

# Numerical Simulation of Non-equilibrium Flow in the Nozzle of VAT-104 Wind Tunnel

Boris Zhestkov<sup>1</sup>, Aleksey Zaytsev<sup>2</sup>, Aleksander Kireev<sup>1</sup>,  
Sergey Chernov<sup>1</sup>, Vladimir Yumashev<sup>1,2</sup>

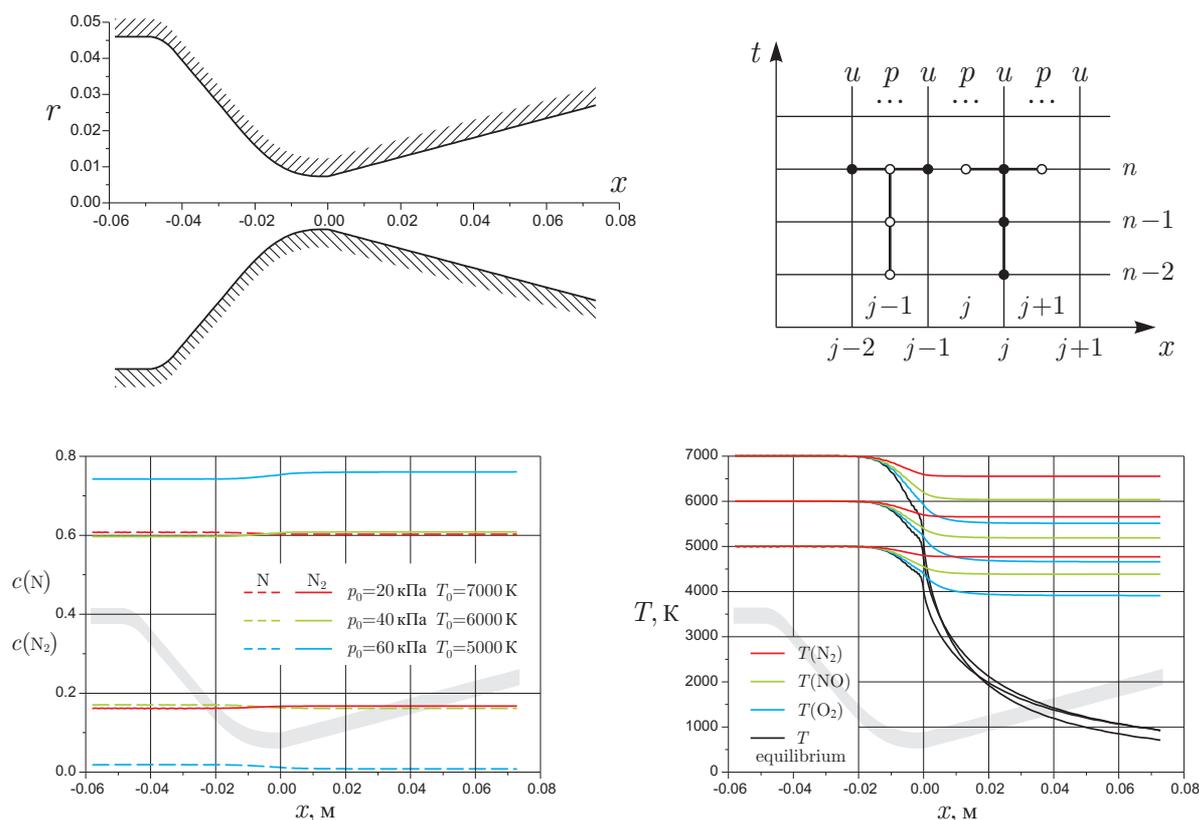
<sup>1</sup> Central Aerohydrodynamic Institute (TsAGI), Zhukovsky, Moscow Region, 140181, Russia

<sup>2</sup> Moscow Institute of Physics and Technology, Zhukovsky, Moscow Region, 140185, Russia  
[a\\_kireev1950@mail.ru](mailto:a_kireev1950@mail.ru), [yumashev@mail.ru](mailto:yumashev@mail.ru)

## Abstract

Numerical simulation of high enthalpy flow in the nozzle of wind tunnel VAT-104 is carried out using a detailed model of nonequilibrium physical and chemical processes. An implicit staggered-grid scheme of the second order of accuracy is used to approximate the governing equations. The goals of this modeling are: (1) to test a numerical approach to simulate high temperature nonequilibrium flows, (2) to determine the role of processes important for energy exchange at the nozzle flow conditions, (3) to get numerical values of species mass fractions and molecule vibration temperatures along the nozzle and at the entry to the test part. The illustrations below show the profile of VAT-104 nozzle, the difference scheme stencils, the N and N<sub>2</sub> mass fraction profiles and vibration temperatures profiles along the nozzle.

Keywords: wind tunnels, high enthalpy nonequilibrium flow, numerical simulation.



УДК 533.6.07

# Численное моделирование неравновесного течения в сопле АДТ ВАТ-104

Б.Е. Жестков<sup>1</sup>, А.В. Зайцев<sup>2</sup>, А.Ю. Киреев<sup>1</sup>, С.В. Чернов<sup>1</sup>,  
В.Л. Юмашев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Центральный Аэрогидродинамический Институт (ЦАГИ), Жуковский, 140181

<sup>2</sup>Московский Физико-Технический Институт (МФТИ), Жуковский, 140185

[a\\_kireev1950@mail.ru](mailto:a_kireev1950@mail.ru), [yumashev@mail.ru](mailto:yumashev@mail.ru)

## Аннотация

Проведено численное моделирование высокоэнтальпийного течения в сопле аэродинамической трубы ВАТ-104 ЦАГИ с детальным описанием неравновесных физико-химических процессов. Аппроксимация системы уравнений выполнена по неявной схеме второго порядка точности. Цели моделирования: (1) проверка применения численной методики для расчетов параметров высокотемпературного неравновесного потока, (2) определение роли процессов, важных для энергообмена при условиях течения в сопле, (3) получение численных значений массовых долей компонент и колебательных температур молекул вдоль сопла и на входе в рабочую часть АДТ.

Ключевые слова: аэродинамические трубы, высокоэнтальпийное неравновесное течение, численное моделирование.

## 1. Введение

Аэродинамическая труба ВАТ-104 ЦАГИ предназначена для испытаний теплозащитных материалов, которые применяются для защиты аэрокосмических аппаратов в условиях полета с большими скоростями в верхних слоях атмосферы. Эта АДТ оборудована высокочастотным индукционным подогревателем газа, который позволяет нагревать газ бесконтактным образом и избежать свойственных для электродуговых подогревателей загрязнений потока. В качестве рабочего вещества можно использовать различные газы, например азот, воздух, аргон, смесь аргона с кислородом и т.п.

Температура торможения потока в ВАТ-104 достигает 5000-8000 К. Из-за этого невозможно измерение параметров потока обычными средствами измерения, такими как трубки Пито, термпары, калориметры. В настоящее время ведется разработка специализированных охлаждаемых датчиков, но эта сложная инженерная задача пока еще не подошла к завершению. Применение эффективных оптических, спектральных методов диагностики, частично имевших место в работах [1 – 3], сдерживается высокой стоимостью современных измерительных систем.

В этих условиях важную роль приобретает численное моделирование течения в ВАТ-104 с учетом комплекса физико-химических процессов, происходящих при высоких температурах. Следует отметить работы [4, 5], в которых решались полные уравнения Навье-Стокса в двумерной постановке. В первой работе использовалась 5-компонентная модель

воздуха, во второй работе 11-компонентная модель. В обоих случаях колебательные степени свободы молекул считались находящимися в равновесии с текущим тепловым состоянием смеси.

Однако при действующих условиях возможно развитие колебательной неравновесности в течении. В настоящей работе ставится задача оценить влияние колебательной неравновесности путем расчета течения в сопле ВАТ-104 в одномерном приближении.

В разделе 2 излагается физическая и математическая постановка задачи, включая модель физико-химических процессов.

В разделе 3 рассматривается симметричная неявная разностная схема, сочетающая второй порядок аппроксимации по пространству и монотонность численного решения.

В разделе 4 рассматривается алгоритм решения системы нелинейных разностных уравнений методом Ньютона-Рафсона с автоматическим выбором стабилизирующего коэффициента.

Раздел 5 посвящен особенностям программной реализации, включая специальную архитектуру библиотеки АЛГЕБРА, динамическую настройку программы на разнообразные модели физико-химических процессов.

В разделе 6 обсуждаются результаты расчетов.

## 2. Физическая постановка и математическая модель

Рассматривается течение вязкого газа в сопле ВАТ-104 (рис. 1) в одномерном приближении: параметры течения не зависят от поперечной координаты, поперечная скорость не учитывается. Этого достаточно для первых оценок влияния колебательной неравновесности при минимальных затратах.

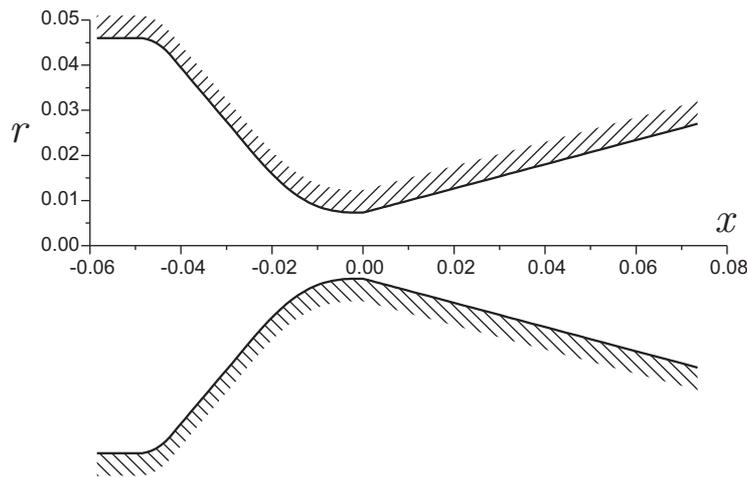


Рис. 1. Схема сопла ВАТ-104

Течение описывается системой уравнений

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

$$\frac{\partial \rho u F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u F}{\partial x} + F \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho(e+k)F}{\partial t} + \frac{\partial \rho(e+k)uF}{\partial x} + \frac{\partial u p F}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

Здесь  $p$  – давление,  $u$  – скорость,  $\rho$  – плотность,  $e$  – внутренняя энергия,  $k = u^2/2$  – кинетическая энергия,  $F$  – площадь поперечного сечения. Предполагается, что газ состоит из  $N$  компонент, реагирующих между собой. В систему добавляются уравнения переноса компонент

$$\frac{\partial \rho c_i F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u c_i F}{\partial x} = \rho r_i F, \quad i = 1, \dots, N-1. \quad (4)$$

Здесь  $c_i$  – массовые доли компонент с условием  $c_1 + c_2 + \dots + c_N = 1$ ,  $r_i$  – скорости образования компонент в результате химических реакций, измеряемые в массовых долях в секунду.

Учитывается также неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы многоатомных молекул. Изменение колебательной энергии происходит по закону Ландау-Теллера, который в движущейся среде имеет вид

$$\frac{dE_{vj}}{dt} \equiv \frac{\partial E_{vj}}{\partial t} + u \frac{\partial E_{vj}}{\partial x} = \frac{E_{vj}^0 - E_{vj}}{\tau_{vj}}, \quad j = 1, \dots, M \quad (5)$$

Здесь  $E_{vj}$  – энергии колебательных мод,  $E_{vj}^0$  – равновесные значения колебательной энергии,  $\tau_{vj}$  – характерные времена колебательной релаксации,  $M$  – суммарное число колебательных мод всех молекул.

Система дифференциальных уравнений (1) – (5) дополняется алгебраическими связями между параметрами течения:

$$p = \rho T \sum_{i=1}^N c_i R_i, \quad \rho e + p = \rho \sum_{i=1}^N c_i h_i, \quad h_i = h_{0i} + R_i \sum_{j=1}^M \nu_{ij} E_{vj} + C_{pi} T. \quad (6)$$

Здесь  $T$  – температура,  $h_i$  – энтальпии компонент,  $h_{0i}$  – их энтальпии образования,  $R_i$  и  $C_{pi}$  – газовые постоянные и теплоемкости компонент (без учета колебательной энергии),  $i$  – номера компонент,  $j$  – номера колебательных мод,  $\nu_{ij}$  – коэффициенты кратности колебательных мод (для каждого  $j$  существует единственное  $i$ , при котором  $\nu_{ij} \neq 0$ ). Колебательные энергии компонент  $E_{vi}$  измеряются в градусах Кельвина. Включение энтальпии образования компонент в полную энергию позволяет обойтись без источникового члена в уравнении энергии.

Система химических реакций может быть представлена в общем виде, чтобы процедура решения не была привязана к частным случаям. Предполагается, что между  $N$  компонентами происходят  $K$  реакций, причем реакция с номером  $j$  описывается обобщенной формулой

$$\alpha_{j1} Z_1 + \alpha_{j2} Z_2 + \dots + \alpha_{jN} Z_N = \beta_{j1} Z_1 + \beta_{j2} Z_2 + \dots + \beta_{jN} Z_N$$

Здесь  $\alpha_{ji}$  и  $\beta_{ji}$  – стехиометрические коэффициенты,  $Z_i$  – химические наименования компонент. С каждой стороны формулы редко бывает более трех членов, поэтому в матрицах  $\alpha_{ji}$  и  $\beta_{ji}$  большинство элементов – нули. Скорость производства  $i$ -й компоненты определяется как

$$r_i = m_i \sum_{j=1}^K (\beta_{ji} - \alpha_{ji}) (G_{fj} - G_{rj}),$$

$$G_{fj} = A_{fj} T^{B_{fj}} e^{-\frac{D_{fj}}{T}} \prod_{i=1}^N \left( \frac{\rho c_i}{m_i} \right)^{\alpha_{ji}}, \quad G_{rj} = A_{rj} T^{B_{rj}} e^{-\frac{D_{rj}}{T}} \prod_{i=1}^N \left( \frac{\rho c_i}{m_i} \right)^{\beta_{ji}}.$$

Здесь  $m_i$  – молекулярные веса компонент,  $G_{fj}$  и  $G_{rj}$  – скорости прямых и обратных реакций,  $A_{fj}$ ,  $B_{fj}$ ,  $D_{fj}$ ,  $A_{rj}$ ,  $B_{rj}$ ,  $D_{rj}$ , – параметры закона Аррениуса. В данном случае

рассматривается модель воздуха из десяти компонент (табл. 1) при наличии девяти реакций между ними (табл. 2). Параметры реакций соответствуют [6], при этом учитываются коэффициенты эффективности третьей частицы в реакциях диссоциации-рекомбинации (табл. 3).

Таблица 1

Компонента	$m$	Степени свободы	$h_0/R$ , К	$\theta$ , К	$\sigma$ , м <sup>2</sup>	$E_d$ , К
O <sub>2</sub>	32	5	0	2256	$3.0 \cdot 10^{-21}$	29875
O	16	3	29760	–	–	–
N	14	3	56600	–	–	–
NO	30	5	10810	2710	$3.0 \cdot 10^{-21}$	37750
N <sub>2</sub>	28	5	0	3354	$3.0 \cdot 10^{-21}$	56600
O <sup>+</sup>	16	3	153338	–	–	–
O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	32	5	140000	2256	–	2256
NO <sup>+</sup>	30	5	126000	2714	–	2714
N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	28	5	181000	3354	–	3354
e <sup>-</sup>	0.00055	3	0	–	–	–

Таблица 2

Реакция	$A_f$	$B_f$	$D_f$	$A_r$	$B_r$	$D_r$	$E_d$
N <sub>2</sub> + M = N + N + M	$7.0 \cdot 10^{18}$	-1.6	113200	$1.015 \cdot 10^{13}$	-1.24	0	56600
O <sub>2</sub> + M = O + O + M	$2.0 \cdot 10^{18}$	-1.5	59750	$1.171 \cdot 10^{13}$	-1.19	0	29875
NO + M = N + O + M	$5.0 \cdot 10^{12}$	0.0	75500	$1.129 \cdot 10^8$	0.27	0	37750
O + NO = N + O <sub>2</sub>	$2.8 \cdot 10^6$	1.0	20000	$1.1 \cdot 10^7$	1.0	4000	–
O + N <sub>2</sub> = N + NO	$2.04 \cdot 10^9$	0.5	38000	$4.4 \cdot 10^8$	0.5	0	–
N + O = NO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	$2.56 \cdot 10^9$	0.0	32200	$6.7 \cdot 10^{18}$	-1.5	0	–
O + O = O <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	0.71	2.7	80600	$1.492 \cdot 10^{14}$	-0.06	0	–
N + N = N <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	$4.44 \cdot 10^7$	0.7	67500	$1.5 \cdot 10^{19}$	-1.5	0	–
O + e <sup>-</sup> = O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> + e <sup>-</sup>	$3.9 \cdot 10^{30}$	-3.78	158500	$3.686 \cdot 10^{38}$	-5.89	0	–

Таблица 3

Тип 3-й частицы	N	O	NO	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	O <sup>+</sup>	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	NO <sup>+</sup>	N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>
M(N <sub>2</sub> )	4.3	4.3	1.0	1.0	1.0	4.3	1.0	1.0	1.0	1.0
M(O <sub>2</sub> )	5.0	5.0	1.0	1.0	1.0	5.0	1.0	1.0	1.0	1.0
M(NO)	22.0	22.0	22.0	1.0	1.0	22.0	1.0	22.0	1.0	1.0

Равновесные значения колебательной энергии определяются законом Дебая

$$E_{vj}^0 = \frac{\theta_j}{e^{\theta_j/T} - 1},$$

где  $\theta_j$  – дебаевские температуры колебательных мод. Характерное время колебательной релаксации определяется по формуле Милликена-Уайта [7] с введением поправки Парка [8]:

$$\tau_{vj} = \left( \sum_{i=1}^K \frac{c_i}{\tau_{ij}} \right)^{-1} + \tau_p, \quad \tau_{ij} = \frac{9.8 \cdot 10^{-4}}{p} e^{a_{ij}(T^{-1/3} - b_{ij})},$$

$$a_{ij} = 0.00116 m_{ij}^{1/2} \theta_j^{4/3}, \quad b_{ij} = 0.015 m_{ij}^{1/4}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j},$$

$$\tau_p = \frac{1}{\rho N_A \sigma} \sqrt{\frac{\pi}{8 R_0 T}} \left( \sum_{i=1}^K \frac{c_i}{m_i} \right)^{-3/2} \left( \frac{T}{50000} \right)^2.$$

Здесь  $N_A$  – число Авогадро,  $\sigma$  – эффективное сечение столкновения молекул,  $R_0$  – универсальная газовая постоянная. Значения параметров  $\theta$  и  $\sigma$  для рассматриваемых компонент приведены в табл. 1.

Известно, что неравновесное возбуждение колебательных степеней свободы влияет на процесс диссоциации. Колебательно-диссоциационное взаимодействие учитывается путем умножения скорости реакции диссоциации на поправочный множитель [9]

$$\frac{E_v^0 + \theta}{E_v + \theta} e^{E_d(1/T - 1/T_v)}.$$

Значения параметра  $E_d$ , связанного с энергией диссоциации, приведены в табл. 2 для соответствующих реакций. Колебательная температура  $T_v$  по определению находится из соотношения

$$E_v = \frac{\theta}{e^{\theta/T_v} - 1}, \quad T_v = \frac{\theta}{\ln(1 + \theta/E_v)}.$$

На левой границе (вход в сопло) требуется задать давление, плотность, скорость газа и массовые доли всех компонент. Однако при наличии физико-химических процессов невозможно предугадать, какой расход сможет пропустить критическое сечение сопла. При несоответствии заданного расхода и пропускной способности критического течения параметры газа будут испытывать скачок у левой границы и фактически будет течение с другими входными параметрами. Поэтому один из названных параметров должен быть свободным и подбираться в ходе глобальных итераций. В данном случае фиксируются давление  $p_0$ , плотность  $\rho_0$  и состав газа, а скорость  $u_0$  является свободным параметром, подлежащим подбору.

На правой границе установившееся течение является сверхзвуковым и граничные условия не требуются. Однако в ходе установления параметры газа изменяются в широких пределах и течение оказывается дозвуковым на значительном промежутке времени. Поэтому здесь ставится искусственное граничное условие экстраполяции, не препятствующее выходу возмущенного потока и запуску сопла.

### 3. Конечно-разностная аппроксимация

Исходную систему дифференциальных уравнений надо аппроксимировать конечными разностями на расчетной сетке в пространстве  $(x, t)$ . В общем случае сетка может быть неравномерной и криволинейной. Например, в данной задаче желательно сгущение узлов сетки вблизи критического сечения и угловой точки сопла. Обычный способ управления формой сетки состоит в том, чтобы перейти к обобщенным координатам  $(\xi, \eta)$ . Равномерная прямоугольная сетка в обобщенных координатах может давать сетку любой необходимой формы в физических координатах путем выбора надлежащего преобразования

координат. В данном случае сетка предполагается неподвижной и синхронной, так что

$$x = x(\xi), \quad t = \eta.$$

Для перехода к координате  $\xi$  достаточно домножить систему уравнений (1) – (5) на коэффициент  $g = dx/d\xi$ :

$$g \frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F}{\partial \xi} = 0, \quad (7)$$

$$g \frac{\partial \rho u F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 F}{\partial \xi} + F \frac{\partial p}{\partial \xi} = 0, \quad (8)$$

$$g \frac{\partial \rho(e+k)F}{\partial t} + \frac{\partial \rho(e+k)uF}{\partial \xi} + \frac{\partial upF}{\partial \xi} = 0. \quad (9)$$

$$g \frac{\partial \rho c_i F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u c_i F}{\partial \xi} = g \rho F r_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (10)$$

$$g \frac{\partial E_{vj}}{\partial t} + u \frac{\partial E_{vj}}{\partial \xi} = g \frac{E_{vj}^0 - E_{vj}}{\tau_{vj}}, \quad j = 1, 2, \dots, M. \quad (11)$$

При выборе схемы конечно-разностной аппроксимации приходится искать баланс между повышением порядка точности и сохранением устойчивости и монотонности численного решения. Схемы первого порядка легче обеспечивают устойчивость и монотонность, однако это достигается за счет схемной вязкости, во многих случаях недопустимой. С другой стороны, С.К. Годунов доказал, что не существует линейных монотонных схем второго и выше порядков [10].

В мировой практике эта проблема чаще всего решается путем использования разностных схем переменного порядка, получивших собирательное название TVD [11 – 13]. При всем многообразии вариантов схем TVD их общий принцип состоит в том, что в области гладкого поведения решения достигается высокий порядок, а в области резких особенностей порядок понижается до первого. Можно сказать, что это схемы с переменным шаблоном, адаптирующимся к особенностям численного решения.

В настоящей работе используется иной подход, состоящий в том, что разные газодинамические величины рассматриваются в разных семействах точек, смещенных друг относительно друга на половину шага сетки. В мировой литературе такая конструкция получила название *staggered grids*, у нас – *разнесенные сетки*. Следуя [14], будем рассматривать скорость газа в узлах сетки, а давление, плотность и прочие теплофизические величины – в ячейках, т.е. промежутках между узлами (рис. 2).

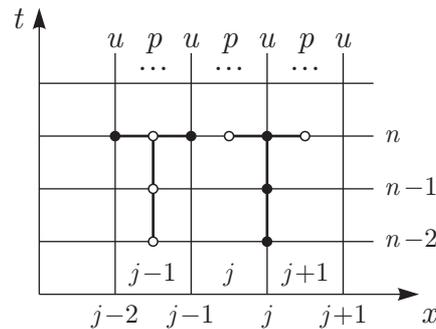


Рис. 2. Шаблон разностной схемы

Проведем исследование свойств разностной схемы. Чтобы избежать громоздких выкладок, покажем принцип построения разностных уравнений и проведем анализ их свойств на простейшем примере системы уравнений акустики

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c^2 \frac{\partial r}{\partial x} = 0. \quad (13)$$

Здесь  $x$  – пространственная координата,  $t$  – время,  $r(x, t)$  – малые возмущения плотности газа  $\rho$ ,  $q(x, t)$  – малые возмущения потока или импульса  $\rho u$ ,  $u$  – скорость газа,  $c$  – скорость звука.

Введем в пространстве  $(x, t)$  равномерную прямоугольную сетку с шагом  $h$  по координате и шагом  $\tau$  по времени. Будем рассматривать значения импульса газа в узлах сетки, а значения плотности – в серединах ячеек, т. е. в промежутках между узлами по оси  $x$ . Чтобы избежать громоздких полуцелых индексов, условимся нумеровать ячейки целыми номерами так же, как и узлы: по определению,  $j$ -я ячейка заключена между  $(j - 1)$ -м и  $j$ -м узлами. Обозначим сеточные функции

$$r_j^n = r \left[ \left( j - \frac{1}{2} \right) h, n\tau \right], \quad q_j^n = q(jh, n\tau).$$

Аппроксимируем дифференциальные уравнения конечными разностями в тех же точках по оси  $x$ , где определены соответствующие функции: уравнение (12) – в центрах ячеек, уравнение (13) – в узлах.

Пространственные производные аппроксимируются симметричными разностями, что должно обеспечить второй порядок точности по  $x$ . По способу аппроксимации временной производной рассмотрим трехслойный Т-образный шаблон, в котором порядок точности по  $t$  изменяется от первого до второго. Разностные уравнения имеют вид

$$\frac{r_j^n - r_j^{n-1}}{\tau} + (1 - \alpha) \frac{r_j^n - 2r_j^{n-1} + r_j^{n-2}}{\tau} + \frac{q_j^n - q_{j-1}^n}{h} = 0, \quad (14)$$

$$\frac{q_j^n - q_j^{n-1}}{\tau} + (1 - \alpha) \frac{q_j^n - 2q_j^{n-1} + q_j^{n-2}}{\tau} + c^2 \frac{r_{j+1}^n - r_j^n}{h} = 0. \quad (15)$$

Весовой коэффициент  $\alpha$  здесь изменяется от 1 до 0.5: при  $\alpha = 1$  получаем чисто неявную схему первого порядка по времени, при  $\alpha = 0.5$  производные по времени аппроксимируются со вторым порядком по формулам

$$\frac{3r_j^n - 4r_j^{n-1} + r_j^{n-2}}{2\tau}, \quad \frac{3q_j^n - 4q_j^{n-1} + q_j^{n-2}}{2\tau}.$$

Характерной чертой разнесенных сеток является то, что они позволяют построить симметричные разности по значениям функций в соседних узлах, в то время как на обычных сетках для этого приходится брать значения функций через два интервала сетки. Для проявления этого свойства разнесенных сеток существенно перекрестное расположение временных и пространственных производных в исходных дифференциальных уравнениях, что вообще характерно для уравнений газовой динамики. Благодаря аппроксимации производных по  $x$  по соседним узлам разностная схема реагирует на пилообразные возмущения, которые обычно нарушают монотонность численных решений, и способна им противодействовать.

В [14] проведено исследование устойчивости этой схемы спектральным методом [15] и показано, что она безусловно устойчива при  $\alpha \geq 0.5$ . Больше информации о свойствах схемы дает метод дифференциального приближения [16]. Разлагая функции  $r(x, t)$  и  $q(x, t)$  в ряд Тейлора в окрестности узла  $(j, n)$  и подставляя в уравнения (14), (15), получим Г-форму дифференциального приближения (по терминологии [16])

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \tau \frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + O(\tau^2, h^2),$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c^2 \frac{\partial r}{\partial x} = \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \tau \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} + O(\tau^2, h^2).$$

Используя исходные дифференциальные уравнения, исключим старшие производные по  $t$  и смешанные производные и получим П-форму первого дифференциального приближения

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) c^2 \tau \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} + O(\tau^2, h^2),$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c^2 \frac{\partial r}{\partial x} = \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) c^2 \tau \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + O(\tau^2, h^2).$$

Коэффициент при вторых производных  $(\alpha - 1/2) c^2 \tau$  характеризует собственную аппроксимационную вязкость разностной схемы. Для чисто неявной схемы она равна  $c^2 \tau / 2$ . Существенно, что аппроксимационная вязкость не зависит от пространственного шага сетки, что дает определенные преимущества при использовании неравномерных сеток. С другой стороны, зависимость от шага по времени и параметра  $\alpha$  позволяет регулировать аппроксимационную вязкость в широких пределах, добиваясь компромисса между монотонностью численного решения и степенью сглаживания разрывов.

В исходной системе уравнений (6) – (10) аппроксимационная вязкость возникает в "силовой" паре уравнений импульса и энергии. Это – результат перекрестного расположения производных по времени и по координате относительно скорости с одной стороны и давления либо энергии – с другой. Заметим, что в совершенном газе давление  $p$  и энергия  $\rho e$  совпадают с точностью до множителя  $(\gamma - 1)$ , где  $\gamma$  – показатель адиабаты. При наличии физико-химических процессов отношение  $p$  и  $\rho e$  перестает быть константой, но родственный характер сохраняется, обеспечивая действие аппроксимационной вязкости.

#### 4. Решение системы разностных уравнений методом Ньютона

В результате конечно-разностной аппроксимации возникает большая система нелинейных алгебраических уравнений. За редким исключением нелинейные уравнения не имеют аналитического решения и должны решаться численно путем последовательных приближений. Для этих целей создано множество итерационных методов, среди которых выделяется метод Ньютона (иначе, метод касательных) благодаря сочетанию простоты и скорости сходимости. Пусть надо решить уравнение

$$f(x) = 0$$

Пусть  $x^{(k)}$  – очередное приближение, при котором  $f(x^{(k)}) \neq 0$ . Следующее приближение находится как точка пересечения касательной к графику функции в точке  $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$  с осью абсцисс:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

Для дальнейшего удобнее представить эту формулу в виде

$$f'(x^{(k)}) (x^{(k+1)} - x^{(k)}) + f(x^{(k)}) = 0. \tag{16}$$

Обратимся к системе разностных уравнений, представленной в векторном виде

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = 0.$$

Здесь  $\mathbf{F}$  – вектор уравнений,  $\mathbf{X}$  – вектор искомых величин. Метод Ньютона (16) естественным образом обобщается на случай системы уравнений:

$$\frac{D\mathbf{F}(\mathbf{X})}{D\mathbf{X}} (\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}) + \mathbf{F}(\mathbf{X}^{(k)}) = 0$$

В результате получена система линейных уравнений относительно нового приближения  $\mathbf{X}^{(k+1)}$ . Матрица системы представляет собой матрицу Якоби

$$\frac{D\mathbf{F}(\mathbf{X})}{D\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

На практике нередко возникают затруднения в сходимости итераций. Чтобы повысить устойчивость итерационного процесса, приходится ограничивать шаги между последовательными приближениями. Поэтому в данной работе используется метод Ньютона-Рафсона, в котором добавлен замедляющий коэффициент  $\beta \leq 1$ :

$$\frac{D\mathbf{F}(\mathbf{X})}{D\mathbf{X}} (\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}) + \beta^{(k)} \mathbf{F}(\mathbf{X}^{(k)}) = 0.$$

Значение  $\beta$  либо подбирается опытным путем, либо вычисляется по неким критериям. В данной работе используется автоматическая подстройка  $\beta$  под то, как развивается итерационный процесс. Этот метод был предложен в работе [17] и модифицирован П.Е. Бабиковым. На первой итерации задается некоторое начальное значение  $\beta^{(1)}$  из диапазона  $0 < \beta \leq 1$ , а далее оно вычисляется по формуле

$$\beta^{(k+1)} = -\beta^{(k)} \frac{(\Delta^{(k+1)} - \Delta^{(k)}, \Delta^{(k)})}{|\Delta^{(k+1)} - \Delta^{(k)}|^2},$$

где  $\Delta^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}^{(k-1)}$ . Действует ограничение: если  $\beta$  окажется меньше некоторого заданного  $\beta_{\min}$ , то оно заменяется на  $\beta_{\min}$ .

## 5. Программная реализация

Со времен комплекса АРГОЛА [18] действует принцип строгого разделения разработки программы и ее использования. Иначе говоря, при проведении серии расчетов не допускается переходить от варианта к варианту путем внесения изменений в программу. Для каждого расчета программа получает задание, представляющее собой текст длиной обычно 15 – 20 строк, которое определяет значения всех параметров и прочие обстоятельства расчета. Задание составляется на специальном входном языке, которому присущи ключевой способ ввода параметров, свободный формат, мнемоничность. В действительности программа может иметь много десятков параметров, однако действует принцип умолчания, благодаря которому приходится задавать только небольшую их часть. Среди параметров могут быть имена файлов, отсылающие к более значительным объемам данных (рис. 3).

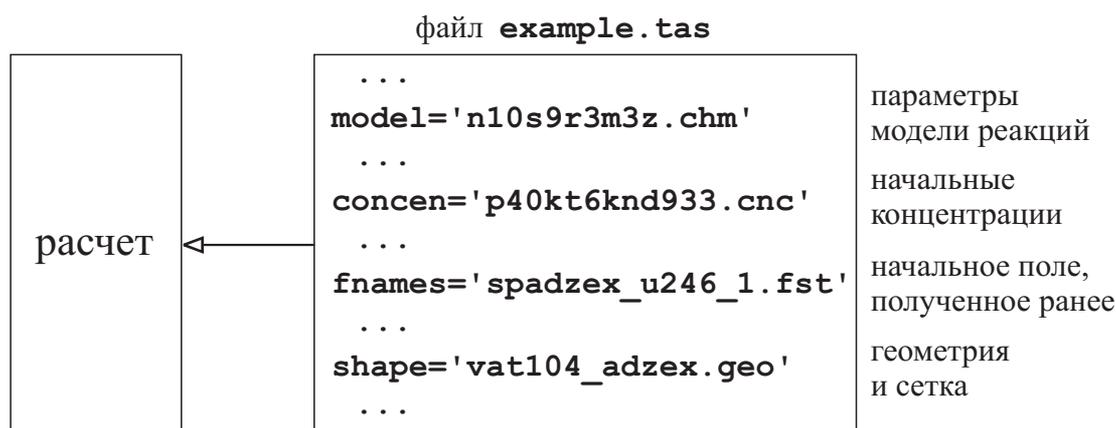


Рис. 3. Ссылки на файлы данных в задании на расчет

Программа сделана независимой от конкретного вида модели физико-химических процессов. Описание модели (состав газовой смеси, набор химических реакций, параметры неравновесных колебаний) составляется в виде наглядного текста, а программа автоматически настраивается, как это показано на рис. 4. Модуль INTASK осуществляет ввод задания и передает имя файла модулю INCHEM. Модуль INCHEM читает и анализирует описание модели, определяет число компонент газовой смеси  $N$ , число реакций  $K$ , число мод неравновесных колебаний  $M$  и формирует в памяти рабочие таблицы, содержащие параметры компонент, реакций и колебаний.

Определяется длина вектора данных в каждой ячейке расчетной сетки: к основным переменным  $L$  добавляются  $N - 1$  компонент и  $M$  колебательных мод. В соответствии с этим резервируется память под массивы поля течения и служебные массивы, используемые в вычислительном алгоритме. Это делается при помощи авторской системы динамического распределения памяти, универсальной для различных компьютерных платформ [19].

Далее сформированные структуры данных используются в процессе расчета. В состав программы входит модуль SOURCE, вычисляющий скорости производства компонент в результате химических реакций, модуль SOVIBR, вычисляющий времена релаксации неравновесных колебаний, и модуль THERMO, вычисляющий недостающие термодинамические параметры.

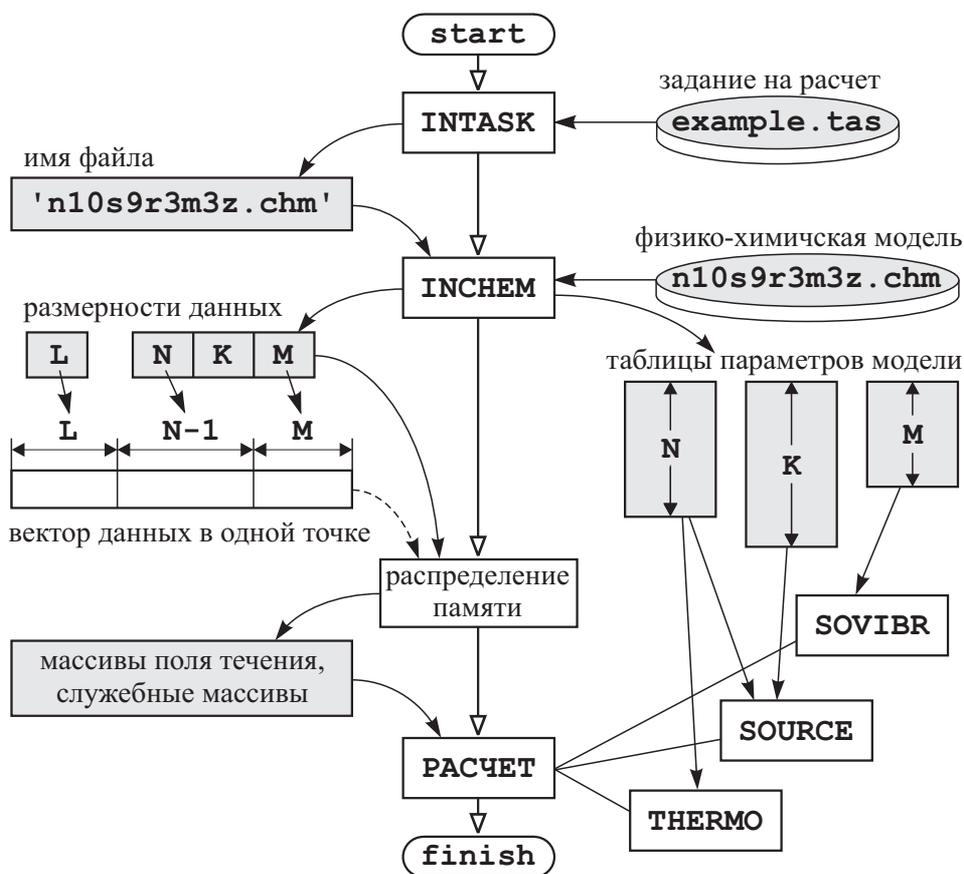


Рис. 4. Настройка программы на модель физико-химических процессов

Метод Ньютона-Рафсона реализован при помощи библиотеки АЛГЕБРА, созданной П.Е. Бабиковым в НИО-8 ЦАГИ. В программе используются два основных модуля из этой библиотеки: модуль JAC01D строит матрицу Якоби, модуль LEQ26D решает получившуюся систему линейных уравнений. В соответствии с разностным шаблоном матрица Якоби имеет трехдиагональную блочную структуру (рис. 5). Каждый столбец блоков соответствует вектору неизвестных в одной ячейке расчетной сетки, каждая строка – вектору уравнений в ячейке. Обратим внимание: в нарушение трехдиагональной структуры первая и последняя строки матрицы содержат не два, а три блока с целью сохранить второй порядок аппроксимации на границах.

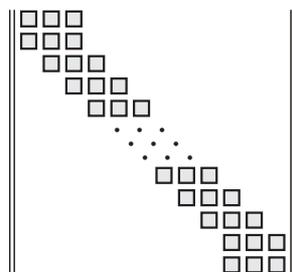


Рис. 5. Блочно-трехдиагональная матрица Якоби

Матрица Якоби вычисляется путем численного дифференцирования, так как этот способ является универсальным и не зависит от конкретного вида уравнений, а также позволяет избежать громоздких выкладок. За одно обращение модуль JAC01D вычисляет одну блочную строку. В качестве аргумента ему подается функция обратного вызова

(callback), вычисляющая невязку: значение вектора уравнений в ячейке  $i$  при заданном значении вектора неизвестных в трех смежных ячейках  $i-1, i, i+1$ , составляющих разностный шаблон:

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{X}_{i-1} \cup \mathbf{X}_i \cup \mathbf{X}_{i+1}) = \delta_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

Именно в callback-функциях заключена вся специфика задачи: разностные уравнения и граничные условия. В рассматриваемом случае во внутренних ячейках  $i = 2, \dots, N-1$  используется функция MIDDLE, в ячейке 1 – функция BOUNDB, в ячейке  $N$  – функция BOUNDA. Схема взаимодействия модулей программы и библиотеки АЛГЕБРА показана на рис. 6.

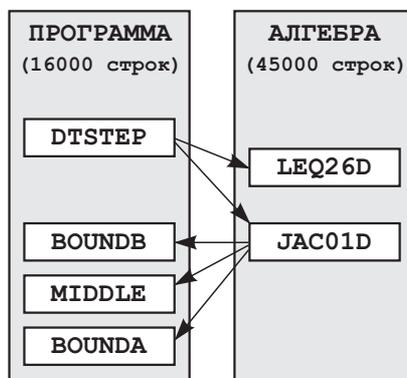


Рис. 6. Взаимодействие программы с библиотекой АЛГЕБРА

Результаты расчета с заданной периодичностью выводятся в файл в формате DST [19]. В таком виде их можно анализировать с помощью программы DSTview, экспортировать фрагменты данных в форме текстовых таблиц, а также использовать в качестве начальных данных для новых расчетов. Имеется конвертер формата DST в формат CGNS, открывающий доступ ко множеству других средств графического анализа.

## 6. Результаты расчетов

На основании экспериментальных данных [5] для расчета выбраны три режима работы ВАТ-104, в которых давление газа на входе в сопло составляет 60, 40 и 20 кПа при температуре 5000, 6000 и 7000 К соответственно.

На входе в сопло необходимо определить равновесный состав газовой смеси при заданных давлении и температуре, чтобы использовать его в качестве граничного условия. При этом равновесный состав должен соответствовать используемой модели физико-химических процессов. С этой целью в настоящей работе бралась неподвижная смесь 23%  $O_2$  и 77%  $N_2$  в замкнутом объеме и рассматривалась ее релаксация по времени к конечному равновесному состоянию. Итерационным путем подбирались начальные давление и плотность так, чтобы равновесная смесь приобретала требуемые давление и температуру, указанные выше. Результат подбора соответствует требуемым значениям с точностью 0.1% по давлению и сотых долей процента по температуре:

Таблица 4

Начальные значения			Равновесное состояние		
$p$ , Па	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$T$ , К	$p$ , Па	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$T$ , К
88502.5	0.0342657	8955.98	60070.5	0.0342657	5000.0
72600.0	0.01677	15011.4	40033.8	0.01677	6000.63
47320.0	0.005409	30335.1	20001.2	0.005409	7001.82

При этом получены массовые доли компонент, принятые в качестве граничных условий:

Таблица 5

вариант	O <sub>2</sub>	O	N	NO	N <sub>2</sub>
20кПа/7000К	$0.10956 \cdot 10^{-4}$	0.228197	0.607403	0.0011443	0.161764
40кПа/6000К	$0.13645 \cdot 10^{-3}$	0.226468	0.170403	0.0060088	0.596624
60кПа/5000К	$0.21203 \cdot 10^{-2}$	0.218040	0.018778	0.0183890	0.742612

вариант	O <sup>+</sup>	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	NO <sup>+</sup>	N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>
20кПа/7000К	$0.8852 \cdot 10^{-3}$	$0.1696 \cdot 10^{-6}$	$0.5564 \cdot 10^{-3}$	$0.3895 \cdot 10^{-4}$	$0.4140 \cdot 10^{-7}$
40кПа/6000К	$0.1261 \cdot 10^{-5}$	$0.9954 \cdot 10^{-7}$	$0.3560 \cdot 10^{-3}$	$0.2723 \cdot 10^{-5}$	$0.6626 \cdot 10^{-8}$
60кПа/5000К	$0.1045 \cdot 10^{-7}$	$0.2300 \cdot 10^{-7}$	$0.5953 \cdot 10^{-4}$	$0.1413 \cdot 10^{-7}$	$0.1092 \cdot 10^{-8}$

Течение в сопле получается путем расчета нестационарного запуска сопла и последующей релаксации к стационарному состоянию. Для этого требуется задать какое-либо начальное распределение параметров по длине сопла. Программа позволяет использовать ранее полученные результаты в качестве начального условия. Однако, если результатов еще нет, программа позволяет задать только однородное начальное поле. В случае совершенного газа этого оказывается достаточно. Но если происходят физико-химические процессы и условия течения экстремальные, то расчет может завершаться аварийно на первом же шаге по времени.

По этим причинам сначала выполняется расчет течения совершенного газа либо газа в состоянии термодинамического равновесия. Полученное таким образом поле течения уже пригодно для начала расчета течения со всем комплексом неравновесных физико-химических процессов.

Как отмечалось в разделе 2 (стр. 6), необходимо подобрать скорость газа  $u_0$  на входе в сопло, которая при заданных параметрах газа обеспечивает пропуск расхода  $\rho_0 u_0 F_0$  через критическое сечение ( $F_0$  – площадь входного сечения). Поэтому для каждого варианта граничных условий выполнялась серия из нескольких расчетов, представляющих собой глобальные итерации по подбору скорости газа. В результате были подобраны такие значения:

Таблица 6

вариант	20кПа/7000К	40кПа/6000К	60кПа/5000К
скорость, м/с	34.4	26.5	22.5

Полученное в расчетах изменение давления по длине сопла показано на рис. 7 для трех вариантов граничных условий. Эти же данные построены на рис. 8 в логарифмическом масштабе, чтобы разрешить область низкого давления в сверхзвуковой части сопла. В окрестности критического сечения наблюдается немонотонное поведение наклона кривых, что связано с особенностями профиля сопла и наличием угловой точки. Это заметно также в распределениях плотности на рис. 9 и скорости газа на рис. 10, где мы видим, что поток разгоняется до скоростей порядка 3 – 4 км/с.

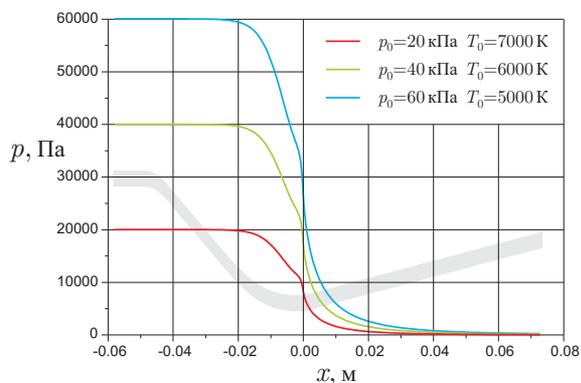


Рис. 7. Изменение давления по длине сопла ВАТ-104

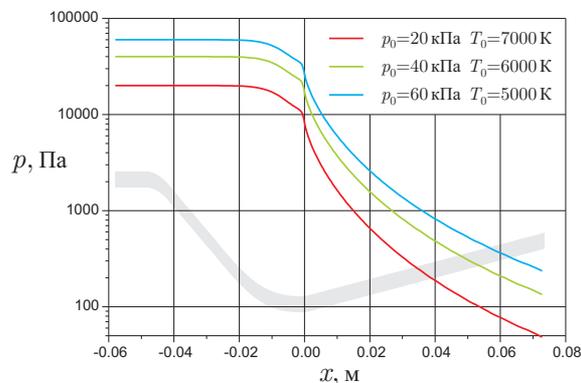


Рис. 8. Изменение давления по длине сопла ВАТ-104

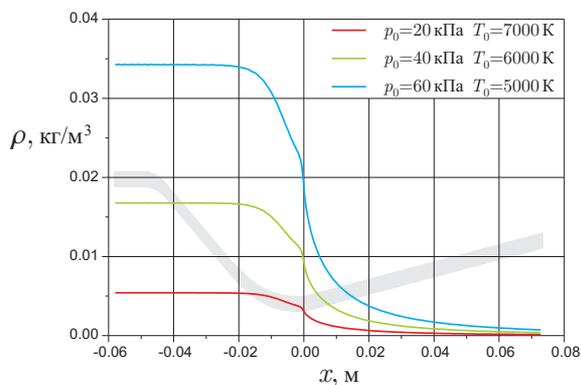


Рис. 9. Изменение плотности по длине сопла ВАТ-104

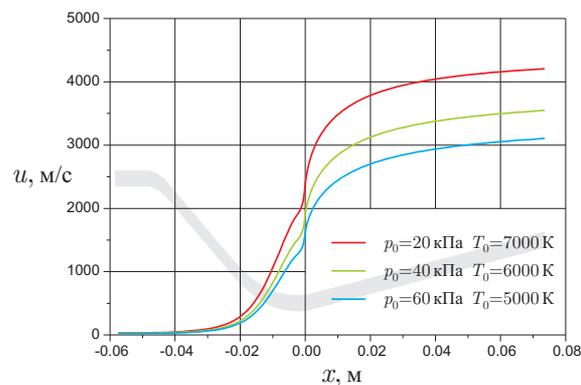


Рис. 10. Изменение скорости по длине сопла ВАТ-104

На рис. 11 показано изменение температуры  $T$ , определение которой следует из термодинамических соотношений (6). Эта температура соответствует энергии поступательных и вращательных степеней свободы молекул, находящихся в состоянии равновесия. Можно заметить, что чем выше начальная температура, тем быстрее спад и тем ниже оказывается температура на выходе из сопла (где она лежит в диапазоне 800 – 1000 К). Напротив, поведение колебательных степеней свободы двухатомных молекул  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$  существенно неравновесное. Их колебательные температуры на рис. 12 в дозвуковой части сопла начинают отставать от равновесной температуры  $T$ , а в сверхзвуковой части и вовсе выходят на постоянный уровень. Ранее всего замерзание колебательной энергии наступает у азота, позднее всего – у кислорода. Снижение колебательной температуры относительно начального уровня менее всего у азота, более всего у кислорода, но последняя все равно остается много выше равновесной температуры.

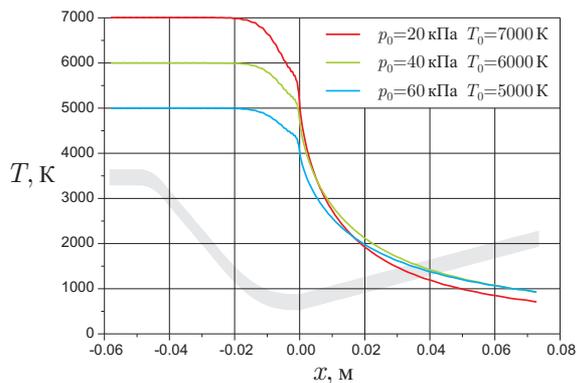


Рис. 11. Изменение поступательной температуры по длине сопла ВАТ-104

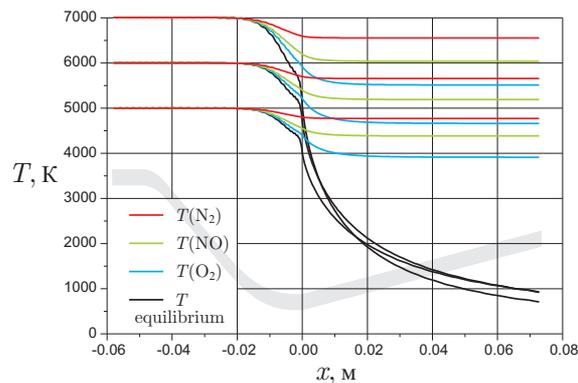


Рис. 12. Изменение колебательных температур по длине сопла ВАТ-104

Такой характер процесса легко объясняется. На входе в сопло скорость газа мала и характерное время процесса соответственно велико, а высокая температура определяет малые времена релаксации колебаний. В результате состояние колебаний близко к равновесному. По мере разгона потока характерное время уменьшается, а температура падает и времена релаксации увеличиваются. В результате процесс приближается к состоянию замерзания.

Те же причины определяют поведение массовых долей молекулярного и атомарного азота на рис. 13. В дозвуковой части сопла успевает пройти небольшая рекомбинация, обусловленная снижением температуры, а в сверхзвуковой части массовые доли выходят на постоянный уровень. Поскольку азот преобладает в составе газовой смеси, в целом течение в сверхзвуковой части сопла можно считать замороженным.

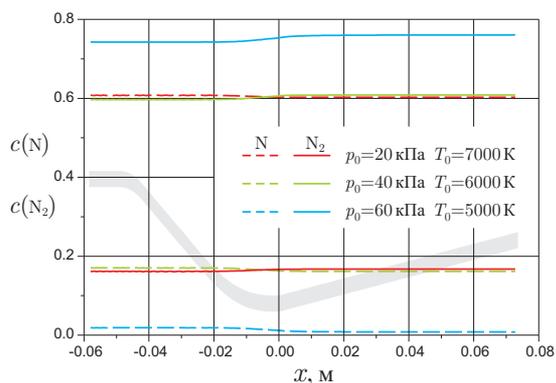


Рис. 13. Изменение массовых долей N и N<sub>2</sub> по длине сопла ВАТ-104

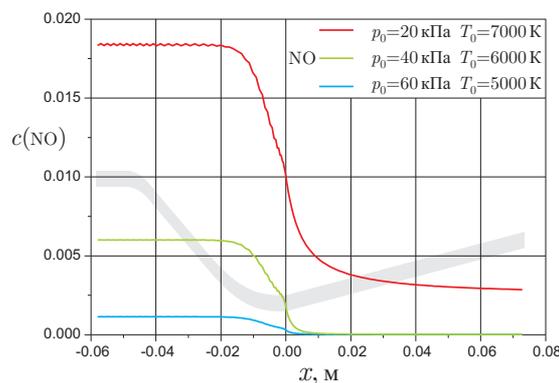


Рис. 14. Изменение массовой доли NO по длине сопла ВАТ-104

Изменение массовых долей азота невелико, но оно влияет на баланс других компонент. Это происходит благодаря обменным реакциям  $O + N_2 = N + NO$  и  $O + NO = N + O_2$ , имеющим меньший энергетический порог и продолжающим действовать в сверхзвуковой части сопла. В результате доля NO на рис. 14 снижается, доля атомарного кислорода на рис. 15 подрастает менее чем на процент, а доля O<sub>2</sub> на рис. 16 демонстрирует немонотонное поведение, будучи при этом пренебрежимо малой.

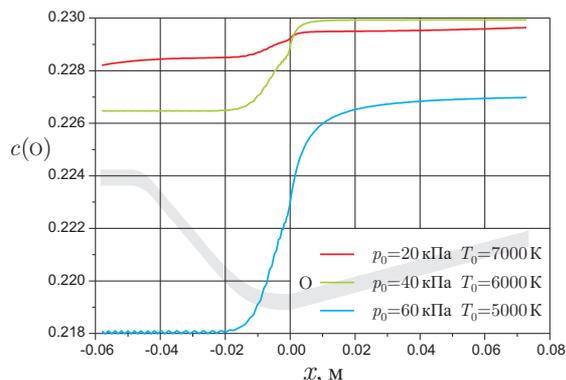


Рис. 15. Изменение массовой доли О по длине сопла ВАТ-104

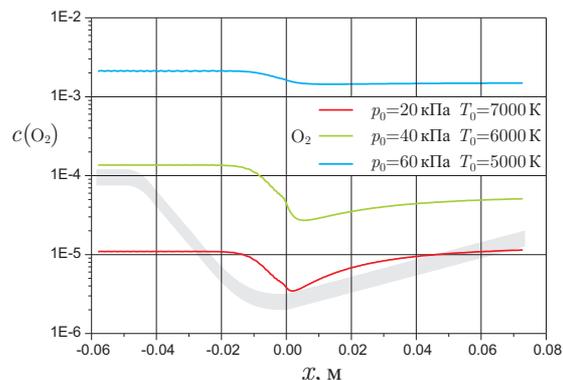


Рис. 16. Изменение массовой доли O<sub>2</sub> по длине сопла ВАТ-104

Влияние неравновесных колебаний на течение зависит от массовой доли двухатомных молекул. В рассматриваемом случае массовая доля N<sub>2</sub> достаточно велика: в разных режимах она составляет от 17% до 76% (см. рис. 13). При этом колебательная температура азота превышает равновесную температуру смеси  $T$  на 4000 – 6000 К (рис. 12). Следовательно, неравновесная колебательная энергия азота занимает весомое место в энергетическом балансе. В отличие от этого количество NO и O<sub>2</sub> весьма мало, так что их неравновесные колебания не оказывают ощутимого влияния.

## 7. Заключение

Проведено численное моделирование невязкого течения в сопле аэродинамической трубы ВАТ-104 ЦАГИ в одномерном приближении с учетом неравновесных химических реакций и неравновесного возбуждения колебательной энергии молекул, последнее реализовано впервые.

Показано, что в сверхзвуковой части сопла происходит замораживание течения. Это касается как химического состава газовой смеси, так и колебательной энергии молекул.

Неравновесная колебательная энергия азота вносит вклад в энергетический баланс в виду заметной доли N<sub>2</sub> от 17% до 76% в составе газовой смеси, а также превышения колебательной температуры азота от 4000 до 6000 К над температурой смеси.

В развитие данной работы предполагается исследовать течение в ВАТ-104 в рамках уравнений Навье-Стокса с помощью программы HSFLOW с использованием более сложной модели физико-химических процессов. Актуальной задачей является распространение исследований на другие высокоэнтальпийные аэродинамические трубы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, Грант 18-08-00020а.

## Литература

1. Zhestkov B., Shvedchenko V. Evaluation of materials oxidation in induction plasmatron under simulated re-entry conditions // Proceeding of the Second European Workshop on thermal protection systems. – Stuttgart, Germany, October 25 – 27, p. 204 – 215, 1995.
2. Zhestkov B.E., Ivanov D.V., Shvedchenko V.V. et al. Calculated and Experimental Flat and Wavy Surface Temperature Distributions // AIAA Paper 99-0733, 1999.

3. Жестков Б.Е., Липин А.В., Никифоров А.П. Экспериментальная база НИО-8 для решения задач газодинамики и теплообмена на больших высотах, а также других задач // Труды Всероссийской научно-технической конференции "Фундаментальные исследования для гиперзвуковых технологий". Изд. ЦАГИ, том 2, с. 563 – 571, 1998.
4. Башкин В.А., Егоров И.В., Жестков Б.Е., Шведченко В.В. Численное исследование поля течения и теплообмена в тракте высокотемпературной аэродинамической установки // Теплофизика высоких температур, том 46, № 5, с. 771 – 783, 2008.
5. Василевский Э.Б., Жестков Б.Е., Сахаров В.И. Численное моделирование и эксперимент на индукционном плазмотроне АДТ ВАТ-104 // Ученые записки ЦАГИ, том XLVII, №5, с.3 – 13, 2016.
6. Gupta R.N., Lee K.P. An aerothermal study of MESUR Pathfinder aeroshell // AIAA Paper 94-2025, 1994.
7. Millikan R.C., White D.R. Systematics of vibrational relaxation. J. of Chemical Physics, v. 39, No 12, p. 3209 – 3213, 1963.
8. Park C. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions. I. Earth entries // J. of Thermophysics and Heat Transfer, v. 7, No 3, p. 385 – 398, 1999.
9. Сергиевская А.Л., Ковач Э.А., Лосев С.А. Опыт информационно-математического моделирования в физико-химической кинетике // М., Изд-во МГУ, 1995.
10. Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Математический сборник № 47, с. 271 – 306, 1959.
11. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ, том III, №6, с.68 – 76, 1972.
12. Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws // J. Comput. Phys., v. 49, p. 357 – 393, 1983.
13. Van Leer B. Towards the Ultimate Conservative Scheme. 2. Monotonicity and Conservation in a Second-Order Scheme // J. Comput. Phys., v. 14, No. 2, p. 361 – 376, 1974.
14. Ворожцов И.И., Юмашев В.Л., Об аппроксимационных свойствах одной неявной разностной схемы для уравнений газовой динамики // ЖВМиМФ, том 29, №7, 1093-110, 1990.
15. Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы // М., "Наука 1973.
16. Шокин Ю.И., Яненко Н.Н. Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике // Новосибирск, "Наука 1985.
17. Каримов Т.Х. О некоторых итерационных методах решения нелинейных уравнений в гильбертовом пространстве // Докл. АН СССР, том 269, № 5. С. 1038 – 1046, 1983.
18. Михайлов Ю.Я., Савин И.В., Чельшева И.Ф., Юмашев В.Л. Комплекс АРГОЛА: автоматизированный расчет гиперзвукового обтекания летательного аппарата. // М., Труды ЦАГИ, выпуск 2478, 1993.
19. Orlov I.V., Yumashev V.L. A software system for standard presentation of flow fields in computational fluid dynamics // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 91, 1379 – 1389, 1991.