

УДК 533.6.011.8

© 2002 г. С.Л. ГОРЕЛОВ, С.В. РУСАКОВ

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГИПЕРЗВУКОВОГО ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ РАЗРЕЖЕННЫМ ГАЗОМ

Методом прямого статистического моделирования исследуется влияние внутренних степеней свободы молекул на поле течения и теплопередачу при обтекании цилиндра и сферы гиперзвуковым потоком разреженного газа. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра (VRS-модель) обобщена на случай обмена энергией между поступательными и колебательными степенями свободы. Взаимодействие двухатомных молекул с учетом колебательных степеней свободы моделируется как взаимодействие классических или квантовомеханических гармонических и ангармонических осцилляторов в приближении внешней силы. Предлагается модель диссоциации двухатомного газа.

Ключевые слова: статистическое моделирование, гиперзвуковой поток, разреженный двухатомный газ.

Область приложений численных методов газовой динамики быстро расширяется, включая задачи расчета параметров обтекания рикошетирующих летательных аппаратов, изменяющих орбиту за счет торможения в верхних слоях атмосферы; трансатмосферных летательных аппаратов с достаточно большой боковой дальностью, взлетающих с Земли или с обычного самолета и спускающихся с низкой околоземной орбиты, и гиперзвуковых самолетов с прямоточными двигателями, использующими сверхзвуковое горение. Общей для перечисленных приложений является необходимость учета неравновесного характера течения газа на определенном этапе полета. Хотя большинство проектируемых гиперзвуковых летательных аппаратов будет совершать маневры на режиме континуального обтекания (на этом режиме достигаются и максимальные значения потоков тепла), течение вблизи некоторых элементов, в частности передних кромок и носовой части, может происходить при значительно меньших числах Рейнольдса, то есть в режиме, переходном между континуальным и свободномолекулярным. Для решения подобных задач широко применяется один из вариантов метода Монте-Карло – метод прямого статистического моделирования. Успех в применении метода обуславливается простотой используемых моделей взаимодействия между молекулами в потоке и взаимодействия молекул с поверхностью летательного аппарата.

Для расчета аэродинамических сил, действующих на гиперзвуковые летательные аппараты в переходном режиме обтекания, и определения возникающих при этом тепловых потоков используются искусственные модели молекул и межмолекулярного взаимодействия, отражающие характерные особенности реальных молекул и взаимодействий. В этом контексте и следует понимать предлагаемые ниже модели для описания процессов возбуждения вращательных и колебательных состояний молекул, а также диссоциации при энергиях молекул около 10 эВ.

Экспериментальные и теоретические исследования, касающиеся межмолекулярного взаимодействия, проведены достаточно подробно только в случае атомов благородных газов при энергиях, меньших 0.1 и больших 100 эВ. В диапазоне энергий от 1

до 10 эВ (скорости молекул от 2.5 до 8 км/с) отсутствует достаточно обоснованная информация о потенциале межмолекулярного взаимодействия даже простейших атомных систем. Что касается двухатомных и многоатомных молекул, то здесь, несмотря на большое число исследований, касающихся вероятностей вращательных и колебательных переходов, почти полностью отсутствует информация в диапазоне энергий от 1 до 10 эВ, представляющем интерес для задач современной гиперзвуковой аэродинамики. В этом диапазоне энергий происходят сложные процессы неупругого взаимодействия между молекулами, включающие возбуждение вращательных и колебательных состояний молекул, взаимодействие между этими состояниями, частичное возбуждение электронных состояний молекул, а также процессы диссоциации и рекомбинации.

Положение значительно усугубляется при рассмотрении в указанном выше диапазоне энергий взаимодействия атомов и молекул с поверхностью в случаях, когда следует учитывать химические реакции на поверхности.

1. Моделирование обмена вращательной энергией. Рассматриваются абсолютно шероховатые сферически симметричные молекулы массой $M = 2m$, где m – масса атома. Обмен вращательной энергией осуществляется с помощью VRS-модели [1, 2], а колебательной энергией – на основе модели классического или квантовомеханического гармонического осциллятора в приближении внешней силы [3].

Молекулы сталкиваются таким образом, что ориентация их осей совпадает с линией центров в момент столкновения, направление которой задается вектором \mathbf{k} . Импульс \mathbf{J} , передаваемый от одной молекулы к другой, и скорости молекул при столкновении \mathbf{V}_α можно разложить на две составляющие, направленные по линии центров \mathbf{J}_2 и $\boldsymbol{\eta}_\alpha$ и перпендикулярные ей \mathbf{J}_1 и $\boldsymbol{\eta}_\alpha$, где $\alpha = 1, 2$. Имеем

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2, \quad \mathbf{J}_1 = [\mathbf{k} \times [\mathbf{J} \times \mathbf{k}]], \quad \mathbf{J}_2 = (\mathbf{J}\mathbf{k})\mathbf{k}, \quad \mathbf{V}_\alpha = \boldsymbol{\eta}_\alpha + \boldsymbol{\xi}_\alpha$$

В таких предположениях импульс \mathbf{J}_1 участвует лишь в обмене вращательной энергией, а импульс \mathbf{J}_2 – лишь в обмене колебательной энергией.

Для случая обмена вращательной энергии можно записать

$$\boldsymbol{\eta}'_\alpha = \boldsymbol{\eta}_\alpha \mp \frac{\mathbf{J}_1}{M}, \quad \boldsymbol{\omega}'_\alpha = \boldsymbol{\omega}_\alpha - [\mathbf{k} \times \mathbf{J}_1] \frac{d}{2I}$$

$$\mathbf{S}_r = \boldsymbol{\eta}_2 - \boldsymbol{\eta}_1 + [\mathbf{k} \times (\boldsymbol{\omega}_1 + \boldsymbol{\omega}_2)] \frac{d}{2}, \quad \mathbf{S}_r = -\mathbf{S}'_r$$

Здесь \mathbf{S}_r – относительная скорость молекул в точке касания сфер в момент столкновения (в силу абсолютной шероховатости в момент столкновения она меняет знак на противоположный), $\boldsymbol{\omega}_\alpha$ – угловые скорости молекул, d – диаметр сферы, I – момент инерции молекул. Решая эти уравнения [1, 2], получаем выражение

$$\mathbf{J}_1 = -M \frac{f}{1+f} \mathbf{S}_r \tag{1.1}$$

Здесь $f = (d_1/d)^2$ – параметр модели [2], d_1 – расстояние между атомами. В случае обмена энергией с учетом колебательных степеней свободы законы сохранения импульса и энергии запишутся в виде

$$\boldsymbol{\xi}'_\alpha = \boldsymbol{\xi}_\alpha \mp \frac{\mathbf{J}_2}{M}, \quad \frac{M}{2} (\xi_1^2 + \xi_2^2) = \frac{M}{2} (\xi_1'^2 + \xi_2'^2) + \Delta E_1 + \Delta E_2 \tag{1.2}$$

где ΔE_α – изменение колебательной энергии α -молекулы при столкновении.

2. Моделирование обмена колебательной энергией. В модели предполагается, что бесструктурная частица, налетая на молекулу, действует на нее с силой $F(t)$. Под действием этой силы происходят вынужденные колебания гармонического осцил-

лятора. Уравнение для вынужденных колебаний под действием внешней силы имеет вид

$$\dot{x} + \omega x = -\frac{F(t)}{m}$$

с начальной энергией осциллятора при $t = -\infty$: $E \equiv m(\dot{x} + \omega^2 x^2)/2 = E_0$. Здесь ω – частота собственных колебаний осциллятора, x – отклонение внутренней координаты атома от положения равновесия. В результате решения этого уравнения получаем

$$\xi = \exp(i\omega t) \left\{ \int_{-\infty}^t \frac{F(t)}{m} \exp(-i\omega t) dt + \xi_0 \right\}, \quad \xi = \dot{x} + i\omega x \quad (2.1)$$

Для нахождения колебательной энергии $E = m\xi^2/2$ необходимо конкретизировать вид внешней силы $F(t)$. В качестве модельной используем силу вида $F(t) = F_0 \text{ch}^{-2} at$, что соответствует потенциалу экспоненциального отталкивания. Параметр F_0 связан с импульсом J_2 известным соотношением

$$J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} F(t) dt = \frac{2F_0}{a} \quad (2.2)$$

Интегрируя (2.1) и используя (2.2) для J_2 , получаем

$$J_2 = -Mk \left((kg) + \frac{A}{2} \Delta \epsilon \right) \left(1 + \frac{A^2}{2} \right)^{-1} \quad (2.3)$$

$$A = \frac{\pi\omega}{a} \text{sh}^{-2} \frac{\pi\omega}{2a}, \quad \Delta \epsilon = \dot{x}_{01} + \dot{x}_{02}, \quad \dot{x}_0 = \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \sin(\omega t + \varphi_0)$$

где φ_0 – начальная фаза, $\mathbf{g} = \mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1$ – относительная скорость молекул при столкновении, \dot{x}_0 – скорость колебания атома, E_0 – колебательная энергия молекулы. Параметр A находится из уравнения

$$\frac{A^2/2}{(1+A^2/2)^2} = C(T) \left(\frac{Mg^2}{2kT} \right)^{a_1/2} \exp\left(-a_2 \frac{Mg^2}{2kT}\right) \equiv \Phi \quad (2.4)$$

Функция $C(T)$, параметры a_1 и a_2 определяются из уравнений

$$\langle \Delta E \rangle = 0, \quad Z_V = \frac{k\theta}{\langle \Delta E \rangle_{E_0=0} (\exp(\theta/T) - 1)} \quad (2.5)$$

Здесь $\langle \Delta E \rangle$ – средняя энергия обмена между поступательными и колебательными степенями свободы в равновесии на одну молекулу, Z_V – отношение времен релаксации колебательных и поступательных степеней свободы [5], k – постоянная Больцмана, $\theta = \hbar\omega/k$ – характеристическая температура.

Изменение энергии гармонического осциллятора при столкновении $\Delta E = m\xi_1^2/2 - E_{01}$, тогда

$$\Delta E = \frac{\Delta E_1 + \Delta E_2}{2} = M \frac{\Phi}{2} \left\{ (kg)^2 - \frac{1}{2} \Delta \epsilon^2 - \Delta \epsilon (kg) \left(\frac{1}{A} - \frac{A}{2} \right) \right\} \quad (2.6)$$

Если провести усреднение по фазе осциллятора, входящей в $\Delta \epsilon$, и по углу между векторами \mathbf{k} и \mathbf{g} , то (2.6) принимает вид

$$\Delta E = M \frac{\Phi}{2} \left\{ \frac{1}{3} \mathbf{g}^2 - \frac{E_{01} + E_{02}}{M} \right\} \quad (2.7)$$

Окончательно получаем среднюю энергию обмена между поступательными и колебательными степенями свободы, усредняя величину ΔE по равновесным функциям распределения внутренней энергии и относительной скорости

$$\langle \Delta E \rangle = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \Delta E f_{gv} dg f_E dE$$

$$f_{gv} = \frac{2}{\Gamma(2-2/\nu)} \left(\frac{4kT}{M} \right)^{2/\nu-2} g^{3-4/\nu} \exp\left(-\frac{Mg^2}{4kT}\right) \quad (2.8)$$

$$f_E = \frac{1}{\Gamma(\xi/2)} (kT)^{-\xi/2} E^{\xi/2-1} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

Здесь f_{gv} – распределение относительной скорости молекул после столкновения, f_E – распределение внутренней энергии квантового гармонического осциллятора, имеющего $\xi(T)$ эффективных степеней свободы [4]

$$\xi(T) = \frac{2\theta/T}{\exp(\theta/T) - 1} \quad (2.9)$$

В результате решения уравнений (2.5) получаем

$$C(T) = \frac{2\theta/T \Gamma(2-2/\nu)}{Z_\nu(T) (\exp(\theta/T) - 1) 2^{\gamma_1} \Gamma(a_1 + 3 - 2/\nu)} (1 + 2a_2)^{\gamma_2} \left(\frac{Mg^2}{2kT} \right)^{a_1/2} \exp\left(-a_2 \frac{Mg^2}{2kT}\right)$$

$$\gamma_1 = 1 + \frac{a_1}{2}, \quad \gamma_2 = \frac{a_1}{2} + 3 - \frac{2}{\nu}, \quad \gamma_2 = \frac{a_1}{2} + 3 - \frac{2}{\nu}, \quad (2.10)$$

$$a_1 = \xi(1 + 2a_2) - 4 \left(1 - \frac{1}{\nu} \right)$$

Аппроксимируя экспериментальные данные по зависимости отношения времен релаксации от температуры [5] и используя VHS-модель [4], найдем

$$Z_\nu(T) = b_1 T^{(1/2+2/\nu)} \exp(b_2 T^{1/3}) \quad (2.11)$$

При высоких температурах используется поправка Парка [6]

$$Z_\nu(T) = Z_\nu(T)_{MW} + b_3 T^{2-2/\nu}$$

Параметр a_2 может быть выбран произвольно. Как показали расчеты, его величина не оказывает влияния на колебательную релаксацию. Целесообразно определить a_2 таким образом, чтобы увеличить температурный диапазон применимости модели, ограничением на применение которой служит условие существования решения уравнения (2.4)

$$\frac{A^2/2}{(1 + A^2/2)^2} = \Phi(T, g, \nu, a_2, \xi(T))$$

которое разрешимо при $\Phi \leq 0.25$.

Предлагается определять a_2 из уравнения, являющегося условием минимума функции Φ по a_2 для максимального значения этой функции по g

$$\frac{\partial}{\partial a_2} \Phi(T, g^*, \nu, a_2, \xi(T)) = 0$$

где g^* является решением уравнения $\partial\Phi/\partial g = 0$.

3. Квантовомеханический гармонический осциллятор. Колебательный импульс J_2 вычисляется из уравнения (1.2)

$$J_2 = -m(kg) + [m^2(kg)^2 - 2m(\Delta E_1 + \Delta E_2)]^{1/2} \quad (3.1)$$

Для нахождения изменения колебательной энергии молекул ΔE_α используется формула Ландау – Теллера [7] для вероятностей перехода гармонического осциллятора

$$P_{n,n+1} = (n+1)P_{0,1}, \quad P_{n,n-1} = nP_{0,1}, \quad P_{0,1} = P_{1,0} \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right) \quad (3.2)$$

Эти вероятности перехода получены в предположении адиабатичности столкновений и справедливы при условии $P_{0,1} \ll 1$ ($P_{0,1}$ – вероятность перехода с нулевого на первый уровень). В этих же предположениях для средней величины энергии, которой обмениваются частицы при условии, что в начальный момент времени все молекулы находятся на нулевом колебательном уровне, можно записать

$$\langle \Delta E \rangle = \hbar\omega P_{0,1} \quad (3.3)$$

С другой стороны, для этой же величины из уравнения релаксации получаем

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{kT}{Z_V(T)} \frac{\xi(T)}{2} \quad (3.4)$$

где ξ определена в (2.9). Приравнявая (3.3) и (3.4), находим $P_{0,1}(T)$

$$P_{0,1}(T) = \frac{1}{Z_V(T)} \frac{1}{\exp(\theta/T) - 1}$$

Осциллятор, находящийся на уровне n , с вероятностью $P_{n,n+1}$ переходит на уровень $n+1$ и его энергия увеличивается на величину $\hbar\omega$, с вероятностью $P_{n,n-1}$ переходит на уровень $n-1$ и его энергия уменьшается на величину $\hbar\omega$, а с вероятностью $P_{n,n} = 1 - (P_{n,n+1} + P_{n,n-1})$ остается на том же колебательном уровне и его энергия не меняется.

Однако в данном варианте модель имеет существенный недостаток – не выполняется условие детального баланса, так как подкоренное выражение в (3.1) может быть отрицательным. Если предположить, что внутренняя энергия не меняется, то нарушается баланс между прямыми и обратными переходами. Чтобы этого не произошло, необходимо увеличить вероятность $P_{n,n+1}$ на некоторый коэффициент q , компенсирующий изменение баланса. Пусть $P_{0,1}^*$ – новое значение вероятности перехода с нулевого на 1-й колебательный уровень с учетом выполнения условия детального баланса. Вероятность $P_{0,1}^*$ связана со старым значением вероятности $P_{0,1}$ параметром q

$$P_{0,1}^* = qP_{0,1} \quad (3.5)$$

Доля частиц α , для которых подкоренное выражение в (3.1) отрицательно, находится по формуле [4]

$$\alpha = 2 \int_0^{\pi/2} \alpha(\varphi) \sin(\varphi) \cos(\varphi) d\varphi, \quad \alpha(\varphi) = \int_0^{g^*} g_{gv} dg, \quad g^* = \sqrt{i2 \frac{k\theta}{m} \frac{1}{\cos \varphi}}$$

Здесь φ – угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{g} ; $i = 1$, если одна частица переходит на более высокий колебательный уровень; $i = 2$, если обе частицы переходят на более высокий колебательный уровень при столкновении, f_{gv} – распределение относительной скорости молекул после столкновения. Вероятность перехода $P_{0,1}^*$ должна удовлетворять условию $P_{01} = P_{01}^* - \alpha P_{01}^*$, которое с учетом (3.5) дает $q = 1/(1 - \alpha)$.

4. Ангармонический осциллятор. Ангармонический осциллятор моделируется с помощью межатомного потенциала Морзе

$$U(r) = D(1 - e^{-\beta r})^2 \quad (4.1)$$

Здесь D – энергия диссоциации, r – отклонение межмолекулярной координаты от равновесного положения. Энергия E_n колебательного уровня n определяется выражением

$$E_n = \hbar\omega n(1 - x_c(n + 1)) \quad (4.2)$$

где $x_c = \theta k/4D$ – параметр ангармоничности. Процесс столкновения молекул будем описывать, так же как и для гармонического осциллятора, но с учетом того, что колебательная энергия молекулы принимает значения (4.2). Это позволяет проделать процедуру коррекции вероятностей перехода для ангармонического осциллятора и использовать для вычисления импульса после столкновения формулу (3.1). Вероятности переходов для ангармонического осциллятора определяются на основе формулы Ландау – Теллера с некоторой поправкой $\beta(T)$ в виде [7]

$$P_{n+1,n} = (n + 1)P_{10}\beta^n(T)$$

Аналогичный подход использован и в данной работе. Эта поправка находится из условия, что вероятность перехода с максимального колебательного уровня N_m на $(N_m + 1)$ равна вероятности диссоциации, вычисленной в рамках простой теории столкновений с помощью константы диссоциации, известной либо из эксперимента, либо из теоретических расчетов. Уравнение убыли числа частиц при диссоциации имеет вид

$$-\frac{dn_2}{dt} = K_D^{12}n_1n_2 + K_D^{22}n_2n_2 \quad (4.3)$$

где K_D^{ij} – константа диссоциации при столкновении i -го сорта молекул с j -м сортом, n_1 – концентрация атомов, n_2 – концентрация молекул. С другой стороны, в рамках теории столкновений, без учета вращательного возбуждения молекул для убыли частиц при диссоциации можно получить уравнение

$$-\frac{dn_2}{dt} = 2X_N N_{22} P_D^{22} + X_N N_{12} P_D^{12} \quad (4.4)$$

Здесь X_N – относительная населенность верхнего колебательного уровня, N_{ij} – количество столкновений между молекулами в единицу времени в единице объема, P_D^{ij} – вероятность диссоциации с верхнего колебательного уровня при столкновении пары (i, j) . Если ввести обозначение $N_{ij} = Z_0^{ij}n_i n_j$ и воспользоваться равенством (4.3) и (4.4), то получим следующее выражение

$$K_D^{ij} = Z_0^{ij} X_N P_D^{ij} \quad (4.5)$$

Константу диссоциации можно найти, решая систему кинетических уравнений, аналогичных уравнениям колебательной релаксации с той только разницей, что на верхнем колебательном уровне будет действовать отрицательный источник, описывающий процесс распада молекул на атомы. Такая система была решена [7] для слабой и равновесной диссоциации, и для K_D^{ij} получено аналитическое выражение

$$K_D^{ij} = Z_0^{ij} \frac{\hbar\omega}{(DKT)^{1/2}} \exp\left(-\frac{D}{kT}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right) \quad (4.6)$$

Вероятность $P_{n,n+1}$ будем искать в виде

$$P_{n,n+1} = (n + 1)(P_{01}(T))^{1+\gamma(T)\sqrt{n}} \quad (4.7)$$

где $\chi(T)$ – неизвестная функция температуры, которая находится из условия: $P_D = P_{N,N+1}$. Как показывают расчеты, в диапазоне температур от 2000 до 8000 К функция $|\chi(T)| \ll 1$ и, следовательно, вероятности перехода близки к линейным при $n \sim 1$, что соответствует приближению Ландау – Теллера. При столкновении молекул происходят переходы между уровнями с вероятностью (4.7), причем с вероятностью $P_{N,N+1}$ молекула будет распадаться на два атома. Однако такая модель не учитывает влияния вращательного возбуждения молекул на диссоциацию. Учет вращательных степеней свободы производится с помощью констант диссоциации, полученных в эксперименте. Пусть K_D – экспериментально определенная константа диссоциации, например для азота из [4] для всех партнеров в столкновении имеем

$$K_D(T) = \frac{1.6 \cdot 10^{-13}}{\sqrt{T}} \exp\left(-\frac{1.56 \cdot 10^{-18}}{kT}\right) \quad (4.8)$$

Так как K_D^j из (4.6) получена для невращающейся молекулы, то часть константы диссоциации, отвечающей за влияние вращений молекулы на диссоциацию, находим как

$$(K_D^j)_R = K_D - K_D^j \quad (4.9)$$

Рассуждая, как и при выводе (4.5), можно получить связь $(K_D^j)_R$ и вероятности диссоциации, обусловленной вращательным возбуждением молекулы

$$(K_D^j)_R = Z_0^j X_R P_R^j \quad (4.10)$$

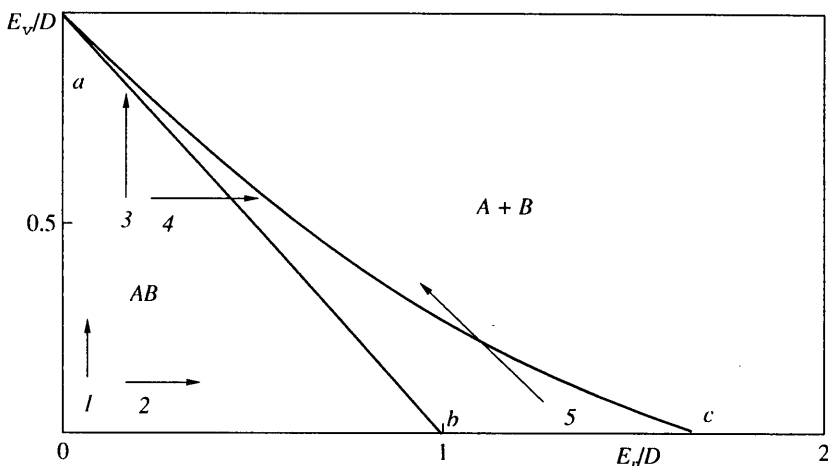
где X_R есть доля молекул, которым позволяет диссоциировать вследствие вращательного возбуждения, P_R^j – вероятность этого распада.

Для определения X_R воспользуемся моделью, предложенной в [7]. Диссоциированные и связанные состояния двухатомной молекулы можно представить изображающими точками на плоскости, координатами на которой служат два интеграла движения пары атомов – полная энергия E и угловой момент J . Вместо этих переменных удобно ввести вращательную энергию неколеблующей молекулы $E_r = j^2 / 2M(r_e)^2$ и колебательную энергию вращающейся молекулы $E_{v,r} = E - E_r$. Для невращающейся молекулы E_v рассчитывается по формуле (4.2) для модели осциллятора Морзе.

На фиг. 1 показана фазовая плоскость молекулы AB . Связанные состояния AB соответствуют части плоскости $(E_{v,r})$ внутри треугольника aob , сторона ab которого совпадает с линией постоянной энергии $E = D$. Диссоциированные состояния отвечают части плоскости, внешней относительно кривой ac . Точки внутри треугольника abc соответствуют метастабильным состояниям с энергией $E > D$. В рамках классического приближения распад из этих состояний закрыт вследствие существования вращательного барьера. Его высота и точка максимума r_m определяются из условия экстремума эффективного потенциала

$$\left. \frac{\partial U_{\text{ef}}}{\partial r} \right|_{r=r_m} = \left. \frac{\partial}{\partial r} \left[U(r) + \frac{j^2}{2Mr^2} \right] \right|_{r=r_m} = 0$$

Результат столкновений молекулы AB с частицей C можно представить как переход изображающей точки из одного фиксированного состояния $(E_{v,r})$ в другое $((E_r)', (E_v)')$. Стрелки 1 и 2 отвечают колебательным и вращательным переходам в стабильной молекуле AB . Стрелка 3 соответствует диссоциации вследствие колеба-



Фиг. 1. Связанные и диссоциированные состояния азота

тельного возбуждения, а стрелка 4 – вследствие вращательного возбуждения. Видно также, что при столкновениях выход из метастабильной области возможен при сохранении полной энергии молекулы (стрелка 5), если вращательно-возбужденная молекула теряет значительную долю собственного углового момента, которая уносится в виде углового момента относительного движения.

Доля молекул, которые могут диссоциировать, X_D определится интегрированием по части плоскости $(E_{v,r})$, лежащей выше кривой ac

$$X_D = \sum_{k=0}^{N_m} \exp\left(\frac{-E_R}{rT}\right) \int_{F(E_k)}^{\infty} \exp\left(\frac{-E_R}{kT}\right) \frac{dE_R}{kT} \left(\sum_{k=0}^{N_m} \exp\left(\frac{-E_k}{kT}\right) \right)^{-1}$$

где E_k – колебательная энергия (4.2), $F(E_k)$ – уравнение кривой ac .

Считалось, что при диссоциации энергии связи молекулы переходит в энергию относительного движения образовавшихся атомов.

5. Моделирование смеси газов. Параметры VHS -модели [4], такие как постоянная A и степень ν в степенном потенциале взаимодействия молекул $U(r) = A/r^\nu$ находятся из сравнения теоретической зависимости коэффициента вязкости для простого газа от температуры с экспериментальными данными. Однако для смеси газов невозможно подобрать постоянные A и ν такие, чтобы теоретические температурные зависимости для коэффициентов вязкости и диффузии соответствовали экспериментальным. Для того, чтобы избежать этого в [8], была предложена VSS -модель. Отличие этой модели от VHS -модели состоит в том, что угол рассеяния χ зависит от прицельного параметра b и диаметра молекулы d как

$$\cos\left(\frac{\chi}{2}\right) = \left(\frac{b}{d}\right)^{1/\alpha}$$

где α – параметр, для VHS -модели $\alpha \equiv 1$.

В случае применения VSS -модели к моделированию течений двухатомного газа с помощью VRS -модели, формулы разделов 1 и 2 несколько усложнятся. Например, формула (2.4) примет вид

$$\frac{A^2/2}{(1+A^2/2)^2} = C(T) \left(\frac{Mg^2}{2kT}\right)^{\alpha_1/2} \exp\left(-a_2 \frac{Mg^2}{2kT}\right) \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)$$

При столкновении молекул разных сортов не представляет труда обобщить все формулы для частиц с массами M_1 и M_2 и диаметрами d_1 и d_2 . Особый интерес представляет случай обмена вращательной энергией при столкновении атома и молекулы. Ниже приведены некоторые окончательные выражения

$$\omega'_k = \omega_k - [\mathbf{k} \times \mathbf{J}_R] \frac{d_k}{2I_k}, \quad \mathbf{J}_R = -\frac{2F}{1+F} \mathbf{S}_R, \quad F = \frac{(1+m_{21})f_1f_2}{f_1+m_{21}f_2}$$

$$m_{21} = M_2 / M_1, \quad f_k = d_{0k}^2 / d_k^2, \quad k = 1, 2$$

Для случая столкновения атома с молекулой

$$F = (1+m_{21})f_2$$

Параметр f_2 находится из уравнения

$$\frac{F}{(1+F)^2} = \frac{1}{Z_R^{1/2}(T)} \frac{1}{4} \Gamma\left(2 - \frac{2}{\nu_{12}}\right) \left(1 + \frac{1}{\alpha_{12}}\right) \left(2kT \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2}\right)^{-4/\nu_{12}} g^{4/\nu_{12}}$$

Параметры потенциала для смеси молекулярного и атомарного азота были приняты следующие [9]

Система	$N_2 - N_2$	$N_2 - N$	$N - N$
ν	7.63	7.41	8.02
$A \text{ \AA}^{\nu}, \text{ \AA}^{\nu} \text{B}$	38.8	11.47	9.84
$d, \text{ \AA}$	4.46	4.02	3.59

Диаметры молекул d вычислены при температуре 273 K, кроме того принято, что $Z_R^{N_2-N} = Z_R^{N_2-N_2}$.

6. Результаты расчетов. Предложенные модели были использованы при решении задач о релаксации газа и о структуре ударной волны [1, 2, 3] методом прямого статистического моделирования [4].

На фиг. 2 приводится решение задачи об однородной релаксации газа, внутренние степени свободы которого в начальный момент времени не возбуждены. Начальная поступательная температура $T_{tr} = 5000$ K, моделируемый газ задается параметрами $Z_V(T) = 10/T^{\omega} \exp(100T^{-1/3})$, $\theta = 2000$ K, $\omega = 0.75$, $Z_R(T) = 5$.

Колебательная энергия молекул после столкновений вычислялась по модели классического осциллятора. Здесь же изображены результаты [4] для того же газа, где использовалась модель Ларсена – Боргнакке для моделирования как вращательной, так и колебательной релаксации. Как и следовало ожидать, сначала происходит релаксация по вращательным степеням свободы, а потом более медленная стадия колебательной релаксации. Время релаксации хорошо согласуется с [4], хотя профили колебательной температуры довольно сильно отличаются друг от друга.

Проведены расчеты релаксации азота с учетом обмена колебательной энергии по классической и квантовой моделям при следующих начальных условиях: поступательная температура $T_t = 15000$ K, вращательная и колебательная температуры $T_R = T_V = 0$. Времена релаксации не отличаются, что подтверждает возможность использования данного классического подхода для описания течений газа с колебательными степенями свободы.

В задаче обтекания цилиндра и сферы гиперзвуковым потоком разреженного газа исследовалось влияние возбуждения внутренних степеней свободы молекул на поле течения перед телом и теплопередачу на критической линии. В методе прямого статистического моделирования около обтекаемого тела выделяется расчетная об-

ласть, которая разбивается на ячейки с линейным размером, меньшим местной длины свободного пробега молекул. Реальный поток газа заменяется несколькими тысячами моделирующих молекул. Компоненты скорости, уровни внутренней энергии и координаты этих молекул хранятся в машинной памяти и изменяются с течением времени по мере того, как частицы перемещаются в расчетной области, претерпевают столкновения друг с другом и с поверхностью тела. Расчет начинается либо с некоторого начального состояния системы, распределение молекул по скоростям, внутренним энергиям и координатам в котором произвольное, например соответствующее невозмущенному потоку газа, или состояния, в котором молекулы в расчетной области отсутствуют и поступают в область с границ расчетной области.

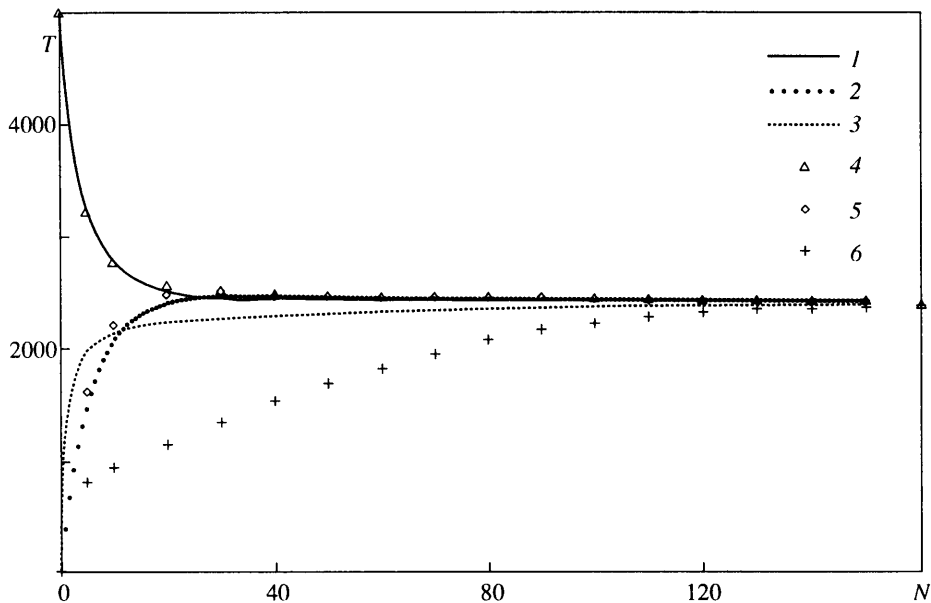
Расчетная сетка строится в физическом пространстве и требуется для упрощения процедуры выбора пар частиц для столкновения и для определения макропараметров течения. В данной работе при расчете обтекания цилиндра применялась цилиндрическая сетка с центром, совпадающим с осью цилиндра, а при расчете обтекания сферы – сферическая сетка. Алгоритм вычислений, в основном, соответствует методу прямого статистического моделирования [4]. Для моделирования столкновений частиц использовался алгоритм схемы [10].

При реализации метода существенным фактором является погрешность вычислений выходных параметров задачи (для аэродинамики разреженного газа – это силы и моменты, действующие на тело, распределение потоков импульса и энергии по поверхности, газодинамические параметры в поле течения). В методе прямого статистического моделирования погрешность вычислений является суммой систематической погрешности, обусловленной конечными размерами расчетной области и шагом по координате и времени, и статистической погрешности, обусловленной вероятностным характером моделирующих алгоритмов. Для определения и уменьшения систематической погрешности расчеты проводились при различных размерах расчетной области и шагах сетки. Основное требование к размеру сетки заключается в том, чтобы шаг сетки был меньше местной длины свободного пробега молекул, поскольку изменение функции распределения молекул происходит на расстоянии порядка длины свободного пробега.

С другой стороны, шаг по времени выбирался таким, чтобы частицы в своем движении за один шаг перемещались не далее соседней ячейки (аналог условия Куранта). При выполнении этих условий систематическая ошибка становилась меньше статистической, которая в методах Монте-Карло пропорциональна обратной величине квадратного корня из числа испытаний (попаданий молекул на поверхность тела). Для вычисления потока тепла в критической точке число попаданий молекул на поверхность тела составляло $\sim 10^5$. При этом погрешность изменялась от $\sim 5\%$ (режимы, близкие к свободномолекулярным) до $\sim 10\%$ (переходные режимы обтекания). Во всех расчетах модельное число частиц составляло $\sim 2 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^5$.

Для выяснения влияния возбуждения внутренних степеней свободы молекул на поток тепла в критической точке при одинаковых граничных условиях на теле и в набегающем потоке проведены расчеты для следующих случаев: 1) одноатомный газ, диффузное отражение от тела; 2) двухатомный газ с возбуждением вращательных степеней свободы, диффузное отражение от тела; 3) двухатомный газ с возбуждением вращательных степеней свободы, диффузное отражение от тела; 4) двухатомный газ с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы, зеркальное отражение внутренних степеней свободы молекул от тела; 5) двухатомный газ с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы и учетом диссоциации в потоке, поверхность тела абсолютно-каталитическая (полная рекомбинация атомов на теле); 6) двухатомный газ с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы и учетом диссоциации в потоке, поверхность тела абсолютно некаталитическая.

Рекомбинация атомов на поверхности тела учитывалась следующим образом. Атом при столкновении с поверхностью поглощается ею с полным выделением энергии,



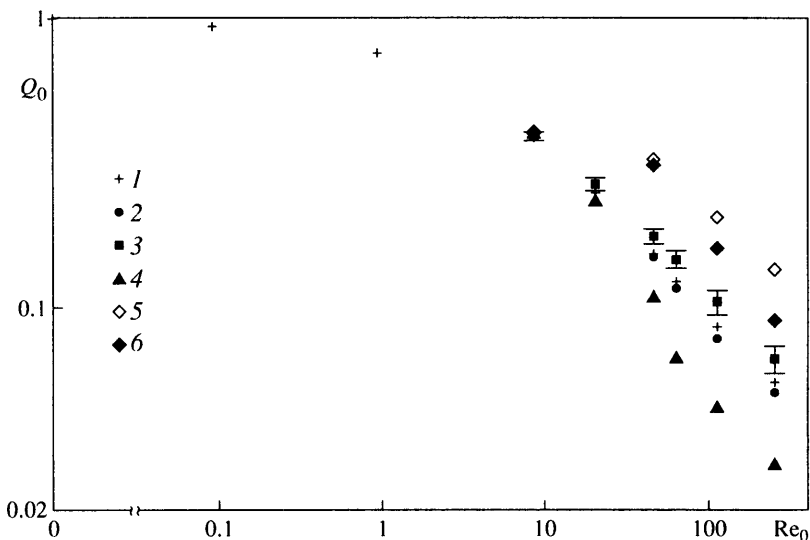
Фиг. 2. Зависимость профилей температур от количества столкновений на одну молекулу. 1 и 4 – поступательная, 2 и 5 – вращательная, 3 и 6 – колебательная температуры для модели ангармонического и классического гармонического осцилляторов соответственно

которой он обладал, при попадании второго атома в ту же ячейку на поверхности тела образовывалась молекула, которая покидает поверхность со средней энергией, соответствующей температуре тела. При этом происходит полное выделение химической энергии связи вновь образованной молекулы. Качественно такая модель рекомбинации соответствует рекомбинации по механизму Или – Райдила [11].

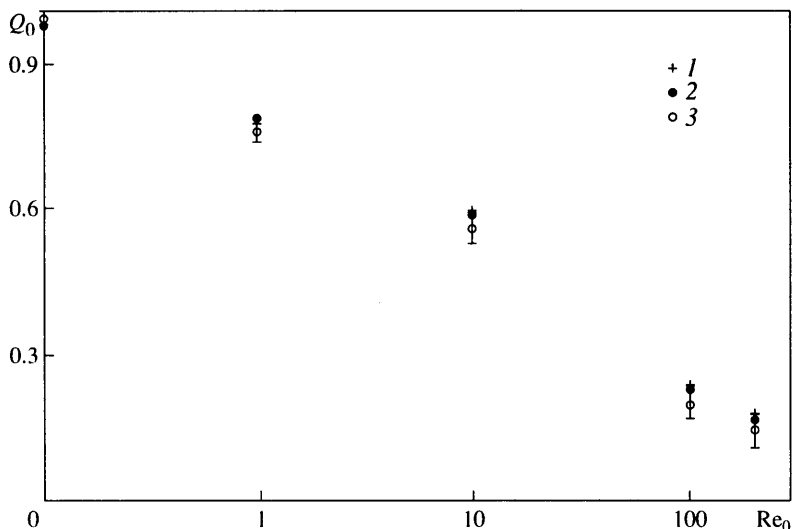
Результаты представлены на фиг. 3 в виде зависимости теплового потока на критической линии цилиндра от числа Рейнольдса (коэффициент вязкости, входящий в выражение для Re_0 , вычисляется по температуре торможения совершенного газа $c_p / c_v = 1.4$). Здесь и далее тепловой поток отнесен к $\rho_\infty V_\infty^3 / 2$, координата x – к радиусу обтекаемого тела. Вертикальные линии показывают среднюю ошибку результатов вычислений методом Монте-Карло. Увеличение ошибки с ростом Re_0 связано с увеличением трудоемкости расчета при уменьшении локальной длины свободного пробега l .

Условия в набегающем потоке: $V_\infty = 11.2$ км/с, $T_\infty = 200$ К, $T_w = 1620$ К, моделируемый газ – азот. При этом $Kn = l/L \sim M/Re \sim 10^{-1} - 10^{-2}$ на внешней границе и $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$ около поверхности тела. Как и ожидалось, наибольший тепловой поток наблюдался для 1-го варианта, наименьший для 6-го. Из фиг. 3 видно, что учет колебательных степеней свободы практически не оказывает влияния на величину теплового потока по сравнению с двухатомным газом для случая 2. Абсолютно некаталитическая поверхность уменьшает поток тепла, выделяемого на теле, учет же рекомбинации атомов на теле приводит к его увеличению до значений, соответствующих варианту 3 и поэтому не показанных на фиг. 3. Здесь же приведен поток тепла в критической точке сферы при ее обтекании потоком разреженного газа при тех же условиях.

Проведено исследование влияния закона отражения молекул от поверхности на поток тепла для случая обтекания сферы. Получено, что закон отражения молекул от поверхности тела не влияет на поток тепла, и различие между потоком тепла для



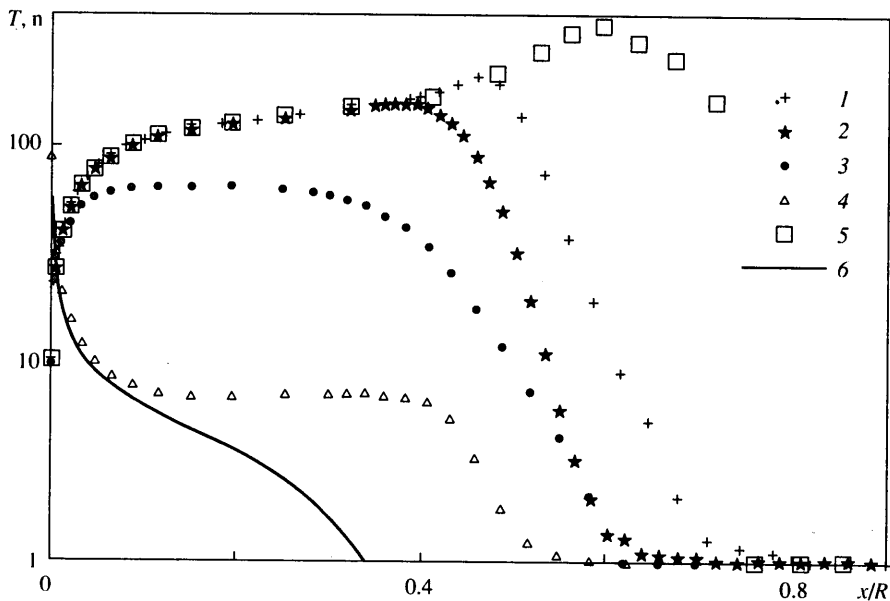
Фиг. 3. Зависимость теплового потока от числа Рейнольдса. На критической линии при обтекании цилиндра: 1 – двухатомный газ с возбуждением вращательных степеней свободы молекул, 2 – с учетом колебательных степеней свободы молекул, диффузное отражение молекул от поверхности; 3 – одноатомный газ; 4 – двухатомный газ с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы молекул с учетом диссоциации, поверхность некаталитическая. В критической точке при обтекании сферы: 5 и 6 – соответствуют случаям 2 и 4



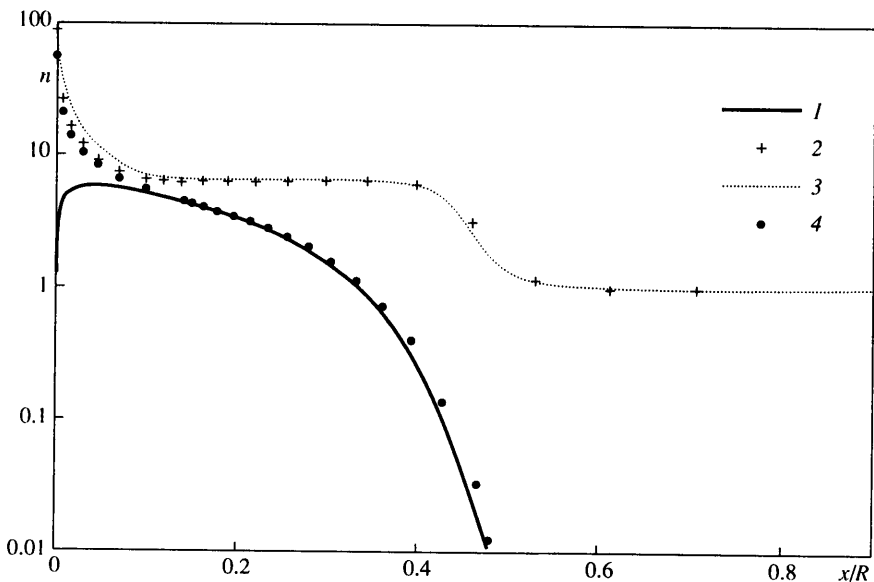
Фиг. 4. Зависимость теплового потока от числа Рейнольдса в критической точке при обтекании сферы. Обозначения 1, 2 см. на фиг. 3, 3 – двухатомный газ с возбуждением вращательных и колебательных степеней свободы при зеркальном отражении внутренних степеней свободы молекул от поверхности

зеркального и диффузного отражения лежит в пределах статистической ошибки вычислений методом прямого статистического моделирования (фиг. 4: $M_\infty = 25$, $T_\infty = 200$ К, $T_w = 900$ К).

Внутренние степени свободы молекул оказывают значительное влияние на картину поля течения перед телом. При их возбуждении происходит уменьшение воз-



Фиг. 5. Профили плотности и температуры на критической линии при обтекании цилиндра. 1 и 5 – температура поступательных степеней свободы молекул двухатомного и одноатомного газа соответственно, 2 – температура вращательных, 3 – колебательных степеней свободы молекул двухатомного газа, 4 и 6 – плотность молекул двухатомного и одноатомного газа соответственно



Фиг. 6. Профили плотности на критической линии при обтекании цилиндра. Точки – некаталитичная, кривые – каталитичная поверхности: 1 и 4 – одноатомный газ, 2 и 3 – двухатомный газ

мушенной зоны перед телом и температуры за ударной волной вследствие перекачки энергии из поступательных во внутренние степени свободы молекул. На фиг. 5 представлены профили температур и плотности вдоль критической линии тока при обтекании цилиндра для случая б при: $Re_0 = 84$, $M_\infty = 30$, $T_w = 1620$ К, $T_\infty = 200$ К,

$K_{n\infty} = 0.032$, $K_{nw} = 0.00057$. Моделируемый газ – азот, координата x отнесена к радиусу цилиндра.

Для сравнения на фиг. 6 приведены профили плотности для вариантов 5 и 6. Учет рекомбинации на поверхности приводит к значительному уменьшению плотности диссоциированного газа вблизи обтекаемого тела. Статистическая ошибка в этих расчетах $\sim 5\%$. Аналогичные вычисления были проделаны и для обтекания сферы, качественно получены такие же результаты.

Заключение. Для расчета течений разреженного газа методом прямого статистического моделирования Монте-Карло предложены модели поступательно-вращательно-колебательного обмена при столкновении молекул газа. Обмен колебательной энергии рассматривается как в классической, так и квантовомеханической постановке в рамках гармонического осциллятора. Проведенные расчеты показывают совпадение результатов в обоих подходах в задачах об однородной релаксации двухатомного газа и о структуре ударной волны. Квантовомеханическая модель взаимодействия обобщена на случай возможной диссоциации газа. В этом случае гармонический осциллятор заменяется на ангармонический. С помощью предложенных моделей решены задачи об обтекании цилиндра и сферы гиперзвуковым потоком диссоциирующего газа. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что учет возбуждения колебательных степеней свободы молекул не приводит к изменению потока тепла на каталитических поверхностях по сравнению с совершенным двухатомным газом. Уменьшение потока тепла достигается только на некаталитических поверхностях летательных аппаратов.

Авторы благодарят за полезные обсуждения В.С. Галкина, Е.А. Дорофеева, С.А. Лосева, Л.А. Пальцева, Ю.И. Хлопкова и В.А. Жарова.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 99-01-00409) и гранта поддержки ведущих научных школ (№ 00-15-96069).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра // Мат. моделирование. 1997. Т. 9. № 10. 43–49 с.
2. Горелов С.Л., Русаков С.В. Структура ударной волны в газе с внутренними степенями свободы // Изв. РАН. МЖГ. 1999. № 3. 121–125 с.
3. Горелов С.Л., Русаков С.В. Прямое статистическое моделирование вращательно-колебательного взаимодействия молекул // Мат. моделирование. 2000. Т. 12. № 9. 55–64 с.
4. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
5. Millikan R.C., White D.R. Systematics of vibrational relaxation // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. № 12. P. 3209–3213.
6. Park C. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air // J. Thermophysics and Heat Transfer. 1989. V. 3. № 3. P. 233–244.
7. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М.: Химия, 1970. 455 с.
8. Koura K., Matsumoto H. Variable soft sphere molecular model for inverse – power – law of Lennard-Jones potential // Phys. Fluids. 1991. V. 3. № 10. P. 2459–2465.
9. Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1989. 231 с.
10. Лукошин А.В., Смирнов С.Н. Об одном стохастическом методе решения уравнения Больцмана // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28. № 2. 293–297 с.
11. Ковалев В.Л. Гетерогенные каталитические процессы при входе в атмосферу. М.: Изд-во МГУ, 1999. 125 с.