

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
**«Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)»**

На правах рукописи

Тихоновец Алена Васильевна



**РАЗРАБОТКА КОМБИНИРОВАННОЙ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ
МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТЕЧЕНИЙ ВЫСОКОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ
НЕРАВНОВЕСНОСТИ**

Специальность: 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических
наук, старший научный сотрудник
Никитченко Юрий Алексеевич

Москва – 2020 год

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
ГЛАВА 1. КОМБИНИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛЕЙ ТЕЧЕНИЯ.....	20
1.1. Гидродинамическая модель.....	20
1.2. Кинетическая модель	21
1.3. Гидродинамическая модель Навье-Стокса-Фурье как первое приближение кинетической модели.....	23
1.4. Методика сшивания моделей	29
1.5. Выводы к Главе 1.....	34
ГЛАВА 2. РАСЧЁТ ПЛОСКОГО ТЕЧЕНИЯ КУЭТТА.....	35
2.1. Формулировка задачи	35
2.2. Численная реализация.....	37
2.3. Результаты тестовых расчетов	41
2.4. Выводы к Главе 2	47
ГЛАВА 3. ЗАДАЧА О СТРУКТУРЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ.....	48
3.1. Формулировка задачи	48
3.2. Численная реализация.....	48
3.3. Результаты расчётов.....	51
3.3.1. Сравнение комбинированной модели с модельным кинетическим уравнением и моделью Навье-Стокса-Фурье	51
3.3.2. Анализ гладкости решения.....	54
3.4. Дополнительные замечания	67
3.5. Выводы к Главе 3	67
ГЛАВА 4. РАСЧЁТ ОБТЕКАНИЯ АКТИВНОЙ ПОВЕРХНОСТИ.....	69
4.1. Формулировка задачи	69
4.2. Численная реализация.....	71
4.3. Методика повышения экономичности вычислительного процесса для многомерных задач	80
4.4. Результаты расчётов.....	83
4.5. Выводы к Главе 4	90
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	92
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	95
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	105

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы.

Современные аэрокосмические, вакуумные и нанотехнологии, а также ряд других областей техники нуждаются в совершенствовании вычислительных методов и математических моделей течений газа в широком интервале значений плотности, скорости, температур, чисел Маха и Кнудсена.

Особенностью ряда газодинамических процессов является их существенная неравновесность, обусловленная быстрыми изменениями параметров газа, т.е. малым временем протекания этих процессов. Под термином «неравновесное состояние» будем понимать такое состояние газовой среды, при котором функция распределения молекул по скоростям существенно отличается от равновесной (локально-максвелловской) функции распределения. В дальнейшем вместо термина «функция распределения молекул по скоростям» будем использовать термин «весовая функция». Весовая функция (или плотность) распределения случайной величины является производной от интегральной функции, поэтому с точки зрения современной математической статистики такая терминология оказывается более верной.

В неравновесной газовой среде энергия неравномерно распределена между степенями свободы молекул, как поступательными, так и внутренними. Исследование таких неравновесных состояний представляет большие математические трудности, а разработка методов описания неравновесных течений оказывается в числе наиболее актуальных задач современной аэромеханики и газовой динамики.

Проблема постановки граничных условий на твердой поверхности для уравнений вязкого теплопроводного газа становится весьма актуальной в случае гиперзвуковых и умеренно разреженных течений. Сильный разогрев поверхностей, возникающий, например, при гиперзвуковом обтекании летательного аппарата, активизирует хемосорбционные процессы на его поверхности. Технологии получения химически чистых веществ широко

используют конденсацию отдельных компонент газовой смеси на охлаждаемых, часто – криогенных, поверхностях разделительной установки. Простейшим устройством, использующим конденсационные процессы для выделения одной из компонент смеси, является бытовой кондиционер.

Существенный интерес представляет задача обтекания поверхностей большой кривизны «острых кромок». В окрестности этой поверхности даже при умеренных сверхзвуковых течениях возникает высокоградиентная область, характеризующаяся высокой степенью неравновесности газовой среды. При расчете гиперзвуковых течений решение этой задачи становится принципиально важным.

Степень разработанности темы.

Методы построения моделей неравновесных течений начали разрабатываться в первой половине двадцатого века. Интерес к ним не ослабевает и по сегодняшний день. Прежде всего, к таким методам относятся методы Грэда [1], Чепмена–Энскога [2, 3], Гильберта [4] и целый ряд более поздних методов.

Физико-математические модели динамики газовой среды можно разделить на три группы в соответствии с элементарным объектом, относительно которого строится модель.

Первая группа моделей в качестве элементарных объектов рассматривает «жидкие частицы». Этот уровень описания основан на теории сплошной среды и, следовательно, ограничивается малыми значениями чисел Кнудсена.

Для жидких частиц записываются уравнения сохранения массы, импульса и энергии. Для моделей динамики невязкой и нетеплопроводной среды этих уравнений достаточно, чтобы получить замкнутую систему. Уравнение движения этой системы принято называть уравнением Эйлера. Вся систему уравнений в дальнейшем будем называть моделью Эйлера.

В модели вязкой и теплопроводной среды дополнительно привлекаются реологический закон Ньютона (закон трения Стокса) и закон Фурье (модель Навье–Стокса–Фурье или *NSF*). В середине прошлого века была построена более

общая теория моделей сплошной среды [5], методы которой, тем не менее, не получили широкого распространения в области задач газовой динамики.

При описании динамики среды, состояние которой близко к локально-равновесному, а число Кнудсена (основной критерий неравновесности, вычисляемый по характерному геометрическому размеру сильно возмущённой области течения) исчезающе мало, достаточно информативной является уже модель Эйлера. В слабонеравновесных течениях, в которых число Кнудсена мало, но конечно, а число Рейнольдса не настолько велико, чтобы возникла турбулентность, модель *NSF* также является достаточно информативной и, по существу, основной физико-математической моделью динамики газовой среды, используемой в практических задачах.

Модель *NSF* для описания течений идеального газа достаточно подробно рассматривалась в работах [6, 7, 8]. Попытки применять модель *NSF* для описания течений с высокой степенью неравновесности предпринимались достаточно долгое время. К примеру, в работах [9, 10, 11, 12] показано, что при средних и низких числах Рейнольдса описание гиперзвукового течения с помощью гидродинамического подхода оказывается крайне неточным. Химическая неравновесность [13, 12] поддается гидродинамическому описанию, однако процессы описываются лишь в осреднённом виде. Во второй половине прошлого века получили развитие методы расчета многокомпонентных и химически реагирующих газовых течений, базирующиеся на классическом методе Чепмена–Энскога и существенно расширяющие его возможности [14, 15, 16, 17]. Добавление уравнений вязкого ударного слоя, выведенных напрямую из уравнений Навье-Стокса, не помогло повысить точность расчётов [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24].

Недостаточная информативность гидродинамических моделей проявляется и в случае больших чисел Рейнольдса при возникновении турбулентных течений. Этот вид течения требует привлечения дополнительных моделей турбулентности.

Следующий уровень описания – уровень кинетических уравнений (кинетический уровень). Элементарный объект моделей этого уровня – группа

молекул, объединенных по какому-либо принципу. В моделях, используемых для решения практических задач, рассматривается группа молекул, обладающих одинаковой (почти одинаковой) скоростью [25]. Уравнение баланса количества молекул в этой группе записывается с использованием одночастичной функции распределения (уравнения Больцмана и Максвелла–Больцмана).

Начиная с 60-х годов прошлого века велись численные исследования кинетических уравнений [26, 27]. Создавались модельные кинетические уравнения (*МКЕ*) – упрощенный вариант кинетического уравнения Больцмана. Одна из наиболее известных моделей – *BGK* [28, 29], в которой в уравнении Больцмана для замены интеграла столкновений введён упрощённый член релаксации. Это позволило достаточно точно рассчитывать свободное движение частиц, однако основным недостатком модели является некорректное число Прандтля, строго равное единице (для одноатомного газа правильное значение – $2/3$).

Так называемая *S*-модель (модель Е.М. Шахова), сохраняющая корректное число Прандтля, также широко используется для ряда задач [30, 31, 32, 33]. Модель Шахова приближена к модели столкновений Больцмана и хорошо воплощает реальные физические явления. Утверждается, что расчетные профили ударных структур для различных чисел Маха, решаемые с помощью модели Шахова, наилучшим образом согласуются с результатами *DSMC*, однако модели Шахова трудно сохранять положительность весовой функции на всем протяжении. Модель *ES* (эллиптическая статистическая модель) выводится на основе наиболее вероятного статистического принципа. Положительность весовой функции в модели *ES* может сохраняться постоянно. Принципиальный недостаток этой модели – тот факт, что тепловые потоки релаксируют быстрее напряжений. Таким образом, физичность модели *ES* не так очевидна, как в модели Шахова, так что погрешность вычисленных профилей ударных волн, решаемых моделью *ES*, несколько больше, чем ошибка модели Шахова, по сравнению с результатами *DSMC*. Для моделирования потока, близкого к равновесному, точность модели *ES* несколько выше или такая же, как у модели Шахова, однако

вычислительная нагрузка модели *ES* выше. Кроме того, модель *ES* менее подходит для решения задач сильно неравновесных течений. Основным недостатком модели Шахова является тот факт, что она подходит только для описания течений одноатомных газов.

Изначально модели кинетического уровня использовались для описания течений одноатомных газов. В дальнейшем эти модели были распространены и на многоатомные газы [34, 35, 36, 37, 38, 39, 40]. Разработаны методы численной реализации кинетических моделей в достаточно плотных газах [41, 42]. При изучении процессов переноса использовались как континуальные [43, 44, 45], так и кинетические [46, 47, 48, 49] уравнения. Так, в работе [50] предложен метод вычисления оператора столкновений обобщенного кинетического уравнения Больцмана, которое включает процессы перехода энергии поступательного движения молекул в колебательную или вращательную энергию. Оператор столкновений вычисляется проекционным методом на равномерной дискретной сетке скоростей. Он сохраняет свойство консервативности по массе, импульсу и энергии и обращается в ноль на равновесной весовой функции. Рассматриваются приближенные модели, позволяющие экономичный расчет вращательно-поступательной релаксации.

В работе [47] разработана кинетическая модель уравнения Больцмана для двухатомного газа с вращательными степенями свободы. Для описания течений двухатомного разреженного газа (азота) предложена система модельных кинетических уравнений. Разработан консервативный численный метод ее решения. Рассчитана задача о структуре ударной волны в азоте, проведено сравнение с данными экспериментов в широком диапазоне чисел Маха. Построенная система модельных кинетических уравнений предназначена для расчета сложных пространственных течений двухатомного газа с вращательными степенями свободы.

DSMC остается наиболее рабочим подходом при микроскопическом описании сложных неравновесных режимов. Численное решение точного уравнения Больцмана в случае гиперзвуковых течений достаточно трудоемко, и

даже подходы, предложенные в [50, 51] не позволяют с высокой точностью проводить расчеты широкого класса практических задач в трехмерных геометриях для гиперзвуковых режимов.

Еще большие вычислительные трудности возникают при интегрировании кинетического уравнения с внутренними степенями свободы. Уравнение, описывающее эволюцию функции распределения молекул, предложенное Ван-Чанг и Уленбеком (*WCU*) [52], учитывает поступательные степени свободы на основе классической механики, а внутренние степени свободы — на основе квантовой механики. Такой полуклассический подход предполагает, что молекулы помимо скорости обладают дискретными значениями внутренней энергии и молекулам, находящимся на каждом энергетическом уровне, соответствует своя функция распределения. Обобщенное уравнение Больцмана в этом случае сводится к системе кинетических уравнений с большим числом уравнений и интегралов столкновений. Методы прямого интегрирования уравнения *WCU* были предложены в [53, 54], но из-за высокой сложности пока еще не получили широкого распространения.

В качестве другого кинетического подхода для изучения влияния внутренней энергии на процессы в молекулярном газе можно использовать приближение, в котором система уравнений Ван-Чанг и Уленбека аппроксимируется модельными уравнениями. Одна из первых моделей для описания движения газа с внутренними степенями свободы была предложена в [55]. При этом интеграл столкновений *WCU* разбивался на сумму интегралов для упругих и неупругих столкновений. Данная идея была в дальнейшем использована в [56] при создании аппроксимирующего уравнения для учета внутренних энергетических состояний на основе эллипсоидальной статистической модели (*ES*-модель), а в [34] для учета вращательных степеней (*R*-модель). В [57] было предложено модельное уравнение с одним релаксационным членом в виде эллипсоидальной функции и с введением вспомогательной температуры, определяющей обмена поступательных и вращательных энергий (*ES-BGK*). В работе [58] исследуется возможность применения модельных

уравнений для расчетов сверх- и гиперзвуковых режимов обтекания тел с учетом внутренней энергии. При этом рассматривается обобщение моделей Рыкова и *ES-BGK* на случай учета колебательных степеней свободы.

Сравнение решений модельных уравнений, дающих правильное число Прандтля (*S*-модель [30], *ES*-модель [56]), в случае одноатомного газа и точного уравнения Больцмана для течений со слабой неравновесностью, малой плотностью или с умеренными числами Маха показывает, что в этих задачах решения, полученные численным интегрированием полного уравнения Больцмана и модельных уравнений, достаточно близки. Задачи обтекания тел при гиперзвуковых скоростях не относятся к этому классу, и использование модельных уравнений в таких режимах может приводить к значительным погрешностям в решении.

К третьей группе можно отнести модели, в которых в качестве элементарного объекта рассматривается отдельная молекула газа. Это статистические модели [59, 60, 61, 62, 63], изначально именуемые методами Монте-Карло, а в дальнейшем – методами прямого статистического моделирования. В подобных моделях количество дополнительных допущений минимально, что повышает точность и физическую адекватность модели. Основной недостаток – высокая трудоемкость численной реализации в смысле количества необходимых вычислительных операций. При решении практических задач рассмотрение полного статистического ансамбля не реализуемо. На практике используются сокращенные ансамбли, результаты расчета которых распространяются на полный ансамбль при ряде допущений. Тем не менее, в области разреженных газов результаты расчетов по статистическим моделям часто используются в качестве эталонных для многих модельных задач.

DSMC и модельные уравнения Больцмана могут дополнять друг друга. В связи с быстрым развитием компьютерных технологий сегодня стало возможным иметь такое крупномасштабное вычислительное оборудование, в котором более одного десятка тысяч центральных процессоров (*ЦП*) могут быть использованы для компьютерного моделирования гиперзвуковых разреженных потоков.

Важным вопросом, касающимся решения трехмерных уравнений Больцмана в фазовом пространстве, является то, что неизвестная функция распределения является функцией семи независимых переменных в фазовом пространстве и времени, и необходима эффективная параллельная реализация алгоритма решения высокого порядка. Таким образом, сочетание методов точного численного решения высокого порядка и его соответствующей параллельной реализации имеет решающее значение для сокращения времени вычислений и потребности в системной памяти для выполнения практического инженерного анализа и проектирования гиперзвуковых транспортных средств.

Основной особенностью статистических моделей является избыточная информативность. Эти модели не имеют принципиальных ограничений по числам Маха и Кнудсена. Следует заметить, что существующие методы (в том числе метод Монте-Карло) могут использоваться только для одноатомных газов, поэтому их практическое применение сильно ограничено. Тем не менее, разработки моделей на основе метода Монте-Карло продолжают.

В работе [58] предложены трёхтемпературные аппроксимирующие модельные уравнения для учёта внутренних степеней свободы, которые являются обобщением моделей Рыкова и *ES-BGK*. В этих моделях вначале рассматриваются однокомпонентные газы с температурами колебательных степеней свободы, не превышающими $600K$ при числах Маха $M \leq 10$. При температурах возбуждения колебательных степеней свободы ($10^3 K$ и выше [64]) многоатомные газы существенно диссоциированы и не могут рассматриваться как однокомпонентные. В работе [58] показано, что при более высоких скоростях тепловой поток становится заниженным. По этой причине указанная работа представляет большой теоретический интерес, однако должна рассматриваться как начальный этап исследований с дальнейшим распространением на многокомпонентные газы.

Моментные модели занимают промежуточное положение между кинетическими и гидродинамическими моделями. В их основе лежит то или иное кинетическое уравнение, из которого при помощи функции распределения

специального вида получают замкнутую систему дифференциальных уравнений относительно макроскопических переменных. Получаемые таким способом модели, с одной стороны, лишены избыточной информативности кинетических моделей, с другой – содержат необходимую информацию о молекулярных процессах, отсутствующую в теории сплошной среды.

Таким образом, исследователи сталкиваются со следующей сложностью: с одной стороны, гидродинамическое описание течения даёт недостаточно точные результаты, а модели кинетического и статистического уровней оказываются избыточно информативными.

Попытки описания высоко неравновесных течений при помощи той или иной одной модели течения приводят, как правило, или к большим погрешностям результатов расчета, или к недопустимо высоким требованиям к производительности вычислительных устройств. Примером может служить решение упомянутой выше задачи об обтекании острой кромки. Существует целый ряд экспериментальных и теоретических работ, посвященных этой проблеме, например [65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72]. В указанных теоретических работах использовались гидродинамические модели, кинетические уравнения, моментные уравнения и метод прямого статистического моделирования.

В связи с этим с конца XX века получили развитие так называемые гибридные модели [73], в которых для описания сильно неравновесной или пристеночной областей течения используются кинетические уравнения, описывающие течение на молекулярном уровне, а в остальном поле течения – классические гидродинамические модели.

Постановка граничных условий на уровне газодинамических переменных приводит к существенным погрешностям при относительно больших значениях чисел Маха и Кнудсена. Кинетические модели позволяют выставлять физически адекватные условия на поверхностях с различными свойствами для любого режима течения [74, 75]. Поскольку граничные условия выставляются для весовой функции, значения любого момента этой функции в граничной точке определяются элементарно и единственным образом. Одни из первых работ,

описывающих обтекание поглощающей поверхности одноатомным газом [76, 77], использовали *BGK*-модель.

Одним из примеров гибридных моделей является описанная в работе [78] гибридная кинетико-гидродинамическая модель решения газодинамических уравнений Больцмана-*BGK*. В этой работе так называемые скоростные частицы описываются кинетическим уравнением типа Больцмана-*BGK*, а тепловые – системой уравнений эйлера типа.

Гидродинамические уравнения базируются на допущении, что средняя длина свободного пробега частицы очень мала по сравнению с характерной макроскопической длиной. В таком случае, функция распределения частиц достигает локального равновесия, представленного максвеллианом, параметры которого – гидродинамические переменные (плотность, средняя скорость и температура). Изменение гидродинамических переменных описывается уравнениями Эйлера или Навье-Стокса. Если Kn – это число Кнудсена, то есть отношение средней длины свободного пробега молекулы к характерному макроскопическому размеру, то можно осуществить разложение решения уравнения Больцмана по степеням Kn . На высшем порядке Kn функция распределения аппроксимируется максвеллианом, параметры которого удовлетворяют уравнениям Эйлера. Если сохраняется следующий порядок, гидродинамические параметры разрешают сжимаемое уравнение Навье-Стокса, где диффузионные члены (вязкость и теплопроводность) – порядка Kn . Когда Kn мало, уравнения Навье-Стокса обеспечивают хорошую физическую точность и скорость решения. Однако при увеличении Kn уравнения Навье-Стокса становятся недействительными, как и любая другая подобная модель (например, уравнения Барнетта).

Модель, предложенная в работе [78], направлена на переходные режимы, где $Kn = O(1)$ (порядка единицы); в этом случае уравнения Навье-Стокса, разумеется, недействительны. В подобной ситуации необходимо прибегнуть к решению полностью кинетического уравнения.

Решение кинетического уравнения требует дискретизации большого количества переменных (3 пространственных измерения, 3 измерения по скорости и время; для многоатомных газов также пространства энергий вращения и колебания). Более того, кинетическое уравнение часто включает в себя «жёсткие» (в терминологии [78]) члены в операторе столкновений, поэтому для его разрешения требуются большие вычислительные мощности. По предположению авторов [78], наиболее эффективным методом решения подобных задач является метод Монте-Карло.

В работе [78] представлена гибридная кинетико-гидродинамическая модель, которая основана на методе деления областей по скоростной переменной. Для упрощения, в качестве опорной точки берётся модель *BGK* (вместо полного оператора Больцмана). Частично такая модель опирается на подход Левермора к минимизации энтропии [80].

Модель основывается на допущении, что частицы могут быть явным образом сгруппированы в две категории. Первая категория частиц – тепловые, их функция распределения близка к максвелловой. Вторая – надтепловые, или энергетические, частицы. Доля таких частиц мала по сравнению с общим их числом. С другой стороны, их функция распределения может быть любой. Авторы работы [78] подчёркивают, что, разумеется, в некоторых ситуациях подобное допущение явно неверно, но в большинстве случаев оно может подходить для практического применения.

По этому допущению, выбирается область B_1 в пространстве скоростей. Принимается предположение, что весовая функция может быть аппроксимирована максвеллианом внутри области B_1 . Также выбирается область B_2 , где используются уравнения *BGK*. Таким образом, наиболее важной задачей становится достижение баланса течения между двумя системами уравнений – Эйлера в области B_1 и *BGK* в области B_2 . В противном случае не достигается физическая точность.

Работа [78] не направлена на оптимизацию численной эффективности и остаётся, как указывают авторы, более медленной, чем прямая конечно-объёмная схема уравнения *BGK*. Авторы также предлагают два метода ускорения расчётов, которые, однако, подробно не рассматриваются.

Результаты решения проверялись в первую очередь на одномерном течении (задача ударной трубы). Также изучалось влияние численных параметров. Граничные условия ставились при помощи классической техники «фиктивной ячейки». Результаты расчётов показывают, что подобная гибридная модель оказывается ошибочной в описании функции распределения внутри ударной волны. Затем рассматривалось влияние численных параметров – как на макро-, так и на микроскопическом уровне. Изучено влияние дискретизации скорости; показано, что увеличение числа дискретных скоростей незначительно улучшает результаты. Также изучалось влияние дискретизации пространства и задача нестационарной ударной волны.

В конечном итоге, результаты численных расчётов в работе [78] хорошо соотносятся с экспериментальными данными до чисел Маха 5 или 6. Очевидно, что на более высоких скоростях такая модель оказывается гораздо менее точной.

Авторы [78] подчёркивают, что расчёты с помощью модели *BGK* и гибридной модели требуют примерно одинакового процессорного времени (причём для гибридной модели его требуется больше), однако в их задачи, как сказано выше, оптимизация решения не входила.

Те же авторы разработали методику сшивания кинетической и гидродинамической модели, представленную в работе [81]. Здесь, однако, рассматривается система заряженных частиц. В модели также используется разбивка пространства скоростей на области, и аппроксимация решения кинетического уравнения выполняется для малых скоростей. Эта аппроксимация основана на моментном методе по принципу минимизации энтропии. Кинетическая модель – уравнение типа Власова-*BGK*. В работе [81] также выполнено численное моделирование и сравнение гибридной модели с моделью *BGK* и уравнениями Навье-Стокса.

Авторы работы [81] указывают, что разработанный ими подход может использоваться для корректного описания лишь некоторых систем частиц, причём скорость решения увеличена по сравнению с чисто кинетическим описанием. Однако увеличение скорости и в этой работе не было основной задачей.

В более ранних работах применено искусственное сглаживание, что существенно снижает точность физического описания течений.

Следует заметить, что существующие методы (в том числе метод Монте-Карло и модель Шахова) могут использоваться только для одноатомных газов, поэтому их практическое применение сильно ограничено. На практике гибридные модели могут оказаться наиболее полезными при расчёте сильно разреженных многоатомных газов, например, воздуха в условиях сильной неравновесности. Тем не менее, разработки моделей на основе метода Монте-Карло продолжаются.

Для сохранения физичности описания течения требуется, чтобы гидродинамическая модель напрямую следовала из кинетической. Для модели *BGK* это условие не выполняется.

Ввиду актуальности методов расчета неравновесных течений число исследований в этой области достаточно велико. Рассмотренные модели течений – это далеко не полный перечень современных методов описания динамики газовых сред.

При использовании положительных аспектов сшиваемых моделей (точность физического описания течения, которую даёт кинетическая модель, и скорость решения гидродинамической модели), появляется возможность разработать модель, в которой кинетическая модель вырождается в гидродинамическую. При этом указанные положительные аспекты позволяют повысить экономичность расчётов (повысить их скорость с максимально возможным сохранением точности)

На основе вышеописанного обзора работ сформулированы цель и основные задачи настоящей работы.

Цель работы – разработка физико-математической модели, объединяющей кинетическое и гидродинамическое описание течения, и повышение её вычислительной экономичности.

Основные задачи работы.

- Разработка метода сшивания (комбинирования) кинетической и гидродинамической моделей применительно к многоатомным газам.
- Разработка метода решения модельного кинетического уравнения (*МКЕ*), не требующего сохранения значений весовой функции во всей вычислительной области.
- Тестирование комбинированной модели в области течений высокой динамической неравновесности.

После решения основных задач работы требуется произвести анализ и обобщение результатов, а также выработать рекомендации. Тестирование комбинированной модели проводится на примере следующих задач:

- в ударных волнах;
- в пристеночных сдвиговых течениях;
- в задачах обтекания поглощающих поверхностей.

Объект исследования – течения высокой степени неравновесности.

Предмет исследования – физико-математические модели неравновесных течений однокомпонентных газов.

Методология и методы исследования.

В работе применялся аналитический метод исследования. Для изучения свойств полученной гибридной модели использовался метод численного эксперимента.

Научная новизна работы.

Разработана комбинированная физико-математическая модель течения многоатомного газа, обеспечивающая гладкое решение в области сшивания кинетической и гидродинамической составляющей.

Сформулированы условия гладкости решения.

Предложен метод решения кинетической составляющей комбинированной модели, позволяющий существенно сократить необходимый объем оперативной памяти вычислительного устройства.

Получено поле течения вблизи поглощающей газ поверхности при малых числах Кнудсена.

На защиту выносятся:

- Комбинированная кинетико-гидродинамическая модель (*КНМ*) однокомпонентных газов.
- Методика повышения экономичности вычислительного процесса при реализации кинетической составляющей комбинированной модели.
- Рекомендации по выбору размера кинетической области при расчете ударных волн.

Научная и практическая значимость работы.

Физико-математическая модель течения и метод ее численной реализации могут быть использованы:

- при изучении сильно неравновесных течений;
- при разработке вычислительных ядер *CFD*-пакетов.

Достоверность результатов исследования подтверждена сравнением полученных расчетных данных с данными экспериментальных и расчетных исследований разных авторов.

Апробация и внедрение результатов.

Материалы работы докладывались:

- Гагаринские чтения – 2016: XLII Международная молодёжная научная конференция. Доклад «Сшивание кинетической и гидродинамической моделей на примере течения Куэтта»
- INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTATIONAL SCIENCE 2019 (ICCS 2019), июнь 2019, Фару, Португалия. Доклад «Special Aspects of Hybrid Kinetic-Hydrodynamic Model When Describing the Shape of Shockwaves»

- INTERNATIONAL CONGRESS ON INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGY 2020 (ICICT 2020), февраль 2020, Лондон, Великобритания. Доклад «Active Surface Calculation Method Using Kinetic-Hydrodynamic Model»

Результаты работы использованы в учебном процессе МАИ:

- в курсе «Динамика неравновесных сред», читаемом студентам специальности 24.03.03

- в курсе «Современные модели неравновесных течений», читаемом аспирантам специальности 05.07.01.

Публикации.

Статьи в журналах из списка ВАК:

- Березко М. Э., Никитченко Ю. А., Тихоновец А. В. Сшивание кинетической и гидродинамической моделей на примере течения Куэтта // Труды МАИ, 2017, №94, http://mai.ru/upload/iblock/f5f/berezko_nikitchenko_tikhonovets_rus.pdf

- Ю. А. Никитченко, С. А. Попов, А. В. Тихоновец, “Комбинированная кинетико-гидродинамическая модель течения многоатомного газа”, // Матем. моделирование, 31:2 (2019), 18–32

- Ю. А. Никитченко, А. В. Тихоновец, “Тестирование кинетико-гидродинамической модели на примере расчета обтекания поглощающей поверхности”, Матем. моделирование, 32:9 (2020), 103–118

Тезисы докладов:

- Березко М.Э., Тихоновец А.В. Сшивание кинетической и гидродинамической моделей на примере течения Куэтта. // Гагаринские чтения – 2017: XLIII Международная молодёжная научная конференция: Сборник тезисов докладов. – М.; Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2017. – 1479 с.

Сборники трудов конференций (SCOPUS):

- Nikitchenko Y., Popov S., Tikhonovets A. (2019) Special Aspects of Hybrid Kinetic-Hydrodynamic Model When Describing the Shape of Shockwaves. In: Rodrigues J. et al. (eds) Computational Science – ICCS 2019. ICCS 2019. Lecture Notes in Computer Science, vol 11539. Springer, Cham

- Yu. Nikitchenko, S. Popov, A. Tikhonovets. Active Surface Calculation Method Using Kinetic-Hydrodynamic Model. (в печати)

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, списка сокращений и условных обозначений, четырех глав, заключения и библиографического списка. Общий объем составляет 108 страниц, включая 70 рисунков. Библиографический список содержит 101 наименование.

Представленная диссертационная работа является одним из результатов комплексной исследовательской работы в области неравновесной газовой динамики, проводимой на кафедре "Аэродинамика ЛА" МАИ при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, проекты № 9.7170.2017/8.9 и № FSFF-2020-0013.

ГЛАВА 1. КОМБИНИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛЕЙ ТЕЧЕНИЯ

1.1. Гидродинамическая модель

В качестве гидродинамической модели рассматривается модель *NSF*, отличающаяся от традиционной системы уравнений сохранения в приближении Навье-Стокса наличием коэффициента объемной вязкости (выводу и учёту этого коэффициента посвящены работы [35, 82] в уравнениях неравновесных напряжений (повторяющиеся греческие подстрочные индексы подразумевают суммирование от 1 до 3):

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

$$P_{ij} = p_{ij} + \delta_{ij} p \quad (2)$$

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

$$\text{Здесь: } q_i = -\frac{9\gamma - 5}{4(\gamma - 1)} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}, \varphi_i = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}, \omega_i = -\frac{5 - 3\gamma}{2(\gamma - 1)} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

Граничные условия на твердой поверхности модели *NSF* формулируются как условия скольжения погранслоя [83]. В разрабатываемой модели течения такие граничные условия не требуются.

Специально отметим, что в определении молекулярно-кинетической теории, в отличие от механики сплошной среды, нормальные напряжения P_{ii} являются положительно определенными величинами, см. [4]. Для совместимости кинетической модели *MKE* и гидродинамической *NSF* в системе (1) тензор напряжений записан в молекулярно-кинетической трактовке.

Коэффициент вязкости μ и параметр Z , показывающий, сколько межмолекулярных столкновений приходится на одно неупругое столкновение, определяются зависимостями, используемыми в модели *MKE*, но с сохранением порядка приближения модели *NSF*, т.е. $\mu = \mu(T_i = T)$, $Z = Z(T_i / T_r = 1)$. В работе [40] показано, что коэффициент объемной вязкости позволяет выразить температуры T_i и T_r через температуру T в гидродинамическом приближении, однако в области сильно неравновесных течений такое приближение дает качественно неверные результаты.

В комбинированной модели, с целью совместимости моделей *NSF* и *MKE*, принималось $h = Z$.

1.2. Кинетическая модель

В качестве кинетической модели рассматривается модельное кинетическое уравнение многоатомных газов *MKE*, аналогично работе [40]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \frac{f^+ - f}{\tau_p} \quad (4)$$

После формального интегрирования по пространству вращательных энергий (4) может быть приведено к двум уравнениям:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{f_t}{f_r} \right| + \xi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left| \frac{f_t}{f_r} \right| = \frac{p}{\mu} \left| \frac{f_t^+ - f_t}{f_r^+ - f_r} \right| \quad (5)$$

Здесь:

$$f_t = \int f d\varepsilon; \quad f_r = \int \varepsilon f d\varepsilon;$$

$$f_t^+ = \frac{n}{(2\pi RT_i^+)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c_\alpha c_\alpha}{2RT_i^+}\right) \left(1 + \frac{\phi_\alpha c_\alpha}{3\rho(RT_i^+)^2} \left(\frac{c_\alpha c_\alpha}{5RT_i^+} - 1\right)\right);$$

$$f_r^+ = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} kT_r^+ f_t^+;$$

$$T_i^+ = T + \frac{5-3\gamma}{2} \left(1 - \frac{1}{Z}\right) (T_i - T_r); \quad T_r^+ = T - \frac{3}{2}(\gamma-1) \left(1 - \frac{1}{Z}\right) (T_i - T_r);$$

Макроскопические параметры газа определяются следующим образом:

$$n = \int f_t d\mathbf{c}; P_{ij} = m_0 \int c_i c_j f_t d\mathbf{c}; T_t = P_{\alpha\alpha} / 3\rho R; \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} nkT_r = \int f_r d\mathbf{c}; \phi_i = \int \frac{m_0 c^2}{2} c_i f_t d\mathbf{c};$$

Для формулировки граничных условий на твердой поверхности достаточно задать закон взаимодействия молекул газа с поверхностью. В настоящей работе использован закон диффузного отражения с полной аккомодацией энергии. Этот закон вполне адекватен реальным физическим процессам, протекающим на шероховатых поверхностях при умеренных энергиях (<1 эв) движения молекул [74].

В работе [40] результаты расчетов по *МКЕ* сравнивались с хорошо изученной *R*-моделью [34, 47] и экспериментальными данными [84, 85]. Рисунок 1 демонстрирует удовлетворительное совпадение расчетного профиля плоской гиперзвуковой ударной волны с экспериментальными данными даже для такого «тонкого» параметра, как температура вращательных степеней свободы. В тестовых расчетах настоящей работы не комбинированная с гидродинамической моделью модель *МКЕ* рассматривается как эталонная.

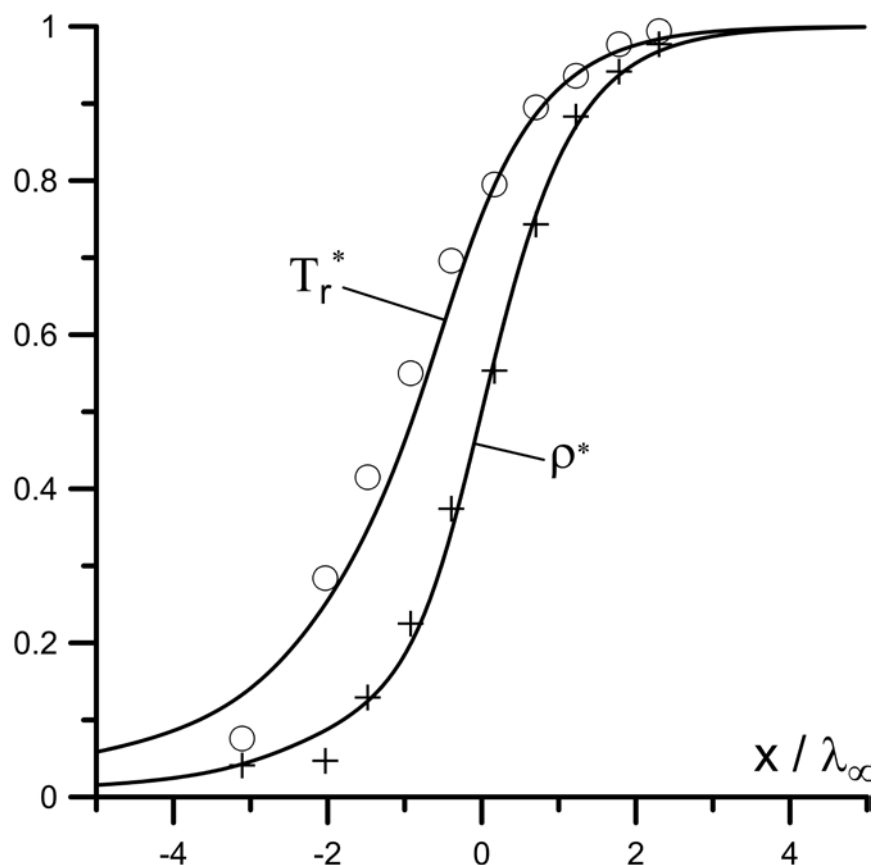


Рисунок 1. Приведенные профили вращательной температуры и плотности. Модельное кинетическое уравнение (МКЕ). Газ – азот. $M_\infty = 7$. \circ и $+$ – экспериментальные данные [84, 85].

1.3. Гидродинамическая модель Навье-Стокса-Фурье как первое приближение кинетической модели

Важнейшим свойством сшиваемых моделей является тот факт, что гидродинамическая модель является строгим первым приближением кинетической, в смысле процедуры Чепмена-Энскога.

Запишем кинетическое уравнение в таком виде, чтобы все, входящие в него величины имели порядок единицы. Начинаем обезразмеривание, ориентируясь на локальную производную:

$$\frac{t^*}{f_\infty} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{t^*}{f_\infty} \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} = \frac{t^*}{f_\infty} \frac{f^+ - f}{\tau_p} \quad (6)$$

Все весовые функции и время в (6) стали безразмерными. Обозначим безразмерные величины штрихом.

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + t^* \xi_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x_\alpha} = t^* \frac{f'^+ - f'}{\tau_p} \quad (7)$$

Заменим в уравнении (7) $t^* \rightarrow \frac{L}{U_\infty}$:

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \frac{L}{U_\infty} \xi_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x_\alpha} = \frac{L}{U_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau_p} \quad (8)$$

Теперь

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \xi'_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x'_\alpha} = \frac{L}{U_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau_p} \quad (9)$$

Если τ_p отнести к $\frac{L}{U_\infty}$, то τ_p будет малой величиной в плотном газе и очень

большой в разреженном. Для того, чтобы τ_p имело порядок единицы в газе любой

плотности, необходимо его отнести к $\tau_{p\infty} = \frac{\mu_\infty}{p_\infty}$.

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \xi'_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x'_\alpha} = \frac{L}{U_\infty} \frac{\mu_\infty p_\infty}{p_\infty \mu_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau_p} = \frac{L}{U_\infty} \frac{p_\infty}{\mu_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau'_p} \quad (10)$$

Теперь учтем $U_\infty = M_\infty \sqrt{\gamma RT_\infty}$ и $\lambda_\infty = \frac{\mu_\infty}{p_\infty} \sqrt{RT_\infty}$.

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \xi'_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x'_\alpha} = \frac{L}{\sqrt{\gamma} M_\infty \sqrt{RT_\infty}} \frac{p_\infty}{\mu_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau'_p} = \frac{L}{\sqrt{\gamma} M_\infty \lambda_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau'_p} \quad (11)$$

Окончательно:

$$\frac{\partial f'}{\partial t'} + \xi'_\alpha \frac{\partial f'}{\partial x'_\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\gamma} M_\infty Kn_\infty} \frac{f'^+ - f'}{\tau'_p} \quad (12)$$

Произведение $\sqrt{\gamma} M_\infty Kn_\infty$ в правой части (12) – показатель степени неравновесности. Принято считать, что модель NSF может быть использована до $Kn_\infty < 10^{-2}$. Однако даже в достаточно плотном газе при больших скоростях (например, при $M_\infty = 10$) уравнения Навье-Стокса оказываются недостаточно точными. Аналогичная ситуация, очевидно, наблюдается в разреженных газах даже при умеренных скоростях потока. Таким образом, при оценивании степени неравновесности потока нельзя руководствоваться только одним из критериев. В

Главе 3 настоящей работы показано, как именно произведение $M_\infty Kn_\infty$ влияет на гладкость решения.

Системы уравнений релаксационной газовой динамики в первом приближении, полученные при различных начальных допущениях, хорошо известны. Сошлёмся только на классические монографии [35, 4]. Рассмотрим некоторые варианты этих моделей, следующие из 24-моментной системы – системы моментных уравнений многоатомных однокомпонентных газов [39].

При таком подходе модели первого приближения могут быть получены на газодинамическом уровне описания физических процессов без привлечения кинетических уравнений. Оговоримся, что сама 24-моментная система получена из кинетического уравнения.

Время релаксации момента ω_i совпадает с временем релаксации напряжений τ_p .

Построим систему уравнений, соответствующую первому приближению процедуры Чепмена–Энскога. Уравнения неравновесных величин будем рассматривать в размерной форме, полагая основные газодинамические переменные $\rho, u_i, T, p, (T_t, T_\Omega, p^m)$ и их производные величинами порядка единицы, а неравновесные величины $\theta, p_{ij}^m, p_{ij}, \phi_{ijk}, \omega_i, q_i$ – малыми величинами порядка τ .

Уравнение неравновесных напряжений представим следующим образом:

$$p_{ij}^m = -\tau_p \left(\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} p_{ij}^m + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha p_{ij}^m) + (\delta_{*\alpha} p^m + p_{*\alpha}^m) \frac{\partial u_*}{\partial x_\alpha} - \\ & - \delta_{ij} \frac{2}{3} (\delta_{\alpha\beta} p^m + p_{\alpha\beta}^m) \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + 2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\phi_{ij\alpha} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \phi_\alpha \right) \end{aligned} \right) \quad (13)$$

Первое приближение неравновесных напряжений:

$$p_{ij}^{m[1]} = -\mu \left(\frac{\partial u_*}{\partial x_*} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \right).$$

Запишем уравнение разности температур θ в виде

$$\theta = -h\tau_p \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial \theta}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} \left(\delta_{\alpha\beta} T_t + \frac{p_{\alpha\beta}^m}{R\rho} \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{2}{3R} \phi_\alpha - \frac{1}{c_\Omega} \omega_\alpha \right) \right) \quad (14)$$

В первом приближении (τ^1) в правой части (14) удержим только старшие члены. Используем очевидное соотношение

$$\delta_{\alpha\beta} T_t \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} = T_t \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \quad (15)$$

Учтем, что в рассматриваемом приближении

$$\tau_p p^m = \mu(T_t) \sim \tau_p p = \mu(T) \quad (16)$$

В результате получим выражение для разности температур в первом приближении:

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

Аналогичные преобразования проведем для остальных неравновесных величин.

Уравнение неравновесных термодинамических напряжений перепишем в виде

$$p_{ij} = \delta_{ij} \frac{5-3\gamma}{2} \frac{h-1}{h} \rho R \theta - \left(\begin{aligned} & \frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha p_{ij}) + (\delta_{* \alpha} p + p_{* \alpha}) \frac{\partial u_{*}}{\partial x_\alpha} - \\ & - \tau_p \left(-\delta_{ij} \frac{2}{3} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} \right) (\delta_{\alpha\beta} p + p_{\alpha\beta}) \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (2\phi_{ij\alpha} - \delta_{ij} (\gamma-1) q_\alpha) \right) \end{aligned} \right) \quad (18)$$

Заменим разность температур первым приближением (17) и выделим главные члены в остальных слагаемых правой части (18). В результате приходим к выражению

$$p_{ij}^{[1]} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} h \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha} \quad (19)$$

Преобразованное уравнение моментов третьего порядка φ_{ijk} :

$$\phi_{ijk} = -\frac{3}{2} \tau_p \left(\frac{\partial}{\partial t} \phi_{ijk} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \phi_{ijk}) + \phi_{**\alpha} \frac{\partial u_*}{\partial x_\alpha} + \right. \\ \left. + \frac{R}{2} (\delta_{*\alpha} p^m + p_{*\alpha}^m) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\delta_{*k} T_t + \frac{p_{**}^m}{R\rho} \right) \right) \quad (20)$$

Тепловой поток поступательных степеней свободы:

$$\phi_i^{[1]} \equiv \phi_{i\alpha\alpha}^{[1]} = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T_t}{\partial x_i} \quad (21)$$

В первом приближении

$$\phi_{ijk}^{[1]} = -\frac{3}{4} R\mu \delta_{**} \frac{\partial T_t}{\partial x_*} \quad (22)$$

Преобразованное уравнение теплового потока ω_i :

$$\omega_i = -\frac{c_\omega}{c_\Omega} \tau_p \left(\frac{\partial}{\partial t} \omega_i + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \omega_i) + \omega_\alpha \frac{\partial u_i}{\partial x_\alpha} + c_\Omega (\delta_{i\alpha} p^m + p_{i\alpha}^m) \frac{\partial T_\Omega}{\partial x_\alpha} \right) \quad (23)$$

В первом приближении

$$\omega_i^{[1]} = -c_\omega \mu \frac{\partial T_\Omega}{\partial x_i} \quad (24)$$

Первое приближение полного теплового потока q_i :

$$q_i^{[1]} = \phi_i^{[1]} + \omega_i^{[1]} = -\frac{c_p}{\text{Pr}} \mu \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (25)$$

Здесь учтено, что в рассматриваемом приближении $T \sim T_t \sim T_\Omega$. Эта же зависимость может быть получена из уравнения теплового потока.

Система уравнений сохранения в совокупности с замыкающими ее зависимостями представляет собой модель первого приближения, соответствующую модели НСФ с явно выраженным коэффициентом объемной вязкости. Запишем ее в термодинамических терминах; только термодинамическая форма записи уравнений сохранения является строгим первым приближением. В процедуре Чепмена-Энскога порядок приближения определяется показателем степени малых величин, удерживаемых в уравнениях системы.

$$f_M = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right) \quad (26)$$

Здесь:

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

$$\phi_{ijk}^{[1]} = -\frac{3}{4} R \mu \left(\delta_{ij} \frac{\partial T_t}{\partial x_k} + \delta_{ik} \frac{\partial T_t}{\partial x_j} + \delta_{jk} \frac{\partial T_t}{\partial x_i} \right)$$

$$\phi_i^{[1]} \equiv \phi_{i\alpha\alpha}^{[1]} = -\frac{15}{4} R \mu \frac{\partial T_t}{\partial x_i}$$

$$\omega_i^{[1]} = -c_\omega \mu \frac{\partial T_\Omega}{\partial x_i}$$

$$q_i = -\frac{c_p}{Pr} \mu \frac{\partial T}{\partial x_i}; \quad c_\mu = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} h \right).$$

В отличие от модели НСФ, система (26) содержит коэффициент объемной вязкости в явном виде. Если коэффициент объемной вязкости μ' включен в уравнение неравновесных термодинамических напряжений в форме

$$p_{ij} = -\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \delta_{ij} \frac{2}{3} (\mu - \mu') \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}, \text{ то очевидно}$$

$$\mu' = \frac{5-3\gamma}{2} h \mu \quad (27)$$

Первые приближения неравновесных величин, полученные выше, являются следствием выбора значений времен релаксации. В этом плане проделанная процедура имеет только методологический смысл. Однако из реологического закона Ньютона и закона Фурье, используемых для определения времен релаксации τ_p , τ_ϕ , τ_ω , не следует, и принципиально не может следовать, выражение для коэффициента объемной вязкости.

Выражение (27) обусловлено уравнением быстроты энергообмена и уравнением для τ_θ . В совокупности с системой моментных уравнений многоатомных газов указанные уравнения однозначно определяют объемную вязкость.

Отличительной особенностью выражения (27) является адекватность газодинамическим задачам и по методу получения, и по уровню описания процессов.

Отметим характерную особенность модели первого приближения и, как будет показано ниже, моделей более высоких приближений процедуры Чепмена–Энскога. Уравнение энергии систем моментных уравнений может быть представлено в виде двух уравнений, записанных относительно температур T_i и T_r .

Количество скалярных уравнений напряжения при этом будет сокращено на единицу, что компенсирует увеличение количества уравнений энергии. Таким образом, проведенное преобразование по существу ничего не меняет в системах моментных уравнений.

1.4. Методика сшивания моделей

Одно из приложений комбинированной модели предполагает применение кинетической модели в сильно неравновесных областях поля течения и гидродинамической модели – в остальных областях.

Другое приложение относится к слабо неравновесным течениям вблизи активных (поглощающих или выделяющих газ) поверхностей. В этом случае кинетическая модель необходима только для формирования граничных условий на поверхности. На Рисунке 2 представлены схемы одномерной расчетной области для обоих случаев, варианты *A* и *B* соответственно. Вертикальной линией на варианте *B* обозначена обтекаемая поверхность.

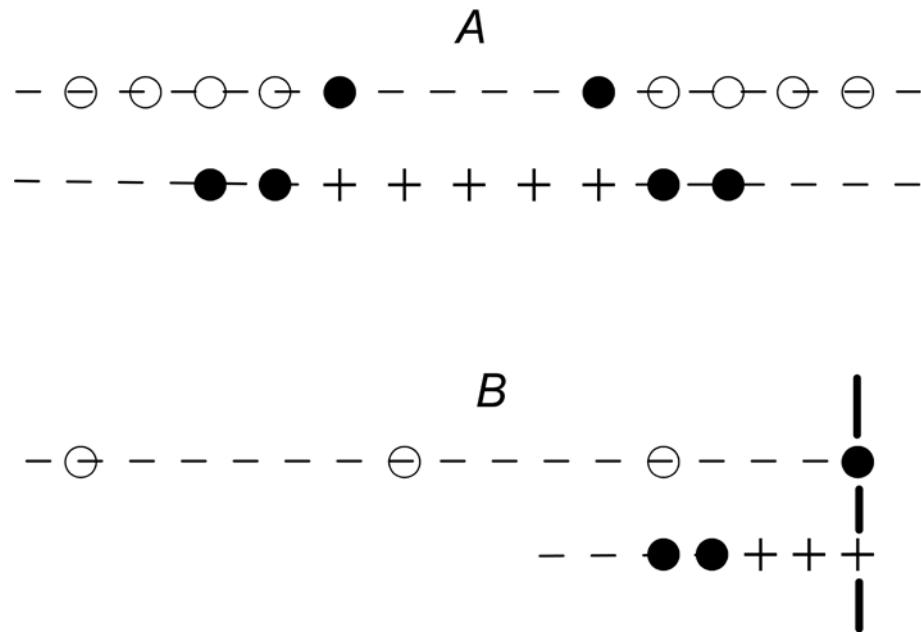


Рисунок 2. Схемы расчетных областей в одномерном случае. \circ – узлы гидродинамической модели, $+$ – узлы кинетической модели, \bullet – узлы сшивания моделей

Не уменьшая общности, рассмотрим одномерное стационарное поле течения с геометрической координатой $x_i \equiv x$, и соответствующей ей скоростной координатой ξ_x . Допустим, что для численного решения применяется конечно-разностный метод. Производные в системе (1) аппроксимируются центральными разностями на трех узлах, в системе (5) – односторонними разностями против потока, также на трех узлах. Отметим, что направление потока в кинетических уравнениях определяется направлением молекулярной скорости. В данном случае это скорость ξ_x , имеющая два противоположных направления. Следовательно, имеют место две разнонаправленные разностные схемы. Такой дискретный аналог вычислительной области в дальнейшем будет использован для численных тестов. Здесь он приведен только для наглядности изложения и не имеет принципиального значения.

В обоих вариантах Рисунка 2 расчетная область изображена дважды, отдельно для гидродинамической (светлые кружки) и кинетической (крестики)

моделей. В варианте А область решения гидродинамического решения разделена на две подобласти. Граничные условия левой подобласти формируются в узле (узел сшивания), обозначенном черной точкой и принадлежащем области кинетического решения. Для выбранного разностного шаблона достаточно одного узла. Значения ρ , u_x , T в этом узле определяются как моменты весовой функции, вычисленной в кинетической области. Аналогично строится решение в правой подобласти гидродинамического решения. При описании течения в пристеночной области достаточно одной гидродинамической подобласти. В варианте А между гидродинамической подобластью и стенкой располагается кинетическая подобласть (на Рисунке 2 не показано).

Граничные условия кинетического решения формируются в узлах гидродинамической области (черные кружки): по два узла в каждой гидродинамической подобласти для соответствующих ($\xi_x > 0$ или $\xi_x < 0$) разностных шаблонов. Поскольку гидродинамическая модель менее информативна, чем кинетическая модель, для восстановления весовой функции в узлах сшивания используется аппроксимирующая весовая функция f_A . В случае пристеночного течения в граничном со стенкой узле восстанавливается весовая функция, определяемая законом взаимодействия молекул с твердой поверхностью.

С учетом порядка приближения гидродинамической модели, в качестве аппроксимирующей весовой функции целесообразно принять разложение равновесной, максвелловой функции. Аналогичное разложение используется в ряде работ, например [86], для одноатомных газов.

Аппроксимирующая функция f_A :

$$f = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right) \times \frac{2\sqrt{\varepsilon/\pi}}{(2/3\eta kT_r)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2/3\eta kT_r}\right) \times \left(1 + \frac{1}{\rho RT_t} \left(\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_p}\right) p_{\alpha\beta} c_\alpha c_\beta + \left(1 - \frac{2}{3} \frac{\tau}{\tau_p}\right) \varphi_\alpha \left(\frac{c^2}{5RT_t} - 1\right) c_\alpha + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_p}\right) \frac{\omega_\alpha T_t}{\eta T_r} \left(\frac{\varepsilon}{\eta kT_r} - 1\right) c_\alpha \right) \right) \quad (28)$$

При больших значениях c_i (в периферийной области пространства скоростей) может иметь отрицательные значения. Например, при больших значениях теплового потока φ_i (соизмеримых с $p\sqrt{RT}$) и при разных знаках φ_i и $c_i c^2$ произведение $\varphi_i c_i c^2$ будет отрицательным. По модулю оно может превысить остальные слагаемые правой части.

В области сшивания кинетики и *NSF* величины неравновесных параметров должны быть очень малы (их квадратами можно пренебречь). Отрицательные значения аппроксимирующей функции находятся настолько далеко (по c_i), что не учитываются при численном решении. Таким образом, в области сшивания аппроксимирующая функция определена положительно.

Аналогичная ситуация возникает с функцией

$$f_t^+ = \frac{n}{(2\pi RT_t^+)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{c_\alpha c_\alpha}{2RT_t^+}\right) \left(1 + \frac{\varphi_\alpha c_\alpha}{3\rho (RT_t^+)^2} \left(\frac{c_\alpha c_\alpha}{5RT_t^+} - 1\right) \right) \quad (29)$$

Эта функция используется в течениях любой степени неравновесности, при сколь угодно больших значениях неравновесных величин. Но это функция гипотетическая. Она имитирует скорость релаксационного процесса. Её отрицательные значения только ускоряют процесс релаксации очень быстрых молекул.

В случае многоатомного газа для функций f_{At} и f_{Ar} аналогичные разложения приводят к выражениям [40]:

$$f_{At} = f_M \left(1 + \frac{1}{\rho(RT_t)^2} \left(\frac{1}{2} p_{\alpha\beta} c_\alpha c_\beta + \varphi_\alpha \left(\frac{c^2}{5RT_t} - 1 \right) c_\alpha \right) \right) \quad (30)$$

$$f_{Ar} = kT_r \left(\frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} f_{At} + f_M \frac{\omega_\alpha c_\alpha}{\rho R^2 T_t T_r} \right) \quad (31)$$

$$f_M = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right) \quad (32)$$

Макропараметры этих выражений определяются гидродинамической моделью и рассматриваются в соответствующем приближении:

$$T_t = T_r = T, \quad p_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} Z \right) \mu \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha},$$

$$\varphi_i = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad \omega_i = -\frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

Вариант *B* на Рисунке 2 предполагает решение модели *NSF* во всей расчетной области. Это позволяет строить расчетные сетки с гидродинамическим шагом, что принципиально важно при малых *Kn*. Сетка кинетического решения с шагом порядка длины пробега молекул строится в пределах последнего, пристеночного шага гидродинамической сетки. Макропараметры ρ , u_x , T в узлах сшивания получают интерполяцией гидродинамического решения.

После вычисления весовой функции движущихся к поверхности молекул в граничном узле восстанавливается весовая функция отраженных молекул. Для этого используется какой-либо закон взаимодействия молекул с поверхностью. Например, для хемо- или криосорбирующих поверхностей может быть использован диффузный закон отражения с учетом коэффициента поглощения массы [87].

На следующем этапе рассчитывается весовая функция отраженных молекул и вычисляются макропараметры в кинетической области. Для общего, гидродинамического решения используются макропараметры только граничного узла. Кинетическая модель используется только для формирования граничных условий гидродинамической модели.

1.5. Выводы к Главе 1

Разработан метод сшивания (комбинирования) кинетической и гидродинамической моделей применительно к многоатомным газам. Важнейшим свойством сшиваемых моделей является тот факт, что гидродинамическая модель является строгим первым приближением кинетической, в смысле процедуры Чепмена-Энскога. С учетом порядка приближения гидродинамической модели, в качестве аппроксимирующей весовой функции принято разложение равновесной, максвелловой функции.

ГЛАВА 2. РАСЧЁТ ПЛОСКОГО ТЕЧЕНИЯ КУЭТТА

2.1. Формулировка задачи

В качестве первой тестовой задачи выбрано плоское течение Куэтта. Это одномерное течение хорошо изучено как экспериментально, так и теоретически [88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95].

Схема течения и используемая система координат показаны на Рисунке 3. Две плоские бесконечные поверхности движутся в противоположных направлениях оси Ox с относительной скоростью u_w . Температура поверхностей – T_w . До начала движения плотность газа и концентрация молекул имели значения ρ_0 и n_0 .

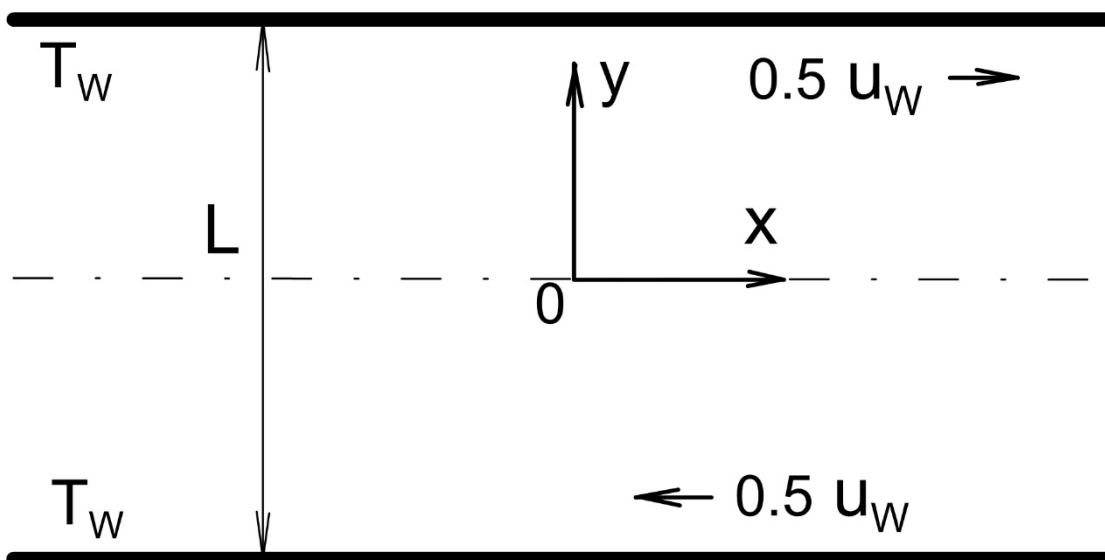


Рисунок 3. Схема тестовой задачи.

Средняя длина свободного пробега молекулы в невозмущенном (неподвижном) газе:

$$\lambda_0 = \frac{\mu_0}{\rho_0 \sqrt{RT_w}} \quad (33)$$

Числа Маха и Кнудсена определены как

$$M = \frac{u_w}{\sqrt{\gamma RT_w}}; \quad Kn = \frac{\mu_0}{\rho_0 \sqrt{RT_w}} \frac{1}{L},$$

здесь μ_0 – коэффициент вязкости, рассчитанный по температуре T_w .

Варьирование числами M и Kn позволяет изучать течения различной степени неравновесности. Величина касательного напряжения p_{xy} может приближаться к величине давления p .

Особенностью течения Куэтта является обращение уравнения сохранения массы (первое уравнение системы (1)) в тривиальное тождество. Поле плотности определяется по уравнению сохранения импульса, записанному для u_y . В стационарном течении $u_y = 0$ и закон сохранения импульса сводится к соотношению

$$\frac{\partial P_{yy}}{\partial y} = 0$$

В рассматриваемом течении в приближении модели NSF $p_{yy} = 0$ (см. (3)), следовательно, $P_{yy} = p = \rho RT = const$. Очевидное соотношение

$$\frac{2}{L} \int_0^{L/2} \rho dy = \rho_0 \quad (34)$$

может быть преобразовано следующим образом:

$$\frac{2}{L} \int_0^{L/2} \rho dy = \frac{2}{L} \int_0^{L/2} \frac{\rho RT}{RT} dy = \frac{2}{L} \rho RT \int_0^{L/2} \frac{dy}{RT} = \rho_0.$$

Отсюда следует:

$$\rho(y) = \frac{L\rho_0}{2T(y) \int_0^{L/2} \frac{dy}{T(y)}} \quad (35)$$

Поле плотности определяется локально алгебраическим уравнением (35). В отличие от дифференциальных уравнений, определяющих u_x и T , (35) не связано явно с фиксированными параметрами u_w и T_w на границах вычислительной области. Это приводит к накоплению вычислительной погрешности в процессе итерационного решения (1). Аналогичная проблема возникает при решении (5).

Для коррекции значений плотности на каждой итерации используется соотношение (34). Корректированное значение плотности (ρ') определяется как

$$\rho' = \frac{\rho}{\frac{2}{L} \int_0^{L/2} \rho dy} \quad (36)$$

Такая коррекция носит приближенный характер, так как требует постоянства только средней по полю плотности. При надлежащем выборе схемы решения вычислительная погрешность в пределах одной итерации имеет место только в последних знаках мантиссы числа. При проведении коррекции (36) на каждой итерации неточности коррекции практически не влияют на установившиеся значения параметров течения, определенных кинетической и *NSF* моделями.

В *КНМ* (кинетико-гидродинамическая модель) влияние коррекции на установившееся решение несколько больше. Это связано с тем, что кинетическая модель имеет большую вычислительную погрешность, чем модель *NSF*. Дополнительную погрешность вносит численное интегрирование по пространству скоростей. В результате коррекция (36) оказывает завышенное влияние на гидродинамическую область и заниженное – на кинетическую.

Отметим, что коррекция плотности вызвана спецификой течения Куэтта. В других задачах, например, в задачах внешнего обтекания, фиксированные значения плотности (ρ_∞) присутствует на границе вычислительной области. Проблема накопления вычислительной погрешности не возникает.

2.2. Численная реализация

Разработанная *КНМ* предполагает разбиение поля течения на две области – кинетическую и гидродинамическую. Кинетическая область непосредственно граничит с обтекаемой поверхностью. Ее протяженность в направлении нормали к поверхности составляет несколько длин свободного пробега молекул λ (кнудсеновский слой). Остальное поле течения занято гидродинамической областью.

На смежных границах указанных областей расположена область сшивания кинетической и гидродинамической моделей. В кинетической и

гидродинамической областях соответствующие модели течения реализуются традиционным для них образом. В области сшивания численное решение моделей специфично.

Передача информации в виде значений ρ , u_i , T , p от кинетической модели к гидродинамической не вызывает затруднений. Указанные газодинамические параметры являются моментами весовой функции, определяемой кинетической моделью.

Обратный информационный обмен неоднозначен. По газодинамическим параметрам, определенным гидродинамической моделью, принципиально невозможно восстановить весовую функцию в динамически неравновесном течении. В условиях близких к равновесным, возможны адекватные аппроксимации функции. Отметим, что модель *NSF* теоретически обоснована только в слабо неравновесных течениях (модель первого приближения процедуры Чепмена-Энскога). Этой модели соответствует весовая функция, часто называемая «навье-стоксовой» [4].

Если область сшивания моделей находится в слаборавновесной области течения, то передача информации от модели *NSF* к кинетической модели посредством весовой функции типа навье-стоксовой будет вполне обоснована. Модель течения и аппроксимирующая весовая функция будут соответствовать одному порядку приближения. Пригодность модели течения для описания процессов в рассматриваемой области будет означать пригодность аппроксимирующей функции для передачи информации в кинетическую модель.

Известно [4], что профиль скорости в погранслое меняет логарифмическую форму на линейную на расстоянии $(1...2)\lambda$ от поверхности. Линейный профиль скорости характерен для модели *NSF*. На этом основании сделана приведенная выше оценка толщины кинетической области.

В настоящей работе принята аппроксимирующая весовая функция f_A , аналогичная описанной выше. В случае многоатомных газов интегралы этой функции по пространству вращательных энергий приобретают вид:

$$f_{At} = f_{Mt} \left(1 + \frac{1}{p^m RT_t} \left(p_{xy}^m c_x c_y + \left(\frac{c^2}{5RT_t} - 1 \right) \phi_x c_x \right) \right) \quad (37)$$

$$f_{Ar} = kT_r \left(\frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} f_{At} + f_{Mt} \frac{\omega_x c_x}{p^m RT_r} \right) \quad (38)$$

$$f_{Mt} = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right) \quad (39)$$

Параметры функций f_{At} , f_{Mt} определяются в приближении модели NSF[31]:

$$T_t = T - \frac{5-3\gamma}{3} \frac{h\mu}{R\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right); \quad T_r = T + (\gamma-1) \frac{h\mu}{R\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right); \quad p^m = \rho RT_t;$$

$$p_{xy}^m = -\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right); \quad \phi_x = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \phi_y = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x}$$

$$\omega_x = -\left(c_v - \frac{3}{2} R \right) \mu \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \omega_y = -\left(c_v - \frac{3}{2} R \right) \mu \frac{\partial T}{\partial y}$$

На Рисунке 4 показана схема расчетной области. Для численного решения задачи используется конечно-разностный метод. Область сшивания моделей обозначена символом C с тремя перечеркнутыми узлами.

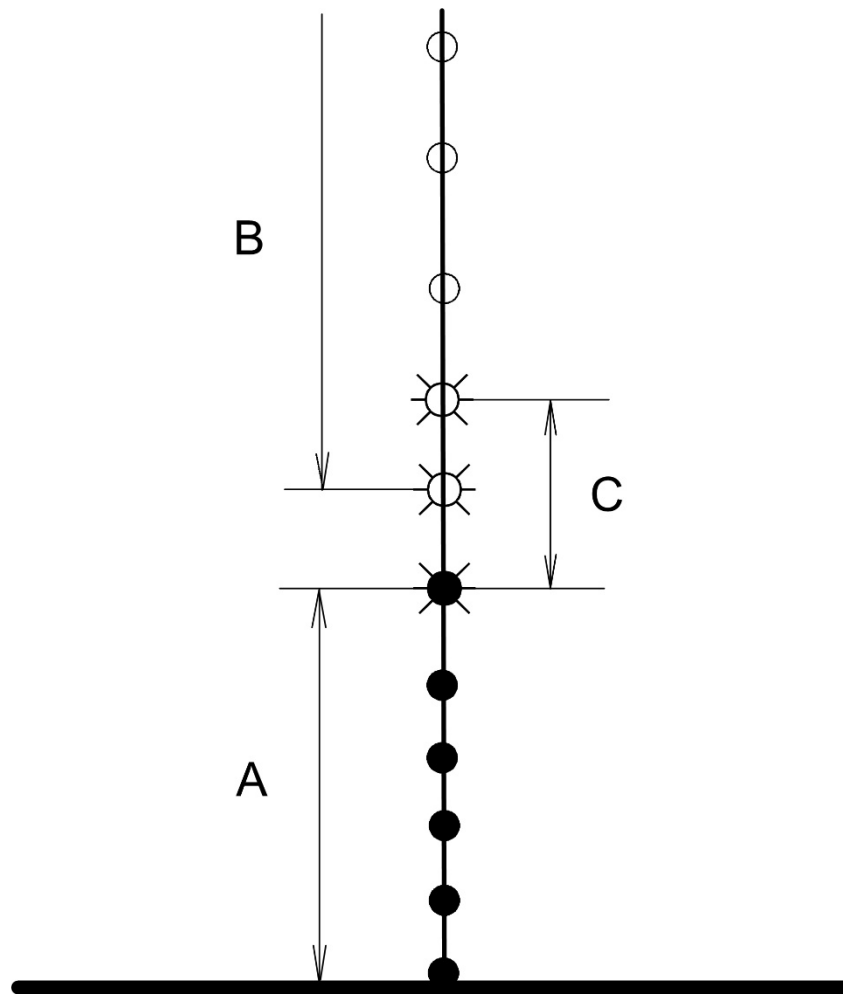


Рисунок 4. Схема расчетной области. A - кинетическая область, B - гидродинамическая область, C - область сшивания.

В узлах кинетической области (область A , темные точки) решается кинетическое модельное уравнение (5). Параметры ρ , u_i , T , p , определённые в верхней точке области A , служат краевыми значениями для модели NSF . Эта модель решается в гидродинамической области (область B , светлые точки). Аппроксимирующие весовые функции восстанавливаются в двух верхних узлах области сшивания.

Количество таких узлов зависит от выбора конечно-разностного шаблона кинетической модели. На Рисунке 4 предполагается аппроксимация производной по трем точкам, что требует двух краевых узлов. Для модели NSF достаточно одного краевого узла, если для решения поставлена краевая задача, реализуемая на трёхдиагональной ленточной матрице.

На обтекаемой поверхности, в нижнем узле области A , выставляются кинетические граничные условия в их традиционной форме.

2.3. Результаты тестовых расчетов

На начальном этапе тестирования моделей выбирались свободные параметры s , h и Z из условия наилучшего соответствия расчетных и экспериментальных коэффициентов трения в криптоне при $M = 0.88$ и в воздухе при $M = 1.4$ [88]. Интервал чисел Кнудсена – $Kn = 10^{-2} \dots 1$. Для модели NSF принято: $s = 0.7$, $h = 5$. Для кинетической модели: $s = 1$, $Z = 5$. Эти же значения использовались в гидродинамической и кинетической областях модели KHM . Область сшивания этой модели находилась на расстоянии 2λ от твердой поверхности.

Результаты расчетов показали, что наиболее наглядно расхождения профилей наблюдается на профилях температуры. На Рисунке 5 показаны профили температуры двухатомного газа при $M = 1$ и $Kn = 0.01$. Здесь и на следующих рисунках профили кинетической модели изображены сплошной линией, модели NSF – мелким пунктиром, модели KHM – крупным пунктиром.

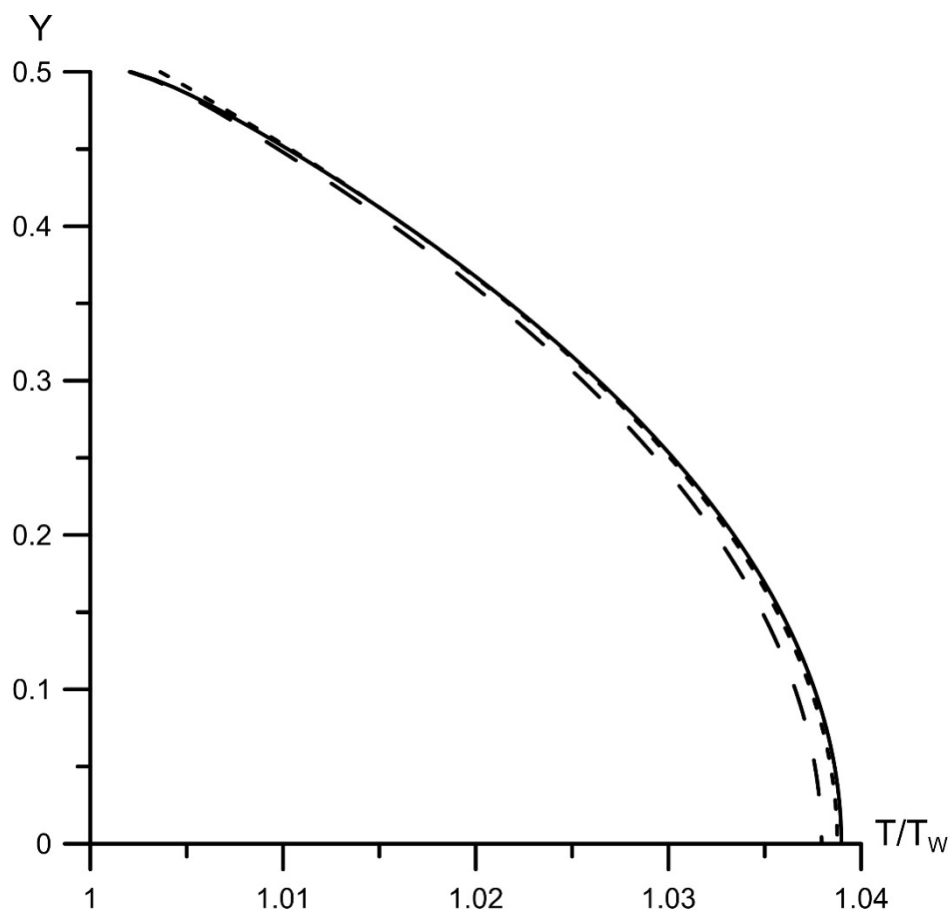


Рисунок 5. Профили температуры, $M = 1$, $Kn = 0.01$. Сплошная линия – кинетическая модель (*MKE*); мелкий пунктир – модель *NSF*; крупный пунктир – *KHM*.

При данном числе Кнудсена модель *NSF* с граничными условиями скольжения погранслоя теоретически обоснована. Профили всех моделей практически совпадают. Наибольшее отклонение от *MKE* имеет профиль *KHM*. Это отклонение связано с указанными выше погрешностями коррекции концентрации. Рисунок 9 позволяет оценить влияние этих погрешностей.

При данных параметрах течения модель *KHM* потребляла в несколько десятков раз меньше процессорного времени и оперативной памяти, чем кинетическая модель.

На Рисунке 6 представлены результаты расчета при $M = 1$ и $Kn = 0.1$. Это значение Kn соответствует переходной области течения, в которой модель *NSF* не обоснована теоретически, что и подтверждает Рисунок 6. *KHM*, использующая

NSF в большей части расчетной области, дает существенно лучший профиль, даже с учетом погрешности коррекции плотности.

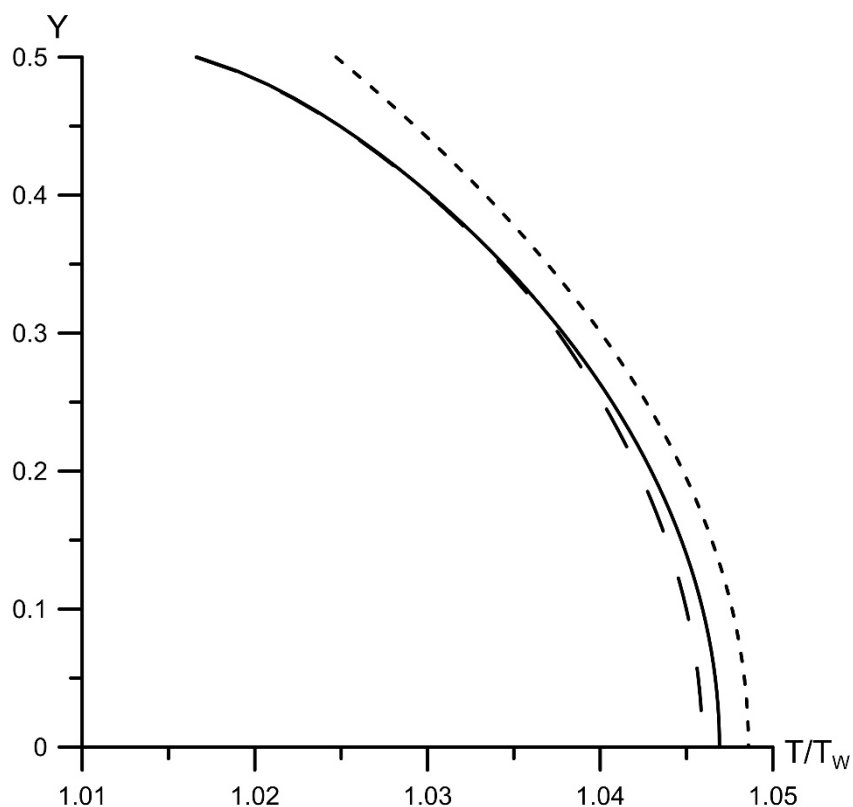


Рисунок 6. Профили температуры, $M = 1$, $Kn = 0.1$.

Графики Рисунка 7 построены при $M = 4$, $Kn = 0.01$. Из сравнения с Рисунком 6 видно, что увеличение числа Маха до гиперзвуковых значений не существенно влияет на погрешность модели *NSF*, пока число Кнудсена находится в континуальной области течения. Отклонение профиля *KHM* не сильно отличается от Рисунка 6, если рассматривать это отклонение в относительном измерении.

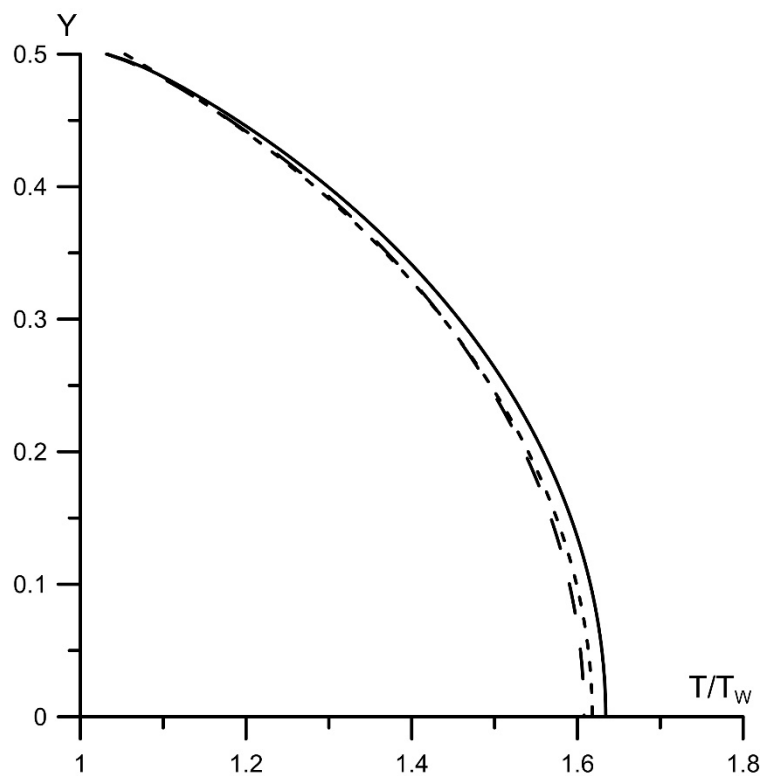


Рисунок 7. Профили температуры, $M = 4$, $Kn = 0.01$.

На Рисунке 8 приведены графики для $M = 4$, $Kn = 0.1$. Сравнение с Рисунком 7 показывает существенное отклонение профиля модели *NSF* в верхней части рисунка, соответствующей пристеночной области. Это свидетельствует о том, что в переходной области течения при больших скоростях граничные условия скольжения погранслоя перестают адекватно описывать процесс взаимодействия газа с твердой поверхностью.

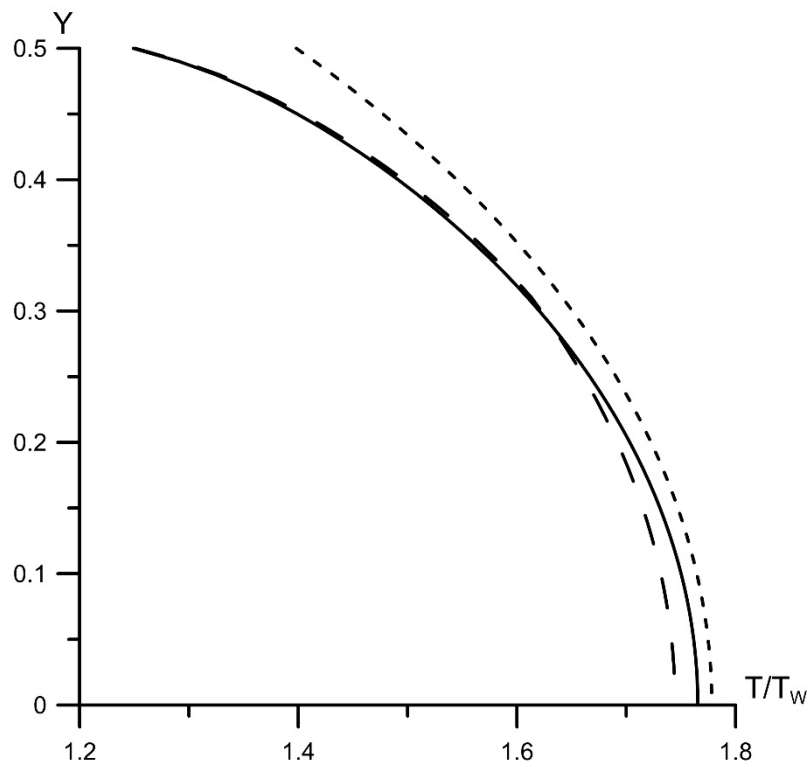


Рисунок 8. Профили температуры, $M = 4$, $Kn = 0.1$.

На Рисунке 9 показана зависимость среднеквадратического отклонения (σ) профилей температуры (T/T_w) моделей *NSF* и *KHM* от профиля *MKE* в зависимости от чисел M и Kn .

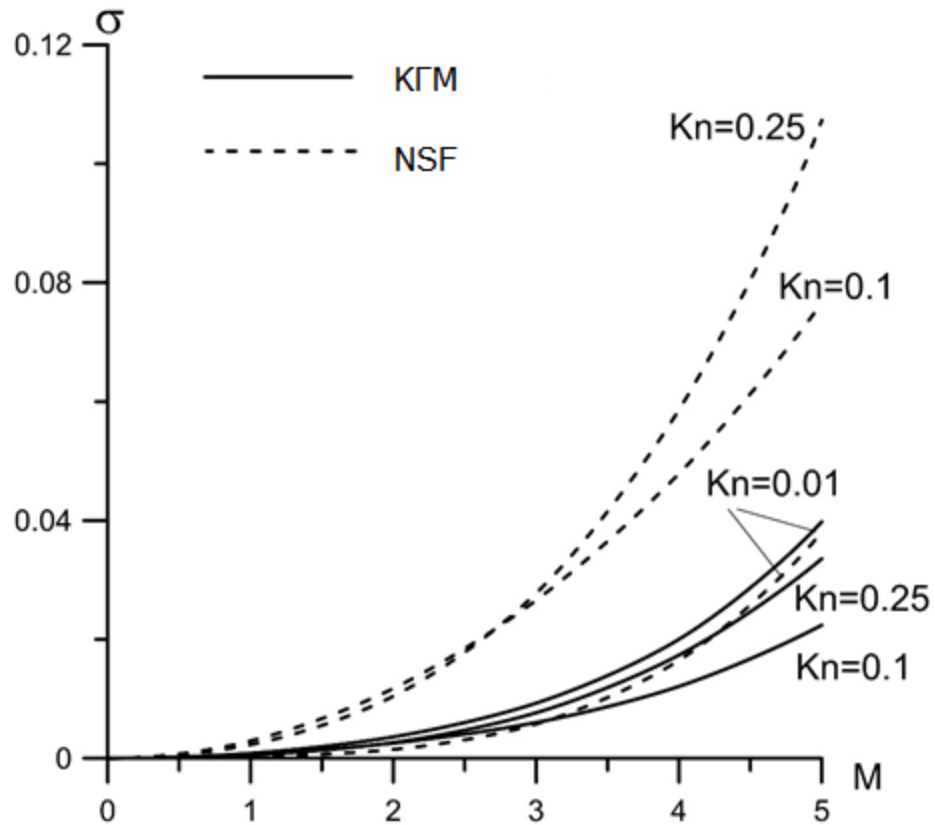


Рисунок 9. График среднеквадратичного отклонения профилей температуры в зависимости от чисел Маха и Кнудсена.

Характер зависимостей вполне ожидаем. Увеличение чисел M и Kn означает повышение степени неравновесности течения, оцениваемой как произведение $M \cdot Kn$ [39]. Модель NSF теоретически обоснована только в слабонеравновесных течениях, что и подтверждают кривые на Рисунке 9. Отклонения KHM существенно меньше.

Обращает на себя внимание кривая KHM при значениях $Kn = 0.01$, отвечающих минимальной степени неравновесности в рассмотренном интервале чисел Kn . Эта кривая близка к соответствующей кривой модели NSF , и даже несколько превосходит ее. К тому же, эта кривая проходит существенно выше кривых KHM , соответствующих большей степени неравновесности.

По-видимому, такое поведение KHM объясняется неточностью коррекции концентрации, так как при этом числе Kn обе сшитые модели достаточно хорошо описывают течение. Уместно напомнить, что коррекция концентрации является

специфической процедурой решения задачи о течении Куэтта.

2.4. Выводы к Главе 2

Результаты расчетов показали, что *КНМ* ненамного уступает в точности кинетической модели и существенно превосходит ее в экономичности. При $Kn = 0.01$ *КНМ* требовала в несколько десятков раз меньше процессорного времени, чем кинетическая модель.

При описании течений плотных газов экономичность *КНМ* не зависит от числа Kn и слабо зависит от числа M . Таким образом, разработанная модель течения в отношении адекватности граничных условий наследует свойства кинетической модели, а в отношении экономичности – свойства модели *NSF*.

ГЛАВА 3. ЗАДАЧА О СТРУКТУРЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

3.1. Формулировка задачи

Задача решается в стационарной постановке и формулируется следующим образом. На границах расчетной области выставляются условия Ренкина–Гюгонио. Размер расчетной области составляет несколько десятков длин свободного пробега молекулы в невозмущенном потоке:

$$\lambda_{\infty} = 3.2\mu_{\infty} (2\pi RT_{\infty})^{-1/2} / \rho_{\infty} \quad (40)$$

Число Кнудсена в модели *KHM* вычислялось по размеру кинетической области.

3.2. Численная реализация

Система уравнений модели *MKE* преобразуется следующим образом:

$$\xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left| \begin{array}{l} f_t \\ f_r \end{array} \right| = \frac{p}{\mu} \left| \begin{array}{l} f_t^+ - f_t \\ f_r^+ - f_r \end{array} \right| \quad (41)$$

Преобразования входящих в (41) функций и параметров очевидны.

Система уравнений модели *NSF* для данной задачи:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho u_x = \rho_{\infty} u_{x\infty} \\ \rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial P_{xx}}{\partial x} = 0 \\ \rho u_x \frac{\partial T}{\partial x} + (\gamma - 1) P_{xx} \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_v^{-1} \frac{\partial q_x}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad (42)$$

Во всех расчетах принимались аппроксимации коэффициента вязкости $\mu = \mu(T_t^s)$ для кинетической модели и $\mu = \mu(T^s)$ для гидродинамической. Показатель степени s выбирался из соображений наилучшего совпадения профиля плотности с экспериментальными профилями работ [84, 85]. Аппроксимации параметра Z для различных режимов течения взяты из работ [40, 47, 96]. Разностные схемы соответствуют описанным в Главе 1, вариант А.

Использованы два способа численного решения.

Стационарный способ.

Для модели *NSF* использован метод Томаса (прогонка) [97] на трех узлах расчетной сетки. Конечно-разностная аппроксимация производных в i -ом узле сетки (геометрической), например, для температуры:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_i \cong \frac{1}{2\Delta x} (T_{i+1} - T_{i-1}) \quad (43)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_i \cong \frac{1}{\Delta x^2} (T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}) \quad (44)$$

Для модели *MKE* конечно-разностная аппроксимация производной в i -ом узле геометрического пространства и j -ом узле пространства скоростей (разности вверх по молекулярному потоку):

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} \cong \pm \frac{1}{2\Delta x} (3F_{i,j} - 4F_{i\mp 1,j} + F_{i\mp 2,j}), \xi_x \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} 0 \quad (45)$$

Способ установления.

Локальная производная для обеих моделей:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right|_i \cong \frac{\Phi_i - \Phi_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (46)$$

здесь Φ_i^{n-1} – значение искомой функции на предыдущем шаге по времени Δt .

Производные модели *NSF* аналогичны приведенным выше.

Для модели *MKE* конечно-разностная аппроксимация производной в i -ом узле геометрического пространства и j -ом узле пространства скоростей проводилась следующим образом (два узла вверх по потоку):

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} \cong \frac{1}{6\Delta x} (F_{i-2,j} - 6F_{i-1,j} + 3F_{i,j} + 2F_{i+1,j}), \xi_x > 0 \quad (47)$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} \cong -\frac{1}{6\Delta x} (2F_{i-1,j} + 3F_{i,j} - 6F_{i+1,j} + F_{i+2,j}), \xi_x < 0 \quad (48)$$

где $F_{i,j}$ – искомая функция.

Конечно-разностный аналог кинетического уравнения:

$$\begin{cases} K_\xi F_{i-2} - 6K_\xi F_{i-1} + 6(1 + 0.5K_\xi + K_\tau)F_i + 2K_\xi F_{i+1} = 6(F_i^{n-1} + K_\tau F_i^+), \xi_x > 0 \\ 2K_\xi F_{i-1} + 6(1 + 0.5K_\xi + K_\tau)F_i - 6K_\xi F_{i+1} + K_\xi F_{i+2} = 6(F_i^{n-1} + K_\tau F_i^+), \xi_x < 0 \end{cases} \quad (49)$$

Параметры $K_\xi = |\xi_x| \Delta t / \Delta x$ и $K_\tau = \Delta t / \tau$ имеют смысл сеточных чисел Куранта и Кнудсена соответственно. Нетрудно заметить, что при $K_\xi = 1$ матрица коэффициентов уравнений является хорошо обусловленной. Для численного решения такой матрицы высокоэффективен метод прогонки.

Параметр K_ξ не обязательно вычислять по максимальному из рассматриваемых значений $|\xi_x|$. При использовании следующих масштабов: пространства скоростей – $\sqrt{RT_\infty}$, времени – μ_∞ / p_∞ , геометрического пространства – $\sqrt{RT_\infty} \mu_\infty / p_\infty$, устойчивая разностная схема имеет место уже при $\sqrt{RT_\infty} \Delta t / \Delta x = 1$. В безразмерном виде: $\Delta t = \Delta x$.

Отметим две позитивные особенности этого метода решения.

1. Несмотря на то, что метод решения нестационарен, он не требует запоминания значения искомой функции на предыдущем временном шаге. Правые части вычисляются на первом этапе прогонки (прямая прогонка) по текущим значениям F_i .
2. При продвижении решения по времени вычислительная погрешность не накапливается, что является характерным свойством первой начально-краевой задачи.

В численных тестах законы сохранения выполнялись с точностью до шестого знака. Вычислительная погрешность определяется в основном погрешностью численного интегрирования по пространству скоростей. При $M_\infty = 7$ параметры скоростной сетки составляли:

- протяженность сетки на одной полуветви оси $\xi_x - 22\sqrt{RT_\infty}$;
- шаг сетки $\Delta \xi_x = \sqrt{RT_\infty} / 7$.

3.3. Результаты расчётов

3.3.1. Сравнение комбинированной модели с модельным кинетическим уравнением и моделью Навье-Стокса-Фурье

Расчетные профили ударной волны комбинированной модели сравнивались с профилями моделей *MKE* и *NSF*. Расчеты показали, что наибольшее расхождение между профилями комбинированной модели и модели *MKE* имеет место на профилях температуры. Профили плотности и групповой скорости согласовывались существенно лучше. В дальнейшем будут рассматриваться только профили температуры, приведенной к единичному отрезку – T^* :

$$T^* = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}} \quad (50)$$

Штрихпунктирные линии – область сшивания гидродинамической и кинетической составляющих *КНМ*.

В области умеренных чисел Маха комбинированная модель давала гладкие профили, хотя в области кинетического решения наблюдалось заметное отличие от профилей модели *MKE*. На Рисунке 10 показаны профили температуры для $M_{\infty} = 1.55$.

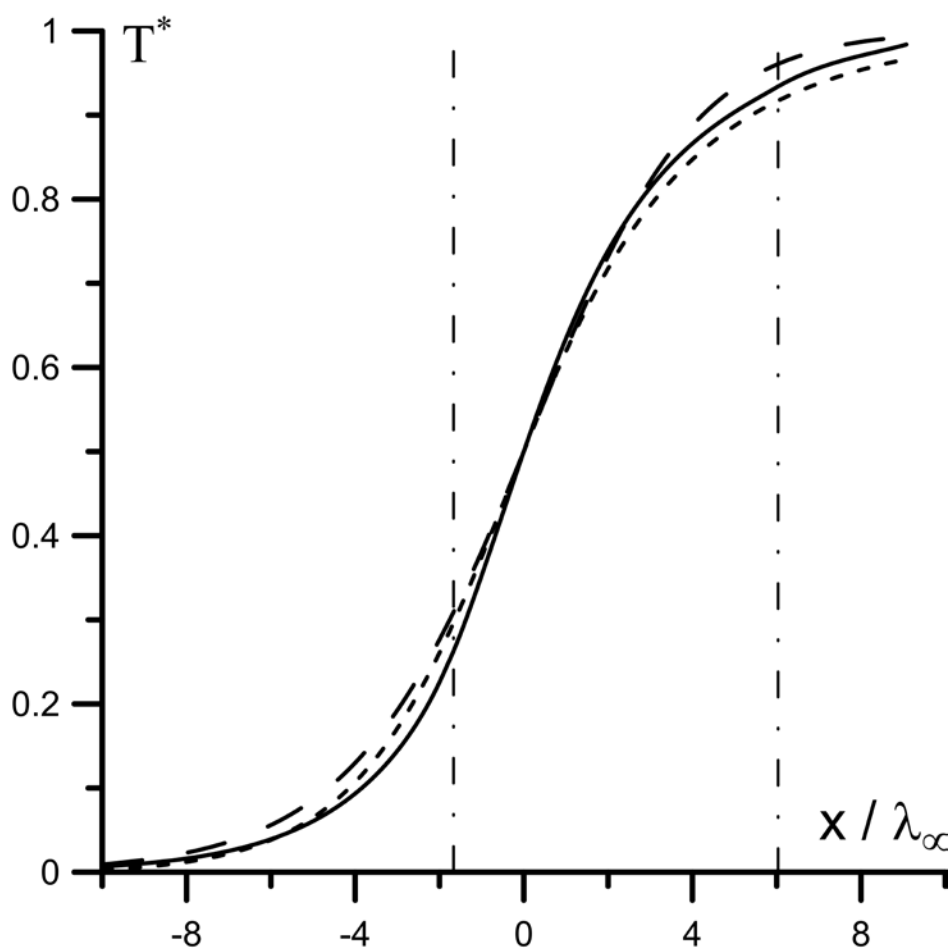


Рисунок 10. Приведенные профили температуры в плоской ударной волне двухатомного газа. $M_\infty = 1.55$. Сплошная линия – *KHM*; мелкий пунктир – модель *MKE*; крупный пунктир – модель *NSF*; вертикальные штрихпунктирные линии – границы кинетической области комбинированной модели

Размер кинетической области *KHM* составлял $7.8\lambda_\infty$. Узлы сшивания моделей находились в высокоградиентной области. При увеличении размера кинетической области соответствующий профиль сближался с профилем модели *MKE*. Анализ вторых производных температуры в узлах сшивания не выявил разрыва первых производных, то есть изломов графика.

Такой характер решения наблюдался до $M_\infty \approx 2$. При бóльших числах Маха даже при достаточно больших размерах кинетической области ($20 \div 30 \lambda_\infty$) в ее граничных узлах возникал разрыв производных. Вместе с тем, профиль кинетической области *KHM* сближался с профилем модели *MKE*.

На Рисунке 11 приведены профили температуры в случае гиперзвукового течения. В левом граничном узле кинетической области *КНМ* наблюдается явно выраженный разрыв производных. Размер кинетической области *КНМ* составляет $17.2 \lambda_\infty$. Профиль кинетической области *КНМ* практически совпадает с профилем *МКЕ*.

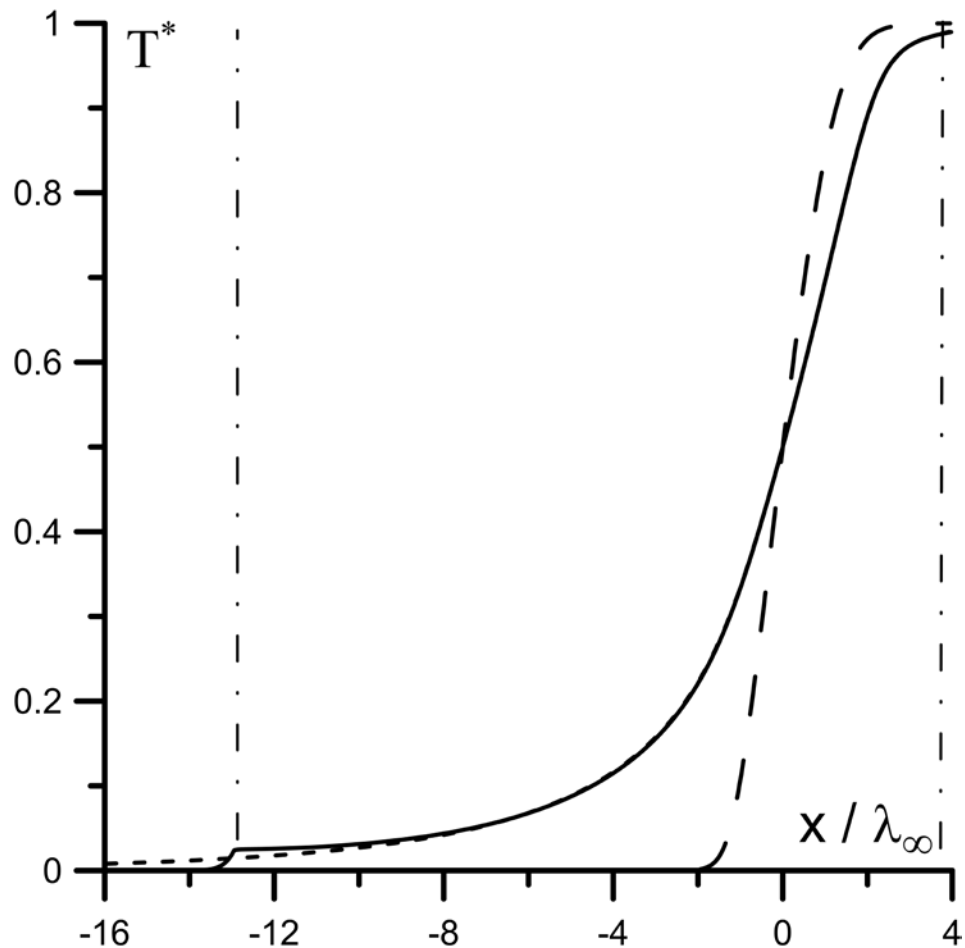


Рисунок 11. То же, что на рисунок 10, $M_\infty = 7$

Еще одной характерной особенностью *КНМ* является то, что во всей расчетной области, в том числе и в узле разрыва производной, законы сохранения выполняются с точностью до погрешности численного интегрирования весовой функции по пространству скоростей.

Из Рисунка 11 также следует, что, несмотря на разрыв производной в граничном узле кинетической области, *КНМ* позволяет существенно улучшить гидродинамическое решение.

Оба способа численного решения, описанные выше, дали практически совпадающие результаты. Таким образом, обнаруженный эффект сближения решений при наличии разрыва производных не является особенностью вычислительного метода. Объяснения этому эффекту на данный момент не найдено.

Количественная оценка максимальной относительной погрешности вычисления температуры в зависимости от размера кинетической области *КНМ* приведена на Рисунке 12.

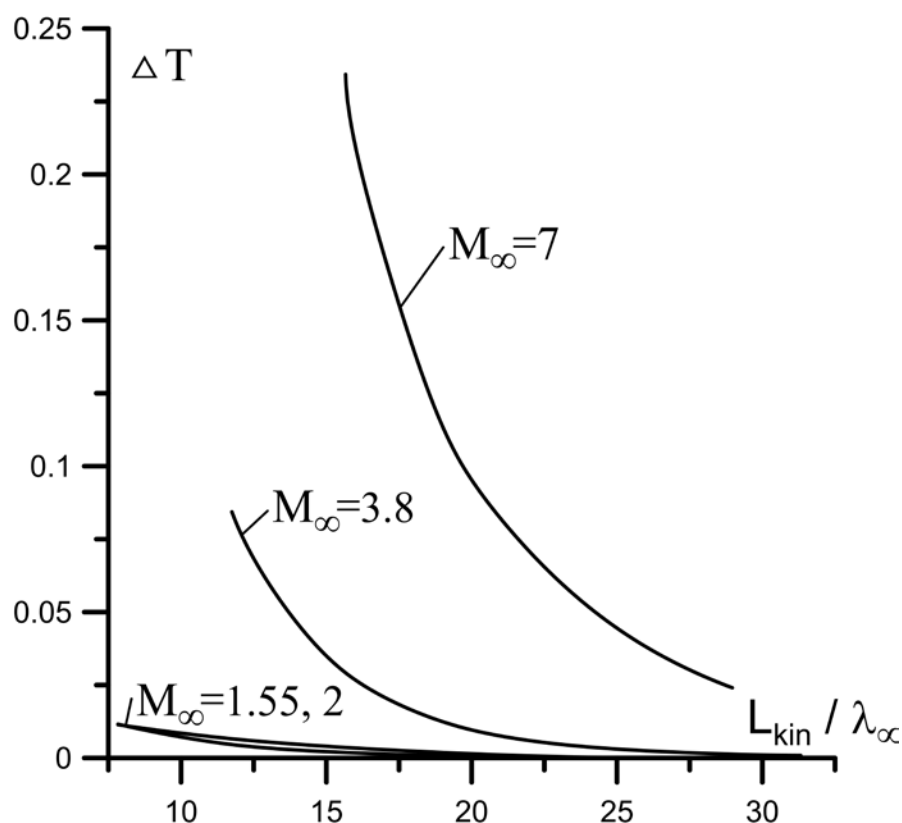


Рисунок 12. Максимальная относительная погрешность вычисления температуры в зависимости от протяженности кинетической области *КНМ*

3.3.2. Анализ гладкости решения

На Рисунках 13-66 показаны профили ударной волны при разных произведениях чисел Маха и Кнудсена.

a) $M = 1.5$

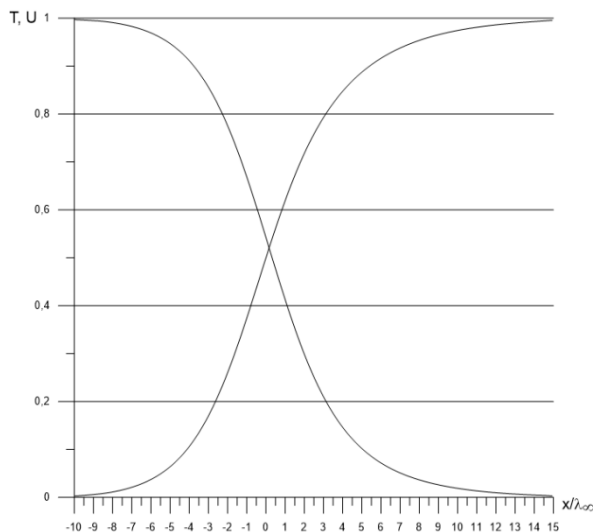


Рисунок 13. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04399$,
 $MKn = 0.06598$

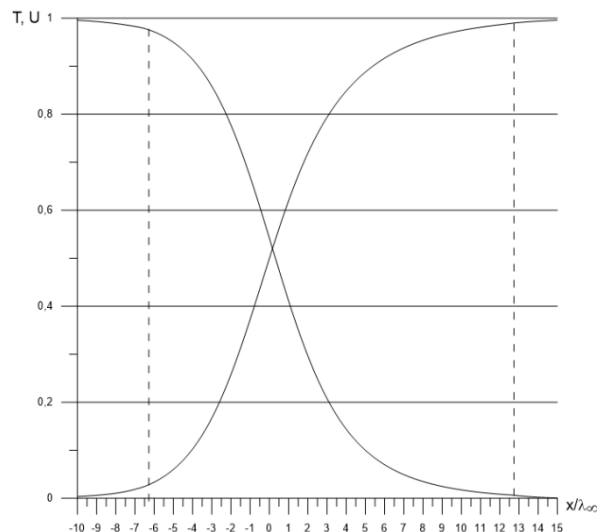


Рисунок 14. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.05278$,
 $MKn = 0.07917$

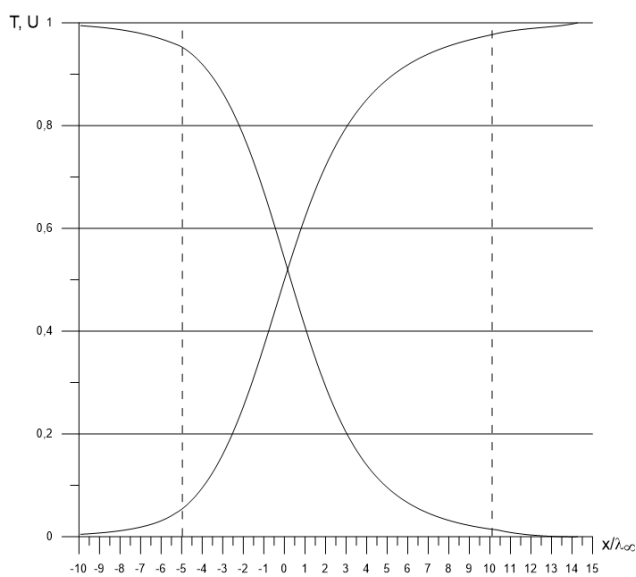


Рисунок 15. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.06598$,
 $MKn = 0.09897$

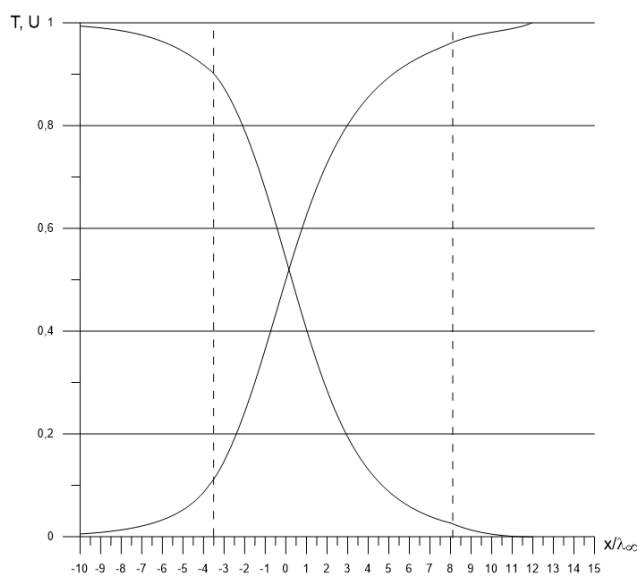


Рисунок 16. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.088$,
 $MKn = 0.132$

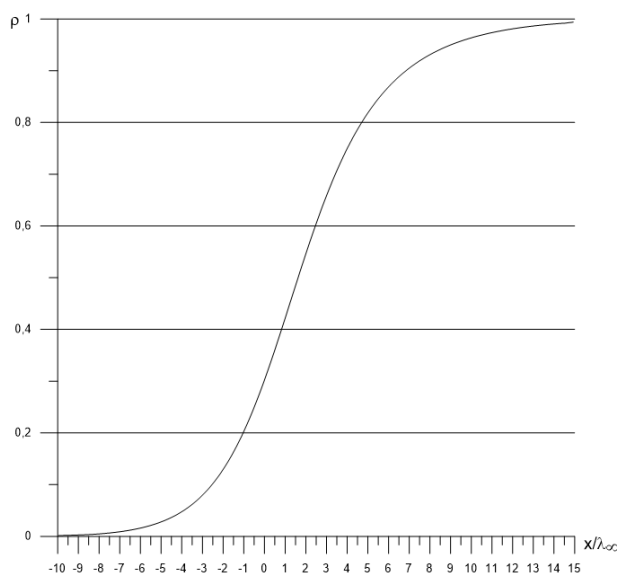


Рисунок 17. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04399$, $MKn = 0.06598$

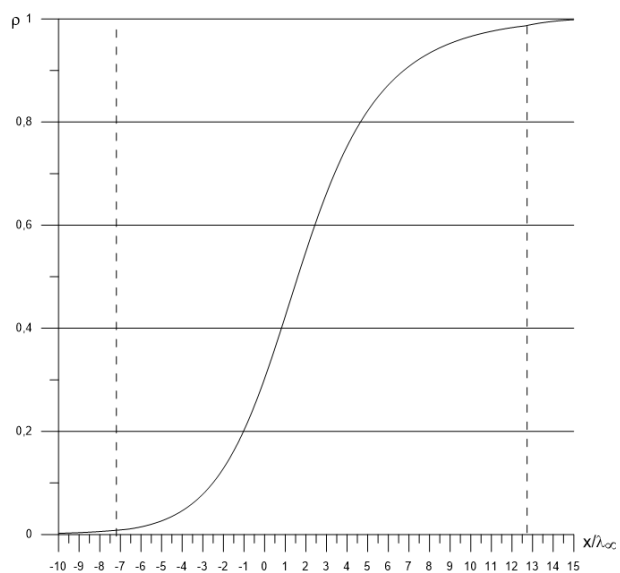


Рисунок 18. Профиль плотности,
 $Kn = 0.05278$, $MKn = 0.07917$

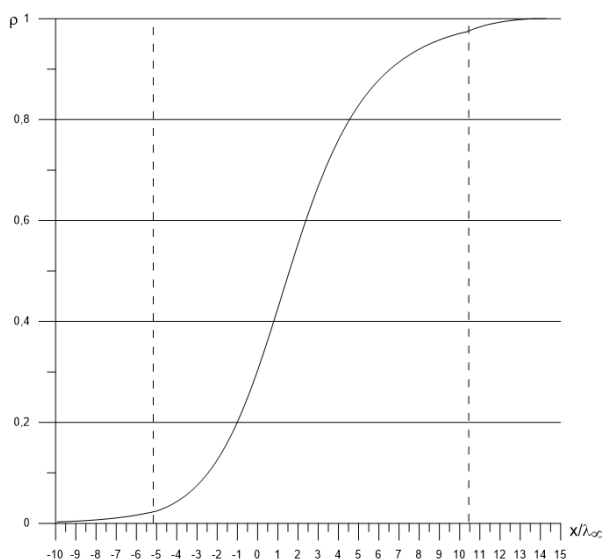


Рисунок 19. Профиль плотности,
 $Kn = 0.06598$, $MKn = 0.09897$

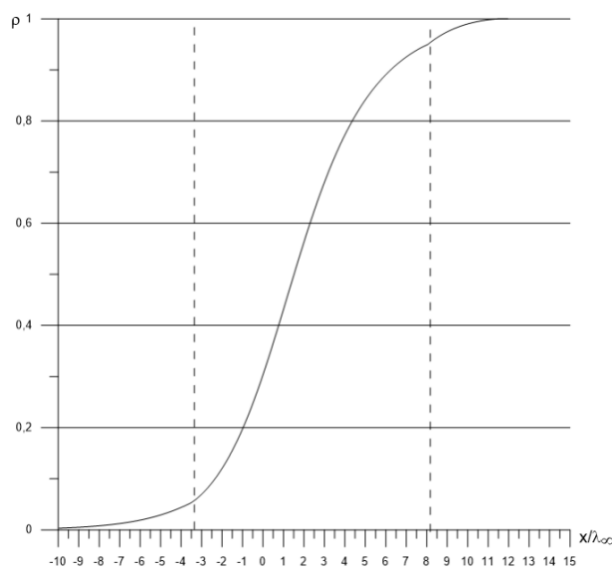


Рисунок 20. Профиль плотности,
 $Kn = 0.088$, $MKn = 0.132$

б) $M = 2$

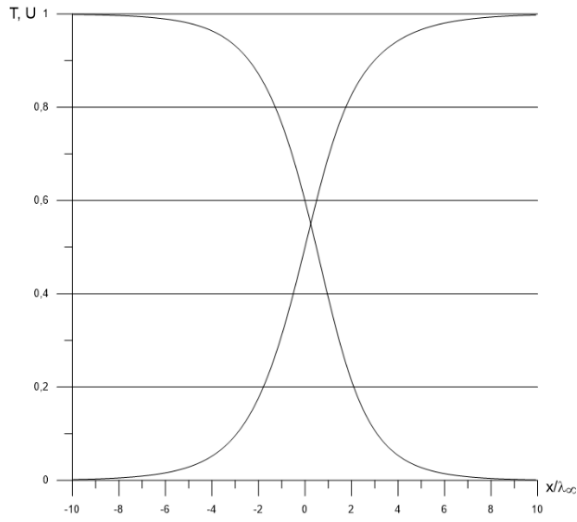


Рисунок 21. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04257$,
 $MKn = 0.08513$

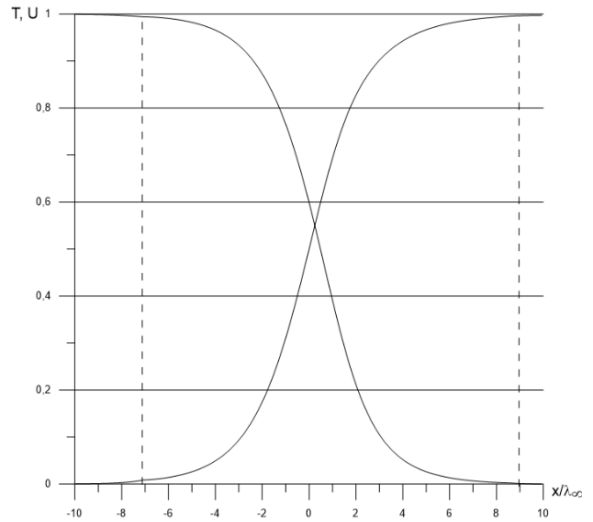


Рисунок 22. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.06385$,
 $MKn = 0.1277$

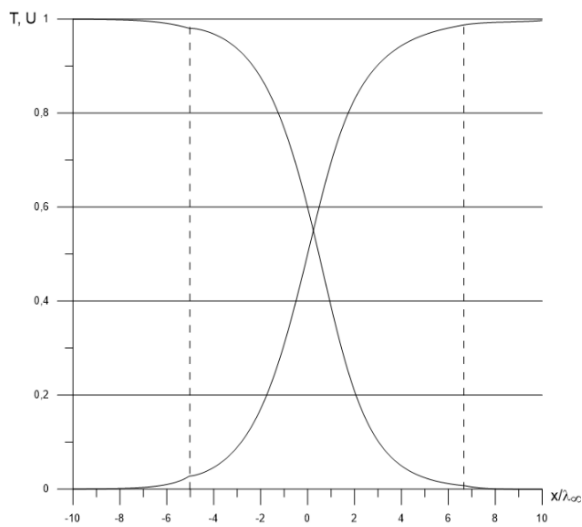


Рисунок 23. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.08515$,
 $MKn = 0.1703$

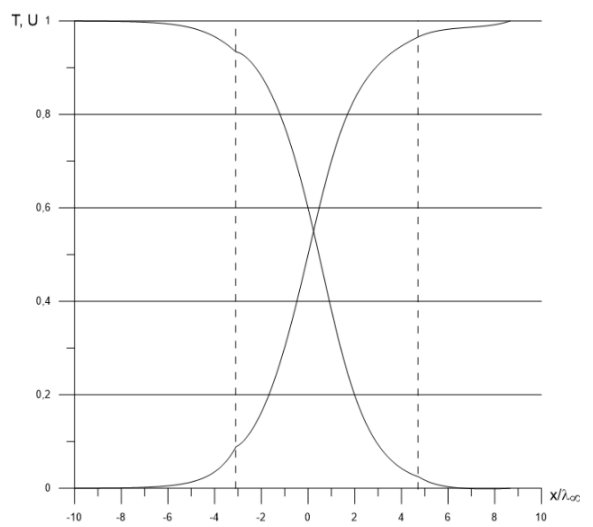


Рисунок 24. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.1277$,
 $MKn = 0.2554$

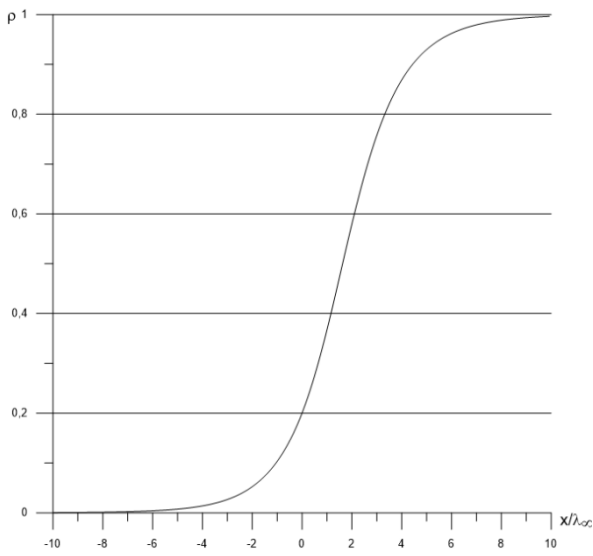


Рисунок 25. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04257$, $MKn = 0.08513$

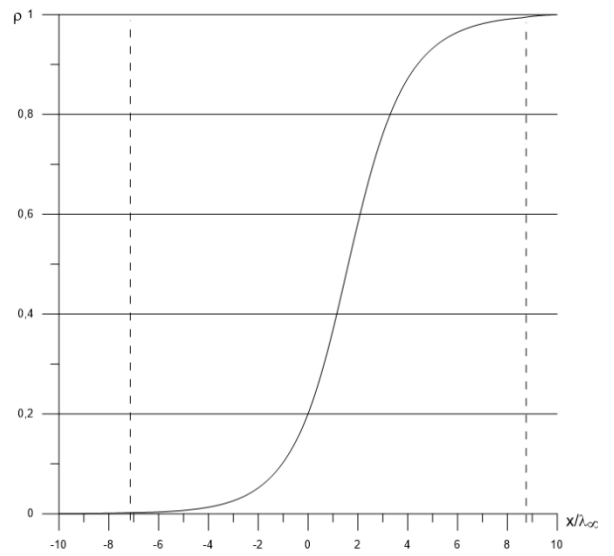


Рисунок 26. Профиль плотности,
 $Kn = 0.06385$, $MKn = 0.1277$

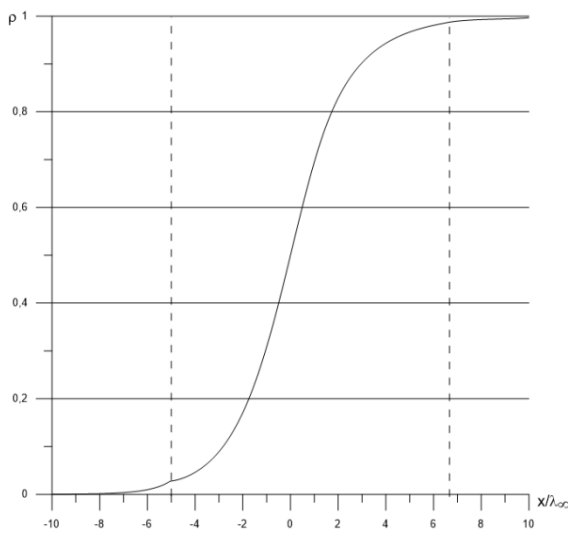


Рисунок 27. Профиль плотности,
 $Kn = 0.08515$, $MKn = 0.1703$

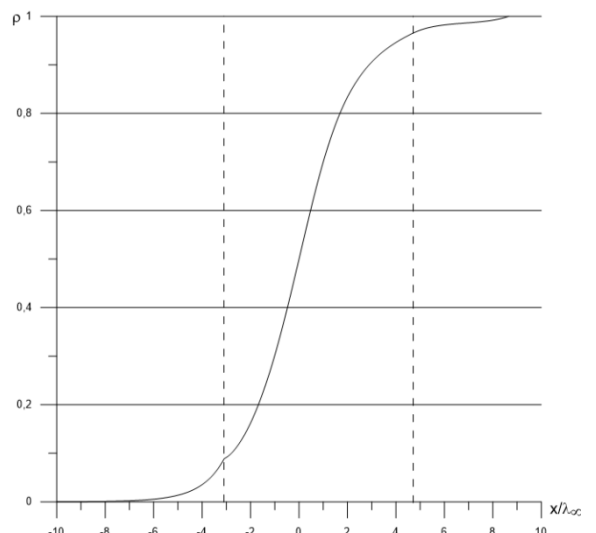


Рисунок 28. Профиль плотности,
 $Kn = 0.1277$, $MKn = 0.2554$

в) $M = 3.8$

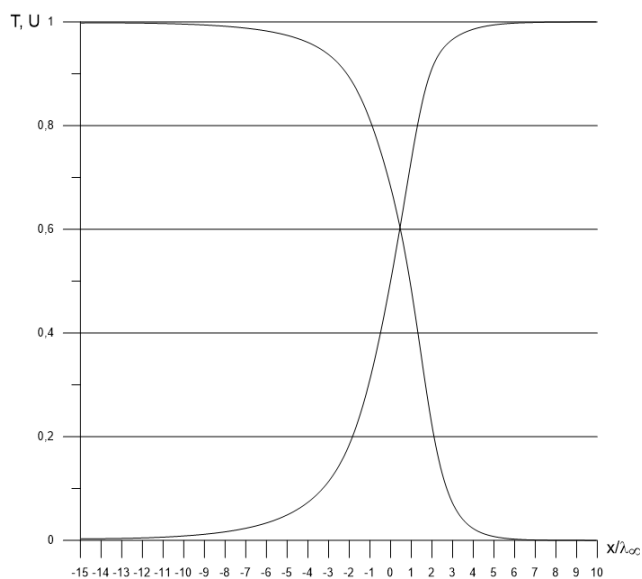


Рисунок 29. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04258$,
 $MKn = 0.1618$

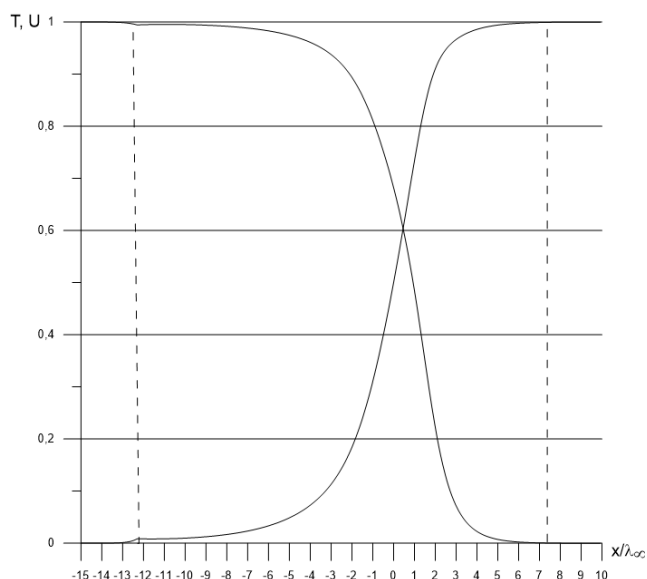


Рисунок 30. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.05108$,
 $MKn = 0.1941$

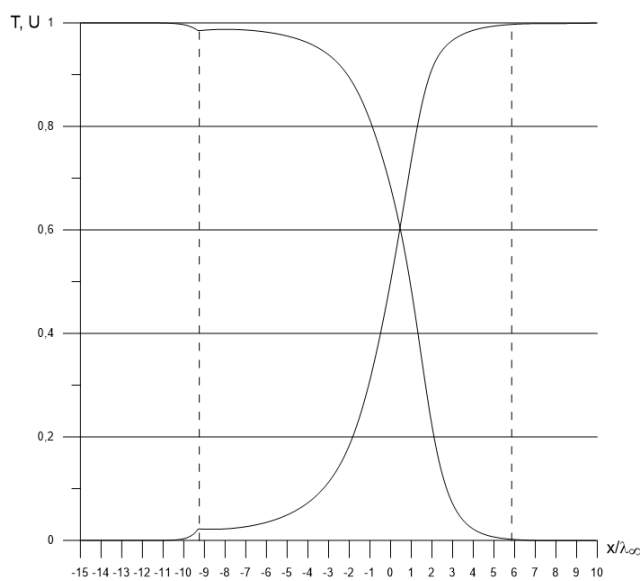


Рисунок 31. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.06384$,
 $MKn = 0.2426$

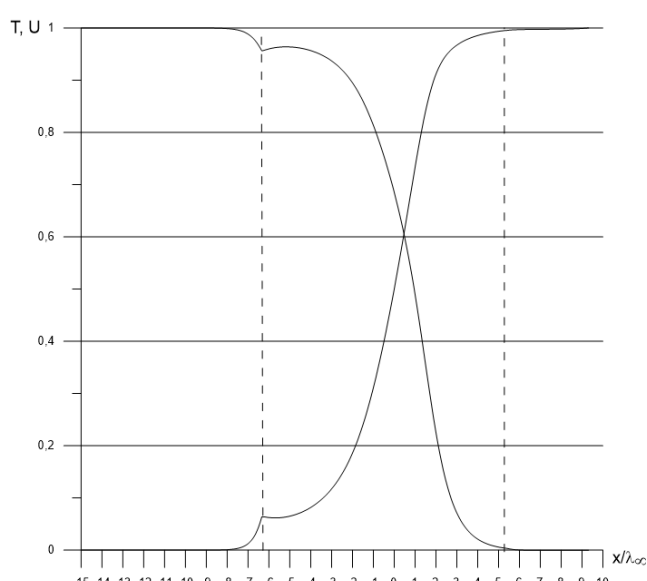


Рисунок 32. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.08513$,
 $MKn = 0.3235$

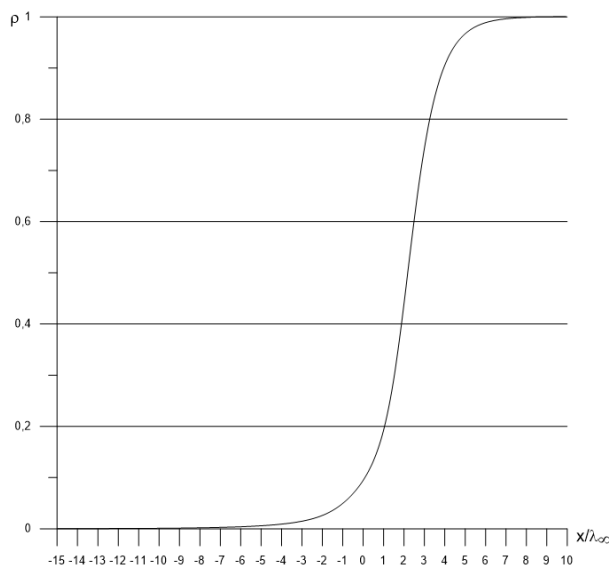


Рисунок 33. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04258$, $MKn = 0.1618$

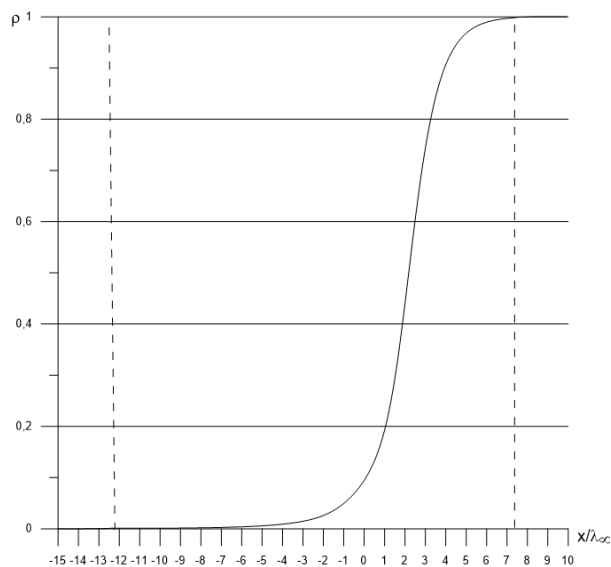


Рисунок 34. Профиль плотности,
 $Kn = 0.05108$, $MKn = 0.1941$

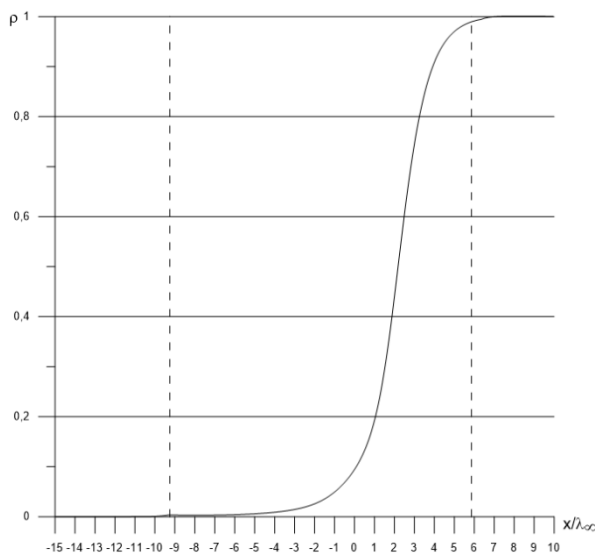


Рисунок 35. Профиль плотности,
 $Kn = 0.06384$, $MKn = 0.2426$

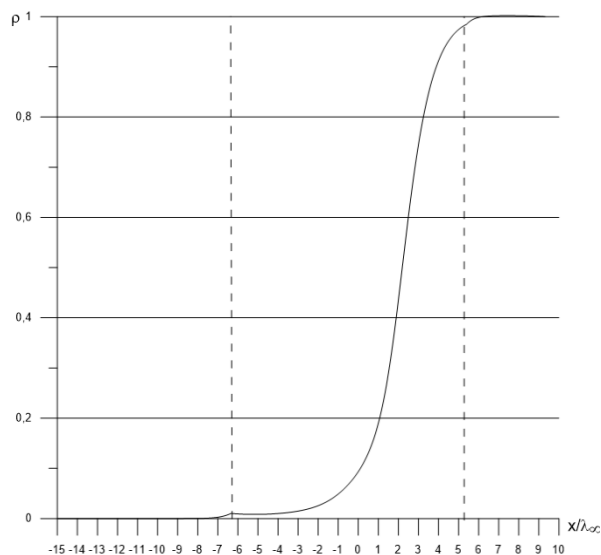


Рисунок 36. Профиль плотности,
 $Kn = 0.08513$, $MKn = 0.3235$

г) $M = 5$

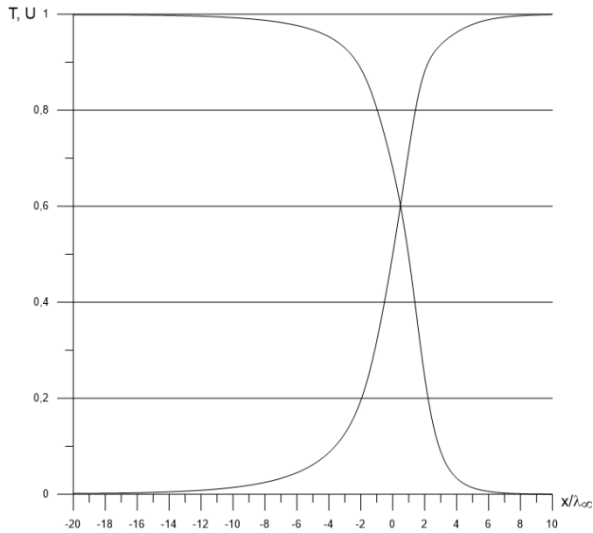


Рисунок 37. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04077$,
 $MKn = 0.20384$

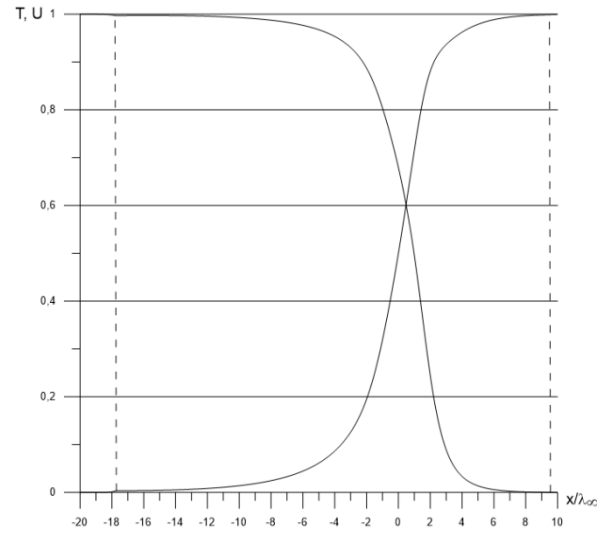


Рисунок 38. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04659$,
 $MKn = 0.23296$

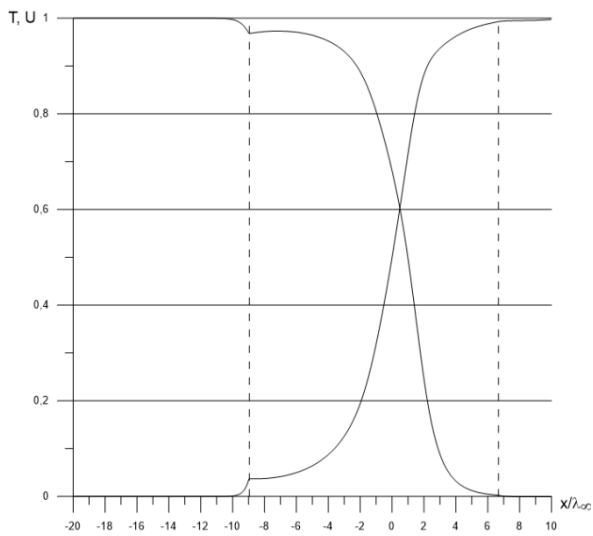


Рисунок 39. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.08154$,
 $MKn = 0.40768$

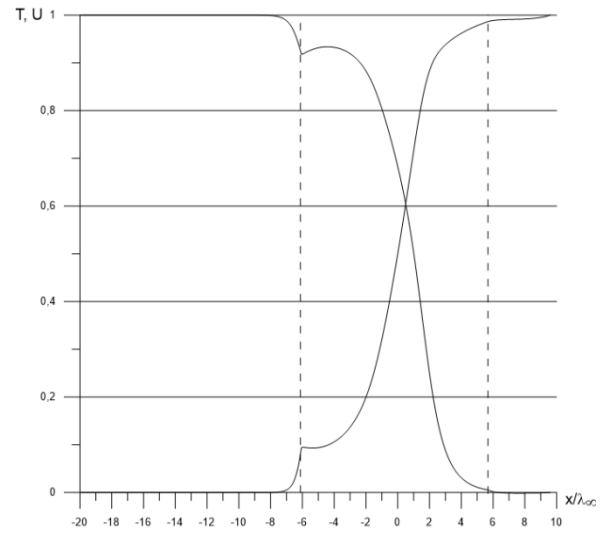


Рисунок 40. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.10872$,
 $MKn = 0.54358$

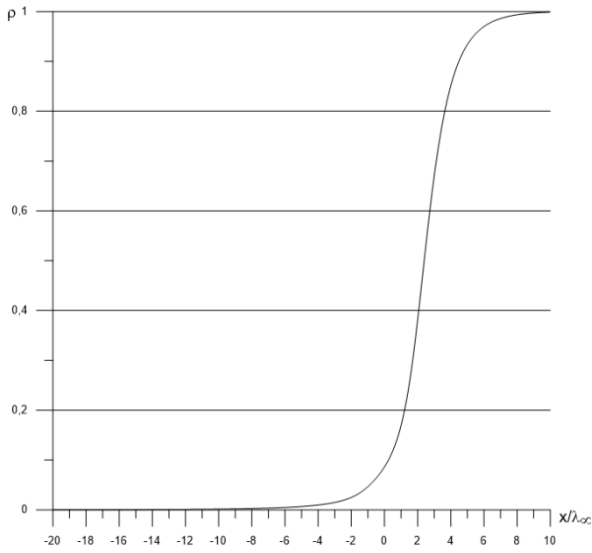


Рисунок 41. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04077$, $MKn = 0.20384$

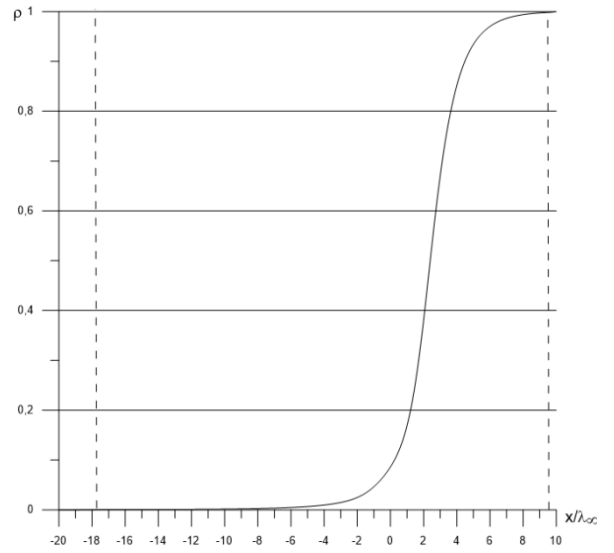


Рисунок 42. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04659$, $MKn = 0.23296$

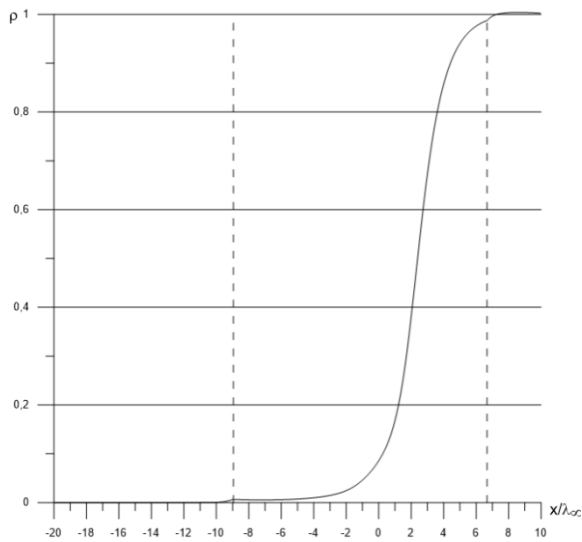


Рисунок 43. Профиль плотности,
 $Kn = 0.08154$, $MKn = 0.40768$

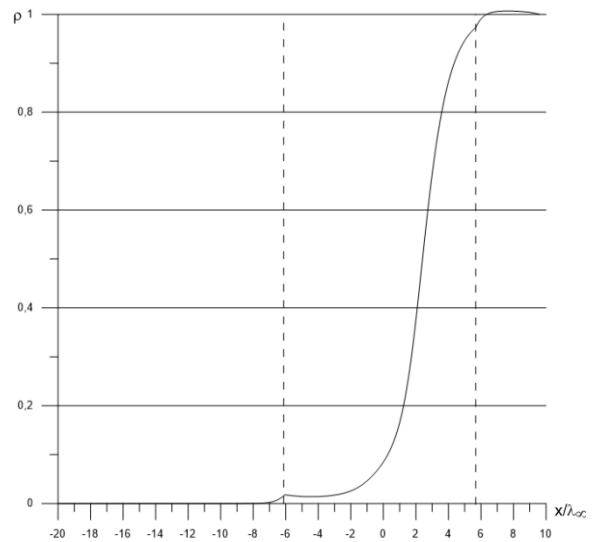


Рисунок 44. Профиль плотности,
 $Kn = 0.10872$, $MKn = 0.54358$

д) $M = 7$

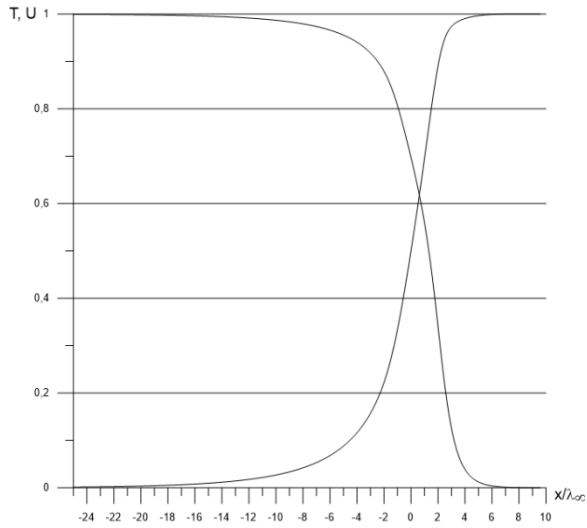


Рисунок 45. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.02857$, $MKn = 0.2$

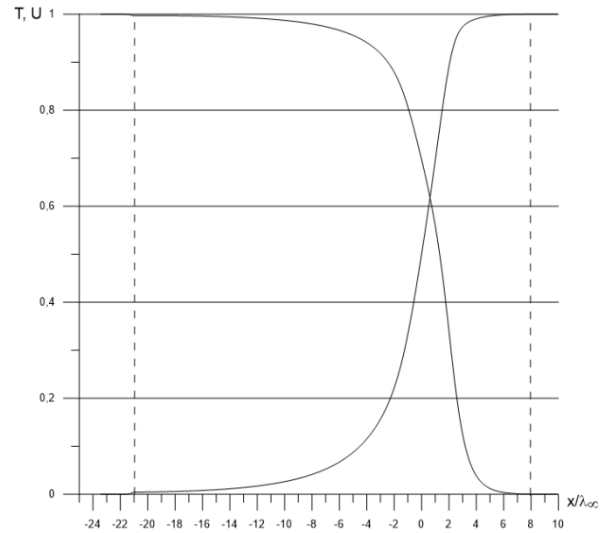


Рисунок 46. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.03451$, $MKn = 0.2416$

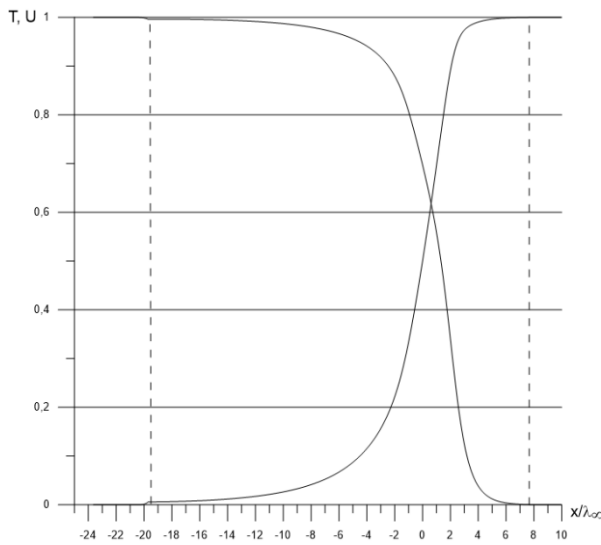


Рисунок 47. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.03649$, $MKn = 0.2554$

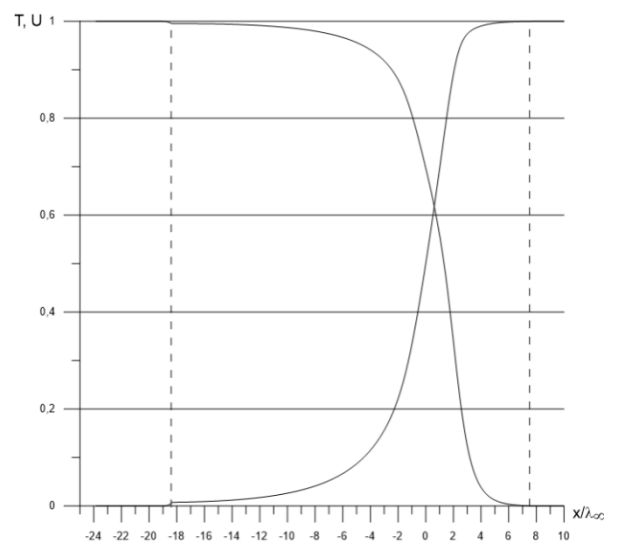


Рисунок 48. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.0387$, $MKn = 0.2709$

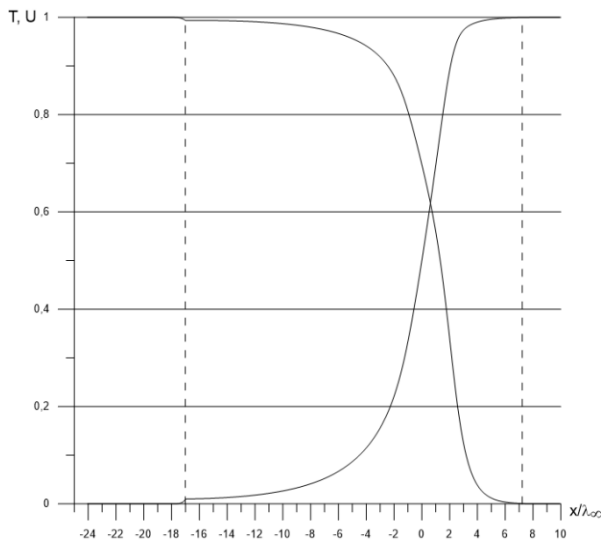


Рисунок 49. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.0412$,
 $MKn = 0.2884$

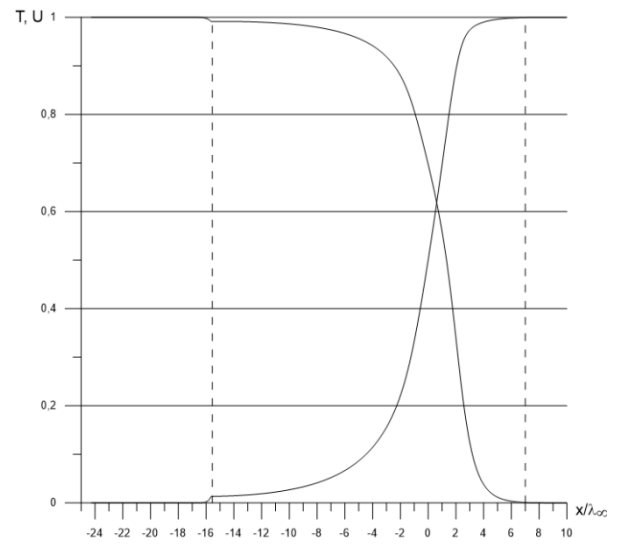


Рисунок 50. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.04403$,
 $MKn = 0.3082$

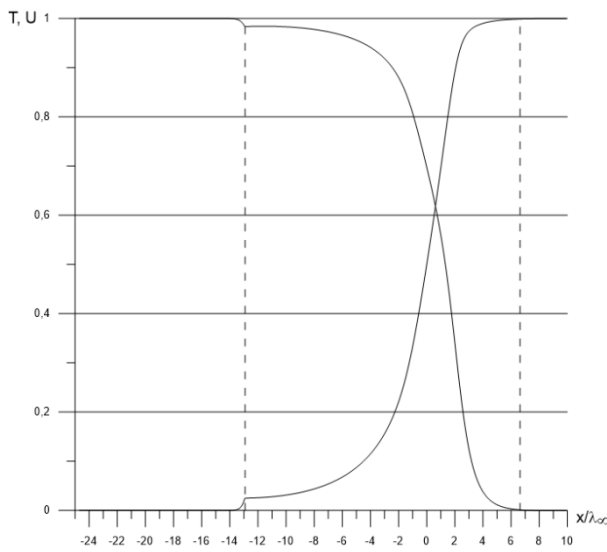


Рисунок 51. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.05109$,
 $MKn = 0.3576$

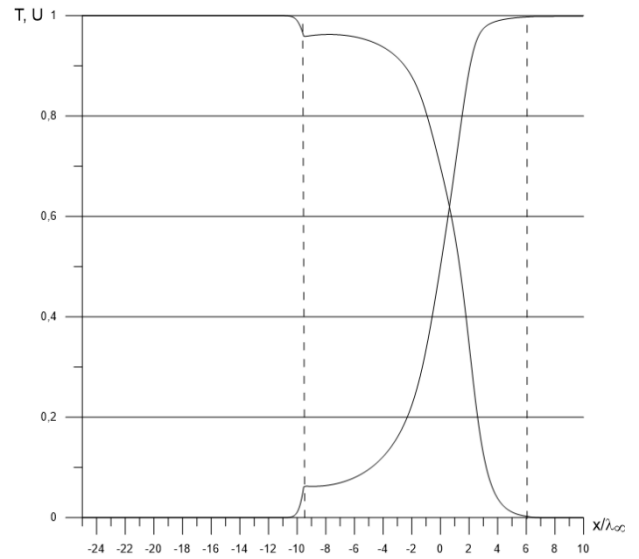


Рисунок 52. Профили скорости и температуры, $Kn = 0.06384$,
 $MKn = 0.4469$

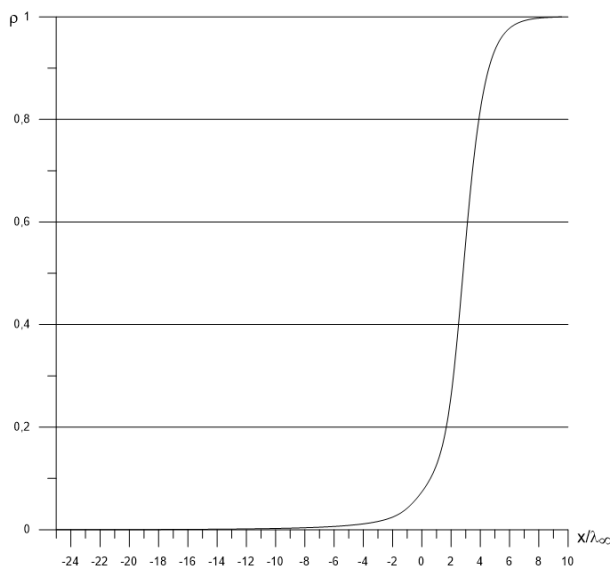


Рисунок 53. Профиль плотности,
 $Kn = 0.02857$, $MKn = 0.2$

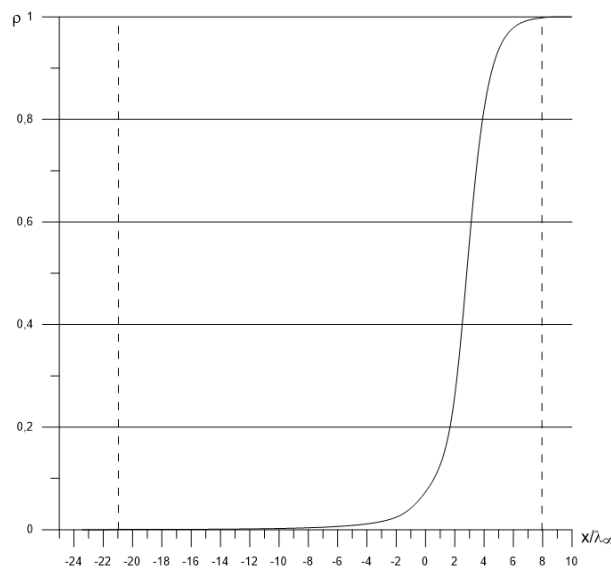


Рисунок 54. Профиль плотности,
 $Kn = 0.03451$, $MKn = 0.2416$

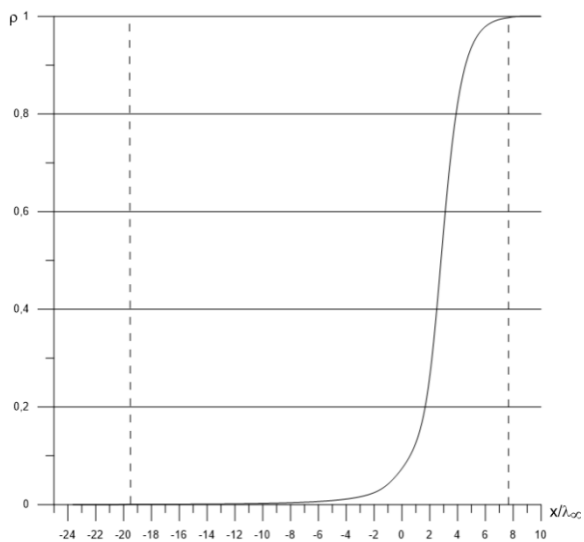


Рисунок 55. Профиль плотности,
 $Kn = 0.03649$, $MKn = 0.2554$

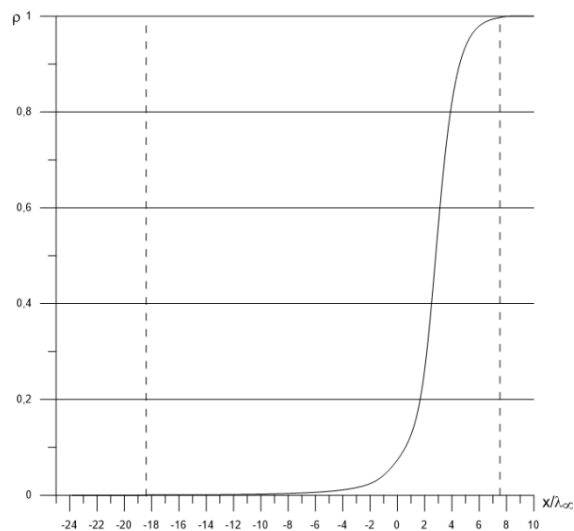


Рисунок 56. Профиль плотности,
 $Kn = 0.0387$, $MKn = 0.2709$

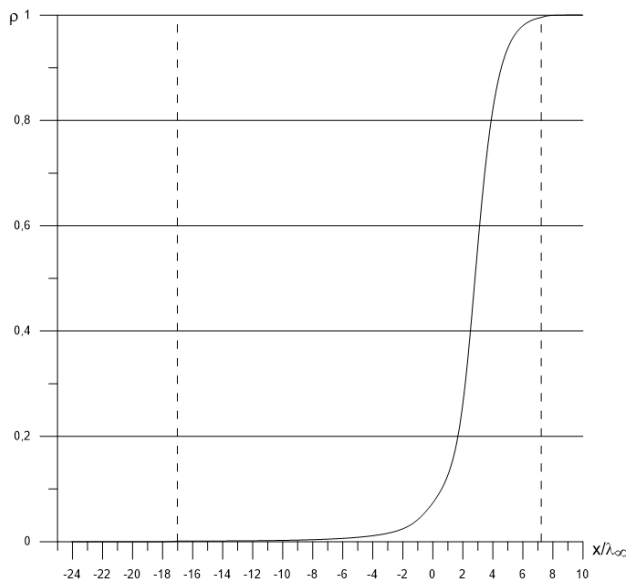


Рисунок 57. Профиль плотности,
 $Kn = 0.0412$, $MKn = 0.2884$

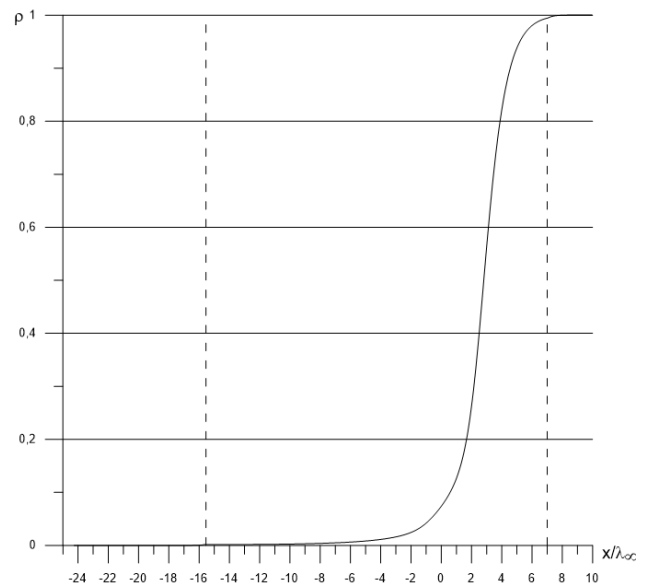


Рисунок 58. Профиль плотности,
 $Kn = 0.04403$, $MKn = 0.3082$

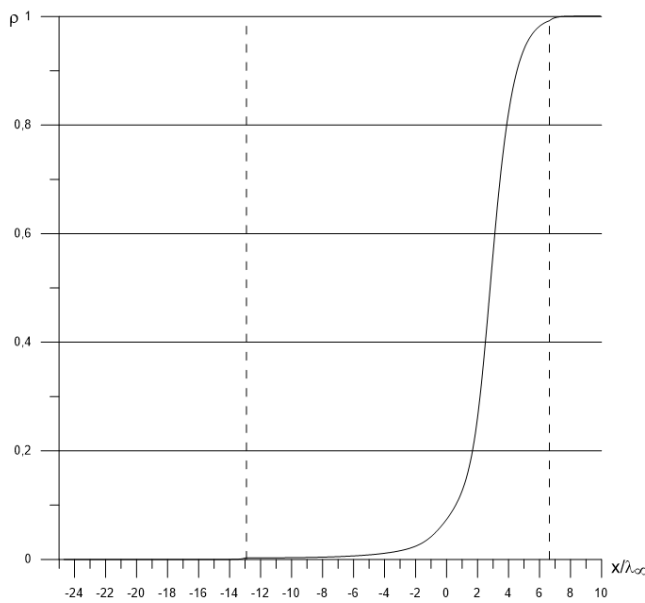


Рисунок 59. Профиль плотности,
 $Kn = 0.05109$, $MKn = 0.3576$

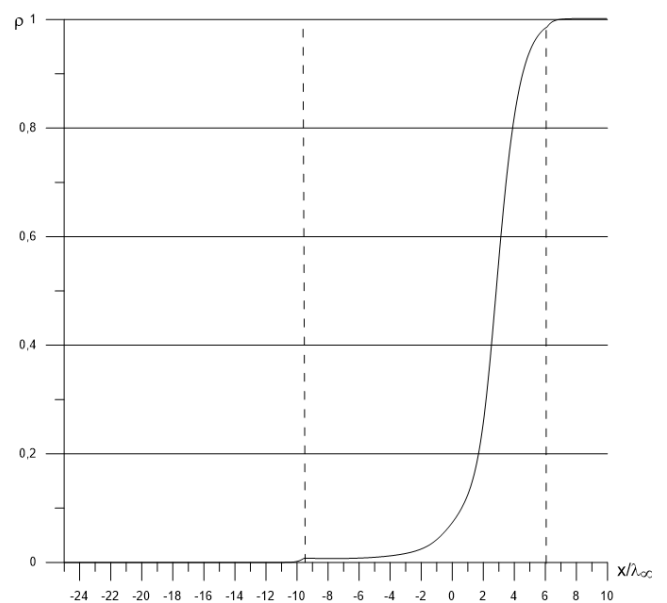


Рисунок 60. Профиль плотности,
 $Kn = 0.06384$, $MKn = 0.4469$

Из представленных графиков видно, что рост степени неравновесности, то есть произведения $M_{\infty} Kn_{\infty}$, приводит к нарушению гладкости решения. Для сохранения гладкости можно порекомендовать следующее:

- при $M_{\infty} \leq 2$ степень неравновесности не должна превышать 1;

- при $M_\infty > 3.5$ степень неравновесности не должна превышать 0.2.

3.4. Дополнительные замечания

По аналогии с предложенной моделью может быть построена комбинированная модель, в которой для гидродинамического описания течения используются моментные уравнения любого, сколь угодно высокого порядка. При этом снимается вопрос выставления граничных условий на твердой поверхности. Для всех моментов, входящих в систему дифференциальных уравнений, имеют место граничные условия Дирихле.

Для практических задач, связанных с описанием течений вблизи твердых поверхностей, разработанная комбинированная модель пригодна в представленном виде. По-видимому, дополнительной разработки требует только несложный алгоритм перехода от одного варианта модели к другому при описании течений в широком интервале чисел Кнудсена.

3.5. Выводы к Главе 3

По результатам расчётов видно, что наибольшее расхождение между профилями комбинированной модели и модели *МКЕ* имеет место на профилях температуры. Профили плотности и групповой скорости согласовывались существенно лучше. В области умеренных чисел Маха комбинированная модель давала гладкие профили, хотя в области кинетического решения наблюдалось заметное отличие от профилей модели *МКЕ*. Анализ вторых производных температуры в узлах сшивания не выявил разрыва первых производных, то есть изломов графика.

Оба использованных способа численного решения дали практически совпадающие результаты. Таким образом, обнаруженный эффект (наличие разрыва производных) не является особенностью вычислительного метода. Объяснения эффекту на данный момент не получено.

Несмотря на разрыв производной в граничном узле кинетической области, *КНМ* позволяет существенно улучшить гидродинамическое решение. Показано,

что к нарушению гладкости решения приводит в первую очередь рост степени неравновесности.

Для сохранения гладкости можно порекомендовать следующее:

- при $M_\infty \leq 2$ степень неравновесности не должна превышать 1;
- при $M_\infty > 3.5$ степень неравновесности не должна превышать 0.2.

ГЛАВА 4. РАСЧЁТ ОБТЕКАНИЯ АКТИВНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

4.1. Формулировка задачи

Рассматривается плоское течение в прямоугольных декартовых координатах OXY . Невозмущенный поток двигался в направлении оси OX через левую границу вычислительной области. В потоке, поперек его, расположена тонкая пластина бесконечного размаха. Начало системы координат совмещено с центром пластины. Лобовая поверхность пластины поглощает газ. Задача симметрична относительно сечения $y = 0$. Схема задачи показана на Рисунке 61. Изображена верхняя полуобласть поля течения.

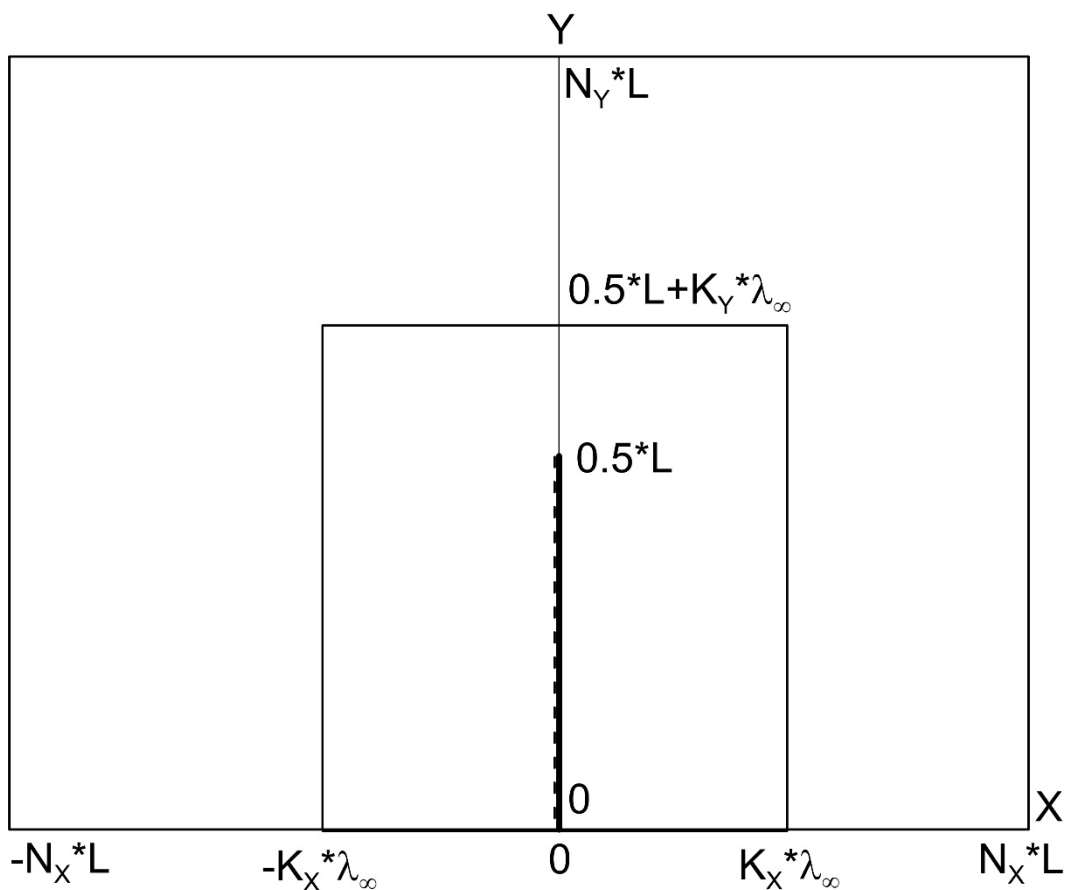


Рисунок 61. Схема вычислительной области. Жирная линия – пластина, поглощающая поверхность обозначена пунктиром; K_x – ширина кинетической полуобласти в длинах пробега молекулы; N_x – ширина гидродинамической полуобласти в единицах высоты пластины; N_y – высота гидродинамической полуобласти в единицах высоты пластины.

Размер всей вычислительной области, он же внешний размер гидродинамической области, составлял: $N_x = 3...4$, $N_y = 2...3$. Размер кинетической области, он же внутренний размер гидродинамической области, принимался $K_x = 10...20$, $K_y = 10...15$. Длина свободного пробега молекулы определена соотношением

$$\lambda_\infty = \mu_\infty (RT_\infty)^{-1/2} / \rho_\infty \quad (51)$$

Граничные условия на внешних границах вычислительной области выставлены следующим образом: в сечении $x = -N_x L$ – параметры невозмущенного потока, в сечении $y = N_y L$ – принималось

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} (\rho, u_x, u_y, T) = 0 \quad (52)$$

в сечении $x = N_x L$ – принималось

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\rho, u_x, u_y, T) = 0 \quad (53)$$

в сечении $y = 0$ – условия симметрии течения.

На лобовой поверхности пластины (пунктир на Рисунке 67) задавался коэффициент поглощения поверхности

$$\alpha = (J_{down} - J_{reflect}) / J_{down} \quad (54)$$

где плотности падающего и отраженного молекулярного потока:

$$J_{down} = \int_{-\infty}^{+\infty} dc_y \int_{-\infty}^{+\infty} dc_z \int_0^\infty d\varepsilon \int_0^{+\infty} \xi_x f dc_x \quad (55)$$

$$J_{reflect} = - \int_{-\infty}^{+\infty} dc_y \int_{-\infty}^{+\infty} dc_z \int_0^\infty d\varepsilon \int_{-\infty}^0 \xi_x f_w dc_x \quad (56)$$

f_w – весовая функция отраженных поверхностью молекул.

В качестве коэффициента сопротивления пластины рассматривается следующее соотношение:

$$c_x = \left(\int_{F1} (P_{xx} + \rho u_x^2) dF - \int_{F2} P_{xx} dF \right) / (p_\infty + \rho_\infty u_\infty^2) S \quad (57)$$

где $F1$, $F2$ – лобовая и донная поверхности пластины; $S = L \times 1$ – площадь пластины единичного размаха. В отличие от коэффициента лобового

сопротивления в традиционном понимании эта зависимость в качестве характерной величины использует поток импульса невозмущенного потока. Такая форма коэффициента сопротивления позволяет, например, рассматривать задачи обтекания поглощающих поверхностей, расположенных в неподвижном газе. Эта позитивная особенность коэффициента и определила его выбор.

Аналогичная постановка задачи имела место в [87]. При этом температура лобовой поверхности пластины принималась равной температуре торможения газа, а температура донной поверхности – температуре невозмущенного потока. В настоящей работе температура всей пластины принимается равной температуре торможения газа.

4.2. Численная реализация

Кинетические конечно-разностные схемы строились на трех узлах вверх по потоку (молекулярному).

В гидродинамической области использовалась схема Лакса-Вендрофа на четырех узлах, асимметрично смещенных вверх по потоку. Эта схема условно устойчива. При тестировании новых моделей нежелательно использовать абсолютно устойчивые схемы, поскольку увеличение шага по времени (основное преимущество абсолютно устойчивых схем) приводит к росту погрешностей аппроксимации. В случае тестирования новых моделей основной целью является высокая точность вычислений, и любые дополнительные погрешности, связанные с неверным выбором разностной схемы, крайне нежелательны.

Принцип комбинирования моделей *NSF* и *MKE* в рамках рассматриваемой *КНМ* показан на Рисунке 62. Граничные условия гидродинамического решения (схема 1) формируются в узел сшивания, обозначенном черной точкой и принадлежащем области кинетического решения. Для выбранного разностного шаблона достаточно одного узла. Значения ρ , u_x , u_y , T в этом узле определяются как моменты весовой функции, вычисленной в кинетической области.

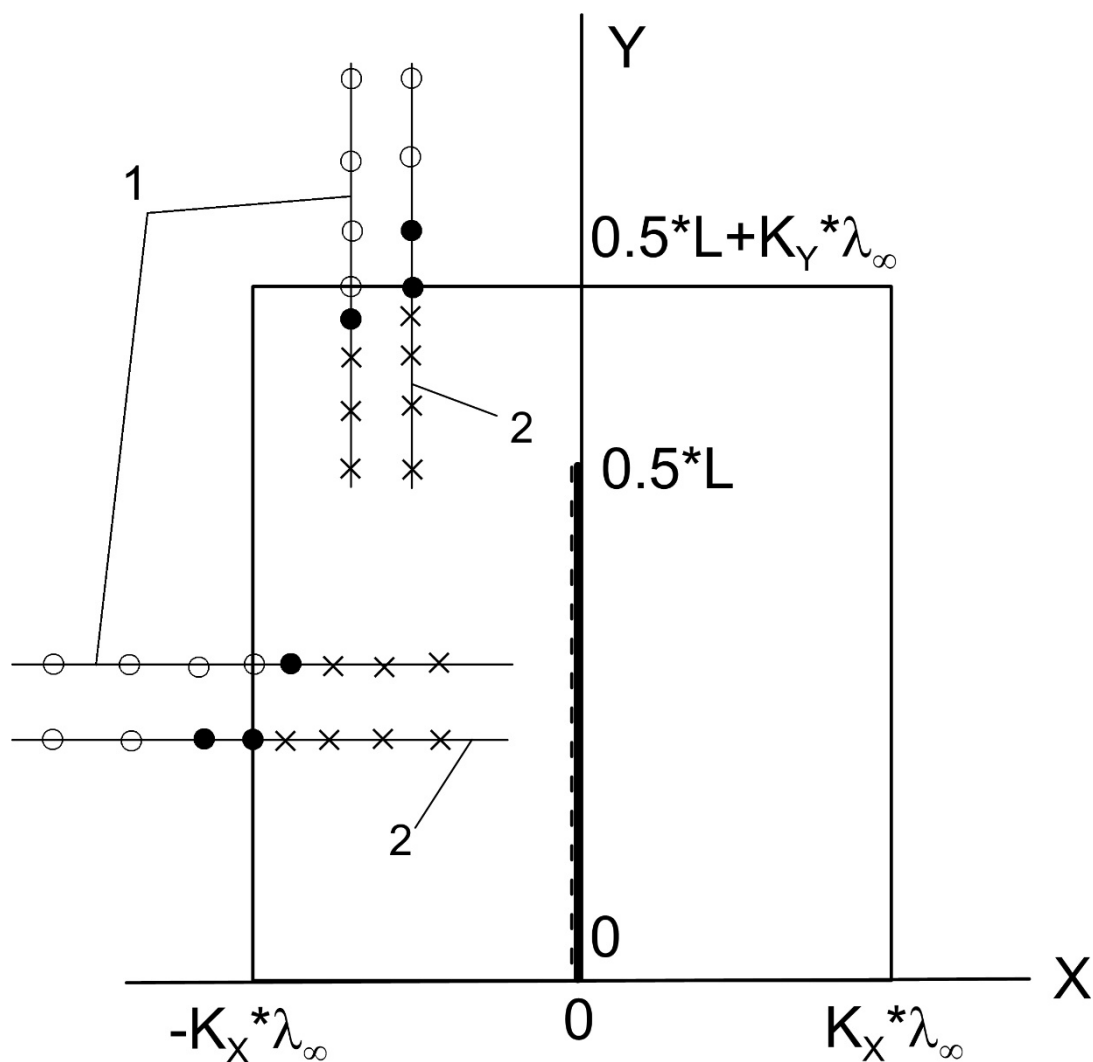


Рисунок 62. Расположение узлов сшивания *КНМ*. 1 – схема расположения узлов сшивания для гидродинамической области; 2 – схема расположения узлов сшивания для кинетической области; • – узлы сшивания; o – узлы гидродинамической сетки; x – узлы кинетической сетки.

Граничные условия кинетического решения (схема 2) формируются в узлах сшивания, принадлежащих гидродинамической составляющей *КНМ*. Так как для кинетического решения используются односторонние конечные разности на трех узлах, для сшивания необходимо два узла.

Гидродинамическая модель менее информативна, чем кинетическая. Для восстановления весовой функции в узлах сшивания используется аппроксимирующая весовая функция f_A . С учетом порядка приближения гидродинамической модели, в качестве аппроксимирующей весовой функции

целесообразно принять разложение равновесной, максвелловой функции. Такое разложение используется в ряде работ, например [63], для одноатомных газов. В случае многоатомного газа для функций f_{At} и f_{Ar} аналогичные разложения приводят к выражениям [39, 40]:

$$f_{At} = f_M \left(1 + \frac{1}{\rho (RT_t)^2} \left(\frac{1}{2} (p_{xx}^m c_x^2 + p_{yy}^m c_y^2 + p_{zz}^m c_z^2) + p_{xy}^m c_x c_y + \left(\frac{c^2}{5RT_t} - 1 \right) (\phi_x c_x + \phi_y c_y) \right) \right) \quad (58)$$

$$f_{Ar} = kT_r \left(\frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} f_{At} + f_M \frac{(\omega_x c_x + \omega_y c_y)}{\rho R^2 T_t T_r} \right) \quad (59)$$

$$f_M = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right) \quad (60)$$

Макропараметры этих выражений определяются гидродинамической моделью в соответствующем приближении [39, 40]:

$$T_t = T - \frac{5-3\gamma}{3} Z \frac{\mu}{R\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right);$$

$$T_r = T + (\gamma-1) Z \frac{\mu}{R\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right);$$

$$p_{ij}^m = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right), \quad i, j = x, y;$$

$$p_{zz}^m = -p_{xx}^m - p_{yy}^m = \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right);$$

$$\phi_i = -\frac{15}{4} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i};$$

$$\omega_i = -\frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} R\mu \frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

Для молекул, отраженных пластиной, принят диффузный закон:

$$f_w = \frac{n_w}{(2\pi RT_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_w}\right) \quad (61)$$

$$n_w = (1 - \alpha) \sqrt{\frac{2\pi}{T_w}} J_{down} \quad (62)$$

где T_w – температура поверхности. На донной поверхности пластины $\alpha = 0$.

Единицы измерения (общие для NSF и MKE):

$$x, y \rightarrow L \text{ (размер пластины)}; u_i \rightarrow \sqrt{RT_\infty}; t \rightarrow \frac{L}{\sqrt{RT_\infty}}; n, \rho \rightarrow n_\infty, \rho_\infty (\rho = m_0 n);$$

$$T, T_r, T_t \rightarrow T_\infty; P_{ij}, p_{ij} \rightarrow \rho_\infty RT_\infty = p_\infty; q_i, \varphi_i, \omega_i \rightarrow p_\infty \sqrt{RT_\infty}; \mu \rightarrow \mu_\infty;$$

$$\lambda \rightarrow \lambda_\infty = \frac{\mu_\infty}{\rho_\infty} \sqrt{RT_\infty}; Kn = \frac{\mu_\infty}{\rho_\infty \sqrt{RT_\infty} L}; u_\infty = \gamma \sqrt{RT_\infty} \cdot M_\infty$$

$$\text{Для справки: } \Delta x \rightarrow \frac{\Delta x}{L} = Kn \frac{\Delta x}{\lambda}$$

Безразмерная вязкость $\mu = T_i^s$; s - свободный параметр модели. Параметр h , определяющий объёмную вязкость, принят $h = Z$ для совместимости с кинетической моделью.

Система уравнений модели NSF в безразмерной форме

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \rho = 0 \\ \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial P_{xy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + (\gamma - 1) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) T + \\ + (\gamma - 1) \left[\frac{P_{xx}}{\rho} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{P_{yy}}{\rho} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{P_{xy}}{\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right] + \frac{(\gamma - 1)}{\rho} \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} \right) = 0 \end{array} \right. \quad (63)$$

$$P_{xx} = -Kn\mu \left[\left(\frac{4}{3} + \frac{5-3\gamma}{3} Z \right) \frac{\partial u_x}{\partial x} - \left(\frac{2}{3} - \frac{5-3\gamma}{3} Z \right) \frac{\partial u_y}{\partial y} \right] \quad (64)$$

$$P_{yy} = -Kn\mu \left[\left(\frac{4}{3} + \frac{5-3\gamma}{3} Z \right) \frac{\partial u_y}{\partial y} - \left(\frac{2}{3} - \frac{5-3\gamma}{3} Z \right) \frac{\partial u_x}{\partial x} \right] \quad (65)$$

$$P_{xy} = -Kn\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right); \text{ для справки: } P_{zz} = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{3} Z \right) Kn\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)$$

$$q_x = -Kn \frac{9\gamma - 5}{4(\gamma - 1)} \mu \frac{\partial T}{\partial x}, q_y = -Kn \frac{9\gamma - 5}{4(\gamma - 1)} \mu \frac{\partial T}{\partial y}$$

Для аппроксимирующей функции:

$$\varphi_x = -Kn \frac{15}{4} \mu \frac{\partial T}{\partial x}; \varphi_y = -Kn \frac{15}{4} \mu \frac{\partial T}{\partial y}; \omega_x = -Kn \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} \mu \frac{\partial T}{\partial x}; \omega_y = -Kn \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} \mu \frac{\partial T}{\partial y}.$$

$$T_t = T - Kn \frac{5-3\gamma}{2} Z \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right); T_r = T + Kn(\gamma-1)Z \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)$$

Для сокращения записи:

$$c_1 = Kn \left(\frac{4}{3} + \frac{5-3\gamma}{3} Z \right), \quad c_2 = Kn \left(\frac{2}{3} - \frac{5-3\gamma}{3} Z \right), \quad c_3 = Kn \frac{9\gamma-5}{4}, \quad c_4 = \frac{15}{4} Kn,$$

$$c_5 = Kn \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)}, \quad c_6 = Kn \frac{5-3\gamma}{2} Z, \quad c_7 = Kn(\gamma-1)Z$$

После подстановки p_{ij} и q_i получаем систему четырёх дифференциальных уравнений. Каждое уравнение может быть записано в универсальной форме:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + a_{2x} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + a_{2y} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} + a_{1x} \frac{\partial F}{\partial x} + a_{1y} \frac{\partial F}{\partial y} + a_0 F = r \quad (66)$$

F	a_{2x}	a_{2y}	a_{1x}	a_{1y}	a_0	r
ρ	0	0	u_x	u_y	$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}$	0
u_x	$-c_1 \frac{\mu}{\rho}$	$-Kn \frac{\mu}{\rho}$	$u_x - \frac{c_1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x}$	$u_y - \frac{Kn}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial y}$	0	$\frac{1}{\rho} \left\{ Kn \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) - \right.$ $\left. -c_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{\partial P}{\partial x} \right) \right\}$
u_y	$-Kn \frac{\mu}{\rho}$	$-c_1 \frac{\mu}{\rho}$	$u_x - \frac{Kn}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x}$	$u_y - \frac{c_1}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial y}$	0	$\frac{1}{\rho} \left\{ Kn \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) - \right.$ $\left. -c_2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) \right\}$
T	$-c_3 \frac{\mu}{\rho}$	$-c_3 \frac{\mu}{\rho}$	$u_x - \frac{c_3}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial x}$	$u_y - \frac{c_3}{\rho} \frac{\partial \mu}{\partial y}$	$(\gamma - 1) \cdot \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)$	$(\gamma - 1) \frac{\mu}{\rho} \left\{ c_1 \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \right.$ $\left. + c_1 \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 - 2c_2 \frac{\partial u_x}{\partial x} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \right.$ $\left. + Kn \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 \right\}$

При численной реализации все коэффициенты $a_{...}$ и r считаются известными, т.е. берутся с предыдущего временного уровня. Для уравнения сохранения массы эти коэффициенты записаны для явной схемы Мак-Кормака [98]. Для остальных уравнений использовался метод Томаса [97] с нестационарным членом, т.е. решалась краевая задача.

Аппроксимации производных в модели NSF

Использовались прямоугольные сетки с переменным шагом. Шаг сетки увеличивался в геометрической прогрессии по мере удаления от пластины.

$$\left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_{i,j} \approx \frac{F_{i,j}^k - F_{i,j}^{k-1}}{\Delta t} \quad (67)$$

i, j - индексы узлов геометрической сетки по осям X и Y

k - индекс временного уровня

$$\Delta x_1 = x_1 - x_0, \Delta x_2 = x_2 - x_1$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x_1} \approx -\frac{\Delta x_2}{\Delta x_1(\Delta x_1 + \Delta x_2)} F_0 + \frac{\Delta x_2 - \Delta x_1}{\Delta x_1 \Delta x_2} F_1 + \frac{\Delta x_1}{\Delta x_2(\Delta x_1 + \Delta x_2)} F_2 \quad (68)$$

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right|_{x_1} \approx \frac{2}{\Delta x_1(\Delta x_1 + \Delta x_2)} F_0 - \frac{2}{\Delta x_1 \Delta x_2} F_1 + \frac{2}{\Delta x_2(\Delta x_1 + \Delta x_2)} F_2 \quad (69)$$

Уравнения модели МКЕ в безразмерной форме. Стационарное течение в координатах XY (сшиваемая модель NSF нестационарная)

$$\xi_x \frac{\partial f_t}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f_t}{\partial y} = \frac{1}{Kn} \frac{p^m}{\mu} \left| \frac{f_t^+ - f_t}{f_r^+ - f_r} \right| \quad (70)$$

$$f_t^+ = \frac{n}{(2\pi T_t^+)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2T_t^+}\right) \left[1 + \frac{\varphi_x c_x + \varphi_y c_y}{3n(T_t^+)^2} \left(\frac{c^2}{5T_t^+} - 1 \right) \right] \quad (71)$$

$$f_r^+ = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} T_r^+ f_t^+ \quad (72)$$

Полусвёрнутые функции

$$F_n = \int f_t d\xi_z \quad (73)$$

$$F_p = \int f_z^2 f_t d\xi_z \quad (74)$$

$$\Phi = \int f_r d\xi_z \quad (75)$$

$$\xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left| \frac{F_n}{F_p} \right| + \xi_y \frac{\partial}{\partial y} \left| \frac{F_n}{F_p} \right| = \frac{1}{Kn} \frac{p^m}{\mu} \left| \frac{F_n^+ - F_n}{F_p^+ - F_p} \right| \quad (76)$$

$$F_n^+ = \int f_t^+ d\xi_z = \frac{n}{2\pi T_t^+} \exp\left(-\frac{c_x^2 + c_y^2}{2T_t^+}\right) \left\{ 1 + \frac{\varphi_x c_x + \varphi_y c_y}{15n(T_t^+)^2} \left(\frac{c_x^2 + c_y^2}{T_t^+} - 4 \right) \right\} \quad (77)$$

$$F_p^+ = \int c_z^2 f_t^+ dc_z = T_t^+ \cdot F_n^+ + \frac{2}{15} \frac{\varphi_x c_x + \varphi_y c_y}{n T_t^+} \cdot \frac{n}{2\pi T_t^+} \exp\left(-\frac{c_x^2 + c_y^2}{2T_t^+}\right) \quad (78)$$

$$\Phi^+ = \int f_r dc_z = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} T_r^+ \cdot F_n^+ \quad (79)$$

Макропараметры

$$n = \int F_n d\xi_x d\xi_y; u_x = \frac{1}{n} \int \xi_x F_n d\xi_x d\xi_y; u_y = \frac{1}{n} \int \xi_y F_n d\xi_x d\xi_y; P_{xx} = \int \xi_x^2 F_n d\xi_x d\xi_y - nu_x^2;$$

$$P_{yy} = \int \xi_y^2 F_n d\xi_x d\xi_y - nu_y^2; P_{zz} = \int F_p d\xi_x d\xi_y; P_{xy} = \int \xi_x \xi_y F_n d\xi_x d\xi_y - nu_x u_y;$$

$$T_t = \frac{1}{3n} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}); T_r = \frac{2(\gamma-1)}{5-3\gamma} \frac{1}{n} \int \Phi d\xi_x d\xi_y; T = \frac{3}{2}(\gamma-1)T_t + \frac{5-3\gamma}{2}T_r;$$

$$\begin{aligned} \varphi_x &= \frac{1}{2} \int \xi_x \left[(\xi_x^2 + \xi_y^2) F_n + F_p \right] d\xi_x d\xi_y - u_x P_{xx} - \frac{3}{2} u_x p^m - u_y P_{xy} - \frac{1}{2} nu_x (u_x^2 + u_y^2) = \\ &= \frac{1}{2} \int c_x \left[(c_x^2 + c_y^2) F_n + F_p \right] dc_x dc_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_y &= \frac{1}{2} \int \xi_y \left[(\xi_x^2 + \xi_y^2) F_n + F_p \right] d\xi_x d\xi_y - u_x P_{xy} - \frac{3}{2} u_y p^m - u_y P_{yy} - \frac{1}{2} nu_y (u_x^2 + u_y^2) = \\ &= \frac{1}{2} \int c_y \left[(c_x^2 + c_y^2) F_n + F_p \right] dc_x dc_y \end{aligned}$$

Граничные условия на пластине

$$n_w = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{T_w}} \left| \begin{matrix} 1-\alpha \\ 1 \end{matrix} \right| \int_0^0 \xi_x F_n d\xi_x d\xi_y \quad (80)$$

$$F_{n_{omp}} = \frac{n_w}{2\pi T_w} \exp\left(-\frac{\xi_x^2 + \xi_y^2}{2T_w}\right) \quad (81)$$

$$F_{p_{omp}} = \frac{n_w}{2\pi} \exp\left(-\frac{\xi_x^2 + \xi_y^2}{2T_w}\right) = T_w \cdot F_{n_{omp}} \quad (82)$$

$$\Phi_{omp} = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} T_w \cdot F_{n_{omp}} = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} F_{p_{omp}} \quad (83)$$

$$\frac{T_0}{T_\infty} = 1 + \frac{\gamma-1}{2} M_\infty^2 \quad (84)$$

Аппроксимирующая функция в безразмерной форме (область сшивания)

$$f_{M_t} = \frac{n}{(2\pi T_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2T_t}\right) \quad (85)$$

$$f_{A_t} = f_{M_t} \left\{ 1 + \frac{1}{nT_t^2} \left[\frac{1}{2} p_{xx}^m c_x^2 + \frac{1}{2} p_{yy}^m c_y^2 + \frac{1}{2} p_{zz}^m c_z^2 + p_{xy} c_x c_y + \left(\frac{c^2}{5T_t} - 1 \right) (\varphi_x c_x + \varphi_y c_y) \right] \right\} \quad (86)$$

$$f_{A_r} = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} T_r \cdot f_{A_t} + \frac{\omega_x c_x + \omega_y c_y}{nT_t} f_{M_t} \quad (87)$$

$$T_t = T - Kn \frac{5-3\gamma}{3} h \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right); \quad T_r = T + Kn(\gamma-1) h \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)$$

$$p_{xx}^m = -\frac{4}{3} Kn \mu \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{2}{3} Kn \mu \frac{\partial u_y}{\partial y}; \quad p_{yy}^m = -\frac{4}{3} Kn \mu \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{2}{3} Kn \mu \frac{\partial u_x}{\partial x};$$

$$p_{zz}^m = -p_{xx}^m - p_{yy}^m = \frac{2}{3} Kn \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right); \quad p_{xy}^m = -Kn \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

$$\varphi_x = -Kn \frac{14}{5} \mu \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \varphi_y = -Kn \frac{14}{5} \mu \frac{\partial T}{\partial y}; \quad \omega_x = -Kn \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} \mu \frac{\partial T}{\partial x};$$

$$\omega_y = -Kn \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} \mu \frac{\partial T}{\partial y}$$

Полусвёрнутые функции (неполные моменты)

$$F_{M_t} = \int f_{M_t} d\xi_z = \frac{n}{2\pi T_t} \exp\left(-\frac{c_x^2 + c_y^2}{2T_t}\right) \quad (88)$$

$$F_{A_t} = \int f_{A_t} d\xi_z = F_{M_t} \left\{ 1 + \frac{1}{p^m} \left[\frac{p_{xx}^m}{2} \left(\frac{c_x^2}{T_t} - 1 \right) + \frac{p_{yy}^m}{2} \left(\frac{c_y^2}{T_t} - 1 \right) + p_{xy} \frac{c_x c_y}{T_t} + \frac{\varphi_x c_x + \varphi_y c_y}{5T_t} \left(\frac{c_x^2 + c_y^2}{T_t} - 4 \right) \right] \right\} \quad (89)$$

$$F_{A_p} = \int \xi_z^2 f d\xi_z = T_t \cdot F_{A_t} + \frac{1}{p^m} \left[\frac{2}{5} (\varphi_x c_x + \varphi_y c_y) - T_t (p_{xx} + p_{yy}) \right] F_{M_t} \quad (90)$$

$$\Phi_A = \int f_{A_r} d\xi_z = \frac{5-3\gamma}{2(\gamma-1)} T_r F_{A_t} + \frac{\omega_x c_x + \omega_y c_y}{p^m} F_{M_t} \quad (91)$$

Дискретное уравнение (универсальное)

$$\begin{cases} \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{|\xi_x|}{\Delta x} \left(\frac{3}{2} f_i - 2f_{i-s(x)} + \frac{1}{2} f_{i-2s(x)} \right), s(x) = \text{sign}(\xi_x) \\ \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{|\xi_y|}{\Delta y} \left(\frac{3}{2} f_j - 2f_{j-s(y)} + \frac{1}{2} f_{j-2s(y)} \right), s(y) = \text{sign}(\xi_y) \end{cases} \quad (92)$$

$$F_{i,j} = \frac{2 \frac{|\xi_x|}{\Delta x} \left(F_{i-s(x_{i,j})} - \frac{1}{4} F_{i-2s(x_{i,j})} \right) + 2 \frac{|\xi_y|}{\Delta y} \left(F_{i,j-s(y)} - \frac{1}{4} F_{i,j-2s(y)} \right) + \frac{1}{Kn} \frac{p^m}{\mu} F_{i,j}^+}{\frac{3}{2} \left(\frac{|\xi_x|}{\Delta x} + \frac{|\xi_y|}{\Delta y} \right) + \frac{1}{Kn} \frac{p^m}{\mu}} \quad (93)$$

4.3. Методика повышения экономичности вычислительного процесса для многомерных задач

Большую часть объема памяти, потребляемого *КНМ*, занимает весовая функция f , так как размерность фазового пространства, даже после формального интегрирования по координатам ξ_z и ε [87], вдвое превышает размерность геометрического пространства OXY . Вместе с тем, при решении стационарных задач нет необходимости хранить все значения f в памяти компьютера. В данной задаче при выбранных полупространствах молекулярных скоростей ξ_x и ξ_y , достаточно рассматривать один квадрант пространства скоростей. На Рисунке 63 показан такой квадрант для полупространств $\xi_x \geq 0$ и $\xi_y \geq 0$.

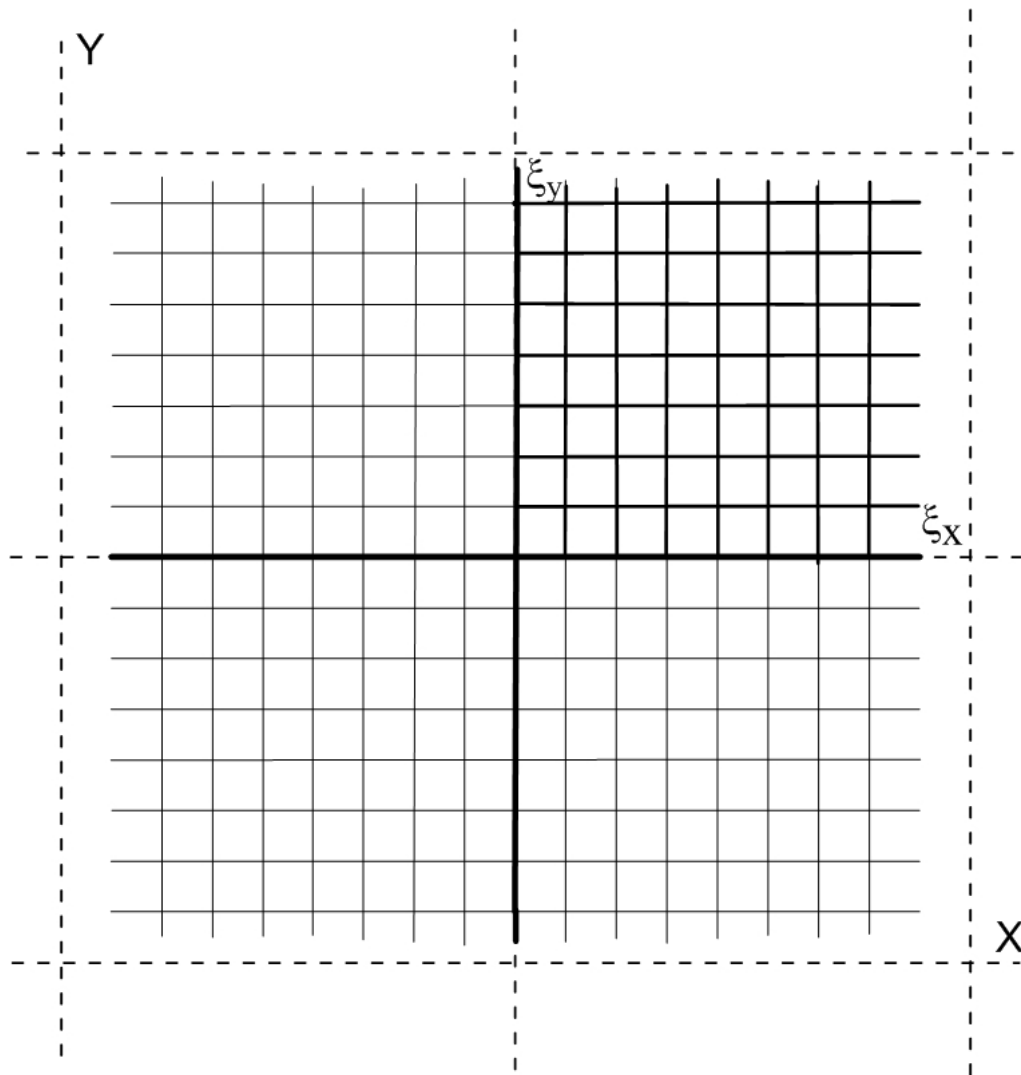


Рисунок 63. Вычислительная сетка в пространстве скоростей. Пунктирные линии – геометрическая сетка, сплошные линии – скоростная сетка, утолщенные сплошные линии – рассчитываемый квадрант скоростной сетки ($\xi_x \geq 0, \xi_y \geq 0$)

В трёхмерном случае вместо квадрантов используются октанты.

Приведем алгоритм вычисления.

Если используется конечно-разностная схема на трех узлах геометрической расчетной сетки, то для продвижения по координате Y достаточно значений f на трех строках сетки с координатами y_n, y_{n-1}, y_{n-2} . На Рисунке 64 показаны строки, используемые для вычисления f на n -ой и $(n+1)$ -ой строках. Продвижение по Y снизу вверх, т.е. $\xi_y \geq 0$. Функция f записана в 4-мерный массив, в котором

координата Y имеет три значения: 0, 1 и 2. Значения функции вычисляются в сечении массива $y=0$ по значениям в сечениях $y=1$ и $y=2$.

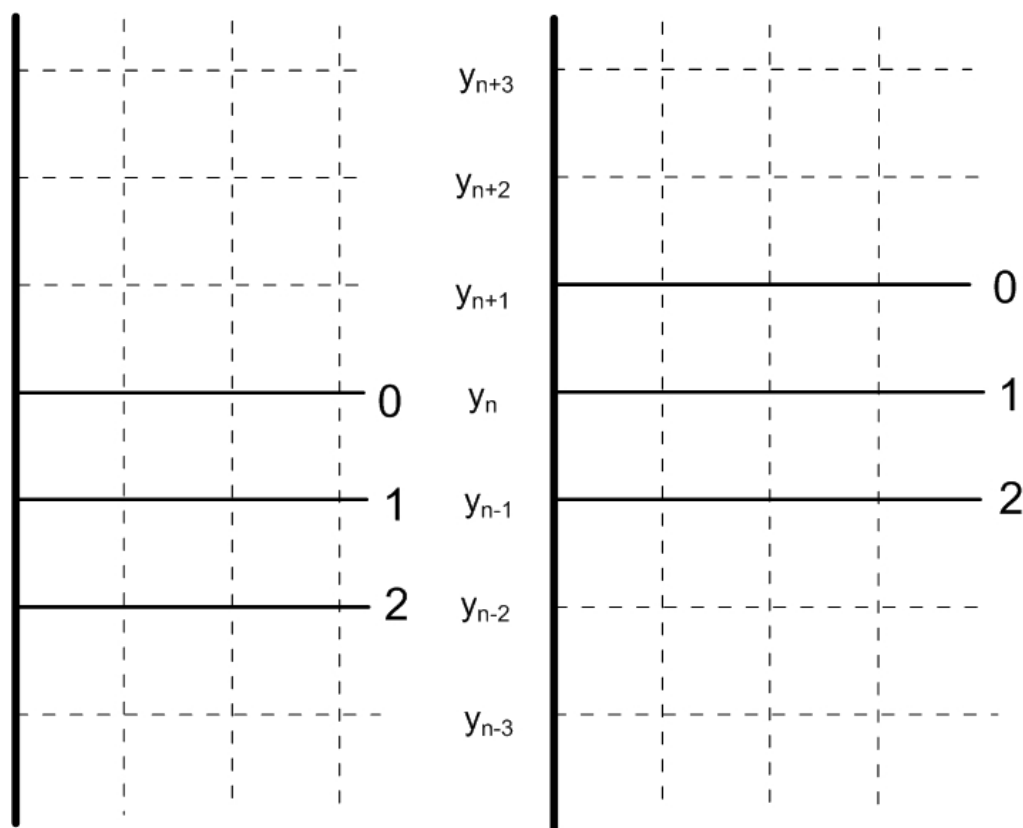


Рисунок 64. Алгоритм вычисления весовой функции при n -ом и $(n+1)$ -ом значениях координаты Y . Жирная линия – пластина.

После определения f во всех узлах выбранного квадранта (пространство скоростей) и во всех узлах сечения $y=0$ (геометрическое пространство) вычисляются и записываются в память неполные моменты весовой функции. Неполные моменты вычисляются для молекулярных скоростей ξ_i . Например, для первого квадранта (Рисунок 63) момент второго порядка вычисляется как

$$M_{ij}^{(1)} = m_0 \int_0^\infty \int_0^\infty \xi_i \xi_j f_{z\varepsilon} d\xi_x d\xi_y, \quad i, j = x, y \quad (94)$$

Здесь $f_{z\varepsilon}$ – весовая функция, формально проинтегрированная по ξ_z и ε . Верхний индекс в скобках – номер квадранта.

При переходе на следующую, $(n+1)$ -ю строку основной геометрической сетки, сечение массива $y=0$ перенумеровывается (но не перезаписывается) как $y=1$, сечение $y=1$ – как $y=2$. Вычисление сечения $y=0$ продолжается по описанной выше схеме.

После вычисления неполных моментов во всех квадрантах всех геометрических узлов определяются макропараметры газовой среды. Например, касательное напряжение

$$P_{xy} = \sum_{k=1}^4 M_{xy}^k - \rho u_x u_y \quad (95)$$

Описанный алгоритм позволяет хранить значения весовой функции только в одном квадранте (октанте) скоростной сетки и только на трех строках геометрической сетки. Для вычислений в остальных квадрантах (октантах) используется массив первого квадранта (октанта) с учетом знаков молекулярных скоростей.

При решении задачи обтекания пластины с $Kn=0.01$ описанная методика позволила сократить объем памяти примерно на два порядка.

4.4. Результаты расчётов

Расчеты проводились для двухатомного газа при $M=2.31$ и $Kn=0.1\dots 0.001$. Для выбранного числа Маха имеется достаточно большой набор экспериментальных и расчетных данных в переходной области течения. Подборку данных для коэффициента лобового сопротивления пластин можно найти в [99]. Результаты расчетов, включая поля течения, сравнивались с расчетами по *МКЕ* [40], которые удовлетворительно согласуются с данными [99].

На Рисунке 65 показана зависимость $c_x(\alpha)$. При $Kn=0.1$ расчеты по *МКЕ* и *КНМ* совпадают, так как при этих числах Кнудсена практически вся вычислительная область находилась в кинетической составляющей *КНМ*, а ее гидродинамическая составляющая выполняла функции граничных условий на внешней границе вычислительной области. В *МКЕ* и кинетической составляющей *КНМ* использовались идентичные расчетные сетки.

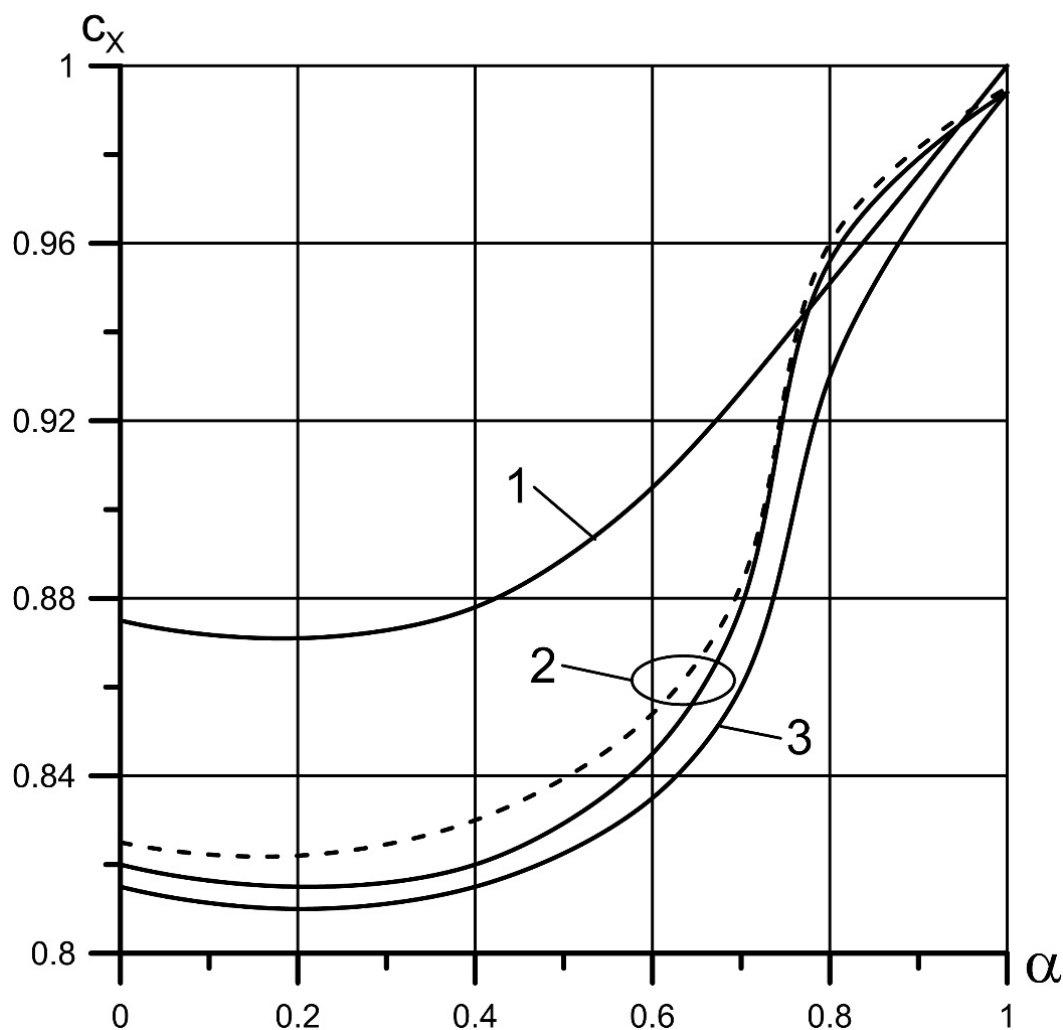


Рисунок 65. Зависимость коэффициента лобового сопротивления пластины от коэффициента поглощения ее лобовой поверхности. 1 – *МКЕ* и *КНМ*, $Kn = 0.1$; 2 – пунктир *МКЕ*, $Kn = 0.01$, 2 – сплошная *КНМ*; 3 – *КНМ*, $Kn = 0.001$.

При $Kn = 0.01$ и $\alpha < 0.7$ имеет место некоторое расхождение между используемыми моделями. Как следует из представленных ниже графиков, при этих значениях параметров вся высокоградиентная область находится в гидродинамической составляющей *КНМ*. Методы механики сплошной среды существенно уступают в точности расчета высокоградиентных областей методам молекулярно-кинетической теории. Это, видимо, и является причиной расхождения результатов расчета.

Расчеты течения при $Kn = 0.001$ являлись своего рода противоположностью расчетов при $Kn = 0.1$. Практически вся вычислительная область принадлежала гидродинамической составляющей КНМ. Кинетическая составляющая выполняла функции граничных условий на пластине. Наблюдается отсутствие «горба» в области $\alpha \approx 0.8$, характерного как для кинетической, так и для комбинированной модели.

Для анализа физической адекватности комбинированных или гибридных моделей наиболее интересны режимы течения, при которых область сшивания проходит через высокоградиентную область. Основной проблемой большинства моделей указанного класса является возникновение разрывов производных газодинамических параметров в этой области. С той точки зрения наиболее интересны распределения параметров перед лобовой поверхностью пластины ($x < 0$) и режимы течения при $Kn = 0.01$ и $\alpha = 0.6 \dots 0.8$.

На следующих графиках представлены распределения плотности, проекции скорости u_x и температуры вдоль оси X при $Kn = 0.01$. На Рисунке 66 и Рисунке 67 коэффициент поглощения поверхности $\alpha = 0.6$. На Рисунке 66 распределения построены в сечении симметрии ($y = 0$). Вся высокоградиентная область течения находится в гидродинамической составляющей КНМ (слева от области сшивания). Профили плотности, скорости и температуры смещены вниз по потоку относительно профилей МКЕ. Наблюдается существенное отличие в профилях плотности. Это особенно заметно на Рисунке 70, на уровне верхней кромки пластины ($y = 0.5$). Область сшивания в этом случае находится в высокоградиентной области.

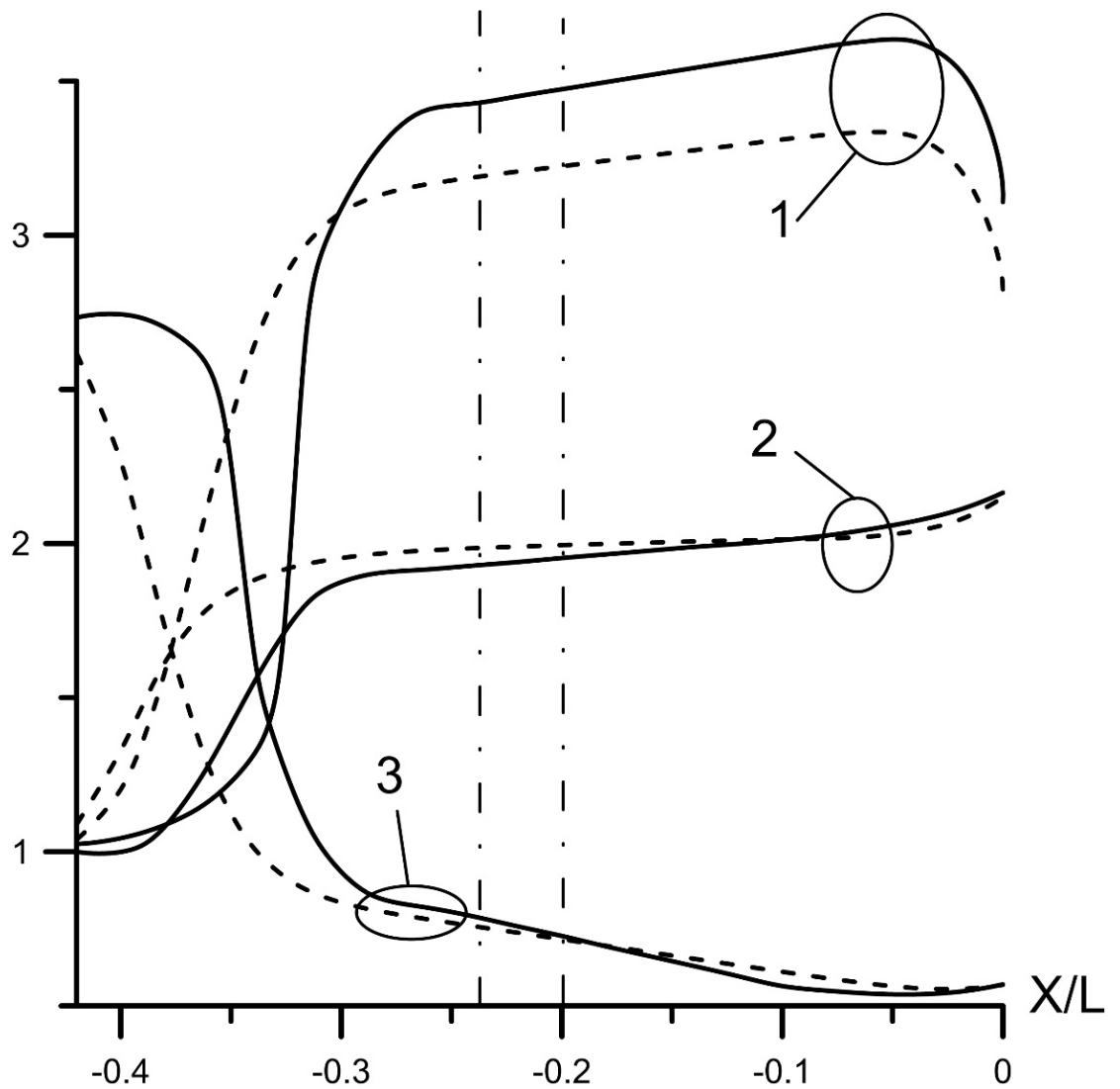


Рисунок 66. Распределение плотности, скорости u_x и температуры перед лобовой поверхностью. $Kn = 0.01$, $\alpha = 0.6$, $y = 0$. 1 – плотность; 2 – температура; 3 – u_x . Пунктирные линии – *МКЕ*; сплошные линии – *КНМ*; вертикальные штрихпунктирные линии – границы области сшивания.

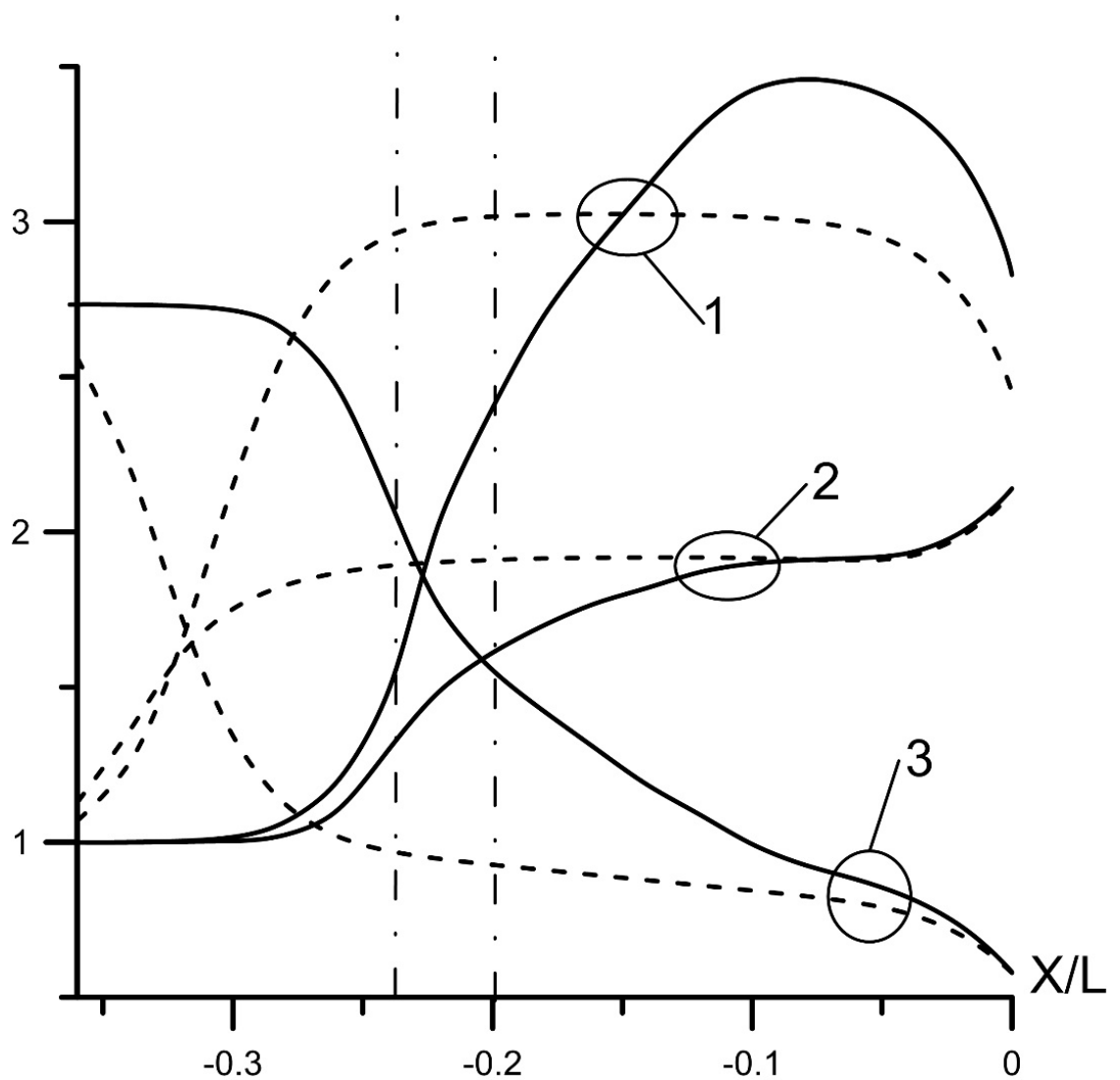


Рисунок 67. Распределение плотности, скорости u_x и температуры перед лобовой поверхностью. $Kn = 0.01$, $\alpha = 0.6$, $y = 0.5$. 1 – плотность; 2 – температура; 3 – u_x . Пунктирные линии – *МКЕ*; сплошные линии – *КНМ*; вертикальные штрихпунктирные линии – границы области сшивания.

По мере увеличения коэффициента поглощения высокоградиентная область течения все больше смещается в кинетическую составляющую *КНМ* (справа от области сшивания). Профили *МКЕ* и *КНМ* сближаются и в отношении расположения, и в отношении величин параметров, Рисунок 68 и Рисунок 69. Примечательно, что даже графики Рисунок 69 не содержат разрывов производных ρ , u_x , T . Эта позитивная особенность рассматриваемой *КНМ* проанализирована в [100, 101].

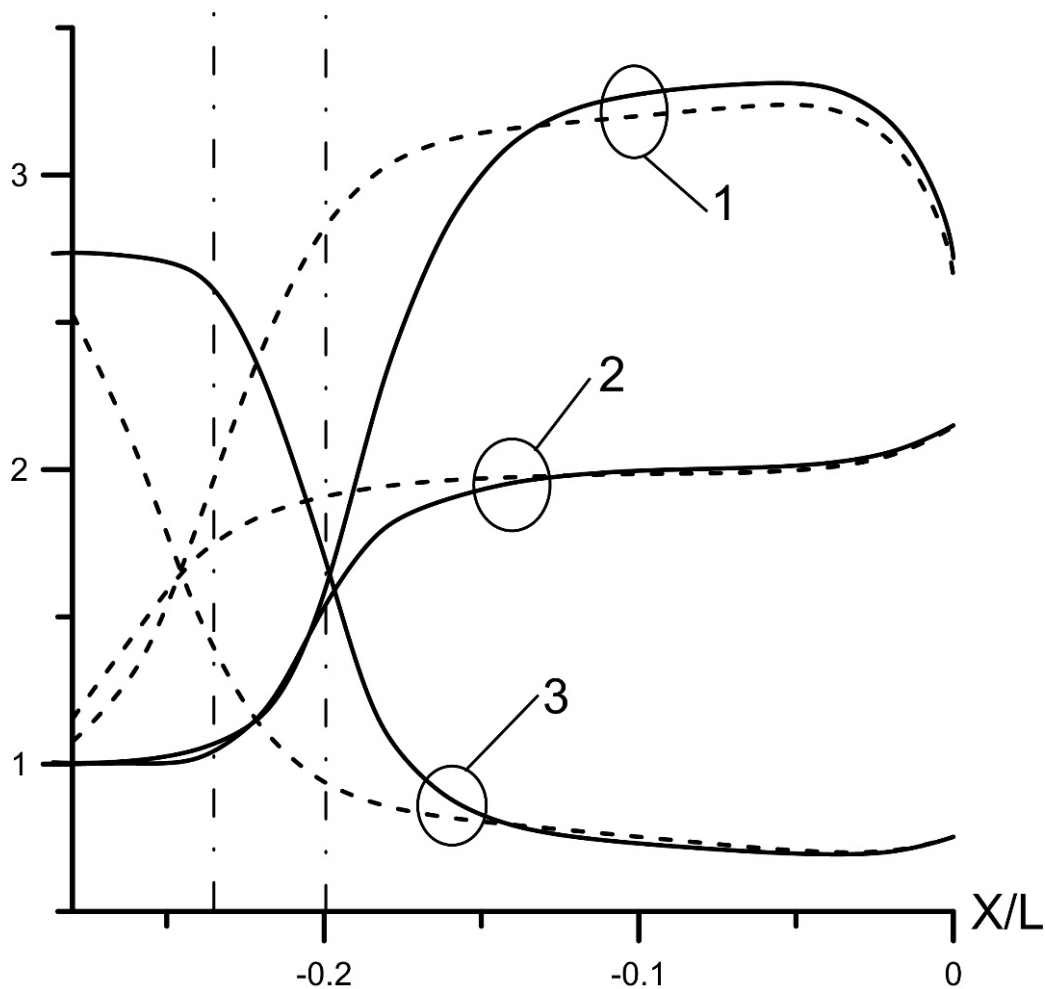


Рисунок 68. Распределение плотности, скорости u_x и температуры перед лобовой поверхностью. $Kn = 0.01$, $\alpha = 0.7$, $y = 0$. 1 – плотность; 2 – температура; 3 – u_x . Пунктирные линии – MKE ; сплошные линии – KHM ; вертикальные штрихпунктирные линии – границы области сшивания.

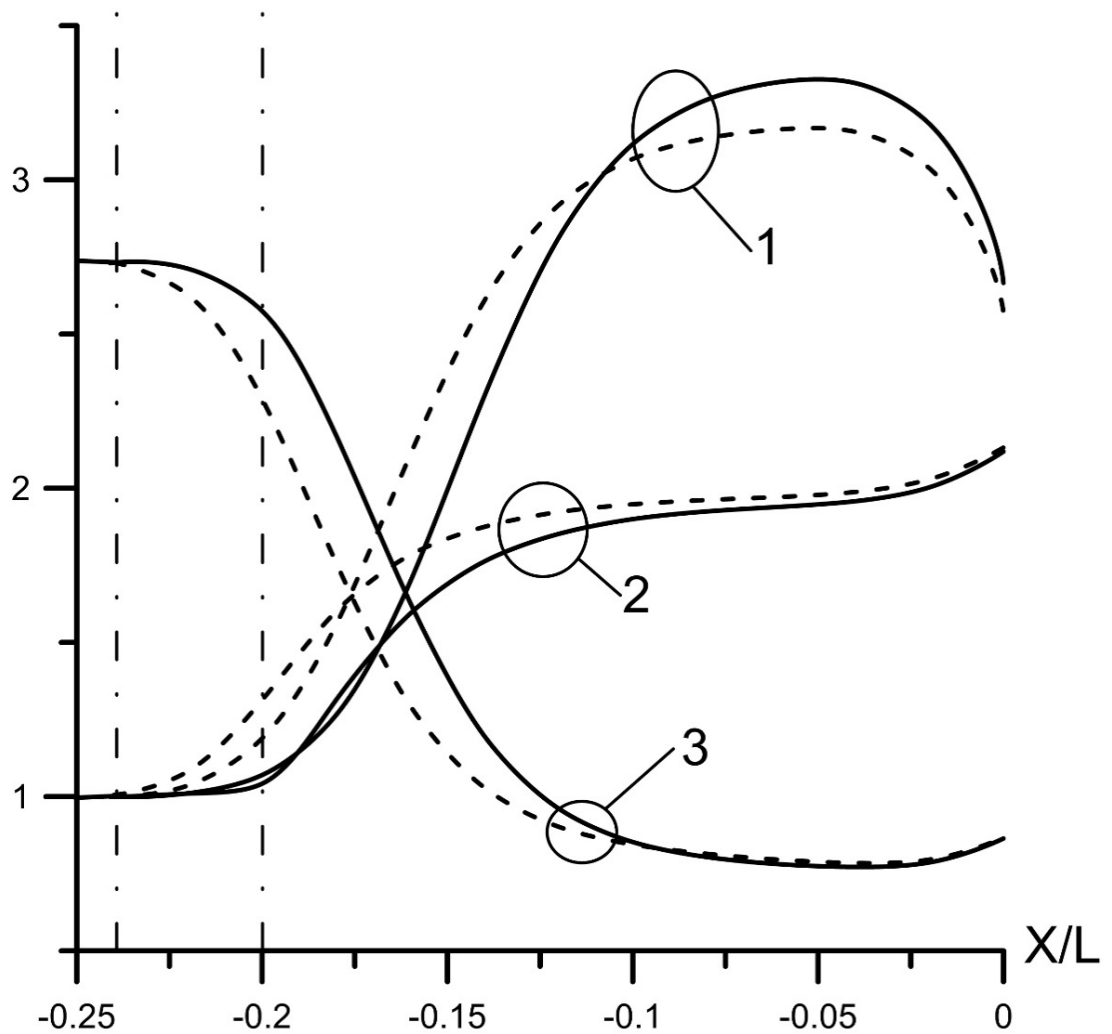


Рисунок 69. Распределение плотности, скорости u_x и температуры перед лобовой поверхностью. $Kn = 0.01$, $\alpha = 0.75$, $y = 0$. 1 – плотность; 2 – температура; 3 – u_x . Пунктирные линии – *МКЕ*; сплошные линии – *КНМ*; вертикальные штрихпунктирные линии – границы области сшивания.

При $\alpha = 0.8$, Рисунок 70, высокоградиентная область находится полностью в гидродинамической подобласти. Правая граница области сшивания имеет координату $x = -0.2$ и не попадает в поле рисунка. Профили *КНМ* и *МКЕ* почти совпадают. Относительно небольшое различие профилей связано, видимо с тем, что для расчетов при $Kn = 0.01$ по *МКЕ* использовалась геометрическая сетка с шагом $2\lambda_\infty$, а расчеты в кинетической подобласти *КНМ* выполнялись с вдвое

меньшим шагом. Необходимость завышения шага в модели *МКЕ* была связана с техническими возможностями используемых вычислительных средств.

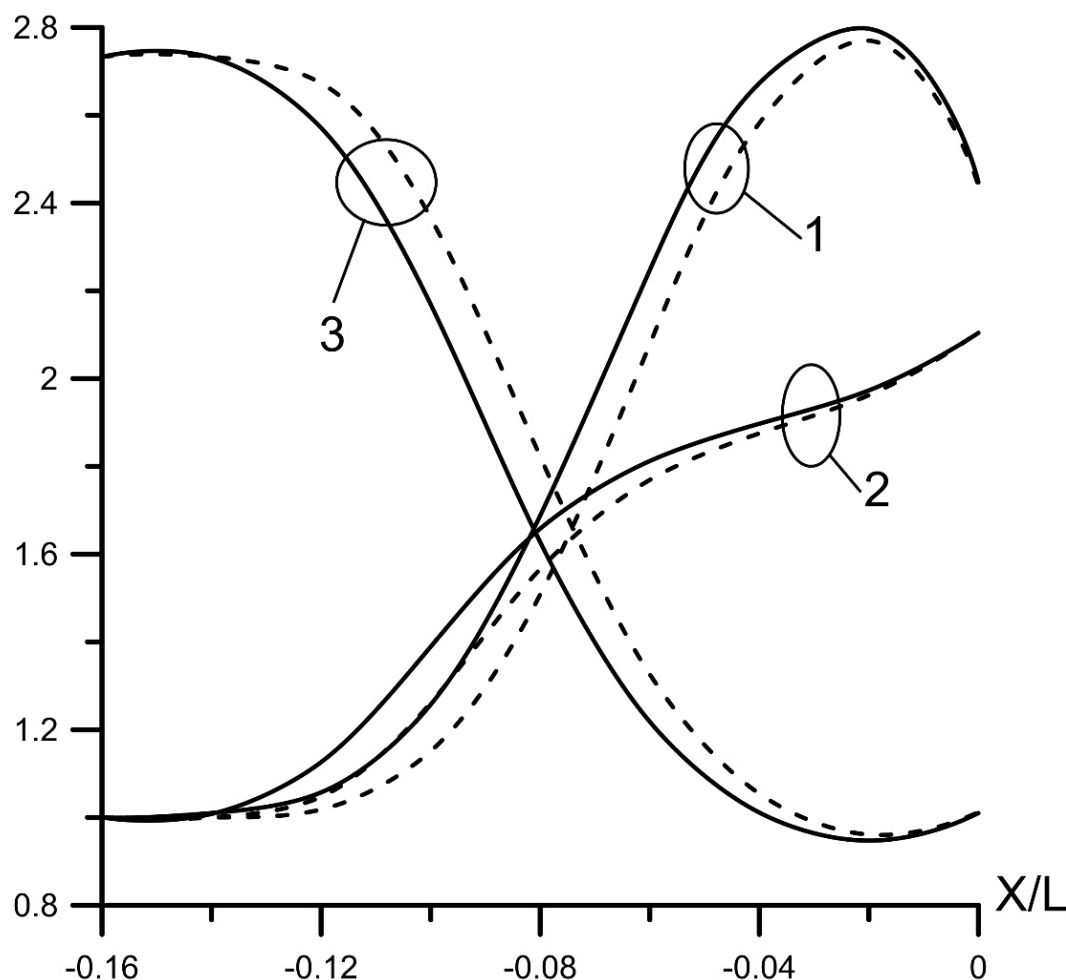


Рисунок 70. Распределение плотности, скорости u_x и температуры перед лобовой поверхностью. $Kn = 0.01$, $\alpha = 0.8$, $y = 0$. 1 – плотность; 2 – температура; 3 – u_x . Пунктирные линии – *МКЕ*; сплошные линии – *КНМ*.

4.5. Выводы к Главе 4

Результаты расчетов показывают, что комбинированная кинетико-гидродинамическая модель позволяет физически адекватно описывать процессы, протекающие в переходной области течения газовой среды. В области сшивания кинетической и гидродинамической составляющих модели отсутствуют разрывы производных газодинамических параметров.

КНМ позволяет выставлять граничные условия на поглощающих поверхностях. Значения такой интегральной характеристики как $c_x(\alpha)$,

рассчитанные по *КНМ*, удовлетворительно согласуются с результатами расчетов по *МКЕ*.

При расчете относительно плотных газов ($Kn = 0.01$) *КНМ* позволяет сократить потребляемый объем памяти вычислительного устройства примерно на три порядка и процессорное время на два порядка по сравнению *МКЕ*.

Рассмотренная *КНМ* может быть использована в широком интервале чисел Кнудсена.

Относительно большие погрешности вычисления поля плотности вблизи обтекаемой поверхности, по-видимому, связаны с неудачным выбором численной схемы для решения уравнения неразрывности в гидродинамической составляющей модели.

Кинетические уравнения из-за возможности разбиения их на независимо выполняемые фрагменты, эффективно решаются с использованием методов параллельного программирования. Такие программы выполняются быстрее их последовательных эквивалентов. При этом нагрузка на каждый процессор оказывается сбалансированной. Время выполнения расчёта снижается во столько раз, сколько выделено процессоров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработан метод сшивания (комбинирования) кинетической и гидродинамической моделей применительно к многоатомным газам.

2. Разработан метод решения модельного кинетического уравнения (*МКЕ*), не требующий сохранения значений весовой функции во всей вычислительной области.

3. Полученная физико-математическая модель, объединяющая кинетическое и гидродинамическое описание течения (*КНМ*), протестирована в области течений высокой динамической неравновесности.

На примере течения Куэтта (пристеночного сдвигового течения) показано, что *КНМ* ненамного уступает в точности кинетической модели и существенно превосходит ее в экономичности. При $Kn = 0.01$ *КНМ* требовала в несколько десятков раз меньше процессорного времени, чем кинетическая модель.

При описании течений плотных газов экономичность *КНМ* не зависит от числа Kn и слабо зависит от числа M . Таким образом, разработанная модель течения в отношении адекватности граничных условий наследует свойства кинетической модели, а в отношении экономичности – свойства модели *NSF*.

На примере задачи об ударной волне показано, что наибольшее расхождение между профилями комбинированной модели и модели *МКЕ* имеет место на профилях температуры. Профили плотности и групповой скорости согласовывались существенно лучше. В области умеренных чисел Маха комбинированная модель давала гладкие профили, хотя в области кинетического решения наблюдалось заметное отличие от профилей модели *МКЕ*. Анализ вторых производных температуры в узлах сшивания не выявил разрыва первых производных, то есть изломов графика.

Оба использованных способа численного решения дали практически совпадающие результаты. Таким образом, обнаруженный эффект (наличие разрыва производных) не является особенностью вычислительного метода.

Несмотря на разрыв производной в граничном узле кинетической области, *КНМ* позволяет существенно улучшить гидродинамическое решение. Показано, что к нарушению гладкости решения приводит в первую очередь рост степени неравновесности.

На примере задачи об обтекании активной поверхности показано, что комбинированная кинетико-гидродинамическая модель позволяет физически адекватно описывать процессы, протекающие в переходной области течения газовой среды. В области сшиваания кинетической и гидродинамической составляющих модели отсутствуют разрывы производных газодинамических параметров.

КНМ позволяет выставлять граничные условия на поглощающих поверхностях. Значения такой интегральной характеристики, как $c_x(\alpha)$, рассчитанные по *КНМ*, удовлетворительно согласуются с результатами расчетов по *МКЕ*.

При расчете относительно плотных газов ($Kn = 0.01$) *КНМ* позволяет сократить потребляемый объем памяти вычислительного устройства примерно на три порядка и процессорное время на два порядка по сравнению *МКЕ*.

Рассмотренная *КНМ* может быть использована в широком интервале чисел Кнудсена.

Относительно большие погрешности вычисления поля плотности вблизи обтекаемой поверхности, по-видимому, связаны с неудачным выбором численной схемы для решения уравнения неразрывности в гидродинамической составляющей модели.

4. Предложена методика повышения экономичности вычислительного процесса для многомерных задач. Кинетические уравнения из-за возможности разбиения их на независимо выполняемые фрагменты, эффективно решаются с использованием методов параллельного программирования. Такие программы выполняются быстрее их последовательных эквивалентов. При этом нагрузка на каждый процессор оказывается сбалансированной. Время выполнения расчёта снижается во столько раз, сколько выделено процессоров.

Разработанная гибридная модель в будущем может быть распространена на многокомпонентные газы. В дальнейшем планируется провести дополнительные исследования в этой области, а также рассмотреть течения в до- и гиперзвуковой областях.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Грэд Г. О кинетической теории разреженных газов: перевод с английского / Г.Грэд // *Механика*. – 1952. – №4. – С.71-97.
2. Enskog, D. The kinetic theory of phenomena in fairly rare gases / D.Enskog – Upsala, 1917. – 279 p.
3. Chapman, S. On the law of distribution of velocities and on the theory of viscosity and thermal conduction in a non-uniform simple monatomic gas / S.Chapman // *Phil. Trans. Roy. Soc.* – 1916. – A 216. – Pp.279.
4. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. – М.: Наука, 1967. - 440 с. Kogan MN. Rarefied Gas Dynamics. Moscow: Nauka; 1967.
5. Седов, Л.И. О тензоре энергии – импульса и о макроскопических внутренних взаимодействиях в гравитационном поле и в материальных средах/ Л.И.Седов. // *Доклады АН СССР*. – 1965. – Т. 164. – №3.
6. Tirskiy GA. Continuum models in problems of hypersonic flow of a rarefied gas over blunt bodies. *Prikl Mat Mekh* 1997;61(6):903–30.
7. Tirskiy GA. Continuum models for the problem of hypersonic flow of rarefied gas over blunt body. *Syst Anal Modelling Simulation* 1999;34(4):205–40.
8. Tirskiy GA. The theory of the hypersonic flow of a viscous chemically reacting multicomponent gas over plane and axisymmetrical blunt bodies with injection. *Nauch Trudy Inst Mekh MGU* 1975;39:5–38.
9. Probstein RF, Kemp NH. Viscous aerodynamic characteristics in hypersonic rarefied gas flow. *J Aero/Space Sciences* 1960;27(3):174–92.
10. Ho H-T, Probstein RF. The compressible viscous layer in rarefied hypersonic flow. *Proc. 2nd Intern. Symp. Rarefied Gas Dynamics*. Ed. L.Talbot, N.Y.: Acad. Press, 1961. p. 525–52.
11. Tolstykh AI. The aerodynamic characteristics of a cooled spherical bluntness in a hypersonic flow of a slightly rarefied gas. *Izv Akad Nauk SSSR MZhG* 1969;6:163–6.

12. Davis RT. Numerical solution of the hypersonic viscous shock layer equations. *AIAA Journal* 1970;8(5):843–51.
13. Gupta RN, Simmonds AL. Hypersonic low-density solutions of the Navier–Stokes equations with chemical nonequilibrium and multicomponent surface slip. *AIAA Paper*. 1986. No 86-1349. 18 p.
14. Галкин, В.С. К теории объемной вязкости и релаксационного давления / В.С.Галкин, С.В.Русаков. // *Прикладная математика и механика*. – 2005. – Т. 69. – Вып.6. – С. 1062-1075.
15. Галкин, В.С. Обобщенный метод Чепмена–Энскога: часть 1. Уравнения неравновесной газовой динамики / В.С.Галкин, М.Н.Коган, Н.К.Макашев // *Ученые записки ЦАГИ*. – 1974. – Т.5. – № 5. – С. 66-76.
16. Галкин, В.С. Обобщенный метод Чепмена–Энскога: часть 2. Уравнения многоскоростной многотемпературной смеси газов / В.С.Галкин, М.Н.Коган, Н.К.Макашев // *Ученые записки ЦАГИ*. – 1975. – Т.6. – № 1. – С. 15-27.
17. Галкин, В.С. Систематизация уравнений релаксационной газовой динамики / В.С.Галкин, С.А.Лосев // *Изв. РАН. Механика жидкости и газа*. – 2010. – №4. – С. 3-25.
18. Chernyi GG. *Gas Flows at High Supersonic Velocity*. Moscow: Fizmatgiz; 1959.
19. Cheng HK. The blunt body problem in hypersonic flow at low Reynolds number. *IAS Paper*. 1963. No 63-92. 100 p.
20. Sedov LI, Mikhailova MP, Chernyi GG. The effect of viscosity and thermal conductivity on the gas flow behind a strongly curved shock wave. *Vestnik MGU Ser Fiz-Yestest Nauk* 1953;3:95–100.
21. Brykina IG. Asymptotic solution of the thin viscous shock layer equations at low Reynolds numbers for a cold surface. *Izv Ross Akad Nauk MzhG* 2004;5:159–70.
22. Slezkin NA. The theory of gas flow in the layer between the surface of a shock wave and the blunted surface of a solid of revolution. *Izv Akad Nauk SSSR OTN Mekh Mashinostroyeniye* 1959;2:3–12.

23. Rogov BV, Sokolova IA. Hyperbolic approximation of the Navier–Stokes equations for viscous mixed flows. *Izv Ross Akad Nauk MZhG* 2002;3:30–49.
24. Rogov BV, Tirskiy GA. The accelerated method of global iterations for solving the external and internal problems of aerothermodynamics. In: *Proc. 4th Europ. Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles*, 2001. The Netherlands: Europ. Space Agency; 2002. p. 537–44.
25. Больцман, Л. Лекции по теории газов / Л. Больцман. – М.: Гостехиздат, 1953. – 235с.
26. Aristov VV. *Direct Methods for Solving the Boltzmann Equation and Study of Non equilibrium Flows*. Dordrecht: Kluwer; 2001. p. 298.
27. Yen SM. Numerical solution of the nonlinear Boltzmann equation for non-equilibrium gas flow problems. *Annu Rev Fluid Mech* 1984;16:67–97.
28. Bhatnagar PL, Gross EP, Krook M. A model for collision processes in gases. *Phys Rev* 1954;94(3):511–25.
29. Continuum equations in the dynamics of rarefied gases. *J Fluid Mech* 1959;6(Pt 4):523–41.
30. Шахов Е. М. Об обобщении релаксационного кинетического уравнения Крука // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1968. № 5. С. 142–145.
31. Е.М. Шахов. *Метод исследования движений разреженного газа*. – М.: Наука, 1975, 207 с.
32. Satofuka N, Morinishi K, Oishi T. Numerical solution of the kinetic model equations for hypersonic flow. *Comput Mech* 1993;11(5/6):452–64.
33. Titarev VA, Shakhov Ye M. Numerical calculation of the transverse hypersonic flow of a rarefied gas over a cold plate. *Izv Akad Nauk MZhG* 2005;5:139–54.
34. В.А. Рыков. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // *Изв. АН СССР, МЖГ*, 1975, №6, с.107-115; англ. пер.: V.A. Rykov. A model kinetic equation for a gas with rotational degrees of freedom // *Fluid Dynamics*, 1975, v.10, №6, p.959-966.
35. Жданов, В.М. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах / В.М. Жданов, М.Я. Алиевский. – М.: Наука, 1989. – 336 с.

- 36.Блохинцев, Д.И. Акустика неоднородной движущейся среды / Д.И.Блохинцев. – М.: Наука, 1981. – 206 с.
- 37.Титарев, В.А. Течение Пуазейля и термокрип в капилляре на основе кинетической R-модели / В.А.Титарев, Е.М.Шахов // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 2012. – № 5. – С. 114-125.
- 38.Черемисин, Ф.Г. Метод решения кинетического уравнения Больцмана для многоатомного газа / Ф.Г.Черемисин. // Ж. вычислит. матем. и матем. физ.. – 2012. – Т. 52. – № 2. – С. 270-287. Tcheremissin FG. Direct numerical solution of the Boltzmann equation. In: Proc. 24th Int. Symp. on Gas Dynamics, 2004. N.Y.: Amer. Inst. Phys.; 2005. p. 677–85.
- 39.Ю.А. Никитченко. Модели неравновесных течений. – М.: Изд-во МАИ, 2013, 160 с.; Yu.A. Nikitchenko. Modeli neravnovesnykh techenii. – М.: Izd-vo MAI, 2013, 160 s.
- 40.Ю.А. Никитченко. Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2017, том 57, № 11, с. 117–129; англ. пер.: Yu.A. Nikitchenko. Model Kinetic Equation for Polyatomic Gases // Computational Mathematics and Mathematical Physics, November 2017, Volume 57, Issue 11, pp 1843–1855.
- 41.Ларина, И.Н. Метод численного решения уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена / И.Н.Ларина, В.А.Рыков. // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12. – №6. – С. 109-125.
- 42.Ларина, И.Н. Исследование медленных течений однокомпонентного газа около кругового цилиндра / И.Н.Ларина, В.А.Рыков. // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 2008. – № 6. – С. 146-155.
- 43.Шевелев Ю. Д., Сызранова Н. Г., Кустова Е. В., Нагнибеда Е. А. Численные исследования гиперзвукового обтекания космических аппаратов при спуске в атмосфере Марса // Матем. моделирование. 2010. Т. 22. № 9. С. 23–50.
- 44.Josyula E., Bailey W. Governing equations for weakly ionized plasma flow fields of aerospace vehicles // J. Spacecraft and Rockets. 2003. V. 40. № 6. P. 845–857.

45. Colonna G., Armenise I., Bruno D., Capitelli M. Reduction of state-to-state kinetics to macroscopic models in hypersonic flows // *J. Thermophys. Heat Transfer*. 2006. V. 20. № 3. P. 477–486.
46. Бондарь Е. А., Шевырин А. А., Чен Й. С., Шумакова А. Н., Кашковский А. В., Иванов М. С. Прямое статистическое моделирование высокотемпературных химических реакций в воздухе // *Теплофизика и аэромеханика*. 2013. Т. 20. № 5. С. 561–573.
47. И.Н. Ларина, В.А. Рыков. Кинетическая модель уравнения Больцмана для двухатомного газа с вращательными степенями свободы // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 2010, т.50, №12, с.2233-2245;
англ. пер.: I.N. Larina, V.A. Rykov. Kinetic model of the Boltzmann equation for a diatomic gas with rotational degrees of freedom // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2010, v.50, №12, p.2118-2130.
48. Бишаев А. М., Рыков В. А. Построение системы кинетических уравнений для неидеального газа // *ТВТ*. 2017. Т. 55. № 1. С. 31–43.
49. Tantos C., Ghioldi G. P., Valougeorgis D., Frezzotti A. Effect of vibrational degrees of freedom on the heat transfer in polyatomic gases confined between parallel plates // *Intern. J. Heat and Mass Transfer*. 2016. V. 102. P. 162–173.
50. Черемисин Ф. Г. Решение кинетического уравнения для высокоскоростных течений // *Журн. Вычисл. матем. и матем. физ.* 2006. Т. 46. № 2. С. 329–343.
51. Arslanbekov R. R., Kolobov V. I., Frolova A. A. Kinetic solvers with adaptive mesh in phase space // *Phys. Rev. E*. 2013. P. 063301.
52. Wang Chang C. S., Uhlenbeck G. E. Transport phenomena in polyatomic gases. CM-681, Univ. Michigan Research Report, 1951.
53. Черемисин Ф. Г. Решение кинетического уравнения Ван Чанг–Уленбека // *Докл. РАН*. 2002. Т. 387. № 4. С. 1.
54. Аникин Ю. А., Додулад О. И. Решение кинетического уравнения для двухатомного газа с использованием дифференциальных сечений рассеяния, рассчитанных методом классических траекторий // *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.* 2013. Т. 53. № 7. С. 1193–1211.

55. Morse T. F. Kinetic model for gases with internal degrees of freedom // *Phys. Fluids*. 1964. V. 7. № 2. P. 159–169.
56. Holway, L.H. New statistical models in kinetic theory: methods of construction / L.H.Holway // *Phys. Fluids*. – 1966. – V. 3. – № 3.
57. Andries P., LeTallec P., Perlat J., Perthame B. The Gaussian — BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl number // *Eur. J. Mech. B — Fluids*. 2000. V. 19. P. 813–830.
58. Титарев В.А., Фролова А.А. Применение модельных кинетических уравнений для расчетов сверх- и гиперзвуковых течений молекулярного газа // *Изв. РАН. МЖГ*. 2018. № 4. С. 95-112.
59. Берд, Г. Молекулярная газовая динамика / Г.Берд.—М.: Мир, 1981. — 320 с.
60. Bird G. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press; 1994. p. 458.
61. Ivanov MS, Gimelshein SF. Computational hypersonic rarefied flows. *Annu Rev Fluid Mech* 1998;30:469–505.
62. Muntz EP. Rarefied gas dynamics. *Annu Rev Fluid Mech* 1989;21:387–417.
63. Belotserovskii OM, Yanitskii VYe. The statistical particles-in-cells method to solve problems of rarefied gas dynamics. II. Computational aspects of the method. *Zh Vychisl Mat Mat Fiz* 1975;15(6):1553–67.
64. Кириловский С.В., Маслов А.А., Поплавская Т.В., Цырюльников И.С.. Влияние колебательной релаксации на развитие возмущений в ударном слое на пластине // *Журнал технической физики*, 2015, вып. 5, стр. 12
65. Becker, M. Flow field and surface pressure measurements in the fully merged and transition flow regimes on a cooled sharp flat plate: *Rarefied Gas Dynamics, Suppl. 4, Vol. 2*, / M.Becker, D.E.Boyland; ed. by C.L. Brundin. – New York: Academic Press. 1967. Pp. 993-1014.
66. Tannehill, J.C. Numerical computation of the hypersonic rarefied flow near the sharp leading edge of a flat plate / J.C.Tannehill, R.A.Mohling, J.V.Rakich // *AIAA Paper*. – 1973. – №73-200. – Pp. 1-13.

67. Butler, T.D. Numerical Solutions of Hypersonic Sharp-Leading-Edge Flows / T.D. Butler // The Physics of Fluids. – 1967. – Vol. 10. – No. 6.. – Pp. 1205-1215.
68. Никитченко, Ю.А. Применение модели Навье–Стокса–Фурье к расчету гиперзвукового обтекания тонкой пластины / Ю.А. Никитченко // Вестник МАИ. – 2011. – Т. 18. – № 3. – С. 21-28.
69. Рыжов, Ю.А. Численное исследование гиперзвукового обтекания острой кромки на основе модели Навье–Стокса–Фурье / Ю.А. Рыжов, Ю.А. Никитченко, И.В. Парамонов // Электронный журнал Труды МАИ. – 2012. – № 55. – 9 с.
70. Егоров И. В., Ерофеев А. И. Исследование гиперзвукового обтекания плоской пластины на основе сплошнородного и кинетического подходов // Ученые записки ЦАГИ. 1997. №2.
71. Николаев К. В. Аэродинамические и тепловые характеристики обтекания затупленных тел разреженным газом. Канд. диссертация: М.: МФТИ - 1990.
72. Шершнёв Антон Алексеевич, Кудрявцев Алексей Николаевич, Бондарь Евгений Александрович Численное моделирование сверхзвукового течения газа около плоской пластины на основе кинетических и континуальных моделей // ЖВТ. 2011. №6.
73. Elizarova, T.G. & Graur, Irina & Chpoun, A. & Lengrand, Jean-Claude. (1995). Comparition of continuum and molecular approaches for rarefied gas flows.
74. Баранцев Р.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. – М.: Наука, 1975. – 343 с. Barantsev RG. The Interaction of Rarefied Gases with Streamlined Surfaces. Moscow: Nauka; 1975.
75. Латышев А.В., Юшканов А.А. Моментные граничные условия в задачах скольжения разреженного газа // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2004. № 2. С. 193-208.
76. Rarefied Supersonic Flow Interaction with Absorbing Surface. // 19-th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. Book of Abstracts. Oxford University. 1994
77. Supersonic Flow Interaction whit Absorbing Surface. // Proceedings of the 4-th International Seminar on Recent Research and Design in Aeronautical

- Engineering and Its Influence on Education. Part 1, pp. 138-142. Institute of Aeronautics and Applied Mechanics Warsaw University of Technology. 2001
- 78.N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou. A hybrid kinetic-fluid model for solving the gas dynamics Boltzmann-BGK equations // J. Comput. Phys., 2004, v.199, p.776-808.
- 79.П. Роуч. Вычислительная гидродинамика // Рипол Классик, 1980. 616 с.
- 80.Levermore, C.D. Moment closure hierarchies for kinetic theories / C.D.Levermore // J. Stat. Phys. – 1996. – Vol 83. – No 5/6. – Pp. 1021-1065.
- 81.N. Crouseilles, P. Degond, M. Lemou. A hybrid kinetic-fluid model for solving the Vlasov-BGK equations // Journal of Comput. Phys., 2005, v.203, p.572-601.
- 82.Никитченко Ю.А. О целесообразности учета коэффициента объемной вязкости в задачах газовой динамики // Изв. РАН. МЖГ. 2018. № 2. С. 128-138.
- 83.Welander P., Arkiv far Fysik 7, Hafte 6, 507 (1954).
- 84.H. Alsmeyer. Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // J. Fluid Mech. 1976. V. 74. Pt. 3. Pp. 497-513.
- 85.F. Robben, L. Talbot. Experimental study of the rotational distribution function of nitrogen in a shock wave // Phys. Fluids, 1966, v.9, №4, p.653-662.
- 86.O.I. Rovenskaya, G. Croce. Numerical simulation of gas flow in rough micro channels: hybrid kinetic–continuum approach versus Navier–Stokes // Microfluid Nanofluid (2016) 20:81.
- 87.В.С. Глинкина, Ю.А.Никитченко, С.А. Попов, Ю.А. Рыжов. О коэффициенте лобового сопротивления сорбирующей пластины, установленной поперек потока // Известия РАН. МЖГ. 2016. N 6. С. 77–84; англ.пер: V.S. Glinkina, Yu.A. Nikitchenko, S.A. Popov, Yu.A. Ryzhov. Drag Coefficient of an Absorbing Plate Set Transverse to a Flow // Fluid Dynamics, November 2016, Volume 51, Issue 6, pp 791–798.
- 88.Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А. Прикладная динамика разреженного газа. М.: Машиностроение, 1977

89. Richardson, S.. (2006). COUETTE FLOW. Atomization and Sprays - ATOMIZATION SPRAYS. c. 10.1615/AtoZ.c.COUFLO.
90. Golubkin, Valerii & Sizykh, Grigory. (2018). ON THE COMPRESSIBLE COUETTE FLOW. TsAGI Science Journal. 49. 10.1615/TsAGISciJ.2018026781.
91. Aristov, S. & Prosviryakov, Evgenii. (2014). Inhomogeneous Couette flow. Nelineinaya Dinamika. 177-182. 10.20537/nd1402004.
92. Isah, B.Y.. (2018). On a Couette Flow of Conducting Fluid. International Journal of Theoretical and Applied Mathematics. 4. 8. 10.11648/j.ijtam.20180401.12.
93. Lebiga, V. & Pak, A. & Zinovyev, V. & Mironov, D. & Medvedev, Alexey. (2019). Simulation of Couette flow in semicircular channel. AIP Conference Proceedings. 2125. 030017. 10.1063/1.5117399.
94. Wang, A. & Gelhar, Lynn. (1974). Turbulent Couette Flow. Journal of Fluids Engineering. 96. 265. 10.1115/1.3447150.
95. Karp, M. & Cohen, J.. (2014). Transition to turbulence in Couette flow. 54th Israel Annual Conference on Aerospace Sciences 2014. 1. 342-351.
96. А.И. Ерофеев. Исследование структуры ударной волны в азоте на основе траекторных расчетов взаимодействия молекул // Известия РАН, МЖГ, 2002, №6, с.134-147;
англ. пер.: A.I. Erofeev. Investigation of the Nitrogen Shock Wave Structure on the Basis of Trajectory Calculations of the Molecular Interaction // Fluid Dynamics, 2002, v.37, №6, p.970-982.
97. Флетчер, К. Вычислительные методы в динамике жидкостей: том 1 / К.Флетчер. – М.: Мир, 1991. – 502с.
98. Флетчер, К. Вычислительные методы в динамике жидкостей: том 2 / К.Флетчер. – М.: Мир, 1991. – 552с.
99. Е.Н.Бондарев, В.Т.Дубасов, Ю.А.Рыжов, С.Б.Свирщевский, Н.В.Семенчиков. Аэрогидромеханика // М.: Машиностроение, 1993.–608 с.
100. Ю. А. Никитченко, С. А. Попов, А. В. Тихоновец. “Комбинированная кинетико-гидродинамическая модель течения многоатомного газа” //

Матем. моделирование, 31:2 (2019), 18–32; англ.пер: Ju. A. Nikitchenko, S. A. Popov, A. V. Tikhonovets. “Composed kinetic-hydrodynamic model of polyatomic gas flow” // Matem. Mod., 31:2 (2019), 18–32

101. Nikitchenko Y., Popov S., Tikhonovets A. (2019) Special Aspects of Hybrid Kinetic-Hydrodynamic Model When Describing the Shape of Shockwaves. // Rodrigues J. et al. (eds) Computational Science – ICCS 2019. ICCS 2019. Lecture Notes in Computer Science, vol 11539. Springer, Cham

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

Системы координат

Основная система координат:

прямоугольная декартова система координат $0x_1x_2x_3$. Векторные и тензорные выражения записаны в индексной форме, соответствующей этой системе координат.

Операции

Интегралы по пространству молекулярных скоростей и пространству внутренних энергий молекул:

$$\int \dots d\bar{c} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots dc_1 dc_2 dc_3, \quad \int \dots d\bar{\xi} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$\int \dots d\bar{c} d\varepsilon \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dc_1 dc_2 dc_3 \int_0^{\infty} \dots d\varepsilon, \quad \int \dots d\bar{\xi} d\varepsilon \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \int_0^{\infty} \dots d\varepsilon.$$

Повторяющиеся греческие подстрочные индексы, используемые в одночленах, подразумевают суммирование от 1 до 3, например:

$$P_{\alpha\alpha} \equiv P_{11} + P_{22} + P_{33}.$$

Подстрочный символ “звездочка” обозначает суммирование одночленов по всем «различимым» перестановкам индексов («неразличимыми» считаются перестановки, различающиеся транспозицией индексов в пределах одного симметрического тензора), например:

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

Здесь $M^{(3)}$ – симметрический тензор третьего ранга. Полученная сумма представляет собой симметрический тензор. Таким образом, подстрочные звездочки обозначают операцию симметрирования с исключением повторений тождественных по значению членов. Количество звездочек в одночлене равно рангу тензорного уравнения.

Надстрочные и подстрочные символы

δ_{ij} – символ Кронекера.

X^+ (надстрочный символ) обозначает принадлежность величины (X) к процессу обратных столкновений молекул.

X^* (надстрочный символ) обозначает величину (X), приведённую к единичному отрезку.

X' (надстрочный символ) обозначает безразмерные величины (X).

X_∞ (подстрочный символ) используется для обозначения величины (X), относящейся к невозмущённому потоку.

$X^{[...]}$ надстрочные квадратные скобки обозначают номер приближения, соответствующего приближению процедуры Чепмена-Энскога, например: $q_i^{[1]}$ тепловой поток в гидродинамическом (первом) приближении.

Символы микроскопических величин

m_0 - масса молекулы.

$\xi_i = c_i + u_i$ - молекулярная, тепловая и групповая (макроскопическая) скорости.

ε - внутренняя энергия молекулы.

$f \equiv f(t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \varepsilon)$ - весовая функция, фазовое пространство, которой дополнено подпространством вращательной энергии молекулы ε .

$f_0 = \frac{n}{(2\pi RT_t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_t}\right)$ – равновесная функция распределения.

J_{down} – интеграл прямых столкновений.

$J_{reflect}$ – интеграл обратных столкновений.

τ – среднее время свободного пробега молекулы.

$\frac{1}{\tau^+}$ – средняя частота обратных столкновений молекул.

τ_p – время релаксации напряжений.

$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{RT}$ – средняя длина свободного пробега молекулы.

n_w – концентрация отраженных поверхностью молекул.

Символы макроскопических величин

n – концентрация молекул.

$\rho = m_0 n$ – плотность газа.

u_i – проекция вектора макроскопической скорости газа.

$P_{ij} = p_{ij} + \delta_{ij} p$ – тензор напряжений.

$T_{ij} = \frac{P_{ij}}{\rho R}$ – удельные напряжения.

p^m – «механическое» давление.

p – «термодинамическое» давление.

T_t – «поступательная» температура.

T_r – температура внутренних степеней свободы молекул.

$\theta = T_t - T_r$.

T – «термодинамическая» температура.

p_{ij}^m – компонент тензора неравновесных напряжений (механических).

p_{ij} – компонент тензора неравновесных напряжений (термодинамическая форма).

q_i – проекция вектора теплового потока.

φ_i – проекции вектора теплового потока, обусловленного только поступательным движением молекул.

ω_i – проекция вектора теплового потока, обусловленного переносом внутренней энергией молекул.

φ_{ijk} – моменты третьего порядка (по поступательным степеням свободы).

$\mu = \mu(T^s)$ – коэффициент вязкости.

s – свободный параметр модели.

h – свободный параметр модели, имеющий смысл отношения времени релаксации разности поступательной и вращательной температур к времени релаксации напряжений.

α – коэффициент поглощения поверхности.

Основные константы и критерии подобия

k – постоянная Больцмана.

c_p, c_v – изобарная и изохорная удельные теплоемкости.

$R = \frac{k}{m_0}$ – удельная газовая постоянная.

$\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ – показатель адиабаты.

Pr – число Прандтля.

M – число Маха.

Kn – число Кнудсена.

Аббревиатуры

NSF – модель Навье-Стокса-Фурье.

MKE – модельные кинетические уравнения.

BGK – кинетическая модель Бхатнагара-Гросса-Крука.

DSMC – метод прямого статистического моделирования Монте-Карло.

ES – эллиптическая статистическая модель.

WCU – уравнение, описывающее эволюцию функции распределения молекул, предложенное Ван-Чанг и Уленбеком.

ЦП – центральный процессор.

KHM – гибридная кинетико-гидродинамическая модель.

CFD – вычислительная гидродинамика.