

*Памяти выдающегося ученого Ю.Д. Шмыглевского
с бесконечной благодарностью за его внимание к работе
и душевную поддержку в трудные минуты жизни*

АНАЛИЗ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ РАЗРЕЖЕННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ГАЗА С ПАРЦИАЛЬНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ АККОМОДАЦИИ И ЭНЕРГООБМЕНОМ¹⁾

© 2021 г. А. А. Фролова

119333 Москва, ул. Вавилова, 44, кор. 2, ФИЦ ИУ РАН, Россия

e-mail: aafrolova@yandex.ru

Поступила в редакцию 03.02.2021 г.
Переработанный вариант 14.02.2021 г.
Принята к публикации 09.06.2021 г.

Исследуются модели граничных условий на поверхности тела для разреженного молекулярного газа с учетом вращательной энергии. Проводится сравнение температурных полей при обтекании тел сверхзвуковым потоком газа при неполной аккомодации энергии на поверхности и при различной степени обмена вращательной и поступательной энергий. Показано влияние на течение газа интенсивности обмена в зависимости от параметра разреженности, скорости набегающего потока и температуры поверхности. Библ. 21. Фиг. 6.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, метод дискретных скоростей, граничное условие для газа с вращательными степенями свободы, взаимодействие газа с поверхностью.

DOI: 10.31857/S0044466921100045

1. ВВЕДЕНИЕ

Выбор граничного условия отражения, аппроксимирующего взаимодействие частиц с поверхностью тел, является одним из основных моментов при исследовании течений разреженного газа. При решении прикладных задач взаимодействие моноатомного газа с поверхностями, как правило, моделируется классическими условиями Максвелла, Эпштейна (см. [1]), Ночиллы (см. [2]), Черчиньяни–Лэмпис (см. [3]), а также их различными комбинациями и обобщениями (см. [4], [5]). При изучении течений молекулярного газа часто используются модель отражения Лорда (см. [6]) или условия Максвелла с неполной аккомодацией. Как и в случае моноатомного газа, для получения результатов, близких к экспериментальным, применяются различные модификации условий Максвелла и Черчиньяни–Лэмпис (см. [7], [8]). Данные граничные условия, учитывая закон отражения частиц с вращательными степенями свободы, не описывают обмена внутренней и поступательной энергий. Модель граничных условий с учетом энергетического обмена была предложена В. Рыковым (см. [9]). Несмотря на то что эта модель была представлена достаточно давно (в 1986 г.), она мало использовалась, и только несколько примеров ее применения можно найти в научной литературе (см. [10], [11]). Одной из причин этого является то, что величина энергетического обмена в условиях В. Рыкова является свободным внешним параметром, зависящим от двух вспомогательных коэффициентов, значения которых должны быть заданы априори. При этом критерием правильности выбора является согласование вращательной и поступательной температур около поверхности с экспериментальными данными. Так как экспериментальные данные, как правило, дают информацию о каком-то определенном режиме течения, то общая картина влияния обменов энергии на течение газа остается невыясненной. Поэтому представляется важным провести анализ данных условий и установить связь между интенсивностью энергетического обмена и параметрами течения, а также определить влияние

¹⁾Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект 075-15-2020-799).

величины обменов на изменения температуры газа около поверхности в зависимости от параметра разреженности, скорости набегающего потока и температуры поверхности.

2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ И МОДЕЛИ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ГАЗА

Детальным методом исследования влияния внутренних энергий на течение молекулярного газа является подход, основанный на решении полуклассического кинетического уравнения Ван-Чанг и Улунбека, но из-за своей сложности оно редко используется в прикладных задачах. Менее детальные подходы на основе кинетических уравнений используют двух- или трехтемпературные приближения, учитывая только изменение внутренней энергии и основываются на обобщении модельных уравнений типа БГК (Бхатнагара–Гросса–Крука), эллипсоидальной статистической модели или модели Шахова для одноатомного газа. При этом вращательная энергия молекул в модельных уравнениях описывается, как правило, классически (непрерывной величиной), а суммирование заменяется интегрированием. Колебательная энергия остается дискретной (см., например, [12]–[16]).

Сравнение поверхностных коэффициентов и температурных полей при обтекании цилиндра молекулярным газом (азотом) при сверхзвуковых скоростях (с числами Маха = 10, 25), полученных применением модели из [16] и методом DSMC из [17], показало удовлетворительное согласие, при этом влияние колебательной энергии на параметры течения оказалось достаточно слабым. Поэтому в настоящей работе мы будем рассматривать различные граничные условия при обтекании тел двухатомным газом (азотом), учитывая только вращательные энергии и используя модель Рыкова (R-модель) (см. [12]).

Описание течений двухатомного газа в [12] осуществляется введением функции распределения $f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, I_r)$, зависящей от времени t , вектора координат \mathbf{x} , вектора скорости $\boldsymbol{\xi}$ и непрерывной переменной I_r ($I_r > 0$), соответствующей вращательной энергии. В этом случае число степеней свободы внутренней энергии $k_{\text{rot}} = 2$. Макропараметры газа (плотность числа частиц n , вектор скорость \mathbf{u} , температуры $T_{\text{tr}}, T_{\text{rot}}$, векторы тепловых потоков $\mathbf{q}_{\text{tr}}, \mathbf{q}_{\text{rot}}$ и энергии $E_{\text{tr}}, E_{\text{rot}}$) определяются с использованием собственной скорости $\mathbf{C} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$ и обозначения $\langle\langle f \rangle\rangle = \int_{R^3 \times R^+} f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, I_r) d\boldsymbol{\xi} dI_r$ следующим образом (нижний индекс tr соответствует поступательным переменным, а rot – вращательным):

$$n = \langle\langle f \rangle\rangle, \quad n\mathbf{u} = \langle\langle \boldsymbol{\xi} f \rangle\rangle, \quad 3nk_{\text{B}}T_{\text{tr}} = \langle\langle m\mathbf{C}^2 f \rangle\rangle, \quad (k_{\text{rot}}/2)nk_{\text{B}}T_{\text{rot}} = \langle\langle I_r f \rangle\rangle,$$

$$\mathbf{q}_{\text{tr}} = m\langle\langle \mathbf{C}\mathbf{C}^2/2f \rangle\rangle, \quad \mathbf{q}_{\text{rot}} = \langle\langle I_r \mathbf{C} f \rangle\rangle, \quad nE_{\text{rot}} = \langle\langle I_r f \rangle\rangle, \quad nE_{\text{tr}} = \langle\langle m\xi^2/2f \rangle\rangle,$$

где m – масса молекул, k_{B} – постоянная Больцмана. Давление поступательного движения p_{tr} и равновесная температура T_{eqr} , устанавливаемая за счет обменов поступательной и вращательной энергий, определяются согласно формулам

$$p_{\text{tr}} = nk_{\text{B}}T_{\text{tr}}, \quad T_{\text{eqr}} = \frac{(3T_{\text{tr}} + k_{\text{rot}}T_{\text{rot}})}{3 + k_{\text{rot}}}.$$

В R-модели интеграл столкновений представляется суммой двух релаксационных членов, аппроксимирующих упругие и неупругие соударения. Усреднение функций распределения по внутренним энергиям и интегрирование по переменной I_r с весовыми коэффициентами $+1, I_r$,

$$f_0 = \int f dI_r, \quad f_1 = \int I_r f dI_r,$$

приводит кинетическое уравнение к системе двух модельных уравнений

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} + \left(\boldsymbol{\xi}, \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{x}} \right) = \nu_{\text{tr}}(nf_j^{\text{tr}} - f_j) + \nu_{\text{rot}}(nf_j^{\text{rot}} - f_j), \quad j = 0, 1,$$

где введены следующие обозначения:

$$f_0^{\text{tr}} = f_M(T_{\text{tr}})[1 - (\mathbf{q}_{\text{tr}} \cdot \mathbf{C})a(T_{\text{tr}})],$$

$$f_0^{\text{rot}} = f_M(T_{\text{eqr}})[1 - \omega_0(\mathbf{q}_{\text{tr}} \cdot \mathbf{C})a(T_{\text{eqr}})],$$

$$\begin{aligned}
 f_1^{\text{tr}} &= k_B T_{\text{rot}} [f_0^{\text{tr}} + f_M(T_{\text{tr}})(1 - \delta_D)m(\mathbf{q}_{\text{rot}} \cdot \mathbf{C}) / (k_B T_{\text{rot}} p_{\text{tr}})], \\
 f_1^{\text{rot}} &= k_B T_{\text{eqr}} [f_0^{\text{rot}} + f_M(T_{\text{eqr}})\omega_1(1 - \delta_D)m(\mathbf{q}_{\text{rot}} \cdot \mathbf{C}) / (k_B T_{\text{eqr}} p_{\text{eqr}})], \\
 f_M(T) &= \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mC^2}{2k_B T}\right), \quad a(T) = \frac{2m}{15n(k_B T)^2} \left(\frac{5}{2} - \frac{m}{2k_B T} C^2\right).
 \end{aligned}$$

Величина δ_D определяется по коэффициентам самодиффузии газа D и вязкости поступательного движения μ_{tr} , соотношением $\delta_D = \mu_{\text{tr}}/nmD$. Для молекул со степенным законом взаимодействия при индексе вязкости, близком к единице (максвелловские молекулы) $\delta_D = 1/1.55$. Параметры ω_0, ω_1 зависят от свойств рассматриваемого газа и определяются либо из экспериментальных данных по релаксации тепловых потоков, либо по числу Прандтля, которое для R-модели, как следует из [18], представляется в виде

$$\text{Pr} = \frac{\gamma}{(\gamma - 1)} \left\{ \frac{15}{2[2 + (1 - \omega_0)Z_r^{-1}]} + \frac{1}{\delta_D + (1 - \delta_D)(1 - \omega_1)Z_r^{-1}} \right\}^{-1}.$$

Здесь $\gamma = 7/5$, а Z_r – вращательное число столкновений, определяющее вращательную и поступательную частоты столкновений равенствами $\nu_{\text{rot}} = \nu/Z_r, \nu_{\text{tr}} = \nu(1 - 1/Z_r)$ и $\nu = p_{\text{tr}}/\mu_{\text{tr}}$.

Рассмотрим постановку граничных условий для функций f_0, f_1 , следуя аппроксимации взаимодействия газа с поверхностью, предложенной в [9]. Закон отражения в этом случае предполагается диффузным с температурой поверхности T_w и функцией распределения отраженных частиц в виде

$$f_w(\xi, I_r) = n_w(\beta_{\text{tr}}/\sqrt{\pi})^3 \exp[-\beta_{\text{tr}}^2 \xi^2 - I_r / (k_B T_{\text{rot},r})] / k_B T_{\text{rot},r}, \tag{2.1}$$

где $\beta_{\text{tr}} = \sqrt{m/(2k_B T_{\text{tr},r})}$, $T_{\text{tr},r}, T_{\text{rot},r}$ – поступательная и вращательная температуры отраженных частиц, а n_w – плотность, удовлетворяющая условию непротекания.

Интегрируя (2.1) по переменной I_r с весовыми коэффициентами $+1, I_r$, получаем

$$f_{0w}(\xi_n < 0) = n_w(\beta_{\text{tr}}/\sqrt{\pi})^3 \exp[-\beta_{\text{tr}}^2 \xi^2],$$

$$f_{1w}(\xi_n < 0) = k_B T_{\text{rot},r} f_{0w},$$

$$N_i = \frac{n_w}{2\sqrt{\pi}\beta_{\text{tr}}} = \int_{\xi_n > 0} \xi_n f_0(\xi) d\xi.$$

Поступательная и вращательная энергии, уносимые отраженными частицами $E_{\text{tr},r}, E_{\text{rot},r}$, и энергии отраженных частиц при равновесии газа с поверхностью тела $E_{\text{tr},w}, E_{\text{rot},w}$ связаны с $T_{\text{tr},r}, T_{\text{rot},r}$ следующими формулами:

$$E_{\text{tr},r} = 2N_i k_B T_{\text{tr},r}, \quad E_{\text{rot},r} = N_i k_B T_{\text{rot},r}, \quad E_{\text{tr},w} = 2N_i k_B T_w, \quad E_{\text{rot},w} = N_i k_B T_w. \tag{2.2}$$

При этом сами температуры $T_{\text{tr},r}, T_{\text{rot},r}$ определяются из условия аккомодации энергии, которое можно записать в виде

$$\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_r = \mathbf{A}(\mathbf{E}_i - \mathbf{E}_w),$$

где введены векторы энергий падающих и отраженных молекул и матрица коэффициентов аккомодации следующими соотношениями:

$$\mathbf{E}_i = (E_{\text{tr},i}, E_{\text{rot},i}), \quad \mathbf{E}_w = (E_{\text{tr},w}, E_{\text{rot},w}), \quad \mathbf{E}_r = (E_{\text{tr},r}, E_{\text{rot},r}),$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha_{\text{tr}} + \alpha_{\text{tr,rot}} & -\alpha_{\text{rot,tr}} \\ -\alpha_{\text{tr,rot}} & \alpha_{\text{rot}} + \alpha_{\text{rot,tr}} \end{pmatrix}.$$

Здесь $E_{tr,i}$, $E_{rot,i}$ – поступательная и вращательная энергии падающих на поверхность частиц. Если коэффициенты $\alpha_{tr,rot} = \alpha_{rot,tr} = 0$, то обмен энергии между поступательными и вращательными степенями свободы отсутствует, и граничные условия для энергий имеют вид

$$E_{tr,r} = (1 - \alpha_{tr})E_{tr,i} + \alpha_{tr}E_{tr,w},$$

$$E_{rot,r} = (1 - \alpha_{rot})E_{rot,i} + \alpha_{rot}E_{rot,w},$$

а температуры отраженных частиц определяются с использованием (2.2) следующим образом:

$$k_B T_{tr,r} = (1 - \alpha_{tr})E_{tr,i}/(2N_i) + \alpha_{tr}k_B T_w, \tag{2.3}$$

$$k_B T_{rot,r} = (1 - \alpha_{rot})E_{rot,i}/N_i + \alpha_{rot}k_B T_w. \tag{2.4}$$

При отличных от нуля коэффициентах $\alpha_{tr,rot}$, $\alpha_{rot,tr}$ энергии отраженных молекул определяются по формулам

$$E_{tr,r} = E_{tr,i} + \alpha_{tr}(E_{tr,w} - E_{tr,i}) + \alpha_{tr,rot}(E_{tr,w} - E_{tr,i}) - \alpha_{rot,tr}(E_{rot,i} - E_{rot,w}), \tag{2.5}$$

$$E_{rot,r} = E_{rot,i} + \alpha_{rot}(E_{rot,w} - E_{rot,i}) + \alpha_{rot,tr}(E_{rot,w} - E_{rot,i}) - (E_{tr,i} - E_{tr,w}), \tag{2.6}$$

что приводит к соотношениям для температур

$$k_B T_{tr,r} = E_{tr,i}/(2N_i) - (\alpha_{tr} + \alpha_{tr,rot})[E_{tr,i}/(2N_i) - k_B T_w] + \alpha_{rot,tr} \left(\frac{E_{rot,i}}{2N_i} - k_B T_w \right),$$

$$k_B T_{rot,r} = \frac{E_{rot,i}}{N_i} - (\alpha_{rot} + \alpha_{rot,tr})[E_{rot,i}/N_i - k_B T_w] + \alpha_{rot,tr} [E_{tr,i}/N_i - k_B T_w].$$

Условия (2.5), (2.6) можно записать также в следующем виде:

$$E_{tr,r} = E_{tr,i} - \alpha_{tr}(E_{tr,i} - E_{tr,w}) - Q, \tag{2.7}$$

$$E_{rot,r} = E_{rot,i} - \alpha_{rot}(E_{rot,i} - E_{rot,w}) + Q, \tag{2.8}$$

где $Q = \alpha_{tr,rot}(E_{tr,i} - E_{tr,w}) - \alpha_{rot,tr}(E_{rot,i} - E_{rot,w})$ определяет величину обмена энергии. Если $Q > 0$, то превалирует переход поступательной энергии молекул во вращательную, и наоборот, если $Q < 0$. Задание величины Q достаточно произвольно, однако при выборе параметров $\alpha_{tr,rot}$, $\alpha_{rot,tr}$ нужно учитывать условия положительности энергий отраженных частиц $E_{rot,r} > 0$ и $E_{tr,r} > 0$. Кроме того, так как при обтекании выпуклых тел сверхзвуковым потоком вращательная температура у поверхности меньше поступательной (за исключением возможно теневой области), то значения Q на части поверхности, обращенной к потоку, можно выбрать таким, чтобы выполнялось условие $T_{rot,r} < T_{tr,r}$. Из соотношений (2.2), (2.7), (2.8) и используя обозначения

$$E_{tr,r}^* = (1 - \alpha_{tr})E_{tr,i} + \alpha_{tr}E_{tr,w}, \quad E_{rot,r}^* = (1 - \alpha_{rot})E_{rot,i} + \alpha_{rot}E_{rot,w},$$

получаем

$$\max\{-E_{rot,r}^*, -E_{tr,r}^*\} < Q \leq (E_{tr,r}^* - 2E_{rot,r}^*)/3. \tag{2.9}$$

Отметим, что правая часть (2.9) оценивает значения температур для вылетающих с поверхности молекул. Для температур на поверхности поступательного движения $T_{tr,s}$ и вращательного движения $T_{rot,s}$ нужно учесть энергию частиц, приходящих на тело. Выполнение условия $T_{rot,s} < T_{tr,s}$ приводит к более общему условию для величины обмена. Оценить допустимую величину Q можно по значениям энергий и скорости падающего потока для свободномолекулярного режима. Тогда для температур отраженных частиц, вводя обозначение

$$F(U_n, U_t, \beta_{tr}) = \frac{\beta_{tr} U_n}{3\sqrt{\pi}} + \frac{n \langle u_0 \rangle U_t^2}{3(n \langle u_0 \rangle + N_i \beta_{tr} \sqrt{\pi})},$$

будем иметь

$$T_{rot,r} < T_{tr,r} + F(U_n, U_t, \beta_{tr}),$$

где U_n, U_t – нормальная и тангенциальная компоненты скорости свободно молекулярного потока, а $\langle u_0 \rangle = 0.5 \operatorname{erfc}(-\beta_{tr} U_n)$. Из (2.2), (2.7), (2.8) получим

$$Q \leq (E_{tr,r}^* - 2E_{rot,r}^*)/3 + 2/3 N_i F(U_n, U_t, \beta_{tr}). \quad (2.10)$$

Сравнивая условия (2.9) и (2.10), мы видим, что в случае обтекания тел на элементах поверхности, обращенных к потоку, $U_n > 0$, и из условия (2.9) следует (2.10), а в теневой области, где величина $F(U_n, U_t, \beta_{tr})$ может стать отрицательной, условие (2.10) является более сильным. При уменьшении числа Кнудсена компоненты скорости U_n, U_t около поверхности стремятся к нулю и (2.9), (2.10) становятся практически эквивалентными. Отметим, что при постоянных значениях коэффициентов $\alpha_{tr,rot}, \alpha_{rot,tr}$ не всегда удается удовлетворить этим условиям на всей поверхности, так как величины в правых частях (2.9), (2.10) и величина обмена Q могут менять знак.

Полная энергия отраженных частиц $E_r = E_{tr,r} + E_{rot,r}$ выражается формулой

$$E_r = E_i - \alpha_{tr}(E_{tr,i} - E_{tr,w}) - \alpha_{rot}(E_{rot,i} - E_{rot,w}),$$

так что поверхностный коэффициент теплопередачи для свободномолекулярного режима не зависит от энергетического обмена, а в случае произвольных значений числа Кнудсена изменяется очень незначительно. Основное отличие при использовании граничных условий (2.7), (2.8) проявляется в поведении температурных полей около поверхности тела, которое и исследуется в настоящей работе.

3. МЕТОД И ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

При численном анализе рассматривается двумерная стационарная задача сверхзвукового обтекания цилиндрического тела с закругленным сечением (см. ниже фиг. 4). Влияние величины энергетического обмена на параметры течения оценивается сравнением поведения температуры около поверхности.

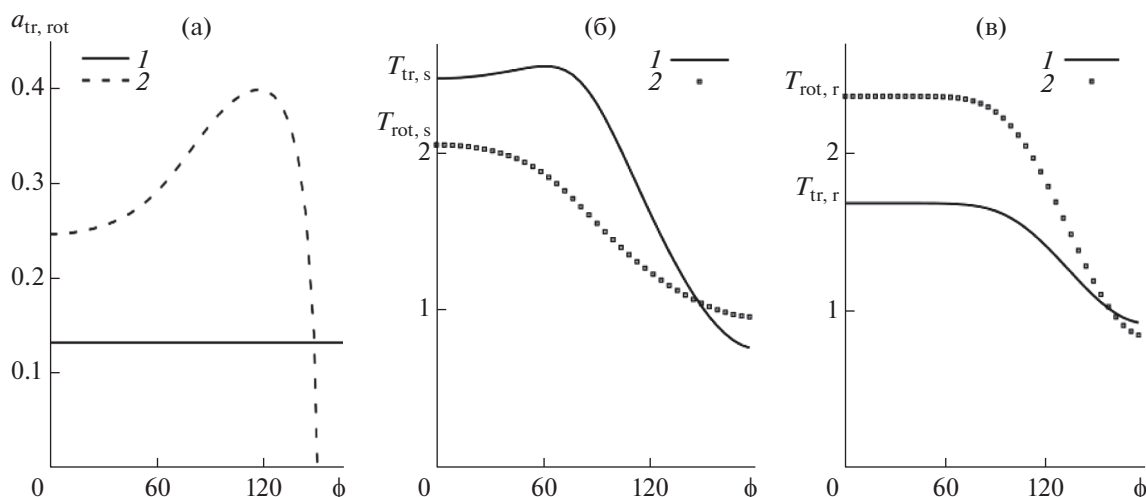
Численный расчет проводится методом дискретных ординат с применением кинетического модуля программного комплекса Unified Flow Solver (UFS) (см. [19]), использующего для решения расщепление кинетического уравнения на этапы свободномолекулярного течения и релаксацию. В дискретном скоростном пространстве выбирается равномерная кубическая сетка. В физическом пространстве используется иерархическая адаптивно измельчаемая сетка. В пространственных координатах применяется метод конечных объемов второго порядка на неструктурированной декартовой сетке. Поверхность тела аппроксимируется с помощью метода скошенных ячеек. Стационарное решение ищется с помощью явного по времени метода установления. Интеграл столкновений в кинетическом уравнении аппроксимируется согласно R-модели Рыкова (см. [12]). Для выполнения законов сохранения релаксационного оператора используется итерационная процедура Ньютона.

Физические параметры задачи взяты из [17], где предполагается, что закон вязкости соответствует взаимодействию по модели $\mu = \mu_{ref}(T/T_{ref})^\omega$, и

$$\mu_{ref} = \frac{15\sqrt{\pi m k_B T_{ref}}}{2\pi d_{ref}^2 (5 - 2\omega)(7 - 2\omega)}, \quad \omega = 0.7, \quad T_{ref} = 290 \text{ К}, \quad d_{ref} = 4.11 \times 10^{-10} \text{ м.}$$

При расчетах используются безразмерные величины введением характерных значений длины d , температуры и плотности набегающего потока T_∞, ρ_∞ , и наиболее вероятной молекулярной скорости $v_m = \sqrt{2RT_\infty}$. Тепловой поток, давление и вязкость обезразмериваются на $\rho_\infty v_m^3/2, \rho_\infty v_m^2/2$ и $\mu_\infty = \mu(T_\infty)$ соответственно. Введение характерных величин приводит к безразмерной форме кинетического уравнения с числом Кнудсена $\text{Kn} = \lambda_\infty/d$, где λ_∞ – длина свободного пробега. Вращательное число столкновений Z_r в расчетах задается постоянным и $Z_r = 4$.

Вычисления, представленные ниже, выполнены с размерами ячеек в скоростном пространстве $\Delta\xi/v_m = 0.3-0.4$. Адаптация сетки в физическом пространстве выполнялась по расстоянию от тела. Минимальный размер ячейки около поверхности выбирался от $h/d = 4 \times 10^{-3}$ до $h/d = 2 \times 10^{-2}$ в зависимости от числа Кнудсена.



Фиг. 1. (а) – Значения коэффициента $\alpha_{tr,rot}$ в зависимости от угла ϕ наклона нормали к поверхности, линии 1, 2 соответствуют равенствам в (2.9), (2.10). Значения поступательной и вращательной температур при $\alpha_{tr,rot} = 0.2$ на поверхности (б) и отраженных молекул (в). Линии 1, 2 – поступательная и вращательная температуры соответственно.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Исследуем, как влияют граничные условия (2.7), (2.8) на температурные поля на примере обтекания цилиндрического тела с параболическим сечением и прямой задней кромкой (см. ниже фиг. 4). Характерный параметр длины d равен максимальной ширине сечения. Парциальные коэффициенты аккомодации заданы значениями $\alpha_{tr} = 0.6$, $\alpha_{rot} = 0.5$, которые близки к коэффициентам, полученным для азота в [20].

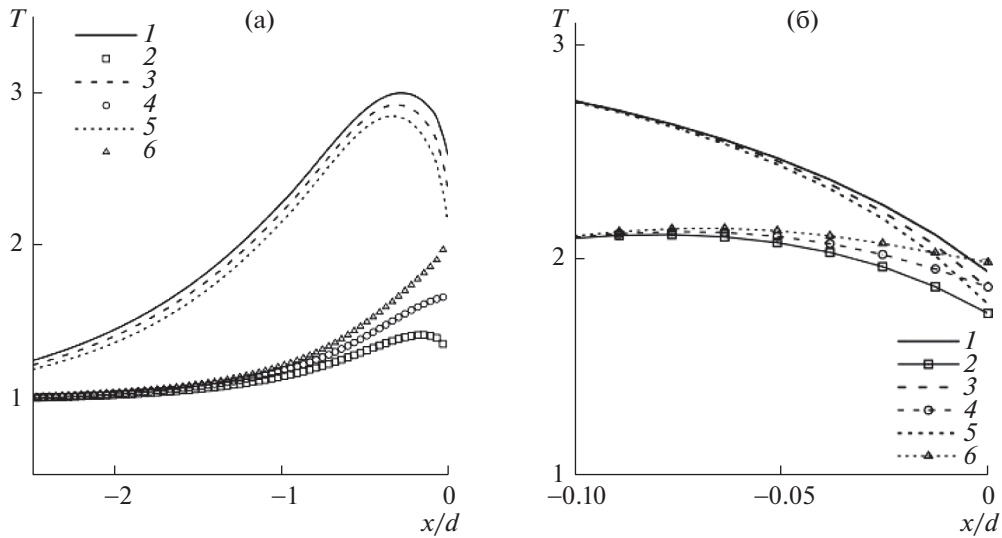
Пример 1. Рассмотрим сначала случай обтекания при температуре поверхности тела $T_w = T_\infty$. В безразмерных переменных $T_w = 1$. Зададим скорость набегающего потока, соответствующей числу $Ma = 3$. В свободномолекулярном режиме при отсутствии энергетических обменов внутренней энергия при любых заданных коэффициентах аккомодации и любой скорости частиц, падающих на поверхность, не изменяется, что не является физически корректным, так как исключает возбуждение вращательных степеней свободы (см. [21]). Рассмотрим случай, когда преобладает передача поступательной энергии во вращательную, т.е. $Q > 0$. Так как в свободномолекулярном режиме величина $(E_{rot,i} - E_{rot,w}) = 0$, то для анализа влияния интенсивности энергетического обмена на решение будем изменять $\alpha_{tr,rot}$.

Для выбора значений $\alpha_{tr,rot}$ рассмотрим поведение коэффициента в зависимости от угла наклона нормали к элементу поверхности при свободномолекулярном режиме обтекания. На фиг. 1а приведены графики значений $\alpha_{tr,rot}$, дающие равенство в условиях (2.9) и (2.10) (кривые 1, 2 соответственно). Видно, что условие $T_{rot,s} < T_{tr,s}$ можно удовлетворить при $\phi < 140^\circ$, выбрав $\alpha_{tr,rot} < 0.24$, однако при этом $T_{rot,r} > T_{tr,r}$. Значения температур на поверхности и температур отраженных частиц при $\alpha_{tr,rot} = 0.2$ приведены на фиг. 1б и 1в.

Учитывая значения $\alpha_{tr,rot}$ в свободномолекулярном режиме обтекания, рассмотрим влияние энергетических обменов на поведение температур при числах Кнудсена $Kn = 1$ и $Kn = 0.1$ для следующих значений параметров:

- вариант 1: $\alpha_{tr,rot} = 0.0$, $\alpha_{rot,tr} = 0.0$,
- вариант 2: $\alpha_{tr,rot} = 0.1$, $\alpha_{rot,tr} = 0.0$,
- вариант 3: $\alpha_{tr,rot} = 0.2$, $\alpha_{rot,tr} = 0.0$.

Из фиг. 2а следует, что при $Kn = 1$ передача поступательной энергии во вращательную приводит к значительному изменению температур по сравнению с течением без обмена. Особенно



Фиг. 2. Профили поступательной и вращательной температур при переходе поступательной энергии во вращательную: (а) – $\text{Kn} = 1$, (б) – $\text{Kn} = 0.1$. Линии 1, 3, 5 – поступательная температура, 2, 4, 6 – вращательная температура. Линии (1, 2), (3, 4), (5, 6) соответствуют вариантам 1, 2, 3.

сильно увеличивается вращательная температура газа, и при выбранных значениях $\alpha_{\text{tr,rot}}$ остается меньше поступательной температуры у поверхности тела.

При уменьшении числа Kn правая часть условия (2.10) стремится к нулю, и решения с обменом и без обмена становятся близкими. На Фиг. 2б, где представлены вращательная и поступательная температуры газа у поверхности при $\text{Kn} = 0.1$, видно, что отличия температур становятся малыми и локализованы около поверхности. При этом для варианта 2 температуры становятся уже равными, а для варианта 3 $T_{\text{rot}} > T_{\text{tr}}$. Таким образом, с уменьшением числа Кнудсена допустимые значения $\alpha_{\text{tr,rot}}$ и Q уменьшаются и граничные условия без обмена энергиями (2.3), (24) и с обменом (2.7), (2.8) становятся эквивалентными.

В рассмотренных случаях параметр $\alpha_{\text{rot,tr}} = 0$, и передача вращательной энергии в поступательную энергию молекул явным образом не задана. Значения $\alpha_{\text{rot,tr}}$, отличные от нуля, могут приводить к изменению поведения температур в поле течения. Однако для скоростей набегающего потока с $\text{Ma} \gg 1$ влияния перехода вращательной энергии в поступательную оказывается слабым, так как величина $|E_{\text{rot},i} - E_{\text{rot,w}}| \ll |E_{\text{tr},i} - E_{\text{tr,w}}|$ за исключением частей поверхности, где $(E_{\text{tr},i} - E_{\text{tr,w}}) \cong 0$. Кроме этого, выбором в точке торможения $\alpha_{\text{tr,rot}}^* = \alpha_{\text{tr,rot}} - \alpha_{\text{rot,tr}}(E_{\text{rot},i} - E_{\text{rot,w}})/(E_{\text{tr},i} - E_{\text{tr,w}})$ можно сделать обмены Q близкими.

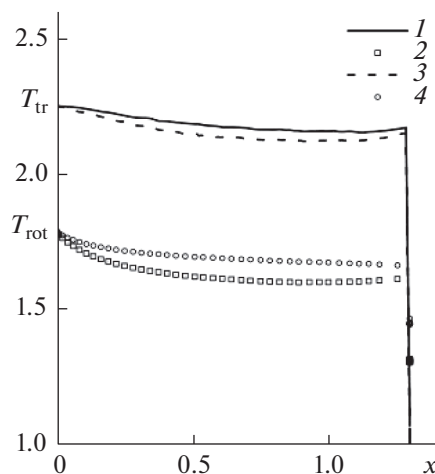
На Фиг. 3 показаны профили поступательной и вращательной температур газа на поверхности от координаты x , отсчитываемой от вершины параболы, с равными обменами в точке торможения для двух вариантов параметров ($\text{Kn} = 1$):

вариант 1: $\alpha_{\text{tr,rot}} = 0.138$, $\alpha_{\text{rot,tr}} = 0.5$,

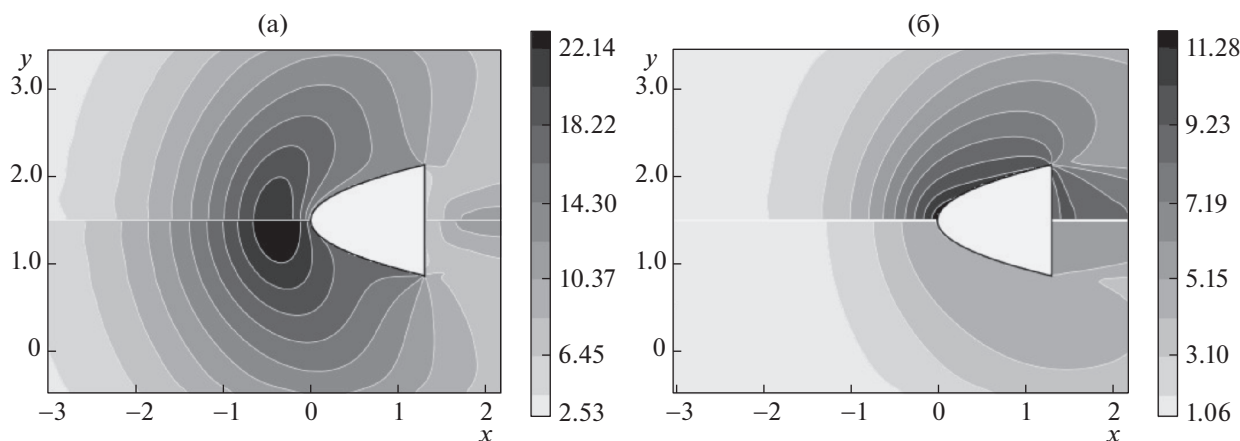
вариант 2: $\alpha_{\text{tr,rot}} = 0.128$, $\alpha_{\text{rot,tr}} = 0.0$.

Несмотря на отличие значений в вариантах 1 и 2, температуры вдоль линии торможения совпадают (график опущен), а отличия температур газа на поверхности малы.

При увеличении скорости набегающего потока общая тенденция влияния граничных условий на течение газа не изменяется. Положительный обмен, удовлетворяющий условиям (2.9), (2.10), стремится к нулю при уменьшении числа Kn . При $\text{Kn} \sim 1$ основное влияние испытывает вращательная температура, изменяясь не только около поверхности, но и во всем поле течения. На Фиг. 4 приведены изолинии вращательной и поступательной температур при обмене энергиями ($\alpha_{\text{tr,rot}} = 0.24$, $\alpha_{\text{rot,tr}} = 0.0$) и без обмена ($\alpha_{\text{tr,rot}} = \alpha_{\text{rot,tr}} = 0.0$) для скорости набегающего потока $\text{Ma} = 10$ при температуре поверхности $T_w = 2.5$.



Фиг. 3. Профили поступательной и вращательной температур на поверхности при равных обменах в точке торможения. Линии (1, 2) – вариант 1, линии (3, 4) – вариант 2, (1, 3) – поступательная температура, (2, 4) – вращательная температура.



Фиг. 4. Изолинии температур при скорости набегающего потока $Ma = 10$ и $T_w = 2.5$: (а) – поступательная температура, (б) – вращательная температура. Верхняя часть фигуры условия с обменом энергией, нижняя без обмена.

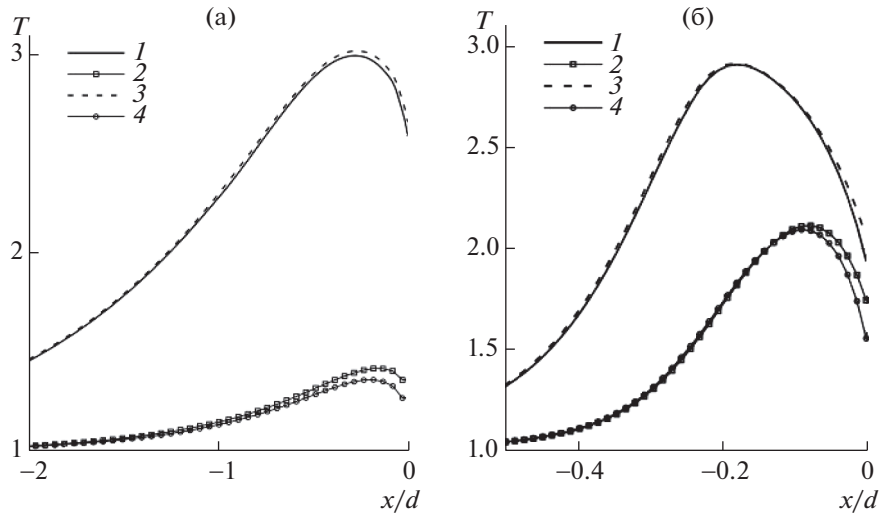
Рассмотрим случай $Q < 0$, соответствующий переходу вращательной энергии в поступательную при значениях параметров $\alpha_{tr,rot} = 0$ и $\alpha_{rot,tr} = 0.5$. Отметим, что данным выбором параметров мы искусственно создаем передачу вращательной энергии в поступательную, что может и не соответствовать реальной картине отражения.

На фиг. 5, где приведены для сравнения профили температур с $Q < 0$ и $Q = 0$, видно, что переход вращательной энергии в поступательную слабо влияет на течение как при $Kn = 1$, так и при $Kn = 0.1$. Относительные изменения вращательной и поступательной температур в точке торможения составляют 10 и 2% соответственно. Отметим, что при уменьшении числа Кнудсена относительные изменения вращательной и поступательной температур около поверхности сохраняются по величине.

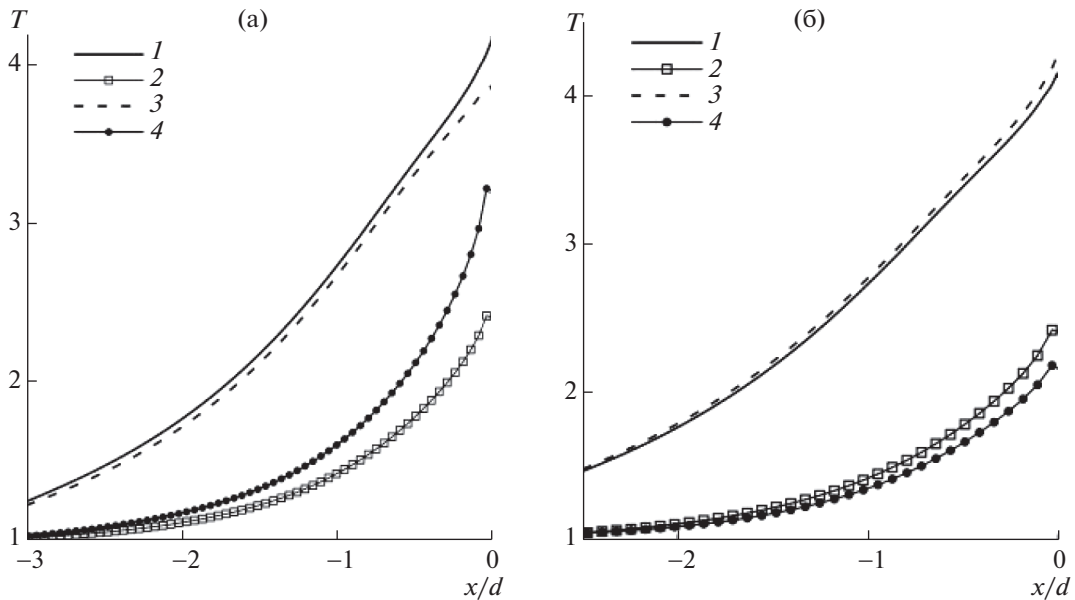
Пример 2. Рассмотрим обтекание при $Kn = 1$, с температурой поверхности тела выше равновесной температуры набегающего потока со скоростью $Ma = 3$. В безразмерных переменных $T_w = 4.5$. Для анализа влияния энергетических обменов на течение газа рассмотрим два варианта параметров:

вариант 1: $\alpha_{tr,rot} = 0.0, \alpha_{rot,tr} = 0.4,$

вариант 2: $\alpha_{tr,rot} = 0.4, \alpha_{rot,tr} = 0.0.$



Фиг. 5. Профили поступательной и вращательной температур при $Q < 0$ и $Q = 0$: (а) – $Kn = 1$, (б) – $Kn = 0.1$. Линии 1, 3 – поступательная температура, 2, 4 – вращательная температура. Линии (1, 2) – $Q = 0$, (3, 4) – $Q < 0$.



Фиг. 6. Профили поступательной и вращательной температур при $T_w = 4.5$: (а) – обмен $Q > 0$, (б) – обмен $Q < 0$. Линии 1, 3 – поступательная температура, 2, 4 – вращательная. Линии (1, 2) – условия без обмена энергий, (3, 4) – с обменом.

Нас интересует, возможен ли переход поступательной энергии во вращательную при малых значениях $E_{tr,i} - E_{tr,w}$. Из представленных графиков (фиг. 6) следует, что значения коэффициентов варианта 1 дают переход поступательной энергии во вращательную, несмотря на то что $\alpha_{tr,rot} = 0$. Так как $E_{rot,i} - E_{rot,w} < 0$, то величина обмена оказывается положительной, что и приводит к передаче поступательной энергии во вращательную. Положительная величина обмена, как и в примерах, рассмотренных выше, приводит к значительному повышению вращательной температуры. При значениях коэффициентов из варианта 2 реализуется обратная передача энергии, которая практически не влияет на параметры.

Таким образом, в рассмотренном случае определяющим фактором энергообмена является знак величины Q независимо от значений коэффициентов $\alpha_{tr,rot}$, $\alpha_{rot,tr}$.

В данной работе мы проанализировали только ряд предельных случаев использования граничных условий с энергообменом, не рассматривая дозвуковые течения и области за телом. Из приведенных примеров видно, что определяющим фактором при взаимодействии газа с поверхностью является величина обмена Q , которая может быть близкой при разных значениях используемых коэффициентов обмена. Задавая разные значения величины Q , мы можем моделировать различные условия отражения частиц поверхностью. При этом положительные значения независимо от значений коэффициентов обмена будут приводить к передаче поступательной энергии во вращательную, а отрицательные – наоборот.

Однако для использования таких граничных условий в реальных задачах необходимы дополнительная информация и детализация процесса передачи энергий, возможно, с заменой постоянных коэффициентов обмена на параметры, зависящие от энергии падающих на поверхность частиц и температуры отражения.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ граничных условий отражения молекулярного газа от поверхности с парциальными коэффициентами аккомодации и с обменом энергий показывает, что преобладание передачи поступательной энергии во вращательную существенно изменяет температуру газа около поверхности при умеренных и больших числах Кнудсена. С уменьшением числа Кнудсена переход поступательной энергии во вращательную становится незначительным, и условия без энергетического обмена могут использоваться при решении задач.

Переход вращательной энергии в поступательную гораздо слабее влияет на параметры течения, однако приводит к отличию температур около поверхности тела даже при малых числах Кнудсена. Такой процесс передачи энергии должен использовать дополнительную информацию о величине и условиях обмена и исследоваться более детально, учитывая распределение вращательной энергии по уровням.

При температуре поверхности выше равновесной энергетический обмен реализуется при значениях коэффициентов, соответствующих обратному переходу. Это связано с тем, что приходящие частицы не отдают, а получают энергию от поверхности.

Численные расчеты программным комплексом UFS проводились на вычислительных ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Epstein M.* A model of the wall boundary condition in kinetic theory // *AIAA Journal*. 1967. V. 5. № 10. P. 1797–1800.
2. *Nocilla S.* The surface re-emission law in free molecule flow, ed. J.A. Laurmann. *Rarefied Gas Dynamics*. New York, Academic Press, 1963.
3. *Cercignani C.* Theory and application of the Boltzmann equation. Edinburgh and London: Academic Press, 1975.
4. *Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н.* Анализ моделей рассеяния на основе результатов траекторных расчетов // *Изв. РАН. Механ. жидкости и газа*. 2012. № 5. С. 80–87.
5. *Struchtrup H.* Maxwell boundary condition and velocity dependent accommodation coefficient // *Phys. Fluids*. 2013. V. 25. P. 112001.
6. *Lord R.G.* Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel // *Phys. Fluids A*. 1991. V. 3. P. 706–710.
7. *Yamamoto K., Takeuchi H., Hyakutake T.* Characteristics of reflected gas molecules at a solid surface // *Phys. Fluids*. 2006. V. 18. P. 046103.
8. *Yamamoto K., Takeuchi H., Hyakutake T.* Scattering properties and scattering kernel based on the molecular dynamics analysis of gas-wall interaction // *Phys. Fluids*. 2007. V. 19. P. 087102.
9. *Ларина И.Н., Рыков В.А.* О граничных условиях для газов на поверхности тела // *Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа*. 1986. № 5. С. 141–148.
10. *Рыков В.А., Тутарев В.А., Шахов Е.М.* Численное исследование поперечного обтекания пластины сверхзвуковым потоком двухатомного разреженного газа // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2007. Т. 47. № 1. С. 140–154.
11. *Tantos S.* Effect of rotational and vibrational degrees of freedom in polyatomic gas heat transfer, flow and adsorption processes far from local equilibrium // *Dissertation*. Department of Mech. Engineer. Univ. of Thessaly, 2006.

12. Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газов с вращательными степенями свободы // Изв. АН СССР. Механ. жидкости и газа. 1975. № 6. С. 107–115.
13. Holway L.H. New statistical models for kinetic theory: Methods of construction // Phys. Fluids. 1966. V. 9. P. 1658–1673.
14. Andries P., LeTallec P., Perlat J., Perthame B. The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl number // Eur. J. Mech. B – Fluids. 2020. V. 19. P. 813–830.
15. Wang Z., Yan H., Li Q., Xu K. Unified gas-kinetic scheme for diatomic molecular flow with translational, rotational, and vibrational modes // J. of Comput. Phys. 2017. V. 350. P. 237–259.
16. Титарев В.А., Фролова А.А. Применение модельных кинетических уравнений для расчетов сверх- и гиперзвуковых течений молекулярного газа // Изв. РАН. Механ. жидкости и газа. 2018. № 4. С. 95–112.
17. Lofthouse A.J. Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics using the Direct Simulation Monte Carlo and Navier-Stokes models. PhD dissertation. Univ. Michigan, 2008.
18. Рыков В.А., Скобелкин В.Н. О макроскопическом описании движения газа с вращательными степенями свободы // Изв. АН. СССР. Механ. жидкости и газа. 1978. № 1. С. 180–183.
19. Kolobov V., Arslanbekov R., Aristov V., Frolova A., Zabelok S. Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement // J. Comput. Phys. 2007. V. 223. P. 589–608.
20. Ребров А.К., Морозов А.А., Плотников М.Ю., Тимошенко Н.И., Шишкин А.В. Аккомодация поступательной и вращательной энергии газа при свободномолекулярном обтекании тонкой проволоки // Ж. эксперим. и техн. физ. 2003. Т. 124. Вып. 4 (10) С. 820–828.
21. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.