

## Потоки тепла и излучения в сильно неравновесных течениях за ударными волнами\*

В. А. Истомин<sup>1</sup>, Е. В. Кустова<sup>1,2</sup>, К. А. Прутъко<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

<sup>2</sup> Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»  
Российской академии наук,

Российская Федерация, 119333, Москва, ул. Вавилова, 44/2

<sup>3</sup> Институт космических исследований Российской академии наук,  
Российская Федерация, 117997, Москва, Профсоюзная ул., 84/32

**Для цитирования:** Истомин В. А., Кустова Е. В., Прутъко К. А. Потоки тепла и излучения в сильно неравновесных течениях за ударными волнами // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 4. С. 705–719. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.412>

С использованием обобщенного метода Чепмена—Энскога построены поуровневая и двухтемпературная теоретические модели для описания высокотемпературных сильно неравновесных реагирующих течений воздуха и расчета потоков тепла и излучения. В теоретическом подходе выводятся расширенные системы уравнений гидродинамики, химической кинетики, кинетики внутренних энергетических переходов и излучения. Также разработаны алгоритмы расчета поуровневых коэффициентов переноса. Предложенные модели применяются для моделирования течения воздушной смеси за плоской ударной волной в условиях высоких температур, наблюдаемых в летных экспериментах. Получены распределения концентраций компонентов смеси, профили температуры и давления. Изучено влияние различных наборов коэффициентов скорости химических реакций. Показано, что параметры потока сильно зависят как от применяемого подхода кинетической теории, так и от выбора модели химических реакций: молярные доли компонентов смеси показывают существенно различное поведение для поуровневого и двухтемпературного подходов. Проведен расчет потоков тепла и излучения в зависимости от расстояния от фронта ударной волны. Установлено, что основной вклад в общий поток тепла вносит диффузия, тогда как роль теплопроводности слаба из-за наличия компенсационных эффектов. Показано, что в рассматриваемых условиях двухтемпературные модели неприменимы для корректного прогнозирования радиационного нагрева.

*Ключевые слова:* поуровневая кинетика, электронное возбуждение, процессы переноса, поток тепла, поток излучения.

**1. Введение.** Корректное прогнозирование нагрева поверхности космического аппарата при входе в атмосферу планеты является одной из самых сложных задач современной гиперзвуковой аэродинамики. В ударно нагретых течениях на газодинамические параметры и теплообмен может влиять множество физико-химических процессов, таких как переходы внутренней энергии, химические реакции, ионизация и излучение. Несмотря на то, что новые экспериментальные методы в

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 22-11-00078).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

последнее время стимулировали развитие гиперзвуковых наземных аэродинамических установок [1], экспериментальные исследования потоков энергии все еще остаются довольно дорогостоящими и часто не могут адекватно воспроизвести условия, наблюдаемые в реальных течениях. Летные эксперименты для различных траекторий входа в атмосферу также немногочисленны; исключением является эталонный летный эксперимент Fire II [2], который предоставляет наборы данных для ряда точек траектории входа в атмосферу земли; эти данные широко используются для оценки теоретических моделей [3–6]. В связи с этим большой актуальностью обладает разработка и тестирование надежных теоретических моделей неравновесных высокотемпературных течений с учетом колебательно-электронного возбуждения, химических реакций, ионизации и излучения.

Для описания высокотемпературных течений могут быть разработаны модели различной сложности: поуровневые, многотемпературные, однотемпературные [7]. При этом при исследовании вязких течений принципиально важным вопросом является совместное рассмотрение кинетики, гидродинамики, процессов переноса и излучения. Цели данного исследования: 1) разработка детальной поуровневой и сокращенной двухтемпературной моделей неравновесного течения с учетом кинетики электронных состояний, химических реакций, излучения, процессов переноса; 2) применение разработанных моделей для моделирования течения ударно-нагретого воздуха в условиях эксперимента Fire II; 3) оценка влияния различных моделей химических реакций на процессы переноса и радиационный нагрев. Основным преимуществом настоящего исследования является объединение поуровневого подхода к моделированию неравновесной кинетики и излучения с поуровневой моделью расчета коэффициентов переноса, разработанной в [8]; насколько известно авторам, это первая попытка изучения влияния реалистичных небольшогомановских распределений по электронным состояниям на тепловые потоки.

**2. Теоретическая модель.** Самосогласованная теоретическая модель неравновесного высокотемпературного течения с учетом поуровневой кинетики колебательных и электронных состояний молекул, химических реакций, ионизации, излучения может быть построена на основе обобщенного метода Чепмена — Энскога [9, 10]. Полная система уравнений выводится из уравнения Больцмана с учетом быстрых и медленных процессов. В зависимости от соотношения кинетических и газодинамических масштабов могут быть построены модели различной степени детализации. Замыкание систем уравнений проводится с помощью формализма метода Чепмена — Энскога в различных приближениях разложения функции распределения по малому параметру.

**2.1. Поуровневое приближение.** В поуровневом приближении обычно предполагается, что поступательная и вращательная релаксации являются быстрыми процессами по сравнению с другими неупругими процессами и химическими реакциями, т. е. выполняется следующее соотношение между характерными временами процессов:

$$\tau_{tr,h} \sim \tau_{tr,e} \sim \tau_{rot} \ll \tau_{vibr} \sim \tau_{tr,e-h} \sim \tau_{el} \sim \tau_{react} \sim \tau_{rad} \sim \theta. \quad (1)$$

Здесь  $\tau_{tr,h}$ ,  $\tau_{tr,e}$  — характерные времена поступательной релаксации тяжелых частиц и электронов;  $\tau_{rot}$ ,  $\tau_{vibr}$ ,  $\tau_{el}$  — характерные времена вращательной, колебательной и электронной релаксации соответственно;  $\tau_{react}$  — характерное время химических

реакций обмена, диссоциации, рекомбинации и ионизации, а  $\tau_{rad}$  описывает характерное время излучательных переходов, приводящих к поглощению и испусканию фотона. В присутствии свободных электронов поступательный обмен энергией между быстрыми легкими электронами и тяжелыми частицами затруднен из-за высокой скорости и малой массы электронов; это приводит к установлению распределений Максвелла для тяжелых частиц и электронов с разными температурами ( $T$  и  $T_e$ ), которые затем приходят в равновесие за счет упругих столкновений тяжелых частиц и электронов с характерным временем  $\tau_{tr,e-h}$ .

В предположении (1) расширенные гидродинамические уравнения могут быть записаны в следующем виде:

$$\frac{dn_{ci}}{dt} + n_{ci} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_{ci} \mathbf{V}_{ci}) = R_{ci}^{vibr} + R_{ci}^{el} + R_{ci}^{react} + R_{ci}^{rad}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dU}{dt} + \frac{\partial \epsilon_{rad}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{rad} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{3}{2} k_B \frac{d}{dt} (n_e T_e) + \nabla \cdot \mathbf{q}_e + \mathbf{P}_e : \nabla \mathbf{v} = Q_e. \quad (5)$$

Здесь  $n_e$ ,  $n_{ci}$  — молярная доля электронов и частицы химического сорта  $c$  во внутреннем состоянии  $i = (k, v)$  (электронный уровень ( $k$ ) для атомов и колебательно-электронный ( $k, v$ ) для молекул, электроны не имеют внутренних состояний);  $\rho$  — плотность смеси;  $\mathbf{v}$  — скорость газа;  $k_B$  — постоянная Больцмана. Полная удельная энергия смеси  $U$  вычисляется с учетом поступательных, вращательных, колебательных и электронных степеней свободы (для атомов — поступательных и электронных);  $U$  является функцией температуры газа  $T$ , температуры электронов  $T_e$  и молярных долей всех частиц, включая молярные доли внутренних энергетических состояний;  $\epsilon_{rad}$  — средняя энергия излучения на единицу объема. Поточковые члены:  $\mathbf{V}_{ci}$  — скорость диффузии для каждого химического вещества и каждого возбужденного колебательно-электронного состояния (электронного для атомов);  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{P}_e$  — тензор напряжений для тяжелых частиц и для электронов;  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{q}_e$  — суммарный тепловой поток для тяжелых частиц и тепловой поток для электронов,  $\mathbf{q}_{rad}$  — поток излучения. Релаксационные члены  $R_{ci}^{vibr}$ ,  $R_{ci}^{el}$ ,  $R_{ci}^{react}$  и  $R_{ci}^{rad}$  определяют скорости изменения заселенностей внутренних состояний за счет переходов колебательной и электронной энергии, химических реакций и ионизации, и излучения. Правая часть  $Q_e$  в уравнении (5) характеризует изменение энергии электронов за счет медленных процессов, в основном упругих столкновений электронов с тяжелыми частицами и неупругих столкновений, приводящих к изменению электронных состояний атомов. Формальные определения поточковых и релаксационных членов, входящих в уравнения (2)–(5), даны в работах [7, 9].

Данная система уравнений дополняется уравнениями переноса излучения [9, 10]:

$$\frac{1}{c} \frac{I_\nu}{\partial t} + \Omega_\nu \frac{I_\nu}{\partial \mathbf{r}} = R_\nu^{rad} = j_\nu - \kappa_\nu I_\nu, \quad \nu = \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_R, \quad (6)$$

где  $I_\nu$  — спектральная интенсивность поля излучения;  $c$  — скорость света;  $j_\nu$  — спектральный коэффициент излучения;  $\kappa_\nu$  — спектральный коэффициент поглощения;

$d\Omega_\nu$  — элемент телесного угла, определяемый единичным вектором  $\Omega_\nu$ , задающим направление движения фотона. Набор частот  $\nu$  в общем случае представляет собой бесконечный спектр. Из практических соображений количество уравнений ограничено числом характерных частот потока  $R$ .

Система уравнений (2)–(6) обеспечивает описание неравновесного реагирующего потока, полностью связанного с полем излучения: члены  $\epsilon_{rad}$ ,  $\mathbf{q}_{rad}$ ,  $R_{ci}^{rad}$ ,  $R_\nu^{rad}$  отвечают за взаимное влияние газодинамики, поуровневой кинетики и излучения в потоке. С использованием обобщенного метода Чепмена — Энскога можно получить выражения для потоковых членов в приближении идеального и вязкого теплопроводного газа, а также коэффициенты переноса. Алгоритмы расчета поуровневых коэффициентов переноса с учетом электронного возбуждения молекул и атомов построены в [8] и реализованы в программном комплексе *PAINeT* [11].

Важной особенностью поуровневого приближения является то, что перенос колебательной и электронной энергии связан с диффузионными процессами, а не только с теплопроводностью; в ударно нагретых течениях диффузия возбужденных состояний может давать вклад в теплоперенос, сравнимый и даже превышающий вклад классической массовой диффузии [12]. Это вызывает дополнительные трудности, поскольку число необходимых коэффициентов диффузии составляет около  $N^2$ , где  $N$  — общее число химических частиц и колебательно-электронных состояний (в данном исследовании  $N$  составляет несколько сотен, табл. 1). По этой причине реализация поуровневой модели при моделировании вязкого течения по-прежнему остается проблемой в вычислительной гидродинамике. Чтобы оценить вклад различных диссипативных процессов в перенос массы и тепла, можно разделить скорость диффузии и тепловой поток на несколько членов [12]:

$$\mathbf{V}_{ci} = \mathbf{V}_{ci}^{MD} + \mathbf{V}_{ci}^{TD} + \mathbf{V}_{ci}^{ESD}, \quad (7)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_F + \mathbf{q}_{MD} + \mathbf{q}_{TD} + \mathbf{q}_{ESD}, \quad (8)$$

где MD, TD, ESD соответствуют массовой диффузии, термодиффузии, диффузии возбужденных состояний, F — теплопроводности (тепловому потоку Фурье).

**2.2. Двухтемпературное приближение.** Многотемпературные модели могут применяться в условиях, когда часть колебательных и электронных энергообменов протекает в масштабах времен, значительно меньших, чем гидродинамический масштаб времени. Двухтемпературная модель, рассматриваемая в данной работе, основана на предположении, что давление газа за ударной волной достаточно велико и колебательные и электронные возбужденные состояния быстро достигают распределения Больцмана за счет близких к резонансным обменов VV, EE, VE. Релаксация поступательной и колебательной (электронной) температур происходит за счет процессов VT и ET, поступательного обмена энергией между электронами и тяжелыми частицами, а также химических реакций и излучения.

Следуя формализму обобщенного метода Чепмена — Энскога, можно записать систему уравнений и замкнуть ее в приближении вязкого теплопроводного газа. Выражения для скорости диффузии и потока тепла в этом случае не будут содержать вклады, связанные с переносом энергии возбужденными состояниями. Скорость диффузии будет определяться массовой диффузией (МД) химических сортов и термодиффузией (ТД), а тепловой поток будет состоять из трех членов: потока Фурье, связанного с теплопроводностью  $\mathbf{q}_F$ , и потоков, обусловленных массовой диффузией  $\mathbf{q}_{MD}$  и термодиффузией  $\mathbf{q}_{TD}$ .

Представленный выше двухтемпературный подход намного более эффективен в численном отношении по сравнению с поуровневой моделью, однако он может неправильно описывать области течения с сильными отклонениями от равновесия, где распределения по внутренней энергии существенно отличаются от Больцмановских.

**3. Приложение к моделированию течения за ударной волной.** Разработанные модели применялись для исследования течения высокотемпературного воздуха за сильным скачком уплотнения. Рассмотрена ударная волна, распространяющаяся в 11-компонентной смеси воздуха  $N/N^+/O/O^+/N_2/N_2^+/O_2/O_2^+/NO/NO^+/e^-$ , с учетом поступательных и электронных степеней свободы атомов, а также поступательных, вращательных, колебательных и электронных степеней свободы молекул. Используются двухтемпературный и поуровневый подходы кинетической теории. Количество учтенных уровней электронной энергии  $L_c$  приведено в табл. 1. Указанное количество уровней выбрано в соответствии с фактором понижения энергии ионизации  $\Delta E_c$ , равным  $1000 \text{ см}^{-1}$  [13].

Таблица 1. Число учитываемых электронных уровней

N	N <sup>+</sup>	O	O <sup>+</sup>	N <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	O <sub>2</sub>	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	NO	NO <sup>+</sup>
170	157	204	254	5	7	7	7	4	8

В настоящей работе рассматривается модельный случай, соответствующий условиям входа в атмосферу спускаемого аппарата Fire II, точка траектории 1634 с [2] (табл. 2).

Таблица 2. Условия в набегающем потоке

Fire II, 1634 с	Скорость, м/с	Температура, К	Давление, Па
Перед ударной волной	11360	195	2
За ударной волной	1899	62377	3827

Как видно из табл. 2, температура газа за ударной волной составляет около 60 000 К, что вызывает очень быструю колебательную релаксацию и диссоциацию. Концентрация молекулярных частиц и ионов вблизи фронта ударной волны невелика, и доминирующими частицами являются атомы азота и кислорода. В таких условиях мы можем упростить исходную задачу, предполагая быструю колебательную релаксацию, и применить поуровневую модель только к электронным состояниям атомов N и O. В случае двухтемпературной модели заселенности возбужденных состояний атомов определяются распределением Больцмана с температурой электронов.

Система уравнений (2)–(5) была записана в стационарной одномерной постановке. Предполагалось, что исходная смесь состоит из нейтральных молекул N<sub>2</sub> и O<sub>2</sub>; во фронте ударной волны поступательные, вращательные, колебательные и электронные степени свободы компонент смеси с малыми молярными долями (N<sup>+</sup>, O<sup>+</sup>, N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, NO, NO<sup>+</sup>) полностью возбуждаются, тогда как химические реакции и возбуждение электронных состояний N и O остаются замороженными. При численном интегрировании расстояние отсчитывается от фронта ударной волны в направлении поверхности тела.

Численные методы решения полученной системы подробно описаны в [14–16]. Для оценки тепловых потоков задача разбивалась на два этапа. На первом этапе поле течения моделировалось в приближении невязкого газа с помощью решения одномерных уравнений Эйлера, связанных с уравнениями поуровневой химической и электронной кинетики атомов N и O и уравнениями химической кинетики для остальных частиц. В результате получались распределения газодинамических переменных и их производных в зависимости от расстояния до ударного фронта. На втором этапе рассчитывались коэффициенты переноса и тепловые потоки. Такой упрощенный метод ранее применялся в [12, 13]; его использование позволяет получить представление о физике неравновесного течения, избегая больших вычислительных затрат.

Радиационный тепловой поток на каждом шаге рассчитывается методом постобработки [14, 15]. Применяется приближение касательной плоскости. Ударный слой разбивается на множество плоскостей с постоянными свойствами, такими как спектральный коэффициент излучения  $j_\nu$ , спектральный коэффициент поглощения  $\kappa_\nu$ , заселенность электронных состояний  $n_{ci}$ . Спектральные коэффициенты рассчитываются с использованием баз данных TOPbase [16], NIST [17]. Излучение определяется посредством связанно-связанных переходов, процессами фоторекомбинации и механизмами тормозного излучения, которые дают спектральные коэффициенты излучения и поглощения [18]. Эти коэффициенты зависят от заселенностей возбужденных состояний, поэтому неравновесность в ударном слое может существенно влиять на радиационный тепловой поток. Для профиля линии связанного перехода учитывалось доплеровское и штарковское уширение.

Скорости ионизации атомов за счет электронного удара рассчитываются по модели Парка [19]. Для реакций диссоциации, обмена и ассоциативной ионизации были реализованы две модели. Первая (модель 1) — модель Парка [19], учитывающая колебательно-диссоциационную связь за счет введения эффективной температуры. Вторая (модель 2) — модификация модели Тринора — Маррона, описанная в [14]; модель упрощается за счет предположения о единой колебательной температуре для всех сортов; заселенности колебательных состояний задаются температурой  $T_e$ . Обмен энергией между тяжелыми частицами (нейтральными и заряженными) и электронами рассчитывается по модели [20], тогда как VT-обмен между кинетической энергией тяжелых частиц и колебательной энергией молекул описывается в рамках модели Ландау — Теллера с временами релаксации из [21]. Поскольку в рассматриваемых условиях энергия электронов тесно связана с колебательной энергией  $N_2$ , электронная температура и температура, определяющая колебательное возбуждение молекул азота, совпадают.

**4. Результаты и обсуждение.** Было проведено численное моделирование течений за ударными волнами с использованием поуровневого (STS) и двухтемпературного (2T) подходов и моделей химических реакций (1) и (2). На рис. 1 представлен состав смеси, полученной с помощью ударной волны  $x$ , для двух химических моделей, сформированных в зависимости от расстояния от фронта этой волны. Видно, что выбор химической модели и подхода кинетической теории существенно влияют на распределение мольных долей за ударной волной. Для молекул использование различных подходов кинетической теории (STS и 2T) с одной и той же химической моделью (модель 1) приводит к качественно схожим результатам. Молярные доли ионизированных двухатомных частиц довольно низкие для всех моделей, пред-

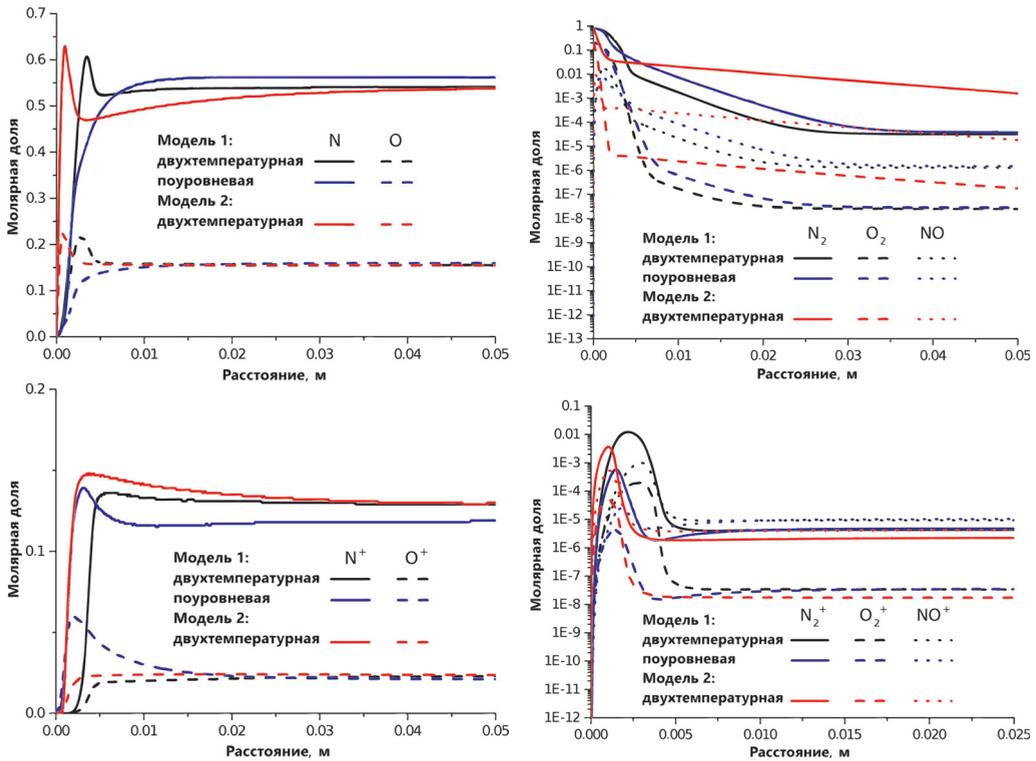


Рис. 1. Состав смеси, полученный для двух химических моделей в рамках STS- и 2Т-приближений.

ставленных в настоящем исследовании; максимальная концентрация молекулярных ионов ниже для STS-подхода по сравнению с 2Т-моделью.

В то время как применение поуровневой модели показывает монотонное изменение молярных долей нейтральных атомов N и O, двухтемпературная модель дает ярко выраженные пики в молярных долях N и O из-за быстрой диссоциации и последующей ионизации. Следует отметить, что моделирование кинетики, проведенное в [4], также показывает монотонное увеличение атомарных молярных долей. Молярные доли ионизированных атомарных частиц, полученные в настоящем исследовании с использованием поуровневого подхода, напротив, ведут себя немонотонно. Такое поведение можно объяснить высокой электронной температурой на расстоянии около 3 мм, где  $T_e$  выше конечного равновесного значения.

Степень диссоциации и ионизации, а также поступательная и электронная температуры представлены на рис. 2. Максимум электронной температуры достигается при  $x \approx 1.5$  мм, но степень диссоциации в этой точке составляет около 0.25, в связи с чем в указанной точке не наблюдается максимум концентрации электронов. Далее, при  $x \approx 3$  мм, когда степень диссоциации кислорода около 0.9, а азота 0.7, концентрация электронов достаточно высока, чтобы ионизировать атомы и поддерживать степень ионизации в соответствии с уравнением Саха — Больцмана. После этого электронная температура постепенно снижается, и, как следствие, уменьшается концентрация электронов.

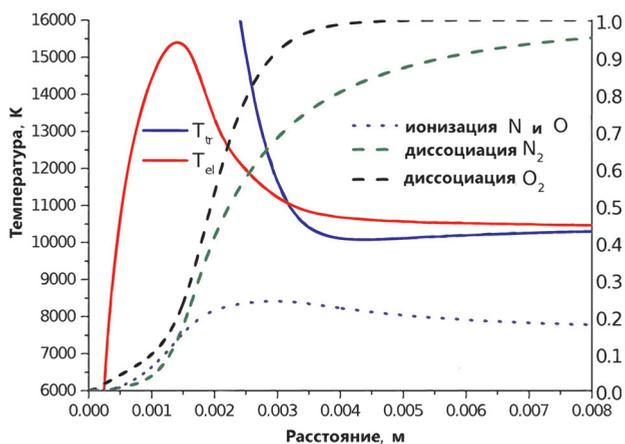
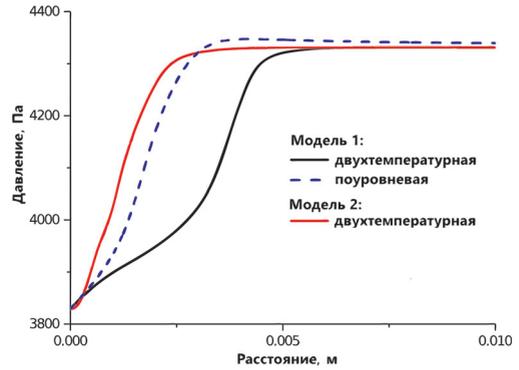
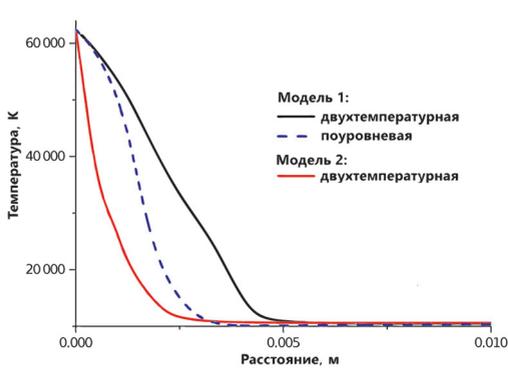


Рис. 2. Степень диссоциации и ионизации, а также поступательная и электронная температуры в рамках поуровневого приближения.

Другое наблюдение заключается в том, что полученные данные для нейтральных газов близки к результатам [4], однако для ионизированных частиц имеется значительное расхождение — в настоящем исследовании ионизация происходит быстрее. Это может происходить вследствие того, что моделирование [4] учитывает потери энергии из-за спонтанного излучения, что приводит к уменьшению поступательной, а также электронной температуры. Спонтанное излучение вызывает значительное снижение заселенности высокоэнергетических возбужденных состояний атомов, тем самым уменьшая скорость ионизации.

На рис. 3 представлены профили температуры и давления в зависимости от расстояния  $x$ . Разные модели показывают разные распределения температуры за фронтом: модель 2Т с моделью химических реакций Парка дает более медленную диссоциацию и, соответственно, более медленное падение температуры. Поуровневый подход STS, хотя и использует те же коэффициенты скорости диссоциации и обменных реакций из модели 1, показывает более быстрое падение температуры; модель 2 — более высокую скорость диссоциации. Оба подхода STS и 2Т с использованием модели химических реакций Парка имеют некоторое инкубационное время вблизи фронта ударной волны; с увеличением расстояния модель STS дает более эффективную релаксацию к равновесию. Аналогичные тенденции получаются для всех гидродинамических переменных.

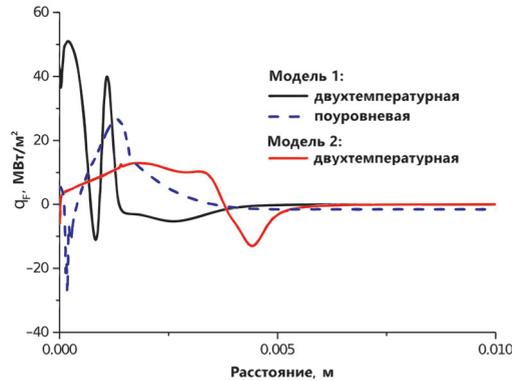
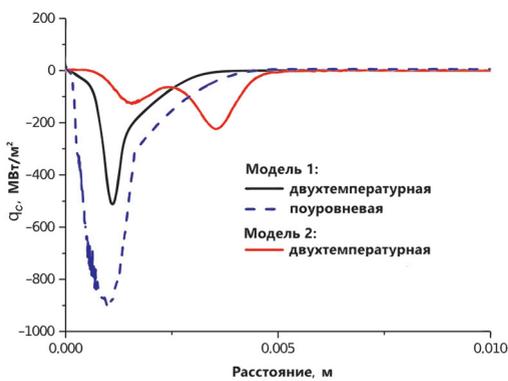
Рассмотрим влияние различных моделей на потоки энергии. На рис. 4 представлен полный тепловой поток  $q_C$  в слое, а также части теплового потока, связанные с теплопроводностью, массовой диффузией и термодиффузией. Основной вклад в тепловой поток вносят процессы диффузии: в поуровневом моделировании они включают в себя как массовую диффузию, так и диффузию электронно-возбужденных состояний. Подобный эффект был указан в [12] для нейтральных смесей при высоких числах Маха, но в отсутствие электронов вклад теплопроводности получался более существенным. В данном случае потоки, обусловленные теплопроводностью, намного меньше, чем потоки, вызванные диффузией, поскольку существует сильная конкуренция между членами, связанными с градиентами  $T$  и  $T_e$ , имеющими про-



а

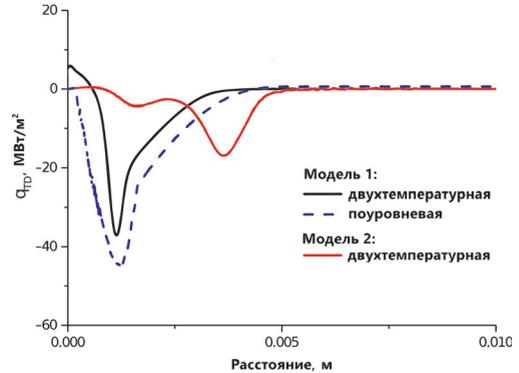
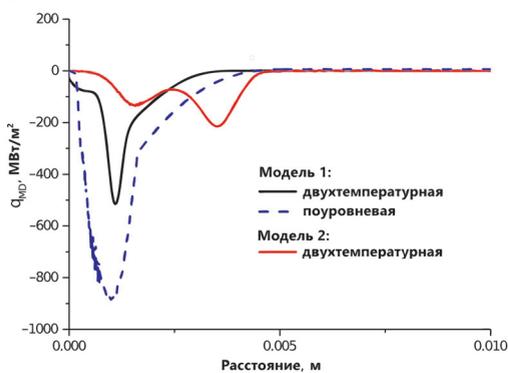
б

Рис. 3. Температура (а) и давление (б) в зависимости от расстояния за ударной волной для различных моделей.



а

б



б

а

Рис. 4. Полный тепловой поток (а), тепловой поток Фурье (б), потоки за счет массовой диффузии (в) и тепловой диффузии (г) в зависимости от расстояния за фронтом ударной волны.

тивоположные знаки; такой компенсационный эффект приводит к значительному уменьшению  $q_F$ . Другой особенностью теплового потока является его немонотонность, что объясняется разной скоростью образования и диссоциации химических

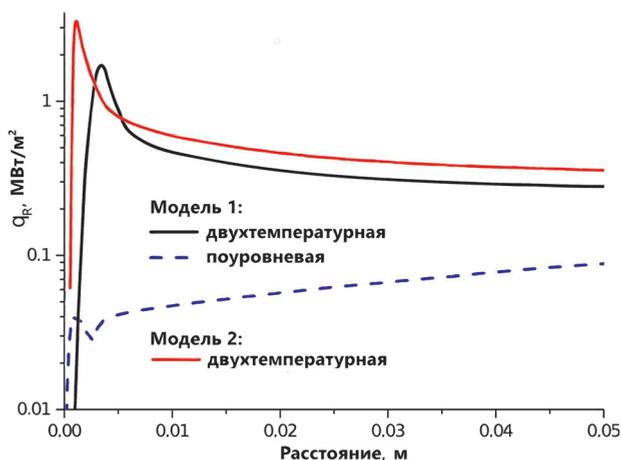


Рис. 5. Радиационные потоки как функция расстояния от фронта ударной волны.

частиц за фронтом ударной волны. Максимальное абсолютное значение диффузионного потока соответствует области течения с максимальным градиентом молярных долей компонент смеси. Абсолютная величина теплового потока вблизи фронта ударной волны, полученная в STS-модели, как правило, больше, чем в двухтемпературном подходе. Влияние выбора химической модели на  $q_C$  также оказывается существенным.

Перейдем к сравнению потоков излучения. Модель предварительно была валидирована в работе [15], где потоки излучения и параметры потока, рассчитанные с помощью поуровневой модели с использованием данных химической модели Парка, сравниваются с данными, полученными на установке NASA EAST [2]; было показано хорошее совпадение результатов.

На рис. 5 представлены потоки излучения, рассчитанные в STS- и 2Т-приближениях с использованием двух химических моделей. Использование 2Т-приближения дает значительно завышенные значения радиационных потоков, которые имеют ярко выраженный максимум вблизи фронта ударной волны. Поток излучения, полученный при моделировании в поуровневом приближении, значительно ниже; вблизи фронта расхождение составляет более одного порядка. В двухтемпературном приближении заселенность возбужденных состояний атомов определяется как распределение Больцмана при электронной температуре  $T_e$ , что вызывает сильную заселенность высокоэнергетических состояний атомов вблизи точки максимума температуры  $T_e$ . Это приводит к значительному количеству энергии, испускаемой атомами. Таким образом, в рассматриваемых условиях двухтемпературный подход вряд ли применим для расчета потока излучения из ударного слоя. Напротив, в STS-приближении возбужденным состояниям требуется больше времени для их заселения посредством различных механизмов столкновений и не наблюдается локального равновесия, получаемого в 2Т-приближении.

Поскольку заселенность возбужденных состояний в STS-приближении намного меньше, чем в случае равновесного распределения, радиационный поток также намного меньше. Следует отметить, что в STS-приближении максимум электронной температуры составляет около 15 000 К, а в 2Т-подходе — около 20 000 К (для мо-

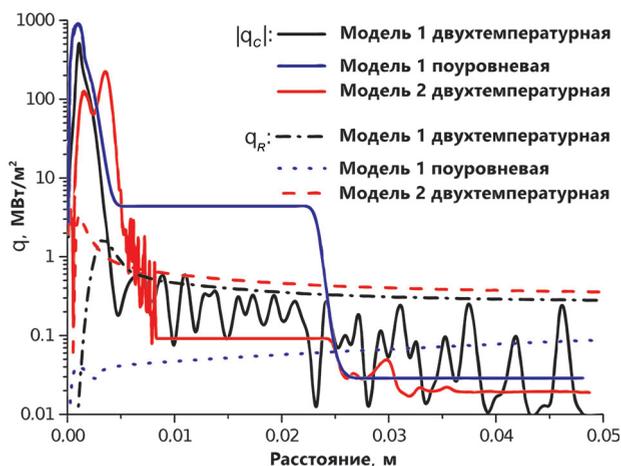


Рис. 6. Потоки тепла и излучения как функции расстояния от фронта ударной волны.

дели 1) и около 29 000 К (для модели 2). Локальные максимумы в радиационных потоках соответствуют пикам  $T_e$  (см. рис. 2).

На рис. 6 абсолютное значение конвективного теплового потока  $|q_C|$  сравнивается с потоком излучения; при моделировании используются различные химические модели и кинетические подходы. Стоит отметить, что для рассматриваемой точки траектории поток излучения в ударном слое меньше, чем поток энергии, обусловленный диссипативными процессами в газе, особенно при использовании поуровневой модели. По мере удаления от фронта ударной волны вклады  $q_C$  и  $q_R$  становятся сравнимыми (при этом оба потока относительно малы). Интересно отметить, что знаки  $q_C$  и  $q_R$  различны, что может приводить к конкуренции этих двух видов источников нагрева и, следовательно, к уменьшению суммарного теплового потока. В настоящем исследовании радиационный поток рассчитывался только к поверхности и необходимо указать, что при учете обоих направлений компенсационный эффект может уменьшиться. Следует также подчеркнуть, что в настоящей работе рассматривался нагрев газа в ударном слое, а не на поверхности. Для оценки конвективного нагрева на поверхности необходимо учесть поуровневые коэффициенты переноса в решателе для двумерного вязкого потока, что планируется в качестве будущей работы.

**5. Заключение.** Разработаны две теоретические модели различной сложности для описания сильно неравновесных высокотемпературных реагирующих и излучающих потоков воздуха. Первая модель представляет собой детальную поуровневую модель, обеспечивающую полную связь между переходами внутренней энергии, химическими реакциями и излучением, вторая модель — сокращенную двухтемпературную модель, предполагающую бальцмановские распределения по электронным состояниям с соответствующей температурой. Обе модели основаны на модифицированном методе Чепмена — Энскога и обеспечивают замкнутое самосогласованное описание неравновесного течения при соответствующих соотношениях характерных времен процессов. Разработаны и реализованы алгоритмы, позволяющие производить расчет коэффициентов переноса в поуровневом и двухтемпературном приближениях.

С использованием ряда упрощающих допущений предложенные теоретические модели применяются для моделирования плоской ударной волны в условиях летного эксперимента Fire II. Получены распределения гидродинамических переменных в зависимости от расстояния от фронта ударной волны для двух различных наборов коэффициентов скоростей химических реакций. Показано, что параметры потока сильно зависят как от модели химии, так и от выбора подхода кинетической теории: молярные доли атомарных частиц, рассчитанные в модели STS, демонстрируют монотонное поведение, тогда как в молярных долях O и N при 2Т-моделировании наблюдаются сильные пики. Исходя из полученных результатов сделан вывод о том, что в рассматриваемых условиях двухтемпературные модели неприменимы для корректного прогнозирования радиационного нагрева.

Оценены вклады различных процессов в полный тепловой поток. Показано, что основное влияние на поток энергии в высокотемпературных условиях оказывают диффузионные процессы; тепловой поток Фурье за счет теплопроводности оказывается малым из-за компенсации членов, связанных с градиентами тяжелых частиц и электронными температурами, имеющими противоположные знаки. Нагрев за счет излучения также оказывается меньше.

В дальнейших исследованиях планируется внедрение разработанных моделей в решатель для вязкого течения, что позволит оценить взаимное влияние поуровневой кинетики и коэффициентов переноса на аэродинамический нагрев. Для этого потребуются оптимизация и ускорение численных алгоритмов расчета поуровневых коэффициентов переноса.

## Литература

1. Reynier P. Survey of high-enthalpy shock facilities in the perspective of radiation and chemical kinetics investigations. *Progress in Aerospace Sciences* **85**, 1–32 (2016). <http://doi.org/10.1016/j.paerosci.2016.04.002>
2. Cauchon D. L. Radiative heating results from Fire II flight experiment at a re-entry velocity of 11.4 km/s. NASA TM X-1402 (1967).
3. Johnston C. O., Hollis B. R., Sutton K. Nonequilibrium stagnation-line radiative heating for Fire II. *Journal of Spacecraft and Rockets* **45** (6), 1185–1195 (2008).
4. Panesi M., Magin T. E., Bourdon A., Bultel A., Chazot O. Fire II flight experiment analysis by means of a collisional-radiative model. *J. Thermophys. Heat Transfer* **23** (2), 236–248 (2009).
5. Surzhikov S. T. Radiative gas dynamics of the Fire-II superorbital space vehicle. *Technical Physics* **61** (3), 349–359 (2016). <https://doi.org/10.1134/S1063784216030208>
6. Nagnibeda E. A., Kustova E. V. *Nonequilibrium Reacting Gas Flows. Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2009).
7. Istomin V., Kustova E. State-specific transport properties of partially ionized flows of electronically excited atomic gases. *Chem. Phys.* **485–486**, 125–139 (2017). <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemphys.2017.01.012>
8. Kustova E. V., Chikhaoui A. Kinetic modelling of radiative reacting gas flow under strong nonequilibrium conditions. *Chem. Phys.* **255**, 59–71 (2000).
9. Aliat A., Chikhaoui A., Kustova E. V. Non-equilibrium kinetics of a radiative CO flow behind a shock wave. *Phys. Review E* **68**, 056306 (2003).
10. Istomin V., Oblapenko G. Transport coefficients in high-temperature ionized air flows with electronic excitation. *Physics of Plasmas* **25** (1), 013514 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5017167>
11. Kunova O., Kustova E. M. Mekhonoshina, Nagnibeda E. Non-equilibrium kinetics, diffusion and heat transfer in shock heated flows of N<sub>2</sub>/N and O<sub>2</sub>/O mixtures. *Chem. Phys.* **463**, 70–81 (2015). <http://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.10.004>
12. Istomin V., Kustova E. Transport coefficients and heat fluxes in non-equilibrium high-temperature flows with electronic excitation. *Physics of Plasmas* **24** (2), 022109 (2017). <http://doi.org/10.1063/1.4975315>

13. Землянский Б. А., Лунев В. В., Власов В. И., Горшков А. Б., Залогин Г. Н., Ковалев Р. В., Маринин В. П., Мурзинов И. Н. Конвективный теплообмен летательных аппаратов. Москва, Физматлит, 2014.

14. Prutko K. A. Radiating gas behind strong shock waves with non-equilibrium ionization processes. *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics* **17** (3), 851–872 (2016). <https://doi.org/10.18721/JPM.10207>

15. Cunto W. Topbase at the cds. *Astronomy and Astrophysics* **275**, L5–L8 (1993).

16. Mallard W. G., Westley F., Herron J. T., Hampson R. F. *NIST Chemical Kinetics Database — Ver. 6.0*. NIST Standard Reference Data, Gaithersburg, MD (1994).

17. Zel'dovich Ya. B., Raiser Yu. P. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. New York, Academic Press (1967).

18. Park C. Chemical-kinetic problems of future nasa missions. i. earth entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* **7** (3), 385–398 (1993).

19. Cambier J. L., Kapper M. G. Ionizing shocks in argon. Part 1: Collisional-radiative model and steady-state structure. *Journal of Applied Physics* **109**, 113308 (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3585688>

20. Millikan R. C., White D. R. Systematics of vibrational relaxation. *J. Chem. Phys.* **39**, 3209–3213 (1963).

21. Grinstead J., Wilder M., Olejniczak J., Bogdanoff D., Allen G., Dang K., Forrest M. Shock-Heated Air Radiation Measurements at Lunar Return Conditions. *Session: TP-9: CEV Aerosciences II* **1244**, 092407 (2008). <https://doi.org/10.2514/6.2008-1244>

Статья поступила в редакцию 22 апреля 2022 г.;

доработана 8 июня 2022 г.;

рекомендована к печати 9 июня 2022 г.

#### Контактная информация:

Истомин Владимир Андреевич — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр.; [v.istomin@spbu.ru](mailto:v.istomin@spbu.ru)

Кустова Елена Владимировна — д-р физ.-мат. наук, проф.; [e.kustova@spbu.ru](mailto:e.kustova@spbu.ru)

Прутко Кирилл Александрович — канд. физ.-мат. наук; [kirillkame@yandex.ru](mailto:kirillkame@yandex.ru)

## Heat and radiative fluxes in strongly nonequilibrium flows behind shock waves\*

V. A. Istomin<sup>1</sup>, E. V. Kustova<sup>1,2</sup>, K. A. Prutko<sup>3</sup>

<sup>1</sup> St Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St Petersburg, 199034, Russian Federation

<sup>2</sup> Federal Research Center “Computer Science and Control” of the Russian Academy of Sciences,

44/2, ul. Vavilova, Moscow, 119333, Russian Federation

<sup>3</sup> Space Research Institute of the Russian Academy of Sciences,

84/32, ul. Profsoyuznaya, Moscow, 117997, Russian Federation

**For citation:** Istomin V. A., Kustova E. V., Prutko K. A. Heat and radiative fluxes in strongly nonequilibrium flows behind shock waves. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 4, pp. 705–719.

<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.412> (In Russian)

State-to-state and two-temperature theoretical models for high-temperature strongly non-equilibrium reacting and radiating air flows are developed in the framework of the generalized Chapman–Enskog method. In the theoretical approach, the sets of governing equations for coupled fluid dynamics, chemical kinetics, internal energy transitions and radiation are derived; the algorithms for the calculation of state-resolved transport coefficients are developed and implemented. The proposed models are applied for 1-D simulations of shock waves in air under high-temperature conditions observed in flight experiments.

\*The work is supported by the Russian Science Foundation (project no. 22-11-00078).

Nonequilibrium mixture composition, temperatures and pressure profiles are obtained and compared for various models of chemical reaction rate coefficients. Flow variables strongly depend on both the kinetic-theory approach and chemical reaction model; species molar fractions and temperature show significantly different behaviour for the state-to-state and two-temperature simulations. Transport properties and radiative fluxes are calculated as functions of the distance from the shock front. It is found that diffusion provides a major contribution to the total energy flux whereas the role of heat conduction is weak due to the compensation effects. It is shown that under considered conditions, two-temperature models are not applicable for correct predictions of radiative heating.

*Keywords:* state-to-state kinetics, electronic excitation, transport coefficients, heat flux, radiative flux.

## References

1. Reynier P. Survey of high-enthalpy shock facilities in the perspective of radiation and chemical kinetics investigations. *Progress in Aerospace Sciences* **85**, 1–32 (2016). <http://doi.org/10.1016/j.paerosci.2016.04.002>
2. Cauchon D.L. Radiative heating results from Fire II flight experiment at a reentry velocity of 11.4 km/s. NASA TM X-1402 (1967).
3. Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K. Nonequilibrium stagnation-line radiative heating for Fire II. *Journal of Spacecraft and Rockets* **45** (6), 1185–1195 (2008).
4. Panesi M., Magin T.E., Bourdon A., Bultel A., Chazot O. Fire II flight experiment analysis by means of a collisional-radiative model. *J. Thermophys. Heat Transfer* **23** (2), 236–248 (2009).
5. Surzhikov S.T. Radiative gas dynamics of the Fire-II superorbital space vehicle. *Technical Physics* **61** (3), 349–359 (2016). <https://doi.org/10.1134/S1063784216030208>
6. Nagnibeda E.A., Kustova E.V. *Nonequilibrium Reacting Gas Flows. Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2009).
7. Istomin V., Kustova E. State-specific transport properties of partially ionized flows of electronically excited atomic gases. *Chem. Phys.* **485–486**, 125–139 (2017). <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemphys.2017.01.012>
8. Kustova E.V., Chikhaoui A. Kinetic modelling of radiative reacting gas flow under strong nonequilibrium conditions. *Chem. Phys.* **255**, 59–71 (2000).
9. Aliat A., Chikhaoui A., Kustova E.V. Non-equilibrium kinetics of a radiative CO flow behind a shock wave. *Phys. Review E* **68**, 056306 (2003).
10. Istomin V., Oblapenko G. Transport coefficients in high-temperature ionized air flows with electronic excitation. *Physics of Plasmas* **25** (1), 013514 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5017167>
11. Kunova O., Kustova E., Mekhonoshina M., Nagnibeda E. Non-equilibrium kinetics, diffusion and heat transfer in shock heated flows of N<sub>2</sub>/N and O<sub>2</sub>/O mixtures. *Chem. Phys.* **463**, 70–81 (2015). <http://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.10.004>
12. Istomin V., Kustova E. Transport coefficients and heat fluxes in non-equilibrium high-temperature flows with electronic excitation. *Physics of Plasmas* **24** (2), 022109 (2017). <http://doi.org/10.1063/1.4975315>
13. Zemlyanskiy B.A., Lunev V.V., Vlasov V.I., Gorshkov A.B., Zalogin G.N., Kovalev R.V., Marinin V.P., Murzinov I.N. *Convective heat transfer of aircrafts*. Moscow, Fizmatlit Publ. (2014). (In Russian)
14. Prutko K.A. Radiating gas behind strong shock waves with non-equilibrium ionization processes. *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics* **17** (3), 851–872 (2016). <https://doi.org/10.18721/JPM.10207>
15. Cunto W. Topbase at the cds. *Astronomy and Astrophysics* **275**, L5–L8 (1993).
16. Mallard W.G., Westley F., Herron J.T., Hampson R.F. *NIST Chemical Kinetics Database – Ver. 6.0*. NIST Standard Reference Data, Gaithersburg, MD (1994).
17. Zel'dovich Ya.B., Raiser Yu.P. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. New York, Academic Press (1967).
18. Park C. Chemical-kinetic problems of future nasa missions. i. earth entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* **7** (3), 385–398 (1993).
19. Kapper M.G., Cambier J.L. Ionizing shocks in argon. Part 1: Collisional-radiative model and steady-state structure. *Journal of Applied Physics* **109**, 113308 (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3585688>

20. Millikan R. C., White D. R. Systematics of vibrational relaxation. *J. Chem. Phys.* **39**, 3209–3213 (1963).
21. Grinstead J., Wilder M., Olejniczak J., Bogdanoff D., Allen G. Dang K., Forrest M. Shock-Heated Air Radiation Measurements at Lunar Return Conditions. *Session: TP-9: CEV Aerosciences II* **1244**, 092407 (2008). <https://doi.org/10.2514/6.2008-1244>

Received: April 22, 2022  
Revised: June 8, 2022  
Accepted: June 9, 2022

#### Authors' information:

Vladimir A. Istomin — v.istomin@spbu.ru  
Elena V. Kustova — e.kustova@spbu.ru  
Kirill A. Prutko — kirillkame@yandex.ru

## ХРОНИКА

18 мая 2022 г. на заседании секции теоретической механики им. проф. Н. Н. Поляхова в санкт-петербургском Доме ученых им. М. Горького выступили:

1) канд. физ.-мат. наук, доц., вед. науч. сотр. М. З. Досаев и д-р физ.-мат. наук, проф. В. А. Самсонов (НИИ механики МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва) с докладом на тему «Особенности равновесия тела на шарнирных и подвижных опорах».

Краткое содержание доклада:

При строительстве объектов на опорах могут возникать большие значения неопределимых тангенциальных реакций. Подобные проблемы, в частности, могут быть связаны с предварительными напряжениями при сборке конструкции или с неодинаковыми температурными сжатиями/расширениями материалов. На практике для борьбы с этими трудностями используют подвижные элементы сочленения. Рассматривается равновесие систем, сочетающих жесткие и скользящие (телескопические) опоры. Показано, что включение в систему потенциально скользящего сочленения приводит к острому конфликту с теми связями, которые остались «твердыми», и может вызвать их бесконечно большие реакции;

2) канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотр. Л. А. Климина и канд. физ.-мат. наук, доц. Ю. Д. Селюцкий (НИИ механики МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва) с докладом на тему «Моделирование динамики робота-змеи, управляемого одним внутренним маховиком».

Краткое содержание доклада:

Рассматривается движение робота-змеи по шероховатой плоскости. Звенья корпуса соединены пассивными шарнирами, в которых установлены спиральные пружины. Внутри головного звена установлен маховик. Единственное управляющее воздействие — момент, приложенный к данному маховику. Предполагается, что в точках контакта звеньев корпуса с опорой действует анизотропное сухое трение. Строится управление, обеспечивающее установившееся движение робота, при котором центр масс перемещается по змеевидной траектории. Оцениваются средняя скорость центра масс, а также ширина полосы, необходимой для перемещения робота.