



www.volsu.ru

DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.volsu.2024.1.6>

УДК 534.2, 537.7

ББК 22.25,22.32

Дата поступления статьи: 15.01.2023

Дата принятия статьи: 01.02.2024



## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН В НЕРАВНОВЕСНОМ ХИМИЧЕСКИ АКТИВНОМ ГАЗЕ<sup>1</sup>

**Сергей Сергеевич Храпов**

Кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры информационных систем и компьютерного моделирования,  
Волгоградский государственный университет  
khrapov@volsu.ru  
<https://orcid.org/0000-0003-2660-2491>  
просп. Университетский, 100, 400062 г. Волгоград, Российская Федерация

**Аннотация.** Рассмотрена нелинейная динамика неустойчивых звуковых волн в неравновесном колебательно-возбужденном газе с учетом вязкости, теплопроводности, химических реакций и произвольных зависимостей времени релаксации, функций нагрева и охлаждения от плотности и температуры. Построена численная модель и разработан программный комплекс, основанный на газодинамических методах сквозного счета CSPH-TVD/MUSCL, для исследования линейной и нелинейной стадии развития акустической неустойчивости в неравновесном химически активном газе с различными моделями времени релаксации, нагрева и охлаждения. Численная модель обладает высоким пространственным разрешением и имеет второй порядок точности. Исследовано влияние химической активности в неравновесном колебательно-возбужденном газе на нелинейную динамику акустической неустойчивости. Показано, что учет химических реакций в неравновесном газе приводит к усилению акустической неустойчивости и в результате на конечной нелинейной стадии формируются ударно-волновые импульсы более высокой интенсивности и с большим пространственным масштабом. Исследована структура и устойчивость ударных волн (УВ) различной интенсивности. Показано, что ударные волны в неравновесном колебательно-возбужденном газе оказываются неустойчивыми, то есть за фронтом УВ происходит генерация неустойчивых возмущений, амплитуда которых с течением времени нарастает, достигая нелинейного насыщения.

**Ключевые слова:** неравновесный газ, колебательная релаксация, химические реакции, ударные волны, численный метод CSPH-TVD, нелинейное акустическое уравнение.

## Введение

Структура слабых ударных волн в неравновесном колебательно-возбужденном газе рассматривалась в работах [2; 7; 9; 10] на основе акустического уравнения с квадратичной нелинейностью. Подход, основанный на решении нелинейного акустического уравнения, используется и при исследовании нелинейных волновых структур в различных неравновесных средах, например, с неравновесным тепловыделением [3; 11].

В общем динамика нелинейных волн со значительной амплитудой требует учета не только квадратичной нелинейности, но и нелинейных поправок более высокого порядка. Полный учет всех нелинейных эффектов возможен только при прямом численном решении газодинамических уравнений. Ранее детальное исследование динамики акустической неустойчивости и ударных волн в неравновесном химически активном газе не проводилось.

### 1. Постановка задачи и численная модель динамики неравновесного химически активного газа

Рассмотрим задачу сверхзвукового натекания газа на препятствие (твердую стенку). Воспользуемся математической моделью динамики неравновесного колебательно-возбужденного газа с учетом химических реакций, вязкости, теплопроводности, нагрева и охлаждения, которая подробно описана в работе [4].

#### 1.1. Численная модель

Проведем обобщение численной модели динамики неравновесного колебательно-возбужденного газа [5; 6] на случай химической активности газа. В обобщенной модели добавляется новое уравнение динамики химически активного реагента [4], а в уравнении баланса энергии удельная мощность нагрева дополняется новым слагаемым (см. [4]), которое учитывает нагрев газа за счет химических реакций.

Для решения уравнений обобщенной численной модели воспользуемся хорошо апробированными газодинамическими методами сквозного счета CSPH-TVD/MUSCL, которые адаптированы для моделирования динамики химически активных сред и позволяют исследовать как нелинейную динамику акустической неустойчивости, так и структуру ударных волн.

#### 1.2. Нелинейное акустическое уравнение

Наряду с обобщенной численной моделью полной системы уравнений газодинамики неравновесного химически активного газа (см. п. 1.1) рассмотрим приближение, в котором учитываются только квадратичные поправки по возмущенным величинам. Этот подход используется при выводе нелинейного акустического уравнения, широко применяемого для исследования структуры ударных волн в различных неравновесных средах [2; 3; 7; 9–11]. Для того чтобы получить аналог нелинейного акустического уравнения в рамках нашей обобщенной численной модели, необходимо в выражениях для потоков импульса и энергии исключить кубические поправки относительно возмущен-

ных величин  $\tilde{f} = f - f_0$  ( $f_0$  — начальные стационарные значения параметров течения):

$$\begin{aligned} F_u &= \rho u^2 + p - \mu_0 \rho \frac{\partial u}{\partial x} - \tilde{\rho} \tilde{u}^2, \\ F_E &= (E + p)u - \mu_0 \rho u \frac{\partial u}{\partial x} - \kappa_0 \frac{\partial T}{\partial x} + \mu_0 \tilde{\rho} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $F_u$  и  $F_E$  — потоки импульса и энергии для модели с квадратичной нелинейностью соответственно. Также необходимо заменить функции общего вида  $f(\rho, T)$  для времени колебательной релаксации  $\tau$ , скорости химической реакции  $K$ , мощности нагрева  $Q$  и охлаждения  $\Lambda$  следующей квадратичной аппроксимацией:

$$\begin{aligned} f(\rho, T) &\approx \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} \left( \frac{\partial \ln f}{\partial \ln \rho} \right)_0 + \frac{\tilde{\rho}^2}{\rho_0^2} \left( \frac{\partial^2 \ln f}{\partial \ln \rho^2} \right)_0 + \frac{\tilde{T}}{T_0} \left( \frac{\partial \ln f}{\partial \ln T} \right)_0 + \frac{\tilde{T}^2}{T_0^2} \left( \frac{\partial^2 \ln f}{\partial \ln T^2} \right)_0 \\ &= \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} f_\rho + \frac{\tilde{\rho}^2}{\rho_0^2} f_{\rho\rho} + \frac{\tilde{T}}{T_0} f_T + \frac{\tilde{T}^2}{T_0^2} f_{TT}. \end{aligned} \quad (2)$$

Предложенный подход (1)–(2) обладает рядом преимуществ по сравнению с аналитическим представлением нелинейного акустического уравнения и прямыми численными методами его решения. Во-первых, это универсальность, позволяющая рассматривать различные неравновесные среды, а во-вторых, это использование хорошо апробированных численных газодинамических методов, которые обладают свойствами консервативности, устойчивости и отсутствием паразитных осцилляций в численных решениях за счет использования TVD-ограничителей [5; 6].

## 2. Результаты численного моделирования

Будем рассматривать три режима натекания неравновесного химически активного газа: дозвуковой с числом Маха  $M < 1$ , околосзвуковой  $M = 1$  и сверхзвуковой  $M > 1$ . Далее будем использовать безразмерные параметры, определенные в [5; 6]. Базовые фиксированные значения безразмерных параметров численной модели зададим в виде [4–6]:  $\gamma = 1,4$ ,  $C_v = 0,0888$ ,  $S_0 = 0,5$ ,  $\bar{\tau}_0^{(a)} = 1$ ,  $\bar{\mu}_0 = \bar{\chi}_0 = 10^{-4}$ ,  $\tau_\rho = -1$ ,  $\tau_T = -4,3333$ ,  $Q_\rho^{(a,s)} = 0$ ,  $Q_T^{(s)} = 0$ ,  $Q_T^{(a)} = 10$ ,  $Q_Y^{(a)} = 1$ ,  $\Lambda_\rho = 0$ ,  $\Lambda_T = 1,4286$ . Варьируемые параметры численной модели: число Маха  $M = \{0,5; 1; 2\}$ ; доля химического энерговыделения в общей мощности нагрева  $\beta = \{0; 0,5\}$ . Расчетную область  $\bar{x} \in [0, \bar{L}]$  ( $\bar{L} = 500$ ) покроем сеткой с размером ячеек  $\bar{h} = \bar{L}/N$ , где количество ячеек  $N = 5 \times 10^4$ . Выбранное пространственное разрешение ( $\bar{h} = 0,01$ ) позволяет детально исследовать структуру ударных волн (УВ) и мелкомасштабных неустойчивых возмущений, генерируемых фронтом УВ. Даже для самых мелкомасштабных неустойчивых гармоник, возникающих в численных экспериментах, количество ячеек, приходящихся на длину волну, оказывается больше 50. Твердая стенка расположена в точке  $\bar{x} = 0$ , а газ натекает на нее справа со скоростью  $\bar{u}_0 = -M$ .

### 2.1. Нелинейная динамика акустической неустойчивости в неравновесном химически активном газе

В обычной равновесной и диссипативной среде при дозвуковом натекании газа на препятствие нелинейные волновые структуры с ударными волнами не образуются, а

образуется только некоторое гладкое возмущение в виде звуковой волны, которое затухает при удалении от твердой стенки. В неравновесном колебательно-возбужденном газе, параметры которого допускают развитие акустической неустойчивости [1; 4; 8], ситуация кардинально меняется. Начальное звуковое возмущение быстро эволюционирует в ударную волну, за счет развития акустической неустойчивости, что отражено на рисунке 1 при  $\bar{t} = 20$ . Далее фронт этой ударной волны начинает генерировать возмущения конечной амплитуды, которые, также за счет развития акустической неустойчивости, эволюционируют в систему ударно-волновых импульсов (УВИ) [5; 6] (рис. 1 при  $\bar{t} = 500$  и  $\bar{t} = 390$ ).

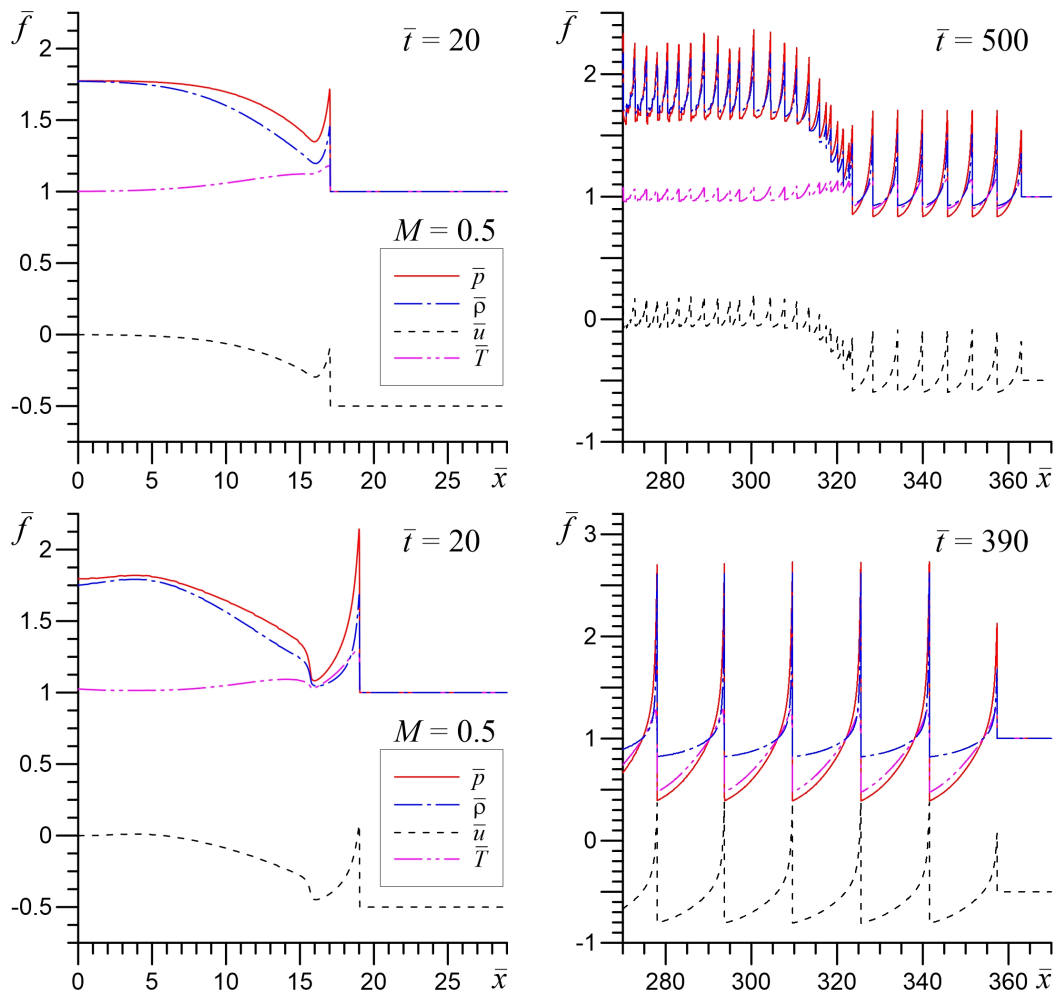


Рис. 1. Структура ударных волн при начальной скорости натекания газа  $M = 0,5$  в различные моменты времени. Верхний ряд соответствует модели без учета химических реакций ( $\beta = 0$ ), а нижний ряд — при  $\beta = 0,5$

На рисунке 1 показана динамика образования УВИ как для модели без учета химической активности газа ( $\beta = 0$ ), так и для модели с учетом химических реакций ( $\beta = 0,5$ ). Видно, что в неравновесном химически активном газе происходит существенное усиление акустической неустойчивости и на конечной нелинейной стадии ее эволюции формируются ударно-волновые импульсы с интенсивностью в 2–2,5 раза больше,

чем без учета химических реакций. При этом пространственный масштаб (расстояние между фронтами) УВИ также увеличивается в 2–2,5 раза. Скорость распространения УВИ (скорость первого фронта волнового пакета) относительно невозмущенного газа составляет  $\bar{u}_{sh} \simeq 1,22$  для модели с  $\beta = 0$  и  $\bar{u}_{sh} \simeq 1,44$  при  $\beta = 0,5$ , то есть натекание газа на фронт УВИ происходит со сверхзвуковой скоростью. Увеличение интенсивности и пространственного масштаба УВИ в неравновесном химически активном газе обусловлено усилением акустической неустойчивости при учете химических реакций. Наибольший эффект увеличения акустического инкремента происходит на частотах  $\bar{\omega} \sim 1$  [4], чем и обусловлено увеличение пространственного масштаба УВИ.

## 2.2. Структура и устойчивость ударных волн в неравновесном химически активном газе

В обычной равновесной и диссипативной среде при околосзвуковом и сверхзвуковом натекании газа на препятствие происходит образование ударных волн, которые распространяются от твердой стенки с практически неизменной формой, а за фронтом УВ устанавливается стационарное течение. При околосзвуковых режимах натекания образуются слабые ударные волны  $M \sim 1,01–1,05$ . Для околосзвуковых и сверхзвуковых режимов натекания в неравновесном колебательно-возбужденном газе, параметры которого допускают развитие акустической неустойчивости [1; 4; 8], ситуация также кардинально меняется. На фронте ударной волны, образовавшейся за счет газодинамических процессов, формируется характерный пик, обусловленный развитием акустической неустойчивости (рис. 2 при  $\bar{t} = 30$ ). Далее фронт ударной волны с этим пиком начинает генерировать звуковые волны, которые также за счет развития акустической неустойчивости эволюционируют в систему УВИ [5; 6], которая формируется за фронтом головной ударной волны (см. рис. 2 при  $\bar{t} = 223$ ).

На рисунке 2 показана динамика и структура ударных волн для случая околосзвукового натекания газа  $M = 1$  в моделях без учета химической активности газа ( $\beta = 0$ ) и с учетом химических реакций ( $\beta = 0,5$ ). Видно, что в неравновесном химически активном газе происходит существенное усиление акустической неустойчивости за фронтом головной ударной волны, что на конечной нелинейной стадии ее эволюции приводит к образованию более интенсивной системы УВИ с амплитудой в 2–5 раз больше, чем без учета химических реакций. Пространственный масштаб УВИ также увеличивается в 2–5 раз. Скорость распространения головной ударной волны относительно невозмущенного газа незначительно возрастает при учете химической активности среды. Так, при  $\beta = 0$  она составляет  $\bar{u}_{sh} \simeq 1,48$ , а при  $\beta = 0,5$  имеем  $\bar{u}_{sh} \simeq 1,5$ . Также как и для случая дозвукового натекания увеличение интенсивности и пространственного масштаба УВИ за фронтом головной ударной волны связано с более высоким значением акустического инкремента в неравновесном химически активном газе на частотах  $\bar{\omega} \sim 1$  [4].

На рисунке 3 показана динамика и структура ударных волн для случая сверхзвукового натекания газа  $M = 2$  в моделях без учета химической активности газа ( $\beta = 0$ ) и с учетом химических реакций ( $\beta = 0,5$ ). Видно, что при сверхзвуковом режиме натекания образуется ударная волна с большей амплитудой, характерный пик на фронте УВ, обусловленный акустической неустойчивостью, становится существенно меньше как по интенсивности, так и по пространственному масштабу (рис. 3 при  $\bar{t} = 50$ ). В этом численном эксперименте скорость распространения головной ударной волны относительно невозмущенного газа составляет  $\bar{u}_{sh} \simeq 2,31$ .

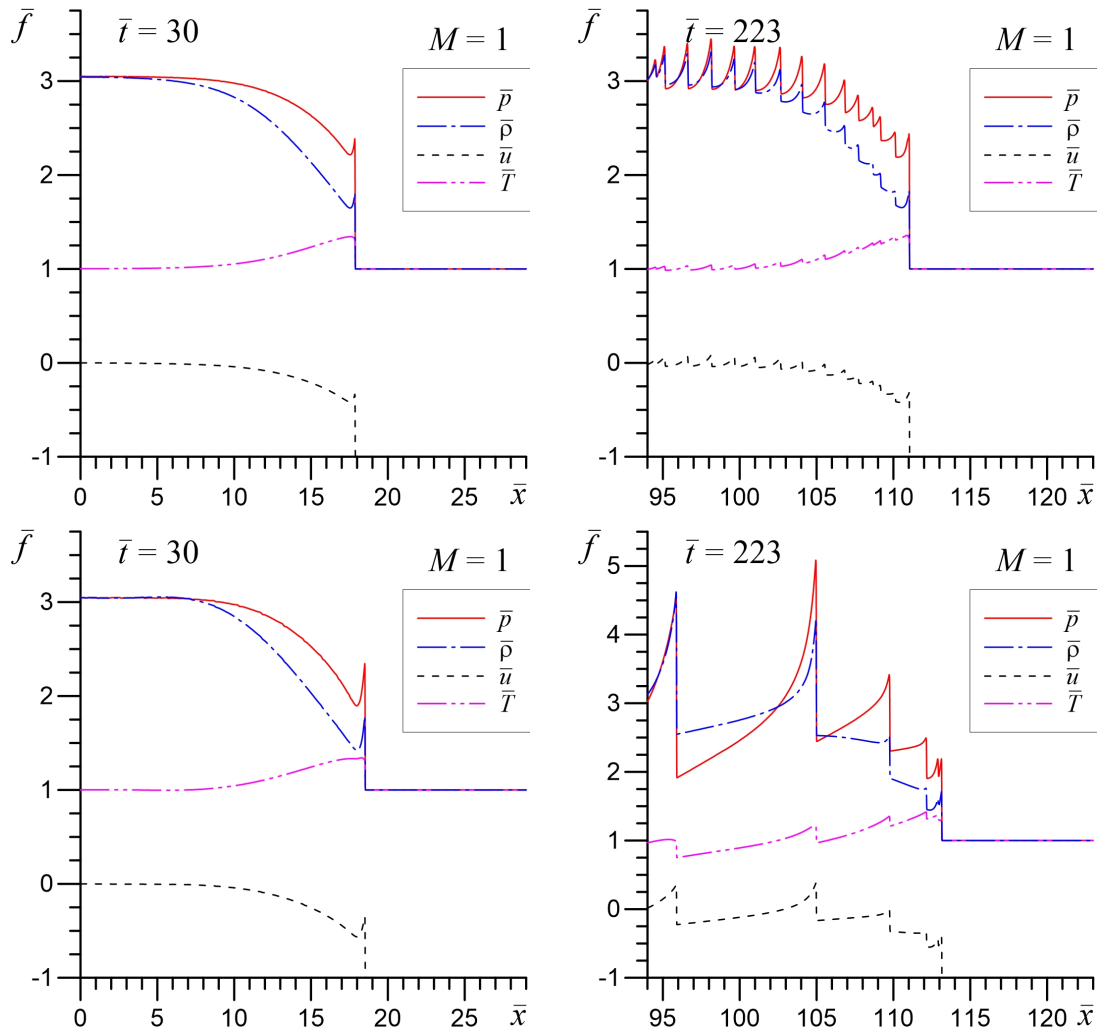


Рис. 2. Структура ударных волн при начальной скорости натекающего газа  $M = 1$  в различные моменты времени. Верхний ряд соответствует модели без учета химических реакций ( $\beta = 0$ ), а нижний ряд — при  $\beta = 0,5$

Последующая эволюция структуры ударных волн сильно зависит от параметра  $\beta$ . Так, при  $\beta = 0$  к моменту времени  $\bar{t} = 350$  за фронтом головной ударной волны образуется мелкомасштабная волновая структура с относительной амплитудой возмущений  $\sim 10\%$ , то есть происходит существенное уменьшение акустического инкремента. В модели с учетом химической активности газа  $\beta = 0,5$  при  $M = 2$  стабилизация (уменьшение инкремента) неустойчивости не происходит и также за фронтом головной УВ формируется система интенсивных УВИ с большим пространственным масштабом. Дальнейшее увеличение числа Маха в натекающем газе приводит к полной стабилизации неустойчивости акустического типа за фронтом головной УВ при  $M > M_{crit}$ . Для модели с  $\beta = 0$  критическое число Маха составляет  $M_{crit} \approx 3$ , а для модели с  $\beta = 0,5$  имеем  $M_{crit} \approx 7$ . Величина  $M_{crit}$  возрастает с увеличением начальной степени неравновесности  $S_0$ .

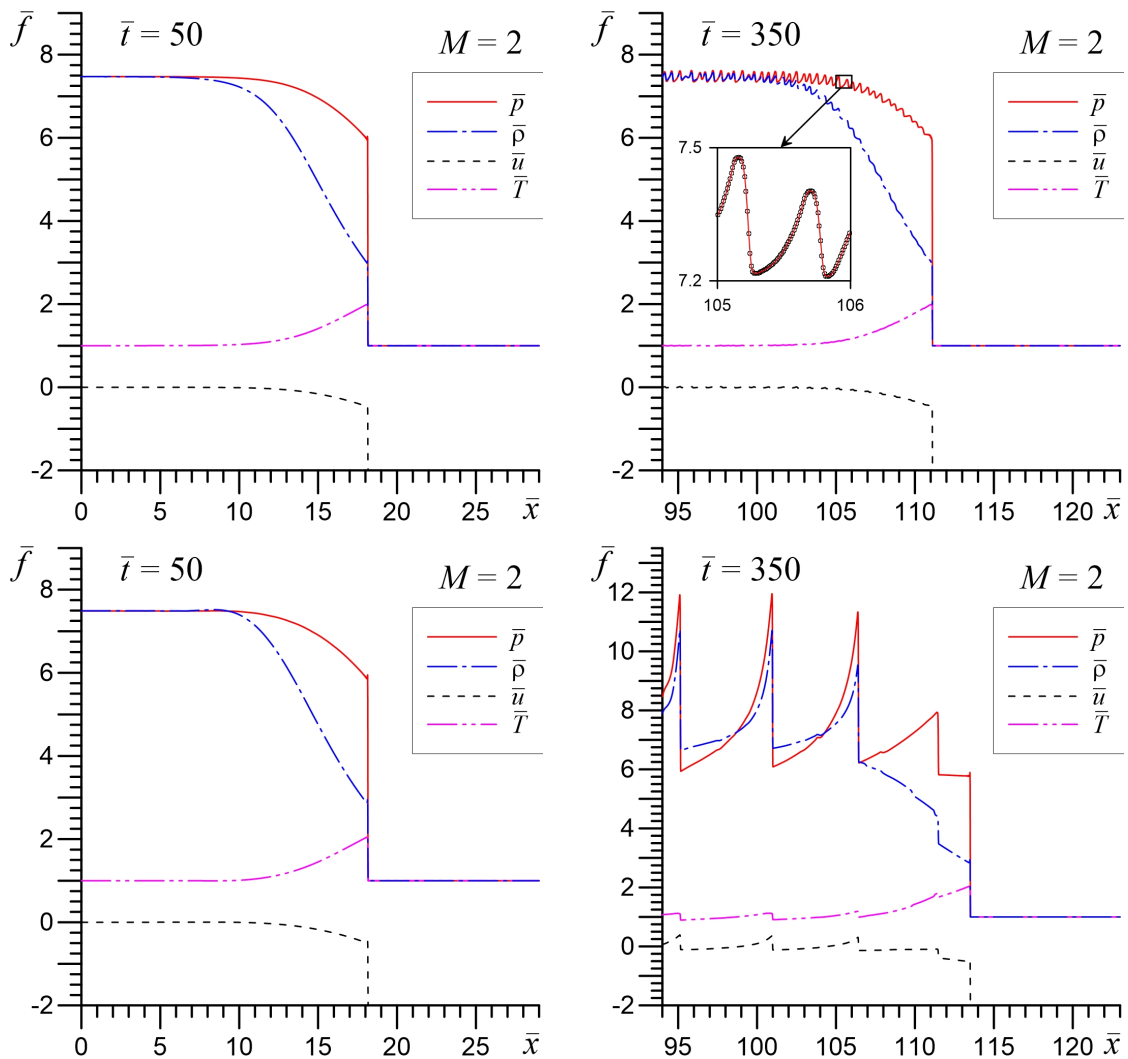


Рис. 3. Структура ударных волн при начальной скорости натекания газа  $M = 2$  в различные моменты времени. Верхний ряд соответствует модели без учета химических реакций ( $\beta = 0$ ), а нижний ряд — при  $\beta = 0,5$ . На врезке показана структура мелкомасштабных неустойчивых гармоник, генерируемых фронтом УВ, узлы расчетной сетки отмечены точками

### Заключение

Сформулируем основные результаты работы:

- 1) Построена обобщенная численная модель динамики неравновесного колебательно-возбужденного газа с учетом вязкости, теплопроводности и химических реакций. В обобщенной модели добавилось новое уравнение динамики химически активного реагента, а в уравнении баланса энергии удельная мощность нагрева дополнена новым слагаемым, учитывающим нагрев газа за счет химических реакций.
- 2) Разработан программный комплекс для моделирования динамики неравновесных химически активных сред, который основан на газодинамических методах сквоз-

ного счета CSPH-TVD/MUSCL и предназначен как для исследования нелинейной динамики акустической неустойчивости, так и для изучения структуры и устойчивости ударных волн в неравновесных химически активных средах.

- 3) Исследовано влияние химической активности в неравновесном колебательно-возбужденном газе на нелинейную динамику акустической неустойчивости. Показано, что учет химических реакций в неравновесном газе приводит к усилению акустической неустойчивости и в результате на конечной нелинейной стадии формируются ударно-волновые импульсы (УВИ) более высокой интенсивности и с большим пространственным масштабом. Увеличение интенсивности и пространственного масштаба УВИ связано с более высокими значениями акустического инкремента на частотах  $\omega\tau \sim 1$  по сравнению с моделями без учета химических реакций.
- 4) Проведено численное моделирование ударных волн в неравновесном колебательно-возбужденном газе с учетом химических реакций, вязкости, теплопроводности, нагрева и охлаждения. Исследована структура и устойчивость ударных волн (УВ) различной интенсивности (от слабых УВ с числом Маха  $M < 1,01$  до сильных УВ с  $M > 10$ ). Показано, что ударные волны в неравновесном колебательно-возбужденном газе оказываются неустойчивыми, то есть за фронтом УВ происходит генерация неустойчивых возмущений, амплитуда которых с течением времени нарастает, достигая нелинейного насыщения. С увеличением числа Маха амплитуда и пространственный масштаб формируемых на нелинейной стадии развития неустойчивости волновых структур за фронтом УВ уменьшаются. При больших значениях числа Маха  $M > M_{crit}$  происходит стабилизация неустойчивости и УВ становятся устойчивыми. Величина  $M_{crit}$  увеличивается с ростом степени неравновесности  $S_0$  и при учете химических реакций. Кроме того, учет химической активности приводит к увеличению как максимальной амплитуды, так и пространственного масштаба волновых структур, образующихся за фронтом УВ на нелинейной стадии развития неустойчивости.
- 5) Разработана численная модель, которая является аналогом нелинейного акустического уравнения, описывающего динамику возмущений конечной амплитуды в химически активной неравновесной среде с учетом квадратичных поправок. Данная модель строилась на основе базовой численной модели посредством исключения в выражениях для потока импульса и энергии кубических поправок относительно возмущенных величин ( $\sim \tilde{\rho} \tilde{u}^2$ ), а также замены функций общего вида  $f(\rho, T)$  для времени колебательной релаксации, скорости химической реакции, мощности нагрева и охлаждения квадратичной аппроксимацией с параметрами  $f_\rho, f_T, f_{\rho\rho}, f_{TT}$ . Преимуществом данного подхода является универсальность и использование хорошо апробированных численных газодинамических методов, обладающих важными свойствами, такими как консервативность, устойчивость, точность и отсутствие паразитных осцилляций за счет применения TVD-ограничителей. В дальнейшем построенная модель нелинейного акустического уравнения может быть использована для оценок точности и определения границ применимости квадратичного приближения, которое широко используется для анализа волновых структур (структуры слабых УВ) в различных средах.



## ПРИМЕЧАНИЕ

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (РНФ) № 23-21-00401, <https://rscf.ru/project/23-21-00401/>.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Динамика малых возмущений в неравновесном колебательно-возбужденном газе / С. С. Храпов, Г. С. Иванченко, В. П. Радченко, И. С. Маковеев // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2023. — Т. 26, № 4. — С. 83–105. — DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.4.7>
2. Макарян, В. Г. Структура слабых ударных волн в стационарно неравновесной среде / В. Г. Макарян, Н. Е. Молевич // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2005. — Т. 3. — Article ID: <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/84>.
3. Молевич, Н. Е. Автоволновой импульс в среде с дисбалансом между тепловыделением и теплоотводом при произвольной величине тепловой дисперсии / Н. Е. Молевич, Д. С. Рящиков // Письма в Журнал технической физики. — 2020. — Т. 46, № 7. — С. 637–640.
4. Храпов, С. С. Газодинамические неустойчивости в неравновесной химически активной среде / С. С. Храпов // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2024. — Т. 27, № 1. — С. 26–44. — DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2024.1.3>
5. Храпов, С. С. Нелинейная динамика акустической неустойчивости в колебательно-возбужденном газе: влияние нагрева и охлаждения / С. С. Храпов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. — 2023. — Т. 24, № 6. — Article ID: <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-6/articles/1059>. — DOI: <http://doi.org/10.33257/PhChGD.24.6.1059>
6. Численное моделирование акустической неустойчивости в неравновесном колебательно-возбужденном газе / С. С. Храпов, Г. С. Иванченко, В. П. Радченко, А. В. Титов // Журнал технической физики. — 2023. — Т. 93, № 12. — С. 1727–1731.
7. General Nonlinear Acoustical Equation of Relaxing Media and Its Stationary Solutions / N. E. Molevich, R. N. Galimov, V. G. Makaryan, D. I. Zavershinskiy // The Journal of the Acoustical Society of America. — 2013. — Vol. 133, № 5. — Article ID: 3555.
8. Khrapov, S. S. Instability of Sound Waves in a Nonequilibrium Vibrational Excited Gas: Linear Dynamics / S. S. Khrapov. — Preprint ResearchGate. — Electronic text data. — Mode of access: <https://www.researchgate.net/publication/374582690>. — Title from screen. — DOI: <http://doi.org/10.13140/RG.2.2.18683.28965>
9. Makaryan, V. G. Stationary Shock Waves in Nonequilibrium Media / V. G. Makaryan, N. E. Molevich // Plasma Sources Science and Technology. — 2007. — Vol. 16, № 1. — P. 124–131.
10. Zavershinskiy, D. I. Numerical Simulations of Evolution of Weak Disturbances in Vibrationally Excited Gas / D. I. Zavershinskiy, V. G. Makaryan, N. E. Molevich // The Journal of the Acoustical Society of America. — 2013. — Vol. 133, iss. 5. — Article ID: 3328. — DOI: <https://doi.org/10.1121/1.4805578>
11. Zavershinskiy, D. I. Overstability of Acoustic Waves in Heat-Releasing Gaseous Media / D. I. Zavershinskiy, N. E. Molevich, S. et al Belov // AIP Conference Proceedings. — 2020. — Vol. 2304, iss. 1. — Article ID: 020028. — DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0034849>

## REFERENCES

1. Khrapov S.S., Ivanchenko G.S., Radchenko V.P., Makoveev I.S. Dinamika malykh vozmushcheniy v neravnovesnom kolebatelno-vozbuzhdennom gaze [Dynamics of Small

Perturbations in a Nonequilibrium Vibrationally Excited Gas]. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie* [Mathematical Physics and Computer Simulation], 2023, vol. 26, no. 4, pp. 83-105. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.4.7>

2. Makaryan V.G., Molevich N.E. Struktura slabykh udarnykh voln v statsionarno neravnesnoy srede [Weak Shock Waves in Negative-Dispersion Nonequilibrium Media]. *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoy dinamike*, 2005, vol. 3, article ID: <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/84>.

3. Molevich N.E., Ryashchikov D.S. Avtovolnovoy impuls v srede s disbalansom mezhdru teplovydeleniem i teplotvodom pri proizvolnoy velichine teplovy dispersii [Autowave Pulse in a Medium with the Heating/Cooling Misbalance and an Arbitrary Thermal Dispersion]. *Pisma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Technical Physics Letters], 2020, vol. 46, no. 7, pp. 637-640.

4. Khrapov S.S. Gazodinamicheskie neustoychivosti v neravnesnoy khimicheski aktivnoy srede [Gas-Dynamic Instabilities in a Nonequilibrium Chemically Active Medium]. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie* [Mathematical Physics and Computer Simulation], 2024, vol. 27, no. 1, pp. 26-44. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2024.1.3>

5. Khrapov S.S. Nelineynaya dinamika akusticheskoy neustoychivosti v kolebatelno-vozbuzhdennoy gaze: vliyanie nagreva i okhlazhdeniya [Nonlinear Dynamics of Acoustic Instability in a Vibrationally Excited Gas: Influence of Heating and Cooling]. *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoy dinamike*, 2023, vol. 24, no. 6, article ID: <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-6/articles/1059>. DOI: <http://doi.org/10.33257/PhChGD.24.6.1059>

6. Khrapov S.S., Ivanchenko G.S., Radchenko V.P., Titov A.V. Chislennoe modelirovanie akusticheskoy neustoychivosti v neravnesnoy kolebatelno-vozbuzhdennoy gaze [Numerical Simulation of Acoustic Instability in a Nonequilibrium Vibrationally Excited Gas]. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki* [Technical Physics], 2023, vol. 93, no. 12, pp. 1727-1731.

7. Molevich N.E., Galimov R.N., Makaryan V.G., Zavershinskiy D.I. General Nonlinear Acoustical Equation of Relaxing Media and Its Stationary Solutions. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2013, vol. 133, no. 5, article ID: 3555.

8. Khrapov S.S. Instability of Sound Waves in a Nonequilibrium Vibrationally Excited Gas: Linear Dynamics. *Preprint ResearchGate*. URL: <https://www.researchgate.net/publication/374582690>. DOI: <http://doi.org/10.13140/RG.2.2.18683.28965>

9. Makaryan V.G., Molevich N.E. Stationary Shock Waves in Nonequilibrium Media. *Plasma Sources Science and Technology*, 2007, vol. 16, no. 1, pp. 124-131.

10. Zavershinskiy D.I., Makaryan V.G., Molevich N.E. Numerical Simulations of Evolution of Weak Disturbances in Vibrationally Excited Gas. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2013, vol. 133, iss. 5, article ID: 3328. DOI: <https://doi.org/10.1121/1.4805578>

11. Zavershinskiy D.I., Molevich N.E., Belov S.etal Overstability of Acoustic Waves in Heat-Releasing Gaseous Media. *AIP Conference Proceedings*, 2020, vol. 2304, iss. 1, article ID: 020028. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0034849>

## NUMERICAL MODELING OF SHOCK WAVES IN A NONEQUILIBRIUM REACTIVE GAS

**Sergey S. Khrapov**

Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Associate Professor,  
Department of Information Systems and Computer Modeling,  
Vologograd State University  
khrapov@volsu.ru  
<https://orcid.org/0000-0003-2660-2491>  
Prosp. Universitetsky, 100, 400062 Volgograd, Russian Federation

**Abstract.** The nonlinear dynamics of unstable sound waves in a nonequilibrium vibrationally excited gas is considered, taking into account viscosity, thermal conductivity, chemical reactions and arbitrary dependences of the relaxation time, heating and cooling functions on density and temperature. A numerical model has been constructed and a software package has been developed, based on the gas-dynamic methods of end-to-end calculation CSPH-TVD/MUSCL, to study the linear and nonlinear stages of the development of acoustic instability in a nonequilibrium chemically active gas with different models of relaxation, heating and cooling times. The numerical model has high spatial resolution and second order accuracy. The influence of chemical activity in a nonequilibrium vibrationally excited gas on the nonlinear dynamics of acoustic instability has been studied. It is shown that taking into account chemical reactions in a nonequilibrium gas leads to an increase in acoustic instability and, as a result, at the final nonlinear stage, shock wave pulses of higher intensity and with a larger spatial scale are formed. The structure and stability of shock waves (SW) of various intensities have been studied. It is shown that shock waves in a nonequilibrium vibrationally excited gas turn out to be unstable, i.e. SW the shock front, unstable disturbances are generated, the amplitude of which increases over time, reaching nonlinear saturation.

**Key words:** nonequilibrium gas, vibrational relaxation, chemical reactions, shock waves, CSPH-TVD numerical method, nonlinear acoustic equation.