

УДК 533.6.011.8; 519.6

СИСТЕМА МОДЕЛЬНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА

© 2023 г. Ю. А. Никитченко*, С. А. Попов**, Н. И. Сергеева***

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия

*E-mail: nikitchenko7@yandex.ru

**E-mail: flowmech@mail.ru

***E-mail: natasg@outlook.com

Поступила в редакцию 22.03.2023 г.

После доработки 16.06.2023 г.

Принята к публикации 03.10.2023 г.

Представлена математическая модель течения многокомпонентного газа на базе модельного кинетического уравнения. Рассматриваются течения многокомпонентных одноатомных совершенных газов. Проведено тестирование модели на примере задачи о профиле ударной волны для смеси аргона и гелия в различных пропорциях. Показано, что модель дает удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0040364423050113

ВВЕДЕНИЕ

Направление, к которому относится настоящая работа, связано с разработкой моделей течения многокомпонентных газов. Настоящая публикация имеет своей целью построение модели течения смеси электрически нейтральных газов без учета химических реакций в газовой среде. Актуальность таких моделей связана с необходимостью физически адекватного описания обтекания активных по отношению к отдельным компонентам поверхностей. Существует целый ряд практических задач, требующих такого описания, например, обтекание поверхностей, химически активных к отдельным компонентам газа, обледенение поверхностей летательных аппаратов, разделение компонентов в конденсационных и криоконденсационных установках и прочее.

Проблема описания высоконеравновесных течений существует как в газовой динамике, так и в динамике плазмы [1, 2]. Имеется ряд аналитических работ по исследованию течения смесей двух- и трехкомпонентных газов [3–6] в ударных волнах, в которых получены профили ударной волны для двух- и трехкомпонентных газов.

В работах, связанных со статистическим моделированием неравновесных течений многокомпонентных газов, например [7–10], решается задача об ударной волне статистическими методами. Данные методы применимы для достаточно разреженных сред и не позволяют получать системы моментных уравнений для описания плотных газов.

Экспериментальные исследования посвящены в основном разделению профилей плотности,

скорости и удельных напряжений в ударной волне двухкомпонентного одноатомного газа. Для тестирования теоретических моделей наиболее интересна работа [11], в которой масштабирование по длинам пробега молекул и центрирование полученных профилей приведено в общепринятых критериях. Именно эта работа будет использоваться для тестирования разрабатываемой модели.

В настоящее время широкое применение получили модельные кинетические уравнения, обеспечивающие хорошую сходимость с решениями уравнения Больцмана на уровне макроскопических параметров газа. Работы [12–18] связаны с различными способами построения модельных кинетических уравнений. В [13, 14] строится модельное кинетическое уравнение для двухкомпонентного газа, компоненты которого сильно отличаются по массе. Достаточно полный обзор публикаций, связанных с моделированием течений многокомпонентных газов с помощью модели Бхатнагара, Гросса, Крука (БГК), дан в [15].

Настоящее исследование имеет следующие особенности. Учитывая, что модельные кинетические уравнения релаксационного типа используют интеграл обратных столкновений в сильно упрощенном виде по сравнению с интегралом Больцмана, описание процессов межкомпонентных взаимодействий проводится на уровне осредненных величин тепловой и относительной скоростей молекул. Эффективное сечение и частота межмолекулярных столкновений определяются по аналогии с временем релаксации Максвелла. Такой подход, отличающий данную модель от

известных ранее, позволяет получить относительно простые зависимости для интеграла столкновений, не сильно выходя за пределы допущений модельного уравнения.

В качестве базового модельного кинетического уравнения используется однокомпонентная модель работы [16].

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СМЕСИ ГАЗОВ

Рассматриваются течения многокомпонентных одноатомных совершенных газов. Учитываются только парные межмолекулярные взаимодействия, что является приемлемым допущением для совершенных газов. При таком подходе взаимодействие всех компонентов смеси может быть выражено в виде суммы взаимодействия отдельных пар.

Ниже величины с тильдой относятся к параметрам смеси газов. Для отдельных компонентов газовой смеси использована специальная символика. Параметры рассматриваемого компонента (плотность, скорость, температура, коэффициент вязкости т.п.) будем обозначать верхним индексом K , а фонового компонента — нижним индексом N . Это же правило будет использоваться и для параметров межмолекулярных взаимодействий (относительная скорость, частота столкновений и т.п.), содержащих два индекса.

Если значения параметров межмолекулярного взаимодействия данной пары компонентов совпадают, оба индекса будут указаны сверху, что облегчает чтение математических выражений. Например, средняя скорость молекул рассматриваемого компонента K относительно фонового компонента N обозначается как $\bar{g}_N^K$. Эта скорость будет определяться с учетом не только относительной скорости центров массы компонентов, но и с учетом их средних тепловых скоростей $\bar{c}^K$ и $\bar{c}_N$. Ниже будет показано, что в этом случае $\bar{g}_N^K = \bar{g}_K^N = \bar{g}^{KN}$.

Рассмотрим процесс межмолекулярных столкновений в однокомпонентном газе. Эффективное сечение столкновений $\sigma = \pi d^2$, где d — условный диаметр молекул, являющийся радиусом сечения. Относительная скорость движения молекул $\bar{g}$ в этом случае может быть ассоциирована со средней скоростью теплового движения $\bar{c}$:

$$\bar{g} \approx \bar{c} = \bar{c}_\infty \sqrt{\frac{T}{T_\infty}}.$$

Здесь $\bar{c}$ и $\bar{c}_\infty$ — средняя тепловая скорость в рассматриваемой точке и невозмущенном потоке; T и T_∞ — температура газа в рассматриваемой точке и в невозмущенном потоке.

Средняя длина свободного пробега молекулы может быть выражена как

$$\bar{\lambda} = \frac{\bar{c}}{n\sigma\bar{g}} \approx \frac{1}{n\sigma},$$

где n — концентрация молекул, σ — эффективное сечение столкновения.

Эффективное сечение столкновений, согласно элементарной кинетической теории [19], связано с коэффициентом вязкости

$$\mu = mn\bar{c}\bar{\lambda} = m\bar{c}_\infty \sqrt{\frac{T}{T_\infty}} \frac{1}{\sigma},$$

где m — масса молекулы. Если для коэффициента вязкости принять степенной закон $\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^s$,

где μ_∞ — коэффициент вязкости в невозмущенном потоке, а s — свободный параметр модели ($s = 0.5$ для молекул-шаров и $s = 1$ для максвелловских молекул), то условный диаметр молекул d может быть выражен как

$$d = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} = \sqrt{\frac{m\bar{c}_\infty}{\pi\mu_\infty}} \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{0.25-s/2}.$$

Частота столкновений молекул

$$\nu = \sigma \bar{c} n = mn \frac{\bar{c}_\infty}{\mu_\infty} \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{1-s}.$$

Модельное кинетическое уравнение для частоты столкновений использует первое приближение процедуры Чепмена–Энскога $\nu = \frac{nkT}{\mu}$, где k — постоянная Больцмана. Из двух последних выражений следует

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{kT}{m}}.$$

По аналогии с однокомпонентным газом определим основные параметры смеси. Условный диаметр одного компонента смеси, например K -компонента,

$$d^K = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (m^K k T_\infty)^{0.25} \frac{1}{\sqrt{\mu_\infty^K}} \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{0.25-sK/2}. \quad (1)$$

В этом выражении и ниже sK — показатель степени для компонента K .

Частота столкновений K -молекул между собой (K – K -столкновений)

$$\nu_K^K = \nu^{KK} = \frac{n^K k T_\infty}{\mu_\infty^K} \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{1-sK}. \quad (2)$$

При определении частоты межкомпонентных столкновений v_N^K следует учесть, что эффективное сечение столкновений выражается как

$$\sigma^{KN} = \frac{\pi}{4}(d^K + d_N)^2, \quad (3)$$

где d^K и d_N — условные диаметры молекул соответствующих компонентов.

Компоненты в общем случае движутся с различными групповыми скоростями $\mathbf{U}^K$ и $\mathbf{U}_N$. Относительная скорость движения компонентов определена как $\Delta\mathbf{U}_N^K = \mathbf{U}^K - \mathbf{U}_N$.

В рамках используемого приближения средние тепловые скорости $\bar{c}^K$ и $\bar{c}_N$ рассматриваются как положительно определенные изотропные величины. С этой точки зрения целесообразно рассмотреть эффективную групповую скорость $U_N^K = |\Delta\mathbf{U}_N^K| \cos\beta$, которая является проекцией $\Delta\mathbf{U}_N^K$ на одно из возможных направлений средних тепловых скоростей $\bar{c}^K$ и $\bar{c}_N$. На рис. 1 такое направление показано штриховой линией в условной плоскости $0U_xU_y$, содержащей эту линию и вектор $\Delta\mathbf{U}_N^K$.

Поскольку частота межмолекулярных столкновений v_N^K определяется общим количеством столкновений молекул, движущихся во всевозможных направлениях со средней тепловой скоростью $\bar{c}^K$, введем среднюю положительно определенную групповую скорость

$$U_N^K = \int_0^{\pi/2} |\Delta\mathbf{U}_N^K| \cos\beta d\beta = \frac{2}{\pi} |\Delta\mathbf{U}_N^K|.$$

Считая все направления теплового движения равновероятными, что является достаточно силь-

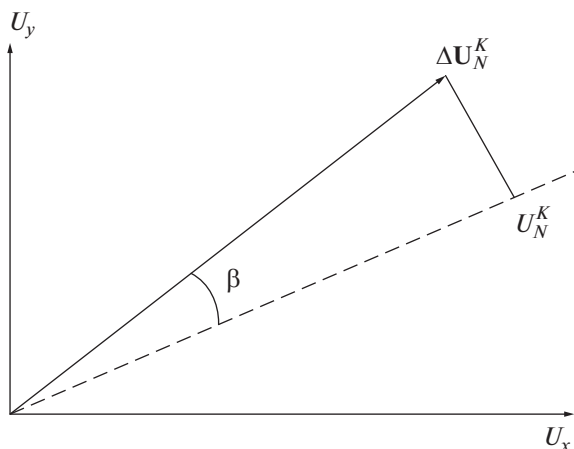


Рис. 1. Схема определения эффективной групповой скорости.

ным допущением для высоконеравновесных течений, среднюю скорость пробной молекулы относительно фоновых молекул, т.е. $\bar{g}_N^K$, можно вычислить как среднее значение относительных скоростей, полученное для восьми комбинаций $\pm\bar{U}_N^K, \pm\bar{c}^K, \pm\bar{c}_N$:

$$\begin{aligned} \bar{g}_N^K &= \frac{1}{8} (|\bar{U}_N^K + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}_N^K + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + \\ &+ |\bar{U}_N^K - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}_N^K - \bar{c}^K - \bar{c}_N| + \\ &+ |-\bar{U}_N^K + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |-\bar{U}_N^K + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + \\ &+ |-\bar{U}_N^K - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |-\bar{U}_N^K - \bar{c}^K - \bar{c}_N|) = \\ &= \frac{1}{4} (|\bar{U}_N^K + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}_N^K + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + \\ &+ |\bar{U}_N^K - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}_N^K - \bar{c}^K - \bar{c}_N|) = \\ &= \frac{1}{2} [\max(|\bar{U}_N^K + \bar{c}^K|, \bar{c}_N) + \max(|\bar{U}_N^K - \bar{c}^K|, \bar{c}_N)]. \end{aligned}$$

Здесь учтено, что $\bar{g}_N^K$ и восемь ее возможных значений — положительно определенные величины. Из выражения для суммы восьми слагаемых следует очевидное соотношение $\bar{g}_N^K = \bar{g}_K^N = \bar{g}^{KN}$. Соответствие суммы четырех слагаемых сумме двух функций максимума несложно проверить простым геометрическим построением.

Частота межкомпонентных столкновений с учетом (1) и (3)

$$\begin{aligned} v_N^K &= \sigma^{KN} \bar{g}^{KN} n_N = \frac{n_N k T_\infty}{4\tilde{\mu}_\infty} \frac{\bar{g}^{KN}}{\sqrt{k T_\infty}} \times \\ &\times \left[\sqrt{\frac{\tilde{\mu}_\infty}{\mu_\infty^K}} \left(\frac{m^K}{\tilde{m}_\infty} \right)^{0.25} \left(\frac{T^K}{T_\infty} \right)^{0.25-sK/2} + \right. \\ &\left. + \sqrt{\frac{\tilde{\mu}_\infty}{\mu_{\infty N}}} \left(\frac{m_N}{\tilde{m}_\infty} \right)^{0.25} \left(\frac{T_N}{T_\infty} \right)^{0.25-sN/2} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

В этом выражении $\tilde{m}_\infty = \sum_i \frac{m^i n_i}{n_\infty}$ — кажущаяся масса молекулы (суммирование по всем компонентам смеси); $\tilde{\mu}_\infty$ — вязкость смеси в невозмущенном потоке, определяемая по таблицам вязкости смесей.

В процессе KN -столкновений групповая скорость молекул, участвующих в этих столкновениях, может релаксировать до предельного значения $\mathbf{U}^{KN}$. Если в KN -столкновениях участвуют n^{KN} молекул каждого компонента, то закон сохранения импульса требует

$$\mathbf{U}^{KN} (m^K n^{KN} + m_N n^{KN}) = \mathbf{U}^K m^K n^{KN} + \mathbf{U}_N m_N n^{KN},$$

$$\mathbf{U}^{KN} = \frac{\mathbf{U}^K m^K + \mathbf{U}_N m_N}{m^K + m_N}.$$

По аналогии с работой [16] предусмотрим вариант неполной релаксации, при которой групповая скорость участвующих в KN -столкновениях молекул K -компонента после столкновений частично сохранит свое прежнее значение $\mathbf{U}^K$:

$$\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^K + \frac{\tau_p}{\tau_U} (\mathbf{U}^{KN} - \mathbf{U}^K), \quad (5)$$

где $\mathbf{U}_N^{+K}$ — групповая скорость участвующих в KN -столкновениях молекул K -компонента после столкновения.

Параметр $\frac{\tau_p}{\tau_U}$, имеющий смысл отношения времени релаксации напряжений к времени релаксации групповой скорости, является свободным параметром модели, определяемым в процессе тестирования модельного кинетического уравнения. Он может принимать значения $\frac{\tau_p}{\tau_U} \leq 1$. При $\frac{\tau_p}{\tau_U} = 1$ под-

разумевается полная релаксация, т.е. $\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^{KN}$. Нетрудно убедиться в выполнении закона сохранения импульса в случае неполной релаксации:

$$\mathbf{U}^{KN} (m^K n^{KN} + m_N n^{KN}) = \mathbf{U}_N^{+K} m^K n^{KN} + \mathbf{U}_K^{+N} m_N n^{KN}.$$

Температура тех частей компонентов, которые участвуют в KN -столкновениях, может релаксировать до предельного значения T^{KN} . Из закона сохранения энергии следует

$$T^{KN} = \frac{1}{2} \left(T^K + \frac{m^K}{2k} (\mathbf{U}^K - \mathbf{U}^{KN})^2 + T_N + \frac{m_N}{2k} (\mathbf{U}_N - \mathbf{U}^{KN})^2 \right) = \frac{T^K + T_N}{2} + \frac{1}{6k} \frac{m^K m_N}{m^K + m_N} (\mathbf{U}^K - \mathbf{U}_N)^2.$$

В случае неполной релаксации

$$T_N^{+K} = T^K + \frac{\tau_p}{\tau_T} (T^{KN} - T^K),$$

где T_N^{+K} — температура молекул K -компонента, участвующих в KN -столкновениях, после столкновения. Параметр $\frac{\tau_p}{\tau_T}$ связан с параметром $\frac{\tau_p}{\tau_U}$ следующим соотношением:

$$\frac{\tau_p}{\tau_T} = \frac{\tau_p}{\tau_U} \left(2 - \frac{\tau_p}{\tau_U} \right).$$

Систему кинетических уравнений для смеси одноатомных газов запишем по аналогии с модельным кинетическим уравнением [16]. Уравнение для K -компонента:

$$\frac{\partial f^K}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f^K}{\partial x_\alpha} = v^{KK} (f_K^{+K} - f^K) + \sum_{N \neq K} v_N^K (f_N^{+K} - f^K).$$

Здесь $f(t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3)$ — функция распределения молекул по скоростям, ξ_i — проекция молекулярной скорости. Повторяющийся подстрочный греческий индекс подразумевает суммирование одночлена по всем значениям соответствующей координаты:

$$f_K^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T^K)^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{c}^K)^2}{2R^K T^K} \right) \times \left(1 + \frac{(\mathbf{q}^K)_\alpha (c^K)_\alpha}{3\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(\mathbf{c}^K)^2}{5R^K T^K} - 1 \right) \right),$$

где $\rho^K = m^K n^K$, $R^K = k/m^K$, $\mathbf{c}^K = \xi - \mathbf{U}^K$, $\mathbf{q}^K$ — тепловой поток;

$$f_N^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T_N^{+K})^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{c}_N^{+K})^2}{2R^K T_N^{+K}} \right) \times \left(1 + \frac{(\mathbf{q}^K)_\alpha (c_N^{+K})_\alpha}{3\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(\mathbf{c}_N^{+K})^2}{5R^K T_N^{+K}} - 1 \right) \right),$$

где $\mathbf{c}_N^{+K} = \xi - \mathbf{U}_N^{+K}$.

Частоты столкновений v^{KK} и v_N^K определены уравнениями (2) и (4).

Система кинетических уравнений содержит уравнения всех компонент, связанные правыми частями.

Для тестирования модельного кинетического уравнения будет рассмотрена задача о профиле плоской ударной волны в двухкомпонентной смеси газов. Если газ движется вдоль одной из координатных осей, например оси x_1 , обозначаемой далее как x ($x_2 = y$, $x_3 = z$), то можно сократить количество измерений функции распределения, введя в рассмотрение две функции f_n и f_p для каждого из компонентов:

$$f_n(t, x, \xi_x) = \int f d\xi_y d\xi_z,$$

$$f_p(t, x, \xi_x) = \int (c_y^2 + c_z^2) f dc_y dc_z.$$

Здесь и далее $c_i = \xi_i - U_i$ — проекция вектора тепловой скорости молекул. В одномерной задаче очевидно: $c_y = \xi_y$, $c_z = \xi_z$. Функция f_p необходима для вычисления моментов второго и третьего порядков.

Кинетические уравнения принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{f_n^K}{f_p^K} \right| + \xi_x \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left| \frac{f_n^K}{f_p^K} \right| = \\ = v^{KK} \left| \frac{f_{nK}^{+K} - f_n^K}{f_{pK}^{+K} - f_p^K} \right| + v_N^K \left| \frac{f_{nN}^{+K} - f_n^K}{f_{pN}^{+K} - f_p^K} \right|. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь

$$\begin{aligned} f_{nK}^{+K} &= \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T^K}} \exp \left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T^K} \right) \times \\ &\times \left[1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T^K} - 3 \right) \right], \\ f_{pK}^{+K} &= \frac{2R^K T^K n^K}{\sqrt{2\pi R^K T^K}} \exp \left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T^K} \right) \times \\ &\times \left[1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T^K} - 1 \right) \right], \\ f_{nN}^{+K} &= \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_N^{+K}}} \exp \left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_N^{+K}} \right) \times \\ &\times \left[1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_N^{+K}} - 3 \right) \right], \\ f_{pN}^{+K} &= \frac{2R^K T_N^{+K} n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_N^{+K}}} \exp \left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_N^{+K}} \right) \times \\ &\times \left[1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_N^{+K}} - 1 \right) \right], \\ (c_N^{+K})_x &= \xi_x - (U_N^K)_x = \xi_x - (U^K)_x - \\ &- \frac{\tau_p}{\tau_U} [(U^{KN})_x - (U^K)_x]. \end{aligned}$$

Моменты функции распределения:

$$\begin{aligned} n^K &= \int f_n^K d\xi_x, \\ (U^K)_x &= \frac{1}{n^K} \int \xi_x f_n^K d\xi_x, \\ T^K &= \frac{1}{3R^K n^K} \int [(c^K)_x^2 f_n^K + f_p^K] dc_x, \\ (q^K)_x &= \frac{n^K}{2} \int [(c^K)_x^3 f_n^K + (c^K)_x f_p^K] dc_x, \\ (p^K)_{xx} &= m^K \int (c^K)_x^2 f_n^K dc_x - n^K k T^K \end{aligned}$$

— неравновесное нормальное напряжение (элемент девиатора напряжений). Здесь учтено, что $d(c^K)_x = dc_x = d\xi_x$.

ПРОФИЛЬ ПЛОСКОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

В данной работе задача о профиле ударной волны рассматривалась в качестве теста, имеющего своей целью оценить физическую адекватность разрабатываемого модельного уравнения. В этой связи детальное изучение процессов, протекающих в многокомпонентных ударных волнах [5], не рассматривалось. Задача решалась для двухкомпонентного газа.

Выбранная задача хорошо изучена как теоретически, так и экспериментально. На профиле ударной волны имеет место высоконеравновесное течение, характеризующееся значительным разделением профилей отдельных компонентов смеси. Кроме этого, решение задачи весьма чувствительно к выполнению законов сохранения массы, импульса и энергии. Даже небольшие неточности в выполнении этих законов не позволяют получить гладкие профили в нижней по потоку области течения.

Решение кинетического уравнения строилось как первая краевая задача. На границах вычислительной области задавались условия невозмущенного потока и условия Ренкина—Гюгонно. Учитывалось, что групповые скорости и температуры на границах, находящихся в условиях равновесия, одинаковы для обоих компонентов. Скорость звука и, следовательно, число Маха в невозмущенном потоке определялись по кажущейся массе молекул $\tilde{m}_\infty$. Из условий равновесия газовой среды на границах вычислительной области следует, что парциальные концентрации $n^K/(n^K + n_N)$ и $n_N/(n^K + n_N)$ за ударной волной соответствуют их значениям в невозмущенном потоке.

Для численного решения задачи использовался метод установления с шагом по времени Δt . Геометрическая сетка имела постоянный шаг Δx . Конечно-разностный шаблон по аналогии с [16] формировался на четырех узлах расчетной сетки со смещением против потока (молекулярного). В результате для $\xi_x \geq 0$ и $\xi_x \leq 0$ получены четырехдиагональные матрицы. Например, при $\xi_x \geq 0$ в i -м узле расчетной сетки конечно-разностный аналог кинетического уравнения (6) имеет вид

$$\begin{aligned} (1/6) \text{Ku} F_{i-2} - \text{Ku} F_{i-1} + \\ + [1 + 0.5 \text{Ku} + \Delta t (v^{KK} + v_N^K)] F_i + \\ + (1/3) \text{Ku} = \Delta t (v^{KK} F_K^{+K} + v_N^K F_N^{+K}) + F_i^{j-1}. \end{aligned}$$

Здесь $\text{Ku} = \xi_x \Delta t / \Delta x$ — аналог числа Куранта, F_i^{j-1} — значение искомой функции на предыдущем шаге по времени. Значения v^{KK} , v_N^K , F_K^{+K} , F_N^{+K} также вычислялись на предыдущем шаге Δt .

Показанные на графиках профили плотности и удельных напряжений построены для смеси аргона

и гелия при $M_\infty = 2.03\text{--}2.05$. Для сравнения использованы экспериментальные данные работы [11].

На рис. 2–5 показаны профили плотности и удельных напряжений для смеси аргона и гелия при парциальных концентрациях 13 и 50% аргона и при различных значениях параметра τ_p/τ_U . Данные работы [11] для концентрации 94% аргона не использовались ввиду большого разброса экспериментальных точек. Свободный параметр модели, определяющий зависимость коэффициента вязкости от температуры, принимался одинаковым для обоих компонентов: $s = s_K = s_N$.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}.$$

Индексы 1 и 2 соответствуют значению параметра перед и за ударной волной. Значение координаты $x/\lambda_\infty = 0$ соответствует середине профиля суммарной плотности.

Профили на рис. 2 и 3 показывают, что лучшее соответствие экспериментальным данным наблюдается при $\tau_p/\tau_U = 0.8\text{--}1.0$. Замедление релаксационного процесса, $\tau_p/\tau_U < 0.8$, приводит к большему отклонению расчетных профилей от эксперимен-

тальных. Если принять $\tau_p/\tau_U = 1$, то (5) упростится, так как $\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^{KN}$ и $T_N^{+K} = T^{KN}$. Тогда

$$f_N^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T^{KN})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{c}^{KN})^2}{2R^K T^{KN}}\right) \times \left[1 + \frac{(q^K)_\alpha (c^{KN})_\alpha}{3\rho^K (R^K T^{KN})^2} \left(\frac{(\mathbf{c}^{KN})^2}{5R^K T^{KN}} - 1\right)\right],$$

где $\mathbf{c}^{KN} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{U}^{KN}$.

На рис. 4 и 5 показаны профили удельных напряжений T_{xx} и T_{yy} , рассчитанные по соотношениям

$$T_{xx} = \frac{P_{xx}}{\rho R}, \quad T_{yy} = \frac{P_{yy}}{\rho R},$$

где P_{xx} и P_{yy} — компоненты тензора напряжений. Они не противоречат экспериментальным данным.

На рис. 6 и 7 показаны сравнительные профили плотности и теплового потока для смеси аргона и гелия, полученные с использованием БГК- и разрабатываемой моделей. Профили плотности обеих моделей практически совпадают. Профили теплового потока существенно различаются, что является известным фактом, связанным с неверным числом Прандтля БГК-модели.

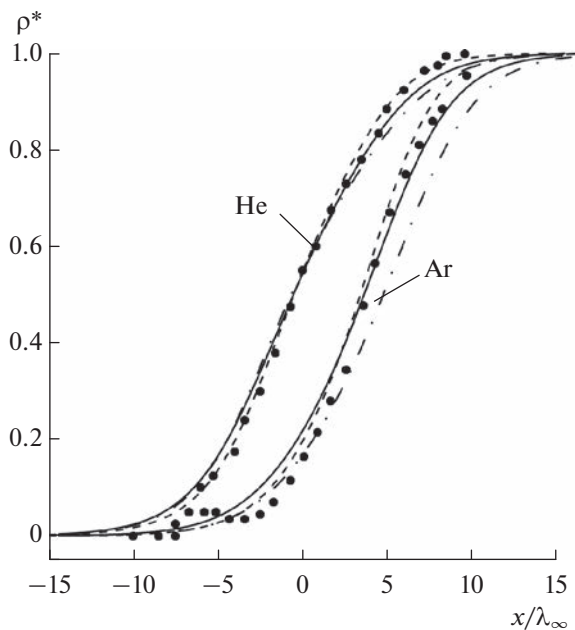


Рис. 2. Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона — 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$: точки — экспериментальные данные [11], сплошная линия — $\tau_p/\tau_U = 1$, штриховая — 0.8, штрихпунктир — 0.6.

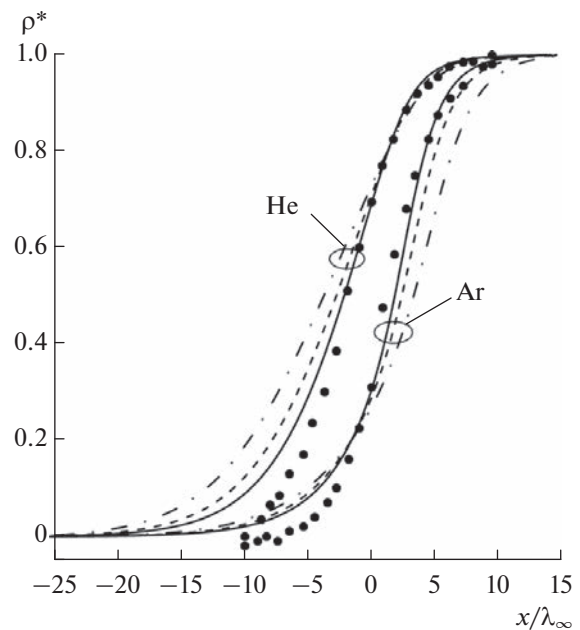


Рис. 3. Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона — 50%, $M_\infty = 2.05$, $s = 1$: точки — экспериментальные данные [11], сплошная линия — $\tau_p/\tau_U = 1$, штриховая — 0.8, штрихпунктир — 0.6.

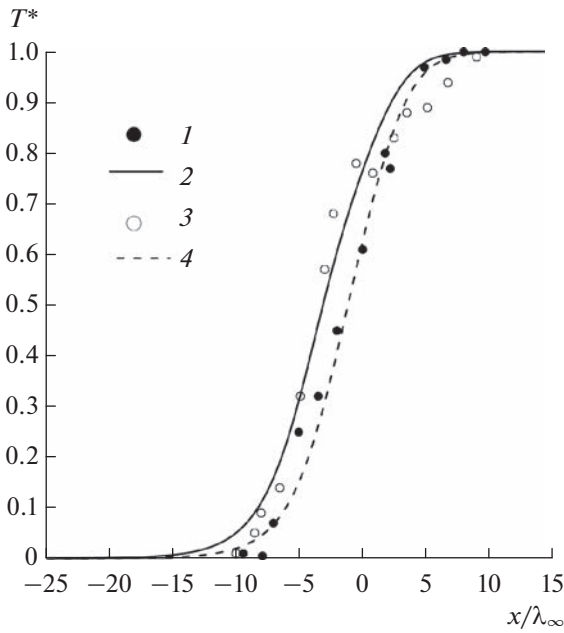


Рис. 4. Профили удельных напряжений гелия в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона – 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$; 1, 2 – T_{xx} ; 3, 4 – T_{yy} (1, 3 – экспериментальные [11]; 2, 4 – расчетные данные).

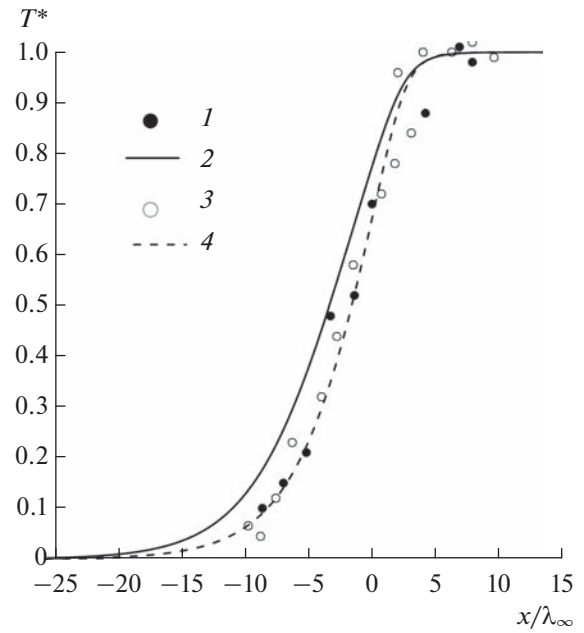


Рис. 5. Профили удельных напряжений гелия в плоской ударной волне двухкомпонентного газа при содержании аргона 50%, $M_\infty = 2.05$: обозначения те же, что на рис. 4.

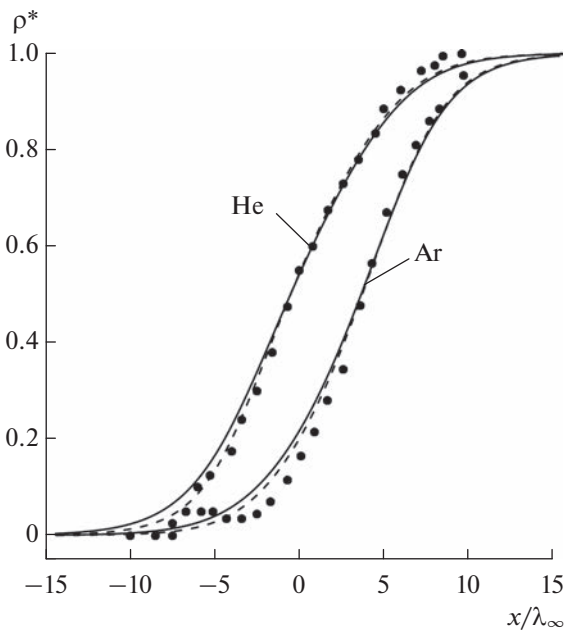


Рис. 6. Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона – 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – экспериментальные данные [11], сплошная линия – разрабатываемая модель, штриховая – модель БГК.

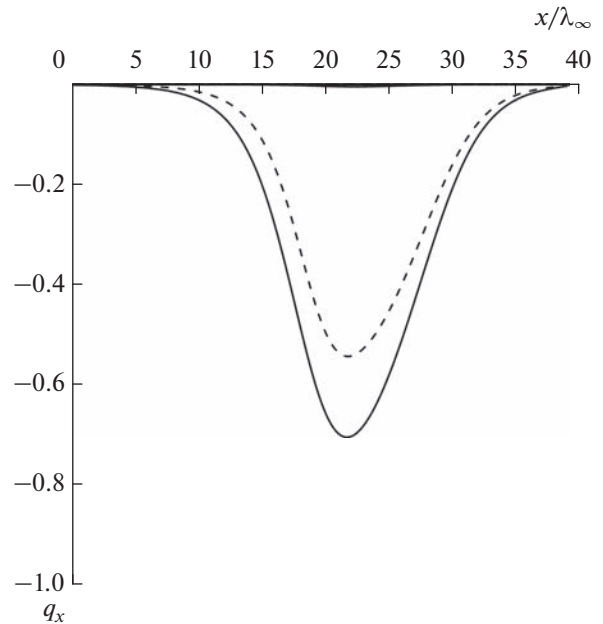


Рис. 7. Профили теплового потока в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона – 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: сплошная линия – разрабатываемая модель, штриховая – модель БГК.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе приведена система модельных кинетических уравнений для смеси одноатомных газов. По аналогии с предложенной моделью может быть построена система уравнений для смеси многоатомных газов. Кинетические уравнения системы позволяют построить применимую для описания течений плотных газов систему моментных уравнений для каждого компонента газа. Проведенные численные тесты показывают, что разработанная модель дает удовлетворительную сходимость с экспериментальными данными для одноатомных газов. Основные отличия разработанной модели от известных модельных кинетических уравнений для смеси газов заключаются в следующем.

— Относительная скорость движения молекул разных компонентов выражена через осредненные величины тепловых и групповых скоростей, что приводит к достаточному простому выражению для частоты межмолекулярных столкновений и повышает экономичность модели с точки зрения количества вычислительных операций.

— Частота столкновений различных компонентов содержит коэффициент вязкости смеси, определяемый только в невозмущенном потоке по известным табличным данным для данного состава смеси. В результате отпадает необходимость в использовании аппроксимаций этого коэффициента, зачастую весьма сложных, в зависимости от парциального состава и температуры.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства образования и науки РФ (номер темы FSFF-2023-0008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сон К.Э. Редуцирование полной системы уравнений химической кинетики для течений многокомпонентных высокотемпературных газов на основе метода частичного локального равновесия // ТВТ. 2020. Т. 58. № 1. С. 81.
2. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Трехкомпонентная химическая модель неидеальной плазмы “для пользователей” // ТВТ. 2021. Т. 59. № 1. С. 3.
3. Великодный В.Ю., Качармин С.В. Структура ударных волн в трехкомпонентных газовых смесях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 10. <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/326/>
4. Демидов И.В., Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Тихоновец А.В. Асимптотически точное значение функции распределения пар молекул в ударно сжатой сильно диспергированной смеси газов // IX Поляховские чтения. Матер. Междун. науч. конф. по механике. 9–12 марта 2021. СПб.: Изд-во ВВМ, 2021. С. 471.
5. Demidov I.V., Kuznetsov M.M., Kuleshova Y.D., Tikhonovets A.V. Analytical Theory of High-speed Nonequilibrium in a Binary Mixture of Gases with a Predominant Light Component // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 2056. 012008.
6. Harris W.E., Bienkovski G.K. An Asymptotic Theory of Shock Structure in Binary Gas Mixtures of Disparate Masses // Rarefied Gas Dynamics. 1969. V. 6. P. 397.
7. Bird G.A. The Structure of Normal Shock Waves in a Binary Gas Mixture // J. Fluid Mech. 1968. V. 31. Pt. 4. P. 657.
8. Куликов С.В., Соловьева М.Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // ЖВМиМФ. 1988. Т. 28. № 12. С. 1867.
9. Куликов С.В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны // МЖГ. 1997. № 4. С. 171.
10. Райнес А.А. Численное исследование температурных макропараметров в ударной волне в бинарной смеси газов на базе кинетического уравнения Больцмана // МЖГ. 2003. № 1. С. 154.
11. Бочкарев А.А., Ребров А.К., Тимошенко Н.И. Структура ударной волны в смеси Ar–He // Изв. СО АН СССР. 1976. № 3. Вып. 1. С. 76.
12. Ворошилова Ю.Н. Модельные кинетические уравнения и описание газовых потоков на разных стадиях релаксации // Вестн. СПб. ун-та. Математика. Механика. Астрономия. 2018. Т. 5(63). Вып. 2. С. 278.
13. Oguchi H. A Kinetic Model for a Binary Mixture and its Application to a Shock Structure // Rarefied Gas Dynamics. 1967. V. 1. P. 745.
14. Abe K., Oguchi H. Shock Wave Structure in Binary Gas Mixture // Rarefied Gas Dynamics. 1969. V. 6. P. 425.
15. Pirner M. Kinetic Modeling of Gas Mixtures. Würzburg: Würzburg University Press, 2018. 222 p.
16. Никитченко Ю.А. Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов // ЖВМиМФ. 2017. Т. 57. № 11. С. 1882.
17. Ларина И.Н., Рыков В.А. Метод расщепления второго порядка точности для решения уравнения Больцмана // Матем. моделирование. 2002. Т. 14. № 8. С. 96.
18. Ларина И.Н., Рыков В.А. Метод численного решения уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена // Матем. моделирование. 2000. Т. 12. № 6. С. 109.
19. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.