

УДК 533.6.011.8

Модели первого приближения для неравновесных течений многоатомных газов

Никитченко Ю.А.

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия

e-mail: nikitchenko7@yandex.ru

Аннотация

Рассмотрены модели первого приближения, содержащие 5 и 6 моментных уравнений. Модели предназначены для расчета неравновесных, преимущественно сверх- и гиперзвуковых, течений. Энергообмен между поступательными и внутренними степенями свободы в 5-моментной модели учтен коэффициентом объемной вязкости, в 6-моментной – двумя самостоятельными уравнениями энергии. На примере решения задачи о профиле ударной волны показано, что 5-моментная модель дает качественно неверные значения энергий поступательных и внутренних степеней свободы. Погрешности 6-моментной модели носят количественный характер.

Ключевые слова: моментные уравнения, первое приближение, объемная вязкость, двухтемпературная модель, профиль ударной волны.

Введение

Характерной особенностью поля течения, возникающего при обтекании гиперзвукового летательного аппарата, является образование областей с высокой динамической неравновесностью. В этих областях энергия теплового движения существенно неравномерно распределена между степенями свободы молекул, как поступательными, так и внутренними (вращательными и колебательными). Тестовые расчеты плоских ударных волн показывают, что количество энергии теплового движения, сосредоточенной на продольной поступательной степени свободы, при $M_\infty = 5$ может почти вдвое превосходить значение средней энергии теплового движения и более чем втрое превышать энергию внутренних степеней свободы.

Вместе с тем, пороговые значения энергий многих физико-химических процессов, протекающих в газе и на поверхности летательного аппарата, определены энергией (температурой) поступательного движения молекул. Из кинетической теории известно, что коэффициенты переноса (вязкости, теплопроводности, диффузии) определяются поступательной температурой (температурой поступательных степеней свободы). В этой связи становится актуальной разработка физико-математических моделей неравновесных течений.

Методы прямого статистического моделирования и кинетические модели течения газовой среды используются, как правило, в задачах с относительно простой геометрией в силу своей низкой экономичности.

Моментные методы, базирующиеся на кинетическом уравнении, но позволяющие описывать течение в газодинамических переменных, не достаточно хорошо разработаны для практического использования в гиперзвуковой области течений. Основным препятствием является коротковолновая неустойчивость системы моментных уравнений.

В практических расчетах широко распространена феноменологическая модель Навье-Стокса-Фурье (НСФ). В случае течения одноатомного газа эта модель является строгим первым приближением (в смысле процедуры Чепмена-Энскога) кинетического уравнения. Применительно к течениям многоатомных газов модель НСФ носит скорее эвристический характер. Это связано с тем, что энергообмен между поступательными и внутренними степенями свободы молекул учитывается на основании представлений общего характера. Уточним, что модель НСФ базируется на теории сплошной среды, из которой не следует объемная вязкость в каком-либо конкретном выражении.

Строгие соотношения для коэффициента объемной вязкости, следующие из молекулярно кинетической теории, получены рядом авторов, см. например [1]. В удобной для газодинамических задач форме коэффициент объемной вязкости получен из первого приближения системы моментных уравнений многоатомных газов [2].

Сразу оговоримся, что коэффициент объемной вязкости имеет очень специфическое назначение. В модели НСФ этот коэффициент предназначен для связи термодинамического давления (давления в традиционном понимании) с

механическим давлением, представляющим собой треть следа тензора напряжений. В более информативных моделях, например кинетических или моментных, необходимость в коэффициенте объемной вязкости отпадает, так как процессы энергообмена между поступательными и внутренними степенями свободы в таких моделях описаны явно.

Модель первого приближения с коэффициентом объемной вязкости в форме [2] будет рассматриваться как 5-моментная модель, так как представляет собой первое приближение 24-моментной системы [3] и содержит ее первые пять уравнений. Коэффициент объемной вязкости в рамках этой модели позволяет формально определять энергии поступательных и внутренних степеней свободы. В работе [2] показана несостоятельность 5-моментной модели в данном приложении.

В работе [4] предложена 6-моментная модель первого приближения. Энергии теплового движения поступательных и внутренних степеней свободы представлены двумя самостоятельными уравнениями. Коэффициент объемной вязкости в этой модели не используется. Вопрос адекватности получаемых значений энергий реальным значениям в работе [4] не рассматривался. Выяснению этого вопроса посвящена настоящая работа.

1. Система 24-х моментных уравнений

Система моментных уравнений многоатомных газов (24-моментная система) была получена в работе [3]. В работах [2] и [4] используются различные, эквивалентные

формы записи этой системы. При получении моделей первого приближения различные формы 24-моментной системы приводят к неэквивалентным системам уравнений. Причины этого будут пояснены ниже.

Одна из форм 24-моментной системы, используемая в работе [2], записана относительно термодинамических величин давления и температуры. Уравнения этой системы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0; (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial u_i}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P_{i\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0; (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} + (\gamma - 1) T_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{1}{c_v \rho} \frac{\partial q_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0; (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial \theta}{\partial x_{\alpha}} + \frac{2}{3} T_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\frac{2}{3R} \varphi_{\alpha} - \frac{1}{c_{\Omega}} \omega_{\alpha} \right) = -\frac{\theta}{h\tau_p}; (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p_{ij}^m + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(u_{\alpha} p_{ij}^m \right) + P_{*\alpha} \frac{\partial u_{*}}{\partial x_{\alpha}} - \delta_{ij} \frac{2}{3} P_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \\ + 2 \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\varphi_{ij\alpha} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \varphi_{\alpha} \right) = -\frac{p_{ij}^m}{\tau_p}; (5) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \varphi_{ijk}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(u_{\alpha} \varphi_{ijk} \right) + \varphi_{**\alpha} \frac{\partial u_{*}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{R}{2} P_{*\alpha} \frac{\partial T_{**}}{\partial x_{\alpha}} = -\frac{2}{3} \frac{\varphi_{ijk}}{\tau_p}; (6)$$

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(u_{\alpha} \omega_i \right) + \omega_{\alpha} \frac{\partial u_i}{\partial x_{\alpha}} + c_{\Omega} P_{i\alpha} \frac{\partial T_{\Omega}}{\partial x_{\alpha}} = -\frac{\omega_i}{\tau_p}. (7)$$

Здесь использована аппроксимация Эйкена $Pr = 4\gamma/(9\gamma - 5)$. При этом время релаксации момента ω_i совпадает с временем релаксации напряжений τ_p .

Повторяющиеся греческие подстрочные индексы в одночленах подразумевают суммирование от 1 до 3, например: $P_{\alpha\alpha} \equiv P_{11} + P_{22} + P_{33}$.

Подстрочные звездочки в одночлене обозначают операцию симметрирования тензора с исключением повторений тождественных по величине членов (компактное симметрирование). Например:

$$M_{**\alpha}^{(3)} \frac{\partial u_*}{\partial x_\alpha} \equiv M_{ij\alpha}^{(3)} \frac{\partial u_k}{\partial x_\alpha} + M_{ki\alpha}^{(3)} \frac{\partial u_j}{\partial x_\alpha} + M_{jk\alpha}^{(3)} \frac{\partial u_i}{\partial x_\alpha}. \text{ Здесь } M^{(3)} \text{ – симметричный тензор}$$

третьего ранга.

Основные символы.

m_0, c_i, ε – масса, тепловая скорость и внутренняя энергия молекулы;

$f \equiv f(t, x_1, x_2, x_3, c_1, c_2, c_3, \varepsilon)$ – одночастичная функция распределения;

ρ, u_i, T – плотность, скорость и термодинамическая температура газа;

E_Ω – энергия внутренних степеней свободы молекул в единице объема;

$T_t, T_\Omega = E_\Omega/(c_\Omega \rho), \theta = T_t - T_\Omega$ – температуры поступательных и внутренних степеней свободы молекул и разность температур;

$P_{ij} = m_0 \int c_i c_j f d\bar{c} d\varepsilon, T_{ij} = P_{ij}/(\rho R)$ – полное и удельное напряжения;

$p^m = P_{\alpha\alpha}/3 = \rho R T_t, p = \rho R T$ – механическое и термодинамическое давления;

$p_{ij}^m = P_{ij} - \delta_{ij} p^m$, $p_{ij} = P_{ij} - \delta_{ij} p$ – механическое и термодинамическое неравновесные напряжения;

$\varphi_{ijk} = \frac{m_0}{2} \int c_i c_j c_k f d\bar{c} d\varepsilon$ – момент 3-го порядка;

$\varphi_i \equiv \varphi_{i\alpha\alpha}$ – вектор теплового потока, обусловленный переносом энергии поступательного движения молекул;

$\omega_i = \int c_i \varepsilon f d\bar{c} d\varepsilon$ – вектор теплового потока, обусловленный переносом внутренней энергии молекул;

$q_i = \varphi_i + \omega_i$ – полный тепловой поток.

c_v , γ , k , $R = k/m_0$ – изохорная теплоемкость, показатель адиабаты, постоянная Больцмана и газовая постоянная;

$c_\Omega = c_v - 3/2 R$ – теплоемкость внутренних степеней свободы;

τ_p , τ_θ – времена релаксации напряжений и разности температур;

$h = \tau_\theta / \tau_p$.

В настоящей работе величина h определена в соответствии с работой [5]:

$$h = Z \frac{(7-2s)(5-2s)}{30}. \quad (8)$$

Здесь $1/Z$ представляет долю неупругих столкновений по отношению к общему числу столкновений молекул; s – показатель степени температуры в аппроксимации коэффициента вязкости $\mu = \mu(T^s)$.

Приведем некоторые полезные в дальнейшем соотношения. Энергия теплового движения молекул может быть разложена на поступательную и внутреннюю составляющие следующим образом:

$$c_v \rho T = \frac{3}{2} R \rho T_t + \left(c_v - \frac{3}{2} R \right) \rho T_\Omega. \quad (9)$$

Простейшие преобразования позволяют выразить термодинамическую температуру как средневзвешенное значение поступательной и внутренней температур, а также получить соотношения этих температур с использованием разности температур θ :

$$T = \frac{3}{2}(\gamma - 1)T_t + \frac{5 - 3\gamma}{2}T_\Omega; \quad (10)$$

$$T_t = T + \frac{5 - 3\gamma}{2}\theta; \quad (11)$$

$$T_\Omega = T - \frac{3}{2}(\gamma - 1)\theta. \quad (12)$$

Тензор напряжений может быть разложен на сферическую и бездивергентную части двумя способами:

$$P_{ij} = p_{ij}^m + \delta_{ij} p^m = p_{ij} + \delta_{ij} p. \quad (13)$$

С учетом определений механического и термодинамического давлений из (11) и (13) следует связь между термодинамическим и механическим неравновесными напряжениями:

$$p_{ij} = p_{ij}^m + \delta_{ij} \frac{5 - 3\gamma}{2} \rho R \theta. \quad (14)$$

В работе [4] уравнение энергии (3) 24-моментной системы представлено в виде двух уравнений: уравнения поступательной энергии и уравнения внутренней энергии теплового движения:

$$\frac{\partial T_t}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial T_t}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} T^{\alpha\beta} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3\rho R} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{5-3\gamma}{2h} \frac{T_t - T_\Omega}{\tau_p}; \quad (15)$$

$$\frac{\partial T_\Omega}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial T_\Omega}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{c_\Omega \rho} \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{3(\gamma-1)}{2h} \frac{T_t - T_\Omega}{\tau_p}. \quad (16)$$

Уравнение разности температур (4) становится избыточным и исключается из системы. Остальные уравнения остаются неизменными. Подчеркнем, что обе 24-моментные системы эквивалентны и представляют собой единую физико-математическую модель течения, называемую в работе [2] 24-моментной моделью.

2. Модель первого приближения в термодинамических переменных

Порядок приближения в смысле процедуры Чепмена-Энскога определяется показателем степени малых величин, удерживаемых в уравнениях системы.

Выберем в качестве единиц измерения времени, геометрического размера, массы, энергии и температуры такие единицы, в которых макроскопические величины, включая характерное время и геометрический размер, будут иметь порядок единицы. Константы, входящие в уравнения 24-моментных систем, изменят свои значения, но также будут иметь порядок величины – единица.

В умеренно разреженном газе средняя длина и среднее время свободного пробега молекулы будут малыми величинами. Примем в качестве малой величины среднее

время свободного пробега τ или совпадающее с ним по порядку величины время релаксации напряжений τ_p .

Уточним, что даже в плотных газах могут возникать области высокой неравновесности, размер которых соизмерим с длиной свободного пробега молекул. Физико-математические модели первого приближения для таких течений теоретически не обоснованы и требуют дополнительного тестирования. В частности, ударная волна является областью высокой неравновесности независимо от степени разреженности газа. Это обстоятельство делает задачу о профиле плоской ударной волны основным тестом пригодности модели того или иного приближения для описания неравновесного течения.

Считая время свободного пробега молекулы τ малым, оценим порядок малости неравновесных величин, входящих в 24-моментную систему. Нетрудно заметить, что в левых частях моментных уравнений (4) ... (7) содержатся члены порядка единицы. Эти члены имеют вид выражений $T \frac{\partial u_{...}}{\partial x_{...}}$, $p \frac{\partial u_{...}}{\partial x_{...}}$, $p \frac{\partial T}{\partial x_{...}}$. Различие между

p и p^m , T и T_t или T_Ω в данном случае несущественно. Правые части указанных уравнений, т.е. релаксационные члены, также должны иметь порядок единицы. Так как релаксационные члены содержат неравновесную величину, отнесенную к времени релаксации, то неравновесная величина должна иметь порядок малости τ . Исключение составляют моменты φ_{ijk} с несовпадающими значениями индексов, но такие моменты в моделях первого приближения не используются.

Оставим в левых частях уравнений (4) ... (7) только старшие члены. Перепишем уравнения относительно неравновесных величин, фигурирующих в релаксационных членах. В результате получим выражения неравновесных величин в первом (τ^1) приближении. Номер приближения обозначен надстрочным индексом в квадратных скобках:

$$\theta^{[1]} = -\frac{2}{3} h \frac{\mu}{R\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}; \quad (17)$$

$$p_{ij}^{m[1]} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right); \quad (18)$$

$$\varphi_{ijk}^{[1]} = -\frac{3}{4} R\mu \left(\delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_k} + \delta_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_j} + \delta_{jk} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right), \quad \varphi_i^{[1]} \equiv \varphi_{i\alpha\alpha}^{[1]} = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}; \quad (19)$$

$$\omega_i^{[1]} = -c_\Omega \mu \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (20)$$

В этих выражениях учтено, что для выполнения закона трения Стокса необходимо: $\tau_p p = \mu$. Для перехода к термодинамическим переменным используем (14) и соотношение $q_i = \varphi_i + \omega_i$:

$$p_{ij}^{[1]} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} h \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (21)$$

$$q_i^{[1]} = \varphi_i^{[1]} + \omega_i^{[1]} = -\frac{c_p}{\text{Pr}} \mu \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (22)$$

В уравнении (21) коэффициент объемной вязкости представлен как

$$\mu' = \frac{2}{3} \frac{5-3\gamma}{2} h \mu. \quad (23)$$

Уравнения (1), (2), (3) в совокупности с (21), (22) образуют 5-моментную модель первого приближения или модель НСФ с явно выраженным коэффициентом объемной вязкости:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial u_i}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P_{i\alpha}}{\partial x_\alpha} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + (\gamma - 1) T_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{1}{c_p \rho} \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \end{cases} \quad (24)$$

$$p_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} h \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}; \quad q_i = -\frac{c_p}{\text{Pr}} \mu \frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

Здесь $P_{ij} = p_{ij} + \delta_{ij} p$, $\mu = \mu(T^s)$.

Система (24) определяет только поступательную температуру, но зависимости (11) и (12) в совокупности с (17) позволяют определить поступательную и внутреннюю температуры в первом приближении:

$$T_t^{[1]} = T + \frac{5-3\gamma}{2} \theta^{[1]} = T - \frac{5-3\gamma}{3} h \frac{\mu}{R\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}; \quad (25)$$

$$T_\Omega^{[1]} = T - \frac{3}{2} (\gamma - 1) \theta^{[1]} = T + (\gamma - 1) h \frac{\mu}{R\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (26)$$

Насколько эти выражения адекватны описываемым физическим процессам будет показано в последнем разделе.

3. Двухтемпературная модель первого приближения

Двухтемпературная или б-моментная модель первого приближения может быть построена аналогичным образом. Система дифференциальных уравнений этой модели содержит уравнения сохранения массы и импульса, а также два уравнения сохранения энергии в форме (15), (16). Для замыкания системы достаточно уравнений (18), (19), (20).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial u_i}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P_{i\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = 0 \\ \frac{\partial T_t}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial T_t}{\partial x_{\alpha}} + \frac{2}{3} T_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{2}{3\rho R} \frac{\partial \varphi_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = -\frac{5-3\gamma}{2h} \frac{T_t - T_{\Omega}}{\tau_p} \\ \frac{\partial T_{\Omega}}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial T_{\Omega}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{c_{\Omega}\rho} \frac{\partial \omega_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} = \frac{3(\gamma-1)}{2h} \frac{T_t - T_{\Omega}}{\tau_p} \end{array} \right. ; (27)$$

$$P_{ij}^m = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} \right); \quad \varphi_i = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T_t}{\partial x_i}; \quad \omega_i = -c_{\Omega}\mu \frac{\partial T_{\Omega}}{\partial x_i}.$$

Здесь $P_{ij}^m = p_{ij}^m + \delta_{ij} p^m$, $\mu = \mu(T_t^s)$. Коэффициент объемной вязкости не используется.

Термодинамическая температура не является системной величиной. При необходимости она может быть вычислена по уравнению (20).

Если формально следовать порядку приближения неравновесных величин, то в релаксационных членах уравнений (15) и (16) разность температур должна быть заменена своим первым приближением, т.е.

$$\frac{\partial T_t}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial T_t}{\partial x_{\alpha}} + \frac{2}{3} T_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{2}{3\rho R} \frac{\partial \varphi_{\alpha}^{[1]}}{\partial x_{\alpha}} = -\frac{5-3\gamma}{2h} \frac{\theta^{[1]}}{\tau_p}; (28)$$

$$\frac{\partial T_{\Omega}}{\partial t} + u_{\alpha} \frac{\partial T_{\Omega}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{c_{\Omega} \rho} \frac{\partial \omega_{\alpha}^{[1]}}{\partial x_{\alpha}} = \frac{3(\gamma - 1) \theta^{[1]}}{2h \tau_p}. \quad (29)$$

Здесь в обозначениях тепловых потоков сохранен значок первого приближения, опущенный в системах (24) и (27).

Нетрудно показать, что (28) и (29) представляют собой внепорядковые выражения. Левые части этих уравнений помимо старших членов (порядок единица), содержат величины порядка τ . Таким образом, левые части определены в «навье-стоксовом» приближении, т.е. уточнены до величин порядка τ . Релаксационные члены уравнений (28), (29) имеют порядок единица и не содержат членов порядка τ , что соответствует «эйлерову» приближению.

С феноменологической точки зрения левые, дифференциальные части моментных уравнений определяют процессы переноса и наработки неравновесных величин. Правые части описывают процесс релаксации этой величины. Моментные уравнения (28) и (29) описывают указанные процессы в разном приближении, что и делает их несостоятельными с точки зрения феноменологии. Формальная сторона этого вопроса разобрана в работе [2]. В настоящей работе двухтемпературная модель с уравнениями энергии в форме (28), (29) рассматриваться не будет.

4. Тестовый расчет

В качестве предварительного теста для разработанных моделей рассмотрена задача о профиле ударной волны. Эта задача решалась в традиционной постановке. На верхней по потоку границе расчетной области задавались условия невозмущенного

потока. На нижней границе – условия Ренкина-Гюгонио. На обеих границах значения неравновесных величин p_{ij} , φ_{ijk} , ω_i принимались равными нулю, т.е. состояние газа считалось равновесным. Средняя длина свободного пробега молекул в невозмущенном потоке определена как $\lambda_\infty = \frac{\mu_\infty}{p_\infty} \sqrt{RT_\infty}$.

Для качественного анализа результатов тестирования применялись профили, рассчитанные по модельному кинетическому уравнению, предложенному в работе [2] для анализа системы моментных уравнений и “настроенному” на рассматриваемую задачу по экспериментальным профилям работы [6].

На приведенных ниже графиках показаны результаты расчета профилей плоской ударной волны в двухатомном газе. Все графики построены при $M_\infty = 5$. На рис. 1 показаны профили, рассчитанные по 5-моментной модели. Профили поступательной и внутренней температур построены с использованием зависимостей (25), (26) и заимствованы из работы [2]. В этом тесте принято $h = 1$, т.е. поступательные и внутренние степени свободы равноценны с точки зрения скорости протекания релаксационных процессов. Вместе с тем, экспериментально установлено, что внутренние (вращательные) степени свободы релаксируют в несколько раз медленнее поступательных.

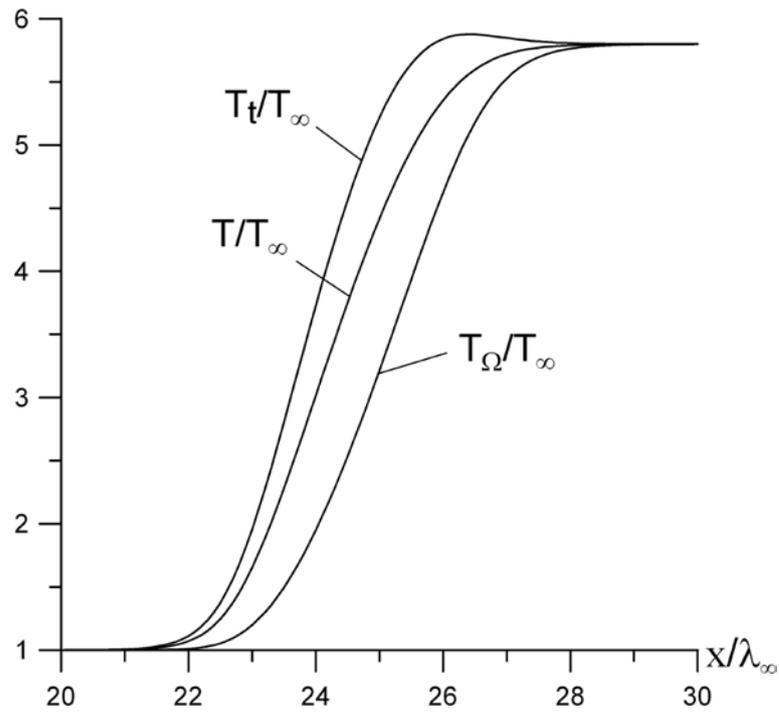


Рис. 1. Профили температур в плоской ударной волне двухатомного газа. 5-моментная модель первого приближения (24), $s = 1$, $h = 1$.

При значениях $h > 1$ на профиле T_Ω , рассчитанном по 5-моментной модели, возникает физически неадекватный участок, на котором в процессе релаксации энергия теплового движения передается от «холодных» внутренних степеней свободы к «горячим» поступательным степеням.

На рис. 2 показаны профили, рассчитанные при $h = 2.5$. Это значение соответствует зависимости (8) при $s = 1$ и $Z = 5$. Если учесть, что 5-моментная модель явным образом требует выполнения закона сохранения энергии в виде уравнения (3), то можно утверждать, что занижение температуры T_Ω влечет за собой завышение температуры T_t в соответствии с соотношением (10).

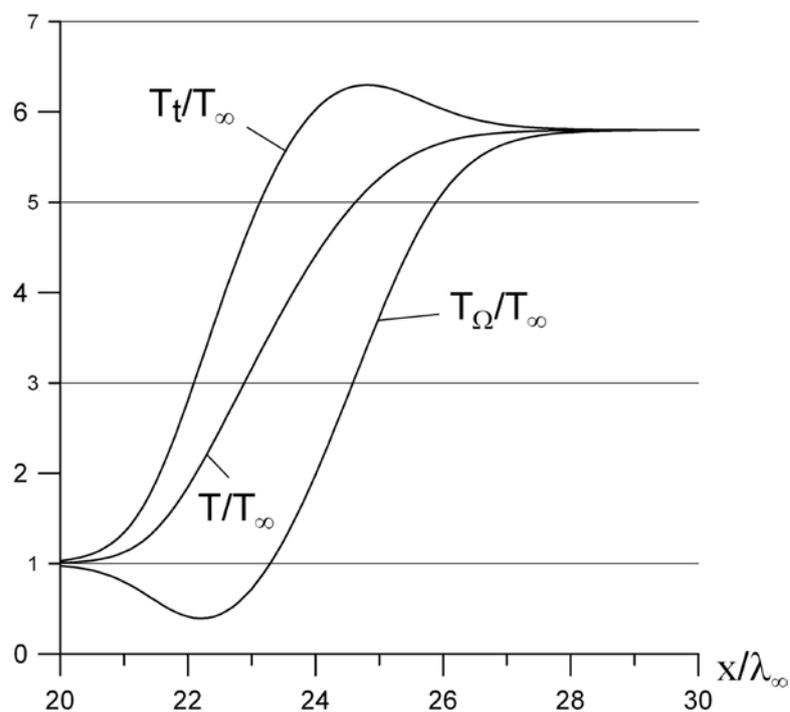


Рис. 2. Профили температур в плоской ударной волне двухатомного газа. 5-моментная модель первого приближения (24), $s = 1$, $h = 2.5$.

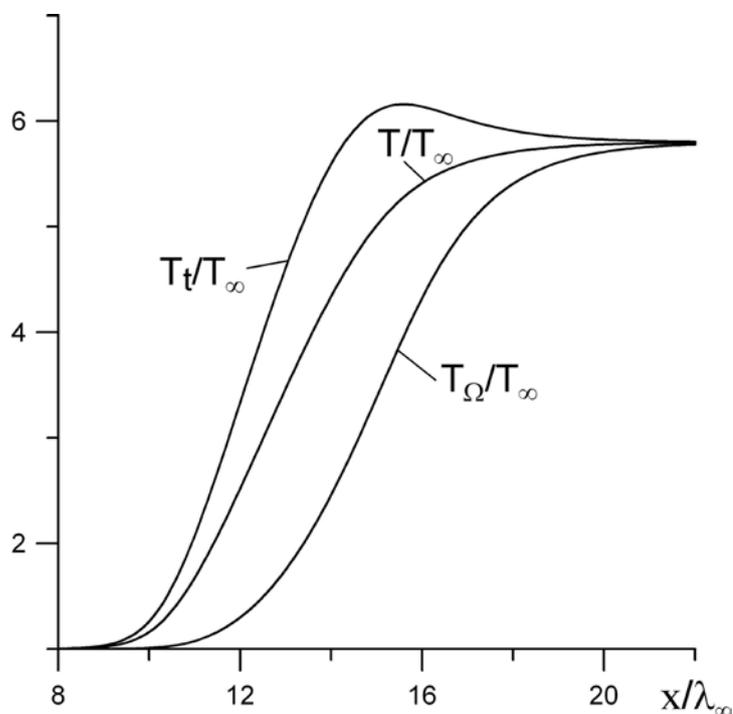


Рис. 3. Профили температур в плоской ударной волне двухатомного газа. Двухтемпературная (6-моментная) модель первого приближения (27), $s = 1$, $h = 2.5$.

Профили рис. 3 построены при тех же значениях параметров, что и профили рис. 2. Расчеты проведены по 6-моментной двухтемпературной модели. Поступательная и внутренняя температуры определены непосредственно системой (27). На графиках отсутствует физически неадекватная область.

На рис. 4 совмещены профили, даваемые кинетической моделью (сплошные линии), и профили 6-моментной модели (пунктирные линии). Параметры s и h 6-моментной модели подобраны таким образом, чтобы наклон профиля плотности соответствовал экспериментальным данным работы [6]. Наблюдается количественное расхождение между профилями кинетической и 6-моментной моделей. В частности, размер возмущенной области, даваемый 6-моментной моделью, существенно меньше. Причины такого заужения профилей ударных волн, характерного для всех моделей первого приближения, подробно рассмотрены в работе [2]. Качественные несоответствия профилей отсутствуют.

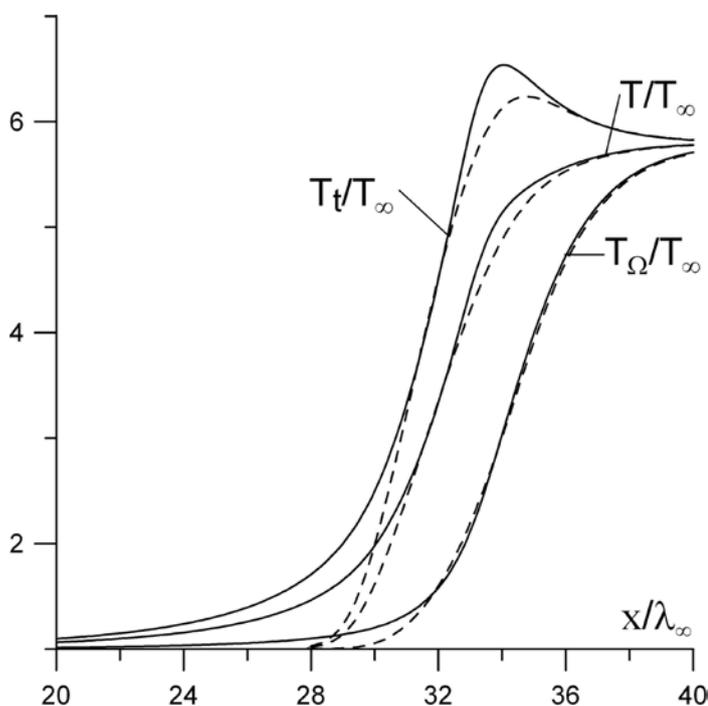


Рис. 4. Профили температур в плоской ударной волне двухатомного газа. Сплошные линии – кинетическая модель [2]; пунктирные линии – двухтемпературная (6-моментная) модель первого приближения (27), $s = 1$, $h = 3.1$.

На рис. 5 совмещены профили, даваемые 6-моментной моделью (сплошные линии), и профили 5-моментной модели (пунктирные линии). Профили 6-моментной модели соответствуют рис.4. Параметры s и h 5-моментной модели подобраны из указанных выше соображений. Помимо отмеченных выше качественных несоответствий, 5-моментная модель дает более узкую область возмущений, чем 6-моментная модель.

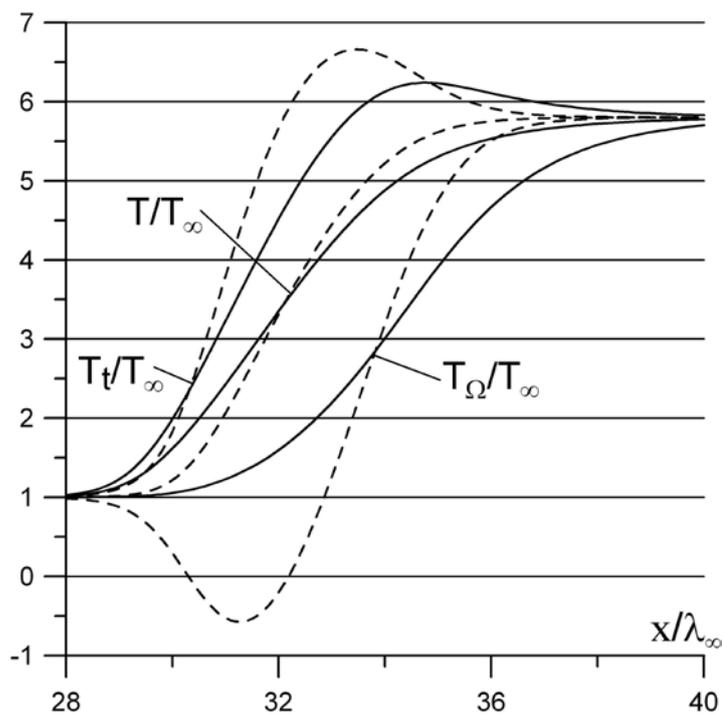


Рис. 5. Профили температур в плоской ударной волне двухатомного газа. Сплошные линии – двухтемпературная (6-моментная) модель первого приближения (27), $s = 1$, $h = 3.1$; пунктирные линии – 5-моментная модель первого приближения (24), $s = 1$, $h = 4$.

4. Обсуждение результатов

Расчетные данные, приведенные на рис. 4 и рис. 5, подтверждают известное свойство моделей первого приближения давать зауженную область возмущений в случае торможения сверх- и гиперзвуковых потоков, см. например [2]. Более широкая область возмущения 6-моментной модели обусловлена, по-видимому, использованием в аппроксимации коэффициента вязкости поступательной температуры, что повышает вязкие свойства модели в течениях торможения. В 5-моментной модели такая аппроксимация привела бы к физически неадекватным решениям, так как T_Ω и, следовательно, T_t определены этой моделью качественно неверно.

Проанализируем причины такой физической неадекватности с феноменологической точки зрения. Система уравнений (24) содержит только уравнения сохранения массы, импульса и энергии. Эти уравнения представляют собой моментные уравнения, не содержащие релаксационных членов. Отсутствие релаксационных членов, очевидно, связано с тем, что уравнения сохранения записаны для моментов, являющихся инвариантами межмолекулярных столкновений. Таким образом, 5-моментная модель явным образом требует выполнения только законов сохранения. Диссипативные процессы описаны в данной модели неявно.

Во всех моделях первого приближения необратимый переход энергии группового движения молекул в энергию их теплового движения сводится к равенству

быстроты релаксации и быстроты динамической наработки неравновесного напряжения в первом приближении. В 6-моментной модели это:

$$P^m \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) = - \frac{P_{ij}^m}{\tau_p}. \quad (30)$$

В 5-моментной модели:

$$P \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} h \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) = - \frac{P_{ij}}{\tau_p}. \quad (31)$$

Принципиально важно, что зависимость (30) описывает перераспределение энергии только между поступательными степенями свободы, а зависимость (31) - еще и между поступательными и внутренними степенями свободы. В выражении (31) эти функции выполняет коэффициент объемной вязкости (23). В 6-моментной модели энергообмен между поступательными и внутренними степенями свободы описан явно и представлен релаксационными членами уравнений энергии системы (27) или (15), (16).

Принципиальное отличие описания процессов энергообмена между поступательными и внутренними степенями свободы двумя рассматриваемыми моделями обнаруживается и с формальной точки зрения. Если считать время релаксации известной функцией, то бесконечная система моментных уравнений является прямым следствием кинетического уравнения.

Для кинетического уравнения справедлива *H*-теорема Больцмана, представляющая собой молекулярно-кинетическую трактовку второго закона термодинамики. Таким

образом, модели течений, базирующиеся на системе моментных уравнений, явным образом требуют выполнения указанного закона.

Численное тестирование моментных моделей (см. например [2]) показывает, что даже в условиях сильно неравновесных течений процесс энергообмена между поступательными и внутренними степенями свободы описывается качественно верно. Отметим, что коротковолновая неустойчивость моментных систем не связана с процессом указанного энергообмена, так как в равной степени проявляется в течениях как многоатомных, так и одноатомных газов, не имеющих внутренних степеней свободы.

Обе модели первого приближения получены из 24-моментной системы уравнений. Использование термодинамических величин p и T , т.е. величин осредненных по всем степеням свободы, приводит к 5-моментной модели. В результате такого осреднения из уравнения энергии исчезают релаксационные члены, т.е. члены, выражающие второй закон термодинамики в явной форме. Профиль T_Ω рис.2 на интервале $x = (20 \div 22)\lambda_\infty$ очевидно противоречит этому закону.

Уравнения энергий поступательных и внутренних степеней свободы не могут быть записаны без релаксационных членов, так как эти энергии не являются инвариантами межмолекулярных столкновений. Таким образом, 6-моментная модель наследует свойства 24-моментной системы уравнений в отношении строгого выполнения второго закона термодинамики.

Проведенные тесты позволяют сделать следующие выводы:

- 5-моментная модель или модель НСФ с подобранным коэффициентом объемной вязкости, не позволяет, по крайней мере в области неравновесных течений, физически адекватно определять температуры поступательных и внутренних степеней свободы;
- для расчета неравновесных течений, связанных с химическими реакциями, эрозией поверхности и подобными физико-химическими процессами, следует использовать двухтемпературные модели, аналогичные описанной 6-моментной модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект №865.

Библиографический список

1. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. – М.: Наука, 1989. – 336 с.
2. Никитченко Ю.А. Модели неравновесных течений. – М.: Изд-во МАИ, 2013. – 160с.
3. Никитченко Ю.А., Система моментных уравнений многоатомных газов // Полет. 2010. №11. С. 43-51.
4. Никитченко Ю.А. Модели первого и второго приближений для течений многоатомных газов. // Вестник Московского авиационного института, т.19, №2, 2012, С. 11-17.

5. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
6. 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. Pp. 497-513.