

УДК 533.6.011.8

© 2002 г. А.И. ЕРОФЕЕВ

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В АЗОТЕ НА ОСНОВЕ ТРАЕКТОРНЫХ РАСЧЕТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ

Методом прямого статистического моделирования исследуется структура ударной волны в двухатомном газе. Обмен энергией между поступательными и вращательными степенями свободы (TR-обмен) рассчитывается на основе решения динамической задачи о взаимодействии молекул – жестких ротаторов в рамках классической механики. Проводится сравнение рассчитанных профилей плотности с экспериментальными данными и на основе этого дается оценка времени вращательной релаксации азота. Исследуется возможность применения упрощенных моделей межмолекулярного взаимодействия, а именно модели сфер переменного диаметра с феноменологическим рассмотрением TR-обмена.

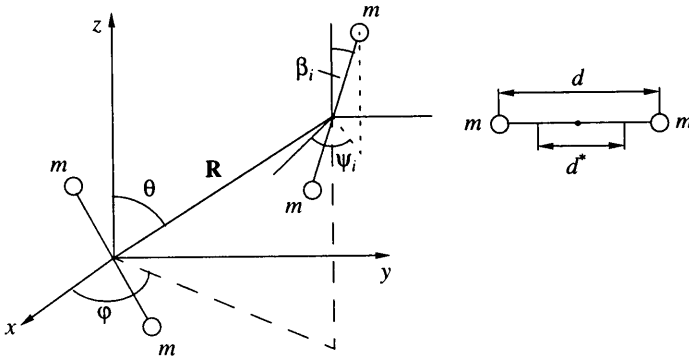
Дан анализ профилей газодинамических параметров в волне. На основе параметрического расчета структуры ударной волны получены простые аппроксимации профилей градиента скорости и поступательной и вращательной температур как функций скорости, что позволило дать приближенное описание профилей газодинамических параметров в элементарных функциях.

Ключевые слова: ударная волна, двухатомный газ, вращательная релаксация, статистическое моделирование.

Исследованию структуры прямой ударной волны посвящено большое количество работ. Однако интерес к решению этой проблемы не ослабевает. В первую очередь это вызвано тем обстоятельством, что в сильных ударных волнах, образующихся при обтекании тел высокоскоростным потоком газа, происходит большое число разнообразных физико-химических процессов, которые определяют состояние самого потока (степень диссоциации, ионизации, протекание химических реакций и т.д.) и характер взаимодействия потока газа с обтекаемым телом. При проведении теоретических (численных) исследований эта одномерная задача привлекает тем, что представляет наиболее простой пример сильно неравновесных течений газа, на котором можно проводить анализ различных физико-математических моделей.

В данной работе исследование ударной волны в азоте проводится для анализа влияния на ее структуру обмена энергией только между поступательными и вращательными степенями свободы молекул (TR-обмен), т.е. в предположении, что возбуждением колебательной моды молекул можно пренебречь. При проведении такого анализа в качестве основы принята динамическая модель взаимодействия между молекулами, в которой для определения TR-обмена в каждом столкновении проводится траекторный расчет взаимодействия молекул – жестких ротаторов в рамках классической механики. По-видимому, первая попытка такого расчета была предпринята в [1], где из-за ограниченных возможностей вычислительной техники полученные результаты имели слишком большой разброс. Недавно задача в аналогичной постановке была решена в [2], где представлены профили основных газодинамических параметров (плотность, скорость, поступательная и вращательная температуры газа).

В данной работе исследуется влияние времени вращательной релаксации τ_R (или параметра вращательной релаксации $Z_R = \tau_R/\tau$, где τ – среднее время свободного



Фиг. 1. Схема взаимодействия молекул: d – расстояние между атомами, d^* – расстояние между центрами отталкивания

пробега молекул) на профили газодинамических параметров в ударной волне, а также рассматривается возможность применения упрощенных представлений для TR-обмена, полученных в [3] на основе анализа релаксационного процесса.

Исследование структуры ударной волны в одноатомном газе, проведенное в [4], выявило ряд новых соотношений между макропараметрами. Было показано, что произведение компоненты тензора напряжений на скорость $p_{xx}u$, тепловой поток $q_x(u)$ и температура $T(u)$ с хорошей точностью могут быть представлены параболическими функциями скорости u . Оказалось также, что профиль градиента скорости может быть аппроксимирован полиномом третьей степени от скорости $V' = V(1 - V)a(1 + bV)$, где V – нормированная скорость. Эти соотношения позволяют дать приближенное решение задачи о структуре ударной волны в элементарных функциях. В данной работе анализ, начатый в [4], распространяется на газ, обладающий внутренними степенями свободы молекул.

1. Траекторный расчет. Рассмотрим взаимодействие молекул – жестких ротаторов в рамках классической механики. Система координат представлена на фиг. 1. В [3] приведены уравнения движения, начальные условия и подробно изложен метод расчета. Здесь остановимся лишь на основных предположениях, особенностях и параметрах численного алгоритма, а также приведем величины входящих в задачу физических параметров. В обобщенных координатах в системе центра масс гамильтониан системы взаимодействующих частиц имеет вид

$$H = \frac{p_R^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mR^2} + \frac{p_\phi^2}{2mR^2 \sin^2 \theta} + \frac{1}{2J} \left(p_{\beta_1}^2 + \frac{p_{\psi_1}^2}{\sin^2 \beta_1} + p_{\beta_2}^2 + \frac{p_{\psi_2}^2}{\sin^2 \beta_2} \right) + U(R, \theta, \phi, \beta_i, \psi_i) \quad (1.1)$$

Здесь R – расстояние между центрами молекул, θ, ϕ – углы, определяющие ориентацию вектора \mathbf{R} , β_i, ψ_i – углы, определяющие ориентацию осей молекул, $J = md^2/2$ – момент инерции молекулы, m – масса атома, d – межатомное расстояние. Будем полагать, что потенциальная энергия взаимодействия молекул имеет вид [5]

$$U = E_* [Ae^{-\alpha(R-D)}(1 + \epsilon \cos 2\Gamma_1)(1 + \epsilon \cos 2\Gamma_2) - 2e^{-\alpha(R-D)/2}] \\ \cos \Gamma_i = \cos \theta \cos \beta_i + \sin \theta \sin \beta_i \cos(\phi - \psi_i) \quad (1.2)$$

Постоянную A определим из условия равенства осредненного по ориентациям молекул потенциала (1.2) и сферически симметричного потенциала Морзе

$$U(R) = E_* [e^{-\alpha(R-D)} - 2e^{-\alpha(R-D)/2}] \quad (1.3)$$

В результате получаем $A = (1 - \epsilon/3)^{-2}$. В потенциалах (1.2), (1.3): E_* – глубина потенциальной ямы, D – расстояние, на котором потенциальная функция имеет минимум, ϵ – параметр асимметричности потенциала. В дальнейшем будут приняты следующие значения параметров потенциала [5–7]: $E_* = kT_*$, $T_* = 91.5\text{K}$, $D = 4.03 \text{ \AA}$, $\alpha = 4.09 \text{ \AA}^{-1}$.

Отталкивательная часть потенциала (1.2) является разложением в ряд Фурье 4-точечного потенциала в предположении малости параметра ϵ [5]

$$\epsilon = \frac{2I_2(\alpha d^* / 2)}{I_0(\alpha d^* / 2)}$$

где d^* – расстояние между центрами отталкивания (см. фиг. 1), $I_n(x)$ – функция Бесселя n -много аргумента. В дальнейшем параметр ϵ будет варьироваться. Наибольшее значение $\epsilon = 0.69$, используемое ниже, соответствует при $\alpha = 4.09 \text{ \AA}^{-1}$ величине $d^* = d$. Как и в [3], величина $d = 1.079 \text{ \AA}$.

Численное решение системы уравнений движения молекул, получаемых с помощью гамильтониана (1.1), проводилось четырехточечным методом Адамса с постоянным шагом, начальный участок траектории рассчитывался методом Рунге–Кутты. Контроль точности проводился на проверке закона сохранения энергии. В большинстве траекторных расчетов погрешность составляла величину менее 0.1%, величина максимальной погрешности была принята равной 1%. Эта погрешность траекторных расчетов относится только к погрешности вычисления обмена энергией между поступательными и вращательными степенями свободы. При определении скоростей и внутренней энергии молекул после столкновения проводилась коррекция таким образом, что законы сохранения выполнялись точно.

2. Метод расчета структуры ударной волны. 1) *Общая структура метода.* Решение задачи о структуре ударной волны проводилось методом прямого статистического моделирования – DSMC [8]. В этом методе рассматривается движение ансамбля молекул, моделирующих реальный газ. Используется метод расщепления, в котором свободное движение молекул и столкновение между ними проводится последовательно на некотором временном шаге Δt . Размеры расчетной области выбирались таким образом, чтобы в областях течения газа до и после фронта волны имелись достаточно протяженные участки с соответствующими равновесными значениями параметров и функциями распределения.

Расчетная область разбивается на ячейки, в которых и проводятся столкновения находящихся в них молекул. Размер пространственной ячейки, одинаковый во всей области течения, определялся условием $h \leq \lambda_{\min} / 4$, где λ_{\min} – минимальная средняя длина свободного пробега молекул в расчетной области (в большинстве расчетов полагалось $h = \lambda_{\min} / 4$). Шаг по времени определялся соотношением $\Delta t = 0.25h/u_1$, где u_1 – скорость газа в набегающем потоке. Использовался вариант метода, в котором количество моделирующих молекул во всей расчетной области оставалось постоянным. Число моделирующих молекул в ячейке в невозмущенном потоке $N_0 \geq 20$. При расчете столкновений в ячейках использовался метод мажорантной частоты [8]. Точность расчетов контролировалась анализом выполнения законов сохранения. Статистическая погрешность расчетов не превышала 0.2%.

2) *Столкновения молекул.* В методе прямого статистического моделирования вероятность столкновения молекул в ячейке объемом W за время Δt определяется соотношением [9]

$$P = \frac{g\sigma(g)\Delta t}{W}$$

где g – относительная скорость сталкивающихся молекул, $\sigma(g)$ – сечение столкновения. При расчете взаимодействия молекул с потенциалом (1.2) необходимо про-

водить угловое обрезание для того, чтобы исключить столкновения с малыми углами рассеяния. В [3] показано, что можно воспользоваться сферически симметричным потенциалом (1.3) и определять сечение столкновения следующим образом

$$\sigma = \pi R_m^2, \quad R_m = k_R r_0 \left(1 + 0.5727 \frac{E_*}{E_\infty} \right) \quad (2.1)$$

$$r_0 = D \left[1 - \frac{2}{\alpha D} \ln \left(1 + \sqrt{1 + \frac{E_\infty}{E_*}} \right) \right]$$

Здесь $E_\infty = mg^2/2$ – относительная энергия поступательного движения молекул, r_0 – расстояние наибольшего сближения молекул для сферически симметричного потенциала. Было показано также, что при выборе параметра $k_R = 1.22$ расчетные значения коэффициента вязкости азота хорошо согласуются с приводимыми в литературе данными (см., например, [10, 11]). Сечение столкновений, определяемое соотношениями (2.1), применялось при $E_\infty \geq E_*$. При $E_\infty < E_*$ полагалось, что

$$g\sigma(g) = \text{const} = (g\sigma)_* \quad (2.2)$$

где $(g\sigma)_*$ получено по (2.1) при $E_\infty = E_*$.

Приведенные соотношения полностью определяют вероятность столкновений при траекторных расчетах. Результаты ряда работ (например, [12, 13]) показывают, что в задаче о структуре ударной волны для определения скоростей молекул после столкновения можно не вычислять углы рассеяния, а использовать модель сфер переменного диаметра. Эта процедура применяется и в данной работе, а именно: в результате траекторных расчетов определяются энергия относительного поступательного движения молекул после столкновения $E_{tr} = \mu g_1^2/2$, где μ – относительная масса, и вращательные энергии молекул E_{Ri} . Скорости молекул после столкновения вычисляются так: $V_i^* = (V_1 + V_2 \pm g_1 \mathbf{n})/2$ (индекс $i = 1$ соответствует знаку плюс, $i = 2$ – знаку минус), где V_i – скорости молекул до столкновения, а \mathbf{n} – единичный вектор, равномерно распределенный по сфере.

При расчетах с приближенной моделью TR-обмена будет использована модель сфер переменного диаметра (VHS-модель), моделирующая степенной потенциал взаимодействия молекул $U(r) = \kappa r^{-s}$.

3) *Вычисляемые величины.* В процессе расчетов задачи определялись гидродинамические параметры – плотность, скорость, поступательная и вращательная температуры газа, а также напряжение, тепловые потоки и градиент скорости как функции координаты x . Первые три величины определялись стандартным способом, вращательная температура определялась как мера средней энергии вращательного движения молекул и остальные величины равны

$$kT_R = \langle e_R \rangle = \frac{1}{n} \int e_R f(\xi, e_R) d\xi de_R, \quad P_{ij} = M \int c_i c_j f(\xi, e_R) d\xi de_R \quad (2.3)$$

$$q_{tri} = \frac{M}{2} \int c_i c^2 f(\xi, e_R) d\xi de_R, \quad q_{Ri} = \int c_i e_R f(\xi, e_R) d\xi de_R, \quad q_{toi} = q_{tri} + q_{Ri}$$

Здесь M – масса молекулы, e_R – вращательная энергия молекул.

Для получения безразмерных величин плотность, температура и давление отнесены к их значениям в набегающем потоке – ρ_1, T_{tr1}, p_1 . Скорость отнесена к величине $c_1 = \sqrt{2RT_1}$. Напряжение $p_{xx} = P_{xx} - p$, тепловые потоки q_{ix} и q_{rx} , обусловленные

поступательной и вращательной модами, отнесены соответственно к p_1 и к $p_1 c_1$. Координата x отнесена к средней длине свободного пробега молекул λ_1 .

В дальнейшем будут использоваться также нормированные значения газодинамических параметров

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad T_i^* = \frac{T_i - T_1}{T_2 - T_1}, \quad V = \frac{u - u_1}{u_2 - u_1}$$

где индекс "2" относится к состоянию газа за ударной волной.

Длина свободного пробега при взаимодействии молекул с потенциалом (1.2) определяется соотношением $\lambda_1 = \sqrt{8kT / \pi M} (n_1 \langle g\sigma \rangle)^{-1}$.

Часто при анализе экспериментальных данных в качестве характерной длины свободного пробега принимается величина, определенная через коэффициент вязкости соотношением, как для молекул – твердых сфер

$$\lambda_{hs} = \frac{16}{5\pi} \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{2RT}}$$

Связь этой величины с длиной свободного пробега для используемых в работе моделей взаимодействия молекул определяется следующими соотношениями: для VHS – модели с показателем степени s

$$\lambda = \lambda_{hs} \left(1 - \frac{2}{3s}\right) \left(1 - \frac{1}{s}\right)$$

для потенциала (1.3)

$$\lambda = a_T \lambda_{hs}$$

Зависимость a_T от температуры дана ниже

T, K	300	1000	3000	10 ⁴
a_T	0.7628	0.8525	0.8772	0.8743

3. О вращательной релаксации. Как отмечалось выше, одной из целей работы является исследование влияния обмена энергией между поступательными и вращательными степенями свободы (TR-обмен) на структуру ударной волны и, напротив, выяснение возможности определения скорости TR – обмена, исходя из профилей газодинамических параметров. Такой обмен чаще всего описывают с феноменологических позиций, используя представление о том, что релаксация идет в направлении приближения системы к равновесию. Так, в простой модели [14] предполагается, что при столкновении молекул с вероятностью P_R происходит распределение энергии между поступательным и вращательным движением, причем соответствующие величины определяются на основе равновесного состояния, а с вероятностью $1 - P_R$ столкновение считается чисто упругим. Если для анализа релаксационного процесса использовать уравнение

$$\frac{dE_R}{dt} = \frac{E_R(T) - E_R}{\tau_R} \quad (3.1)$$

где $E_R(T)$ – равновесная вращательная энергия при температуре T , а τ_R – время вращательной релаксации, зависящее от T , то можно найти связь между τ_R и P_R . Вместо времени вращательной релаксации используют также параметр вращательной релаксации $Z_R = \tau_R / \tau$, где $\tau = 1/\nu$ – среднее время свободного пробега молекул. Обычно τ_R или Z_R определяют из (3.1), полагая $E_R = 0$ при $t = 0$. Тогда

$$\tau_R = \frac{E_R(T)}{(dE_R / dt)_{E_R=0}}$$

Исходя из анализа динамической задачи о взаимодействии молекул – жестких ротаторов в одной плоскости в [5], получена зависимость Z_R от температуры

$$Z_R = \frac{Z_R^\infty}{1 + 0.5\pi^{3/2}(T_*/T)^{1/2} + (0.25\pi^2 + 2)T_*/T} \quad (3.2)$$

Здесь $T_* = E_*/k$, где E_* – глубина потенциальной ямы (см. (1.2)).

Однако результаты ряда исследований показали (см., например, [15, 16]), что величины τ_R или Z_R зависят не только от поступательной, но и от вращательной температуры. В [17] проведен подробный анализ релаксационного процесса с использованием динамической модели столкновения на базе траекторных расчетов с потенциалом (1.2). Было получено, что при параметре асимметричности потенциала $\epsilon = 0.42$ зависимость Z_R от T_{tr} и T_R имеет вид

$$Z_R = Z_R^\circ \left(1 + 1.3 \frac{T_R}{T_{tr}}\right), \quad Z_R^\circ = 13 \left(1 + 3 \sqrt{\frac{T_*}{T_{tr}}}\right)^{-1} \quad (3.3)$$

а для $\epsilon = 0.69$

$$Z_R = Z_R^\circ \left(1 + 0.75 \frac{T_R}{T_{tr}}\right), \quad Z_R^\circ \equiv \text{const} = 5.2 \quad (3.4)$$

Отметим, что зависимость (3.3) при $T_R = 0$ качественно совпадает с полученной в [5], т.е. Z_R возрастает при увеличении T_{tr} . Но с увеличением параметра асимметричности она становится совершенно иной. Численный анализ процесса релаксации на основе модели [14] позволил установить связь между Z_R и P_R , а именно

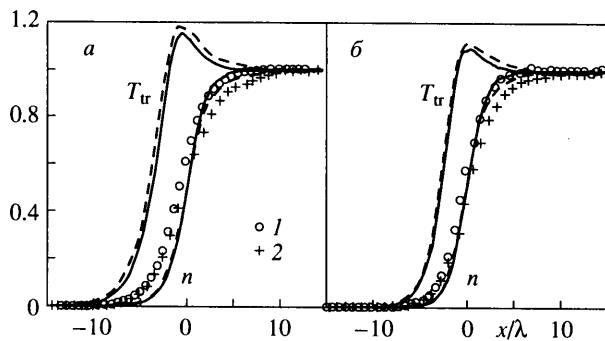
$$Z_R = 2.1 / P_R \quad (3.5)$$

Имеющиеся в литературе экспериментальные данные о величине параметра Z_R различаются в 2–3 раза. Примерно такое же различие имеется и при теоретических исследованиях (см., например, [18]). Часто при рассмотрении сильно неравновесных течений газа используется температурная зависимость $Z_R(T)$, полученная в [5], причем для азота параметр $Z_R^\infty = 20 - 22$. Но экспериментальные исследования структуры ударной волны, приведенные в [19–21], указывают на то, что параметр Z_R имеет существенно меньшее значение. Об этом же говорят результаты исследований последних лет, приведенные в [22], которые основаны на измерениях заселенности молекул на различных вращательных уровнях. В [19] отмечалось, что вращательная релаксация идет достаточно быстро даже в сильных ударных волнах, а расчеты с феноменологической моделью Берда дали оценку параметра релаксации $Z_R \approx 4-5$ в зависимости от температуры. Ниже влияние скорости TR – обмена на структуру ударной волны рассматривается на основе прямых траекторных расчетов взаимодействия молекул.

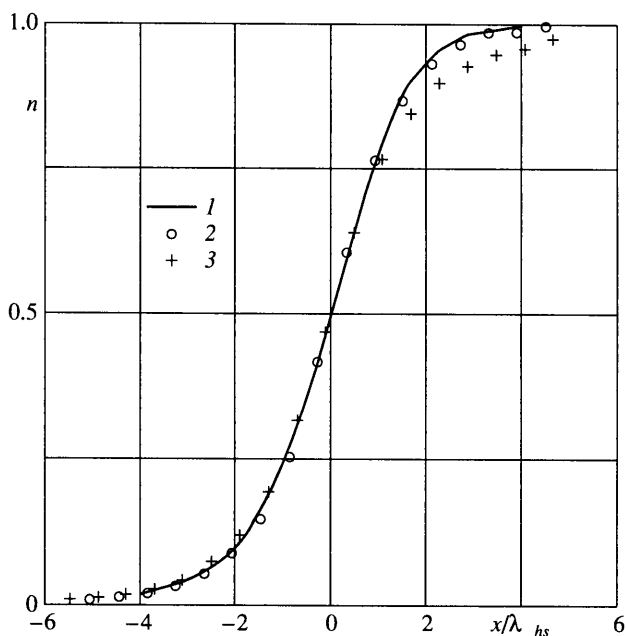
4. Результаты расчетов. 1) Траекторные расчеты и сравнение с экспериментом.

Проанализируем сначала результаты расчета структуры ударной волны при расчете столкновений молекул с TR -обменом на основе траекторных расчетов с потенциалом (1.2). Эти расчеты проводились при числах Маха $M = 3.2, 6$ и 10 при температуре газа в невозмущенной области $T_1 = 300$ К, чтобы можно было проводить сравнение с экспериментальными данными [19].

На фиг. 2 приведены расчетные профили нормированных величин плотности, поступательной T_{tr} и вращательной T_R температур для двух значений параметра асимметричности потенциала (1.2) $\epsilon = 0.69$ и 0.42 и числе $M = 3.2$ и 10 . Наиболее существенное различие результатов для профиля плотности при разных значениях параметра ϵ заключается в том, что при меньшем значении ϵ (т.е. при $\epsilon = 0.42$), когда TR – обмен протекает более медленно, профиль плотности нарастает медленнее в



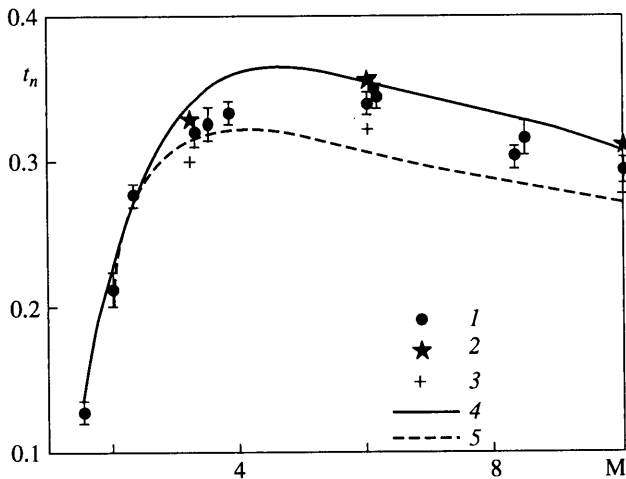
Фиг. 2. Профили газодинамических параметров. Плотность и поступательная температура – кривые: сплошная – $\epsilon = 0.69$, штриховая – $\epsilon = 0.42$, вращательная температура – точки: 1 – $\epsilon = 0.69$, 2 – 0.42 ; а – $M = 10$, б – 3.2



Фиг. 3. Сравнение экспериментального и расчетных профилей плотности при $M = 10$: 1 – эксперимент, 2 – траекторный расчет: $\epsilon = 0.69$, 3 – 0.42

области горячего газа, порождая асимметрию профиля. Профиль плотности на переднем фронте волны слабо зависит от величины параметра асимметричности. Соответственно и профиль поступательной температуры уширяется в области горячего газа при меньшем значении ϵ . Ожидаемые различия имеют место для профилей вращательной температуры, а именно существенное отставание профиля T_R при более медленном TR-обмене.

На фиг. 3 дано сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [19]. Координата x отнесена к средней длине свободного пробега в невозмущенной области, определенной для молекул – твердых сфер. Полученные в [19, 21] профили плотности обладают небольшой асимметрией, что свидетельствует, по мнению авторов, о том, что релаксационный процесс идет достаточно быстро. Из сопоставления результатов траекторных расчетов с экспериментальными данными следует, что



Фиг. 4. Относительная толщина профиля плотности. Эксперимент – 1, траекторный расчет: 2 – $\epsilon = 0.69$, 3 – 0.42; феноменологическая модель ($s = 10$): 4 – $\epsilon = 0.69$, 5 – 0.42

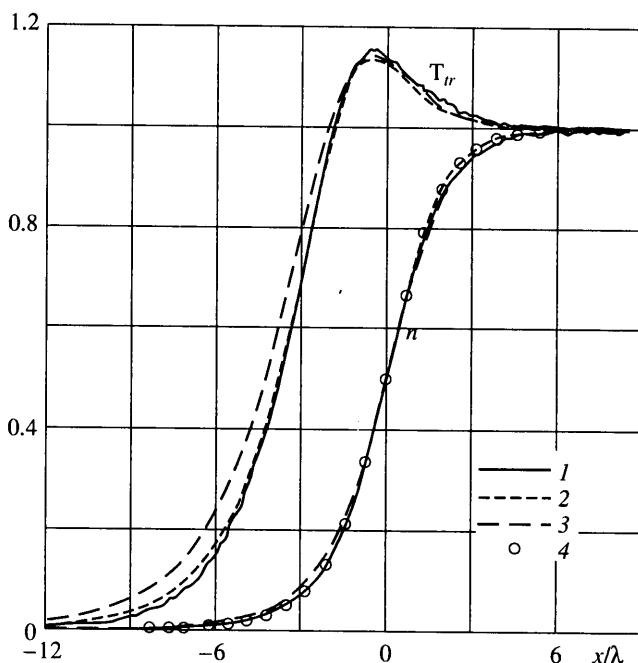
очень хорошее согласование имеется для динамических расчетов, проведенных с параметром асимметрии потенциала (1.2) $\epsilon = 0.69$. С другой стороны, каких-либо определенных выводов о наилучшем значении параметра ϵ нельзя сделать, если ориентироваться на данные по толщине ударного фронта, поскольку, как видно из приведенных на фиг. 2, 3 данных, профиль плотности при $n \leq 0.7$ слабо зависит от параметра асимметрии.

На фиг. 4 представлены экспериментальные и расчетные данные по величине обратной толщины ударной волны $t_n = \lambda_{\infty} / L_n$, где толщина профиля плотности $L_n = (dn^* / dx)_{\max}^{-1}$. Из этих данных следует, что несколько лучшее согласование расчетных данных с экспериментальными имеет место для $\epsilon = 0.69$.

Результаты расчетов показывают (см. фиг. 2), что величина скорости вращательной релаксации влияет на взаимное расположение профилей плотности и вращательной температуры. Так, при $\epsilon = 0.69$ профиль вращательной температуры почти всюду опережает профиль плотности (до величины $n \approx 0.8-0.9$), в то время как при $\epsilon = 0.42$ профиль T_R пересекает профиль плотности примерно при $n = 0.5$. В пользу более быстрой релаксации говорят и данные [21], где измерялась вращательная температура газа. В полученных в [21] данных профиль T_R опережает профиль плотности при больших числах Маха. Отметим, что величина t_n , полученная в [21] при больших числах Маха, значительно превышает данные других экспериментов, представленных в [19].

Таким образом, имеющиеся экспериментальные данные о структуре ударной волны в азоте свидетельствуют о быстром протекании процесса вращательной релаксации. По результатам динамического расчета взаимодействия молекул можно заключить, что такому положению соответствуют данные при больших значениях параметра асимметрии потенциала, когда центры отталкивания в молекулах совпадают с центрами атомов.

2) *Сопоставление траекторных расчетов с феноменологическими моделями вращательной релаксации.* Несмотря на имеющиеся в настоящее время вычислительные возможности проведения исследований наиболее простых течений газа с помощью динамических моделей, описывающих взаимодействия молекул, не теряют своего значения и феноменологические модели процессов. Применение динамических моделей требует адекватного знания потенциалов взаимодействия, вероятностей протекания



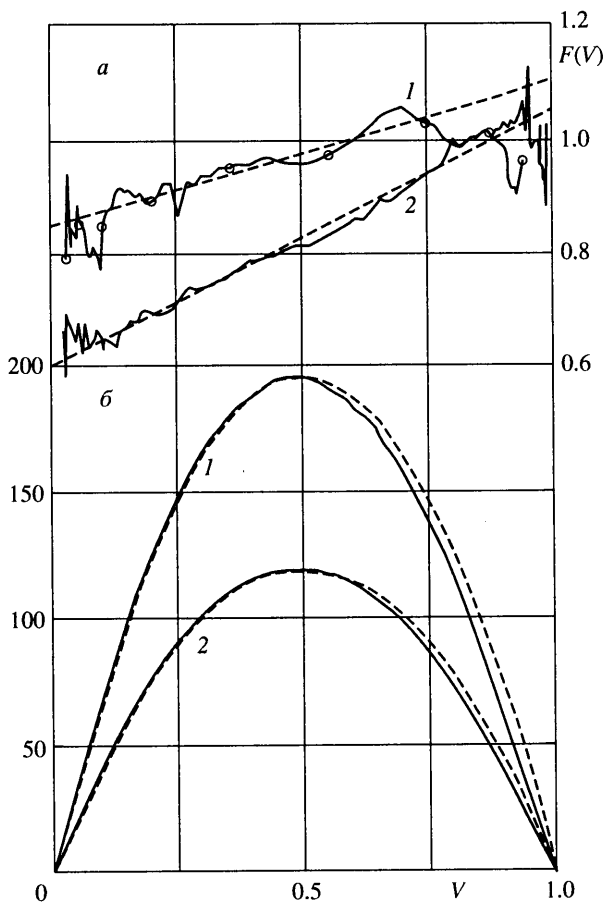
Фиг. 5. Сравнение профилей плотности и поступательной температуры для динамической и феноменологической моделей при $M = 10$ и $\epsilon = 0.69$: 1 – траекторный расчет; феноменологическая модель: 2 – $s = 9$, 3 – 8; 4 – приближенный расчет

процессов по различным каналам и т.д., а таких данных в настоящее время явно недостаточно. Феноменологические же модели дают возможность параметрического исследования явлений. Но всегда встает вопрос об адекватности моделей или их верификации. Наиболее прямой ответ на такой вопрос может быть получен путем сравнения данных, полученных с использованием моделей, и данных, полученных с использованием точных методов. В этом разделе такое сравнение проводится путем сопоставления результатов расчетов структуры ударной волны с применением динамической задачи о взаимодействии молекул с данными, полученными для модели сфер переменного диаметра (VHS – модель) и феноменологической моделью вращательной релаксации.

При выборе параметров VHS – модели учитывалось, что зависимость частоты столкновений молекул от температуры, получаемая при взаимодействии молекул с потенциалом (1.3), при температурах $T \leq 3000$ К близка зависимости, получаемой для степенного потенциала с показателем степени $s = 8$, а при больших температурах – для $s = 10$. Процесс вращательной релаксации описывался феноменологической моделью, в которой зависимость вероятности неупругого столкновения от параметра релаксации Z_R определялась соотношениями (3.3)–(3.5).

На фиг. 5 представлены результаты расчета профилей плотности и температур для траекторного расчета и VHS – модели при $\epsilon = 0.69$ для числа $M = 10$.

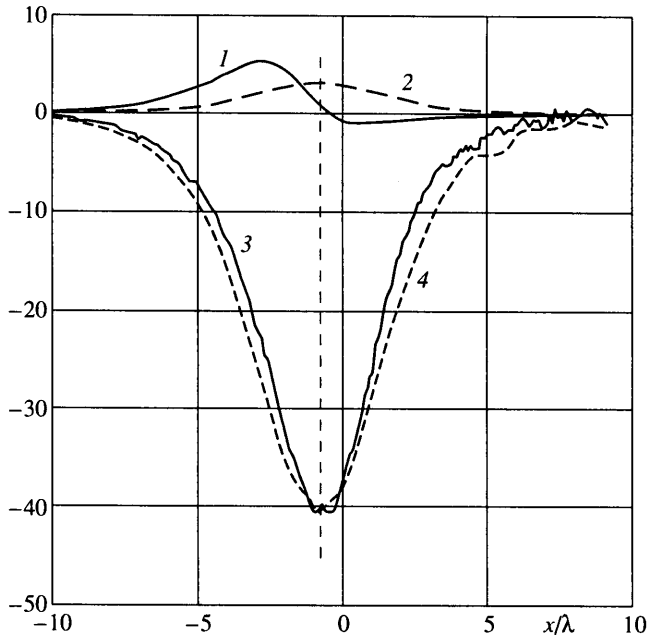
Как показывает сравнение, лучшее согласование VHS – модели с траекторным расчетом имеет место для $s = 9$. Наиболее сильное влияние величина s оказывает на расстояние отхода профилей температур от профиля плотности – это расстояние больше для меньшего значения s . Сопоставление данных траекторного расчета и VHS – модели с экспериментальными данными представлено на фиг. 4 и подтверждает возможность использования феноменологической модели при соответствующем выборе ее параметров.



Фиг. 6. Соотношения между макропараметрами для $\epsilon = 0.69$:
a – зависимость функции $F(V) = V'/V'(1 - V)^{-1}$ от нормированной скорости газа V , 1 – $M = 3.2$, 2 – 10, сплошная кривая – траекторные расчеты, штриховая – линейная аппроксимация;
б – $M = 10$, 1 – зависимость теплового потока – q_{xTot} от V , 2 – зависимость произведения напряжения на скорость $p_{xx}u_x$ от V : сплошные кривые – траекторные расчеты, штриховая – параболическая аппроксимация

3) *Соотношения между макропараметрами.* При исследовании структуры ударной волны в одноатомном газе в [4] были получены новые соотношения для макропараметров. Оказалось, что тепловой поток q_x и величина $p_{xx}u$ приблизительно являются параболическими функциями скорости u . Из законов сохранения следует, что и температура газа есть параболическая функция скорости. Далее, расчеты показали, что градиент скорости приблизительно описывается полиномом третьей степени от скорости. Эти приближенные соотношения позволяют выразить зависимости всех макропараметров от координаты в виде элементарных функций. Ниже анализируются соотношения между макропараметрами при наличии внутренних степеней свободы молекул при $\epsilon = 0.69$. Определение макроскопических переменных дано формулами (2.3).

На фиг. 6 представлены зависимости градиента скорости ($M = 10$ и 3.2), напряжения и суммарного теплового потока ($M = 10$) от нормированной скорости V . Как следует из приведенных данных, приближенный характер параболической зависимости $p_{xx}u$ и q_{Tot} от скорости выполняется с большей погрешностью в горячей зоне ударной волны (при $V > 0.7$) и достаточно хорошо на переднем фронте. Величина



Фиг. 7. Профили параметров при траекторных расчетах для $M = 10$ и $\epsilon = 0.69$:

1 – производная поступательной температуры dT_{tr}/dx , 2 – производная вращательной температуры dT_R/dx , 3 – вращательный тепловой поток q_{Rx} , 4 – функция $f = -C_R dT_R/dx$, $C_R = 12.7$, вертикальной чертой отмечено положение максимума dT_R/dx

относительной скорости $V = 0.7$ соответствует величине плотности $n \approx 0.3$, при этом поступательная температура газа практически максимальна (фиг. 3). При меньших числах Маха ситуация примерно такая же. Таким образом, аппроксимация полной температуры, полного теплового потока и p_{xx} квадратичной функцией скорости в случае двухатомного газа имеет большую погрешность, чем для одноатомного газа.

Рассмотрим теперь зависимость градиента скорости (точнее, величины $F(V) = V'/V(1 - V)$, где $V' = dV/dx$) от скорости V . На фиг. 6 приведены зависимость $F(V)$, а также аппроксимации этой зависимости линейной функцией. Как и в случае одноатомного газа линейная аппроксимация работает достаточно хорошо при $V < 0.8$, а при $V \geq 0.8$ расчетные значения $V'/V(1 - V)$ лежат ниже аппроксимирующей линии. Определим теперь, насколько эти отклонения искажают профили в ударной волне. Представив производную в виде

$$\frac{dV}{dx} = a(1 + bV)V(1 - V) \quad (4.1)$$

получим следующую зависимость координаты x от скорости

$$x = x_0 + \frac{1}{a(1 + b)} [(1 + b) \ln V - \ln(1 - V) - b \ln(1 + bV)] \quad (4.2)$$

Постоянную интегрирования x_0 определим так, чтобы в некоторой точке совпадали значения скорости при точном расчете и в (4.2). Результаты пересчета профилей плотности и поступательной температуры по координате x , вычисленной по (4.2), представлены на фиг. 5 ($M = 10$). Эти данные показывают достаточно хорошую точность аппроксимации (4.1). Аналогичный результат имеет место и для $M = 3.2$, причем в этом случае погрешность в определении плотности составляет примерно 2% при $n > 0.8$, а при меньших значениях n результаты практически неразличимы.

Профили производных для поступательной и вращательной температур и теплового потока, обусловленного вращательными степенями свободы, приведены на фиг. 7. Из этих данных следует, что максимум теплового потока q_{Rx} практически совпадает с максимумом производной вращательной температуры, а его зависимость от координаты качественно описывается зависимостью $f = -C_R dT_R/dx$, причем коэффициент C_R зависит от числа Маха и при $M = 10$ равен 12.7. С уменьшением числа Маха улучшается и количественное согласование q_{Rx} и функции f , а величина коэффициента уменьшается: при $M = 3.2$ коэффициент $C_R = 2.708$, а профили q_{Rx} и функции f практически совпадают. Такая зависимость теплового потока q_{Rx} отличается от структуры при слабом отклонении от равновесия, когда он может быть представлен суммой градиентов поступательной и вращательной температур с соответствующими коэффициентами теплопроводности (см., например, [23]).

Приведенное на фиг. 5 приближенное представление профиля плотности с помощью соотношения для градиента скорости (4.1) указывает на возможность приближенного описания всей структуры волны. Ниже на базе данных расчетов дается приближенное описание структуры ударной волны в элементарных функциях. Используется приближенная модель TR – обмена (3.4)–(3.5) с показателем асимметричности потенциала $\epsilon = 0.69$ и VHS – модель столкновения молекул с показателем степени $s = 9$. На основе параметрических расчетов для различных чисел Маха строятся приближенные выражения $T_{tr}(V)$, $T_R(V)$, обеспечивающие хорошее приближение к расчетным данным на переднем фронте ударной волны и хуже работающие в зоне максимума зависимости $T_{tr}(V)$. Эти соотношения имеют вид

$$T_{tr}(V) = V(1 + c - V) / c \quad (4.3)$$

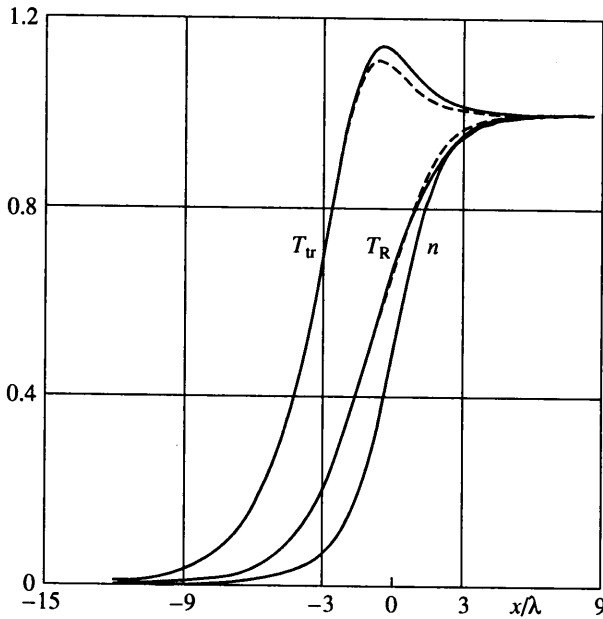
$$T_R(V) = d_1 V + d_2 V^2 + (1 - d_1 - d_2) \exp(-d_3(1 - V)) \quad (4.4)$$

Входящие в соотношения (4.1)–(4.4) коэффициенты приведены ниже

M	1.53	2	3.2	4	6	10	20
$a\sqrt{M}$	0.658	1.131	1.61	1.624	1.715	1.825	1.918
b	-0.242	-0.098	0.268	0.580	0.785	0.870	0.921
c	1.2	0.85	0.618	0.57	0.53	0.515	0.51
d_1	0.44	0.441	0.516	0.567	0.622	0.658	0.698
d_2	0.2	0.18	0.17	0.163	0.13	0.115	0.08
d_3	6.0	7.5	10.0	13.0	14.0	15.0	16.0

На фиг. 8 приведены профили газодинамических параметров, полученные в расчетах, и приближенные профили. Эти данные показывают удовлетворительное согласование результатов. Для поступательной температуры погрешность аппроксимации в области максимума не превышает 4% ($M = 2$). Несколько меньше максимальная погрешность в определении T_R ($\approx 3\%$). Уменьшения погрешности можно достичь усложнением формул (5.1), (5.2), однако для целей получения оценок на переднем фронте волны приведенные соотношения представляются достаточными.

Заключение. Анализ профилей газодинамических параметров в сильной ударной волне, распространяющейся в однокомпонентном двухатомном газе показал, что асимметричность профиля плотности увеличивается с возрастанием параметра вращательной релаксации Z_R в основном за счет его изменения в области горячего газа, поэтому оценка величины Z_R по величине относительной толщины ударной волны затруднена, так как при $\rho^* < 0.7$ параметр Z_R слабо влияет на профиль плотности. Величина скорости вращательной релаксации влияет на взаимное расположение профилей плотности и вращательной температуры T_R , а именно: при быстрой релаксации ($\epsilon = 0.69$) профиль T_R почти всюду опережает профиль плотности, а при увеличении Z_R



Фиг. 8. Сравнение профилей температур и плотности в ударной волне при $M = 10, s = 9, \epsilon = 0.69$: сплошные кривые – расчет, штриховые – аппроксимация

профиль T_R пересекает профиль плотности – при $\epsilon = 0.42$ это происходит примерно при $\rho^* = 0.5$. Хорошее согласование рассчитанных профилей плотности на основе решения динамической задачи столкновения молекул при $\epsilon = 0.69$ с экспериментальными данными показывает, что вращательная релаксация азота происходит достаточно быстро. С учетом анализа процесса релаксации для этого значения ϵ (соотношение (3.4)) оценка величины параметра вращательной релаксации дает $Z_R < 10$.

Показано, что упрощенные модели межмолекулярного взаимодействия с феноменологическим рассмотрением TR-обмена при надлежащем выборе параметра Z_R хорошо согласуются с результатами при динамической модели взаимодействия.

Анализ изменения газодинамических параметров в волне показал, что градиент скорости приближенно выражается полиномом третьей степени от скорости, а тепловой поток, обусловленный вращательной степенью свободы молекул, является линейной функцией градиента вращательной температуры.

На основе параметрических расчетов даны простые приближенные зависимости для поступательной и вращательной температур как функций скорости, что позволило с учетом отмеченной выше зависимостью градиента скорости от скорости дать описание структуры ударной волны в элементарных функциях.

Автор благодарит О.Г. Фридлендера за обсуждение работы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 99-01-00154) и Государственной программы поддержки ведущих научных школ (код проекта 00-15-96069).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Macpherson A.K.* Rotational temperature profiles of shock waves in diatomic gases // *J. Fluid Mech.* 1971. V. 49. Pt 2. P. 337–351.
2. *Koura K.* Direct Simulation Monte Carlo method coupled with classical trajectory calculations for

- rigid diatomic molecules: Nitrogen shock wave // Proc. 21st Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamic. Eds. R. Brun et al., Marseille, France, 1999. V. 2. P. 23–30.
3. *Ерофеев А.И.* Численное исследование вращательной релаксации азота // Изв. РАН. МЖГ. 1993. № 2. С. 124–132.
 4. *Erofeev A.I., Friedlander O.G.* New relations between macroparameters in shock wave // Proc. 22nd Intern. Symp. in Rarefied Gas Dynamic. Ed. T.J. Bartel and M.A. Gallis. Sydney, Australia, 2000. N.Y.: Amer. Inst. Phys., 2001. P. 154–158.
 5. *Parker J.G.* Rotational and vibrational relaxation in nonpolar diatomic gases // Phys. Fluids, 1959. V. 2. № 4. P. 449–462.
 6. *Konowalow D.D., Hirschfelder J.O.* Intermolecular potential functions for nonpolar molecules // Phys. Fluids. 1961. V. 4. № 5. P. 629–636.
 7. *Hirshfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B.* Molecular Theory of Gases and Liquids. N.Y.: Wiley; L.: Charman and Hall, 1954. (Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.)
 8. *Bird G.A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458 p.
 9. *Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е.* Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа // Ж. вычисл. математики и мат. физики. 1975. I. Т. 15. № 5. С. 1195–1208; II. № 6. С. 1553–1567.
 10. Теплофизические свойства технических важных газов при высоких температурах и давлениях. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1989. 231 с.
 11. *Гордеев О.А., Калинин А.П., Комов А.Л. и др.* Потенциалы взаимодействия, упругие сечения, интегралы столкновений компонентов воздуха для температур до 20 000 К (Методы определения, рекомендуемые данные) // Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. М.: ИВТ АН СССР, 1985. № 5(55). 97 с.
 12. *Muntz E.P., Erwin D.A., Pham-Van-Diep G.C.* A review of the kinetic detail required for accurate predictions of normal shock waves // Proc. 17th Symp. on Rarefied Gas Dynamic. / A.E. Beylich. Weinheim etc.: VCH, 1991. P. 198–206.
 13. *Gimelshein S.F., Ivanov M.S., Rogasinsky S.V.* Investigation of shock wave structures by majorant cell and free cell schemes of DSMC // Proc. 17th Symp. on Rarefied Gas Dynamic. Ed. A.E. Beylich. Weinheim etc.: VCH, 1991. P. 717–726.
 14. *Larsen P.S., Borgnakke C.* Statistical collision model for simulation polyatomic gas with restricted energy exchange // Proc. 9th Symp. on Rarefied Gas Dynamic. Potz-Wahn: DFVLR-Press, 1974. V. 1. P. A7/1-A7/9.
 15. *Lordi J.A., Mates R.E.* Rotational relaxation in nonpolar diatomic gas // Phys. Fluids. 1970. V. 13. № 2. P. 291–308.
 16. *Лебедь И.В., Рябов В.В.* Замкнутая система уравнений газовой динамики и коэффициенты переноса вращательно-возбужденного газа // Тр. ЦАГИ. 1984. Вып. 2256. 24 с.
 17. *Ерофеев А.И.* Численное исследование влияния скорости вращательной релаксации на структуру ударной волны в азоте // Изв. РАН. МЖГ. 1995. № 4. С. 159–167.
 18. *Беликов А.У., Бурштейн А.И., Долгушев С.В. и др.* Константы скорости и времена вращательной релаксации азота в аргоне. Препринт № 183. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1988. 32 с.
 19. *Alsmeyer H.* Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // J. Fluid Mech. 1976. V. 74. Pt 3. P. 497–513.
 20. *Linzer M., Hornig D.F.* Structure of shock fronts in argon and nitrogen // Phys. Fluids. 1963. V. 6. № 12. P. 1661–1668.
 21. *Robben F., Talbot L.* Experimental study of the rotational distribution function of nitrogen in a shock wave // Phys. Fluids. 1966. V. 9. № 4. P. 653–662.
 22. *Wysong I.J., Wadsworth D.C.* Assessment of rotational collision number of nitrogen at high temperatures and its possible effect on modeling of reacting shocks. Proc. 21st Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamic Eds. R. Brun et al., Marseille, France, 1999. V. 2. P. 321–328.
 23. *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.