

ИНДЕКС УДК 533.6.011

ДВУХУРОВНЕВАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВРАЩАТЕЛЬНО-ПОСТУПАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В РАЗРЕЖЕННОМ ГАЗЕ

Черемисин Ф.Г.

Вычислительный Центр имени А.А.Дородницына РАН, Москва

tcherem@ccas.ru

Аннотация

Предлагается простая кинетическая модель, которая приближенно описывает процесс вращательно-поступательного переноса энергии (RT процесс) в разреженном газе. Модель содержит два свободных параметра, которые могут быть определены из сравнения результатов расчёта на её основе с имеющимися экспериментальными или теоретическими данными. Приводится сравнение выполненных на основе модели расчётов структуры ударной волны в азоте с численным решением кинетического уравнения Ван Чанг – Уленбека (ВЧ – У).

TWO LEVELS KINETIC MODEL FOR ROTATIONAL-TRANSLATIONAL TRANSFERS IN A RAREFIED GAS

A simple kinetic model that approximately describes the process of the rotational-translational transfer of energy (RT process) in a rarefied gas is proposed. The model contains two free parameters that can be defined by comparing the results of computation obtained by the model with available experimental and theoretical data. The comparison of some results of computation of the shock wave structure in Nitrogen made on the base of the model with numerical solution of the Wang Chang – Uhlenbeck (WC – U) equation is reported.

Введение

Моделирование течений разреженных молекулярных газов требует учёта обмена энергией между поступательными и внутренними степенями свободы молекул, прежде всего вращательными степенями свободы, сечение возбуждения которых достаточно велико и может составлять порядка 25% от сечения упругих столкновений.

Важной особенностью вращательных степеней свободы является малая величина переносимого кванта энергии для всех газов, за исключением водорода и его изотопов. Например, для азота квант вращательной энергии равен 2.89К и вращательный спектр близок к непрерывному спектру, что позволяет рассматривать процесс вращательно-поступательного переноса энергии (RT процесс) в рамках классической механики [1,2]. Однако для построения кинетического уравнения более удобным является квантование вращательного спектра, что позволяет обобщить уравнение Больцмана в форме кинетического уравнения Ванг Чанг – Уленбека (ВЧ – У) [3]. Решение уравнения ВЧ – У представляет сложную и трудоёмкую вычислительную задачу, и первые результаты получены недавно [4–6]. Основная вычислительная трудность связана с большим числом спектральных уровней. Например, при расчёте структуры ударной волны в азоте при комнатной температуре в [6] число спектральных уровней менялось от 30 для числа Маха 1.5 до 44 при числе Маха 3.2, а время счёта оказалось примерно пропорционально квадрату числа уровней. Для продвижения в область больших чисел Маха (более высоких температур) возможно искусственное увеличение кванта вращательной энергии и введение меньшего числа «фиктивных» уровней. Та-

кое приближение использовалось в [6] и позволило продвинуться до чисел Маха порядка 10, но объём вычислений остаётся большим.

Расчёт сложных двух и трёхмерных течений и особенно течений, при которых необходимо учитывать возбуждение колебательных степеней свободы требует разработки упрощённых моделей RT процесса. Первая такая модель – релаксационное уравнение Морзе [7] – была разработана в то время, когда решение кинетического уравнения Больцмана, и тем более уравнения ВЧ – У, считалось невыполнимой задачей и основные усилия были направлены на конструирование модельных кинетических уравнений. Эта модель является обобщением релаксационного кинетического уравнения Крука и вводит два времени релаксации: для поступательных и для вращательных степеней свободы.

В настоящей работе предлагается экономичная модель RT процесса, содержащая только 2 уровня вращательной энергии. В ней RT процесс моделируется так же, как в модели Морзе, но процесс изменения функции распределения в результате упругих столкновений рассчитывается на основе интеграла столкновений Больцмана. Свободные параметры модели выбираются из условий близости результатов расчёта с данными численного решения уравнения ВЧ – У.

Практическим оправданием использования приближенных моделей RT процесса является весьма неточное знание о сечениях возбуждения вращательных уровней.

1 Построение модели

Предлагаемое модельное кинетическое уравнение (будем называть его 2LRT-моделью) имеет целью значительно упростить моделирование RT процесса обмена энергией в газе. Такое упрощение необходимо для расчета сложных течений молекулярных газов, особенно когда наряду с вращательными уровнями необходимо учитывать также возбуждение колебательных уровней энергии.

Модель состоит из 2 уровней: основного уровня с вращательной энергией $\varepsilon_1 = 0$ и возбужденного уровня с энергией $\varepsilon_2 > T_{\max}$, где T_{\max} есть максимальная температура газа, достигаемая в рассматриваемом течении (температура измеряется в энергетических единицах и постоянная Больцмана равна 1). Газ представляется как двухкомпонентная смесь молекул, находящихся на одном из данных уровней с плотностями n_1 и n_2 , а функция распределения состоит из двух частей: f_1 и f_2 . Плотности компонент – заселенности уровней – определяются соотношениями

$$n_1 = \int f_1 d\xi, \quad n_2 = \int f_2 d\xi$$

Плотность газа есть $n = n_1 + n_2$, а плотность вращательной энергии $E_{rot} = \varepsilon_2 n_2$. Пусть плотность газа в некоторой точке пространства есть n , кинетическая энергия E_{kin} и вращательная энергия E_{rot} . Заселенности уровней определяются простыми формулами

$$n_2 = E_{rot} / \varepsilon_2, \quad n_1 = n - n_2$$

Так как максимальное значение вращательной энергии ограничено условием $E_{rot} < nT_{\max}$, то $n_2 < nT_{\max} / \varepsilon_2 < n$, что гарантирует положительность заселенностей

$$0 < n_2 < n \text{ и } n_1 > 0$$

Зная кинетическую энергию E_{kin} можно определить равновесную температуру $T_{eq} = 2(E_{kin} + E_{rot})/5n$ и равновесные заселенности $n_{2,eq} = nT_{eq}/\varepsilon_2$, $n_{1,eq} = n - n_{2,eq}$, которые определяют равновесные максвелловские функции распределения $f_{1,M}$ and $f_{2,M}$.

Для конструирования модельного уравнения будем исходить из кинетического уравнение Ванг Чанг – Уленбека

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\xi \cdot \partial f_i}{\partial \mathbf{x}} = \sum_{j,k,l} \int p_{i,j}^{k,l} (f_k f_l - f_i f_j) g_{i,j} b db d\varphi d\xi_j \equiv Q_i \quad (1)$$

Представим оператор столкновений Q_i как сумму оператора упругих столкновений Q_i^{ell} и оператора неупругих столкновений Q_i^r . Так как для реальных газов почти все столкновения сопровождаются переносом относительно малой энергии между вращательными и поступательными степенями свободы, а чисто упругие столкновения являются исключением, то окажется, что $Q_i^{ell} \ll Q_i^r$. Однако, при малом переносе энергии большинство столкновений по динамике мало отличается от упругих, и можно предположить, что они почти также перераспределяют молекулы газа в пространстве скоростей, как и упругие столкновения. На этом основании можно приближенно включить все столкновения в оператор Q_i^{ell} , а процесс RT переноса энергии представить в форме релаксационного оператора.

Оператор упругих столкновений запишется в виде оператора столкновений для смеси газов

$$Q_i^{ell} = \sum_j \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{i,j} b db d\varphi d\xi_j \quad (2)$$

Оператор неупругих столкновений запишем в релаксационной форме

$$Q_i^r = -\nu_r (f_i - f_{i,M}^*) \quad (3)$$

Для рассматриваемой двух уровневой системы $i = (1,2)$, $j = (1,2)$ и модель является наиболее простой. В качестве $f_{i,M}^*$ естественно было бы взять максвелловские функции распределения с параметрами T_{eq} и $n_{i,eq}$. На основе серии численных экспериментов было найдено, что такой выбор является возможным, но не лучшим. Предлагается в качестве оптимального выбор эллиптической функции распределения, определяемой диагональными элементами тензора температур

$$f_{i,M}^* = n_{i,eq} \left(\frac{m}{2\pi k} \right)^{3/2} (T_{xx}^* T_{yy}^* T_{zz}^*)^{-1/2} \exp \left(-\frac{mc_x^2}{2kT_{xx}^*} - \frac{mc_y^2}{2kT_{yy}^*} - \frac{mc_z^2}{2kT_{zz}^*} \right), \quad (4)$$

где $c_x = \xi_x - u$, $c_y = \xi_y - v$, $c_z = \xi_z - w$, u, v, w – компоненты вектора массовой скорости газа. Компоненты T_{aa}^* определяются как подобные преобразования компонент $T_{\alpha\alpha}$, вычисленных по функции $f = f_1 + f_2$

$$T_{aa}^* = T_{aa} (T_{eq}/T_{kin}) \quad (5)$$

Использование функции (4) вместо максвелловской означает, что неупругий оператор Q_i^r в некоторой степени сохраняет вид функции распределения в пространстве скоростей.

Такое предположение представляется естественным, так как перераспределение молекул в скоростном пространстве включено в оператор Q_i^{ell} . Частота неупругой релаксации ν_r определяется как доля частоты столкновений ν релаксационного уравнения Крукса

$$\nu_r = a^{(1)}\nu \quad (6)$$

Несмотря на выбранный вид $f_{i,M}^*$, оператор неупругих столкновений также вносит вклад в изменение функции распределения в скоростном пространстве в направлении к равновесному состоянию. Для учёта этого влияния следует уменьшить величину упругого оператора множителем $(1 - a^{(2)}\nu_r)$, $0 < a^{(2)} < 1$. Оператор упругих столкновений примет вид

$$Q_i^{ell,*} = (1 - a^{(2)}\nu_r)Q_i^{ell} \quad (7)$$

Окончательно 2LRT-модель состоит из двух операторов: неупругого (3) с частотой (6), и упругого (7). Она содержит два свободных параметра: $a^{(1)}$ и $a^{(2)}$, которые могут быть определены из сравнения полученных на её основе результатов с решениями уравнения Ванг Чанг – Уленбека или данными физического эксперимента

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\xi \cdot \partial f_i}{\partial \mathbf{x}} = (1 - a^{(1)}a^{(2)}\nu) \sum_j \int (f_i' f_j' - f_i f_j) g_{i,j} b db d\varphi d\xi_j + a^{(1)}\nu (f_i - f_{i,M}^*) \quad (8)$$

2 Метод решения модельного уравнения

Эффективным методом решения уравнения (8) является метод расщепления по физическим процессам, предложенный для уравнения Больцмана в [8] и обобщенный на уравнение ВЧ – У в [5]. Для уравнения (8) на малом по сравнению со средним временем свободного пробега молекул шаге по времени τ осуществляется расщепление на 3 стадии: а) расчёт переноса молекул без столкновений, б) расчёт упругих столкновений, и в) расчёт вращательно-поступательной релаксации. Обозначив функцию распределения после первого этапа f_i^* , после второго f_i^{**} , после заключительного третьего этапа f_i , а решение на предыдущем временном слое как $f_i^{t-\tau}$, получим следующую последовательность уравнений

$$\begin{aligned} \text{а) } & \frac{f_i^* - f_i^{t-\tau}}{\tau} + \frac{\xi \cdot \partial f_i^{t-\tau}}{\partial \mathbf{x}} = 0; \\ \text{б) } & \frac{f_i^{**} - f_i^*}{\tau} = \sum_j \int (f_i^{*'} f_j^{*'} - f_i^* f_j^*) g_{i,j} b db d\varphi d\xi_j; \\ \text{в) } & \frac{f_i - f_i^{**}}{\tau} = -\nu_r (f_i^{**} - f_{i,M}^{**}) \end{aligned}$$

Для аппроксимации производных по физическим координатам на стадии а) применяются консервативные по потокам явные схемы высокого порядка точности. Наиболее трудоёмким является этап б), связанный с вычислением интеграла столкновений Больцмана. Для этой цели разработан консервативный проекционный метод [9]. Решение релаксационного уравнения на заключительном этапе не представляет особой трудности, но требует простой коррекции для того, чтобы обеспечить точное выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии. Функция $f_{i,M}^{**}$ имеет вид (4) и вычисляется по параметрам $n_{i,eq}$ и T_{aa}^* , вычисленным после этапа б).

3 Адаптация модели для азота

Для того чтобы настроить модель для азота, были проведены расчёты структуры плоской ударной волны в этом газе в широком диапазоне чисел Маха, и на их основе выбраны параметры $a^{(1)}$ и $a^{(2)}$, наилучшим образом приближающие результаты решения уравнения ВЧ-У из [6]. Сравнения проводились для чисел Маха 2.4 и 10, а также для нескольких промежуточных чисел. Решение уравнения ВЧ-У было выполнено для потенциала Леннарда – Джонса с параметрами, приведенными в [10]. Для чисел Маха до $M = 3.2$ брался реальный вращательный спектр с $\varepsilon_0 = 2.89K$, а при больших числах Маха использовались фиктивные уровни с числом от 16 до 24. Независимость результатов от числа выбранных уровней проверялась. Сечения RT переходов брались из данных молекулярного моделирования, выполненных в [11,12] и приведенных в виде приближенной аналитической зависимости от относительной энергии сталкивающихся молекул и разности энергий исходных и конечных уровней вращательной энергии. Для 2LRT модели был выбран степенной потенциал с показателем -12 , который хорошо приближает потенциал Леннарда – Джонса и даёт частоту релаксационного уравнения Крука $\nu \sim nT_{kin}^{0.33}$.

После многочисленных расчётов и сравнений были определены следующие оптимальные значения параметров модели

$$a^{(1)} = 0.36, a^{(2)} = 0.9$$

Сравнение решений 2LRT модели при указанных параметрах с решением уравнения ВЧ-У для $M = 2.4$ приведено на рисунках 1 и 2, а для $M = 10$ на рисунках 3 и 4. Графики для 2LRT модели отмечены звёздочкой. Данные на первых двух рисунках приведены в нормализованном виде $a' = (a - a_1)/(a_2 - a_1)$, а на остальных рисунках в виде отношения $a'' = a/a_1$. Здесь a – значение физической величины в точке с координатой x , a_1 – её значение перед ударной волной, и a_2 – значение за ударной волной. Координата x нормирована на длину свободного пробега молекул до ударной волны, центр ударной волны помещён в точку $x = 0$.

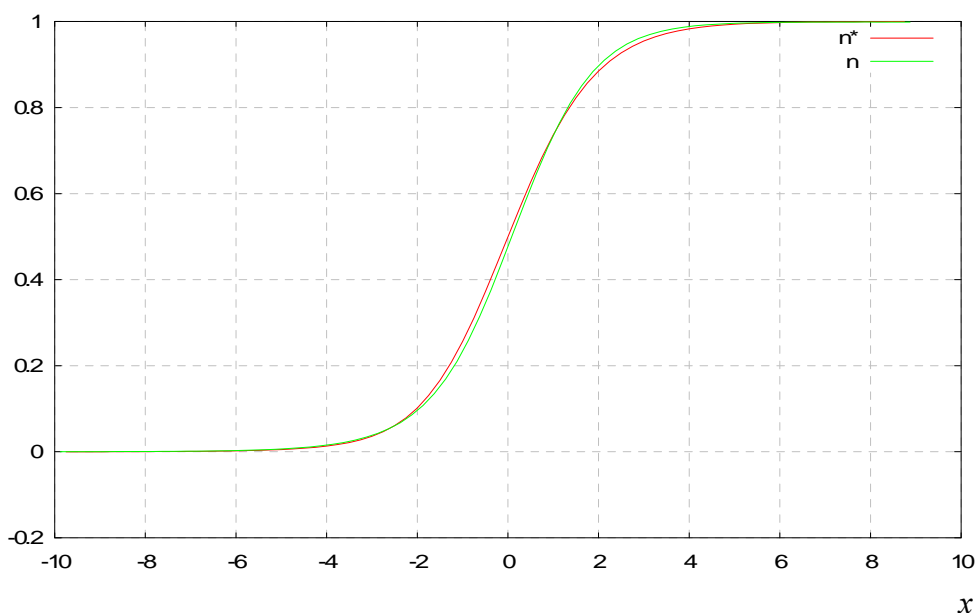


Рис.1. Сравнение графиков приведенной плотности при $M = 2.4$

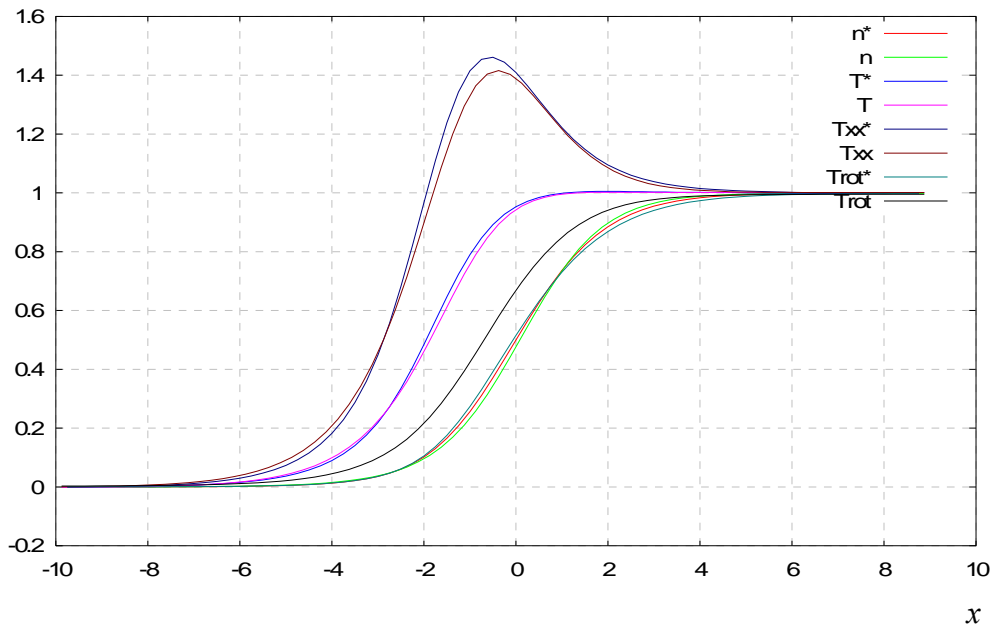


Рис.2. Приведенные параметры газа при $M = 2.4$

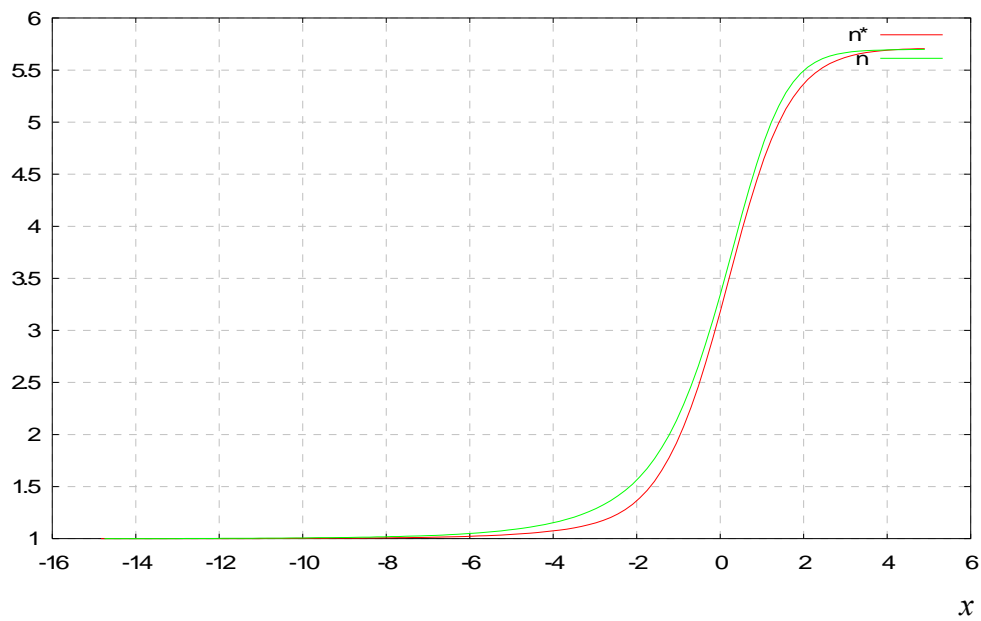
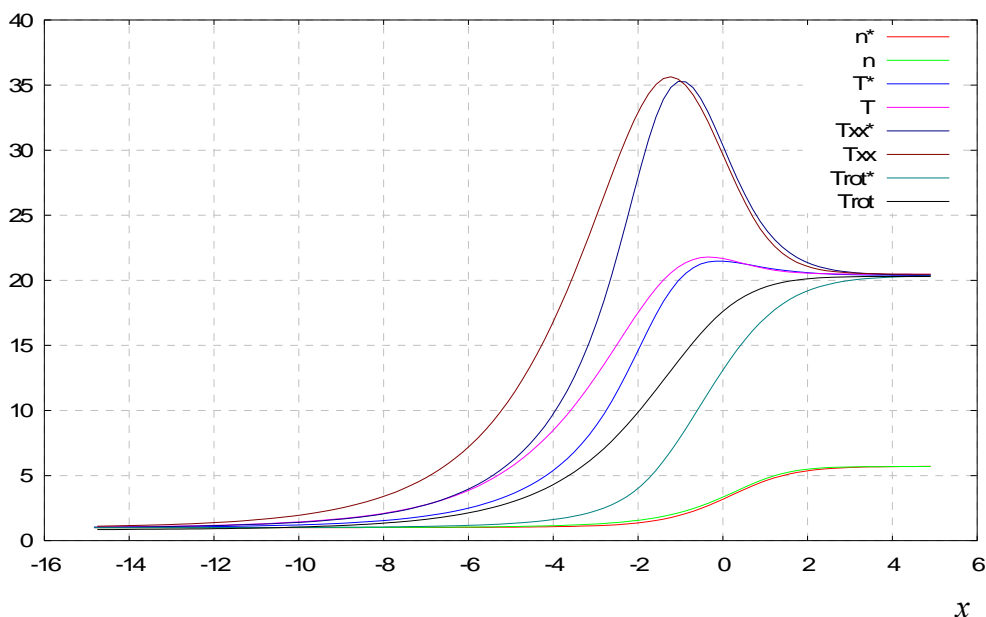


Рис.3. Сравнение графиков плотности при $M = 10$

Рис.4. Параметры газа при $M = 10$

Заключение

Из рассмотрения рисунков видно, что 2LRT модель даёт точные равновесные значения плотности и температуры в ударной волне, достаточно хорошо определяет толщину ударной волны, предсказывает горб температуры в ударной волне, правильно описывает поведение компонент тензора температур. Лучшая аппроксимация результатов, полученных по уравнениям ВЧ–У имеет место при небольших числах Маха. Наибольшее отличие от решения уравнения ВЧ–У наблюдается в поведении вращательной температуры внутри ударной волны. Эта разница обусловлена тем, что реальный процесс переноса энергии между вращательными и поступательными степенями носит сложный нелинейный характер, который не может быть описан с достаточной точностью линейным релаксационным уравнением.

Можно надеяться, что во многих сложных течениях, как и в рассмотренном случае, указанное различие в протекании RT процесса не скажется в значительной степени на других параметрах газа.

Литература

1. Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Т. 5.: Статистическая физика. М., Наука Физматлит, 1995.
2. Е.М.Лифшиц и Л.П.Питаевский, Теоретическая физика. Т. 10.: Физическая кинетика. М., Физматлит, 2002.
3. C.S. Wang Chang, and G.E. Uhlenbeck, Transport phenomena in polyatomic gases// University of Michigan Research Report N CM-681, 1951.
4. Ф.Г. Черемисин, Решение кинетического уравнения Ванг Чанг – Уленбека// Доклады РАН, 2002, Т. 387, № 4, С. 1–4.
5. Felix Tcheremissine, Direct Numerical Solution of the Boltzmann Equation// Rarefied Gas Dynamics, 24-th Intern. Symp. on RGD. M.Capitelli ed., AIP Conf. Proceedings 762, Melville, New York, 2005, pp. 677–685.
6. F.G. Tcheremissine, V.I. Kolobov, and R.R.Arslanbekov, Simulation of Shock Wave Structure in Nitrogen with Realistic Rotational Spectrum and Molecular Interaction Potential// Proc.25-th Rarefied Gas Dynamics Symposium, St.Petersburg, 2006.
7. T.F.Morse, Kinetic model for gases with internal degrees of freedom// Phys. Fluids, 1964, № 6, P.159.
8. В.В. Аристов и Ф.Г. Черемисин, Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана// Докл. Акад. Наук СССР, 1976, Т.231, № 1, С. 49–52.

9. Ф.Г. Черемисин, Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана// Доклады РАН, 1997, Т.357, № 1, С.53–56.
10. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс и Р. Берд, Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
11. Alfred A. Beylich, An Interlaced System for Nitrogen Gas// Workshop on CECAM, ENS de Lyon, France, 2000.
12. Alfred A. Beylich and Anshuman Awasthi, An Interlaced System for Rigid Rotors// Proc. 22-th Intern. Symp. on RGD, 2001, pp. 434–438.