

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

На правах рукописи



УДК 532.526.4:533.21:536.2

Янышев Дмитрий Сергеевич

**Математическое моделирование
высокоэнергетических потоков для теплового и
газодинамического проектирования в
аэрокосмической технике**

1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора технических наук

Научный консультант

д. т. н., доцент.

А.М.Молчанов

Москва – 2024

Оглавление

Введение	6
Глава 1. Современное состояние вопросов, касающихся моделирования высокоскоростных течений	16
Глава 2. Общая математическая модель высокоэнергетического газового потока	20
2.1. Запись основных уравнений в инвариантной форме	20
2.2. Уравнения математической модели потока химически нейтрального термически равновесного газа	30
2.3. Учет протекания химических реакций в потоке газа	36
2.4. Термические и переносные свойства газовой смеси	38
2.5. Проблема турбулентности в потоке газа	51
2.6. Выводы по главе	59
Глава 3. Численный метод решения уравнений, описывающих течение газа	61
3.1. Система уравнений	61
3.2. Конечно-объемное представление основной системы уравнений	64
3.3. Ограничители	86
3.4. Реализация переключающей функции ψ	88
3.5. Численный метод решения основной системы с жесткими источниками	89
Глава 4. Программная реализация численного метода	96
4.1. Особенности современных вычислительных систем	96
4.2. Общая архитектура и алгоритм работы программного кода Universe CFD	98

4.3.	Параллельные вычисления	104
4.4.	Выводы по главе	113
Глава 5.	Вторая вязкость и ее роль газовой динамике	115
5.1.	Подходы к оценке значимости второй вязкости в газовой динамике	115
5.2.	Общая трактовка второй вязкости	117
5.3.	Количественная оценка величины коэффициента второй вязкости .	119
5.4.	Результаты расчетов с учетом второй вязкости	123
5.5.	Выводы по главе	127
Глава 6.	Неравновесный энергетический обмен в газе	129
6.1.	Уравнение переноса колебательной энергии	131
6.2.	Другая форма уравнения колебательной энергии	134
6.3.	Уравнение полной энергии для колебательно неравновесного газа .	137
6.4.	Механизмы колебательного энергетического обмена	139
6.5.	Источник в уравнении колебательной энергии	142
Глава 7.	Перенос излучения в газе	147
7.1.	Физико-математическая модель оптических характеристик газо- вых потоков с учетом колебательной неравновесности	148
7.2.	Результаты расчетов	162
7.3.	Выводы по главе	174
Глава 8.	Метод расчета динамики разреженных газов	175
8.1.	Введение	175
8.2.	Уравнение Больцмана	177
8.3.	Следствия уравнения Больцмана	179
8.4.	Метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC)	181
8.5.	Квазигазодинамические уравнения	183
8.6.	Вывод квазигазодинамических уравнений	186

8.7.	Квазигазодинамические уравнения неразрывности компонентов газовой смеси	193
8.8.	Квазигазодинамические уравнения энергий для колебательно неравновесного газа	195
8.9.	Решение квазигазодинамических уравнений в двумерном случае .	200
8.10.	Результаты расчетов. Сравнение с экспериментом и результатами расчетов других авторов.	202
8.11.	Выводы по главе	225
Глава 9.	Моделирование турбулентности	226
9.1.	Двухмерный слой смешения несжимаемых жидкостей	226
9.2.	Алгебраические модели турбулентности	231
9.3.	Осредненная система уравнений для сжимаемого газа и основные допущения	232
9.4.	Двухпараметрические модели турбулентности	236
9.5.	Перенос напряжений Рейнольдса	255
9.6.	Граничные условия в моделях турбулентности	258
9.7.	Трехпараметрическая модель турбулентности для сжимаемых течений	267
9.8.	Выводы по главе	283
Глава 10.	Подходы к моделированию ламинарно-турбулентного перехода	284
10.1.	Ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое	284
10.2.	Подходы к определению устойчивости пограничного слоя	289
10.3.	Ламинарно-турбулентный переход при больших числах Маха	309
10.4.	Факторы воздействия на ламинарно-турбулентный переход	313
10.5.	Инженерная модель ламинарно-турбулентного перехода в высокоскоростном потоке	324

10.6. Выводы по главе	328
Глава 11. Применение разработанной методики в задачах внешнего об-	
текания	330
11.1. Обтекание сферы	330
11.2. Обтекание аппарата OREX	334
11.3. Обтекание аппарата Pioneer-Venus	348
11.4. Течение в донной области	352
Заключение	356
Список сокращений и условных обозначений	358
Список литературы	361
Приложение А. Вывод формул для скоростей колебательных энергетиче-	
ских переходов	384
Приложение Б. Вывод уравнения для турбулентной кинетической энер-	
гии и скорости диссипации	395
Б.1. Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии	395
Б.2. Несжимаемая жидкость	397
Б.3. Уравнение переноса диссипации	400

Введение

Современное развитие аэрокосмической техники, проблемы входа и спуска в атмосфере Земли и других планет вызывает необходимость исследования физических явлений и процессов, происходящих с различными газовыми средами как в самих летательных аппаратах, так и в окружающем их пространстве. Характер и скорость (характерное время) протекания этих процессов существенно изменяется с изменением высоты. Изменение соотношения скоростей (характерных времен) протекания различных физико-химических процессов в газе и газодинамической скорости (характерного времени) приводит к существенному отклонению от равновесного состояния.

К примеру, с точки зрения рассмотрения высокоэнергетических течений газа, земную атмосферу можно условно разделить на несколько областей по высоте:

- низкие высоты (до 20 км), где протекание физико-химических процессов во внешнем потоке газа можно считать равновесным;
- средние высоты (20-60 км), где во внешнем потоке может проявляться существенная химическая неравновесность (по реакциям диссоциации-рекомбинации во внешнем потоке), переходящая затем в химическую «замороженность», также существенный эффект может оказывать взаимное влияние друг на друга турбулентности потока и химических реакций, протекающих в нем;
- большие высоты (60-100 км), где химические реакции во внешнем потоке практически прекращаются, однако существенное влияние начинает оказывать термическая неравновесность, вызванная ростом характерных времен энергетического обмена между поступательными, колебательными и вращательными степенями свободы молекул газа, что вызывает необходимость выделения отдельных поступательной, колебательных и вращательных температур для описания теплового состояния газа;

- очень большие высоты (100-180 км), где начинает также существенно возрастать число Кнудсена и, как следствие нарушаться гипотеза сплошности.

Актуальность и степень разработанности темы исследования

В настоящее время хорошо отработанными являются методы моделирования течений газа для двух режимов по числу Кнудсена: сплошного и свободномолекулярного. В первом случае применяется механика сплошной среды, во втором - методы прямого моделирования Монте-Карло (Direct Monte-Carlo Simulation - DSMC). Проблематика переходного режима, когда гипотеза сплошности нарушается, но при этом газ еще слишком плотный, и применение методов DSMC слишком является ресурсоемким, проработана на сегодняшний день недостаточно.

В рамках исследования термически неравновесных течений следует отметить, что большинство практических расчетов на сегодняшний день до сих пор проводится в рамках т.н. «двухтемпературной» модели Ч.Парка, которую, несмотря на ее историческую значимость, трудно назвать физически достоверной. При этом с теоретической точки зрения термически неравновесные течения для чисел Кнудсена менее 0.01 (в рамках соблюдения гипотезы сплошности) являются относительно хорошо изученными. Вопросы о термической неравновесности в разреженных течениях (в особенности - на переходных режимах) исследованы мало.

Исследования в области турбулентности и ее возникновения проводятся достаточно давно. В рамках подходов, основанных на осреднении Рейнольдса-Фавра создано большое количество различных моделей. При этом вопросы применимости указанных подходов и учета эффектов, возникающих в высокоэнергетических потоках, с практической точки зрения проработаны недостаточно.

Перенос излучения в газовых средах - сложная с физической и вычислительной точки зрения задача. В настоящее время хорошо разработаны методы расчета излучения с применением аппроксимации Куртисса-Годсона (упрощенный под-

ход), а также методы расчета по спектральным линиям (ресурсоемкий подход). Эффективные методы расчета переноса излучения в термически неравновесных газах с ярко выраженным линейчатым спектром развиты недостаточно.

При этом не существует универсальной теории, описывающей все упомянутые эффекты и их взаимное влияние в совокупности (подробный анализ степени разработанности темы исследования представлен в первой главе диссертации).

Более того, существенная разница характерных времен протекания различных физико-химических процессов в газе приводит к существенным проблемам при численном решении уравнений модели (т.н. проблема численной жесткости), что требует применения специальных численных методов. Для общего случая данная проблема является не до конца разрешенной.

До настоящего времени не существует комплексных математических моделей, позволяющих *в рамках единого подхода* описывать течение потока в широком диапазоне высот с учетом термической и химической неравновесности, а также всей совокупности других факторов, влияющих на высокоэнергетический поток газа.

Объект исследования - высокоэнергетические потоки. Предметами исследования являются различные физические эффекты, возникающие в данных потоках при изменении режимных параметров, а именно: явления переноса в разреженном газовом потоке, термическая и химическая неравновесность, явление турбулентности и ее возникновение, излучение и его перенос в газовой среде.

Учет комплекса возможных изменяющихся с высотой факторов, влияющих на характеристики внутренних и внешних течений и их взаимного влияния позволит с большей степенью достоверности прогнозировать характеристики газового потока для последующего использования этих данных в тепловом и газодинамическом проектировании техники.

Изложенная проблема является фундаментальной и имеет высокую степень актуальности, так как ее решение позволит установить взаимосвязи различных физических процессов, их влияние друг на друга, создать математическую модель,

объединяющую в себе максимальное число значимых факторов и позволяющую прогнозировать возникновение различных явлений и эффектов в газовом потоке как в земной атмосфере, так и в атмосферах других планет.

Цели и задачи диссертационной работы Цель работы - создание средств математического моделирования высокоэнергетических термодинамически неравновесных потоков газа для произвольно высоких чисел Маха, любых режимов по числу Рейнольдса и диапазона чисел Кнудсена от 0 до 10. Для достижения данной цели были сформулированы и решены следующие задачи:

1. Составление физически корректной комплексной модели газового потока, учитывающей протекание неравновесных химических реакций, термическую неравновесность, переменность термических и переносных свойств газа в широком диапазоне высот. В рамках общей задачи поставлены и решены следующие вопросы:
 - 1.1. Корректный учет влияния объемной (второй) вязкости на структуру высокоэнергетического потока. Общетеоретические аспекты, связанные с влиянием второй вязкости на структуру течения рассматривались еще Дж. Стоксом и Л.Д.Ландау, однако практического применения эти выкладки не нашли. До настоящего времени большинством исследователей применяется гипотеза о нулевом значении данного параметра, которая с физической точки зрения справедлива лишь для одноатомных газов. При этом в современной молекулярно-кинетической теории предложены физически корректные модели расчета коэффициента второй вязкости.
 - 1.2. Учет нарушения гипотезы сплошности на больших высотах, внесение поправок в уравнения Навье-Стокса с целью расширения их применимости для математического моделирования термодинамически неравновесного высокоэнергетического потока газа.

- 1.3. Моделирование турбулентности с учетом существенной сжимаемости потока и неизотропности турбулентных характеристик.
 - 1.4. Моделирование переносных характеристик потока и прогнозирование местоположения ламинарно-турбулентного перехода.
2. Создание методики детального расчета переноса излучения в газе. Следует принимать во внимание, что во многих случаях проведение контактных измерений в потоках газа на больших высотах крайне затруднено или вообще невозможно. Воссоздание высотных условий в рамках стендовых наземных экспериментов также часто представляет существенные трудности. В этой ситуации при исследовании основную роль начинают играть бесконтактные измерения, и в первую очередь – измерения интенсивности излучения в газовом потоке. Учитывая это, для сопоставления расчетных данных, получаемых с помощью математического моделирования с данными экспериментальных исследований необходимо производить расчеты излучательных характеристик газового потока. В рамках данной общей задачи поставлены и решены следующие вопросы:
- 2.1. Построение эффективного метода расчета излучения для газов с линейчатым спектром в состоянии термической неравновесности.
 - 2.2. Разработка методики расчета излучения разреженного потока.
3. Создание и отработка алгоритма решения и составление расчетной программы для численного решения уравнений комплексной модели с учетом существенной численной жесткости уравнений.

Научная новизна.

1. Предложен новый эффективный полностью связанный неявный численный метод решения системы уравнений Навье-Стокса (Рейнольдса-Фавра) для расчета термически и химически неравновесных сверхзвуковых потоков,

в котором, в отличие от расщепления системы уравнений по физическим процессам, реализована специальная факторизация матриц, позволившая существенно ускорить процесс обращения матриц.

2. Предложена и реализована методика учета влияния второй вязкости в неравновесных высокоэнергетических потоках со сложной волновой структурой и показана важность ее учета для полетов на большой высоте.
3. Впервые предложена комплексная методика расчета термически неравновесных газовых потоков умеренной разреженности (число Кнудсена $0.01 < Kn < 10$) с произвольной геометрией течения, основанная на использовании квазигазодинамических (КГД) уравнений, в которые включены уравнения, учитывающие колебательную неравновесность.
4. Впервые проведен расчет высотных струй ДЛА (двигателя летательного аппарата) от 100 до 200 км земной атмосферы, основанный на решении полных систем уравнений Навье-Стокса и квазигазодинамических (КГД) уравнений, включающей уравнения для колебательных энергетических мод, а также учитывающих ненулевую вторую вязкость
5. Впервые разработана методика расчета неравновесного ИК излучения струй ДЛА на больших высотах, основанная на решении уравнения переноса излучения в термически неравновесном газе и методе k -распределения. Методика включает колебательно-вращательные энергетические переходы различных мод, использование специально построенной неравновесной функции Планка и излучательную дезактивацию колебательной энергии.
6. Предложена новая неизотропная трехпараметрическая модель турбулентного смешения, основанная на аналитически полученных зависимостях взаимодействия между крупномасштабными пульсациями давления и скорости деформации, что позволило получить более достоверное совпадение резуль-

татов расчета с экспериментальными данными для высокоэнергетических потоков.

7. Предложена новая упрощенная модель ламинарно-турбулентного перехода в высокоскоростных потоках, основанная на понятии перемежаемости.
8. Разработана новая вычислительная модель и программное обеспечение на языках Fortran 2018 и C для расчёта высокоэнергетических потоков с использованием неструктурированных сеток и распараллеливания на основе MPI и структуры данных DMPlex.

Теоретическая и практическая значимость.

В работе развиты различные направления математического моделирования высокоскоростных потоков в рамках механики сплошной среды: моделирование разреженных потоков, моделирование термической неравновесности, моделирование турбулентности и перехода к ней, моделирование переноса излучения в газе.

На основе предлагаемых подходов создана комплексная математическая модель, позволяющая учитывать различные факторы, влияющие на высокоскоростной поток и его взаимодействие с обтекаемыми телами. С помощью разработанной комплексной модели проведена серия вычислительных экспериментов, направленных на решение задач высокоскоростной аэрокосмической тематики. Вычислительные эксперименты показали, что важнейшую роль в решении этих задач играет учет неравновесности физико-химическими процессами. При этом, применение предлагаемой в работе комплексной модели и численных методов позволяет в отдельных случаях существенно увеличить точность расчетов (от 10%-15% до 4-5 раз).

Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для проведения теплового и газодинамического проектирования летательных аппаратов.

Материалы и результаты диссертации внедрены и используются в практической работе.

Методология и методы исследования. Результаты работы получены на основе методов математического моделирования. В исследованиях использованы подходы и методики механики сплошной среды, физической кинетики и элементы квантовой механики. Численное решение построено на основе метода конечных объемов в полностью связанной постановке.

Положения, выносимые на защиту. На защиту выносятся следующие результаты работы:

1. Методика расчета газотермодинамических и излучательных характеристик высокоэнтальпийного потока газа, а также количественных характеристик его взаимодействия с поверхностью обтекаемого тела в диапазоне чисел Маха от 0.3 и чисел Кнудсена от 0 до 10.
2. Сопоставление результатов расчётов, полученных с помощью разработанной методики с данными экспериментальных исследований высокоскоростных течений.
3. Численный метод решения связанной системы уравнений, описывающих химически и термически неравновесное течение газа с жёсткими источниками на произвольных геометриях.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность научных положений подтверждается использованием законов сохранения массы химических компонентов, количества движения и энергии, теории численных методов; всесторонним тестированием разработанных численных методов и алгоритмов, исследованием устойчивости и сходимости решений на последовательности сгущающихся сеток; сравнением результатов расчётов с экспериментальными данными и результатами расчётов других авторов.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

1. Международной конференции «Решетневские чтения», г.Красноярск 2009 [1].
2. XIV Международной конференции по теплообмену (ИТС14), США, август 2010 [2].
3. Международной конференции «Решетневские чтения», г.Красноярск, 2011 г. [3].
4. Шестой Российской национальной конференции по теплообмену, г. Москва, 27-31 октября 2014 [4].
5. XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2016), г. Алушта, 25-31 мая 2016 г. [5–7];
6. XV Минском международном форуме по тепло- и массообмену, г. Минск, 23-26 мая 2016 г. [8, 9];
7. XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и прикладным программным системам, г.Алушта, 23-26 мая 2016 г. [10];
8. Второй международной виртуальной конференции по новым технологиям в науке и технике ICMTES'17, Республика Индия, г.Андра Прадеш, 18-19 августа 2017 г. [11];
9. II Международной конференции «Математическое моделирование», г. Москва, 21-22 июля 2021 г. [12];
10. VIII международной конференции «Тепломассообмен и гидродинамика в закрученных потоках», октябрь 2021, г.Москва [13].
11. Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену, г. Москва, 17 - 22 октября 2022 года [14].

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 44 печатных работах, из них 4 учебных пособия [15–18], 2 монографии [19, 20], 17 статей в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендуемых ВАК, и приравненных к ним по научной специальности диссертации [21–37], 14 тезисов докладов на научных конференциях [1–14], 7 статей в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендуемых ВАК, по смежным научным специальностям [38–44].

Личный вклад автора. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 11 глав, заключения, списка обозначений, библиографии и 2 приложений. Общий объем диссертации 400 страниц. Библиография включает 237 наименований.

Глава 1

Современное состояние вопросов, касающихся моделирования высокоскоростных течений

Обозначенная во введении научная проблема является комплексной. Исследования по ней можно условно разделить на несколько основных направлений:

1. Традиционное математическое моделирование турбулентных течений со значительным набором химических реакций. Данное направление связано в первую очередь с численным решением системы уравнений, описывающих движение сжимаемого газа (уравнения Навье-Стокса) с добавлением уравнений неравновесной химической кинетики и уравнения переноса энергии. Данное направление зародилось начиная с появления первых серьезных ЭВМ и в настоящее время активно развивается вместе с развитием информационных технологий и вычислительной техники. В этом направлении можно выделить работы Р. Маккормака [45], Г. Кендлера [46, 47], Э.И. Виткина с соавторами [48]; работы А.В. Сафронова [49], А.В. Родионова [50]. Струйным течениям особое внимание уделено коллективом авторов под руководством С.М. Дэша [51–55].
2. Исследование и моделирование турбулентности. Турбулентность является одной из фундаментальных проблем физики в целом. Аспектам математического моделирования турбулентности в последние десятилетия посвящены работы Д.Уилкокса [56], Ф.Р.Ментера [57], А.Н.Секундова [58], П.Дарбина [59]. Вопросы турбулентности в сильно сжимаемых течениях исследовались Д.Уилкоксом [60] и С.Саркарсом [61]. Вопросы влияния турбулентности на скорость химических реакций в потоке газа рассматривались С.Гиримаджи [62], С.Поупом [63, 64], Р.Гафни [65].
3. Изучение газовых сред в условиях неравновесного энергетического обме-

на (термической неравновесности). Данное направление связано в первую очередь с изучением термических и переносных свойств газа в условиях отсутствия равновесного распределения по степеням свободы его молекул. Здесь следует в первую очередь отметить работы коллективов под руководством С.А. Лосева и С.Т. Суржикова, а также работы А.И. Осипова, А.В. Уварова, Дж.Блауэра, Дж.Никерсона. Данными авторами изучены и обобщены основные механизмы и модели протекания процессов неравновесного энергетического обмена в газах, построена иерархия кинетических моделей, исследованы и обобщены скорости энергетического обмена.

4. Изучение и моделирование высокоскоростных потоков газа с учетом термической неравновесности. Данное направление объединяет в себе традиционное моделирование течения газовой смеси с учетом дополнительных физических эффектов, вызываемых термической неравновесностью. Здесь необходимо отметить фундаментальную работу Ч.Парка [66, 67], предложившего, в частности, одну из широко применяемых на практике до сих пор моделей – т.н. двухтемпературную модель термически неравновесного газа, а также работы С.Т. Суржикова [68], Э.А. Ашратова [69], Г.Кендлера [70], Р.Н. Гупты с соавторами [71]. Авторами проведены расчеты различных течений термически неравновесного газа при больших скоростях в рамках гипотезы сплошной среды.
5. Исследование законов и разработка методик расчета распространения излучения в газе. К настоящему моменту развиты различные упрощенные и более детальные методы расчета излучения в газах. Упрощенные методы расчета излучения с применением аппроксимации Куртисса-Годсона развиты в работах коллектива под руководством Ф.С.Завелевича [72]. Вопросам излучения газов посвящены монографии С.Т.Суржикова [73]. Методам расчета излучения газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра посвящены работы под руководством М.Ф.Модеста [74, 75] и Т.Озавы [76].

6. Моделирование течения разреженного газа. Расчет течений газа на больших высотах представляет серьезную проблему. В основном, это связано с нарушением условия сплошности разреженной среды и ярко выраженной неравновесностью между различными энергетическими модами. Если в качестве параметра, определяющего разреженность применить число Кнудсена (соотношение средней длины свободного пробега молекул с характерным линейным размером течения), то течения условно можно разделить на течение сплошной среды ($Kn < 0.01$), переходный участок ($0.01 < Kn < 10$) и свободно-молекулярное течение ($Kn > 10$), в котором столкновения между молекулами практически отсутствуют. На сегодняшний день хорошо развиты подходы к моделированию течений на основе механики сплошной среды ($Kn < 0.01$) и подход на основе прямого численного моделирования молекулярной динамики методом Монте-Карло DSMC, который хорошо подходит для молекулярных течений ($Kn > 10$), но слишком затратен для переходной области ($0.01 < Kn < 10$). С этой целью группой ученых Института прикладной математики под руководством Б.Н. Четверушкина была предложена концепция т.н. квазигидродинамических уравнений (КГД) [77]. Принципиальным и существенным отличием КГД подхода от теории Навье–Стокса явилось использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин - плотности, скорости, температуры и т.п. Данный подход был в дальнейшем развит Ю.В.Шеретовым и Т.Г.Елизаровой и применен для расчета отдельных задач о течениях газов и жидкостей. Обобщение результатов данной работы было приведено Т.Г.Елизаровой в монографии [78].

Существенный объем исследований по указанным направлениям был проведен в Московском авиационном институте группой под руководством А.М. Молчанова с участием автора. Группой проводились исследования высокоэнергетических химически реагирующих струй, предложена трехпараметрическая модель

турбулентности $k - \epsilon - V_n$, для свободных течений, учитывающая влияние сжимаемости газа на диссипацию турбулентной энергии и анизотропные эффекты. Созданы математические модели и разработаны расчетные программы на базе полной и параболизированной системы уравнений Навье-Стокса для моделирования свободных высокоскоростных течений методом конечных объемов на структурированных сетках.

Глава 2

Общая математическая модель высокоэнергетического газового потока

Рассмотрение вопросов обеспечения НИР и ОКР в области аэрокосмической техники современными средствами теплового и газодинамического проектирования необходимо начать с основы, а именно - формулировки базовой математической модели высокоэнергетического потока.

2.1. Запись основных уравнений в инвариантной форме

Одним из наиболее важных вопросов при рассмотрении математических моделей и построении инструментария моделирования является вопрос перехода из одной системы координат в другую.

Уравнения математической модели газового потока содержат скалярные, векторные и тензорные величины, а также их первые и вторые производные.

Для ряда систем координат (цилиндрическая, сферическая и т.д.) существуют общеизвестные формулы преобразования. Однако подчас возникает необходимость использования произвольных систем координат.

Общие подходы к изменению системы координат разработаны в рамках линейной алгебры и тензорного анализа.

2.1.1. Скалярное произведение и компоненты вектора в произвольном неортогональном базисе

Одним из базовых понятий, на котором построены дальнейшие выкладки, является понятие скалярного произведения. В данном случае используется классическое определение скалярного произведения (см., например, [79]).

Рассмотрим некоторый вектор a и определим его координаты по отношению

к некоторой тройке векторов $\{e_1, e_2, e_3\}$. Условимся называть данные векторы базисными. Найдем разложение вектора \mathbf{a} на компоненты базисных векторов:

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^3 \alpha^i \mathbf{e}_i \quad (2.1)$$

где α^i - некоторые пока неопределенные коэффициенты (индексы i не подразумевают возведения в степень).

Для этого поочередно скалярно умножим обе части уравнения (2.1) на векторы \mathbf{e}_j ($j = 1, 2, 3$):

$$(\mathbf{a}, \mathbf{e}_j) = \left(\sum_{i=1}^3 \alpha^i \mathbf{e}_i \right) \cdot \mathbf{e}_j$$

В силу линейности операции скалярного умножения получим:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^3 \alpha^i (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) \quad (2.2)$$

Если базисные векторы $\{e_1, e_2, e_3\}$ взаимно ортогональны (т.е. $e_i e_j = 0$ при $i \neq j$), а их длина равна единице (т.е. рассматриваемый базис *ортонормирован*), то выражение (2.2) упрощается:

$$\alpha^i = (\mathbf{a}, \mathbf{e}_j) \quad (2.3)$$

В случае, когда базис $\{e_1, e_2, e_3\}$ не является ортонормированным (векторы базиса пересекаются под произвольными углами, их длины не равны единице), то задача сводится к решению следующей линейной системы уравнений:

$$\mathbf{G}\alpha = \mathbf{b} \quad (2.4)$$

где $\mathbf{G} = \begin{pmatrix} (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1) & (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) & (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3) \\ (\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1) & (\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2) & (\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \\ (\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_1) & (\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_2) & (\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_3) \end{pmatrix}$ — матрица Грама или *метрика*;
 $\alpha = [\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3]^T$ - компоненты вектора \mathbf{a} ;

$\mathbf{b} = [(\mathbf{a}, \mathbf{e}_1), (\mathbf{a}, \mathbf{e}_2), (\mathbf{a}, \mathbf{e}_3)]^T$ - вектор, содержащий скалярные произведения вектора \mathbf{a} на векторы базиса.

Таким образом, пользуясь понятием скалярного произведения, можно определить коэффициенты разложения (компоненты) вектора в произвольном базисе. При этом принято, что данные коэффициенты (компоненты) обозначаются той же буквой, что и сам вектор ($\alpha^i \equiv a^i$).

Для дальнейших выкладок удобнее пользоваться системой обозначений, принятых в тензорном исчислении:

- компоненты векторов и тензоров обозначаются через латинские или греческие индексы, которые по умолчанию пробегают значения от 1 до N (где N - размерность пространства);
- нижний индекс определяет т.н. *ковариантные* компоненты, т.е. компоненты меняющиеся по закону, совпадающему с законом, по которому изменяются компоненты;
- верхний индекс обозначает *контравариантные* компоненты, т.е. компоненты, меняющиеся по обратному закону по сравнению с законом изменения компонент базиса;
- по паре повторяющихся индексов (одного верхнего и одного нижнего) производится суммирование, знак суммы при этом опускается (т.н. правило Эйнштейна).

Проиллюстрируем запись уравнения (2.4) с помощью тензорной нотации. Предварительно введем следующее обозначение:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{e}_k) = a_k \quad (2.5)$$

Компоненты a_k называются ковариантными компонентами вектора и обозначаются, в соответствии с указанными выше правилами, с помощью нижних индексов. Ковариантные компоненты a_k наряду с контравариантными компонентами

a^i представляют собой альтернативный способ разложения вектора, представляя собой по сути ортогональную проекцию вектора на базисные векторы. Нетрудно убедиться (см., например, [80]), что закон изменения ковариантных компонент соответствует закону изменения базиса.

Учитывая изложенное, формула (2.4) запишется в виде:

$$a^i g_{ik} = a_k \quad (2.6)$$

где g_{ik} — метрический тензор, компоненты которого представляются матрицей Грама ($g_{ik} = e_i e_k$).

Формула (2.6) выражает соотношение между контравариантными и ковариантными компонентами вектора. При этом очевидно, что в ортонормированном базисе контравариантные и ковариантные компоненты совпадают друг с другом по величине, поскольку в данном случае метрический тензор представлен единичной матрицей.

Помимо основного базиса в тензорном исчислении оперируют также вспомогательным, взаимным базисом. Для иллюстрации этого понятия рассмотрим скалярное произведение двух векторов, записанное с помощью их компонент в базисе $\{e_1, e_2, e_3\}$:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (a^1 e_1 + a^2 e_2 + a^3 e_3) (b^1 e_1 + b^2 e_2 + b^3 e_3) = a^j g_{ij} b^i \quad (2.7)$$

Как видно из данного уравнения, выражение для скалярного произведения получается в общем случае весьма громоздким (оно включает в себя 9 компонентов). Для упрощения уравнения (2.7) запишем вектор \mathbf{b} с помощью разложения во вспомогательном базисе $\{e^1, e^2, e^3\}$, векторы которого взаимно ортогональны и обратны по величине векторам основного базиса $\{e_1, e_2, e_3\}$, т.е. $e_i e^j = \delta_i^j$ ¹. Тогда будем иметь следующее выражение для скалярного произведения:

¹ В тензорном исчислении вводится специальный тензор δ_i^j , называемый символом Кронекера. Все компоненты данного тензора равны нулю, за исключением компонентов, у которых $i = j$ - данные компоненты равны 1

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (a^1 \mathbf{e}_1 + a^2 \mathbf{e}_2 + a^3 \mathbf{e}_3) (b_1 \mathbf{e}^1 + b_2 \mathbf{e}^2 + b_3 \mathbf{e}^3) = a^j b_j \quad (2.8)$$

При этом, согласно формуле (2.6), $g_{ij} b^i = b_j$, т.е. с помощью ковариантных компонент можно получить разложение вектора во взаимном базисе.

2.1.2. Криволинейные координаты

Изложенные выше положения справедливы в случае, когда система координат задана прямолинейными координатами. В этом случае метрический тензор во всех точках пространства одинаков. Однако это не так в случае, когда координатные линии - кривые. Тем не менее, приведенные выше выкладки можно достаточно легко экстраполировать на случай криволинейных координат. Продемонстрируем это.

Для этого рассмотрим некоторую произвольную систему координат q^k . Допустим существуют функции f^i , однозначно связывающие декартовы координаты точки x^i (компоненты радиус-вектора \mathbf{r} точки) с координатами q^k :

$$x^i = f^i(q^k)$$

или в форме радиус-вектора \mathbf{r} точки -

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(q^1, q^2, q^3)$$

Дифференцирование вектора \mathbf{r} по координатам q^k в некоторой точке в результате даст систему векторов, касательных к координатным линиям $q^k = const$ в данной точке:

$$\mathbf{e}_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i} \quad (2.9)$$

Данные векторы называют локальным базисом. Пользуясь данным понятием, можно определить компоненты вектора в любой точке пространства в криволинейной системе координат.

В компонентной форме совокупность векторов локального базиса (2.9) представляет собой матрицу Якоби:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial x^i}{\partial q^k} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x^1}{\partial q^1} & \frac{\partial x^1}{\partial q^2} & \frac{\partial x^1}{\partial q^3} \\ \frac{\partial x^2}{\partial q^1} & \frac{\partial x^2}{\partial q^2} & \frac{\partial x^2}{\partial q^3} \\ \frac{\partial x^3}{\partial q^1} & \frac{\partial x^3}{\partial q^2} & \frac{\partial x^3}{\partial q^3} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Учитывая формулы (2.4), (2.6) и (2.10), ковариантные компоненты метрического тензора определяется следующим образом:

$$g_{ij} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^i} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^j} = \frac{\partial x^k}{\partial q^i} \frac{\partial x^l}{\partial q^j} \tilde{g}_{kl} \quad (2.11)$$

Воспользовавшись определением взаимного базиса, данным ранее, получим выражение для контравариантных компонент метрического тензора:

$$g^{ij} = (\nabla q^i) (\nabla q^j) = \frac{\partial q^i}{\partial x^k} \frac{\partial q^j}{\partial x^l} \tilde{g}^{kl} \quad (2.12)$$

В данных уравнениях под \tilde{g}_{kl} и \tilde{g}^{kl} понимаются компоненты метрического тензора в изначальной системы координат (в рассматриваемом случае - декартовой системы координат x^i)².

Как уже отмечалось выше, в произвольной системе координат метрический тензор не является постоянной величиной. Учитывая это, следует обратить особое внимание при вычислении производных. Для примера рассмотрим производную от вектора \mathbf{a} в произвольной системе координат q^j .

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial q^j} = \frac{\partial}{\partial q^j} (a^i \mathbf{e}_i) = \frac{\partial a^i}{\partial q^j} \mathbf{e}_i + a^i \frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial q^j} \quad (2.13)$$

Во втором члене в данного выражения присутствует совокупность из 9 векторов $\frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial q^j}$. Каждый из векторов данной совокупности можно представить в виде

² Иногда в литературе вместо обозначений \tilde{g}_{kl} и \tilde{g}^{kl} применяют обозначения δ_{kl} и δ^{kl} соответственно, поскольку метрический тензор в декартовой системе координат представляется единичной матрицей. Данное обозначение представляется не слишком удачным, поскольку для систем координат, отличных от декартовой, компоненты объектов δ_{kl} и δ^{kl} уже не соответствуют единичной матрице.

разложения по векторам базиса [80]. Таким образом каждый i -ый вектор базиса, продифференцированный по j -ой координате, может быть представлен как сумма векторов базиса $\{e_1, e_2, e_3\}$ с некоторыми коэффициентами $\Gamma^1, \Gamma^2, \Gamma^3$ (для каждой пары сочетаний i и j эти коэффициенты будут отличаться). Этот факт отражен в следующей формуле:

$$\frac{\partial e_i}{\partial q^j} = \Gamma_{ij}^k e_k \quad (2.14)$$

где Γ_{ij}^k — символы Кристоффеля второго рода.

Значение Γ_{ij}^k зависит от выбранной системы координат.

Путем дифференцирования метрического тензора можно после преобразований прийти к следующей формуле для определения значений символов Кристоффеля:

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{km} \left(\frac{\partial g_{mj}}{\partial q^i} + \frac{\partial g_{im}}{\partial q^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^m} \right) \quad (2.15)$$

В результате уравнение (2.13) запишется следующим образом:

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial q^j} = \left(\frac{\partial a^m}{\partial q^j} + a_i \Gamma_{ij}^m \right) \mathbf{e}_m = (\nabla_j a^m) \mathbf{e}_m \quad (2.16)$$

где ∇_j — ковариантная производная.

Следует отметить важные свойства символов Кристоффеля (см. [81]):

1. Символы Кристоффеля симметричны по нижним индексам, т.е.:

$$\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ji}^k \quad (2.17)$$

2. Свертка символов Кристоффеля по одному верхнему и одному нижнему индексу связана с определителем матрицы Якоби J и определителем метрического тензора g следующим образом:

$$\Gamma_{ij}^j = \Gamma_{ji}^j = \frac{1}{J} \frac{\partial J}{\partial q^i} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial q^i} \quad (2.18)$$

2.1.3. Замечание о тензорах

До настоящего момента рассматривались исключительно преобразования компонент векторных величин. Тем не менее, векторы являются лишь одним из видов более обобщенных объектов, а именно - тензоров.

Тензоры классифицируются по рангам. Ранг тензора зависит от количества компонент, необходимых для его описания. Вектор является тензором 1 ранга, поскольку имеет 3 компоненты (в случае трехмерного пространства). Тензор 2 ранга описывается уже девятью компонентами (примером такого тензора может служить метрический тензор). Тензор ранга m - N^m компонент (где N - размерность пространства).

Более наглядно о ранге можно судить по количеству индексов у рассматриваемого объекта (у вектора - один, у тензора 2 ранга - два, и т.д.).

По определению, тензор ранга m представляет собой математический объект, инвариантный относительно преобразования координат:

$$T^{ijk\dots r} e_1 e_2 \dots e_m = T'^{ijk\dots r} e'_1 e'_2 \dots e'_m \quad (2.19)$$

При этом надо четко отделять понятие компонентов тензора ($T^{ijk\dots r}$) и самого тензора. Компоненты тензора зависят от выбранной системы координат и преобразуются по определенному закону, при этом сам тензор, как уже указывалось выше, инвариантен относительно преобразования координат.

Тензор, как и вектор, может быть описан с помощью контравариантных и ковариантных компонентов (обозначаются аналогично - верхними и нижними индексами соответственно).

Приведем здесь общее правило вычисления ковариантной производной для компонентов произвольного тензора. Для начала рассмотрим тензор третьего ранга, представленный компонентами вида C_{jk}^i .

Используя подход, изложенный ранее (см. формулы (2.13), (2.14)), можно

прийти к следующему выражению:

$$\nabla_m C_{jk}^i = \frac{\partial C_{jk}^i}{\partial q^m} + \Gamma_{mn}^i C_{jk}^n - \Gamma_{mj}^n C_{nk}^i - \Gamma_{mk}^n C_{jn}^i \quad (2.20)$$

Исходя из данной формулы, общее правило можно сформулировать следующим образом: ковариантная производная для произвольных компонент тензора вычисляется как сумма производной от компонент тензора по криволинейным координатам и свертки данных компонент с символами Кристоффеля по каждому из индексов поочередно, причем свертки по верхним (контравариантным) индексам берутся с положительным знаком, а по нижним (ковариантным) индексам - с отрицательным.

2.1.4. Дифференциальные операторы в произвольной системе координат

Для записи уравнений математической модели в инвариантной форме целесообразно сначала рассмотреть форму записи основных дифференциальных операторов, применяемых в данных уравнениях, а именно операторов градиента grad , и дивергенции div .

Градиент и дивергенция определяются через векторный оператор набла ∇ , который представляет собой условный вектор со следующими компонентами:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q^i} \right) e^i \quad (2.21)$$

При умножении оператора набла на скалярную функцию координат по определению получится градиент данной функции:

$$\nabla \varphi = \text{grad } \varphi = (\nabla_i \varphi) e^i = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^i} \right) e^i \quad (2.22)$$

Умножение оператора набла на вектор (тензор) в результате дает градиент вектора (тензора), который представляет собой тензор более высокого ранга, чьи компоненты совпадают с компонентами ковариантной производной (именно поэтому компоненты ковариантной производной обозначаются как ∇_i).

Например, для вектора \mathbf{a} , выраженного контравариантными компонентами:

$$\nabla \mathbf{a} \equiv \nabla \otimes \mathbf{a} = \left(\frac{\partial a^j}{\partial q^i} \mathbf{e}_j \right) \mathbf{e}^i = \nabla_i a^j \mathbf{e}^i \mathbf{e}_j \quad (2.23)$$

Скалярное умножение оператора набла на вектор (тензор) представляет собой операцию дивергенции (с точки зрения компонент, данная операция представляет собой свертку соответствующих компонент тензора с компонентами ковариантной производной).

С учетом формулы (2.18), дивергенция вектора \mathbf{a} может быть записана следующим образом:

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \nabla_i a^i = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial (\sqrt{g} a^i)}{\partial q^i} \quad (2.24)$$

2.1.5. Физические компоненты тензора

Классическое разложение вектора по компонентам базиса обычно предполагает, что векторы базиса $\hat{\mathbf{e}}_i$ - нормированные и не имеют физической размерности (такие векторы обычно обозначаются знаком «»)³:

$$\hat{\mathbf{e}}_i = \frac{\mathbf{e}_i}{|\mathbf{e}_i|} = \frac{\mathbf{e}_i}{\sqrt{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i}} = \frac{\mathbf{e}_i}{\sqrt{g_{ii}}} \quad (2.25)$$

Ранее в выкладках требование о нормировке базисных векторов не предъявлялось. Таким образом, компоненты векторов и тензоров, рассмотренные выше, отражают значения объектов в масштабе соответствующих базисных векторов \mathbf{e}_i , которые в общем случае имеют определенную размерность и длину, отличную от 1.

Компоненты разложения векторов и тензоров в нормированном базисе $\hat{\mathbf{e}}_i$ называют физическими компонентами. Для физических компонент вектора можно получить следующие формулы [3]³:

³ Суммирование по i не производится, поскольку оба индекса - нижние.

$$\begin{aligned}\hat{a}^i &= \sqrt{g_{ii}}a^i = \frac{a^i}{\sqrt{g^{ii}}} \\ \hat{a}_i &= \sqrt{g^{ii}}a_i = \frac{a_i}{\sqrt{g_{ii}}}\end{aligned}\quad (2.26)$$

Аналогично с компонентами тензоров любого ранга:

$$\begin{aligned}\hat{T}^{i,j\dots s} &= \sqrt{g_{ii}}\sqrt{g_{jj}}\dots\sqrt{g_{ss}}T^{i,j\dots s} \\ \hat{T}_{i,j\dots s} &= \sqrt{g^{ii}}\sqrt{g^{jj}}\dots\sqrt{g^{ss}}T_{i,j\dots s}\end{aligned}\quad (2.27)$$

Следует иметь в виду, что, исходя из определения оператора набла, операцию градиента вектора также можно представить с помощью физических компонент:

$$\text{grad } \varphi = \frac{1}{\sqrt{g_{ii}}} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^i} \right) e^i \quad (2.28)$$

2.2. Уравнения математической модели потока химически нейтрального термически равновесного газа

2.2.1. Обобщенное уравнение переноса. Уравнения переноса основных физических величин

В данном разделе приводится инвариантная форма записи системы уравнений, описывающих движение потока сжимаемого газа. Данная система основана на законах сохранения массы, количества движения и энергии. Уравнения выводятся исходя из общего принципа баланса физических величин в некотором объеме с последующим переходом к рассмотрению величин в точке. Физическая величина в объеме может изменяться посредством потоков данной величины через поверхность объема, а также - за счет внутренних источников.

Потоки физической величины через поверхность объема связаны с изменением данной величины внутри объема через теорему Остроградского-Гаусса. Данную теорему для некоторой произвольной векторной величины а можно записать следующим образом (использована векторная и тензорная нотация):

$$\int_S \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \operatorname{div} \mathbf{a} dV$$

$$\int_S a^i n_i dS = \int_V \nabla_i a^i dV$$
(2.29)

Используя формулу (2.29), для некоторой функции координат и времени $f(t, q^i)$ можно также получить следующее соотношение (причем f может быть как скаляром, так и вектором или тензором):

$$\frac{d}{dt} \int_V f dV = \int_V \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_i (f u^i) \right] dV$$
(2.30)

где u^i — компоненты вектора скорости.

Произведение $f u^i$ представляет собой конвективный поток величины f , т.е. перенос величины f за счет внешней скорости потока u^i .

Основная система уравнений, получаемая исходя из вышеуказанных принципов, выражает собой законы сохранения массы, количества движения и энергии. Для химически реагирующих потоков дополнительно рассматривается закон сохранения химических компонент. Для термически неравновесных течений - законы сохранения для различных видов молекулярной энергии.

Уравнения данной системы называются уравнениями переноса. Искомые величины в данных уравнениях - удельные, приведенные к единице объема (это следует из тех принципов, на основе которых уравнения выводятся). Таким образом, для уравнения неразрывности (закона сохранения массы) такой величиной будет плотность ρ , для уравнения количества движения - величина ρu^i , для уравнения энергии - полная энергия газа в единице объема $E = e + \frac{u^i u_i}{2} = e + \frac{g_{ij} u^i u^j}{2}$ и т.д.

Уравнения переноса имеют следующую форму:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \nabla_j (\Phi^j - f u^j) + R$$
(2.31)

где Φ - поток величины f , R - объемный источник.

Причем ранг Φ всегда выше ранга f на единицу, т.е. если f - скаляр, то Φ - вектор, если f - вектор, то Φ - тензор второго ранга и т.д.

Поскольку плотность потока переносится только посредством конвекции, в уравнении неразрывности $\Phi = 0$. Объемные источники массы как правило внутри потока отсутствуют, поэтому $R = 0$. Таким образом, уравнение неразрывности будет иметь вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla_j (\rho u^j) \quad (2.32)$$

В уравнении количества движения в качестве Φ выступают поверхностные силы, действующие на произвольный объем жидкости. Как уже говорилось выше, Φ в данном случае будет выражаться тензором второго ранга. Обозначим компоненты данного тензора как σ^{ij} . Источник R для данного уравнения объемная сила, которую принято выражать как ρX^j :

$$\frac{\partial (\rho u^i)}{\partial t} = \nabla_j \Pi^{ij} + \rho X^j = \nabla_j (\sigma^{ij} - \rho u^i u^j) + \rho X^j \quad (2.33)$$

Вид тензора σ^{ij} зависит от внутренних свойств жидкости.

Данный тензор принято разлагать на две составляющие, исходя из природы действующих поверхностных сил. Он складывается из суммы напряжений, возникающих в жидкости за счет давления p , и вязких напряжений τ^{ij} [81]:

$$\sigma^{ij} = -p g^{ij} + \tau^{ij} \quad (2.34)$$

Наиболее часто для вязких напряжений применяется модель т.н. ньютоновской жидкости. В этой модели вязкие напряжения линейно пропорциональны градиенту скорости (а точнее, его симметричной части - тензору скоростей деформаций). В самой общей форме тензор вязких напряжений имеет следующий вид:

$$\tau^{ij} = 2\mu S_{mn} g^{im} g^{jn} + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu \right) g^{ij} \nabla_m u^m \quad (2.35)$$

где $S_{mn} = \frac{1}{2} (\nabla_m u_n + \nabla_n u_m)$ — тензор скоростей деформаций, μ — динамический коэффициент вязкости, ζ — коэффициент второй вязкости.

Обычно для коэффициента второй вязкости применяется гипотеза Стокса, согласно которой $\zeta = 0$. Молекулярно кинетическая теория показывает, что для одноатомного газа это гипотеза справедлива всегда [82]. Тем не менее, есть случаи, когда коэффициент ζ отличен от нуля и даже превышает по своему значению коэффициент μ [83, 84]. Примеры таких случаев - течение разреженного газа, течение в непосредственной близости от скачка уплотнения и др. Например, в работах [85, 86] вторая вязкость используется для корректного моделирования взаимодействия турбулентности со скачком уплотнения.

При этом необходимо отметить, что корректных экспериментальных методов измерения второй вязкости в настоящий момент практически не существует [82] и можно лишь приближенно теоретически оценить его величину.

В уравнении энергии в качестве Φ выступают тепловые потоки Q^j через поверхность объема, а также работа поверхностных сил, действующих на объем в единицу времени. В качестве R выступает работа объемных сил X^j и объемное тепловыделение \tilde{Q}_V ⁴:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = \nabla_j [u^k \tau^{ij} g_{ik} - u^j (p + \rho E) - Q^j] + \rho X^j u^k g_{jk} + \tilde{Q}_V \quad (2.36)$$

где слагаемое $(p + \rho E)$ представляет собой полную энтальпию потока ρH .

При необходимости уравнение (2.36) можно записать относительно H , сделав замену $E = H - \frac{p}{\rho}$. Тогда (2.36) запишется следующим образом:

$$\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \nabla_j [u^k \tau^{ij} g_{ik} - u^j \rho H - Q^j] + \frac{\partial p}{\partial t} + \rho X^j u^k g_{jk} + \tilde{Q}_V \quad (2.37)$$

⁴ Для удобства вычислительной реализации уравнение записывается исключительно относительно контравариантных компонент. При необходимости, уравнение можно упростить, используя формулу опускания индексов (2.6)

2.2.2. Система уравнений для потока газа в матричной форме для произвольной системы координат

Для реализации алгоритма решения системы уравнений (2.32), (2.33) и (2.36)⁵ удобно записать относительно вектора \mathbf{U} , чьи элементы представляют собой все величины, описывающие движение газа:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u^1 \\ \rho u^2 \\ \rho u^3 \\ \rho E \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

Как уже говорилось выше, структура всех уравнений системы - одинаковая и соответствует обобщенному уравнению переноса (2.31). Для объединения уравнений в обобщенное матричное уравнение необходимо раскрыть ковариантную производную ∇_j . В уравнениях (2.32) и (2.36) производная берется исключительно по контравариантным компонентам векторов, поэтому для ее представления возможно использовать формулу (2.24). В уравнении (1.33) производная берется от контравариантных компонент тензора второго ранга. Компоненты такой производной вычисляются по общему правилу (2.20), однако окончательное выражение можно упростить, воспользовавшись формулой (2.18):

$$\nabla_j \Pi^{ij} = \frac{\partial \Pi^{ij}}{\partial q^j} + \Gamma_{jm}^j \Pi^{im} + \Gamma_{mj}^i \Pi^{mj} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial (\sqrt{g} \Pi^{ij})}{\partial q^j} + \Gamma_{jm}^i \Pi^{jm} \quad (2.39)$$

В результате система уравнений в матричной форме будет иметь вид:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial (\sqrt{g} \mathbf{F}^j)}{\partial q^j} + \mathbf{G}_j \mathbf{F}^j = \mathbf{R} \quad (2.40)$$

⁵ В настоящем разделе для удобства рассматриваются только 3 основных уравнения математической модели потока газа, остальные уравнения при необходимости добавляются в систему по аналогии

где по повторяющемуся индексу $j = 1, 2, 3$ производится суммирование, а \mathbf{F}^j , \mathbf{R}^j и \mathbf{G}_j выражаются следующим образом:

$$\mathbf{F}^j = \begin{bmatrix} \rho u^j \\ \rho u^1 u^j - \sigma^{1j} \\ \rho u^2 u^j - \sigma^{2j} \\ \rho u^3 u^j - \sigma^{3j} \\ u^j (p + \rho E) + Q^j - u^k \tau^{ij} g_{ik} \end{bmatrix}; \mathbf{G}_j = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{j1}^1 & \Gamma_{j2}^1 & \Gamma_{j3}^1 & 0 \\ 0 & \Gamma_{j1}^2 & \Gamma_{j2}^2 & \Gamma_{j3}^2 & 0 \\ 0 & \Gamma_{j1}^3 & \Gamma_{j2}^3 & \Gamma_{j3}^3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho X^1 \\ \rho X^2 \\ \rho X^3 \\ \rho X^j u^k g_{jk} + \tilde{Q}_V \end{bmatrix}$$

В результате получена система уравнений, описывающая течение сжимаемого термически равновесного химически нейтрального газа, в произвольной системе координат. Как видно из (2.40), уравнения переноса любых скалярных величин в любом случае могут быть сведены к однообразной форме записи, а основную трудность при записи представляют уравнения для тензорных величин первого порядка и выше, поскольку их запись в дивергентной форме в общем виде не представляется возможной (возникают дополнительные члены, представленные здесь в виде членов вида $\mathbf{G}_j \mathbf{F}^j$).

Тем не менее, использование представленной выше обобщенной записи упрощает, а современные средства компьютерной алгебры (как с открытым кодом - типа SymPy и Maxima так и проприетарные - типа Maple) позволяют автоматизировать процесс записи уравнений в любой системе координат.

В дальнейшем для удобства и краткости выкладок в настоящей работе будет применяться в основном декартова система координат ⁶.

⁶ При использовании индексной (тензорной) нотации в декартовой системе координат разделение индексов на

2.3. Учет протекания химических реакций в потоке газа

В случае протекания гомогенных химических реакций поток газа необходимо рассматривать как однородную смесь, состоящую из N_c компонентов (сумма всех реагентов и продуктов химических реакций). При этом систему (2.40) необходимо дополнить $N_c - 1$ уравнениями вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j C_s + J_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad (2.41)$$

где $s = 1, 2, \dots, N_c - 1$, $C_s = \rho_s / \rho$ — массовая доля компонента s ; ρ — плотность компонента s ; \dot{w}_s — скорость образования компонента s в результате химических реакций; N_c — количество компонентов газовой смеси⁷.

При этом для диффузионной скорости $J_{s,j} \equiv \rho_s V_{s,j}$ используется закон Фика:

$$J_{s,j} \equiv \rho_s V_{s,j} = -\rho D \frac{\partial C_s}{\partial x_j} = -\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \quad (2.42)$$

где D — обобщенный коэффициент бинарной диффузии, $V_{s,j}$ — диффузионная скорость компонента s в j -ом направлении.

Здесь коэффициент диффузии выражается через единое число Шмидта⁸

$$\rho D = \frac{\mu}{Sc} \quad (2.43)$$

Давление газовой смеси складывается из парциальных давлений всех компонентов:

$$p = \sum_{s=1}^{N_c} p_s = \sum_{s=1}^{N_c} \rho_s \frac{R_U}{M_s} T = \rho \frac{R_U}{M_\Sigma} T \quad (2.44)$$

где R_U — универсальная газовая постоянная; M_Σ — кажущаяся молекулярная масса газовой смеси:

верхние и нижние лишено смысла и применяться не будет, поскольку ковариантные и контрвариантные компоненты в декартовой системе координат совпадают.

⁷ В случае многофазного течения к уравнениям в правой части добавляется дополнительный источник $S_{\alpha s}$

⁸ В [87] приводится более универсальный и точный подход к моделированию диффузионных потоков, который при необходимости может быть использован, что не нарушает общности приводимых в данной работе рассуждений. При этом необходимо отметить, что применяемый в [87] существенно более требователен к вычислительным ресурсам, но преимущества его применения очевидны далеко не всегда.

$$M_{\Sigma} = \left(\sum_{s=1}^{N_c} \frac{C_s}{M_s} \right)^{-1}$$

Скорость образования компонента в результате химических реакций складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует:

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{k=1}^K (\nu''_{k,s} - \nu'_{k,s}) R_k \quad (2.45)$$

где K – число реакций, которые протекают в химически реагирующей системе; $\nu'_{k,s}$ — стехиометрический коэффициент компонента s в k -ой прямой реакции (слева направо); $\nu''_{k,s}$ - стехиометрический коэффициент компонента s в k -ой обратной реакции (справа налево); R_k - скорость k -ой химической реакции.

Математическое представление k -ой химической реакции может быть записано в виде:



Скорость химической реакции R_k определяется как изменение мольной (молярной) концентрации одного из реагирующих веществ за единицу времени и имеет размерность $[\text{моль м}^{-3}\text{с}^{-1}]$.

Скорость химической реакции определяется на основе закона действующих масс:

$$R_k = \left(F_k \prod_{s=1}^{N_c} [I_s]^{\nu'_{k,s}} - B_k \prod_{s=1}^{N_c} [I_s]^{\nu''_{k,s}} \right) \quad (2.47)$$

где F_k и B_k - коэффициенты скоростей прямой и обратной k -ой реакции, соответственно, $n_k = \sum_{s=1}^{N_c} \nu_{k,s}$ - порядок реакции.

Коэффициенты скоростей реакций рассчитываются по формулам:

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_U T}\right), \quad (2.48)$$

$$B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_U T}\right) \quad (2.49)$$

2.4. Термические и переносные свойства газовой смеси

2.4.1. Температура газовой смеси. Термически равновесные и неравновесные состояния

Как известно, температура - феноменологическое понятие, выражающее степень нагретости тела. Для газа оно связано со средним количеством энергии его частиц и степенью их упорядоченности (энтропией):

$$T = \left(\frac{\partial e}{\partial S}\right)_V \quad (2.50)$$

Температура определяет энергообмен между различными телами, системами, различными частями одной системы.

Изменение внутренней энергии системы связано с изменением ее температуры с помощью понятия теплоемкости. По определению:

$$c_v \equiv \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_V \quad (2.51)$$

Внутренняя энергия газа складывается с энергии поступательного (e_{tr}) и вращательного (e_{rot}) движения его частиц. В многоатомных газах сюда следует добавить энергию колебаний (e_{ϑ}) атомов в молекуле⁹:

$$e = e_{tr} + e_{rot} + e_{\vartheta} \quad (2.52)$$

⁹ Помимо этого следует также помнить о химической энергии, а при очень высоких температурах - об энергии электронного возбуждения.

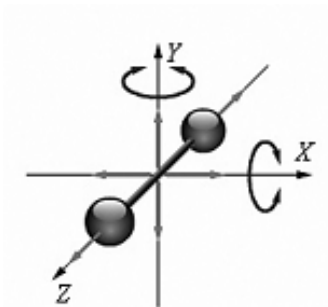


Рис. 2.1. Степени свободы двухатомной молекулы

Рассмотрим более подробно поведение отдельной молекулы. Молекула, состоящая из одного атома (например, He, H, O, Ar) также обладают тремя степенями свободы.

Напомним определение. *Число степеней свободы* механической системы - это минимальное число независимых скалярных величин, задание значений которых необходимо для однозначного определения конфигурации системы.

Двухатомные молекулы имеют, в общей сложности, 6 степеней свободы (2 атома умножить на 3 степени свободы). Из них: 3 относятся к поступательному движению молекулы как единому целому; 2 вращательные степени свободы; 1 - колебательная (см. рисунок 2.1).

Молекула может поступательно перемещаться в направлениях трех осей X , Y , Z и вращаться вокруг двух осей: X , Y . Кроме того, атомы могут периодически менять расстояние между собой, т.е. колебаться вдоль оси Z . Двухатомная молекула, как частный случай линейной, обладает всего одним колебанием, при котором меняется расстояние между двумя атомами молекулы.

Эти движения и обуславливают три вида энергии молекулы: поступательную, вращательную и колебательную, соответственно.

Трехатомные молекулы обладают 9-ю степенями свободы. Они могут быть линейными (например, CO_2) и нелинейными (например, H_2O). Нелинейные молекулы имеют 3 поступательные степени свободы, 3 вращательные (см. рисунок 2.2).

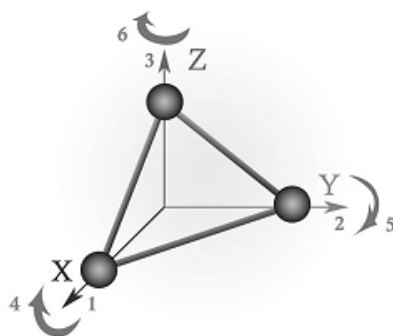


Рис. 2.2. Степени свободы нелинейной трехатомной молекулы

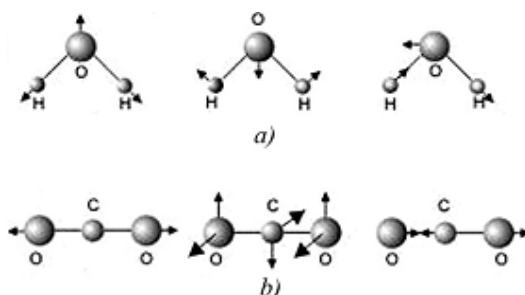


Рис. 2.3. Колебательные моды трехатомной молекулы

Соответственно, число колебательных степеней свободы равно

$$i_{\vartheta} = 9 - 3 - i_{rot} = 3 \quad (2.53)$$

где i_{rot} — число вращательных степеней свободы молекулы, i_{ϑ} — число колебательных степеней свободы молекулы.

У линейной молекулы всего 2 вращательных степени свободы. Поэтому число колебательных степеней свободы (колебательных мод) равно 4.

На рисунке 2.3 показаны колебательные моды для двух молекул: воды H_2O и углекислого газа CO_2 . Молекула H_2O является нелинейной и обладает тремя степенями свободы, связанными с колебаниями. Следовательно, три моды характеризуют колебания этой молекулы. Первая мода характеризует *симметричное растяжение*, вторая связана с *деформационным колебанием*, третья представляет собой *асимметричное растяжение*.

В отличие от H_2O молекула CO_2 является линейной и обладает 4 колебательными степенями свободы. Поэтому колебания данной молекулы связаны с

четырьмя модами. Первая мода характеризует симметричное растяжение и сжатие вдоль направления связей, вторая и третья (1,2) являются деформационными колебаниями, происходящими в двух взаимно перпендикулярных направлениях, четвертая мода представляет собой асимметричное колебание вдоль направления связей.

В общем случае частоты и энергии различных мод различны, а сами колебательные моды существуют независимо друг от друга, одновременно определяя любое произвольное колебательное состояние молекулы.

В дальнейшем мы будем называть первый вариант симметричной колебательной модой $\nu_{(1)}$, второй - деформационной колебательной модой $\nu_{(2)}$, а третий - асимметричной $\nu_{(3)}$.

В классической статистической физике доказывается, что при термическом равновесии на каждую степень свободы в молекуле приходится энергия, равная $RT/2$ (т.е. все степени свободы частиц газа описываются единой температурой). Это утверждение носит наименование теоремы о равнораспределении. В этом случае, при использовании данной теоремы теплоемкость будет определяться как:

$$c_v = \frac{3 + i_{rot} + i_v}{2} R \quad (2.54)$$

Отметим, что уравнение (2.54) напрямую использовать нельзя. Дело в том, что при достаточно низких температурах вращательные и колебательные "заморожены" (т.е. не хранят в себе значительное количество энергии и, соответственно, не дают вклада в теплоемкость газа). По мере повышения температуры вращательные, а затем и колебательные степени свободы - "активируются".

Кроме того, следует также учитывать квантовые эффекты, благодаря которым энергия колебательных степеней свободы зависит от температуры нелинейно.

Тем не менее, энергообмен между различными степенями свободы в равновесном случае отсутствует и все их можно охарактеризовать единой равновесной температурой.

Таким образом, реальная теплоемкость газа представляет собой функцию единой равновесной температуры $c_v = f(T)$.

При достаточно высоких энергиях равновесие между различными степенями свободы нарушается, и в общем случае энергия каждой степени свободы должна рассматриваться отдельно и характеризоваться отдельной температурой [88].

В этом случае $e_{tr} = f(T_{tr})$, $e_{rot} = f(T_{rot})$, $e_{\vartheta i} = f(T_{\vartheta i})$.

Получить энергию, приходящуюся на единицу массы газа, можно исходя из энергии отдельных молекул.

Поступательная энергия молекулы связывается с *поступательной температурой* T_T известным соотношением:

$$\varepsilon_T = \frac{3}{2}kT_T, \quad (2.55)$$

а вращательная - с *вращательной температурой* T_R :

$$\varepsilon_R = \frac{i_{rot}}{2}kT_R \quad (2.56)$$

Здесь k — постоянная Больцмана, ε — энергия молекулы.

Таким образом, эти энергии связаны с температурами линейными зависимостями и их напрямую можно обобщить на удельные характеристики.

Для колебательной энергии обычно используется *модель гармонического осциллятора*. Из решения уравнения Шрёдингера возможны следующие значения энергий колебаний:

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu, \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.57)$$

где n - квантовое число, h - постоянная Планка, ν - частота колебаний.

Можно показать [89], что при использовании модели гармонического осциллятора среднее число m -ых колебательных квантов α_m , приходящихся на одну молекулу, определяется формулой

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta(m)}) - 1} \quad (2.58)$$

где θ_m - характеристическая колебательная температура m -ой колебательной моды; $T_{\vartheta(m)}$ - соответствующая колебательная температура; r_m - кратность вырождения m -ой моды молекулы (число различных состояний квантовой физической системы, имеющих одно и то же значение физической величины).

В приведенных примерах у всех колебательных мод, кроме деформационной моды CO_2 , кратность вырождения равна единице. Для деформационной моды CO_2 кратность вырождения равна двум, т.к. ей соответствуют 2 колебательные степени свободы.

Энергия m -ой колебательной моды определяется соотношением $h\nu_m = k\theta_m$. Таким образом, энергия молекулы, запасенная в m -м типе колебаний, равна

$$\varepsilon_{\vartheta(m)} = k\theta_m \alpha_m = \frac{r_m k \theta_m}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta(m)}) - 1} \quad (2.59)$$

Для того, чтобы получить выражения для энергий (поступательной, вращательной и колебательной), приходящихся на 1 моль вещества, необходимо умножить соответствующие энергии молекулы на число Авогадро N_A . Для удельных энергий (на единицу массы вещества) надо затем разделить полученное выражение на молярную массу M .

Из формул (2.55), (2.56) и (2.59) получаем:

$$e_{tr} = \frac{3}{2} k T_{tr} N_A / M = \frac{3}{2} R T_{tr} \quad (2.60)$$

$$e_{rot} = \frac{i_{rot}}{2} R T_{rot} \quad (2.61)$$

$$e_{\vartheta(m)} = \frac{r_m R \theta_m}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta(m)}) - 1}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M, \quad (2.62)$$

где N_M – количество колебательных мод.

Здесь использовались соотношения:

$$k N_A = R_U, \quad R = R_U / M \quad (2.63)$$

где R_U - универсальная газовая постоянная; R - газовая постоянная данного вещества.

Внутренняя энергия газовой смеси складывается и энергий всех химических компонентов, и их вклад пропорционален массовой доли:

$$e = \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_{tr,s} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_{rot,s} + \sum_{m=1}^{N_M} C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^0, \quad (2.64)$$

где $C_{s(m)}$ - массовая доля компонента s , к которому относится m -ая колебательная мода.

Отметим, что в формуле (2.62) удельная энергия $e_{\vartheta(m)}$ относится к единице массы компонента, а не к единице массы газовой смеси. Если нас интересует, сколько колебательной энергии содержится в единице массы смеси, то следует использовать величину

$$E_{\vartheta(m)} = C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} = C_{s(m)} \frac{r_m R_{s(m)} \theta_m}{\exp(\theta_m / T_{\vartheta(m)}) - 1}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M \quad (2.65)$$

Здесь $R_{s(m)}$ - газовая постоянная соответствующего компонента.

Введем параметр $e_{\vartheta s}$ - колебательную энергию компонента s . Она складывается из всех колебательных мод, относящихся к данному компоненту:

$$e_{\vartheta s} = \sum_{m=1}^{m(s)} e_{\vartheta(m)} \quad (2.66)$$

У атомов колебательная энергия отсутствует - $e_{\vartheta s} = 0$; у двухатомных молекул всего одна колебательная степень свободы и $m(s) = 1$; у трехатомных $m(s) = 3$.

Замечание. В общем случае у линейных трехатомных молекул (например, CO_2) число колебательных степеней свободы равно 4, но две из них вырождены. Т.к. коэффициент вырождения r_m уже учтен в формуле для $e_{\vartheta(m)}$, то и для таких молекул $m(s) = 3$.

С учетом (2.66) формула внутренней энергии газовой смеси принимает вид:

$$e = \sum_{s=1}^{Nc} C_s (e_{tr s} + e_{rot s} + e_{\vartheta s} + h_s^0) = \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_s \quad (2.67)$$

Здесь внутренняя энергия компонента s задается формулой

$$e_s = e_{tr s} + e_{rot s} + e_{\vartheta s} + h_s^0 \quad (2.68)$$

Вводим энтальпию газовой смеси по традиционной формуле:

$$h = e + \frac{p}{\rho} = e + \frac{R_U}{M_{\Sigma}} T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_s + \sum_{s=1}^{Nc} C_s R_s T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s \quad (2.69)$$

где

$$h_s = e_s + R_s T$$

- энтальпия компонента s .

Удобно ввести поступательно-вращательную энтальпию, поступательно-вращательную теплоемкость газовой смеси при постоянном давлении и соответствующие теплоемкости компонентов - по следующим формулам:

$$\begin{aligned} h_{TR} &= C_{V,TR} T + \frac{p}{\rho} = C_{V,TR} T + \frac{R_U}{M_{\Sigma}} T = T \sum_{s=1}^{Nc} \frac{(5 + n_R)}{2} R_s C_s = \\ &= T \sum_{s=1}^{Nc} (C_P)_{s,TR} C_s = C_{P,TR} T \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$C_{P,TR} = \sum_{s=1}^{Nc} (C_P)_{s,TR} C_s, \quad (C_P)_{s,TR} = \frac{(5 + i_{rot})}{2} R_s \quad (2.71)$$

С учетом этого все введенные энтальпии можно выразить по формулам:

$$h_s = \frac{(5 + i_{rot})}{2} R_s T + e_{\vartheta s} + h_s^0 = (C_P)_{s,TR} T + e_{\vartheta s} + h_s^0 \quad (2.72)$$

$$h = \sum_{s=1}^{Nc} C_s \left((C_P)_{s,TR} T + e_{\vartheta s} + h_s^0 \right) = C_{P,TR} T + \sum_{s=1}^{Nc} C_s e_{\vartheta s} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^0 \quad (2.73)$$

Здесь через T обозначена поступательно-вращательная температура. (Предполагается термическое равновесие между поступательной и вращательной степенями свободы молекул).

Один из наиболее широко распространенных в аэрокосмической технике случаев - так называемая колебательная неравновесность (т.е. отсутствие равновесия между колебательными степенями свободы и всеми остальными).

Процесс установления равновесия по колебательным степеням свободы молекул (колебательная релаксация) является относительно медленным процессом: характерное время колебательной релаксации значительно больше времени поступательной и вращательной релаксации [90]. По этой причине поступательные и вращательные степени свободы описываются единой поступательно-вращательной температурой, а колебательные степени свободы (колебательные моды) - отдельными колебательными температурами.

В том случае, когда в газе наблюдается существенная колебательная неравновесность, к основным уравнениям системы (2.40) следует добавить уравнения переноса колебательной энергии.

Абстрагируясь в настоящий момент от конкретных механизмов и моделей колебательной релаксации, запишем общий вид уравнения переноса колебательной энергии m -ой колебательной моды.

Для определения средней на единицу массы колебательной энергии необходимо ввести параметр, отражающий в среднем "концентрацию" частиц с возбужденными колебательными модами в данной точке пространства. Таким параметром является среднее число колебательных квантов из расчета на одну молекулу ($0 \leq \alpha \leq 1$).

Тогда средняя удельная колебательная энергия моды m может быть оценена по формуле:

$$e_{\vartheta m} = R_s \theta_m \alpha_m \quad (2.74)$$

где R_s - газовая постоянная компонента, к которому принадлежит соответствующая мода.

Изменение во времени числа квантов каждой моды определяется всеми энергетическими переходами с общей скоростью и может быть записано в виде [91]:

$$\frac{d\alpha_m}{dt} = \psi_m \quad (2.75)$$

Если раскрыть вещественную производную в данном уравнении, получим уравнение переноса для α_m :

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + u_{s(m),j} \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} = \psi_m \quad (2.76)$$

где $u_{s(m),j}$ - скорость движения компонента s , к которому относится m -ая колебательная мода.

При этом скорость движения компонента вычисляется исходя из скорости его адвекции в потоке и диффузионной скорости:

$$u_{s,j} = u_j + V_{s,j} \quad (2.77)$$

С учетом (2.42) формула (2.76) примет вид:

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + u_j \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho_{s(m)}} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_{s(m)}}{\partial x_j} \frac{\partial \alpha_m}{\partial x_j} = \psi_m \quad (2.78)$$

В конечном итоге, учитывая формулу (2.74), переходя к консервативной форме уравнений, получим:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_{\vartheta m}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e_{\vartheta m}) - \frac{\mu}{Sc} \frac{1}{C_{s(m)}} \frac{\partial C_{s(m)}}{\partial x_j} \frac{\partial e_{\vartheta m}}{\partial x_j} = \rho \dot{e}_{\vartheta m} \quad (2.79)$$

где

$$\dot{e}_{\vartheta m} = R_s \theta_m \psi_m \quad (2.80)$$

Таким образом, перенос колебательной энергии в потоке помимо адвекции и диффузионного переноса, определяется общей скоростью квантовых энергетических переходов. Более подробно вопросы неравновесного энергетического обмена в газах будет посвящен отдельный раздел данной работы.

2.4.2. Вторая вязкость

Как уже указывалось в разделе 2.2, влияние т.н. коэффициента второй вязкости в отдельных случаях достаточно велико.

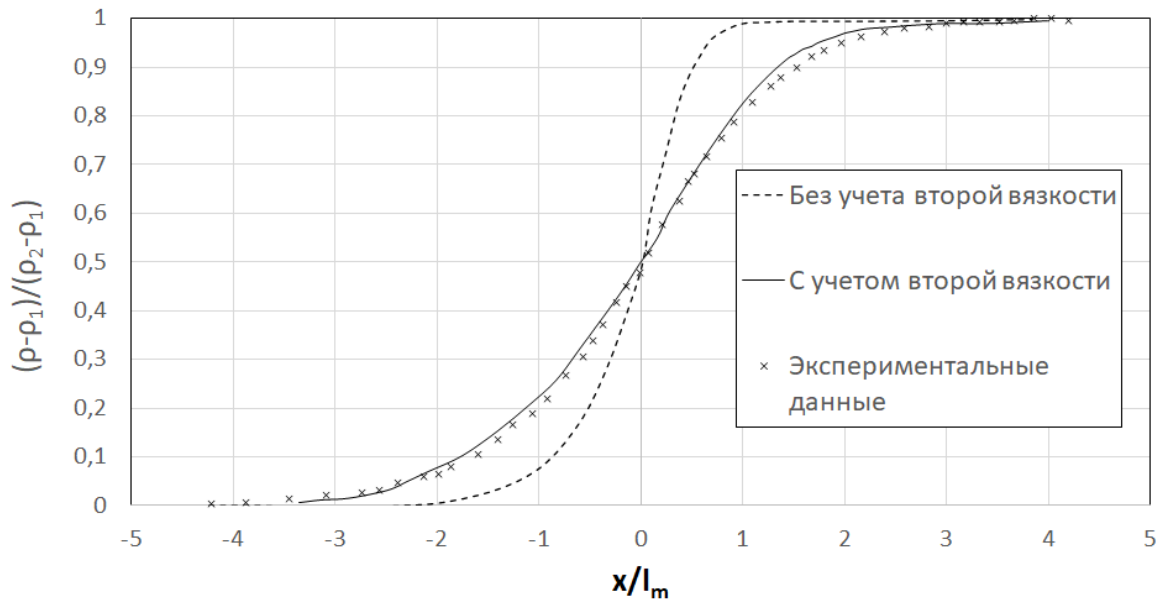


Рис. 2.4. Распределение плотности в ударной волне при числе Маха $M_1 = 6.1$ (координата x нормирована на длину свободного пробега молекулы l_m) согласно данным [93])

В работах [92, 93] на примере сравнения расчетных и экспериментальных данных показывается, что учет ненулевой второй вязкости позволяет получить более близкие к экспериментальным данным результаты расчетов структуры отошедшей ударной волны (см. рисунок 2.4). Профиль, рассчитанный без учета объёмного коэффициента вязкости, во-первых дает заниженное значение толщины скачка, а во-вторых сильно качественно и количественно отличается от экспериментального профиля.

При этом прямое экспериментальное измерение величины данного коэффициента представляется весьма затруднительным. Тем не менее, в рамках кинетической теории газов существуют модели, которые позволяют в первом приближении оценить величину коэффициента второй вязкости газа, основываясь на физических свойствах его молекул [94].

Общая формула для коэффициента второй вязкости записывается следующим образом:

$$\zeta = \frac{k c_{int}}{m c_v^2} p \tau_E \quad (2.81)$$

где c_{int} — теплоемкость по внутренним степеням свободы молекулы, τ_E — характерное время релаксации внутренних степеней свободы.

Указанную формулу сложно применять на практике, поскольку время релаксации внутренних степеней свободы молекул может лежать в достаточно широком пределе.

Один из упрощенных методов вычисления коэффициента ζ - т.н. "метод шероховатых сфер". Согласно данному методу:

$$\zeta = \left(\frac{m k_b T}{\pi} \right)^{0.5} \frac{1}{\sigma^2} \frac{(1 + K)^2}{32 K^2} \quad (2.82)$$

где K - безразмерный момент инерции молекулы, σ - молекулярный кинетический диаметр (может быть взят в частности исходя из значений констант потенциала Леннарда-Джонса).

$$K = \frac{4 I_\alpha}{m \sigma^2} \quad (2.83)$$

Проиллюстрируем описанный подход на примере молекулы азота N_2

Для двухатомных молекул момент инерции вычисляется следующим образом:

$$I_\alpha = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} R^2$$

где m_a и m_b - массы атомов в молекуле, R - расстояние между атомами.

На рисунке 2.5 представлены результаты расчетов соотношения коэффициентов сдвиговой и объемной (второй) вязкости для газообразного азота. Данные по длине связи и кинетическому диаметру молекулы взяты в соответствии с [95].

Из рисунка видно, что коэффициент второй вязкости для азота существенно превышает коэффициент сдвиговой вязкости.

В целом, как видно из формулы (2.82), зависимость коэффициента вязкости

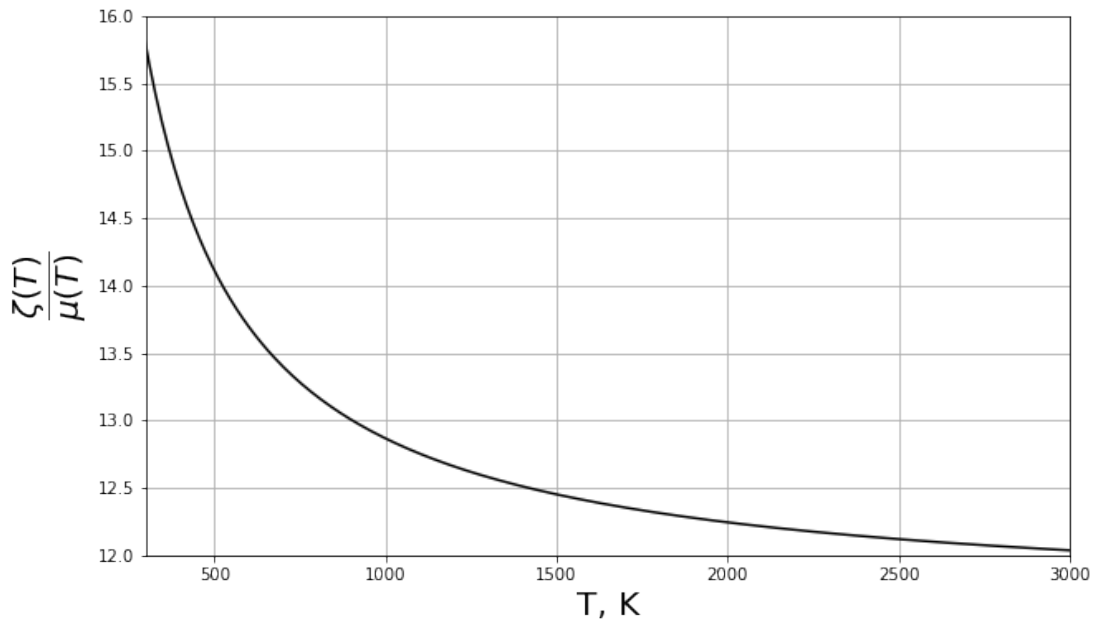


Рис. 2.5. Соотношение между сдвиговой и объемной вязкостью, рассчитанное по формуле (2.82) в зависимости от температуры.

Таблица 2.1. Значения константы a для расчета коэффициента второй вязкости по формуле (2.84)

Газ	a , мкПа · с/К ^{0.5} .
Азот	16.2859
Кислород	10.5600
NO	12.4676
NO+	16.6963

от температуры можно представить в виде степенной зависимости вида:

$$\zeta(T) = a \cdot T^{0.5} \quad (2.84)$$

Значения коэффициентов a для основных составляющих воздуха, рассчитанные на базе данных [95], приведены в таблице 2.1¹⁰.

Подробнее о второй вязкости, подходах к определению ее численного значения и ее роли в газовой динамике будет изложено позднее в отдельной главе.

¹⁰ Здесь следует принимать во внимание что для одноатомных газов $\zeta = 0$ (неупругие столкновения у одноатомных молекул отсутствуют)

2.5. Проблема турбулентности в потоке газа

Как известно, все течения жидкостей и газов, можно разделить на ламинарные (слоистые) и турбулентные. Характерная особенность турбулентных течений состоит в том, что движение носит неупорядоченный, хаотический характер. Если использовать подход Лагранжа, то, в отличие от ламинарных течений, в которых близлежащие частицы движутся по практически параллельным траекториям, в турбулентном течении траектории частиц могут произвольно пересекаться и вести себя в достаточной степени непредсказуемо.

Турбулентные течения всегда нестационарные, причем характерные времена (масштабы) этих нестационарностей могут иметь весьма широкий диапазон.

Можно выделить следующие основные свойства турбулентных течений [15]:

1. Переход от ламинарного режима течения к турбулентному происходит не в заданном месте, а в достаточно произвольном, случайном месте, и носит вероятностный характер.
2. Само турбулентное движение также носит случайный характер: тот или иной вихрь может оказаться в совершенно произвольном, непредсказуемом месте.
3. При возникновении турбулентности сначала возникают крупные вихри, размер которых - порядка характерного размера течения. Движение становится нестационарным и сильно анизотропным. Крупные вихри теряют устойчивость и распадаются на все более мелкие. Таким образом, возникает т.н. иерархия вихрей. Энергия движения этих вихрей передается от крупных вихрей к более мелким, и в конце этого процесса исчезает - происходит диссипация энергии.
4. При ламинарном режиме течения смешение интенсивность процесса переноса вещества, энергии и количества движения в поперечном потоку направлении достаточно низкая, а при турбулентном - носит очень интенсивный характер.

5. Несмотря на то, что граничные условия остаются стационарными, само турбулентное течение носит ярко выраженный нестационарный характер - все газодинамические параметры непрерывно меняются во времени.
6. Есть и еще одно важное свойство турбулентности: оно всегда трехмерно. Даже если мы рассматриваем одномерное течение в трубе или двухмерный пограничный слой, все равно следует учитывать, что движение турбулентных вихрей происходит в направлениях всех трех координатных осей.

Основной критерий, по которому определяют характер течения жидкости, был сформулирован О.Рейнольдсом в классической работе 1883 г. [96]:

$$Re = \frac{\rho u d}{\mu}, \quad (2.85)$$

где ρ - плотность жидкости в потоке, u - характерная скорость потока; d - характерный размер потока (в опыте Рейнольдса - это диаметр трубы), μ - коэффициент динамической вязкости.

Рейнольдс показал, что безразмерный критерий для трубы находится в диапазоне $2300 < Re_{cr} < 20000$. Диапазон весьма велик, т.е. практически на порядок величины.

Аналогичный диапазон величин получается для пограничного слоя при обтекании пластины. В качестве характерного размера принимается расстояние от передней кромки пластины. Для этого случая $3 \cdot 10^5 < Re_{cr} < 4 \cdot 10^4$. Если же характерный размер определяется как толщина пограничного слоя, то $2700 < Re_{cr} < 9000$.

Многочисленные исследования по исследованию характера течений показали, что критическое значение числа Рейнольдса зависит от большого числа факторов, например, от градиента давления, от степени шероховатости обтекаемой поверхности, от интенсивности турбулентности во внешнем потоке, от перепада температур между слоями и т.д.

Возможные сценарии перехода к турбулентности и факторы, влияющие на этот процесс, в данной работе будут обсуждаться отдельно. Пока отметим, что все перечисленные факторы тем или иным образом вызывают возмущение скорости, и в зависимости от масштаба этого возмущения по сравнению с силами ему препятствующими, оно может затухать или усиливаться.

Для более глубокого понимания физического смысла, число Рейнольдса можно представить в следующем виде:

$$\text{Re} = \frac{\rho u L}{\mu} = \frac{\rho u^2}{\mu \frac{u}{L}}, \quad (2.86)$$

т.е. в числителе стоит удвоенный скоростной напор, а в знаменателе - величина, имеющая порядок напряжения трения (если в качестве масштаба длины берется оценка толщины пограничного слоя).

Как уже говорилось, турбулентное движение является нестационарным и для него характерен широкий спектр масштабов турбулентных вихрей - от наиболее крупных до самых мелких.

Нестационарные уравнения динамики вязкой жидкости описывают движение в турбулентном течении вплоть до минимальных масштабов турбулентности. Однако при численном решении этих уравнений для того, чтобы учесть эти масштабы, может потребоваться настолько мелкая сетка, что даже современные компьютерные мощности не позволят решить такую задачу. То же относится и к выбору шага численного интегрирования по времени, так как характерное время мелкомасштабной турбулентности очень мало. С другой стороны, именно мелкомасштабная турбулентность играет важнейшую роль при описании турбулентных течений.

Подход, при котором уравнения динамики жидкости решаются для турбулентного режима течения напрямую без привлечения каких-либо дополнительных гипотез, называется прямым численным моделированием.¹¹

¹¹ Direct Numeric Simulation, DNS.

Прямое численное моделирование при правильной его реализации дает очень хорошее совпадение результатов расчета с экспериментальными данными, но требует слишком значительных вычислительных ресурсов и поэтому применяется для инженерных расчетов достаточно редко.

Более простой моделью является так называемое моделирование крупных вихрей (Large Eddy Simulation, LES). В этом подходе крупные вихри рассчитываются, а мельчайшие вихри подсеточного масштаба (Sub-Grid Scale, SGS) моделируются. Основной предпосылкой такого подхода является то, что наибольшие вихри, которые находятся под прямым воздействием граничных условий, несут максимум энергии и должны быть рассчитаны.

Эти подходы имеют хорошую перспективу, но в настоящее время наиболее распространенным способом моделирования турбулентности является использование осреднения Рейнольдса, когда вместо уравнений для мгновенных значений параметров используются уравнения для неких осредненных величин. Эти уравнения называются уравнениями Рейнольдса.

При турбулентном режиме течения в каждой точке потока все газодинамические параметры течения (скорость, температура, давление и т.д.) постоянно изменяются, притом неравномерно (см. рисунок 2.6).

На рисунке 2.6 мгновенная скорость u пульсирует около некоторого среднего во времени значения \bar{u} . Отклонение мгновенной скорости u от средней во времени называют пульсационными скоростями u' , при этом в любой момент времени:

$$u = \bar{u} + u'. \quad (2.87)$$

Таким образом, турбулентное движение состоит как бы из регулярного течения, описываемого осредненными значениями скоростей, и из наложенного на него хаотического пульсационного течения. Можно использовать различные способы осреднения газодинамических параметров течения. Например, с использованием математического ожидания и функции плотности распределения вероятностей:

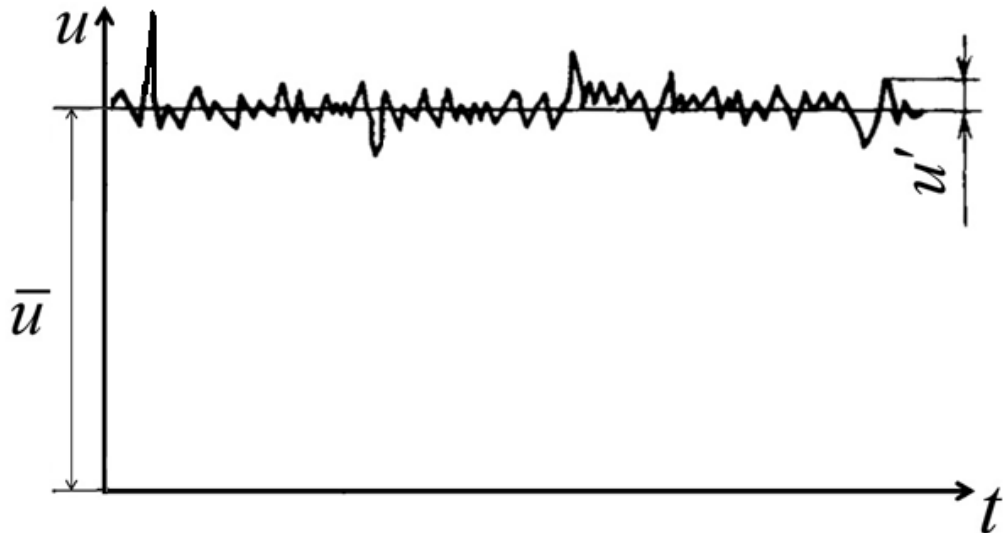


Рис. 2.6. Осциллограмма колебаний скорости в определенной неподвижной точке турбулентного потока, имеющего неизменную среднюю скорость течения

$$M(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} u \cdot f(u) du, \quad (2.88)$$

где u – любой газодинамический параметр (в данном случае скорость), который рассматривается как случайная величина, $f(u)$ – функция распределения плотности вероятностей этой величины.

Для течений, в которых средняя величина не меняется во времени, можно использовать осреднение по времени:

$$\bar{u}(x, y, z) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u(x, y, z, t) dt, \quad (2.89)$$

где Δt – период времени, существенно превышающий временной масштаб турбулентности.

Если использовать эргодическую гипотезу¹² можно считать, что

$$M(u) \cong \bar{u}. \quad (2.90)$$

¹² Эргодическая гипотеза (др.-греч. $\epsilon\rho\gamma\omicron\nu$ - работа и $\omicron\delta\omicron\varsigma$ - путь) в статистической физике - предположение о том, что средние по времени значения физических величин, характеризующих систему, равны их средним статистическим значениям; служит для обоснования статистической физики.

В дальнейшем будем обозначать осредненные параметры верхним подчеркиванием: \bar{u} , $\bar{\rho}$, \bar{T} , \bar{p} и т.д. Это, так называемые, средние по Рейнольдсу.

Для осредненных и пульсационных величин справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned}\overline{A \pm B} &= \bar{A} \pm \bar{B}, \\ \overline{AB} &= \bar{A} \cdot \bar{B} + \overline{A'B'}, \quad \overline{A'B'} \neq 0, \\ \overline{\overline{AB}} &= \bar{A} \cdot \bar{B}, \\ \frac{\partial \overline{A}}{\partial x_i} &= \frac{\partial \bar{A}}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial \overline{A}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{A}}{\partial t}, \\ \overline{A'} &= 0.\end{aligned}\tag{2.91}$$

Величину $\overline{A'B'}$ называют корреляцией пульсаций случайных величин A и B . В общем случае она не равна нулю.

Правила осреднения Рейнольдса можно применить к основным уравнениям динамики жидкости и в случае сжимаемых течений, т.е. в случае, когда ее плотность не является константой. Однако для сжимаемых течений в полученных уравнениях появляется большое количество членов, содержащих пульсации плотности.

Для устранения этой проблемы применяется метод, предложенный Фавром [97], в котором используются так называемые среднемассовые значения параметров или средние по Фавру:

$$\tilde{T} = \frac{\overline{\rho T}}{\bar{\rho}}.\tag{2.92}$$

Мгновенные значения величин в этом случае представляются в виде:

$$T = \tilde{T} + T'',\tag{2.93}$$

где T'' - пульсационная составляющая по Фавру, т.е. мгновенное отклонение параметра от среднего по Фавру.

Для средних по Фавру и соответствующих пульсаций справедливы следующие соотношения:

$$\widetilde{A \pm B} = \frac{\overline{\rho(A \pm B)}}{\bar{\rho}} = \widetilde{A} \pm \widetilde{B}, \quad (2.94)$$

$$\overline{A\widetilde{B}} = \overline{A \frac{\rho\widetilde{B}}{\bar{\rho}}} = \bar{A}\widetilde{B}, \quad (2.95)$$

$$\overline{\rho A''} = \overline{\rho(A - \widetilde{A})} = \overline{\rho A} - \overline{\rho\widetilde{A}} = \bar{\rho}\widetilde{A} - \bar{\rho}\widetilde{A} = 0, \quad (2.96)$$

$$\begin{aligned} \overline{\rho A\widetilde{B}} &= \overline{\rho(\widetilde{A} + A'')(\widetilde{B} + B'')} = \overline{\rho(\widetilde{A}\widetilde{B} + A''\widetilde{B} + \widetilde{A}B'' + A''B'')} = \\ &= \overline{\rho\widetilde{A}\widetilde{B}} + \overline{\rho A''\widetilde{B}} + \overline{\rho\widetilde{A}B''} + \overline{\rho A''B''} = \bar{\rho}\widetilde{A}\widetilde{B} + \overline{\rho A''B''} = \bar{\rho}\widetilde{A}\widetilde{B} + \overline{\rho A''B''}, \end{aligned} \quad (2.97)$$

$$\begin{aligned} \overline{A''} &= \overline{(A - \widetilde{A})} = \bar{A} - \widetilde{A} = \bar{A} - \frac{\overline{\rho A}}{\bar{\rho}} = \bar{A} - \frac{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{A} + A')}{\bar{\rho}} = \\ &= \bar{A} - \frac{(\bar{\rho}\bar{A} + \rho'\bar{A} + \bar{\rho}A' + \rho'A')}{\bar{\rho}} = -\frac{\rho'A'}{\bar{\rho}} \neq 0. \end{aligned} \quad (2.98)$$

При использовании осреднения по Фавру основная система уравнений, описывающих течение газовой смеси, принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\widetilde{u}_j) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{u}_i + \overline{\rho u_j'' u_i''} + \delta_{ji}\bar{p} - \bar{\tau}_{ij} \right) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{C}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{C}_s + \overline{\rho u_j'' C_s''} + \bar{J}_{s,j} \right) &= \bar{w}_s \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\widetilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}\widetilde{u}_j\widetilde{H} + \overline{\rho u_j'' H''} + \bar{q}_j - \widetilde{u}_i\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' (\tau_{ij}/\rho)''} \right] &= -\bar{Q}_R \end{aligned} \quad (2.99)$$

В данной системе уравнений присутствуют слагаемые вида $\overline{\rho A'' B''}$ - т.н. корреляции пульсаций. Большинство специалистов в области расчетов турбулентных течений сходятся во мнении, что из этих величин наиболее важную роль играют

корреляции пульсаций скорости и основных газодинамических параметров (энергии, скорости, массовых долей компонентов и т.п.), имеющих физический смысл дополнительных турбулентных потоков энергии, концентраций и напряжений турбулентного трения: $\overline{\rho u_j'' H''}$, $\overline{\rho u_j'' C_s''}$, $\overline{\rho u_j'' u_i''}$ [91]. При этом считается, что осредненные диффузионные (вязкие) потоки величин будут определяться градиентами осредненных параметров, например:

$$\bar{q}_j = -\frac{\mu}{\text{Pr}_{TR}} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_j}$$

Коэффициенты переноса рассчитываются через средние по Фавру температуру и массовые доли компонентов.

Осредненная полная энергия равна:

$$\tilde{E} = \tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_k^2 + K \quad (2.100)$$

где $K = \overline{u_i'' u_i''} / 2$ — кинетическая энергия турбулентности.

Вычисление значений корреляций пульсаций - нетривиальная задача. В силу нелинейности уравнений Навье-Стокса, точного конечного выражения для корреляций пульсаций получить не представляется возможным, поскольку корреляции порядка n будут зависеть от корреляций более высоких порядков [98]. Система иерархических уравнений Фридмана-Келлера [99], которая линейно связывает корреляции пульсаций разных порядков между собой является бесконечной и, как следствие, незамкнутой.

В результате на практике приходится применять упрощенные математические модели, которые позволяют вычислить приближенные значения турбулентных характеристик. Такие математические модели получили название моделей турбулентности.

Подходам к построению таких моделей посвящен отдельный раздел настоящей работы.

Здесь же отметим, что при построении общей математической модели потока

газа для учета турбулентности необходимо добавить дополнительные уравнения модели турбулентности. Формально они представляют собой уравнения переноса: в самом простом случае - от одного до трех уравнений переноса скалярных величин, а в более сложных случаях - одно уравнение переноса скалярной величины и одно уравнение переноса для тензора второго порядка (т.е. в трехмерном случае - шесть уравнений переноса для независимых компонент данного тензора).

Таким образом, с практической точки зрения при учете турбулентности необходимо решить от одного до семи дополнительных уравнений переноса.

2.6. Выводы по главе

В данной главе была сформулирована общая математическая модель однофазного высокоэнергетического потока газа. Сформулированы правила, позволяющие записать систему уравнений модели в произвольной системе координат.

Модель позволяет учесть следующие физические процессы и эффекты, которые могут возникать в газовом потоке:

1. Перенос вещества, количества движения и энергии с учетом различных механизмов переноса и зависимости их интенсивности от температуры (температур) в потоке.
2. Протекание химических реакций.
3. Неравновесный энергообмен между различными степенями свободы молекул газа.
4. Турбулентность.

Также в главе была обоснована необходимость учета ненулевого коэффициента второй (объемной) вязкости при расчетах течений с высокими скоростями, приведена методика и пример расчета данного коэффициента в зависимости от температуры.

В следующих главах будут в подробностях рассмотрены особенности учета каждого из приведенных аспектов.

Глава 3

Численный метод решения уравнений, описывающих течение газа

3.1. Система уравнений

Выпишем систему уравнений (2.40) с учетом турбулентности в декартовой системе координат:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (E_C - E_V) + \frac{\partial}{\partial y} (F_C - F_V) + \frac{\partial}{\partial z} (G_C - G_V) = H \quad (3.1)$$

где

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E^T \\ \rho C_1 \\ \vdots \\ \rho C_{N_c-1} \\ \rho T_1 \\ \vdots \\ \rho T_{N_t} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned}
 E_C &= \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho u (E^T + p/\rho) \\ \rho u C_1 \\ \vdots \\ \rho u C_{N_c-1} \\ \rho u T_1 \\ \vdots \\ \rho u T_{N_t} \end{pmatrix}, & F_C &= \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho v (E^T + p/\rho) \\ \rho v C_1 \\ \vdots \\ \rho v C_{N_c-1} \\ \rho v T_1 \\ \vdots \\ \rho v T_{N_t} \end{pmatrix}, \\
 G_C &= \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ \rho w (E^T + p/\rho) \\ \rho w C_1 \\ \vdots \\ \rho w C_{N_c-1} \\ \rho w T_1 \\ \vdots \\ \rho w T_{N_t} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Здесь T_1, T_2, \dots, T_{N_t} - турбулентные параметры. Система легко расширяется в

случае добавления уравнений переноса энергетических мод и т.п.

$$\begin{aligned}
 E_V = & \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} - q_x \\ -J_{1,x} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,x} \\ -g_{1,x} \\ \vdots \\ -g_{Nt,x} \end{pmatrix}, & F_V = & \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} - q_y \\ -J_{1,y} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,y} \\ -g_{1,y} \\ \vdots \\ -g_{Nt,y} \end{pmatrix} \\
 G_V = & \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} - q_z \\ -J_{1,z} \\ \vdots \\ -J_{Nc-1,z} \\ -g_{1,z} \\ \vdots \\ -g_{Nt,z} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

$$H = \left(0, 0, 0, 0, -\sum_{s=1}^{Nc} h_s^0 \dot{w}_s, \dot{w}_1, \dots, \dot{w}_{Nc-1}, S_{T,1}, \dots, S_{T,Nt} \right)^T \tag{3.5}$$

Вязкие напряжения и потоки ¹:

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= \mu \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\frac{\partial w}{\partial z} \right) = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{yy} &= \mu \left(2\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\frac{\partial w}{\partial z} \right) = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \quad \tau_{zz} = \frac{2}{3}\mu \left(2\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)\end{aligned}\tag{3.6}$$

$$q_x = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad q_y = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial y}, \quad q_z = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial z}\tag{3.7}$$

3.2. Конечно-объемное представление основной системы уравнений

Конечно-объемное представление уравнения (3.1) для q -ой ячейки сетки в декартовой системе координат:

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} (\mathbf{F}_{C,j} - \mathbf{F}_{V,j}) \cdot \mathbf{n}_j s_j + V_q H_q\tag{3.8}$$

где

$\mathbf{F}_C = E_C \mathbf{i} + F_C \mathbf{j} + G_C \mathbf{k}$ - вектор невязкого потока (через поверхность); $\mathbf{F}_{C,j}$

- вектор невязкого потока через j -ую грань;

$\mathbf{F}_V = E_V \mathbf{i} + F_V \mathbf{j} + G_V \mathbf{k}$ - вязкий поток;

V_q - объем q -ой ячейки сетки;

\mathbf{n}_j - вектор нормали к j -ой грани, направленный наружу по отношению к q -ой ячейке сетки;

s_j - площадь поверхности j -ой грани.

Суммирование $\sum_{j \in q}$ производится исключительно о граням, принадлежащим к q -ой ячейке сетки.

¹ Для простоты выкладок в данном разделе полагается, что коэффициент второй вязкости равен нулю

3.2.1. Двумерный случай

Уравнение (3.1):

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (E_C - E_V) + \frac{\partial}{\partial y} (F_C - F_V) = H \quad (3.9)$$

Пусть C — положительно ориентированная кусочно-гладкая замкнутая кривая на плоскости, а V — область, ограниченная кривой C .

Т.е. для положительно ориентированной кривой обход осуществляется *против часовой стрелки*.

По теореме Грина для положительно ориентированной кривой:

$$\begin{aligned} \iint_V \left(\frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \right) dx dy &\equiv \iint_V \left(\frac{\partial E}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} (-F) \right) dx dy = \\ &= \oint_C E dx + (-F) dy = \oint_C E dx - F dy \end{aligned} \quad (3.10)$$

Для отрицательно ориентированной кривой (т.е. обход производится по часовой стрелке) все наоборот:

$$\iint_V \left(\frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} \right) dx dy = \oint_C F dy - E dx \quad (3.11)$$

Договоримся, что в дальнейшем мы будем использовать обход *по часовой стрелке*, т.е. используем формулу (3.11).

Интегрируем (3.9) по поверхности q -ой ячейки:

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} + \oint_C (E_C - E_V) dy - (F_C - F_V) dx = V_q H_q \quad (3.12)$$

V_q - площадь q -ой ячейки сетки.

3.2.2. Расщепление невязкого потока

Используем гомогенность невязкого потока:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_C \cdot \mathbf{n} &= F_{C,n} = \frac{\partial F_{C,n}}{\partial U} U = AU \\ \mathbf{F}_C \cdot \mathbf{n} &\equiv E_C \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} + F_C \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} + G_C \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (3.13)$$

где $F_{C,n}$ - нормальная составляющая невязкого потока.

Матрица Якоби A может быть диагонализирована подобным представлением

$$A = S^{-1}\Lambda S \quad (3.14)$$

и разделена на положительную и отрицательную часть

$$A^+ = S^{-1}\Lambda^+S, \quad A^- = S^{-1}\Lambda^-S \quad (3.15)$$

Здесь Λ - диагональная матрица, состоящая из собственных значений матрицы A .

При этом для исключения эффекта карбункула и обеспечения численной устойчивости к собственным значениям матрицы A следует добавить небольшую величину e_μ :

$$\lambda^\pm = \frac{1}{2} \left(\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 + e_\mu^2} \right) \quad (3.16)$$

Данная величина имеет смысл искусственной численной вязкости. В настоящей работе она рассчитывается следующим образом:

$$e_\mu = k_\mu \psi (|\mathbf{u}| + a) \quad (3.17)$$

где k_μ - калибровочная константа, лежащая в пределах от 0.1 до 1, ψ - функция-переключатель, принимающая значения от 0 до 1.

Необходимость функции ψ продиктована тем, что ненулевой параметр e_μ искажает параметры течения в пограничном слое. Данный переключатель можно реализовать двумя путями:

1. Отключение искусственной вязкости только в области высоких градиентов (скачков уплотнения). Вид функции ψ для данного случая описан в разделе [3.4](#).
2. Отключение искусственной вязкости в пристеночной зоне. В этом случае:

$$\psi = \begin{cases} 0 & \text{при } y_w < y_{lim} \\ 1 & \text{при } y_w \geq y_{lim} \end{cases} \quad (3.18)$$

где y_w - расстояние от ближайшей стенки, y_{lim} - некоторое заранее выбранное значение.

Для представления невязкого потока на j -ой грани можно использовать:

1) метод Рое [100]

$$\mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j = F_{C,n,j} = 0.5 (F_L + F_R) - 0.5 \left| \hat{A} \right| (U_R - U_L) \quad (3.19)$$

где

$$\hat{A} = A \left(\hat{U}_{LR} \right) \quad (3.20)$$

Здесь F_L, F_R - значения нормального вектора $F_{C,n,j}$ "слева" и "справа" от рассматриваемой грани.

Все параметры, входящие в матрицу \hat{A} , вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \frac{\rho_R \sqrt{\rho_R} + \rho_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & \hat{u} &= \frac{u_R \sqrt{\rho_R} + u_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & \hat{v} &= \frac{v_R \sqrt{\rho_R} + v_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, \\ \hat{w} &= \frac{w_R \sqrt{\rho_R} + w_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, & H^T &= \frac{(H^T)_R \sqrt{\rho_R} + (H^T)_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}}, \\ f &= \frac{f_R \sqrt{\rho_R} + f_L \sqrt{\rho_L}}{\sqrt{\rho_R} + \sqrt{\rho_L}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Из (3.13) следует:

$$F_L = A_L U_L, \quad F_R = A_R U_R \quad (3.22)$$

и формула (3.19) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j = F_{C,n,j} &= 0.5 \left(A_L + \left| \hat{A} \right| \right) U_L + 0.5 \left(A_R - \left| \hat{A} \right| \right) U_R = \hat{A}_L^+ U_L + \hat{A}_R^- U_R \\ \hat{A}_L^+ &= 0.5 \left(A_L + \left| \hat{A} \right| \right), \quad \hat{A}_R^- = 0.5 \left(A_R - \left| \hat{A} \right| \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

2) Расщепление Стегера-Уорминга [101]

$$\mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j = F_{C,n,j} = (A^+)_L U_L + (A^-)_R U_R \quad (3.24)$$

где матрицы A^+ , A^- рассчитываются по формулам (3.15) на левой и правой гранях.

3) Модифицированное расщепление Стегера-Уорминга [102]

$$\mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j = F_{C,n,j} = (A^+)_{LR} U_L + (A^-)_{LR} U_R \quad (3.25)$$

где

$$\begin{aligned} (A^+)_{LR} &= A^+(U_{LR}), & (A^-)_{LR} &= A^-(U_{LR}) \\ U_{LR} &= \frac{U_L + U_R}{2} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Все три формулы (3.23), (3.24) и (3.25) имеют одинаковую структуру

$$\mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j = F_{C,n,j} = A_L^+ U_L + A_R^- U_R \quad (3.27)$$

и отличаются только способом расчета матриц A_L^+ , A_R^-

3.2.3. Матрица Якоби А.

Формулу для невязкого потока получаем из (3.13):

$$\mathbf{F}_C \cdot \mathbf{n} = E_C n_x + F_C n_y + G_C n_z = \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho U u + p n_x \\ \rho U v + p n_y \\ \rho U w + p n_z \\ \rho U H^T \\ \rho U C_1 \\ \vdots \\ \rho U C_{Nc-1} \\ \rho U T_1 \\ \vdots \\ \rho U T_{Nt} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

где

$$\begin{aligned} U &= u n_x + v n_y + w n_z \\ H^T &= E^T + p/\rho \end{aligned} \quad (3.29)$$

Введем вспомогательные единичные векторы \mathbf{l} и \mathbf{m} , направленные тангенциально к поверхности грани, такие, что \mathbf{n} , \mathbf{l} и \mathbf{m} взаимно ортогональны, т.е.

$$n_i l_i = n_i m_i = l_i m_i = 0 \quad (3.30)$$

Им соответствуют следующие компоненты скорости:

$$V = ul_x + vl_y + wl_z \quad (3.31)$$

$$W = um_x + vm_y + wm_z \quad (3.32)$$

Условие задания нормальной скорости.

Направим вектор \mathbf{l} по одному из ребер грани: из узла v (1) в узел v (2)

Тогда второй касательный вектор определится соотношениями:

$$\begin{cases} n_x m_x + n_y m_y + n_z m_z = 0 \\ l_x m_x + l_y m_y + l_z m_z = 0 \\ m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1 \end{cases}$$

$$l_x n_x m_x + l_x n_y m_y + l_x n_z m_z = 0$$

$$-l_x n_x m_x - n_x l_y m_y - n_x l_z m_z = 0 \quad (3.33)$$

$$(l_x n_y - n_x l_y) m_y + (l_x n_z - n_x l_z) m_z = 0$$

$$m_y = \frac{(n_x l_z - l_x n_z)}{(l_x n_y - n_x l_y)} m_z$$

$$m_x = -\frac{1}{n_x} (n_y m_y + n_z m_z) = \frac{n_z l_y - n_y l_z}{l_x n_y - n_x l_y} m_z$$

$$\frac{(n_z l_y - n_y l_z)^2}{(l_x n_y - n_x l_y)^2} m_z^2 + \frac{(n_x l_z - l_x n_z)^2}{(l_x n_y - n_x l_y)^2} m_z^2 + m_z^2 = 1$$

$$\left[(n_z l_y - n_y l_z)^2 + (n_x l_z - l_x n_z)^2 + (n_y l_x - n_x l_y)^2 \right] m_z^2 = (l_x n_y - n_x l_y)^2$$

$$m_z = \frac{\pm(l_x n_y - n_x l_y)}{\sqrt{[(n_z l_y - n_y l_z)^2 + (n_x l_z - l_x n_z)^2 + (n_y l_x - n_x l_y)^2]}}$$

$$m_x = \frac{\pm(n_z l_y - n_y l_z)}{\sqrt{[(n_z l_y - n_y l_z)^2 + (n_x l_z - l_x n_z)^2 + (n_y l_x - n_x l_y)^2]}} \stackrel{l_z=0}{=} \frac{\pm(n_z l_y)}{\sqrt{[n_z^2 + (n_y l_x - n_x l_y)^2]}} \quad (3.34)$$

$$m_y = \frac{\pm(n_x l_z - l_x n_z)}{\sqrt{[(n_z l_y - n_y l_z)^2 + (n_x l_z - l_x n_z)^2 + (n_y l_x - n_x l_y)^2]}}$$

Можно использовать более простые соотношения

$$\mathbf{m} = \mathbf{l} \times \mathbf{n} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned}
m_x &= (l_y n_z - l_z n_y) \\
m_y &= (l_z n_x - l_x n_z) \\
m_z &= (l_x n_y - l_y n_x)
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Матрица Якоби имеет следующий вид:

$$A = \frac{\partial F_{C,n}}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha \bar{\beta} n_x - Uu & un_x(1 - \bar{\beta}) + U & -\bar{\beta}vn_x + un_y & -\bar{\beta}wn_x + un_z & \bar{\beta}n_x & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha \bar{\beta}n_y - Uv & -\bar{\beta}un_y + vn_x & vn_y(1 - \bar{\beta}) + U & -\bar{\beta}wn_y + vn_z & \bar{\beta}n_y & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha \bar{\beta}n_z - Uw & -\bar{\beta}un_z + wn_x & -\bar{\beta}vn_z + wn_y & (-\bar{\beta}wn_z + wn_z) + U & \bar{\beta}n_z & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ U(\alpha \bar{\beta} - H^T) & -\bar{\beta}uU + H^T n_x & -\bar{\beta}vU + H^T n_y & -\bar{\beta}wU + H^T n_z & \bar{\gamma}U & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -UC_1 & C_1 n_x & C_1 n_y & C_1 n_z & 0 & U & \dots & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ -UC_{Nc-1} & C_{Nc-1} n_x & C_{Nc-1} n_y & C_{Nc-1} n_z & 0 & \dots & U & & & & \\ -UT_1 & T_1 n_x & T_1 n_y & T_1 n_z & 0 & 0 & \dots & 0 & U & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ -UT_{Nt} & T_{Nt} n_x & T_{Nt} n_y & T_{Nt} n_z & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & U \end{pmatrix} \setminus \tag{3.37}$$

Использованы следующие соотношения

$$\begin{aligned}
\bar{\gamma} &= \frac{h^T}{e^T} = \frac{e^T + \frac{p}{\rho}}{e^T} = 1 + \frac{p}{\rho e^T} \\
e^T &= E^T - \alpha = E^T - 0.5u^2 - 0.5v^2, \\
R_{\Sigma} T &= \frac{p}{\rho} = (h^T - e^T) = (E^T - 0.5u^2 - 0.5v^2)(\bar{\gamma} - 1) = \bar{\beta}(E^T - \alpha) \\
\alpha &= 0.5u^2 + 0.5v^2 \\
\bar{\beta} &= \bar{\gamma} - 1 \\
p &= \rho \bar{\beta}(E^T - 0.5u^2 - 0.5v^2) = \bar{\beta} \left(U_5 - 0.5 \frac{U_2^2}{U_1} - 0.5 \frac{U_3^2}{U_1} \right) \\
\frac{\partial p}{\partial U_1} &= \bar{\beta}(0.5u^2 + 0.5v^2) = \alpha \bar{\beta} \\
\frac{\partial p}{\partial U_2} &= -\beta u, \quad \frac{\partial p}{\partial U_3} = -\beta v, \quad \frac{\partial p}{\partial U_4} = -\beta w, \quad \frac{\partial p}{\partial U_5} = \beta
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Матрица S^{-1} :

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 & \frac{1}{2a^2} & \frac{1}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{u}{a^2} & l_x & m_x & \frac{(u+an_x)}{2a^2} & \frac{(u-an_x)}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{v}{a^2} & l_y & m_y & \frac{(v+an_y)}{2a^2} & \frac{(v-an_y)}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{w}{a^2} & l_z & m_z & \frac{(w+an_z)}{2a^2} & \frac{(w-an_z)}{2a^2} & 0 & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{\alpha}{a^2} & V & W & \frac{(H^T+aU)}{2a^2} & \frac{(H^T-aU)}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{C_1}{2a^2} & \frac{C_1}{2a^2} & \frac{1}{a^2} & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{C_{Nc-1}}{2a^2} & \frac{C_{Nc-1}}{2a^2} & 0 & \cdots & \frac{1}{a^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{T_1}{2a^2} & \frac{T_1}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{a^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{T_{Nt}}{2a^2} & \frac{T_{Nt}}{2a^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{a^2} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

Матрица S :

$$S = \begin{pmatrix} a^2 - \alpha\beta & \beta u & \beta v & \beta w & -\beta & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -V & l_x & l_y & l_z & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -W & m_x & m_y & m_z & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha\beta - Ua & an_x - \beta u & an_y - \beta v & an_z - \beta w & \beta & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha\beta + Ua & -an_x - \beta u & -an_y - \beta v & -an_z - \beta w & \beta & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha\beta C_1 & \beta u C_1 & \beta v C_1 & \beta w C_1 & -\beta C_1 & a^2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha\beta C_{Nc-1} & \beta u C_{Nc-1} & \beta v C_{Nc-1} & \beta w C_{Nc-1} & -\beta C_{Nc-1} & 0 & \cdots & a^2 & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha\beta T_1 & \beta u T_1 & \beta v T_1 & \beta w T_1 & -\beta T_1 & 0 & \cdots & 0 & a^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ -\alpha\beta T_{Nt} & \beta u T_{Nt} & \beta v T_{Nt} & \beta w T_{Nt} & -\beta T_{Nt} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a^2 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Матрица Λ :

$$\Lambda = \begin{pmatrix} U & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & U & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & U & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U+a & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U-a & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & U & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & U & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \dots & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & U \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

3.2.4. Невязкое дискретное уравнение

Рассмотрим исходное уравнение (3.8)

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} \mathbf{F}_{C,j} \cdot \mathbf{n}_j s_j \quad (3.42)$$

Подставим (3.19):

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} [0.5 (F_{j,L} + F_{j,R}) - 0.5 |A_j| (U_{j,R} - U_{j,L})] s_j \quad (3.43)$$

Подстановка (3.27) дает:

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} (A_L^+ U_L + A_R^- U_R)_j s_j \quad (3.44)$$

Векторы в уравнениях (3.43), (3.44), являются функцией основного вектора U в нескольких узлах.

Обозначим через U_{qj} значение вектора в узле ячейки, которая соединяется с q -ой ячейкой через j -ую гранью.

Пусть $Z(q)$ - множество узлов, через которые выражается поток в q -ой ячейке.

Тогда

$$\begin{aligned} U_{j,L} &= \sum_{s \in Z(q)} \alpha_s U_s, \\ U_{j,R} &= \sum_{s \in Z(qj)} \alpha_s U_s, \end{aligned} \quad (3.45)$$

В самом простом случае:

$$\begin{aligned} U_{j,L} &= U_q, \\ U_{j,R} &= U_{qj} \end{aligned} \quad (3.46)$$

При использовании (3.46) уравнение (3.43) принимает следующий вид

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = - \sum_{j \in q} [0.5 (F_q + F_{qj}) - 0.5 |A_j| (U_{qj} - U_q)] s_j \quad (3.47)$$

а уравнение (3.44) –

$$\begin{aligned} V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} &= - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j U_{j,L} + (A_R^-)_j U_{j,R} \right] s_j \\ V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} &= - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j U_q + (A_R^-)_j U_{qj} \right] s_j \end{aligned} \quad (3.48)$$

Таким образом, эти уравнения содержат $(N_q + 1)$ неизвестных величин, где N_q - число граней, окружающих q -ую ячейку. При этом

$$F_q = F_{C,n,j}(U_q) \quad (3.49)$$

Так для двумерной 4-х угольной ячейки уравнение (3.47) содержит 5 неизвестных величин, а для трехмерной гексаэдральной ячейки - 7 неизвестных величин.

Обозначим через δU^{n+1} приращения вектора U при переходе от n - го шага по времени к $(n+1)$ -му шагу по времени

$$\delta U^{n+1} = U^{n+1} - U^n \quad (3.50)$$

На каждом шаге по времени стоит задача определения U^{n+1} по известным значениям U^n .

Можно показать, что для векторной функции справедливы те же формулы дифференциального исчисления, что и для обычных функций. В частности,

можно выразить потоки на $(n+1)$ -ом шаге через потоки на n -ом шаге с помощью разложения в ряд Тейлора относительно приращения δU^{n+1} :

$$(F_{C,n})^{n+1} = (F_{C,n})^n + \left(\frac{\partial F_{C,n}}{\partial U} \right)^n \delta U^{n+1} = (F_{C,n})^n + A^n \delta U^{n+1} \quad (3.51)$$

Выразим потоки, входящие в уравнение (3.47), как линейную комбинацию значений на n -м и $(n+1)$ -м шагах по времени

$$\begin{aligned} F_{C,n} &= (1 - \alpha) (F_{C,n})^n + \alpha (F_{C,n})^{n+1} = (F_{C,n})^n + \alpha A^n \delta U^{n+1} \\ F_q &= F_q^n + \alpha A_q^n \delta U_q^{n+1}, \quad F_{qj} = F_{qj}^n + \alpha A_{qj}^n \delta U_{qj}^{n+1} \\ U_{qj} &= U_{qj}^n + \alpha \delta U_{qj}^{n+1}, \quad U_q = U_q^n + \alpha \delta U_q^{n+1} \end{aligned} \quad (3.52)$$

Здесь α - параметр, характеризующий порядок точности представления производной по времени. Если $\alpha = 0.5$, порядок равен 2, и схема подобна схеме Кранка-Николсона; при $\alpha = 1$ получается чисто неявная схема; значение $\alpha > 1$ дает завышенную релаксацию, но это может улучшать сходимость метода.

1) Использование формы (3.47)

Подставляем (3.52) в (3.47):

$$\begin{aligned} V_q &= \frac{\delta U_q^{n+1}}{\Delta t} \\ &= - \sum_{j \in q} [0.5 (F_q^n + \alpha A_q^n \delta U_q^{n+1} + F_{qj}^n + \alpha A_{qj}^n \delta U_{qj}^{n+1}) - 0.5 |A_j| (U_{qj}^n + \alpha \delta U_{qj}^{n+1} - U_q^n - \alpha \delta U_q^{n+1})] s_j \\ &= -0.5 \alpha \sum_{j \in q} [(A_q^n + |A_j|) \delta U_q^{n+1} + (A_{qj}^n - |A_j|) \delta U_{qj}^{n+1}] s_j \\ &\quad - \sum_{j \in q} [0.5 (F_q^n + F_{qj}^n) - 0.5 |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)] s_j \end{aligned} \quad (3.53)$$

Полученное выражение преобразуется к уравнению вида

$$\begin{aligned} &\left[I + 0.5 \alpha \Delta t \sum_{j \in q} (A_q^n + |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \right] \delta U_q^{n+1} + 0.5 \alpha \Delta t \sum_{j \in q} (A_{qj}^n - |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \delta U_{qj}^{n+1} \\ &= -\Delta t \sum_{j \in q} [0.5 (F_q^n + F_{qj}^n) - 0.5 |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)] \frac{s_j}{V_q} \end{aligned} \quad (3.54)$$

или

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n \quad (3.55)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta U_q^n &= -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [0.5 (F_q^n + F_{qj}^n) - 0.5 |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)] s_j \\ \mathbf{A}_q &= I + 0.5 \alpha \Delta t \sum_{j \in q} (A_q^n + |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \\ \mathbf{A}_{qj} &= 0.5 \alpha \Delta t (A_{qj}^n - |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \end{aligned} \quad (3.56)$$

Для явной части можно использовать более высокий порядок аппроксимации:

$$\Delta U_q^n = -\Delta t \sum_{j \in q} \left[0.5 (F_{j,L}^n + F_{j,R}^n) - 0.5 |A_j| (U_{j,R}^n - U_{j,L}^n) \right] \frac{s_j}{V_q} \quad (3.57)$$

2) Использование формы (3.48)

Теперь подставляем (3.52) в (3.48):

$$\begin{aligned} V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} &= - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j U_q + (A_R^-)_j U_{qj} \right] s_j \\ V_q \frac{\delta U_q^{n+1}}{\Delta t} &= - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j (U_q^n + \alpha \delta U_q^{n+1}) + (A_R^-)_j (U_{qj}^n + \alpha \delta U_{qj}^{n+1}) \right] s_j \\ &= - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j (U_q^n) + (A_R^-)_j (U_{qj}^n) \right] s_j - \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j (\alpha \delta U_q^{n+1}) + (A_R^-)_j (\alpha \delta U_{qj}^{n+1}) \right] s_j \end{aligned} \quad (3.58)$$

Полученное выражение преобразуется к уравнению вида

$$\begin{aligned} \left[I + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (A_L^+)_j s_j \right] \delta U_q^{n+1} + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(A_R^-)_j \delta U_{qj}^{n+1} \right] s_j \\ = - \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j (U_q^n) + (A_R^-)_j (U_{qj}^n) \right] s_j \end{aligned} \quad (3.59)$$

или

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n \quad (3.60)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q &= I + \frac{\alpha \Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (A_L^+)_j s_j, \quad \mathbf{A}_{qj} = \frac{\alpha \Delta t s_j}{V_q} (A_R^-)_j \\ \Delta U_q^n &= - \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j U_q^n + (A_R^-)_j U_{qj}^n \right] s_j \end{aligned} \quad (3.61)$$

Для явной части можно использовать более высокий порядок аппроксимации:

$$\Delta U_q^n = - \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[(A_L^+)_j U_{j,L} + (A_R^-)_j U_{j,R} \right]^n s_j = - \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (F_{C,n,j})^n s_j \quad (3.62)$$

Для сравнения напомним, что для метода Рое:

$$A_L^+ = 0.5 \left(A_L + |\hat{A}| \right), \quad A_R^- = 0.5 \left(A_R - |\hat{A}| \right) \quad (3.63)$$

Использование в качестве привязки грани. В этом случае грань окружена двумя ячейками. Одна считается "правой а другая - "левой". Вектор нормали \mathbf{n} является *внешним* по отношению к "левой" ячейке, т.е. он направлен внутрь "правой".

Таким образом, поток, заданный формулой (3.13), определяет баланс "правой" ячейки. Для "левой" ячейки необходимо поменять знак.

Для "левой" ячейки при учете потока через j -ую грань:

формула (3.47) перейдет в

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = [0.5 (F_q + F_{qj}) - 0.5 |A_j| (U_{qj} - U_q)] s_j \quad (3.64)$$

Подставляем (3.52) в (3.64):

$$\begin{aligned} & \left[I - 0.5\alpha \frac{\Delta t}{V_q} s_j (A_q^n + |A_j|) \right] \delta U_q^{n+1} - 0.5\alpha \frac{\Delta t}{V_q} s_j (A_{qj}^n - |A_j|) \delta U_{qj}^{n+1} \\ & = 0.5 \frac{\Delta t}{V_q} s_j (F_q^n + F_{qj}^n - |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)) \end{aligned} \quad (3.65)$$

или

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n \quad (3.66)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q &= I - 0.5\alpha \frac{\Delta t}{V_q} s_j (A_q^n + |A_j|) \\ \mathbf{A}_{qj} &= -0.5\alpha \frac{\Delta t}{V_q} s_j (A_{qj}^n - |A_j|) \\ \Delta U_q^n &= 0.5 \frac{\Delta t}{V_q} s_j (F_q^n + F_{qj}^n - |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)) \end{aligned} \quad (3.67)$$

Сравниваем с (3.56)

$$\begin{aligned} \Delta U_q^n &= -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [0.5 (F_q^n + F_{qj}^n) - 0.5 |A_j| (U_{qj}^n - U_q^n)] s_j \\ \mathbf{A}_q &= I + 0.5\alpha \Delta t \sum_{j \in q} (A_q^n + |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \\ \mathbf{A}_{qj} &= 0.5\alpha \Delta t (A_{qj}^n - |A_j|) \frac{s_j}{V_q} \end{aligned}$$

Все члены, содержащие Δt , поменяли знак.

3.2.5. Вязкие потоки

Вязкие потоки на гранях (в том числе граничных) Представление вязкого потока на грани:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n} &\equiv E_V \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} + F_V \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} + G_V \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} = E_V n_x + F_V n_y + G_V n_z = \\
 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} n_x + \tau_{yx} n_y + \tau_{zx} n_z \\ \tau_{xy} n_x + \tau_{yy} n_y + \tau_{zy} n_z \\ \tau_{xz} n_x + \tau_{yz} n_y + \tau_{zz} n_z \\ (u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} - q_x) n_x + (u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} - q_y) n_y + (u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} - q_z) n_z \\ -J_{1,x} n_x - J_{1,y} n_y - J_{1,z} n_z \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

Градиент:

$$\begin{aligned}
 \text{grad} \varphi &= \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \mathbf{k} \\
 \text{grad} \varphi \cdot \mathbf{n} &\equiv \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \\
 &= \frac{\partial \varphi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \varphi}{\partial y} n_y + \frac{\partial \varphi}{\partial z} n_z
 \end{aligned} \tag{3.69}$$

2.6.3. Вязкие потоки на границах для 3D случая.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u_i}{\partial x} &= \frac{\partial u_i}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial u_i}{\partial l} \frac{\partial l}{\partial x} + \frac{\partial u_i}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial x} = \frac{\partial u_i}{\partial n} n_x + \frac{\partial u_i}{\partial l} l_x + \frac{\partial u_i}{\partial m} m_x \\
 \frac{\partial u_i}{\partial y} &= \frac{\partial u_i}{\partial n} n_y + \frac{\partial u_i}{\partial l} l_y + \frac{\partial u_i}{\partial m} m_y \\
 \frac{\partial u_i}{\partial z} &= \frac{\partial u_i}{\partial n} n_z + \frac{\partial u_i}{\partial l} l_z + \frac{\partial u_i}{\partial m} m_z
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Обратное выражение:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} x_n & x_l & x_m \\ y_n & y_l & y_m \\ z_n & z_l & z_m \end{pmatrix} &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{n}} = \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1} = \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ l_x & l_y & l_z \\ m_x & m_y & m_z \end{pmatrix}^{-1} = \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T = \begin{pmatrix} n_x & l_x & m_x \\ n_y & l_y & m_y \\ n_z & l_z & m_z \end{pmatrix} \\
 \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ l_x & l_y & l_z \\ m_x & m_y & m_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x & l_x & m_x \\ n_y & l_y & m_y \\ n_z & l_z & m_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_i}{\partial n} &= \frac{\partial u_i}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial n} + \frac{\partial u_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial n} + \frac{\partial u_i}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial n} = \frac{\partial u_i}{\partial x} x_n + \frac{\partial u_i}{\partial y} y_n + \frac{\partial u_i}{\partial z} z_n = \frac{\partial u_i}{\partial x} n_x + \frac{\partial u_i}{\partial y} n_y + \frac{\partial u_i}{\partial z} n_z \\
\frac{\partial u_i}{\partial l} &= \frac{\partial u_i}{\partial x} x_l + \frac{\partial u_i}{\partial y} y_l + \frac{\partial u_i}{\partial z} z_l = \frac{\partial u_i}{\partial x} l_x + \frac{\partial u_i}{\partial y} l_y + \frac{\partial u_i}{\partial z} l_z \\
\frac{\partial u_i}{\partial m} &= \frac{\partial u_i}{\partial x} x_m + \frac{\partial u_i}{\partial y} y_m + \frac{\partial u_i}{\partial z} z_m = \frac{\partial u_i}{\partial x} m_x + \frac{\partial u_i}{\partial y} m_y + \frac{\partial u_i}{\partial z} m_z
\end{aligned} \tag{3.72}$$

1) Стенка без скольжения

$$\frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{(u_i)_c}{\Delta n} \tag{3.73}$$

Индекс «с» означает центр пристеночной ячейки; Δn - расстояние от этого центра до стенки.

Остальные производные $\frac{\partial u_i}{\partial l}$, $\frac{\partial u_i}{\partial m}$ берутся равными нулю.

2) Стенка со скольжением (или симметрия)

$$\begin{aligned}
U &= un_x + vn_y + wn_z \\
V &= ul_x + vl_y + wl_z \\
W &= um_x + vm_y + wm_z \\
U &= 0, \quad \frac{\partial V}{\partial n} = \frac{\partial W}{\partial n} = 0 \\
un_x + vn_y + wn_z &= 0 \\
\frac{\partial u}{\partial n} l_x + \frac{\partial v}{\partial n} l_y + \frac{\partial w}{\partial n} l_z &= 0 \\
\frac{\partial u}{\partial n} m_x + \frac{\partial v}{\partial n} m_y + \frac{\partial w}{\partial n} m_z &= 0 \\
\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial u}{\partial n} n_x + \frac{\partial u}{\partial l} l_x + \frac{\partial u}{\partial m} m_x
\end{aligned} \tag{3.74}$$

2.6.4. Выражение вязких потоков через основной вектор \mathbf{U} . Вязкие потоки являются функциями производных газодинамических параметров по пространственным переменным x, y, z .

Введем вектор:

$$\mathbf{V} = (\rho, u, v, w, h^T, C_1, \dots, C_{Nc-1}, T_1, \dots, T_{Nt})^T \tag{3.75}$$

Очевидно, что этот вектор является однозначной функцией искомого вектора \mathbf{U} , т.е.

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}(\mathbf{U}) \tag{3.76}$$

Эти соображения позволяют нам записать вязкие потоки в виде:

$$\begin{aligned}
 E_V &= M_{Ex} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{Ey} \frac{\partial V}{\partial y} + M_{Ez} \frac{\partial V}{\partial z} = M_{Ex} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} + M_{Ey} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} + M_{Ez} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial z}, \\
 F_V &= M_{Fx} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{Fy} \frac{\partial V}{\partial y} + M_{Fz} \frac{\partial V}{\partial z} = M_{Fx} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} + M_{Fy} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} + M_{Fz} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial z}, \\
 G_V &= M_{Gx} \frac{\partial V}{\partial x} + M_{Gy} \frac{\partial V}{\partial y} + M_{Gz} \frac{\partial V}{\partial z} = M_{Gx} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} + M_{Gy} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} + M_{Gz} \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial z}
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

Матрицы M_{Ex} , M_{Ey} , M_{Ez} и т.д. легко получаются из формул для вязких потоков. Например,

$$\begin{aligned}
 M_{Ex} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}u & v & w & \frac{1}{Pr} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{Sc} \end{pmatrix}, \quad M_{Ey} = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v & -\frac{2}{3}u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 M_{Ez} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & -\frac{2}{3}u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

$$\begin{aligned}
M_{Fx} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}v & u & 0 & 0 \end{pmatrix}, & M_{Fy} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & u & \frac{4}{3}v & w & \frac{1}{\text{Pr}} \end{pmatrix}, \\
M_{Fz} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & -\frac{2}{3}v & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.79}$$

$$\begin{aligned}
M_{Gx} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}w & 0 & u & 0 \end{pmatrix}, & M_{Gy} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3}w & v & 0 \end{pmatrix}, \\
M_{Gz} &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & u & v & \frac{4}{3}w & \frac{1}{\text{Pr}} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.80}$$

Таким образом, можно выразить вязкие потоки на гранях из формулы (3.68):

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n} &= E_V n_x + F_V n_y + G_V n_z = (n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx} + n_z M_{Gx}) \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial x} \\
&+ (n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy} + n_z M_{Gy}) \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial y} + (n_x M_{Ez} + n_y M_{Fz} + n_z M_{Gz}) \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial z} \\
&= M_x \frac{\partial U}{\partial x} + M_y \frac{\partial U}{\partial y} + M_z \frac{\partial U}{\partial z} = \mathbf{M} \cdot \nabla U
\end{aligned} \tag{3.81}$$

где

$$\begin{aligned} M_x &= (n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx} + n_z M_{Gx}) \frac{\partial V}{\partial U} \\ M_y &= (n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy} + n_z M_{Gy}) \frac{\partial V}{\partial U} \end{aligned} \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned} M_z &= (n_x M_{Ez} + n_y M_{Fz} + n_z M_{Gz}) \frac{\partial V}{\partial U} \\ M &= M_x \mathbf{i} + M_y \mathbf{j} + M_z \mathbf{k} \end{aligned} \quad (3.83)$$

$$\begin{aligned} &(n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx} + n_z M_{Gx}) \\ &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}n_x & n_y & n_z & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}n_y & n_x & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}n_z & 0 & n_x & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}un_x - \frac{2}{3}vn_y - \frac{2}{3}wn_z & vn_x + un_y & wn_x + un_z & \frac{1}{Pr}n_x \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.84)$$

$$\begin{aligned} &n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy} + n_z M_{Gy} = \\ &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_y & -\frac{2}{3}n_x & 0 & 0 \\ 0 & n_x & \frac{4}{3}n_y & n_z & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3}n_z & n_y & 0 \\ 0 & vn_x + un_y & \frac{4}{3}vn_y - \frac{2}{3}un_x - \frac{2}{3}wn_z & wn_y + vn_z & n_y \frac{1}{Pr} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.85)$$

$$\begin{aligned} &n_x M_{Ez} + n_y M_{Fz} + n_z M_{Gz} = \\ &= \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_z & 0 & -\frac{2}{3}n_x & 0 \\ 0 & 0 & n_z & -\frac{2}{3}n_y & 0 \\ 0 & n_x & n_y & \frac{4}{3}n_z & 0 \\ 0 & un_z + wn_x & vn_z + wn_y & \frac{4}{3}wn_z - \frac{2}{3}un_x - \frac{2}{3}vn_y & \frac{1}{Pr}n_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.86)$$

Градиент U :

$$\text{grad } U = \nabla U = \frac{\partial U}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial U}{\partial z} \mathbf{k} \quad (3.87)$$

Определение градиента Для этого используем методику, описанную в [103]

Градиент в ячейке С равен

$$\text{grad } \phi_C = \nabla \phi_C = \sum_{k=1}^{NB(C)} (c_k w_k (\phi_k - \phi_C)) = \sum_{k=1}^{NB(C)} (d_k (\phi_k - \phi_C)) \quad (3.88)$$

где $NB(C)$ - число соседей, через которые определяется градиента в ячейке С; w_k – весовые коэффициенты, равные обратному расстоянию между ячейкой С и соответствующим k -тым соседом.

$$w_k = \frac{1}{|r_{F_k} - r_C|} = \frac{1}{\sqrt{\Delta x_k^2 + \Delta y_k^2 + \Delta z_k^2}}$$

Градиент на грани между ячейками С и Q является линейной комбинацией градиентов в этих ячейках:

$$\begin{aligned} \nabla \phi_{CQ} &= r \nabla \phi_C + (1 - r) \nabla \phi_Q \\ 0 &\leq r \leq 1 \end{aligned} \quad (3.89)$$

3.2.6. Конечно-объемное уравнение, учитывающее только вязкие члены

Исходное уравнение (3.8)

$$V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} = \sum_{j \in q} F_{V,j} \cdot n_j s_j \quad (3.90)$$

Для вязкого потока через грань используем формулу (3.81), а для входящих в нее компонент градиента - формулы (3.88) и (3.89).

Таким образом,

$$\begin{aligned} (\nabla U)_{CQ} &= r (\nabla U)_C + (1 - r) (\nabla U)_Q = \\ &= r \sum_{k=1}^{NB(C)} (d_k (U_k - U_C)) + (1 - r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} (d_m (U_m - U_Q)) \\ (\nabla U)_C &= \sum_{k=1}^{NB(C)} (d_k (U_k - U_C)) \\ (\nabla U)_Q &= \sum_{m=1}^{NB(Q)} (d_m (U_m - U_Q)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})_{CQ} &= \\
&= M_{CQ} \cdot (\nabla U)_{CQ} = M_{CQ} \cdot \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} (d_k (U_k - U_C)) + (1 - r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} (d_m (U_m - U_Q)) \right] = \\
&= \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} M_{CQ} \cdot d_k (U_k - U_C) + (1 - r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} M_{CQ} \cdot d_m (U_m - U_Q) \right]
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Замечание. Вектор d является пространственным вектором, а вектор U - вектором, состоящим из неизвестных величин системы. Они независимы друг от друга, и поэтому их можно переставлять.

Используем явно-неявное представление потока:

$$\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n} = \alpha (\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})^{n+1} + (1 - \alpha) (\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})^n = \alpha \left[(\mathbf{F}_V)^{n+1} - (\mathbf{F}_V)^n \right] \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})^n \tag{3.92}$$

Неявное представление:

$$\begin{aligned}
&\left[(\mathbf{F}_V)^{n+1} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{F}_V)^n \cdot \mathbf{n} \right]_{CQ} \equiv (\delta \mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})_{CQ} \\
&= \left[r \sum_{k=1}^{NB(C)} M_{CQ} \cdot d_k (\delta U_k - \delta U_C) + (1 - r) \sum_{m=1}^{NB(Q)} M_{CQ} \cdot d_m (\delta U_m - \delta U_Q) \right]
\end{aligned} \tag{3.93}$$

Аналогично гипотезе Тисенджера-Кофи будем считать, что в неявном представлении потока достаточно учитывать только разности параметров в ячейках, прилежащих к грани, т.е.

$$\begin{aligned}
&\left[(\mathbf{F}_V)^{n+1} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{F}_V)^n \cdot \mathbf{n} \right]_{CQ} \\
&= [r M_{CQ} \cdot d_{C,Q} (\delta U_Q - \delta U_C) + (1 - r) M_{CQ} \cdot d_{Q,C} (\delta U_C - \delta U_Q)] \\
&= M_{CQ} \cdot [r d_{C,Q} - (1 - r) d_{Q,C}] (\delta U_Q - \delta U_C) = M_{CQ} \cdot d_{CQ} (\delta U_Q - \delta U_C)
\end{aligned} \tag{3.94}$$

Здесь под $d_{C,Q}$ подразумевается градиентный коэффициент, определенный в ячейке C по отношению к соседу Q ; а под $d_{Q,C}$ подразумевается градиентный коэффициент, определенный в ячейке Q по отношению к соседу C .

$$d_{CQ} = r d_{C,Q} - (1 - r) d_{Q,C} \tag{3.95}$$

Вероятно, для определения матрицы M_{CQ} следует использовать формулу типа (3.95).

Подставляем (3.94) в (3.92) и получаем окончательную формулу для неявного представления вязкого потока на грани CQ:

$$(\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})_{CQ} = (\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n})_{CQ}^n + \alpha M_{CQ} \cdot d_{CQ} (\delta U_Q - \delta U_C) \quad (3.96)$$

Вспоминаем, что

$$\begin{aligned} M &= M_x \mathbf{i} + M_y \mathbf{j} + M_z \mathbf{k} \\ d_{CQ} &= (d_{CQ})_x \mathbf{i} + (d_{CQ})_y \mathbf{j} + (d_{CQ})_z \mathbf{k} \end{aligned}$$

Таким образом

$$M_{CQ} \cdot d_{CQ} = M_x (d_{CQ})_x + M_y (d_{CQ})_y + M_z (d_{CQ})_z \quad (3.97)$$

Для представления (3.90) лучше преобразовать формулу (3.96) к виду:

$$\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j = (\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n + \alpha M_j \cdot d_j (\delta U_{qj} - \delta U_q) \quad (3.98)$$

Подставляем в (3.90) и получаем систему

$$\left[I + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \right] \delta U_q^{n+1} - \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \delta U_{qj}^{n+1} = \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [(\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n] s_j \quad (3.99)$$

Вывод:

$$\begin{aligned} V_q \frac{\partial U_q}{\partial t} &= \sum_{j \in q} \mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j s_j \\ \delta U_q &= \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [(\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n + \alpha M_j \cdot d_j (\delta U_{qj} - \delta U_q)] s_j \\ &= \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [(\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n] s_j + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \delta U_{qj} - \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \delta U_q \\ \left[I + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \right] \delta U_q - \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \delta U_{qj} &= \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [(\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n] s_j \end{aligned}$$

Эта система имеет такую же форму, как для невязких потоков (3.55)

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n$$

где

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_q &= I + \alpha \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (M_j \cdot d_j) s_j \\
\mathbf{A}_{qj} &= -\alpha \frac{\Delta t}{V_q} (M_j \cdot d_j) s_j \\
\Delta U_q^n &= \frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} [(\mathbf{F}_{V,j} \cdot \mathbf{n}_j)^n] s_j
\end{aligned} \tag{3.100}$$

Здесь, также как и для невязких потоков должно учитываться то, что для «левых» ячеек знак перед Δt должен меняться на противоположный по сравнению с «правыми» ячейками.

3.2.7. Вязкие потоки в случае 2D

В этом случае формулы (3.81), (3.82) имеют вид

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_V \cdot \mathbf{n} &= M_x \frac{\partial U}{\partial x} + M_y \frac{\partial U}{\partial y} = M \cdot \nabla U \\
M_x &= (n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx}) \frac{\partial V}{\partial U}, \quad M_y = (n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy}) \frac{\partial V}{\partial U}
\end{aligned} \tag{3.101}$$

Для матрицы $\frac{\partial V}{\partial U}$ используем формулу:

$$\frac{\partial V}{\partial U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -u/\rho & 1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -v/\rho & 0 & 1/\rho & 0 & 0 & 0 \\ (-H^T + \alpha(1 + \bar{\gamma})) / \rho & -\bar{\gamma}u/\rho & -\bar{\gamma}v/\rho & \bar{\gamma}/\rho & 0 & 0 \\ -C_s/\rho & 0 & 0 & 0 & 1/\rho & 0 \\ -Turb/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\rho \end{pmatrix} \tag{3.102}$$

где

$$\begin{aligned}
\alpha &= 0.5 (u^2 + v^2), \quad \bar{\gamma} = h^T / e^T, \\
H^T &= E^T + p/\rho = E^T + R_{\Sigma} T \\
H^T &= h^T + \alpha \\
E^T &= e^T + \alpha
\end{aligned} \tag{3.103}$$

Очевидно, что

$$-H^T + \alpha(1 + \bar{\gamma}) = -h^T + \bar{\gamma}\alpha = -e^T \bar{\gamma} + \bar{\gamma}\alpha = \bar{\gamma}(-e^T + \alpha) = \bar{\gamma}(2\alpha - E^T) \tag{3.104}$$

Вязкая матрица:

$$\begin{aligned} M_{CQ} \cdot d_{CQ} &= M_x (d_{CQ})_x + M_y (d_{CQ})_y \\ &= \left[(n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx}) (d_{CQ})_x + (n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy}) (d_{CQ})_y \right] \frac{\partial V}{\partial U} \end{aligned} \quad (3.105)$$

Матрицы M_{Ex} , M_{Fx} , M_{Ey} , M_{Fy} см. формулы (3.78), (3.79):

$$n_x M_{Ex} + n_y M_{Ey} =, \quad (3.106)$$

$$(n_x M_{Ex} + n_y M_{Fx}) = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}n_x & n_y & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3}n_y & n_x & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}un_x - \frac{2}{3}vn_y & un_y + vn_x & \frac{1}{Pr}n_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{Sc}n_x \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

$$(n_x M_{Ey} + n_y M_{Fy}) = \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_y & -\frac{2}{3}n_x & 0 & 0 \\ 0 & n_x & \frac{4}{3}n_y & 0 & 0 \\ 0 & un_y + vn_x & \frac{4}{3}vn_y - \frac{2}{3}un_x & \frac{1}{Pr}n_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{Sc}n_y \end{pmatrix} \quad (3.108)$$

3.3. Ограничители

Значения параметра f в центре грани j экстраполируются из центра ячейки q по формуле

$$f_j = f_q + \phi_q (\nabla f)_q \cdot \Delta r_{jq} \quad (3.109)$$

где $(\nabla f)_q$ - градиент f в центре ячейки q ; Δr_{jq} - вектор, выходящий из точки q в точку j ; ϕ_q - ограничитель (лимитер). При $\phi_q = 0$ имеем схему «против потока», при $\phi_q = 1$ - «неограниченную» схему второго порядка.

В качестве ограничителя применяется модифицированный ограничитель Барта–Джесперсена:

$$\phi_q = \psi_q \phi_q^{BJ} \quad (3.110)$$

где ϕ_q^{BJ} - базовый ограничитель Барта-Джесперсена в соответствии с [104, 105], а ψ_q - функция-«выключатель», которая в зоне сильных градиентов (таких как, например, скачок уплотнения) сводит схему к схеме «против потока».

Дополнительная функция ψ_q вводится из соображений численной устойчивости. Можно реализовать данную функцию двумя путями.

«Автоматический выключатель» исходя из полей скорости, давления и/или плотности, определяет положение скачка уплотнения и сводит численную схему к схеме «против потока» в определенной его окрестности. Данная реализация описана в разделе 3.4.

«Ручной выключатель» является заранее заданной функцией координат. Практика показала, что для течений с числом Маха свыше 10 целесообразнее использовать «ручную» функцию.

Базовый ограничитель Барта-Джесперсена ϕ_q^{BJ} определяется по следующему алгоритму [104, 105]:

1) определяются максимальные и минимальные значения параметра f в самой ячейке и во всех соседях:

$$f_q^{\max} = \max_{j \in q} (f_q, f_{qj}), \quad f_q^{\min} = \min_{j \in q} (f_q, f_{qj}) \quad (3.111)$$

2) Для каждой грани j , окружающую ячейку q , определяются нелимитированные значения параметра, т.е. по формуле (3.109) с $\phi_q^{BJ} = 1$

$$f_{t,j} = f_q + (\nabla f)_q \cdot \Delta r_{jq} \quad (3.112)$$

3) Для каждой грани j , окружающую ячейку q , определяется функция

$$\Phi_{qj} = \begin{cases} F_{BJ} \left(\frac{f_q^{\max} - f_q}{f_{t,j} - f_q} \right), & \text{при } f_{t,j} - f_q > 0 \\ F_{BJ} \left(\frac{f_q^{\min} - f_q}{f_{t,j} - f_q} \right), & \text{при } f_{t,j} - f_q < 0 \\ 1, & \text{при } f_{t,j} - f_q = 0 \end{cases} \quad (3.113)$$

4) выбираем минимальное значение из всех граней

$$\phi_q^{BJ} = \min_{j \in q} (\Phi_{qj}) \quad (3.114)$$

Здесь

$$F_{BJ} \left(\frac{\Delta_+}{\Delta_-} \right) = \min \left(1, \frac{\Delta_+}{\Delta_-} \right) \quad (3.115)$$

$$\Delta_+ = f_q^{\max, \min} - f_q, \quad \Delta_- = f_{t,j} - f_q$$

3.4. Реализация переключающей функции ψ

В данном разделе опишем автоматическую функцию переключения, используемую в формулах (3.110).

Согласно подходу Моро и др. [106] идентификатор скачка может быть определен следующим образом. Введем параметр:

$$s_\epsilon = -k_{shock} * \Delta r_{qp} * \text{div } \mathbf{u} / c_{crit j} \quad (3.116)$$

где Δr_{qp} - расстояние между ячейками, между которыми лежит грань j , k_{shock} - калибровочная константа (в данном исследовании предполагалось, что $k_{shock} = 5$), $c_{crit} = \sqrt{\frac{2\gamma RT_{tot}}{\gamma + 1}}$ — критическая скорость звука (индекс j означает, что данная скорость вычисляется в центре грани).

В области, где $s_\epsilon > 1$, находится скачок.

Для применения данного параметра в виде переключателя следует применить к нему активационную функцию. В данной работе в качестве такой функции использовалась сигмоида:

$$\psi_q = \frac{1}{1 + \exp[-a_{shock} (s_\epsilon - b_{shock})]} \quad (3.117)$$

где $a_{shock} = 5$, $b_{shock} = 0.8$ - калибровочные константы.

Результирующая функция ψ_q принимает значения в пределах от 0 до 1.

3.5. Численный метод решения основной системы с жесткими источниками

При использовании расщепления невязких потоков, гипотезы Тисенджер–Кофи для вязких потоков [107] и неявного представления источника, уравнение (3.8) преобразуется к следующей неявной форме:

$$\left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right] \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n \quad (3.118)$$

Явное приращение ΔU_q^n определяется формулой

$$\Delta U_q^n = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} (\mathbf{F}_{C,j}^n - \mathbf{F}_{V,j}^n) \cdot \mathbf{n}_j s_j + \Delta t H_q^n \quad (3.119)$$

Уравнение (3.118) по своей сути представляет систему линейных уравнений с коэффициентами в виде блочных матричных элементов; ее размерность равна $(N \times N)$, где N – число ячеек сетки. Матрица этой системы является разреженной (число ненулевых членов в каждой строке для каждой ячейки не превышает числа соседних ячеек плюс 1).

Методы решения разреженных систем линейных уравнений с числовыми коэффициентами подробно описаны, например, в [108]. Эти методы могут быть расширены и на системы с блочными матричными элементами. Но при этом необходимо на каждой итерации в каждой ячейке производить обращение матрицы $\mathbf{B}_q = \left[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right]$, размер которой равен числу уравнений в основной системе (3.1).

Число таких уравнений для реальных задач с большим количеством химических компонентов и энергетических мод может достигать 50 и более. На больших сетках многократное обращение матрицы \mathbf{B}_q может потребовать огромных вычислительных ресурсов.

Но можно существенно упростить задачу.

3.5.1. Матрицы Якоби для вязких и невязких потоков

Прежде всего, следует отметить, что все матрицы Якоби, связанные с вязкими/невязкими потоками, можно привести к виду [91]:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_{11} & 0 \\ \Phi_{21} & D \end{pmatrix} \quad (3.120)$$

Матрица-блок Φ_{11} связана с первыми пятью уравнениями системы (3.1) и имеет размер 5×5 . Остальные матрицы-блоки связаны с дополнительными уравнениями (химических компонентов, энергий и т.д. и имеют следующие размеры: Φ_{21} - $N_a \times 5$; D - диагональная матрица размером N_a . Здесь N_a - число дополнительных уравнений.

Основные достоинства матрицы вида (3.120):

1) ее обращение сводится к однократному обращению матрицы Φ_{11} и тривиальным операциям перемножения матриц (формула Фробениуса):

$$\Phi^{-1} = \begin{pmatrix} \Phi_{11}^{-1} & 0 \\ -D^{-1}\Phi_{21}\Phi_{11}^{-1} & D^{-1} \end{pmatrix} \quad (3.121)$$

2) любые необходимые операции с такой матрицей (обращение, перемножение) не меняют ее форму, т.е. блок Φ_{12} остается нулевым, а блок Φ_{22} остается диагональной матрицей.

Как следствие, блочный матричный элемент A_q также имеет форму (3.120).

Таким образом, решение системы (3.118) при нулевом источнике $H = 0$ существенно менее затратное с точки зрения компьютерных ресурсов по сравнению с тем случаем, когда осуществляется прямое обращение матрицы V_q .

Ситуация существенно усложняется в случае, когда источник H не равен нулю. Во-первых, матрица V_q уже не имеет форму (3.120), и операции с ней не обладают теми преимуществами, о которых говорилось выше. Во-вторых, очень часто характерное время химических и энергетических процессов существенно меньше характерного газодинамического времени, и прямое решение системы

(3.118) требует уменьшения шага по времени. Это происходит из-за того, что для обеспечения устойчивого решения выбор шага должен ориентироваться на наиболее быстрые процессы.

3.5.2. Расщепление по физическим процессам

Наиболее часто для решения указанных выше проблем используется численная схема с расщеплением по физическим процессам. В этом случае на каждом шаге по времени последовательно решаются уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial t} = H \quad (3.122)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (E_C - E_V) + \frac{\partial}{\partial y} (F_C - F_V) + \frac{\partial}{\partial z} (G_C - G_V) = 0 \quad (3.123)$$

При этом на каждом шаге по времени начальным условием для уравнения (3.123) является решение, полученное в результате решения уравнения (3.122). Приращение, полученное в результате решения (3.122), равно

$$\delta \tilde{U}_q^{n+1} = \left[I - \alpha \Delta t (\partial H / \partial U)_q^n \right]^{-1} \Delta t H_q^n \quad (3.124)$$

Здесь $\tilde{U}^{n+1} = U^n + \delta \tilde{U}^{n+1}$

Приращение, полученное в результате решения (3.123), находится из решения системы

$$\mathbf{A}_q \delta \mathcal{U}_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta \mathcal{U}_{qj}^{n+1} = \Delta \mathcal{U}_q^n \quad (3.125)$$

где явное приращение равно

$$\Delta \mathcal{U}_q^n = -\frac{\Delta t}{V_q} \sum_{j \in q} \left[\mathbf{F}_{C,j} \left(\tilde{U}^{n+1} \right) - \mathbf{F}_{V,j} \left(\tilde{U}^{n+1} \right) \right] \cdot \mathbf{n}_j s_j \quad (3.126)$$

Здесь $\mathcal{U}^{n+1} = \tilde{U}^{n+1} + \delta \mathcal{U}^{n+1}$. Общее приращение основного вектора равно

$$\delta \mathcal{U}^{n+1} = \delta \tilde{U}^{n+1} + \delta \mathcal{U}^{n+1} = \mathcal{U}^{n+1} - \mathcal{U}^n \quad (3.127)$$

Недостатки метода расщепления по физическим процессам очевидны: отключение

на каждом полушаге взаимодействия различных процессов может приводить к получению нефизичных результатов. Кроме того, возможны проблемы со сходимостью – результаты, полученные после решения уравнения (3.122), могут несколько отличаться от полученных после решения (3.123).

Желательно избежать раздельного приращения искомой функции в результате различных физических процессов и получить полностью связанную схему.

3.5.3. Полностью связанная схема 1

Применим следующий метод.

Преобразуем уравнение (3.118):

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n + \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \delta U_q^{n+1} \quad (3.128)$$

И рассмотрим решение уравнения

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = H \quad (3.129)$$

относительно новой переменной \bar{U} . (Фактически это уравнение (3.1), в котором отброшены вязкие/невязкие потоки). Решением этого уравнения при использовании неявной схемы Эйлера является

$$\delta \bar{U}_q^{n+1} = \left[I - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t H_q^n \quad (3.130)$$

Подставим это решение в уравнение (3.128) вместо δU_q^{n+1} :

$$\mathbf{A}_q \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n - \Delta t H_q^n + \delta \bar{U}_q^{n+1} \quad (3.131)$$

При выводе этой формулы использовалось несложное преобразование

$$\begin{aligned} & \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \left[I - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t H_q^n = \\ & = - \left[-I + I - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right] \left[I - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t H_q^n \\ & = \left[I - \alpha \Delta t \left(\frac{\partial H}{\partial U} \right)_q^n \right]^{-1} \Delta t H_q^n - \Delta t H_q^n = \delta \bar{U}_q^{n+1} - \Delta t H_q^n \end{aligned}$$

Сравнение с формулой (3.119) показывает, что стоящее в правой части (3.131) выражение $\Delta U_q^n - \Delta t H_q^n$ есть не что иное, как явное приращение основного вектора, обусловленное только вязкими и невязкими потоками.

Система (3.131) быстро и эффективно решается таким же методом, как система (3.118) с нулевым источником.

На первый взгляд, может показаться, что данная численная схема очень похожа на метод расщепления по физическим процессам. Но самом деле, имеется качественное отличие. Система (3.131) решается относительно полного приращения основного вектора δU_q^{n+1} и является полностью связанной. Таким образом, предлагаемая численная схема лишена недостатков, присущих схеме с расщеплением по физическим процессам.

Легко показать, что численная схема (3.131) аппроксимирует исходное уравнение (3.1) с первым порядком по Δt и является безусловно устойчивой.

Как уже говорилось, решение уравнений химической кинетики и т.п. может потребовать существенно меньший шаг по времени по сравнению с газодинамическим шагом.

Поэтому в областях, где происходят быстрые химические реакции, для решения уравнения (3.129) используются неявные многошаговые методы, в частности метод Гира [109].

На шаге $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ решается система дифференциальных уравнений относительно неизвестного вектора \mathbf{Y}

$$\frac{dY}{dt} = H(t, Y) \quad (3.132)$$

Начальное условие для уравнения (3.132):

$$Y_0 = Y(0) = U(t^n) = U^n \quad (3.133)$$

Применим к решению этого уравнения метод Гира.

1) Шаг $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ разбивается на N_p частей

$$h_j = h = \Delta t / N_p \quad (3.134)$$

Значение N_p может быть разным для разных частей системы и для разных ячеек.

2) Выбирается макс.порядок метода Гира $m_{\max} \leq 4$

На первом шаге h_1 используется метод Гира первого порядка $m = 1$, на второго – второго порядка и т.д., но не больше m_{\max}

Значение m_{\max} также может быть разным для разных частей системы и для разных ячеек.

3) На каждом j -ом шаге необходимо решить систему нелинейных уравнений относительно Y_{j+1} :

$$hH(t_{j+1}, Y_{j+1}) - a_0 Y_{j+1} = R \quad (3.135)$$

где

$$R = \sum_{k=1}^m a_k Y_{j-k+1} \quad (3.136)$$

Эту нелинейную систему можно решать отдельно для каждой части основной системы уравнений и соответствующих частей векторов **U** и **H**. Для решения используется метод Ньютона.

Значения коэффициентов:

m	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
1	1	-1			
2	3/2	-2	1/2		
3	11/6	-3	3/2	-1/3	
4	25/12	-4	3	-4/3	1/4

3.5.4. Полностью связанная схема 2

Матрицу $\partial H/\partial U$ можно представить в виде:

$$\partial H/\partial U = d + g \quad (3.137)$$

где d - диагональная часть матрицы $\partial H/\partial U$, а g - недиагональная.

Тогда уравнение (3.118) преобразуется к виду:

$$[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t d_q^n] \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n + \alpha \Delta t g_q^n \delta U_q^{n+1} \quad (3.138)$$

Можно снова подставить в правую часть этого уравнения приращение $\delta \bar{U}_q^{n+1}$, полученное в результате решения уравнения (3.129), вместо δU_q^{n+1} :

$$[\mathbf{A}_q - \alpha \Delta t d_q^n] \delta U_q^{n+1} + \sum_{j \in q} \mathbf{A}_{qj} \delta U_{qj}^{n+1} = \Delta U_q^n + \alpha \Delta t g_q^n \delta \bar{U}_q^{n+1} \quad (3.139)$$

После определения правой части уравнения (3.139) это уравнение эффективно решается таким же методом, как система (3.118) с нулевым источником, т.к. матрица имеет форму (3.120) и, следовательно, обладает всеми ее преимуществами.

В остальном этот метод реализуется полностью так же, как и метод, описанный в п.3.5.3

Численные эксперименты показали, что для уравнений химической кинетики наиболее устойчивые результаты получаются при использовании метода, описанного в п. 3.5.3, а для энергетических уравнений – метод п.3.5.4

Глава 4

Программная реализация численного метода

Одной из основных характеристик численного метода является возможность создания его высокопроизводительной и масштабируемой по объёму задачи и числу процессорных ядер программной реализации. Глава посвящена описанию ключевых аспектов реализации программного кода Universe CFD, в котором реализован численный метод представленный в главе 3 (в двухмерной плоской, двухмерной осесимметричной и трехмерной постановке), с использованием параллельных вычислений и с учётом особенностей современных вычислительных систем.

Материалы данной главы были частично опубликованы в [36].

4.1. Особенности современных вычислительных систем

Сложность вычислительных задач в аэрокосмической отрасли непрерывно растет, что требует соответствующего роста производительности компьютеров. В последние годы увеличение производительности однопроцессорных систем, зависящее от тактовой частоты процессора и числа операций, выполняемых за один такт, значительно замедлилось, и основной рост общей производительности стал обеспечиваться за счет увеличения количества процессорных ядер (см. рис. 4.1) и внедрения векторных инструкций, которые позволяют выполнять одну и ту же операцию одновременно над несколькими элементами.

Программное обеспечение, созданное для однопроцессорных систем, не будет эффективно работать на многопроцессорных системах без соответствующей модификации для использования всех доступных ресурсов. То же самое относится и к векторным инструкциям.

Скорость процессора - не единственный фактор, влияющий на общую производительность компьютерной системы. Производительность оперативной памя-

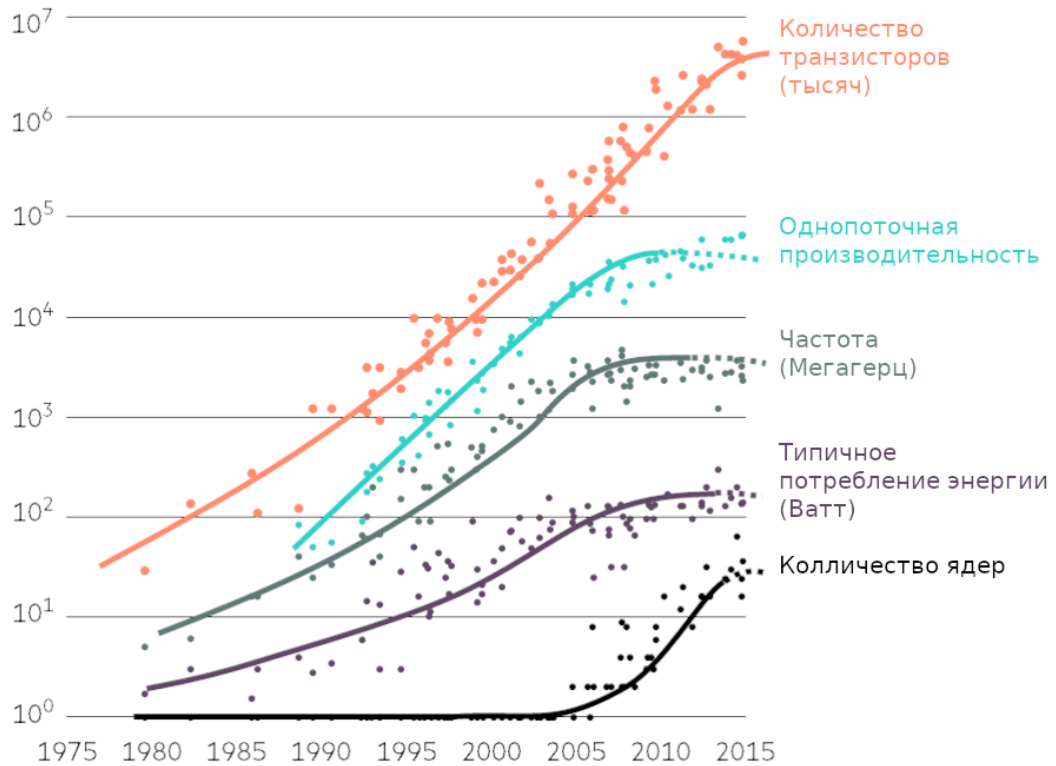


Рис. 4.1. Развитие процессоров

ти также очень важна, особенно при работе с большими объемами данных. В этом аспекте ситуация еще хуже, чем со скоростью процессора. Основная проблема заключается не в самом факте слабого увеличения производительности оперативной памяти, а в увеличении разрыва между ее производительностью и производительностью процессора [110] (рис. 4.2). Наиболее сильное влияние на производительность оперативной памяти оказывают в большей степени задержки случайного доступа. Это приводит к тому, что процессор часто простаивает в ожидании данных из оперативной памяти вместо выполнения вычислений.

Современные процессоры используют различные методы для сглаживания разницы в производительности между процессором и оперативной памятью. К таким методам относятся:

- Процессорный кэш (CPU cache), который ускоряет работу процессора.
- Предсказание переходов (branch prediction), которое позволяет предсказать, какой путь исполнения программы будет выбран.

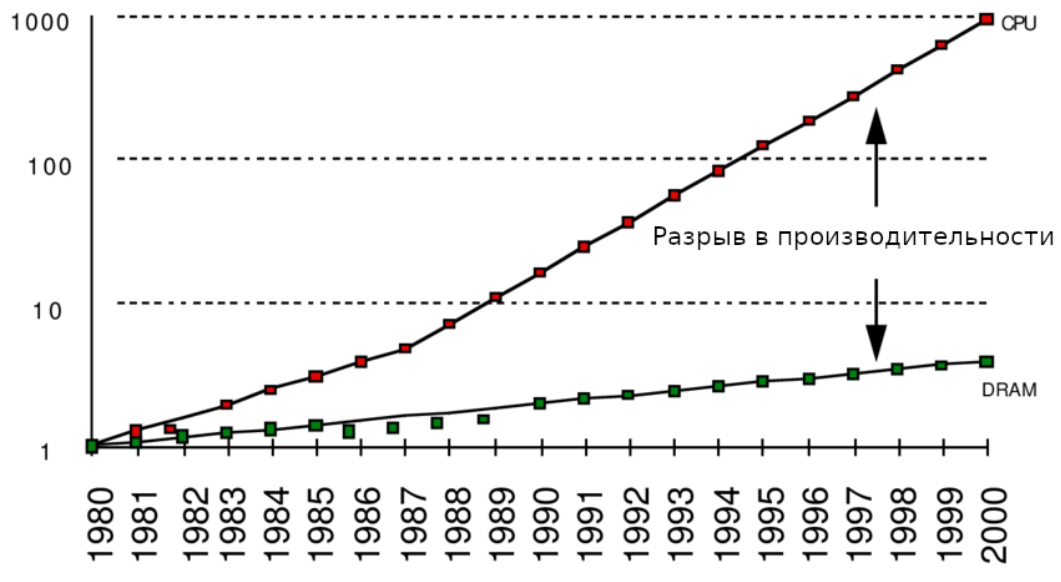


Рис. 4.2. Разрыв в производительности между процессорами и оперативной памятью

- Спекулятивное исполнение (speculative execution), которое начинает исполнение кода до того, как станет известно, будет ли оно нужно.
- Предварительная (упреждающая) выборка данных и команд (data prefetching, instruction prefetching), которая загружает данные и команды заранее, чтобы сократить время ожидания.

Для обеспечения максимальной эффективности этих методов и приближения производительности процессора к максимально возможной, требуется особый подход к архитектуре программного кода, в частности к обработке данных и их размещению в оперативной памяти.

4.2. Общая архитектура и алгоритм работы программного кода

Universe CFD

Код Universe CFD представляет собой реализацию численного метода, предложенного в настоящей работе. Он применяет метод конечных объемов на неструктурированной сетке для дискретизации уравнений по пространству и использует неявный метод по времени. Алгоритм можно кратко описать следующим алгорит-

мом:

1. Загрузка расчётной сетки и расчет геометрических характеристик ее элементов.
2. Задание начальных полей искомых величин в расчётной области.
3. Задание граничных условий.
4. Заполнение матриц коэффициентов и вектора источников.
5. Решение системы линейных уравнений итерационным методом.
6. Обновление значений искомых величин в расчётной области.
7. Проверка условий завершения расчета и переход к пп. 3 или 8 (в зависимости от результатов проверки).
8. Вывод результатов расчета.

Временной шаг, условия сходимости при решении системы уравнений и условия сходимости самого метода различны для стационарной и нестационарной задач. Стационарные задачи решаются методом установления.

Далее более подробно рассмотрим реализацию описанного алгоритма с привязкой к архитектурным решения использованным в базовой (последовательной) версии программного кода Universe CFD.

Загрузка расчётной сетки. Расчётная сетка загружается в специальную структуру данных, где все элементы расчётной сетки, такие как ячейки, грани, рёбра и узлы представлены в виде элементов графа (рис. 4.3), что позволяет быстро находить топологическую связь между элементами расчётной сетки. После загрузки расчётной сетки производится расчёт геометрических характеристик ячеек и граней, необходимых для дальнейших вычислений.

Геометрические характеристики в программном коде Universe CFD хранятся в памяти в виде структуры массивов (SoA) [111] (рис. 4.4, а), то есть для каждой характеристики используется отдельный массив - в противоположность схеме «Массив структур (Array of Structs, AoS)» (рис. 4.4, б). Номер элемента в массиве соответствует номеру ячейки или грани. Это позволяет более эффективно исполь-

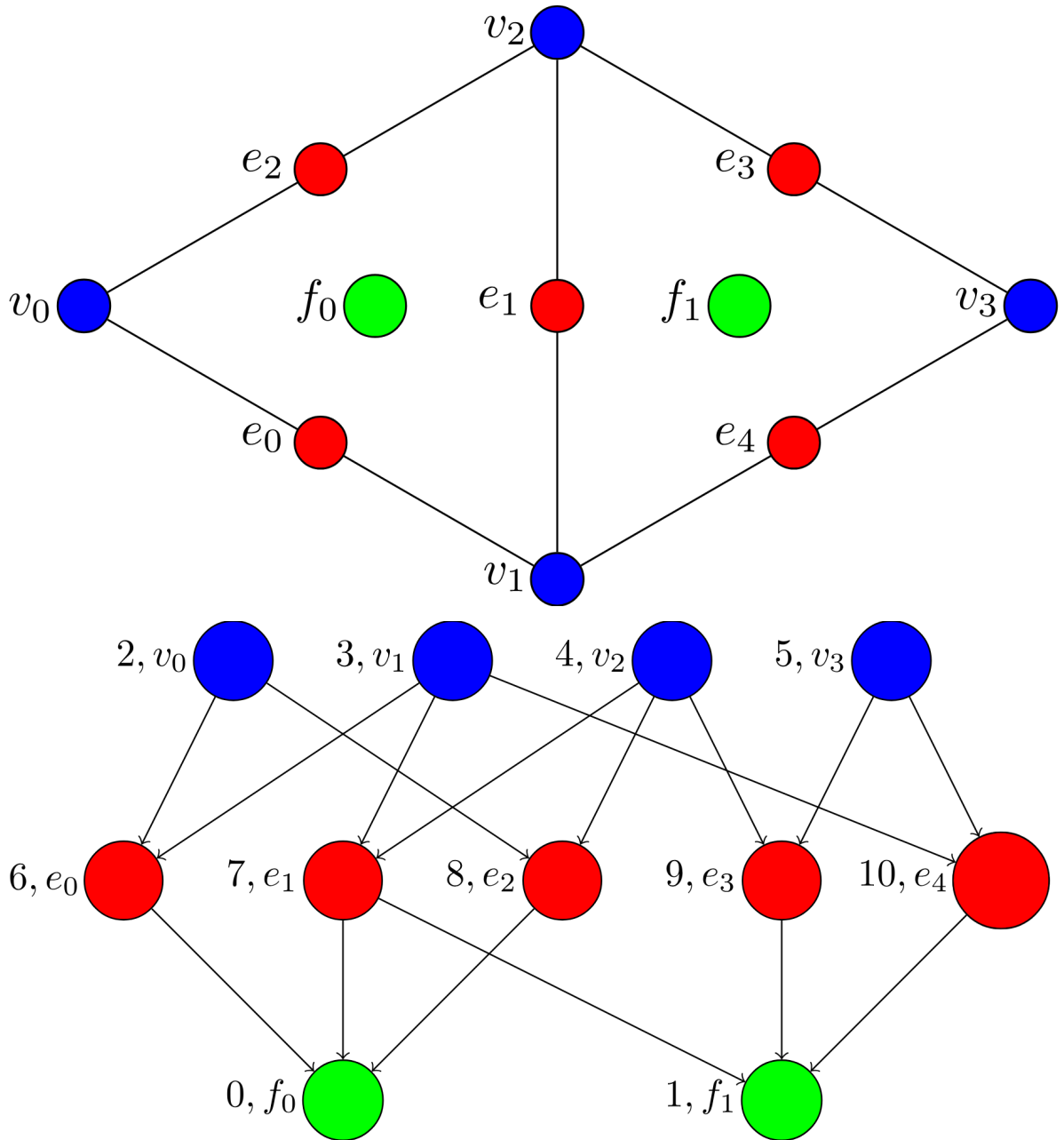


Рис. 4.3. Часть расчётной сетки и её представление в виде графа

s[0]	x ₁	y ₁	z ₁
s[1]	x ₂	y ₂	z ₂
s[2]	x ₃	y ₃	z ₃
s[3]	x ₄	y ₄	z ₄

(a)

s_x	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄
s_y	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄
s_z	z ₁	z ₂	z ₃	z ₄

(б)

Рис. 4.4. Массив структур (а) и структура массивов (б).

зывать кэш процессора за счет загрузки больших объемов данных из оперативной памяти. Если данные организованы в виде массива структур (AoS), при обработке следующей структуры данные для нее не будут находиться в кэше, и произойдет обращение к оперативной памяти. В конечном итоге частота обращений к оперативной памяти увеличится, что приведет к снижению производительности.

Задание начальных полей параметров величин Начальные распределения задаются разными методами. Возможно задание постоянных условий, соответствующих выбираемому пользователем ГУ, задание полей полностью вручную, либо с помощью результатов предыдущего расчёта.

Для хранения текущих расчетных значений величин используется вектор консервативных переменных. Дополнительные параметры, необходимые для расчётов, хранятся в виде скалярных, векторных и тензорных полей.

Задание граничных условий Частой практикой для задания граничных условий при реализации метода конечных объёмов является использование так называемых мнимых ячеек (ghost cells). Данные ячейки располагают на границе расчётной области и задают в них значения таким образом, чтобы при расчёте потока через пограничную грань соблюдались необходимые граничные условия. Данный подход связан с определенными сложностями и требует прохода по мнимым ячейкам для корректировки их значений на каждом шаге.

В предлагаемом программном коде не используются мнимые ячейки для зада-

ния граничных условий, вместо этого ГУ задаются непосредственно на границе. В зависимости от типа границы, расчет потока производится соответствующим образом. В связи с этим, границы разных типов сохраняются в отдельных массивах, а определение типа границы выполняется для всего массива в целом перед его обработкой. Такой подход позволяет избежать дополнительных ветвлений в программе, которые могли бы негативно повлиять на производительность из-за взаимодействия со встроенным механизмом прогнозирования ветвлений процессора. Проблема в том, что этот механизм работает лучше всего, когда ветвление следует определенной модели, в то время как полностью случайное ветвление может привести к снижению производительности, так как каждый неудачный прогноз вынуждает процессор откатывать свое внутреннее состояние на несколько шагов назад, требуя значительного количества тактов.

Заполнение массивов Матрицы коэффициентов представляют собой квадратные, разреженные матрицы, размер которых равен количеству ячеек сетки. Каждый ненулевой элемент в этой матрице является блочной матрицей, состоящей из трех блоков. Размер каждого блока зависит от числа уравнений. Вектор исходных данных, по сути являясь двумерным массивом, хранится в виде одномерного массива с длиной равной количеству ячеек умноженному на количество уравнений.

Для вычисления вязких и невязких потоков используется проход по граням сетки. При этом рассчитывается поток через каждую грань и соответствующие коэффициенты вносятся в матрицу и вектор источников. Направление потока определяется с помощью нормали к поверхности грани и заранее ориентированной в условленном направлении (информация об ориентации берется из файла сетки).

Для эффективного с вычислительной точки зрения обхода граней используется структура данных, упомянутая выше. Массив граней разделяется на отдельные массивы по типу граней (внутренние и несколько граничных). Все массивы относящиеся к граням, например геометрические характеристики, ориентация и проч. разделяются на отдельные массивы с одинаковой индексацией.

Описанный подход позволяет обеспечить для разных типов граней разный набор данных (например у граничных граней нет массива с индексом соседней ячейки). При этом нет необходимости хранить индексы граней, а при обходе по граням обеспечивается эффективное использование кэша процессора, т. к. данные в массивах граней хранятся в том же порядке, в котором происходит обход граней.

Для заполнения вектора источников химических реакций, турбулентных характеристик и т. д. используется обход по ячейкам.

Решение системы уравнений Для решения получившейся системы уравнений используются методы Крыловского типа. В частности - обобщённый метод минимальных невязок (англ. Generalized minimal residual method, GMRES) [112]. Данный метод на практике показал свою наибольшую эффективность (с точки зрения скорости сходимости и устойчивости).

В качестве предобуславливателя (pre-conditioner) используется простой предобуславливатель Якоби [113].

Обновление полей искомых величин в расчётной области Результат решения системы уравнений используется для корректировки текущего значения вектора консервативных переменных, после чего на его основе производится пересчет значений полей термодинамических величин.

Проверка условий прекращения счета Обновляются значения невязки и проверяются условия сходимости (прекращения счета) в зависимости от типа задачи.

Вывод результатов С помощью вектора консервативных величин вычисляются необходимые для вывода в качестве результатов поля основных и вспомогательных величин, а также интегральные коэффициенты и выводятся в необходимом формате.

4.3. Параллельные вычисления

В данной работе под термином "параллельные вычисления" понимается метод организации обработки данных, при котором одинаковые операции выполняются над разными частями данных одновременно (параллельно). Существует несколько методов организации параллельных вычислений, наиболее распространенными из которых являются:

1. Параллельное выполнение задач через общую память: потоки выполнения в одном процессе операционной системы или отдельные процессы в операционной системе взаимодействуют через ОЗУ. Преимущество этого метода в том, что все потоки имеют полный доступ к общим данным и, следовательно, нет необходимости в обмене данными. Недостаток - необходимость координации потоков с помощью специальных механизмов синхронизации. Правильное управление таким взаимодействием является сложной задачей. Также невозможно организовать такое взаимодействие между отдельными узлами сети.
2. Взаимодействие через обмен сообщениями: процессы обмениваются данными через сетевое соединение. Преимущества такого способа взаимодействия в том, что каждый процесс может рассматриваться как однопоточный и, следовательно, отсутствует необходимость в использовании механизмов синхронизации, а обмен данными может происходить между отдельными узлами сети.
3. Комбинирование способов взаимодействия: использование общей памяти внутри одного узла сети и обмен сообщениями между узлами. Этот метод является наиболее производительным, но и наиболее сложным в реализации.

Закон Амдала Максимально возможный прирост производительности при использовании параллельных вычислений определяет логическое заключение, назы-

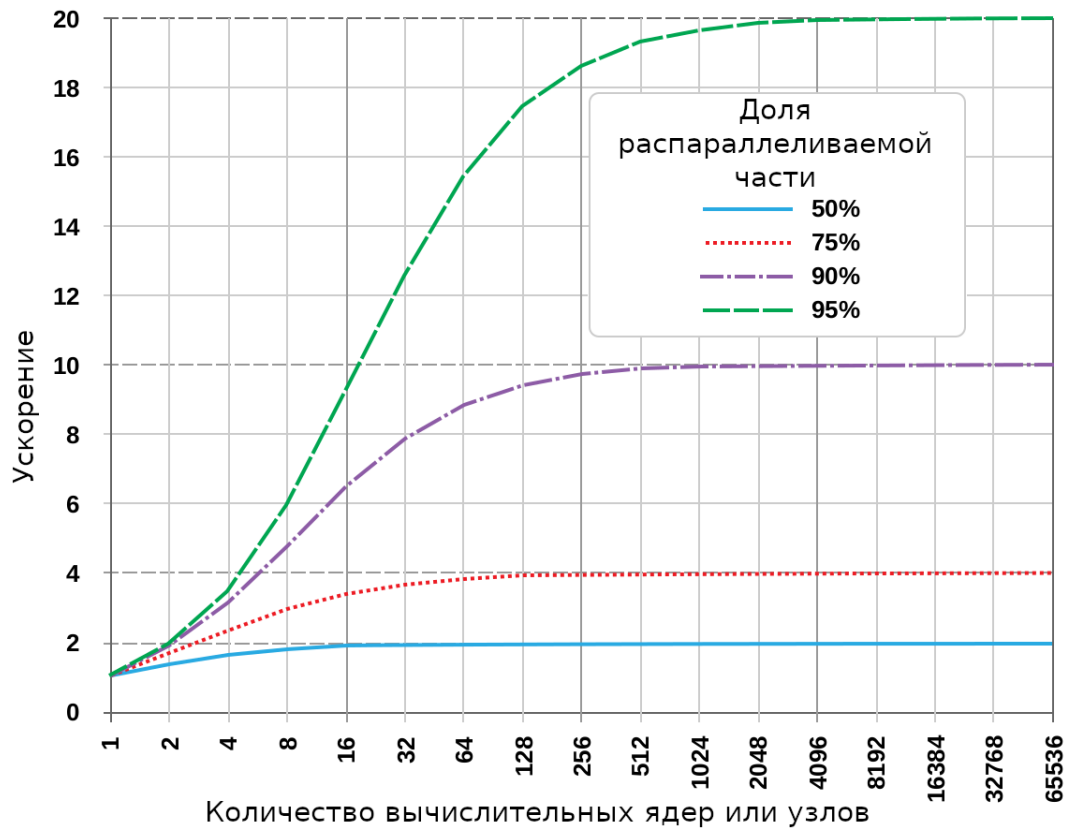


Рис. 4.5. Зависимость ускорения исполнения программы от доли распараллеливаемой части программного кода

ваемое законом Амдала [114], который гласит: "В случае, когда задача разделяется на несколько частей, суммарное время её выполнения на параллельной системе не может быть меньше времени выполнения самого медленного фрагмента".

$$S_p = \frac{1}{\alpha + \frac{1-\alpha}{p}} \quad (4.1)$$

где S_p — ожидаемое ускорение; α — доля времени вычислений, которые могут быть получены только последовательными расчётами, p — количество ядер на которые производится распараллеливание.

Смысл данного закона заключается в том, что ускорение исполнения программы на любом, даже бесконечно большом множестве вычислительных устройств, будет ограничено временем необходимым на выполнение последовательной части кода (см. рис. 4.5).

Технология MPI Для реализации параллельных вычислений в компьютерном коде Universe CFD применяется т.н. технология MPI (Message Passing Interface) [115], или Интерфейс передачи сообщений. Данная технология представляет собой программный интерфейс обмена данными между отдельными процессами. Интерфейс стандартизован и имеет несколько свободных и коммерческих реализаций в виде программных библиотек.

Функции интерфейса включают:

- Обмен сообщениями между отдельными процессами
- Коллективное взаимодействие процессов
- Взаимодействие в группах процессов
- Реализация топологии процессов
- Динамическое создание процессов и управление ими
- Односторонние связи
- Параллельный ввод-вывод.

Базовым механизмом взаимодействия при использовании MPI является обмен сообщениями между вычислительными процессами. Для этого необходимо указать следующие параметры:

- Идентификатор коммутатора (номер группы процессов).
- Номер процесса-отправителя (его ранг в группе).
- Номер процесса-получателя.
- Тип сообщения.

Взаимодействие между процессами может осуществляться различными способами:

- **Блокирующим:** при вызове функции обмена данными процесс блокируется до тех пор, пока не завершится обмен данными.
- **Неблокирующим:** после вызова функции обмена управление сразу возвращается в программу, и обмен данными происходит в фоновом режиме. Однако, прежде чем использовать полученные данные, необходимо вызвать дополнительную функцию блокировки, которая ожидает завершения обмена.

Неблокирующие операции позволяют скрыть задержки, связанные с обменом данными.

Соккрытие задержек обмена данными Один из самых медленных компонентов вычислительной системы - ввод и вывод, включая передачу данных по сети. Проблема не столько в скорости передачи данных, сколько во времени их ожидания, то есть в промежутке между запросом данных и началом их передачи. В случае использования интерфейса MPI в рамках одного узла обычно применяется оптимизация: обмен данными происходит через оперативную память, и задержка не заметна. Однако, при обмене данными между разными узлами в сети нужно применять методы сокращения задержек.

Наиболее распространенный метод - перекрытие во времени обмена данными и вычислений. Это достигается путем начала обмена данными через неблокирующий интерфейс, как только готовы все данные для передачи, и выполнения параллельных вычислений, которые не зависят от передаваемых данных.

Сильная и слабая масштабируемость программного кода Для оценки качества программы, которая выполняет параллельные вычисления, используют меры сильной и слабой масштабируемости.

Сильная масштабируемость показывает, как изменяется время выполнения задачи с увеличением числа процессоров (или узлов), при условии, что общий

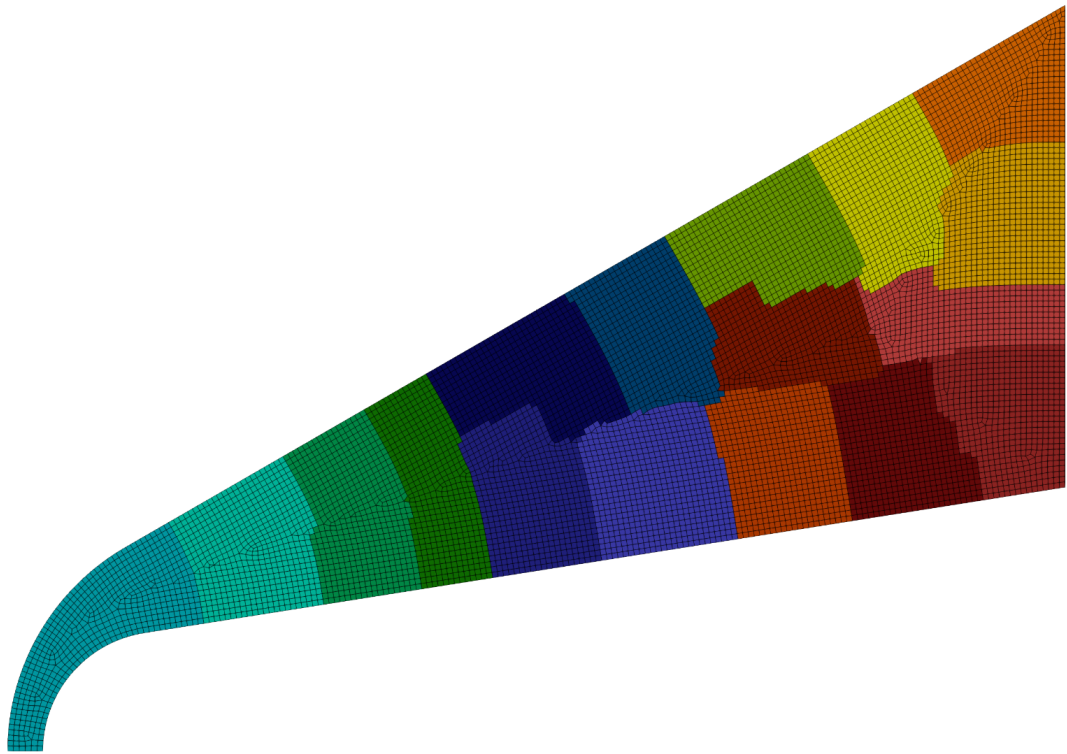


Рис. 4.6. Разбиение сетки на отдельные части

объем задачи остается неизменным.

Слабая масштабируемость, в свою очередь, показывает, как меняется время выполнения задачи при увеличении числа процессоров (или узлов), если объем задачи, приходящийся на один процессор (или узел), остается постоянным. [116].

4.3.1. Особенности параллельной реализации программного кода

Параллельная реализация программного кода Universe CFD основана на организации обмена данными посредством MPI.

В качестве механизма распределения вычислительной нагрузки на отдельные процессы используется разбиение расчётной сетки на отдельные части (см. рис. 4.6).

Поскольку численный метод оперирует значениями соседних ячеек, разбиение сетки делается с перекрытием, зависящим от выбранного порядка аппроксимации (рис. 4.7), при этом ячейки, входящие в данное перекрытие, считаются принадлежащими соседнему процессу.

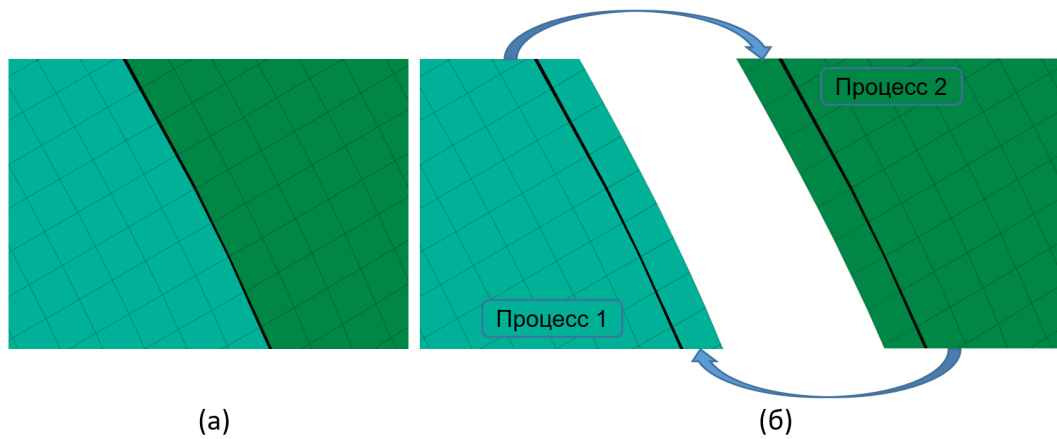


Рис. 4.7. (а) Граница разделения сетки, (б) Части сетки на 1-м и 2-м процессах с перекрытием (стрелками показан порядок обмена данными)

Согласно закону Амдала, для ускорения расчёта, параллельными необходимо максимальное число этапов работы алгоритма.

Параллельная реализация скалярных, векторных и тензорных полей Большинство полей величин в параллельной версии программного кода, как и в последовательной версии, представляют собой массивы размерностью, соответствующей количеству ячеек части сетки обрабатываемой данным процессом. В некоторых ситуациях, таких как расчет химических характеристик и параметров турбулентности или другие виды вычислений, может быть достаточно выполнить расчет только для ячеек, принадлежащих данному процессу, игнорируя при этом ячейки, принадлежащие соседним процессам. Чтобы при обработке ячеек избежать постоянных проверок принадлежности ячеек, они пронумерованы таким образом, чтобы ячейки, принадлежащие соседним процессам, находились после ячеек, принадлежащих данному процессу. Это позволяет упростить обработку, ограничив ее диапазоном от первой ячейки до количества ячеек, принадлежащих текущему процессу.

Кроме того, такое расположение ячеек облегчает обмен данными, поскольку в этом случае достаточно передать последовательный фрагмент данных.

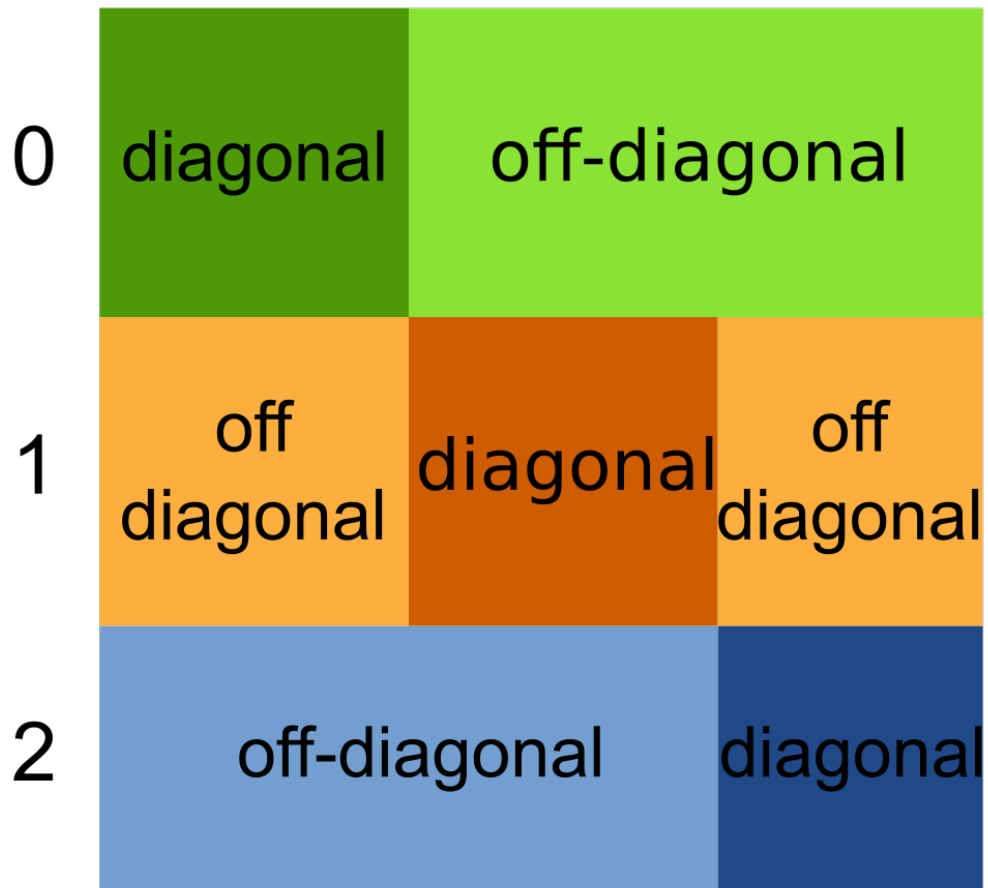


Рис. 4.8. Расположение параллельной матрицы на 3-х процессах, diagonal – диагональная часть, off-diagonal – часть с элементами за пределами диагональной части

Параллельные реализации матриц и векторов Параллельные матрицы создаются путем разделения общей матрицы или вектора на отдельные фрагменты по строкам в соответствии с глобальной нумерацией ячеек. При этом на каждом из процессов находятся только строки матрицы или элементы вектора, соответствующие ячейкам, принадлежащим данному процессу.

На каждом процессе локальная часть матрицы хранится в виде двух компонентов: квадратной матрицы с элементами на диагонали и прямоугольной матрицы с элементами вне диагональной части (рис 4.8).

Это разделение предназначено для скрывания задержек при передаче данных при решении систем уравнений. Например, при умножении глобальной матрицы на вектор, передача данных на данном процессе осуществляется параллельно с умножением диагональной части локальной матрицы на локальный элемент век-

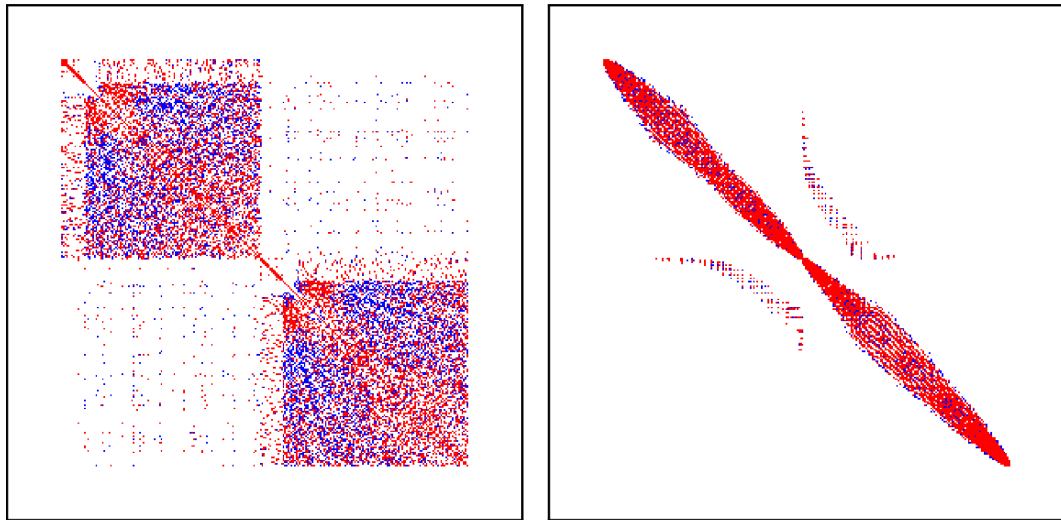


Рис. 4.9. Расположение ненулевых элементов матрицы до и после использования перенумерации по обратному алгоритму Катхилла-Макки

тора.

Загрузка конечнообъемной сетки. Загрузка сетки происходит на так называемом корневом (нулевом) процессе MPI. Далее выполняется перенумерация ячеек по обратному алгоритму Катхилла-Макки (RCM, reversed Cuthill-McKee) [117], что позволяет переместить большинство ненулевых элементов ближе к главной диагонали матрицы (рис. 4.9).

После этого расчетная сетка делится на отдельные части и распределяется между процессами. Затем каждый процесс вычисляет геометрические характеристики, как и в последовательной версии программы.

Задание начального распределения искомых величин Как уже упоминалось ранее, начальное распределение задаётся либо из параметров граничного условия, либо вручную, либо из результатов предыдущего расчёта. В последнем случае результаты загружаются корневым MPI процессом и распределяются по остальным процессам, согласно распределению сетки.

Задание граничных условий К внутренним граням добавились грани между двумя ячейками принадлежащими соседнему процессу и грани на границе рас-

чётной области и ячейками принадлежащими соседнему процессу. Данные виды граней в расчёте не участвуют, соответственно при заполнении массивов граней они должны быть отброшены. Кроме этого появляется необходимость отдельно обрабатывать грани находящиеся между ячейками принадлежащими данному процессу и ячейками принадлежащими соседнему процессу, для этого данные грани располагаются в отдельных массивах.

Заполнение матриц коэффициентов и вектора источников. В параллельной версии программного кода, к обходу по внутренним граням, расчёту конвективных и вязких потоков через них и заданию с помощью данных потоков коэффициентов в матрице, появилась необходимость обработки особым образом граней находящихся между ячейкой принадлежащей данному процессу и ячейкой принадлежащей соседнему процессу. Для таких граней коэффициенты в матрице необходимо устанавливать только в строке матрицы с номером ячейки принадлежащей процессу, т. к. другой коэффициент будет установлен соседним процессом в своей части матрицы. Несмотря на кажущуюся расточительность вычислительных ресурсов, т. к. поток через грань будет рассчитан дважды, данный способ в итоге оказывается быстрее, чем расчёт потока на одном из процессов и пересылка его другому процессу, т. к. расчёт потока занимает гораздо меньшее время по сравнению с задержкой отправки данных по сети.

Также изменился и алгоритм прохода по ячейкам при расчёте источников химических реакций и турбулентных параметров, в параллельной версии он осуществляется только для ячеек принадлежащих процессу.

Решение системы уравнений Решение системы уравнений в параллельной версии также осуществляется параллельно. Для этого используется параллельная реализация обобщённого метода минимальных невязок, работающая с параллельной матрицей описанной выше, а в качестве предобуславливателя был реализован параллельный блочный предобуславливатель Якоби [118].

Обновление значений искомых величин в расчётной области После корректировки вектора консервативных переменных с помощью результата решения системы уравнений происходит обмен между процессами значениями вектора консервативных переменных в ячейках пересечения. Для сокращения задержек обмена данными, данный обмен происходит параллельно с пересчётом полей термодинамических величин из значений вектора консервативных переменных для ячеек принадлежащих процессу.

Проверка условий прекращения счета Вычисление невязок и проверка условий прекращения счета также происходит параллельно на каждом процессе, далее общий результат вычисляется и устанавливается на всех процессах с помощью функции из интерфейса MPI — MPI_Allreduce.

Вывод результатов Для вывода результатов, значения вектора консервативных переменных пересылаются на корневой MPI процесс, далее из данного вектора вычисляются поля термодинамических величин и выводятся в заданном формате.

4.3.2. Сильная масштабируемость программного кода Universe CFD

Было выполнено определение сильной масштабируемости параллельного программного кода Universe CFD с использованием процессора AMD Ryzen 9 5950X, имеющего 16 физических ядер, на различных расчетных сетках (от 1 млн. до 5 млн. ячеек). Результаты представлены на графике (рис. 4.10).

4.4. Выводы по главе

В ходе исследования были проанализированы современные особенности вычислительных систем и виды взаимодействия при реализации параллельных вычислений. Были рассмотрены архитектурные решения, использованные в Universe CFD, которые учитывают современные особенности вычислительных систем. Бы-

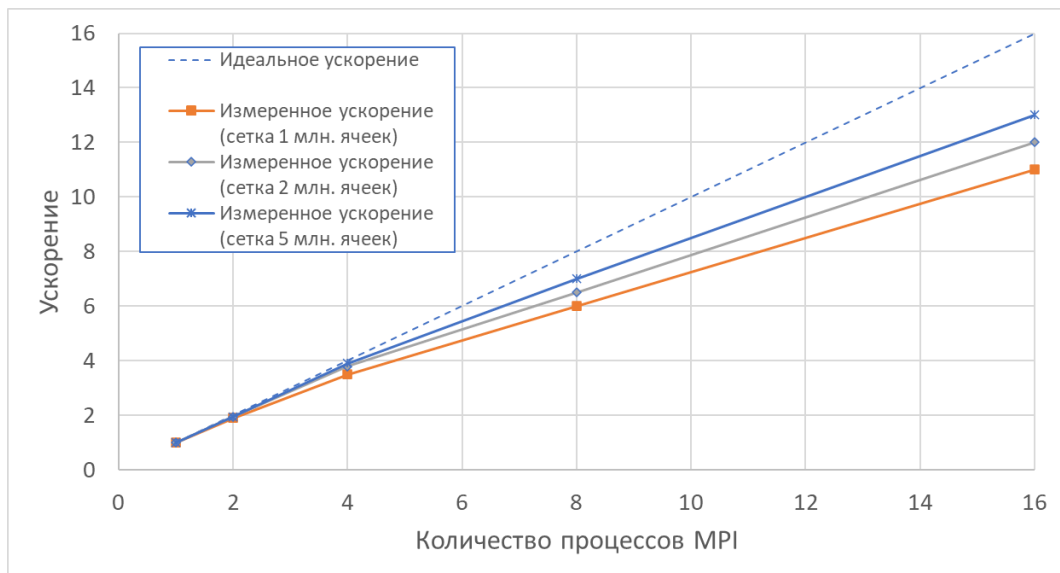


Рис. 4.10. График сильной масштабируемости

ли описаны основные различия между параллельной и последовательной версиями Universe CFD. В заключение, был проведен расчет сильной масштабируемости для параллельной версии Universe CFD.

Глава 5

Вторая вязкость и ее роль газовой динамике

В главе 2 упоминалось, что ненулевое значение коэффициента второй вязкости позволяет получать более реалистичную (близкую к экспериментальным данным) толщину скачка уплотнения. Позднее, в главе 8 будет показано, что слагаемое, которое также можно интерпретировать как вторую вязкость, можно получить при интегрировании уравнений Больцмана, выводя уравнения механики сплошной среды.

В данной главе проанализируем значимость данного коэффициента и необходимость его учета при расчете полей течений.

Частично указанные материалы публиковались автором в [14].

5.1. Подходы к оценке значимости второй вязкости в газовой динамике

Дж. Стокс в своей классической работе [119] предложил считать коэффициент второй вязкости равным 0. В указанной работе подчеркивалось, что такая гипотеза справедлива для несжимаемых и слабосжимаемых жидкостей, а также для случаев течений, когда изменение плотности жидкости происходит медленно. При этом Стокс указывал, что экспериментальные исследования таких течений не в состоянии ни подтвердить, ни опровергнуть указанную гипотезу. Всё это исходит из малости или тождественного равенства нулю дивергенции скорости в течениях указанного типа.

В общем же случае дивергенция скорости в потоке будет ненулевой. Ее величину можно оценить по следующей формуле (используя уравнение (??)):

$$\partial_j u_j = -1/\rho (u_j \partial_j \rho + \partial \rho / \partial t) \quad (5.1)$$

Отсюда можно сделать вывод, что влияние второй вязкости может быть су-

щественным, во-первых, для течений газа с относительно небольшой плотностью при высоких скоростях потока, а во-вторых, для нестационарных течений с резко изменяющимися характеристиками потока.

Б.Шарма в своей работе [120] приводит следующую трактовку влияния второй вязкости. Рассмотрим полный тензор напряжений в жидкости (т.н. тензор Коши):

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = 2\mu S_{ij} + (\zeta - 2/3\mu) \delta_{ij} \partial_m u_m - p\delta_{ij} \quad (5.2)$$

Давление в данной формуле представляет собой равновесное термодинамическое давление.

С точки зрения механики давление как мера нормальной силы, действующей со стороны жидкости на единичную площадку будет определяться как:

$$p_{mech} = -\frac{1}{3}\sigma_{ij} = p + (\zeta - 2/3\mu) \partial_m u_m \quad (5.3)$$

Таким образом, значимость вклада второй вязкости в общую картину течения будет (помимо значения самого коэффициента ζ) определяться соотношением дивергенции скорости к некоторому характерному значению давления в потоке. Автор не нашел в литературе четких критериев, которые могли бы сигнализировать о необходимости учета второй вязкости.

Опыт показывает, что наибольшего значения дивергенция скорости достигает в области скачков уплотнения. Отталкиваясь от этого, попробуем выработать критерий необходимости учета второй вязкости в задачах внешнего обтекания.

Введем параметр:

$$\psi = \frac{\zeta \nabla \cdot u}{p_{ref}} \quad (5.4)$$

Оценим дивергенцию скорости потока на скачке:

$$\nabla \cdot u \sim \frac{\Delta u}{\delta_{shock}} \sim \frac{\Delta u}{\lambda_\infty} \quad (5.5)$$

где λ – длина свободного пробега молекулы, а символом бесконечности обозначены параметры невозмущенного потока.

На прямом скачке уплотнения имеет место соотношение:

$$\Delta u = M_\infty \sqrt{\gamma RT} \left(1 - \frac{M_\infty^2 \frac{\gamma-1}{2} + 1}{\frac{\gamma+1}{2} M_\infty^2} \right) \quad (5.6)$$

При этом:

$$\lambda \sim \mu \frac{\sqrt{RT}}{p} \quad (5.7)$$

Отсюда:

$$\psi = \frac{\zeta_\infty p_\infty}{\mu_\infty p_{ref}} M_\infty \sqrt{\gamma} \left(1 - \frac{M_\infty^2 \frac{\gamma-1}{2} + 1}{\frac{\gamma+1}{2} M_\infty^2} \right) \quad (5.8)$$

В конечном итоге характерное давление зависит от давления внешнего потока и числа Маха. Таким образом, в общем случае имеем:

$$\psi = \frac{\zeta_\infty}{\mu_\infty} f(M) \quad (5.9)$$

Таким образом, на основании приведенного качественного анализа можно сказать, что влияние второй вязкости на картину течения определяется двумя факторами: соотношением второго и первого коэффициента вязкости и волновой структурой течения. При этом можно предположить, что влияние коэффициента второй вязкости на параметры пограничного слоя следует учитывать в тех случаях, когда значительно влияние на эти параметры поля давления.

5.2. Общая трактовка второй вязкости

Анализ значимости второй вязкости приводят Л.Д. Ландау и Л.М. Лифшиц в своем курсе теоретической физики [84], ссылаясь на работы Л.И. Мандельштама и М.А. Леонтовича, 1937 г. Рассматривается некий обобщенный процесс χ , в ходе которого происходят отклонения от равновесного состояния, сопровождающиеся изменением давления и плотности. К таким процессам могут относиться неравновесные химические реакции, термически неравновесные процессы и т.п. В этом случае диссипация энергии (и как следствие – вторая вязкость) будет определяться временем релаксации процесса χ :

$$\zeta = \tau_\chi \rho_0 (a_\chi^2 - a_0^2) \quad (5.10)$$

где $a_\chi = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_\chi$, a_0 – равновесная скорость звука, τ_χ – время релаксации в процессе χ .

Данная формула справедлива для сравнительно медленных процессов. Для «быстрых» волновых процессов, согласно [84], необходимо учитывать зависимость коэффициента второй вязкости от частоты колебаний параметров.

Количественных оценок в [84] не приводится.

Среди первых работ, посвященных второй вязкости, также стоит отметить работу Л. Тисы [121]. В своей статье он анализировал величины коэффициента поглощения звуковых волн в газах и жидкостях. Учет ненулевого коэффициента второй вязкости согласно Л. Тисе позволяет решить проблему «аномального» поглощения звуковых волн в газовой среде. В работе приводится следующая формула для оценки величины коэффициента второй вязкости:

$$\zeta = \rho_0 a_0^2 \frac{\gamma - 1}{\gamma} \sum_i \frac{c_i}{c_v} \tau_i \quad (5.11)$$

где γ – показатель адиабаты, c_v – поступательная теплоемкость при постоянном объеме, c_i – теплоемкость по внутренним степеням свободы молекул (вращательным, колебательным), τ_i – соответствующие времена релаксации.

Формула (5.11) применима для «медленных» (низкочастотных) процессов [122].

Если сравнивать формулы (5.10) и (5.11), то видно, что они в какой-то степени похожи. Коэффициент второй вязкости пропорционален скорости распространения воздействий в среде и времени релаксации неравновесных процессов.

Общая трактовка второй вязкости при этом следующая: коэффициент второй вязкости представляет собой параметр релаксации, относящийся прежде всего к процессам установления термического равновесия между различными степенями свободы (энергетическими модами) многоатомных молекул. К этому склоняются авторы [84, 121, 123, 124]. Автор [122] в целом так же поддерживает данный подход, при этом высказывая сомнения относительно его применимости к высокочастотным процессам (следует при этом отметить, что в [84] демонстрируется

общий теоретический подход, включающий в т.ч. и высокочастотные процессы).

Основная проблема изложенного подхода – невозможность его прямого применения на практике по причине неопределенности значений времен релаксации.

5.3. Количественная оценка величины коэффициента второй вязкости

Остановимся более подробно на количественных оценках величины коэффициента второй вязкости. В этом плане данные, приводящиеся в публикациях весьма ограничены, и часто противоречивы.

Так, например, в статье [121] упоминаются количественные оценки коэффициента второй вязкости, сделанные на основании анализа экспериментальных данных по распространению звуковых волн в CO_2 и N_2O . Соотношение между второй вязкостью и сдвиговой («первой») вязкостью, согласно данной работе, может достигать $\zeta/\mu \sim 2000$. При этом упоминается, что для воздуха $\zeta/\mu \sim 1$.

Ф. Шерман [125], измеряя толщину ударных волн, делает вывод, что $\zeta/\mu \approx 0,667$.

В работе [126] авторы приводят результаты измерений затухания звуковых колебаний и расчет второй вязкости на их основе для N_2 , CO , CH_4 и CD_4 в диапазоне температур от 77 до 300 К. Согласно данной работе ζ/μ находится в пределах от 0.1 до 1.17 в зависимости от конкретного газа и температуры.

М.С. Крамер [127], пользуясь формулой (5.11) и обобщая данные других авторов, приводит данные по коэффициенту второй вязкости для целого ряда веществ. Для качественной оценки, входящего в формулу (5.11) времени релаксации он использует различные модели, в частности – модель Паркера [128] для времени релаксации вращательных степеней свободы и модель Ландау-Теллера для колебательных степеней свободы [129].

Формула расчета второй вязкости по Крамеру следующая:

$$\zeta = \zeta_{rot} + \zeta_{vibr} = (\gamma - 1)^2 \left[\frac{i_{rot}}{2} p \tau_{rot} + \frac{c_{vibr}}{R} p \tau_{vibr} \right] \quad (5.12)$$

где i_{rot} – число вращательных степеней свободы молекулы, c_{vibr} – колебательная часть теплоемкости, τ_{rot} и τ_{vibr} – соответствующие времена релаксации.

Для N_2 , CO , CH_4 в предположении о доминировании вращательных мод Крамером предложена следующая формула:

$$\zeta = (\gamma - 1)^2 \frac{i_{rot}}{2} p \tau_{rot} = A \left(\frac{T}{T_r} \right)^n \quad (5.13)$$

При этом даются следующие значения коэффициентов:

- N_2 - $A = 0,778 \cdot 10^{-5} \text{ О} \cdot \text{А}$, $T_r = 200\text{К}$, $n = 1,376$ (применимо в диапазоне от 77 до 1073К);

- CO - $A = 0,533 \cdot 10^{-5} \text{ О} \cdot \text{А}$, $T_r = 200\text{К}$, $n = 1,461$ (применимо в диапазоне от 77 до 293К);

- CH_4 - $A = 0,836 \cdot 10^{-5} \text{ О} \cdot \text{А}$, $T_r = 200\text{К}$, $n = 1,295$ (применимо в диапазоне от 77 до 293К).

Утверждается, что в указанном диапазоне температур колебательные моды не играют роли, а на вторую вязкость влияют исключительно вращательная степень свободы.

Приводятся данные для водорода, у которого колебательная мода возбуждается при температуре порядка 6000К, но при этом время релаксации вращательной моды весьма велико из-за малого момента инерции молекулы:

$$\zeta_{H_2} = (\gamma - 1)^2 (a + bT) \quad (5.14)$$

где $a=1,822 \cdot 10^{-4} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $b=4,641 \cdot 10^{-6} \text{ Па} \cdot \text{с/К}$.

Аналогичный подход, в котором вторая вязкость связывается исключительно с вращательной неравновесностью, предлагается Т.Г. Елизаровой и В.В. Серегиним. [130], А.В. Чикиткиным, Б.В. Роговым, Г.А. Тирским и С.В. Утюжниковым [131] и авторским коллективом под руководством С.А. Лосева [94].

Согласно [130]:

$$\zeta = \mu B \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) \quad (5.15)$$

где $B = \frac{3\pi}{8} (\gamma - 1) Z_{rot}$.

Согласно [131]:

$$\zeta = \frac{\pi}{25} \mu Z_{rot} \quad (5.16)$$

В обоих случаях Z_{rot} – коэффициент обмена энергией между вращательными и поступательными степенями свободы, который можно рассчитать, например, по модели Паркера [128]:

$$Z_{rot} = \frac{Z_{\infty}}{1 + \frac{\sqrt{\pi^3}}{2} \sqrt{\frac{T^*}{T}} + \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi \right) \frac{T^*}{T}} \quad (5.17)$$

где T^* и Z_{∞} – параметры, определяемые конкретным веществом.

К примеру, для азота $T^* = 91,5\text{К}$. При этом относительно параметра Z_{∞} различные работы дают различные значения. В [130] предлагается использовать $Z_{\infty} = 23$, в [131] – $Z_{\infty} = 4,3$.

В работе под ред. С.А. Лосева [94] предлагается следующая формула, полученная на основе модели шероховатых сфер:

$$\zeta = \left(\frac{mk_b T}{\pi} \right)^{0.5} \frac{1}{\sigma^2} \frac{(1 + K)^2}{32K^2} = A\sqrt{T} \quad (5.18)$$

где $K = 4I_{\alpha}/m\sigma^2$ – безразмерный момент инерции молекулы, m – ее масса, σ – кинетический диаметр.

Значения коэффициента A для разных веществ приводились в главе 2 (см. таблицу 2.1).

Принципиально иная картина, согласно Крамеру [127], наблюдается для молекул, у которых колебательные моды активируются при сравнительно низких температурах. Среди таких молекул: Cl_2 , F_2 , N_2O , SF_6 , CF_4 , CO_2 и ряд других. Для иллюстрации приведем здесь график зависимости относительного коэффициента второй вязкости CO_2 от температуры (см. рисунок 5.1).

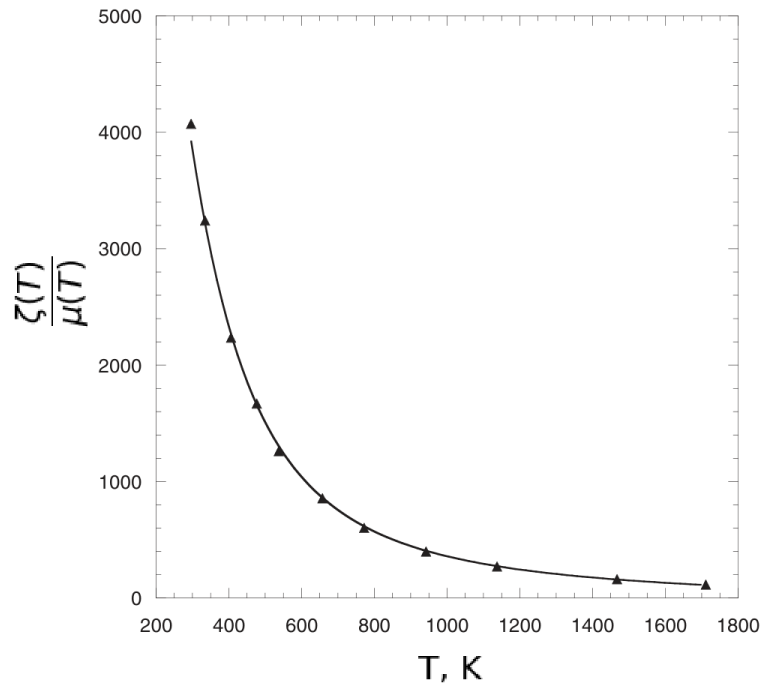


Рис. 5.1. Зависимость относительного коэффициента второй вязкости для CO_2 по данным [127]

Е.В. Кустова в своей работе [132] отмечает, что использование формулы (5.12) не вполне корректно и предлагает использовать формулу, полученную на основе модели Чапмена-Энскога собственной модификации [133]:

$$\zeta = \frac{Rc_{int}}{c_v^2} p \tau_{int} = pR \left(\frac{c_{int}}{c_v} \right)^2 / \left(\frac{c_{rot}}{\tau_{rot}} + \frac{c_{vibr}}{\tau_{vibr}} \right) \quad (5.19)$$

Расчеты по данной формуле дают значения относительного коэффициента второй вязкости на 2 порядка меньше по сравнению с данными Крамера [127] и других авторов.

До настоящего времени указанное противоречие является неразрешенным. Авторам настоящей работы не удалось найти в научной литературе последних лет данных, подтверждающих либо опровергающих точку зрения, изложенную в [132].

Еще один момент относительно значения коэффициента второй вязкости, который необходимо отметить в данном разделе – отсутствие в литературе методик расчета коэффициента второй вязкости для смесей газов. Обоснованность применения подходов, которые были разработаны для коэффициентов сдвиговой

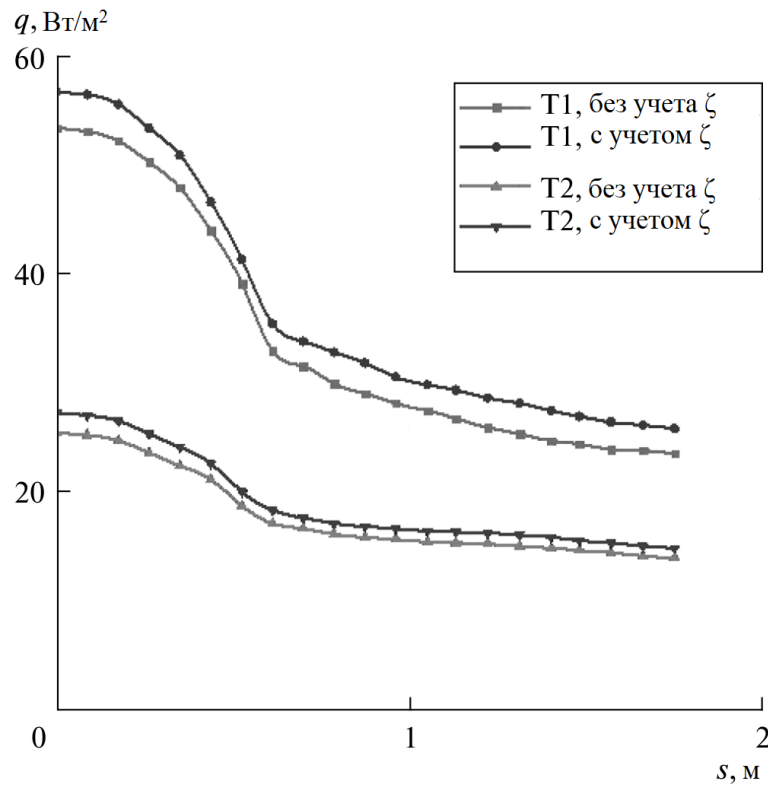


Рис. 5.2. Результаты расчетов по теплообмену при входе в атмосферу Марса по данным [134]. Режим T1 - $u_\infty = 5223$ м/с, $\rho_\infty = 2.93 \times 10^{-4}$ кг/м³; режим T2 - $u_\infty = 5687$ м/с, $\rho_\infty = 3.141 \times 10^{-5}$ кг/м³

вязкости и теплопроводности (таких, как например метод Уилке) в целом остается под вопросом.

5.4. Результаты расчетов с учетом второй вязкости

5.4.1. Результаты других авторов

Приведем обзор результатов расчетов течений, в которых учитывалась вторая вязкость.

На рисунке 5.2 представлены результаты расчета авторов [134] для обтекания притупленного тела потоком CO₂. По расчетам авторов относительной коэффициент второй вязкости для CO₂ в данных условиях не превышает 2.

На 5.3 видим результаты из работы [131] по расчету обтекания сферы потоком N₂.

Как видно из приведенных расчетов, вторая вязкость влияет на теплообмен.

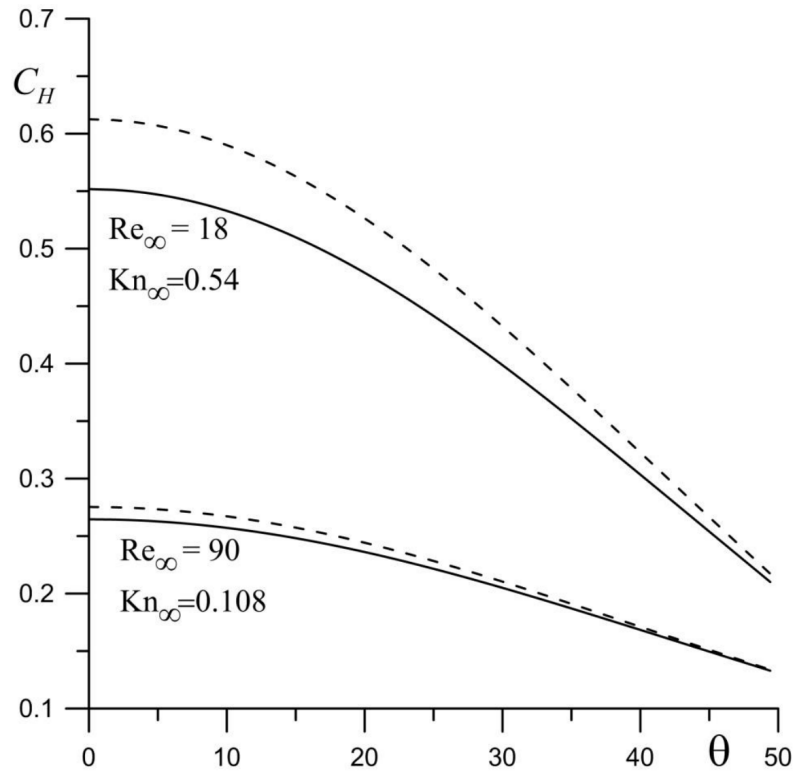


Рис. 5.3. Результаты расчетов числа Стантона при обтекании сферы потоком N_2 при $M = 8$ [131]. Сплошная линия – расчет без учета второй вязкости, пунктир – с учетом второй вязкости по модели Паркера

Максимальное влияние можно наблюдать в области передней критической точки.

5.4.2. Обтекание наклонной пластины разреженным потоком газа

В целом количество опубликованных работ, в которых приводятся результаты расчетов газовой динамики с учетом второй вязкости весьма ограничено. При этом авторам не удалось найти опубликованных работ, в которых бы результаты таких расчетов сравнивались бы с экспериментальными данными.

Принимая это во внимание, автором настоящей работы была проведена серия расчетов. Наиболее интересных результатов удалось, достичь при сравнении с экспериментальными данными полученных результатов по моделированию обтекания потоком разреженного газа плоской пластины под углом атаки 10 градусов. Параметры течения – число Маха $M = 20$; давление внешнего потока $p_\infty = 0,2091$ Па,

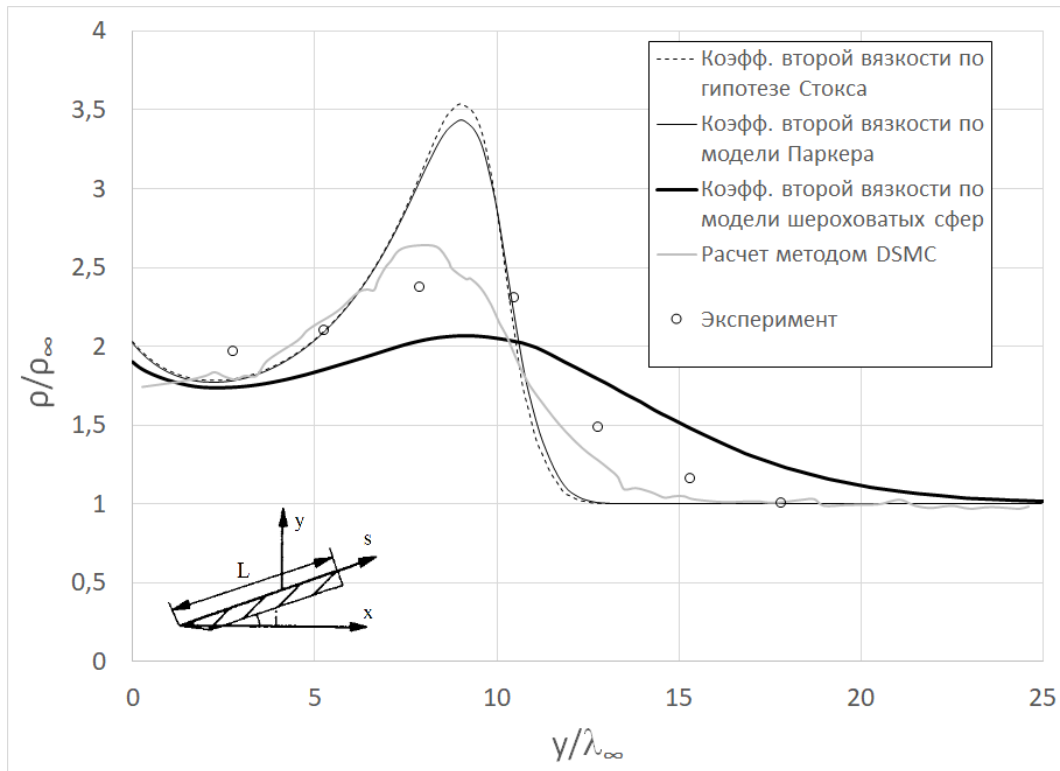


Рис. 5.4. Профиль плотности в сечении $x = 32\lambda_\infty$ при обтекании пластины под углом атаки 10 градусов в сравнении с данными [135].

температура внешнего потока $T_\infty = 13,58\text{K}$. Рабочее тело – азот.

Расчеты проводились для различных случаев:

- нулевая вторая вязкость (гипотеза Стокса);
- вторая вязкость, рассчитанная по формулам (5.16) и (5.17) при $Z_7=23$ (на графиках обозначено как модель Паркера);
- вторая вязкость, рассчитанная по формуле (5.18) (на графиках – модель шероховатых сфер).

Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными и расчетными данными методом DSMC, приведенными в [135]. На рисунках 5.4, 5.5 и 5.6 приведены данные по профилю плотности, относительному давлению и числу Стантона.

Как видно из рисунках 5.4 и 5.5, учет ненулевого значения коэффициента второй вязкости позволяет получить данные по давлению и плотности более близкие к результатам экспериментальных исследований и сравнимые с результа-

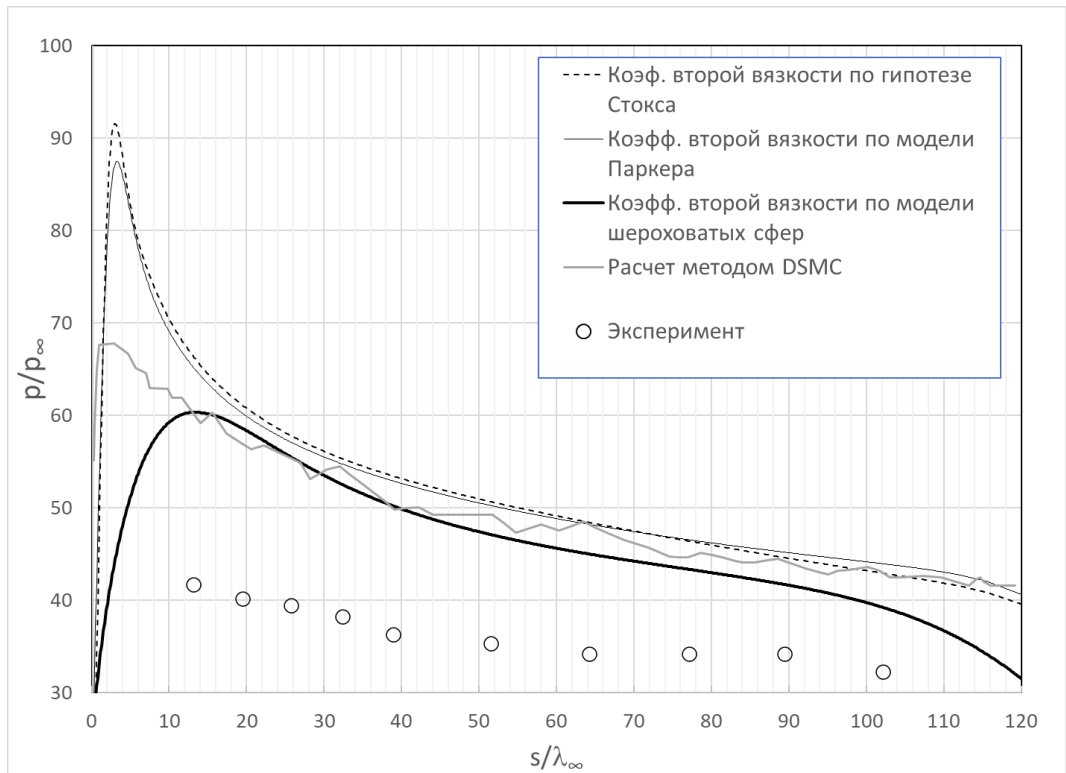


Рис. 5.5. Распределение относительного давления вдоль стенки при обтекании пластины под углом атаки 10 градусов в сравнении с данными [135]

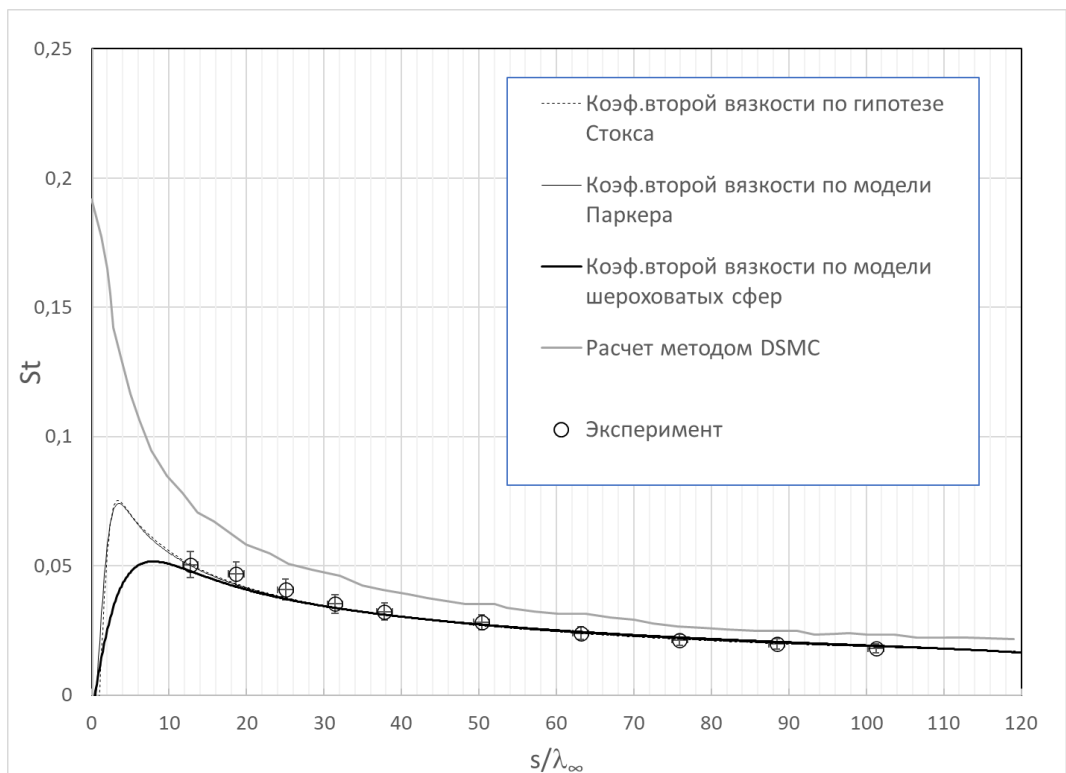


Рис. 5.6. Распределение числа Стантона вдоль стенки при обтекании пластины под углом атаки 10 градусов в сравнении с данными [135]

тами расчета методом DSMC. А исходя из рисунка 5.6, расчет числа Стантона с использованием уравнений Навье-Стокса (с учетом второй вязкости и без) дают результаты более близкие к результатам эксперимента. Влияние второй вязкости на теплообмен прослеживается в первую очередь в зоне кромки пластины. К сожалению, экспериментальные данные для данной области отсутствуют.

Среди прочего можно отметить следующую интересную особенность – расчет второй вязкости по модели Паркера дает результаты мало отличимые от результатов расчета с нулевой второй вязкостью. При этом модель шероховатых сфер, которая в [94] характеризуется как позволяющая оценить вторую вязкость «в первом приближении», позволяет достичь результатов более близких к экспериментальным.

5.5. Выводы по главе

По результатам обзора источников литературы и проведенных расчетов можно сделать вывод, что до настоящего момента вторая вязкость является не до конца изученным свойством веществ.

Общетеоретический подход к проблеме в целом был разработан достаточно неплохо еще в 1940-1950 гг. Большинство авторов сходится на мнении, что природа второй вязкости связана с релаксацией неравновесных процессов, чаще всего – с термической (вращательной или колебательной) релаксацией.

Иначе дело обстоит с прикладной областью. Данные о численных значениях коэффициента второй вязкости весьма разрознены, справочная информация для проведения практических расчетов ограничена несколькими десятками химических соединений. Отсутствуют общепризнанные методики расчета второй вязкости смесей газов.

Вместе с тем, опыт показывает, что в отдельных случаях вторая вязкость имеет весьма существенное влияние на картину течения и взаимодействие потока со стенкой.

Можно с уверенностью утверждать, что учет ненулевой второй вязкости в расчетах позволяет, получать физически адекватную толщину скачков уплотнения, что становится физически значимым при больших числах Маха и числах Кнудсена $Kn > 0,01$. Помимо этого, опыт проведенных расчетов и анализ результатов других авторов показывает, что в указанном случае немаловажным становится влияние второй вязкости на распределение давления, коэффициента трения и числа Стантона вдоль обтекаемой поверхности (в особенности – в области передней критической точки).

Среди перспективных, на взгляд автора настоящей работы, направлений исследований находится вопрос о влиянии второй вязкости на ламинарно-турбулентный переход.

Открытыми также остаются вопросы роли второй вязкости в нестационарных процессах и в гетерогенных потоках.

Подводя итоги, можно сделать вывод, что вопрос учета второй вязкости требует дальнейшего всестороннего изучения.

Глава 6

Неравновесный энергетический обмен в газе

При формулировке общей математической модели высокоэнергетического потока газа обсуждался вопрос термической неравновесности - состояния газа, в котором имеет место неравновесное распределение термической энергии между различными степенями свободы его молекул. В этом состоянии характеризовать газ единой температурой уже нельзя.

Неравновесный газ стремится в конечном итоге вернуться в состояние равновесия. Процесс установления равновесного или квазистационарного неравновесного распределения в статистических системах называется релаксационным процессом.

Релаксационный процесс обычно характеризуют т.н. временем релаксации, обратно пропорциональным скорости протекания данного процесса

Можно построить следующую иерархию времен релаксации[90]:

$$\tau_0 \sim \tau_{T-T} \leq \tau_{R-T} \ll \tau_{V-T} \ll \tau_{chem} \ll \tau_e \ll \tau_I \quad (6.1)$$

где τ_0 — среднее время свободного пробега частиц, τ_{T-T} — время поступательной релаксации, τ_{R-T} — время вращательной релаксации, τ_{V-T} — время колебательной релаксации, τ_{chem} — характерное время протекания химических реакций, τ_e — время электронного возбуждения/дезактивации, τ_I — время ионизации/рекомбинации.

Формула (6.1) обуславливает сформулированную ранее структуру общей математической модели, а именно - описание поступательных и вращательных степеней свободы с помощью единой температуры и рассмотрение отдельно колебательной релаксации и неравновесных химических реакций в потоке ¹.

Подробный обзор, построение и практическая реализация математической модели колебательной релаксации были приведены автором в [28].

¹ При достаточно высоких температурах необходимо также учитывать перенос электронов и ионизацию газа

Иерархический порядок времен релаксации не зависит от давления, поскольку каждое из характерных времен пропорционально давлению (более сложная зависимость времен релаксации от давления наблюдается в процессах с участием электронов). Температурная зависимость времени релаксации специфична для каждого процесса, поэтому с изменением температуры порядок расположения членов в иерархии времен релаксации может меняться. Так, при комнатных температурах $\tau_{VT} \ll \tau_{chem}$, а при высоких температурах $\tau_{VT} \sim \tau_{chem}$.

Упрощенные методы описания релаксационных процессов . При заданном временном масштабе газодинамической задачи τ_L можно рассматривать только те релаксационные процессы, для которых времена релаксации (характерные времена) $\tau \sim \tau_L$. Более быстрые процессы в этом масштабе можно считать уже закончившимися, а относительно медленные - еще не начавшимися. Такой подход соответствует методу *квазистационарных функций распределения*, при котором функция распределения энергии по отдельным степеням свободы зависит только от переменных, характеризующих эту степень свободы. Закончившиеся быстрые процессы определяют лишь величину соответствующих параметров в функции распределения, которые характеризуют результат этого процесса. Например - при изучении колебательной релаксации двухатомных молекул относительно медленный процесс - диссоциацию - при $\tau_{chem} \gg \tau_{VT}$ можно совсем не рассматривать. Более быстрые процессы поступательной и вращательной релаксации в масштабе τ_{VT} считаются закончившимися, а их результат - формирование неравновесного распределения энергии по поступательным и вращательным степеням свободы входит в функцию распределения колебательной энергии как параметр, определяющий мгновенное значение поступательной и вращательной температуры.

Уровневая кинетика описывает изменение заселенности определенных уровней энергии частиц.

Модовая кинетика - вращательная и колебательная релаксация в модовом приближении представляет собой сокращенное описание уровневой кинетики, не требующее знания конкретного вида функции распределения энергии и оперирующее со средним запасом энергии в каждой моде.

Процесс установления равновесия по колебательным степеням свободы молекул (колебательная релаксация) является относительно медленным процессом: характерное время колебательной релаксации значительно больше времени поступательной и вращательной релаксации. Так, в единицах среднего времени свободного пробега для молекул кислорода время колебательной релаксации меняется от 10^8 при $T = 288 \text{ K}$ до 10^3 при $T = 3000 \text{ K}$.

В изолированной системе с произвольными начальными условиями колебательная релаксация приводит к равновесному распределению по уровням колебательной энергии - больцмановскому распределению. В неизолированных системах, которые могут обмениваться с окружающей средой массой, импульсом и (или) энергией, например - при движении релаксирующего газа в соплах и струях, распределение молекул по колебательным уровням может существенно отличаться от больцмановского.

6.1. Уравнение переноса колебательной энергии

Рассмотрим сначала однородный газ, состоящий из одного компонента.

При этом, как уже упоминалось в главе 2, молекулы газа будем считать линейными квантовыми осцилляторами.

$$\epsilon_i = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu, \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (6.2)$$

Каждому энергетическому состоянию соответствует плотность молекул, N_n . Из-за быстрой скорости резонансных V-V столкновений предполагается, что эти

популяции представляют собой *распределения Больцмана*:

$$N_n = \frac{N \exp(-\epsilon_n/kT_\vartheta)}{\sum_j \exp(-\epsilon_j/kT_\vartheta)}, \quad (6.3)$$

где N - общее количество возбужденных молекул; T_ϑ - колебательная температура, связанная с рассматриваемой модой.

Предполагается также, что после каждого столкновения молекулы могут быть возбуждены только до следующего энергетического состояния. Общая энергия колебаний на единицу объема может быть записана как

$$\rho E_\vartheta = \rho e_\vartheta = \sum_n \epsilon_n N_n \quad (6.4)$$

Рассмотрим теперь многокомпонентную газовую смесь. Пусть $N_{s(m)}$ - общее число молекул компонента, к которому относится m -ная колебательная мода, в единице объема; энергия молекулы, запасенная в m -м типе колебаний, равна $\epsilon_{\vartheta(m)}$ и определяется по формуле (2.59):

$$\epsilon_{\vartheta(m)} = k\theta_m \alpha_m = \frac{r_m k \theta_m}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta(m)}) - 1}$$

Тогда полная m -ная колебательная энергия в единице объема равна

$$\rho E_{\vartheta(m)} = \rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} = \rho_{s(m)} e_{\vartheta(m)} = N_{s(m)} \epsilon_{\vartheta(m)} \quad (6.5)$$

Общая скорость изменения m -й вибрационной энергии определяется следующим уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\vartheta} N_{s(m)} \epsilon_{\vartheta(m)} dv + \iint_s N_{s(m)} \epsilon_{\vartheta(m)} V_{s(m)} \cdot ds = \iiint_{\vartheta} \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} dv, \quad (6.6)$$

где dv - элемент объема, а ds - элемент площади поверхности.

Здесь $\rho \dot{E}_{\vartheta(m)}$ - источник колебательной энергии, который будет подробно изучен в следующих параграфах; $V_{s(m)}$ - вектор средней скорости частиц.

В результате использования теоремы Остроградского-Гаусса получено дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} (N_{s(m)} \epsilon_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (N_{s(m)} \epsilon_{\vartheta(m)} V_{s(m)}) = \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} \quad (6.7)$$

Для связи индивидуальных скоростей и средней скорости вводим скорость диффузии компонента $U_{s(m)}$, определенную как $U_{s(m)} = V_{s(m)} - \mathbf{u}$.

Подставляя это в уравнение (6.7) с учетом формулы (6.5), получаем следующую формулу

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho E_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) = \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \nabla \cdot (N_{s(m)} \varepsilon_{\vartheta(m)} \mathbf{U}_{s(m)}) \quad (6.8)$$

Колебательный тепловой поток q_{ϑ} определяется как

$$q_{\vartheta} = N_{s(m)} \varepsilon_{\vartheta(m)} \mathbf{U}_{s(m)} = \rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} \mathbf{U}_{s(m)} \quad (6.9)$$

и подставляется в уравнение (6.8):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho E_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) = \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \nabla \cdot \mathbf{q}_{\vartheta} \quad (6.10)$$

При использовании модели гармонического осциллятора и предположения о справедливости распределения Больцмана (6.3) для каждой колебательной моды вводится единая колебательная температура $T_{\vartheta,m}$, которая связана с колебательной энергией формулой (2.65)

$$E_{\vartheta(m)} = C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} = C_{s(m)} \frac{r_m R_{s(m)} \theta_m}{\exp(\theta_m / T_{\vartheta(m)}) - 1}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M$$

Удельная теплоемкость при постоянном объеме для m -ой колебательной моды задается как

$$(c_V)_{\vartheta(m)} = \frac{\partial e_{\vartheta(m)}}{\partial T_{\vartheta(m)}} = r_m R_{s(m)} \left(\frac{\theta_m}{T_{\vartheta(m)}} \right)^2 \frac{\exp(\theta_m / T_{\vartheta(m)})}{[\exp(\theta_m / T_{\vartheta(m)}) - 1]^2} \quad (6.11)$$

Тепловой поток колебательной энергии обусловлен как градиентом самой энергии, так и, как это видно из формулы (6.9), диффузией самого химического компонента.

Рассмотрим сначала чистый однокомпонентный газ, в котором диффузия химических компонентов отсутствует.

В этом случае, как это следует из формулы (6.4),

$$\mathbf{q}_{\vartheta} = \sum_n N_n \varepsilon_n \mathbf{U}_n \quad (6.12)$$

Для чистого газа справедливо $N_n \mathbf{U}_n = -ND \nabla \left(\frac{N_n}{N} \right)$, где D - коэффициент диффузии, или, в этом случае, коэффициент самодиффузии. Таким образом

$$\begin{aligned} q_{\vartheta} &= \sum_n N_n \varepsilon_n \mathbf{U}_n = -ND \sum_n \varepsilon_n \nabla \left(\frac{N_n}{N} \right) = \\ &= -ND \nabla \left(\frac{1}{N} \sum_n \varepsilon_n N_n \right) = -\rho D \nabla \left(\frac{1}{\rho} \sum_n \varepsilon_n N_n \right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

С учетом изложенного получаем:

$$\mathbf{q}_{\vartheta} = -\rho D \nabla E_{\vartheta} = -\rho D \nabla e_{\vartheta} = -\frac{\mu}{\text{Sc}} \nabla e_{\vartheta} = -\frac{\mu}{\text{Sc}} (c_V)_{\vartheta(m)} \nabla T_{\vartheta}, \quad (6.14)$$

где $\text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}$ - число Шмидта.

В случае газовой смеси используем формулу Фика для диффузии :

$$\rho_s \mathbf{U}_s = -\frac{\mu}{\text{Sc}} \nabla C_s = -\rho D \nabla C_s \quad (6.15)$$

Тогда тепловой поток колебательной энергии, связанный с диффузией, равен

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\vartheta, D} &= \rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} \mathbf{U}_{s(m)} = e_{\vartheta(m)} \rho_{s(m)} \mathbf{U}_{s(m)} = \\ &= -e_{\vartheta(m)} \rho D \nabla C_{s(m)} = -e_{\vartheta(m)} \frac{\mu}{\text{Sc}} \nabla C_{s(m)} \end{aligned} \quad (6.16)$$

Таким образом, общий тепловой поток определяется формулой:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\vartheta} &= -\frac{\mu}{\text{Sc}} (c_V)_{\vartheta(m)} C_{s(m)} \nabla T_{\vartheta} - e_{\vartheta(m)} \frac{\mu}{\text{Sc}} \nabla C_{s(m)} = \\ &= -\frac{\mu}{\text{Sc}} \left[C_{s(m)} (c_V)_{\vartheta(m)} \nabla T_{\vartheta} + e_{\vartheta(m)} \nabla C_{s(m)} \right] \end{aligned} \quad (6.17)$$

Первый член в правой части этой формулы обусловлен колебательной теплопроводностью, а второй диффузией химического компонента.

Исходя из этого, можно ввести коэффициент колебательной теплопроводности

$$\lambda_{\vartheta(m)} = \frac{\mu}{\text{Sc}} C_{s(m)} (c_V)_{\vartheta(m)} \quad (6.18)$$

6.2. Другая форма уравнения колебательной энергии

Уравнение сохранения массы компонента имеет следующий вид :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \nabla \cdot (\rho C_s \mathbf{u}_j) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{\text{Sc}} \nabla C_s \right) + \dot{w}_s \quad (6.19)$$

а уравнение колебательной энергии (6.10):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) = \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \nabla \cdot \mathbf{q}_{\vartheta} \quad (6.20)$$

Это консервативная форма уравнений. С учетом уравнения неразрывности уравнение (6.19) принимает вид:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial}{\partial t} (C_s) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla (C_s) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_s \right) + \dot{w}_s, \\ \rho \frac{d}{dt} (C_s) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_s \right) + \dot{w}_s, \end{aligned} \quad (6.21)$$

а уравнение (6.20):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) &= \\ = \rho \frac{\partial}{\partial t} (C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla (C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) &= \\ = \rho \frac{d}{dt} (C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) = \rho C_{s(m)} \frac{d}{dt} (e_{\vartheta(m)}) + \rho e_{\vartheta(m)} \frac{d}{dt} (C_{s(m)}) \end{aligned} \quad (6.22)$$

Подставляем сюда выражение (6.21)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho C_{s(m)} e_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) &= \\ = \rho C_{s(m)} \frac{d}{dt} (e_{\vartheta(m)}) + e_{\vartheta(m)} \left[\nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_s \right) + \dot{w}_s \right] &= \\ = \rho C_{s(m)} \frac{d}{dt} (e_{\vartheta(m)}) + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_s \right) + e_{\vartheta(m)} \dot{w}_s \end{aligned} \quad (6.23)$$

Тогда из уравнения (6.20) получаем:

$$\rho C_{s(m)} \frac{d}{dt} (e_{\vartheta(m)}) + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_{s(m)} \right) + e_{\vartheta(m)} \dot{w}_{s(m)} = \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \nabla \cdot \mathbf{q}_{\vartheta} \quad (6.24)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho e_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho e_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) &= \\ = \frac{1}{C_{s(m)}} \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \frac{1}{C_{s(m)}} \left[\nabla \cdot \mathbf{q}_{\vartheta} + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_c} \nabla C_{s(m)} \right) \right] - \frac{1}{C_{s(m)}} e_{\vartheta(m)} \dot{w}_{s(m)} \end{aligned} \quad (6.25)$$

Рассмотрим отдельно второй член в этой формуле:

$$\begin{aligned}
& \nabla \cdot q_{\vartheta} + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) = \\
& = \nabla \cdot \left(-\frac{\mu}{S_C} C_{s(m)} \nabla e_{\vartheta(m)} - e_{\vartheta(m)} \frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) = \\
& = -\nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} C_{s(m)} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) - \nabla \cdot \left(e_{\vartheta(m)} \frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) = \\
& = -\nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} C_{s(m)} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) - e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) - \\
& - \frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \cdot \nabla (e_{\vartheta(m)}) + e_{\vartheta(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \right) = \\
& = -\nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} C_{s(m)} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) - \frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \cdot \nabla (e_{\vartheta(m)}) = \\
& = -C_{s(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) - \frac{\mu}{S_C} \nabla e_{\vartheta(m)} \cdot \nabla (C_{s(m)}) - \frac{\mu}{S_C} \nabla C_{s(m)} \cdot \nabla (e_{\vartheta(m)}) = \\
& = -C_{s(m)} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) - 2 \frac{\mu}{S_C} \nabla e_{\vartheta(m)} \cdot \nabla C_{s(m)}
\end{aligned}$$

и получим окончательно уравнение колебательной энергии:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho e_{\vartheta(m)}) + \nabla \cdot (\rho e_{\vartheta(m)} \mathbf{u}) = \\
& = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{S_C} \nabla e_{\vartheta(m)} \right) + 2 \frac{\mu}{S_C} \frac{1}{C_{s(m)}} \nabla e_{\vartheta(m)} \cdot \nabla C_{s(m)} + \rho \dot{e}_{\vartheta(m)}
\end{aligned} \tag{6.26}$$

где

$$\rho \dot{e}_{\vartheta(m)} = \frac{1}{C_{s(m)}} \rho \dot{E}_{\vartheta(m)} - \frac{1}{C_{s(m)}} e_{\vartheta(m)} \dot{w}_{s(m)} \tag{6.27}$$

- источник колебательной энергии.

Уравнение колебательной энергии в форме (6.26) имеет ряд преимуществ по сравнению с формой (6.10). Во-первых, проще формула для диффузионного потока; во-вторых, в источнике не надо учитывать образование колебательной энергии в результате химических реакций; в-третьих, при определении колебательной температуры через энергию (формула (2.65)) нет необходимости деления на $C_{s(m)}$, что могло бы вызвать проблемы в области очень малых значений массовых долей колебательно возбужденных компонентов.

Некоторые проблемы вызывает деление на $C_{s(m)}$ в члене $\frac{1}{C_{s(m)}} \nabla e_{\vartheta(m)} \cdot \nabla C_{s(m)}$, однако численный анализ показывает, что этот член стремится к нулю в области малых значений массовых долей колебательно возбужденных компонентов.

Все же, чтобы избежать проблем с делением на очень малую величину, при численном счете рекомендуется ставить ограничитель. Дело в том, что удельная энергия $e_{\vartheta(m)}$ теряет физический смысл в областях, где отсутствует соответствующий химический компонент.

6.3. Уравнение полной энергии для колебательно неравновесного газа

Уравнение полной энергии для термически неравновесной газовой смеси имеет тот же вид, что и в случае термического равновесия:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p) + q_j - u_n \tau_{ij}] = -Q_R \quad (6.28)$$

где Q_R - потери на излучение $[[\text{Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})]$.

Кроме учета потерь на излучение, принципиальное отличие состоит в том, что плотность теплового потока q_j

$$q_j = q_{\lambda,j} + q_{D,j} \quad (6.29)$$

должна отдельно учитывать перенос поступательной, вращательной и колебательной энергий.

Плотность теплового потока $q_{\lambda,j}$, обусловленного теплопроводностью, для всех энергетических мод определяется законом Фурье:

$$q_{\lambda,j} = -\lambda_{TR} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_{\vartheta(m)} \frac{\partial T_{\vartheta(m)}}{\partial x_j}, \quad (6.30)$$

а перенос за счет диффузии - соотношением:

$$q_{D,j} = \sum_s V_{s,j} \rho_s h_s = -\frac{\mu}{Sc} \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s \quad (6.31)$$

Здесь для простоты предполагается термическое равновесие между поступательной и вращательной степенями свободы молекул.

Поступательно-вращательные коэффициенты теплопроводности компонентов $\lambda_{TR,s}$ берутся по справочным данным ², а для $\lambda_{\vartheta(m)}$ используется формула (6.18).

Для определения градиента температуры используем формулы (2.69), (2.72) и (2.71):

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial x_j} &= \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \sum_{s=1}^{Nc} C_s \frac{\partial h_s}{\partial x_j} = \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \frac{\partial T}{\partial x_j} (c_P)_{TR} + \sum_{s=1}^{Nc} C_s \frac{\partial e_{\vartheta s}}{\partial x_j} = \\ &= \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \frac{\partial T}{\partial x_j} (c_P)_{TR} + \sum_{m=1}^{Nm} C_{s(m)} \frac{\partial e_{\vartheta(m)}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (6.32)$$

Отсюда

$$\frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{1}{(c_P)_{TR}} \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} - \sum_{s=1}^{Nc} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s - \sum_{m=1}^{Nm} C_{s(m)} \frac{\partial e_{\vartheta(m)}}{\partial x_j} \right) \quad (6.33)$$

Таким образом, общая плотность теплового потока получается путем следующего преобразования:

$$\begin{aligned} q_j &= q_{\lambda,j} + q_{D,j} = -\lambda_{TR} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{m=1}^{Nm} \lambda_{\vartheta(m)} \frac{\partial T_{\vartheta(m)}}{\partial x_j} - \frac{\mu}{Sc} \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s = \\ &= -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \frac{\mu}{Sc} \right) \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \\ &+ \sum_{m=1}^{Nm} \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} C_{s(m)} (c_V)_{\vartheta(m)} - \lambda_{\vartheta(m)} \right) \frac{\partial T_{\vartheta(m)}}{\partial x_j} = \\ &= -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \frac{\mu}{Sc} \right) \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_j} h_s + \\ &+ \sum_{m=1}^{Nm} C_{s(m)} (c_V)_{\vartheta(m)} \left(\frac{\mu}{Pr_{TR}} - \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial T_{\vartheta(m)}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (6.34)$$

Здесь введено поступательно-вращательное число Прандтля:

$$Pr_{TR} = \frac{\mu (c_P)_{TR}}{\lambda_{TR}} \quad (6.35)$$

² Используются справочные данные по коэффициентам теплопроводности газов, или данные по их вязкости и соответствующие числа Прандтля

Обычно считается, что $Pr_{TR} \approx Sc$, поэтому с достаточной точностью для полного теплового потока можно использовать следующую формулу:

$$q_j = -\frac{\mu}{Pr_{TR}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (6.36)$$

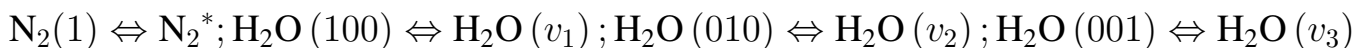
6.4. Механизмы колебательного энергетического обмена

В многокомпонентной смеси двухатомных и многоатомных молекул возбуждение или дезактивация колебательных степеней свободы молекул при неупругих соударениях может происходить несколькими путями: 1) путем непосредственного перехода кинетической энергии сталкивающихся молекул в колебательную энергию, и наоборот (процесс прямого возбуждения или дезактивации), обозначаемый как T-V (V-T) переход; 2) путем обмена энергией между колебательными степенями свободы сталкивающихся молекул (процесс колебательно-колебательного обмена), обозначаемый как V-V переход. V-V переходы бывают как внутримолекулярные, так и межмолекулярные; 3) вследствие спонтанной излучательной дезактивации.

Данные по энергетическим переходам согласно [48, 136–138], приведены в таблице 6.1.

Здесь цифры в скобках означают квантовый уровень колебательного возбуждения. Для трехатомных молекул первая цифра относится к симметричной моде $v_{(1)}$, вторая - к деформационной $v_{(2)}$, третья - к асимметричной $v_{(2)}$.

В связи с этим существует альтернативный вариант обозначений:



и т.д.

Особый интерес представляет трехатомная линейная молекула CO_2 . Как уже говорилось, она имеет 3 степени свободы, одна из которых вырождена. Кроме того, вследствие своей линейности, она имеет вращательную колебательную моду

Таблица 6.1. Основные энергетические переходы в многокомпонентной газовой смеси

V-T процессы	
1. $N_2(1) + M \rightleftharpoons N_2(0) + M$	8. $H_2O(100) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$
2. $CO_2(01^10) + M = CO_2(00^00) + M$	9. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$
3. $CO(1) + M \rightleftharpoons CO(0) + M$	10. $O_2(1) + M \rightleftharpoons O_2(0) + M$
4. $H_2O(010) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$	11. $OH(1) + M \rightleftharpoons OH(0) + M$
5. $H_2(1) + M \rightleftharpoons H_2(0) + M$	12. $CO_2(00^01) + M = CO_2(00^00) + M$
6. $HCl(1) + M \rightleftharpoons HCl(0) + M$	13. $Cl_2(1) + M \rightleftharpoons Cl_2(0) + M$
7. $NO(1) + M \rightleftharpoons NO(0) + M$	
внутримолекулярные V-V процессы:	
14. $CO_2(00^01) + M = \begin{cases} CO_2(03^10) + M \\ CO_2(11^10) + M \end{cases}$	16. $H_2O(100) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$
15. $CO_2(10^00) + M = CO_2(02^00) + M$	17. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$
	18. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(100) + M$
межмолекулярные V-V' процессы:	
19. $CO_2(00^01) + N_2(0) = CO_2(00^00) + N_2(1)$	27. $N_2(1) + O_2(0) = N_2(0) + O_2(1)$
20. $CO_2(00^01) + CO(0) = CO_2(00^00) + CO(1)$	28. $CO_2(01^11) + N_2(0) = CO_2(01^10) + N_2(1)$
21. $CO(1) + N_2(0) = CO(0) + N_2(1)$	29. $CO(1) + O_2(0) = CO(0) + O_2(1)$
22. $N_2(1) + NO(0) = N_2(0) + NO(1)$	30. $CO_2(01^11) + CO(0) = CO_2(01^10) + CO(1)$
23. $CO(1) + NO(0) = CO(0) + NO(1)$	31. $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(001)$
24. $CO_2(00^01) + NO(0) = CO_2(00^00) + NO(1)$	32. $H_2(1) + H_2O(000) = H_2(0) + H_2O(100)$
25. $CO_2(00^00) + N_2(1) = \begin{cases} CO_2(03^10) + N_2(0) \\ CO_2(11^10) + N_2(0) \end{cases}$	33. $H_2(1) + OH(0) = H_2(0) + OH(1)$
26. $CO_2(00^00) + CO(1) = \begin{cases} CO_2(03^10) + CO(0) \\ CO_2(11^10) + CO(0) \end{cases}$	34. $H_2O(001) + OH(0) = H_2O(000) + OH(1)$
	35. $H_2O(100) + OH(0) = H_2O(000) + OH(1)$
V-V' процессы с участием HCl:	
36. $HCl(1) + CO(0) = HCl(0) + CO(1)$	40. $HCl(1) + NO(0) = HCl(0) + NO(1)$
37. $HCl(1) + N_2(0) = HCl(0) + N_2(1)$	41. $HCl(1) + O_2(0) = HCl(0) + O_2(1)$
38. $HCl(1) + CO_2(00^00) = HCl(0) + CO_2(00^01)$	42. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(001)$
39. $HCl(1) + H_2(0) = HCl(0) + H_2(1)$	43. $HCl(1) + H_2O(000) = HCl(0) + H_2O(100)$

относительно своей оси. Типичный спектроскопический символ для этой молекулы будут иметь вид $\text{CO}_2(mn^l p)$. Целые числа m , n , p определяют значения всех трех колебательных квантовых чисел ν_1 , ν_2 и ν_3 . Целое число l будет четным или нечетным в зависимости от того, является ли ν_2 четным или нечетным, кроме того, следующее соотношение имеет место:

$$l = \nu_2, \nu_2 - 2, \nu_2 - 4, \dots, 1 \text{ или } 0 \quad (6.37)$$

Во время радиационного перехода, включающего молекулу CO_2 , справедливы следующие правила:

$$\begin{aligned} \Delta \nu_1 &= \pm 1, 0 \\ \Delta \nu_2 &= \pm 1, 0 \\ \Delta \nu_3 &= \pm 1, 0 \\ \Delta l &= \pm 1, 0 \quad \text{в зависимости от } \Delta \nu_2 = \pm 1, 0 \end{aligned} \quad (6.38)$$

Для описания колебательного состояния воды требуется только три квантовых числа. Соответственно, символ $\text{H}_2\text{O}(mnp)$ обозначает, что целочисленные значения трех квантовых чисел ν_1 , ν_2 и ν_3 равны m , n и p соответственно. Правила отбора, которые, как предполагается, применяются для вибрационных обменов с участием этой молекулы, следующие:

$$\begin{aligned} \Delta \nu_1 &= \pm 1, 0 \\ \Delta \nu_2 &= \pm 1, 0 \\ \Delta \nu_3 &= \pm 1, 0 \end{aligned} \quad (6.39)$$

Нумерация колебательных мод (вibrаторов) и характерные колебательные температуры, использованные в данной работе, приведены в таблице 6.2.

Таблица 6.2. Колебательные моды и характерные колебательные температуры

m	1	2	3	4	5	6	7
Кол.мода	CO	$CO_2 (v_2)$	$CO_2 (v_3)$	N_2	$H_2O (v_1)$	$H_2O (v_2)$	$H_2O (v_3)$
θ_m, K	3083	960	3380	3357	5254	2295	5404
m	8	9	10	11	12	13	14
Кол.мода	$CO_2 (v_1)$	H_2	O_2	NO	OH	HCl	Cl_2
θ_m, K	1920	5964	2234	2700	5286	4143	811

6.5. Источник в уравнении колебательной энергии

Ранее в разделе 2.4.1 источник в уравнении колебательной энергии был выписан в виде (2.80). Более общее выражение следующее:

$$\rho \dot{E}_{\vartheta(m)} = Q_{T-V(m)} + Q_{V-V(m)} + Q_{e-V(m)} - Q_{Rad-V(m)} + \dot{w}_{s(m)} e_{\vartheta(m)}, \quad (6.40)$$

где $Q_{T-V(m)}$ - поступательно-колебательная (Т-V) скорость передачи энергии; $Q_{V-V(m)}$ - колебательно-колебательная (V-V) скорость передачи энергии; $Q_{Rad-V(m)}$ - потеря колебательной энергии вследствие спонтанной излучательной дезактивации; $\dot{w}_{s(m)}$ - скорость образования компонента соответствующей моды в результате химических реакций.

Считается, что скорости энергообмена (релаксации) могут быть с достаточной степенью точности описаны формулой Ландау-Теллера [129, 139]. В общем виде для некоторого процесса релаксации ξ данное уравнение может быть записано следующим образом:

$$Q_{\xi} = \rho_{\xi} \frac{E_{\xi}^{eq} - E_{\xi}}{\tau_{\xi}} \quad (6.41)$$

где индексом eq обозначено равновесное состояние.

Выпишем каждую составляющую источника (6.40).

Поступательно-колебательная скорость передачи энергии Общий вид V - T процессов (1-13) по таблице 6.1:



где A^* - колебательно возбужденное состояние молекулы A .

Вид формулы Ландау-Теллера следующий:

$$Q_{T-V(m)} = \rho_{s(m)} \frac{e_{\vartheta(m)}^{eq}(T) - e_{\vartheta(m)}}{\tau_s} \quad (6.43)$$

Время релаксации для каждого компонента s определяется по формулам:

$$\tau_m = \langle \tau_m \rangle + \tau_{p(m)}, \quad (6.44)$$

$$\langle \tau_m \rangle = \frac{1}{\sum_r X_r / \tau_{m,r}} \quad (6.45)$$

где X_s — мольная доля компонента s , а суммирование ведется по всем компонентам r , с которыми может соударяться молекула компонента s , $\tau_{p(m)}$ - возможная дополнительная поправка.

Для определения времени релаксации двухатомных молекул можно использовать формулу Милликана-Уайта [140]:

$$\tau_{m,r} = \frac{101325}{p} \exp \left[A_{m,r} \left(T^{-1/3} - B_{m,r} \right) - 18.42 \right], \quad (6.46)$$

где

$$A_{m,r} = 1.16 \cdot 10^{-3} \mu_{mr}^{1/2} \theta_m^{4/3}, \quad B_{sr} = 0.015 \mu_{mr}^{1/4}, \quad \mu_{mr} = \frac{M_m M_r}{M_m + M_r} \quad (6.47)$$

индекс m относится к вибрирующей молекуле, индекс r – к третьему телу.

При этом известно, что формула Милликана-Уайта несколько занижает время релаксации, поэтому вводится дополнительная поправка Парка [66]:

$$\tau_{p(m)} = \frac{1}{\sigma_m c_m n}, \quad (6.48)$$

где n - концентрация частиц в газовой смеси; v_m - средняя скорость молекул компонента, заданная формулой

$$c_m = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_m}}, \quad (6.49)$$

σ_m - предельное сечение столкновений:

$$\sigma_m = 10^{-20} \left(\frac{50000}{T} \right)^2 \text{ м}^2 \quad (6.50)$$

В случае наличия более точных данных по временам релаксации, $\tau_{p(m)} = 0$.

Колебательно-колебательная скорость передачи энергии Общий вид V-V процесса:



При этом справедливы следующие формулы [90]:

$$\left. \frac{d\alpha_A}{dt} \right|_{VV} = \frac{X_B}{\tau_{AB}} \left[(1 + \alpha_A) \alpha_B \exp \left(\frac{\theta_B - \theta_A}{T} \right) - (1 + \alpha_B) \alpha_A \right] \quad (6.52)$$

$$\left. \frac{d\alpha_B}{dt} \right|_{VV} = \frac{X_A}{\tau_{AB}} \left[(1 + \alpha_B) \alpha_A - (1 + \alpha_A) \alpha_B \frac{\exp(\theta_B/T)}{\exp[\theta_A/T]} \right] \quad (6.53)$$

Таким образом, изменение числа колебательных квантов A и B связаны соотношением:

$$\frac{1}{X_A} \left. \frac{d\alpha_B}{dt} \right|_{VV} = - \frac{1}{X_B} \left. \frac{d\alpha_A}{dt} \right|_{VV} \quad (6.54)$$

В особом случае внутримолекулярных V-V процессов (14-18) используются следующие формулы:

$$\varphi_{14} = \frac{1}{\tau_{14}} \left[(1 + \alpha_3) \left(\frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \exp \left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T} \right) - \alpha_3 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \right], \quad (6.55)$$

$$\varphi_{16} = \frac{1}{\tau_{16}} \left[(1 + \alpha_5) (\alpha_6)^2 \exp \left(\frac{2\theta_6 - \theta_5}{T} \right) - \alpha_5 (1 + \alpha_6)^2 \right] \quad (6.56)$$

и т.д.

Предполагается, что в процессе релаксации симметричная и деформационная моды колебаний молекул CO_2 находятся в равновесии между собой (Ферми-резонанс: $\theta_8 = 2\theta_2$). Вследствие этого реакция 15 не учитывается.

Общая скорость образования квантов m -ой моды $\dot{\alpha}_{V-V(m)}$ складывается из всех VV процессов, происходящих с этой модой.

Между скоростью передачи энергии и изменением числа квантов $\dot{\alpha}_{V-V(m)}$ имеется следующая связь:

$$Q_{V-V(m)} = \rho_{s(m)} \theta_m \frac{R}{M_{s(m)}} \dot{\alpha}_{V-V(m)} \quad (6.57)$$

Для расчета времен релаксации τ_{AB} используются формулы из [48, 69, 90, 136].

Более подробные сведения по кинетике энергетических переходов приведены в приложении А.

Электронно-колебательная скорость передачи энергии Наблюдается значительный обмен между энергией электронов и колебательной энергией молекулярного азота. Связь энергии электронов с энергией колебаний других молекул ничтожно мала. Для обмена энергиями между энергией электронов и колебательной модой азота используется формула Ландау-Теллера в следующем виде:

$$Q_{e-V(m)} = \rho_m \frac{M_m}{M_e} \frac{e_{V(m)}^{eq}(T_e) - e_{V(m)}}{\tau_{em}}, \quad for \ m = N_2 \quad (6.58)$$

где время релаксации τ_{em} является функцией температуры и давления электронов [141].

Используются следующие аппроксимирующие зависимости:

$$T_e^{\min}(T_V) = \frac{b}{T_V + a} \quad (6.59)$$

$$p_e \tau_e^{\min}(T_V) = c + d T_V \quad (6.60)$$

где коэффициенты принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} a &= 22159.90 K, \\ b &= 1.60 \times 10^8 K^2 \\ c &= 1.20 \times 10^{-5} J m^{-3} s \\ d &= 5.9 \times 10^{-10} J m^{-3} s K^{-1} \end{aligned} \quad (6.61)$$

Таблица 6.3. Обратные времена для спонтанной излучательной дезактивации (данные [136])

m	1	2	3	4	5	6	7
Кол.мода	CO	$CO_2(\nu_2)$	$CO_2(\nu_3)$	N_2	$H_2O(\nu_1)$	$H_2O(\nu_2)$	$H_2O(\nu_3)$
τ_m^{-1}, c^{-1}	33	2.98	416	0	1.7	21.7	39.2

Для температур электронов $T_e \geq T_e^{\min}$ используется следующая формула:

$$p_e \tau_e(T_e, T_V) = p_e \tau_e^{\min}(T_V) + \sum_{i=1}^3 c_i(T_V) (T_e - T_e^{\min}(T_V))^i, \quad (6.62)$$

где

$$\begin{aligned} c_1(T_V) &= 2.38 \cdot 10^{-5} - 4.54 \cdot 10^{-9} T_V + 1.65 \cdot 10^{-13} T_V^2, \\ c_2(T_V) &= 1.78 \cdot 10^{-8} + 2.11 \cdot 10^{-12} T_V - 2.23 \cdot 10^{-17} T_V^2 \\ c_3(T_V) &= 1.17 \cdot 10^{-13} \end{aligned} \quad (6.63)$$

Спонтанная излучательная дезактивация колебательных мод Предполагается, что основные потери на излучение в уравнении энергии связаны со спонтанной излучательной дезактивацией колебательных мод CO^* , $CO_2^*(\nu_2)$, $CO_2^*(\nu_3)$, $H_2O^*(\nu_1)$, $H_2O^*(\nu_2)$, $H_2O^*(\nu_3)$.

Уменьшение энергии этих мод происходит вследствие спонтанной излучательной дезактивации и описывается формулами:

$$Q_{Rad-V(m)} = \rho \frac{E_{\vartheta(m)}}{\tau_{R(m)}} = \rho_{s(m)} \frac{e_{\vartheta(m)}}{\tau_{R(m)}} \quad (6.64)$$

Значения обратных времен указаны в таблице 6.3.

Для всех остальных энергетических мод полагаем $\tau_{R(m)}^{-1} = 0$.

Глава 7

Перенос излучения в газе

Исследование переноса излучения в колебательно неравновесном газе представляет собой важную прикладную и научную проблему. Во многих случаях, радиационные процессы имеют существенное влияние на энергетический баланс таких систем.

Измерение интенсивности излучения колебательно-вращательных линий в сочетании с теоретическим определением этих величин является практически единственным методом диагностики высокотемпературных и высокоскоростных течений колебательно неравновесного газа.

Спектр испускаемой радиации состоит из большого количества отдельных линий. Такой характер линий спектра высокотемпературных газов делает расчет излучения молекул крайне сложной и трудоемкой задачей.

В работе [142] показано, что метод k -распределения [75, 143, 144] позволяет с высокой эффективностью проводить расчеты узкополосного излучения горячих газов с ярко выраженным линейчатым характером спектра. Полученные результаты сопоставимы с методом прямого расчета по спектральным линиям (line-by-line, LBL) [145] и хорошо согласуются с экспериментальными данными, как для однородных, так и для неоднородных газовых смесей.

В данной работе представлена методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k -распределения. Задача состоит из двух взаимосвязанных частей: 1) определение распределений излучающих молекул по колебательным уровням на основе рассмотрения колебательных процессов релаксации (математическая модель термически неравновесного газа представлена в главе 6); 2) используя полученное распределение, определение излучательных и поглощательных характеристик газа в ИК области спектра.

Материал данной главы ранее был опубликован автором в [6, 28].

7.1. Физико-математическая модель оптических характеристик газовых потоков с учетом колебательной неравновесности

7.1.1. Уравнение переноса излучения

Каждая линия спектра в инфракрасном (ИК) диапазоне является результатом колебательно-вращательного перехода между двумя энергетическими уровнями: верхним и нижним. Пусть n_u, n_l - концентрации молекул (заселенности) с более высоким энергетическим состоянием u и более низким энергетическим состоянием l соответственно.

Уравнение переноса излучения (УПИ) для каждого излучающего газа при отсутствии рассеяния имеет вид:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = \kappa_\eta N (B_\eta^{ne} - I_\eta) \quad (7.1)$$

где N - число частиц излучающего компонента в единице объема, [1/см³]; η - волновое число, [1/см]; I_η — спектральная энергетическая яркость, [Вт/(см²·ср·см⁻¹)]; κ_η — спектральный коэффициент поглощения, [см²].

В отличие от равновесного излучения, в УПИ входит не яркость излучения абсолютно черного тела (АЧТ), а функция Планка для термически неравновесного излучения:

$$B_\eta^{ne} = \frac{2hc^2\eta^3}{[(n_l g_u) / (n_u g_l) - 1]}$$

где g_u и g_l - кратности вырождения, т.е. количество независимых состояний, соответствующих данному энергетическому уровню; h - постоянная Планка; c - скорость света, [см/с].

Каждая спектральная линия характеризуется интенсивностью (силой) S_η . Связь между коэффициентом поглощения и S_η зависит от уширения линии: лоренцева или доплеровского. Например, для доплеровского уширения:

$$\kappa_\eta = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \left(\frac{S_\eta}{\gamma_D} \right) \exp \left[- (\ln 2) \left(\frac{\eta - \eta_0}{\gamma_D} \right)^2 \right],$$

где $\gamma_D = \eta_0 \sqrt{\frac{2kT}{mc^2}} \ln 2$ - полуширина линии на полувысоте; η_0 - волновое число в центре линии; m - масса излучающей частицы; k - постоянная Больцмана. Здесь для упрощения записи поступательно-вращательная температура обозначается как T .

Очевидно, что уширение Доплера зависит только от волнового числа и от поступательной температуры T . (В отличие от уширения Лоренца, которое зависит от T , парциального давления излучающего газа и общего давления газовой смеси [75]).

Для интенсивности линии справедлива следующая формула [75]:

$$S_\eta = \frac{A_{ul}}{8\pi c \eta^2} \frac{n_l g_u}{N g_l} \left(1 - \frac{n_u g_l}{n_l g_u} \right),$$

где A_{ul} - коэффициент Эйнштейна для спонтанной эмиссии [1/с].

Таким образом, для решения УПИ (7.1) необходимо определить заселенности энергетических уровней.

7.1.2. Распределения молекулярных состояний

Быстрый энергообмен в резонансных переходах внутри одной энергетической моды создает квазистационарное распределение Больцмана по соответствующим колебательным и вращательным температурам, поэтому для заселенности колебательно-вращательного уровня, характеризующегося колебательным уровнем V и J -м вращательным уровнем, справедлива следующая формула [137]:

$$n_{VJ} = N Q_V^{-1} Q_R^{-1} g X_R X_V, \quad (7.2)$$

где $g = g_V g_J$; $g_J = 2J + 1$ - статистический вес J -го вращательного уровня; g_V - статистический вес колебательного уровня; Q_R - вращательная функция распределения (суммирование или совокупность всех вращательных энергетических уровней молекулы); Q_V - аналогичная колебательная функция распределения; X_R, X_V - определяют функции Больцмана по вращательной и колебательным температурам соответственно.

В работе [75] показано, что вращательная функция распределения для умеренных и высоких температур зависит от момента инерции молекул и для линейных молекул пропорциональна вращательной температуре T_{rot} :

$$Q_R(T_{rot}) \propto T_{rot}$$

Для нелинейных молекул:

$$Q_R(T_{rot}) \propto T_{rot}^{3/2}$$

Формулу для колебательной функции распределения можно получить, используя модель гармонического осциллятора:

$$Q_V(T_\vartheta) = \prod_k [1 - \exp(-hc\eta_k/kT_{v,k})]^{-g_k},$$

где произведение берется по всем колебательным модам с волновым числом гармонического осциллятора [75].

Функции X_R , X_V определяются следующим образом:

$$X_R(V, J, T_{rot}) = \exp\left[-\frac{hc\omega_R(V, J)}{kT_{rot}}\right], \quad X_V(V, T_\vartheta) = \exp\left[-\frac{hc\omega_V}{kT_\vartheta}\right], \quad (7.3)$$

где $\omega_R(V, J)$ - вращательная энергия молекулы для J -го вращательного уровня, [1/см]; ω_V - колебательная энергия, соответствующая колебательному уровню V , [1/см] (здесь все энергии нормированы на hc).

Формула (7.3) для X_V строго справедлива в случае двухатомных молекул. Для трехатомных молекул, которые имеют несколько колебательных степеней свободы, необходимо использовать более сложные формулы.

Для CO_2 [137]:

$$X_V(V, T_\vartheta) \equiv X_V(V, T_{v,12}, T_{v,3}) = \exp\left[-\frac{hc}{k} \left(\frac{\omega_{v_1 v_2^l v_3} - \omega_{0^0 0^0 v_3}}{T_{v,12}} + \frac{\omega_{0^0 0^0 v_3}}{T_{v,3}} \right)\right],$$

где $T_{v,12}$ - единая колебательная температура симметричной и деформационной моды (резонанс Ферми); $T_{v,3}$ - колебательная температура асимметричной моды;

$\omega_{v_1 v_2^l v_3} = \omega_V (v_1, v_2^l, v_3)$ - колебательная энергия, соответствующая колебательному уровню $V = (v_1, v_2^l, v_3)$; l - дополнительное квантовое число, характеризующее составляющую углового момента по оси молекулы и связанное с изгибным колебанием.

Для H_2O :

$$X_V (V, T_\vartheta) \equiv X_V (V, T_{v,1} T_{v,2}, T_{v,3}) = \\ = \exp \left[-\frac{hc}{k} \left(\frac{\omega_{v_1 v_2 v_3} - \omega_{0 v_2 v_3}}{T_{v,1}} + \frac{\omega_{0 v_2 v_3} - \omega_{0 0 v_3}}{T_{v,2}} + \frac{\omega_{0 0 v_3}}{T_{v,3}} \right) \right]$$

Для колебательных и вращательных энергий используются формулы Герцберга [137, 146].

Колебательная энергия двухатомной молекулы [137]:

$$\omega_v^e = \omega^e (v + 0.5) - \omega^e x^e (v + 0.5)^2 + \omega^e y^e (v + 0.5)^3 - \omega^e z^e (v + 0.5)^4 \\ + \omega^e q^e (v + 0.5)^5 - \omega^e s^e (v + 0.5)^6 \quad (7.4)$$

В справочниках (например, в [147–149]) отсчет колебательной энергии идет не от минимума потенциальной кривой, как это делается в формуле (7.4), а от низшего колебательного состояния с $v = 0$. В этом случае

$$\omega_v = \omega_v^e (v) - \omega_v^e (0)$$

Для линейной трехатомной молекулы CO_2 справедлива формула [137]:

$$\omega_v^e (v_1, v_2^l, v_3) = \sum_{i=1}^3 \omega_i^e (v_i + 0.5d_i) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 x_{ij}^e (v_i + 0.5d_i) (v_j + 0.5d_j) + \\ + \sum_{i=1}^3 \sum_{j \geq i}^3 \sum_{k \geq j \geq i}^3 y_{ijk}^e (v_i + 0.5d_i) (v_j + 0.5d_j) (v_k + 0.5d_k) + \dots + x_{ll}^e l^2 + \sum_{i=1}^3 y_{ill}^e v_i l^2 + \dots \quad (7.5)$$

Здесь у молекулы CO_2 степени вырождения равны: $d_1 = d_3 = 1$, $d_2 = 2$

Если, как и ранее, отсчитывать колебательную энергию от низшего колебательного состояния, то:

$$\omega_v (v_1, v_2^l, v_3) = \omega_v^e (v_1, v_2^l, v_3) - \omega_v^e (0, 0^0, 0)$$

Для молекулы H_2O используется формула (7.5) с $d_1 = d_2 = d_3 = 1$, $l = 0$

Вращательная энергия определяется формулой:

$$\omega_R(V, J) = B_V [J(J+1) - l^2] - D_V [J(J+1) - l^2]^2 + H_V [J(J+1) - l^2]^3 - L_V [J(J+1) - l^2]^4 + \dots$$

где коэффициенты зависят от набора квантовых чисел V [137].

Использование формулы (7.2) позволяет определить соотношение между заселенностями верхнего и нижнего колебательно-вращательных уровней

$$\frac{n_u g_l}{n_l g_u} = \frac{X_R(V_u, J_u, T_{rot}) X_V(V_u, T_\vartheta)}{X_R(V_l, J_l, T_{rot}) X_V(V_l, T_\vartheta)} \quad (7.6)$$

и получить формулу для силы линии, соответствующей переходу между ними:

$$S_\eta = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \frac{X_R(V_l, J_l, T_{rot}) X_V(V_l, T_\vartheta)}{Q_V(T_\vartheta) Q_R(T_{rot})} \left[1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_{rot}) X_V(V_u, T_\vartheta)}{X_R(V_l, J_l, T_{rot}) X_V(V_l, T_\vartheta)} \right] \quad (7.7)$$

Для CO формула (7.6) имеет вид:

$$\frac{n_u g_l}{n_l g_u} = \exp \left[-\frac{hc}{k} \left(\frac{\omega_R(V_u, J_u) - \omega_R(V_l, J_l)}{T_{rot}} + \frac{\omega_V(V_u) - \omega_V(V_l)}{T_\vartheta} \right) \right]$$

В справочниках HITRAN [147], HITEMP [148], CDSD [149] для стандартной температуры T_0 заданы колебательные и вращательные квантовые числа, соответствующие верхнему и нижнему энергетическому уровням, а также:

$$E_l = \omega_V(V_l) + \omega_R(J_l)$$

- энергия нижнего уровня,

$$\eta = E_u - E_l$$

- волновое число, соответствующее переходу.

Для стандартной температуры $T_V = T_R = T_0$ и интенсивность линии равна:

$$S_\eta(T_0) = \frac{A_{ul} g_u}{8\pi c \eta^2} \frac{1}{Q_V(T_0) Q_R(T_0)} \exp \left(-C_2 \frac{E_l}{T_0} \right) \left[1 - \exp \left(-C_2 \frac{\eta}{T_0} \right) \right], \quad (7.8)$$

где $C_2 = hc/k$

Таким образом, используя формулы (7.7) и (7.8), можно выразить интенсивность линии через табличное значение $S_\eta(T_0)$ и через вращательные и колебательные температуры:

$$S_\eta = S_\eta(T_0) \frac{Q_V(T_0) Q_R(T_0)}{Q_V(T_\vartheta) Q_R(T_{rot})} \frac{X_R(V_l, J_l, T_{rot}) X_V(V_l, T_\vartheta)}{e^{-C_2 E_l / T_0}} \frac{\left[1 - \frac{X_R(V_u, J_u, T_{rot}) X_V(V_u, T_\vartheta)}{X_R(V_l, J_l, T_{rot}) X_V(V_l, T_\vartheta)} \right]}{1 - e^{-C_2 \frac{\eta}{T_0}}}$$

7.1.3. Использование метода k-распределения

Рассмотрим прямолинейную траекторию в некотором направлении, проходящую через излучающую среду и выходящую из произвольной начальной точки. Пусть s обозначает положение некоторой точки на этой траектории. Если $I_\eta(0) = 0$, то уравнение (7.1) для этой траектории имеет решение:

$$I_\eta(s) = \int_0^s B_\eta^{ne}(s') \frac{d\tau_\eta(s', s)}{ds'} ds' \quad (7.9)$$

где функция

$$\tau_\eta(s', s) = \exp \left(- \int_{s'}^s \kappa_\eta(y) N(y) dy \right) \quad (7.10)$$

- коэффициент пропускания слоя $[s', s]$.

Для однородной полосы, имеющей оптическую толщину $X = NL$, коэффициент пропускания равен:

$$\tau_\eta(X) = e^{-\kappa_\eta X}$$

Решение уравнения переноса излучения для каждой спектральной линии представляет серьезную математическую сложность из-за очень большого количества линий и очень сильной зависимости коэффициента поглощения от волнового числа, поэтому будем искать решения для полосы спектра $\Delta\eta$, ширина которой является достаточно узкой ($1 \dots 5 \text{ см}^{-1}$), но существенно больше ширины отдельной линии. Для однородного слоя среднее значение коэффициента пропускания равно:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp(-\kappa_\eta X) d\eta \quad , \quad (7.11)$$

Используем метод k -распределения (во многих источниках через k обозначают коэффициент поглощения, что и дало название методу). Приведем краткое изложение этой методики.

Из-за огромного количества спектральных линий при решении уравнения переноса излучения для каждой линии практически одни и те же вычисления повторяются снова и снова. Было бы удобнее переупорядочить поле коэффициента поглощения в гладкую, монотонно увеличивающуюся функцию, гарантируя, что каждое вычисление области интенсивности выполнено только однажды.

Если бы использовался метод расчета по спектральным линиям, то формула (7.11) трансформировалась бы в сумму N спектральных интервалов в рассматриваемой полосе:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \exp(-\kappa_j X) \Delta\eta_j, \quad (7.12)$$

где $\Delta\eta_j$ - ширина j -го интервала линий.

Чисто математически в методе k -распределения осуществляется переход от интегрирования по волновым числам к интегрированию по k , что позволяет увеличить шаг интегрирования, существенно снизив объем вычислений.

Первым шагом создания k -распределения является перегруппирование коэффициентов поглощения в некие субинтервалы (подинтервалы) шириной Δk_i . «Плотность распределения» линий спектра создается суммированием частоты встречаемости интервалов волновых чисел, при которых коэффициент поглощения попадает в каждый такой субинтервал:

$$f(k_i) = \frac{1}{\Delta\eta} \sum_{j=1}^N \left| \frac{\Delta\eta_j}{\Delta k_j} \right| W(k_j, k_i, \Delta k_i),$$

где $W(k_j, k_i, \Delta k_i)$ - «оконная» функция для i -го субинтервала:

$$W(k_j, k_i, \Delta k_i) = \begin{cases} 1, & k_i < k_j \leq k_i + \Delta k_i \\ 0, & k_j \leq k_i \cup k_j > k_i + \Delta k_i \end{cases}$$

Введенная таким образом функция $f(k_i)$ позволяет перейти в формуле (7.12) от суммирования по интервалам $\Delta\eta_j$ (по числу интервалов N) к суммированию по

субинтервалам Δk_i :

$$\bar{\tau} = \sum_{i=1}^M \exp(-k_i X) f(k_i) \Delta k_i \quad , \quad (7.13)$$

где M - число субинтервалов Δk_i .

Устремив к нулю Δk_i , получим из (7.13) формулу для пропускательной способности:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kX) f(k) dk \quad (7.14)$$

Очевидно, что выражение $\Delta g_i = f(k_i) \Delta k_i$ определяет долю волновых чисел во всей полосе $[\Delta\eta]$, для которых коэффициент поглощения находится в субинтервале Δk_i .

Введем соответствующую монотонную функцию:

$$g(k) = \int_0^k f(k) dk \approx \sum_{k_i=\kappa_{\min}}^{k_i=k} f(k_i) \Delta k_i$$

Из монотонности следует, что можно ввести обратную функцию:

$$k(g) = g^{-1}(k)$$

Это позволяет перейти в формуле (7.14) к новой переменной интегрирования:

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g) X) dg \quad , \quad (7.15)$$

т.к. $dg = f(k) dk$

Таким образом, для использования узкополосного k -распределения необходимо для каждой полосы $\Delta\eta = \eta_{\max} - \eta_{\min}$ получить следующие функции:

$$f(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \delta(k - \kappa_\eta) d\eta, \quad g(k) = \int_0^k f(k) dk$$

где $\delta(k)$ - дельта функция Дирака.

Затем определяется обратная функция $k(g)$ и с помощью формулы (7.15) получается пропускательная способность всей полосы $\Delta\eta$.

Для неоднородного слоя шириной $[y_1, y_2]$ из формулы (7.10) следует, что для полосы спектра $\Delta\eta$ справедливо следующее соотношение:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} \exp \left[- \int_{y_1}^{y_2} \kappa_{\eta}(y) N(y) dy \right] d\eta \quad (7.16)$$

Используем коррелированный k -метод [75], основанный на предположении, что давление и температура воздействуют на все линии рассматриваемой полосы одинаково, т.е.

$$\kappa(\eta_i, p, T) = \kappa(\eta_j, p, T), \quad \text{если} \quad \kappa_r(\eta_i) = \kappa_r(\eta_j),$$

где индекс r относится к некоторым базисным (опорным) условиям.

Кроме того, считается, что, если при базисных условиях коэффициент поглощения при η_i больше, чем при η_j , то такое же соотношение будет во всем диапазоне изменения температуры и давления.

При выполнении этих условий формула (7.16) преобразуется к виду, аналогичному для однородного газа:

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp \left[- \int_{y_1}^{y_2} k(g, y) N(y) dy \right] dg \quad (7.17)$$

3.4. Метод k -распределения для термически неравновесного газа

Описанный в предыдущем параграфе метод k -распределения строго справедлив для термически равновесного газа, когда радиационные свойства газа определяются одной температурой. В термически неравновесном газе эти свойства зависят от нескольких температур, и уравнение переноса излучения (7.1) записывается в следующей форме:

$$\frac{dI_{\eta}}{ds} = \kappa_{\eta}(\underline{\phi}) N (B_{\eta}^{ne}(\underline{\phi}) - I_{\eta}), \quad (7.18)$$

где $\underline{\phi} = (T_{tr}, T_{\vartheta})$ в случае доплеровского уширения; $I_{\eta} = I(\eta)$ - функция волнового числа.

Аналогично тому, как это сделано в [150], переупорядочим уравнение (7.18) в k -распределение путем умножения его на функцию Дирака $\delta(k - \kappa_{\eta})$ с последующим интегрированием его волновому диапазону $\Delta\eta$:

$$\frac{dI_k}{ds} = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N\kappa_{\eta}(\underline{\phi}) B_{\eta}^{ne}(\underline{\phi}) \delta(k - \kappa_{\eta}) d\eta - \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} N\kappa_{\eta}(\underline{\phi}) I_{\eta} \delta(k - \kappa_{\eta}) d\eta \quad (7.19)$$

где

$$I_k = I(k) = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_{\eta} \delta(k - \kappa_{\eta}) d\eta -$$

является функцией k .

Т.к. во всей полосе выбраны только те волновые числа, где $\kappa_{\eta}(\underline{\phi}) = k$, то уравнение (7.19) можно записать в виде:

$$\frac{dI_k}{ds} = kN(B^{ne}(\underline{\phi}) f(\underline{\phi}, k) - I_k), \quad (7.20)$$

где

$$f(\underline{\phi}, k) = \frac{1}{\Delta\eta} \frac{1}{B^{ne}(\underline{\phi})} \int_{\Delta\eta} B_{\eta}^{ne}(\eta, \underline{\phi}) \delta(k - \kappa_{\eta}) d\eta \quad (7.21)$$

- функция k -распределения с функцией Планка в качестве весового множителя.

Функция $f(\underline{\phi}, k)$ носит весьма неупорядоченный (беспорядочный) характер, поэтому, как и в предыдущем параграфе, имеет смысл перейти к монотонной функции:

$$g(\underline{\phi}, k) = \int_0^k f(\underline{\phi}, k) dk \quad (7.22)$$

Входящая в формулу (7.21) функция Планка $B^{ne}(\underline{\phi})$ может быть выбрана достаточно произвольно, равной средней по полосе $\Delta\eta$.

$$B^{ne}(\underline{\phi}) = \frac{\bar{\varepsilon}(\underline{\phi})}{\bar{\kappa}(\underline{\phi})}, \quad (7.23)$$

где $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\kappa}$ - средние значения на полосе $\Delta\eta$ коэффициентов излучения и поглощения соответственно.

В этом случае уравнение (7.20) имеет вид, сходный с уравнением (7.1), и его решение для однородного слоя аналогично уравнению (7.9):

$$I_k(s) = \int_0^s B^{ne}(\underline{\phi}) \frac{d\tau_k(s', s)}{ds'} ds' \quad (7.24)$$

где функция пропускания равна

$$\tau_k(s', s) = \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k)$$

Средний по полосе коэффициент пропускания равен:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp(-kNL) f(\underline{\phi}, k) dk$$

Так же как и в предыдущем параграфе, переходим к функции g , введенной по формуле (8.72):

$$\bar{\tau} = \int_0^1 \exp(-k(g)NL) dg \quad ,$$

Она полностью совпадает с формулой (7.15), полученной для равновесного излучения. Единственное отличие заключается в том, что функция k -распределения теперь содержит в качестве весового множителя неравновесную функцию Планка (см. формулу (7.21)).

Для неоднородного слоя решение уравнения (7.20) также определяется формулой (7.24), в которой

$$\tau_k(s', s) = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right)$$

т.к.

$$\frac{d\tau_k(s', s)}{ds'} = f(\underline{\phi}, k) \exp\left(-\int_{s'}^s kN(y) dy\right) \frac{d}{ds'} \left[\int_s^{s'} kN(y) dy \right] = \tau_k(s', s) kN(s')$$

Это позволяет использовать для среднего коэффициента пропускания коррелированный k -метод при условиях, описанных в предыдущем параграфе:

$$\bar{\tau} = \int_{\kappa_{\min}}^{\kappa_{\max}} \exp \left(- \int_{s'}^s k N(y) dy \right) f(\underline{\phi}, k) dk = \int_0^1 \exp \left(- \int_{s'}^s k(g, y) N(y) dy \right) dg, \quad (7.25)$$

Формула (7.25) полностью совпадает с полученной для равновесного излучения формулой (7.17).

Среднее по полосе значение интенсивности излучения определяется по формуле:

$$I = \frac{1}{\Delta\eta} \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta = \int_0^1 I_k(k(g)) dg = \int_0^s B^{ne}(\underline{\phi}) \frac{d\bar{\tau}}{ds'} ds', \quad (7.26)$$

где для $B^{ne}(\underline{\phi})$ используется формула (7.23).

Использование метода k -распределения предполагает создание баз данных для каждого компонента, в которой зависимость коэффициента поглощения $k(g)$ получена для различных значений волновых чисел, температур и парциальных давлений газовых компонентов.

Очевидно, что для каждого компонента функция $k(g)$ зависит от распределения коэффициента поглощения внутри рассматриваемой полосы, который, в свою очередь, зависит от многих параметров: поступательной, вращательной и колебательных температур, общего давления, парциального давления компонента, а также от волнового числа и ширины полосы.

Таким образом, в базе данных (БД) для каждой полосы должны содержаться зависимости от достаточно большего количества параметров, что приводит к большому объему и неудобству использования этой БД. Например, для CO_2 коэффициент поглощения зависит от поступательной температуры, вращательной температуры, 2-х колебательных температур, общего давления и парциального давления компонента (или мольной доли), т.е. от 6 параметров.

На самом деле, можно существенно упростить задачу. Во-первых, как правило, справедливо допущение о равенстве вращательной и поступательной темпера-

тур, которое уже использовалось в данной работе:

$$T_{rot} = T$$

Во-вторых, колебательная неравновесность обычно проявляется только при достаточно низких давлениях, когда преобладает доплеровское уширение линий, которое зависит только от поступательной температуры. В этом случае значение коэффициента поглощения не зависит от общего давления и парциального давления, которые влияют на лоренцево уширение.

Таким образом, достаточно сделать 2 различных базы данных: 1) для высоких и средних давлений - в зависимости от 3-х параметров: температуры, давления и мольной доли компонента (такая база описана в работе [142]); 2) для низких давлений - в зависимости от поступательно-вращательной температуры и колебательных температур (разработана в данной работе).

7.1.4. Смесь газов

Если газ состоит из нескольких компонентов, то коэффициенты излучения и поглощения определяются по формулам:

$$\varepsilon_{\eta} = \sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i}(\eta), \quad \kappa_{\eta} = \sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i}(\eta)$$

и уравнение переноса излучения принимает вид [151]:

$$\frac{dI_{\eta}}{ds} = \sum_{n,i} N_n [\varepsilon_{n,i}(\eta) - \kappa_{n,i}(\eta) I_{\eta}]$$

где $\varepsilon_{n,i}(\eta)$, $\kappa_{n,i}(\eta)$ - спектральные коэффициенты излучения и поглощения, индекс n относится к номеру компонента, индекс i относится к колебательной моде.

Введем эффективную функцию Планка для неравновесного излучения:

$$B_{ef}^{ne} = \frac{\sum_{n,i} N_n \varepsilon_{n,i}}{\sum_{n,i} N_n \kappa_{n,i}}$$

Тогда:

$$\frac{dI_{\eta}}{ds} = \kappa_{\eta} (B_{ef}^{ne} - I_{\eta})$$

Решение этого уравнения такое же, как (7.1):

$$I_{\eta}(s) = \int_0^s B_{ef}^{ne}(s') \frac{d\tau_{\eta}(s', s)}{ds'} ds'$$

где

$$\begin{aligned} \tau_{\eta}(s', s) &= \exp\left(-\sum_{n,i} \int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \\ &= \prod_{n,i} \exp\left(-\int_{s'}^s N_n \kappa_{n,i}(\eta) dy\right) = \prod_{n,i} \tau_{\eta,n,i}(s', s), \\ \tau_{\eta,n,i}(s', s) &= \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_{n,i}(\eta) N_n dy\right) \end{aligned}$$

Здесь $\tau_{\eta,n,i}$ - коэффициент пропускания вследствие отдельного колебательного перехода; τ_{η} - коэффициент пропускания вследствие всех колебательных переходов.

При получении решения для полосы спектра $\Delta\eta$ необходимо учитывать взаимное наложение спектральных линий различных компонентов, однако в данной работе рассматривается излучение при достаточно низком давлении: $p < 10^{-3}$ атм. Анализ спектра показывает, что в этом случае расстояние между сильными линиями существенно больше ширины линий, и пересечение (наложение) таких линий маловероятно. Это дает основание рассматривать расчет коэффициента пропускания для каждого компонента отдельно и с достаточно большой точностью использовать формулу

$$\bar{\tau} = \prod_{n,i} \bar{\tau}_{n,i},$$

где для каждого отдельного компонента используется метод k-распределения и формулы (7.25), (7.26).

Для средней по полосе эффективной функции Планка в этом случае получается формула:

$$B^{ne}(\phi) = \sum_{n,i} N_n \bar{\epsilon}_{n,i} / \sum_{n,i} N_n \bar{\kappa}_{n,i}$$

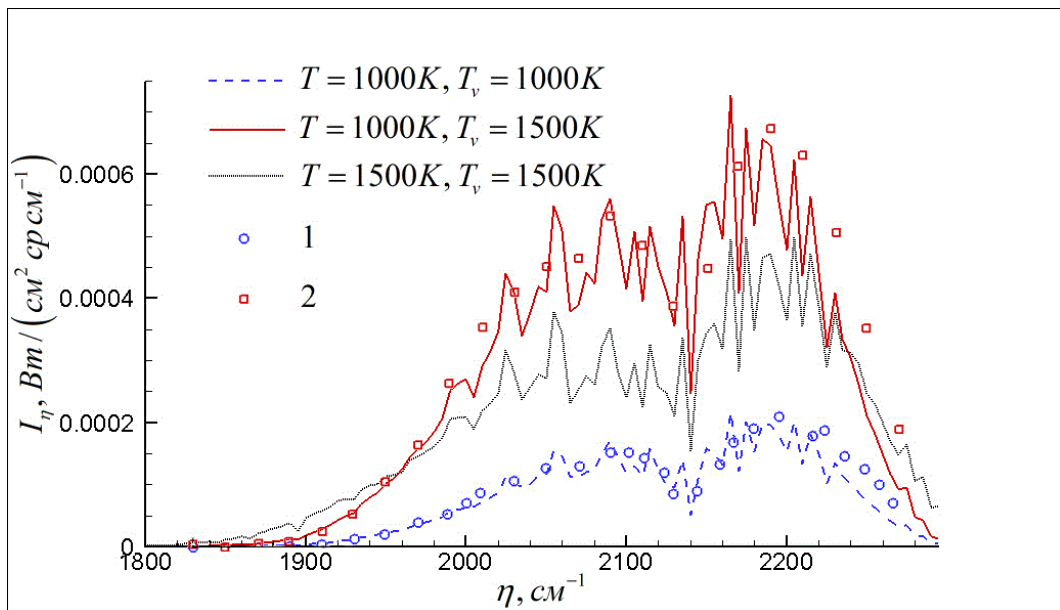


Рис. 7.1. Спектральная энергетическая яркость слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм. Линии - результаты данной работы; значки - результаты работы [145], 1 - $T = T_{\vartheta} = 1500K$, 2 - $T = 1000K$, $T_{\vartheta} = 1500K$

7.2. Результаты расчетов

Для тестирования описанной выше методики проведено сопоставление расчетов характеристик неравновесного излучения с экспериментальными данными и модельными результатами других авторов.

Для численного решения основных газодинамических уравнений использовался численный метод и его программная реализация, описанные в настоящей работе

На рис.7.1 представлены результаты расчетов спектральной энергетической яркости слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм. Сначала спектры были вычислены при равновесной температуре 1000К, затем поступательно-вращательная и колебательная температуры поочередно в отдельности повышались до 1500К. И, наконец, последний расчет был проведен при равновесной температуре 1500К.

Результаты расчета по представленной методике сравнивались с данными из работы [145], в которой использовался метод LBL. Результаты расчетов хорошо согласуются между собой.

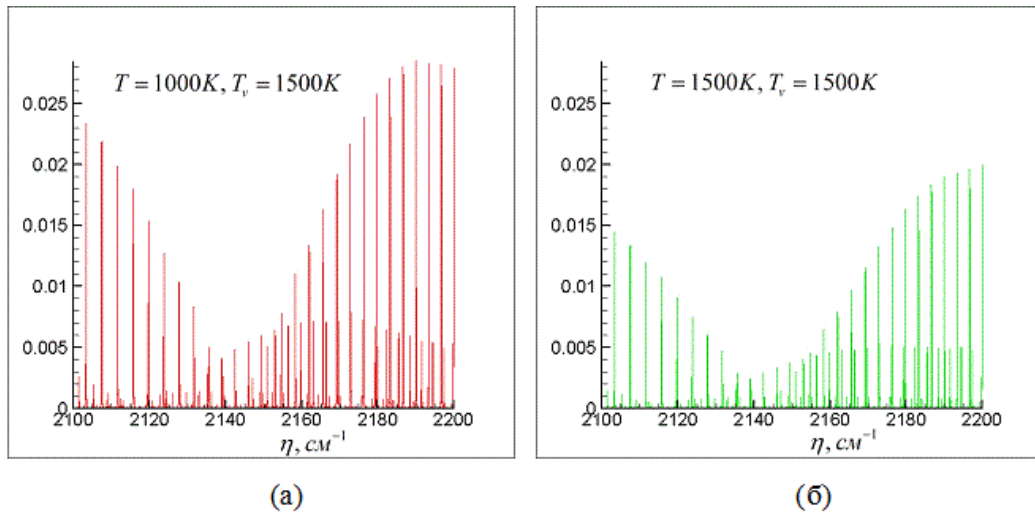


Рис. 7.2. Спектральный коэффициент излучения, рассчитанный полинейно в диапазоне 2100-2200 см⁻¹, для слоя СО толщиной 5 см при давлении 1 атм при различных соотношениях поступательной и колебательной температур: (а) $T = 1000\text{K}$, $T_v = 1500\text{K}$, (б) $T = T_v = 1500\text{K}$.

Интересно, что яркость при равновесной температуре $T=T_v=1500\text{K}$ существенно меньше, чем при неравновесных значениях $T=1000\text{K}$, $T_v=1500\text{K}$, т.е. при меньшем значении поступательной температуры. Это обусловлено тем, что значение коэффициента излучения во втором случае (рис.7.2(а)) намного больше, чем в первом (рис.7.2(б)).

Это позволяет сделать очень важный вывод, что подход, основанный на равновесной методике расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), может приводить к грубым ошибкам.

На рис.7.3 представлены результаты расчетов в диапазоне 3400-3800 см⁻¹ спектрального коэффициента поглощения слоя СО₂ (мольная доля равна 0.2) толщиной 1 м при давлении 10³ Па при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Результаты расчетов по разработанной методике сравнивались с результатами работы [152], в которой использовалась статистическая модель полосы. Очевидно, что результаты обоих методик хорошо согласуются.

Анализ результатов показывает, что в районе длины волны ~2.7 мкм более сильное влияние на излучение оказывают первая (симметричная) и вторая (де-

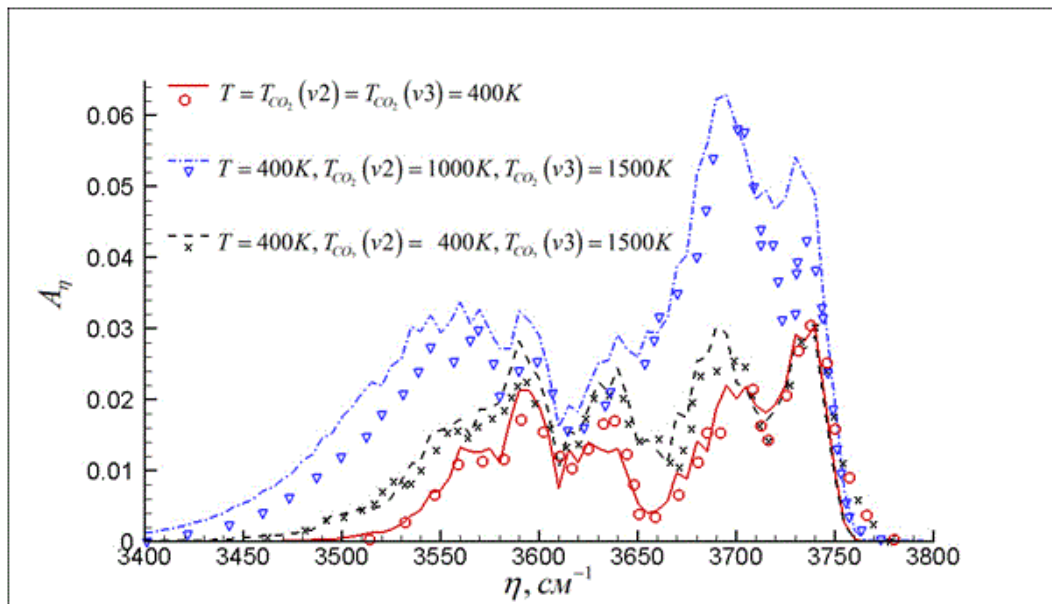


Рис. 7.3. Спектральный коэффициент поглощения слоя CO_2 (мольная доля 0,2) толщиной 1 м при давлении 1 кПа при различных соотношениях поступательной и колебательных температур. Линии - результаты данной работы; значки - результаты работы [152]

формационная) колебательные моды по сравнению с третьей (асимметричной). Напомним, что предполагается равновесие между первой и второй модами вследствие резонанса Ферми.

Более подробный анализ влияния температур различных энергетических мод CO_2 на интенсивность излучения показан на рис.7.4 (диапазон $3400\text{-}3800\text{ см}^{-1}$) и на рис.7.5 (диапазон $2000\text{-}2500\text{ см}^{-1}$). Рассматривался слой CO_2 толщиной 5 м при давлении 10^2 Па. Сначала спектры были вычислены при равновесной температуре 1000К, затем поступательно-вращательная и колебательные температуры поочередно в отдельности повышались до 1500К. И, наконец, последний расчет был проведен при равновесной температуре 1500К.

Анализ результатов показывает, что увеличение поступательной температуры практически не влияет на интенсивность излучения (даже несколько снижает его).

В районе 4.3 мкм температура симметричной и деформационной моды $T_{\text{CO}_2(v2)}$ слабо влияет на излучение. Это объясняется тем, что в этом диапазоне определяющее влияние имеет дезактивация асимметричной моды ($v3$).

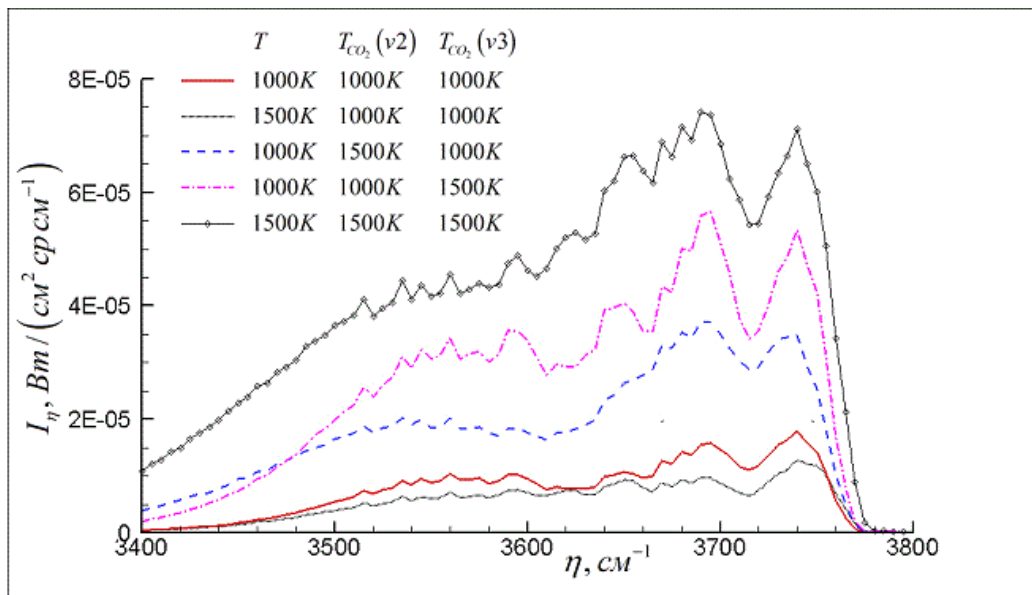


Рис. 7.4. Спектральная энергетическая яркость слоя CO_2 толщиной 5м при давлении 102 Па в диапазоне $3400-3800\text{ см}^{-1}$ при различных соотношениях поступательной и колебательных температур

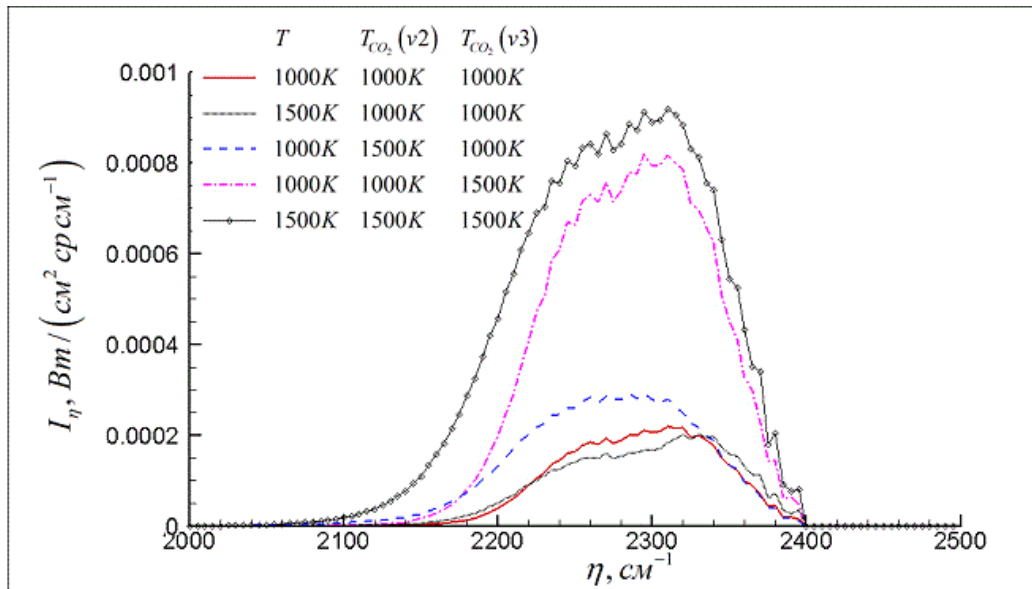


Рис. 7.5. Спектральная энергетическая яркость слоя CO_2 толщиной 5м при давлении 102 Па в диапазоне $2000-2500\text{ см}^{-1}$ при различных соотношениях поступательной и колебательных температур

В районе 2.7 мкм ($3400\text{-}3800 \text{ см}^{-1}$) излучение связано с переходами с верхних уровней $2\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_3$, поэтому увеличение обеих колебательных температур приводит к росту излучения. На первый взгляд, такой результат противоречит представленному в предыдущем тесте (рис.7.3). Однако, на рис.7.3 показан лишь коэффициент поглощения, а интенсивность излучения зависит, как от коэффициента поглощения, так и от неравновесной функции Планка, которая резко растет с увеличением колебательной температуры.

Расчет с использованием равновесной температуры 1500К завышает значения интенсивности излучения по сравнению неравновесными расчетами (особенно для диапазона $3400\text{-}3800 \text{ см}^{-1}$). Это подтверждает, что для CO_2 , также как и для CO , не рекомендуется применять подход, основанный на применении равновесной методики расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), т.к. это может приводить к грубым ошибкам.

Описанные выше тесты связаны с неравновесным излучением однородных слоев горячего газа и носят в большей мере методический характер. Гораздо больший интерес представляет излучение неоднородных газовых смесей, в особенности, таких сложных объектов, как сверхзвуковые струи высокотемпературных продуктов сгорания с большими перепадами давления и сложной волновой структурой.

На рис. 7.6, 7.7 представлены спектральная интенсивность излучения $F [Bm/(cp \text{ мкм})]$ и яркость факела в диапазоне $4.372\text{-}4.516 \text{ мкм}$ для струи с параметрами на срезе сопла, указанными в таблицах 7.1 и 7.2.

Как указывалось выше, при таком давлении уже проявляются эффекты колебательной неравновесности.

Результаты расчетов сопоставлялись с экспериментальными данными из работы [153], в которой измерение спектральной интенсивности излучения производилось с разрешением $\sim 20 \text{ см}^{-1}$. Получено удовлетворительное совпадение.

Гораздо более сильно термическая неравновесность проявляется при исте-

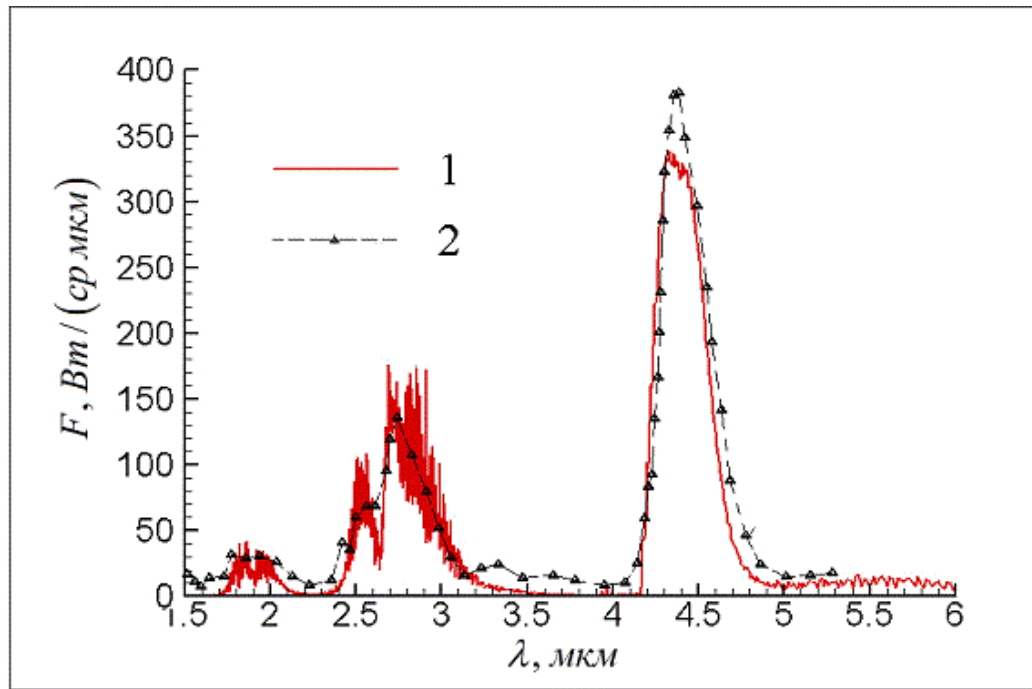


Рис. 7.6. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 1 м. 1 - результаты расчета данной работы; 2 - экспериментальные измерения работы [153]

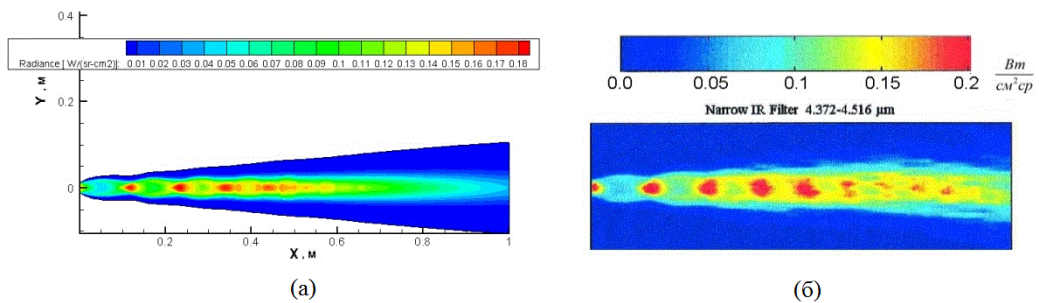


Рис. 7.7. Яркость факела в диапазоне 4.372-4.516 мкм. а - результаты расчета данной работы; б - экспериментальные измерения работы [153]

Таблица 7.1. Исходные данные для расчета излучения факела

Давление, кПа		Температура, К		Скорость, м/с		Угол полуконуса, рад		Радиус сопла, мм	
288		1963		2125		0.131		11.25	
Мольные доли компонентов									
H ₂	O ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	HCl		N ₂		
0.055	0	0.404	0.111	0.136	0.194		0.1		

Таблица 7.2. Параметры внешнего потока при расчете излучения факела

Давление, Па	Температура, К	Скорость, м/с
101.e3	288.	68.

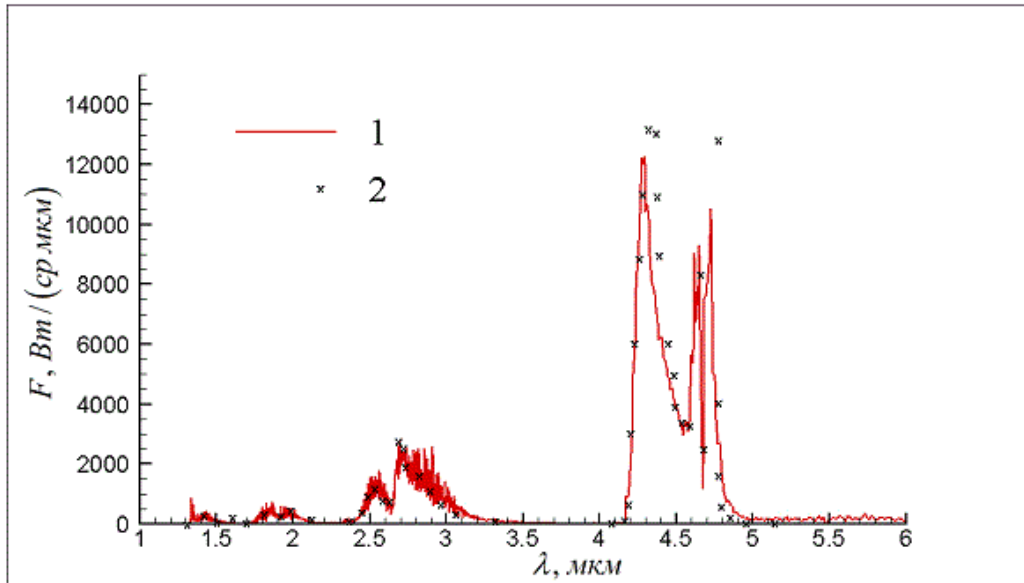


Рис. 7.8. Спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км. 1 - результаты расчета данной работы; 2 - данные из работы [48]

чении горячих продуктов сгорания в вакуум. На рис.7.8 показано распределение спектральной интенсивности излучения сверхзвуковой струи, истекающей в вакуум из сопла с параметрами на срезе, указанными в таблице 7.3.

Результаты расчета сравниваются с данными из работы [48].

Сопоставление результатов расчета с данными из работы [48] показывает, в целом, удовлетворительное согласование, хотя имеет место и некоторое расхождение, например, в области излучения CO (~4.7 мкм).

Таблица 7.3. Начальные данные из работы [48] (концентрации компонентов указаны в мольных долях)

T, К	U_a , м/с	R_a , м	p_a , атм	H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	N ₂
2000	2500	0.3	0.1	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35

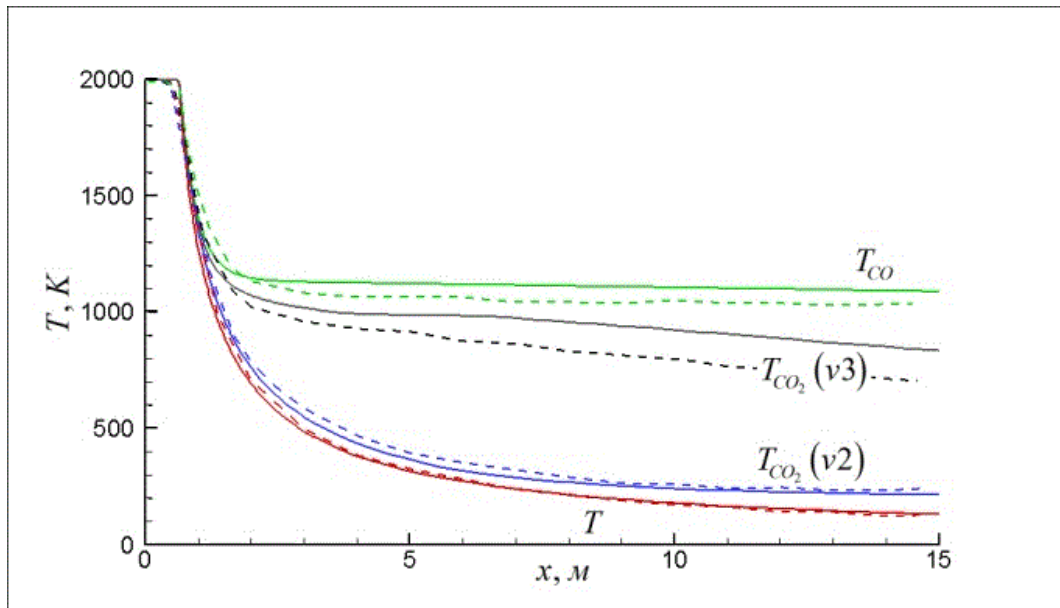


Рис. 7.9. Распределение колебательных и поступательной температур вдоль оси струи при истечении в вакуум. Сплошные линии - результаты расчета данной работы; пунктиры - данные из работы [154]

Для анализа причин этого расхождения проведено сравнение осевого распределения температур различных энергетических мод в струе с параметрами близкими к указанным в 7.3 (см. рис.7.9). Используются исходные данные работы [154].

Расчетные значения поступательной температуры и колебательной температуры деформационной моды $T_{CO_2}(v2)$ удовлетворительно согласуются с данными из [154]. Наблюдаемое расхождение колебательных температур T_{CO} и $T_{CO_2}(v3)$, по всей видимости, обусловлено различием констант кинетики VV и VT энергетических переходов.

Для анализа влияния параметров внешнего потока на неравновесное излучение проведен расчет сверхзвуковой струи горячих продуктов сгорания, истекающей из сопла с параметрами на срезе, совпадающими с указанными в 7.3, за исключением: $R_a=0.5\text{м}$, $p_a=0.3\text{атм}$. Используются исходные данные из работы [48].

Параметры внешнего спутного потока указаны для нескольких случаев, соответствующих состоянию атмосферы на различных высотах (см. таблицу 7.4).

Очевидно, что с ростом высоты и соответствующим уменьшением давления,

Таблица 7.4. Параметры внешнего спутного потока в зависимости от высоты полета

Н, км	50	60	70	80	90	100	110	120
U_e , м/с	2000	2800	3500	4000	4300	4600	5000	5400

эффекты колебательной неравновесности усиливаются.

На рис.7.10-7.12 представления результаты расчетов спектральной интенсивности излучения и температур различных энергетических мод для некоторых высот из таблицы 7.4.

На высоте 70 км равновесное излучение в районе 4.3 мкм несколько меньше неравновесного. Вероятно, это обусловлено тем, что максимальная по поперечному сечению колебательная температура $T_{CO_2(v3)}$ на начальном участке струи намного выше поступательной (рис.7.10(б)).

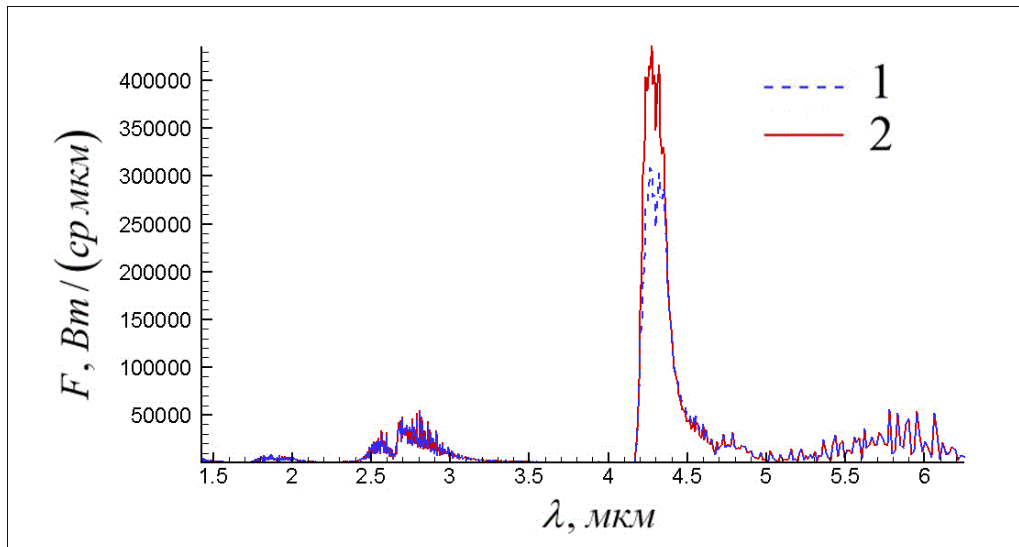
На высоте 80 км начинает проявляться обратный эффект: максимальная поступательная температура выше колебательных температур CO и CO₂. Это приводит к завышенному равновесному излучению по сравнению с неравновесным в соответствующих диапазонах.

На высотах 70, 80 и 90 км колебательные температуры воды практически совпадают с поступательной и поэтому их графики не приводятся.

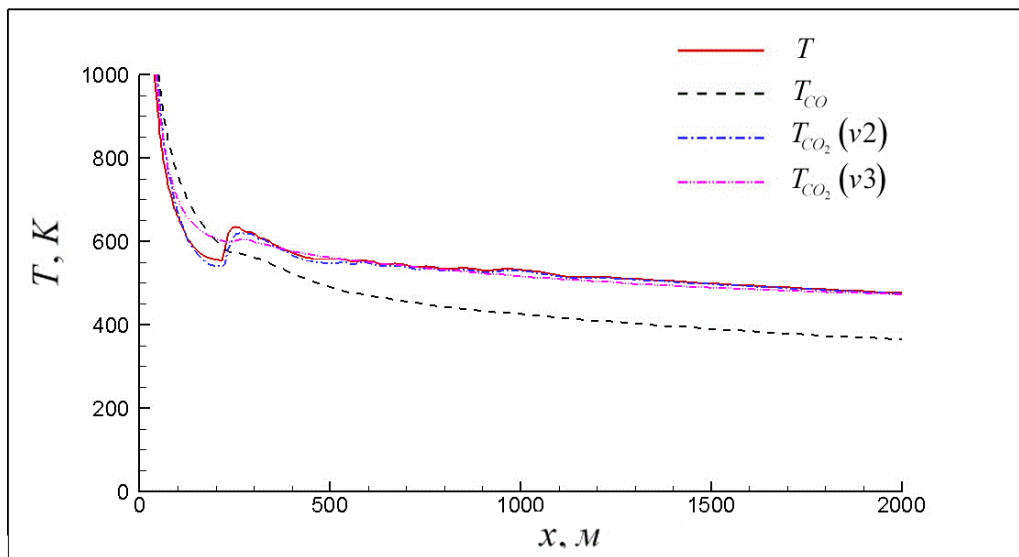
На больших высотах расхождение расчета излучения по неравновесной и равновесной методике проявляется очень сильно. Так, на высоте 110 км результаты расчеты интенсивности излучения в районе 4.3 мкм (линии CO₂(v3)) отличаются более, чем на порядок.

Намного меньше неравновесное излучение по сравнению с равновесным и для H₂O в районе 2.7 мкм, т.к. колебательная температура $T_{H_2O(v3)}$ существенно ниже поступательной (см.рис.7.12(в)). (В районе 2.7 мкм излучение воды связано с переходами с верхнего уровня третьей моды v3).

Колебательная температура $T_{H_2O(v2)}$ близка к поступательной, и поэтому расчеты по равновесной и неравновесной методике в районе 6 мкм практически совпадают.

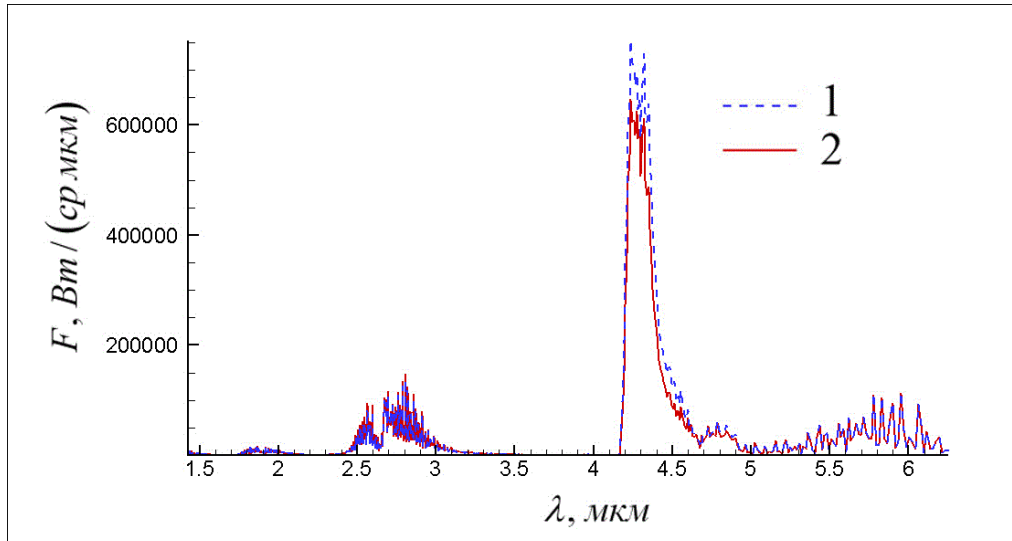


(a)

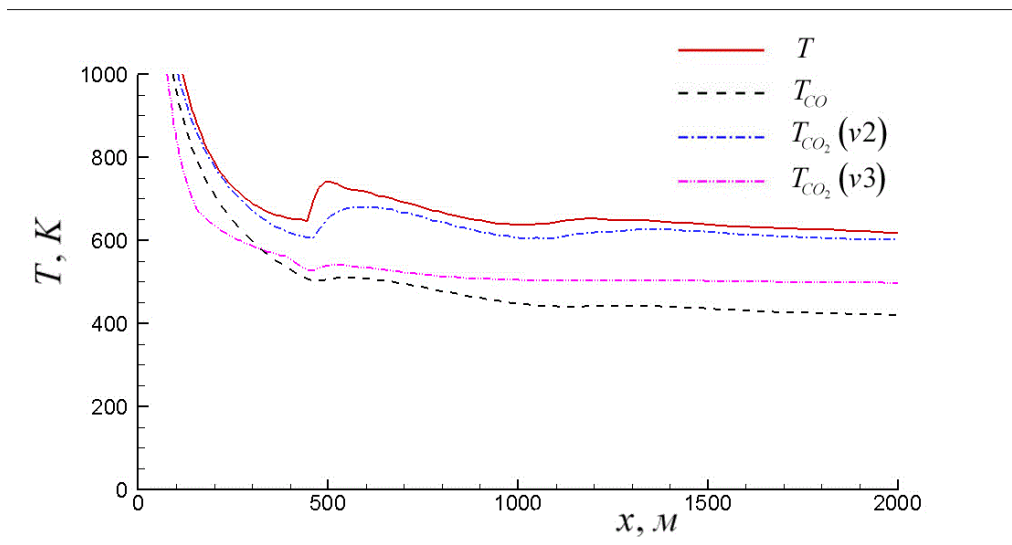


(б)

Рис. 7.10. Высота 70км. (а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения). (б) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения

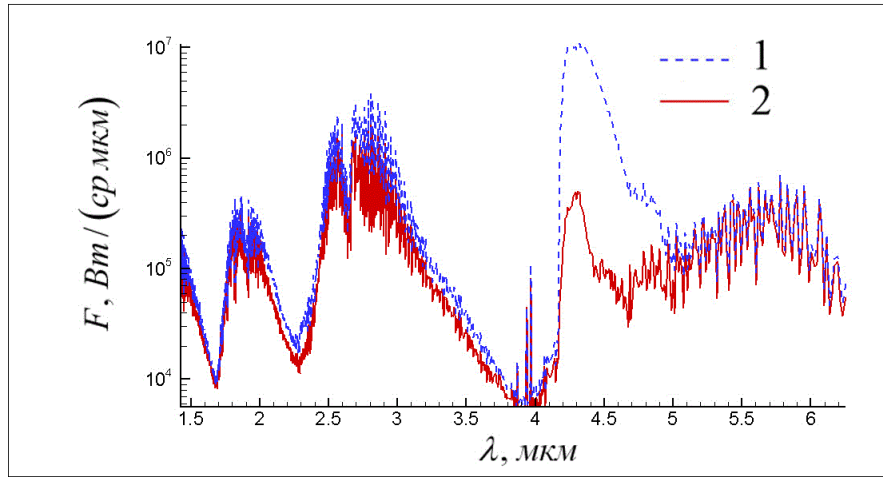


(а)

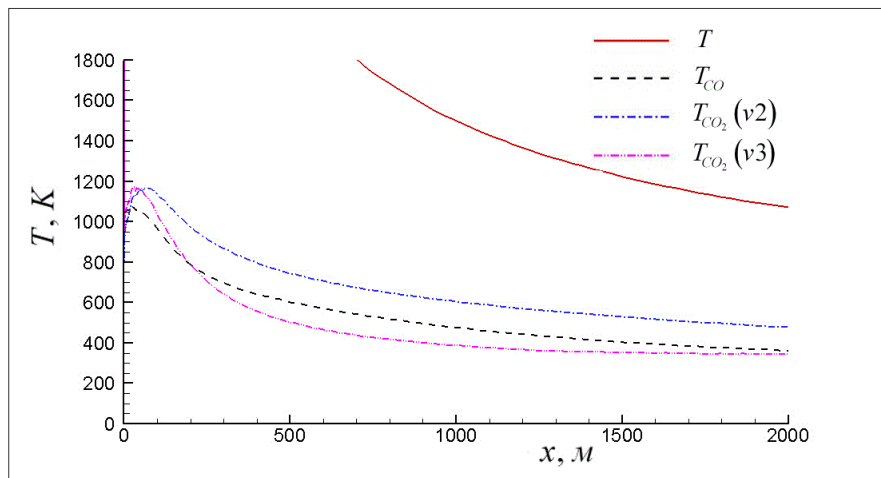


(б)

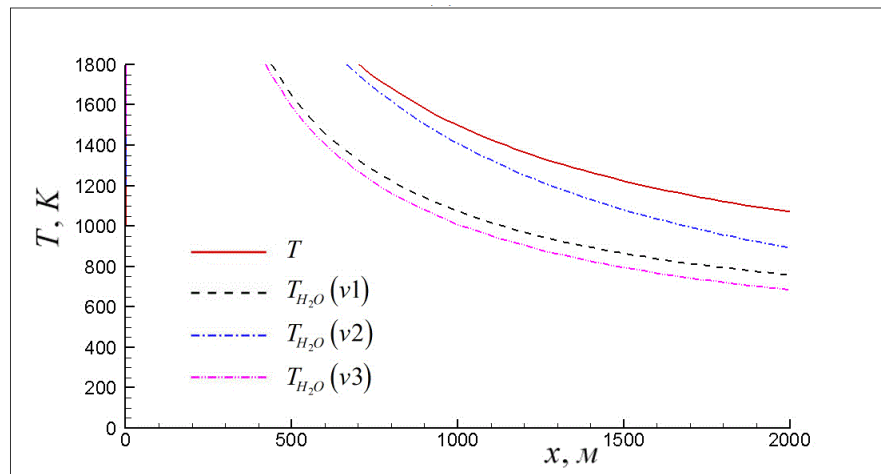
Рис. 7.11. Высота 80км. (а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения); (б) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения



(a)



(б)



(в)

Рис. 7.12. Высота 110км. (а) - спектральная интенсивность излучения, проинтегрированная по длине факела 2 км (1 - расчет равновесного излучения с использованием поступательной температуры; 2 - расчет неравновесного излучения); (б), (в) - распределение по длине струи максимальных значений температур в слое смешения

7.3. Выводы по главе

1. Разработана методика расчета теплового излучения колебательно неравновесного газа на основе метода k-распределения.
2. Предложены формулы для расчета средних по полосе пропускательной способности и эффективной функции Планка для колебательно неравновесной газовой смеси.
3. Проведено сопоставление расчета неравновесного излучения с результатами других авторов и с экспериментальными данными, которое показало удовлетворительное совпадение.
4. Показано, что результаты расчета интенсивности излучения по неравновесной методике существенно отличаются от равновесной (расхождение может превышать порядок).
5. Показано, что подход, основанный на равновесной методике расчета излучения с использованием колебательной температуры в качестве определяющей вместо поступательной (равновесной), может приводить к грубым ошибкам.
6. Показано, что с уменьшением давления эффекты колебательной неравновесности усиливаются. Причем, в первую очередь это проявляется для CO и CO₂, и только на больших высотах начинает проявляться для H₂O.
7. Показано, что колебательные температуры симметричной и асимметричной мод воды $T_{H_2O}(v1)$ и $T_{H_2O}(v3)$ очень близки друг к другу даже при сильной колебательной неравновесности, что говорит о равновесии между этими модами.
8. Константы скоростей энергетических переходов существенно влияют на колебательные температуры, поэтому в дальнейшем желательно их уточнение.

Глава 8

Метод расчета динамики разреженных газов

8.1. Введение

При полетах на больших высотах расчет течений газа представляет серьезную проблему. Связано это с тем, что происходит нарушение условия сплошности среды. Таким образом становится невозможным адекватное описание течений в рамках классической механики жидкости и газа.

Материалы данной главы ранее публиковались автором в [37].

Характеристикой степени разреженности газодинамического течения является K_n — число Кнудсена.

$$K_n = \frac{l}{L}, \quad (8.1)$$

представляющее собой отношение средней длины свободного пробега молекул l к характерному линейному размеру рассматриваемой области течения L . Обычно газ рассматривается как плотный, если $K_n > 0$ (на практике $K_n < 0.01$). Условия, при которых $K_n \rightarrow \infty$ (на практике $K_n > 10$), характерны для свободно-молекулярных течений, когда столкновения между частицами практически отсутствуют. При промежуточных числах K_n газ считается разреженным.

Под умеренно-разреженным течением газа понимают такие течения, когда число Кнудсена лежит в диапазоне порядка от 0.01 до 0.1, в зависимости от рассматриваемой задачи. Течения умеренно-разреженного газа представляют собой область, находящуюся на границе применимости кинетического подхода и подхода, связанного с решением моментных уравнений. Расчет таких течений методами кинетической теории требует неоправданно больших вычислительных ресурсов, что обусловлено высокой плотностью газа. В то же время уравнения Навье–Стокса,

полученные в приближении $Kn > 0$, теряют свою точность при анализе указанных режимов.

Для расчета течений умеренно-разреженного газа в рамках моментных уравнений возникает необходимость учета отклонения от режима сплошной среды, в первую очередь вблизи обтекаемой поверхности. Для этого используются специальные граничные условия.

Для всех чисел Кнудсена, как бы малы они ни были, вблизи стенки существует слой газа, толщина которого имеет порядок средней длины свободного пробега молекул - так называемый *слой Кнудсена*. Для того, чтобы в рамках макроскопических уравнений учесть влияние этого слоя на поле течения, вводятся граничные условия, представляющие собой условия скольжения для скорости и скачка для температуры.

В настоящее время в литературе имеется много вариантов таких граничных условий. Например [78]:

$$u_s = \frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} l \left(\frac{\partial u_n}{\partial n} \right)_s + \frac{4}{3} \left(\frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial s} \right)_s, \quad (8.2)$$

$$T_s - T_w = \frac{2 - \sigma_e}{2\sigma_e} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{l}{Pr} \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_s,$$

где u_n и u_s - нормальная составляющая скорости газа вблизи стенки и скорость скольжения вдоль стенки; n и s - координаты вдоль внешней нормали к стенке и вдоль стенки; T_s - температура газа вблизи стенки; T_w - температура стенки; σ_u и σ_e - коэффициенты аккомодации для скорости и энергии соответственно.

Для большинства материалов в условиях сверхзвукового обтекания коэффициенты аккомодации для скорости и энергии можно полагать одинаковыми и близкими к единице.

Для решения практических задач можно использовать формулы из работы [155]:

$$u_n|_{\Sigma} = 0, \quad u_t|_{\Sigma} = \left(\frac{\sqrt{\pi} \mu}{\rho \sqrt{2RT}} \frac{\partial u_t}{\partial n} \right) |_{\Sigma} \quad (8.3)$$

$$T|_{\Sigma} - T_W = \frac{\sqrt{\pi}}{2R} \left(\frac{\lambda}{\rho\sqrt{2RT}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) |_{\Sigma} \quad (8.4)$$

Течения газа в диапазоне чисел Кнудсена 0.1 - 10 представляют собой существенную сложность для аналитического исследования и численного моделирования. В этом диапазоне применяются методы кинетической теории и решения уравнения Больцмана или его упрощенных вариантов.

8.2. Уравнение Больцмана

Введем понятие одночастичной функции распределения f . Определим функцию распределения для одинаковых молекул через выражение

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi} = m_0 dN, \quad (8.5)$$

где dN - есть ожидаемое число молекул в элементе пространства $d\mathbf{x}$ в окрестности точки \mathbf{x} , обладающих скоростями в элементе пространства скоростей $d\boldsymbol{\xi}$, в окрестности точки $\boldsymbol{\xi}$ в момент времени t ; m_0 — масса частицы.

Зная функцию распределения f , можно определить газодинамические величины - плотность ρ , скорость \mathbf{u} , давление p , температуру T , удельную внутреннюю энергию e , полную энергию E , тензор вязких напряжений \mathbf{T} и тепловой поток \mathbf{q} с помощью выражений:

$$\rho = \int f d\boldsymbol{\xi} \quad (8.6)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi} \quad (8.7)$$

$$p = \int \frac{\mathbf{c}^2}{3} f d\boldsymbol{\xi} \quad (8.8)$$

$$e = \frac{1}{\rho} \int \frac{\mathbf{c}^2}{2} f d\boldsymbol{\xi} \quad (8.9)$$

$$q = \int \frac{c^2}{2} c f d\xi \quad (8.10)$$

$$\mathbf{T} = \int \left(I \frac{c^2}{3} - \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} \right) f d\xi \quad (8.11)$$

где $c = \xi - u$ — скорость хаотического движения частицы газа, или тепловая скорость. Здесь и далее интегрирование выполняется по всему пространству скоростей частиц.

Классическое уравнение для определения функции распределения f , предложенное Л.Больцманом, имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi \cdot \nabla_x) f + (\mathbf{F} \cdot \nabla_\xi) f = J(f, f), \quad (8.12)$$

где \mathbf{F} - действующая на частицы внешняя сила, отнесенная к единице массы; ∇_x и ∇_ξ - операторы Гамильтона по физическому пространству и пространству скоростей соответственно; $J(f, f)$ - интеграл столкновений, который является нелинейным функционалом и определяет изменение функции распределения в результате парных столкновений.

В индексной форме уравнение (8.12) записывается в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = J(f, f) \quad (8.13)$$

Важным свойством интеграла столкновений, которое будет использовано в дальнейшем, является его ортогональность любому из так называемых столкновительных, или сумматорных инвариантов

$$h(\xi) = (1, \xi, \xi^2/2) \quad (8.14)$$

То есть можно записать

$$\int h(\xi) J(f, f) d\xi = 0 \quad (8.15)$$

Это соотношение выражает законы сохранения массы, импульса и энергии частиц при их парном столкновении.

Интегрируя (8.12) с весами 1, $\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{\xi}^2/2$ и пользуясь свойством (8.15), для макроскопических параметров, получим:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (8.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \nabla p = \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (8.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \mathbf{u} \left(e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} \right] + \nabla \cdot \mathbf{q} = \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \mathbf{T}) + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{F} \quad (8.18)$$

Эти уравнения практически совпадают с представленными в главе 2 уравнениями движения вязкого газа (только добавлены внешние массовые силы), но при этом в эту систему входят неизвестные величины: \mathbf{T} и \mathbf{q} .

8.3. Следствия уравнения Больцмана

Точным решением уравнения Больцмана является функция распределения, называемая *локально-максвелловской равновесной функцией*, которая в размерных величинах имеет вид:

$$f^{(0)}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{u} - \boldsymbol{\xi})^2}{2RT} \right] \quad (8.19)$$

Для функции $f^{(0)}$ справедливо соотношение $J(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$, и она связана

с f соотношениями:

$$\begin{aligned}\rho &= \int f d\xi = \int f^{(0)} d\xi, \\ \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho} \int \xi f d\xi = \frac{1}{\rho} \int \xi f^{(0)} d\xi, \\ e &= \frac{1}{\rho} \int \frac{c^2}{2} f d\xi = \frac{1}{\rho} \int \frac{c^2}{2} f^{(0)} d\xi\end{aligned}\tag{8.20}$$

Непосредственной подстановкой можно убедиться, что для локально-максвелловской функции распределения справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned}q &= \int \frac{c^2}{2} c f^{(0)} d\xi = 0 \\ \mathbf{T} &= \int \left(I \frac{c^2}{3} - \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} \right) f^{(0)} d\xi = 0\end{aligned}\tag{8.21}$$

Интегрирование уравнения Больцмана с весами 1 , ξ , $\xi^2/2$ в нулевом приближении, то есть когда f считается равной $f^{(0)}$, позволяет получить из (8.16) - (8.18) систему уравнений Эйлера.

Из уравнения Больцмана (8.12) можно получить и уравнения Навье-Стокса, если искать решение уравнения (8.12) в виде формального асимптотического ряда по степеням малого положительного параметра - числа Кнудсена Kn , в виде ряда Энскогога:

$$f = f^{(0)} + f^{(1)}\text{Kn} + f^{(2)}\text{Kn}^2 + \dots\tag{8.22}$$

В первом приближении по числу Kn вычисления с помощью этого метода приводят к так называемой *локально-навье-стоксовской функции распределения*, и к получению уравнений Навье-Стокса в форме, описанной в главе 2 и разделе 8.2.

Используя следующее приближение в разложении функции распределения по числу Кнудсена, можно получить уравнения Барнетта [78]. Эти уравнения включают в себя третьи пространственные производные, что вызывает существенные трудности при их численном решении и постановке граничных условий.

Наряду с уравнением Больцмана (8.12) рассмотрим более простую модель для описания одночастичной функции распределения, предложенную Бхатнагаром, Гроссом и Круком [156]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_x) f + (F \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}) f = \frac{f^{(0)} - f}{\tau_M} \quad (8.23)$$

В этой формуле столкновительный интеграл $J(f, f)$ аппроксимируется с помощью выражения

$$J(f, f) = \frac{f^{(0)} - f}{\tau_M} \quad (8.24)$$

Уравнение (8.23) называют еще модельным кинетическим уравнением Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК).

Положительный параметр τ_M в правой части уравнения (8.23) интерпретируется как характерное время релаксации функции f к локально-максвелловскому распределению $f^{(0)}$, определяемому формулой (8.19), и считается заданной функцией давления и температуры. Величина τ_M совпадает по порядку величины со средним временем свободного пробега молекул в газе.

8.4. Метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC)

Как уже указывалось, течения газа в диапазоне чисел Кнудсена 0.1 – 10 представляют собой существенную сложность для аналитического исследования и численного моделирования. Численный анализ таких течений может проводиться на основе методов прямого численного моделирования Монте–Карло или, как их часто называют в литературе, DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) методов.

Для моделирования течений газа с использованием DSMC-методов используется специальный подход, основанный на моделировании газа с помощью небольшого числа лагранжевых частиц, которые представляют пакеты молекул газа. То есть проводится численный эксперимент, в котором прослеживается история ограниченного числа частиц, каждая из которых представляет "пакет состоящий из

большого числа W реальных молекул. Величина W называется "весовым множителем" (weighting factor).

Для каждой из частиц запоминаются ее координаты, скорость и энергия. По этим величинам путем осреднения по всем частицам определяются газодинамические параметры течения.

Основные этапы метода Монте-Карло.

1. Дискретизация и моделирование движения части.

Область течения разбивается на пространственные ячейки, причем такие, чтобы изменение газодинамических параметров течения в каждой ячейке было малым. Размер ячейки имеет порядок средней длины свободного пробега l . Для эффективности счета число частиц в каждой пространственной ячейке не должно сильно различаться и составлять порядка нескольких десятков.

Моделирование физического движения молекул проводится посредством дискретных шагов по времени Δt , малых по сравнению со средним временем свободного пробега молекул τ_c , $\Delta t < \tau_c$.

Движение молекул и межмолекулярные столкновения на временном интервале моделируются последовательно. На каждом шаге по времени Δt движение частиц разбивается на два этапа и описывается в рамках кинетической модели, которая представляет собой циклически-повторяющийся процесс: бесстолкновительный разлет и мгновенные столкновения.

Эта модель соответствует двум этапам расчета.

1.1. Перемещение. На первом этапе все молекулы перемещаются на расстояние, определяемое их скоростями $\xi \Delta t$. Учитываются пересечения молекулами поверхностей твердых тел, линий и плоскостей симметрии и границ течения. При наличии потока внутрь области на соответствующих границах генерируются новые молекулы. Если молекула покидает

область расчета, то она исчезает.

1.2. Столкновения. На втором этапе моделируются столкновения между молекулами с последующей коррекцией молекулярных скоростей. Выбор очередной сталкивающейся пары частиц проводится в пределах одной ячейки и производится на основе данных генератора случайных чисел. Предполагается, что сталкиваются только те частицы, которые находятся в одной пространственной ячейке.

2. Расчет макроскопических характеристик

Для вычисления макроскопических параметров газа ρ , \mathbf{u} , p , T запоминаются и аккумулируются данные для всех молекул. Затем происходит дополнительное осреднение по последовательности расчетов, чтобы сгладить статистические флуктуации, возникающие в процессе вычислений.

Важной частью метода прямого моделирования является вычисление числа столкновений. Частота столкновений ν определяется свойствами реального газа, для которого решается задача, и именно эта величина определяет диссипативные характеристики течения - коэффициенты вязкости μ и теплопроводности λ моделируемого газа.

8.5. Квазигазодинамические уравнения

Численное решение уравнения Больцмана, а также использование методов прямого численного моделирования (DSMC) требует использования огромных компьютерных ресурсов.

Поэтому для течений в диапазоне чисел Кнудсена 0.1 – 10 желательно использование более простых моделей.

В Институте прикладной математики АН СССР разработана модель, получившая название *квазигазодинамические (КГД) уравнения* [78].

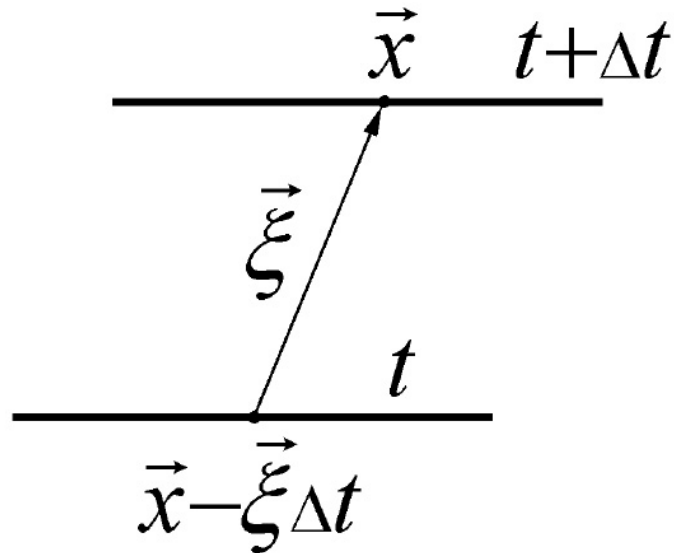


Рис. 8.1. Схема, поясняющая модель

Этот подход основан на использовании математической модели, обобщающей систему уравнений Навье-Стокса и отличающейся от нее дополнительными диссипативными слагаемыми с малым параметром в качестве коэффициента. Принципиальным и существенным отличием КГД подхода от теории Навье-Стокса явилось использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин - плотности, скорости и температуры.

Получение квазигазодинамических уравнений основано на модели расщепления задачи по физическим процессам, которая иначе называется принцип суммарной аппроксимации.

Схематическое изображение этой модели приведено на рисунке 8.1.

Эта модель представляет движение газа как циклически повторяющийся процесс, состоящий из двух этапов: это бесстолкновительный разлет молекул газа и последующее мгновенное установление термодинамического равновесия за счет столкновения частиц - этап мгновенной максвеллизации.

Пусть в некоторый момент времени $t = t_1$ функция распределения имеет

локально-максвелловский вид:

$$f^{(0)}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{u} - \boldsymbol{\xi})^2}{2RT} \right] \quad (8.25)$$

Затем в течение времени Δt происходит бесстолкновительный разлет молекул, который описывается уравнением Больцмана для свободномолекулярного течения:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f = 0 \quad (8.26)$$

Это уравнение представляет собой линейное уравнение переноса и имеет точное решение

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f^{(0)}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}t, \boldsymbol{\xi}), \quad (8.27)$$

где $f^{(0)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$ - известная функция распределения в момент времени $t = 0$.

Далее, в момент времени $t = t_2 = t_1 + \Delta t$ функция распределения f мгновенно вновь становится локально-максвелловской (8.25), но уже с новыми значениями макроскопических параметров ρ , \mathbf{u} и T . Мгновенная максвеллизация имитирует этап столкновения молекул, который в уравнении Больцмана описывается интегралом столкновений $J(f, f)$. Затем оба этапа циклически повторяются.

Уравнение для функции распределения можно получить из уравнения Больцмана в приближении Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК) (8.23), которое в случае отсутствия внешних сил имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f = \frac{f^{(0)} - f}{\tau_M} \quad (8.28)$$

Разложим функцию распределения (8.27) в ряд Тейлора, полагая функцию f_0 максвелловской $f_0 = f^{(0)}$. Ограничиваясь членами первого порядка малости по t , получим

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = f^{(0)} - t(\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f^{(0)} \quad (8.29)$$

Заменяя этим выражением функцию распределения в конвективном слагаемом в (8.28), получим окончательный вид регуляризованного кинетического уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f^{(0)} - (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) \tau_M (\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla) f^{(0)} = \frac{f^{(0)} - f}{\tau_M} \quad (8.30)$$

Здесь мы отождествили временной интервал t с максвелловским временем релаксации τ_M .

В [78] показано, что решения уравнения (8.30) и БГК уравнения близки.

8.6. Вывод квазигазодинамических уравнений

Вывод квазигазодинамических уравнений в общем случае представляет довольно длинную процедуру, поэтому в этом параграфе приведен более простой пример построения КГД уравнений для плоского одномерного течения газа [78].

Рассмотрим плоское одномерное течение вдоль оси x . При этом скорости молекул $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ связаны с тепловыми скоростями $c = (c_x, c_y, c_z)$ соотношениями

$$\xi_x = u + c_x, \quad \xi_y = c_y, \quad \xi_z = c_z \quad (8.31)$$

где u - макроскопическая скорость течения газа вдоль оси x . В этом случае кинетическое уравнение (8.30) принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} - \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) = J(f, f) \quad (8.32)$$

Макроскопические уравнения строятся путем умножения уравнения (8.32) последовательно на сумматорные инварианты

$$h(\xi) = (1, \xi_x, \xi^2/2) \quad (8.33)$$

и осреднения по всем скоростям частиц ξ . Законы сохранения массы, импульса и энергии в процессе столкновений выражаются следующим соотношением для интеграла столкновений

$$\int h(\xi) J(f, f) d\xi = 0 \quad (8.34)$$

Таким образом, из результирующих уравнений исчезают слагаемые с интегралом столкновений.

8.6.1. Уравнение неразрывности

Проинтегрируем уравнение (8.32) по всем скоростям частиц. При интегрировании первого слагаемого получаем:

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\xi = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\xi = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (8.35)$$

Здесь использовалось соотношение (8.6).

Второе слагаемое преобразуется как

$$\int \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\xi = \frac{\partial}{\partial x} \int \xi_x f^{(0)} d\xi = \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) \quad (8.36)$$

Здесь использовалось соотношение (8.7).

Второе слагаемое в левой части уравнения (8.32) преобразуется как

$$\begin{aligned} & \int \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) d\xi = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \xi_x^2 f^{(0)} d\xi \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x)^2 f^{(0)} d\xi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int u^2 f^{(0)} d\xi \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int 2uc_x f^{(0)} d\xi \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \int c_x^2 f^{(0)} d\xi \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) \right) \end{aligned} \quad (8.37)$$

Здесь использованы соотношения (8.20) совместно с определением давления p (8.8) в виде

$$p = \int \frac{c^2}{3} f^{(0)} d\xi = \frac{1}{3} \int (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) f^{(0)} d\xi = \int c_x^2 f^{(0)} d\xi \quad (8.38)$$

Объединяя выражения (8.35), (8.36) и (8.37), получим первое уравнение КГД системы в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) \right) \quad (8.39)$$

8.6.2. Уравнение количества движения

Умножим уравнение (8.32) на ξ_x

$$\xi_x \frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} - \xi_x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) = \xi_x J(f, f) \quad (8.40)$$

и проинтегрируем по всем скоростям ξ .

При интегрировании первого слагаемого и второго слагаемых получаем:

$$\int \xi_x \frac{\partial f}{\partial t} d\xi = \frac{\partial}{\partial t} \int \xi_x f d\xi = \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) \quad (8.41)$$

$$\begin{aligned} \int \xi_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\xi &= \frac{\partial}{\partial x} \int (u + c_x)^2 f^{(0)} d\xi = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \int (u^2 + 2uc_x + c_x^2) f^{(0)} d\xi = \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) + \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) \end{aligned} \quad (8.42)$$

При выводе второго соотношения учитывалось уравнение (8.38).

Последнее слагаемое преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \int \xi_x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) d\xi &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int \xi_x^3 f^{(0)} d\xi \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int u^3 f^{(0)} d\xi \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int 3u^2 c_x f^{(0)} d\xi \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int 3uc_x^2 f^{(0)} d\xi \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int c_x^3 f^{(0)} d\xi \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \left(3u^2 \int c_x f^{(0)} d\xi \right) \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \left(3u \int c_x^2 f^{(0)} d\xi \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \int c_x^3 f^{(0)} d\xi \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3up) \right] \end{aligned} \quad (8.43)$$

Здесь использовались соотношения

$$\int c_x f^{(0)} d\xi = 0, \quad \int c_x^3 f^{(0)} d\xi = 0 \quad (8.44)$$

и формула (8.38).

В более общем случае, вследствие симметрии, справедливо соотношение

$$\int c_i c_j^2 f^{(0)} d\xi = 0 \quad (8.45)$$

Объединяя уравнения (8.41), (8.42) и (8.43), получим из (8.40) второе уравнение КГД системы в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^3 + 3up) \right] \quad (8.46)$$

8.6.3. Уравнение энергии

Осредняя уравнение (8.32) с весом $\xi^2/2$

$$\frac{\xi^2}{2} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\xi^2}{2} \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} - \frac{\xi^2}{2} \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) = \frac{\xi^2}{2} J(f, f), \quad (8.47)$$

получим для первых двух слагаемых модельного кинетического уравнения

$$\begin{aligned} \int \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial f}{\partial t} d\xi &= \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{\xi^2}{2} f d\xi = \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) \\ \int \frac{\xi^2}{2} \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\xi &= \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2} (u + c_x) f^{(0)} d\xi = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \int u \frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2} f^{(0)} d\xi + \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2} c_x f^{(0)} d\xi = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (u \rho E) + \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{((u + c_x)^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2} c_x f^{(0)} d\xi = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (u \rho E) + \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{2} u^2 c_x f^{(0)} d\xi + \frac{\partial}{\partial x} \int u c_x c_x f^{(0)} d\xi + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{2} c_x^2 c_x f^{(0)} d\xi + \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{2} c_y^2 c_x f^{(0)} d\xi + \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{2} c_z^2 c_x f^{(0)} d\xi \\ &= \frac{\partial}{\partial x} (u \rho E + up) \end{aligned} \quad (8.49)$$

Здесь мы использовали определения для ρ и p совместно с уравнениями (8.45) и определение полной энергии в виде

$$\rho E = \int \frac{\xi^2}{2} f d\xi \quad (8.50)$$

Последнее слагаемое кинетического уравнения (8.47) преобразуется в слагаемые со вторыми пространственными производными в уравнении для полной

энергии

$$\begin{aligned}
& \int \frac{\xi^2}{2} \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) d\xi = \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{\xi^2}{2} \xi_x \tau \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} d\xi = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{\xi^2}{2} \xi_x^2 f^{(0)} d\xi \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(u + c_x)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} (u + c_x)^2 f^{(0)} d\xi \right] = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(u + c_x)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} u^2 f^{(0)} d\xi \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(u + c_x)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} 2uc_x f^{(0)} d\xi \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{(u + c_x)^2 + c_y^2 + c_z^2}{2} c_x^2 f^{(0)} d\xi \right] = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 E) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} (2u^2 p) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} u^2 p \right) \right] \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \int \frac{1}{2} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) c_x^2 f^{(0)} d\xi \right]
\end{aligned} \tag{8.51}$$

Для вычисления последнего интеграла в выражении (8.51) выполним замену переменных

$$x = \frac{c_x}{\sqrt{2RT}}, \quad y = \frac{c_y}{\sqrt{2RT}}, \quad z = \frac{c_z}{\sqrt{2RT}} \tag{8.52}$$

Тогда для локально-максвелловской равновесной функции справедливо:

$$\begin{aligned}
f^{(0)}(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{V} - \boldsymbol{\xi})^2}{2RT} \right] = \\
&= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(u - \xi_x)^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{2RT} \right] = \\
&= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{c_x^2 + c_y^2 + c_z^2}{2RT} \right] = \\
&= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp \left[-\frac{c_x^2}{2RT} \right] \exp \left[-\frac{c_y^2}{2RT} \right] \exp \left[-\frac{c_z^2}{2RT} \right] = \\
&= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-x^2) \exp(-y^2) \exp(-z^2)
\end{aligned} \tag{8.53}$$

В результате замены получаем:

$$\begin{aligned}
& \int \frac{1}{2} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) c_x^2 f^{(0)} d\xi = \int \frac{1}{2} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) c_x^2 f^{(0)} dc_x dc_y dc_z = \\
& = \int \frac{1}{2} (2RT x^2 + 2RT y^2 + 2RT z^2) 2RT x^2 \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-x^2) \exp(-y^2) \exp(-z^2) (2RT)^{3/2} dx dy dz = \\
& = 2\rho(RT)^2 \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \int (x^2 + y^2 + z^2) x^2 \exp(-x^2) \exp(-y^2) \exp(-z^2) dx dy dz = \\
& = 2\rho(RT)^2 \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \int (x^4 + y^2 x^2 + z^2 x^2) \exp(-x^2) \exp(-y^2) \exp(-z^2) dx dy dz
\end{aligned} \tag{8.54}$$

Рассмотрим отдельно интеграл в этом выражении:

$$\begin{aligned}
& \int (x^4 + y^2 x^2 + z^2 x^2) \exp(-x^2) \exp(-y^2) \exp(-z^2) dx dy dz = \int x^4 \exp(-x^2) dx \int \exp(-y^2) dy \int \exp(-z^2) dz \\
& \left[+ \int x^2 \exp(-x^2) dx \int y^2 \exp(-y^2) dy \int \exp(-z^2) dz + \int x^2 \exp(-x^2) dx \int \exp(-y^2) dy \int z^2 \exp(-z^2) dz \right. \\
& \quad \left. = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \sqrt{\pi} \sqrt{\pi} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{\pi} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{\pi} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{5}{4} \pi^{3/2} \right.
\end{aligned} \tag{8.55}$$

Здесь использовались известные формулы (пределы интегрирования опущены):

$$\begin{aligned}
& \int \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}, \\
& \int x^2 \exp(-x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \\
& \int x^4 \exp(-x^2) dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Подставляя уравнение (8.55) в уравнение, получаем:

$$\int \frac{1}{2} (c_x^2 + c_y^2 + c_z^2) c_x^2 f^{(0)} d\xi = 2\rho(RT)^2 \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \frac{5}{4} \pi^{3/2} = \frac{5}{2} \frac{p^2}{\rho} \tag{8.56}$$

Таким образом, последнее слагаемое в уравнении (8.47) равно

$$\int \frac{\xi^2}{2} \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \xi_x \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} \right) d\xi = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \left(u^2 E + \frac{5}{2} u^2 p + \frac{5}{2} \frac{p^2}{\rho} \right) \right] \tag{8.57}$$

Объединяя формулы (8.48), (8.49) и (8.57), получим последнее уравнение КГД системы в виде

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \left(E + \frac{p}{\rho} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u^2 E + \frac{5}{2} u^2 p + \frac{5}{2} \frac{p^2}{\rho} \right) \right] \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u^2 E + \frac{5}{2} u^2 p \right) \right] + \frac{5}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau_M \frac{p}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{5}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau_M p \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right]
\end{aligned} \tag{8.58}$$

8.6.4. Формулировка КГД-уравнений для многоатомных газов

Напомним, что уравнение Больцмана (8.12) и, следовательно, уравнения (8.46) и (8.58), получены для частиц одноатомного газа.

Для обобщения на случай произвольных молекул преобразуем правую часть уравнения энергии (8.58) следующим образом: выделим в ней последнее слагаемое, описывающее тепловой поток, в котором введем число Прандтля Pr и идентифицируем коэффициент $5/3$ с параметром γ как $5/2 = \frac{\gamma}{(\gamma-1)}$ (напомним, что у одноатомного газа $\gamma = 5/3$).

Таким образом окончательный вид уравнения энергии имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u \left(E + \frac{p}{\rho} \right) \right] &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u^2 E + \frac{5}{2} u^2 p \right) \right] + \\ + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\tau \frac{p}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right) &+ \frac{1}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau p \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right] \end{aligned} \quad (8.59)$$

В уравнении движения (8.46) многоатомность может вносить вклад во взаимодействие между частицами. В первую очередь за счет процессов перераспределения энергии между различными энергетическими модами. В уравнениях Навье–Стокса это учитывается введением коэффициента второй (объемной) вязкости, зависящим от соотношения теплоемкостей по различным степеням свободы молекулы (поступательным, вращательным, колебательным). В случае одноатомного газа данная поправка естественным образом исчезает.

Сравнивая уравнения Навье–Стокса и уравнения КГД, можно преобразовать уравнение движения КГД к виду [78, 155]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) &= \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^3) + \frac{4}{3} \tau p \frac{\partial u}{\partial x} + \tau p \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) \frac{\partial u}{\partial x} + \tau \left(\gamma p \frac{\partial u}{\partial x} + 3u \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (8.60)$$

8.6.5. Система КГД в общем случае

Основные квазигазодинамические уравнения (8.39), (8.59) и (8.60), полученные для одномерной задачи, легко обобщаются на более общий случай:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right] \right\} \quad (8.61)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij}) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k u_i u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j p) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i p) - \frac{2}{3} p \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tau_M u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + p \gamma \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_M p \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \end{aligned} \quad (8.62)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \left(E + \frac{p}{\rho} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j u_i (\rho E + 2p)] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} u_k^2 p \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \tau p \frac{\partial p}{\rho \partial x_i} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{1}{\text{Pr}} \frac{\gamma}{(\gamma - 1)} \tau p \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{p}{\rho} \right) \right] \end{aligned} \quad (8.63)$$

Система замыкается уравнением состояния идеального газа

$$p = \rho R T \quad (8.64)$$

и формулой для τ_M

$$\tau_M = \frac{\mu}{p} \quad (8.65)$$

При этом согласно [78], слагаемое $\tau_M p (5/3 - \gamma) = \mu (5/3 - \gamma)$ несет смысл коэффициента второй вязкости ζ .

8.7. Квазигазодинамические уравнения неразрывности

компонентов газовой смеси

Уравнение неразрывности для отдельного компонента s газовой смеси выводится аналогично общему уравнению неразрывности (8.61). Оно имеет следующий

вид [78]:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_s u_i) = \frac{\partial g_{s,i}}{\partial x_i} + \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C \quad (8.66)$$

где ρ_s - массовая (парциальная) плотность компонента s ; \dot{w}_s - скорость образования компонента s в результате химических реакций; N_C - число компонентов газовой смеси.

Для потока $g_{s,i}$ используется формула

$$\begin{aligned} g_{s,i} &= \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_s u_j u_i) + \frac{\partial p_s}{\partial x_i} \right] = \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_s u_j u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (p X_s) \right] \\ &= \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho C_s u_j u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (p C_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} [p (X_s - C_s)] \right] \end{aligned} \quad (8.67)$$

где X_s - мольная (молярная) доля компонента s ; C_s - массовая доля компонента s (определения аналогичны приведенным в главе 2).

Пренебрегая последним членом в этом выражении и обобщая уравнение на случай произвольного числа Шмидта Sc , получаем следующую формулу для потока $g_{s,i}$.

$$g_{s,i} = \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho C_s u_j u_i) + C_s \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Sc} p \frac{\partial C_s}{\partial x_i} \right] \quad (8.68)$$

Это допущение аналогично предположению, часто используемому в сплошных течениях жидкости и газа, что диффузионный поток в многокомпонентных смесях определяется по закону Фика с использованием обобщенного числа Шмидта, которое одинаково для всех компонентов смеси.

При суммировании уравнений (8.66) по всем компонентам и при использовании формулы (8.68) для потоков получается общее уравнение неразрывности в форме (8.61).

После введения обозначения

$$g_i = \tau_M \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right] = \tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p), \quad (8.69)$$

общее уравнение неразрывности (8.61) для газовой смеси имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = \frac{\partial g_i}{\partial x_i} \quad (8.70)$$

а поток $g_{s,i}$ -

$$g_{s,i} = C_s g_i + \tau_M \left(\rho u_j u_i + \frac{1}{S_c} \delta_{ij} p \right) \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \quad (8.71)$$

8.8. Квазигазодинамические уравнения энергий для колебательно неравновесного газа

Приведем формулировку КГД-уравнений для многотемпературной термической модели газа. Приводимые ниже выкладки выполнялись при непосредственном участии автора и в дальнейшем были обобщены и опубликованы А.М. Молчановым [91].

Как уже упоминалось в разделе 2.4.1, внутренняя энергия каждого компонента s складывается из поступательной $e_{tr m}$, вращательной $e_{rot m}$, энергии колебательных мод компонента $e_{\vartheta m}$ и химической h_s^0 составляющих, и их вклад во внутреннюю энергию газовой смеси пропорционален массовой доле:

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{tr m} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_{rot m} + \sum_{m=1}^{N_M} C_m e_{\vartheta m} + \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s^0, \quad (8.72)$$

где C_m - массовая доля компонента, к которому относится m -ая колебательная мода; N_M - количество колебательных мод.

При использовании модели гармонического осциллятора среднее число m -ых колебательных квантов α_m , приходящихся на одну молекулу, определяется формулой

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta m}) - 1}, \quad (8.73)$$

где θ_m - характеристическая колебательная температура m -ой колебательной моды; $T_{\vartheta m}$ - соответствующая колебательная температура; r_m - кратность вырождения m -ой моды молекулы.

Энергия m -ой колебательной моды определяется соотношением $h\nu_m = k\theta_m$.

Таким образом, энергия молекулы, запасенная в m -м типе колебаний, равна

$$\varepsilon_{\vartheta(m)} = k\theta_m \alpha_m = \frac{r_m k \theta_m}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta m}) - 1} \quad (8.74)$$

Для того, чтобы получить выражение для энергии, приходящейся на 1 моль вещества, необходимо умножить соответствующую энергию молекулы на число Авогадро N_A . Для удельной энергии (на единицу массы вещества) надо затем разделить полученное выражение на молярную массу данного вещества

$$e_{\vartheta m} = \frac{r_m R_m \theta_m}{\exp(\theta_m/T_{\vartheta m}) - 1}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M,$$

Здесь учитывались соотношения: $kN_A = R$, $R_m = R/M_m$; R - универсальная газовая постоянная; R_m - газовая постоянная данного вещества.

Уравнение сохранения $E_{\vartheta m}$ - колебательной энергии m -ой колебательной моды, содержащейся в единице объема газа, выводится следующим образом. С удельной энергией $e_{\vartheta m}$ эта величина связана соотношением

$$E_{\vartheta(m)} = \rho_m e_{\vartheta m} = \rho C_m e_{\vartheta m} \quad (8.75)$$

Введем функцию распределения для одинаковых молекул через выражение

$$f(t, x, \xi) dx d\xi = m_0 dN, \quad (8.76)$$

где dN - есть ожидаемое число молекул в элементе пространства dx в окрестности точки x , обладающих скоростями в элементе пространства скоростей $d\xi$ в окрестности точки ξ в момент времени t ; m_0 масса частицы.

Поведение функции распределения f описывается уравнением Больцмана уравнение [78]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = J(f, f) \quad (8.77)$$

где $J(f, f)$ - интеграл столкновений, который является нелинейным функционалом и определяет изменение функции распределения в результате парных столкновений.

Для построения моментных уравнений, описывающих течения вязкого газа, традиционно используются приближения для функции f в виде разложения по малому параметру вблизи равновесного значения с последующим осреднением полученного кинетического уравнения с сумматорными инвариантами.

Для построения квазигазодинамических уравнений, учитывающих поступательно-колебательную неравновесность, необходимо заменить функцию распределения f ее приближенным значением f^{QGD} , которое представляет собой разложение по малому параметру в окрестности равновесной функции распределения f^0 следующего вида [78]:

$$f^{QGD} = f^0 - \tau_M \xi_i \frac{\partial f^0}{\partial x_i}$$

Формальная замена $f \rightarrow f^{QGD}$ в конвективном слагаемом уравнения Больцмана (8.77) приводит к приближенному уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f^0}{\partial x_i} - \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_M \xi_j \frac{\partial f^0}{\partial x_j} \right) = J(f, f) \quad (8.78)$$

Чтобы получить уравнение для колебательной энергии $e_{\vartheta m}$, необходимо осреднить (8.78) с весом $\varepsilon_{\vartheta(m)}$, определяемым по формуле (8.74).

Учитывая, что

$$E_{\vartheta(m)} = \int \varepsilon_{\vartheta(m)} f d\xi = \int \varepsilon_{\vartheta(m)} f^0 d\xi, \quad (8.79)$$

получим следующее уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} (E_{\vartheta(m)}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (E_{\vartheta(m)} u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\rho u_j u_i + \delta_{ij} p) \frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \right] \right\} + \dot{E}_{\vartheta(m)} \quad (8.80)$$

где обменный член определяется формулой

$$\dot{E}_{\vartheta(m)} = \int J(f, f) \varepsilon_{\vartheta(m)} f d\xi$$

Первый член в правой части уравнения (8.80) можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\rho u_j u_i + \delta_{ij} p) \frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \right] \right\} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u_i E_{\vartheta(m)}) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_M \frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_M p \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \right) \right] \end{aligned} \quad (8.81)$$

Изложенный здесь способ получения моментных уравнений приводит к выражениям для теплового потока с числом Прандтля, равным единице. Для обобщения

уравнений на случай произвольного числа Прандтля последнее слагаемое в (8.81) следует домножить на величину Pr^{-1} .

Окончательно получаем уравнение для колебательной энергии

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (E_{\vartheta(m)}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (E_{\vartheta(m)} u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j u_i E_{\vartheta(m)}) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_M \frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{1}{\text{Pr}} \tau_{MP} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \right) \right] + \dot{E}_{\vartheta(m)} \end{aligned} \quad (8.82)$$

С учетом (8.69) это уравнение примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (E_{\vartheta(m)}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (E_{\vartheta(m)} u_i) = \frac{\partial F_{m,i}}{\partial x_i} + \dot{E}_{\vartheta(m)} \quad (8.83)$$

где

$$F_{m,i} = \frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} g_i + \tau_M \left(\rho u_j u_i + \frac{1}{\text{Pr}} \delta_{ji} p \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{E_{\vartheta(m)}}{\rho} \right) \quad (8.84)$$

Для расчета источника $\dot{E}_{\vartheta(m)}$ используются формулы, полученные в главе 6. При этом необходимо учитывать, что для колебательной энергии, содержащейся в единице объема газа, используется следующее выражение:

$$E_{\vartheta(m)} \equiv \rho e_{\vartheta m} = \rho C_m e_{\vartheta m} \quad (8.85)$$

Рассмотрим теперь поступательную и вращательную части полной энергии. Предполагая равновесие между поступательной и вращательной энергиями, можно получить уравнение для энергии

$$E_{TR} = e_{TR} + \frac{1}{2} u_k^2$$

где e_{TR} - поступательно-вращательная часть внутренней энергии. Соответствующий показатель адиабаты определяется по формуле

$$\gamma_{TR} = \frac{5 + i_{rot}}{3 + i_R}$$

где i_{rot} - число вращательных степеней свободы молекулы: $i_{rot} = 0$ для одноатомных молекул, $i_{rot} = 2$ для линейных молекул, $i_{rot} = 3$ для многоатомных нелинейных молекул (число атомов больше 2).

Уравнение для E_{TR} совпадает по форме с уравнением (8.63)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{TR}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \left(E_{TR} + \frac{p}{\rho} \right) \right] &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_j u_i (\rho E_{TR} + 2p) \right] \right\} + \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} u_k^2 p \right) \right] &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau h_{TR} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{Pr} \tau p \frac{\partial h_{TR}}{\partial x_i} \right) + S_{TR} \end{aligned} \quad (8.86)$$

где $h_{TR} = \frac{\gamma_{TR}}{(\gamma_{TR} - 1)} RT$ - поступательно-вращательная энтальпия; S_{TR} - обменный член, которой уже не равен нулю, т.к. имеется обмен между поступательно-вращательной и колебательными энергиями.

Складывая уравнения (8.86) и (8.82) для всех колебательных мод, получаем уравнение полной энергии для колебательно неравновесного однородного газа

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{TRV}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \left(E_{TRV} + \frac{p}{\rho} \right) \right] &= \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j u_i \left(E_{TRV} + 2 \frac{p}{\rho} \right) \right] \right\} &+ \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} u_k^2 p \right) \right] &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau h_{TRV} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{1}{Pr} \tau p \frac{\partial h_{TRV}}{\partial x_i} \right] \end{aligned} \quad (8.87)$$

где

$$E_{TRV} = E_{TR} + \frac{1}{\rho} \sum_{m=1}^{Nm} E_{\vartheta(m)}, \quad h_{TRV} = h_{tr} + \frac{1}{\rho} \sum_{m=1}^{Nm} E_{\vartheta(m)} \quad (8.88)$$

Очевидно, что

$$S_{TR} + \sum_{m=1}^{Nm} \dot{E}_{\vartheta(m)} = 0$$

Нетрудно показать, что при использовании допущения о подобии диффузионного переноса и теплового потока, т.е. при $Pr = Sc$, уравнение энергии в форме (8.87) может использоваться и для смеси газов.

Окончательно получаем уравнение полной энергии для колебательно неравновесной газовой смеси

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i H) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \tau_M \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j u_i \left(H + \frac{p}{\rho} \right) \right] \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tau_M \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} u_k^2 p \right) \right] &+ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_M h \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{Pr} \tau_{MP} p \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (8.89)$$

Здесь $H = E + \frac{p}{\rho}$ - полная энтальпия газовой смеси.

8.9. Решение квазигазодинамических уравнений в двумерном случае

Для иллюстрации запишем систему КГД в двумерном виде.

В случае двумерных течений плоских ($\kappa=0$) или осесимметричных ($\kappa=1$) течений квазигазодинамическая система уравнений имеет следующий вид

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho v) &= \frac{\partial g_x}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa g_y) \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho v u) &= \frac{\partial \Pi_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \Pi_{yx}) \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2 + p) + \kappa \frac{\rho v^2}{y} &= \frac{\partial \Pi_{xy}}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \Pi_{yy}) - \kappa \frac{\Pi_{\phi\phi}}{y} \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u H) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho v H) &= \frac{\partial F_{Ex}}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa F_{Ey}) \\
 \frac{\partial}{\partial t}(E_{\vartheta(m)}) + \frac{\partial}{\partial x}(u E_{\vartheta(m)}) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa v E_{\vartheta(m)}) &= \\
 = \frac{\partial F_{m,x}}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa F_{m,y}) + \dot{E}_{\vartheta(m)}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho C_s u_i) &= \frac{\partial g_{s,i}}{\partial x_i} + \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1
 \end{aligned} \tag{8.90}$$

где потоки массы, импульса и энергий определяются по формулам:

$$\begin{aligned}
 g_x &= \tau \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 + p) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho u v) \right] \\
 g_y &= \tau \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho v^2) + \frac{\partial p}{\partial y} \right] \\
 \Pi_{xx} &= \tau \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u^3) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho u^2 v) + 3 \frac{\partial}{\partial x}(u p) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa v p) \right] \\
 \Pi_{yx} &= \tau \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 v) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho u v^2) + \frac{\partial}{\partial x}(v p) + \frac{\partial}{\partial y}(u p) \right] \\
 \Pi_{yy} &= \tau \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u v^2) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa \rho v^3) + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa v p) + \frac{\partial}{\partial x}(u p) + 2 \frac{\partial}{\partial y}(v p) \right] \\
 \Pi_{\phi\phi} &= \tau \left[\frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y}(y^\kappa v p) + \frac{\partial}{\partial x}(u p) + 2 \frac{v p}{y} \right] \\
 F_{Ex} &= \tau \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u^2 \left(H + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} \left[y^\kappa \rho u v \left(H + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[p \left(\frac{u^2}{2} + \frac{v^2}{2} \right) \right] + h \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Pr}} p \frac{\partial h}{\partial x} \right\} \\
 F_{Ey} &= \tau \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho u v \left(H + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} \left[y^\kappa \rho v^2 \left(H + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[p \left(\frac{v^2}{2} + \frac{u^2}{2} \right) \right] + h \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Pr}} p \frac{\partial h}{\partial y} \right\}
 \end{aligned}$$

$$F_{V,x} = \frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} g_x + \tau \left[\left(\rho u^2 + \frac{1}{\Gamma} p \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} \right) + (\rho uv) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} \right) \right]$$

$$F_{V,y} = \frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} g_y + \tau \left[(\rho uv) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} \right) + \left(\rho v^2 + \frac{1}{\Gamma} p \right) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{E_{\vartheta}(m)}{\rho} \right) \right]$$

Систему (8.90) удобно представить в векторной форме

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_I}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} (y^\kappa G_I) + \kappa \frac{1}{y} H_I = \frac{\partial F_V}{\partial x} + \frac{1}{y^\kappa} \frac{\partial}{\partial y} (y^\kappa G_V) + \kappa \frac{1}{y} H_V + S \quad (8.91)$$

где

$$U = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, E_{\vartheta 1}, \dots, E_{\vartheta Nm}, \rho C_1, \dots, \rho C_{Nc-1})^T$$

$$\mathbf{F}_I = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho u H \\ u E_{\vartheta m} \\ \rho u C_s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_I = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho v H \\ v E_{\vartheta m} \\ \rho v C_s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_I = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_V = \begin{pmatrix} g_x \\ \Pi_{xx} \\ \Pi_{xy} \\ F_{Ex} \\ F_{m,x} \\ g_{s,x} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_V = \begin{pmatrix} g_y \\ \Pi_{yx} \\ \Pi_{yy} \\ F_{Ey} \\ F_{m,y} \\ g_{s,y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_V = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\Pi_{\phi\phi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S = (0, 0, 0, 0, \dot{E}_{\vartheta 1}, \dots, \dot{E}_{\vartheta Nm}, \dot{w}_1, \dots, \dot{w}_{Nc-1})^T$$

С точки зрения численного решения система уравнений (8.91) мало чем отличается от системы уравнений Навье-Стокса, описывающей течение плотного газа, поэтому для численного решения основных квазигазодинамических уравнений использовался метод, описанный в главе 3.

8.10. Результаты расчетов. Сравнение с экспериментом и результатами расчетов других авторов.

8.10.1. Скачок уплотнения

Для проверки методики, основанной на решении КГД уравнений, проведено сравнение результатов расчета толщины скачка уплотнения в одномерном течении с экспериментальными данными, представленными в работе [157]; с результатами расчета с использованием уравнений Навье-Стокса, а также метода Монте-Карло [158].

В [157] в качестве рабочего тела использовался Ar. Толщина скачка t_ρ определялась по профилю плотности (по максимальному градиенту).

На рисунке 8.2 представлено отношение длины свободного пробега молекулы l к толщине скачка уплотнения в зависимости от числа Маха набегающего потока.

Очевидно, что расчет с использованием КГД уравнений удовлетворительно согласуется с экспериментом и с расчетом по методу Монте-Карло. При применении уравнений Навье-Стокса толщина скачка уплотнения получается почти в 2 раза меньше, чем в эксперименте.

Аналогичные результаты получены в работе [155].

8.10.2. Истечение из звукового сопла

Для дальнейшей верификации методики проведено сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными из работ [159, 160], в которой исследуются струи, истекающие из звукового сопла диаметром $D=300\text{мкм}$ в разреженное пространство. Рабочее тело - CO_2 .

Рассматривались 4 варианта полного давления: $P_0^I = 203 \cdot 10^3\text{Па}$, $P_0^{II} = 103 \cdot 10^3\text{Па}$, $P_0^{III} = 44 \cdot 10^3\text{Па}$, $P_0^{IV} = 23 \cdot 10^3\text{Па}$.

В [159, 160] для измерений использовался высокочувствительный спектро-

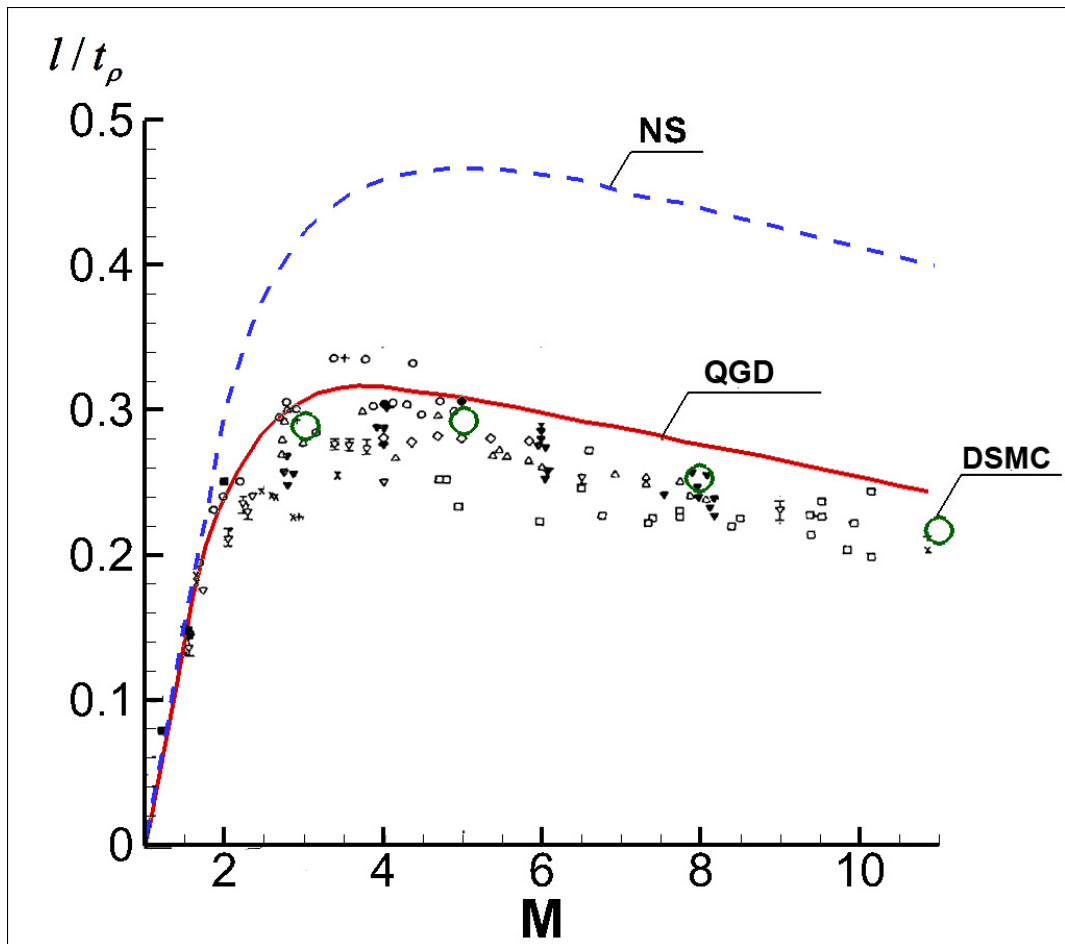


Рис. 8.2. Отношение длины свободного пробега молекулы к толщине скачка уплотнения в зависимости от числа Маха набегающего потока: NS - расчет с использованием уравнений Навье-Стокса; DSMC - расчет с использованием метода Монте-Карло; QGD - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений. Мелкими значками представлены экспериментальные данные из [157]

метр рамановского рассеяния, оснащенный голографической решеткой 2360 линий/мм в качестве дисперсионного элемента и детекторным устройством с зарядовой связью 512x512 пикселей, охлаждаемым жидким N₂. Проводились измерения концентраций частиц, вращательных и колебательных температур.

На рисунке 8.3 представлено пространственное распределение относительных температур для режима *I*., а на рисунке 8.4 - изменение температуры вдоль оси струи. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными в пределах 15-30%, которые декларированы для данного эксперимента.

На рисунке 8.5 представлены результаты расчета колебательных температур для всех 4 вариантов и сопоставление этих результатов с экспериментальными данными. Характер изменения результатов расчета отличается от эксперимента: расчетные колебательные температуры уменьшаются быстрее и вблизи от среза сопла практически совпадают с поступательной температурой. Это объясняется тем, что в непосредственной близости от сопла давление еще достаточно высоко для обеспечения термического равновесия.

Тем не менее, уровень, на котором происходит замораживание колебательных температур, в расчетах и в экспериментах удовлетворительно совпадает.

8.10.3. Выхлопная струя ракеты-носителя Titan-ШВ

Рассмотрим задачу моделирования истечения из сопла американской ракеты-носителя Titan-ШВ результаты, получаемые при описании газодинамической картины с использованием КГД уравнений, а также с помощью уравнений Навье–Стокса с второй вязкостью по гипотезе Стокса и по модели Лосева.

По данной задаче имеются опубликованные данные летного эксперимента [161].

В таблице 8.1 представлена циклограмма полета данного изделия.

Параметры на срезе сопла:

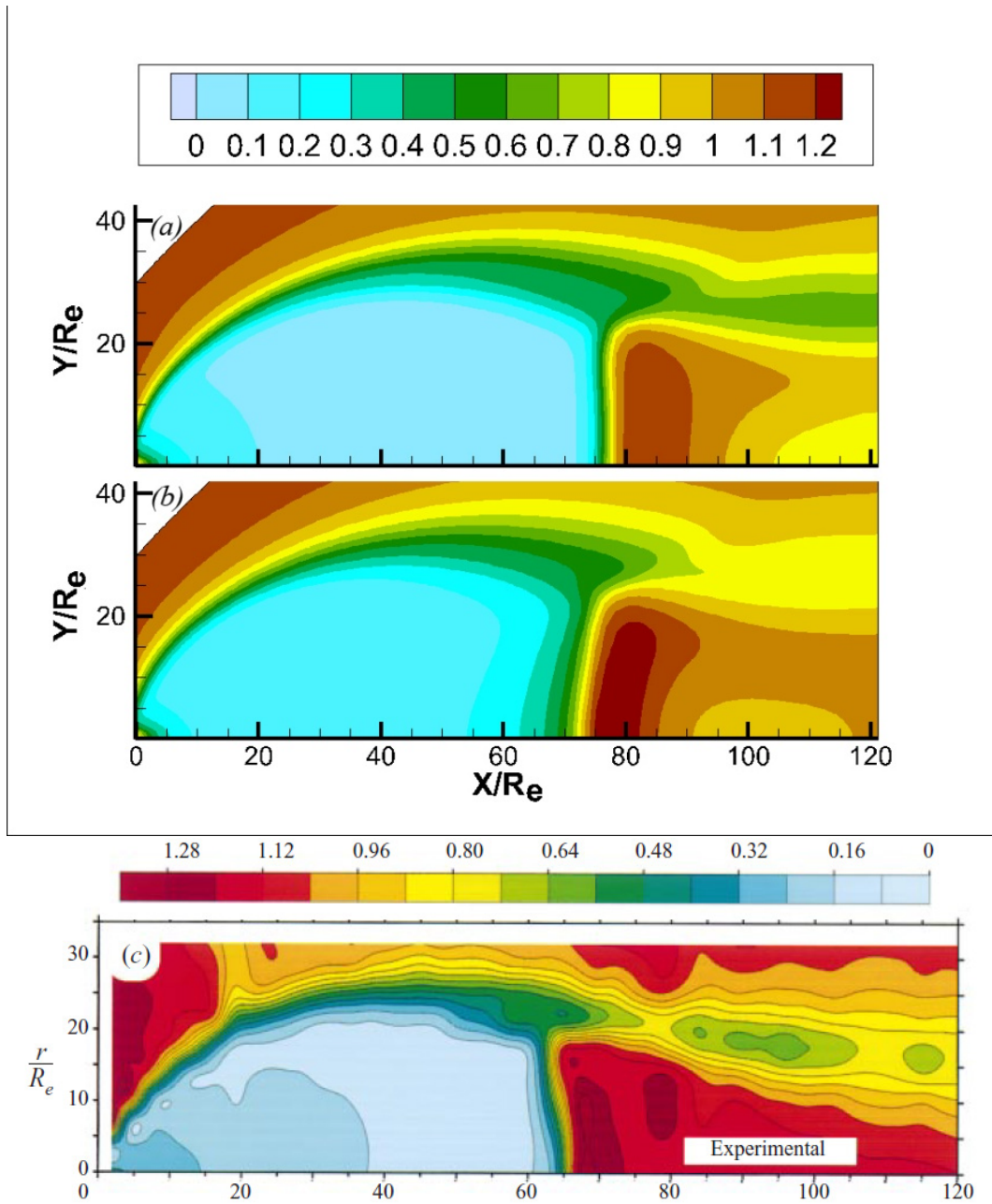


Рис. 8.3. Пространственное распределение относительных температур T/T_∞ для варианта I.
 (a) - результаты расчета поступательно-вращательной температуры при использовании уравнений Навье-Стокса;
 (b) - результаты расчета поступательно-вращательной температуры при использовании квазигазодинамических уравнений;
 (c) - результаты экспериментального исследования вращательной температуры [160].

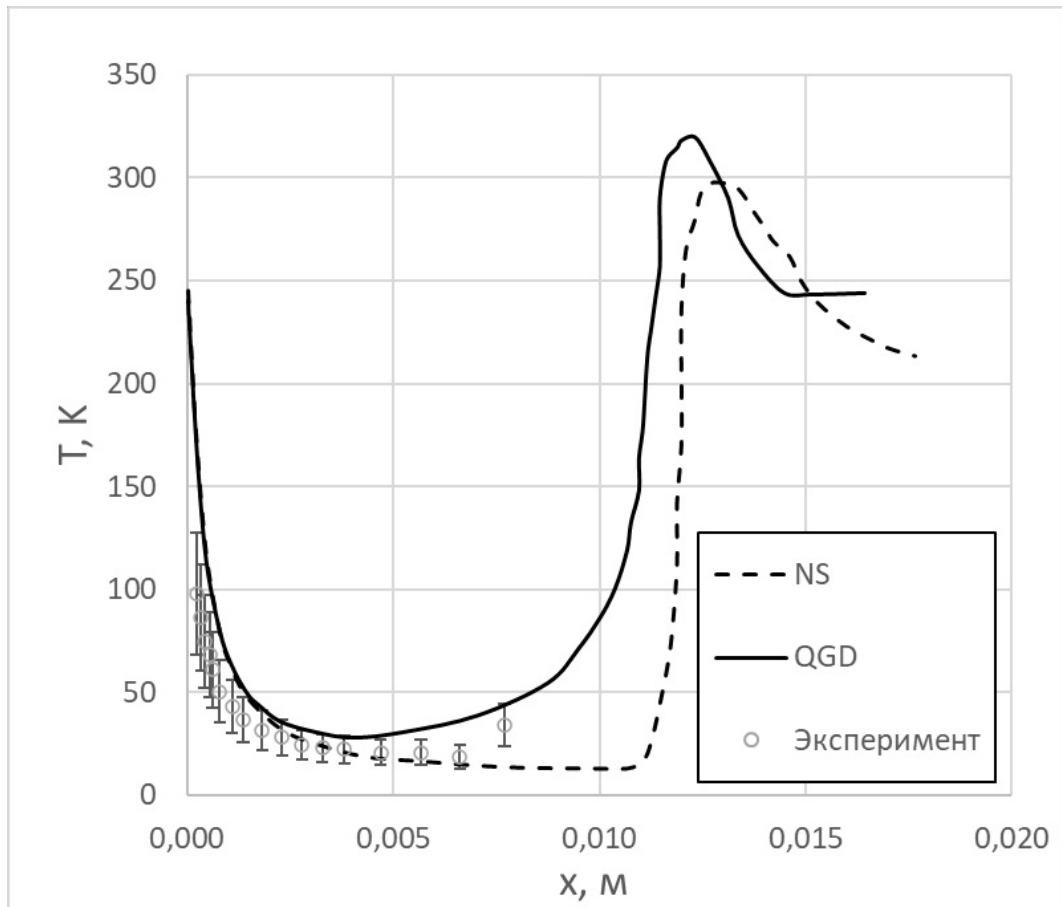


Рис. 8.4. Осевое изменение температуры для варианта I. Пояснение см. рисунок 8.3

Таблица 8.1. Циклограмма полета ракеты-носителя Titan-ШВ

Высота, км	100	110	120	130	140	150	160	168
Время полета, с	220	237	253	275	300	334	368	421
Скорость, м/с	2730	2905	3139	3438	3920	4673	5405	5523

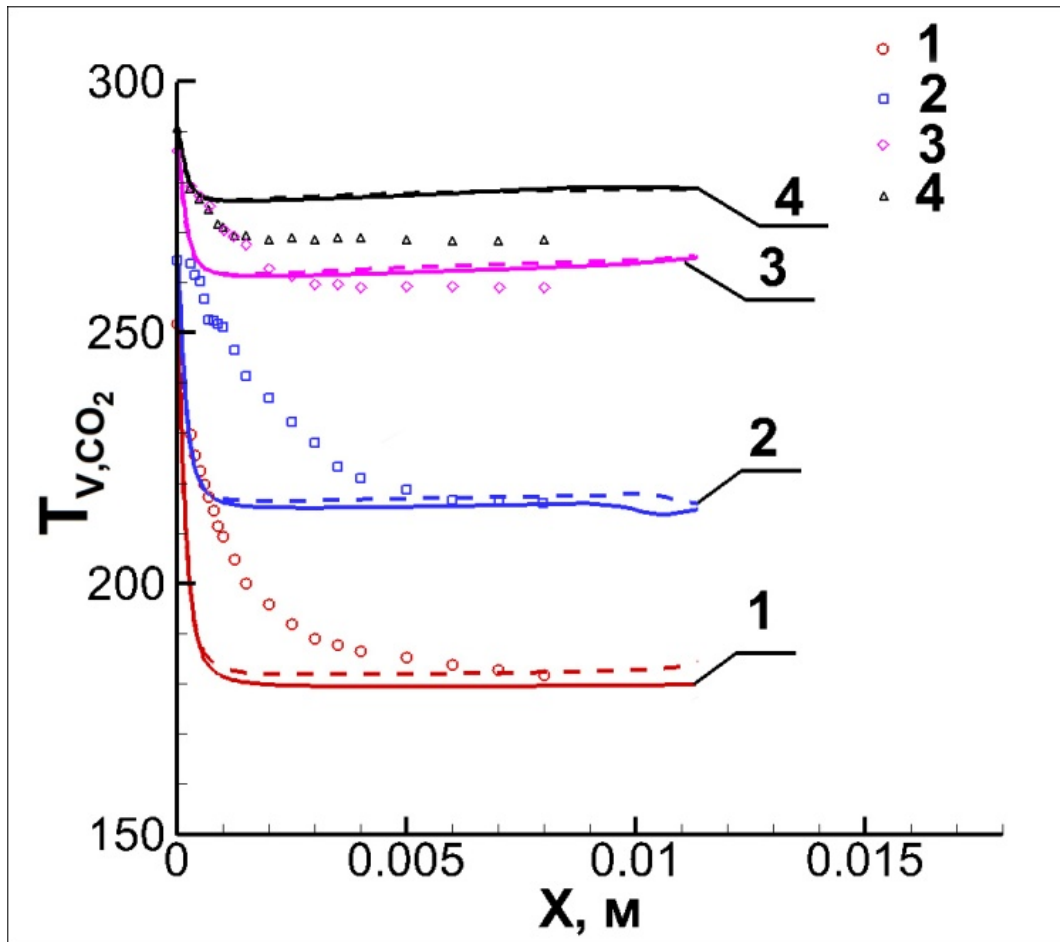


Рис. 8.5. Осевое изменение колебательной температуры. 1 - $P_0^I = 203 \cdot 10^3 \text{Па}$; 2 - $P_0^{II} = 103 \cdot 10^3 \text{Па}$; 3 - $P_0^{III} = 44 \cdot 10^3 \text{Па}$; 4 - $P_0^{IV} = 23 \cdot 10^3 \text{Па}$; Сплошные линии - результаты расчета при использовании уравнений Навье-Стокса; пунктирные линии - результаты расчета при использовании квазигазодинамических уравнений; значки - результаты экспериментального исследования вращательной температуры [159]

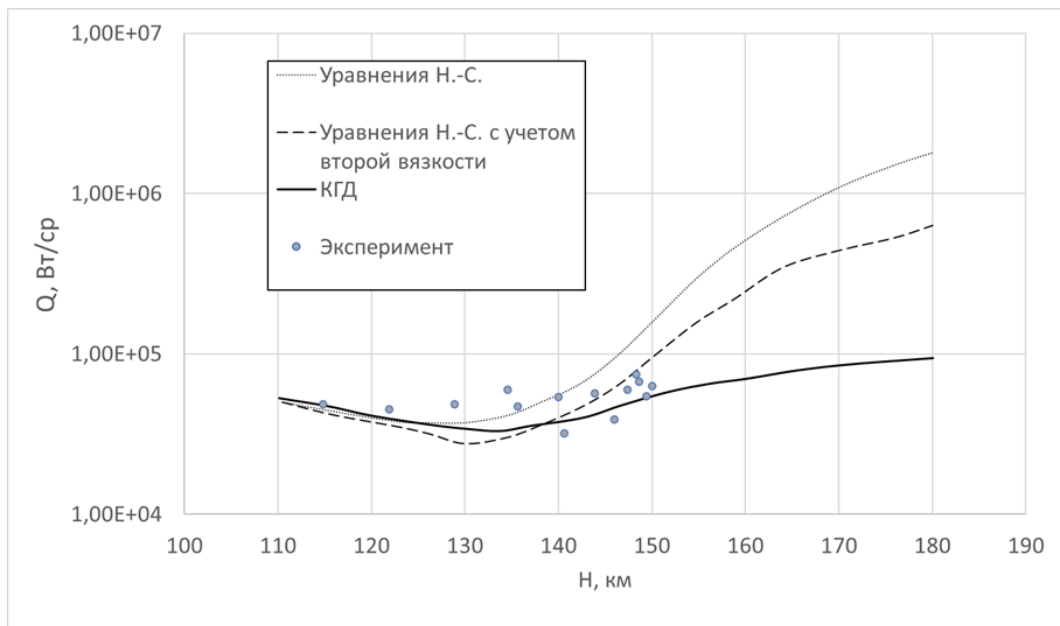


Рис. 8.6. Зависимость интегрального излучения струи по высоте

- состав (в мольных долях): $[H_2] = 0,0185$; $[H_2O] = 0,4652$; $[CO] = 0,0141$; $[CO_2] = 0,1051$; $[N_2] = 0,3563$; $[H] = 0,0089$; $NO = 0,0141$; $[OH] = 0,0021$; сумма (O_2 , O , N) = 0,0167.

- температура, скорость и давление на срезе сопла: $T = 1318$ К; $U_a = 3200$ м/с; $p_a = 9900$ Па.

- угол наклона на срезе — 10;

- диаметр одного сопла — 1,63 м.

В летном эксперименте измерялось излучение струи.

Результаты приведены на рисунке 8.6.

Как видно из рисунка, учет ненулевой второй вязкости позволяет получить результаты расчета ближе к экспериментальным данным.

Очевидно, что применение модели КГД позволяет достичь наиболее удачного совпадения результатов с данными эксперимента, но даже простой учет ненулевого коэффициента второй вязкости позволяет к ним приблизиться.

8.10.4. Выхлопная струя модельного двигателя на высотах от 100 до 200 км

Рассматривается струя модельного жидкостного двигателя с параметрами из работы [48] (см. Таблицу 8.2). В указанной работе рассматривался данный модельный двигатель на высотах порядка 10 км или предельный случай - истечение в вакуум. В данной работе рассматривается диапазон высот от 100 до 200 км с детальным расчетом газовой динамики.

Таблица 8.2. Параметры на срезе сопла (химический состав задан в мольных долях)

$T_a,$ К	$U_a,$ м/с	$R_a,$ м	$P_a,$ атм	H_2	H_2O	CO	CO_2	N_2
2000	2500	0.5	0.3	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35

Расчет проводился для 7 высот полета: 100км (скорость внешнего потока 2950 м/с), 110км (3130 м/с), 120км (3340 м/с), 130км (3550 м/с), 150км (4060 м/с), 180км (4900 м/с), 200км (5500 м/с).

На каждой высоте проводилось 5 вариантов расчета:

1) решение системы уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности с нулевым значением коэффициента второй вязкости (на графиках обозначен как "NS" или "NS Neq");

2) решение системы уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности со значением коэффициента второй вязкости по модели Лосева (см. главу 5) - на графиках обозначено как "NS-bulk";

3) решение системы квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности (на графиках обозначен как "QGD" или "QGD Neq");

4) решение системы уравнений Навье-Стокса в предположении термического равновесия, т.е. $T = T_{TR} = T_{\vartheta m}$ (на графиках обозначен как "NS Eq");

5) решение системы квазигазодинамических уравнений в предположении термического равновесия (на графиках обозначен как "QGD Eq").

В результате получены пространственные распределения газодинамических

параметров для всех указанных выше вариантов. Данные распределения затем использовались для расчета излучения струй в диапазоне длин волн от 1 до 7 мкм.

Физико-математическая модель расчета оптических характеристик газовых потоков с учетом колебательной неравновесности подробно описана в главе 7.

Наиболее важные диапазонами длин волн являются: 1) в районе 2.7 мкм излучение H_2O с переходами с верхнего уровня третьей моды ν_3 ; 2) колебательная температура $T_{\text{H}_2\text{O}}(\nu_2)$ наиболее важна в районе 6 мкм; 3) в районе 2.7 мкм ($3400\text{-}3800\text{ см}^{-1}$) излучение CO_2 связано с переходами с верхних уровней $2\nu_2 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_3$, 4) очень сильная линия излучения CO_2 находится в районе 4.3 мкм и связана с переходами с верхнего уровня третьей моды ν_3 ; 5) наконец, линия излучения CO находится в районе 4.7 мкм.

Поскольку CO_2 и H_2O практически всегда присутствуют в струях, особое внимание уделим диапазону 2.7-2.9 мкм.

На рисунке 8.7 представлена зависимость интегральной интенсивности излучения (Вт/ср) от высоты в диапазоне длин волн $1\div 7$ мкм. Здесь и далее рассматривалась длина струи 5 км. Расчет проведен с учетом термической неравновесности. Начиная со 120 км (длина свободного пробега в окружающей атмосфере на этой высоте составляет порядка 3м) в расчете с использованием НС наблюдается существенный рост излучения с высотой. В расчете с использованием КГД интегральное излучение практически не меняется по высоте (отличие с NS расчетом достигает 4 раз). Результаты NS-bulk располагаются где-то посередине.

Аналогичные результаты и для интегрального излучения в диапазоне $2.7\div 2.9$ мкм (см. рисунок 8.8).

Распределение излучения в зависимости от высоты, полученное с использованием КГД, более всего соответствует наблюдаемой в реальности картине.

Также приведем более развернутые результаты для вариантов расчетов NS и QGD (вариант NS-bulk для большей читаемости результатов опустим). На рисунках 8.9, 8.10, 8.11 представлено распределение погонной интенсивности излучения (Вт/(ср см)) по длине струи для 3 высот: 100 км, 150 км и 180 км.

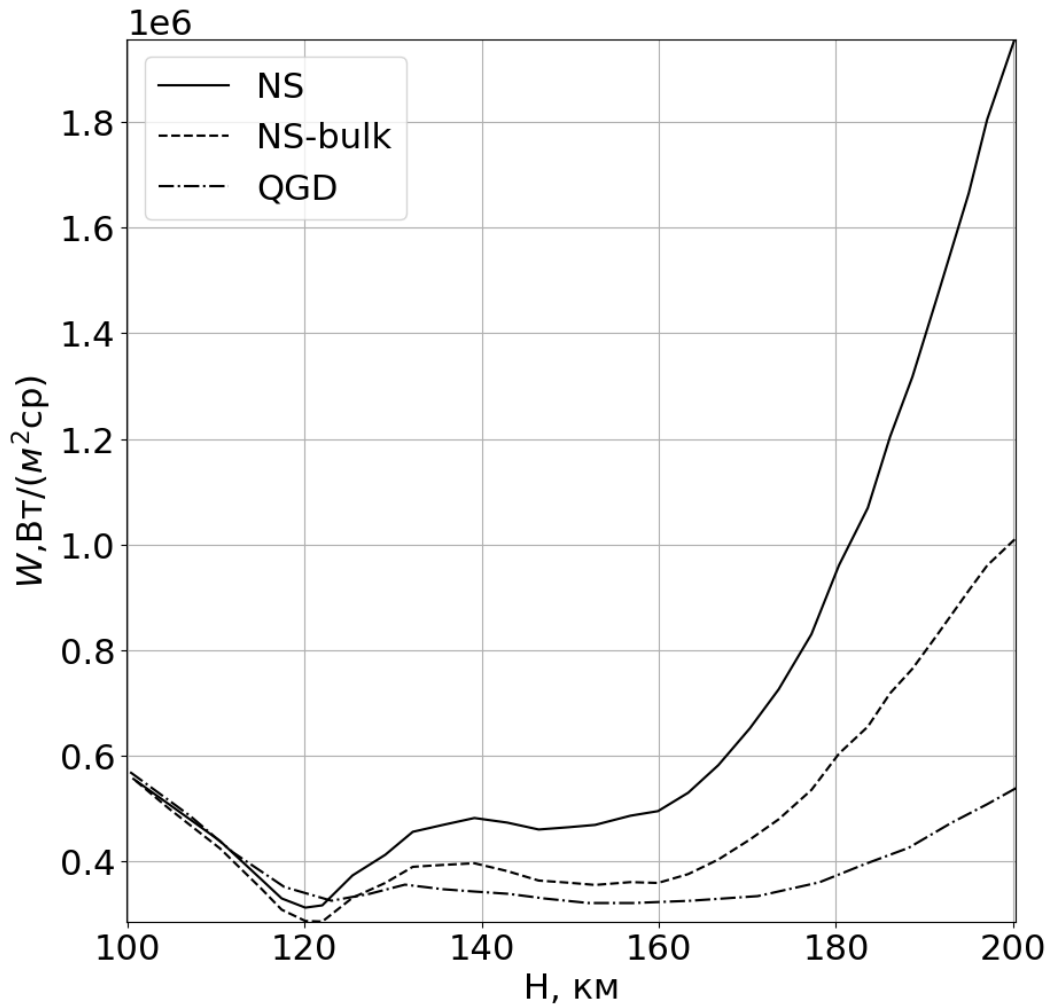


Рис. 8.7. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $1\div 7$ мкм) от высоты: NS - расчет с использованием уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности; NS-bulk - то же, но с учетом второй вязкости; QGD - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

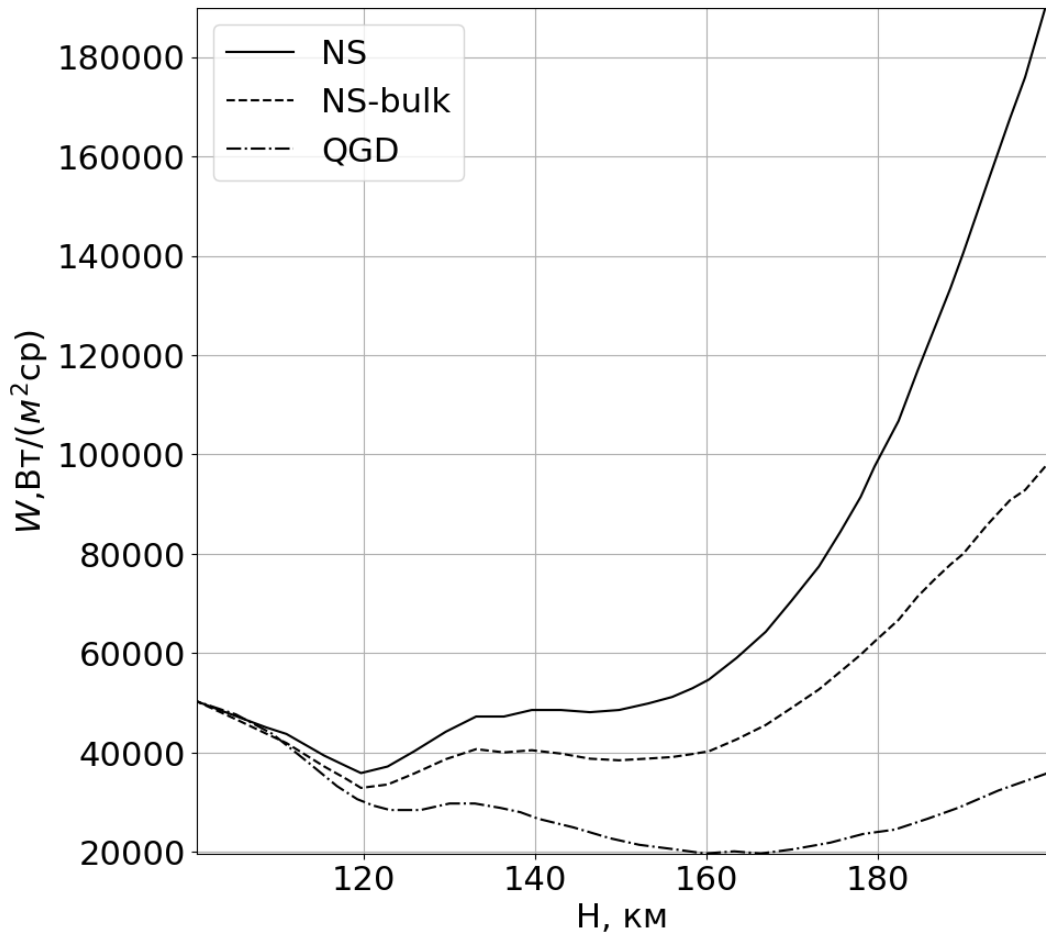


Рис. 8.8. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $2.7 \div 2.9$ мкм) от высоты.

Пояснение - см. рисунок 8.7

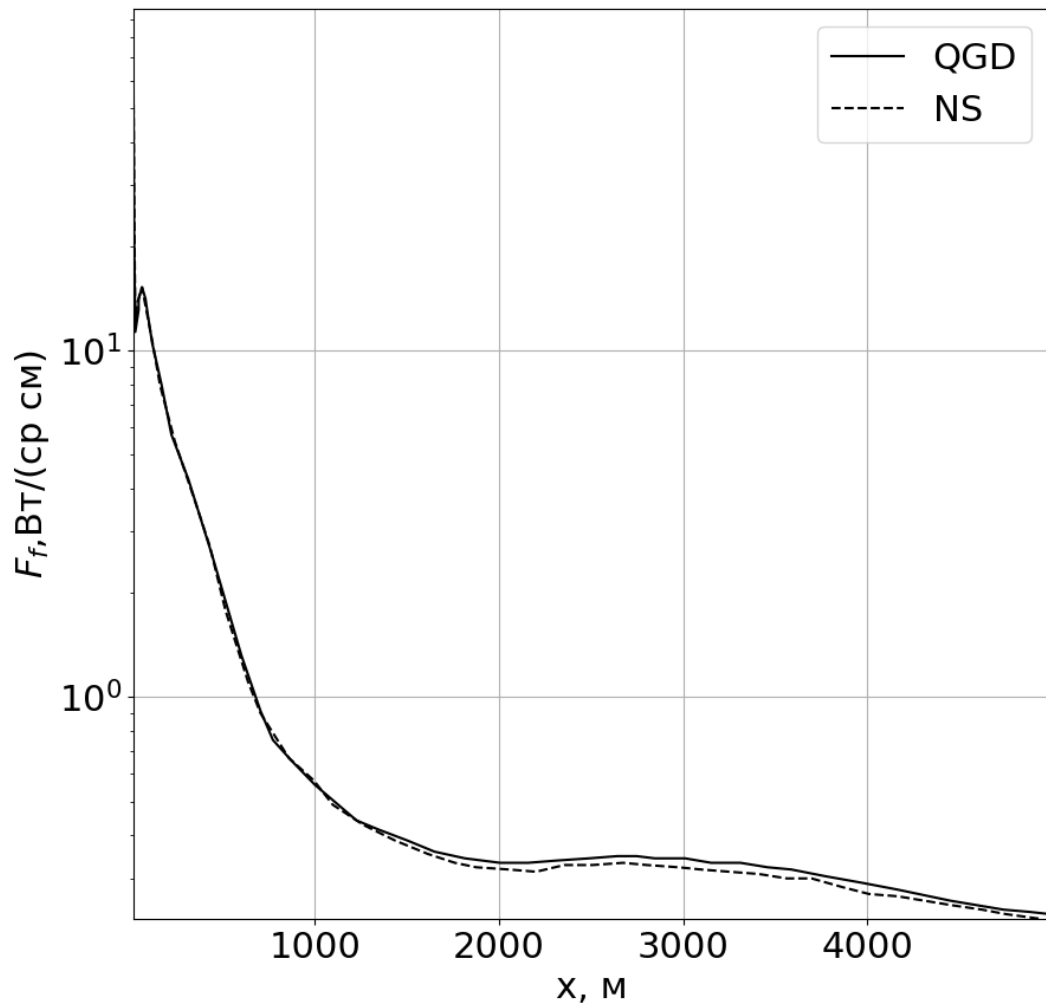


Рис. 8.9. Распределение погонной интенсивности излучения по длине струи для высоты 100 км в диапазоне длин волн $1 \div 7$ мкм. Пояснение - см. рисунок 8.7

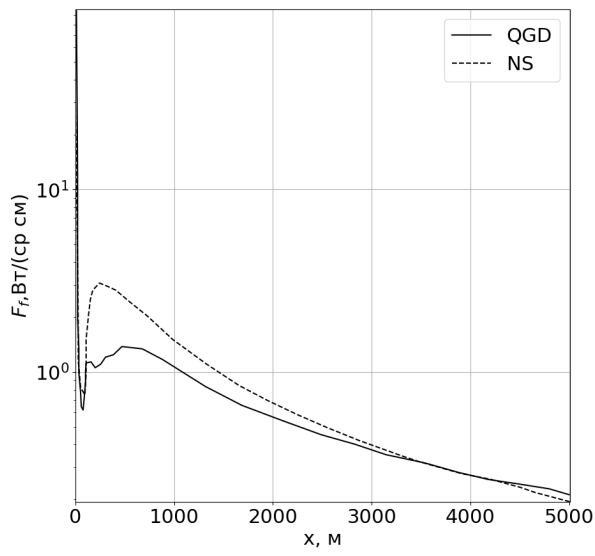
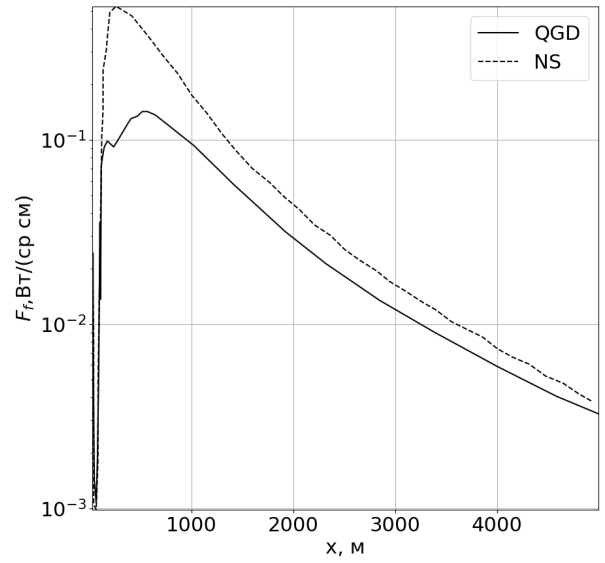
(a) $1 \div 7$ мкм(б) $2.7 \div 2.9$ мкм

Рис. 8.10. Распределение погонной интенсивности излучения по длине струи для высоты 150 км.
Пояснение - см. рисунок 8.7

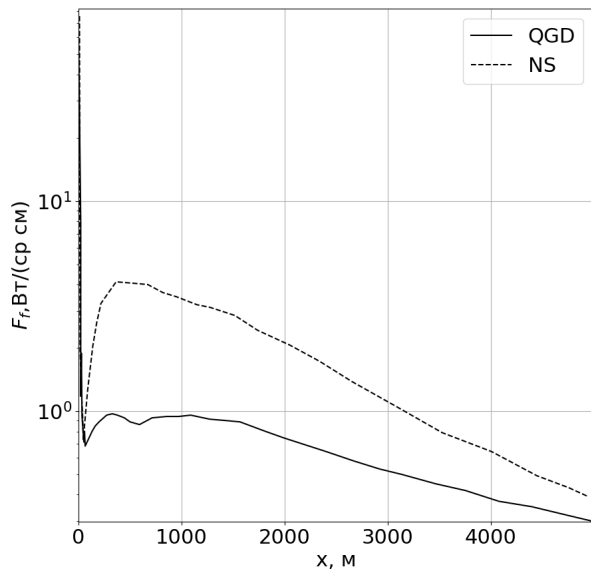
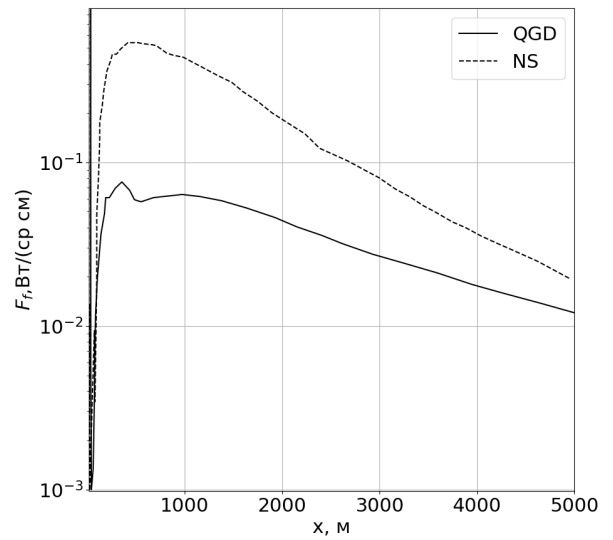
(a) $1 \div 7$ мкм(б) $2.7 \div 2.9$ мкм

Рис. 8.11. Распределение погонной интенсивности излучения по длине струи для высоты 180 км.
Пояснение - см. рисунок 8.7

На высоте 100 км результаты по NS и QGD практически совпадают.

На высотах 150, 180 км наблюдается существенное различие. Наибольшее отличие погонной интенсивности излучения в обоих диапазонах проявляется на расстоянии 400-1000 м от среза сопла.

Рассмотрим поперечные профили температур на расстоянии 400 м от среза сопла, в которых наблюдается аналогичная картина.

На рисунке 8.12 представлены поперечные профили температур (поступательно-вращательной и колебательных) на расстоянии 400 м от среза сопла на высоте 100 км.

На рассматриваемой высоте результаты NS и QGD, как уже отмечалось выше, практически совпадают. Однако по данным профилям уже ярко виден эффект термической неравновесности: в области сжатого слоя происходит резкий заброс поступательной температуры. В равновесном случае здесь энергия равномерно перераспределится бы по всем степеням свободы газа. В реальности колебательные температуры «не успевают» выровняться с поступательной. Как будет видно в дальнейшем, данный эффект существенно усиливается с ростом высоты (падением давления).

Интересно проанализировать спектральную интенсивность излучения для обоих случаев. Она показана на рисунке 8.13. Спектры практически совпадают.

Мы видим сильные линии H_2O (районы 2.7 мкм и 6 мкм), CO_2 (районы 2.7 мкм и 4.3 мкм) и CO (район 4.7 мкм). Действительно, соответствующие колебательные температуры, связанные с излучением в этих диапазонах спектра, еще достаточно велики на этой высоте.

На рисунке 8.14 представлены поперечные профили температур (поступательно-вращательной и колебательных) на расстоянии 400 м от среза сопла на высоте 150 км. Расчеты по NS и КГД уже отличаются. Это относится как к поступательно-вращательной температуре, так и колебательным температурам. Колебательные температуры T_{CO_2} (v_3) и T_{CO} практически заморожены в обоих случаях и их вклад в спектральное излучение (см. рисунок 8.15) одинаков соответственно

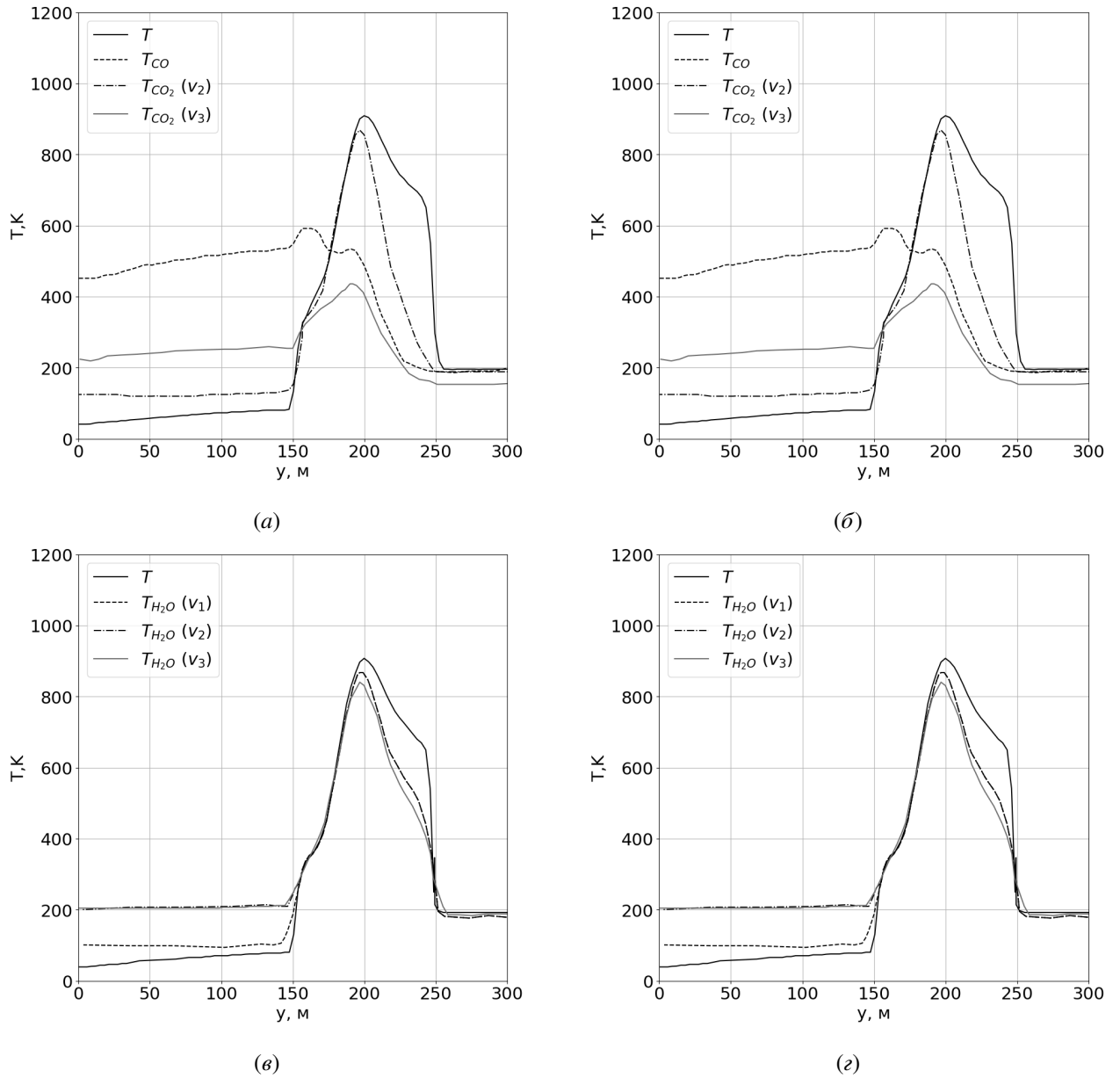


Рис. 8.12. Поперечные профили температур на расстоянии 400 м от среза сопла на высоте 100км. (а),(в) - расчет с использованием уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности; (б),(г) - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

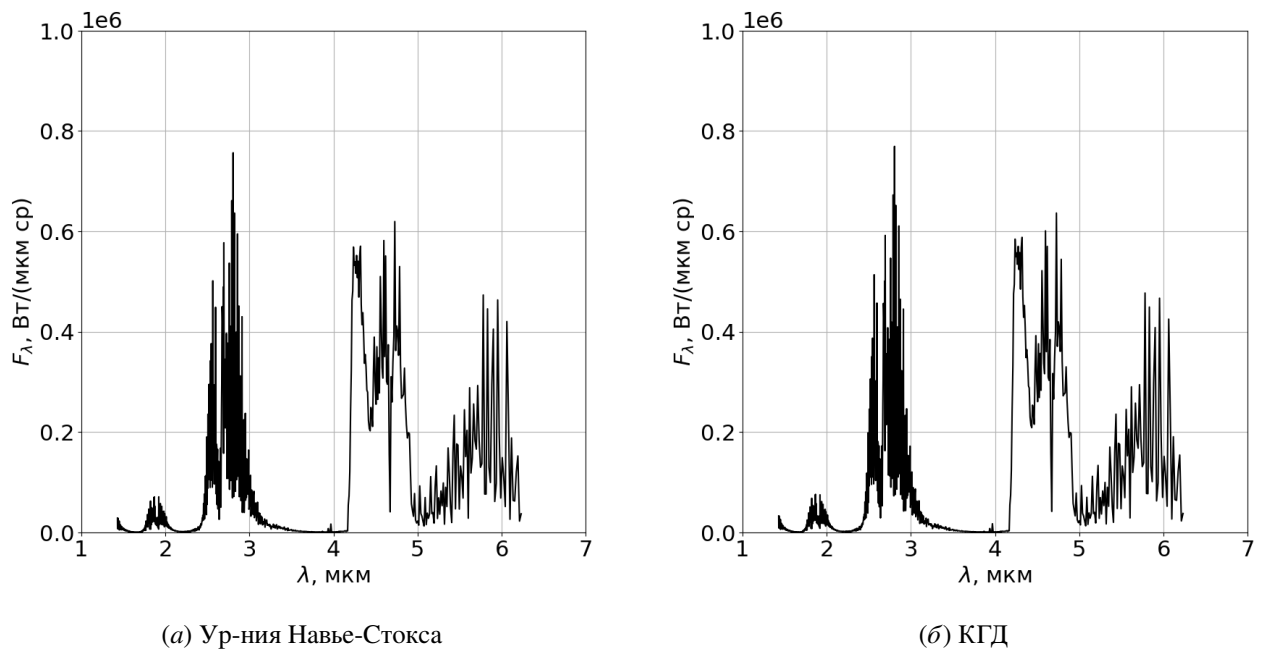


Рис. 8.13. Спектральная интенсивность излучения на высоте 100км. Результаты расчетов с учетом термической неравновесности

в районах 4.3 мкм и 4.7 мкм.

Влияние разреженности гораздо сильнее проявляется для колебательных температур воды и $T_{\text{CO}_2}(\nu_2)$ и, соответственно, в диапазоне спектра 2.7 мкм.

Аналогичные результаты получены для высоты 180 км (см.рисунки 8.16 и 8.17). Влияние разреженности газа проявляется еще сильнее: все температуры значительно ниже, а все важные линии спектра существенно ослабевают.

В качестве примера пространственных распределений параметров, на рисунке 8.18 показано распределение температуры. Видно, что учет разреженности в расчетах приводит к снижению температуры в слое смешения на протяжении всей длины струи.

В заключение, в качестве иллюстрации важности учета термической неравновесности, на рисунках 8.19, 8.20 приведено сравнение результатов расчетов решение системы КГД уравнений с учетом неравновесности (QGD Neq) и без ее учета (QGD Eq).

Видно, что отличие двух расчетов проявляется уже на высоте 100 км и на 200-х км достигает 2-х порядков.

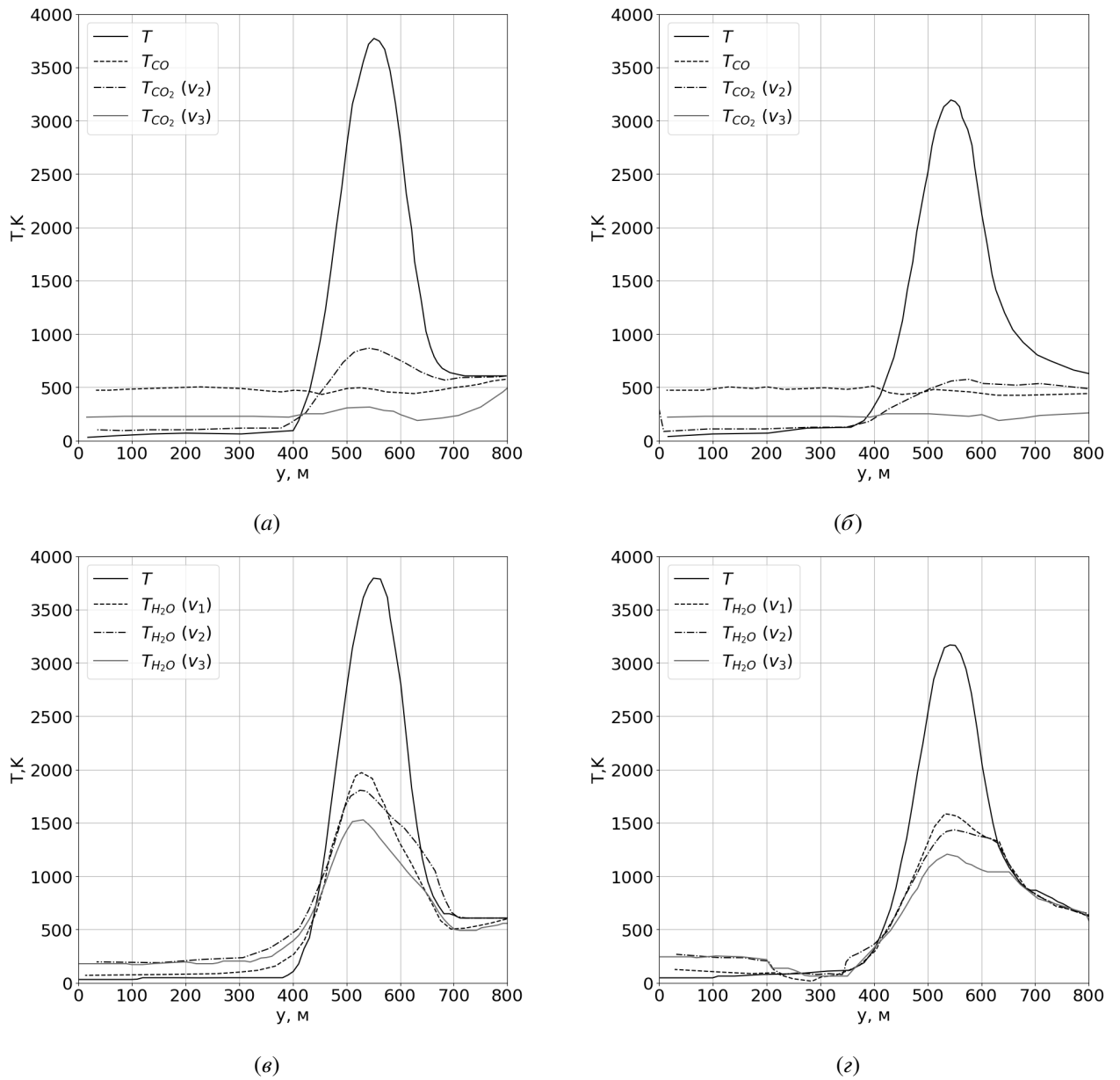


Рис. 8.14. Поперечные профили температур на расстоянии 400 м от среза сопла на высоте 150 км. (а),(в) - расчет с использованием уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности; (б),(г) - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

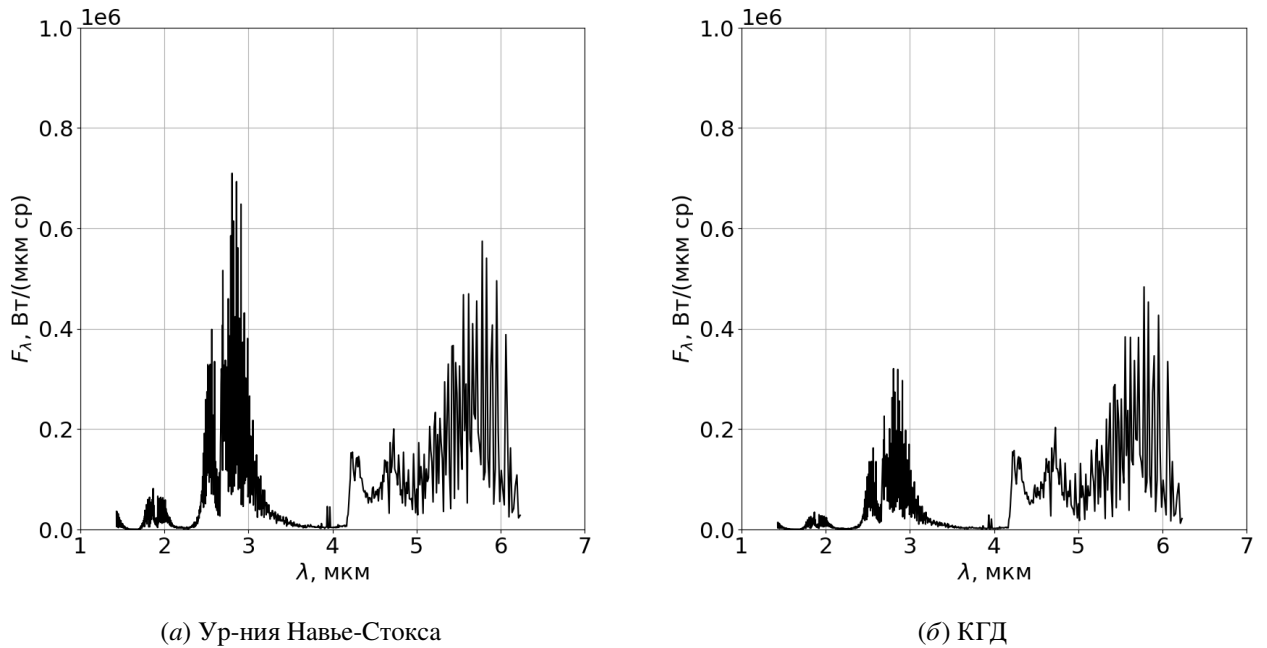


Рис. 8.15. Спектральная интенсивность излучения на высоте 150км.

Проведенный тестовый анализ струи модельного двигателя показал:

1. при использовании модели КГД интенсивность излучения существенно ниже, чем при расчете с использованием классической системы уравнений Навье-Стокса;
2. отличие в результатах начинается примерно с высоты полета 120 км, и на высоте 200 км достигает почти 5 раз;
3. интенсивность излучения в рассматриваемом диапазоне длин волн при использовании КГД слабо зависит от высоты;
4. расчеты по системе уравнений Навье-Стокса с ненулевой второй вязкостью находятся между КГД и НС с нулевой второй вязкостью;
5. более низкая интенсивность излучения, полученная при использовании КГД уравнений по сравнению с НС, обусловлена тем, что температуры всех энергетических мод (поступательная, вращательные и колебательные) в слое смешения струи с окружающим воздухом ниже, чем при расчете по НС;

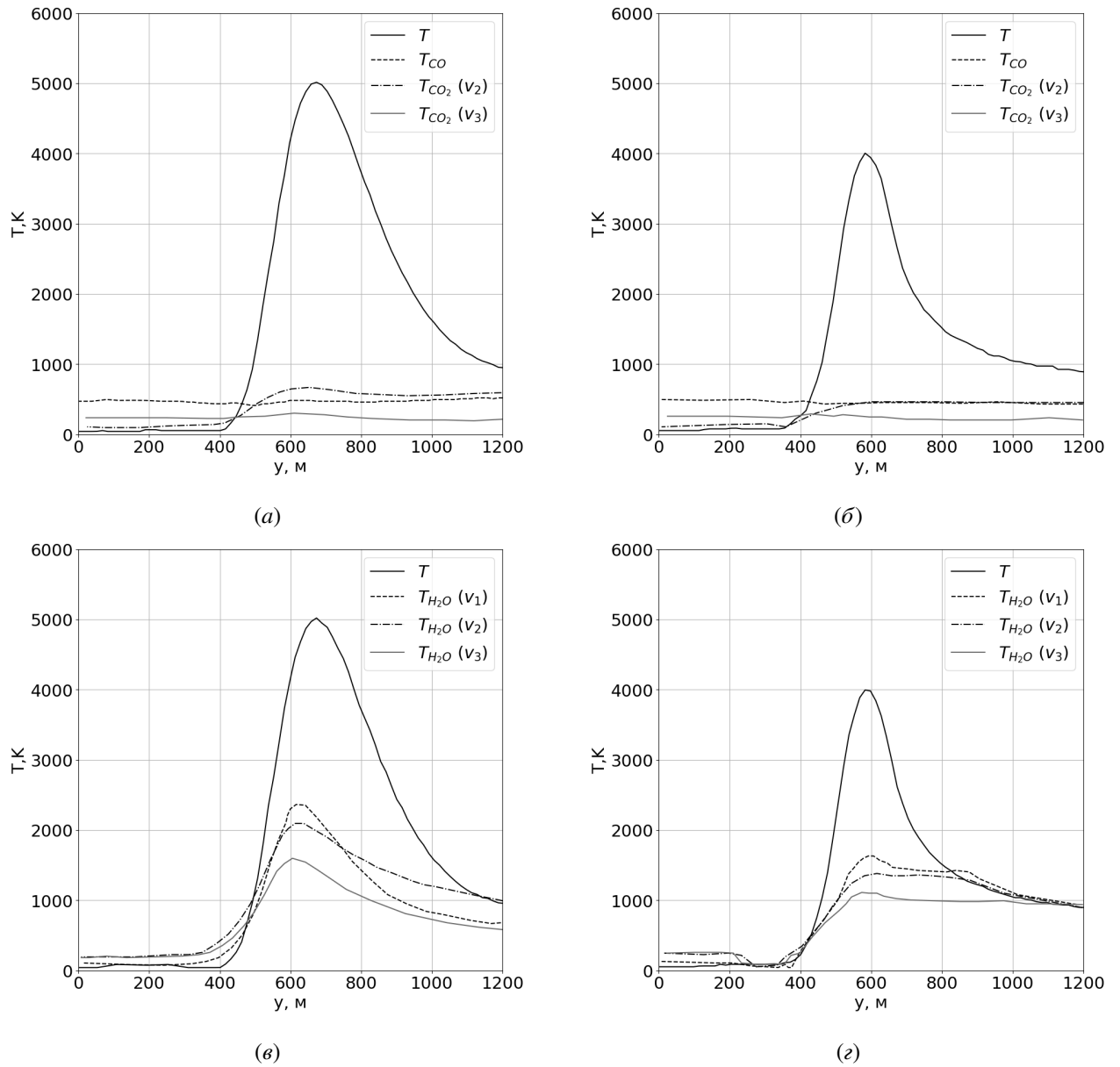


Рис. 8.16. Поперечные профили температур на расстоянии 400 м от среза сопла на высоте 180 км. (а),(в) - расчет с использованием уравнений Навье-Стокса с учетом термической неравновесности; (б),(г) - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

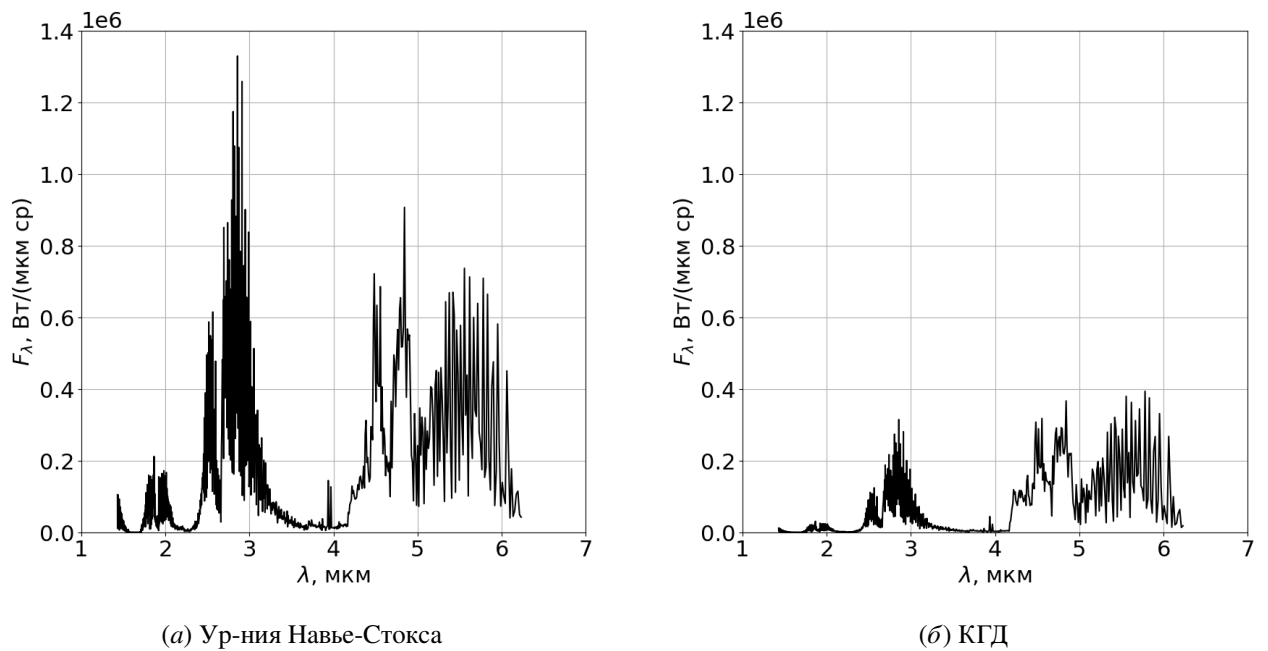
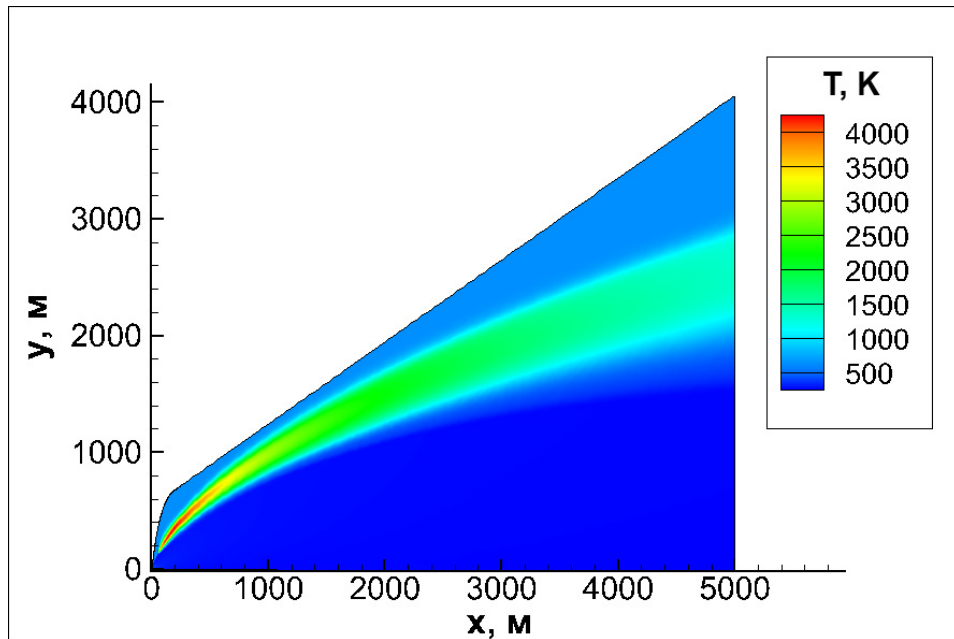
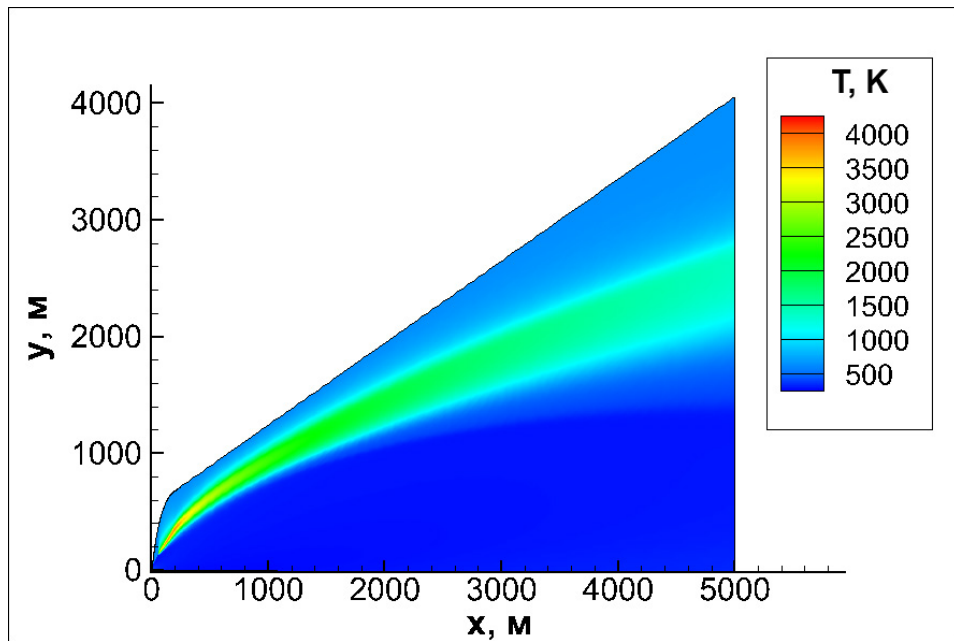


Рис. 8.17. Спектральная интенсивность излучения на высоте 180км.

6. наибольшее значение указанный эффект имеет в диапазоне длин волн в районе 2.7 мкм, т.к. использование КГД уравнений приводит к значительно-му уменьшению колебательных температур, соответствующих излучению в данном диапазоне;
7. расчет с использованием предположения о термическом равновесии (т.е. равновесия между всеми энергетическими модами) приводит к ошибочным результатам: интенсивность излучения завышается на 1-2 порядка;
8. меньшая интенсивность излучения, получаемая при использовании КГД уравнений и уравнений Навье-Стокса с учетом ненулевого коэффициен-та второй вязкости, по сравнению с уравнениями Навье-Стокса с нулевым коэффициентом второй вязкости объясняется тем, что в первых двух учи-тывается увеличение толщины скачка и уменьшается температура в сжатом слое.



(a) Ур-ния Навье-Стокса



(б) КГД

Рис. 8.18. Пространственное распределение поступательно-вращательной температуры на высоте 150км

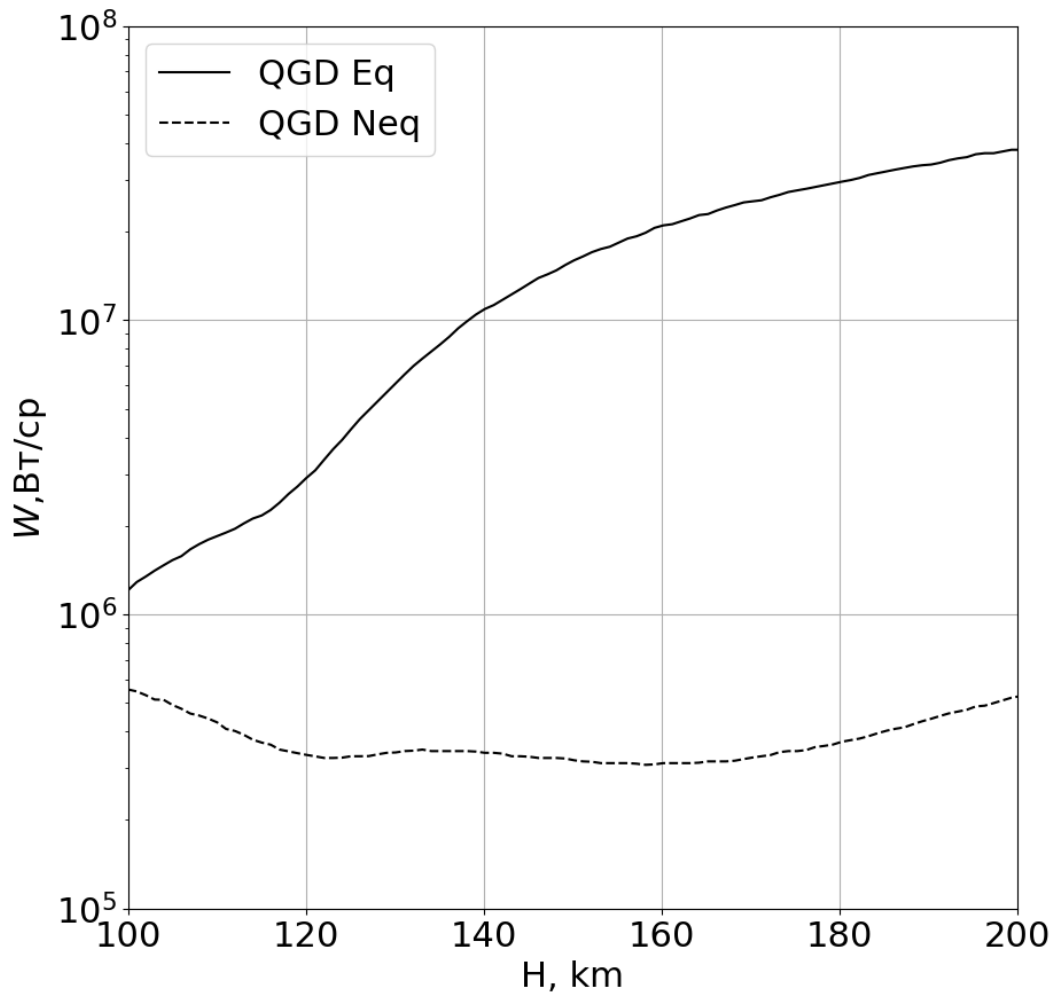


Рис. 8.19. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $1 \div 7$ мкм) от высоты: QGD Eq - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений в предположении термического равновесия; QGD Neq - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

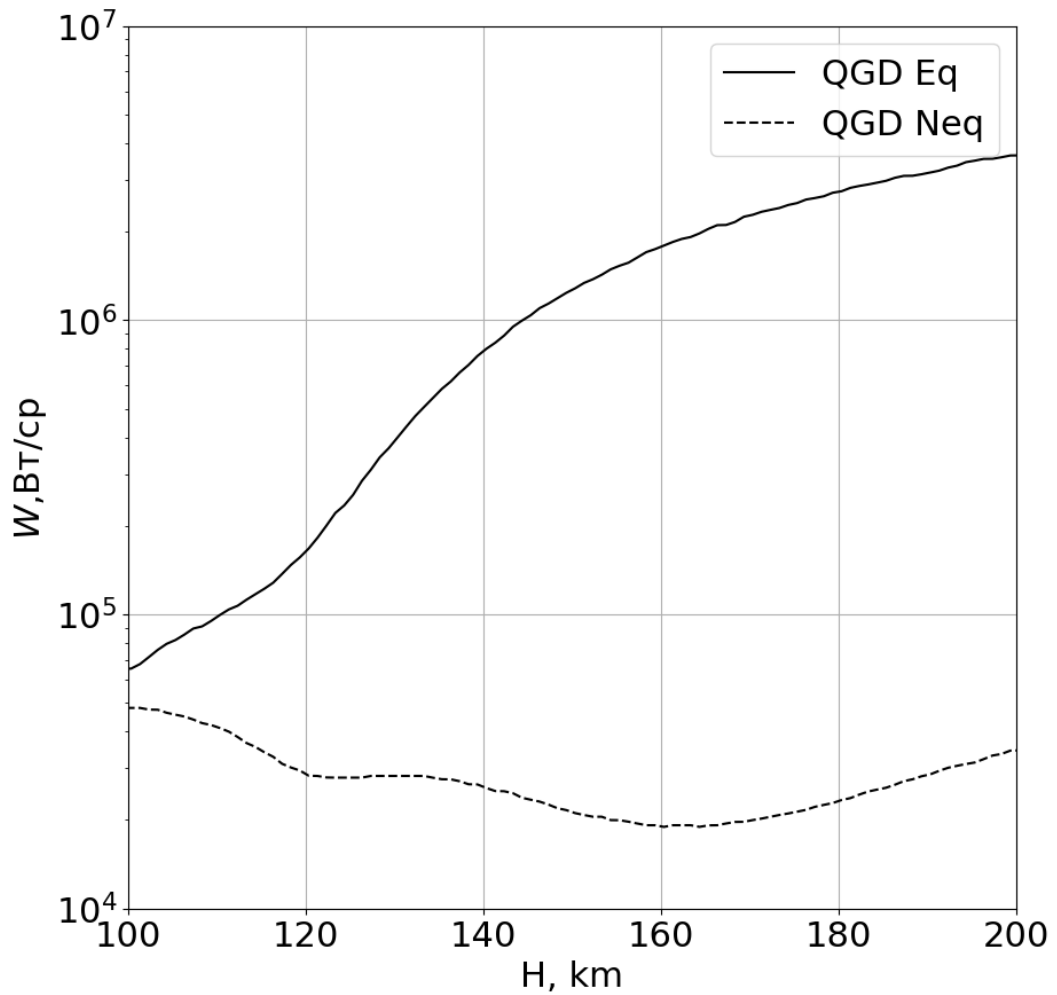


Рис. 8.20. Зависимость интегральной интенсивности излучения (диапазон $2.7 \div 2.9$ мкм) от высоты: QGD Eq - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений в предположении термического равновесия; QGD Neq - расчет с использованием квазигазодинамических уравнений с учетом термической неравновесности.

8.11. Выводы по главе

В данной главе на основе базовой системы уравнений КГД была сформулирована система уравнений КГД для термически неравновесного газа.

Система была использована для решения ряда задач по течению разреженного газа и расчету излучающих свойств. Сходимость с известными опубликованными результатами - удовлетворительная.

Термически неравновесная система КГД позволяет проводить расчеты в широком диапазоне чисел Кнудсена (до 10).

Глава 9

Моделирование турбулентности

Ранее в главе 2 был изложен общий подход к описанию сжимаемых турбулентных течений путем осреднения Фавра. При таком осреднении в уравнения, описывающих течение сплошной среды, возникают дополнительные слагаемые, содержащие корреляции турбулентных пульсаций.

В данной главе будут более подробно описаны подходы к моделированию данных дополнительных членов, описана проблема учета сжимаемости, сформулирована модель турбулентности для сжимаемых течений и проведена ее валидация.

Материалы данной главы ранее публиковались автором в [5, 8, 11, 15, 29, 31].

9.1. Двухмерный слой смешения несжимаемых жидкостей

Для иллюстрации основных свойств турбулентного течения в случае разложения параметров течения на осредненные и пульсационные рассмотрим упрощенный пример - смешение двух потоков, которые движутся параллельно оси x , но с разной скоростью. При этом их плотность и динамическая вязкость являются константами.

Для несжимаемого течения:

$$\operatorname{div}(v) \equiv \frac{\partial u_m}{\partial x_m} = 0. \quad (9.1)$$

Тензор вязких напряжений равен

$$\tau_{ij} \equiv \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial u_m}{\partial x_m} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (9.2)$$

Таким образом, входящая в уравнение количества движения величина равна

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ji}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) = \mu \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right] = \\ &= \mu \left[\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \right] = \mu \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_i^2}. \end{aligned} \quad (9.3)$$

А уравнение количества движения в проекции на ось x для рассматриваемой задачи имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \quad (9.4)$$

Очевидно, что каждый из двух параллельных потоков за счет вязкости вызывает возмущение скорости в соседнем потоке, и это возмущение равно разности скоростей Δu . Число Рейнольдса, выраженное через это возмущение и толщину слоя смешения δ , равно

$$\text{Re} = \frac{\rho \Delta u \delta}{\mu}. \quad (9.5)$$

Если оно превышает критическое значение ~ 10 , происходит переход к турбулентному режиму течения.

Для математического описания этого течения используем подход Рейнольдса, т.е. проведем осреднение уравнения (9.4), используя правила (2.91),

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}^2 + \rho \overline{u'^2} + \bar{p}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \bar{u} \bar{v} + \rho \overline{u'v'}) = \mu \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial y^2}. \quad (9.6)$$

Действительно, например,

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial}{\partial y} (\rho uv)} &= \frac{\partial}{\partial y} (\overline{\rho uv}) = \frac{\partial}{\partial y} \left[\overline{\rho (\bar{u} + u') (\bar{v} + v')} \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial y} \left[\overline{\rho (\bar{u} \bar{v} + u' \bar{v} + \bar{u} v' + u' v')} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[\rho (\bar{u} \bar{v} + \overline{u' \bar{v}} + \overline{\bar{u} v'} + \overline{u' v'}) \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial y} (\rho \bar{u} \bar{v}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \overline{u' v'}). \end{aligned}$$

Плотность не надо осреднять, т.к. в несжимаемой жидкости она не пульсирует.

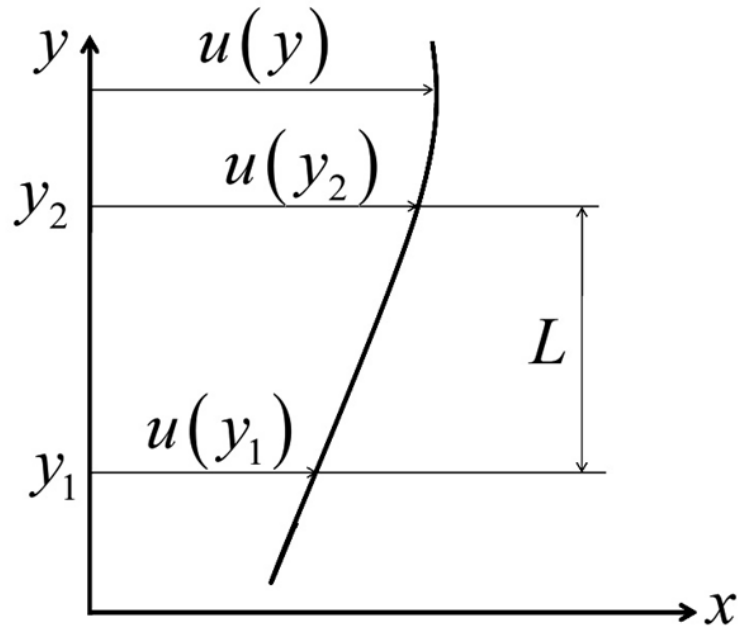


Рис. 9.1. Профиль скорости в поперечном сечении слоя смешения

По форме записи уравнение (9.6) очень похоже на исходное уравнение (9.4), но в нем появились два дополнительных члена: $\overline{\rho u'^2}$, $\overline{\rho u'v'}$. Это связано с тем, что корреляции пульсаций случайных величин не равны нулю.

Попробуем понять физический смысл этих дополнительных членов.

Прежде всего, введем понятие *турбулентной кинетической энергии*:

$$K = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}). \quad (9.7)$$

Эту энергию несут турбулентные вихри, и она отнюдь не равна нулю. Как уже указывалось, турбулентность носит трехмерный характер, и поэтому не один из трех членов, входящих в (9.7), не равен нулю.

Дополнительный член $\overline{u'^2}$ является одной из составляющих турбулентной кинетической энергии.

Для того, чтобы понять смысл величины $\overline{\rho u'v'}$, представим следующую умоглядную картину. Пусть в каком-то поперечном сечении слоя смешения профиль скорости имеет вид как на рисунке 9.1.

Пусть в какой-то момент времени возникает крупный турбулентный вихрь и в результате появляется положительная пульсация поперечной скорости v' . За

счет этого происходит перенос вещества вверх: из слоя с координатой y_1 (рисунок 9.1) в слой с координатой y_2 . Расстояние между слоями L примерно равно размеру возникшего вихря.

В результате количество движения в слое составит $\rho u_1 = \rho u(y_1)$ вместо количества движения $\rho u_2 = \rho u(y_2)$, которое было до возникновения вихря. Таким образом, произойдет изменение скорости, т.е. возникнет пульсация продольной скорости

$$u' = u_1 - u_2. \quad (9.8)$$

В данном примере эта пульсация имеет отрицательный знак, т.к. на рисунке 9.1 скорость u_1 меньше скорости u_2 . Т.е. происходит торможение потока в слое.

Исходя из профиля скорости, представленного на рисунке, эту разницу скоростей можно приблизительно выразить через производную скорости:

$$u_1 - u_2 \cong -L \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (9.9)$$

В результате получается, что положительная пульсация случайной величины v' вызвала пульсацию случайной величины u' , определяемую формулой (9.9), т.е.

$$u'v' \cong -v'L \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (9.10)$$

Аналогично, в случае появления отрицательной пульсации v' , она вызывает положительную пульсацию u' , связь между которыми может быть выражена в общем виде следующей формулой

$$u'v' \cong -|v'|L \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (9.11)$$

В качестве оценки интенсивности пульсации поперечной скорости можно использовать среднеквадратичную величину $\sqrt{v'^2}$, и в результате после осреднения получаем:

$$\overline{\rho u'v'} \cong -\rho\sqrt{v'^2}L\frac{\partial\bar{u}}{\partial y}. \quad (9.12)$$

Возникновение пульсаций возникает из-за того, что более медленный слой жидкости тормозит более быстрый, и, наоборот, более быстрый слой увлекает за собой более медленный. Такой физический процесс похож на обычное трение и называется *турбулентным трением*.

При ламинарном режиме течения молекулярное трение в слое смешения определяется формулой

$$\tau = \mu\frac{\partial u}{\partial y}. \quad (9.13)$$

По аналогии можно представить и турбулентное трение¹

$$\tau_T \equiv -\overline{\rho u'v'} = \mu_T\frac{\partial\bar{u}}{\partial y}, \quad (9.14)$$

где

$$\mu_T = C_1\rho\sqrt{v'^2}L \quad (9.15)$$

– так называемый *коэффициент турбулентной вязкости*.

В этой формуле C_1 – константа близкая к единице.

Введем определения:

величина $\sqrt{v'^2}$ – *масштаб пульсаций поперечной скорости*, L – *масштаб турбулентности*.

Таким образом, коэффициент турбулентной вязкости пропорционален произведению масштаба пульсаций скорости на масштаб турбулентности, который имеет порядок линейного размера крупных турбулентных вихрей.

Стоит отметить, что вывод формулы для обыкновенной молекулярной вязкости дает аналогичный результат. Однако в этой формуле используется средне-

¹ Данное предположение о форме тензора турбулентных напряжений трения называют гипотезой Буссинеска в честь французского ученого, впервые ее предложившего [162].

квадратичная скорость теплового движения молекул и длина свободного пробега молекул.

Оценка величин, входящих в уравнение (9.6), показывает, что в слое смешения справедливы соотношения:

$$\overline{u'^2} \ll \bar{u}^2, \quad \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial y^2}. \quad (9.16)$$

При использовании всех описанных допущений уравнение (9.6) принимает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}^2 + \bar{p}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \bar{u} \bar{v}) = \frac{\partial}{\partial y} \left[(\mu + \mu_T) \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right]. \quad (9.17)$$

9.2. Алгебраические модели турбулентности

Формула (9.15), полученная для двумерного слоя смешения, лежит в основе большинства используемых на практике способов моделирования турбулентных течений – *моделей турбулентности*.

Простейшими из них являются модели, основанные на алгебраических выражениях для масштаба пульсаций скорости и масштаба турбулентности.

Для моделирования течения в пограничном слое успешно использовалась модель *пути смешения (перемешивания) Прандтля*. Она основана на двух предположениях.

1. Турбулентный вихрь (объем жидкости) при перемещении из одного места пограничного слоя в другое место сохраняет свою индивидуальность (свои свойства) на некотором расстоянии, называемом путем перемешивания. Это расстояние ассоциируется с масштабом турбулентности.
2. Средние пульсации поперечной скорости пропорциональны пульсациям продольной скорости, т.е. для них можно использовать формулу (9.9).

В результате можно получить формулу для коэффициента турбулентной вязкости

$$\mu_T = C_2 \rho L^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|. \quad (9.18)$$

Чаще всего полагают, что длина пути перемешивания пропорциональна расстоянию от стенки.

Для моделирования слоя смешения получила распространение формула, основанная на предположении, что турбулентная вязкость пропорциональна разности скоростей смешивающихся потоков жидкости Δu , а масштаб турбулентности в свою очередь, пропорционален ширине слоя смешения Δy . В этом случае

$$\mu_T = C_3 \rho |\Delta u| \Delta y. \quad (9.19)$$

Разумеется, числовые коэффициенты пропорциональности C_1, C_2, C_3 имеют совершенно разные значения в рассматриваемых формулах (9.15), (9.18) и (9.19).

Основным достоинством алгебраических моделей турбулентности является их простота. Основная система уравнений, описывающих движение жидкости (уравнения Рейнольдса), по форме практически совпадает с системой уравнений Навье-Стокса. Только вместо коэффициента динамической вязкости μ используется некая эффективная вязкость

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_T, \quad (9.20)$$

а вместо мгновенных значений параметров (например, u) используется их осредненные аналоги (\bar{u} и т.п.).

9.3. Осредненная система уравнений для сжимаемого газа и основные допущения

Ранее в главе 2 была сформулирована система уравнений (2.99).

Для наглядности приведем ее здесь еще раз:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i + \widetilde{\bar{\rho} u_j'' u_i''} + \delta_{ji} \bar{p} - \bar{\tau}_{ij} \right) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{C}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}_s + \widetilde{\bar{\rho} u_j'' C_s''} + \bar{J}_{s,j} \right) &= \bar{w}_s \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{H} + \widetilde{\bar{\rho} u_j'' H''} + \bar{q}_j - \tilde{u}_i \bar{\tau}_{ij} - \widetilde{\bar{\rho} u_i'' (\tau_{ij}/\rho)} \right] &= -\bar{Q}_R\end{aligned}$$

Как уже упоминалось, данную систему уравнений невозможно решить без введения дополнительных допущений. Эти допущения можно объединить в несколько логических групп.

Группа 1 относится к моделированию молекулярных вязких, тепловых и диффузионных потоков.

Пренебрегая корреляцией, получаем:

$$\overline{u_i'' \tau_{ij}} = 0. \quad (9.21)$$

Тензор вязких напряжений и тепловой поток моделируются по следующим формулам:

$$\bar{\tau}_{ij} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m}, \quad (9.22)$$

$$\bar{q}_j = -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}. \quad (9.23)$$

Переносные свойства при этом выражаются через средние (по Фавру) значения параметров:

$$\begin{aligned}\bar{\mu} &= \overline{\mu(T)} = \mu(\tilde{T}), \\ \bar{\lambda} &= \overline{\lambda(T)} = \lambda(\tilde{T}).\end{aligned} \quad (9.24)$$

Если ввести в рассмотрение критерий Прандтля

$$\text{Pr} = \frac{\bar{\mu}C_P}{\lambda}, \quad (9.25)$$

то уравнение для теплового потока (9.23) можно записать в виде

$$\bar{q}_j = -\frac{\bar{\mu}C_P}{\text{Pr}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} = -\frac{\bar{\mu}}{\text{Pr}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}. \quad (9.26)$$

Некоторые аргументы в обоснование правомочности допущений этой группы будут рассмотрены в данной главе позднее.

Группа 2 относится к моделированию дополнительных турбулентных потоков $\overline{\rho u''_j u''_i}$, $\overline{\rho u''_j h''}$, $\overline{\rho u''_j u''_i u''_i}$. Основное допущение, наиболее часто используемое на практике, состоит в том, что эти потоки моделируются аналогично молекулярным потокам (см. формулы (9.22) и (9.26) и главу 2.2).

Тензор турбулентных напряжений моделируется через скорость деформаций

$$-\overline{\rho u''_j u''_i} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu_T \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho K. \quad (9.27)$$

Последний член в формуле добавлен для совпадения инвариантов тензоров, стоящих в формуле справа и слева.

Здесь μ_T – коэффициент турбулентной вязкости.

Для моделирования μ_T за основу можно взять формулу (9.15):

$$\mu_T = C_1 \bar{\rho} \sqrt{\overline{v''^2}} L. \quad (9.28)$$

В качестве масштаба скорости $\sqrt{\overline{v''^2}}$ можно по аналогии со слоем смешения использовать среднеквадратичную пульсацию скорости по направлению нормали к линиям тока $\sqrt{\overline{V_n''^2}}$.

Однако в общем случае для практического использования масштаб турбулентности в форме L неудобен. Для описания турбулентных течений более важным

параметром является не какой-то один характерный масштаб длины, а характерный масштаб времени \mathbb{T} , т.е. время, за которое энергия движения крупных вихрей, полученная от осредненного движения, проходит весь спектр масштабов размеров - от наиболее крупных до самых мелких, при которых происходит диссипация турбулентной энергии.

Исходя из теории размерностей, получаем:

$$L = \mathbb{T} \sqrt{\widetilde{V_n''^2}}, \quad (9.29)$$

и окончательная формула для μ_T принимает вид:

$$\mu_T = C_1 \mathbb{T} \widetilde{\rho V_n''^2}. \quad (9.30)$$

Эту формулу и будем рассматривать как основу для дальнейших выкладок.

Турбулентные потоки скалярных величин моделируются через градиенты этих величин:

$$\widetilde{\rho u''_j h''} = -\frac{\mu_T}{Pr_T} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_j}, \quad (9.31)$$

$$\frac{1}{2} \widetilde{\rho u''_j u''_i} = -\frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j}, \quad (9.32)$$

где Pr_T – турбулентное число Прандтля, σ_K – аналог числа Прандтля для потока турбулентной кинетической энергии K (обычно полагается константой близкой к единице).

Таким образом, задача моделирования турбулентности сведена к определению параметров, входящих в определение коэффициента турбулентной вязкости μ_T (9.30), турбулентной кинетической энергии K и турбулентного число Прандтля.

Этому вопросу будут посвящены следующие разделы.

9.4. Двухпараметрические модели турбулентности

Одним из важнейших параметров, характеризующих турбулентное движение, является турбулентная кинетическая энергия

$$K = \frac{1}{2} \overline{u''_i u''_i}.$$

Процесс получения дифференциального уравнения переноса турбулентной кинетической энергии называется *взятием момента* от уравнения количества движения.

Вывод уравнения показан в приложении Б.

Приведем здесь окончательную формулировку:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}K)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j K)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\underbrace{\overline{-\rho u''_j \frac{1}{2} (u''_i)^2}}_{(I)} - \underbrace{\overline{p' u''_j}}_{(II)} + \underbrace{\overline{\tau_{ij} u''_i}}_{(III)} \right] - \\ - \underbrace{\overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}}_{(IV)} - \underbrace{\overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}}_{(V)} - \underbrace{\overline{u''_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}}_{(VI)} + \underbrace{\overline{p' \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}}}_{(VII)} - \underbrace{\overline{\tau_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}}_{(VIII)}. \end{aligned} \quad (9.33)$$

Физический смысл членов, входящих в правую часть уравнения (9.33), следующий:

(I) – турбулентный диффузионный перенос, обусловленный пульсациями скорости;

(II) – турбулентный диффузионный перенос, обусловленный пульсациями давления;

(III) – молекулярный диффузионный перенос;

(IV) – генерация турбулентной энергии, обусловленная взаимодействием напряжений Рейнольдса и градиента средней скорости;

(V) – вязкая диссипация турбулентной энергии в тепловую энергию;

(VI) – работа сил давления;

(VII) – дополнительная диссипация, обусловленная взаимодействием пульсаций давления с дивергенцией пульсаций скорости;

(VIII) – дополнительный член, учитывающий вязкое трение.

Для несжимаемой жидкости уравнение переноса турбулентной кинетической энергии имеет вид (вывод см. в приложении Б):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} + \mu \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \rho \varepsilon, \quad (9.34)$$

где $P_K = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ – генерация K , ε – скорость диссипации турбулентной энергии.

Уравнение переноса ε можно строго получить, используя ту же методику, что и для вывода уравнения переноса K (см. приложение Б).

В результате для ε получается уравнение по структуре подобное уравнению переноса K :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} + \mu \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{K} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon), \quad (9.35)$$

где σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ – числовые константы.

9.4.1. Двухпараметрические модели турбулентности для несжимаемой жидкости

В этом разделе приводятся некоторые наиболее часто используемые модели турбулентности для несжимаемой жидкости. Более подробное описание различных моделей можно найти в различных источниках. Например, в [56].

Как уже говорилось, в системе уравнений Рейнольдса, описывающих осредненное течение жидкости при турбулентном режиме течения, появляются дополнительные неизвестные параметры, имеющие физический смысл тензора турбулентных напряжений трения. Для его моделирования можно использовать формулу (9.27), которая для несжимаемых течений имеет вид:

$$-\rho \overline{u'_j u'_i} = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho K. \quad (9.36)$$

При таком подходе для замыкания системы необходимо получить формулу для значения турбулентной вязкости μ_T . В настоящее время для этой цели чаще всего используются так называемые *двухпараметрические модели*. Так они называются потому, что в них μ_T определяется через два параметра, для которых решаются дополнительные дифференциальные уравнения в частных производных.

Целый ряд моделей турбулентности строится на основе уравнения для турбулентной кинетической энергии.

Предполагается, что среднеквадратичная пульсация $\widetilde{V_n''^2}$ пропорциональна всей турбулентной кинетической энергии K (а это совершенно справедливо для больших значений чисел Рейнольдса). Тогда из формулы (9.30) следует, что

$$\mu_T = C \rho K \mathbb{T}. \quad (9.37)$$

$K\varepsilon$ -модель турбулентности. С точки зрения теории размерностей можно предположить, что отношение K/ε и есть то время, за которое энергия движения крупных вихрей, полученная от осредненного движения, проходит весь спектр масштабов размеров - от наиболее крупных до самых мелких, при которых происходит диссипация турбулентной энергии. Т.е. время от образования вихря до его полного распада \mathbb{T} , входящее в формулу (9.30), определяется как

$$\mathbb{T} = \frac{K}{\varepsilon}. \quad (9.38)$$

Отсюда следует, что коэффициент турбулентной вязкости определяется по формуле:

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{K^2}{\varepsilon}. \quad (9.39)$$

Кроме того, в модель входят следующие уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} + \mu \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \rho \varepsilon, \quad (9.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} + \mu \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{K} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon). \quad (9.41)$$

В классической $K\varepsilon$ -модели используются следующие числовые константы:

$$C_\mu = 0.09; \quad \sigma_K = 1; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92. \quad (9.42)$$

Эта модель широко используется для свободных течений (струи, слои смешения и т.п.). Она плохо описывает пристеночные течения. Дело в том, что при выводе основных уравнений, относящихся к скорости диссипации ε , использовалось допущение о больших значениях локального числа Рейнольдса. Возле стенки это допущение нарушается – здесь локальное число Рейнольдса стремится к нулю.

Модель $K\omega$. Этому недостатка лишена $K\omega$ -модель Уилкокса. В ней также используются два параметра: турбулентная кинетическая энергия K и величина ω , которая обратно пропорциональна характерному масштабу времени \mathbb{T} и имеет, следовательно, размерность частоты $[1/c]$.

В этой модели коэффициент турбулентной вязкости рассчитывается по формуле:

$$\mu_T = \rho \frac{K}{\omega}, \quad (9.43)$$

а уравнения переноса K и ω имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K1}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* \rho K \omega, \quad (9.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{u}_j\omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{K} P_K - \beta_0 \rho \omega^2. \quad (9.45)$$

Числовые константы, входящие в эту модель, равны:

$$\beta_0^* = 0.09, \quad \alpha = 5/9, \quad \beta_0 = 0.075, \quad \sigma_{K1} = 2, \quad \sigma_{\omega 1} = 2.$$

Можно показать, что связь между параметрами ω и ε имеет вид:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\beta_0^* K}. \quad (9.46)$$

$K\omega$ -модель хорошо описывает пристеночные течения, но крайне неудобна для свободных течений: в зависимости от корректности задания частоты турбулентных пульсаций ω на границе расчетной области, может быть получен значительный разброс в результатах расчета. Кроме того, рассматриваемый метод имеет низкую точность решения в области свободного течения.

SST модель. Модель Ментера SST [57] является комбинированной моделью турбулентности, основанной на использовании $K\omega$ -модели в пристеночных областях и $K\varepsilon$ модели в областях, находящихся на достаточном удалении от стенки. Этот комбинированный метод заключается в преобразовании уравнений $K\varepsilon$ -модели к $K\omega$ формулировке. Уравнения видоизмененной $K\varepsilon$ -модели, дополняются стыковочной функцией $1 - F_1$. Функция F_1 принимает значение $F_1 = 1$ вблизи поверхности и обращается в ноль за пределами пограничного слоя, т.е. от границы пограничного слоя и далее за его пределами $K\varepsilon$ - модель возвращается к первоначальной, стандартной формулировке.

Эта модель показала хорошие результаты при расчете течений в зоне отрыва и при сильном продольном градиенте давления. Она учитывает перенос касательных напряжений.

Для преобразования уравнений стандартной $K\varepsilon$ -модели к уравнениям в формулировке $K\omega$ воспользуемся формулой (9.46)

$$\varepsilon = \beta_0^* K \omega. \quad (9.47)$$

Откуда

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{K\beta_0^*} \left(\frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\varepsilon}{K} \frac{dK}{dt} \right). \quad (9.48)$$

Подставляя эти выражения в уравнения (9.40) и (9.41) получаем, что в преобразованном виде стандартная $K\varepsilon$ модель имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* \rho K \omega \quad (9.49)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \\ &+ \alpha_2 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_2 \rho \omega^2 + \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (9.50)$$

а числовые константы равны:

$$\beta_0^* = C_\mu = 0.09; \alpha_2 = (C_{\varepsilon 1} - 1) = 0.44; \beta_2 = (C_{\varepsilon 2} - 1) C_\mu = 0.0828.$$

Следует отметить, что уравнение (9.49) является строгим следствием уравнения (9.40), а при выводе уравнения (9.50) Менгер пренебрег некоторыми диффузионными членами, и как показано в работе [8] они не влияют на результаты расчетов.

Основная идея SST модели турбулентности состоит в том, что с помощью стыковочной функции F_1 получается линейная комбинация уравнений (9.44), (9.45) из $K\omega$ -модели и уравнений (9.49), (9.50) из преобразованной стандартной $K\varepsilon$ модели турбулентности:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* \rho K \omega, \quad (9.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \\ &+ \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_3 \rho \omega^2 + (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (9.52)$$

где коэффициенты новой модели – линейная комбинация соответствующих коэффициентов моделей, лежащих в основе метода:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= F_1 \alpha + \alpha_2 (1 - F_1), \quad \beta_3 = F_1 \beta_0 + \beta_2 (1 - F_1), \\ \frac{1}{\sigma_{K3}} &= F_1 \frac{1}{\sigma_{K1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_K}, \quad \frac{1}{\sigma_{\omega 3}} = F_1 \frac{1}{\sigma_{\omega 1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_{\omega 2}}. \end{aligned} \quad (9.53)$$

Стыковочная функция в модели Ментера строится таким образом, чтобы наиболее адекватно учитывать перенос напряжения трения в пограничном слое.

Напомним, что $F_1 = 1$ вблизи поверхности и $F_1 = 0$ за пределами пограничного слоя.

В модели Ментера для несжимаемой жидкости коэффициент турбулентной вязкости определяется по формуле:

$$\mu_T = \rho \frac{a_1 K}{\max(a_1 \omega, \Omega F_2)} = \rho \frac{K}{\max(\omega, S F_2 / a_1)}, \quad (9.54)$$

где $a_1 = 0.31$,

$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$ – инвариант тензора скоростей деформации, а

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (9.55)$$

Стыковочные функции в модели SST определяются по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
F_1 &= \tanh(\arg_1^4), \\
\arg_1 &= \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{K}}{\beta_0^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho K}{CD_{K\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right], \\
CD_{K\omega} &= \max \left(\frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 1.0 \times 10^{-10} \right), \\
F_2 &= \tanh(\arg_2^2), \\
\arg_2 &= \max \left(\frac{2\sqrt{K}}{\beta_0^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right).
\end{aligned} \tag{9.56}$$

Здесь y – расстояние до ближайшей стенки.

9.4.2. Дополнительные члены в уравнении переноса турбулентной энергии в случае сжимаемой жидкости

В случае сжимаемой жидкости, когда плотность жидкости является переменной, в уравнении переноса турбулентной кинетической энергии (9.33) появляются дополнительные члены, которых нет в уравнениях для несжимаемой жидкости.

Это:

$\Pi = -\overline{u''_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \equiv \frac{\overline{\rho' u''_j}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}$ – дополнительный член, характеризующий работу сил давления;

$K = \rho' \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}$ – член, соответствующий дополнительной диссипацией, обусловленной взаимодействием пульсаций давления с дивергенцией пульсаций скорости;

$\widetilde{\tau}_{ij} \frac{\partial \overline{u''_i}}{\partial x_j}$ – дополнительный член, учитывающий вязкое трение.

Последним членом можно пренебречь, т.к. при больших значениях числа Рейнольдса первый сомножитель, входящий в него, очень мал, а при малых значениях числа Рейнольдса – пренебрежимо мал второй сомножитель.

Кроме появления дополнительных членов, есть и еще одна особенность. Дело в том, что вязкая диссипация $\tau''_{ij} \frac{\partial \overline{u''_i}}{\partial x_j}$ в случае сжимаемой жидкости больше не определяется формулой

$$\rho\varepsilon = \mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} \quad (9.57)$$

для которой выводится уравнение (Б.27).

Проанализируем выражение для вязкой диссипации $\overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}$.

Прежде всего, отметим, что вследствие симметричности тензора вязких напряжений, справедливо:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= \tau_{ji} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \\ a = b &\Rightarrow a = \frac{1}{2}(a + b) \\ \Rightarrow \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} &= \frac{1}{2} \tau_{ij} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \end{aligned}$$

Введем обозначение для пульсаций скорости деформации:

$$s''_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right). \quad (9.58)$$

Тогда для сжимаемых течений с учетом того, что

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial u_m}{\partial x_m}, \quad (9.59)$$

пренебрегая пульсациями вязкости, получаем:

$$\tau''_{ij} \simeq \mu \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial u''_m}{\partial x_m} = 2\mu s''_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial u''_m}{\partial x_m}. \quad (9.60)$$

Откуда:

$$\begin{aligned} \overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} &= \overline{\frac{1}{2} \tau''_{ij} \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right)} = \overline{\left(2\mu s''_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \frac{\partial u''_m}{\partial x_m} \right) s''_{ij}} = \\ &= \overline{2\mu s''_{ij} s''_{ij}} - \frac{2}{3} \overline{\left(\mu \frac{\partial u''_m}{\partial x_m} \right) s''_{ii}} = \overline{2\mu s''_{ij} s''_{ij}} - \frac{2}{3} \overline{\mu \frac{\partial u''_m}{\partial x_m} \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}} = \\ &= \overline{2\mu s''_{ij} s''_{ij}} - \frac{2}{3} \overline{\mu d''^2}, \end{aligned} \quad (9.61)$$

где $d'' = \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}$ – дивергенция пульсаций скорости.

Квадрат пульсаций скорости деформации можно представить как:

$$\begin{aligned} s''_{ij}s''_{ij} &= \frac{1}{4} \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} + 2 \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right). \end{aligned} \quad (9.62)$$

Можно показать, что:

$$\frac{\overline{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i}}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u''_i u''_j}) \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{u''_i \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}} \right) + \overline{\left(\frac{\partial u''_j}{\partial x_j} \right)^2}. \quad (9.63)$$

Для однородной турбулентности первые два члена в уравнении (9.63) равны нулю, т.е. справедливо:

$$\frac{\overline{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_j}{\partial x_i}}{\partial x_j \partial x_i} = \overline{\left(\frac{\partial u''_j}{\partial x_j} \right)^2} = \overline{d''^2}. \quad (9.64)$$

В работе Саркара [163] показано, что это выражение асимптотически справедливо и для неоднородной турбулентности при больших значениях чисел Рейнольдса.

Таким образом, получаем:

$$\overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} = \bar{\mu} \frac{\overline{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}{\partial x_j \partial x_j} + \bar{\mu} \overline{d''^2} - \frac{2}{3} \bar{\mu} \overline{d''^2} = \bar{\mu} \frac{\overline{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{4}{3} \bar{\mu} \overline{d''^2}. \quad (9.65)$$

В выражении (9.65) первая часть диссипации практически совпадает с выражением для случая несжимаемой жидкости - выражение (9.57). Обозначим ее, как и прежде

$$\bar{\rho} \varepsilon = \bar{\mu} \frac{\overline{\partial u''_i}{\partial x_j} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (9.66)$$

Вторая часть этого выражения зависит от пульсаций дивергенции скорости и называется сжимаемой диссипацией:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C = \frac{4}{3}\bar{\mu}\overline{d'''^2}. \quad (9.67)$$

Саркаром и др.[163], а также Земаном [164] было показано, что скорость диссипации, заданная формулой (9.66), практически не зависит от влияния сжимаемости и для нее можно использовать такое же уравнение переноса, как для случая несжимаемой жидкости.

Таким образом, полный источник в уравнении турбулентной кинетической энергии в рассматриваемом случае имеет вид:

$$S_K = P_K - \bar{\rho}(\varepsilon + \varepsilon_C) + K + \Pi. \quad (9.68)$$

Моделирование членов, включающих пульсации дивергенции скорости. Для моделирования членов, включающих пульсации дивергенции скорости, наиболее часто используется модель Саркара и др. [163]

$$\varepsilon_C \sim M_T^2 \varepsilon, \quad (9.69)$$

где M_T – турбулентное число Маха

$$M_T = \frac{\sqrt{2K}}{a} \quad (9.70)$$

и a - локальная скорость звука.

В эту же формулу включена и добавка к дополнительной диссипации, обусловленной взаимодействием пульсаций давления с дивергенцией пульсаций скорости $K = \overline{p'd'''^2}$, т.е. предполагается, что

$$\bar{\rho}\varepsilon_C - K = \alpha_1 M_T^2 \bar{\rho}\varepsilon, \quad (9.71)$$

где $\alpha_1 = 1$ – числовая константа.

² Не следует путать добавку K (прямой шрифт) с энергией турбулентности K (курсив)!

В другой работе Саркара [165] предлагаются отдельные формулы для K и $\bar{\rho}\varepsilon_C$:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C = \alpha_1 M_T^2 \bar{\rho}\varepsilon, \quad (9.72)$$

$$K = -\alpha_2 P_K M_T + \alpha_3 \bar{\rho}\varepsilon M_T^2, \quad (9.73)$$

в которых константы равны:

$$\alpha_1 = 0.5, \quad \alpha_2 = 0.15, \quad \alpha_3 = 0.2. \quad (9.74)$$

Отсюда:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C - K = \alpha_2 P_K M_T + (\alpha_1 - \alpha_3) \bar{\rho}\varepsilon M_T^2. \quad (9.75)$$

В работе Земана [164] оба параметра, содержащие пульсации дивергенции, выражаются одной формулой:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C - K = c_D F(M_T) \bar{\rho}\varepsilon, \quad (9.76)$$

где $c_D = 0.75$,

$$F(M_T) = \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{(\gamma + 1)}{2} \left(\frac{M_T - M_{T0}}{\sigma_0} \right)^2 \right] \right\} H(M_T - M_{T0}), \quad (9.77)$$

$$M_{T0} = 0.1 \sqrt{\frac{\gamma + 1}{2}}, \quad \sigma_0 = 0.6.$$

$H(x)$ – функция Хевисайда³.

Предполагается, что дополнительные члены, которые содержат пульсации дивергенции скорости, имеют акустическое происхождение.

³ Напомним, что функция Хевисайда представляет собой единичную «ступеньку», $H(x < 0) = 0$, $H(0) = 0.5$, $H(x > 0) = 1$.

Плотность потока энергии, связанного с распространяющимися звуковыми волнами, в волновой зоне равна [166]:

$$J_E = \frac{a^3 \overline{\rho'^2}}{\bar{\rho}} = \frac{\overline{p'^2}}{\bar{\rho} a}, \quad (9.78)$$

поскольку

$$\frac{p'}{a^2} = \rho', \quad \frac{\overline{p'^2}}{a^4} = \overline{\rho'^2}. \quad (9.79)$$

Тогда полная акустическая энергия, излучаемая за единицу времени в единице объема турбулентной среды, может быть оценена как:

$$\bar{\rho} \varepsilon_A = \frac{1}{V} \iint_S J_E dS \cong \frac{\overline{p'^2}}{\bar{\rho} a L}, \quad (9.80)$$

где L - масштаб турбулентности.

Для пульсации давления используется простейшее предположение:

$$(p')^2 \sim (\bar{\rho} K)^2. \quad (9.81)$$

Масштаб турбулентности может быть выражен также через кинетическую энергию турбулентности и скорость диссипации:

$$L \sim \frac{K^{3/2}}{\varepsilon}. \quad (9.82)$$

При подстановке оценочных формул (9.81) и (9.82) в (9.80) получаем:

$$\bar{\rho} \varepsilon_A \sim \bar{\rho} \frac{K^{1/2}}{a} \varepsilon. \quad (9.83)$$

Таким образом, получается, что:

$$\bar{\rho} \varepsilon_C - K = c_A \bar{\rho} M_T \varepsilon, \quad (9.84)$$

где $C_A = 0.29$ – константа.

В работе [167] предложена формула:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C - K = \alpha_1 \tilde{M}_T^2 P_K + \alpha_2 \tilde{M}_T^2 \bar{\rho}\varepsilon, \quad (9.85)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{M}_T &= \max(M_T - \lambda, 0), \\ \alpha_1 &= 2.5, \quad \alpha_2 = 2.0, \quad \lambda = 0.2. \end{aligned} \quad (9.86)$$

Уилкоккс [60] предложил свою поправку на сжимаемость:

$$\begin{aligned} \xi^* &= 1.5, \quad M_{T0} = 0.25, \\ \bar{\rho}\varepsilon_C - K &= \xi^* \cdot (M_T^2 - M_{T0}^2) \cdot H(M_T - M_{T0}) \bar{\rho}\varepsilon. \end{aligned} \quad (9.87)$$

Формулы (9.71), (9.76), (9.84) и (9.87) имеют общую структуру:

$$\bar{\rho}\varepsilon_C - K = \phi(M_T) \bar{\rho}\varepsilon. \quad (9.88)$$

В формуле турбулентной вязкости (9.30)

$$\mu_T = C_1 \bar{\rho} \widetilde{V_n''^2} \mathbb{T}.$$

При определении характерного времени τ можно использовать в качестве скорости диссипации как ε , определяемую формулой (9.66), так и полную диссипацию, учитывающую и сжимаемую часть

$$\varepsilon + \varepsilon_C - \frac{K}{\bar{\rho}} = [1 + \phi(M_T)] \varepsilon. \quad (9.89)$$

В таблице 9.1 собраны функции $\phi(M_T)$ для различных моделей сжимаемости.

Моделирование члена, содержащего градиент давления. Ранее упоминалось, что дополнительный член в уравнении переноса турбулентной кинетической энергии

$$\Pi = -\overline{u''_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\overline{\rho' u''_j}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}$$

Таблица 9.1. Коэффициенты в различных моделях учета сжимаемости

Работа	$\phi(M_T)$	Числовые константы
[163]	$\alpha_1 M_T^2$	$\alpha_1 = 1$
[165]	$\alpha_2 \frac{P_K}{\rho \varepsilon} M_T + (\alpha_1 - \alpha_3) M_T^2$	$\alpha_1 = 0.5, \quad \alpha_2 = 0.15,$ $\alpha_3 = 0.2$
[164]	$c_D \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{(\gamma+1)}{2} \left(\frac{M_T - M_{T0}}{\sigma_0} \right)^2 \right] \right\} \cdot H(M_T - M_{T0})$	$c_D = 0.75, \quad M_{T0} = 0.1 \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}},$ $\sigma_0 = 0.6$
[168]	$c_A M_T$	$C_A = 0.29$
[167]	$\alpha_1 \tilde{M}_T^2 \frac{P_K}{\rho \varepsilon} + \alpha_2 \tilde{M}_T^2$	$\tilde{M}_T = \max(M_T - \lambda, 0),$ $\alpha_1 = 2.5, \quad \alpha_2 = 2.0, \quad \lambda = 0.2$
[60]	$\xi^* (M_T^2 - M_{T0}^2) H(M_T - M_{T0})$	$\xi^* = 1.5, \quad M_{T0} = 0.25$

характеризует работу сил давления.

Самый простейший вариант моделирования $\overline{\rho' u_j''}$ – градиентное представление

$$\overline{\rho' u_j''} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_T}{\sigma_\rho} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j}. \quad (9.90)$$

Таким образом,

$$\Pi = -\frac{1}{\bar{\rho}^2} \frac{\mu_T}{\sigma_\rho} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}. \quad (9.91)$$

9.4.3. Двухпараметрические модели турбулентности для сжимаемой жидкости

Рассмотренные ранее модели турбулентности в свете приведенных выше соображений можно преобразовать для моделирования сжимаемых течений.

Для моделирования тензора турбулентных напряжений трения можно использовать формулу (9.27)

$$-\overline{\rho u''_j u''_i} = \mu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu_T \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} K. \quad (9.92)$$

Как и в случае несжимаемой жидкости, предполагается, что среднеквадратичная пульсация $\overline{V_n''^2}$ пропорциональна всей турбулентной кинетической энергии K . Тогда из формулы (9.30) следует, что

$$\mu_T = C \bar{\rho} K \mathbb{T}. \quad (9.93)$$

$K\varepsilon$ –модель турбулентности. Также как и было рассмотрено ранее, при определении \mathbb{T} может быть использовано разное понятие скорости диссипации. Соответственно, коэффициент турбулентной вязкости может определяться по формуле.

$$\mu_T = C_\mu \bar{\rho} \frac{K^2}{\varepsilon} \quad (9.94)$$

или

$$\mu_T = C_\mu \bar{\rho} \frac{K^2}{[1 + \phi(M_T)] \varepsilon}. \quad (9.95)$$

Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии следует из (9.33):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} + \mu \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - [1 + \phi(M_T)] \bar{\rho} \varepsilon + \Pi, \quad (9.96)$$

где $P_K = -\overline{\rho u''_i u''_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$ – генерация K .

Здесь использованы допущения о градиентном характере турбулентной и молекулярной диффузии турбулентной кинетической энергии:

$$-\overline{\rho u''_j K} - \overline{p' u''_j} + \overline{\tau_{ij} u''_i} = \frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j} + \mu \frac{\partial K}{\partial x_j}. \quad (9.97)$$

Как уже указывалось ранее уравнение переноса скорости диссипации ε по форме совпадает с уравнениями для несжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} + \mu \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{K} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho}\varepsilon). \quad (9.98)$$

Следует еще раз подчеркнуть, что это уравнение справедливо только для больших значений чисел Рейнольдса.

Для расчетов по $K\varepsilon$ модели турбулентности используются те же числовые константы, как и для несжимаемой жидкости:

$$C_\mu = 0.09; \quad \sigma_K = 1; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92. \quad (9.99)$$

Функция $\phi(M_T)$, учитывающая влияние сжимаемости, вычисляется по одной из моделей, представленных в таблице 9.1.

$K\omega$ -модель Уилкокса. В этой модели коэффициент турбулентной вязкости рассчитываются по формуле:

$$\mu_T = \bar{\rho} \frac{K}{\omega}. \quad (9.100)$$

Уилкокс внес в свою модель следующие поправки на сжимаемость.

1. Членом, учитывающим градиент давления $\Pi = -\overline{u''_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}$, пренебрегают.
2. Дополнительная диссипация в уравнении переноса K обозначается как:

$$S_{K,add} = -\phi(M_T) \bar{\rho}\varepsilon. \quad (9.101)$$

Сравнивая формулы (9.94) и (9.100), можно получить:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{C_\mu K} = \frac{\varepsilon}{\beta_0^* K}. \quad (9.102)$$

В модели Уилкокса константа C_μ обозначается как $C_\mu = \beta_0^*$.

Из (9.102) следует, что

$$\bar{\rho} \frac{d\omega}{dt} = \frac{1}{\beta_0^* K} \left(\bar{\rho} \frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\varepsilon}{K} \bar{\rho} \frac{dK}{dt} \right), \quad (9.103)$$

т.е. дополнительный член, появляющийся в уравнении переноса ω , можно выразить как:

$$S_{\omega,add} = \frac{1}{\beta_0^* K} \left(0 - \frac{\varepsilon}{K} S_{K,add} \right) = \frac{\bar{\rho} \varepsilon^2}{\beta_0^* K^2} \phi(M_T) = \bar{\rho} \omega^2 \beta_0^* \phi(M_T). \quad (9.104)$$

Дополнительный член (9.101) через ω выражается как

$$S_{K,add} = -\bar{\rho} \omega \beta_0^* K \phi(M_T). \quad (9.105)$$

В результате $K\omega$ -модель, учитывающая сжимаемость, принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K1}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* [1 + \phi(M_T)] \bar{\rho} K \omega, \end{aligned} \quad (9.106)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \omega) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{K} P_K - [\beta_0 - \beta_0^* \phi(M_T)] \bar{\rho} \omega^2. \end{aligned} \quad (9.107)$$

Числовые константы, входящие в эту модель, равны:

$$\beta_0^* = 0.09, \quad \alpha = 5/9, \quad \beta_0 = 0.075, \quad \sigma_{K1} = 2, \quad \sigma_{\omega 1} = 2. \quad (9.108)$$

SST модель, учитывающая влияние сжимаемости на турбулентность. Модель Ментера, в которую внесены поправки на сжимаемость, несложно получить, используя те же принципы, что и для несжимаемой жидкости.

Напомним, что SST модель Ментера является комбинацией преобразованной $K\varepsilon$ модели турбулентности и $K\omega$ модели Уилкокса.

Предполагается, что связь между ε и ω остается такой, как и прежде:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\beta_0^* K}. \quad (9.109)$$

Тогда преобразованное уравнение переноса для K (9.96) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) = \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} + \mu \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* [1 + \phi(M_T)] \bar{\rho} K \omega. \end{aligned} \quad (9.110)$$

Для преобразования уравнения ε используя формулу (9.103), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_2 \frac{\omega}{K} P_K \\ - [\beta_2 - \beta_0^* \phi(M_T)] \bar{\rho} \omega^2 + \frac{2\bar{\rho}}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (9.111)$$

где:

$$\beta_0^* = C_\mu = 0.09; \quad \alpha_2 = (C_{\varepsilon 1} - 1) = 0.44; \quad \beta_2 = (C_{\varepsilon 2} - 1) C_\mu = 0.0828. \quad (9.112)$$

С помощью стыковочной функции F_1 получаем линейную комбинацию уравнений (9.106), (9.107) из $K\omega$ модели и уравнений (9.110), (9.111) из преобразованной $K\varepsilon$ модели турбулентности:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \\ - \beta_0^* [1 + \phi(M_T)] \bar{\rho} K \omega, \end{aligned} \quad (9.113)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_K - \\ - [\beta_3 - \beta_0^* \phi(M_T)] \bar{\rho} \omega^2 + (1 - F_1) \frac{2\bar{\rho}}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (9.114)$$

где коэффициенты новой модели – это линейная комбинация соответствующих коэффициентов моделей, лежащих в основе метода:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= F_1\alpha + \alpha_2(1 - F_1), & \beta_3 &= F_1\beta_0 + \beta_2(1 - F_1), \\ \frac{1}{\sigma_{K3}} &= F_1\frac{1}{\sigma_{K1}} + (1 - F_1)\frac{1}{\sigma_K}, & \frac{1}{\sigma_{\omega 3}} &= F_1\frac{1}{\sigma_{\omega 1}} + (1 - F_1)\frac{1}{\sigma_{\omega 2}}. \end{aligned} \quad (9.115)$$

Стыковочная функция в модели Менгера строится таким образом, чтобы модель могла наиболее адекватно учитывать перенос напряжения трения в пограничном слое.

Коэффициент турбулентной вязкости определяется, как и в случае несжимаемой жидкости, по формуле:

$$\mu_T = \rho \frac{a_1 K}{\max(a_1 \omega, \Omega F_2)} = \rho \frac{K}{\max(\omega, S F_2 / a_1)}, \quad (9.116)$$

где $a_1 = 0.31$,

$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ – инвариант скорости деформации, а

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (9.117)$$

9.5. Перенос напряжений Рейнольдса

В предыдущих разделах моделирование турбулентности было основано на использовании гипотезы Буссинеска, по которой напряжения Рейнольдса пропорциональны коэффициенту турбулентной вязкости и градиенту скорости (точнее, тензору скоростей деформации).

Альтернативным подходом, получившим широкое распространение в конце 20 века, стало непосредственное получение дифференциальных уравнений переноса напряжений Рейнольдса. Считалось, что достаточные вычислительные мощности позволят эффективно решать 6 дополнительных уравнений переноса напряжений Рейнольдса, и таким образом, сразу будут сняты все основные проблемы

моделирования турбулентности. Однако, практика показала, что использование полного тензора напряжений Рейнольдса в большинстве случаев не дает существенных преимуществ по сравнению с двухпараметрическими моделями. Кроме того, численное решение получившейся системы уравнений дает весьма плохую сходимость.

Тем не менее, исследование уравнений переноса напряжений Рейнольдса, позволяет, не решая эти уравнения, использовать их как руководство для построения более простых двухпараметрических моделей.

Уравнения переноса напряжений Рейнольдса выводятся аналогично выводу уравнения переноса турбулентной кинетической энергии K .

Окончательно данные уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho u''_i u''_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho \tilde{u}_k u''_i u''_j} \right) = \\
 & = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\underbrace{-\overline{\rho u''_k u''_i u''_j} + \overline{u''_i \tau_{jk}} + \overline{u''_j \tau_{ik}}}_{(I)} \right) - \\
 & - \underbrace{\left(\overline{\rho u''_i u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \overline{\rho u''_j u''_k} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right)}_{(II)} - \underbrace{\left(\overline{u''_i} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{u''_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{(III)} - \\
 & - \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{p' u''_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{p' u''_j} \right)}_{(IV)} + \underbrace{\left(p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} + p' \frac{\partial u''_j}{\partial x_i} \right)}_{(V)} - \\
 & - \underbrace{\left(\overline{\tau'_{jk}} \frac{\partial u''_i}{\partial x_k} + \overline{\tau'_{ik}} \frac{\partial u''_j}{\partial x_k} \right)}_{(VI)} - \underbrace{\left(\overline{\tau_{ik}} \frac{\partial u''_j}{\partial x_k} + \overline{\tau_{jk}} \frac{\partial u''_i}{\partial x_k} \right)}_{(VII)}.
 \end{aligned} \tag{9.118}$$

Физический смысл членов уравнения в его правой части:

(I) – турбулентная и молекулярная диффузия;

(II) – генерация напряжений Рейнольдса;

(III) – работа сил давления (этот член возникает только в сжимаемых течениях, вероятно, им можно пренебречь);

(IV) – вклад диффузии;

(V) – корреляция пульсаций давления со скоростями деформаций;

(VI) – вязкая диссипация;

(VII) – этим членом как и в уравнении переноса K , можно пренебречь.

Таким образом, источник в уравнении переноса напряжений Рейнольдса выглядит как

$$S_{ij} = P_{ij} - \bar{\rho}\varepsilon_{ij} + \Pi_{ij}, \quad (9.119)$$

где

$$\begin{aligned} P_{ij} &= - \left(\overline{\rho u''_i u''_k \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k}} + \overline{\rho u''_j u''_k \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}} \right), \\ \bar{\rho}\varepsilon_{ij} &= \left(\overline{\tau'_{jk} \frac{\partial u''_i}{\partial x_k}} + \overline{\tau'_{ik} \frac{\partial u''_j}{\partial x_k}} \right), \quad \Pi_{ij} = \left(\overline{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u''_j}{\partial x_i}} \right). \end{aligned} \quad (9.120)$$

Член P_{ij} , учитывающий генерацию, не требует дополнительных соотношений, т.к. в него входят только известные параметры. А вот для остальных членов требуется предложить некоторые гипотезы.

Например, диссипативный член $\bar{\rho}\varepsilon_{ij}$ моделируют следующим образом: при больших числах Рейнольдса мелкомасштабные диссипативные турбулентные движения можно считать изотропными (локальная изотропность), так что этот член может быть представлен следующим образом:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3}\varepsilon\delta_{ij}. \quad (9.121)$$

Для пристеночной турбулентности этот тензор считается анизотропным:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\widetilde{u''_i u''_j}}{K}\varepsilon. \quad (9.122)$$

Выражения для Π_{ij} различаются в зависимости от конкретного вида используемой модели. Существует целый спектр моделей переноса напряжений Рейнольдса, подробная классификация которых здесь не приводится.

Можно заметить, что для исключения гипотезы изотропности турбулентности, приходится вводить две новые гипотезы, которые заключаются в представле-

нии Π_{ij} и способе моделирования тензора диссипации турбулентной энергии.

Также отметим, что полная система модели турбулентности с использованием уравнений для напряжений Рейнольдса состоит из 7 уравнений, это:

- уравнения переноса напряжений Рейнольдса – 6 независимых уравнений;
- уравнение для скорости диссипации турбулентной энергии ε .

Существуют также модели, где тензор диссипации моделируется через скорость диссипации ω , а не через ε . Тогда вместо уравнения для ε совместно с 6 уравнениями для напряжений решается уравнение для ω .

В заключение отметим, что с учетом большого количества уравнений и необходимости введения особых гипотез при расчете тензора диссипации и Π_{ij} , непосредственное моделирование переноса напряжений Рейнольдса в инженерной практике используется достаточно редко.

9.6. Граничные условия в моделях турбулентности

Как и для любого уравнения в частных производных при решении уравнений модели турбулентности требуется введение граничных условий.

Особую важность здесь представляют граничные условия типа **вход** и типа **стенка**.

В данном разделе будут кратко рассмотрены основные правила применения граничных условий для моделей турбулентности на примере двухпараметрических моделей.

9.6.1. Граничные условия на входе

На входе (при условиях, если **вход дозвуковой**) необходимо задавать граничные условия для всех уравнений модели турбулентности.

Однако на практике оказывается, что прямое задание значений кинетической энергии турбулентности и ее диссипации крайне неудобно, поскольку дан-

ные величины практически никогда неизвестны. Их значение можно приближенно определить по некоторым косвенным параметрам.

В качестве таких параметров выступают:

1. Интенсивность турбулентности ι .
2. Масштаб длины L .
3. Отношение турбулентной вязкости к молекулярной μ_T/μ .

Интенсивность турбулентности определяется следующим выражением:

$$\iota \equiv \frac{u'}{w}, \quad (9.123)$$

где u' – среднеквадратичное значение пульсаций скорости, w – среднemasсовая скорость.

Для данного параметра существуют следующие приближенные оценки существования в технических устройствах:

1. Высокая интенсивность турбулентности, $\iota = 5\% \div 20\%$. Такая интенсивность реализуется в высокоскоростных потоках со сложной геометрией. Например, при течении в теплообменных аппаратах или в лопаточных машинах.
2. Средняя интенсивность турбулентности, $\iota = 1\% \div 5\%$. Примером течений со средней интенсивностью турбулентности являются, допустим, течения в больших трубах.
3. Низкая интенсивность турбулентности, $\iota < 1\%$. Такой интенсивностью характеризуются потоки при истечении из большого неподвижного объема.

Для оценки уровня интенсивности турбулентности применяют следующую эмпирическую формулу, полученную для течения в гладких трубах:

$$\iota = 0.16 \operatorname{Re}_{d_h}^{-\frac{1}{8}}, \quad (9.124)$$

где Re_{d_h} определяется по гидравлическому диаметру канала d_h и среднemasсовой скорости.

Масштаб длины можно определить следующим образом:

$$L = C_\mu \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (9.125)$$

или по некоторым источникам как:

$$L^* = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}. \quad (9.126)$$

На практике обычно применяется следующее выражение для оценки масштаба длины:

$$L = 0.038d_h. \quad (9.127)$$

Соотношение вязкостей используется при моделировании течений, для которых имеются экспериментальные данные по этому параметру.

Приведем теперь формулы, с помощью которых можно вычислить значения k , ε и ω на границах, с помощью приведенных выше величин.

Определение энергии турбулентности.

$$K = \frac{3}{2}(wl)^2. \quad (9.128)$$

Определение диссипации турбулентной энергии.

$$\varepsilon = C_\mu \frac{k^{3/2}}{L} \quad (9.129)$$

или:

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L^*} \quad (9.130)$$

или, с использованием отношения вязкостей:

$$\varepsilon = C_\mu \frac{\rho k^2}{\mu} \left(\frac{\mu_T}{\mu} \right)^{-1}. \quad (9.131)$$

Определение скорости диссипации турбулентной энергии.

$$\omega = \frac{\sqrt{K}}{L} \quad (9.132)$$

или:

$$\omega = C_{\mu}^{-1/4} \frac{\sqrt{K}}{L^*} \quad (9.133)$$

или, с использованием отношения вязкостей:

$$\omega = \frac{\rho K}{\mu} \left(\frac{\mu_T}{\mu} \right)^{-1}. \quad (9.134)$$

9.6.2. Граничные условия на стенке

Пристеночная область течения отличается особым характером турбулентности: здесь турбулентные пульсации, направленные по нормали к стенке, гасятся. В непосредственной близости от стенки (так называемый «вязкий подслой») силы вязкости преобладают над силами инерции, локальное число Рейнольдса мало, течение приобретает характер, близкий к ламинарному.

В соответствии с этим модели турбулентности делятся на две больших категории:

1. Низкорейнольдсовские (LRN)⁴. Данный класс моделей позволяет без дополнительных гипотез моделировать пристеночную область. К такому классу, в частности, относится модель $K\omega$.
2. Высокореинольдсовские (HRN)⁵. Данные модели неадекватно моделируют течение в пристеночной области и требуют применения особого метода построения граничных условий, о котором будет рассказано в данном разделе. К таким моделям относится, например, стандартная модель $K\varepsilon$.

⁴ англ. Low Reynolds Number Models. Далее - LRN.

⁵ англ. High Reynolds Number Models. Далее - HRN.

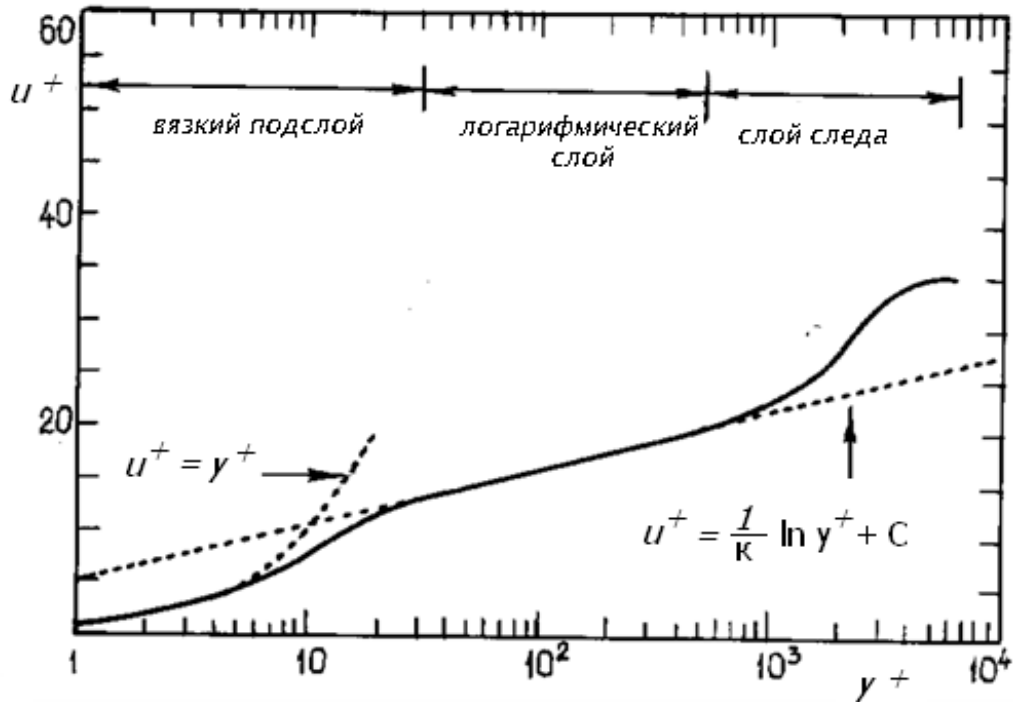


Рис. 9.2. Профиль скорости вблизи стенки

Динамические переменные. Профиль скорости потока в пристеночном слое представлен на рисунке 9.2.

На данном графике в качестве координат использованы так называемые динамические переменные.

$$\begin{aligned} u^+ &= \frac{u}{u^*}, \\ y^+ &= \frac{u^* y}{\nu}, \end{aligned} \quad (9.135)$$

где $u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ – динамическая скорость, или скорость трения.

Как видно из приведенных формул, динамические переменные представляют особым образом обезразмеренные координату и скорость.

По своему физическому смыслу параметр y^+ представляет собой некоторое подобие числа Рейнольдса, где в качестве масштаба скорости принята скорость трения u^* , а в качестве масштаба длины – расстояние до стенки.

Смысл же u^+ легко понять, если представить данный параметр в следующем

виде:

$$u^+ = \frac{u}{u^*} = u^+ = \sqrt{\frac{\rho u^2}{\tau_w}} = \sqrt{2c_f},$$

где c_f – некоторый локальный коэффициент трения.

Исходя из приведенного выше можно сделать вывод, что $u^+(y^+)$ по сути являются локальными аналогами зависимости коэффициента сопротивления трения от числа Рейнольдса, которые в разных формах применяются при аэродинамических и теплогидравлических инженерных расчетах.

Функции стенки. Как уже говорилось, LRN модели турбулентности описывают пристеночный слой без привлечения дополнительных гипотез. Естественным граничным условием для K на стенке будет $K_w = 0$. Условия для ω и ε различаются в зависимости от конкретной модели.

В HRN моделях применяется особый прием – метод функций стенки. Данный метод подразумевает, что течение вблизи от стенки не моделируется. При этом значения всех основных параметров потока получаются с помощью так называемых функций стенки.

Фактически данные функции представляют собой профили основных параметров вблизи стенки.

У функций стенки есть множество модификаций. Приведем здесь стандартную формулировку метода.

$$u^+ = \begin{cases} y^+; & \text{при } y^+ < 11.5, \\ \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + 5.1 = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+); & \text{при } y^+ \geq 11.5, \end{cases} \quad (9.136)$$

где $E = 9.8$.

При этом, напряжение трения на стенке определяется как:

$$\tau_w = \begin{cases} \frac{\nu u_P}{y_P}; & \text{при } y^+ < 11.5, \\ \frac{\kappa c_\mu^{1/4} \sqrt{k_P} \cdot u_P}{u^+}; & \text{при } y^+ \geq 11.5, \end{cases} \quad (9.137)$$

где индексом P обозначается пристеночный узел сетки.

В случае $y^+ \geq 11.5$ встает вопрос о нахождении значений u^+ и y^+ , которые зависят от τ_w .

Для этого поступают следующим образом. Для пристеночного узла можно приближенно написать:

$$\tau_w = \rho(\nu + \nu_T) \cdot \frac{\Delta u}{\Delta y}.$$

Учитывая, что на стенке $u_w = 0$:

$$\tau_w = \rho(\nu + \nu_T) \cdot \frac{u_P}{y_P}. \quad (9.138)$$

Тогда:

$$\nu_T = \nu \left(\frac{y^+ \kappa}{\ln E y^+} - 1 \right).$$

После преобразований можно получить следующее уравнение

$$\frac{\kappa u_P y_P}{\nu} = y^+ \ln E y^+. \quad (9.139)$$

Данное уравнение обычно решают итерационным методом. Автором настоящей работы было найдено аналитическое решение уравнения такого типа с использованием функции Ламберта [41]. Точное решение выглядит следующим образом:

$$y^+ = \frac{\exp \left[LamW \left(\frac{E \kappa u_P y_P}{\nu} \right) \right]}{E} \quad (9.140)$$

Очевидно, что аналитические решения могут быть найдены и для многих других форм пристеночных функций, содержащих слагаемые вида $y^+ \ln (E y^+)$.

С учетом того, что вычисления y^+ необходимо проводить на каждом шаге по времени, приведенный метод имеет очевидные преимущества над итерационным.

После нахождения y^+ , τ_w и u^* можно вычислить основные параметры турбулентности, используя следующие формулы:

$$K_P = \frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}}, \quad (9.141)$$

$$\omega_P = \frac{\sqrt{K_P}}{C_\mu^{1/4} \kappa y_P}, \quad (9.142)$$

$$\varepsilon_P = C_\mu K_P \omega_P. \quad (9.143)$$

Отметим, что обычно при использовании метода пристеночных функций необходимо чтобы первый узел находился на таком отдалении от стенки, при котором $y_P^+ \geq 11.5$. Это продиктовано соображениями численной стабильности решения.

Требования к сетке. Для применения моделей HRN с методом пристеночных функций для получения физически адекватного стабильного решения обычно используется условие, чтобы y^+ в пристеночном узле сетки находился в следующем диапазоне:

$$\boxed{11.5 \leq y_P^+ \leq 200}. \quad (9.144)$$

В свою очередь для моделей LRN требования к сетке в пристеночной области очень жесткие:

$$\boxed{y_P^+ \leq 3}. \quad (9.145)$$

При этом желательно, чтобы $\boxed{y_P^+ \simeq 1}$.

Функции стенки для уравнения энергии. Для уравнения энергии в случае применения HRN моделей также требуется применение функций стенки. Данные функции служат для определения теплового потока в стенку и значения температуры в пристеночных ячейках сетки.

Обычно функции стенки для уравнения энергии применяют в следующей форме:

$$T^+ = \rho c_p \frac{(T_w - T_P) \cdot u_P}{u^+ q_w} = \begin{cases} \text{Pr} \cdot y^+; & y^+ < y_q^+ \\ \text{Pr}_T \left[\frac{1}{\kappa} \ln E y^+ + C_q \right]; & y^+ \geq y_q^+, \end{cases} \quad (9.146)$$

где $C_q = 9.24 \cdot \left[\left(\frac{\text{Pr}}{\text{Pr}_T} \right)^{3/4} - 1 \right] \cdot [1 + 0.28 \exp(-0.007 \text{Pr} / \text{Pr}_T)]$ – функция, зависящая от числа Прандтля;

y_q^+ – толщина теплового подслоя (в котором перенос тепла за счет теплопроводности преобладает над конвективным механизмом). Данная величина находится из соотношения $y^+ = \frac{\text{Pr}_T}{\text{Pr}} \left[\frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C_q \right]$.

Фактически функции стенки для уравнения энергии являются скорректированными с помощью чисел Pr и Pr_T функциями стенки для скорости, за исключением дополнительной поправки C_q . Можно также заметить, что в случае малого различия между Pr и Pr_T поправка C_q близка к нулю.

Аналогичным образом строятся и функции стенки для уравнения переноса химических компонентов. При этом вместо чисел Прандтля Pr и Pr_T используют числа Шмидта Sc и Sc_T .

«Автоматические» ГУ на стенке. В заключение раздела отметим, что для моделей класса LRN с целью их универсализации также могут применяться функции стенки. Функции стенки в LRN моделях применяют с целью получения физически адекватных результатов в случаях, когда параметры сетки в отдельных ячейках не соответствуют требованиям модели по y_P^+ .

Применение функций стенки в LRN моделях обычно используют по методу «автоматического переключателя», т.е., когда в случае удовлетворения требований к y_P^+ применяются обычные граничные условия модели турбулентности, а при неудовлетворительном значении y_P^+ – все параметры в пристеночной ячейке рассчитываются с помощью функций стенки.

9.7. Трехпараметрическая модель турбулентности для сжимаемых течений

Как уже упоминалось ранее, турбулентные течения газа при больших скоростях по причине сжимаемости характеризуются определенными особенностями производства, переноса и диссипации турбулентной энергии.

Модели турбулентности, разработанные для несжимаемой жидкости, плохо описывают сверхзвуковые сжимаемые течения. Известно, что сжимаемость оказывает стабилизирующее воздействие на турбулентность, уменьшая с ростом числа Маха интенсивность турбулентного смешения.

В современных задачах авиационной и ракетно-космической техники этот эффект играет важнейшую роль.

В ранних работах Саркара [163], Земана [164], А.М.Молчанова [168] и ряде других предполагается, что эффект замедления турбулентного смешения с ростом скорости связан с появлением в уравнении турбулентной кинетической энергии дополнительной сжимаемой диссипации, которая зависит от турбулентного числа Маха и происходит на мелкомасштабном уровне.

Однако последние исследования (например, Гиримаджи [62]) показали, что основное воздействие сжимаемости на турбулентность осуществляется уже на уровне крупных масштабов и связано с тем, что пульсации давления воздействуют на турбулентность совершенно иначе, чем в несжимаемой жидкости.

В данной работе рассматривается модернизированная версия модели $k - \varepsilon - V_n$, разработанной А.М.Молчановым [169]. Данная модель основана на мо-

делировании корреляции «давление - скорости деформаций» в зависимости от скорости потока и на гипотезе о том, что основную роль в механизме турбулентного переноса играют пульсации скорости, направленные по нормали к линиям тока (пульсации линий тока).

Изначально модель $k - \varepsilon - V_n$ разрабатывалась для расчета преимущественно струйных сильно сжимаемых течений. В данной работе модель была адаптирована для успешного применения при расчетах как струйных течений, так и течений в пограничных слоях.

9.7.1. Проблема учета сжимаемости и общая структура модели

Основные уравнения модели выводятся из уравнений переноса напряжений Рейнольдса (верхней тильдой обозначено осреднение по Фавру):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho u_i' u_j'} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho \tilde{u}_k u_i' u_j'} \right) = T_{ijk.k} + P_{ij} + \Pi_{ij} - \overline{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (9.147)$$

где

$$\begin{aligned} T_{ijk.k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(-\overline{\rho u_k' u_i' u_j'} + \overline{u_i' \tau_{jk}} + \overline{u_j' \tau_{ik}} - \delta_{kj} \overline{p' u_i'} - \delta_{ki} \overline{p' u_j'} \right), \\ P_{ij} &= - \left(\overline{\rho u_i' u_k' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k}} + \overline{\rho u_j' u_k' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}} \right), \\ \Pi_{ij} &= \left(\overline{p' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}} \right), \quad \varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \end{aligned}$$

Ключевую роль для учета сжимаемости, как это было показано различными исследователями [170–172], играет тензор корреляции пульсаций давления с градиентом пульсаций скорости Π_{ij} .

Данный тензор разлагается на две составляющие - «медленную» $\Pi_{ij}^{(1)}$ и «быструю» $\Pi_{ij}^{(2)}$:

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij}^{(1)} + \Pi_{ij}^{(2)} \quad (9.148)$$

При этом предполагается, что «медленная» часть $\Pi_{ij}^{(1)}$, имеющая физический смысл тенденции к изотропности и связанная с мелкомасштабной турбулентностью, может быть выражена формулой, использующейся для несжимаемых течений:

$$\Pi_{ij}^{(1)} = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon \left(\frac{\widetilde{u'_i u'_j}}{K} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) \quad (9.149)$$

где $C_1 = 1.8$.

«Быстрая» часть $\Pi_{ij}^{(2)}$ связана прежде всего с крупномасштабной турбулентностью. Поэтому в данной работе сделано предположение, что именно через нее осуществляется влияние пульсаций давления на развитие турбулентности.

Результаты прямого численного моделирования (DNS), полученные Гиримаджи [172], показывают, что для можно использовать формулу:

$$\Pi_{ij}^{(2)} = C_{\Pi 1} \Pi_{ij}^{(P)} - C_{\Pi 2} P_{ij}, \quad (9.150)$$

где $C_{\Pi 1}$, $C_{\Pi 2}$ являются функцией градиентного числа Маха и имеют форму указанную ниже.

$$\begin{aligned} M_g < \alpha : & \begin{cases} C_{\Pi 1} = 1, \\ C_{\Pi 2} = 0 \end{cases} \\ \alpha \leq M_g \leq \beta : & \begin{cases} C_{\Pi 1} \rightarrow 0, \\ C_{\Pi 2} \rightarrow 1 \end{cases} \\ M_g > \beta : & \begin{cases} C_{\Pi 1} = 0, \\ C_{\Pi 2} = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (9.151)$$

где α и β - некоторые константы.

Тензор $\Pi_{ij}^{(P)}$ рассчитывается следующим образом

$$\Pi_{ij}^{(P)} = -C_2 \left(P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right), \quad (9.152)$$

где $C_2 = 0.6$.

Приведем физическую интерпретацию функций $C_{П1}$ и $C_{П2}$.

Согласно [172] характер влияния пульсаций давления в зависимости от скорости потока можно разбить на 3 области:

1. При малых скоростях потока ($M_g < \alpha$) пульсации давления ведут себя так же, как и в несжимаемой жидкости, и «быстрая» часть удовлетворяет уравнению Пуассона и рассчитывается по формуле (9.152).
2. При дальнейшем росте скорости ($\alpha \leq M_g \leq \beta$) величина $\Pi_{ij}^{(2)}$ становится меньше, чем рассчитываемая по формуле (9.152), кроме того, на нее оказывает подавляющее воздействие тензор скоростей деформаций через генерацию. Именно этот эффект и приводит к стабилизирующему воздействию на турбулентность.
3. Наконец при очень больших скоростях ($M_g > \beta$) «быстрая» часть становится пренебрежимо малой по сравнению с генерацией. Пантано и Саркар [173] показали, что это связано с тем, что при больших значениях числа Маха скорость распространения воздействия пульсаций давления (скорость звука) слишком мала, чтобы влиять на турбулентность.

Конкретный вид функций $C_{П1}$ и $C_{П2}$, используемых в разработанной модели, будет приведен позднее.

Уравнение для кинетической энергии турбулентности получается путем свертки уравнения (9.147) с учетом принятых допущений относительно формы тензора Π_{ij} .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}K) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k K) = T_{k.k} + P(1 - C_{П2}) - \bar{\rho}\varepsilon, \quad (9.153)$$

где $P = \frac{1}{2}P_{ii} = \overline{\rho u'_i u'_k \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}}$ - источник турбулентной энергии.

Уравнение для диссипации турбулентной энергии имеет практически стандартную форму за исключением небольших модификаций, примененных для учета сжимаемости.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right] + \frac{\varepsilon}{K} [C_{\varepsilon 1}P(1 - C_{\Pi 2}) - C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\varepsilon] \quad (9.154)$$

При классическом определении вихревой вязкости ($\mu_T = \rho C_\mu K^2/\varepsilon$) система уравнений (9.153)-(9.154) является замкнутой. Однако в такой постановке невозможно адекватно моделировать многие эффекты, возникающие в слоях смешения, пограничных слоях и т.п. По сути классическая формула является физически обоснованной лишь для некоторых типов течения.

Покажем это, рассмотрев структуру формулы турбулентной вязкости. Из анализа размерностей имеем, что $\mu_T \sim \rho \mathcal{V}^2 \mathcal{T}$, где \mathcal{V} и \mathcal{T} - турбулентные масштабы скорости и времени соответственно.

В классической формуле $\mathcal{V} = \sqrt{K}$, что оказывается физически обоснованным лишь в частных случаях течений. По своему определению коэффициент турбулентной вязкости отвечает за вихревой перенос количества движения между слоями. Как было показано еще Л.Г.Лойцяным [174], скоростной масштаб этого переноса определяется пульсациями линий тока (или пульсациями поперечной составляющей скорости, что эквивалентно). Таким образом, более физически обоснованный турбулентный масштаб скорости есть $\mathcal{V} = V'_n$, где V'_n пульсации поперечной составляющей скорости по нормали к линиям тока.

Для получения уравнения для $\widetilde{V}_n'^2$ рассмотрим двумерное течение, обозначив индексом «1» направление вдоль линий тока, а индексом «2» - перпендикулярно линиям тока. В этом случае очевидны следующие соотношения:

$$\tilde{u}_2 \ll \tilde{u}_1, \quad \frac{\partial f}{\partial x_1} \ll \frac{\partial f}{\partial x_2}, \quad f = \tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \quad \tilde{u}_3 = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial x_3} = 0 \quad (9.155)$$

Тогда из (9.147) получим:

$$P_{12} \approx -\overline{\rho u'_2 u'_2} \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_2}, \quad P_{22} \approx 0, \quad P_{11} \approx -2\overline{\rho u'_1 u'_2} \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_2}, \quad P \approx -\overline{\rho u'_1 u'_2} \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_2} \quad (9.156)$$

Таблица 9.2. Коэффициенты модели $K - \varepsilon - V_n$

σ_K	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_1	C_2
1.0	1.3	1.44	1.92	1.8	0.6

Используя уравнения (9.147), (9.149), (9.150), (9.152) и предположение (9.156), можно получить следующее уравнение для $\widetilde{u}_2^2 = \widetilde{V}_n^2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \widetilde{V}_n^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_k \widetilde{V}_n^2 \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial \widetilde{V}_n^2}{\partial x_k} \right] + \\ + \frac{2}{3} C_{\Pi 1} C_2 P - \left[C_1 \frac{\widetilde{V}_n^2}{K} + \frac{2}{3} (1 - C_1) \right] \bar{\rho} \varepsilon \end{aligned} \quad (9.157)$$

Формулу для вихревой вязкости можно получить, рассмотрев вид источника в уравнении для касательных напряжений (уравнение (9.147) при $i = 1, j = 2$):

$$S_{12} = - (1 - C_{\Pi 2} - C_{\Pi 1} C_2) \bar{\rho} \widetilde{u}'_2 \frac{\partial \widetilde{u}'_1}{\partial x_2} - C_1 \frac{\widetilde{u}'_1 \widetilde{u}'_2}{K} \bar{\rho} \varepsilon \quad (9.158)$$

Для этого используем прием, примененный в работе, посвященной исследованию алгебраических моделей напряжений Рейнольдса [175]. Согласно указанной работе, влиянием диффузионного и конвективного переноса на касательные напряжения можно пренебречь. Таким образом, $S_{12} \approx 0$. И тогда из уравнения (9.158) получаем явное выражение для напряжения трения:

$$\widetilde{u}'_1 \widetilde{u}'_2 = - \frac{(1 - C_{\Pi 1} C_2 - C_{\Pi 2}) K}{C_1} \frac{\widetilde{u}'_2}{\varepsilon} \frac{\partial \widetilde{u}'_1}{\partial x_2} \quad (9.159)$$

Данное уравнение можно переписать в форме:

$$\bar{\rho} \widetilde{u}'_1 \widetilde{u}'_2 = - \mu_T \frac{\partial \widetilde{u}'_1}{\partial x_2}$$

Таким образом, формула для вихревой вязкости имеет вид:

$$\mu_T = \frac{(1 - C_{\Pi 1} C_2 - C_{\Pi 2}) \bar{\rho} \widetilde{V}_n^2 K}{C_1 \varepsilon}, \quad (9.160)$$

В предположении справедливости гипотезы Буссинеска, коэффициент μ_T может быть использован для вычисления всех компонент тензора Рейнольдса.

Окончательная модель для свободного потока состоит из уравнений (9.153), (9.154) и (9.157). Коэффициенты модели приведены в таблице 9.2. Валидация использованных в модели гипотез проводилась А.М.Молчановым [169].

9.7.2. Учет влияния стенки

Описанная в предыдущем разделе модель $k - \varepsilon - V_n$ хорошо показала себя при расчете свободных течений. Однако известные свойства классического уравнения для диссипации турбулентной энергии ε не позволяют адекватно применять модель для расчета пристеночных течений без ее модификаций.

В настоящее время развиты три основных подхода, позволяющих учесть эффекты стенки:

1. Использование так называемых «функций стенки», позволяющих исключить фазу решения уравнений, описывающих течение, в непосредственной близости от стенки и дающих «готовое» решение для этой области в виде безразмерных профилей скорости и температуры. Данный подход имеет очевидный недостаток, поскольку явные функции стенки способны адекватно предсказывать распределение скоростей лишь в течениях определенного вида и в достаточно ограниченном диапазоне параметров потока.
2. Сопряжение с моделью ω -типа. Как известно, модели данного типа разрабатывались специально для моделирования течений вблизи стенки, но при этом они характеризуются сильной зависимостью получаемых результатов от параметров турбулентности внешнего течения. Сопряженная же модель позволяет решать в области пограничного слоя ω -уравнение, а вне его - ε -уравнение. «Переключение» между моделями осуществляется с помощью специальных функций сопряжения. На этом принципе в частности построена модель Ф.Р.Ментера SST [57].

3. Применение дополнительного эллиптического уравнения для специальной функции релаксации, позволяющей учесть эффекты стенки. На этом принципе строится модель $v^2 f$ [59].

В рамках работ по модификации модели турбулентности $k - \varepsilon - V_n$ рассматривались два последних подхода. По итогам анализа полученных результатов предпочтение было отдано в пользу второго подхода, несмотря на то, что третий подход является физически обоснованным и применение эмпирических функций в нем сведено к минимуму. Причины такого выбора в основном связаны с более легкой численной реализацией. Кроме того, исследования показали, что модели, основанные на применении дополнительного эллиптического уравнения имеют проблемы с назначением граничных условий в сложных течениях, а также могут неадекватно проявлять себя в нестационарных условиях, что связано, по-видимому с отсутствием производной по времени в уравнении для эллиптической функции [19].

Следует подчеркнуть, что уравнение для ω , помимо проблем, связанных с неадекватным влиянием внешней турбуликации потока на параметры турбулентности внутри пограничного слоя, имеет еще один существенный недостаток, связанный с определением граничных условий на стенке (на поверхности стенки $\omega \rightarrow \infty$, что создает известные трудности при численном решении).

По этой причине в данной работе уравнение для ω было заменено на уравнение для новой переменной g , определяемой следующим образом:

$$g^2 = 1/(\beta^*\omega), \quad g^2 = K/\varepsilon \quad (9.161)$$

Такой подход был впервые предложен в [176].

Данная переменная представляет собой квадратный корень временного масштаба турбулентности. Граничные условия для g получаются естественным образом (на стенке характерное время турбулентных пульсаций стремится к нулю, следовательно, на стенке $g_w = 0$).

В [176] получено следующее уравнение для g :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j g) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{g1}} \right) \frac{\partial g}{\partial x_j} \right] - \frac{1}{2} \alpha_1 \frac{g}{K} P + \frac{1}{2} \frac{\beta_1 \rho}{\beta^* g} - \frac{3}{g} \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{g1}} \right) \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} \quad (9.162)$$

Для сопряжения моделей уравнение для ε переписывается относительно параметра g с использованием формулы (9.161).

Опуская тривиальные выкладки, приведем окончательную формулировку модели.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \tilde{u}_k K) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial x_k} \right] + P^* - \frac{\rho K}{g^2}, \quad (9.163)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} g) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \tilde{u}_k g) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_g} \right) \frac{\partial g}{\partial x_k} \right] - \\ &- \frac{\alpha}{2} \frac{g}{K} P^* + \frac{\beta \rho}{2 \beta^* g} - \frac{3}{g} \left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_g} \right) \frac{\partial g}{\partial x_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} + \\ &+ \frac{(1 - F_1)}{K} \left\{ \frac{2 \mu_T}{\sigma_g} \frac{\partial K}{\partial x_k} \frac{\partial g}{\partial x_k} + \frac{g}{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu_T \left(\frac{1}{\sigma_K} - \frac{1}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial K}{\partial x_k} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (9.164)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \widetilde{V}_n^2) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \tilde{u}_k \widetilde{V}_n^2) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial \widetilde{V}_n^2}{\partial x_k} \right] + \\ &+ \frac{2}{3} C_{\Pi 1} C_2 P - \left[C_1 \frac{\widetilde{V}_n^2}{K} + \frac{2}{3} (1 - C_1) \right] \frac{\rho K}{g^2}, \end{aligned} \quad (9.165)$$

$$\mu_T = \min \left(C_D \rho \widetilde{V}_n^2 g^2; \frac{\rho a_1 K}{S F_2} \right). \quad (9.166)$$

где $a_1 = 0.31$ - константа Брэдшоу, а функции сопряжения определяются следующим образом:

Таблица 9.3. Коэффициенты модели $K - g - V_n$

α_1	β^*	β_1	σ_{g1}	σ_{K1}
5/9	0.09	0.075	2.0	1.176

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4); \quad (9.167)$$

$$\arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{g^2 \sqrt{K}}{y}, \frac{500 \mu \beta^* g^2}{\rho y^2} \right), \frac{1}{CD_{K\omega}} \frac{4\rho K}{\sigma_\varepsilon y^2} \right];$$

$$CD_{K\omega} = \max \left(-\frac{4\rho}{\sigma_\varepsilon g} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{dg}{dx_j}, 1.0 \times 10^{-10} \right); \quad F_2 = \tanh(\arg_2^2);$$

$$\arg_2 = \max \left(2 \frac{g^2 \sqrt{K}}{y}, \frac{500 \mu \beta^* g^2}{\rho y^2} \right)$$

Коэффициенты модели определяются с использованием функций сопряжения:

$$\alpha = F_1 \alpha_1 + (1 - F_1)(C_{\varepsilon 1} - 1)$$

$$\frac{\beta}{\beta^*} = F_1 \frac{\beta}{\beta^*} + (1 - F_1)(C_{\varepsilon 1} - 1)$$

$$\frac{1}{\sigma_g} = F_1 \frac{1}{\sigma_{g1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_\varepsilon} \quad (9.168)$$

$$\frac{1}{\sigma_K} = F_1 \frac{1}{\sigma_{K1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_{K2}}$$

$$C_D = F_1 \frac{(1 - C_2)}{C_1} + (1 - F_1) \frac{(1 - C_{\Pi 1} C_2 - C_{\Pi 2})}{C_1}$$

Значения $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 1}$, σ_ε and σ_{K2} , C_1 , C_2 берутся в соответствии с таблицей 9.2 (уточнение: в качестве σ_{K2} берется значение σ_K по таблице).

Остальные коэффициенты берутся в соответствии с таблицей 9.3.

Источник турбулентной энергии модифицируется следующим образом:

$$P^* = P [1 - (1 - F_1) C_{\Pi 2}] \quad (9.169)$$

$C_{\Pi 1}$ и $C_{\Pi 2}$ являются функциями турбулентного числа Маха:

$$C_{\Pi 1}(M_T) = \begin{cases} 1, & M_T \leq \alpha_{\Pi 1} \\ 1 - 3\zeta^2 + 2\zeta^3, & \zeta = \frac{(M_T - \alpha_{\Pi 1})}{(\beta_{\Pi 1} - \alpha_{\Pi 1})}, \quad \alpha_{\Pi 1} < M_T < \beta_{\Pi 1} \\ 0, & M_T \geq \beta_{\Pi 1} \end{cases}$$

$$C_{\Pi 2}(M_T) = \begin{cases} C_{\Pi 2, \max} (3\zeta^2 + 2\zeta^3), & \zeta = \frac{(M_T - \alpha_{\Pi 2})}{(\beta_{\Pi 2} - \alpha_{\Pi 2})}, \quad \alpha_{\Pi 2} < M_T \leq \beta_{\Pi 2} \\ C_{\Pi 2, \max} (1 - 3\zeta^2 + 2\zeta^3), & \zeta = \frac{(M_T - \beta_{\Pi 2})}{(\gamma_{\Pi 2} - \beta_{\Pi 2})}, \quad \beta_{\Pi 2} < M_T < \gamma_{\Pi 2} \\ 0, & M_T \leq \alpha_{\Pi 2} \cup M_T \geq \gamma_{\Pi 2} \end{cases}$$

$$\alpha_{\Pi 1} = 0.1; \quad \beta_{\Pi 1} = 0.27; \quad \beta_{\Pi 2} = 0.315; \quad \gamma_{\Pi 2} = 10; \quad C_{\Pi 2, \max} = 0.65 \quad (9.170)$$

В данной работе с учетом эффектов стенки турбулентное число Маха выбрано следующим образом:

$$M_T = \frac{\min(0.2857L_T S; \sqrt{2K})}{a} \quad (9.171)$$

где $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ - инвариант тензора скоростей деформаций $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$,
 $L_T = \min(g^2 \sqrt{K}; y)$ - масштаб длины, где y расстояние до ближайшей стенки.

В заключении описания модели необходимо подчеркнуть, что в непосредственной близости от стенки сжимаемость перестает оказывать существенное влияние на турбулентную структуру, в связи с чем в модели заложено, что функции $C_{\Pi 1}$ и $C_{\Pi 2}$ в данной области обнуляются.

9.7.3. Валидация модели

С целью валидации с помощью модели проводились расчеты свободных и пристеночных высокоскоростных течений. Результаты расчетов сравнивались с результатами экспериментов [177–179], а также с результатами расчетов с использованием известной модели Саркара [163] (только для свободного течения) и модели SST Ментера.

Таблица 9.4. Параметры экспериментов по смешению турбулентных потоков [177]

Режим	1	1d	2	3	3r	4	5
$r = U_2/U_1$	0.78	0.79	0.57	0.18	0.25	0.16	0.16
$s = \rho_2/\rho_1$	0.76	0.76	1.55	0.57	0.58	0.6	1.14
M_1, M_2	2.01, 1.38	2.02, 1.39	1.91, 1.36	1.96, 0.27	2.22, 0.43	2.35, 0.3	2.27, 0.38
T_1, T_2 [К]	163, 214	151, 198	334, 215	161, 281	159, 275	171, 285	332, 292
U_1, U_2 [м/с]	515, 404	498, 392	700, 399	499, 92	561, 142	616, 100	830, 131
P [кПа]	46	55	49	53	53	36	32

Отсутствие сравнения результатов расчета пристеночного течения с моделью Саркара обусловлено в первую очередь тем, что эта модель не предназначена к моделированию течений такого класса.

Для исследования поведения модели в свободных течениях использовались экспериментальные данные Гобела и Даттона [177]. В этих экспериментах исследовалось плоское смешение двух параллельных потоков газа, имеющих различные скорости и плотности. В таблице 9.4 представлены основные параметры этих потоков для 7 различных режимов.

Результаты расчета для свободных течений представлены на рис. 9.3 (для режима 4) и в таблицах 9.6 и 9.5 (для остальных режимов).

Анализируя эти результаты, можно сделать следующие выводы. Увеличение относительной скорости приводит к уменьшению сдвигового напряжения, к существенному уменьшению поперечных пульсаций скорости, и очень слабому изменению продольных пульсаций.

Это означает, что сжимаемость, в первую очередь, воздействует на пульсации скорости, направленные по нормали к линиям тока, а через величину $\widetilde{V}_n'^2$ - на сдвиговое напряжение; при этом воздействие на пульсации скорости вдоль линий тока невелико. Предложенная модель турбулентности хорошо отражает эти факты, а модели Менгера и Саркара - нет, поскольку являются полностью изотропными.

При этом очевидна тенденция к увеличению погрешности расчетов при ис-

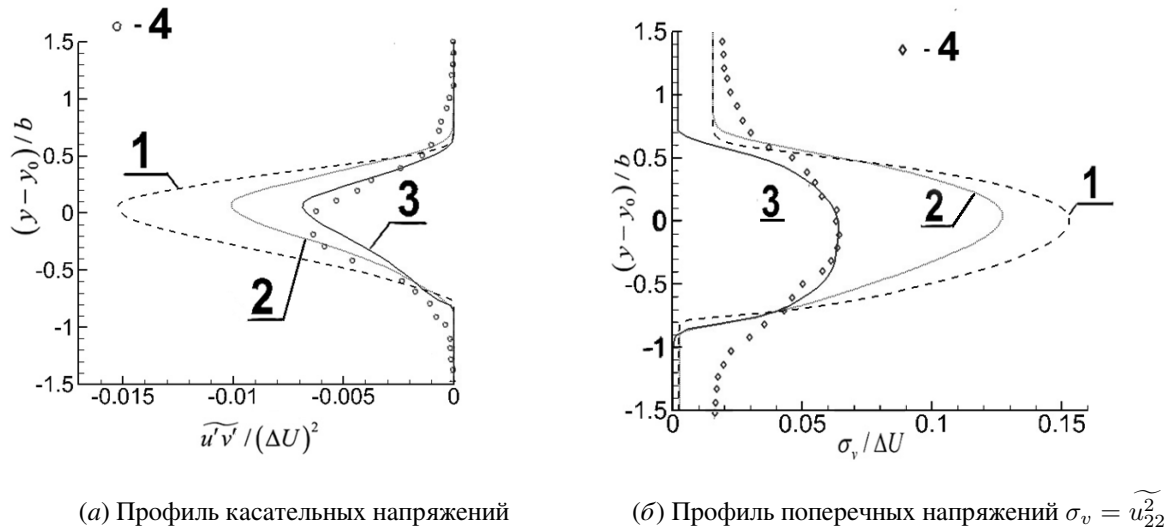


Рис. 9.3. Безразмерные профили основных компонент тензора напряжений Рейнольдса для плоского смещения двух параллельных потоков. 1 - результаты расчета с использованием модели SST, 2 - результаты расчета с использованием модели Саркара [163] 3 - результаты расчета с использованием представленной модели, 4 - результаты эксперимента

Таблица 9.5. Результаты расчета относительной высоты пика поперечных напряжений $\sigma_v / (\Delta U)^2$

Режим	1	1d	2	3	3r	4	5
$K - g - V_n$	0,159	0,15	0,1085	0,08	0,088	0,0066	0,06
SST	0,167	0,16	0,147	0,14	0,154	0,15	0,145
Sarkar	0,167	0,157	0,14	0,117	0,154	0,13	0,12
Эксперимент	0,15	0,15	0,099	0,078	0,086	0,0066	0,053

пользовании данных моделей с ростом относительной скорости ΔU (т.е. с увеличением значимости эффекта сжимаемости). Так, к примеру, для режимов 1 и 3 результаты расчета касательных напряжений с использованием модели Саркара дают удовлетворительный уровень совпадения с экспериментальными данными (в пределах 5%), в то время как для режимов 3r-5 отклонения от экспериментальных данных достигают почти 70% (см. таблицы 9.5-9.6).

Для исследования поведения модели $K - g - V_n$ при расчете пристеночных течений использовались экспериментальные данные из работы [178]. В этих экспериментах исследовалось пристеночное течение сжимаемых газов.

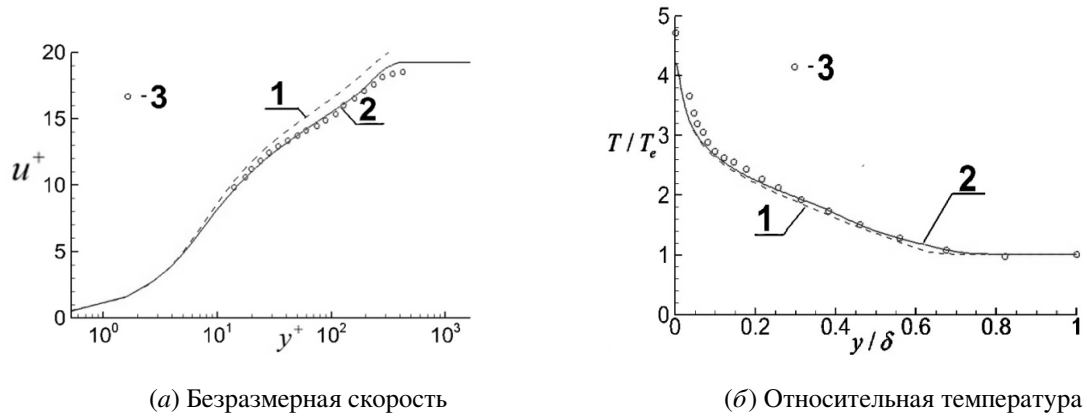


Рис. 9.4. Безразмерные профили скорости и температуры для режима (1). 1 - результаты расчета с использованием модели SST, 2 - результаты расчета с использованием представленной модели, 3 - результаты эксперимента

Таблица 9.6. Результаты расчета относительной высоты пика касательных напряжений $\widetilde{u'v'}/(\Delta U)^2$

Режим	1	1d	2	3	3r	4	5
$K - g - V_n$	0,0172	0,0173	0,095	0,068	0,0082	0,0068	0,0064
SST	0,0182	0,0164	0,014	0,012	0,0126	0,0151	0,014
Sarkar	0,0174	0,0153	0,0127	0,0086	0,009	0,011	0,009
Эксперимент	0,017	0,016	0,086	0,09	0,0073	0,0066	0,0058

Таблица 9.7. Параметры сжимаемого пограничного слоя в экспериментах [178]

Режим	1	2	3
Число Маха внешнего потока, M_e	4.544	2.244	5.29
Отношение температуры стенки к температуре восстановления, T_w/T_r	1.0	1.0	0.92

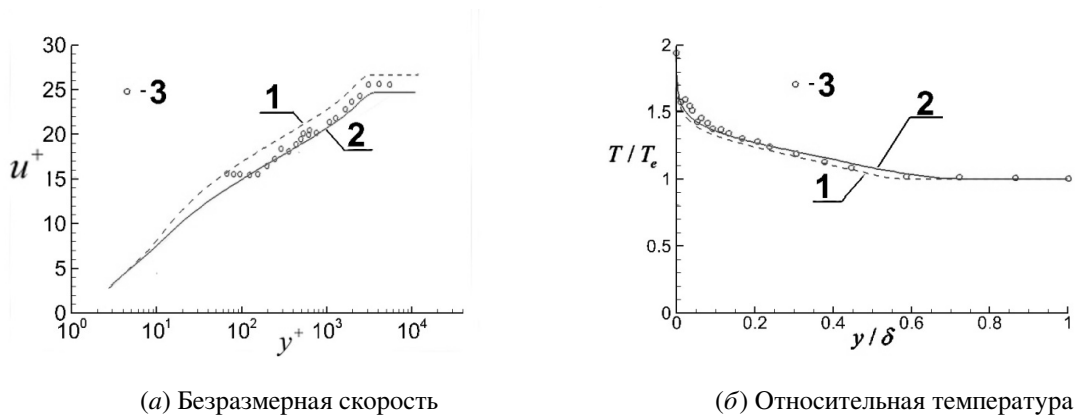


Рис. 9.5. Безразмерные профили скорости и температуры для режима (2). 1 - результаты расчета с использованием модели SST, 2 - результаты расчета с использованием представленной модели, 3 - результаты эксперимента

В таблице 9.7 представлены основные параметры экспериментов [178] для 3 режимов.

Результаты расчетов пристеночных течений сжимаемого газа для трех различных режимов представлены на рисунках 9.4-9.6.

Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что представленная модель позволяет получить более точное совпадение профилей параметров экспериментальными данными.

Для исследования поведения модели в условиях взаимодействия со скачком уплотнения использовались экспериментальные данные работы [179].

Вид экспериментальной установки показан на рисунке 9.7.

Результаты расчетов с использованием разработанной модели в сравнении с моделью SST и экспериментальными данными показаны на рисунке 9.8.

Как видно из рисунка, в расчетах с использованием модели SST высота пика

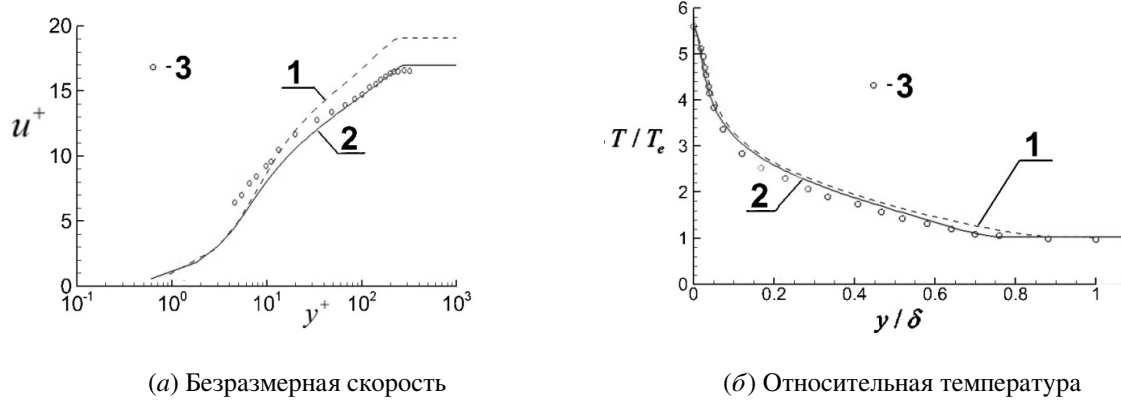


Рис. 9.6. Безразмерные профили скорости и температуры для режима (3). 1 - результаты расчета с использованием модели SST, 2 - результаты расчета с использованием представленной модели, 3 - результаты эксперимента

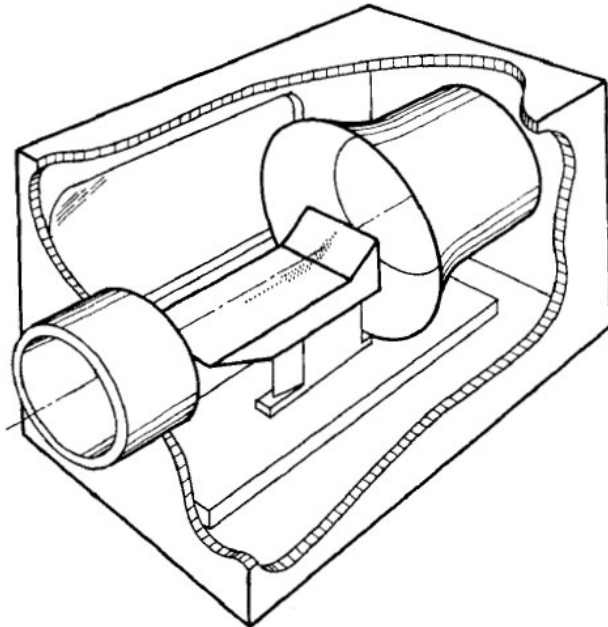


Рис. 9.7. Вид экспериментальной установки

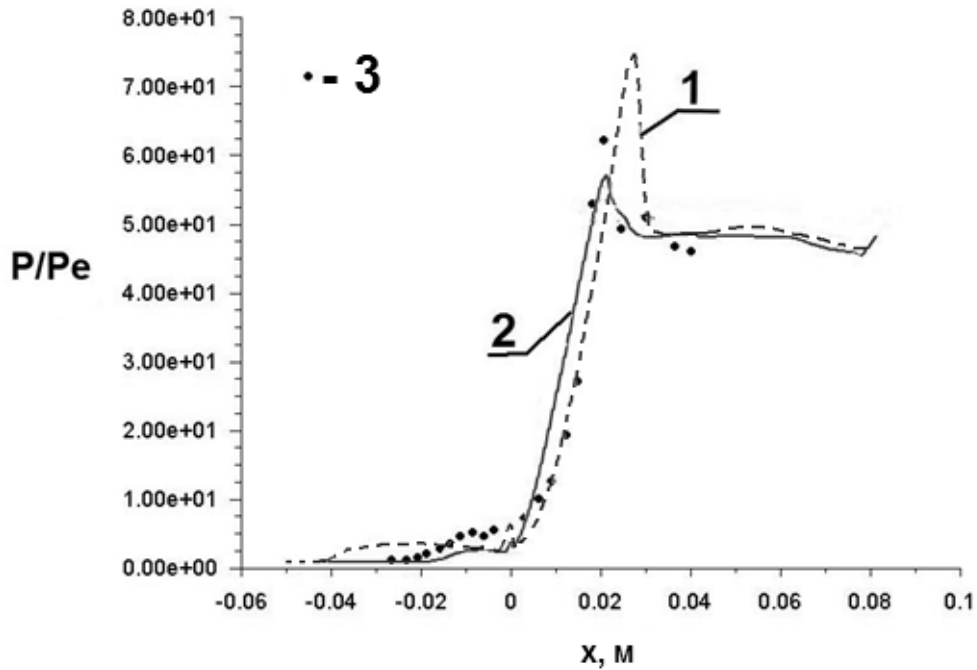


Рис. 9.8. Распределение статического давления по поверхности клина. 1 - расчет с использованием модели SST, 2 - расчет с использованием представленной модели, 3 - эксперимент [179]

давления и размеры отрывной зоны оказываются завышенными по сравнению с экспериментальными данными, в то время как расчеты с использованием модели $k - g - V_n$ показывают более точную сходимость с результатами эксперимента.

9.8. Выводы по главе

В главе детально рассмотрены подходы к моделированию турбулентных характеристик на основе осреднения Рейнольдса-Фавра.

Предложена модификация метода пристеночных функций с применением функции Ламберта, позволяющая сократить время счета. Затронута проблема влияния сжимаемости на турбулентные характеристики.

Сформулирована и валидирована трехпараметрическая модель турбулентности, учитывающая влияние неизотропности турбулентности и сжимаемости газа на турбулентные характеристики.

Глава 10

Подходы к моделированию ламинарно-турбулентного перехода

В данной главе рассмотрим основные подходы определению расположения ламинарно-турбулентного перехода и факторы, влияющие на это.

Материалы данной главы были опубликованы автором в [7, 23] - в сокращенном виде и в [20] - в расширенном виде.

10.1. Ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое

10.1.1. Механизмы перехода к турбулентности

Как известно, пограничный слой может находиться в различных состояниях, основные из них: ламинарное, турбулентное, отрывное (см. рисунок 10.1)

Феномен ламинарно-турбулентного перехода до сих пор до конца не изучен. Расширение знаний о ламинарно-турбулентном переходе в высокоскоростных пограничных слоях важно для разработки будущих летательных аппаратов, предназначенных для функционирования при таких скоростях полета.

Как известно, основной особенностью турбулентного течения является неупорядоченное пульсационное изменение мгновенных характеристик течения (таким как скорость, температура, давление и т.д.).

Повторимся, что первооткрывателем феномена турбулентности является известный английский физик Осборн Рейнольдс, в 1883 г. поставивший свой зна-

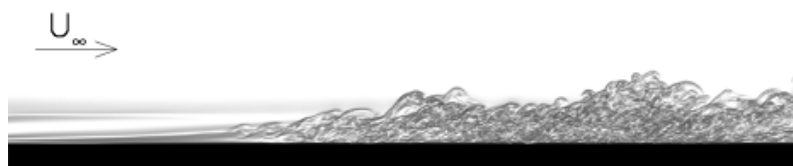


Рис. 10.1. Ламинарно-турбулентное течение

менитый опыт с течением струйки краски в потоке воды в прозрачной трубе. Рейнольдсом было установлено, что в случае, когда соотношение параметров скорости потока, плотности жидкости и диаметра трубы с молекулярной вязкостью потока (впоследствии названное числом Рейнольдса) превышает определенное пороговое значение, режим течения изменяется со слоистого (ламинарного) на турбулентный.

Данный переход происходит не мгновенно. Вначале в потоке появляются отдельные упорядоченные вихревые структуры, которые затем разрушаются на более мелкие вихри, в конечном итоге приводя к нарушению слоистого упорядоченного течения жидкости.

Современное представление о механизме ламинарно-турбулентного перехода (далее – ЛТ перехода) в окружающей среде с малыми начальными возмущениями показано на рисунке 10.2 [180].

Первая стадия (I) рассматриваемого процесса, называется восприимчивостью [181]. Возмущения в набегающем потоке, такие как вихри и звуковые волны, воздействуют на пограничный слой в виде устойчивых или неустойчивых флуктуаций. Вид и интенсивность этих возмущений определяют начальные условия возмущений в ПС, такие как амплитуда, частота и фаза, которые в итоге могут привести к разрушению ламинарного пограничного слоя. Восприимчивость рассматривает зарождение волн неустойчивости, а не их развитие.

В области восприимчивости происходит преобразование внешних возмущений в волны неустойчивости пограничного слоя. Самым распространенным видом таких волн являются волны Толмина-Шлихтинга – T-S волны (различные виды волн неустойчивости будут рассмотрены позднее).

Вторая стадия (II) процесса – линейный рост собственных мод волн неустойчивости пограничного слоя, которую можно представить в виде собственных решений гомогенных линеаризованных уравнений возмущений.

По мере роста амплитуды колебаний в ПС происходят трехмерные и нелинейные взаимодействия в форме вторичных неустойчивостей. Тогда волны рас-

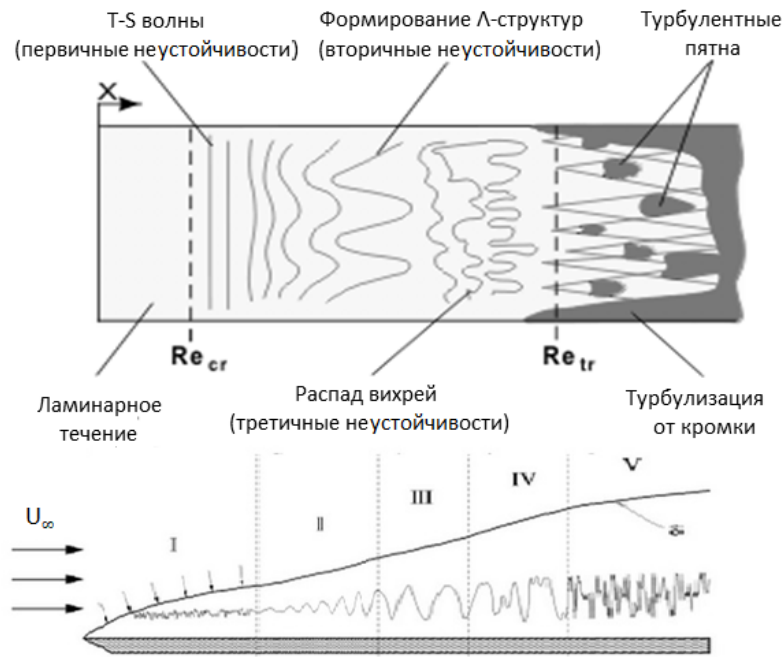


Рис. 10.2. Схема развития неустойчивостей и турбулентности в пограничном слое

пространяются с одинаковой фазовой скоростью, что позволяет осуществить передачу энергии от первичных (основных) к вторичным волнам, в результате чего происходит быстрый рост вторичных волн.

В зоне (III) механизмы вторичной неустойчивости генерируют косые (волны) моды посредством нелинейных взаимодействий.

В зоне третичной неустойчивости (IV) слои, связанные с мгновенными перегибами профилей скорости, порождают высокочастотные флуктуации (колебания, пики, полосчатые структуры) и области турбулентных пятен.

Накопление и объединение турбулентных пятен приводит к образованию области турбулентности (зона V).

Более общая схема сценариев перехода к турбулентности в ПС представлена на рисунке 10.3

На рисунке 10.3 амплитуда начальных возмущений растет слева направо. Первоначально такие возмущения могут быть слишком малы для измерения, и о них можно судить только по появившейся неустойчивости. Несколько различных неустойчивостей могут проявляться вместе или порознь; появление той или иной



Рис. 10.3. Механизмы перехода к турбулентности

неустойчивости обусловлено рядом факторов, таких как, например, скорость набегающего потока, кривизна стенки, шероховатость, наличие неровностей и т.д. Если колебания достаточно малы, то распад проходит по пути А, и процесс роста возмущений можно описать линейной теорией устойчивости основных мод. Такой рост неинтенсивен, происходит на большом удалении от начального участка, и на него может повлиять градиентом давления, вдувом с поверхности, градиентом температур и т.д. По мере роста амплитуды происходят трехмерные и нелинейные взаимодействия в форме вторичных неустойчивостей. В таких случаях рост происходит значительно быстрее, и происходит распад до турбулентности.

Поскольку поведение пограничного слоя в случае линейной устойчивости поддается расчету, то методы предсказания турбулентности часто предполагают, что процесс пойдет по пути А, и рассматривается только линейный рост. Такое допущение справедливо для течений с низкими возмущениями свободного потока и большим участком линейного роста, по сравнению с нелинейным.

Иногда возмущения потока настолько велики, что турбулентный режим наступает значительно раньше, минуя стадию линейного роста, через т.н. «байпасный» механизм перехода [182]. Это соответствует пути Е. Исторически исследовались только два сценария перехода к турбулентности: А и Е. Только недавно, результатом большого объема работ, стало лучшее понимание путей, согласно которым происходит процесс ламинарно-турбулентного перехода.

Стадия нестационарного роста происходит при взаимодействии волн неустойчивости.

Изыскания в этой области показали, что через нестационарный рост при соответствующих начальных условиях возможно достижение больших амплитуд. Такие начальные условия зависят от восприимчивости ПС. В зависимости от амплитуды, нестационарный рост может привести к модуляции двумерных волн (путь В), возмущению начального состояния до уровня вторичных (нелинейных) неустойчивостей (путь С) и переходу по «байпасному» механизму – путь D).

10.1.2. Виды волн неустойчивости в пограничном слое

В области восприимчивости происходит преобразование внешних возмущений в волны неустойчивости пограничного слоя, такие как:

Первая мода неустойчивости – волны Толмина-Шлихтинга (Т-S), представляющих собой вязкую неустойчивость, порождающую низкочастотные вихревые возмущения, наиболее неустойчивы в виде двумерных возмущений.

Вторая мода или моды Мака. Возмущения второй моды свойственны сжимаемым высокоскоростным ($M > 3$) пограничным слоям. Такие неустойчивости порождают высокочастотные акустические возмущения, которые растут быстрее Т-S волн. Вторая мода является доминирующим механизмом перехода высокоскоростного течения при отсутствии сильных поперечных течений, вихрей Гёртлера и байпасного перехода.

Поперечная неустойчивость – возникает в поперечных течениях, когда при-

существует перегиб профиля скорости. Примером такого течения может служить трехмерный пограничный слой на стреловидном крыле. Поперечной неустойчивости свойственны нелинейные взаимодействия. Наиболее быстро растущими, оказывающими сильное воздействие на устойчивость пограничного слоя принято считать поперечную стоячую волну.

Неустойчивость Гёртлера – это продольные встречно-вращающиеся вихри, являются довольно распространенным явлением в течении Прандтля-Майера в ПС. Они могут возникать как естественно, когда линии тока испытывают кривизну, так и искусственным путем, за расположенными в течении препятствиями. Основной неустойчивостью, приводящей к продольным встречно-вращающимся вихрям, является центробежная неустойчивость, когда центробежная сила превосходит радиальный градиент давления [183].

Несколько различных неустойчивостей могут проявляться вместе или порознь; появление той или иной неустойчивости обусловлено рядом факторов, таких как, например, скорость набегающего потока, кривизна стенки, шероховатость, наличие неровностей и т.д. Если колебания в ПС достаточно малы, то распад проходит по пути А, и процесс роста возмущений можно описать линейной теорией устойчивости основных мод. Такой рост неинтенсивен, происходит на большом удалении от начального участка, и на него можно повлиять изменением градиента давления, градиента температур, вдувом с поверхности в ПС и т.д.

10.2. Подходы к определению устойчивости пограничного слоя

10.2.1. Методы теории устойчивости

Линейная теория устойчивости

Для получения законов распространения неустойчивостей в пограничном слое все физические величины, характеризующие состояние потока, раскладывают на две составляющие – осредненную и пульсационную:

$$q = \bar{q}(\mathbf{x}, t) + q'(\mathbf{x}, t) \quad (10.1)$$

Подставляя величины в виде (10.1) в уравнения Навье-Стокса, можно получить точные уравнения для пульсаций. Для несжимаемой жидкости данные уравнения будут иметь вид:

$$\nabla \mathbf{u}' = 0 \quad (10.2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t} - \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}' + (\mathbf{u}' \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \mathbf{u}' + \nabla p' = (\mathbf{u}' \cdot \nabla) \mathbf{u}' \quad (10.3)$$

При невысоком уровне возмущений, правую часть уравнения (10.3) можно считать равной нулю. В этом случае уравнения (10.2)-(10.3) становятся линейными.

Решения этих уравнений ищутся в волновой форме (форме нормальных мод). Так для параллельного течения ($\bar{\mathbf{u}} = [u, 0, w]^T$) пограничного слоя решение выглядит следующим образом:

$$\mathbf{q}' = \hat{\mathbf{q}}(y) \exp [i(\alpha x + \beta z - \omega t)] \quad (10.4)$$

где $\mathbf{q}' = [u', v', w', p']^T$ - вектор переменных, описывающих течение, а $\hat{\mathbf{q}}(y) = [\hat{u}(y), \hat{v}(y), \hat{w}(y), \hat{p}(y)]^T$ - вектор функций формы, описывающих форму профилей величин (амплитуду) по оси, перпендикулярной обтекаемой плоскости (оси y), α и β - волновые числа, ω - частота (в общем случае α , β и ω - комплексные).

Как видно из данного уравнения уровень возмущений будет неограниченно расти в случае, когда $Im(\alpha) < 0$, $Im(\beta) < 0$ или $Im(\omega) > 0$.

При этом в случае наличия ярко выраженного направления движения потока (т.е. достаточно большой по величине средней скорости потока), все возмущения сносятся вниз по потоку, и имеет место два вида неустойчивости (неустойчивостей) потока.

В случае, когда, несмотря на снос возмущений вниз по потоку, в любой фиксированной точке пространства при сколь угодно малых начальных возмущениях их амплитуда неограниченно возрастает с течением времени, имеет место *абсолютная неустойчивость*.

В случае же, когда возмущения сносятся вниз по потоку так быстро, что в фиксированной точке пространства при $t \rightarrow \infty$ интенсивность возмущений стремится к нулю, имеет место *конвективная неустойчивость*.

После подстановки (10.4) в линеаризованную систему уравнений (10.2)-(10.3) получим уравнения линейной теории устойчивости (LST – Linear Stability Theory):

$$L\hat{q} = 0 \quad (10.5)$$

Причем дифференциальный оператор L включает в себя производные только по координате y . Применяя различные преобразования к оператору L можно получить различные формы данной системы, например систему уравнений, состоящую из уравнений Орра-Зоммерфельда и Сквайра [184] (уравнения для возмущения скорости и завихренности этого возмущения соответственно) или уравнение Орра-Зоммерфельда отдельно.

Решение уравнений LST обычно сводят к нахождению зависимостей $\omega(Re)$ или $\alpha(Re)$ (см. рисунок 10.4). На данной диаграмме кривая, отделяющая заштрихованную область, называется *нейтральной кривой*. На данной кривой $Im(\alpha) = 0$ или $Im(\omega) = 0$. Заштрихованная область представляет из себя область неустойчивости, а вся остальная область – область устойчивости (все возмущения, расположенные в данной области, - затухают).

В случае рассмотрения конвективной неустойчивости возмущения возрастают только с ростом координаты x вниз по потоку. В этом случае разумно поставить вопрос следующим образом: необходимо найти зависимость $Im(\alpha)$ (и/или $Im(\beta)$) от частоты возмущения и числа Рейнольдса. Для $Im(\alpha) < 0$ имеет место неустойчивое течение, а для $Im(\alpha) > 0$ – устойчивое. Граница двух областей

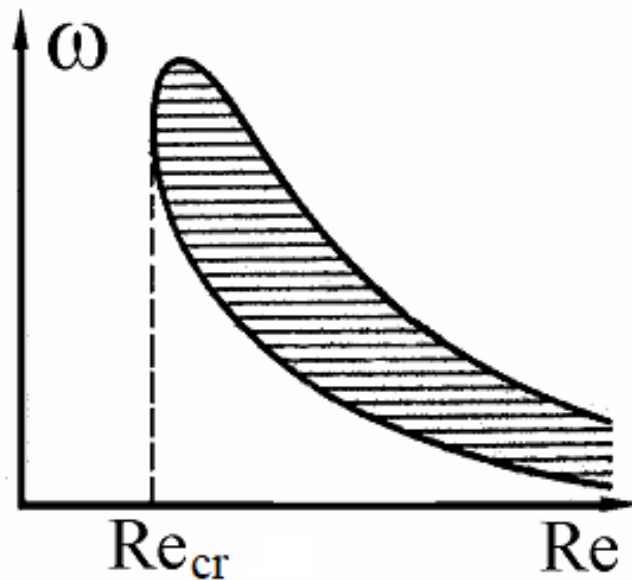


Рис. 10.4. Общий вид нейтральной кривой

определяется нейтральной кривой, чье уравнение имеет вид:

$$\text{Im} [\alpha (\omega, Re)] = 0 \quad (10.6)$$

Обобщая, можно сказать что существует три основных подхода к рассмотрению неустойчивости течения: временная теория, рассматривающая усиление возмущений во времени (волновые числа α и β – действительные числа, а частота ω – комплексная), пространственная теория, рассматривающая рост возмущений в пространстве (волновые числа α и β – комплексные числа, а частота ω – действительная) и пространственно-временная теория (волновые числа α, β и частота ω – комплексные числа),

Параболизированные уравнения устойчивости (PSE)

В общем случае возмущения, возникающие в потоке, нельзя считать малыми. Таким образом, просто приравнять к нулю правую часть уравнения (10.3), вообще говоря, оказывается не всегда корректным.

При этом решение уравнений (10.2)-(10.3) напрямую зачастую оказывается невыполнимым по причине необходимости слишком больших вычислительных

мощностей (по сути решение системы (10.2)-(10.3) напрямую эквивалентно прямому численному решению уравнений Навье-Стокса).

Однако существует «промежуточное» решение, которое с одной стороны не настолько требовательно к вычислительным ресурсам, а с другой стороны лишено многих недостатков, свойственных линейной теории.

Этот подход получил название параболизированных уравнений устойчивости (Parabolized stability equations – PSE).

Один из вариантов уравнений метода PSE приведен ниже.

$$L_{PSE}\hat{\mathbf{q}} = 0 \quad (10.7)$$

где $L_{PSE} = L_0 + L_1 + L_2 \frac{\partial}{\partial z} + i \frac{d\beta}{dz} L_3$ - оператор параболизированной системы;

$$L_0 = \begin{bmatrix} L - \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + i\omega & -\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} & 0 & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} & L - \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + i\omega & 0 & -\frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial \bar{w}}{\partial x} & -\frac{\partial \bar{w}}{\partial y} & L + i\omega & -i\beta \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & i\beta & 0 \end{bmatrix}; L_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\partial \bar{w}}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$L_2 = \begin{bmatrix} -\bar{w} + \frac{2i\beta}{Re} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\bar{w} + \frac{2i\beta}{Re} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\bar{w} + \frac{2i\beta}{Re} & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -\bar{w} + \frac{2i\beta}{Re} \end{bmatrix}; L_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$L = \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \beta^2 \right\} - \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial}{\partial y} - i\beta \bar{w};$$

Описанная система уравнений позволяет рассчитывать поведение возникающих в потоке неустойчивостей не только для параллельных потоков, но и для систем со сложной геометрической конфигурацией (например - обтекание лопаток в лопаточных машинах).

e^N -метод

Необходимо отметить, что описанные выше теории устойчивости (LST и PSE) хотя и описывают поведение волн неустойчивости в потоке, но не определяют точку перехода.

О фактическом разрушении ламинарного течения и перехода к турбулентному режиму на сегодняшний день обычно судят с применением полуэмпирического e^N -метода.

Данный метод заключается в следующем.

Считается, что переход к турбулентности происходит в момент, когда амплитуда волн неустойчивости возрастает в e^N раз по сравнению с начальной нейтральной точкой пограничного слоя (первой точкой, в которой $Im(\alpha) = 0$).

Можно показать, что для пограничного слоя на плоской пластине:

$$N = \ln \left(\frac{A_{tr}}{A_0} \right) = -2 \int_{R_0}^R Im(\alpha) dR \quad (10.8)$$

где $R = \sqrt{Re_x} = \sqrt{\frac{\rho u x}{\mu}}$.

Исходя из эмпирических данных, турбулентность возникает при $N = 7 \dots 9$ [6].

У описанного метода существует достаточно серьезный недостаток – он применим не для всех существующих (изученных) механизмов разрушения ламинарного слоя. В частности – с его помощью невозможно предсказать ламинарно-турбулентный переход при байпасном механизме.

10.2.2. Замечание о нестационарном росте

Изложенные выше методы теории устойчивости рассматривают условия усиления или затухания спонтанных волн неустойчивости малой амплитуды. Процесс увеличения амплитуды спонтанно возникших волн неустойчивости и представляет собой «естественный» механизм ламинарно-турбулентного перехода. Он, как уже

отмечалось ранее, осуществляется только в случае, когда степень турбулентности внешнего потока мала.

Между тем на практике в основном встречаются случаи, когда степень турбулентности внешнего потока достаточно высока.

В таких случаях, описанные выше подходы теории устойчивости не могут быть применены напрямую. Математически это связано с тем, что теория устойчивости рассматривает усиление вихрей в асимптотическом приближении, переходя от задачи с начальными и граничными условиями к задаче поиска собственных значений [185].

Рассматривая течение в свете теории устойчивости, мы не рассматриваем непосредственную динамику системы, мы судим о *возможности* системы поддерживать неограниченный рост возмущений.

Между тем, такая постановка задачи в общем случае не вполне математически корректна, когда мы говорим о системе, описываемой уравнениями Навье-Стокса (по причине математических свойств операторов, этой системы). Это может приводить к тому, что некоторое внешнее возмущение, которое в соответствии с асимптотическим анализом системы должно затухнуть при $t \rightarrow \infty$, на самом деле в локальный момент времени испытывает сильный рост, чьим результатом впоследствии является переход к турбулентности.

Иначе говоря, существуют случаи, когда течение, в котором с точки зрения теории устойчивости, внешние возмущения должны затухать с течением времени, может перейти к турбулентности за счет *нестационарного роста* некоторого возмущения.

Данные рассуждения были проведены с точки зрения пространственной теории устойчивости. Аналогичные выводы можно сделать и относительно временной теории (см. раздел 10.2.1). То есть в общем случае концепция нестационарного роста подразумевает под собой *локальное* развитие возмущений, в противоположность теории устойчивости, рассматривающей принципиальную возможность развития возмущений, выделяя случаи экспоненциального роста возмущений или

же их экспоненциального затухания в некотором пределе.

Для того, чтобы математически проиллюстрировать это, запишем систему (10.5) в форме уравнений Орра-Зоммерфельда и Сквайра:

$$\begin{bmatrix} L & 0 \\ C & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{\Omega} \end{bmatrix} = 0 \quad (10.9)$$

где $\hat{\Omega}$ – завихренность возмущения скорости, $L = S\Delta - i\alpha \frac{d^2 \bar{u}}{dy^2}$ – оператор Орра-Зоммерфельда, $S = -i\omega + i\alpha \bar{u} - \frac{\Delta}{Re}$ – оператор Сквайра, $C = i\beta \frac{d\bar{u}}{dy}$ – оператор сопряжения, $\Delta = \frac{d^2}{dy^2} - (\alpha^2 + \beta^2)$ – оператор Лапласа.

Как видно из (10.9), при $\beta = 0$ можно сказать, что уравнения, входящие в систему (10.9), независимы. Их собственными модами являются моды Орра-Зоммерфельда (в двухмерной постановке – волны Толмина-Шлихтинга) и моды Сквайра. Моды Орра-Зоммерфельда являются решениями уравнения Орра-Зоммерфельда (уравнения для возмущения скорости) и уравнения Сквайра (уравнения завихренности), а моды Сквайра – решение уравнения Сквайра при $\hat{u} = 0$ или $\beta = 0$.

Во всех же случаях, когда $\beta \neq 0$, то и оператор $C \neq 0$, т.е. оператор системы уравнений Навье-Стокса – несамосопряженный. Это означает, что моды Орра-Зоммерфельда и моды Сквайра в условиях неплоского течения способны взаимодействовать между собой.

При этом можно показать, что для случая, когда моды Орра-Зоммерфельда и моды Сквайра по отдельности, безусловно, затухают, их *нестационарное* взаимодействие может привести к существенному росту амплитуды возмущения, что может привести к ламинарно-турбулентному переходу.

Для анализа нестационарного роста обычно применяют понятие фактора усиления (фактора роста):

$$G = \frac{E}{E_0} \quad (10.10)$$

где E – норма энергии, определяемая по разному для разного типа течений, индекс 0 означает начальное значение.

К примеру, для несжимаемого потока данная норма представляет собой просто интеграл от кинетической энергии возмущений:

$$E = \int_0^{\infty} (u'^2 + v'^2 + w'^2) dy \quad (10.11)$$

Анализ нестационарного роста состоит в поиске так называемых оптимальных возмущений, для которых фактор усиления (10.10) максимален. Это позволяет определить верхнюю границу усиления возмущений в потоке и понять, какой тип возмущений наиболее подвержен росту в конкретном типе течения.

Часто с нестационарным ростом связывают ламинарно-турбулентный переход, вызванный шероховатостью поверхности, однако единой теории ламинарно-турбулентного перехода, вызванного шероховатостью или отдельными ее элементами, еще не создано.

10.2.3. Инженерно-практические методы

Описанные выше методы, основанные на анализе уравнений для волн неустойчивости, дают хорошие результаты и совпадение с экспериментальными данными, однако применение их в инженерной практике часто оказывается затруднительным по нескольким причинам.

Во-первых, применение методов теории устойчивости, вообще говоря, требует специальной подготовки и хорошего владения соответствующим физико-математическим аппаратом.

Во-вторых, применение этих методов для течений со сложной геометрической конфигурацией подчас довольно затруднительно.

В-третьих, учитывая специфику описанных методов, возможность их включения в качестве модулей в современные программные комплексы вычислительной гидродинамики на современном этапе представляется маловероятной.

Более практичными (с инженерной точки зрения) представляются подходы к определению устойчивости ламинарного течения, основанные на численном

моделировании, такие как – прямое численное моделирование, методики типа Лэнгтри-Ментера [186] и $k - k_L$ -модели перехода.

Прямое численное моделирование

Современное развитие вычислительных мощностей и алгоритмов вычислений позволяет численно решать уравнения Навье-Стокса напрямую, без каких бы то ни было упрощений.

Сегодня считается, что достоверность результатов, полученных с помощью прямого численного моделирования (Direct Numerical Simulation – DNS) сопоставима с достоверностью результатов экспериментальных исследований.

Более того – некоторые результаты исследований, полученные с DNS, на сегодняшнем уровне развития техники измерений получить экспериментальным путем не представляется возможным.

Главным недостатком DNS-подхода является чрезмерная требовательность к вычислительным мощностям. Это связано в первую очередь с необходимостью моделирования вихревых структур на всех масштабах, начиная от колмогоровского.

Было показано [187], что требования к вычислительным мощностям при прямом численном моделировании возрастают пропорционально кубу числа Рейнольдса.

Обобщая, можно сказать, что за DNS – будущее вычислительной гидродинамики, а на данном этапе данный подход является источником ценных данных, достоверность которых сопоставима с результатами экспериментальных исследований.

Пережимаемость. Подход Лэнгтри-Ментера

В современных методах расчета турбулентных течений одну из центральных ролей играют уравнения Навье-Стокса, осредненные по Рейнольдсу (для сжимае-

мых течений – по Фавру).

Данные уравнения заложены в основу современных инженерных расчетных программ (таких как, например, Ansys CFX, Ansys Fluent, Star-CD, FlowVision, ЛОГОС и др.).

Когда турбулентные пульсации стремятся к нулю, данные уравнения переходят в обыкновенные уравнения Навье-Стокса (действительно – при $q' \rightarrow 0$, $q \rightarrow \bar{q}$).

Для перехода между моделью ламинарного потока ($q \rightarrow \bar{q}$) и турбулентного ($q = \bar{q} + q'$) оказывается удобным ввести т.н. фактор перемежаемости, который представляет собой отношение времен, в течение которых поток в данной точке находится в турбулентном и ламинарном режиме течения [188]:

$$\gamma = \frac{\tau_t}{\tau_L + \tau_t} \quad (10.12)$$

где τ_L - время, в течение которого поток в данной точке находится в ламинарном режиме течения, τ_t - время, в течение которого поток в данной точке находится в турбулентном режиме течения.

Используя понятие перемежаемости и гипотезу Буссинеска для турбулентных напряжений, можно определить средний коэффициент вязкости μ_{eff} в данной точке потока:

$$\mu_{eff} = \mu + (1 - \gamma) \mu_{nt} + \gamma \mu_T \quad (10.13)$$

где индекс T означает турбулентный режим, а nt относится к не турбулентным (переходным) возмущениям.

Или же можно наложить соответствующее ограничение на источник турбулентности в уравнении для переноса кинетической энергии турбулентности (что аналогичным образом отразится на коэффициенте вязкости).

Главным недостатком данного подхода является тот факт, что для определения фактора перемежаемости γ не представляется возможным строго вывести

соответствующее уравнение.

Можно лишь предположить, что такое уравнение должно иметь стандартную форму уравнения переноса с источником членом особого вида:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\gamma) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho\bar{u}_j\gamma) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\gamma} \right) \frac{\partial \gamma}{\partial x_j} \right] + F_\gamma \quad (10.14)$$

где σ_γ – число Прандтля-Шмидта для фактора перемежаемости.

Граничные условия, рекомендованные Менгером:

- на стенке $\frac{\partial \gamma}{\partial n} = 0$ (n - нормаль к поверхности стенки);
- на входе - $\gamma = 1$.

Условие на входе было выбрано «в основном из соображений численной стабильности» [189]. Физический смысл такого граничного условия можно обосновать в частности рассматривая байпасный механизм перехода к турбулентности, когда возмущения в пограничный слой вносятся из внешнего потока.

Отметим, что фактор перемежаемости, хотя и является «индикатором» режима течения (т.е. равняется 0 в ламинарном потоке и 1 в турбулентном), он никак не регламентирует реальный уровень турбулентности потока. Так, например, если установить в качестве граничного условия на входе в расчетную область значение кинетической энергии турбулентности $k \rightarrow 0$, то и уровень турбулентности внешнего потока будет стремиться к 0, несмотря на установленное значение фактора перемежаемости $\gamma = 1$.

Форма источникового члена F_γ зависит от версии модели (Менгером и др. было предложено несколько модификаций – см., напр. [189–191]). Она фактически определяет поведение модели.

Очевидно, что определить вид источника практичнее всего, используя обобщенные экспериментальные данные по ламинарно-турбулентному переходу в зависимости от локальных переменных. Вкупе с выбранной формой уравнения переноса для γ это избавляет нас от необходимости определения конкретного вида неустойчивости, вызывающей переход.

Главной проблемой здесь является то, что основное большинство экспериментальных данных по ламинарно-турбулентному переходу получены в виде зависимостей для интегральных характеристик, а именно – для числа Рейнольдса Re_{θ_t} , при котором происходит переход к турбулентному режиму течения от уровня турбулентности во внешнем потоке Tu , параметра градиента давления и т.п.

$$Re_{\theta_t} = \frac{\rho U_{\infty} \theta_t}{\mu} = f(Tu \dots)_{\infty} \quad (10.15)$$

где θ_t – толщина пограничного слоя, при которой происходит смена режима течения (является интегральной характеристикой пограничного слоя, не может быть определено в точке), $Tu = \left(\sqrt{2/3k}/u \right) \cdot 100\%$.

Ментером и Лэнгтри было предложено следующее решение данной проблемы.

Вместо интегрального числа Рейнольдса Re_{θ} было предложено использовать т.н. вихревое число Рейнольдса Re_v , вычисляемое исключительно с помощью локальных параметров потока:

$$Re_v = \frac{\rho y^2 S}{\mu} \quad (10.16)$$

где y – расстояние от стенки, $S = \sqrt{S_{ij} S_{ij}}$ – инвариант тензора скоростей деформации $S_{ij} = 1/2 (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$ (в некоторых работах вместо него применяется $\Omega = \sqrt{\Omega_{ij} \Omega_{ij}}$ – инвариант тензора завихренности $\Omega_{ij} = 1/2 (\partial u_i / \partial x_j - \partial u_j / \partial x_i)$).

Число Re_v имеет максимум примерно в середине ламинарного пограничного слоя, пропорциональный Re_{θ} .

Ментером и др. [186] было показано, что для ламинарного пограничного слоя без градиента давления:

$$Re_{\theta} = \frac{Re_{v \max}}{2.193} \quad (10.17)$$

При этом доказывалось, что для расчетов ламинарно-турбулентного перехода данная зависимость может применяться без изменений и в случае более

сложных течений.

Итак, интегральное число Рейнольдса Re_θ было заменено на локальное число Re_v . Тем не менее, число Рейнольдса перехода $Re_{\theta t}$ является функцией интегральных параметров внешнего потока (таких как Tu_∞).

Таким образом, требуется введение локального аналога числа $Re_{\theta t}$.

С этой целью Менгер и др. [186, 189, 192] вводят некоторое модифицированное локальное число $\widetilde{Re}_{\theta t}$. Для данного числа искусственно формулируется уравнение переноса:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \widetilde{Re}_{\theta t}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \widetilde{Re}_{\theta t}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sigma_{\theta t} (\mu + \mu_T) \frac{\partial \widetilde{Re}_{\theta t}}{\partial x_j} \right] + P_{\theta t} \quad (10.18)$$

Причем, согласно [192], путем численных экспериментов была получена эмпирическая зависимость между $\widetilde{Re}_{\theta t}$ и интегральным критическим числом Рейнольдса:

$$Re_{\theta c} = \begin{cases} \sum_{n=0}^4 A_n \widetilde{Re}_{\theta t}^n; & \widetilde{Re}_{\theta t} \leq 1870 \\ 0,518 \widetilde{Re}_{\theta t} + 308.23; & \widetilde{Re}_{\theta t} > 1870 \end{cases} \quad (10.19)$$

где $A = \begin{pmatrix} -396,035 \cdot 10^{-2} \\ 101,207 \cdot 10^{-2} \\ -868,230 \cdot 10^{-6} \\ 696,506 \cdot 10^{-9} \\ -174,105 \cdot 10^{-12} \end{pmatrix}$.

Для полноты изложения приведем вид источниковых членов согласно [191] (последний из ныне опубликованных вариантов модели).

Источник в уравнении (10.14):

$$F_\gamma = P_\gamma - E_\gamma \quad (10.20)$$

где P_γ – «турбулентный» источник (отвечает за прирост фактора перемежаемости);

E_γ – источник реламинаризации (отвечает за убыль фактора перемежаемости по причине эффекта реламинаризации).

$$P_\gamma = F_{length} \cdot c_{a1} \rho S \sqrt{\gamma F_{onset}} (1 - c_{e1} \gamma) \quad (10.21)$$

где $S = \sqrt{S_{ij} S_{ij}}$ – инвариант тензора скоростей деформации.

$$E_\gamma = c_{a2} \rho \Omega \gamma F_{turb} (c_{e2} \gamma - 1) \quad (10.22)$$

где $\Omega = \sqrt{\Omega_{ij} \Omega_{ij}}$ – инвариант тензора скоростей деформации.

$$F_{onset1} = \frac{Re_v}{2,193 Re_{\theta c}} \quad (10.23)$$

$$F_{onset2} = \min(\max(F_{onset1}; F_{onset1}^4); 2) \quad (10.24)$$

$$R_T = \frac{\rho k}{\mu \omega} \quad (10.25)$$

$$F_{onset3} = \max\left(1 - \left(\frac{R_T}{2,5}\right); 0\right) \quad (10.26)$$

$$F_{onset} = \max(F_{onset2} - F_{onset3}; 0) \quad (10.27)$$

$$F_{turb} = \exp\left(-\frac{R_T^4}{256}\right) \quad (10.28)$$

$$F_{length1} = \begin{cases} \sum_{n=0}^2 B_n \widetilde{Re}_{\theta t}^n; & \widetilde{Re}_{\theta t} < 400 \\ \sum_{n=0}^3 C_n \widetilde{Re}_{\theta t}^n; & 400 \leq \widetilde{Re}_{\theta t} < 596 \\ 0,6788 - 3 \cdot 10^{-4} \widetilde{Re}_{\theta t}; & 596 \leq \widetilde{Re}_{\theta t} < 1200 \\ 0,3188; & 1200 \leq \widetilde{Re}_{\theta t} \end{cases} \quad (10.29)$$

$$\text{где } B = \begin{pmatrix} 398,189 \cdot 10^{-1} \\ -119,270 \cdot 10^{-4} \\ -132,567 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix}; \quad C = \begin{pmatrix} 263,404 \\ -123,939 \cdot 10^{-2} \\ 194,548 \cdot 10^{-5} \\ -101,695 \cdot 10^{-8} \end{pmatrix}.$$

$$F_{sublayer} = \exp\left[-\left(\frac{R_\omega}{0,4}\right)^2\right] \quad (10.30)$$

$$R_\omega = \frac{\rho y^2 \omega}{500 \mu} \quad (10.31)$$

$$F_{length} = F_{length1} (1 - F_{sublayer}) + 40 \cdot F_{sublayer} \quad (10.32)$$

Константы модели для уравнения (10.14):

$$\sigma_\gamma = 1; \quad c_{e1} = 1; \quad c_{a1} = 2; \quad c_{e2} = 50; \quad c_{a2} = 0,06 \quad (10.33)$$

Источник в уравнении (10.18):

$$P_{\theta t} = c_{\theta t} \frac{\rho}{t} \left(Re_{\theta t} - \widetilde{Re}_{\theta t} \right) (1 - F_{\theta t}) \quad (10.34)$$

где $t = \frac{500\mu}{\rho U^2}$ – масштаб времени, $U = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ – величина вектора скорости, а $Re_{\theta t}$ – определяется по эмпирическим зависимостям в зависимости от градиента давления и степени турбулизации потока (см. ниже).

$$F_{\theta t} = \min \left[\max \left(F_{wake} \cdot e^{-(y/\delta)^4}; 1 - \left(\frac{\gamma - 1/c_{e2}}{1 - 1/c_{e2}} \right) \right); 1 \right] \quad (10.35)$$

где

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{50\Omega y}{U} \cdot \delta_{BL}; \quad \delta_{BL} = \frac{15}{2} \theta_{BL}; \quad \theta_{BL} = \frac{\widetilde{Re}_{\theta t} \mu}{\rho U}; \\ F_{wake} &= \exp \left[- \left(\frac{Re_\omega}{10^5} \right)^2 \right]; \quad Re_\omega = \frac{\rho \omega y^2}{\mu} \end{aligned} \quad (10.36)$$

Эмпирическая зависимость для $Re_{\theta t}$:

$$\begin{aligned} Re_{\theta t} &= E(Tu) \cdot F(\lambda_\theta, Tu) \\ E(Tu) &= \begin{cases} 1173,51 - 589,428Tu + \frac{0,2196}{Tu^2}; & Tu \leq 1,3 \\ 331,50 [Tu - 0,5658]^{-0,671}; & Tu > 1,3 \end{cases} \\ F(\lambda_\theta, Tu) &= \begin{cases} 1 - [-12,986\lambda_\theta - 123,66\lambda_\theta^2 - 405,689\lambda_\theta^3] e^{-[3Tu/2]^{3/2}}; & \lambda_\theta \leq 0 \\ 1 + 0,275 [1 - e^{-35\lambda_\theta}] e^{-2Tu}; & \lambda_\theta > 0 \end{cases} \\ \lambda_\theta &= \frac{\rho \theta^2}{\mu} \frac{dU}{ds} \end{aligned} \quad (10.37)$$

где s – направление линий тока, Tu – степень турбулизации потока, измеренная в процентах.

Причем данная эмпирическая зависимость фактически представляет собой нелинейное уравнение для θ , которое решается итерационно (θ представлено в левой части уравнения входящим в число $Re_{\theta t}$, а в правой – входящим в параметр градиента давления λ_θ).

Константы модели для уравнения (10.18):

$$c_{\theta t} = 0,03; \quad \sigma_{\theta t} = 2 \quad (10.38)$$

Модель применима в следующем диапазоне параметров:

$$-0,1 \leq \lambda_{\theta} \leq 0,1; \quad Tu \geq 2,7\%; \quad Re_{\theta t} \geq 20 \quad (10.39)$$

По утверждению авторов [57], для сильно сжимаемых течений модель неприменима.

Модель $k - k_L$

Описанный выше подход Менгера-Лэнгтри можно охарактеризовать как чисто феноменологический, основанный лишь на данных многочисленных экспериментов.

Иной подход, основанный на попытке рассмотреть процессы, происходящие при ламинарно-турбулентном переходе, с точки зрения переноса энергии возмущений, представлен авторами [193].

Главная идея состоит в разложении энергии флуктуаций k_{TOT} в потоке на две составляющие:

$$k_{TOT} = k_L + k_T \quad (10.40)$$

где k_L представляет собой кинетическую энергию нетурбулентных пульсаций («ламинарную» энергию), а k_T – кинетическую энергию турбулентности.

Из физических соображений, нетурбулентные пульсации более крупномасштабны, в то время как турбулентные пульсации – мелкомасштабны. Коэффициенты переноса: для нетурбулентных пульсаций – молекулярная вязкость, для турбулентных пульсаций – молекулярная вязкость и турбулентная вязкость.

Модель состоит из трех уравнений – для k_L , k_T и скорости диссипации вихрей ω .

$$\frac{D(\rho k_T)}{Dt} = \rho(P_{k_T} + R_{BP} + R_{NAT} - \omega k_T - D_T) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\rho \alpha_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k_T}{\partial x_j} \right] \quad (10.41)$$

$$\frac{D(\rho k_L)}{Dt} = \rho(P_{k_L} - R_{BP} - R_{NAT} - D_L) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial k_L}{\partial x_j} \right] \quad (10.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{D(\rho \omega)}{Dt} = & C_{\omega 1} \frac{\rho \omega}{k_T} P_{k_T} + \left(\frac{C_{\omega R}}{f_W} - 1 \right) \frac{\rho \omega}{k_T} (R_{BP} + R_{NAT}) - \\ & - C_{\omega 2} \rho \omega^2 + C_{\omega} J_{\omega} \alpha_T f_W^2 \frac{\rho \sqrt{k_T}}{d^3} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\rho \alpha_T}{\sigma_{\omega}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad (10.43)$$

Формулы для источников и ограничительных функций:

$$P_{k_T} = \nu_{T_s} S^2 \quad (10.44)$$

$$P_{k_L} = \nu_{T_l} S^2 \quad (10.45)$$

где индекс T_s обозначает мелкомасштабные вихри, а T_l – крупномасштабные.

$$\nu_{T_s} = f_{\nu} f_{INT} c_{\mu} \sqrt{k_{T_s}} \lambda_{eff} \quad (10.46)$$

Под k_{T_s} понимается энергия мелкомасштабных турбулентных пульсаций:

$$k_{T_s} = f_{SS} f_W k_T \quad (10.47)$$

Под λ_{eff} понимается эффективный масштаб длины:

$$\lambda_{eff} = \min(C_{\lambda} y, \lambda_T) \quad (10.48)$$

$$\lambda_T = \frac{\sqrt{k_T}}{\omega} \quad (10.49)$$

$$f_W = \frac{\lambda_{eff}}{\lambda_T} \quad (10.50)$$

Эффект вязкости учитывается с помощью специальной функции:

$$f_\nu = 1 - \exp\left(-\frac{\sqrt{\text{Re}_T}}{A_\nu}\right) \quad (10.51)$$

$$\text{Re}_T = \frac{f_W^2 k_T}{\nu \omega} \quad (10.52)$$

С помощью функции f_{ss} учитывается эффект сопротивления завихренного потока вносимой извне турбулентности («shear-sheltering»):

$$f_{SS} = \exp\left[-\left(\frac{C_{SS}\nu\Omega}{k_T}\right)^2\right] \quad (10.53)$$

Модифицированная константа турбулентности:

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s\left(\frac{S}{\omega}\right)} \quad (10.54)$$

Эффект перемежаемости учитывается функцией:

$$f_{\text{INT}} = \min\left(\frac{k_L}{C_{\text{INT}}k_{\text{TOT}}}, 1\right) \quad (10.55)$$

Крупномасштабная составляющая турбулентной энергии вычисляется следующим образом:

$$k_{Tl} = k_T - k_{Ts} \quad (10.56)$$

Для источника k_L :

$$\nu_{Tl} = \min\left\{\left[f_{\tau l}C_{11}\left(\frac{\Omega\lambda_{\text{eff}}^2}{\nu}\right)\sqrt{k_{T1}}\lambda_{\text{eff}} + \beta_{TS}C_{12}\text{Re}_\Omega d^2\Omega\right]; \frac{(k_L + k_{T,1})}{2S}\right\} \quad (10.57)$$

$$\text{Re}_\Omega = \frac{y^2\Omega}{\nu} \quad (10.58)$$

$$\beta_{TS} = 1 - \exp\left(-\frac{\max(\text{Re}_\Omega - C_{\text{TS,crit}}, 0)^2}{A_{\text{TS}}}\right) \quad (10.59)$$

$$f_{\tau l} = 1 - \exp\left[-c_{\tau l}\frac{k_{Tl}}{\lambda_{\text{eff}}^2\Omega^2}\right] \quad (10.60)$$

Анизотропная диссипация представлена следующим образом:

$$\begin{aligned} D_T &= \nu \frac{\partial \sqrt{k_T}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k_T}}{\partial x_j} \\ D_L &= \nu \frac{\partial \sqrt{k_L}}{\partial x_j} \frac{\partial \sqrt{k_L}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (10.61)$$

В уравнениях (10.41) и (10.43) содержится турбулентный коэффициент переноса, определяемый следующим образом:

$$\alpha_T = f_\nu c_{\mu, \text{std}} \sqrt{k_{Ts}} \lambda_{\text{eff}} \quad (10.62)$$

Остальные члены уравнений.

Демпфирующая функция:

$$f_\omega = 1 - \exp \left[-0.41 \cdot \left(\frac{\lambda_{\text{eff}}}{\lambda_T} \right)^4 \right] \quad (10.63)$$

Функции-источники, моделирующие переход «ламинарной» энергии в турбулентную (BP – bypass – байпасный механизм, NAT – natural – естественный механизм перехода).

$$R_{BP} = C_R \beta_{BP} k_L \omega / f_W \quad (10.64)$$

$$R_{NAT} = C_{R, NAT} \beta_{NAT} k_L \Omega$$

Функции, входящие в состав (10.64):

$$\begin{aligned} \beta_{BP} &= 1 - \exp \left(-\frac{\phi_{BP}}{A_{BP}} \right) \\ \phi_{BP} &= \max \left[\left(\frac{k_T}{\nu \Omega} - C_{BP, \text{cnt}} \right); 0 \right] \\ \beta_{NAT} &= 1 - \exp \left(-\frac{\phi_{NAT}}{A_{NAT}} \right) \\ \phi_{NAT} &= \max \left[\left(\text{Re}_\Omega - C_{NAT, \text{cnt}} / f_{NAT, \text{crit}} \right); 0 \right] \\ f_{NAT, \text{crit}} &= 1 - \exp \left(-C_{NC} \frac{\sqrt{k_L y}}{\nu} \right) \end{aligned} \quad (10.65)$$

Турбулентная вязкость определяется как сумма мелкомасштабной и крупномасштабной:

$$\nu_T = \nu_{Ts} + \nu_{Tl} \quad (10.66)$$

Турбулентный коэффициент температуропроводности определяется как:

$$\alpha_{\theta} = f_W \cdot \left(\frac{k_T}{k_{TOT}} \right) \cdot \frac{\nu_{Ts}}{\sigma_{\theta}} + (1 - f_W) C_{\alpha\theta} \sqrt{k_T} \lambda_{eff} \quad (10.67)$$

Константы модели:

$$\begin{array}{lll} A_0 = 4,04 & C_{INT} = 0,75 & C_{\omega 1} = 0,44 \\ A_s = 2,12 & C_{TS,crit} = 1000 & C_{\omega 2} = 0,92 \\ A_{\nu} = 6,75 & C_{R,NAT} = 0,02 & C_{\omega 3} = 0,3 \\ A_{BP} = 0,6 & C_{11} = 3,4 \cdot 10^{-6} & C_{\omega R} = 1,5 \\ A_{NAT} = 200 & C_{12} = 1,0 \cdot 10^{-10} & C_{\lambda} = 2,495 \\ A_{TS} = 200 & C_R = 0,12 & c_{\mu, std} = 0,09 \\ C_{BP,crit} = 1,2 & C_{\alpha\theta} = 0,035 & \sigma_{\theta} = 0,85 \\ C_{NC} = 0,1 & C_{SS} = 1,5 & \sigma_k = 1 \\ C_{NAT,crit} = 1250 & C_{\tau l} = 4360 & \sigma_{\omega} = 1,17 \end{array} \quad (10.68)$$

Модель показала удовлетворительную сходимость с результатами экспериментов. Возможность расчета сверхзвуковых течений авторами [193] не затрагивалась.

10.3. Ламинарно-турбулентный переход при больших числах Маха

10.3.1. Особенности высокоскоростных потоков

Течения при больших скоростях имеют ряд особенностей, усложняющих картину ламинарно-турбулентного перехода.

Среди таких особенностей в первую очередь можно выделить следующие:

1. При переходе через звуковой барьер и дальнейшем увеличении скорости существенно изменяется волновая структура потока, а следовательно и характер протекания процессов ламинарно-турбулентного перехода.

2. С ростом скорости потока растет его энергетика, что может влиять на

молекулярную структуру и термодинамические свойства потока. Так в окрестности пограничного слоя при определенных числах Маха внешнего потока газ уже нельзя рассматривать как идеальный. Более того – в определенных условиях газ уже невозможно охарактеризовать единой температурой. Эти эффекты оказывают существенное влияние на процессы ламинарно-турбулентного перехода.

Совокупность указанных особенностей существенно осложняет задачу об определении устойчивости потоков газа при больших скоростях.

В настоящее время развиты в основном только общетеоретические подходы к решению данной задачи, основанные в первую очередь на теории устойчивости и модели химически неравновесного высокоэнтальпийного потока. Универсальных инженерно-практических методов в данной области на текущий момент практически не разработано.

10.3.2. Устойчивость высокоскоростных потоков

Главной особенностью высокоскоростных потоков по сравнению с несжимаемыми течениями с точки зрения их устойчивости является наличие целого спектра незатухающих мод неустойчивости.

Их классификация впервые была дана Л.М.Маком [194].

Напомним, что в несжимаемой жидкости, рассматривавшейся ранее, естественный механизм ламинарно-турбулентного перехода определяется волнами Толмина-Шлихтинга (в классификации Л.М.Мака – т.н. «первая мода»), имеющими вязкую природу. Таким образом, можно сказать, что в них существует единственная нормальная мода.

В случае же течения сжимаемой жидкости (газа) с достаточно высокой скоростью в потоке (число Маха $M > 3$) в потоке начинают развиваться невязкие возмущения (моды Мака), имеющие акустическую природу.

Л.М.Маком на примере невязкого уравнения для возмущений давления было показано, что появление незатухающих акустических возмущений в потоке

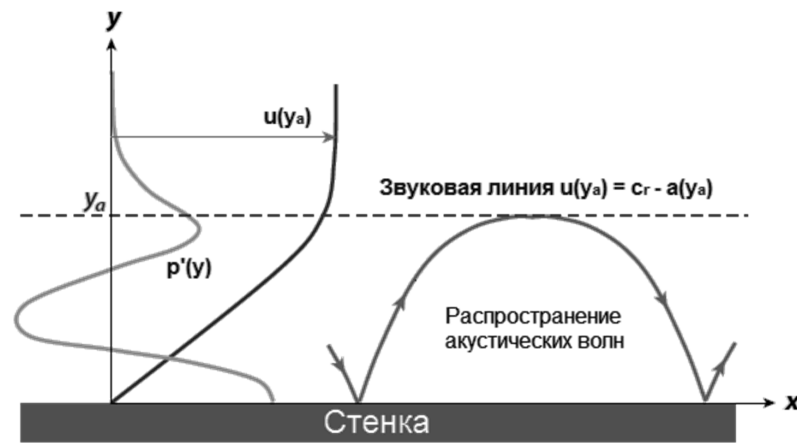


Рис. 10.5. Акустические волны в пограничном слое (u – профиль скорости, c_r – фазовая скорость возмущений, p' – профиль возмущения давления) [195]

определяется фазовой скоростью возмущений относительно скорости течения и скорости звука внешнего потока.

В соответствие с этим вводится относительное число Маха:

$$\tilde{M} = \frac{u_e - c_r}{a_e} \quad (10.69)$$

где индекс e обозначает внешнюю границу пограничного слоя.

В случае когда $\tilde{M} > 1$ в потоке образуется область, где средняя скорость потока относительно фазовой скорости распространения возмущений превышает скорость звука. Линия (поверхность), ограничивающая эту область, называется звуковой линией (поверхностью). В случае существования данной линии (поверхности) акустические волны отражаются от нее и оказываются «запертыми» внутри (см. рисунок 10.5). Такие «запертые» акустические волны и образуют моды Маха.

Амплитуда мод Маха растет быстрее, чем амплитуда возмущений первой моды. Именно поэтому в высокоскоростном потоке при $\tilde{M} > 1$ моды Маха являются преобладающими в механизме естественного ламинарно-турбулентного перехода.

Поведение мод Маха достаточно подробно изучалось как путем решения уравнений теории устойчивости, записанных для случая сжимаемого течения (в линейной и параболизированной постановке), так и экспериментально. Так, к примеру, было установлено, что придание передней кромке обтекаемого тела затуп-

ленной формы стабилизирует моды Мака [196], а охлаждение обтекаемой стенки – дестабилизирует [197].

Отдельный вопрос, требующий тщательного изучения – влияние изменения химических и теплофизических свойств газа при высоких скоростях (связанных в первую очередь с реакциями диссоциации и рекомбинации).

10.3.3. Возмущения в высокоэнтальпийном потоке

Как известно, при высокоэнтальпийном течении в газах протекают интенсивные процессы физико-химических преобразований, связанные с возбуждением внутренних степеней свободы молекул, их диссоциацией, химическими реакциями между компонентами газа и ионизацией атомов.

Таким образом, систему уравнений, описывающих течение газа в случае высокоэнтальпийного потока необходимо дополнить уравнениями, описывающими указанные физико-химические процессы.

Таким образом, в отличие от течений с более низкими скоростями, высокоэнтальпийное течение описывается большим числом параметров. Так для несжимаемого потока имеем 4 основных параметра (составляющие вектора скорости и давление), для сжимаемого потока при числах Маха $M < 6 - 5$ параметров (составляющие вектора скорости, температура и давление/плотность), а для высокоэнтальпийного потока – более 8, в зависимости от химического состава среды (составляющие вектора скорости, полная энергия, колебательная энергия, концентрации компонентов).

Исходя из этого, усложняется система уравнений теории устойчивости, получаемая, как и для других случаев с помощью разложения (10.1) – добавляются уравнения для возмущений колебательной температуры и плотностей компонентов. Следовательно, увеличивается количество параметров, способных влиять на устойчивость течения и положение области ламинарно-турбулентного перехода.

В линейном приближении для плоского слоя система уравнений устойчиво-

сти имеет следующую форму [198]:

$$\left(A \frac{d^2}{dy^2} + B \frac{d}{dy} + C \right) \hat{q} = 0 \quad (10.70)$$

где $\hat{q}(y) = [\hat{\rho}, \hat{u}(y), \hat{v}(y), \hat{w}(y), \hat{T}, \hat{T}_{v1} \dots \hat{T}_{vm}, \hat{C}_1(y) \dots \hat{C}_{N_C}(y)]^T$ – вектор неизвестных величин (функций формы), m – количество молекулярных мод колебаний, N_C – количество компонентов газовой смеси, A, B, C – комплексные матрицы размерностью минимум $N_C + m + 5$ (в случае, когда смесь можно охарактеризовать одной колебательной температурой).

Данная система уравнений решается совместно с уравнениями для осредненных величин и позволяет проводить исследования устойчивости высокоэнthalпийного ламинарного потока по отношению к восприимчивости к волнам неустойчивости и различных факторов воздействия на ламинарно-турбулентный переход.

В частности с помощью рассмотрения уравнений теории устойчивости в описанной выше постановке можно объяснить эффект стабилизации течения при вдуве углекислого газа в пограничный слой.

Описание воздействий различных факторов, воздействующих на устойчивость пограничного слоя будет приведено далее.

10.4. Факторы воздействия на ламинарно-турбулентный переход

С момента пионерских опытов О. Рейнольдса по устойчивости ламинарного потока в круглой трубе был накоплен значительный экспериментальный и теоретический материал по анализу влияния различных факторов на процесс ламинарно-турбулентного перехода. Исследовались несжимаемые и сжимаемые течения; дозвуковые и сверхзвуковые пограничные слои, обтекание тел различной формы.

Факторы, влияющие на преобладающий (имеющий наибольшую степень усиления амплитуды колебания волны) механизм потери устойчивости и распада ламинарного пограничного слоя можно условно разделить на внешние и внутренние. К внешним факторам можно отнести градиент давления, воздействие акустических волн, характеристики набегающего потока, такие как скорость и степень турбулентности (то есть факторы, привносимые в пограничный слой извне). К внутренним факторам следует причислить шероховатость и пористость поверхности, теплообмен с поверхностью и ряд других.

В данном разделе упомянем самые значимые из факторов воздействия на ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое.

10.4.1. Внешние факторы

Акустические воздействия

При изучении низкотурбулентных течений, характерных для условий полета высокоскоростных ЛА, основным внешним воздействием, возбуждающим возмущения в ламинарном пограничном слое, являются акустические волны, возникающие в набегающем потоке. При падении акустической волны на пластину (причем наибольшее воздействие на картину течения оказывает волна при падении в области передней кромки, что может быть связано с малой толщиной пограничного слоя в этой области [199, 200]), происходит передача/зарождение возмущений в ПС. При взаимодействии набегающей акустической волны с отошедшей ударной волной в ПС порождаются три вида возмущения: вихревые, акустические и энтропийные волны. Следует отметить, что в набегающем потоке одновременно существуют две волны – «медленная» и «быстрая», имеющие фазовые скорости $1 - 1/M_\infty$ и $1 + 1/M_\infty$ соответственно (одна волна распространяется по направлению течения, вторая – противоположно ему, но т.к. поток сверхзвуковой, то обе волны движутся в направлении течения). Причем коэффициент восприимчивости ПС к медленной акустической волне больше, чем к быстрой акустической волне

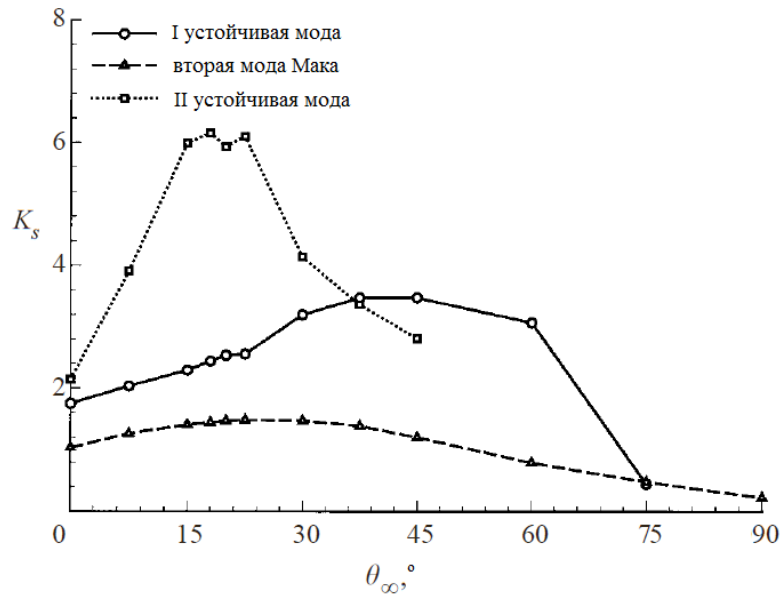


Рис. 10.6. Коэффициент усиления различных мод в высокоскоростном пограничном слое при воздействии внешних акустических колебаний в зависимости от угла их падения (по данным [203])

[199]. Отраженные от границы ПС и стенки волны взаимодействуют и, иногда, резонируют (при синхронизации фазовых скоростей) с устойчивыми модами волн, существующими в потоке, что приводит к росту амплитуды колебаний последних и зарождению волн неустойчивости первой или второй моды [201, 202].

Было установлено, что восприимчивость пограничного слоя к акустической волне зависит от угла её падения на стенку. При этом было показано, что существует зависимость между коэффициентами восприимчивости и углом падения волны (см. рис. 10.6). Под коэффициентом усиления K_S понимается отношение максимальной амплитуды моды возмущения давления к давлению набегающего потока.

Поведение пограничного слоя вблизи поверхности конуса под воздействием акустических волн схоже с описанным выше поведением пограничного слоя на плоской пластине. Акустические волны оказывают воздействие на устойчивость, наиболее сильно передают свои возмущения при падении на вершину конуса.

Градиент давления

Эффект градиента давления достаточно хорошо изучен для случая неустойчивостей первой моды. Эксперименты показали хорошее совпадение с предсказанием теорией, когда положительный градиент производит стабилизирующий эффект, а отрицательный градиент давления – дестабилизирующий. Исчерпывающий обзор экспериментальных исследований на эту тему представлен в [204].

На рисунке 10.7 показана зависимость числа Рейнольдса перехода от градиента давления при различных уровнях турбулизации внешнего потока для низких скоростей течения. При этом параметр градиента давления выражается следующим образом:

$$\lambda_\theta = \frac{\theta^2}{\nu} \frac{dU_\infty}{dx} \quad (10.71)$$

Данные расчетов, проведенных авторами [205] демонстрируют интересную картину влияния градиента давления на стабилизацию мод неустойчивости. В работе принят следующий параметр, характеризующий градиент давления в потоке (в терминологии авторов – «параметр градиентности»).

$$\lambda_s = -\frac{s}{\rho_e u_e} \frac{dp}{ds} \quad (10.72)$$

При умеренных числах Маха (M порядка 2), т.е. в области безусловного доминирования первой моды неустойчивости, влияние градиента давления на пограничный слой сходно с низкоскоростным случаем (т.е. положительный градиент давления оказывает дестабилизирующее действие, а отрицательный – стабилизирующее).

При больших числах Маха (M порядка 5) и небольших параметрах градиентности ($|\lambda_s| < 0.015$) наблюдается «реверс» зависимости критического числа Рейнольдса от градиента давления для возмущений первой моды, т.е. отрицательный градиент давления дестабилизирует первую моду, а положительный – стабилизирует [205]. При $|\lambda_s| > 0.015$ «реверс» зависимости пропадает.

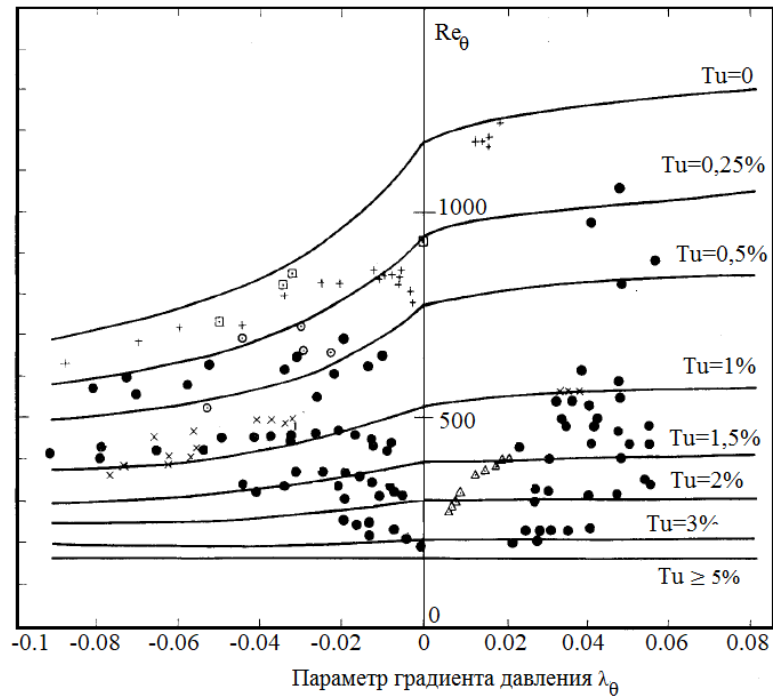


Рис. 10.7. Зависимость числа Рейнольдса перехода от градиента давления при различных уровнях турбулизации внешнего потока Tu (характерный размер при вычислении числа Рейнольдса – толщина потери импульса пограничного слоя) [204]. Точками обозначены экспериментальные данные, линиями – эмпирическая зависимость.

Влияние градиента давления на вторую моду – «классическое», т.е. отрицательный градиент приводит к стабилизации второй моды, а положительный – к значительной дестабилизации. Результирующее влияние градиента давления на высокоскоростной поток с тенденцией к доминированию второй моды при малых параметрах градиентности таково, что при положительном градиенте давления устойчивость пограничного слоя определяется исключительно второй модой, а при отрицательном – первой (см. рис. 10.8, 10.9 и 10.10).

При больших числах Маха набегающего потока и параметрах градиентности $|\lambda_s| > 0.015$ в связи с исчезновением «реверса» усиления первой моды, доминирует вторая мода неустойчивости, а результирующее влияние градиента давления на поток возвращается к «классическому».

Исследования высокоскоростных потоков показали, что моды Маха куда менее восприимчивы к градиенту давления. Таким образом, в высокоскоростных течениях с преобладанием второй моды влияние градиента давления несущественно

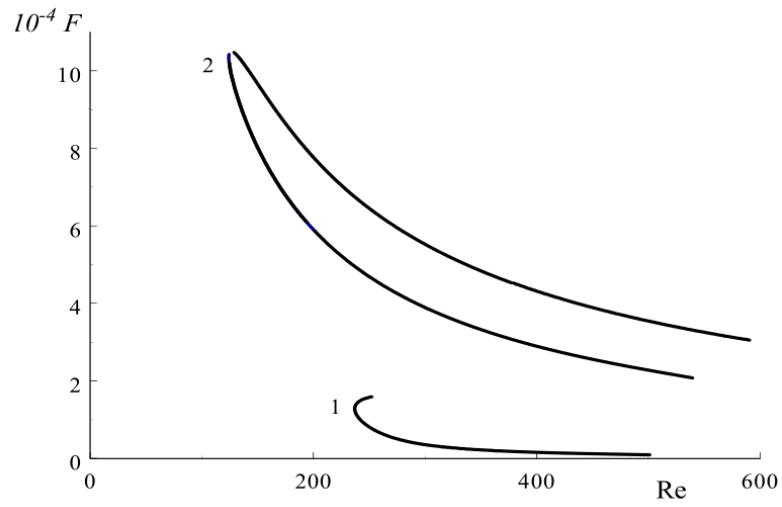


Рис. 10.8. Кривые нейтральной устойчивости первой (1) и второй (2) моды при нулевом градиенте давления $\lambda_s = 0$, $M = 5.35$

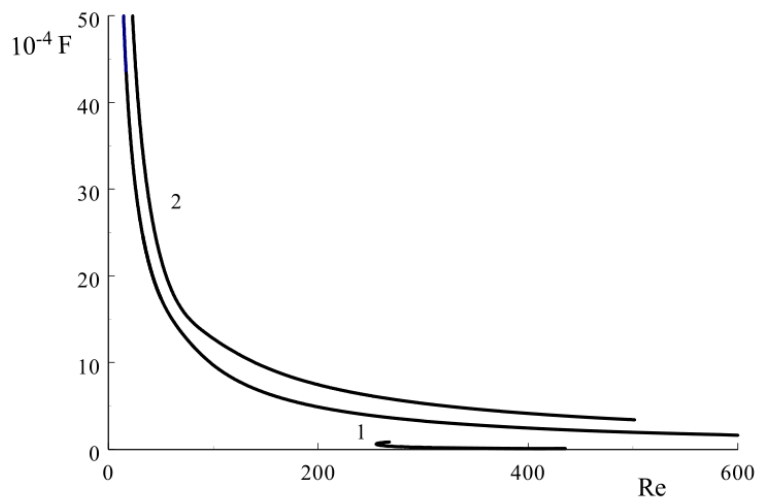


Рис. 10.9. Кривые нейтральной устойчивости первой (1) и второй (2) моды при нулевом градиенте давления $\lambda_s = -0.01$, $M = 5.35$

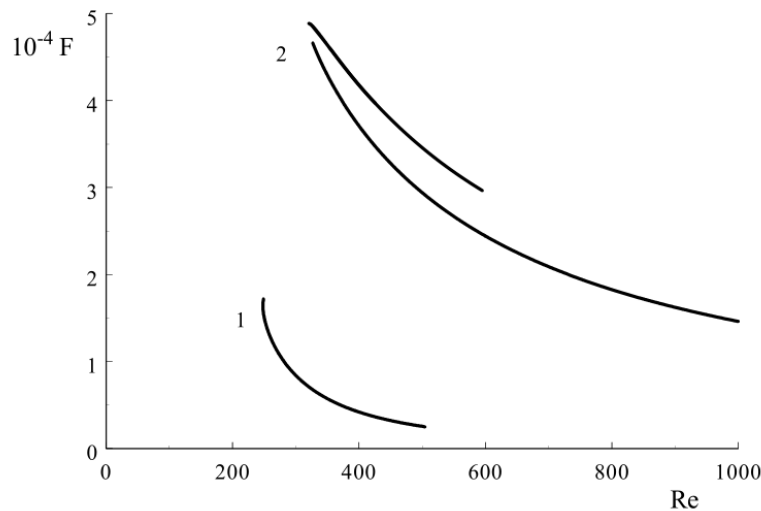


Рис. 10.10. Кривые нейтральной устойчивости первой (1) и второй (2) моды при нулевом градиенте давления $\lambda_s = 0.01$, $M = 5.35$

[206].

Скорость набегающего потока

Скорость набегающего потока может оказывать влияние на местоположение ламинарно-турбулентного перехода. При увеличении числа Маха замечено смещение турбулентности вниз по потоку [207].

На рисунке 10.11 показаны соответствующие результаты экспериментальных и расчетных данных для обтекания конуса.

10.4.2. Внутренние факторы

Теплообмен на поверхности обтекаемого тела

Эффекты, возникающие при теплообмене обтекаемой поверхности с потоком имеют достаточно большое значение. С инженерно технической точки зрения наибольший интерес представляет случай охлаждения потока ($T_w/T_r < 1$).

С помощью методов теории устойчивости установлено, что возмущения первой моды стабилизируются охлаждением потока, а возмущения второй моды - дестабилизируются.

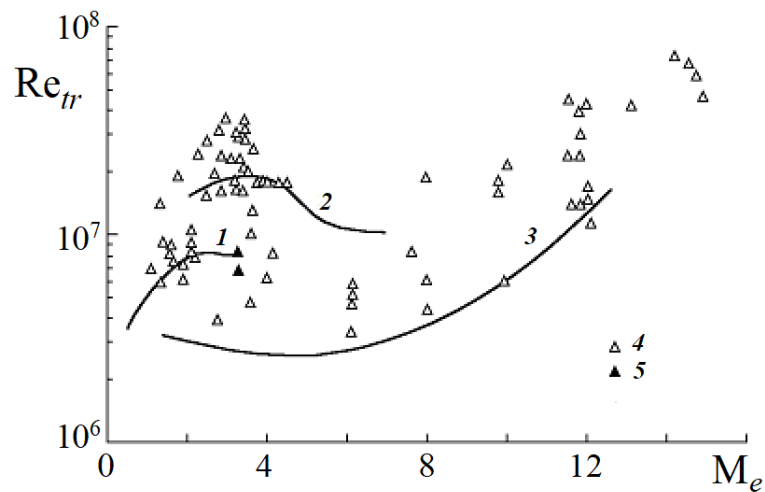


Рис. 10.11. Зависимость числа Рейнольдса перехода от числа Маха на границе пограничного слоя: 1,2 – расчет по методу e^n ($n=10$) для адиабатической и охлаждаемой стенок соответственно; 3 – экспериментальные данные для обычных аэродинамических труб; 4 – результат летных экспериментов; 5 – экспериментальные данные для малозумных аэродинамических труб;

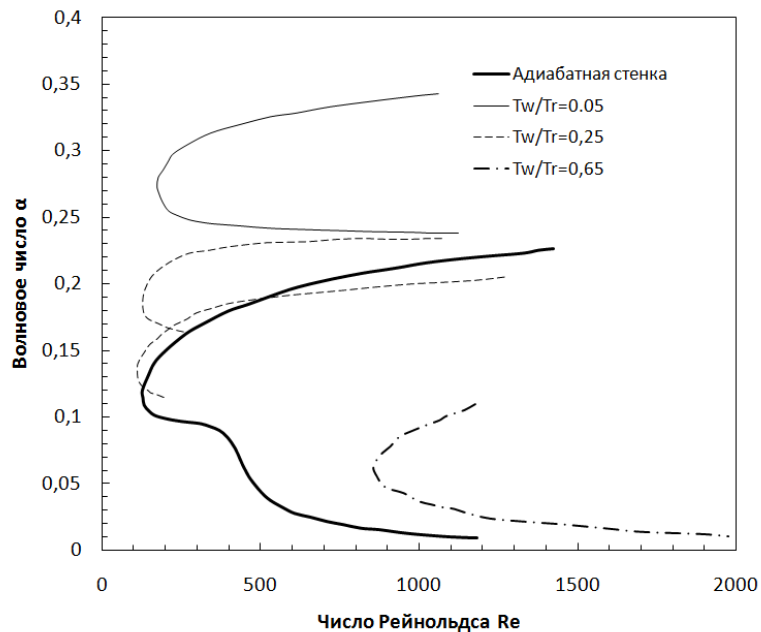


Рис. 10.12. Влияние охлаждения стенки на кривую нейтральной устойчивости при $M = 5, 8$. Двумерные возмущения, $T_\infty = 125K$, в соответствии с данными, впервые полученными в [208]

Таким образом в потоках, где возмущения первой моды являются определяющими в механизме разрушения ламинарного погранслоя, охлаждение стабилизирует течение и оттягивает ламинарно-турбулентный переход, а в более скоростных потоках с превалированием второй моды возмущений охлаждение наоборот приводит к дестабилизации течения и ускоряет переход к турбулентности.

На рисунке 10.12 приведены нейтральные кривые для течения в двумерном пограничном слое на плоской пластине при охлаждении стенки.

Вдув газа в пограничный слой

Различные исследования (см., например [197, 209, 210]) показали, что вдув газа в пограничный слой может существенно повлиять на ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое.

Качественный характер этого влияния зависит от химического состава вдуваемого газа и параметра вдува.

Физические механизмы, лежащие в основе этого влияния исследовались численно с помощью уравнений Навье-Стокса и теории устойчивости.

Можно выделить следующие факторы, за счет которых вдув газа может повлиять на процесс ламинарно-турбулентного перехода:

1. Увеличение толщины пограничного слоя.
2. Эффекты, связанные с химическим составом вдуваемого газа.

Согласно анализу, проведенному в [202] (без учета химических реакций и молекулярных колебаний), вдув газа, увеличивая толщину пограничного слоя, приводит к увеличению длины волны (уменьшению частоты) мод возмущения и к деформации вектора скорости осредненного течения. В конечном итоге это приводит к смещению региона со значительными напряжениями трения от стенки и снижению стабилизирующего влияния вязкости. Таким образом, с чисто гидродинамической точки зрения вдув газа в пограничный слой оказывает дестабилизирующее действие, ускоряя ламинарно-турбулентный переход.

С другой стороны, в определенных случаях вдув газа может оказывать стабилизирующее действие на пограничный слой. Речь здесь идет о физико-химических процессах, связанных с химическими реакциями и молекулярными колебаниями. Обычно данные процессы протекают в высокоэнтропийных потоках.

В частности было обнаружено, что вдув углекислого газа в высокоскоростной поток воздуха может стабилизировать пограничный слой, снижая фактор усиления возмущений N и увеличивая число Рейнольдса перехода [211]. При этом установлено, что вдув других газов (использовались азот, аргон и воздух) не приводит к аналогичному эффекту [212]. При анализе этого феномена было установлено, что эффект, вызываемый углекислым газом связан с колебательно-релаксационными свойствами молекулы CO_2 и процессами перераспределения энергии между поступательной и колебательной энергетическими молекулярными модами в пограничном слое.

Качественно эффект вдува углекислого газа зависит от расхода, с которым данный газ вдувается в пограничный слой и характеризуется параметром вдува:

$$f_w = \frac{\sqrt{2Re_x} \rho_w u_e}{\rho_\infty u_\infty} \quad (10.73)$$

Поскольку, как было указано выше, чисто гидродинамически, вдув газа в пограничный слой оказывает на него дестабилизирующее действие, то существует некоторое пограничное значение параметра f_{w0} . При $f_w < f_{w0}$ молекулярно-релаксационные эффекты вдува преобладают и вдув углекислого газа оказывает стабилизирующее действие, а при $f_w > f_{w0}$ начинают преобладать «гидродинамические» эффекты, и действие вдува оказывается дестабилизирующим.

На рисунке 10.13 показана расчетная зависимость точки ламинарно-турбулентного перехода на конусе от параметра вдува.

Как видно из рисунка, эффекты вдува для аргона и азота практически идентичны. При этом видно, что для углекислого газа существует оптимальный параметр вдува, при котором эффект стабилизации течения максимален.

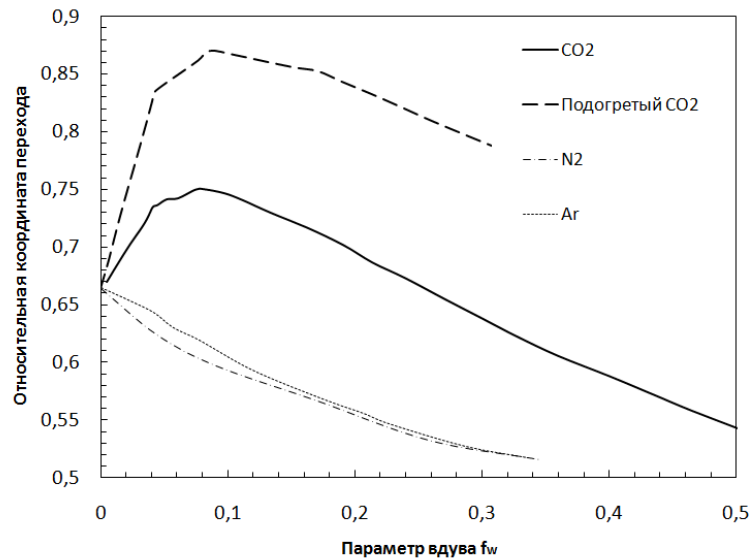


Рис. 10.13. Зависимость точки ламинарно-турбулентного перехода от параметра вдува для разных газов

Состояние поверхности

Состояние поверхности может оказывать значительное воздействие на устойчивость пограничного слоя.

Эксперименты и результаты моделирования показывают, что наличие как одиночных препятствий, так и распределенной шероховатости может породить волны неустойчивости. Основными параметрами, оказывающими воздействие на вид волн и интенсивность их нарастания, является отношение высоты неровности к толщине пограничного слоя и форма препятствия.

К примеру, обнаружено, что наиболее сильный эффект дестабилизации наблюдается при высоте препятствия больше $1/2$ толщины пограничного слоя пограничного слоя.

При этом в целом данный вопрос остается недостаточно изученным, поскольку различные виды элементов шероховатости и их взаимное расположение может по-разному влиять на устойчивость пограничного слоя.

Помимо шероховатости достаточно подробно изучался вопрос влияния пористости поверхности на ламинарно-турбулентный переход.

В экспериментах [213–215] было показано, что, по сравнению с твердой

непроницаемой стенкой, использование пористого покрытия значительно уменьшает рост возмущений второй моды, но несколько дестабилизирует первую моду. Было показано, что при сверхвысоких скоростях полета использование пористого звукопоглощающего покрытия может значительно увеличить участок ламинарного режима течения.

10.5. Инженерная модель ламинарно-турбулентного перехода в высокоскоростном потоке

В предыдущих разделах были описаны основные подходы к расчету течений при наличии ламинарно-турбулентного перехода, а также факторы, влияющие на данные течения.

Подходы, основанные на теории устойчивости и методе e^n , развиты для высокоскоростных течений достаточно хорошо, однако представляют небольшой практический интерес при инженерных расчетах.

Среди инженерных моделей можно выделить лишь работы [216–220]. Между тем, данное направление представляется достаточно перспективным, принимая во внимание техническую простоту реализации, а также широкое распространение автоматизированных программных комплексов вычислительной гидродинамики, в которых применение методов теории устойчивости на практике почти нереализуемо, в отличие от инженерных моделей, основанных на решении дополнительных «полуэмпирических» уравнений переноса.

В данном разделе приводится модель ламинарно-турбулентного перехода, разработанная автором на основе подхода, предложенного в [216–220]. Данный подход основан на использовании понятий перемежаемости и эффективной вязкости, как и подход Лэнгтри-Ментера, с тем отличием, что в модель дополнительно вносятся члены, моделирующие вклад нетурбулентных пульсаций (возмущения первой и второй моды).

Для эффективной вязкости используется формула (10.74):

$$\mu_{eff} = \mu + (1 - \gamma) \mu_{nt} + \gamma \mu_T \quad (10.74)$$

Турбулентная вязкость в данном уравнении определяется соответствующей моделью турбулентности, а для «нетурбулентной» вязкости μ_{nt} применяется формула:

$$\mu_{nt} = C_\mu \rho K \tau_{nt} \quad (10.75)$$

где $C_\mu = 0.09$ - константа, K - кинетическая энергия турбулентности.

Характерное время τ_{nt} складывается из двух частей:

$$\tau_{nt} = \tau_{nt1} + \tau_{nt2} \quad (10.76)$$

где τ_{nt1} , τ_{nt2} - характерные времена первой и второй моды возмущений соответственно.

Они определяются по формулам :

$$\tau_{nt1} = \frac{C_2 \varsigma_{eff}^{1.5}}{\left[(2E_u)^{0.5} \nu \right]^{0.5}}, \quad (10.77)$$

$$\tau_{nt2} = \frac{C_3 \cdot 2\varsigma_{eff}}{U_P} \quad (10.78)$$

Здесь ς_{eff} - эффективный масштаб турбулентности [219, 220], ν - коэффициент кинематической вязкости, $E_u = 0.5 |U_e|^2$ - кинетическая энергия внешнего потока, U_P - фазовая скорость для второй моды. Для нее используется формула [216, 217]:

$$U_P = 0.94 U_e \quad (10.79)$$

где U_e - скорость внешнего потока.

Для определения коэффициента перемежаемости используется уравнение переноса [219, 220]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \gamma) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \gamma) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\gamma} \right) \frac{\partial \gamma}{\partial x_k} \right] + P_\gamma (F_{onset}) - \varepsilon_\gamma, \quad (10.80)$$

где

$$P_\gamma(F_{onset}) = P_\gamma = C_4 \rho F_{onset} [-\ln(1 - \gamma)]^{0.5} \left(1 + C_5 \sqrt{\frac{K}{2E_u}} \right) \frac{d}{\nu} |\nabla \tilde{E}_u|, \quad \varepsilon_\gamma = \gamma P_\gamma \quad (10.81)$$

$$F = 1 - \exp\left(-C_6 \frac{S_{eff} K^{0.5} |\nabla K|}{\nu |\nabla E_u|}\right), \quad (10.82)$$

d - расстояние от стенки.

Используются следующие значения числовых констант, входящих в модель [219, 220]:

C_μ	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	σ_γ
0.09	0.7	0.35	0.005	8e-5	0.07	1.2	1.0

Для тестирования модели проведено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными работы Мее [221], в которой исследовался высокоскоростной ламинарно-турбулентный переход на пластине при следующих условиях:

Тест	6911	6909, 6910	6912, 6913	6926
Число Маха	6.3	6.2	6.1	5.5
Скорость потока (м/с)	2980	3210	3370	4330
Статическое давление (кПа)	2.8	5.4	12.1	9.4
Статическая температура (К)	570	690	800	1560
Единичное чис- ло Re (m^{-1})	1.7×10^6	2.6×10^6	4.9×10^6	1.6×10^6

Некоторые результаты расчетов числа Стантона St представлены на рисунках 10.14 и 10.15.

Модель показывает удачный пример использования «инженерного» подхода в комбинации с данными, полученными из теории устойчивости.

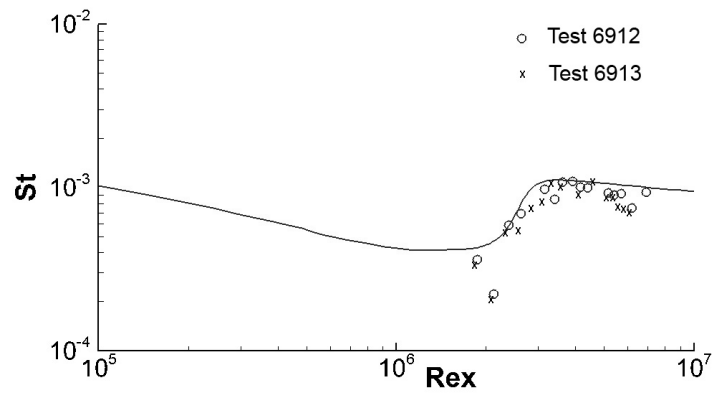


Рис. 10.14. Распределение числа Стантона вдоль пластины для режима 6912 и 6913.
Значки - эксперимент [221]; сплошная линия - результаты расчета

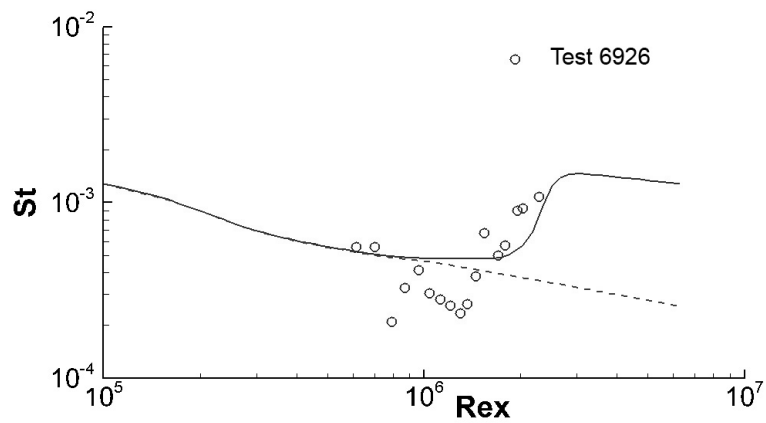


Рис. 10.15. Распределение числа Стантона вдоль пластины для режима 6926.
Значки - эксперимент [221]; сплошная линия - результаты расчета; пунктир - расчет ламинарного течения (без учета ЛТП)

Как видно из приведенных рисунков, модель показывает удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными.

10.6. Выводы по главе

Ламинарно-турбулентный переход в пограничном слое – сложное гидродинамическое явление, характер протекания которого зависит от очень большого числа факторов.

В настоящее время накоплен огромный объём экспериментального и расчётно-теоретического материала по изучению закономерностей данного явления и влияния на него различных факторов. Одной из актуальных на сегодняшний день задач является систематизация и обобщение данного материала.

В данной работе была предпринята попытка краткого обзора существующих методик предсказания ламинарно-турбулентного перехода и наиболее важных факторов, влияющих на протекание данного процесса.

При расчётно-теоретическом анализе поведения пограничного слоя при ламинарно-турбулентном переходе существует два принципиально разных подхода.

«Классический» подход основан на рассмотрении пограничного слоя как некоторой системы, преобразующей внешние возмущающие «сигналы». Направленность данного подхода – определение физических механизмов, ответственных за перемежаемость.

«Инженерно-технический» подход основан на методах вычислительной гидродинамики и искусственно вводит дополнительные полуэмпирические уравнения переноса для характеристик, определяющих состояние погранслоя (например – перемежаемость). Направленность данного подхода – обеспечение определения зоны ламинарно-турбулентного перехода при использовании автоматизированных средств инженерного анализа (программных комплексов вычислительной гидродинамики) без глубокого анализа механизмов перехода.

К сожалению, на сегодняшний день оба подхода подчас развиваются незави-

симо друг от друга.

При этом опыт показывает, что оба подхода имеют свои достоинства и недостатки, которые еще только предстоит преодолеть.

В рамках данной работы предложена инженерная модель ламинарно-турбулентного перехода, построенная с использованием понятия перемежаемости и величин временных масштабов, характерных для различных мод возмущений.

Глава 11

Применение разработанной методики в задачах внешнего обтекания

Для тестирования разработанных моделей и методик был решен ряд валидационных задач и проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

11.1. Обтекание сферы

Условия расчетов:

Давление и температура окружающей среды соответствовали параметрам атмосферы на высоте 10 км (температура - 223.252 К, давление - 2.65×10^4 Па. Рассмотренные скоростные режимы приведены в таблице 11.1.

Задача решалась в двухмерной осесимметричной постановке с учетом протекания в сжатом слое химических реакций.

Расчетная сетка приведена на рисунке 11.1.

Поля числа М, давления и температуры для скоростного режима М=19,99 приведены на рисунках 11.2-11.4.

Таблица 11.1. Скоростные режимы обтекания

Число М набегающего потока	Скорость набегающего потока u , м/с
1.999	600.
8.32949	2500.
11.661	3500.
14.993	4500.
16.659	5000.
19.99	6000.

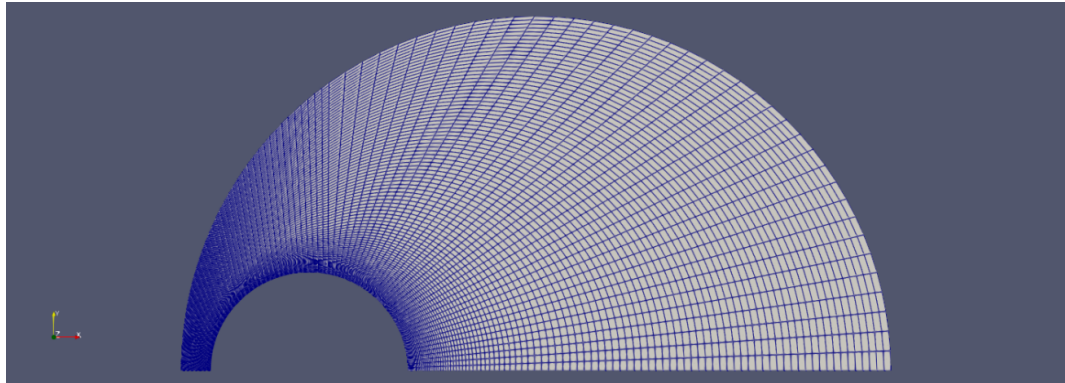
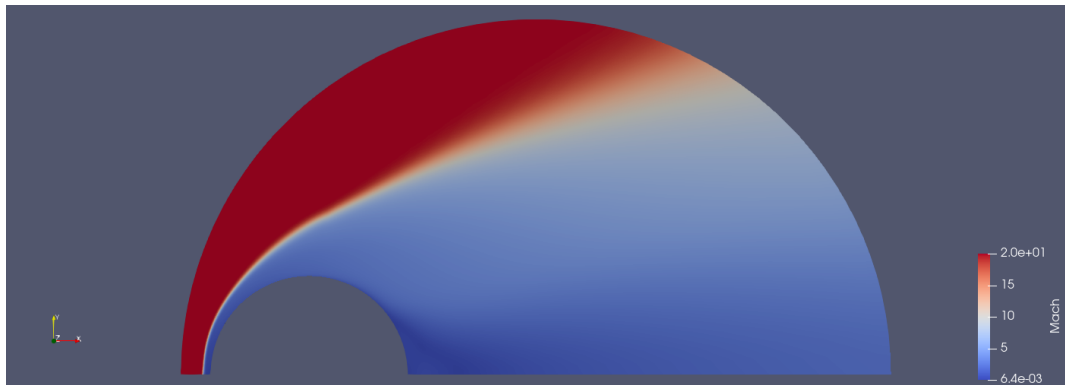


Рис. 11.1. Расчетная сетка

Рис. 11.2. Поле числа М для расчетного режима $M=19,99$ Рис. 11.3. Поле давления для расчетного режима $M=19,99$

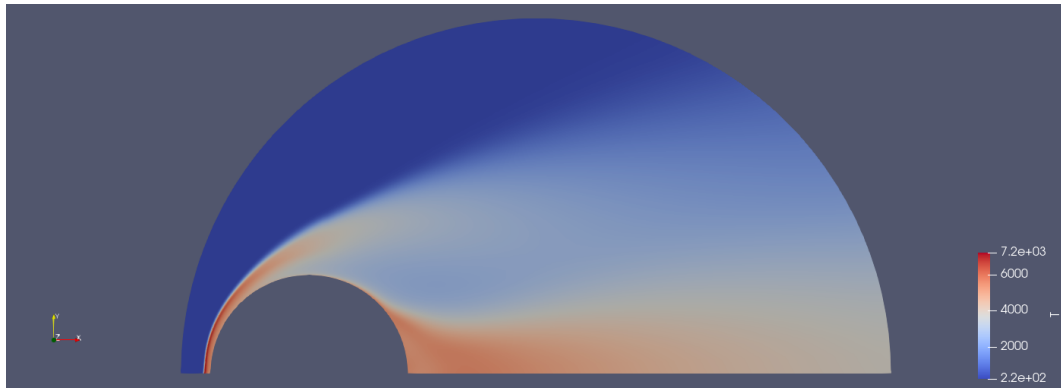


Рис. 11.4. Поле температуры для расчетного режима $M=19,99$

Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными, приведенными в [222].

Сравнение приведено на рисунках 11.5-11.6.

Расчет коэффициента сопротивления по оси x c_x (в виду малости сил трения по сравнению с силами давления в рассматриваемом случае) производился по формуле:

$$c_x = \frac{\int_S p n_x \cdot dS}{\frac{\rho u_\infty^2}{2} A}$$

где p – давление, A – миделево сечение обтекаемого тела, S – площадь поверхности обтекаемого тела \mathbf{n} – нормаль к поверхности.

Сравнение показывает, что полученные результаты близки к результатам экспериментальных исследований.

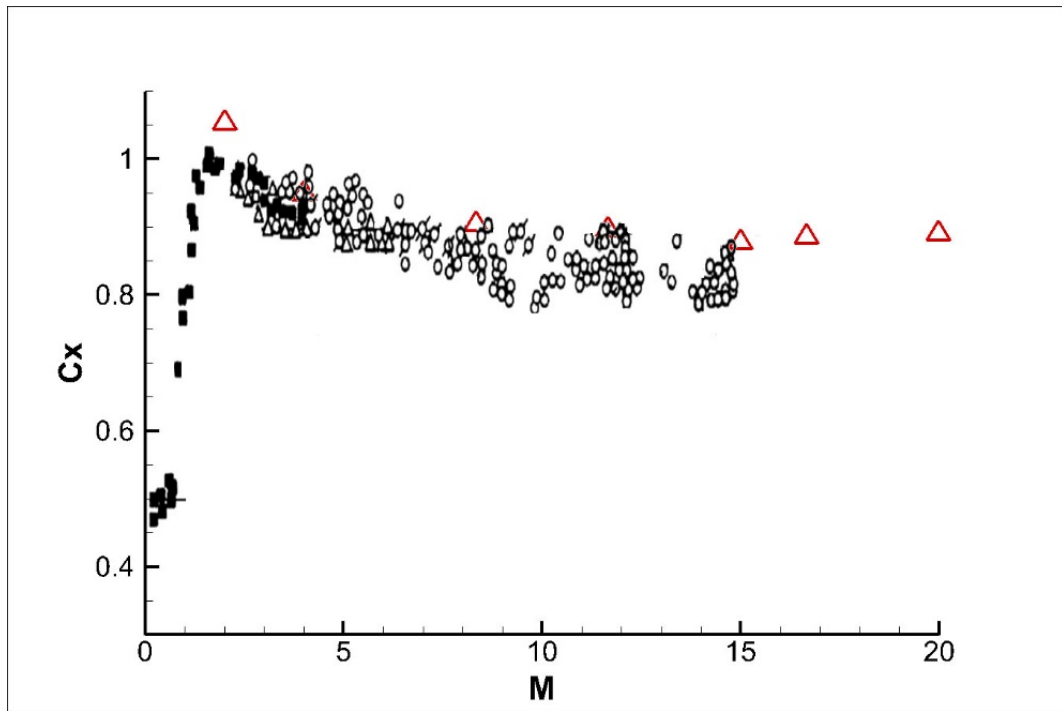


Рис. 11.5. Результаты расчетов коэффициента сопротивления в сравнении с экспериментальными данными (\triangle - данные расчетов, \circ – экспериментальные данные из [222])

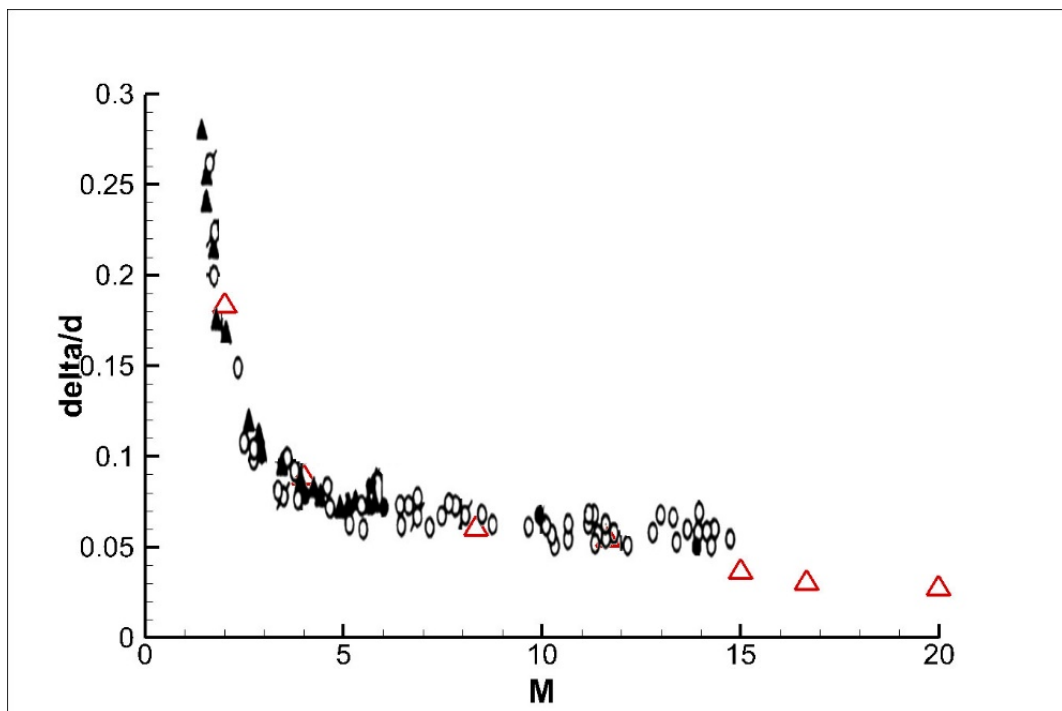


Рис. 11.6. Результаты приведенного расстояния отхода ударной волны от поверхности сферы вблизи ПКТ в сравнении с экспериментальными данными (\triangle - данные расчетов, \circ – экспериментальные данные из [222])

11.2. Обтекание аппарата OREX

Спускаемый аппарат OREX представляет собой сферически затупленный конус с углом наклона 50° , с радиусом носовой части 1.35 м и диаметром основания 3.4 м, как показано на рисунке 11.7. Он был запущен на орбиту Земли с использованием японского ракетносителя Н-П. Во время входа в атмосферу аэротермические данные были получены примерно с высоты 120 км до примерно 40 км, включая период радиомолчания, когда нагревание максимально.

В эксперименте [223] проводилось измерение теплового потока в передней критической точке и концентрации электронов. Электростатический зонд, с помощью которого проводилось измерение концентрации электронов, выступает с поверхности аппарата OREX на высоту 70 мм.

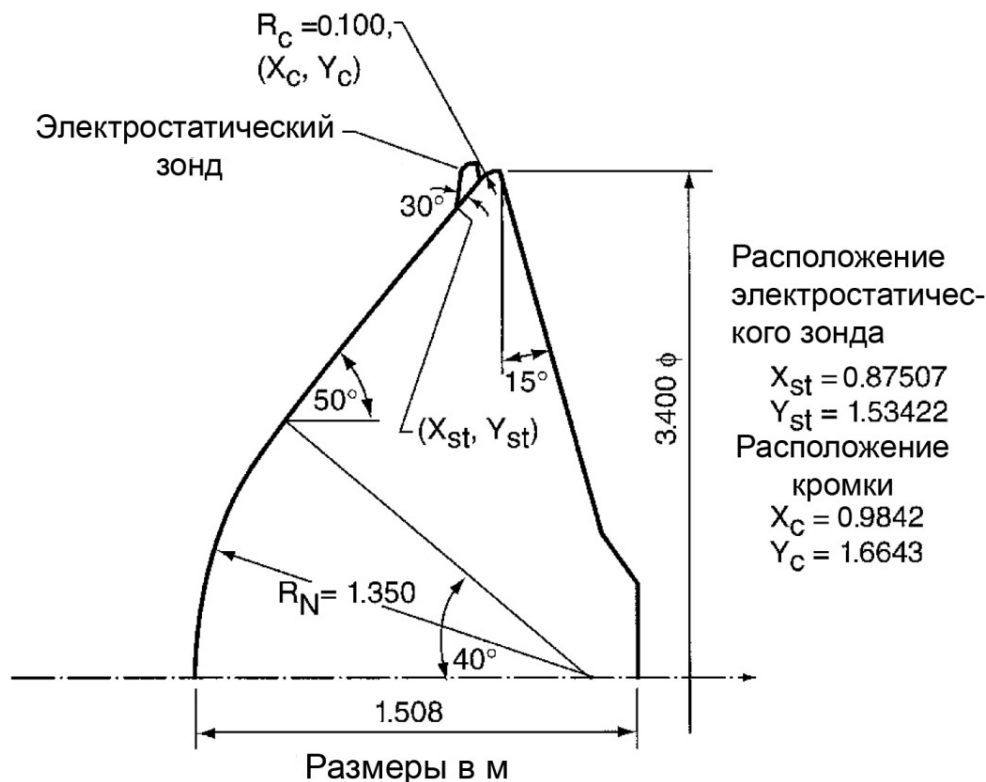


Рис. 11.7. Геометрические параметры аппарата OREX [223]

Расчеты проводились для высот полета $H=79.9, 84, 88.4, 92.8, 96.8$ и 101.1 км.

Параметры траектории взяты из работы [224] и представлены в таблице 1.

Таблица 11.2. Параметры траектории аппарата OREX

H , км	V_∞ , м/с	ρ_∞ , кг/м ³	T_∞ , К	X_{O_2}	X_{N_2}	X_O	P_∞ , Па	T_W , К
101.1	7454.6	4.83×10^{-7}	196.9	0.1726	0.7839	0.0435	2.81×10^{-2}	401.5
96.8	7456.3	9.36×10^{-7}	190.3	0.1884	0.7863	0.0253	5.20×10^{-2}	485.2
92.8	7454.1	1.95×10^{-6}	188.3	0.2025	0.7881	0.0094	0.106	586.1
88.4	7444.3	4.30×10^{-6}	186.9	0.2125	0.7875	0	0.232	686.9
84	7415.9	1.09×10^{-5}	188.9	0.2375	0.7625	0	0.594	785.1
79.9	7360.2	1.84×10^{-5}	198.6	0.2375	0.7625	0	1.05	878.4

Рассматривалось 6 вариантов расчета. Во всех вариантах задавалась поступательно-вращательная температура на стенке T_W . Остальные условия на стенке представлены в таблице 2.

Кроме того, проводились расчеты этих вариантов в предположении термической равновесности ($T = T_{V,N_2} = T_{V,O_2} = T_{V,NO}$).

Некоторые результаты представлены на следующих рисунках.

На рисунке 11.8 представлено изменение плотности теплового потока в передней критической точке в зависимости от высоты полета для двух вариантов расчета: 211 ($\frac{\partial T_\vartheta}{\partial n}|_W = 0$, нулевая каталитическая активность) и 221 ($T_\vartheta|_W = T_W$, нулевая каталитическая активность). Во втором случае тепловой поток несколько больше, однако это различие уменьшается с ростом высоты. Результаты расчета хорошо совпадают с экспериментом [224].

На рисунке 11.9 приведено аналогичное сравнение для вариантов 212 ($\frac{\partial T_\vartheta}{\partial n}|_W = 0$, $K_W=1000$) и 222 ($T_\vartheta|_W = T_W$, $K_W=1000$), т.е. для каталитически активной стенки. При задании колебательных температур равными T_W тепловой поток выше, но с ростом высоты различие также уменьшается.

На рисунке 11.10 приведено сравнение результатов расчета плотности теплового потока в зависимости от высоты полета при различной каталитической активности стенки. С ростом каталитической активности наблюдается увеличе-

Таблица 11.3. Условия на стенке

211	Для колебательных температур использовалось условие $\frac{\partial T_{\vartheta}}{\partial n} _W = 0$	Нулевая каталитическая активность
221	$T_{\vartheta} _W = T_W$	Нулевая каталитическая активность
212 $K_W=1000$	$\frac{\partial T_{\vartheta}}{\partial n} _W = 0$	Задана каталитическая активность $K_W=1000$
222 $K_W=10$	$T_{\vartheta} _W = T_W$	Задана каталитическая активность $K_W=10$
222 $K_W=100$	$T_{\vartheta} _W = T_W$	Задана каталитическая активность $K_W=100$
222 $K_W=1000$	$T_{\vartheta} _W = T_W$	Задана каталитическая активность $K_W=1000$

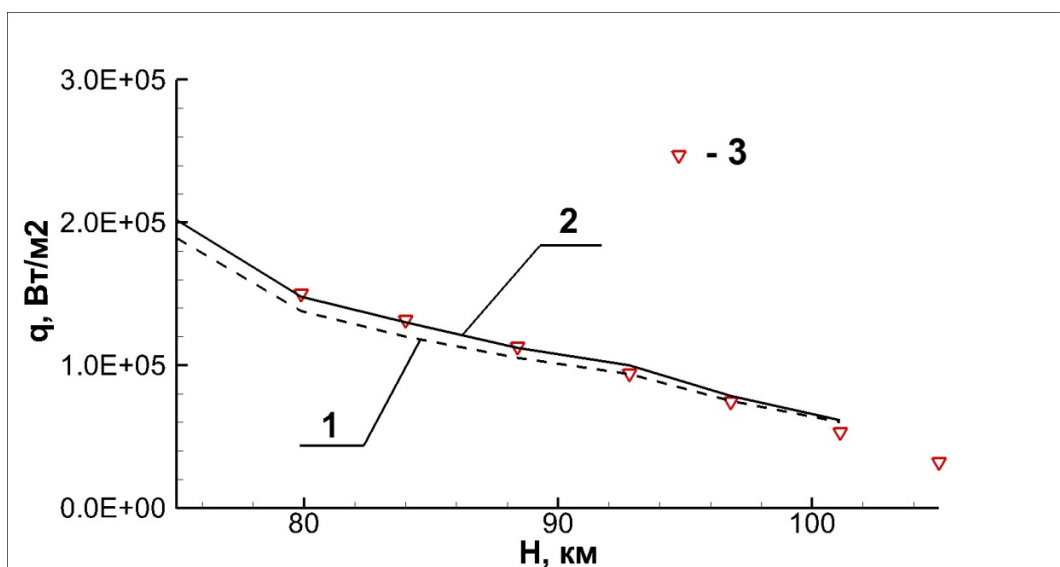


Рис. 11.8. Тепловые потоки в критической точке аппарата OREX. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности:

1 - расчет 211; 2 - расчет 221; 3 - эксперимент [224]

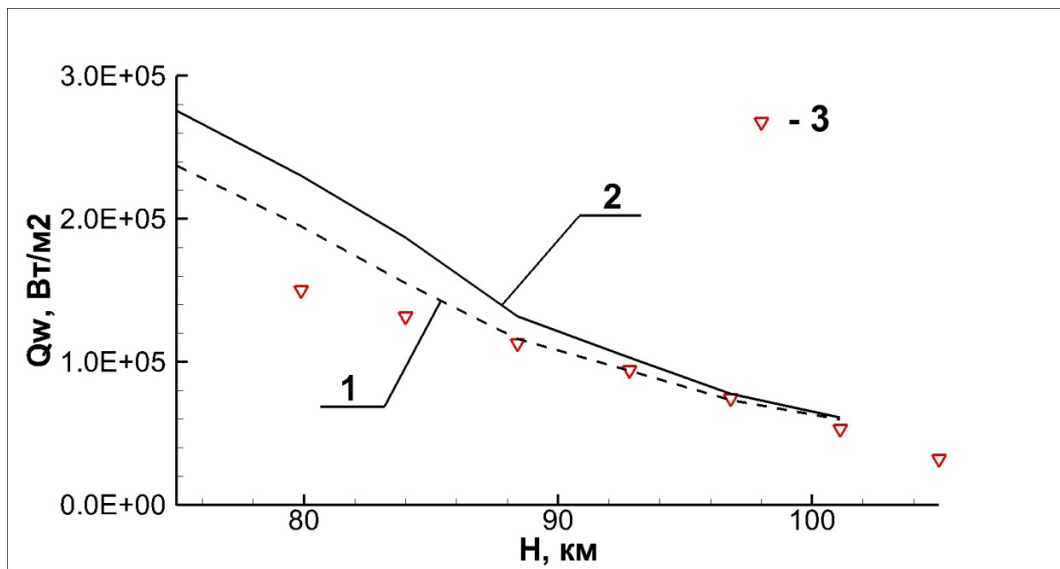


Рис. 11.9. Тепловые потоки в критической точке аппарата OREX. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$):

1 - расчет 212 $K_w=1000$; 2 - расчет 222 $K_w=1000$; 3 - эксперимент [223]

ние теплового потока, но, при высотах 92.8 км и выше, различие практически отсутствует.

Более подробный анализ результатов расчета для высоты полета 84 км приводится на следующих рисунках.

На рисунке 11.11 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата на высоте 84 км при нулевой каталитической активности. При использовании граничного условия $T_{\vartheta}|_W = T_W$ тепловой поток на всей передней поверхности выше, чем при использовании граничного условия $\frac{\partial T_{\vartheta}}{\partial n}|_W = 0$. Кроме вариантов 211 и 221, приводятся данные расчета термически равновесного газа ($T = T_{V,N_2} = T_{V,O_2} = T_{V,NO}$); в этом случае тепловой поток получается еще выше. На рисунке 11.12 представлено распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной на оси потока для этих же двух вариантов: 211 и 221, а на рисунке 7 - сравнение результатов расчета термически неравновесного (вариант 221) и термически равновесного газа. Поступательно-вращательная температура термически неравновесного газа непосредственно за скачком уплотнения получается выше (~18 000 К), чем равновесного (15000), однако вблизи от стенки

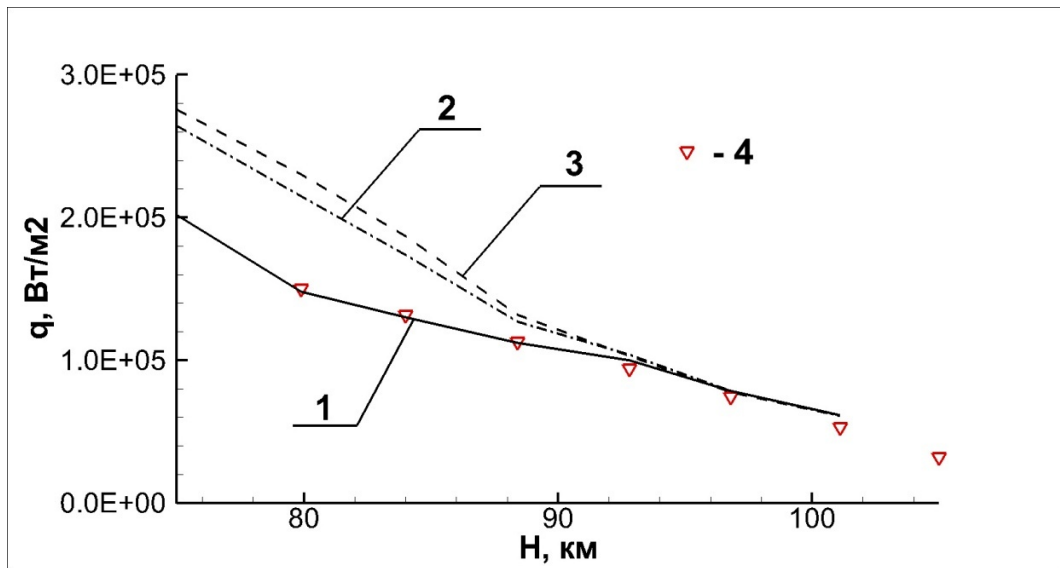


Рис. 11.10. Тепловые потоки в критической точке аппарата OREX. Влияние каталитической активности поверхности: 1 - расчет 221 (нулевая каталитическая активность); 2 - расчет 222 ($K_w=10$); 3 - расчет 222 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [223]

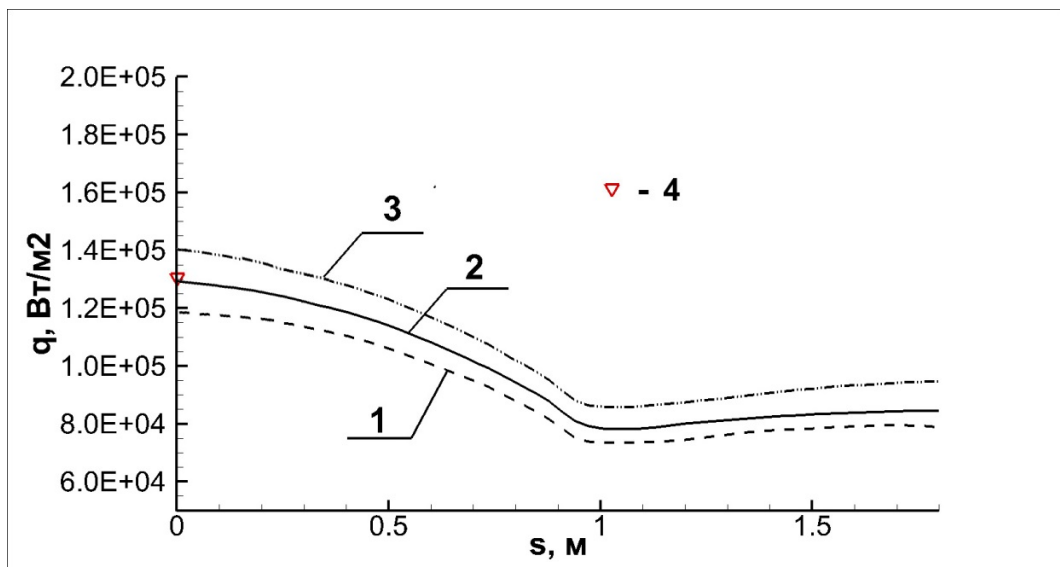
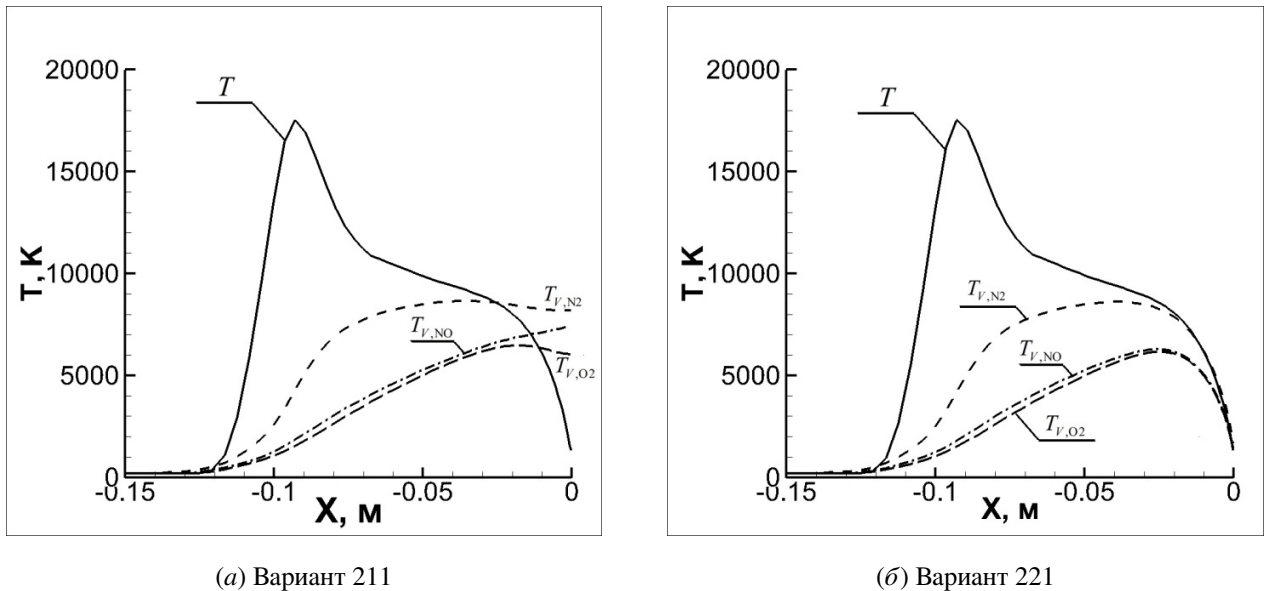


Рис. 11.11. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности: 1 - расчет 211; 2 - расчет 221; 3 - термически равновесный расчет варианта 221; 4 - эксперимент [223]



(а) Вариант 211

(б) Вариант 221

Рис. 11.12. Высота 84 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при различных способах задания граничных условий для колебательных температур

различие незначительно.

Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$) продемонстрировано на рисунке 8. Результат аналогичен предыдущему случаю: при использовании граничного условия $T_\vartheta|_W = T_W$ тепловой поток на всей передней поверхности выше, чем при использовании граничного условия $\frac{\partial T_\vartheta}{\partial n}|_W = 0$

На рисунке 11.15 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата на высоте 84 км при различной каталитической активности поверхности. На этой высоте получается существенное различие результатов расчета: при высокой каталитической активности поверхности тепловой поток выше почти вдвое по сравнению с неактивной поверхностью.

На рисунке 11.16 приведено распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности. С ростом каталитической активности усиливается рекомбинация атомов O и N непосредственно у стенки. У молекул O_2 и N_2 химическая энергия ниже, чем у O и N, поэтому энтальпия у стенки уменьшается, что приводит к увеличению градиента $\frac{\partial h}{\partial n}|_W$ и, соответственно, к росту теплового

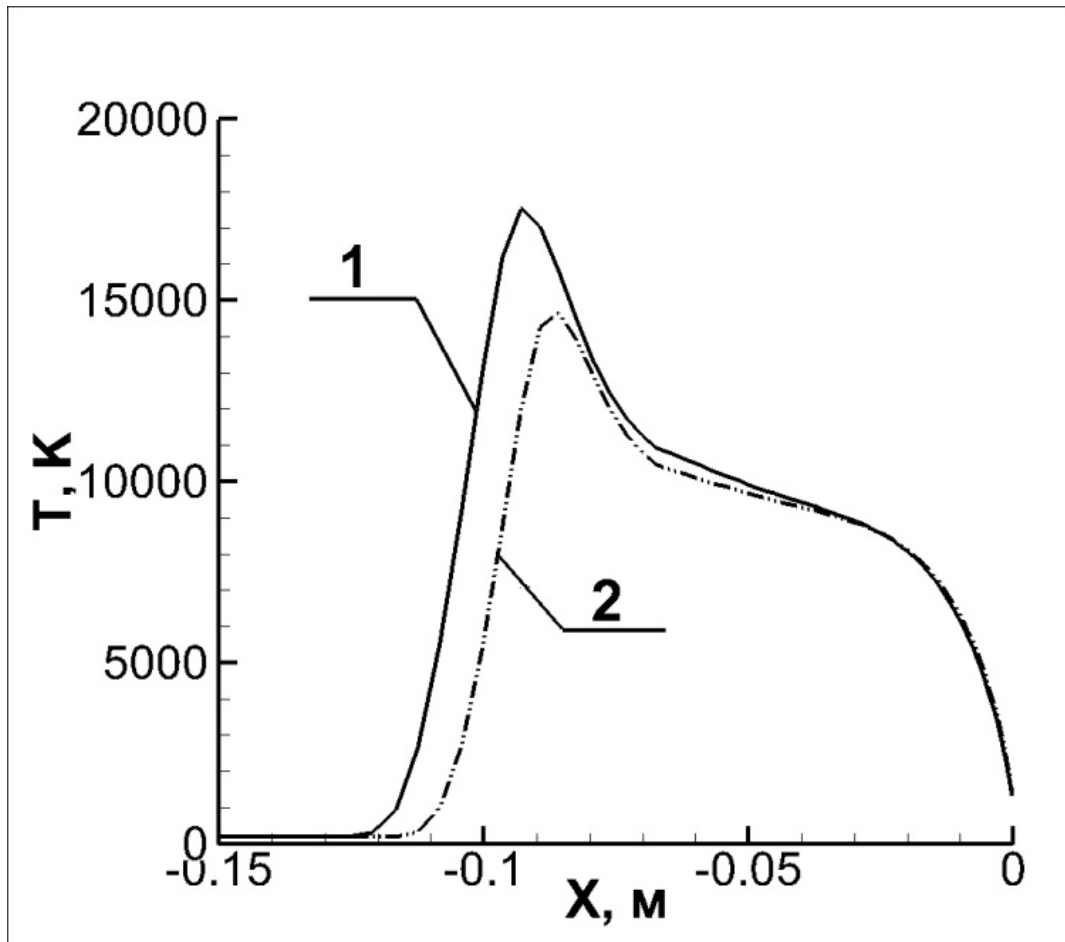


Рис. 11.13. Высота 84 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при условиях 221:

1 - термически неравновесный расчет; 2 - термически равновесный расчет

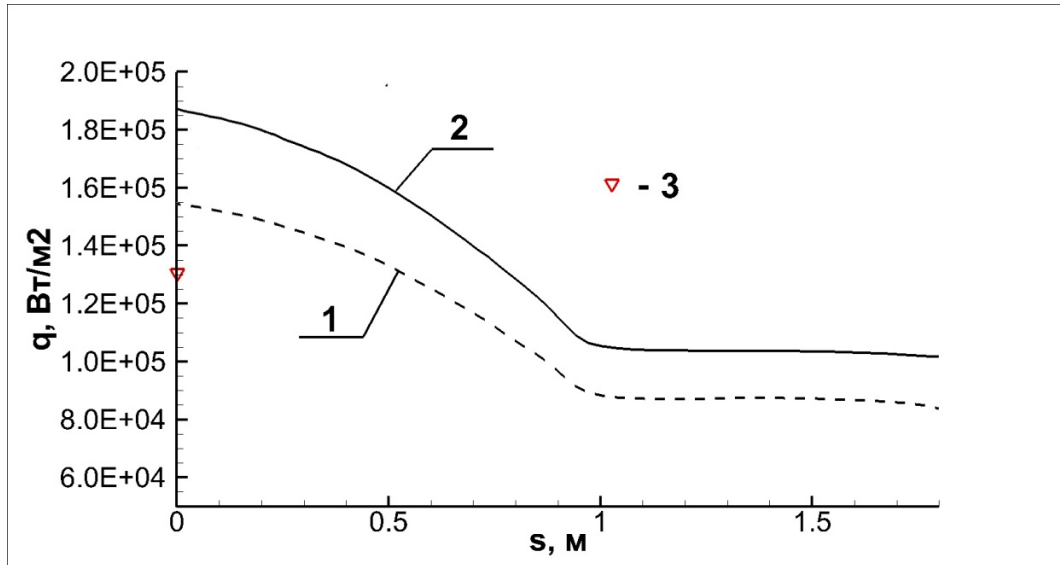


Рис. 11.14. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на поверхности с высокой каталитической активностью ($K_w=1000$):

1 - расчет 212; 2 - расчет 222; 3 - эксперимент [223]

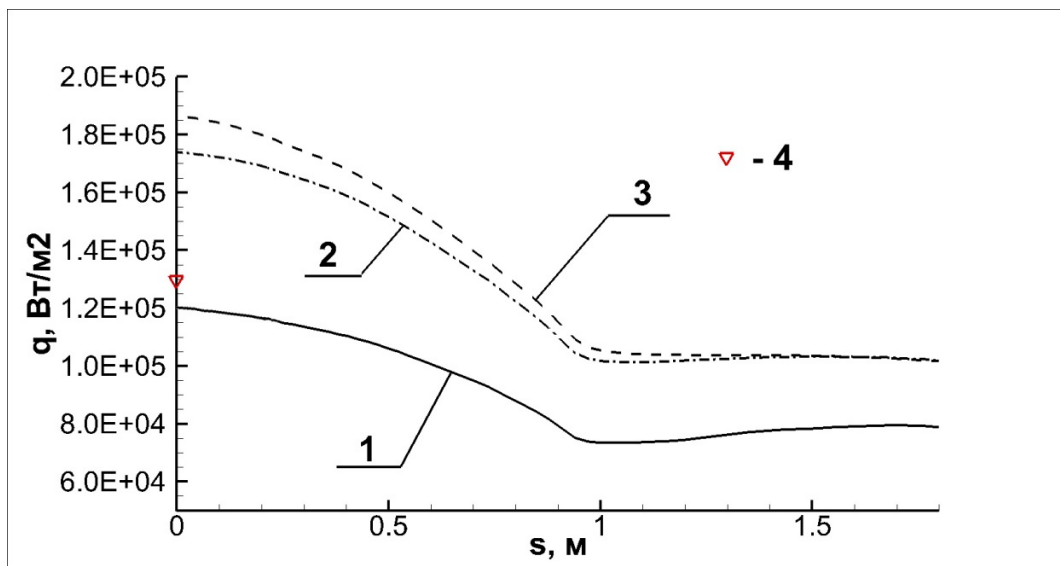
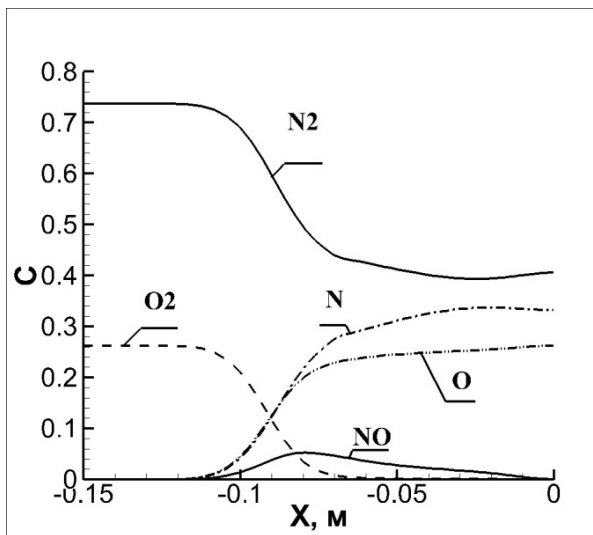


Рис. 11.15. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 84 км. Влияние каталитической активности поверхности

1 - расчет 221 (нулевая каталитическая активность); 2 - расчет 222 ($K_w=10$); 3 - расчет 222 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [223]



(a) Вариант 221

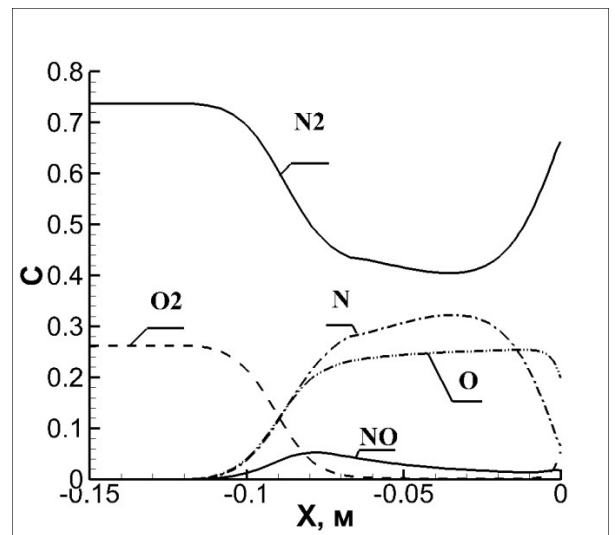
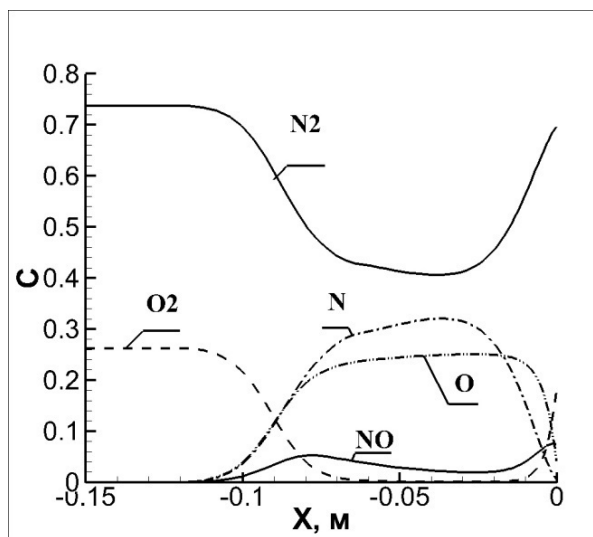
(б) Вариант 222 ($K_w = 10$)(в) Вариант 222 ($K_w = 1000$)

Рис. 11.16. Высота 84 км. Распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности

потока.

Аналогичные результаты получены для высот 96.8 км и 101.1 км.

На рисунке 11.17 представлено распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 96.8 км при нулевой каталитической активности. Расчет вариантов 211 и 221 очень слабо отличаются, т.е. влияние способа задания граничных условий для колебательных температур проявляется очень слабо.

Еще меньше отличие этих вариантов расчета проявляется на высоте 101.1

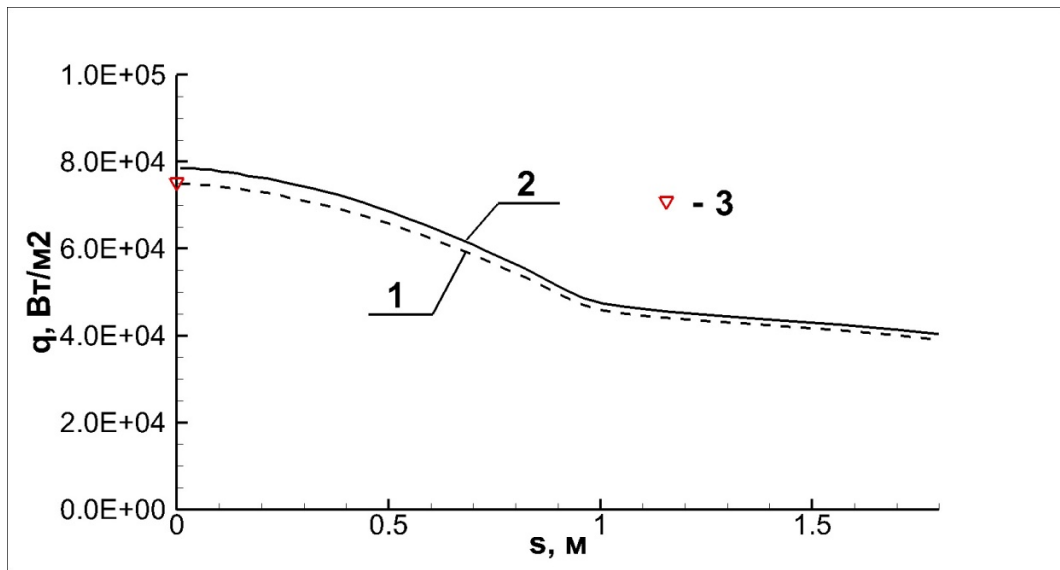
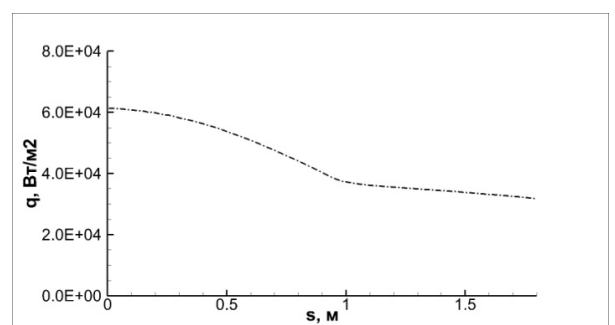
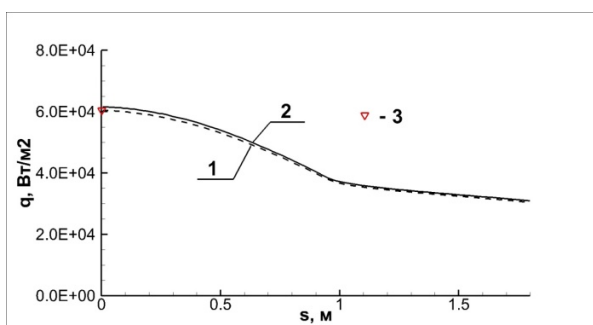
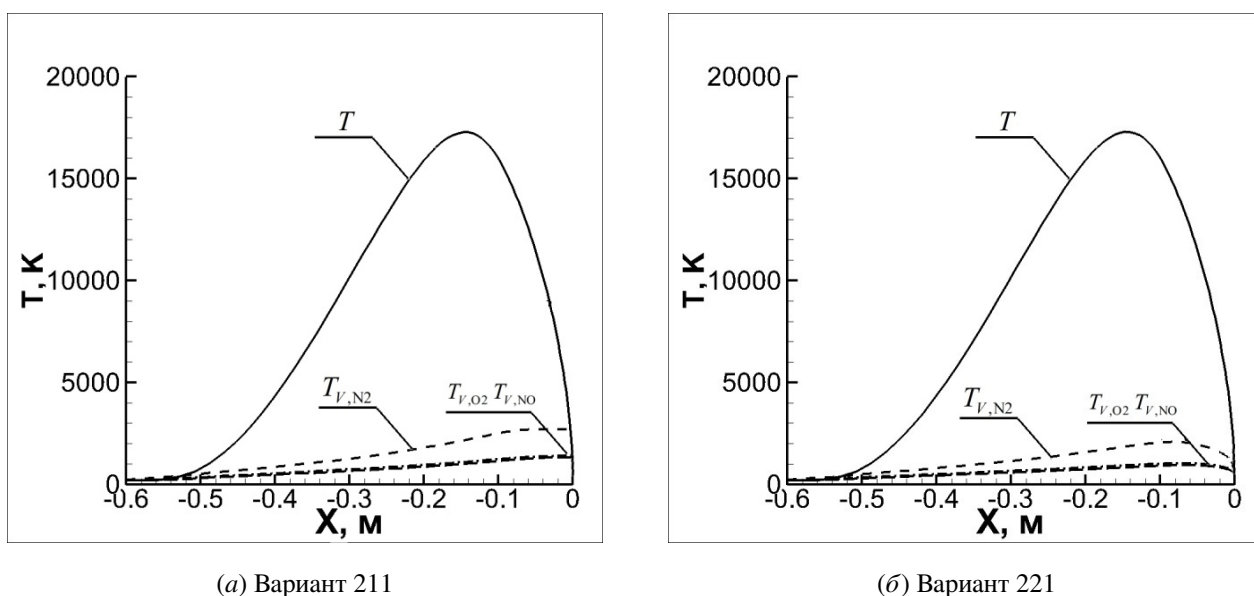


Рис. 11.17. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 96.8км. Влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности: 1 - расчет 211; 2 - расчет 221; 3 - эксперимент [223]



(а) влияние задания граничных условий для колебательных температур на некаталитической поверхности: 1 - расчет 211; 2 - расчет 221; 3 - эксперимент [225] (б) термически равновесный расчет варианта 221 на некаталитической поверхности

Рис. 11.18. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 101.1км.



(а) Вариант 211

(б) Вариант 221

Рис. 11.19. Высота 101.1 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при различных способах задания граничных условий для колебательных температур

км (см. рисунок 11.18, а). Наблюдаемое уменьшение влияния задания граничных условий для колебательных температур связано с тем, что роль последних с ростом высоты полета уменьшается (см. рисунок 11.19). Колебательные температуры существенно ниже, чем поступательно-вращательная: у азота она не выше 3000 К, а у кислорода и NO - порядка 1000 К. Для сравнения: на высоте 84 км эти температуры соответственно $\sim 8000\text{К}$ и $\sim 6000\text{К}$ (см. рисунок 11.12)

Также следует отметить, что расчеты теплового потока, использующие предположения о термическом равновесии и термической неравновесности, на этой высоте практически не отличаются (сравните рисунки 11.18, а и 11.18, б). Тем не менее, различие температур в этих двух вариантах по-прежнему остается очень большим (см. рисунок 11.20).

Анализ рисунков 11.12 и 11.19 позволяет сделать важный вывод о том, колебательные температуры различных компонентов сильно отличаются друг от друга. Таким образом, двухтемпературная модель колебательной неравновесности (T и T_{ϑ}) не соответствует наблюдаемым результатам расчета.

На рисунке 11.21 показано влияние каталитической активности поверхности на высоте 96.8 км.

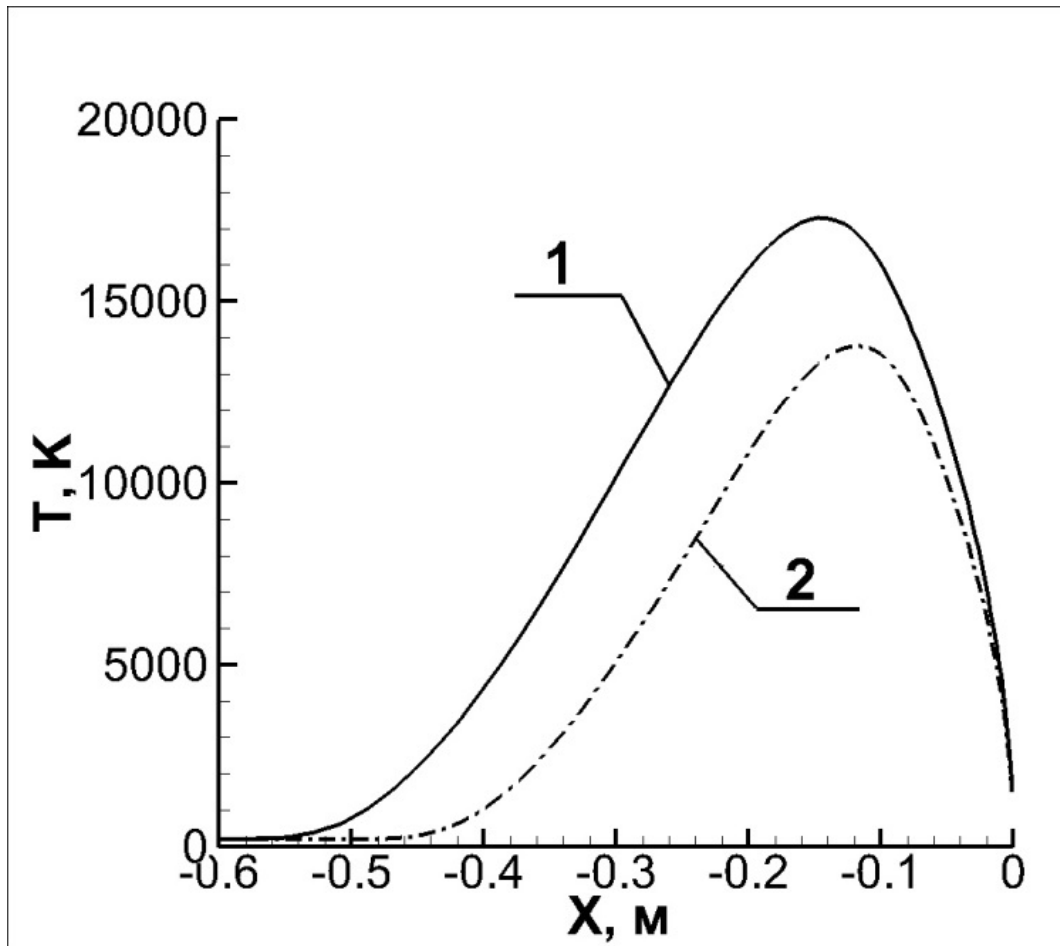


Рис. 11.20. Высота 101.1 км. Распределение температур в сжатом слое за головной ударной волной при условиях 221:1 - термически неравновесный расчет; 2 - термически равновесный расчет

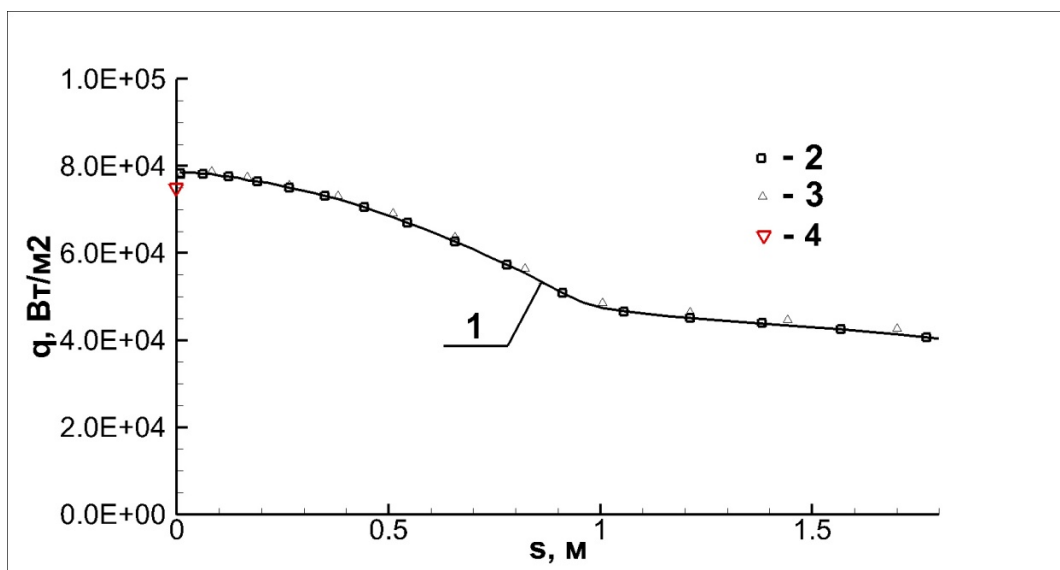
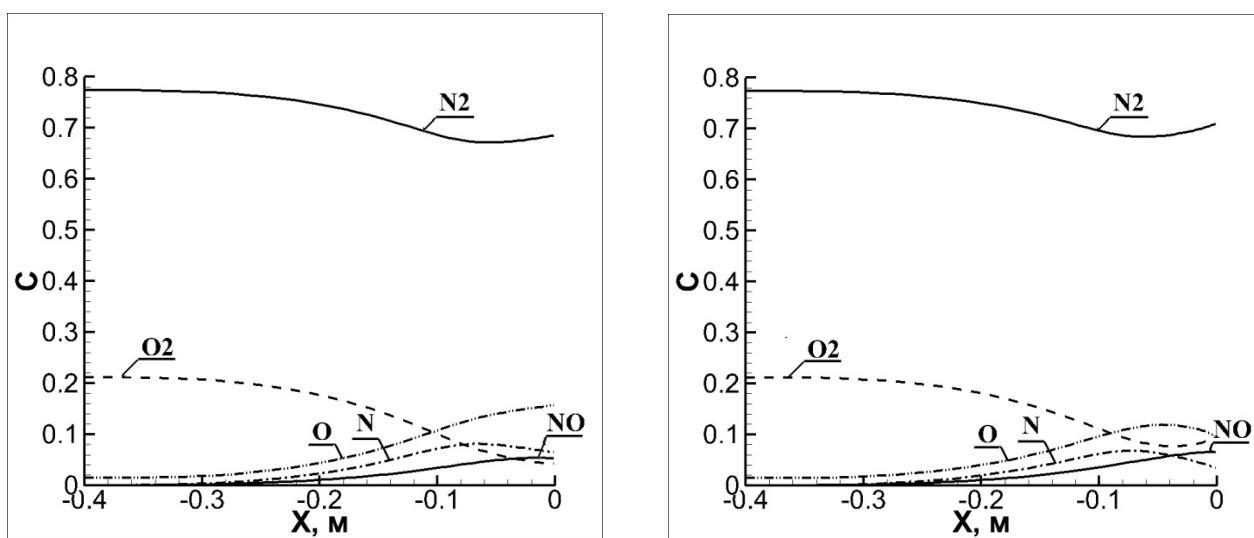


Рис. 11.21. Распределение теплового потока вдоль поверхности аппарата OREX на высоте 96.8 км. Влияние каталитической активности поверхности: 1 - расчет 221 (нулевая каталитичность); 2 - расчет 222 ($K_w=10$); 3 - расчет 222 ($K_w=1000$); 4 - эксперимент [223]



(a) Вариант 221

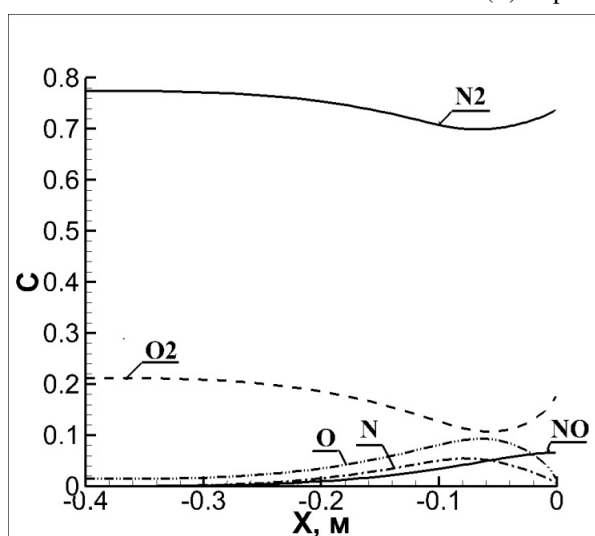
(б) Вариант 222 ($K_w = 10$)(в) Вариант 222 ($K_w = 1000$)

Рис. 11.22. Высота 96,8 км. Распределение массовых долей химических компонентов в сжатом слое за головной ударной волной при различной каталитической активности поверхности

Связано это с тем, что с ростом высоты уменьшается число Дамкёлера, течение "замораживается" и реакции диссоциации и рекомбинации проходят слабо (см. рисунок 11.22).

На рисунке 11.23 представлено распределение плотности электронов в районе электростатического зонда в зависимости от высоты полета. Сопоставление результатов расчета (вариант 221) с экспериментальными данными [223] показывает удовлетворительное совпадение.

По результатам расчета получено хорошее совпадение результатов расче-

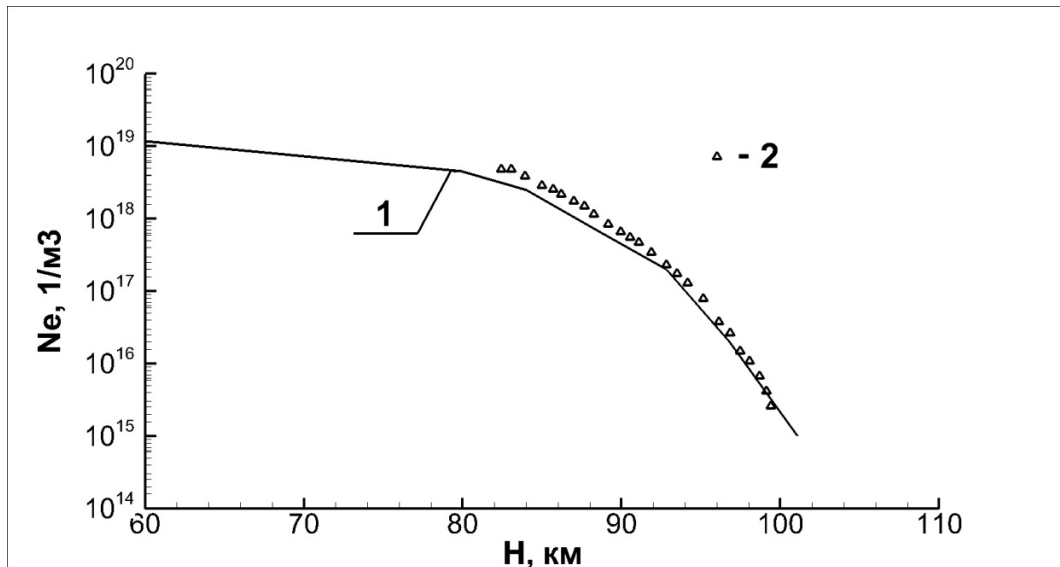


Рис. 11.23. Плотность электронов в районе электростатического зонда ($s = 1.9135$ м, $n = 5.8335 \cdot 10^{-2}$ м) в зависимости от высоты полета: 1 - расчет 221; 2 - эксперимент [223]

та с экспериментальными данными по измерению тепловых потоков в стенку и концентрации электронов.

Проанализировано влияние различных факторов на результаты расчета. Показано, что:

1) При задании значений колебательных температур у стенки равными температуре стенки плотность теплового потока выше, чем при условии нулевого градиента этих температур на стенке; это обусловлено тем, что во втором случае отсутствует вклад колебательных температур в перенос тепла возле стенки. С ростом высоты это отличие несколько уменьшается, что объясняется небольшими значениями колебательных температур по сравнению с поступательной и, соответственно, меньшим их вкладом в общий тепловой поток.

2) Увеличение каталитической активности стенки для высот меньше 90 км приводит к существенному росту плотности теплового потока; это обусловлено тем, что возле стенки усиливается рекомбинация молекул O_2 и N_2 и происходит переход химической энергии в тепловую. Однако, на больших высотах происходит постепенное "замораживание" химических реакций, и, следовательно, влияние каталитической активности пропадает.

- 3) При использовании модели термического равновесия, т.е. предположения, что все энергетические моды находятся в равновесии, температура в сжатом слое за скачком уплотнения получается существенно ниже по сравнению с поступательной температурой в неравновесном расчете ($\sim 15000K$ и $\sim 18000K$ соответственно). Причем это явление наблюдается на всем диапазоне рассматриваемых высот. В непосредственной близости от стенки, однако, это отличие становится незначительным, и температура в равновесном расчете даже несколько выше на высотах до 90 км, что приводит к увеличению теплового потока.
- 4) колебательные температуры различных компонентов сильно отличаются друг от друга. Таким образом, двухтемпературная модель колебательной неравновесности не соответствует действительности.

11.3. Обтекание аппарата Pioneer-Venus

Было проведено численное моделирование обтекания спускаемого в атмосфере Венеры аппарата «Pioneer-Venus», по которому имеются данные летного эксперимента о тепловых потоках в окрестности передней критической точки в ходе спуска [226]. В процессе выполнения миссии было запущено четыре спускаемых аппарата. В настоящей работе рассматривается аппарат NP (North Probe).

Траекторные параметры брались в соответствии с данными, приведенными в [227]. Данные о венерианской атмосфере – в соответствии с [228, 229].

Рассчитывался участок траектории спуска с высоты 90 км до высоты 75 км.

На рисунке 11.24 показана зависимость теплового потока в окрестности передней критической точки по времени. За нулевой момент времени в источниках принимается время, когда аппарат находился на высоте в 200 км. Полученные расчетные данные сравниваются с данными летного эксперимента [226]. При расчете тепловых поток учитывалась поправка на тепловой эффект пиролиза теплозащитного покрытия аппарата в соответствии с данными Парка [230].

На рисунке 11.25 показана зависимость теплового потока для различных

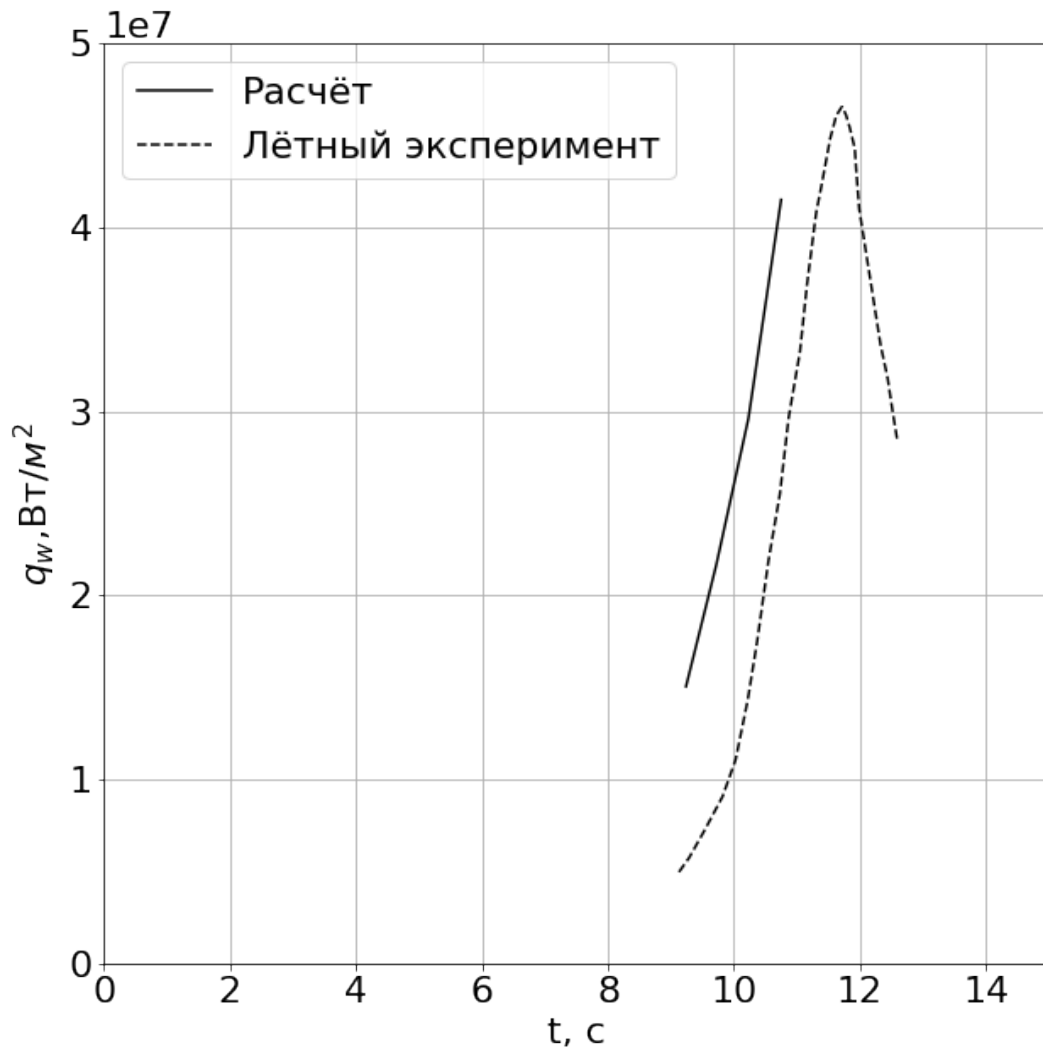


Рис. 11.24. Зависимость теплового потока в окрестности передней критической точки от времени спуска ($t=0$ с. соответствует высоте 200 км) в сравнении с летными данными [226]

высот полета (использовались траекторные данные [227]).

Приведенные расчетные данные показывают удовлетворительную сходимость с данными летного эксперимента.

На рисунке 11.26 представлены поля основных параметров для высоты 80 км. На рисунках 11.27 и 11.28 – распределение по оси основных химических компонентов и ионов соответственно в зависимости от расстояния от стенки.

Как видно из рисунков 11.27 и 11.28 в районе скачка уплотнения весь углекислый газ, составляющий основу венерианской атмосферы, разлагается на газообразный углерод, монооксид углерода и атомарный кислород. Также наблюдается ионизация газа. И хотя в процентном соотношении концентрация ионов невели-

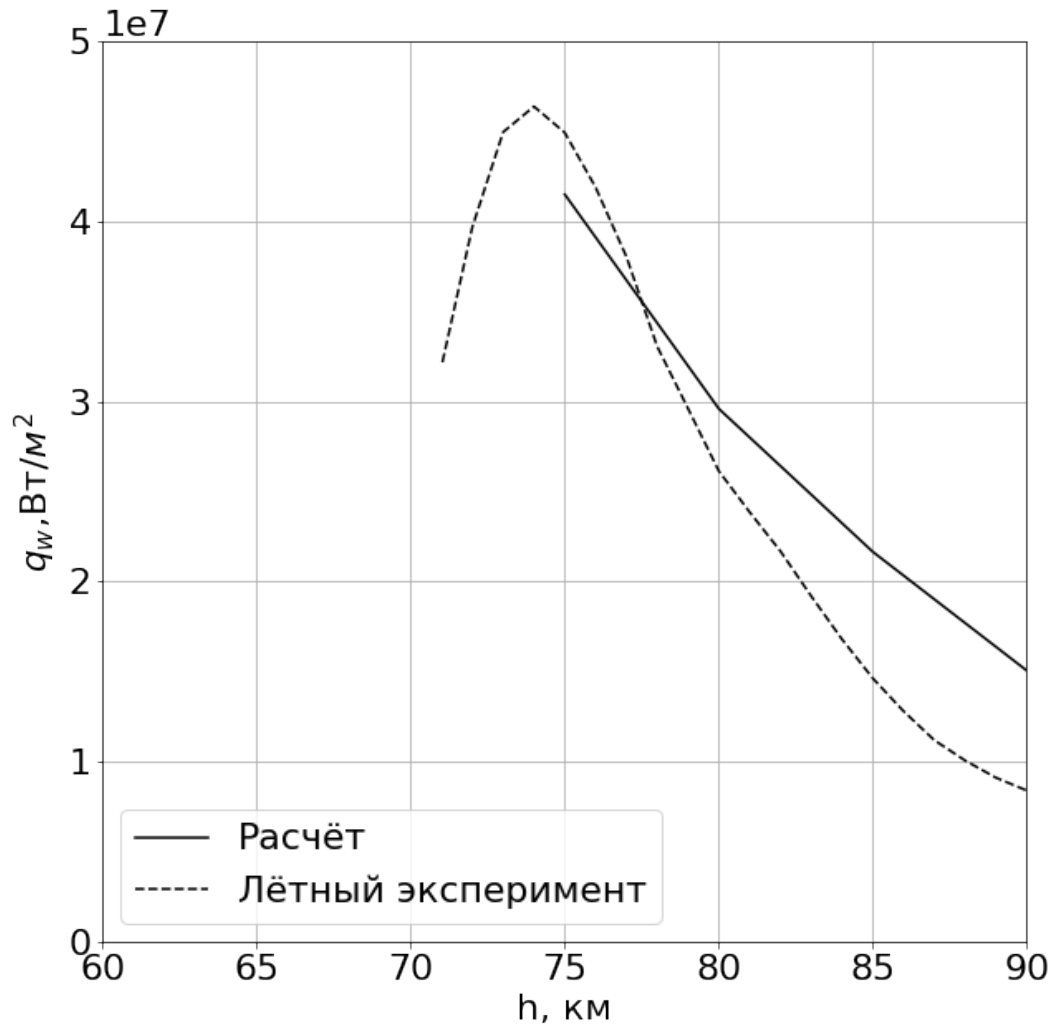


Рис. 11.25. Зависимость теплового потока от высоты полета в сравнении с летными данными [226].

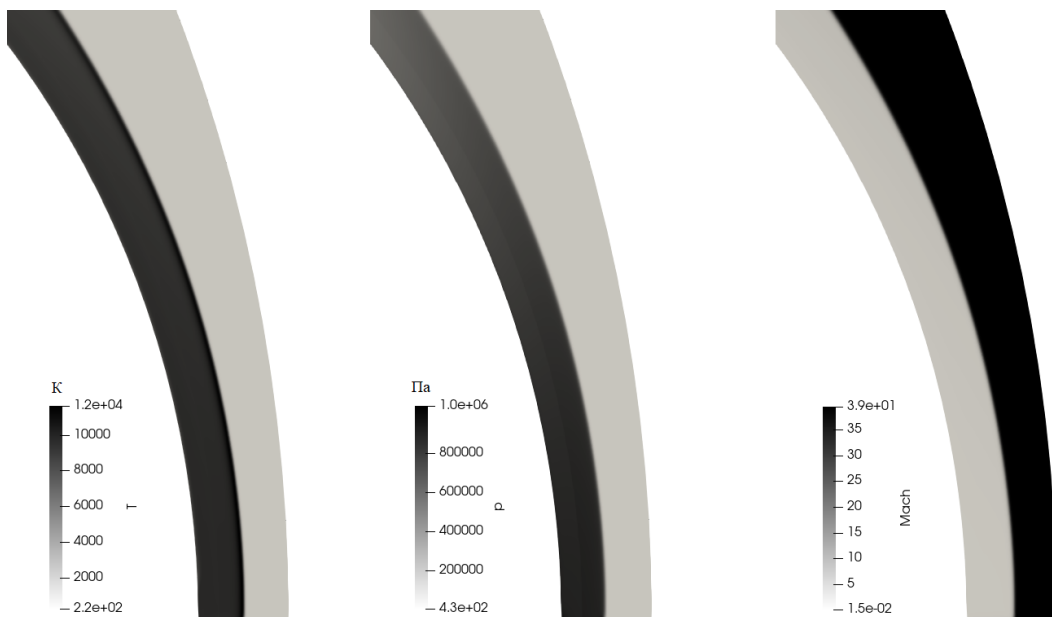


Рис. 11.26. Пространственное распределение полей температуры, давления и числа Маха на высоте 80 км.

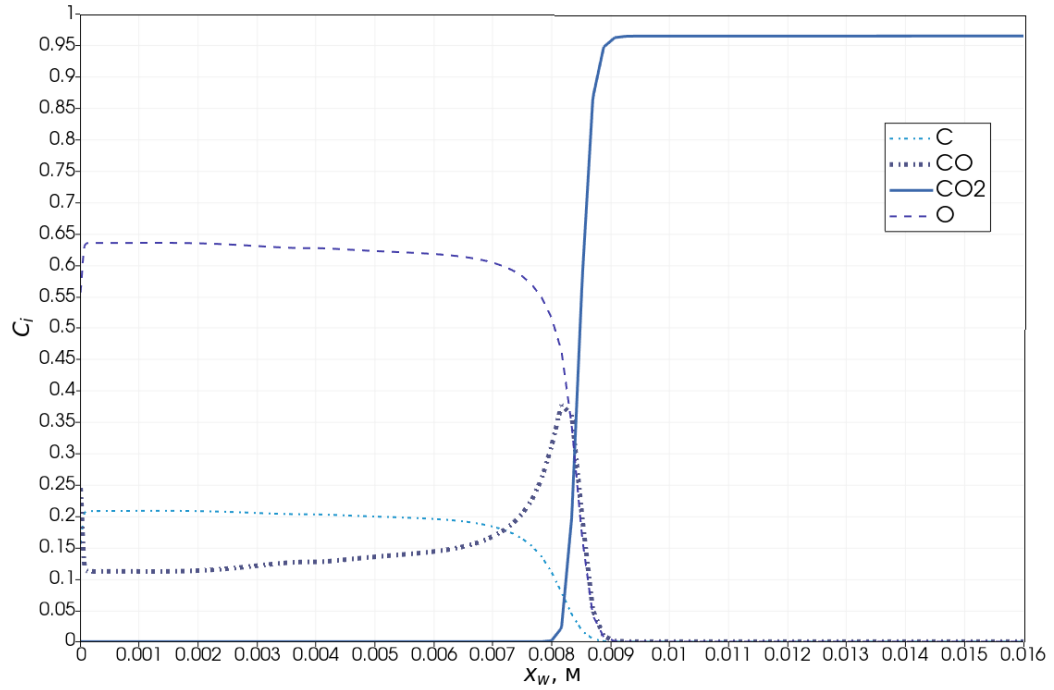


Рис. 11.27. Осевое распределение концентраций основных химических компонентов в зависимости от расстояния от стенки на высоте 80 км

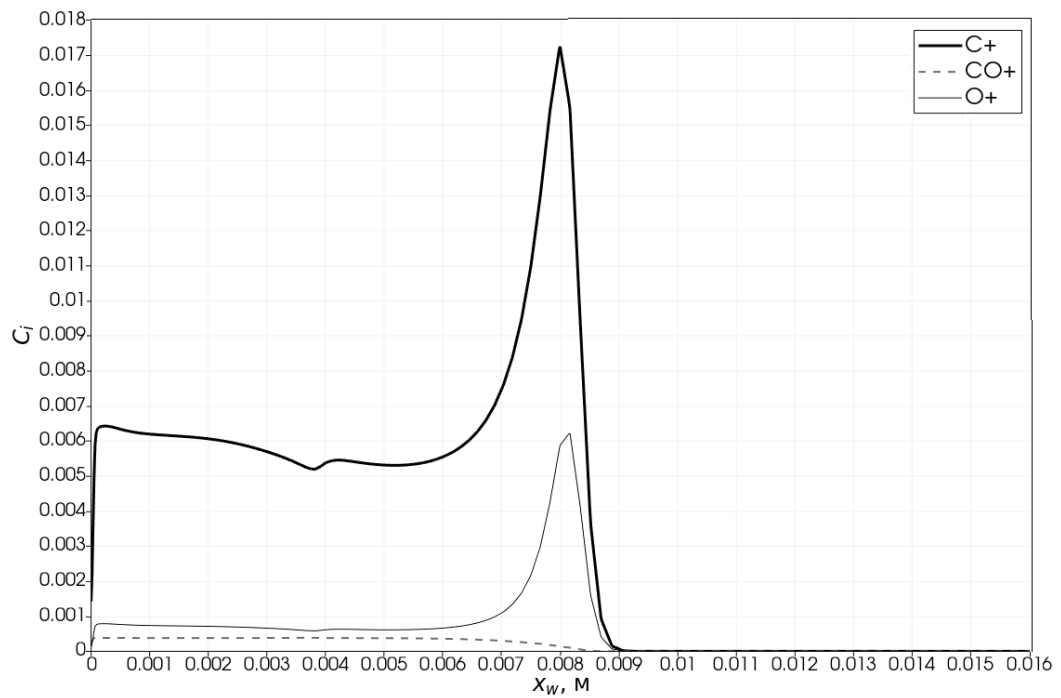


Рис. 11.28. Осевое распределение концентраций ионов в зависимости от расстояния от стенки на высоте 80 км

ка, реакции ионизации оказывают существенный тепловой эффект. Без их учета температура в сжатом слое достигает абсолютно нефизических значений (свыше 30 000К).

11.4. Течение в донной области

Теоретическое исследование течений в донной области и в турбулентном следе важно во многих аэрокосмических приложениях. Низкое давление в донной зоне вызывает сопротивление, которое влияет на устойчивость, траекторию и дальность полета. Обратные потоки могут значительно увеличить тепловой поток к элементам конструкции.

Принято считать (см. например, [231, 232], что теоретический подход, основанный на использовании осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса, не очень успешно описывает подобные течения из-за нескольких причин, таких, как неустойчивость зоны рециркуляции и трудности моделирования турбулентных характеристик в сжимаемом слое смешения.

Отдельные части данного исследования публиковались автором в [35].

В работе [233] показано, что очень большое влияние на распределение параметров в донной области и в следе оказывает «предистория» потока, т.е. течение вдоль корпуса цилиндрической части ЛА и носовой части.

В данном разделе приводится анализ применимости различных моделей турбулентности для расчета течений в донной области и турбулентном следе.

Типичная картина течения в донной области представлена на рисунке 11.29.

Сверхзвуковой набегающий поток после корпуса подвергается сильному расширению с центром в верхней точке дна, и турбулентный пограничный слой отделяется от тела. Образуется слой смешения, который отделяет внешний невязкий поток от относительно большой области рециркуляции непосредственно после основания.

Когда слой смешения приближается к оси симметрии, происходит процесс

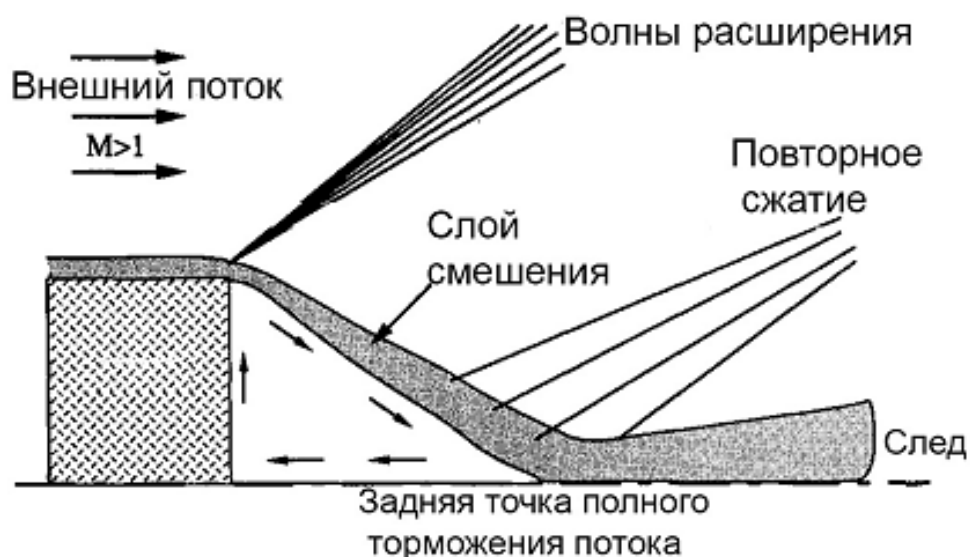


Рис. 11.29. Схема течения в донной области летательного аппарата, движущегося со сверхзвуковой скоростью

повторного сжатия, который в конечном итоге выравнивает поле течения с осью. Задняя точка торможения, в которой средняя скорость равна нулю, расположена на средней линии и отделяет область рециркуляции от следа, развивающегося ниже по потоку.

В качестве источника данных для проверки метода расчета использовались эксперименты из [233–235]. Параметры набегающего потока: $M=2,5$, $T=130\text{K}$, $p=30141\text{ Па}$. Диаметр корпуса=63,5мм.

Расчетная сетка для описания обтекания тела, течения в донной области и в следе представлена на рисунке 11.30.

На рисунке 11.31 представлены результаты расчета скорости по оси в области дна и в следе с использованием различных моделей турбулентности.

На рисунке 11.32 представлена зависимость давления на поверхность днища от числа Маха набегающего потока набегающего потока

Как видно, из проведенных расчетов, наиболее близкие к экспериментам данные позволяет получить модель переноса напряжений Рейнольдса RSM, а также - представленная в настоящей работе трехпараметрическая модель $k - g - V_n$, результаты которой слабо отличаются от семипараметрической модели RSM.

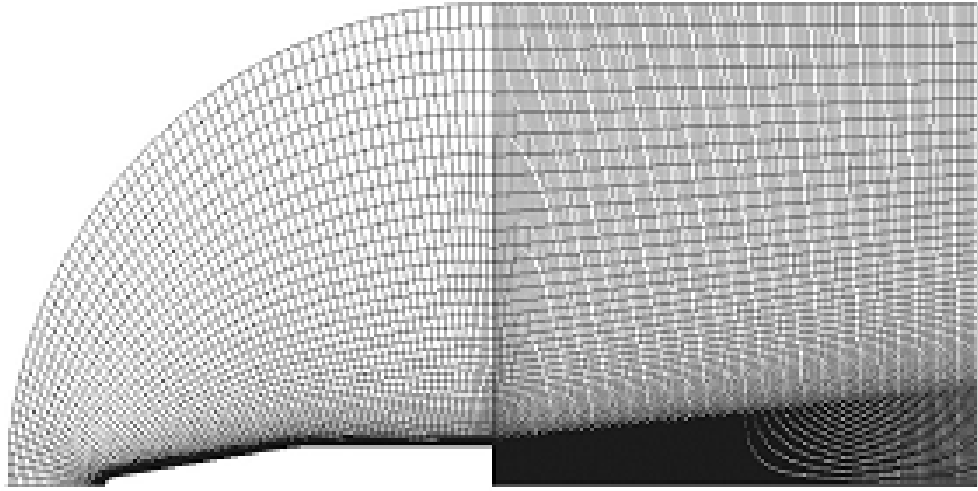
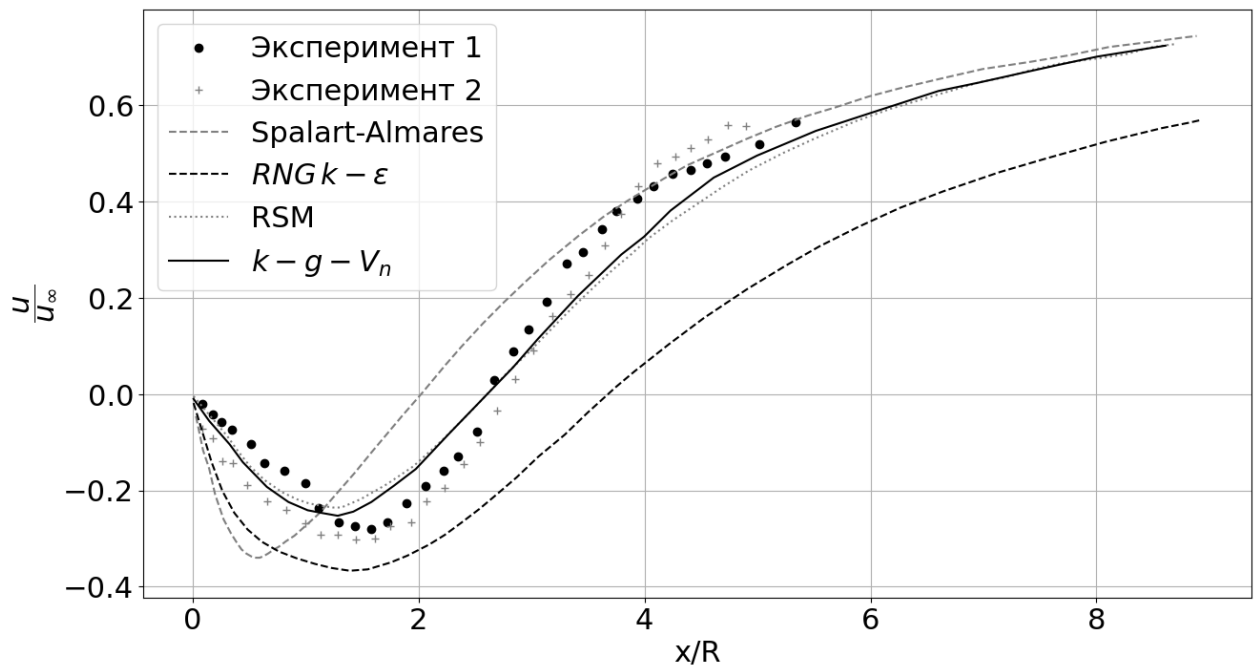


Рис. 11.30. Расчетная сетка

Рис. 11.31. Распределение скорости в донной области цилиндрической модели в сверхзвуковом потоке $M = 2,5$. Эксперимент 1 - [233], Эксперимент 2 - [234]

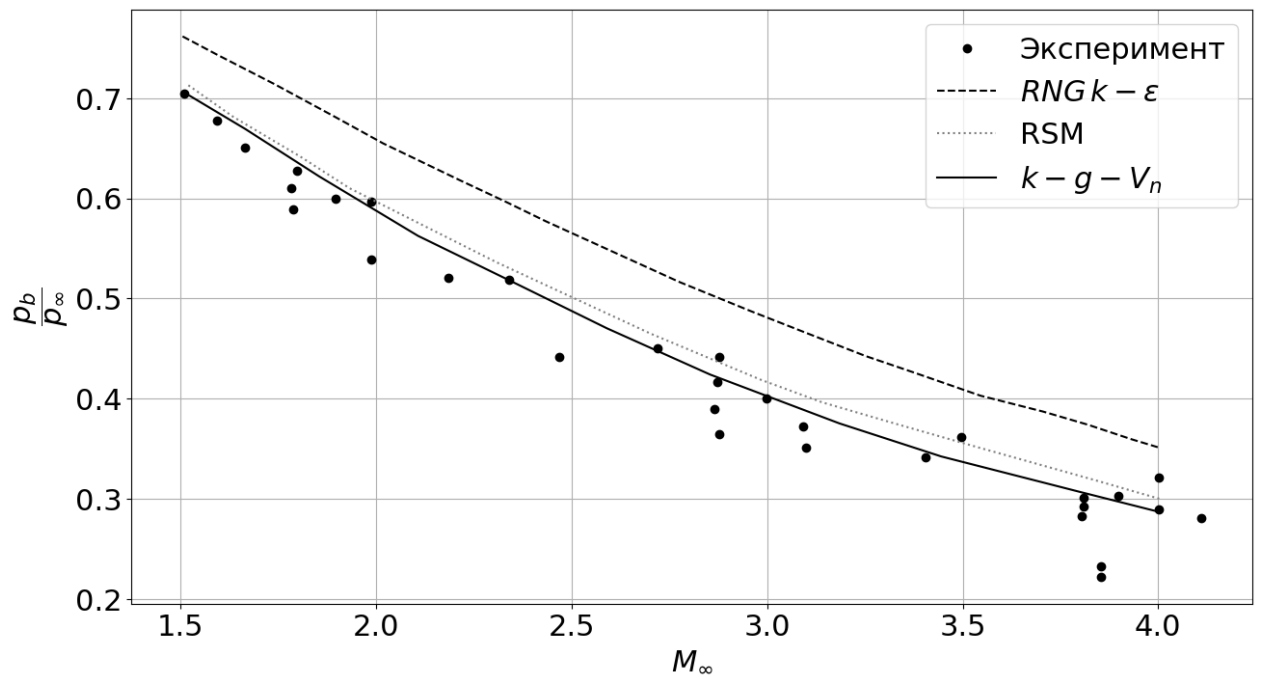


Рис. 11.32. Изменение давления на поверхности днища самолета в зависимости от числа Маха потока.

Эксперимент - данные [235]

Заключение

В рамках данной работы были достигнуты следующие результаты:

1. Сформулирована полностью связанная система уравнений динамики высокоэнтальпийного газа в произвольной системе координат.
2. Разработана математическая модель, позволяющая описать высокоэнтальпийное химически и термически неравновесное течение газа, позволяющая производить расчеты в диапазоне чисел Кнудсена от 0 до 10 и широком диапазоне чисел Маха.
3. Построен численный метод решения связанной системы уравнений, описывающих химически и термически неравновесное течение газа с жёсткими источниками на произвольных геометриях. С точки зрения теории разностных схем, метод обладает безусловной устойчивостью, что позволяет с его помощью эффективно проводить численное решение задач с высокой степенью химической и термической неравновесности.
4. Выработаны методические рекомендации по организации параллельных вычислений при численном решении уравнений механики сплошной среды, направленные на ускорение расчётов
5. Исследовано влияние коэффициента второй вязкости на газодинамические характеристики. Сформулирован критерий необходимости учета ненулевого коэффициента второй вязкости. Показано, что на больших высотах (при низких давлениях) корректный учет влияния второй вязкости позволяет получить картину течения и взаимодействия потока со стенкой гораздо более близкую к наблюдаемой в эксперименте.
6. Разработана методика расчета излучения термически неравновесной газовой смеси, основанная на принципах метода k-распределения, позволившая

получить результаты по точности сопоставимые с методом прямого расчета по спектральным линиям (LBL), но существенно более эффективная с точки зрения использования вычислительных ресурсов.

7. Построена система квазигазодинамических уравнений для термически неравновесного газа.
8. Проведены расчеты разреженных течений с учетом термической неравновесности. Сопоставление результатов указанных расчетов с экспериментальными данными показало хорошую степень сходимости. В отдельных случаях удалось увеличить точность расчетов до 4 раз.
9. Разработана и апробирована неизотропная трехпараметрическая модель турбулентности для высокоскоростных течений, позволяющая адекватно учитывать влияние сжимаемости на турбулентные характеристики. Показано, что предлагаемая модель турбулентности может быть эффективно применена для расчета свободных и пристеночных течений в широком круге задач авиационной и космической техники.
10. Разработана и апробирована инженерная модель перемежаемости (ламинарно-турбулентного перехода) для высокоскоростных течений.
11. Проведены расчеты и сопоставление с экспериментами для ряда задач обтекания тел высокоэнтальпийным потоком. Сопоставление результатов указанных расчетов с экспериментальными данными показало хорошую степень сходимости.

Список сокращений и условных обозначений

- δ_i^j — символ Кронекера
- $\dot{\omega}_s$ — скорость образования компонента s в результате химических реакций
- Γ_{ij}^k — символы Кристоффеля второго рода
- γ — параметр перемежаемости
- κ_η — спектральный коэффициент поглощения
- Kn — число Кнудсена
- μ — динамический коэффициент вязкости
- μ_T — турбулентная вязкость
- ∇_j — ковариантная производная
- ω — удельная скорость диссипации турбулентной энергии
- ρ — плотность компонента s
- ρ — плотность
- σ^{ij} — тензор напряжений
- τ_0 — среднее время свободного пробега частиц
- τ_E — характерное время релаксации внутренних степеней свободы
- τ_e — время электронного возбуждения/деактивации
- τ_I — время ионизации/рекомбинации
- τ_{chem} — характерное время протекания химических реакций
- τ_{R-T} — время вращательной релаксации
- τ_{T-T} — время поступательной релаксации
- τ_{V-T} — время колебательной релаксации
- τ^{ij} — тензор вязких напряжений
- τ_M — время релаксации функции распределения к локально-максвелловскому виду
- ε — скорость диссипации турбулентной энергии
- ε — энергия молекулы
- e_i — базисные векторы

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} (e_1, e_1) & (e_1, e_2) & (e_1, e_3) \\ (e_2, e_1) & (e_2, e_2) & (e_2, e_3) \\ (e_3, e_1) & (e_3, e_2) & (e_3, e_3) \end{pmatrix} \text{ — матрица Грама}$$

\mathbf{J} — матрица Якоби

ζ — коэффициент второй вязкости

$c = \xi - \mathbf{u}$ — скорость хаотического движения частицы газа

$$c_{crit} = \sqrt{\frac{2\gamma RT_{tot}}{\gamma + 1}} \text{ — критическая скорость звука}$$

c_{int} — теплоемкость по внутренним степеням свободы молекулы

D — обобщенный коэффициент бинарной диффузии

E — полная энергия

g — квадратный корень из временного масштаба турбулентности

g — определитель метрического тензора

g_{ik} — метрический тензор

H — полная энтальпия

I_η — спектральная энергетическая яркость

i_ϑ — число колебательных степеней свободы молекулы

i_{rot} — число вращательных степеней свободы молекулы

J — определитель матрица Якоби

k — постоянная Больцмана

$K = \widetilde{u_i''u_i''}/2$ — кинетическая энергия турбулентности

m_0 — масса частицы

N_c — количество компонентов газовой смеси

p — давление

R_U — универсальная газовая постоянная

$S_{mn} = \frac{1}{2} (\nabla_m u_n + \nabla_n u_m)$ — тензор скоростей деформаций

u^i — компоненты вектора скорости

$V - T$ — колебательно-поступательный переход

$V - V$ — колебательно-колебательный переход

X_s — мольная доля компонента s

$\nu'_{k,s}$ — стехиометрический коэффициент

$C_s = \rho_s / \rho$ — массовая доля компонента s

$V_{s,j}$ — диффузионная скорость компонента s в j -ом направлении

M_Σ — кажущаяся молекулярная масса газовой смеси

TR — параметр в случае равновесия поступательных и вращательных степеней свободы молекулы

ДЛА — двигатель летательного аппарата

КГД — квазигазодинамические уравнения

НС — уравнения Навье-Стокса

Список литературы

1. Краев В. М., Янышев Д. С. К вопросу о расчёте турбулентных течений с переменным расходом в каналах ЭУ ЛА и оптимизации процессов с ними связанных // Решетневские чтения. — Красноярск. — 2009. — Т. 1. — С. 116–117.
2. Kraev V. M., Yanyshev D. S. On the Analysis of Turbulent Transient Flows in Channels // International Heat Transfer Conference. — 2010. — Vol. 49378. — P. 395–401.
3. Краев В. М., Янышев Д. С. Обобщение экспериментальных данных о вихревой вязкости при течении газов в каналах в условиях монотонного изменения расхода // Решетневские чтения. — Красноярск. — 2011. — Т. 1. — С. 182–183.
4. Краев В. М., Янышев Д. С. Разработка модели турбулентности для гидродинамически нестационарного течения газа в каналах // Труды Шестой Российской национальной конференции по теплообмену. — Москва. — 2014. — Т. 1. — С. 224–227.
5. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Модель турбулентности k - ϵ - V для высокоскоростных свободных и пристеночных течений // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2016). — Москва : МАИ. — 2016. — С. 100–103.
6. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Характеристики газовой динамики и неравновесного излучения сверхзвуковой струи // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2016). — Москва : МАИ. — 2016. — С. 103–105.
7. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Расчет ламинарно-турбулентного перехода на пластине в гиперзвуковом потоке // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2016). — Москва : МАИ. — 2016. — С. 257–260.

8. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Трехпараметрическая модель турбулентности для высокоскоростных течений // Тезисы докладов и сообщений XV Минского международного форума по тепло- и массообмену. — Минск : НАН РБ. — 2016. — С. 145–149.
9. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Математическая модель гидродинамики и тепломассообмена продуктов сгорания в полостях переменного объема // Тезисы докладов и сообщений XV Минского международного форума по тепло- и массообмену. — Минск : НАН РБ. — 2016. — С. 44–48.
10. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Влияние турбулентности на скорости реакций в химически неравновесных течениях // Материалы XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и прикладным программным системам. — Москва : МАИ. — 2017. — С. 515–516.
11. Molchanov A. M., Bykov L. V., Yanyshv D. S. Effective turbulence model for high speed flow for general engineering applications // J. Eng. Appl. Sci. — 2018. — Vol. 13. — P. 5556–5560.
12. Математическое моделирование рабочего процесса в прямоточном двигателе гипотетического космического летательного аппарата, предназначенного для работы в атмосфере Юпитера / Грибиненко Д. В., Мякочин А. С., Молчанов А. М. и Янышев Д. С. // Математическое моделирование (Тезисы II Международной конференции). — Москва : Изд-во Перо. — 2021. — С. 38–39.
13. Молчанов А. М., Янышев Д. С., Грибиненко Д. В. Влияние закрутки на устойчивость горения в струйном диффузионном пламени // Тепломассообмен и гидродинамика в закрученных потоках. — Москва. — 2021. — С. 177–179.
14. Молчанов А. М., Янышев Д. С., Быков Л. В. О роли второй вязкости и справедливости гипотезы стокса при математическом моделировании теплообмена и гидродинамики в высокоскоростных течениях // Материалы Восьмой Российской национальной конференции по теплообмену. — 2022. — С. 24–25.
15. Вычислительная механика сплошных сред в задачах авиационной и косми-

- ческой техники / Быков Л. В., Молчанов А. М., Щербаков М. А. и Янышев Д. С. — Москва : URSS, 2019. — С. 668.
16. Янышев Д. С., Быков Л. В., Молчанов А. М. Сеточные модели для решения инженерных теплофизических задач в среде ANSYS. — Москва : URSS, 2021. — С. 264.
 17. Янышев Д. С., Быков Л. В., Молчанов А. М. Основы вычислительного теплообмена и гидродинамики. — Москва : URSS, 2021. — С. 200.
 18. Численное моделирование аэродинамики высоких скоростей / Пашков О. А., Янышев Д. С., Молчанов А. М., Зубко А. А. и Платонов И. М. — Москва : Знанием-М, 2023. — С. 186.
 19. Краев В. М., Янышев Д. С. Нестационарные турбулентные течения в каналах энергоустановок. — Красноярск : СибГАУ, 2014. — С. 276.
 20. Быков Л. В., Молчанов А. М., Янышев Д. С. Пути перехода к турбулентности // Гиперзвуковые летательные аппараты / под ред. Дегтяря В. Г., Сона Э. Е. — Москва : Янус-К, 2018. — Т. 2. — С. 647–685 с.
 21. Краев В. М., Мякочин А. С., Янышев Д. С. Эмпирическая модель расчета вихревой вязкости при течении газов в каналах в условиях монотонного изменения расхода // Тепловые процессы в технике. — 2012. — Т. 4, № 2. — С. 50–55.
 22. Molchanov A., Yanyshv D., Bykov L. Numerical modeling of two-phase high speed jet with non-equilibrium solid phase crystallization // Materials Science and Engineering. — 2016. — Vol. 158, no. 1. — P. 012070.
 23. Современные подходы к расчету характеристик течения при ламинарно-турбулентном переходе в пограничном слое / Быков Л. В., Молчанов А. М., Янышев Д. С. и Платонов И. М. // Теплофизика высоких температур. — 2018. — Т. 56, № 1. — С. 104–120.
 24. Molchanov A., Yanyshv D., Bykov L. Simulation of high-speed nonequilibrium heterogeneous turbulent flows with phase transition // Journal of Physics. — 2017. — Vol. 891, no. 1. — P. 012051.

25. Molchanov A., Yanyshv D., Bykov L. Influence of turbulent fluctuations on non-equilibrium chemical reactions in the flow // *Journal of Physics*. — 2017. — Vol. 891, no. 1. — P. 012106.
26. Molchanov A. M., Yanyshv D. S., Bykov L. V. Influence of channel geometrical properties and turbulence on propellant ignition in hypersonic ramjet combustion chamber // *Journal of Physics*. — 2017. — Vol. 891, no. 1. — P. 012107.
27. Influence of geometric parameters and chemical kinetics model on combustion in a supersonic flow / Molchanov A. M., Bykov L. V., Platonov I. M., and Yanyshv D. S. // *International Journal of Fluid Mechanics Research*. — 2017. — Vol. 44, no. 6.
28. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Расчет теплового излучения колебательно-неравновесного потока газа методом k-распределения // *Теплофизика и аэромеханика*. — 2017. — Т. 24, № 3. — С. 411–432.
29. Молчанов А. М., Быков Л. В., Янышев Д. С. Трехпараметрическая модель турбулентности для высокоскоростных течений // *Инженерно-физический журнал*. — 2018. — Т. 91, № 3. — С. 720–727.
30. Математическое моделирование динамического отделения полезной нагрузки от самолета-носителя / Быков Л. В., Пашков О. А., Правидло М. Н., Тишков В. В. и Янышев Д. С. // *Известия высших учебных заведений. Авиационная техника*. — 2018. — № 2. — С. 45–52.
31. On the V2-Based Turbulence Model for Free-Stream and Wall-Bounded High-Speed Compressible Flows / Molchanov A. M., Yanyshv D. S., Bykov L. V., and Platonov I. M. // *International Journal of Fluid Mechanics Research*. — 2019. — Vol. 46, no. 6.
32. Молчанов А. М., Янышев Д. С., Тушканов А. С. Влияние турбулентности на скорости химических реакций // *Тепловые процессы в технике*. — 2019. — Т. 11, № 2. — С. 61–68.
33. Быков Л. В., Янышев Д. С. Особенности моделирования работы пироприводов // *Тепловые процессы в технике*. — 2019. — Т. 11, № 12. — С. 541–549.

34. Молчанов А. М., Грибиненко Д. В., Янышев Д. С. Численное моделирование воспламенения горючего в камере сгорания ГПВРД // Тепловые процессы в технике. — 2021. — Т. 13, № 4. — С. 148–154.
35. Molchanov A., Yanyshev D., Bykov L. Numerical investigation of a supersonic flow in the near wake region of a cylindrical afterbody // Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences. — 2022. — no. 3 (102). — P. 86–95.
36. Utilization of parallel computing for mathematical modeling of high-enthalpy flows / Gribinenko D., Molchanov A., Siluyanov M., and Yanyshev D. // Journal of Physics. — 2022. — Vol. 2308, no. 1. — P. 012010.
37. Янышев Д. С. О роли диссипативных слагаемых при математическом моделировании разреженных потоков газа // Тепловые процессы в технике. — 2023. — Т. 15, № 11. — С. 504–514.
38. Краев В. М., Янышев Д. С. О расчёте гидродинамики и теплообмена в случае нестационарного турбулентного течения в каналах ЭУ ЛА // Вестник Московского авиационного института. — 2009. — Т. 16, № 5. — С. 8–8.
39. Краев В. М., Янышев Д. С. Проблемы расчёта переходных процессов в при турбулентном течении в каналах электроустановок ЛА // Труды МАИ. — 2010. — № 37. — С. 1.
40. Быков Л. В., Молчанов А. М., Янышев Д. С. Численный метод расчета сверхзвуковых турбулентных течений с химическими реакциями // Вестник Московского авиационного института. — 2010. — Т. 17, № 3. — С. 14–14.
41. Янышев Д. С. Применение функции Ламберта в теории турбулентного трения // Труды МАИ. — 2012. — № 50.
42. Янышев Д. С., Быков Л. В. Модель динамики пневматического привода и ее неопределенности // Вестник Московского авиационного института. — 2014. — Т. 21, № 4. — С. 87–92.
43. Разработка инженерной методики моделирования динамики пироприводов / Правидло М. Н., Быков Л. В., Тихонов К. М. и Янышев Д. С. // Автоматизация.

- Современные технологии. — 2015. — № 11. — С. 16–22.
44. Математическое моделирование аэродинамической интерференции между отделяемой полезной нагрузкой и самолетом-носителем / Быков Л. В., Пашков О. А., Правидло М. Н. и Янышев Д. С. // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Инженерные исследования. — 2018. — Т. 19, № 1. — С. 22–37.
 45. MacCormack R. Algorithm development for hypersonic flow // 16th AIAA/DLR/DGLR International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. — 2009. — P. 7320.
 46. Candler G. V. Next-generation CFD for hypersonic and aerothermal flows // 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference. — 2015. — P. 3048.
 47. Candler G. V., Subbareddy P. K., Nompelis I. CFD methods for hypersonic flows and aerothermodynamics. — 2015.
 48. A physico-mathematical model of rocket exhaust plumes / Vitkin E. I., Karelin V. G., Kirillov A. A., Suprun A. S., and Khadyka J. V. // International journal of heat and mass transfer. — 1997. — Vol. 40, no. 5. — P. 1227–1241.
 49. Сафронов А. В. Разностный метод решения стационарных уравнений газодинамики на основе соотношений на разрывах // Матем. моделирование. — 2008. — Т. 20, № 2. — С. 76–84.
 50. Родионов А. В. Монотонная схема второго порядка точности для сквозного счета неравновесных течений // Журнал вычисл. матем. и матем. физ. — 1987. — Т. 27, № 4. — С. 585–593.
 51. Scalar variance model validation for high-speed variable composition flows / Brinckman K., Calhoon W., Mattick S., Tomes J., and Dash S. // 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2006. — P. 715.
 52. Scalar fluctuation and transport modeling for application to high speed reacting flows / Calhoon W., Brinckman K., Tomes J., Mattick S., and Dash S. // 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2006. — P. 1452.
 53. Brinckman K. W., Calhoon Jr W. H., Dash S. M. Scalar fluctuation modeling for

- high-speed aeropropulsive flows // AIAA journal. — 2007. — Vol. 45, no. 5. — P. 1036–1046.
54. Brinckman K., Dash S. Advances In Scalar Fluctuation Modeling and Automated Validation Tools For High-Speed Propulsion Applications // 15th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. — 2008. — P. 2534.
55. Ott J., Kenzakowski D., Dash S. Evaluation of Turbulence Modeling Extensions for the Analysis of Hypersonic Shock Wave Boundary Layer Interactions // 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. — 2013. — P. 983.
56. Wilcox D. C. et al. Turbulence modeling for CFD. — DCW industries La Canada, CA, 1998. — Vol. 2.
57. Menter F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA journal. — 1994. — Vol. 32, no. 8. — P. 1598–1605.
58. Секундов А. Н. Модель турбулентности для описания взаимодействия пограничного слоя с крупномасштабным турбулентным потоком // Изв. АН СССР, МЖГ. — 1997. — № 2. — С. 59–68.
59. Durbin P. A. Near-wall turbulence closure modeling without “damping functions” // Theoretical and computational fluid dynamics. — 1991. — Vol. 3, no. 1. — P. 1–13.
60. Wilcox D. C. Dilatation-dissipation corrections for advanced turbulence models // Aiaa Journal. — 1992. — Vol. 30, no. 11. — P. 2639–2646.
61. Sarkar S. The pressure–dilatation correlation in compressible flows // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. — 1992. — Vol. 4, no. 12. — P. 2674–2682.
62. Gomez C. A., Girimaji S. S. Explicit algebraic Reynolds stress model (EARSM) for compressible shear flows // Theoretical and Computational Fluid Dynamics. — 2014. — Vol. 28, no. 2. — P. 171–196.
63. Pope S. B., Pope S. B. Turbulent flows. — Cambridge university press, 2000.
64. Pope S. B. PDF methods for turbulent reactive flows // Progress in energy and

- combustion science. — 1985. — Vol. 11, no. 2. — P. 119–192.
65. Modeling temperature and species fluctuations in turbulent, reacting flow / Gaffney Jr R., White J., Girimaji S., and Drummond J. // *Computing Systems in Engineering*. — 1994. — Vol. 5, no. 2. — P. 117–133.
66. Park C. *Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics*. — New York, John Wiley & Sons, 1989. — P. 372.
67. Park C. Review of chemical-kinetic problems of future NASA missions. I-Earth entries // *Journal of Thermophysics and Heat transfer*. — 1993. — Vol. 7, no. 3. — P. 385–398.
68. Суржиков С. Т. Компьютерная аэрофизика спускаемых космических аппаратов. Двухмерные модели. — М.: Физматлит, 2018. — С. 543.
69. Ашратов Э. А., Дубинская Н. В. Исследование течений в соплах при наличии колебательной релаксации // *Вычислительные методы и программирование*. — 1977. — № 27. — С. 96–115.
70. Johnston Z. M., Candler G. V. Hypersonic simulations of the BoLT-II subscale geometry // *AIAA Scitech 2021 Forum*. — 2021. — P. 0366.
71. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K / Gupta R. N., Yos J. M., Thompson R. A., and Lee K.-P. // *NASA STI/Recon Technical Report N*. — 1990. — Vol. 90. — P. 27064.
72. Завелевич Ф. С., Ушаков Н. Н. Взаимодействие выхлопных струй ракетных двигателей на различных топливах с атмосферой применительно к оценке экологической безопасности запусков ракет и ракет-носителей // *Вестник СГАУ*. — 2012. — № 3-1 (34).
73. Суржиков С. Т. *Тепловое излучение газов и плазмы*. — Из-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2004. — С. 576.
74. Modest M. F. Backward Monte Carlo simulations in radiative heat transfer // *J. Heat Transfer*. — 2003. — Vol. 125, no. 1. — P. 57–62.
75. Modest M. F., Mazumder S. *Radiative heat transfer*. — Academic press, 2021.

76. Ozawa T., Modest M. F., Levin D. A. Spectral module for photon Monte Carlo calculations in hypersonic nonequilibrium radiation. — 2010.
77. Elizarova T. G., Pavlov A. N., Chetverushkin B. N. Application of a kinetic algorithm for calculating gas dynamic flows // *Differentsial'nye Uravneniya*. — 1985. — Vol. 21, no. 7. — P. 1179–1185.
78. Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. — Москва : Научный Мир, 2007. — С. 350.
79. Стренг Г. Линейная алгебра и ее применения. — Москва : Мир, 1980.
80. Коренев Г. В. Тензорное исчисление. Учеб. пособие: Для вузов. — Москва : Изд-во МФТИ, 2000.
81. Седов Л. И. Механика сплошной среды. — Москва : Наука, 1970. — Т. 1. — С. 492.
82. Emanuel G. Bulk viscosity of a dilute polyatomic gas // *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*. — 1990. — Vol. 2, no. 12. — P. 2252–2254.
83. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2008. — С. 656.
84. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. том VI. Гидродинамика. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — С. 736.
85. Large-eddy simulation of highly underexpanded transient gas jets / Vuorinen V., Yu J., Tirunagari S., Kaario O., Larmi M., Duwig C., and Boersma B. J. // *Physics of Fluids*. — 2013. — Vol. 25, no. 016101.
86. Cook A. W., Cabot W. H. Hyperviscosity for shock-turbulence interactions // *Journal of Computational Physics*. — 2005. — Vol. 203, no. 2. — P. 379–385.
87. Sutton K., Gnoffo P. [Multi-component diffusion with application to computational aerothermodynamics](#) // 7th AIAA/ASME Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference. — 1998. — <https://arc.aiaa.org/doi/pdf/10.2514/6.1998-2575>.
88. Giordano D. [Thermodynamic Equilibrium of Multi-Temperature Gas Mixtures](#) // *Molecular Physics and Hypersonic Flows* / ed. by Capitelli M. — Dordrecht : Springer Netherlands, 1996. — P. 259–280. — ISBN: [978-94-009-0267-1](#). — Ac-

cess mode: https://doi.org/10.1007/978-94-009-0267-1_15.

89. Landry J. G. Nozzle flow with vibrational nonequilibrium : Phd thesis ; Old Dominion University. — 1995.
90. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 2. Физико-химическая кинетика и термодинамика / Лосев С. А., Осипов А. И., Уваров А. В., Шелепин Л. А., Герасимов Г. Я., Кириллов И. А. и Якубов И. Т. ; под ред. Лосева С. А. — Москва : Научн. изд. центр механики, 2002. — С. 368.
91. Молчанов А. М. Неравновесная высокоэнтальпийная термогазодинамика. — Москва : Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2020. — ISBN: [978-5-4316-0735-6](https://doi.org/10.1007/978-5-4316-0735-6).
92. Тирский Г. А., Рогов Б. В., Чикиткин А. В. Эффект объемной вязкости в иерархии асимптотически упрощенных уравнений Навье-Стокса // Ломоносовские чтения. Секция механики. 15-23 апреля 2013 г. — Москва : Издательство Московского университета. — 2013. — С. 134.
93. Чикиткин А. В. Эффект объемной вязкости в задачах сверхзвукового обтекания затупленных тел : Магистерская диссертация ; МФТИ. — 2013.
94. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 3. Модели процессов молекулярного переноса в физико-химической газодинамике / Жданов В. М., Галкин В. С., Гордеев О. А. и Соколова И. А. ; под ред. Лосева С. А. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2012. — С. 284.
95. Справочник химика / под ред. Б.П.Никольского. — Москва : Химия, 1966. — Т. 1. — С. 1072.
96. Reynolds O. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels // Philosophical Transactions of the Royal society of London. — 1883. — no. 174. — P. 935–982.
97. Favre A. Turbulence: Space-time statistical properties and behavior in supersonic flows // The Physics of fluids. — 1983. — Vol. 26, no. 10. — P. 2851–2863.
98. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. — Москва : Наука,

1965. — T. 1. — C. 640.
99. Keller L. V., Fridman A. A. Differential equations of turbulent compressible-fluid motion // Proceedings of the First International Congress of Applied Mechanics, Delft, Holland. — 1924. — P. 395–405.
 100. Roe P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations // Annual review of fluid mechanics. — 1986. — Vol. 18, no. 1. — P. 337–365.
 101. Steger J. L., Warming R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods // Journal of computational physics. — 1981. — Vol. 40, no. 2. — P. 263–293.
 102. MacCormack R., Pulliam T. Assessment of a new numerical procedure for fluid dynamics // 29th AIAA, Fluid Dynamics Conference. — 1998. — P. 2821.
 103. White J. A., Nishikawa H., Baurle R. A. Weighted least-squares cell-average gradient construction methods for The VULCAN-CFD second-order accurate unstructured grid cell-centered finite-volume solver // AIAA Scitech 2019 Forum. — 2019. — P. 0127.
 104. Barth T., Jespersen D. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes // 27th Aerospace sciences meeting. — 1989. — P. 366.
 105. Venkatakrishnan V. On the accuracy of limiters and convergence to steady state solutions // 31st Aerospace Sciences Meeting. — 1993. — P. 880.
 106. Moro D., Nguyen N., Peraire J. Dilation-based shock capturing for high-order methods // International Journal for Numerical Methods in Fluids. — 2016. — Vol. 82. — P. 398–416.
 107. Tysinger T., Caughey D. Implicit multigrid algorithm for the Navier-Stokes equations // 29th Aerospace Sciences Meeting. — 1991. — P. 242.
 108. Darwish M., Moukalled F. The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab®. — Springer, 2016.
 109. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге-Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. — Москва : Мир, 1988.

110. Hennessy J., Patterson D. *Computer Organization and Design*. — San Francisco : Morgan Kaufmann Publishers, 2020.
111. Application of data-oriented design in game development / Fedoseev K., Askarbekuly N., Uzbekova A., and Mazzara M. // *Journal of Physics / IOP Publishing*. — 2020. — Vol. 1694. — P. 012035.
112. Saad Y., Schultz M. H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // *SIAM Journal on scientific and statistical computing*. — 1986. — Vol. 7, no. 3. — P. 856–869.
113. Benzi M. Preconditioning techniques for large linear systems: a survey // *Journal of computational Physics*. — 2002. — Vol. 182, no. 2. — P. 418–477.
114. Rodgers D. P. Improvements in multiprocessor system design // *ACM SIGARCH Computer Architecture News*. — 1985. — Vol. 13, no. 3. — P. 225–231.
115. Standards for message-passing in a distributed memory environment : Rep. / Oak Ridge National Lab., TN (United States) ; executor: Walker D. W. : 1992.
116. Gustafson J. L. Reevaluating Amdahl's law // *Communications of the ACM*. — 1988. — Vol. 31, no. 5. — P. 532–533.
117. Cuthill E., McKee J. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices // *Proceedings of the 1969 24th national conference*. — 1969. — P. 157–172.
118. Bečka M., Okša G., Vajteršic M. Dynamic ordering for a parallel block-Jacobi SVD algorithm // *Parallel Computing*. — 2002. — Vol. 28, no. 2. — P. 243–262.
119. Stokes G. G. On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion, and of the Equilibrium and Motion of Elastic Solids // *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*. — 1845. — Vol. 8, no. 22. — P. 287–342.
120. Sharma B. On the Nature of Bulk Viscosity of Dilute Gases : Phd thesis ; Indian Institute of Technology Kanpur. — 2022.
121. Tisza L. Supersonic Absorption and Stokes' Viscosity Relation // *Phys. Rev.* — 1942. — Vol. 61. — P. 531–536.
122. Meador W., Miner G., Townsend L. Bulk viscosity as a relaxation parameter: fact or fiction? // *Physics of fluids*. — 1996. — Vol. 8, no. 1. — P. 258–261.

123. Transport phenomena in polyatomic molecules. Publication CM-681 : Rep. / University of Michigan ; executor: Chang C., Uhlenbeck G. : 1951.
124. Monchick L., Yun K., Mason E. Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomic gas mixtures // J. Chem. Phys. — 1963. — Vol. 39. — P. 654.
125. A low-density wind-tunnel study of shock-wave structure and relaxation phenomena in gases : Rep. / NACA ; executor: Sherman F. : 1955. — P. 3298.
126. Prangma G., Alberga A., Beenakker J. Ultrasonic determination of the volume viscosity of N₂, CO, CH₄ and CD₄ between 77 and 300 K // Physica. — 1973. — Vol. 64. — P. 278.
127. Cramer M. Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases // Physics of fluids. — 2012. — Vol. 24, no. 6. — P. 66102.
128. Parker J. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases // Phys. Fluids. — 1959. — Vol. 2. — P. 449.
129. Landau L., E. T. Theory of sound dispersion // Physikalische zeitschrift der Sowjetunion. — 1936. — Vol. 10. — P. 34–43.
130. Елизарова Т. Г., Серегин В. В. Квазигазодинамические уравнения и аппроксимационная формула для объемной вязкости // Вестник Московского университета. Сер. 3, Физика. Астрономия. — 2006. — № 1. — С. 15–18.
131. Effect of bulk viscosity in supersonic flow past spacecraft / Chikitkin A., Rogov B., Tirskey G., and Utyuzhnikov S. // Applied Numerical Mathematics. — 2015. — Vol. 93. — P. 47–60.
132. Kustova E., Mekhonoshina M., Kosareva A. Relaxation processes in carbon dioxide // Physics of Fluids. — 2019. — Vol. 31. — P. 46104.
133. Nagnibeda E., Kustova E. Nonequilibrium reacting gas flows // Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes. — 2009. — P. 27.
134. Bulk-viscosity effect on CO₂ hypersonic flow around blunt bodies / Shevelev Y., Syzranova N., Nagnibeda E., and Kustova E. // Doklady Physics. — 2015. — Vol. 60. — P. 207–209.
135. Rarefied hypersonic flow over a sharp flat plate: numerical and experimental re-

- sults / Lengrand J., Allegre J., Chpoun A., and Raffin M. // Progress in astronautics and aeronautics. — 1994. — Vol. 160. — P. 276–276.
136. Blauer J., Nickerson G. A survey of vibrational relaxation rate data for processes important to CO₂-N₂-H₂O infrared plume radiation // 7th Fluid and Plasma Dynamics Conference. — 1974. — P. 536.
137. Диагностика неравновесных состояний в молекулярных лазерах / Ачасов О. В., Кудрявцев Н. Н., Новиков С. С., Солоухин Р. И. и Фомин Н. А. — Минск : Наука и техника, 1985. — С. 280.
138. Leone S. R. Rate coefficients for vibrational energy transfer involving the hydrogen halides // Journal of Physical and Chemical Reference Data. — 1982. — Vol. 11, no. 3. — P. 953–996.
139. Nikitin E. E., Troe J. 70 years of Landau–Teller theory for collisional energy transfer. Semiclassical three-dimensional generalizations of the classical collinear model // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2008. — Vol. 10, no. 11. — P. 1483–1501.
140. Millikan R. C., White D. R. Systematics of vibrational relaxation // The Journal of chemical physics. — 1963. — Vol. 39, no. 12. — P. 3209–3213.
141. Lee J. Electron-Impact Vibrational Excitation Rates in the Flowfield of Aeroassisted Orbital Transfer Vehicles // Progress in Aeronautics and Astronautics: Thermophysical Aspects of Re-entry Flows / ed. by Moss J. N., D. S. C. — New York : AIAA, 1986. — Vol. 103. — P. 197–224.
142. Молчанов А. М., Никитин П. В. Узкополосная база данных для расчета излучения продуктов сгорания с использованием k -распределения // Тепловые процессы в технике. — 2014. — Т. 6, № 10. — С. 448–455.
143. Zhang H., Modest M. F. Multi-group full-spectrum k -distribution database for water vapor mixtures in radiative transfer calculations // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2003. — Vol. 46. — P. 3593–3603.
144. Wang A. High-accuracy, compact database of narrow-band k -distributions for water vapor and carbon dioxide // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative

- Transfer. — 2004. — Vol. 93. — P. 245–260.
145. Ozawa T., Garrison M., Levin D. Accurate molecular and soot infrared radiation model for high-temperature flows // *Journal of thermophysics and heat transfer*. — 2007. — Vol. 21, no. 1. — P. 19–27.
146. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. — Москва : Издательство иностранной литературы, 1949.
147. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database / Rothman L. S., Gordon I. E., Babikov Y., Barbe A., Benner D. C., Bernath P. F., Birk M., Bizzocchi L., Boudon V., Brown L. R., et al. // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2013. — Vol. 130. — P. 4–50.
148. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database / Rothman L. S., Gordon I., Barber R., Dothe H., Gamache R. R., Goldman A., Perevalov V., Tashkun S., and Tennyson J. // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2010. — Vol. 111, no. 15. — P. 2139–2150.
149. CDSD-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank / Tashkun S. A., Perevalov V. I., Teffo J.-L., Bykov A. D., and Lavrentieva N. // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2003. — Vol. 82, no. 1-4. — P. 165–196.
150. Bansal A., Modest M., Levin D. Application of k-distribution method to molecular radiation in hypersonic nonequilibrium flows // *41st AIAA Thermophysics Conference*. — 2009. — P. 3922.
151. Kudryavtsev N., Novikov S. Theoretical and experimental investigations of IR radiation transfer in vibrationally nonequibrated molecular gas containing CO₂ and CO // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 1982. — Vol. 25, no. 10. — P. 1541–1558.
152. Vitkin E., Shuralyov S., Tamanovich V. Radiation transfer in vibrationally nonequilibrium gases // *International journal of heat and mass transfer*. — 1995. — Vol. 38, no. 1. — P. 163–173.
153. Experimental and computational study of infrared emission from underexpanded

- rocket exhaust plumes / Avital G., Cohen Y., Gamss L., Kanelbaum Y., Macales J., Trieman B., Yaniv S., Lev M., Stricker J., and Sternlieb A. // *Journal of thermophysics and heat transfer*. — 2001. — Vol. 15, no. 4. — P. 377–383.
154. Виткин Э. И., Кириллов А. А. Радиационный перенос в движущихся объемах неравновесных молекулярных газов // IV Минский междунар. форум по теплообмену. — 2000. — Т. 2. — С. 144–153.
155. Елизарова Т. Г., Шеретов Ю. В. Теоретическое и численное исследование квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* — 2001. — Т. 41, № 2. — С. 239–255.
156. Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M. A. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems // *Physical Review Journals*. — 1954. — Vol. 94. — P. 511–524.
157. Alsmeyer H. Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1976. — Vol. 74, no. 3. — P. 497–513.
158. Fisco K. A., Chapman D. R. Comparison of Burnett, super-Burnett and Monte Carlo solutions for hypersonic shock structure // *Intl. Symposium on Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and Computational Techniques*. — 1989.
159. Maté B., Tejada G., Montero S. Raman spectroscopy of supersonic jets of CO₂: Density, condensation, and translational, rotational, and vibrational temperatures // *The Journal of chemical physics*. — 1998. — Vol. 108, no. 7. — P. 2676–2685.
160. Experimental and numerical investigation of an axisymmetric supersonic jet / Maté B., Graur I. A., Elizarova T., Chirokov I., Tejada G., Fernández J., and Montero S. // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2001. — Vol. 426. — P. 177–197.
161. Simmons F. Rocket exhaust plume phenomenology. — American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 2000.
162. Boussinesq J. V. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. — Impr. nationale, 1877.
163. The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence /

- Sarkar S., Erlebacher G., Hussaini M. Y., and Kreiss H. O. // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1991. — Vol. 227. — P. 473–493.
164. Zeman O. Dilatation dissipation: the concept and application in modeling compressible mixing layers // *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*. — 1990. — Vol. 2, no. 2. — P. 178–188.
165. Sarkar S., Erlebacher G., Hussaini M. Y. Compressible Homogeneous Shear: Simulation and Modeling // *Turbulent Shear Flows 8* / ed. by Durst F., Friedrich R., Launder B. E. et al. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg. — 1993. — P. 249–267.
166. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. — Москва : Наука, 1965. — Т. 2. — С. 720.
167. Assessment of ke/EASM Turbulence Model Upgrades for Analyzing High Speed Aeropropulsive Flows / Ayyalasomayajula H., Kenzakowski D., Papp J., and Dash S. // 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2005. — P. 1101.
168. Глебов Г. А., Молчанов А. М. Модель турбулентности для расчета высокоскоростных реагирующих струй // *Исследование теплообмена в летательных аппаратах*. — Москва : МАИ, 1982. — С. 6–11.
169. Molchanov A. M. Three-equation $k-\varepsilon-V_n$ turbulence model for high-speed flows // 43rd AIAA Fluid Dynamics Conference. — 2013. — P. 3181.
170. Молчанов А. М. Математическое моделирование задач газодинамики и теплообмена. — Москва : МАИ, 2013. — С. 206.
171. Vreman A. W., Sandham N., Luo K. Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1996. — Vol. 320. — P. 235–258.
172. Gomez C., Girimaji S. Algebraic Reynolds stress model (ARSM) for compressible shear flows // 41st AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit. — 2011. — P. 3572.
173. Pantano C., Sarkar S. A study of compressibility effects in the high-speed turbulent

- shear layer using direct simulation // *Journal of fluid mechanics*. — 2002. — Vol. 451. — P. 329–371.
174. Лойцянский Л. *Механика жидкости и газа*. — Москва : Дрофа, 2003. — С. 840.
175. Ljuboja M., Rodi W. Calculation of turbulent wall jets with an algebraic Reynolds stress model // *J. Fluids Eng.* — 1980. — Vol. 102, no. 3. — P. 350–356.
176. Benton J., Kalitzin G., Gould A. Application of two-equation turbulence models in aircraft design // *34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. — 1996. — P. 327.
177. Goebel S. G., Dutton J. C. Experimental study of compressible turbulent mixing layers // *AIAA journal*. — 1991. — Vol. 29, no. 4. — P. 538–546.
178. Fernholz H.-H., Finley P., AGARD. *A critical compilation of compressible turbulent boundary layer data / AGARD Brussels, Belgium*. — 1977.
179. Elfstrom G. Turbulent hypersonic flow at a wedge-compression corner // *Journal of fluid Mechanics*. — 1972. — Vol. 53, no. 1. — P. 113–127.
180. Kachanov Y. S. Physical Mechanisms of Laminar-Boundary-Layer Transition // *Annual Review of Fluid Mechanics*. — 1994. — Vol. 26, no. 1. — P. 411–482. — <https://doi.org/10.1146/annurev.fl.26.010194.002211>.
181. Morkovin M. V. *Critical evaluation of transition from laminar to turbulent shear layers with emphasis on hypersonically traveling bodies*. — Air Force Flight Dynamics Laboratory, Air Force Systems Command, United . . . , 1969.
182. Morkovin M. V. On the many faces of transition // *Viscous Drag Reduction: Proceedings of the Symposium on Viscous Drag Reduction held at the LTV Research Center, Dallas, Texas, September 24 and 25, 1968 / Springer*. — 1969. — P. 1–31.
183. Jie R., Song F., Jianxin L. The Role of Gortler Vortices in the Hypersonic Boundary Layer Transition // *44th AIAA Fluid Dynamics Conference*. — 2014.
184. Herbert T. Parabolized stability equations // *Annual Review Fluid Mechanics*. — 1997. — Vol. 29. — P. 245–283.
185. A study of eigenvalue sensitivity for hydrodynamic stability operators /

- Schmid P. J., Henningson D. S., Khorrami M. R., and Malik M. R. // *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*. — 1993. — Vol. 4. — P. 227–240.
186. Menter F. R., Langtry R., Völker S. Transition modelling for general purpose CFD codes // *Flow, turbulence and combustion*. — 2006. — Vol. 77. — P. 277–303.
187. Белов И. А., Исаев С. А. Моделирование турбулентных течений: Учебное пособие, Балт. гос. техн. ун-т. СПб. — СПб : Балт. гос. техн. ун-т., 2001. — С. 108.
188. Dhawan S., Narasimha R. Some properties of boundary layer flow during the transition from laminar to turbulent motion // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1958. — Vol. 3. — P. 418–436.
189. A Correlation based Transition Model using Local Variables Part 1- Model Formulation / Menter F., Langtry R., Likki S., Suzen Y., Huang P., and Völker S. // *ASME TURBO EXPO*. — 2004. — P. 12.
190. Menter F., Esch T., Kubacki S. Transition Modelling Based on Local Variables // *th International Symposium on Turbulence Modeling and Measurements*. — Spain. — 2002. — P. 11.
191. Langtry R., Menter F. Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes // *AIAA Journal*. — 2009. — Vol. 47, no. 12. — P. 2894–2906.
192. Langtry R., Menter F. Transition modeling for general CFD applications in aeronautics // *AIAA paper*. — 2005. — Vol. 522. — P. 14.
193. Walters D., Cokljat D. A three-equation eddy-viscosity model for Reynolds-averaged Navier-Stokes simulations of transitional flow // *Journal of Fluids Engineering*. — 2008. — Vol. 130, no. 12. — P. 121401.
194. Mack L. Linear stability theory and the problem of supersonic boundary-layer transition // *AIAA Journal*. — 1975. — Vol. 13, no. 3. — P. 278–289.
195. Fedorov A. Transition and stability of high-speed boundary layers // *Annu. Rev. Fluid Mech.* — 2011. — Vol. 43. — P. 79–95.
196. Demetriades A. Hypersonic viscous flow over a slender cone. III-Laminar insta-

- bility and transition // 7th Fluid and PlasmaDynamics Conference. — 1974. — P. 535.
197. Malik M. Prediction and control of transition in supersonic and hypersonic boundary layers // *AIAA Journal*. — 1989. — Vol. 27, no. 11. — P. 1487–1493.
198. Chokani N., Hudson M. Linear stability theory of hypersonic flow in thermochemical nonequilibrium // *AIAA Journal*. — 1997. — Vol. 35, no. 6. — P. 958–964.
199. Yanbao M., Xiaolin Z. Receptivity of a supersonic boundary layer over a flat plate. Part 1. Wave structures and interactions // *J. Fluid Mech.* — 2003. — Vol. 488. — P. 31–78.
200. Leading-edge receptivity of a hypersonic boundary layer on a flat plate / Maslov A., Shplyuk A., Sidorenko A., and Arnal D. // *J. Fluid Mech.* — 2001. — Vol. 426. — P. 73–94.
201. Balakumar P. Transition in a supersonic boundary layer due to acoustic disturbances // 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2005. — P. 96.
202. Numerical simulations of hypersonic boundary-layer instability with wall blowing / Ghaffari S., Marxen O., Iaccarino G., and Shaqfeh E. // 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. — 2010. — P. 706.
203. Yanbao M., Xiaolin Z. Receptivity of a supersonic boundary layer over a flat plate. Part II. Receptivity to free-stream sound // *J. Fluid Mech.* — 2003. — Vol. 488. — P. 79–121.
204. Abu-Ghannam B., Shaw R. Natural transition of boundary layers—the effects of turbulence, pressure gradient, and flow history // *Journal of Mechanical Engineering Science*. — 1980. — 10. — Vol. 22, no. 5. — P. 213–228.
205. Гапонов С. А., Терехова Н. М. Моделирование влияния внешнего градиента давления на устойчивость возмущений в пограничных слоях сжимаемого газа // *Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика*. — 2013. — Т. 8, № 4. — С. 64–75.
206. Zurigat Y., Nayfeh A., Masad J. Effect of Pressure Gradient on the Stability of

- Compressible Boundary Layers // AIAA JOURNAL. — 1992. — 9. — Vol. 30, no. 9. — P. 2204–2211.
207. Stetson K. Hypersonic boundary layer transition experiments. — Flight Dynamics Laboratory, Air Force Wright Aeronautical Laboratories, 1980.
208. Reshotko E. Boundary-layer stability and transition // Annual review of fluid mechanics. — 1976. — Vol. 8, no. 1. — P. 311–349.
209. Schneider S. Hypersonic Boundary-Layer Transition with Ablation and Blowing // AIAA Technical Report. — 2007. — P. 31.
210. Johnson H., Gronvall J., Candler G. Reacting Hypersonic Boundary Layer Stability with Blowing and Suction // AIAA 2009-938, 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting. — Orlando, Florida. — 2009. — 1. — P. 32.
211. Transition delay in hypervelocity boundary layers by means of CO₂/acoustic instability interactions / Leyva I., Laurence S., Beierholm A., Hornung H., Wagnild R., and Candler G. // 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. — 2009. — P. 1287.
212. Wagnild R. High enthalpy effects on two boundary layer disturbances in supersonic and hypersonic flow : Phd thesis ; University of Minnesota. — 2012.
213. Experiments on Passive Hypervelocity Boundary-Layer Control Using an Ultrasonically Absorptive Surface / Rasheed A., Hornung H., Fedorov A., and Malmuth N. // AIAA journal. — 2002. — 3. — Vol. 40. — P. 9.
214. Stabilization of a hypersonic boundary layer using an ultrasonically absorptive coating / Fedorov A., Shplyuk A., Maslov A., Burov E., and Malmuth N. // J. Fluid Mech. — 2003. — Vol. 479. — P. 99–124.
215. Гапонов С. А., Терехова Н. М. Трехволновые взаимодействия возмущений в гиперзвуковом пограничном слое на пористой поверхности // Прикладная механика и техническая физика. — 2009. — Т. 50, № 5. — С. 3–13.
216. Papp J., Kenzakowski D., Dash S. Extensions of a rapid engineering approach to modeling hypersonic laminar to turbulent transitional flows // 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. — 2005. — P. 892.

217. Papp J., Dash S. Rapid engineering approach to modeling hypersonic laminar-to-turbulent transitional flows // Journal of spacecraft and rockets. — 2005. — Vol. 42, no. 3. — P. 467–475.
218. Papp J., Dash S. Modeling hypersonic laminar to turbulent transitional flows for 3D geometries using a two-equation onset and intermittency transport models // 50th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. — 2012. — P. 449.
219. Wang L., Fu S. Modelling flow transition in a hypersonic boundary layer with Reynolds-averaged Navier-Stokes approach // Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy. — 2009. — 5. — Vol. 52, no. 5. — P. 768–774.
220. Wang L., Fu S. Development of an Intermittency Equation for the Modeling of the Supersonic/Hypersonic Boundary Layer Flow Transition // Flow Turbulence Combust. — 2011. — Vol. 87. — P. 165–187.
221. Mee D. Boundary Layer Transition Measurements in Hypervelocity Flows in a Shock Tunnel // AIAA Paper No. — 2001. — P. 11.
222. Красильщиков А. П., Гурьяшкин Л. П. Экспериментальные исследования тел вращения в гиперзвуковых потоках. — Москва : Физматлит, 2007.
223. Tabulated values for temperature and heat transfer distributions : Rep. / Aerodynamics Div., National Aerospace Lab., ; executor: Yamamoto Y. — Tokyo, Japan : 1995.
224. DSMC simulations of OREX entry conditions : Rep. : NASA-TM-21162Z / Aerothermodynamics Branch, NASA Langley Research Center ; executor: Moss J. N., Gupta R. N., Price J. M. — Hampton, Virginia. 0001, USA : 1996.
225. Howe J. T., Sheaffer Y. S. Chemical relaxation behind strong normal shock waves in carbon dioxide including interdependent dissociation and ionization processes. — National Aeronautics and Space Administration, 1964.
226. Wakefield R. M., Pitts W. C. Analysis of the heat-shield experiment on the Pioneer-Venus entry probes // 15th Thermophysics Conference. — 1978. — P. 1494.
227. McCloy R. Entry dynamics performance predictions for Pioneer Venus probes //

- 4th Atmospheric Flight Mechanics Conference. — 1978. — P. 1370.
228. Superrotation of Venus' atmosphere analyzed with a full general circulation model / Lebonnois S., Hourdin F., Eymet V., Cresspin A., Fournier R., and Forget F. // *Journal of Geophysical Research: Planets*. — 2010. — Vol. 115, no. E6.
229. Thermal structure of the upper atmosphere of Venus simulated by a ground-to-thermosphere GCM / Gilli G., Lebonnois S., González-Galindo F., López-Valverde M. A., Stolzenbach A., Lefèvre F., Chaufray J.-Y., and Lott F. // *Icarus*. — 2017. — Vol. 281. — P. 55–72.
230. Park C., Ahn H.-K. Stagnation-point heat transfer rates for Pioneer-Venus probes // *Journal of thermophysics and heat transfer*. — 1999. — Vol. 13, no. 1. — P. 33–41.
231. Kawai S., Fujii K. Computational study of a supersonic base flow using hybrid turbulence methodology // *AIAA journal*. — 2005. — Vol. 43, no. 6. — P. 1265–1275.
232. Study on supersonic base flow with and without plume interaction / Guoliang L., Liu Q., Yang Y., Gong A., and Liu Z. // *21st AIAA International Space Planes and Hypersonics Technologies Conference*. — 2017. — P. 2276.
233. Herrin J., Dutton J. C. Supersonic base flow experiments in the near wake of a cylindrical afterbody // *AIAA journal*. — 1994. — Vol. 32, no. 1. — P. 77–83.
234. Mathur T., Dutton J. C. Base-bleed experiments with a cylindrical afterbody in supersonic flow // *Journal of Spacecraft and Rockets*. — 1996. — Vol. 33, no. 1. — P. 30–37.
235. Catalano G. D., Sturek W. A numerical investigation of subsonic and supersonic flow around axisymmetric bodies // *US Army Research Lab. Rept. AR-L-TR-2595*. — 2001.
236. Аблеков В. К. Справочник по газодинамическим лазерам. — Москва : Рипол Классик, 1982.
237. Методы расчета турбулентных течений / под ред. В.Кольмана. — Москва : Мир, 1984. — С. 464.

Приложение А

Вывод формул для скоростей колебательных энергетических переходов

Для расчета скоростей энергетических переходов используются модели из справочника [90]

Малая примесь многоатомных молекул XY в среде бесструктурных частиц

M_q

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \right) \times l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \\ & \times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Однокомпонентный газ многоатомных молекул XY в смеси с другими компонентами бесструктурных частиц q

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & \left(\frac{1}{2} k^{XY-XY} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{XY} l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + 2r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \right. \\ & \times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} + \\ & + \sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \left. l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \right. \\ & \times \left. \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где

$$\alpha_s^0 = r_s \frac{\exp\left(-\frac{\theta_s}{T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\theta_s}{T}\right)}, \quad s = i, j \quad (\text{A.3})$$

Бинарная смесь многоатомных молекул XY,ZW в смеси с другими компонентами с бесструктурными частицами q

$$\begin{aligned}
 \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & \left(\frac{1}{2} k^{XY-XY} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{XY} l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + 2r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \right. \\
 & \times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} + \\
 & + k^{XY-ZW} \begin{Bmatrix} l'_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l'_j \end{Bmatrix} N^{ZW} l'_\xi \prod_{i=1}^{k'} \begin{Bmatrix} l'_n + r_n - 1 \\ l'_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} (r_j \alpha_j^0)^{-l'_j} \times \\
 & \times \left\{ \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l'_j} - \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l'_j} \right\} + \quad (A.4) \\
 & + \sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \times \\
 & \times l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \\
 & \times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\}
 \end{aligned}$$

Здесь используются следующие обозначения.

α_ξ - среднее число колебательных квантов в ξ -ой моде молекул XY (определяемая величина),

$$k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} v_n \rightarrow v_n - l_n \\ v_j \rightarrow v_j + l_j \end{Bmatrix}$$

- константа скорости указанного колебательного перехода при столкновении молекулы XY с частицей M_q , в результате которого в k -модах происходит потеря колебательных квантов (в i -ой моде теряется l_n квантов), а в $L-k$ модах - поглощение квантов (в j -ой моде поглощается l_j квантов), т.е. константа скорости процесса ($i = 1 \div k, j = k+1 \div L$):

$$(v_1, \dots, v_k; v_{k+1}, \dots, v_L) \rightarrow (v_1 - l_1, \dots, v_k - l_k; v_{k+1} + l_{k+1}, \dots, v_L + l_L);$$

$$k^{XY-ZW} \begin{Bmatrix} v_n \rightarrow v_n - l_n \\ v_j \rightarrow v_j + l_j \end{Bmatrix} - \text{то же для столкновений молекул XY и ZW;}$$

ξ - индекс, соответствующий рассматриваемой моде в молекуле XY;

i, j - индексы мод, участвующих в колебательном энергообмене;

L, L' - общее количество колебательных мод в молекуле XY и смеси молекул $XY - ZW$, соответственно;

k - количество мод, в которых для данного перехода в молекуле XY происходит потеря колебательных квантов;

k' - то же для смеси молекул $XY - ZW$

l_n - количество квантов, которое теряется в i -ой моде ($i = 1 \div k$) молекулы XY ;

l'_n - то же для смеси молекул $XY - ZW$ при $i = 1 \div k'$

l_j - количество квантов, которое поглощается j -ой модой ($j = k+1 \div L$) молекулы XY ;

l'_j - то же для смеси молекул $XY - ZW$ при $j' = k' + 1 \div L'$

N - число молекул в единице объема;

$N^{XY}(v_n, v_j)$ - число молекул XY в единице объема с конкретным распределением по модам (v_n, v_j) ;

N^{Mq} - число молекул M_q в единице объема;

k_{10}^{01} - характерная константа скорости внутримодового VV -обмена при столкновении молекул;

τ_{VV} - характерное время внутримодовой VV -релаксации;

T - температура поступательных степеней свободы;

T_n - температура i -ой колебательной моды молекул XY (здесь и ниже - аналогично для моды j);

θ_n - характеристическая колебательная температура i -ой моды молекул XY, ZW

r_n - кратность вырождения i -ой моды молекул XY, ZW ;

α_n - среднее число колебательных квантов в i -ой моде молекул XY, ZW ;

α_n^0 - равновесное значение α_n при температуре газа T

q, q' - индексы, нумерующие компоненты, молекулы которых считаются бесструктурными.

Рассмотрим применение формул из [90] к некоторым энергетическим переходам.

1) простой V-T процесс для двухатомной молекулы

$$N_2(1) + M = N_2(0) + M \quad (\text{A.5})$$

В данном случае используется формула

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \right) \times \\ & \times l_\xi \prod_{i=1}^k \begin{Bmatrix} l_n + r_n - 1 \\ l_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \\ & \times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

где $L = 1$, $k = 1$, $l_1 = 1$, $r_1 = 1$

Тогда

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} 1 \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow 0 \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \right) [1 - \exp(-\theta_1/T)] (\alpha_1^0 - \alpha_1) \quad (\text{A.7})$$

т.к.

$$\alpha_1^0 + 1 = \frac{1}{1 - \exp(-\theta_1/T)} \quad (\text{A.8})$$

В данном случае α_ξ и индекс "1" относятся к колебательно возбужденной моде $N_2(v)$, а суммирование производится по всем молекулам газовой смеси.

Если применить формулу (A.6) к обратному процессу

$$N_2(0) + M = N_2(1) + M, \quad (\text{A.9})$$

то $L = 1$, $k = 0$, $l_n = 0$, $l_j = 1$, $r_j = 1$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} 0 \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow 1 \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \right) \frac{\alpha_j - \alpha_j^0}{\alpha_j^0} = \\ = & \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} 0 \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow 1 \end{Bmatrix} N^{\epsilon_q} \right) \left[\exp\left(\frac{\theta_j}{T}\right) - 1 \right] (\alpha_j - \alpha_j^0) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Т.к. резонно предположить, что скорости процессов при одинаковых условиях равны по модулю и имеют разный знак, то:

$$k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} 0 \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow 1 \end{Bmatrix} = k^{XY-\epsilon_q} \begin{Bmatrix} 1 \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow 0 \end{Bmatrix} \frac{1 - \exp(-\theta_1/T)}{\exp(\theta_1/T) - 1} \quad (\text{A.11})$$

Т.е. константы скоростей V-T и T-V не равны между собой.

2) Проверим формулу (A.4) для V-V перехода между двумя двухатомными молекулами, например, для

$$\text{CO}(1) + \text{N}_2(0) = \text{CO}(0) + \text{N}_2(1) \quad (\text{A.12})$$

В этом случае

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & k^{XY-ZW} \begin{Bmatrix} l'_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l'_j \end{Bmatrix} N^{ZW} l'_\xi \prod_{i=1}^{k'} \begin{Bmatrix} l'_n + r_n - 1 \\ l'_n \end{Bmatrix} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} (r_j \alpha_j^0)^{-l'_j} \times \\ & \times \left\{ \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l'_j} - \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l'_j} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

В данном случае $L' = 2$, $k = 1$.

Для CO(1) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & k^{AB-CD} N^{CD} \frac{\alpha_n^0 (1 + \alpha_n) \alpha_j (1 + \alpha_j^0) - \alpha_n (1 + \alpha_n^0) \alpha_j^0 (1 + \alpha_j)}{(1 + \alpha_n^0) \alpha_j^0} = \\ = & k^{AB-CD} N^{CD} \frac{\alpha_{CD} (1 + \alpha_{AB}) \alpha_{AB}^0 (1 + \alpha_{CD}^0) - \alpha_{AB} (1 + \alpha_{CD}) (1 + \alpha_{AB}^0) \alpha_{CD}^0}{(1 + \alpha_{AB}^0) \alpha_{CD}^0} = \\ = & k^{AB-CD} N^{CD} \left[\frac{\alpha_{CD} (1 + \alpha_{AB}) \alpha_{AB}^0 (1 + \alpha_{CD}^0)}{(1 + \alpha_{AB}^0) \alpha_{CD}^0} - \alpha_{AB} (1 + \alpha_{CD}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Из (A.3) в данном случае следует:

$$\frac{\alpha_s^0 + 1}{\alpha_s^0} = \exp\left(\frac{\theta_s}{T}\right) \quad (\text{A.15})$$

Таким образом,

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = k^{AB-CD} N^{CD} \left[\alpha_{CD} (1 + \alpha_{AB}) \exp\left(\frac{\theta_{CD} - \theta_{AB}}{T}\right) - \alpha_{AB} (1 + \alpha_{CD}) \right] \quad (\text{A.16})$$

Для V-V перехода (A.12):

α_ξ - среднее число колебательных квантов в моде CO (1) молекулы CO, AB=CO,
CD = N₂

Для N₂(1) меняется только начало формулы:

$$\frac{d\alpha_{N_2(1)}}{dt} = k^{CD-AB} N^{AB} \left[\alpha_{CD} (1 + \alpha_{AB}) \exp\left(\frac{\theta_{CD} - \theta_{AB}}{T}\right) - \alpha_{AB} (1 + \alpha_{CD}) \right] \quad (\text{A.17})$$

Полагаем, что

$$k^{CD-AB} = -k^{AB-CD} \quad (\text{A.18})$$

т.е.

$$\frac{d\alpha_{N_2(1)}}{dt} = -k^{AB-CD} N^{AB} \left[\alpha_{CD} (1 + \alpha_{AB}) \exp\left(\frac{\theta_{CD} - \theta_{AB}}{T}\right) - \alpha_{AB} (1 + \alpha_{CD}) \right] \quad (\text{A.19})$$

Результаты по формуле (6.52) совпадают с (A.16).

3) Применим формулу (A.4) для VV перехода с участием 3х-атомной молекулы, например для

$$N_2(1) + CO_2(00^00) = N_2(0) + CO_2(00^01) \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & k^{XY-ZW} \left\{ \begin{matrix} l'_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l'_j \end{matrix} \right\} N^{ZW} l'_\xi \prod_{i=1}^{k'} \left\{ \begin{matrix} l'_n + r_n - 1 \\ l'_n \end{matrix} \right\} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} (r_j \alpha_j^0)^{-l'_j} \times \\ & \times \left\{ \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l'_j} - \prod_{i=1}^{k'} [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l'_n} \prod_{j=k'+1}^{L'} [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l'_j} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

В данном случае $L' = 4$, $k' = 1$, $l'_1 = 1$, $l'_2 = l'_3 = 0$, $l'_4 = 1$, $r_1 = r_2 = r_4 = 1$, $r_3 = 2$

Для N₂(1) $l'_\xi = 1$ и

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} = & k^{XY-ZW} N^{ZW} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_4 \frac{\alpha_1^0 (1 + \alpha_4^0)}{(1 + \alpha_1^0) \alpha_4^0} - \alpha_1 (1 + \alpha_4) \right] = \\ = & k^{XY-ZW} N^{ZW} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_4 \exp\left(\frac{\theta_4 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 (1 + \alpha_4) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

где k^{XY-ZW} - скорость VV перехода (A.20), $ZW=CO_2$, индекс 1 относится к нижнему уровню колебательной моды молекулы N_2 , индекс 4 относится к асимметричной моде CO_2 .

Для $CO_2 (00^01)$ $l'_\xi = 1$ и используется та же формула, только $ZW=N_2$:

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = -k^{XY-ZW} N^{ZW} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_4 \exp\left(\frac{\theta_4 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 (1 + \alpha_4) \right] \quad (A.23)$$

4) Рассмотрим более сложный межмолекулярный V-V процесс

$$N_2(1) + CO_2(00^00) = N_2(0) + CO_2(11^10) \quad (A.24)$$

В данном случае $L' = 4$, $k' = 1$, $l'_1 = 1$, $l'_2 = l'_3 = 1$, $l'_4 = 0$, $r_1 = r_2 = r_4 = 1$, $r_3 = 2$

Для $N_2(1)$ $l'_\xi = 1$ и

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = k^{XY-ZW} N^{ZW} \frac{1}{2} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_2 \alpha_3 \frac{\alpha_1^0 (1 + \alpha_2^0) (2 + \alpha_3^0)}{(1 + \alpha_1^0) \alpha_2^0 \alpha_3^0} - \alpha_1 (1 + \alpha_2) (2 + \alpha_3) \right] \quad (A.25)$$

Поскольку

$$\alpha_3^0 = \frac{2}{\exp(\theta_3/T) - 1},$$

$$\frac{(2 + \alpha_3^0)}{\alpha_3^0} = \frac{2 + \frac{2}{\exp(\theta_3/T) - 1}}{\frac{2}{\exp(\theta_3/T) - 1}} = \frac{\exp(\theta_3/T) - 1 + 1}{\exp(\theta_3/T) - 1} = \exp(\theta_3/T)$$

то

$$\frac{\alpha_1^0 (1 + \alpha_2^0) (2 + \alpha_3^0)}{(1 + \alpha_1^0) \alpha_2^0 \alpha_3^0} = \exp\left(\frac{\theta_2 + \theta_3 - \theta_1}{T}\right) \quad (A.26)$$

и

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = k^{XY-ZW} N^{ZW} \frac{1}{2} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_2 \alpha_3 \exp\left(\frac{\theta_2 + \theta_3 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 (1 + \alpha_2) (2 + \alpha_3) \right] \quad (A.27)$$

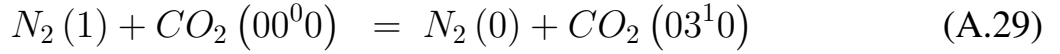
где k^{XY-ZW} - скорость VV перехода (A.24), $ZW=CO_2$, индекс 1 относится к нижнему уровню колебательной моды молекулы N_2 , индекс 2 относится к симметричной моде CO_2 , индекс 3 относится к деформационной моде CO_2 .

Для $CO_2(11^10)$:

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = -k^{XY-ZW} N^{N_2} \frac{1}{2} \left[(1 + \alpha_1) \alpha_2 \alpha_3 \exp\left(\frac{\theta_2 + \theta_3 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 (1 + \alpha_2) (2 + \alpha_3) \right] \quad (A.28)$$

Для данного процесса $\theta_2 = 3353$, $\theta_2 = 2000$, $\theta_3 = 960$, $\theta_4 = 3380$

5) Еще один межмолекулярный V-V процесс



В данном случае

$$L' = 4, \quad k' = 1, \quad l'_1 = 1, \quad l'_2 = 0, \quad l'_3 = 3, \quad l'_4 = 0, \quad r_1 = r_2 = r_4 = 1, \quad r_3 = 2$$

Для $N_2(1)$ $l'_\xi = 1$ и

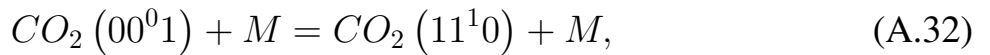
$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} &= k^{XY-ZW} N^{ZW} \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \frac{\alpha_1^0}{(1 + \alpha_1^0)} \left(\frac{2 + \alpha_3^0}{\alpha_3^0}\right)^3 - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \right\} = \\ &= k^{XY-ZW} N^{ZW} \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \exp\left(\frac{3\theta_3 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

где k^{XY-ZW} - скорость VV перехода (A.29), $ZW=CO_2$, индекс 1 относится к нижнему уровню колебательной моды молекулы N_2 , индекс 3 относится к деформационной моде CO_2 .

Для $CO_2(03^10)$ $l'_\xi = 3$ и :

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = -3k^{XY-ZW} N^{N_2} \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \exp\left(\frac{3\theta_3 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_3}{2}\right)^3 \right\} \quad (\text{A.31})$$

б) Аналогично получаем:



$$L = 3, k = 1, l_1 = 1, l_2 = 1, l_3 = 1, r_3 = 2$$

$$\xi = CO_2(00^01)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \left\{ \begin{array}{l} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{array} \right\} N^{\epsilon_q} \right) \times \\ &(1 + \alpha_1) \alpha_2 \frac{\alpha_3}{2} \exp(/T) \exp\left(\frac{\theta_3 + \theta_2 - \theta_1}{T}\right) \exp(/T) - \alpha_1 (1 + \alpha_2) \left(1 + \frac{\alpha_3}{2}\right) \end{aligned}$$

При использовании основной нумерации:

$$\frac{d\alpha_3}{dt} = \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \times (1 + \alpha_3) \alpha_8 \frac{\alpha_2}{2} \exp\left(\frac{\theta_2 + \theta_8 - \theta_3}{T}\right) - \alpha_3 (1 + \alpha_8) \left(1 + \frac{\alpha_2}{2}\right)$$

$$T_{v,8} = T_{v,2}, \quad \theta_8 = 2\theta_2$$

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_3}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \frac{1}{(1 + \alpha_2)} \times \left[(1 + \alpha_3) \left(\frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) - \alpha_3 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \right] \\ &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \cdot \frac{\exp(\theta_2/T_{v,2}) - 1}{\exp(\theta_2/T_{v,2}) + 1} \times \left[(1 + \alpha_3) \left(\frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \exp\left(\frac{3\theta_2 - \theta_3}{T}\right) - \alpha_3 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2}\right)^3 \right] \end{aligned}$$

Т.к.

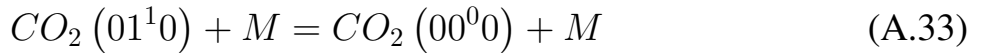
$$T_{v,8} = T_{v,2}, \quad \theta_8 = 2\theta_2$$

$$\alpha_8 = \frac{\alpha_2}{2(\exp(\theta_2/T_{v,2}) + 1)} = \frac{\alpha_2^2}{4(1 + \alpha_2)}$$

$$\alpha_8 + 1 = \frac{\alpha_2^2 + 4\alpha_2 + 4}{4(1 + \alpha_2)} = \frac{(\alpha_2 + 2)^2}{4(1 + \alpha_2)}$$

$$\alpha_2 + 1 = \frac{\exp(\theta_2/T_{v,2}) + 1}{\exp(\theta_2/T_{v,2}) - 1}$$

7) Рассмотрим V-T процесс для трехатомной молекулы



В данном случае используется формула

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} \left\{ \begin{matrix} l_n \rightarrow 0 \\ 0 \rightarrow l_j \end{matrix} \right\} N^{\epsilon_q} \right) \times l_\xi \prod_{i=1}^k \left\{ \begin{matrix} l_n + r_n - 1 \\ l_n \end{matrix} \right\} [r_n (r_n + \alpha_n^0)]^{-l_n} \prod_{j=k+1}^L (r_j \alpha_j^0)^{-l_j} \times \\ &\times \left\{ \prod_{i=1}^k [\alpha_n^0 (r_n + \alpha_n)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j (r_j + \alpha_j^0)]^{l_j} - \prod_{i=1}^k [\alpha_n (r_n + \alpha_n^0)]^{l_n} \prod_{j=k+1}^L [\alpha_j^0 (r_n + \alpha_j)]^{l_j} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

где $L = 3$, $k = 2$, $l_1 = 0$, $l_2 = 1$, $l_3 = 0$, $r_1 = r_3 = 1$, $r_2 = 2$

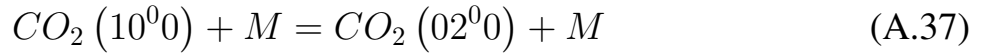
$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ \begin{matrix} l_2 + r_2 - 1 \\ l_2 \end{matrix} \right\} [r_2 (r_2 + \alpha_n^0)]^{-l_2} \left\{ [\alpha_2^0 (r_2 + \alpha_2)]^{l_2} - [\alpha_2 (r_2 + \alpha_2^0)]^{l_2} \right\} = \\ &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left[\frac{2\alpha_2^0 - 2\alpha_2}{(2 + \alpha_2^0)} \right] = \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) [1 - \exp(-\theta_2/T)] (\alpha_2^0 - \alpha_2) \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

т.к.

$$\alpha_2^0 + 2 = \frac{2}{1 - \exp(-\theta_2/T)} \quad (\text{A.36})$$

В данном случае α_ξ и индекс "2" относятся к деформационной моде $CO_2(v_2)$, а суммирование производится по всем бесструктурным молекулам газовой смеси.

8) Рассмотрим внутримолекулярный V-V процесс



В данном случае также используется формула (A.34), где

$$L = 3, \quad k = 1, \quad l_1 = 1, \quad l_2 = 2, \quad l_3 = 0, \quad r_1 = r_3 = 1, \quad r_2 = 2$$

Для $CO_2(10^00)$ $l_\xi = 1$ и :

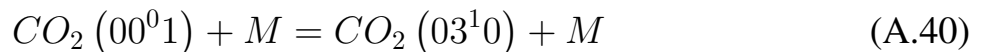
$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_\xi}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) [r_1 (r_1 + \alpha_1^0)]^{-l_1} (r_2 \alpha_2^0)^{-l_2} \times \\ &\times \left\{ [\alpha_1^0 (r_1 + \alpha_1)]^{l_1} [\alpha_2 (r_2 + \alpha_2^0)]^{l_2} - [\alpha_1 (r_1 + \alpha_1^0)]^{l_1} [\alpha_2^0 (r_2 + \alpha_2)]^{l_2} \right\} \\ &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) (\alpha_2)^2 \frac{\alpha_1^0}{4(1 + \alpha_1^0)} \left(\frac{(2 + \alpha_2^0)}{\alpha_2^0} \right)^2 - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^2 \right\} = \\ &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_2}{2} \right)^2 \exp\left(\frac{2\theta_2 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Для $CO_2(02^00)$ $l_\xi = 2$

$$\frac{d\alpha_\xi}{dt} = -2 \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_2}{2} \right)^2 \exp\left(\frac{2\theta_2 - \theta_1}{T}\right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^2 \right\} \quad (\text{A.39})$$

Здесь $k^{XY-\epsilon_q}$ - скорость VV перехода (A.37) при столкновении с молекулой M_q , $XY=CO_2$, индекс 1 относится к симметричной моде CO_2 , индекс 2 относится к деформационной моде CO_2

9) Следующий процесс:



Здесь $L = 2$, $k = 1$, $l_1 = 1$, $l_2 = 3$, $r_1 = 1$, $r_2 = 2$, индекс 1 относится к асимметричной моде ($l_\xi = 1$), индекс 2 относится к деформационной моде, для

которой $l_\xi = 3$. Таким образом,

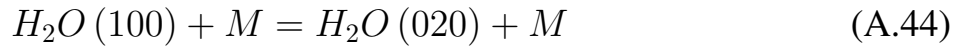
$$\begin{aligned} \frac{d\alpha_{CO_2(00^01)}}{dt} &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) [r_1 (r_1 + \alpha_1^0)]^{-l_1} (r_2 \alpha_2^0)^{-l_2} \times \\ &\times \left\{ [\alpha_1^0 (r_1 + \alpha_1)]^{l_1} [\alpha_2 (r_2 + \alpha_2^0)]^{l_2} - [\alpha_1 (r_1 + \alpha_1^0)]^{l_1} [\alpha_2^0 (r_2 + \alpha_2)]^{l_2} \right\} = \\ &= \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \exp \left(\frac{3\theta_2 - \theta_1}{T} \right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{d\alpha_{CO_2(03^11)}}{dt} = -3 \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) \left(\frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \exp \left(\frac{3\theta_2 - \theta_1}{T} \right) - \alpha_1 \left(1 + \frac{\alpha_2}{2} \right)^3 \right\} \quad (\text{A.42})$$

т.к.

$$\frac{(2 + \alpha_2^0)}{\alpha_2^0} = \exp(\theta_2/T) \quad (\text{A.43})$$

10) Внутримолекулярный V-V переход воды:



Здесь $L = 2$, $k = 1$, $l_1 = 1$, $l_2 = 2$, $r_1 = 1$, $r_2 = 1$, индекс 1 относится к симметричной моде ($l_\xi = 1$), индекс 2 относится к деформационной моде, для которой $l_\xi = 2$. Таким образом,

$$\frac{d\alpha_{H_2O(100)}}{dt} = \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) (\alpha_2)^2 \exp \left(\frac{2\theta_2 - \theta_1}{T} \right) - \alpha_1 (1 + \alpha_2)^2 \right\} \quad (\text{A.45})$$

$$\frac{d\alpha_{H_2O(020)}}{dt} = -2 \left(\sum_q k^{XY-\epsilon_q} N^{\epsilon_q} \right) \left\{ (1 + \alpha_1) (\alpha_2)^2 \exp \left(\frac{2\theta_2 - \theta_1}{T} \right) - \alpha_1 (1 + \alpha_2)^2 \right\} \quad (\text{A.46})$$

Для определения коэффициентов скоростей реакций с участием возбужденных молекул CO, CO₂, N₂, H₂O, H₂, O₂, OH использовались формулы, полученные в работе [136] на основе теории SSH [90] и, по возможности, проверенные экспериментально. Для возбужденной молекулы NO использовались формулы из статьи [69], а для HCl - из работ [138, 236].

Приложение Б

Вывод уравнения для турбулентной кинетической энергии и скорости диссипации

Б.1. Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии

Очевидно, что

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial}{\partial t} (\rho u''_i u''_i)} &= \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u''_i u''_i}) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho \frac{\rho u''_i u''_i}{\bar{\rho}}} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_i}}) = 2 \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K), \end{aligned} \quad (\text{Б.1})$$

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u''_i u''_i)} &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho (\tilde{u}_j + u''_j) u''_i u''_i}) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\bar{\rho} \tilde{u}_j \widetilde{u''_i u''_i}}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u''_j u''_i u''_i}) = \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u''_j u''_i u''_i}). \end{aligned} \quad (\text{Б.2})$$

То есть,

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial}{\partial t} (\rho u''_i u''_i)} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j u''_i u''_i}) &= \\ 2 \left[\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u''_j u''_i u''_i}). \end{aligned} \quad (\text{Б.3})$$

С другой стороны:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u''_i u''_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u''_i u''_i) &= u''_i u''_i \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) \right] + \\ + \rho \frac{\partial}{\partial t} (u''_i u''_i) + \rho u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (u''_i u''_i) &= 2 \rho u''_i \left[\frac{\partial u''_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} \right], \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u''_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u''_i}{\partial x_j} &= \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} - u_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} - \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

откуда

$$\begin{aligned} &\overline{\frac{\partial}{\partial t} (\rho u''_i u''_i)} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u''_i u''_i) = \\ &= \overline{2\rho u''_i \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} - \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right]} = \\ &= \overline{2u''_i \left[\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]} - 2\overline{\rho u''_i \left[\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right]} - 2\overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}} = \\ &= \overline{2u''_i \left[\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]} - 2\overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

Приравнивая (Б.3) и (Б.6), получаем:

$$\begin{aligned} &\left[\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j K) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u''_j u''_i u''_i}) \\ &= \overline{u''_i \left[\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right]} - \overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

Вернемся к уравнению количества движения (2.33), записанному в консервативной форме. Чтобы получить неконсервативную форму вычтем из уравнения (2.33) уравнение неразрывности (2.32), умноженное на u_i :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) - u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} - u_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0,$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0,$$

откуда

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\delta_{ji} \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (\text{Б.8})$$

Подставляя это выражение в (Б.7), получим:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j K) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho u''_j \frac{1}{2} (u''_i)^2} - \overline{u''_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} + \overline{u''_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}} - \overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}. \quad (\text{Б.9})$$

Второй член в правой части расписываем как:

$$\overline{u''_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} = \overline{u''_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} + \overline{u''_j \frac{\partial p'}{\partial x_j}} = \overline{u''_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p' u''_j}) - \overline{p' \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}}. \quad (\text{Б.10})$$

А третий как:

$$\overline{u''_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u''_i}) - \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\tau_{ij} u''_i}) - \overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} - \widetilde{\tau_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}. \quad (\text{Б.11})$$

Подставляя эти выражения в (Б.9), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\bar{\rho}K)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{u}_j K)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\overline{\rho u''_j \frac{1}{2} (u''_i)^2} - \overline{p' u''_j} + \overline{\tau_{ij} u''_i} \right] - \\ &- \overline{\rho u''_i u''_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}} - \overline{\tau''_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}} - \overline{u''_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u''_j}{\partial x_j}} - \widetilde{\tau_{ij} \frac{\partial u''_i}{\partial x_j}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.12})$$

Б.2. Несжимаемая жидкость

Уравнение для турбулентной кинетической энергии наиболее хорошо изучено для несжимаемой жидкости, т.е. для случая, когда $\rho = const$. Обычно при этом коэффициент динамической вязкости полагается постоянным: $\mu = const$. Средние по Рейнольдсу и по Фавру при этом совпадают

$$\tilde{T} = \bar{T}. \quad (\text{Б.13})$$

Совпадают и соответствующие пульсации

$$T'' = T'. \quad (\text{Б.14})$$

Очевидно, что в несжимаемой жидкости справедливо:

$$\overline{u''_i} = -\frac{\overline{\rho' u'_i}}{\bar{\rho}} = 0. \quad (\text{Б.15})$$

Можно показать, что дивергенция пульсаций скорости равна нулю:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j} = 0. \quad (\text{Б.16})$$

Отсюда

$$\frac{\partial u'_j}{\partial x_j} = \frac{\partial (u_j - \overline{u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j} = 0. \quad (\text{Б.17})$$

Таким образом, в несжимаемой жидкости три последних члена уравнения (9.33) – (VI), (VII), (VIII) тождественно равны нулю.

Для представления диссипативного члена (V) уравнения (9.33) рассмотрим несколько промежуточных формул.

Прежде всего

$$\begin{aligned} \tau''_{ij} &= \tau'_{ij} = (\tau_{ij} - \overline{\tau_{ij}}) = \\ &= \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \mu \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) = \mu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) = 2\mu S'_{ij}, \end{aligned} \quad (\text{Б.18})$$

где $S'_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)$ – тензор пульсаций скоростей деформаций.

Вследствие симметрии тензора τ'_{ij} с помощью перестановки индексов можно получить:

$$\tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} = \tau'_{ij} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} = \tau'_{ij} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}. \quad (\text{Б.19})$$

Отсюда получаем:

$$\begin{aligned} \tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} &= \frac{1}{2} \left(\tau'_{ij} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{2} \tau'_{ij} \left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)^2 = 2\mu (S'_{ij})^2. \end{aligned} \quad (\text{Б.20})$$

После осреднения:

$$\begin{aligned} \overline{\tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} &= \frac{1}{2} \mu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)^2} = \\ &= \frac{1}{2} \mu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} + 2 \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} = \mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}}. \end{aligned} \quad (\text{Б.21})$$

Можно показать, что:

$$\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_i u'_j)} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{u'_i \frac{\partial u'_j}{\partial x_j}} \right) + \overline{\left(\frac{\partial u'_j}{\partial x_j} \right)^2}. \quad (\text{Б.22})$$

При однородной турбулентности первые два члена в правой части формулы (Б.22) обращаются в ноль.

Для несжимаемой жидкости третий член в правой части формулы (Б.22) также равен нулю.

Таким образом, в случае однородной турбулентности получаем:

$$\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} = 0. \quad (\text{Б.23})$$

Член, характеризующий вязкую диссипацию в уравнении (9.33), при больших числах Re может быть записан как:

$$\rho \varepsilon \equiv \overline{\tau'_{ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = \mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}. \quad (\text{Б.24})$$

Здесь через ε обозначена так называемая *скорость диссипации* турбулентной кинетической энергии. Ее физический смысл – скорость, с которой турбулентная кинетическая энергия K превращается в тепловую вследствие вязкого трения. Размерность $\varepsilon = [\text{м}^2/\text{с}^3]$.

Таким образом, для несжимаемой жидкости уравнение переноса турбулентной кинетической энергии имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{u_j} K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} + \mu \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \rho \varepsilon, \quad (\text{Б.25})$$

где $P_K = -\overline{\rho u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ – генерация K .

Здесь использованы допущения о градиентном характере турбулентной и молекулярной диффузии турбулентной кинетической энергии:

$$\begin{aligned} -\overline{\rho u'_j K} - \overline{p' u'_j} &= \frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j}, \\ \overline{\tau_{ij} u'_i} &= \mu \frac{\partial K}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (\text{Б.26})$$

Б.3. Уравнение переноса диссипации

Уравнение переноса ε можно строго получить, используя ту же методику, что и для вывода уравнения переноса K , только вместо $u''_i u''_i$ в формулах (Б.1)–(Б.6) необходимо использовать $\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$. Здесь $\nu = \mu/\rho$ – коэффициент кинематической вязкости.

В результате получается уравнение, содержащее большое количество достаточно сложных корреляций пульсаций, для которых при больших значениях чисел Рейнольдса получаются некоторые асимптотические зависимости. Подробные выкладки приводятся, например, в книге [237].

В результате для ε получается уравнение по структуре подобное уравнению переноса K :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{u'_j} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} + \mu \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{K} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon), \quad (\text{Б.27})$$

где σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ – числовые константы.