

Правительство Российской Федерации  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(СПбГУ)

МАТЕМАТИКО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
Кафедра гидроаэромеханики

**КУРСОВАЯ РАБОТА НА ТЕМУ:**  
**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ**  
**ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ В СМЕСИ  $CO_2$  И  $Ar$**

Выполнил:  
Студент 3 курса  
Баталов С.А.

Научный руководитель:  
Профессор кафедры гидроаэромеханики  
Кустова Е.В.

Санкт-Петербург  
2022

# Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Математическая модель</b>	<b>4</b>
2.1	Уравнения для макропараметров . . . . .	4
2.2	Энергия . . . . .	5
2.3	Потоковые члены, тензор напряжений, диффузия . . . . .	5
2.4	Скорости колебательных релаксаций . . . . .	6
2.5	Коэффициенты переноса . . . . .	7
2.6	Системы уравнений для коэффициентов переноса . . . . .	7
2.6.1	Система для коэффициентов теплопроводности и термодиффузии . . .	8
2.6.2	Система для коэффициентов переноса . . . . .	8
2.6.3	Система для коэффициентов сдвиговой вязкости . . . . .	8
2.6.4	Система для коэффициентов объемной вязкости . . . . .	8
2.7	Интегральные скобки . . . . .	8
2.7.1	Интегральные скобки $\Lambda_{rp}^{cd}, H_{00}^{cd}$ . . . . .	8
2.7.2	Интегральные скобки $\beta_{rr'pp'}^{cd}$ . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Численное моделирование</b>	<b>10</b>
3.1	Решение системы . . . . .	10
3.2	Возможные варианты оптимизации . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Расчет коэффициентов переноса</b>	<b>11</b>
4.1	Коэффициенты $\eta, \zeta$ . . . . .	11
4.2	Коэффициенты $\lambda_{12}, \lambda_3, \lambda_{rot}, \lambda_{tr}$ . . . . .	11
4.3	Коэффициенты $D_{T_{CO_2}}, D_{T_{Ar}}$ . . . . .	12
4.4	Коэффициенты $D_{CO_2-CO_2}, D_{Ar-Ar}, D_{CO_2-Ar}$ . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Выводы</b>	<b>13</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>14</b>

# 1 Введение

Численное моделирование сильнонеравновесных процессов в смесях реагирующих газов является актуальным направлением в современной гидрогазодинамике. В частности, большой научный интерес представляют процессы, происходящие за фронтом ударной волны. В настоящее время активно используются как теоретические, так и экспериментальные методы анализа подобных процессов.

В зависимости от степени отклонения от равновесия для описания течения могут применяться детальные поуровневые и сокращенные многотемпературные модели [1]. Наибольший практический интерес представляет многотемпературная модель неравновесных течений, так как она является наиболее эффективной с вычислительной точки зрения. В недавних работах [2]–[4] представлены результаты и методы моделирования неравновесного течения однокомпонентного вязкого углекислого газа. Так, в исследовании [2] строится и реализуется многотемпературная модель процессов релаксации в  $CO_2$  за ударной волной в одномерной постановке с учетом сдвиговой и объемной вязкости, теплопроводности поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы, а также релаксации колебательной энергии в различных модах молекулы углекислого газа.

Мы будем базироваться на результатах работы [2] и усложним модель добавлением еще одной компоненты – аргона. В данном случае выбран этот газ, так как для смеси  $CO_2 - Ar$  существуют результаты, полученные экспериментально [5], которые позволят провести валидацию модели. Таким образом, основной задачей текущей работы является моделирование сильнонеравновесного течения смеси  $CO_2 - Ar$  за ударной волной в одномерном случае.

Для решения поставленной задачи использована многотемпературная модель для смеси газов с учетом внутренних колебательных степеней свободы молекулы  $CO_2$ . В модели уравнения сохранения массы, импульса и энергии дополняются уравнениями релаксации для колебательной энергии объединенной (симметричной-деформационной) и антисимметричной мод молекулы  $CO_2$  и уравнениями диффузии для компонентов смеси. Важную часть модели составляют алгоритмы вычисления коэффициентов переноса: вязкости, теплопроводности, диффузии, построенные строгими методами кинетической теории газов [1], [6]. Численное решение системы гидродинамических уравнений производится с помощью метода конечных объемов, а именно метода Годунова. Применение данного подхода обосновано в работе [3].

Авторы надеются получить хорошее согласование с экспериментом, так как опыт предыдущих работ показал, что многотемпературная модель в достаточной степени точности описывает процессы в реальных неравновесных системах. Однако также ожидаются сложности при расчете коэффициентов переноса, это потребует дополнительной оптимизации моделирующих алгоритмов.

Исследование выполнено при поддержке СПбГУ (проект № 93022273).

## 2 Математическая модель

Для описания процессов переноса и релаксации в разреженных газах есть два принципиальных подхода: поуровневый и многотемпературный. Мы остановимся на рассмотрении второго, так как он является более простым с точки зрения реализации (в этом подходе неравновесная кинетика описывается с помощью меньшего числа уравнений) и, следовательно, представляет больший практический интерес. Для начала составим систему уравнений для макропараметров.

### 2.1 Уравнения для макропараметров

Замкнутая система уравнений динамики многокомпонентной смеси состоит из уравнений для концентраций химических компонентов, уравнений сохранения импульса и полной энергии и дополнительных релаксационных уравнений:

$$\frac{\partial n_{CO_2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( n_{CO_2} (v + V_{CO_2}) \right) = 0, \quad (1)$$

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

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial P_{xx}}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

$$\rho \left( \frac{\partial E}{\partial t} + v \frac{\partial E}{\partial x} \right) + \frac{\partial q}{\partial x} + P_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

$$\rho_{CO_2} \left( \frac{\partial E_{12}}{\partial t} + v \frac{\partial E_{12}}{\partial x} \right) + \frac{\partial q_{12}}{\partial x} = R_{12} + E_{12} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_{CO_2} V_{CO_2}), \quad (5)$$

$$\rho_{CO_2} \left( \frac{\partial E_3}{\partial t} + v \frac{\partial E_3}{\partial x} \right) + \frac{\partial q_3}{\partial x} = R_3 + E_3 \frac{\partial}{\partial x} (\rho_{CO_2} V_{CO_2}). \quad (6)$$

Здесь  $\rho_c$ ,  $n_c$  – плотность и концентрация частиц газа соответствующего химического сорта  $c$ ,  $\rho$  – плотность смеси,  $v$  – скорость потока,  $p$  – давление газа,  $E$ ,  $E_{12}$ ,  $E_3$  – полная энергия и энергии колебательных мод в единице массы газа,  $V_c$  – компоненты скорости диффузии,  $P_{xx}$  – единственная компонента тензора напряжений, входящая в уравнения в одномерной постановке,  $q$ ,  $q_{12}$ ,  $q_3$  – компоненты векторов теплового потока и потоков колебательной энергии в различных модах,  $R_{12}$  и  $R_3$  – скорости колебательной релаксации,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура поступательного движения частиц. Плотности и концентрации связаны между собой следующими соотношениями:

$$\rho = \rho_{CO_2} + \rho_{Ar}, \quad (7)$$

$$\rho_{CO_2} = m_{CO_2} n_{CO_2}, \quad (8)$$

$$\rho_{Ar} = m_{Ar} n_{Ar}, \quad (9)$$

$$n = n_{CO_2} + n_{Ar}. \quad (10)$$

Здесь  $m_c$  – масса частицы химического сорта  $c$ . Описание энергий, потоковых и релаксационных членов мы приведем в следующих разделах.

Важно отметить, что мы не рассматриваем в данной работе химические взаимодействия и превращения компонент смеси, поэтому в правых частях уравнений (1) и (2) отсутствуют релаксационные члены.

Также необходимо заметить, что при рассмотрении 1 – симметричной, 2 – деформационной и 3 – антисимметричной колебательных мод молекулы  $CO_2$  мы вводим общую температуру  $T_{12}$  и энергию  $E_{12}$  для 1 и 2 мод вследствие того, что на практике происходит быстрое их уравнивание. Антисимметричная мода описывается собственной температурой  $T_3$  и колебательной энергией  $E_3$ . Переход к равновесию достигается за счет внутримодовых и межмодовых обменов колебательной энергией [4].

В отличие от работы [2], в данном исследовании учитываются диффузионные силы, поэтому в уравнениях для макропараметров фигурирует скорость диффузии  $V_c$  соответствующего сорта.

## 2.2 Энергия

Для замыкания системы газодинамических уравнений необходимо записать выражения для внутренней энергии. Кинетическая теория дает следующий результат:

$$\rho E = \frac{3}{2}kT(n_{CO_2} + n_{Ar}) + \rho_{CO_2}(E_{rot} + E_{12} + E_3), \quad (11)$$

$$E_{rot} = \frac{kT}{m_{CO_2}}, \quad (12)$$

$$E_{12}(T_{12}) = \frac{1}{m_{CO_2} Z_{12}(T_{12})} \sum_{i_1, i_2} s_{i_1, i_2} \varepsilon_{i_1, i_2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_1, i_2}}{kT_{12}}\right), \quad (13)$$

$$E_3(T_3) = \frac{1}{m_{CO_2} Z_3(T_3)} \sum_{i_3} s_{i_3} \varepsilon_{i_3} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_3}}{kT_3}\right). \quad (14)$$

Здесь  $Z_{12}(T_{12})$  и  $Z_3(T_3)$  – колебательные статистические суммы,  $E_{rot}$  – энергия вращательного движения частиц сорта  $CO_2$ . Основываясь на результатах исследования [2], можем записать:

$$Z_{12}(T_{12}) = \sum_{i_1, i_2} s_{i_1, i_2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_1, i_2}}{kT_{12}}\right), \quad (15)$$

$$Z_3(T_3) = \sum_{i_3} s_{i_3} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{i_3}}{kT_3}\right). \quad (16)$$

Где статистические веса выражаются следующим образом:

$$\varepsilon_{i_1, i_2} = (2i_1 + i_2)\varepsilon_{010}, \quad \varepsilon_{i_3} = i_3\varepsilon_{001}, \quad (17)$$

$$s_{i_1, i_2} = i_2 + 1, \quad s_{i_3} = 1. \quad (18)$$

Здесь  $i_1, i_2, i_3$  – квантовые числа соответствующих колебательных мод молекулы  $CO_2$ ,  $\varepsilon_{010}, \varepsilon_{001}$  – колебательные энергии соответствующих состояний.

## 2.3 Поточковые члены, тензор напряжений, диффузия

Теперь перейдем к рассмотрению потоковых членов. Член потока энергии  $q$  задается выражением:

$$q = q_{tr, rot} + q_{12} + q_3 + q_{diff}. \quad (19)$$

Здесь:

$$q_{tr, rot} = -\lambda'(T, n_{CO_2}, n_{Ar}) \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (20)$$

$$q_{12} = -\lambda_{12}(T_{12}, T) \frac{\partial T_{12}}{\partial x}, \quad (21)$$

$$q_3 = -\lambda_3(T_3, T) \frac{\partial T_3}{\partial x}, \quad (22)$$

$$q_{diff} = \sum_c (\rho_c h_c V_c - p D_{T_c} d_c). \quad (23)$$

Где  $\lambda_{12}$ ,  $\lambda_3$ ,  $\lambda'$  – коэффициенты теплопроводности (для колебательных и поступательно-вращательных процессов), подробное описание этих коэффициентов можно найти в [4]. Удельная энтальпия частиц соответствующих сортов:

$$h_{CO_2} = \frac{5}{2} \frac{kT}{m_{CO_2}} + E_{rot} + E_{12} + E_3, \quad (24)$$

$$h_{Ar} = \frac{5}{2} \frac{kT}{m_{Ar}}. \quad (25)$$

Выражения для скорости и коэффициентов диффузии:

$$V_c = - \sum_s D_{cs} d_s - D_{T_c} \frac{\partial}{\partial x} \ln T, \quad (26)$$

$$d_c = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{n_c}{n} \right) + \left( \frac{n_c}{n} - \frac{\rho_c}{\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x} \ln p. \quad (27)$$

Выражение для тензора напряжений и основное уравнение МКТ:

$$P_{xx} = p - \left( \frac{4}{3} \eta(T) + \zeta(T) \right) \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \text{где} \quad (28)$$

$$p = nkT. \quad (29)$$

Здесь  $\eta$  и  $\zeta$  – коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости соответственно.

## 2.4 Скорости колебательных релаксаций

Релаксация в комбинированной и асимметричной модах [2] включает вклад различных медленных процессов:

$$R_{12} = R_{12}^{VT_2} + R_{12}^{VV_{2-3}} + R_{12}^{VV_{1-2-3}}, \quad (30)$$

$$R_3 = R_3^{VV_{2-3}} + R_3^{VV_{1-2-3}}. \quad (31)$$

Скорость колебательной релаксации в каждой моде вычисляется с помощью модифицированного уравнения Ландау–Теллера:

$$R_{12}^\gamma = \rho \frac{E_{12}(T) - E_{12}(T_{12})}{\tau_\gamma}, \quad \gamma = VT_2, VV_{2-3}, VV_{1-2-3}, \quad (32)$$

$$R_3^\gamma = \rho \frac{E_3(T) - E_3(T_3)}{\tau_\gamma}, \quad \gamma = VV_{2-3}, VV_{1-2-3}. \quad (33)$$

Здесь  $\tau_\gamma$  – время релаксации для процесса  $\gamma$ .

## 2.5 Коэффициенты переноса

Осталось записать выражения для коэффициентов переноса: сдвиговой вязкости, диффузии, термодиффузии, объемной вязкости. Кинетическая теория дает следующий результат:

$$\eta = \frac{kT}{2} \sum_c x_c b_{c,0}, \quad (34)$$

$$\zeta = -kT(x_{CO_2} f_{CO_2,10} + x_{Ar} f_{Ar,1}), \quad (35)$$

$$D_{cd} = \frac{1}{2n} d_{c,0}^d, \quad (36)$$

$$D_{T_{CO_2}} = -\frac{1}{2n} a_{CO_2,00}, \quad D_{T_{Ar}} = -\frac{1}{2n} a_{Ar,0}. \quad (37)$$

Здесь  $x_c = n_c/n$ , коэффициенты  $b_{c,0}$ ,  $d_{c,0}^d$ ,  $a_{c,rp}$ ,  $f_{c,rp}$  определяются из решения соответствующих систем линейных уравнений, которые определяются в следующем параграфе. Вернемся к вычислению коэффициентов теплопроводности:

$$\lambda' = \lambda_{tr} + \lambda_{rot}, \quad (38)$$

$$\lambda_{tr} = \frac{5}{4} k(x_{CO_2} a_{CO_2,10} + x_{Ar} a_{Ar,1}), \quad (39)$$

$$\lambda_{rot} = \frac{m_{CO_2} n_{CO_2} c_{rot}}{\sum_c \frac{x_c}{\mathcal{D}_{CO_2c}}}, \quad (40)$$

$$\lambda_{12} = \frac{m_{CO_2} n_{CO_2} c_{12}}{\sum_c \frac{x_c}{\mathcal{D}_{CO_2c}}}, \quad (41)$$

$$\lambda_3 = \frac{m_{CO_2} n_{CO_2} c_3}{\sum_c \frac{x_c}{\mathcal{D}_{CO_2c}}}. \quad (42)$$

Здесь  $c_{rot} = k/m_{CO_2}$  – удельная теплоемкость вращательных степеней свободы,  $c_{12}$ ,  $c_3$  – удельные теплоемкости колебательных степеней свободы. Запишем коэффициенты диффузии:

$$\mathcal{D}_{cd} = \frac{3kT}{16nm_{cd}} \frac{1}{\Omega_{cd}^{(1,1)}}. \quad (43)$$

Здесь  $m_{cd} = m_c m_d / (m_c + m_d)$  – приведенная масса частиц сортов  $c$  и  $d$ ,  $\Omega_{cd}^{(1,1)}$  – стандартные  $\Omega$ -интегралы.

## 2.6 Системы уравнений для коэффициентов переноса

При составлении систем для отыскания коэффициентов переноса будем пользоваться следующими обозначениями:  $y_c = \rho_c/\rho$  и  $x_c = n_c/n$ . Матрицы систем линейных уравнений состояются из интегральных скобок, подробное описание которых будет приведено в следующем параграфе. Здесь ограничимся только описанием самих систем.

### 2.6.1 Система для коэффициентов теплопроводности и термодиффузии

$$\begin{pmatrix} y_{CO_2} & y_{Ar} & 0 & 0 \\ \Lambda_{00}^{Ar-CO_2} & \Lambda_{00}^{Ar-Ar} & \Lambda_{01}^{Ar-CO_2} & \Lambda_{01}^{Ar-Ar} \\ \Lambda_{10}^{CO_2-CO_2} & \Lambda_{10}^{CO_2-Ar} & \Lambda_{11}^{CO_2-CO_2} & \Lambda_{11}^{CO_2-Ar} \\ \Lambda_{10}^{Ar-CO_2} & \Lambda_{10}^{Ar-Ar} & \Lambda_{11}^{Ar-CO_2} & \Lambda_{11}^{Ar-Ar} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{CO_2,00} \\ a_{Ar,0} \\ a_{CO_2,10} \\ a_{Ar,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{15}{2}kTx_{CO_2} \\ \frac{15}{2}kTx_{Ar} \end{pmatrix} \quad (44)$$

### 2.6.2 Система для коэффициентов переноса

$$\begin{pmatrix} y_{CO_2} & y_{Ar} \\ \Lambda_{00}^{Ar-CO_2} & \Lambda_{00}^{Ar-Ar} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} d_{CO_2,0}^d \\ d_{Ar,0}^d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3kT(\delta_{Ar d} - y_{Ar}) \end{pmatrix}, \quad d = CO_2, Ar. \quad (45)$$

### 2.6.3 Система для коэффициентов сдвиговой вязкости

$$\begin{pmatrix} H_{00}^{CO_2-CO_2} & H_{00}^{CO_2-Ar} \\ H_{00}^{Ar-CO_2} & H_{00}^{Ar-Ar} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{CO_2,0} \\ b_{Ar,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{kT}x_{CO_2} \\ \frac{2}{kT}x_{Ar} \end{pmatrix} \quad (46)$$

### 2.6.4 Система для коэффициентов объемной вязкости

$$\begin{pmatrix} x_{CO_2}c_{tr} & x_{Ar}c_{tr} & y_{CO_2}c_{rot} \\ \beta_{11}^{Ar-CO_2} & \beta_{11}^{Ar-Ar} & \beta_{1001}^{Ar-CO_2} \\ \beta_{0110}^{CO_2-CO_2} & \beta_{0110}^{CO_2-Ar} & \beta_{0011}^{CO_2-CO_2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_{CO_2,10} \\ f_{Ar,1} \\ f_{CO_2,01} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -y_{Ar} \frac{c_u - c_{tr}}{c_u} \\ y_{CO_2} \frac{c_{rot,CO_2}}{c_u} \end{pmatrix} \quad (47)$$

## 2.7 Интегральные скобки

Здесь и далее будем использовать  $\Omega_{cd}^{(i,j)}$  и  $\Omega_c^{(i,j)}$  – стандартные  $\Omega$ -интегралы [1]. В нашей модели используется потенциал Леннарда-Джонса, и в соответствии с ним будет производиться расчет этих интегралов.

### 2.7.1 Интегральные скобки $\Lambda_{rp}^{cd}, H_{00}^{cd}$

$$\Lambda_{00}^{cd} = -8x_c x_d m_{cd} \Omega_{cd}^{(1,1)}, \quad d \neq c, \quad (48)$$

$$\Lambda_{00}^{cc} = 8 \sum_{b \neq c} x_c x_b m_{cb} \Omega_{cb}^{(1,1)}, \quad (49)$$

$$\Lambda_{01}^{cd} = 4x_c x_d m_{cd} \frac{m_c}{m_c + m_d} \left( 2\Omega_{cd}^{(1,2)} - 5\Omega_{cd}^{(1,1)} \right), \quad d \neq c, \quad (50)$$

$$\Lambda_{01}^{cc} = -4 \sum_{b \neq c} x_c x_b m_{cb} \frac{m_c}{m_c + m_b} \left( 2\Omega_{cb}^{(1,2)} - 5\Omega_{cb}^{(1,1)} \right), \quad (51)$$



$$\Lambda_{11}^{cd} = -8x_c x_d \frac{m_{cd}^2}{m_c + m_d} \left( \frac{55}{4} \Omega_{cd}^{(1,1)} - 5\Omega_{cd}^{(1,2)} + \Omega_{cd}^{(1,3)} - 2\Omega_{cd}^{(2,2)} \right), \quad d \neq c, \quad (52)$$

$$\Lambda_{11}^{cc} = 8 \sum_{b \neq c} x_c x_b \frac{m_{cb}^2}{m_c + m_b} \left( \left( \frac{15m_c}{2m_b} + \frac{25m_b}{4m_c} \right) \Omega_{cb}^{(1,1)} + \frac{m_b}{m_c} \left( \Omega_{cb}^{(1,3)} - 5\Omega_{cb}^{(1,2)} \right) + 2\Omega_{cb}^{(2,2)} \right) + 4x_c^2 m_c \Omega_c^{(2,2)}, \quad (53)$$

$$\Lambda_{rp}^{cd} = \Lambda_{rp}^{dc}, \quad \forall c, d, r, p, \quad (54)$$

$$H_{00}^{cd} = \frac{16}{5} \frac{x_c x_d}{kT} \frac{m_c m_d}{(m_c + m_d)^2} \left( -\frac{10}{3} \Omega_{cd}^{(1,1)} + \Omega_{cd}^{(2,2)} \right), \quad d \neq c, \quad (55)$$

$$H_{00}^{cc} = \frac{16}{5} \sum_{b \neq c} \frac{x_c x_b}{kT} \frac{m_b}{(m_c + m_b)^2} \left( \frac{10}{3} \Omega_{cb}^{(1,1)} m_c + \Omega_{cb}^{(2,2)} m_b \right) + \frac{8}{5} \frac{x_c^2}{kT} \Omega_c^{(2,2)}, \quad (56)$$

### 2.7.2 Интегральные скобки $\beta_{rr'pp'}^{cd}$

$$\beta_{11}^{Ar-CO_2} = x_{Ar} x_{CO_2} \frac{m_{Ar} m_{CO_2}}{(m_{Ar} + m_{CO_2})^2} \left( m_{CO_2} c_{rot, CO_2} \frac{T}{p\tau_{CO_2}^{rot}} \frac{\Omega_{Ar-CO_2}^{(2,2)}}{\Omega_{CO_2}^{(2,2)}} - 16\Omega_{Ar-CO_2}^{(1,1)} \right), \quad (57)$$

$$\beta_{11}^{Ar-Ar} = x_{Ar} x_{CO_2} \frac{m_{Ar} m_{CO_2}}{(m_{Ar} + m_{CO_2})^2} \left( m_{CO_2} c_{rot, CO_2} \frac{m_{CO_2}}{m_{Ar}} \frac{T}{p\tau_{CO_2}^{rot}} \frac{\Omega_{Ar-CO_2}^{(2,2)}}{\Omega_{CO_2}^{(2,2)}} + 16\Omega_{Ar-CO_2}^{(1,1)} \right), \quad (58)$$

$$\beta_{0110}^{CO_2-Ar} = -\frac{1}{2} x_{Ar} x_{CO_2} m_{CO_2} c_{rot, CO_2} \frac{m_{CO_2}}{m_{Ar} + m_{CO_2}} \frac{T}{p\tau_{CO_2}^{rot}} \frac{\Omega_{Ar-CO_2}^{(2,2)}}{\Omega_{CO_2}^{(2,2)}}, \quad (59)$$

$$\beta_{0110}^{CO_2-CO_2} = -\frac{4T}{\pi} \sum_{b \neq CO_2} \frac{x_{CO_2} x_b}{\eta_{CO_2 b}} \frac{m_b}{m_{CO_2} + m_b} \frac{m_{CO_2} c_{rot, CO_2}}{\zeta_{CO_2}^{rot}} - \frac{4T}{\pi} \frac{x_{CO_2}^2}{\eta_{CO_2}} \frac{m_{CO_2} c_{rot, CO_2}}{\zeta_{CO_2}^{rot}}, \quad (60)$$

$$\beta_{0011}^{CO_2-CO_2} = \frac{4T}{\pi} \sum_{b \neq CO_2} \frac{x_{CO_2} x_b}{\eta_{CO_2 b}} \frac{m_{CO_2} c_{rot, CO_2}}{\zeta_{CO_2}^{rot}} + \frac{4T}{\pi} \frac{x_{CO_2}^2}{\eta_{CO_2}} \frac{m_{CO_2} c_{rot, CO_2}}{\zeta_{CO_2}^{rot}}, \quad (61)$$

$$\beta_{rr'pp'}^{cd} = \beta_{rr'pp'}^{dc}, \quad \forall c, d, r, p. \quad (62)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\eta_{cd} = \frac{5}{8} \frac{kT}{\Omega_{cd}^{(2,2)}}, \quad \eta_c = \frac{5}{8} \frac{kT}{\Omega_c^{(2,2)}}, \quad \zeta_{CO_2}^{rot} = \frac{4}{\pi} \frac{p\tau_{CO_2}^{rot}}{\eta_{CO_2}}. \quad (63)$$

Подводя итог, можно сказать, что теоретическая многотемпературная модель описана полностью (однако, некоторые уравнения в данной статье не записаны явно), мы составили замкнутую систему уравнений относительно всех макропараметров. Далее можем рассмотреть численные методы решения этой системы и возможные варианты их оптимизации.

## 3 Численное моделирование

### 3.1 Решение системы

Оптимальнее всего искать решение системы ДУ (1) – (6) с помощью метода конечных объемов. В таком случае каждый шаг общего алгоритма будет содержать три этапа:

1. Поиск основных макропараметров  $(\rho, n_{CO_2}, v, E, E_{12}, E_3)$  на текущем шаге метода конечных объемов.
2. Поиск оставшихся макропараметров  $(V_{CO_2}, P_{xx}, q, q_{12}, q_3, R_{12}, R_3)$  с помощью решения нелинейных уравнений, используя метод Ньютона, и линейных систем, используя метод Гаусса или Крамера.
3. Переход к следующему шагу.

На первом этапе удобно записать систему ДУ в консервативных переменных [2] и свести ее к виду:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{R}. \quad (64)$$

Где  $\mathbf{U}$  – вектор консервативных переменных,  $\mathbf{F}$  – вектор потоков,  $\mathbf{R}$  – вектор релаксационных членов. Таким образом, можем легко найти вектор  $\mathbf{U}$  на очередном итерационном шаге.

На втором этапе сначала нужно найти  $T, T_{12}, T_3$ , решая нелинейные уравнения состояния (11) – (14). Затем, зная температуры, нужно явно вычислить тензор напряжений  $(P_{xx})$  и потоки  $(q, q_{12}, q_3, V_c)$ , то есть оставшиеся макроскопические параметры.

Стоит заметить, что при вычислении тензора напряжений и потоков массы и энергии потребуется находить интегральные скобки и решать большое количество систем линейных уравнений, что является вычислительно затратной задачей.

### 3.2 Возможные варианты оптимизации

С точки зрения количества вычислений самой сложной частью задачи является вычисление интегральных скобок на каждом итерационном шаге, этот процесс можно ускорить, применив интерполяцию. Можно заранее рассчитать значения этих коэффициентов в заданном диапазоне температур с достаточно малым шагом, а далее интерполировать. Данный способ освещен в работе [3].

Можно также для интерполирования использовать нейронные сети, это может дать значительный прирост в производительности вычислений.

## 4 Расчет коэффициентов переноса

Под коэффициентами переноса понимаем коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, коэффициенты диффузии, термодиффузии, теплопроводности. В данной работе произведем расчет некоторых коэффициентов для различных концентрации компонент и покажем их зависимость от температуры  $T$ .

Соответствующие вычисления были произведены с помощью адаптированной под нашу задачу программы на языке **Fortran**. Исходная программа предназначалась для расчета коэффициентов переноса пятикомпонентной смеси:  $CO_2$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $O$ ,  $C$ . Далее мы рассмотрим результаты работы программы.

### 4.1 Коэффициенты $\eta$ , $\zeta$

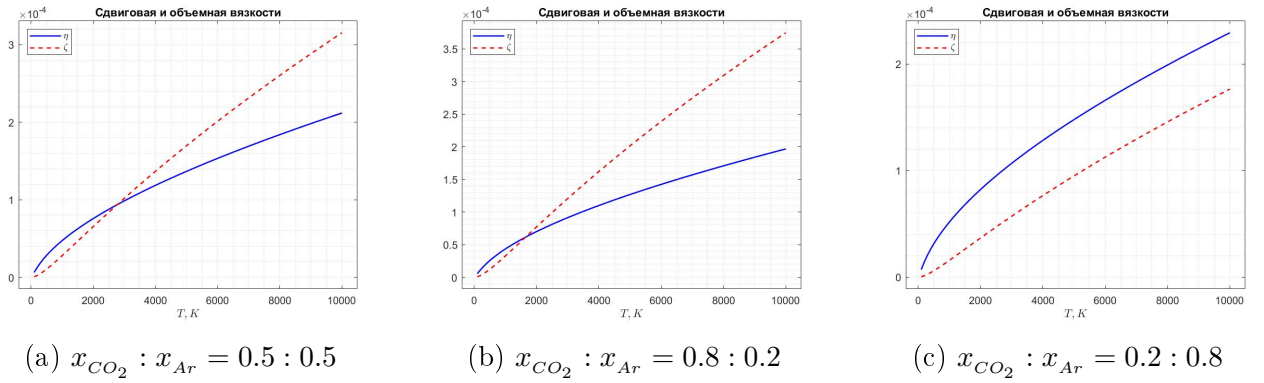


Рис. 1: Графики зависимости коэффициентов сдвиговой ( $\eta$ ) и объемной ( $\zeta$ ) вязкости от температуры смеси для различных концентраций компонент.

### 4.2 Коэффициенты $\lambda_{12}$ , $\lambda_3$ , $\lambda_{rot}$ , $\lambda_{tr}$

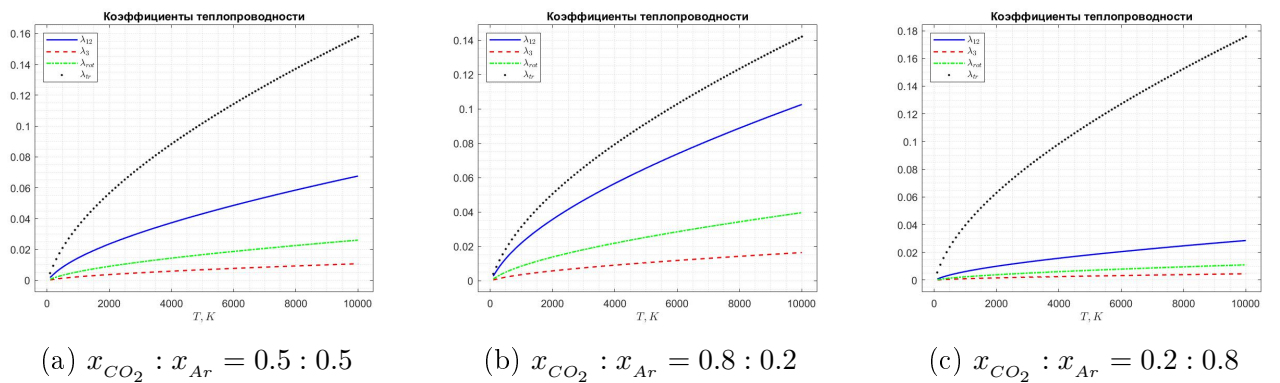
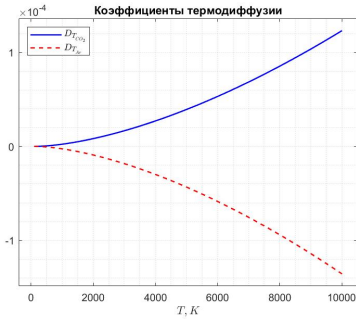
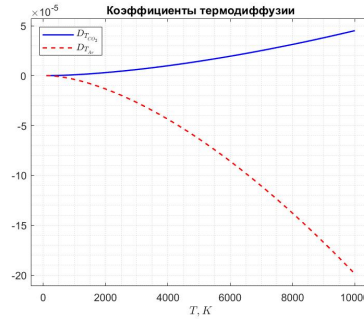


Рис. 2: Графики зависимости коэффициентов теплопроводности от температуры смеси для различных концентраций компонент.

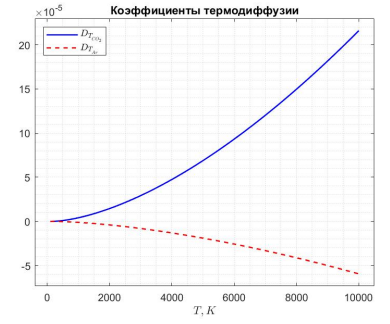
### 4.3 Коэффициенты $D_{T_{CO_2}}$ , $D_{T_{Ar}}$



(a)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.5 : 0.5$



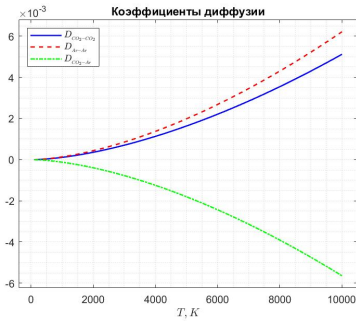
(b)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.8 : 0.2$



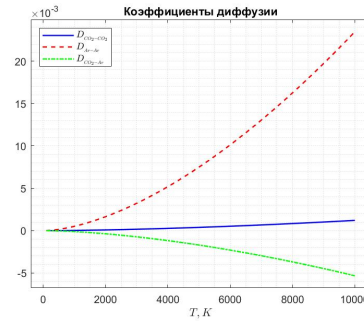
(c)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.2 : 0.8$

Рис. 3: Графики зависимости коэффициентов термодиффузии от температуры смеси для различных концентраций компонент.

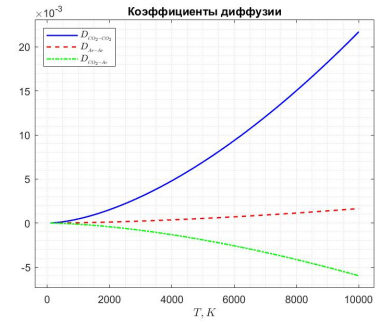
### 4.4 Коэффициенты $D_{CO_2-CO_2}$ , $D_{Ar-Ar}$ , $D_{CO_2-Ar}$



(a)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.5 : 0.5$



(b)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.8 : 0.2$



(c)  $x_{CO_2} : x_{Ar} = 0.2 : 0.8$

Рис. 4: Графики зависимости коэффициентов диффузии от температуры смеси для различных концентраций компонент.

Полученные графики показывают зависимость соответствующих коэффициентов переноса от температуры смеси. Можно заключить, что концентрация оказывает существенное влияние на свойства смеси. Также стоит отметить, что вязкость нашей смеси газов растет с увеличением температуры, этот результат хорошо согласуется с экспериментом, однако в случае рассмотрения вязких жидкостей это неверно.

## 5 Выводы

В данной работе мы описали многотемпературную модель неравновесного одномерного течения смеси аргона и углекислого газа, сформулировали алгоритм решения замкнутой системы уравнений для макропараметров, осветили проблемы, возникающие при численной реализации модели, и способы их решения.

Также мы реализовали алгоритм расчета коэффициентов переноса, что в дальнейшем позволит применить полученный результат для численного решения системы уравнений динамики смеси и окончательно смоделировать одномерное неравновесное течение смеси  $CO_2 - Ar$  за ударной волной.

## Список литературы

- [1] Е.А. Нагнибеда, Е.В. Кустова, Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. – СПб.: Издательство С.-Петербургского университета, 2003. – 272 с., ISBN 5-288-03357-9.
- [2] I. Alekseev, E. Kustova, Extended continuum models for shock waves in  $CO_2$  // Phys. Fluids 33, 096101 (2021).
- [3] 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>.
- [4] E.V. Kustova, E.A. Nagnibeda, On a correct description of a multi-temperature dissociating  $CO_2$  flow // Chem. Phys. 321, 293–310 (2006).
- [5] A. Farooq, J. B. Jeffries, and R. K. Hanson, Sensitive detection of temperature behind reflected shock waves using wavelength modulation spectroscopy of  $CO_2$  near  $2.7 \mu m$  // Appl. Phys. B 96, 161–173 (2009).
- [6] Кустова Е.В., Мехоношина М.А, Некоторые математические преобразования в кинетической теории газов. – СПб.: Издательство С.-Петербургского университета, 2017.