

ОПТИМИЗАЦИЯ РАСЧЕТОВ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ КИНЕТИКИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Е.В. Кустова^{1,2}, О.В. Кунова^{1,2}, В. И. Гориховский¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Санкт-Петербург

² ФИЦ ИУ РАН, 119333, Москва

*e-mail: e.kustova@spbu.ru

Исследование колебательной кинетики углекислого газа важно для современных аэрокосмических и экологических задач, новых приложений низкотемпературной плазмы. Сложность описания кинетики газов с несколькими колебательными модами состоит в наличии нестандартных каналов релаксации, межмодовых обменов энергией, взаимном влиянии мод [1]. В таких условиях применение традиционных многотемпературных моделей, получивших широкое распространение для описания течений двухатомных газов, может приводить к заметным погрешностям при определении газодинамических параметров [2,3]. Использование поуровневого подхода затрудняется тем, что число колебательных уровней молекулы CO₂ достигает нескольких тысяч, поэтому подход неприменим для решения двух- и трехмерных задач.

В работе предлагаются два пути повышения точности и вычислительной эффективности при исследовании колебательной и химической кинетики CO₂. Первый состоит в использовании гибридного многотемпературного подхода, основанного на отказе от традиционной записи скорости колебательной релаксации в форме Ландау-Теллера. При этом становится возможным введение колебательной температуры каждой моды, а расчет скорости колебательной релаксации в разных модах проводится путем осреднения соответствующих поуровневых релаксационных членов с неравновесными распределениями Больцмана или Тринора. Это позволяет снизить погрешность, возникающую за счет использования эмпирических формул для времен релаксации, ограниченных довольно узким диапазоном температур, а также учесть дополнительные каналы релаксации.

Гибридный подход был проверен на примере решения задачи о пространственно однородной релаксации для однокомпонентного газа [2] и пятикомпонентной смеси с химическими реакциями [3]. Показана его высокая точность и хорошее совпадение с результатами поуровневого моделирования. Однако недостатком модели явилась высокая вычислительная сложность расчетов, поскольку осреднение поуровневых скоростей релаксации требует расчета коэффициентов скорости для каждого колебательного состояния. Выходом из этой ситуации может послужить использование нейросетевого подхода для вычисления релаксационных членов, предложенного в [4].

В работе обсуждаются результаты моделирования кинетики CO₂ в 0-мерной задаче и за фронтом ударной волны, анализируется точность и вычислительная эффективность предложенных подходов.

Исследование выполнено при поддержке РНФ, проект 22-11-00078.

1. L. D. Pietanza, O. Guaitella, V. Aquilanti et al. // Eur. Phys. J. D. 2021. Vol. 75. Art. No. 237. <https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-021-00226-0>
2. A. Kosareva, O. Kunova, E. Kustova, and E. Nagnibeda // Phys. Fluids. 2021. Vol. 33. Art. no. 016103. <https://doi.org/10.1063/5.0035171>
3. A. Kosareva, O. Kunova, E. Kustova, and E. Nagnibeda // Phys. Fluids. 2022. Vol. 34. Art. no. 026105. <https://doi.org/10.1063/5.0079664>
4. V.G. Gorikhovskii, E.V. Kustova // Vestnik St. Petersburg University, Mathematics. 2022. Vol. 55, No. 4, pp. 434–442. doi: 10.1134/S1063454122040070