

УДК 519.634

МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗА С ПОСТУПАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТЬЮ¹⁾

© 1999 г. Т. Г. Елизарова, И. А. Широков

(125047 Москва, Миусская пл., 4а, ИММ РАН)

Поступила в редакцию 03.06.98 г.

Построена математическая модель для описания течений вязкого сжимаемого газа, учитывающая возможную неравновесность системы относительно поступательных и вращательных степеней свободы. В равновесном случае построенные уравнения сводятся к выписанной ранее квазигидродинамической системе для полиатомного газа. Приведены результаты расчета течений в ударной волне и задачи о релаксации в сравнении с данными численного моделирования на основе кинетического подхода.

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах [1], [2] была предложена оригинальная математическая модель для описания течения вязкого сжимаемого газа, названная авторами системой квазигазодинамических (к. г. д.) уравнений. Было показано, что эти уравнения пригодны для расчета задач газодинамики и, в частности, для моделирования течений умеренно-разреженного газа [3]. В настоящей работе проводится обобщение к. г. д.-уравнений на случай газа с поступательно-вращательной температурной неравновесностью. Такая неравновесность характерна для течений разреженных газов, состоящих из двухатомных или полиатомных молекул [4]–[6].

Молекула рассматривается как твердое тело, обладающее только трансляционными и вращательными степенями свободы. Такое описание правомочно, если температура газа не слишком высока (колебательные степени свободы не возбуждены) и не слишком низка (вращательные степени свободы могут рассматриваться классически).

2. МОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

2.1. Выражения для энергии молекул. Предположим, что все молекулы одинаковы и представляют собой твердые ротаторы. В случае полная энергия молекулы совпадает с ее кинетической энергией и может быть записана как

$$E_m = \frac{m_0}{2} \xi^2 + E_r,$$

где E_r – вращательная энергия, m_0 – масса молекулы, $\xi = \mathbf{u} + \mathbf{c}$ – скорость ее центра масс, которая представляется в виде суммы макроскопической скорости \mathbf{u} и тепловой скорости \mathbf{c} .

Энергия вращения для случая полиатомной молекулы равна

$$E_r^{(3)} = \frac{1}{2} (I_1^0 \omega_1^2 + I_2^0 \omega_2^2 + I_3^0 \omega_3^2), \quad (2.1)$$

где I_1^0, I_2^0, I_3^0 – главные моменты инерции молекулы и $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ – угловые скорости относительно главных осей, которые обозначаются через 1, 2, 3 (см. [7, с. 128]). В этом случае молекула имеет шесть степеней свободы – три поступательные и три вращательные (число внутренних степеней свободы $\zeta = 3$). В дальнейшем при ссылках на такую систему будем использовать обозначения 3R.

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 98-01-00155).

В случае линейных (например, двухатомных) молекул, обладающих двумя вращательными степенями свободы ($\zeta = 2$), вращательная энергия записывается следующим образом:

$$E_r^{(2)} = \frac{I^0}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2), \quad (2.2)$$

где I^0 – главный момент инерции относительно оси, перпендикулярной оси симметрии молекулы. При ссылках на эту модель будем использовать обозначение $2R$.

2.2. Функции распределения и уравнения состояния. Состояние газа из твердых ротаторов может быть описано одночастичной функцией распределения $f(t, \mathbf{R}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\omega})$, зависящей от времени t , координаты \mathbf{R} , скорости центра масс $\boldsymbol{\xi}$ и вектора угловых скоростей $\boldsymbol{\omega}$. Будем нормировать эту функцию распределения соотношением

$$d\rho = f d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\omega},$$

где ρ – массовая плотность газа.

Введем в рассмотрение локально-равновесную двухтемпературную функцию распределения Максвелла–Больцмана [6, с. 109]:

$$f_{0r} = f_0 f_r, \quad (2.3)$$

которая является произведением максвелловской функции распределения по поступательным степеням свободы

$$f_0 = \rho \left(2\pi \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_t \right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\mathbf{c}^2}{2(\mathcal{R}/\mathcal{M})T_t}\right)$$

и функции распределения Хиншельвуда (Hinshelwood) по вращательным степеням свободы [4, с. 104]

$$f_r = \mathcal{A} \exp\left(-\frac{E_r}{kT_r}\right),$$

где \mathcal{A} – нормировочный множитель. Для газа с двумя вращательными степенями свободы ($2R$) это распределение имеет вид

$$f_r^{2R} = \left(2\pi \frac{\mathcal{R}}{I} T_r \right)^{-1} \exp\left(-\frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2(\mathcal{R}/I)T_r}\right),$$

для газа с тремя вращательными степенями свободы ($3R$)

$$f_r^{3R} = (2\pi \mathcal{R} T_r)^{-1} (I_1 I_2 I_3)^{1/2} \exp\left(-\frac{\omega_1^2}{2(\mathcal{R}/I_1)T_r} - \frac{\omega_2^2}{2(\mathcal{R}/I_2)T_r} - \frac{\omega_3^2}{2(\mathcal{R}/I_3)T_r}\right).$$

Здесь \mathcal{R} – универсальная газовая постоянная, \mathcal{M} – молярная масса рассматриваемого газа, $I = I^0 N_A$, $I_\alpha = I_\alpha^0 N_A$ ($\alpha = 1, 2, 3$), N_A – постоянная Авогадро, $k = \mathcal{R}/N_A$ – постоянная Больцмана, T_t – трансляционная температура, одинаковая для всех трансляционных степеней свободы молекулы, T_r – вращательная температура, одинаковая для всех вращательных степеней свободы молекулы.

Нормировочный множитель \mathcal{A} выбран из условия

$$\int f_r d\boldsymbol{\omega} = 1.$$

Такое представление для функции распределения правомерно в том случае, когда температура газа не слишком высока и колебательные степени свободы не возбуждены, но и не слишком мала, т.е. вращательные степени свободы могут рассматриваться в классическом приближении [8].

Функции распределения f и f_{0r} связаны между собой и определяют макропараметры газа следующим образом:

$$\int f d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\omega} = \int f_{0r} d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\omega} = \rho, \quad (2.4)$$

$$\int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\xi} \int f_{0r} d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\omega} = \rho \mathbf{u}. \quad (2.5)$$

Здесь и далее интегралы берутся в бесконечных пределах. Заметим, что

$$\int \mathbf{c} f d\xi d\omega = \int \mathbf{c} f_{0r} d\xi d\omega = 0.$$

Поступательная температура определяется кинетической энергией поступательного теплового движения:

$$\frac{3}{2} \rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_t = \frac{1}{2} \int \mathbf{c}^2 f d\xi d\omega = \frac{1}{2} \int \mathbf{c}^2 f_{0r} d\xi d\omega.$$

Давление, связанное с поступательной температурой частиц, определяется как

$$p_t = \frac{1}{3} \int \mathbf{c}^2 f d\xi d\omega = \frac{1}{3} \int \mathbf{c}^2 f_{0r} d\xi d\omega = \rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_t.$$

Введем величину ϵ_ω , имеющую смысл энергии вращательного движения частицы [8], которая для 2R-газа равна

$$\epsilon_\omega^{2R} = \frac{I}{2\mathcal{M}} (\omega_1^2 + \omega_2^2), \quad (2.6)$$

а для 3R-газа

$$\epsilon_\omega^{3R} = \frac{1}{2\mathcal{M}} (I_1 \omega_1^2 + I_2 \omega_2^2 + I_3 \omega_3^2). \quad (2.7)$$

Тогда функция распределения вращательной энергии в новых переменных примет вид

$$f_r^{2R} = \frac{I}{2\pi \mathcal{R} T_r} \exp\left(-\frac{\epsilon_\omega^{2R}}{(\mathcal{R}/\mathcal{M}) T_r}\right)$$

и

$$f_r^{3R} = \frac{\sqrt{I_1 I_2 I_3}}{2\pi \mathcal{R} T_r} \exp\left(-\frac{\epsilon_\omega^{3R}}{(\mathcal{R}/\mathcal{M}) T_r}\right).$$

Определим температуру T_r и давление p_r , связанные с вращательной энергией частиц, как

$$\rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_r = p_r = \int \epsilon_\omega^{2R} f d\xi d\omega = \int \epsilon_\omega^{2R} f_{0r} d\xi d\omega \quad (2.8)$$

в случае 2R, и

$$\rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_r = p_r = \frac{2}{3} \int \epsilon_\omega^{3R} f d\xi d\omega = \frac{2}{3} \int \epsilon_\omega^{3R} f_{0r} d\xi d\omega \quad (2.9)$$

в случае 3R.

Из приведенных соотношений следует, что кинетическая энергия единицы массы газа, включающая в себя энергию поступательного E_t и вращательного E_r движения, записывается в виде

$$E = \int \left(\frac{\xi^2}{2} + \epsilon_\omega\right) f d\xi d\omega = \int \left(\frac{\xi^2}{2} + \epsilon_\omega\right) f_{0r} d\xi d\omega = E_t + E_r, \quad (2.10)$$

где

$$E_t = \frac{1}{2} \int \xi^2 f d\xi d\omega = \frac{1}{2} \int \xi^2 f_{0r} d\xi d\omega = \frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \frac{3}{2} p_t,$$

$$E_r^{2R} = \int \epsilon_\omega^{2R} f d\xi d\omega = \int \epsilon_\omega^{2R} f_{0r} d\xi d\omega = \rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_r = p_r,$$

$$E_r^{3R} = \int \epsilon_\omega^{3R} f d\xi d\omega = \int \epsilon_\omega^{3R} f_{0r} d\xi d\omega = \frac{3}{2} \rho \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{M}} T_r = \frac{3}{2} p_r.$$

В заключение заметим, что полная энергия вычисляется как $E = E_t + E_r$, средняя температура связана со средним давлением уравнением состояния $p_{av} = \rho (\mathcal{R}/\mathcal{M}) T_{av}$, и среднее давление

вычисляется как

$$p_{av} = \frac{3p_t + \zeta p_r}{3 + \zeta}, \text{ где для 2R-газа } \zeta = 2, \text{ для 3R-газа } \zeta = 3.$$

3. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ СИСТЕМЫ КООРДИНАТ И НЕКОТОРЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

Введем декартову систему координат в пространстве (x, y, z) , \mathbf{R} – пространственный радиус-вектор. Для векторной функции пространственных координат $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ величина u_x обозначает его x -проекцию, u_y и u_z обозначают y - и z -проекции.

Другая пространственная система координат – произвольная криволинейная (η^1, η^2, η^3) система координат. Для той же векторной функции $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ величина u_i является ковариантной координатой:

$$u_i = \mathbf{u} \cdot \mathbf{R}_i, \text{ где } \mathbf{R}_i = \partial \mathbf{R} / \partial \eta^i.$$

Контравариантные координаты имеют вид $u^i = g^{ij} u_j$, где $g^{ij} = \mathbf{R}^i \cdot \mathbf{R}^j$ – метрический тензор. Векторы \mathbf{R}^i удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{R}^j = \delta_i^j, \quad \delta_i^j = 1(0), \quad i = (\neq) j.$$

Также справедливы следующие соотношения:

$$u^i = \mathbf{u} \cdot \mathbf{R}^i, \quad u_i = g_{ij} u^j, \quad g_{ik} g^{jk} = \delta_i^j, \quad g_{ij} = \mathbf{R}_i \cdot \mathbf{R}_j.$$

В терминах декартовых координат u^i выражается таким образом:

$$u^i = \mathbf{u} \cdot \mathbf{R}^i = u_x R_x^i + u_y R_y^i + u_z R_z^i, \quad (3.1)$$

где R_x^i есть x -проекция \mathbf{R}^i ; соответственно, R_y^i и R_z^i суть y - и z -проекции этого вектора. Метрический тензор можно выразить следующим образом:

$$g^{ij} = \mathbf{R}^i \cdot \mathbf{R}^j = R_x^i R_x^j + R_y^i R_y^j + R_z^i R_z^j. \quad (3.2)$$

Введем в рассмотрение также два пространства скоростей – пространство линейных и пространство угловых скоростей. В пространстве линейных скоростей обозначаем радиус-вектор через ξ . По отношению к пространственным координатам ξ может рассматриваться как постоянное векторное поле ξ^i :

$$\nabla_j \xi^i = 0, \quad (3.3)$$

∇_j – ковариантная производная [9]. В пространстве линейных скоростей введем декартову систему координат (ξ_x, ξ_y, ξ_z) , направления координатных осей которой совпадают с направлениями декартовой системы координат в пространстве \mathbf{R} .

В пространстве угловых скоростей также введем декартову систему координат $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$. Направления координатных осей в данном случае совпадают с главными осями молекулы как твердого тела и различаются от одной молекулы к другой.

Ниже проводим интегрирование в пространстве линейных скоростей ξ и в пространстве угловых скоростей ω с использованием соответствующих декартовых систем координат. Система моментных уравнений будет строиться в криволинейной системе координат (η^1, η^2, η^3) .

Вычислим некоторые интегралы, полезные в дальнейшем (для этих вычислений будем использовать (3.1), (3.2)):

$$\int c^i f_0 dc = \int (c_x R_x^i + c_y R_y^i + c_z R_z^i) f_0 dc = R_x^i \iiint c_x f_0 dc_x dc_y dc_z + \dots = 0, \quad (3.4)$$

$$\int c_i f_0 dc = g_{ik} \int c^k f_0 dc = 0, \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \int c^i c^j f_0 dc &= \int (c_x R_x^i + c_y R_y^i + c_z R_z^i) (c_x R_x^j + c_y R_y^j + c_z R_z^j) f_0 dc = \\ &= R_x^i R_x^j \int c_x^2 f_0 dc + R_y^i R_y^j \int c_y^2 f_0 dc + R_z^i R_z^j \int c_z^2 f_0 dc = (\mathbf{R}^i \cdot \mathbf{R}^j) p_t = g^{ij} p_t, \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\int c^i c^j c^k f_0 d\mathbf{c} = 0, \tag{3.7}$$

$$\int c_x^4 f_0 d\mathbf{c} = \int c_y^4 f_0 d\mathbf{c} = \int c_z^4 f_0 d\mathbf{c} = 3 \frac{p_t^2}{\rho}, \tag{3.8}$$

$$\int c_x^2 c_y^2 f_0 d\mathbf{c} = \int c_x^2 c_z^2 f_0 d\mathbf{c} = \int c_y^2 c_z^2 f_0 d\mathbf{c} = \frac{p_t^2}{\rho}, \tag{3.9}$$

$$\int c^i c^j c^2 f_0 d\mathbf{c} = 5 \frac{p_t^2}{\rho} g^{ij}. \tag{3.10}$$

Все интегралы вычисляются в бесконечных пределах. При их вычислении были использованы равенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) dy = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \exp(-y^2) dy = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} y^4 \exp(-y^2) dy = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}.$$

4. ПОСТРОЕНИЕ МОМЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Поведение функции распределения f описывается уравнением Больцмана

$$\partial f / \partial t + (\xi \nabla) f = \mathcal{F}, \tag{4.1}$$

где \mathcal{F} – интеграл столкновений. Для построения моментных уравнений, описывающих течения вязкого газа, традиционно используются приближения для функции f в виде разложения по малому параметру вблизи равновесного значения с последующим осреднением полученного кинетического уравнения с сумматорными инвариантами [4], [5].

Для построения уравнений, учитывающих поступательно-вращательную неравновесность (к. г. д. р.-система), заменим функцию распределения f ее приближенным значением f^{QGDR} , которое представляет собой разложение по малому параметру (градиентное разложение) следующего вида:

$$f^{QGDR} = f_{0r} - \tau (\xi \nabla) f_{0r}.$$

Здесь τ – максвелловское время релаксации:

$$\tau = \mu / p_t,$$

где $\mu \sim T_t^s$ – коэффициент вязкости газа, вычисляемый на основе поступательной температуры частиц [8], величина s определяется законом межмолекулярного взаимодействия [4].

Формальная замена

$$f \rightarrow f^{QGDR}$$

в конвективном слагаемом уравнения Больцмана (4.1) приводит к приближенному уравнению

$$\partial f / \partial t + (\xi \nabla) f_{0r} - (\xi \nabla) \tau (\xi \nabla) f_{0r} = \mathcal{F}. \tag{4.2}$$

Приближенное уравнение аналогичного вида использовалось ранее для построения к. г. д.-уравнений [1], [2].

Макроскопические к. г. д.-уравнения получаются посредством моментного усреднения уравнения (4.2) по пространствам скоростей. Процедура получения уравнений аналогична изложенной в [9].

Используя (3.3), перепишем уравнение (4.2) в индексной форме:

$$\partial f / \partial t + \nabla_i \xi^i f_{0r} - \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} = \mathcal{F}. \tag{4.3}$$

Интегрируя (4.3) с весом 1 и используя соотношения (2.4), (3.4), (3.6), получаем

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\xi d\omega = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\xi d\omega = \frac{\partial}{\partial t} \rho,$$

$$\int \nabla_i \xi^i f_{0r} d\xi d\omega = \nabla_i \int (u^i + c^i) f_0 d\mathbf{c} \int f_1 d\omega = \nabla_i \rho u^i,$$

$$\begin{aligned} \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} d\xi d\omega &= \nabla_i \tau \nabla_j \int (u^i + c^i)(u^j + c^j) f_0 dc = \\ &= \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + \int c^i c^j f_0 dc) = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_i). \end{aligned}$$

В силу свойств интеграла столкновений (единица является сумматорным инвариантом для интеграла столкновений Больцмана), интеграл от правой части обращается в ноль:

$$\int \mathcal{F} d\xi d\omega = 0.$$

Таким образом, получаем уравнение для плотности:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_i). \quad (4.4)$$

Для получения уравнения импульса проинтегрируем (4.3) с весом ξ^k , используя соотношения (2.5), (3.4), (3.6), (3.7):

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \xi^k d\xi d\omega &= \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k, \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \xi^k d\xi d\omega &= \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p_i), \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \xi^k d\xi d\omega &= \rho u^i u^j u^k + p_i (u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk}). \end{aligned}$$

Поскольку ξ^k является сумматорным инвариантом, то и в этом случае

$$\int \mathcal{F} \xi^k d\xi d\omega = 0.$$

Комбинируя полученные выражения, получаем уравнение для ρu^k :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i (\rho u^i u^k + g^{ik} p_i) = \nabla_i \tau \nabla_j [\rho u^i u^j u^k + p_i (u^k g^{ij} + u^j g^{ik} + u^i g^{jk})]. \quad (4.5)$$

С целью получить уравнение для поступательной энергии E_t усредним (4.3) с весом $\xi^2/2$, используя для этого соотношения (3.4)–(3.10):

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\xi^2}{2} d\xi d\omega &= \frac{\partial}{\partial t} E_t, \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \frac{1}{2} \xi^2 d\xi d\omega &= \nabla_i \frac{1}{2} \int (u^i + c^i) f_0 \xi^2 dc = \nabla_i u^i (E_t + p_t), \\ \int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \frac{\xi^2}{2} d\xi d\omega &= \nabla_i \tau \nabla_j \left(u^i u^j E_t + 2u^i u^j p_t + \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p_t + \frac{5}{2} \frac{p_t^2}{\rho} g^{ij} \right). \end{aligned}$$

Для интеграла столкновений \mathcal{F} величина $\xi^2/2$ уже не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен энергией между поступательными и вращательными степенями и последний интеграл уже не обращается в ноль. Назовем его обменным членом и обозначим так:

$$\int \mathcal{F} \frac{\xi^2}{2} d\xi d\omega = S_t.$$

Комбинируя полученные выражения и дифференцируя по частям последнее слагаемое, в которое входит квадрат давления, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} E_t + \nabla_i u^i (E_t + p_t) = \nabla_i \tau \nabla_j \left(u^i u^j E_t + 2u^i u^j p_t + \frac{1}{2} u_k u^k g^{ij} p_t \right) + \frac{5}{2} \nabla_i \tau \frac{p}{\rho} \nabla_j p_t g^{ij} + \frac{5}{2} \nabla_i \tau p_t \nabla_j \frac{p_t}{\rho} g^{ij} + S_t. \quad (4.6)$$

Чтобы получить уравнение для вращательной энергии E_r , необходимо усреднить (4.3) с весом ε_ω^{2R} (см. (2.6)) в случае 2R-молекул и с весом ε_ω^{3R} (см. (2.7)) в случае 3R-молекул. При этом будем использовать соотношения (2.8), (2.9), (3.4), (3.5). Для первого варианта осреднения получим

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial f}{\partial t} \varepsilon_\omega d\xi d\omega &= \frac{\partial}{\partial t} E_r, \\ \int \nabla_i \xi^i f_{0r} \varepsilon_\omega d\xi d\omega &= \nabla_i \int \xi^i f_0 dc \int \varepsilon_\omega f_r d\omega = \nabla_i u^i E_r, \end{aligned}$$

$$\int \nabla_i \tau \nabla_j \xi^i \xi^j f_{0r} \epsilon_{\omega} d\xi d\omega = \nabla_i \tau \nabla_j (\rho u^i u^j + g^{ij} p_t) \frac{E_r}{\rho} = \nabla_i \tau \nabla_j \left(E_r u^i u^j + g^{ij} \frac{p_t p_r}{\rho} \right).$$

Обменный член обозначим так:

$$\int \mathcal{F} \epsilon_{\omega} d\xi d\omega = S_r.$$

Комбинируя вместе полученные выражения и дифференцируя по частям слагаемое, содержащее произведение давлений, получаем уравнение для вращательной энергии 2R-молекул:

$$\frac{\partial}{\partial t} E_r + \nabla_i u^i E_r = \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_r + \nabla_i \tau \frac{p_r}{\rho} \nabla_j p_t g^{ij} + \nabla_i \tau p_t \nabla_j \frac{p_r}{\rho} g^{ij} + S_r. \quad (4.7)$$

Аналогично получим уравнение для 3R случая, при этом правая часть изменится:

$$\frac{\partial}{\partial t} E_r + \nabla_i u^i E_r = \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_r + \frac{3}{2} \nabla_i \tau \frac{p_r}{\rho} \nabla_j p_t g^{ij} + \frac{3}{2} \nabla_i \tau p_t \nabla_j \frac{p_r}{\rho} g^{ij} + S_r. \quad (4.8)$$

Изложенный здесь способ получения моментных уравнений приводит к выражениям для теплового потока с числом Прандтля, равным единице. Для обобщения уравнений на случай произвольного числа Прандтля предпоследние слагаемые в уравнениях для поступательной и вращательной энергий следует домножить на величину Pr^{-1} (см. [2]). Для определения числа Прандтля можно воспользоваться аппроксимацией Эйкена [10]:

$$Pr = (4\gamma)/(9\gamma - 5).$$

Здесь γ – показатель адиабаты. Для идеального газа [4]

$$\gamma = (5 + \zeta)/(3 + \zeta),$$

где ζ – количество внутренних степеней свободы молекулы. Т.е. в случае 2R-газа $\gamma = 7/5$, $Pr = 14/19$, а в случае 3R-газа $\gamma = 8/6$, $Pr = 16/21$.

Заметим, что использованная здесь процедура построения моментных уравнений позволяет построить модель, учитывающую неравновесность по вращательным и трем поступательным степеням свободы молекул одновременно.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБМЕННЫХ ЧЛЕНОВ

Обменные члены в правых частях уравнений (4.6), (4.7), (4.8) представляют собой моменты интеграла столкновений уравнения Больцмана (4.1). Для их вычисления воспользуемся релаксационной моделью интеграла столкновений в ее традиционном виде:

$$\mathcal{F} = (f_{0r}^0 - f)/\tau_r.$$

где f_{0r}^0 – функция распределения f_{0r} для равновесного случая, т.е. для случая, когда $T_t = T_r = T_{av}$, соответственно, $p_t = p_r = p_{av}$, τ_r – среднее время вращательной релаксации, которое обычно в несколько раз превышает максвелловское время релаксации τ (см. [4], [8]).

Подставляя выражение для интеграла столкновений в определение обменного члена, имеем для случая 2R

$$S_t = \int \frac{1}{\tau_r} (f_{0r}^0 - f) \frac{1}{2} \xi^2 d\xi d\omega = \frac{3}{2\tau_r} (p_{av} - p_t).$$

Для второго обменного члена

$$S_r = \int \frac{1}{\tau_r} (f_{0r}^0 - f) \epsilon_{\omega}^{2R} d\xi d\omega = \frac{1}{\tau_r} (p_{av} - p_r).$$

Подставляя выражения для среднего давления, получаем для 2R-случая

$$p_{av} = \frac{1}{5} (3p_t + 2p_r), \quad S_t = \frac{3}{5\tau_r} (p_r - p_t), \quad S_r = -S_t.$$

Рассуждая аналогично, получаем для 3R-случая

$$p_{av} = \frac{1}{2} (p_t + p_r), \quad S_t = \frac{3}{4\tau_r} (p_r - p_t), \quad S_r = -S_t.$$

Заметим, что, в соответствии с законом сохранения энергии, $S_t + S_r = 0$.

6. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ГАЗА С ДВУМЯ И ТРЕМЯ ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

В полученных уравнениях, где это возможно, подняв индексы с помощью метрического тензора, получим окончательный вид к. г. д. р.-уравнений для двухатомных (2R) и полиатомных (3R) молекул в инвариантном относительно системы координат виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p_t), \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p_t = \nabla_i \tau \nabla_j \rho u^i u^j u^k + \nabla_i \tau (\nabla^i p_t u^k + \nabla^k p_t u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i p_t u^i, \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_t + \nabla_i u^i (E_t + p_t) = \nabla_i \tau \left(\nabla_j (E_t + 2p_t) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p_t \right) + \frac{5}{2} \nabla_i \tau \frac{p_t}{\rho} \nabla^i p_t + \text{Pr}^{-1} \frac{5}{2} \nabla_i \tau p_t \nabla^i \frac{p_t}{\rho} + S_t. \quad (6.3)$$

Уравнение для вращательной энергии и обменные члены в случае 2R имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} E_r + \nabla_i u^i E_r = \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_r + \nabla_i \tau \frac{p_r}{\rho} \nabla^i p_t + \text{Pr}^{-1} \nabla_i \tau p_t \nabla^i \frac{p_r}{\rho} + S_r, \quad (6.4)$$

$$S_t = \frac{3}{5\tau_r} (p_r - p_t), \quad S_r = -S_t, \quad E_t = \frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \frac{3p_t}{2}, \quad E_r = p_r,$$

$$\gamma = 7/5, \text{Pr} = 14/19.$$

Уравнение для вращательной энергии и обменные члены в случае 3R имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} E_r + \nabla_i u^i E_r = \nabla_i \tau \nabla_j u^i u^j E_r + \frac{3}{2} \nabla_i \tau \frac{p_r}{\rho} \nabla^i p_t + \text{Pr}^{-1} \frac{3}{2} \nabla_i \tau p_t \nabla^i \frac{p_r}{\rho} + S_r, \quad (6.5)$$

$$S_t = \frac{3}{4\tau_r} (p_r - p_t), \quad S_r = -S_t, \quad E_t = \frac{\rho \mathbf{u}^2}{2} + \frac{3p_t}{2}, \quad E_r = \frac{3}{2} p_r,$$

$$\gamma = 8/6, \text{Pr} = 16/21.$$

Для пространственно-одномерных течений эти уравнения упрощаются:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^2 + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_t, \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^2 + \frac{\partial}{\partial r} p_t = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu \rho u^3 + 2 \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_t u - 2\nu \frac{\tau}{r^2} p_t u + \frac{\partial \tau}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu p_t u, \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u (E_t + p_t) = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu (E_t + 2p_t) u^2 + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{2} u^2 p_t + \quad (6.8)$$

$$+ \frac{5}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_t}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_t + \text{Pr}^{-1} \frac{5}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_t r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_t}{\rho} + S_t.$$

Для случая 2R

$$\frac{\partial E_r}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u E_r = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u^2 E_r + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_r}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_t + \text{Pr}^{-1} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_t r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_t}{\rho} + S_r. \quad (6.9)$$

Для случая 3R

$$\frac{\partial E_r}{\partial t} + \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u E_r = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{\partial}{\partial r} r^\nu u^2 E_r + \frac{3}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau \frac{p_r}{\rho} r^\nu \frac{\partial}{\partial r} p_t + \text{Pr}^{-1} \frac{3}{2} \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \tau p_t r^\nu \frac{\partial}{\partial r} \frac{p_t}{\rho} + S_r. \quad (6.10)$$

Здесь $\nu = 0$ соответствует плоскому случаю, $\nu = 1$ – цилиндрическому, $\nu = 2$ – сферическому.

Дополненные граничными условиями, выписанные здесь системы уравнений представляют собой замкнутую модель для расчета течений умеренно-разреженного газа с возможной неравновесностью между поступательными и вращательными степенями свободы.

В случае теплового равновесия газа по поступательным и вращательным степеням свободы, т.е. в случае, когда $T_t = T_r = T$ и $p_t = p_r = p$, полная энергия единицы объема равна

$$E = E_t + E_r = \frac{\rho u^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1}.$$

Для получения уравнения энергии в этом случае сложим уравнения для E_t и E_r и получим уравнение для полной энергии E . При этом вид уравнений для плотности и импульса не изменится:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u^i = \nabla_i \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p), \tag{6.11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i \rho u^i u^k + \nabla^k p = \nabla_i \tau \nabla_j \rho u^i u^j u^k + \nabla_i \tau (\nabla^i \rho u^k + \nabla^k \rho u^i) + \nabla^k \tau \nabla_i \rho u^i. \tag{6.12}$$

Уравнение для полной энергии примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i u^i (E + p) = \nabla_i \tau \left(\nabla_j (E + 2p) u^i u^j + \frac{1}{2} \nabla^i u_k u^k p \right) + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau \frac{p}{\rho} \nabla^i p + \text{Pr}^{-1} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla_i \tau p \nabla^i \frac{p}{\rho}. \tag{6.13}$$

Заметим, что приведенное выше уравнение энергии сразу может быть получено при осреднении приближенного уравнения (4.3) с сумматорным инвариантом $\xi^2/2 + \epsilon_\omega$ и обобщении полученного уравнения на числа $\text{Pr} \neq 1$.

Система (6.11)–(6.13) совпадает с использованной ранее к. г. д.-системой (например, [3]), которая была построена для мономолекулярного газа и затем формально обобщена на случай $\gamma \neq 5/3$.

Связь к. г. д.-уравнений и уравнений Навье–Стокса для мономолекулярного газа с числом Прандтля $\text{Pr} = 1$ прослежена в работах [9] и [11]. В частности, в [11] приведена запись к. г. д.-уравнений в виде уравнений баланса массы, импульса и полной энергии в локальной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i j^i = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho u^k + \nabla_i j^i u^k = \nabla_i P^{ik}, \quad \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla_i j^i E / \rho = \nabla_i (A^i - q^i).$$

Здесь введен вектор плотности потока массы

$$j^i = \rho u^i - \tau (\nabla_j \rho u^i u^j + \nabla^i p).$$

Тензор напряжений P^{ik} , вектор теплового потока q^i , а также векторы j^i и A^i представляются в виде суммы соответствующих величин в форме Навье–Стокса и некоторой добавки, которая в случае стационарных течений имеет асимптотический порядок $O(\tau^2)$. Можно показать, что эти результаты остаются справедливыми и в случае газа полиатомных молекул с числом Прандтля $\text{Pr} \neq 1$ в предположении, что коэффициент объемной вязкости η в модели Навье–Стокса [12, с. 72] аппроксимируется выражением

$$\eta = \mu(5/3 - \gamma), \text{ где } \mu = p\tau.$$

Предложенная простая аппроксимация соответствует известным свойствам коэффициента объемной вязкости [5, с. 188], [6, с. 97], а именно, что указанный коэффициент всегда положителен, связан с наличием внутренних степеней свободы молекулы и обращается в ноль для одноатомных газов.

7. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ И ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Численное решение к. г. д. р.-уравнений демонстрируется на основе пространственно-одномерной системы (6.6)–(6.10) в плоском случае ($v = 0$).

Максвелловское время релаксации $\tau = \mu/p$, входящее в диссипативные слагаемые к. г. д. р.-уравнений, вычисляется на основе выражения для коэффициента вязкости согласно работе [4]:

$$\mu = \frac{\lambda \rho \sqrt{2\pi(R/M)T}}{4} \Omega(s) = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^s, \quad \Omega(s) = \frac{30}{(7-2s)(5-2s)},$$

где λ – средняя длина свободного пробега молекул в газе. Во всех указанных соотношениях в качестве температуры выбирается поступательная температура T_t , поскольку именно поступательная температура определяет время между столкновениями и длину свободного пробега [8].

Время вращательной релаксации τ_r , входящее в выражение для обменных членов S_t и S_r , может быть вычислено таким образом:

$$\tau_r = Z \times \tau_c, \text{ где } \tau_c = \tau \times \Omega^{-1}(s),$$

τ_c – среднее время между столкновениями, Z^{-1} – доля неупругих столкновений по отношению к общему числу столкновений в газе (см. [4, с. 117], [8]). Для азота, например, $Z = 5$. Однако в литературе имеются и более точные формулы для вычисления этой величины, учитывающие ее зависимость, например, от температур T_t и T_r (см. например, [13] и [4, с. 413]). В приведенных далее расчетах полагается $\tau_r = Z\tau$.

Для численного решения к. г. д. р.-система уравнений приводится к безразмерному виду на основе масштабных величин длины λ_{ref} , плотности ρ_{ref} и температуры T_{ref} , по которой вычисляется скорость звука $a_{\text{ref}} = \sqrt{\gamma(\mathcal{R}/\mathcal{M})T_{\text{ref}}}$. Эта скорость также используется в качестве масштаба безразмеривания. При этом общий вид уравнений не меняется, однако уравнения связи принимают вид

$$\begin{aligned} p_t &= \rho T_t / \gamma, & p_r &= \rho T_r / \gamma, & a_t &= \sqrt{T_t}, & a_r &= \sqrt{T_r}, \\ \lambda &= \frac{T_t^{s-1/2}}{\rho} = \frac{(\gamma p_t)^{s-1/2}}{\rho^{s+1/2}}, & \tau &= \frac{\mu(T_t)}{p_t} = \frac{(\gamma p_t)^{s-1} \sqrt{2\pi\gamma}}{\rho^s} \Omega(s). \end{aligned}$$

Для численного решения системы к. г. д. р.-уравнений используется метод конечных разностей [14]. Все пространственные производные аппроксимируются на равномерной сетке центральными разностями со вторым порядком точности, производные по времени аппроксимируются с первым порядком точности разностями "вперед". Для нахождения стационарного решения применяется метод установления, построенный на основе явной по времени разностной схемы. Данная схема является условно устойчивой. Шаг по времени Δt выбирается из условия типа условия Куранта:

$$\Delta t = \alpha \frac{\min(h)}{\max[\max(a_t, a_r) + \sqrt{u^2}]},$$

где h – шаг пространственной сетки. Решение считается установившимся при выполнении условия

$$\max \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} \leq \varepsilon_\rho, \text{ где } n \text{ – номер шага по времени.}$$

Задача о пространственной релаксации. В качестве первого примера использования к. г. д. р.-уравнений приведем задачу о пространственной релаксации газа к его равновесному состоянию. Рассмотрим полупространство $x \geq 0$, через левую границу которого вытекает равномерный поток газа с температурой T_{t0} и T_{r0} , скоростью u_0 и плотностью ρ_0 . На правой (выходной) границе будем ставить условия, обеспечивающие свободное вытекание газа через эту границу. Для сверхзвуковых скоростей при этом достаточно поставить условия равенства нулю градиентов газодинамических величин ρ , T_t , T_r , u .

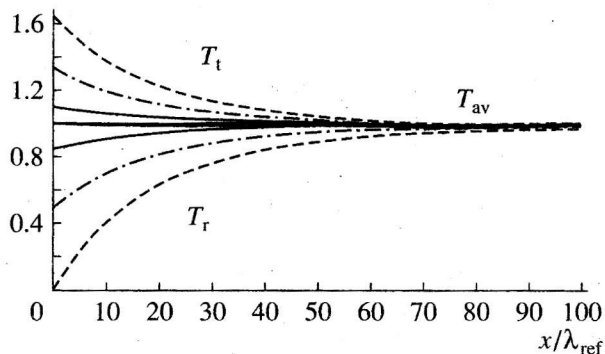
В качестве базовых параметров для приведения уравнений (6.6)–(6.10) к безразмерному виду будем выбирать среднюю температуру на входной границе, которая для случаев 2R- и 3R-газа равна, соответственно,

$$T_{\text{ref}}^{2R} = \frac{3T_{t0} + 2T_{r0}}{5} \text{ и } T_{\text{ref}}^{3R} = \frac{3T_{t0} + 3T_{r0}}{6},$$

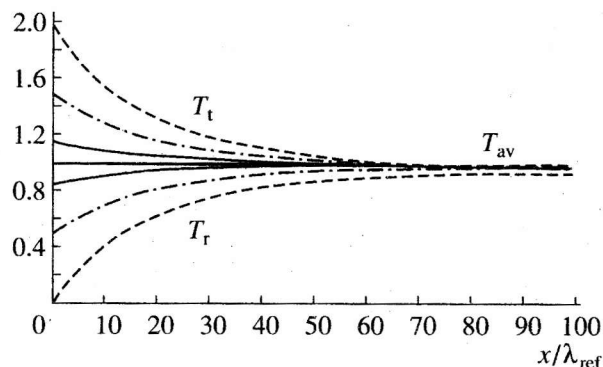
плотность $\rho_{\text{ref}} = \rho_0$, а также скорость звука и длину свободного пробега в виде

$$a_{\text{ref}} = \sqrt{\gamma(\mathcal{R}/\mathcal{M})T_{\text{ref}}}, \quad \lambda_{\text{ref}} = \frac{4\mu(T_{\text{ref}})}{\rho_{\text{ref}} \sqrt{2\pi(\mathcal{R}/\mathcal{M})T_{\text{ref}}}} \Omega(s)^{-1}.$$

Выберем начальную скорость в безразмерном виде $u_0 = 3$ и рассмотрим три варианта начальной неравновесности для 2R-газа: $T_{t0} = 5/3$, $T_{r0} = 0$, что соответствует нулевой вращательной энергии на входной границе, и два варианта более слабой температурной неравновесности на входе: $T_{t0} = 1.33$, $T_{r0} = 0.5$ и $T_{t0} = 1.1$, $T_{r0} = 0.85$. Выберем $Z = 5$, $s = 0.75$. Указанные значения Z и s были вы-



Фиг. 1.



Фиг. 2.

браны для решения задачи о релаксации вращательной температуры в азоте (см. [4] и [15]). Задача решалась в пространственно-однородной постановке.

Расчеты проведены на равномерной пространственной сетке с шагом $h = 0.5$ и числом узлов 201. В качестве начальных условий выбирались значения газодинамических параметров на входной границе. Для обеспечения устойчивости алгоритма параметр α выбирался равным 0.01, число временных шагов до сходимости составляло ~ 600000 при выбранной точности $\epsilon_p = 10^{-4}$. При сгущении сетки в два раза отличие в результатах расчетов было чрезвычайно мало, что позволяет сделать вывод о достигнутой сходимости по сетке.

На фиг. 1 приведены релаксационные кривые для вращательной и поступательной температур в 2R-газе при трех указанных значениях неравновесности на входе. Приведены также графики средней температуры (первый вариант – штриховая кривая, второй – штрихпунктирная, третий – сплошная). Видно, что обе температуры монотонно приближаются к своему равновесному значению $T_{av} = 1$. С ростом уровня начальной неравновесности процесс релаксации замедляется, что соответствует известным результатам [4], [15]. Равновесие достигается на расстоянии порядка 100 длин свободного пробега, что соответствует примерно 35 столкновениям и качественно согласуется с данными из [4, с. 233].

На фиг. 2 аналогичные кривые приведены для 3R-газа, при этом начальные значения выбраны в виде $T_{t0} = 2, T_{r0} = 0$; $T_{t0} = 1.5, T_{r0} = 0.5$; $T_{t0} = 1.15, T_{r0} = 0.85$. Здесь, как и в предыдущем случае, вращательная и поступательная температуры монотонно стремятся к своему среднему значению.

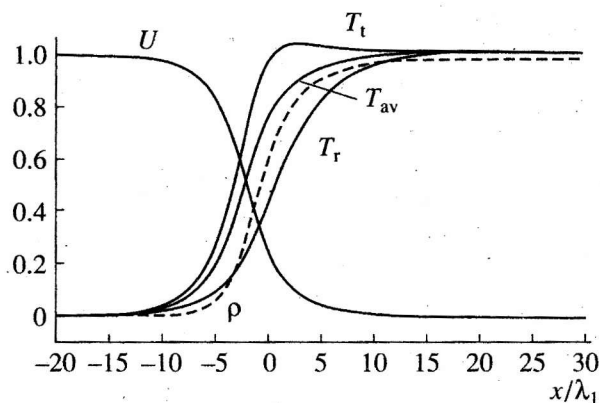
Задача о структуре ударной волны. В качестве второго примера использования предложенной математической модели приведем задачу о структуре неподвижной ударной волны в азоте. В качестве эталонных результатов используются данные прямого численного моделирования по методу Монте-Карло, приведенные в [4], [15].

Для обезразмеривания к. г. д. р.-уравнений используются параметры газа в набегающем потоке. Численное решение системы к. г. д. р.-уравнений основывается на описанном выше алгоритме. В качестве граничных условий на правой и левой границах используем условия Ренкина-Гюгонно для неподвижной ударной волны. Эти же значения использовались и в качестве начальных условий справа и слева от разрыва.

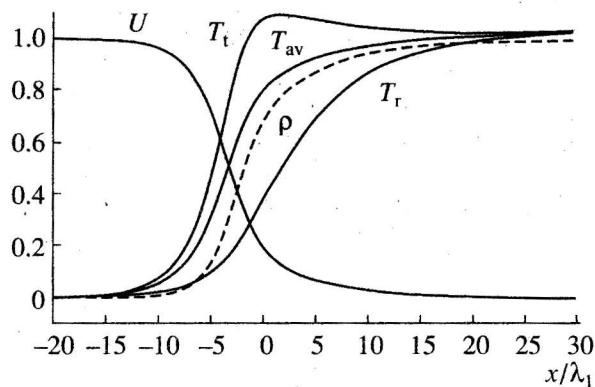
Расчеты проведены для чисел Маха $M = 1.71$ ($Z = 5$ и $Z = 10$), что соответствует [4], и $M = 7$ и 12.9 ($Z = 5$), что соответствует [15]. Задача решалась на равномерной пространственной сетке с шагом $h = 0.5$ и числом узлов 201. Для обеспечения устойчивости алгоритма параметр α выбирался равным 0.01, число временных шагов до сходимости составляло от 20000 до 1000000, в зависимости от числа Маха при выбранной точности $\epsilon_p = 10^{-3}$. При сгущении сетки в два раза отличия в результатах расчетов были чрезвычайно малы даже для $M = 12.9$, что позволяет сделать вывод о достигнутой сходимости по сетке.

Газодинамические параметры в ударной волне (скорость, плотность, поступательная и вращательная температуры, а также средняя температура) приведены на фиг. 3–6 в обычном безразмерном виде на основе условий Ренкина-Гюгонно вверх (индекс 1) и вниз (индекс 2) по потоку. Абсцисса x обезразмерена на длину свободного пробега в набегающем потоке λ_1 .

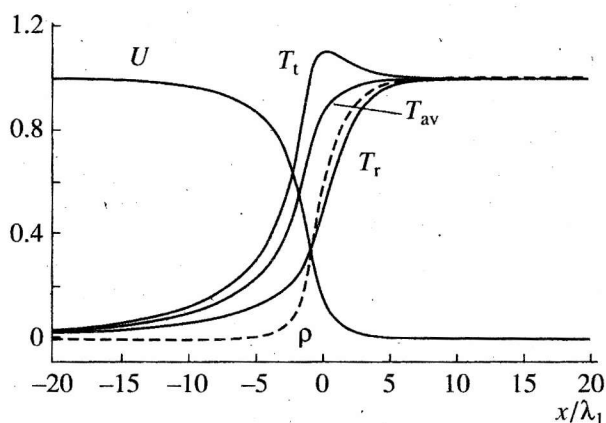
На фиг. 3 ($M = 1.71$ при $Z = 5$) видны характерные особенности рассматриваемой задачи, а именно: взаимное расположение кривых T_t, T_{av}, ρ, T_r соответствует результатам [4]. Видно пре-



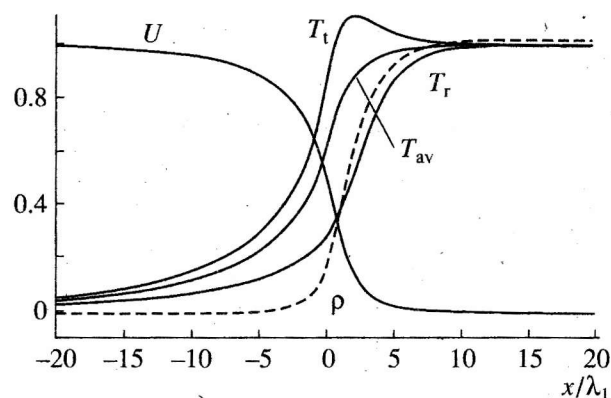
Фиг. 3.



Фиг. 4.



Фиг. 5.



Фиг. 6.

вышение T_t по сравнению с T_r , наблюдается также небольшой максимум поступательной температуры $T_t = 1.042$. На фиг. 4 представлено решение той же задачи, но для $Z = 10$. При этом ширина ударной волны увеличивается, ее обратная ширина по плотности уменьшается примерно на 20% и максимум T_t возрастает более чем в два раза ($T_t = 1.087$), что в точности соответствует данным [4, с. 298].

На фиг. 5 и 6 приведены результаты расчетов для $M = 7.0$ и 12.9 при $Z = 5$. Взаимное расположение всех кривых, и, в частности, профилей ρ и T_r (профиль плотности находится вблизи профиля вращательной температуры), а также значения максимумов поступательной температуры хорошо соответствует эталонному решению из [15]: при $M = 7$ максимум составляет $T_t = 1.098$, при $M = 12.9$ максимум равен $T_t = 1.096$.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена система к. г. д.-уравнений для описания течений газа, в которой учитывается неравновесность между поступательными и вращательными степенями свободы (к. г. д. р.-уравнения). При этом использовалось представление функции распределения в виде градиентного разложения в окрестности ее равновесного значения. Обменные члены получены на основе релаксационного вида интеграла столкновений.

В равновесном случае построенная система уравнений совпадает с выписанной ранее к. г. д.-системой для полиатомного газа.

Результаты численных расчетов задач о пространственной релаксации и структуре ударной волны, полученные на основе к. г. д. р.-уравнений, хорошо согласуются с данными расчетов на основе прямого численного моделирования, которое существенно более трудоемко, чем моментные методы. Это позволяет надеяться на целесообразность применения построенной авторами модели для расчетов многомерных течений умеренно разреженных полиатомных газов.

В заключение авторы выражают благодарность Б.Н. Четверушкину за ряд полезных дискуссий и поддержку этой работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н.* Использование кинетических моделей для расчета газодинамических течений // Матем. моделирование. М.: Наука, 1986. С. 261–278.
2. *Elizarova T.G., Chetverushkin B.N., Sheretov Yu.V.* Quasi gas-dynamic equations and computer simulation of viscous gas flows // Lect. Notes Phys. №414. P. 421–425. Prov. 13th Internat. Conf. on Numer. Methods in Fluid Dynamics, Rome, Italy, 1992.
3. *Elizarova T.G., Graur I.A., Lengrand J.C., Chpoun A.* Rarefied gas flow simulation based on quasigasdynamic equations // AIAA Journal. 1995. V. 33. №12. P. 2316–2324.
4. *Bird G.A.* Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
5. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
6. *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989.
7. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1965.
8. *Рыков В.А.* Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Механ. жидкости и газа. 1975. № 6. С. 107–115.
9. *Елизарова Т.Г., Шеретов Ю.В.* Инвариантный вид и асимптотические свойства обобщенной квазигазодинамической системы // Ж. Вычисл. матем. и матем. физ. 1991. № 7. С. 1042–1050.
10. *Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И.* Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965.
11. *Шеретов Ю.В.* Квазигидродинамические уравнения как модель течений сжимаемой вязкой теплопроводной среды // Применение функц. анализа в теории приближений. Тверь: Тверской гос. ун-т, 1997. С. 127–155.
12. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
13. *Ларина И.Н., Рыков В.А.* Подобие гиперзвуковых течений разреженного газа около тупых тел // Механ. жидкости и газа. 1981. № 2. С. 130–135.
14. *Самарский А.А.* Теория разностей схем. М.: Наука, 1977.
15. *Koura K.* Monte Carlo direct simulation of rotational relaxation of diatomic molecules using classical trajectory calculations: Nitrogen shock wave // Phys. Fluids. 1997. V. 9. № 11. P. 3543–3549.