

РЕАЛИЗАЦИЯ ПОУРОВНЕВЫХ МОДЕЛЕЙ КОЭФФИЦИЕНТОВ СКОРОСТИ ЭНЕРГООБМЕНОВ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ КАРРА¹

Мельник М.Ю., студент кафедры гидроаэромеханики СПбГУ,

melnik.mxm@gmail.com

Аннотация

КАРРА – программный комплекс, разработанный на кафедре гидроаэромеханики СПбГУ и включающий в себя реализации множества подходов и моделей кинетической теории и созданный с целью упрощения расчётов течений газов.

В данной работе были реализованы и протестированы модели колебательного энергообмена двухатомных молекул, используемые для описания неравновесных течений смесей газов.

Введение

На сегодняшний день одной из наиболее точных моделей, учитывающей неравновесную колебательно-химическую кинетику, является поуровневая модель [1]. Область применимости данного подхода ограничена следующим соотношением:

$$\tau_{tr}, \tau_{rot} \ll \tau_{vibr} < \tau_{reac} \sim \theta, \quad (1)$$

где τ_{tr} , τ_{rot} , τ_{vibr} , τ_{reac} — времена релаксации поступательных, вращательных, колебательных степеней свободы и время химической релаксации, θ — характерное время изменения макроскопических параметров газа. Система уравнений, полученная на основе поуровневого подхода, включает в себя уравнения сохранения импульса и полной

¹ Работа выполнена при поддержке СПбГУ, НИР 6.37.206.2016.

энергии смеси, уравнения изменения заселенностей i -го колебательного уровня молекул сорта c

$$\frac{dn_{ci}}{dt} + n_{ci} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_{ci} \mathbf{V}_{ci}) = R_{ci}, \quad (2)$$

и числовой плотности атомов сорта c

$$\frac{dn_c}{dt} + n_c \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_c \mathbf{V}_c) = R_c. \quad (3)$$

Здесь n_{ci} — числовая плотность молекул сорта c , находящихся на колебательном уровне i , n_c — числовая плотность атомов сорта c , \mathbf{v} — макроскопическая скорость газа, \mathbf{V} — скорость диффузии. Правые части уравнений (2) и (3) включают в себя релаксационные члены, описывающие колебательно-химическую кинетику, и имеют вид:

$$R_{ci} = R_{ci}^{vibr} + R_{ci}^{react} = \sum_{dk'i'k'} \left(n_{ci'} n_{dk'} k_{c,i'i}^{d,k'k} - n_{ci} n_{dk} k_{c,ii'}^{d,kk'} \right) + \sum_{dc'd'} \sum_{ki'k'} \left(n_{c'i'} n_{d'k'} k_{c'i',ci}^{d'k',dk} - n_{ci} n_{dk} k_{ci,c'i'}^{dk,d'k'} \right), \quad (4)$$

$$R_c = R_c^{react} = \sum_{dc'd'} \left(n_{c'} n_{d'} k_{c',c}^{d',d} - n_c n_d k_{c,c'}^{d,d'} \right), \quad (5)$$

где $k_{c,ii'}^{d,kk'}$ — коэффициент скорости энергообмена при столкновении частиц сорта c и d на i -ом и k -ом колебательных уровнях, соответственно, $k_{ci,c'i'}^{dk,d'k'}$ — коэффициент скорости химической реакции, в результате которой образуются частицы сорта c' и d' на i' -ом и k' -ом колебательных уровнях.

КАРРА

Описание течений с использованием поуровневого подхода оказывается трудной задачей, требующей сложных расчётов и больших вычислительных ресурсов. С ростом вычислительных мощностей всё актуальнее становятся более точные модели. КАРРА [2] – это библиотека программного обеспечения с открытым исходным кодом [3], разрабатываемая на кафедре гидроаэромеханики СПбГУ. Она включает в себя реализацию различных подходов кинетической теории (детальный поуровневый подход, мультитемпературная и однотемпературная модели), функций вычисления коэффициентов скоростей образования частиц, моделей для расчета термодинамических и транспортных свойств в неравновесных газовых потоках, а также обширную базу данных свойств молекул, атомов и их взаимодействий.

Библиотека спроектирована так, что её легко интегрировать в уже существующие коды. В совокупности с обширной документацией это позволяет значительно ускорить разработку программного обеспечения и моделирование различных сложных течений за счёт использования уже готовых и протестированных модулей. Кроме того, ведётся работа по оптимизации кода, что позволит использовать для расчётов даже низкопроизводительные устройства.

Модели энергообмена

Важной задачей является описание обмена энергией между поступательными и колебательными степенями свободы при столкновениях молекул с частицами газа (VT-обмены) и обмена колебательной энергией при столкновениях молекул (VV-обмены).

Настоящая работа посвящена исследованию существующих моделей описания VT- и VV-обменов для двухатомных молекул и реализации их в программном комплексе КАРРА. Были написаны и протестированы функции вычисления коэффициентов скорости VT-обмена по теории

Шварца-Славского-Герцфельда (SSH) [4] и её обобщённой модификации для ангармонического осциллятора [5], аппроксимации Биллинга [6, 7], модели нагруженного гармонического осциллятора (Forced Harmonic Oscillator, FHO) [8] и аппроксимации, созданной в рамках европейской программы FP7 (Phys4Entry) [9], а также функции расчёта коэффициентов скорости VV-обменов по теории SSH и модели FHO.

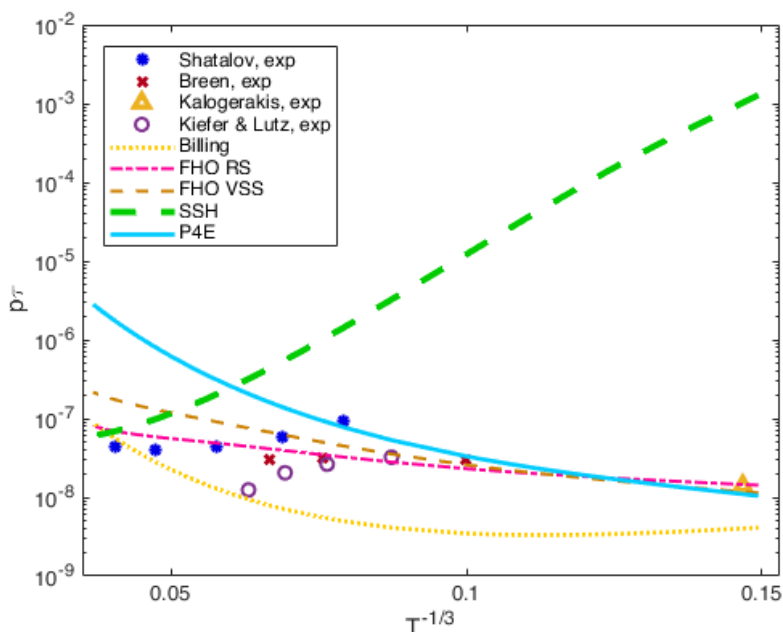


Рис. 1: Сравнение времён колебательной релаксации, рассчитанных по различным теоретическим моделям, с экспериментальными данными.

В результате тестирования были выявлены модели, обладающие наибольшей точностью и наилучшей вычислительной эффективностью. Аппроксимации, основанные на траекторных расчётах Биллинга, требуют наименьших ресурсных затрат, но обладают невысокой точностью, и их

применение ограничено лишь четырьмя реакциями. В то же время модель нагруженного гармонического осциллятора даёт наилучшее согласие с экспериментальными данными и допускает использование для всех реакций, но требует гораздо больших вычислительных затрат.

Заключение

В программном комплексе KAPPA были реализованы и протестированы функции вычисления коэффициентов скорости VT-обмена и VV-обменов в поуровневом приближении. Выявлены наиболее точные и наиболее эффективные с вычислительной точки зрения модели.

Литература

1. *Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В.* Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. Издательство С.-Петербургского университета, 2003.
2. *L. Campoli, G.P. Oblapenko, E.V. Kustova* KAPPA: Kinetic approach to physical processes in atmospheres library in C++ // *Computer Physics Communications*, Volume 236, 2019, Pages 244-267, ISSN 0010-4655.
3. <https://github.com/lkampoli/kappa>
4. *Schwartz R.N., Slawsky Z.I., Herzfeld K.F.* Calculation of vibrational relaxation times in gases // *J. Chem. Phys.* 1952. Vol. 20. N 10. P. 1591-1599.
5. Физико-химические процессы в газовой динамике / под редакцией Черного Г.Г. и Лосева С. А. / М.: Науч. мир, 2007. Т. 1. 399 с.
6. *Billing G.D., Fisher E.R.* VV- and VT-rate coefficients in N₂ by a quantum-classical model // *Chem. Phys.* 1979. Vol. 43. P. 395-401.
7. *Billing G.D., Kolesnick R.E.* Vibrational relaxation of oxygen. State to state rate constants // *Chem. Phys. Lett.* 1992. Vol. 4. P. 382-386.
8. *Adamovich I., Macheret S., Rich J., Treanor C.* Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model // *J. Thermophys. Heat Transf.* 1998. Vol. 12. N 1. P. 57-65.
9. <http://phys4entrydb.ba.imip.cnr.it/Phys4EntryDB/>