

## МЕХАНИКА

УДК 533.6.011

MSC 76L05, 82C40, 82C70

### Численное моделирование ударной волны в вязком углекислом газе методом конечных объемов\*

*И. В. Алексеев, Е. В. Кустова*Санкт-Петербургский государственный университет,  
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

**Для цитирования:** Алексеев И. В., Кустова Е. В. Численное моделирование ударной волны в вязком углекислом газе методом конечных объемов // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2020. Т. 7 (65). Вып. 3. С. 500–510. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2020.312>

Предложен эффективный численный метод для исследования ударных волн в углекислом газе. Разработанная теоретическая модель основана на кинетической теории и не предполагает постоянства отношения удельных теплоемкостей и справедливости приближенных аналитических выражений для термодинамических функций и коэффициентов переноса. С использованием методов кинетической теории коэффициенты теплопроводности, сдвиговой и объемной вязкостей выражаются через температуру, интегралы столкновений и времена релаксации внутренней энергии. Предварительно вычисленные для широкого диапазона температур термодинамические функции и коэффициенты переноса реализованы в расчетном коде и используются при моделировании структуры ударной волны. Учет объемной вязкости в кинетической модели приводит к увеличению ширины ударной волны и улучшает согласие с экспериментальными данными.

*Ключевые слова:* ударная волна, углекислый газ, метод конечных объемов.

**1. Введение.** Расчет структуры ударной волны является эталонной задачей в газовой динамике. Для достаточно разреженных газов применение стандартных континуальных моделей может приводить к заметной погрешности. Поэтому часто утверждается, что необходимо использовать кинетические подходы, такие как прямое статистическое моделирование [1] или модельные кинетические уравнения [2], особенно в многоатомных газах, где возбуждение внутренних степеней свободы

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 19-31-90036 и 18-01-00493).  
© Санкт-Петербургский государственный университет, 2020

может заметно повлиять на структуру ударной волны. Однако недавно было показано, что усовершенствованные континуальные модели, такие как регуляризованный моментный метод [3] или метод Чепмена — Энскога, учитывающий сильные отклонения от равновесия и/или объемную вязкость [4–8], описывают гидродинамические переменные во фронте ударной волны с хорошей точностью.

Моделирование неравновесных потоков углекислого газа является нетривиальной задачей из-за сложной структуры молекулы  $\text{CO}_2$  и множества механизмов колебательной релаксации. Существующие неопределенности в оценке коэффициентов переноса и времени релаксации вызывают дополнительные трудности. Так, в некоторых исследованиях [9] теоретически были предсказаны огромные отношения коэффициентов объемной ( $\zeta$ ) и сдвиговой ( $\eta$ ) вязкости при низкой температуре ( $\zeta/\eta \approx 10^3$ ). Такая большая объемная вязкость может заметно нарушить симметрию профилей гидродинамических переменных за фронтом ударной волны [2] и изменить ширину ударного фронта. Недавние строгие теоретические [4] и экспериментальные [10] исследования не подтверждают справедливость соотношения  $\zeta/\eta \gg 1$ . Одной из целей данного исследования является внедрение точных моделей термодинамических и транспортных свойств и оценка их влияния на структуру ударной волны.

В работах [5, 11] было предложено использовать метод пристрелки для решения одномерной системы уравнений Навье — Стокса в двухатомных и многоатомных вязких газах. Этот метод имеет несколько ограничений: 1) он требует предварительного преобразования системы уравнений с использованием дополнительных предположений, в частности о постоянстве показателя адиабаты и о справедливости приближенного аналитического выражения для удельной энтальпии; 2) метод не подходит для многотемпературных приближений или течений газовых смесей из-за сложности преобразования уравнений; 3) при больших числах Маха решение становится очень чувствительным к параметру пристрелки. В настоящей работе уравнения дискретизируются методом конечных объемов на структурированной сетке. Этот метод может использоваться как для многотемпературных приближений, так и для газовых смесей, и не требует дополнительных преобразований системы уравнений. Метод легко адаптируется для параллельных вычислений и дает результаты с управляемой ошибкой.

Цели текущего исследования: 1) вывести систему уравнений газодинамики для одномерного вязкого потока  $\text{CO}_2$  с учетом строгих моделей термодинамики и коэффициентов переноса; 2) разработать эффективный численный метод для решения полученных уравнений; 3) провести численное моделирование структуры ударной волны в  $\text{CO}_2$  для различных чисел Маха; 4) оценить влияние объемной вязкости на гидродинамические переменные.

**2. Теоретическая модель.** В данной работе изучается структура ударной волны в однокомпонентном потоке углекислого газа в однотемпературном приближении. При расчете удельных энергий и коэффициентов переноса учитываются вращательная и три колебательные моды  $\text{CO}_2$ . Газ рассматривается при умеренных температурах, когда химическими реакциями можно пренебречь.

Будем искать стационарное решение задачи методом установления. Уравнения Навье — Стокса для одномерного течения можно записать в векторном виде

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

вектор консервативных переменных  $\mathbf{U}$  и вектор потока  $\mathbf{F}$  определяются как

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p - P \\ \rho v H + q - P v \end{pmatrix}. \quad (2)$$

В этих уравнениях:  $\rho$  — плотность,  $v$  — скорость газа,  $E$  — полная энергия на единицу массы, включающая кинетическую и внутреннюю ( $E_{\text{int}}$ ) энергии,  $H$  — удельная энтальпия:

$$E = \frac{v^2}{2} + E_{\text{int}}, \quad H = \frac{p}{\rho} + E, \quad (3)$$

$P$  — компонента тензора напряжений,  $q$  — тепловой поток в направлении оси  $x$ :

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

где  $p$  — давление,  $\eta$  и  $\zeta$  — коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости соответственно,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $T$  — температура.

Удельная внутренняя энергия включает в себя вклады поступательной, вращательной и колебательной энергий:

$$E_{\text{int}} = E_{\text{tr}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{vibr}}, \quad (5)$$

где

$$E_{\text{tr}} = \frac{3kT}{2m}, \quad E_{\text{rot}} = \frac{kT}{m}, \quad E_{\text{vibr}} = \frac{1}{mZ^{\text{vibr}}(T)} \sum_{i_1, i_2, i_3} s_{i_1, i_2, i_3} \varepsilon_{i_1, i_2, i_3} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}}{kT}\right), \quad (6)$$

$k$  — постоянная Больцмана,  $m$  — масса молекулы,  $\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}$  — колебательная энергия молекулы на уровнях  $i = (i_1, i_2, i_3)$ , квантовые числа  $i_1, i_2, i_3$  соответствуют симметричной, изгибной, асимметричной модам,  $s_{i_1, i_2, i_3} = i_2 + 1$  — статистический вес, характеризующий вырождение колебательного состояния молекулы с энергией  $\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}$ ,  $Z^{\text{vibr}}(T)$  — равновесная колебательная статистическая сумма, определяемая формулой

$$Z^{\text{vibr}}(T) = \sum_{i_1, i_2, i_3} s_{i_1, i_2, i_3} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}}{kT}\right). \quad (7)$$

Удельная теплоемкость при постоянном объеме вводится выражением

$$c_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial E_{\text{tr}}}{\partial T} + \frac{\partial E_{\text{rot}}}{\partial T} + \frac{\partial E_{\text{vibr}}}{\partial T} = c_{\text{tr}} + c_{\text{rot}} + c_{\text{vibr}}, \quad (8)$$

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

Основные особенности данного исследования состоят в следующем: 1) используются строгие алгоритмы кинетической теории для расчета всех коэффициентов переноса, включая объемную вязкость; 2) при решении уравнений показатель адиабаты  $\gamma = c_p/c_V$  не предполагается постоянным. Как показано в [7], допущение о постоянстве  $\gamma$  в ударно нагретом углекислом газе приводит к значительной потере

точности в предсказанных значениях макропараметров потока. Более того, так как  $\gamma \neq \text{const}$ , для удельной энтальпии не существует простого аналитического соотношения, что вызывает значительное усложнение реализации численного метода.

Кратко остановимся на алгоритме вычисления коэффициентов переноса; подробности можно найти в работах [4, 12]. Коэффициент теплопроводности  $\lambda$  рассчитывается как сумма коэффициентов  $\lambda_{\text{tr}}$  и  $\lambda_{\text{int}}$ , связанных с передачей поступательной и внутренней энергий:

$$\lambda = \lambda_{\text{tr}} + \lambda_{\text{int}}, \quad (9)$$

$$\lambda_{\text{tr}} = \frac{75k^2T}{32m\Omega(2,2)}, \quad \lambda_{\text{int}} = \frac{3kT}{8\Omega(1,1)}c_{\text{int}} = \frac{3kT}{8\Omega(1,1)}(c_{\text{rot}} + c_{\text{vibr}}). \quad (10)$$

Здесь  $\Omega^{(1,1)}$  и  $\Omega^{(2,2)}$  — интегралы столкновений, определяемые потенциалом взаимодействия. В данном исследовании они рассчитаны с использованием потенциала Леннарда — Джонса [12].

Коэффициент сдвиговой вязкости выражается следующим образом:

$$\eta = \frac{5kT}{8\Omega(2,2)}. \quad (11)$$

Коэффициент объемной вязкости  $\zeta$  позволяет учесть релаксацию внутренних степеней свободы (т. е. передачу энергии между внутренней и поступательной модами с конечной скоростью) в случае слабых отклонений от состояния равновесия. Данные об этом коэффициенте в  $\text{CO}_2$  довольно противоречивы, см. обсуждение в работе [4]. В то время как в работе Крамера [9] отношение коэффициентов объемной и сдвиговой вязкости  $\zeta/\eta$  при низких температурах составляет порядка нескольких тысяч, в недавних экспериментах [10] это соотношение не превышает 3. В работе [4] показано, что расчеты Крамера [9] основаны на неверном исходном предположении, а использование строгих методов кинетической теории дает отношение  $\zeta/\eta$ , близкое к экспериментальному. В настоящей работе мы используем метод, предложенный в [4]. Таким образом, коэффициент объемной вязкости задается выражением

$$\zeta = \frac{kT}{\beta_{\text{int}}} \left( \frac{c_{\text{int}}}{c_V} \right)^2, \quad (12)$$

где  $\beta_{\text{int}}$  является интегральной скобкой, зависящей от изменения внутренней энергии при неупругом столкновении. Следуя рассуждениям [4], получаем окончательную формулу для коэффициента объемной вязкости:

$$\zeta = pR \left( \frac{c_{\text{int}}}{c_V} \right)^2 \left( \frac{c_{\text{rot}}}{\tau_{\text{rot}}} + \frac{c_{\text{vibr}}}{\tau_{\text{vibr}}} \right)^{-1}, \quad (13)$$

где  $R = k/m$  — газовая постоянная,  $\tau_{\text{rot}}$ ,  $\tau_{\text{vibr}}$  — времена релаксации для вращательных и колебательных степеней свободы. В настоящей работе время вращательной релаксации рассчитывается на основе теории Паркера [13], время колебательной релаксации взято из экспериментальных данных [14].

**3. Численный метод.** В методе конечных объемов вся вычислительная область делится на множество поддоменов (контрольных объемов), см. схематическое представление на рис. 1. Мы предполагаем, что сеточное значение, определенное в



на каждый временной шаг, и количество временных шагов также велико. Чтобы уменьшить вычислительные затраты, мы используем предварительно вычисленные транспортные коэффициенты и термодинамические функции. Используя точные алгоритмы кинетической теории, мы создаем массивы значений переменных, затратных с точки зрения вычислений (колебательной энергии, удельных теплоемкостей, коэффициентов теплопроводности, вязкости, объемной вязкости), как функции от температуры с шагом 0.5 К. Затем, используя линейную интерполяцию, мы получаем достаточно точные приближенные значения для транспортных коэффициентов и термодинамических функций и, тем самым, значительно ускоряем расчеты ( $\sim 10^{-4}$  сек. на каждую ячейку). Таким образом, при использовании 50 ячеек для моделирования фронта волны время счета в среднем сокращается в 1000 раз.

Также стоит отметить, что вычисление  $F_{i+\frac{1}{2}}$  зависит только от  $U_i$  и  $U_{i+1}$ , поэтому, имея набор векторов  $U$ , можно применять параллельные вычисления для потока в каждой ячейке в течение одного временного шага.

**4. Результаты и обсуждение.** Моделирование потока выполняется в одномерной постановке. Дискретизация уравнений Навье—Стокса осуществляется на структурированной сетке методом конечных объемов. Для интегрирования по времени используется явная схема Эйлера. Потоки рассчитываются по схеме первого порядка (схема Годунова). Задача о распаде произвольного разрыва решается методом точных итераций Годунова. Длина расчетной области в зависимости от числа Маха составляет  $10-30L$ , где  $L$  — длина свободного пробега до ударной волны. Шаг сетки предполагается постоянным. Расчетная область делится на 50 ячеек.

Для проверки метода сначала была рассчитана ударная волна в азоте и проведено сравнение с экспериментом [17]. Условия в набегающем потоке:  $p = 6.66$  Па,  $T = 300$  К,  $M = 6.1$ . В нашем предыдущем исследовании [11] было проведено такое моделирование с учетом объемной вязкости с использованием метода пристрелки и было показано хорошее согласие с экспериментальными значениями [17] и результатами численного моделирования [5]. В данной работе мы в порядке тестирования воспроизводим расчет с использованием нового метода.

На рис. 2 безразмерный профиль плотности, рассчитанный новым методом, сравнивается с профилями, полученными в наших предыдущих расчетах и в экспериментальных исследованиях. Безразмерные переменные рассчитываются по формулам:

$$\hat{\rho} = \frac{\rho - \rho_L}{\rho_R - \rho_L}, \quad \hat{p} = \frac{p - p_L}{p_R - p_L}, \quad \hat{T} = \frac{T - T_L}{T_R - T_L}, \quad \hat{v} = \frac{v - v_R}{v_L - v_R}. \quad (17)$$

Здесь индекс  $R$  соответствует конечному равновесному значению параметров за ударной волной,  $L$  — начальным значениям. На графиках используется безразмерное расстояние  $x/L$ . Видно хорошее согласие расчетного профиля плотности как с предыдущим решением, так и с экспериментальными данными. В определенном диапазоне метод конечного объема дает более точное решение по сравнению с методом пристрелки.

Далее рассмотрим течение углекислого газа при тех же давлении и температуре в набегающем потоке и числе Маха  $M$ , равном 2 и 5. На рис. 3 приведены безразмерные профили плотности для решений, полученных методами конечных объемов и пристрелки. Решение, полученное ранее методом пристрелки, было основано на нескольких упрощающих допущениях, которые не применяются в настоящем исследовании.

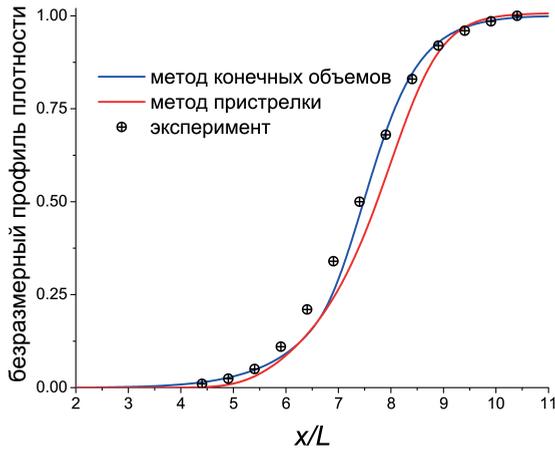


Рис. 2. Безразмерные профили плотности как функции от  $x/L$  для  $N_2$  и  $M = 6.1$ .

довании: применение аналитической формулы для полной энергии на единицу объема, переход к системе из двух уравнений посредством обратного интегрирования с использованием уравнения состояния идеального газа. Кроме того, результаты, представленные на рис. 3, получены с учетом вклада только вращательных степеней свободы в коэффициент объемной вязкости. Видно, что профили плотности практически не отличаются друг от друга при рассматриваемых начальных условиях. Однако новый метод свободен от вышеуказанных ограничений и, следовательно, может применяться в более широком диапазоне условий.

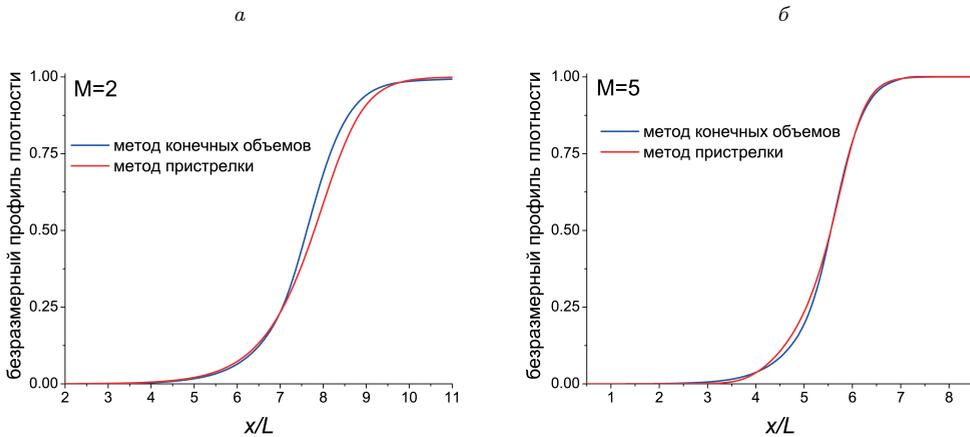


Рис. 3. Безразмерные профили плотности как функции  $x/L$  для  $CO_2$  и  $M = 2$  (а) и  $M = 5$  (б).

На рис. 4, а, б показано влияние объемной вязкости на профиль плотности при  $M = 2$  и  $5$ . Можно видеть, что учет объемной вязкости дает значительное увеличение ширины ударной волны. Этот вывод подтверждается также рис. 5, где безразмерная

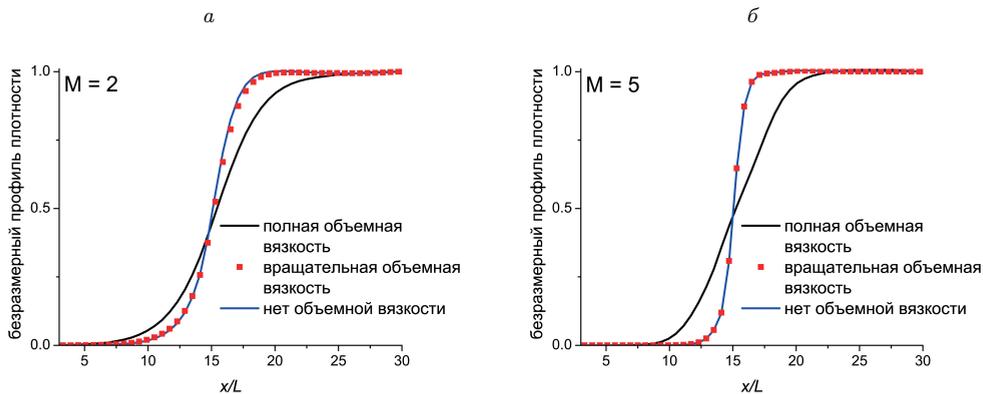


Рис. 4. Безразмерные профили плотности как функции  $x/L$  для  $\text{CO}_2$  и  $M=2$  (а) и  $M=5$  (б).

ширина фронта ударной волны (отнесенная к длине свободного пробега  $L$ ) показана как функция от числа Маха набегающего потока. Таким образом, учет объемной вязкости в диапазоне чисел Маха от 2 до 7 дает ширину ударной волны примерно на 7–8 длин свободного пробега больше. На рис. 4 также представлены решения, полученные с учетом объемной вязкости, связанной только с вращательными степенями свободы. Стоит отметить, что в углекислом газе, в отличие от азота, основная роль принадлежит объемной вязкости колебательных степеней свободы. Включение чисто вращательной части объемной вязкости практически не меняет решение.

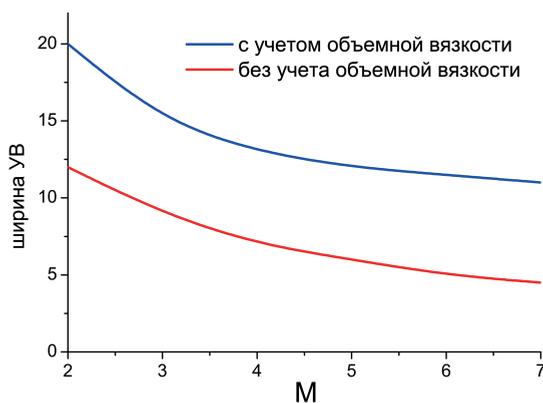


Рис. 5. Безразмерная ширина ударной волны в  $\text{CO}_2$  как функция от числа Маха.

**5. Заключение.** Была исследована структура ударной волны в  $\text{CO}_2$  в одно-температурном приближении с использованием строгой самосогласованной модели течения, учитывающей точные выражения для термодинамических функций, переменного показателя адиабаты и корректных алгоритмов кинетической теории для расчета всех коэффициентов переноса, включая объемную вязкость. Результаты моделирования, выполненного методом конечных объемов, сравниваются с экспери-

ментом [17] для азота и с результатами, полученными другими методами для  $\text{CO}_2$  [11]. Обсуждается влияние объемной вязкости, а также роль колебательных степеней свободы в формировании профилей плотности во фронте ударной волны. Учет объемной вязкости приводит к увеличению ширины фронта ударной волны и обеспечивает лучшее согласие с экспериментами. Хорошее согласие с экспериментами и предыдущими расчетами подтверждает, что предложенный метод подходит для изучения сильнонеравновесных течений с нелинейными эффектами. Метод значительно более гибкий и надежный, чем метод пристрелки, использованный в [11], он не зависит от начального приближения и допускает различные модификации исходных уравнений газодинамики. В последующей работе мы планируем применить этот метод для моделирования многотемпературных вязких течений и течений химически реагирующих газовых смесей в ударных волнах.

## Литература

1. *Bird G. A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford, England, UK: Clarendon, 1994.
2. *Kosuge S., Aoki K.* Shock-wave structure for a polyatomic gas with large bulk viscosity // *Phys. Rev. Fluids*. 2018. Vol. 3. Art. no. 023401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.3.023401>
3. *Timokhin M., Struchtrup H., Kokhanchik A., Bondar Ye.* Different variants of R13 moment equations applied to the shock-wave structure // *Phys. Fluids*. 2017. Vol. 29. Art. no. 037105. <https://doi.org/10.1063/1.4977978>
4. *Kustova E., Mekhonoshina M., Kosareva A.* Relaxation processes in carbon dioxide // *Phys. Fluids*. 2019. Vol. 31. Art. no. 046104. <https://doi.org/10.1063/1.5093141>
5. *Elizarova T. G., Khokhlov A. A., Montero S.* Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen // *Physics of Fluids*. 2007. Vol. 19. Art. no. 068102. <https://doi.org/10.1063/1.2738606>
6. *Chikitkin A. V., Rogov B. V., Tirskey G. A., Utyuzhnikov S. V.* Effect of bulk viscosity in supersonic flow past spacecraft // *Applied Numerical Mathematics*. 2015. Vol. 93. P. 47–60.
7. *Alekseev I., Kosareva A., Kustova E., Naghibeda E.* Various continuum approaches for studying shock wave structure in carbon dioxide // *The International Scientific Conference on Mechanics “The Eighth Polyakhov’s Reading”, 29 January – 2 February 2018, Saint Petersburg, Russia*. 2018. Vol. 1959. Art. no. 060001. (AIP Conference Proceedings.) <https://doi.org/10.1063/1.5034662>
8. *Alekseev I., Kosareva A., Kustova E., Naghibeda E.* Shock waves in carbon dioxide: Simulations using different kinetic-theory models // *Rarefied Gas Dynamics* 31. 2019. Vol. 2132. Art. no. 060005. (AIP Conference Proceeding.) <https://doi.org/10.1063/1.5119545>
9. *Cramer M. S.* Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases // *Physics of Fluids*. 2012. Vol. 24. Art. no. 066102. <https://doi.org/10.1063/1.4729611>
10. *Wang Y., Ubachs W., van de Water W.* Bulk viscosity of  $\text{CO}_2$  from Rayleigh—Brillouin light scattering spectroscopy at 532 nm // *J. Chem. Phys.* 2019. Vol. 150. Art. no. 154502. <https://doi.org/10.1063/1.5093541>
11. *Алексеев И. В., Кустова Е. В.* Расчет структуры ударной волны в  $\text{CO}_2$  с учетом объемной вязкости // *Вестник С.-Петерб. ун-та. Математика. Механика. Астрономия*. 2017. Т. 4 (62). Вып. 4. С. 642–653. <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412>
12. *Нагибеда Е. А., Кустова Е. В.* Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2003.
13. *Parker J.* Rotational and Vibrational Relaxation in Diatomic Gases // *Phys. Fluids*. 1959. Vol. 2. P. 449. <https://doi.org/10.1063/1.1724417>
14. *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, 24–26 November 1998, ESTEC, The Netherlands*. 1999. P. 437–444.
15. *Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
16. *Волков К. Н., Емельянов В. Н., Карпенко А. Г., Смирнов П. Г., Тетерина И. В.* Реализация метода конечных объемов и расчет течений вязкого сжимаемого газа на графических процессорах // *Вычислительные методы и программирование*. 2013. Т. 14. Вып. 1. С. 183–194.
17. *Alstmeier H.* Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // *J. Fluid. Mech.* 1976. Vol. 74. P. 497–513. <https://doi.org/10.1017/S0022112076001912>

Контактная информация:

Алексеев Илья Владимирович — аспирант; alexseev1989@gmail.com

Кустова Елена Владимировна — д-р физ.-мат. наук, проф.; e.kustova@spbu.ru

## Numerical simulations of shock waves in viscous carbon dioxide flows using finite volume method\*

I. V. Alekseev, E. V. Kustova

St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

**For citation:** Alekseev I. V., Kustova E. V. Numerical simulations of shock waves in viscous carbon dioxide flows using finite volume method. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2020, vol. 7 (65), issue 3, pp. 500–510.  
<https://doi.org/10.21638/spbu01.2020.312> (In Russian)

An efficient numerical tool for studying shock waves in viscous carbon dioxide flows is proposed. The developed theoretical model is based on the kinetic theory formalism and is free of common limitations such as constant specific heat ratio, approximate analytical expressions for thermodynamic functions and transport coefficients. The thermal conductivity, viscosity and bulk viscosity coefficients are expressed in terms of temperature, collision integrals and internal energy relaxation times. Precomputed in the wide temperature range thermodynamic functions and transport coefficients are implemented to the numerical code which is used for the simulations of the shock wave structure. Including the bulk viscosity to the kinetic model results in the increasing shock width and improves the agreement with experimental data.

*Keywords:* shock waves, kinetic theory.

## References

1. Bird G. A., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford, England, UK: Clarendon, 1994).
2. Kosuge S., Aoki K., “Shock-wave structure for a polyatomic gas with large bulk viscosity”, *Phys. Rev. Fluids* **3**, 023401 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.3.023401>
3. Timokhin M., Struchtrup H., Kokhanchik A., Bondar Ye., “Different variants of R13 moment equations applied to the shock-wave structure”, *Phys. Fluids* **29**, 037105 (2017). <https://doi.org/10.1063/1.4977978>
4. Kustova E., Mekhonoshina M., Kosareva A., “Relaxation processes in carbon dioxide”, *Phys. Fluids* **31**, 046104 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5093141>
5. Elizarova T. G., Khokhlov A. A., Montero S., “Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen”, *Physics of Fluids* **19**, 068102 (2007). <https://doi.org/10.1063/1.2738606>
6. 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>
7. Alekseev I., Kosareva A., Kustova E., Nagnibeda E., “Various continuum approaches for studying shock wave structure in carbon dioxide”, *The International Scientific Conference on Mechanics “The Eighth Polyakhov’s Reading”, January 29 — February 2, 2018, Saint Petersburg, Russia* **1959**, 060001 (AIP Conference Proceeding, 2018). <https://doi.org/10.1063/1.5034662>

\*The work is supported by Russian Foundation for Basic Research (grants no. 19-31-90036 and 18-01-00493).

8. Alekseev I., Kosareva A., Kustova E., Nagnibeda E., “Shock waves in carbon dioxide: Simulations using different kinetic-theory models”, *Rarefied Gas Dynamics 31* **2132**, 060005. (AIP Conference Proceeding, 2019). <https://doi.org/10.1063/1.5119545>
9. Cramer M. S., “Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases”, *Physics of Fluids* **24**, 066102 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.4729611>
10. Wang Y., Ubachs W., van de Water W., “Bulk viscosity of CO<sub>2</sub> from Rayleigh—Brillouin light scattering spectroscopy at 532 nm”, *J. Chem. Phys.* **150**, 154502 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5093541>
11. Alekseev I. V., Kustova E. V., “Shock wave structure in CO<sub>2</sub> taking into account bulk viscosity”, *Vestnik of St. Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy.* **4 (62)**(4), 642–653 (2017). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412> (In Russian)
12. Nagnibeda E. A., Kustova E. V., *Nonequilibrium Reacting Gas Flows. Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009).
13. Parker J., “Rotational and Vibrational Relaxation in Diatomic Gases”, *Phys. Fluids* **2**, 449 (1959). <https://doi.org/10.1063/1.1724417>
14. 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*, November 24–26, 1998, ESTEC, The Netherlands, 437–444 (1999).
15. Godunov S. K., Zabrodin A. V., Ivanov M. Ya., Kraiko A. N., Prokopov G. P., *Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics* (Nauka Publ., Moscow, 1976). (In Russian)
16. Volkov K., Emelyanov V., Karpenko A., Smirnov P., Teterina I., “Implementation of a finite volume method and calculation of flows of a viscous compressible gas on graphics processor units”, *Vychisl. Metody Programm.* **14**(1), 183–194 (2013). (In Russian)
17. Alsmeyer H., “Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam”, *J. Fluid. Mech.* **74**, 97–513 (1976). <https://doi.org/10.1017/S0022112076001912>

Received: February 4, 2020

Revised: March 12, 2020

Accepted: March 19, 2020

Authors' information:

Ilya V. Alekseev — [alekseev1989@gmail.com](mailto:alekseev1989@gmail.com)

Elena V. Kustova — [e.kustova@spbu.ru](mailto:e.kustova@spbu.ru)