

УДК 533.6.011.72/8

© 1999 г. С.Л. ГОРЕЛОВ, С.В. РУСАКОВ

## СТРУКТУРА УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ГАЗЕ С ВНУТРЕННИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

Методом прямого статистического моделирования проведены расчеты структуры ударной волны в газе с внутренними степенями свободы на основе VRS-модели. Проведено сравнение результатов расчетов для модели двухатомных молекул (азот) с результатами других работ и экспериментом.

В расчетах переносных свойств газов находят применение некоторые сравнительно простые модели молекул, взаимодействующих как твердые упругие тела (шероховатые и нагруженные сферы, сфероцилиндры, эллипсоиды) [1]. Однако эти модели сложны при практическом приложении в численных расчетах, к тому же не всегда дают адекватное описание переносных свойств реальных газов. В методах прямого статистического моделирования широко применяются так называемые феноменологические модели [2–4], в которых реальный динамический процесс столкновения молекул заменен статистическими процедурами.

В основу данной работы положена модернизированная модель шероховатых сфер переменного диаметра (variable rough sphere-model), с помощью которой, с одной стороны, можно моделировать столкновения двухатомных молекул ( $\gamma = 1,4$ ), а с другой стороны, подбором параметров достигать соответствия функциональной зависимости модельного коэффициента вязкости от температуры и экспериментальных значений.

Модель шероховатых сфер переменного диаметра отличается от классической модели абсолютно шероховатых сфер [5] в двух аспектах: 1) масса молекулы сосредоточена в некоторых отдельных точках внутри сферы соответственно расположению атомов в молекуле, 2) диаметр сферы есть некоторая функция от относительной скорости молекул в момент столкновения, выбором которой определяется зависимость коэффициентов переноса (например, коэффициента вязкости) от температуры.

1. В рассматриваемой модели молекулы представляют собой непроницаемые сферы диаметром  $d$  и массой  $M$ . Величины и направления главных моментов инерции зависят от расположения атомов в молекуле. Предположим, что центр массы молекулы совпадает с центром сферы. Величина  $d$  в каждом столкновении фиксирована, но зависит от относительной скорости центров масс сталкивающихся молекул. Для абсолютно шероховатых сфер относительная скорость сфер в точке их соприкосновения изменяется при столкновении на обратную.

Обозначим угловые скорости молекул в момент столкновения  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , а скорости их центров масс  $V_1$  и  $V_2$ . Пусть  $k$  – единичный вектор вдоль линии центров сфер, направленный от центра 2-й молекулы к центру 1-й в момент столкновения. Тогда относительная скорость  $S$  точек соприкосновения сфер в момент столкновения равна

$$S = V_1 - V_2 + \frac{d}{2} [k \times (\omega_1 + \omega_2)] = -V'_1 + V'_2 - \frac{d}{2} [k \times (\omega'_1 + \omega'_2)] \quad (1.1)$$

где  $V'_1, V'_2, \omega'_1, \omega'_2$  – соответствующие скорости молекул и их угловые скорости после столкновения.

Пусть  $J$  – импульс, передаваемый 2-й молекуле со стороны 1-й, тогда из закона сохранения импульса для скоростей молекул и момента импульса молекул относительно точек их соприкосновения до и после столкновения

$$V'_{1,2} = V_{1,2} \pm \frac{J}{M}, \quad M'_{1,2} = M_{1,2} - \frac{d}{2}[\mathbf{k} \times \mathbf{J}] \quad (1.2)$$

Очевидно, импульс передается вдоль прямой проходящей через точку соприкосновения сфер. Рассмотрим двухатомные молекулы, в которых атомы расположены симметрично относительно центра сферы на расстоянии  $d_1$  друг от друга – модель ротатора ( $\gamma = 1,4$ ). В этом случае  $M = I\omega$ . Молекула имеет два главных момента инерции, равных  $I = (Ma_1^2)/4$ ,  $M = 2m$ , где  $m$  – масса атома. Учитывая, что проекция момента импульса на ось молекулы равна нулю (вектор угловой скорости находится в плоскости, перпендикулярной оси молекулы), получаем для угловых скоростей после столкновения

$$\omega'_{1,2} = \omega_{1,2} - \frac{d}{2I}[\mathbf{l}_{1,2} \times [[\mathbf{k} \times \mathbf{J}] \times \mathbf{l}_{1,2}]] \quad (1.3)$$

где  $\mathbf{l}_1$  и  $\mathbf{l}_2$  – единичные векторы, определяющие направление осей молекул. Из уравнений (1.2), (1.3) с помощью (1.1) получаем выражение для импульса

$$\frac{J}{M} = -\frac{1}{(1+f)} \left\{ f\mathbf{S} + \mathbf{k}(\mathbf{k}, \mathbf{S}) + f[\mathbf{k} \times \mathbf{l}_2] \frac{A}{2} + f[\mathbf{k} \times \mathbf{l}_1] \frac{B}{2} \right\} \quad (1.4)$$

$$A = (a_1c - c_1b)(a_1a - b^2)^{-1}, \quad B = (ac_1 - cb)(a_1a - b^2)^{-1}$$

$$a_1 = -1 - f + \frac{1}{2}(1 - (\mathbf{k}, \mathbf{l}_1)^2), \quad a = -1 - f + \frac{1}{2}(1 - (\mathbf{k}, \mathbf{l}_2)^2), \quad f = \left(\frac{d_1}{d}\right)^2$$

$$c_1 = (\mathbf{l}_1, [\mathbf{k} \times \mathbf{S}]), \quad c = (\mathbf{l}_2, [\mathbf{k} \times \mathbf{S}]), \quad b = \frac{1}{2}((\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2) - (\mathbf{k}, \mathbf{l}_1)(\mathbf{k}, \mathbf{l}_2))$$

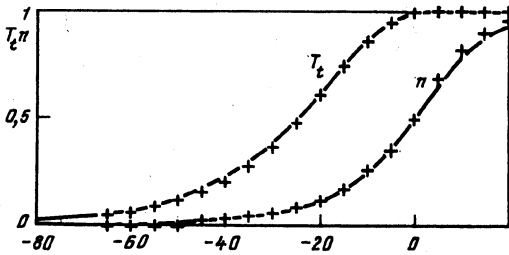
Подставляя (1.4) в (1.2) и (1.3), получаем искомые поступательные и угловые скорости молекул после столкновения. Так как  $d_1 < d$ , то  $0 \leq f \leq 1$ .

В VRS-модель входят два параметра: диаметр сферы  $d$  и параметр  $f$ , которые определяются из сравнения расчетных коэффициентов вязкости и параметра  $Z_r$ , характеризующего среднее число столкновений, необходимое для установления равновесия между поступательными и вращательными степенями свободы [6], с экспериментальными значениями.

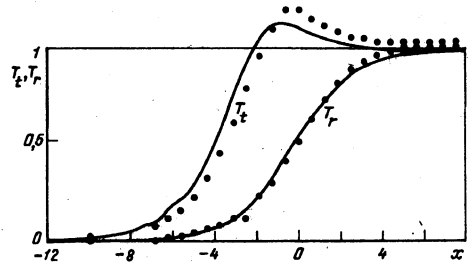
Параметр  $d$  определяется так же, как и в случае модели "дышащих сфер". В данной работе предполагается, что потенциал взаимодействия – степенной, с показателем степени  $\nu$ . Из сравнения зависимости коэффициента вязкости от температуры с экспериментальными значениями из [7–9], для азота и кислорода выбраны значения  $\nu = 9,1$  и  $8,3$  соответственно.

Предполагается, что параметр  $f$  – функция относительной скорости при столкновении  $g = |\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2|$ , которая ищется из условия, что среднее изменение энергии молекул при столкновении в равновесии равно нулю. Таким образом, величина  $f/(1+f)^2$ , которая входит в выражение для изменения энергии при столкновении, представляется как

$$\frac{f}{(1+f)^2} = C(T)g^\alpha$$



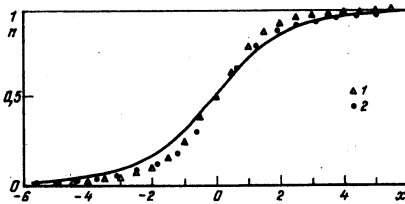
Фиг. 1



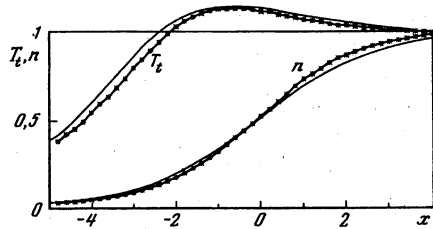
Фиг. 2

Фиг. 1. Профили плотности и температуры в ударной волне при  $M_\infty = 35$ ,  $\nu = 4$ , точки – данные [15]

Фиг. 2. Профили поступательной и вращательной температур в ударной волне при  $M_\infty = 10$ ,  $T_\infty = 300$  К, точки – данные [13]



Фиг. 3



Фиг. 4

Фиг. 3. Профили плотности в ударной волне при  $M_\infty = 10$ ,  $T_\infty = 300$  К, точки 1 – данные [14], точки 2 – данные [13]

Фиг. 4. Профили плотности и поступательной температуры в ударной волне при  $M_\infty = 10$ ,  $T_\infty = 300$  К, кривые –  $Z_{r\infty} = 20$ , точки –  $Z_{r\infty} = 15,7$

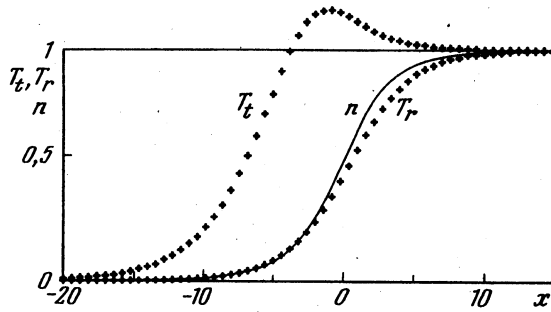
Вычисляя выражение для изменения энергии при столкновении в равновесном случае и приравнявая его нулю, получаем  $\alpha = -1 + 4/\nu$ . Вычисляя затем величину  $Z_r$  методом [6] и приравнявая эту величину соответствующему выражению из [1], окончательно получаем

$$C(T) = (3\sqrt{\pi}Z_r)^{-1} 2^{(3\nu-4)/2\nu} \left(\frac{2kT}{M}\right)^{(\nu-4)/2\nu} \Gamma\left(2 - \frac{2}{\nu}\right)$$

Полагая, что модель работает при  $T > 300$  К, получаем, что  $f$  изменяется от 0,0165 ( $T \rightarrow \infty$ ) до 0,0633 ( $T = 300$  К) для азота и от 0,0176 ( $T \rightarrow \infty$ ) до 0,0778 ( $T = 300$  К) для кислорода. Таким образом,  $f \ll 1$ , что соответствует предположению  $d_1 < d$ . При  $f \rightarrow 0$  следуют обычные формулы, выражающие скорости молекул после столкновения через скорости молекул до столкновения для упругих сфер. Модель проверена на задаче об однородной релаксации двухатомного газа [10].

2. Задача о распространении ударной волны решается методом прямого статистического моделирования. В начальный момент времени ударная волна в виде бесконечно тонкого скачка уплотнения размещается в середине контрольного объема (число ячеек выбирается четным).

Стационарное распределение всех параметров среды вычисляется после установления процесса во времени. Для того чтобы скачок был стационарен, использовался алгоритм [11], в котором новые частицы вводятся в контрольный объем через данный участок границы так, чтобы на этом участке средние по времени потоки вещества, импульса и энергии равнялись своим теоретическим значениям.



Фиг. 5. Профили плотности, поступательной и вращательной температур в ударной волне при  $M_\infty = 35$ ,  $T_\infty = 200$  К,  $Z_{\infty} = 15,7$

Наиболее принципиальным моментом является моделирование столкновительной релаксации. Соответствующий алгоритм должен обеспечивать необходимую частоту столкновений и при этом по возможности минимальный объем вычислений. Для моделирования столкновений частиц использовался алгоритм схемы [12]. Скорости после столкновения вычислялись согласно VRS-модели.

3. Метод решения задачи распространения ударной волны в газе был отестирован на одноатомном газе. Рассматривались максвелловские молекулы ( $\nu = 4$ ) и твердые сферы. Характерные числа Маха на бесконечности 11 и 35. На фиг. 1 сплошными кривыми представлены нормализованные профили плотности и температуры в ударной волне, а точками – результаты других работ для максвелловских молекул и  $M_\infty = 35$ . Координата  $x$  отнесена к длине свободного пробега до ударной волны  $\lambda_\infty = 16\mu_1/5\rho_1(2\pi RT_1)^{1/2}$ .

Небольшое расхождение данных объясняется различным выбором шага по пространству и числом моделирующих частиц (в данной работе расчеты проводились на сетке с шагом  $\Delta x = 0,2$  и с максимальным числом молекул в ячейке до ударной волны  $N_0 = 20$ ).

Расчеты структуры ударной волны в азоте проведены на основе VRS-модели. Результаты вычислений сравнивались с результатами [13, 14].

На фиг. 2 приведены профили поступательной и вращательной температур для ударной волны с числом  $M_\infty = 10$  и температурой набегающего потока 300 К для VRS-модели, а на фиг. 3 представлен профиль плотности для этого случая в сравнении с данными [13] и экспериментом [14]. Можно сделать вывод о качественно похожем поведении профилей плотности и температуры в зоне ударной волны.

В данной работе проведено исследование влияния разброса различных параметров модели на структуру ударной волны. Это существенно, так как параметры модели определяются на основе сравнения с экспериментальными данными и от их точности зависит результат расчета.

Например, точность определения показателя степени в потенциале взаимодействия  $\nu$  зависит от точности экспериментального определения коэффициента вязкости при различных температурах. Проведенные расчеты показали слабый разброс результатов при изменении  $\nu$  от 9 до 10.

Вопрос о выборе  $Z_r$  принципиален при определении параметров динамической модели, так как диапазон изменений  $Z_r$  в процессе решения задачи совпадает с разбросом экспериментальных данных. В работе использовалась формула Паркера для  $Z_r$ , хотя этот параметр должен зависеть и от вращательной температуры [13].

Проведено исследование влияния величины  $Z_{r\infty}$ , входящей в формулу для  $Z_r$  [6], которая для азота, по разным источникам, может изменяться в пределах  $Z_{r\infty} \cong 10-20$ . На фиг. 4 приведены результаты вычислений для  $Z_{r\infty} = 15,7$  и 20. Как и следовало

ожидать, увеличение  $Z_{r\infty}$  приводит к уширению фронта ударной волны. На фиг. 5-представлена структура ударной волны для азота при  $M_\infty = 35$ ,  $T_\infty = 200$  К,  $Z_{r\infty} = 15,7$ .

**Заключение.** Полученные решения задачи о структуре ударной волны для газа с внутренними степенями свободы на основе VRS-модели показали хорошее согласие с результатами других работ и экспериментом. Выявлены различия в структуре ударной волны при применении данной динамической модели и феноменологических моделей. Достоверность результатов зависит от точности экспериментального определения коэффициента вязкости и параметра  $Z_r$ , причем влияние последнего оказывается значительней.

Работа выполнена при финансовой помощи Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 96-01-01244) и Гранта поддержки ведущих научных школ (код проекта 96-15-96063).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
2. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
3. Larsen P.S., Borgnakke C. Statistical collision model for simulating polyatomic gas with restricted energy exchange // Rarefied Gas Dynamics. Potz-Wahn. 1974. V. 1. P. A7/t - A 7/9.
4. Pullin D.I. Kinetic models for polyatomic molecules with phenomenological energy exchange // Phys. Fluids. 1978. V. 21. № 2. P. 209-216.
5. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит., 1960. 510 с.
6. Parker J.G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases // Phys. Fluids. 1959. V. 2. № 4. P. 449-462.
7. Гордеев О.А., Калинин А.П., Комов А.Л., Люстернак В.Е., Самуйлов Е.Е., Соколова И.А., Фокин Л.Р. Потенциалы взаимодействия, упругие сечения, интегралы столкновений компонентов воздуха для температур до 20000 К (методы определения, рекомендуемые данные) // Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. М.: ИВТ АН СССР, 1985. № 5 (55). 83 с.
8. Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1989. 231 с.
9. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 720 с.
10. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра // Мат. моделирование. 1997. Т. 9. № 10. С. 43-49.
11. Белоцерковский О.М., Яницкий В.Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. 1. Основы построения метода. 2. Вычислительные аспекты метода. // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. № 5. С. 1195-1208; № 6. С. 1553-1567.
12. Лукшин А.В., Смирнов С.Н. Об одном стохастическом методе решения уравнения Больцмана // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28. № 2. С. 293-297.
13. Ерофеев А.И. Численное исследование вращательной релаксации азота // Изв. РАН. МЖТ. 1993. № 2. С. 124-132.
14. Alsteyer 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.
15. Lumpkin F.E., Chapman D.R. Accuracy of the Burnett equation for hypersonic real gas flow // J. Thermophys. and Heat Transfer. 1992. V. 6. № 3. P. 419-425.