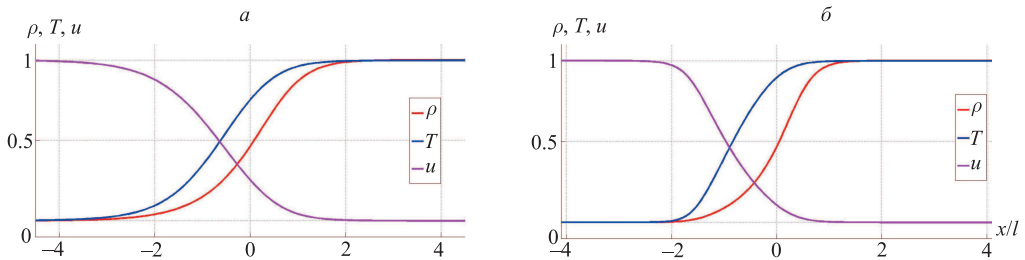


Рис. 3. Нормированные макропараметры как функции  $x/l$  для  $CO_2$ :  $M_0 = 2$  (а),  $M_0 = 5$  (б).

Можно заметить, что с ростом числа Маха фронт волны становится более плотным, узким, скачок макропараметров — резче. Особенно хорошо видна разница для скачка температуры.

Как уже говорилось, немаловажную роль в расчетах макропараметров играют такие величины как показатель адиабаты, а также сдвиговая и объемная вязкость. Поскольку эти величины зависят от температуры, ее резкий скачок во фронте ударной волны приводит и к скачку данных величин. Далее представлены графики сравнения вышеуказанных параметров для различных чисел Маха как функций от  $x/l$  (см. рис. 4). Видим, что показатель адиабаты заметно уменьшается, от 1.287 до 1.181 при  $M_0 = 5$ , а отношение коэффициента объемной вязкости к сдвиговой достигает 7–8.

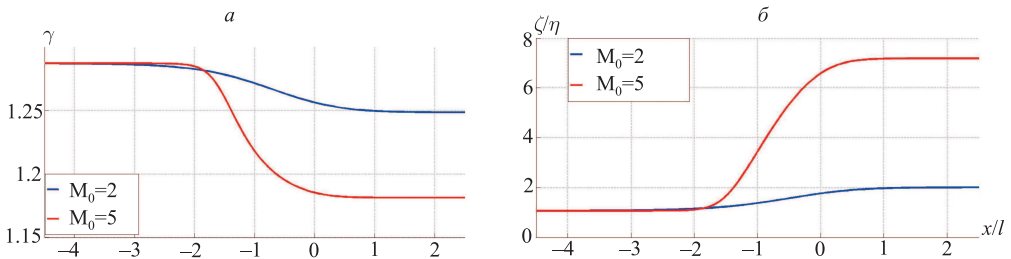


Рис. 4. Показатель адиабаты (а), отношение объемной и сдвиговой вязкости  $\zeta/\eta$  (б) как функции  $x/l$  за ударной волной при различных числах Маха.



Интересно отметить, что в работе [1] отношение коэффициента объемной вязкости к сдвиговой в рассматриваемом диапазоне температур достигает 100–1000. Отличие от результатов настоящей работы связано, по всей видимости, с использованием других данных по времени колебательной релаксации. Мы используем хорошо проверенные экспериментальные данные [7], которые дают достаточно малый вклад колебательных степеней свободы в коэффициент объемной вязкости. Тем не менее мы решили оценить влияние большого отношения  $\zeta/\eta$  на параметры углекислого газа в зоне релаксации ударной волны. Добиться этого можно было, варьируя параметр  $\zeta^\infty$  и, таким образом, изменяя коэффициент объемной вязкости вращательных степеней свободы. Ниже представлены профили давления и температуры для различных значений параметра  $\zeta^\infty$ . Взяты следующие величины:  $\zeta^\infty = 20.39$  (это реальные данные, соответствующие эксперименту; в дальнейшем они используются для строгого вычисления), а также  $\zeta^\infty = 125$ ,  $\zeta^\infty = 300$ ,  $\zeta^\infty = 450$ , при которых отношение объемной вязкости к сдвиговой при  $M_0 = 2$  достигает 1.2, 7.4, 18 и 27 соответственно, а при  $M_0 = 5$  — 1.2, 17.5, 42.4 и 70 соответственно.

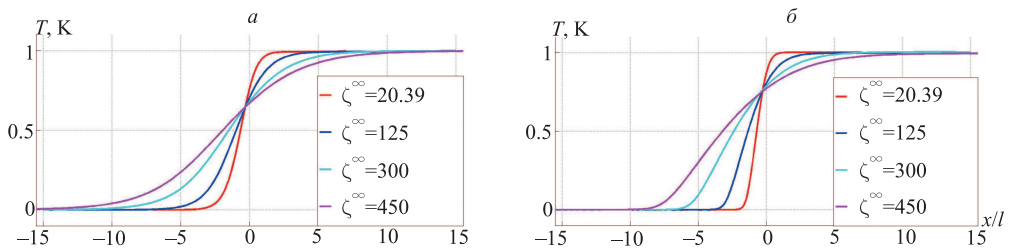


Рис. 5. Нормированная температура как функция  $x/l$  для  $\text{CO}_2$  при различных  $\zeta^\infty$ :  $M_0 = 2$  (а),  $M_0 = 5$  (б).

Как можно видеть из рис. 5, с увеличением  $\zeta^\infty$  растет ширина ударной волны, форма профилей становится более полой.

В статье [4] также была рассмотрена задача о структуре ударной волны в углекислом газе. Решение проводится численно с помощью кинетического подхода с привлечением модельного уравнения (эллипсоидально-статистическая модель), при этом рассмотрен случай «псевдо»-молекул  $\text{CO}_2$ , когда отношение коэффициентов объемной и сдвиговой вязкости зафиксировано, а показатель адиабаты принят постоянным,  $\gamma = 4/3$ . В нашей постановке это значение примерно соответствует значению  $\gamma$  на левой границе. Интересно отметить полученную в [4] несимметричную форму профиля и большую ширину ударной волны с ростом отношения  $\zeta/\eta$ . Качественное сравнение результатов подтверждает отмеченное в нашей работе увеличение ширины зоны релаксации с ростом  $\zeta/\eta$ . При этом количественное сравнение с нашими результатами является затруднительным, поскольку конечное равновесное значение температуры  $T_R$  при использовании постоянного показателя адиабаты оказывается заметно выше, чем в нашем случае.

Обсудим теперь влияние колебательных степеней свободы на параметры газа в ударной волне. В углекислом газе имеем три колебательные моды, следовательно вклад колебательной энергии может оказаться существенным. Ниже представлены результаты расчета профилей давления и температуры с учетом колебательных степеней свободы и без них при различных числах Маха. Поскольку нормированные профили давления практически совпадают, то на рис. 6 приведены профили размер-

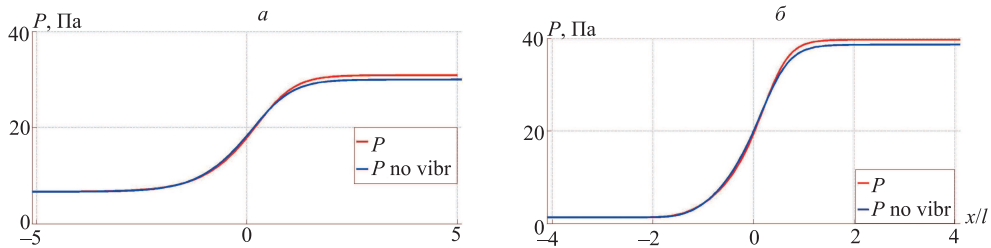


Рис. 6. Профили давления как функции  $x/l$  для  $\text{CO}_2$  с учетом и без учета колебательных степеней свободы:  $M_0 = 2$  (а),  $M_0 = 5$  (б).

ных давлений. Видно, что размерные значения отличаются, хоть и незначительно: разница на правой границе составляет 1.5 Па при  $M_0 = 2$  и 18 Па при  $M_0 = 5$ .

Более интересная картина получается при рассмотрении значений температуры. На рис. 7 представлены профили размерных температур при числах Маха  $M_0 = 2$  и  $M_0 = 5$ . Хотя профили безразмерных температур также практически совпадают, размерные значения существенно отличаются, примерно на 100 К для  $M_0 = 2$  и практически в два раза при  $M_0 = 5$ . Это связано с резким изменением показателя адиабаты при включении в рассмотрение колебательных мод углекислого газа. Таким образом, можно заключить, что учет колебательных степеней свободы сильно влияет на результаты расчета макропараметров углекислого газа в релаксационной зоне ударной волны.

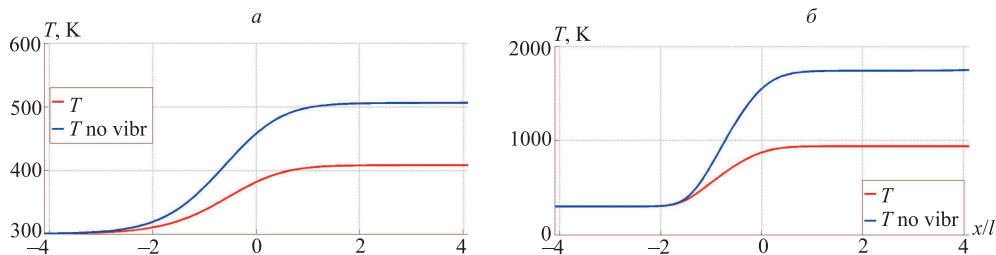


Рис. 7. Профили температуры как функции  $x/l$  для  $\text{CO}_2$  с учетом и без учета колебательных степеней свободы:  $M_0 = 2$  (а),  $M_0 = 5$  (б).

**5. Выводы.** В работе решена задача о структуре ударной волны в  $\text{CO}_2$  в одно-температурном приближении. Теплофизические свойства рассчитывались с применением строгих методов кинетической теории. Проведен расчет удельных теплоемкостей, показателя адиабаты, коэффициентов теплопроводности, сдвиговой и объемной вязкости в однотемпературном приближении, а также времен вращательной и колебательной релаксации для углекислого газа. Изучена роль объемной вязкости, а также колебательных степеней свободы в формировании профилей макропараметров газа в релаксационной зоне ударной волны. Учет эффекта объемной вязкости позволяет получить лучшее согласие с экспериментальными данными для макропараметров. Учет колебательных степеней свободы заметно влияет на распределение температуры за ударной волной.

В дальнейшем предполагается обобщить разработанную методику на случай термически неравновесных течений.

## Литература

1. *Cramer M. S.* Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases // *Physics of Fluids*. 2012. Vol. 24, issue 6. Art. no. 066102. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4729611>
2. *Elizarova T. G., Khokhlov A. A., Montero S.* Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen // *Physics of Fluids*. 2007. Vol. 19, issue 6. Art. no. 068102. <http://doi.org/10.1063/1.2738606>
3. *Chikitkin A. V., Rogov B. V., Tirsky G. A., Utyuzhnikov S. V.* Effect of bulk viscosity in supersonic flow past spacecraft // *Applied Numerical Mathematics*. 2015. Vol. 93. P. 47–60. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2014.01.004>
4. *Kosuge S., Aoki K., Goto T.* Shock Wave Structure in Polyatomic Gases: Numerical Analysis Using a Model Boltzmann Equation // 30th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics: AIP Conf. Proc. 2016. Vol. 1786, issue 1. Art. no. 180004. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4967673>
5. *Нагнибеда Е. А., Кустова Е. В.* Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2003.
6. *Alsmeyer H.* Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // *J. Fluid. Mech.* 1976. Vol. 74, issue 3. P. 479–513. <https://doi.org/10.1017/S0022112076001912>
7. *Losev S. A., Kozlov P. V., Kuznetsova L. A., Makarov V. N., Romanenko Yu. V., Surzhikov S. T., Zalogin G. N.* Radiation of a mixture  $\text{CO}_2\text{-N}_2\text{-Ar}$  in shock waves: experimental and modeling // Proc. 3rd European Symp. on Aerothermodynamics for space vehicles, ESTEC, The Netherlands. 1998. P. 437–444.

Статья поступила в редакцию 5 мая 2017 г.; рекомендована в печать 22 июня 2017 г.

### Сведения об авторах

*Алексеев Илья Владимирович* — аспирант; [alekseev1989@gmail.com](mailto:alekseev1989@gmail.com)

*Кустова Елена Владимировна* — доктор физико-математических наук, профессор; [e.kustova@spbu.ru](mailto:e.kustova@spbu.ru)

## SHOCK WAVE STRUCTURE IN $\text{CO}_2$ TAKING INTO ACCOUNT BULK VISCOSITY

*Илья В. Алексеев, Елена В. Кустова*

St. Petersburg State University, Universitetskaya nab., 7–9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation; [alekseev1989@gmail.com](mailto:alekseev1989@gmail.com), [e.kustova@spbu.ru](mailto:e.kustova@spbu.ru)

Variation of the macroscopic parameters of carbon dioxide  $\text{CO}_2$  passing through a shock wave is studied. The novelty of the work is in correct account of the bulk viscosity while calculating the structure of the shock wave. In the shock front, translational, rotational and vibrational degrees of freedom are excited. The transport processes are modeled using the kinetic theory of gases. The influence of the vibrational degrees of freedom on the transport coefficients for different Mach numbers is studied in detail. The system of Navier–Stokes equations is solved numerically taking into account the viscous stress tensor and the heat flux. The diagonal terms of the stress tensor contain the shear and bulk viscosity, and the coefficient of thermal conductivity is determined by the contributions of translational and internal degrees of freedom. The complex structure of vibrational modes of carbon dioxide molecules is taken into account in calculating its specific heat and the adiabatic factor. It is shown that the adiabatic factor changes noticeably when passing through a shock wave, therefore, the commonly used assumption of its constancy significantly affects the accuracy of calculating the equilibrium values of the gas parameters behind the shock wave. The distributions of the following parameters in the shock waves with Mach numbers 2 and 5 are found numerically: pressure, density, velocity, and temperature. The transport coefficients as functions of the distance from the shock front are analyzed. It is found that taking into account the vibrational degrees of freedom and bulk viscosity significantly affects the width of the shock front and the parameters of the shock wave in polyatomic gases. For nitrogen, taking into account the bulk viscosity leads to a significant improvement in the agreement between the calculated and experimental data on the density measurement. Refs 7. Figs 7.

*Keywords:* bulk viscosity, vibrational degrees of freedom, shock wave, carbon dioxide.

## References

1. Cramer M. S., “Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases”, *Physics of Fluids* **24**, issue 6, 066102 (2012). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4729611>
2. Elizarova T. G., Khokhlov A. A., Montero S., “Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen”, *Physics of Fluids* **19**, issue 6, 068102 (2007). <http://doi.org/10.1063/1.2738606>
3. Chikitkin A. V., Rogov B. V., Tirskey G. A., Utyuzhnikov S. V., “Effect of bulk viscosity in supersonic flow past spacecraft”, *Applied Numerical Mathematics* **93**, 47–60 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2014.01.004>
4. Kosuge S., Aoki K., Goto T., “Shock Wave Structure in Polyatomic Gases: Numerical Analysis Using a Model Boltzmann Equation”, *30th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics: AIP Conf. Proc.* **1786**, issue 1, 180004 (2016). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4967673>
5. Nagnibeda E. A., Kustova E. V., *Kinetic Theory of Transport Processes and Relaxation in Nonequilibrium Reacting Flows* (St. Petersburg. Univ. Press, St. Petersburg, 2003) [in Russian].
6. Alsmeyer H., “Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam”, *J. Fluid. Mech.* **74**, issue 3, 479–513 (1976). <https://doi.org/10.1017/S0022112076001912>
7. Losev S. A., Kozlov P. V., Kuznetsova L. A., Makarov V. N., Romanenko Yu. V., Surzhikov S. T., Zalagin G. N., “Radiation of a mixture CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-Ar in shock waves: experimental and modeling”, *Proc. 3rd European Symp. on Aerothermodynamics for space vehicles, ESTEC, The Netherlands*, 437–444 (1998).

**Для цитирования:** Алексеев И. В., Кустова Е. В. Расчет структуры ударной волны в CO<sub>2</sub> с учетом объемной вязкости // Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2017. Т. 4 (62). Вып. 4. С. 642–653. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412>

**For citation:** Alekseev I. V., Kustova E. V. Shock wave structure in CO<sub>2</sub> taking into account bulk viscosity. *Vestnik SPbSU. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2017, vol. 4 (62), issue 4, pp. 642–653. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412>