ТЕПЛОМАССООБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

УДК 533.7

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН В ГАЗОВОЙ СМЕСИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ЕЕ КОМПОНЕНТОВ

© 2024 г. Ю.А. Никитченко*, Н.И. Сергеева**

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

*E-mail: nikitchenko 7@yandex.ru
**E-mail:natasg@outlook.com
Поступила в редакцию 27.05.2024 г.
После доработки 30.07.2024 г.
Принята к публикации 08.10.2024 г.

На основе модельного кинетического уравнения для смеси газов и его системы моментных уравнений рассмотрена задача о профиле плоской ударной волны в смеси одно- и многоатомных газов. Проведены серийные расчеты для ударных волн в смесях Ar-He и H_2-CO_2 в интервале парциальных концентраций от 0.01 до 0.99. Показано, что наиболее узкие профили плотности, скорости и температуры возникают в смеси с малой концентрацией одного из компонентов. Также показано, что решения кинетического и моментного уравнений достаточно близки, при этом вязкие члены моментных уравнений слабо влияют на форму профиля компонента, если концентрация этого компонента мала. Получены и проанализированы немонотонные профили скорости звука.

DOI: 10.31857/S0040364424050085

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время весьма актуальной задачей является описание течений, обладающих высокой динамической (поступательной) неравновесностью. К таким течениям относятся, например, высокоскоростные течения, обтекание активных по отношению к газу поверхностей и т.п. С практической точки зрения, наиболее актуальны течения газовых смесей.

К числу основополагающих работ в этом направлении можно отнести [1, 2], где сформулирован основной подход к решению указанной задачи. При изучении высоко неравновесных течений большое внимание уделяется описанию процессов, протекающих в ударных волнах. Имеется большое количество работ, посвященных рассмотрению структуры ударной волны. Достаточно подробный анализ структуры ударных волн проведен в монографии [3].

Существует множество методов описания процессов, протекающих в смесях. Наиболее распространенным на сегодняшний день методом исследования процессов, происходящих в ударных волнах, является метод статистического моделирования Монте-Карло (см., например, [4—7]).

Имеются работы, посвященные течениям в ударных волнах с применением аналитических методов [8, 9]. В данных работах используется бимодальное распределение Тамма—Мотт—Смита. Показано, что рассмотрение поведения смесей газов аналитически может быть сопряжено со значительными математическими трудностями.

Особое место занимают экспериментальные работы по исследованию структуры ударных волн в смесях газов [10—13]. В данных работах рассматриваются профили плотности, скорости и температуры внутри ударных волн в бинарных смесях преимущественно одноатомных газов.

В последнее время возрастает интерес к модельным кинетическим уравнениям. Достоинствами этих уравнений являются хорошая сходимость с результатами, полученными на основе решения уравнения Больцмана, а также экономичность. Кроме того, рассмотрение модельных кинетических уравнений позволяет получить систему моментных уравнений, применимую к плотным газам.

В большинстве работ использовано модельное кинетическое уравнение Бхатнагара, Гросса и Крука (БГК) [3]. К недостаткам этой модели

следует отнести неверное число Прандтля и сильно заниженное время релаксации при описании многоатомных газов. Построение модельных кинетических уравнений для смесей газов рассмотрено в работах [14—16].

Близкой по тематике к предлагаемой работе является работа [17], в которой исследовались профили ударной волны в зависимости от массы компонентов и парциальных концентраций на базе системы моментных уравнений.

Настоящая работа является продолжением комплекса исследований, направленного на разработку численных методов расчета высоко неравновесных течений. Отмечены некоторые эффекты, которые необходимо учитывать при разработке вычислительных ядер CFD-пакетов прикладных программ.

В работе рассматриваются распределения параметров смеси, преимущественно многоатомных газов в широком интервале парциальных концентраций и при значительно различающихся молекулярных массах компонентов. Исследования проводятся на базе модельных кинетических уравнений [18—20] и следующей из них системы моментных уравнений [20]. В используемых моделях, в отличие от модели БГК, процессы поступательно-вращательной релаксации описаны явно, что существенно влияет на соотношение поступательной и вращательной температур и, следовательно, на частоты межмолекулярных столкновений.

МОДЕЛИ ТЕЧЕНИЯ

Модельное кинетическое уравнение для смеси двух одно- и многоатомных газов построено на основе работы [18] и представлено в [19, 20]. В этих работах для отдельных компонентов газовой смеси использована специальная символика. Параметры газа (плотность, скорость, температура, коэффициент вязкости и т.п.) обозначены верхними индексами K для рассматриваемого компонента и N — для фонового. Это же правило используется и для параметров межкомпонентных взаимодействий (относительная скорость, частота столкновений и т.п.), содержащих два индекса. Если параметр межкомпонентного взаимодействия различен для компонентов данной пары, то индекс фонового компонента N расположен снизу.

В [19] модельное кинетическое уравнение К-компонента смеси многоатомных газов приводится для одномерного течения. В общем случае оно имеет вид

$$\frac{\partial f^{K}}{\partial t} + \xi_{\alpha} \frac{\partial f^{K}}{\partial x_{\alpha}} = v^{KK} \left(f^{+KK} - f^{K} \right) + \\
+ \sum_{N \neq K} v_{N}^{K} \left(f_{N}^{+K} - f^{K} \right). \tag{1}$$

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

Для сокращения размерности (1) перейдем к интегралам функции распределения по пространству энергий вращения молекул

$$f_t^K (t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3) = \int f^K d\varepsilon,$$

$$f_r^K (t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3) = \int \varepsilon f^K d\varepsilon$$

и запишем (1) в виде системы уравнений

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} f_t^K \\ f_r^K \end{vmatrix} + \xi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \begin{vmatrix} f_t^K \\ f_r^K \end{vmatrix} =$$

$$= v^{KK} \begin{vmatrix} f_t^{+KK} - f_t^K \\ f_r^{+KK} - f_r^K \end{vmatrix} + \sum_{N \neq K} v_N^K \begin{vmatrix} f_{tN}^{+K} - f_t^K \\ f_{rN}^{+K} - f_r^K \end{vmatrix}.$$
(2)

В этой системе v^{KK} и $v_N^{\ K}$ — частоты KK- и KN- столкновений [19]:

$$v_{N}^{KK} = \frac{n^{K}kT_{\infty}}{\mu_{\infty}^{K}} \left(\frac{T^{K}}{T_{\infty}}\right)^{1-sK},$$

$$v_{N}^{K} = \frac{n^{N}kT_{\infty}}{4\tilde{\mu}_{\infty}} \frac{\overline{g}^{KN}}{\sqrt{\frac{kT_{\infty}}{\tilde{m}_{\infty}}}} \left(\sqrt{\frac{\tilde{\mu}_{\infty}}{\mu_{\infty}^{K}}} \left(\frac{m^{K}}{\tilde{m}_{\infty}}\right)^{0.25} \left(\frac{T^{K}}{T_{\infty}}\right)^{0.25-sK/2} + \sqrt{\frac{\tilde{\mu}_{\infty}}{\mu_{\infty}^{N}}} \left(\frac{m^{N}}{\tilde{m}_{\infty}}\right)^{0.25} \left(\frac{T^{N}}{T_{\infty}}\right)^{0.25-sK/2}\right).$$

Здесь $\tilde{m}_{\infty} = \sum_{I} \frac{m^{I} n_{\infty}^{I}}{n_{\infty}}$ — кажущаяся масса моле-

кул и $\tilde{\mu}_{\infty}$ — вязкость смеси, вычисленные в невозмущенном потоке; n — концентрация компонента; k — постоянная Больцмана; T_{∞} — температура невозмущенного потока. Вязкость смеси определяется с помощью аппроксимации Вильке [21], \overline{g}^{KN} — средняя скорость пробной молекулы относительно фоновых молекул.

Функции распределения молекул после KK-и KN-столкновений[20]:

$$f_{t}^{+KK} = \frac{n^{K}}{\left(2\pi R^{K} T_{t}^{+K}\right)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\left(\mathbf{c}^{K}\right)^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+K}}\right) \times \left(1 + \frac{\left(\phi^{K}\right)_{\alpha} \left(c^{K}\right)_{\alpha}}{3\rho^{K} \left(R^{K} T_{t}^{+K}\right)^{2}} \left(\frac{\left(\mathbf{c}^{K}\right)^{2}}{5R^{K} T_{t}^{+K}} - 1\right)\right),$$

$$f_{r}^{+KK} = \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2(\gamma^{K} - 1)} k T_{r}^{+K} f_{t}^{+KK},$$

$$f_{tN}^{+K} = \frac{n^{K}}{(2\pi R^{K} T_{t}^{+})^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{\left(\mathbf{c}^{KN}\right)^{2}}{2R^{K} T_{t}^{+}}\right] \times \left(1 + \frac{\left(\phi^{K}\right)_{\alpha} \left(c^{KN}\right)_{\alpha}}{3\rho^{K} \left(R^{K} T_{t}^{+}\right)^{2}} \left(\frac{\left(\mathbf{c}^{KN}\right)^{2}}{5R^{K} T_{t}^{+}} - 1\right)\right),$$

$$f_{rN}^{+K} = \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2(\gamma^{K} - 1)} k \left(T_{r}^{+}\right)_{N}^{K} f_{tN}^{+K}.$$

Злесь

$$T_{t}^{+K} = T^{K} + \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2} \frac{Z^{K} - 1}{Z^{K}} (T_{t}^{K} - T_{r}^{K});$$

$$T_{r}^{+K} = T^{K} - \frac{3}{2} (\gamma^{K} - 1) \frac{Z^{K} - 1}{Z^{K}} (T_{t}^{K} - T_{r}^{K});$$

$$T_{t}^{+} = \frac{1}{3} \left\{ \left[\left(1 - \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2} \frac{1}{Z^{K}} \right) \frac{1}{\gamma^{K} - 1} + \left(1 - \frac{5 - 3\gamma^{N}}{2} \frac{1}{Z^{N}} \right) \frac{1}{\gamma^{N} - 1} \right] T^{KN} - \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2(\gamma^{K} - 1)} \frac{Z^{K} - 1}{Z^{K}} T_{r}^{K} - \frac{5 - 3\gamma^{N}}{2(\gamma^{N} - 1)} \frac{Z^{N} - 1}{Z^{N}} T_{r}^{N} \right\};$$

$$\left(T_{r}^{+} \right)_{N}^{K} = T_{r}^{K} + \frac{1}{Z^{K}} \left(T^{KN} - T_{r}^{K} \right);$$

$$T^{KN} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{K} - 1}{\gamma^{N} - 1}} T^{K} + \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{N} - 1}{\gamma^{K} - 1}} T^{N} + \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{K} - 1}{\gamma^{K} - 1}} + \frac{1}{1 + \frac{\gamma^{K} - 1}{\gamma^{K} - 1}} \frac{m^{K} m^{N}}{m^{K} + m^{N}} \left(\mathbf{u}^{K} - \mathbf{u}^{N} \right)^{2};$$

 $\left(\mathbf{\phi}^K \right)_i = 0.5 m^K \int \left(\mathbf{c}^K \right)_i \left(\mathbf{c}^K \right)^2 f_i^{\;K} d\overline{c}$ — тепловой поток поступательных степеней свободы;

$$\mathbf{c}^{KN} = \mathbf{\xi} - \mathbf{u}^{KN};$$

$$\mathbf{u}^{KN} = \frac{\mathbf{u}^{K} m^{K} + \mathbf{u}^{N} m^{N}}{m^{K} + m^{N}};$$

 $R^{K} = \frac{k}{m^{K}}$ — удельная газовая постоянная компонента; Z — параметр столкновений, m^{K} — масса молекулы компонента; \mathbf{u}^{K} — групповая ско-

рость компонента; T_{K} , $T_{\mathit{t}}^{\mathit{K}}$, $T_{\mathit{r}}^{\mathit{K}}$ — термодинамическая, поступательная и вращательная температуры компонента; γ^{K} — показатель адиабаты компонента.

Система модельных кинетических уравнений (2) позволяет построить системы моментных уравнений. Ограничимся моментной системой неполного второго порядка, т.е. системой уравнений сохранения массы, импульса и энергии.

Процедура сведения кинетического уравнения к системе моментных уравнений достаточно традиционна. Применительно к (2) эта процедура заключается в интегрировании кинетических уравнений с множителями (молекулярным признаком) вида $m^K \xi_j \xi_k \dots$ по пространству молекулярных скоростей.

Интегрирование первого уравнения (2) с множителем m^K позволяет получить моментное уравнение закона сохранения массы (уравнение неразрывности); с множителем $m^K \xi_i$ — уравнение закона сохранения импульса (уравнение движения). Уравнение энергии может быть получено суммированием интеграла первого уравнения (2) с множителем $0.5m^K \xi^2$ и интеграла второго уравнения (2) без множителя, так как функция f_r^K является интегралом исходной функции распределения с множителем ε по пространству энергий вращения молекулы.

Для решения первой краевой задачи, к которой относится задача о профиле ударной волны, систему моментных уравнений целесообразно представить в следующем виде:

$$\begin{cases}
\frac{\partial \rho^{K}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{K} u_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}} = 0, \\
\frac{\partial u_{i}^{K}}{\partial t} + u_{\alpha}^{K} \frac{\partial u_{i}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{\rho^{K}} \frac{\partial P_{i\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}} = \\
= \sum_{N \neq K} v_{N}^{K} \frac{m^{N}}{m^{K} + m^{N}} \left(u_{i}^{N} - u_{i}^{K} \right), \\
\frac{\partial T^{K}}{\partial t} + u_{\alpha}^{K} \frac{\partial T^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \left(\gamma^{K} - 1 \right) \frac{P_{\alpha\beta}^{K}}{\rho^{K} R^{K}} \frac{\partial u_{\beta}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \\
+ \frac{\gamma^{K} - 1}{\rho^{K} R^{K}} \frac{\partial q_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}} = \\
= \sum_{N \neq K} v_{N}^{K} \left(1.5 \left(\gamma^{K} - 1 \right) T_{t}^{K} + - \\
+ \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2} \left(\frac{1}{Z^{K}} T^{KN} + \frac{Z^{K} - 1}{Z^{K}} T_{r}^{K} \right) - \\
- T^{K} + \frac{\gamma^{K} - 1}{2R^{K}} \left(\frac{m^{N}}{m^{K} + m^{N}} \right)^{2} \left(\mathbf{u}^{N} - \mathbf{u}^{K} \right)^{2} \right).
\end{cases}$$

Для замыкания системы (3) необходимо определить поступательную и вращательную температуры, а так же напряжения P_{ij}^{K} и тепловой поток q_i^{K} Будем рассматривать эти величины в первом приближении процедуры Чепмена—Энскога (приближение Навье—Стокса).

Моментное уравнение напряжений получаем интегрированием первого уравнения системы (2) с множителем $m^K \xi_i \xi_j$. Наиболее простой вид это уравнение имеет в случае одноатомных газов:

$$\frac{\partial P_{ij}^{K}}{\partial t} + \frac{\partial u_{\alpha}^{K} P_{ij}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + P_{i\alpha}^{K} \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + P_{j\alpha}^{K} \frac{\partial u_{i}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + 2 \frac{\partial \varphi_{\alpha ij}^{K}}{\partial x_{\alpha}} =$$

$$= -\left(\mathbf{v}^{KK} + \sum_{N \neq K} \mathbf{v}_{N}^{K} \right) p_{ij}^{K} +$$

$$+ \rho^{K} \sum_{N \neq K} \mathbf{v}_{N}^{K} \left(\delta_{ij} R^{K} \left(T^{KN} - T^{K} \right) +$$

$$+ \left(\frac{m^{N}}{m^{K} + m^{N}} \right)^{2} \left(u_{i}^{N} - u_{i}^{K} \right) \left(u_{j}^{N} - u_{j}^{K} \right) ,$$
(4)

где p_{ij}^K — неравновесные напряжения (девиатор напряжений); φ_{ijk}^K — моменты третьего порядка, свертка которых является тепловым потоком φ_i^K . В одноатомных газах $\varphi_i^K \equiv q_i^K$.

В ряде работ, например [22, 23], показано, что, если в качестве характерного размера при обезразмеривании задачи принять некоторый макроскопический размер L, определяющий число Кнудсена как $\mathrm{Kn} = \lambda_{\infty}/L$, где λ_{∞} — средняя длина свободного пробега молекулы в невозмущенном газе, то неравновесные величины φ_{ijk}^K и p_{ij}^K будут порядка Kn, а частоты столкновений v^{KK} и v_N^K порядка 1/Kn. В безразмерном уравнении движения системы (3) разность скоростей $u_i^N - u_i^K$ также имеет порядок Kn, в противном случае при Kn \rightarrow 0 в плотных газах правая часть уравнения неограниченно возрастает.

Перечисленные обстоятельства позволяют определить неравновесные напряжения в первом приближении. С учетом того, что $p_{ij}^K = P_{ij}^K - \delta_{ij} \, 1/3 \, P_{\alpha\alpha}^K = P_{ij}^K - \delta_{ij} \, p^K$, где p — давление одноатомного газа, вычтем из уравнения (4) треть его свертки. В результате получаем

$$\frac{\partial p_{ij}^{K}}{\partial t} + \frac{\partial u_{\alpha}^{K} p_{ij}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \left(\delta_{i\alpha} p^{K} + p_{i\alpha}^{K}\right) \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \left(\delta_{j\alpha} p^{K} + p_{j\alpha}^{K}\right) \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + \left(\delta_{j\alpha} p^{K} + p_{j\alpha}^{K}\right) \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{\alpha}} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \left(\delta_{\alpha\beta} p^{K} + p_{\alpha\beta}^{K}\right) \frac{\partial u_{\beta}^{K}}{\partial x_{\alpha}} + 2 \frac{\partial \varphi_{\alpha ij}^{K}}{\partial x_{\alpha}} - \delta_{ij} \frac{\partial \varphi_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}} = -\left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}\right) p_{ij}^{K} + (5)^{KK} + \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}$$

$$+\rho^{K} \sum_{N \neq K} \mathbf{v}_{N}^{K} \left(\frac{m^{N}}{m^{K} + m^{N}} \right)^{2} \left(\left(u_{i}^{N} - u_{i}^{K} \right) \left(u_{j}^{N} - u_{j}^{K} \right) - \delta_{ij} \frac{1}{3} \left(\mathbf{u}^{N} - \mathbf{u}^{K} \right)^{2} \right).$$

В первом приближении (5) содержит только старшие по порядку величины члены, т.е. члены порядка Кп должны быть опущены:

$$p^{K} \left(\frac{\partial u_{i}^{K}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{i}} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} p^{K} \frac{\partial u_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}} =$$

$$= - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K} \right) p_{ij}^{K}.$$
(6)

Здесь учтено, что частоты v_K^K и v_N^K имеют порядок 1/Kn, а произведение разности скоростей — Kn². Выражение (6) получено для одноатомного газа. В многоатомных газах необходимо учитывать влияние объемной вязкости газа [22, 23]. Для газов любой атомарной структуры выражение (6) принимает следующий вид:

$$p_{ij}^{K} = -\frac{p^{K}}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}} \left(\frac{\partial u_{i}^{K}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}^{K}}{\partial x_{i}} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{p^{K}}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}} \left(1 - \frac{5 - 3\gamma^{K}}{2} Z^{K} \right) \frac{\partial u_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}}.$$

$$(7)$$

Аналогичным образом может быть определен тепловой поток

$$q_i^K = -\frac{9\gamma^K - 5}{4(\gamma^K - 1)} R^K \frac{p^K}{\nu^{KK} + \sum_{N \neq K} \nu_N^K} \frac{\partial T^K}{\partial x_i}.$$
 (8)

Зависимости (7) и (8), очевидно, представляют собой известные законы Стокса и Фурье. В последнем для числа Прандтля использована аппроксимация Эйкена $\Pr = \frac{4\gamma}{9\gamma - 5}$.

В случае чистых, однокомпонентных газов коэффициент вязкости $\mu = p/v$ не зависит от плотности газа, так как давление и частота столкновений прямо пропорциональны концентрации молекул. Представим «эффективный» коэффициент вязкости компонента смеси $\mu_{\rm eff}^K$, фигурирующий в (7) и (8), в следующем виде:

$$\mu_{eff}^{K} = \frac{p^{K}}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_{N}^{K}} = \frac{n^{K}kT^{K}}{n^{K}\left(v^{KK}\right)^{1} + \sum_{N \neq K} n^{N}\left(v_{N}^{K}\right)^{1}}.$$

Здесь условные обозначения $(v^{KK})^1$ и $(v_N^K)^1$ подразумевают частоты столкновений одной молекулы класса K с молекулами того же класса и с молекулами класса N. Эти частоты зависят толь-

ко от температуры и химических свойств компонентов. Нетрудно заметить, что при уменьшении концентрации n^K «эффективный» коэффициент вязкости, а вместе с ним и вязкие члены p^K_{ij} и q^K_i также уменьшаются и в пределе обращаются в ноль. Таким образом, течение компонента с малой парциальной концентрацией даже в существенно неравновесной области близко к невязкому течению. Аналогичный вывод сделан в [3] в результате анализа численного решения уравнений, полученных асимптотическими методами.

Температуры определены как [24]

$$T_{t}^{K} = T^{K} - \frac{5 - 3\gamma^{K}}{3} Z^{K} \frac{\mu_{eff}^{K}}{R^{K} \rho^{K}} \frac{\partial u_{\alpha}^{K}}{\partial x_{\alpha}},$$

$$T_r^K = T^K + \left(\gamma^K - 1\right) Z^K \frac{\mu_{eff}^K}{R^K \rho^K} \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha}.$$

Полученные соотношения показывают, что разность поступательной и вращательной температур компонента K так же, как и вязкие члены p_{ij}^K и q_i^K , стремится к нулю при малой концентрации этого компонента в смеси.

ЗАДАЧА О ПРОФИЛЕ ПЛОСКОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

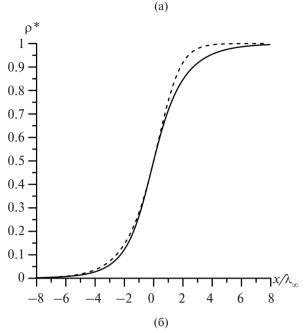
В данной работе решаетсязадача о профиле ударной волны для смеси двух многоатомных газов. Рассматривается смесь водорода и углекислого газа ввиду большой разницы масс молекул этих газов. Кроме того, используется модельное кинетическое уравнение работы [19] для смеси аргон—гелий.

Решение кинетического уравнения строилось как первая краевая задача. На левой границе вычислительной области задавались условия невозмущенного потока, на правой — условия Ренкина—Гюгонио. Конечно-разностный шаблон строился на четырех узлах расчетной сетки аналогично [18]. Шаг по пространству скоростей имел постоянное значение $\Delta \xi$. Для численного решения задачи использовался метод установления с шагом по времени Δt и постоянным шагом геометрической сетки Δx .

Для решения системы моментных уравнений конечно-разностный шаблон формировался на трех узлах расчетной сетки.

В работах [19,20] приведено сравнение профилей ударной волны одноатомных газов с экспериментом [10]. Там же проведено сравнение с результатами расчетов для многоатомных газов, полученными с помощью методов прямого статистического моделирования. Совпадение результатов — удовлетворительное.

Для валидации полученной в данной работе системы моментных уравнений (3) приводит-



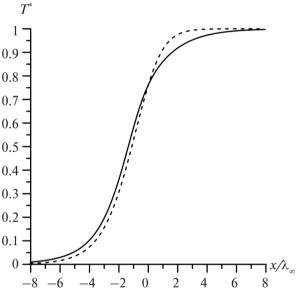


Рис. 1. Профили плотности (а) и температуры (б) углекислого газа в ударной волне при $M_{\infty}=2.05$: сплошная линия — решение модельного кинетического уравнения, штриховая линия — решение системы моментных уравнений.

ся сравнение с решением модельного кинетического уравнения [20]. На рис. 1 показаны зависимости плотности и температуры для углекислого газа. На рис. 2 представлены зависимостиплотности и температуры для смеси водорода и углекислого газа в равных пропорциях также при числе Маха $\mathrm{M}_{\scriptscriptstyle \infty}=2.05$. Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1} \,,$$

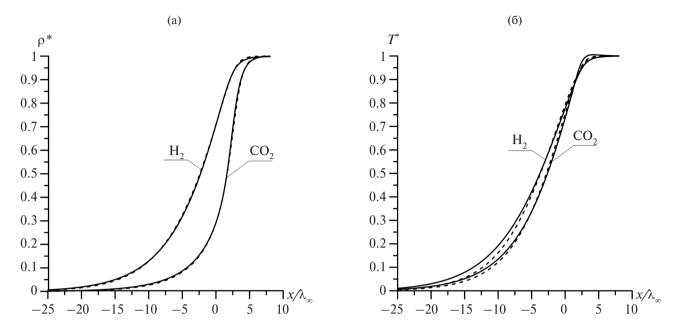


Рис.2.Профили плотности (а) и температуры (б) водорода в смеси H_2 — CO_2 при содержании водорода 50%: сплошная линия — решение модельного кинетического уравнения, штриховая линия — решение системы моментных уравнений.

$$T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1} \,.$$

На всех графиках положение нуля геометрической координаты соответствует центру профиля плотности. На графиках для смесей — центру профиля плотности смеси.

Данные графиков показывают удовлетворительное соответствие результатов, полученных с помощью двух моделей течения газа при расчете для смеси газов. При сравнении решений, полученных для чистого углекислого газа, наблюдается значительное расхождение профилей ударной волны. Это связано с приближенным определением вязких членов в моментных уравнениях.

В расчетах для смеси газов вязкие члены, разумеется, также присутствуют, но оказывают меньшее влияние на решение, чем члены, описывающие межкомпонентные взаимодействия (релаксационные члены). Отметим, что релаксационные члены получены как моменты интеграла столкновений кинетического уравнения без каких-либо дополнительных допущений.

Для определения влияния соотношения парциальных концентраций на распределение параметров газа в профиле ударной волны проведены серийные расчеты для смеси водорода и углекислого газа в интервале парциальных концентраций от 0.01 до 0.99. В серийных расчетах использовалась система моментных уравнений (3). Основное внимание уделено размеру возмущенной области («ширине» ударной волны) и профилю скорости звука.

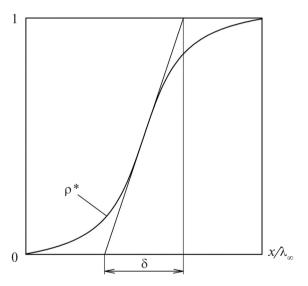
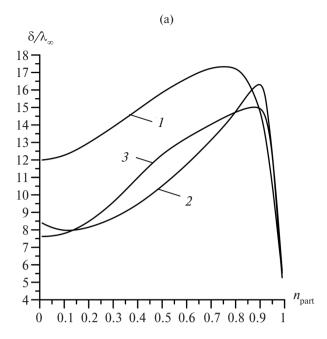


Рис.3. Смеха определения ширины профиля в ударной волне.

Результаты расчетов показали значительное изменение возмущенной области в зависимости от соотношения парциальных концентраций компонентов. Выявлены немонотонные участки на профилях скорости звука. Установлена причина возникновения немонотонности.

Для большей наглядности результатов расчета размервозмущенной области представлен в виде «ширины» ударной волны δ , характеризующей максимальный угол наклона профиля. Этот параметр измеряется в длинах пробега молекулы в невозмущенном потоке. Отметим, что ча-



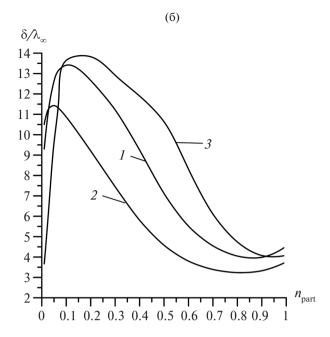


Рис. 4. Ширина профилей скорости (*1*), плотности (*2*) и температуры (*3*) в ударной волне для водорода (а) и углекислого газа (б) в зависимости от их парциальных концентраций в смеси.

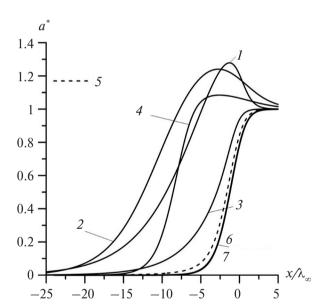


Рис. 5. Профили скорости звука в смеси $\mathrm{H_2-CO_2}$ и в чистых газах: I - 50% $\mathrm{H_2} + 50\%$ $\mathrm{CO_2}, \ 2 - 90\%$ $\mathrm{H_2} + 10\%$ $\mathrm{CO_2}, \ 3 - 10\%$ $\mathrm{H_2} + 90\%$ $\mathrm{CO_2}, \ 4 - 99\%$ $\mathrm{H_2} + 1\%$ $\mathrm{CO_2}, \ 5 - 1\%$ $\mathrm{H_2} + 99\%$ $\mathrm{CO_2}, \ 6 - 100\%$ $\mathrm{H_2}, \ 7 - 100\%$ $\mathrm{CO_2}.$

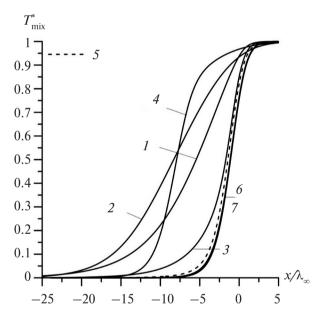


Рис. 6. Профили температуры чистого водорода и его смесей с углекислым газом: I-50% $\rm H_2+50\%$ $\rm CO_2,\ 2-90\%$ $\rm H_2+10\%$ $\rm CO_2,\ 3-10\%$ $\rm H_2+90\%$ $\rm CO_2,\ 4-99\%$ $\rm H_2+1\%$ $\rm CO_2,\ 5-1\%$ $\rm H_2+99\%$ $\rm CO_2,\ 6-100\%$ $\rm H_2,\ 7-100\%$ $\rm CO_2.$

сто в работах для оценки влияния числа Маха на размер ударной волны используется обратная величина. Схема определения δ представлена на рис. 3.

Изменения ширины профилей ударной волны отдельных компонентов смеси в зависимости от их парциальных концентраций n_{part} при-

ведены на рис. 4. Видно, что даже небольшое количество примеси приводит к значительному изменению ширины профиля.

На рис. 5 и 6 показаны профили скорости звука *а* и температуры смеси внутри ударной волны в чистом водороде и его смеси с углекислым газом, где скорость звука определена как

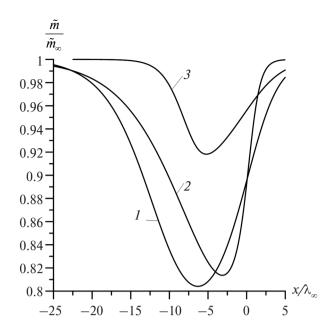


Рис.7. Зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа: 1-90% H $_2+10\%$ CO $_2$, 2-50% H $_2+50\%$ CO $_2$, 3-99% H $_2+1\%$ CO $_2$.

$$a = \sqrt{\gamma_{\text{mix}} \frac{kT_{\text{mix}}}{\tilde{m}}},$$

 $\gamma_{\rm mix}$ — показатель адиабаты, $T_{\rm mix}$ — температура смеси. Профили на рис. 5, 6 приведены к единичному отрезку по аналогии с плотностью и температурой.

Данные графики показывают немонотонное изменение скорости звука в смесях, в отличие от чистых газов. Вместе с тем на профиле температуры смеси отсутствуют немонотонные участки (рис. 6).

Немонотонные участки на профилях скорости звука объясняются немонотонным распределением кажущейся массы молекул \tilde{m} в профиле ударной волны. На рис. 7 показаны зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа.

Обращает на себя внимание сильное влияние малой примеси тяжелого компонента на профили скорости звука (рис. 5) и температуры (рис. 6). Аналогичное влияние наблюдается на профилях других параметров газа, а также в смесях одноатомных газов. Малая примесь легкого компонента в значительно меньшей степени влияет на профили тяжелого компонента.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основемодельного кинетического уравнения для смеси многоатомных газов [20] получена система моментных уравнений для

каждого компонента газа. Показано, что решения задачи о профиле ударной волны с использованием модельного кинетического уравнения и системы моментных уравнений дают близкие результаты.

В результате серии численных тестов установлены следующие закономерности.

Парциальный состав газовой смеси существенно влияет на размер и форму профилей плотности, скорости, температуры и скорости звука (см. рис. 4, 5).

Малая примесь тяжелого компонента значительно изменяет распределение параметров легкого компонента.

Профили скорости звука содержат немонотонные участки, возникновение которых связано с существенно немонотонным изменением кажущейся массы молекул.

При формировании профиля компонента с малой парциальной концентрацией влияние вязких членов (девиатора напряжений и теплового потока) этого компонента мало.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Струминский В.В. Влияние диффузионной скорости на течение газовой смеси // ПММ. 1974. Т. 38, № 2. С. 203.
- 2. *Струминский В.В., Шавалиев М.Ш.* Явления переноса в многоскоростных и многотемпературных смесях газов // ПММ. 1986. Т. 50. № 1. С. 83.
- 3. Киселев С.П., Руев Т.А., Фомин В.М., Шавалиев М.Ш., Трунев А.П. Ударно-волновые процессы в двухкомпонентных и двухфазных средах. Новосибирск: Наука, 1992. 261 с.
- 4. *Bird G.A.* The Structure of Normal Shock Waves in a Binary Gas Mixture // J. Fluid Mech. 1968. V. 31. Pt. 4. P. 657.
- 5. *Куликов С.В., Берзигияров П.К.* Статистическое моделирование поступательной неравновесности газовой смеси во фронте ударной волны на многопроцессорных компьютерах // Выч. мет. Программирование.2002.Т. 3. № 1. С. 144.
- 6. *Куликов С.В., Соловьева М.Е.* Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // ЖВМиМФ. 1988. Т. 28. № 12. С. 1867.
- 7. Raines A.A. Numerical Solution of One-dimensional Problems in Binary Gas Mixture on the Basis of the Boltzmann Equation // AIP Conf. Proc. 2003. V. 663. № 1. C. 67.
- 8. Кузнецов М.М., Матвеев С.В., Молоствин Е.В., Решетникова Ю.Г., Смотрова Л.В. Высокоскоростная поступательная неравновесность смеси газов ваналитической модели ударной волны // Физико-химическая кинетика вгазовой ди-

- намике. 2016. Т. 17. № 1. http://chemphys.edu.ru/issuse/2016-17-1/articles/613/
- 9. *Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Смотрова Л.В., Решетникова Ю.Г.* Омаксимуме эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности вударной волне // Вестник МГОУ. Физика—математика. 2016. № 3. С. 84.
- Бочкарев А.А., РебровА.К., Тимошенко Н.И.Структураударной волны в смеси Ar—He //Изв. СО АН СССР. 1976. Т. 3. Вып. 1. С. 76.
- 11. *Harnett L.M., Muntz E.P.* Experimental Investigation of Normal Shock Wave Velocity Distribution Functions in Mixtures of Argon and Helium // Phys. Fluids. 1972. V. 15. P. 565.
- 12. *Gmurczyk A.S.*, *Walenta Z.A*. Experimental Investigation of Shock-wave Structure in Hydrogen—Xenon Mixture // Arch. Mech. 1981. V. 33. № 4. P. 501.
- Center B.E. Measurements of Shock-wave Structure in Helium—Argon Mixtures // Phys. Fluids. 1967. V. 10. № 8. P. 1777.
- 14. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. О кинетических коэффициентах в граничной задаче скольжения многоатомного газа с вращательными степенями свободы // ТВТ. 2001. Т. 39. № 6. С. 977.
- 15. *Алексеев Б.В., Полев В.В.*Расчет структуры ударной волны с помощью уравнений гидродинамики повышенной точности // ТВТ. 1990. Т. 28. № 3. С. 614.

- Рудяк В.Я.О выводе кинетического уравнения типа Энскога для плотного газа // ТВТ. 1985. Т. 23. № 2. С. 268.
- 17. *Руев А.Г., Федоров А.В., Фомин В.М.* Особенности структуры ударной волны в смесях газов с сильно различающимися массами молекул // ПМТФ. 2002. Т. 43. № 4. С. 47.
- 18. *Никитиченко Ю.А.* Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов // ЖВМиМФ. 2017. Т. 57. № 11. С. 1882.
- 19. *Никимченко Ю.А., Попов С.А., Сергеева Н.И.* Система модельных кинетических уравнений для многокомпонентного газа // ТВТ. 2023. Т. 61. № 5. С. 736.
- 20. *Никимченко Ю.А.*, *Сергеева Н.И*. Модельное кинетическое уравнение для смеси одно- и многоатомных газов // Вестник Гос. ун-та просвещения. Сер. Физика—математика. 2024. № 1. С. 56.
- 21. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Е.* Свойства газов и жилкостей. Л.: Химия, 1982.591 с.
- 22. *Жданов, В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 336 с.
- Никитиченко Ю.А. Модели неравновесных течений. М.: Изд-во МАИ, 2013. 160 с.
- 24. *Никимченко Ю.А.* О целесообразности учета коэффициента объемной вязкости в задачах газовой динамики // Изв. РАН. МЖГ. 2018. №2. С. 128.