

533.7

РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В СМЕСИ ГАЗОВ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

Додулад О. И.^{1,2}, Клосс Ю. Ю.^{1,2}, Черемисин Ф. Г.^{1,3}

1 – Московский физико-технический институт (ГУ), Долгопрудный

2 – Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

3 – Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН, Москва

dodulad@list.ru

Аннотация

Структура ударной волны изучена на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана для смесей газов. Правая часть уравнения – интеграл столкновений – вычисляется консервативным проекционным методом, обеспечивающим выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии. Подробно рассмотрен случай ударной волны в смеси газов, молекулы которых сильно различаются по массе. Структура УВ представлена как на уровне макропараметров газа, так и на уровне функции распределения. Вычисляется частота молекулярных столкновений в УВ с энергией выше заданного порогового значения. Проведено сравнение полученных с использованием потенциала Леннард-Джонса результатов с экспериментальными данными. Для умеренных отношений масс проведено сравнение с существующими расчетными данными. Расчеты выполнены в разработанной авторами программно-моделирующей среде.

COMPUTATIONS OF SHOCK WAVE STRUCTURE IN GAS MIXTURE ON THE BASE OF THE BOLTZMANN EQUATION

The shock wave structure is studied on the base of numerical solving of the Boltzmann kinetic equation for a gas mixture. The right part of the equation – the collision integral – is computed using the conservative projection method which ensures the preservation of mass, momentum and energy. The case of mixture with disparate molecule masses is considered. The shock wave structure is presented at the level of gas macroparameters as well as at the level of molecular distribution function. The frequency of molecular collisions in shock wave with energy higher than some given threshold value is considered. A comparison of numerical results obtained using the Lennard-Jones intermolecular potential with experimental data is presented. For moderate ratios of molecular masses a comparison with other numerical data is given. Computations were carried out on a problem solving environment developed by the authors.

1 Введение

Исследование процессов, происходящих в плоской ударной волне в газе, является классической задачей газовой динамики. В рамках теории сплошной среды изучению структуры ударных волн с учетом ионизации, излучения, возбуждения внутренних степеней свободы молекул газа и других неупругих процессов посвящено большое количество работ, например [1]. В них под структурой ударной волны понимаются процессы, происходящие непосредственно за скачком уплотнения, описываемым соотношениями Рэнкина-Гюгонио для идеального газа. Для описания процессов внутри самого скачка уплотнения на масштабах порядка длины свободного пробега молекул необходим кинетический подход, т. е. описание газа на уровне функции распределения молекул по скоростям. В этой области происходит трансформация функции распределения от равновесной функции с макропара-

метрами до УВ к равновесной функции с параметрами за УВ, и основную роль играют упругие столкновения, но здесь же могут инициироваться неупругие процессы, вызванные возрастанием энергии столкновений молекул.

В ряде работ указана возможность протекания в области фронта УВ неупругих процессов со значениями пороговой энергии, превышающими характерную тепловую энергию равновесного состояния за фронтом. Например, в описываемом в [2] эксперименте были зарегистрированы пики неравновесного излучения во фронте УВ в смеси легкого газа с небольшим содержанием (около 0.5%) молекул йода. В работе [3] проведены эксперименты в гелии с малой примесью (0.01%) гексакарбонила молибдена и обнаружено появление узкой зоны проводимости во фронте ударной волны. В [4] исследована поступательная неравновесность в смеси аргона и гелия. Получено, что в смеси аргона с гелием во фронте УВ имеет место на порядок большее число возбужденных атомов аргона, чем в чистом аргоне.

Численный анализ увеличения высокоэнергетических столкновений в работе [2] проделан на основе модифицированного метода Тамма — Мотт-Смита. Данный метод также был применен к исследованию ударной волны в трехкомпонентной смеси [5]. Расчеты с использованием метода статистического моделирования с весовыми множителями представлены в [6-8]. В них в частности получено, что для однокомпонентного газа увеличение частоты высокоэнергетических столкновений незначительно. Основное внимание уделено рассмотрению смесей газов с большим отношением масс и малым содержанием тяжелой компоненты, где обнаруживается значительное превышение частоты высокоэнергетических столкновений. Даны функции распределения по относительным скоростям для пар частиц.

В настоящей работе осуществляется расчет структуры ударной волны на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана. Это позволяет получать результаты, лишенные влияния статистического шума. Расчет интеграла столкновений осуществляется консервативным проекционным методом дискретных ординат [9]. Для расчета смесей с большим отношением масс использована многоточечная модификация проекционного метода [10]. Расчеты выполнены в разработанной авторами программно-моделирующей среде.

2 Постановка задачи о структуре ударной волны

Рассмотрим плоскую ударную волну, распространяющуюся в смеси газов. Макропараметры газа до и после ударной волны связаны соотношениями Рэнкина-Гюгонио

$$\frac{n_2^i}{n_1^i} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)M^2}{(\gamma - 1)M^2 + 2}, \quad \frac{T_2}{T_1} = \frac{(2\gamma M^2 - (\gamma - 1))((\gamma - 1)M^2 + 2)}{(\gamma + 1)^2 M^2}.$$

Здесь нижним индексом 1 обозначены параметры до ударной волны, индексом 2 — после УВ; n_1^i , n_2^i — концентрации молекул i -ой компоненты смеси, u_1 , u_2 — скорости и T_1 , T_2 — температуры смеси газов; $\gamma = 5/3$; $M = u_1/c_1$ — число Маха, $c_1 = \sqrt{\gamma p_1/\rho_1} = \sqrt{\gamma k T_1 \sum_i n^i / \sum_i m^i n^i}$ — скорость звука в смеси в области до ударной волны, m^i — масса молекул i -го сорта.

Свяжем систему отсчета с фронтом ударной волны. Ось x направим вдоль потока газа перпендикулярно фронту ударной волны. Выделим область $(-L_1, L_2)$, в которой происходит трансформация функции распределения от одной равновесной максвелловской функции к другой. Для функции распределения зададим граничные условия в точках $x_1 = -L_1$, $x_2 = L_2$:

$$f_i(t, x_{\#}, \xi) = \frac{1}{Z_{\#}} \exp\left(-\frac{m_i((\xi_x - u_{\#})^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{2kT_{\#}}\right),$$

где символом # для краткости обозначены либо 1, либо 2; f_i – функция распределения молекул i -го сорта.

Структуру ударной волны получим как результат эволюции разрыва в точке $x = 0$. Таким образом, задача состоит в нахождении $f_i(t, x, \xi)$ путем решения для $x \in (-L_1, L_2)$ до времени t установления структуры ударной волны кинетического уравнения Больцмана для смеси газов

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_j \int (f_i' f_j' - f_i f_j) g b db d\varepsilon d^3 \xi_1$$

В задаче удобно перейти к безразмерным переменным

$$x^* = x/\lambda, \quad \xi^* = \xi/v_0, \quad t^* = t/\tau, \quad f_i^* = f_i v_0^3/n_0, \quad b^* = b/b_0, \quad m_i^* = m_i/m_0.$$

Здесь $\lambda = 1/\sqrt{2\pi} b_0^2 n_0$ – характерная средняя длина свободного пробега, $v_0 = \sqrt{kT_0/m_0}$ – характерная скорость молекул, n_0, T_0 – характерные концентрация молекул и температура. Символ * далее будет опущен.

Задача обладает цилиндрической симметрией в пространстве скоростей, поэтому введём функцию $\tilde{f}_i(t, x, \xi_x, \xi_r) = 2\pi \xi_r f_i(t, x, \xi)$, где $\xi_r = \sqrt{\xi_y^2 + \xi_z^2}$. Также, удобно перейти от функции распределения по скоростям к функции распределения по импульсу $\hat{f}_i(t, x, p) = m_i^{3/2} f_i(t, x, \xi)$.

После данных преобразований уравнение Больцмана принимает вид:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{p}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_j \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (A f_i' f_j' - f_i f_j) g b db d\varepsilon d^3 p_1, \quad A = \frac{p_r p_{r1}}{p_r' p_{r1}'}, \quad g = \left| \frac{p}{m_i} - \frac{p_1}{m_j} \right|. \quad (1)$$

Макроскопические величины, характеризующие состояние газа, определяются как интегралы от функции распределения, умноженной на соответствующие весовые функции (переменные t и x опущены):

$$\begin{aligned} n^i &= \int f_i(p_x, p_r) dp_x dp_r, \quad u^i = \frac{1}{m_i n^i} \int p_x f_i(p_x, p_r) dp_x dp_r, \\ T^i &= \frac{1}{3m_i n^i} \int ((p_x - m_i u)^2 + p_r^2) f_i(p_x, p_r) dp_x dp_r, \\ T_{xx}^i &= \frac{1}{m_i n^i} \int (p_x - m_i u)^2 f_i(p_x, p_r) dp_x dp_r. \end{aligned}$$

3 Дискретная аппроксимация уравнения Больцмана для смесей газов

При численном решении уравнения (1) в пространстве (p_x, p_r) для каждой компоненты смеси $i = 1..N$ строится сетка $S_i = \{(p_x^{i,\gamma}, p_r^{i,\gamma})\}$, $\gamma = 1..N_i$. Сетка состоит из равноотстоящих узлов, размещенных в области Ω_i такой, что функция распределения вне области пренебрежимо мала. Чаще всего области Ω_i являются шарами. На построенных сетках функции распределения $f_i(t, x, p_x, p_r)$ представляются в базисе δ -функций в виде:

$$f_i(t, x, p_x, p_r) = \frac{V_i}{N_i} \sum_{\gamma=1}^{N_i} f_i(t, x, p_x^{i,\gamma}, p_r^{i,\gamma}) \delta(p_x - p_x^{i,\gamma}) \delta(p_r - p_r^{i,\gamma}).$$

Уравнение (1) сводится к системе уравнений, которая решается методом расщепления. Расщепление имеет вид: $\mathcal{T}_{\Delta t/2} \mathcal{C}_{\Delta t} \mathcal{T}_{\Delta t/2}$, где $\mathcal{T}_{\Delta t/2}$ – оператор решения уравнения переноса

$$\frac{\partial f_i^\gamma}{\partial t} + \frac{p}{m_i} \frac{\partial f_i^\gamma}{\partial x} = 0,$$

оператор $\mathcal{C}_{\Delta t}$ дает решение уравнения однородной релаксации

$$\frac{\partial f_i^\gamma}{\partial t} = \sum_j \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (Af_i' f_j - f_i f_j) g b db d\varepsilon d^3 p_1.$$

При аппроксимации уравнения переноса применяется явная консервативная TVD-схема второго порядка точности. Шаг схемы расщепления Δt определяется условием устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви.

Построение консервативной аппроксимации для правой части уравнения Больцмана – интеграла столкновений – осуществляется следующим образом.

Используется свойство симметрии столкновений, и оператор столкновений приводится к виду

$$I^{i,\gamma} = \sum_j \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \int \phi(p_x^{i,\gamma}, p_r^{i,\gamma}) (Af_i' f_j' - f_i f_j) g b db d\varepsilon d^3 p d^3 p_1,$$

где $\phi(p_x^{i,\gamma}, p_r^{i,\gamma}) = \delta(p_x - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r - p_r^{i,\gamma}) + \delta(p_{x1} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_{r1} - p_r^{i,\gamma}) - \delta(p_x' - p_{x1}')\delta(p_r' - p_{r1}') - \delta(p_x^{i,\gamma} - p_x^{i,\gamma'})\delta(p_r^{i,\gamma} - p_r^{i,\gamma'})$. Штрихом обозначены импульсы после столкновения.

Для вычисления интеграла применяется кубатурная интегрирующая сетка Коробова [11] $(p_x^{\alpha_v}, p_r^{\alpha_v})$, $(p_x^{\beta_v}, p_r^{\beta_v})$, φ_v^α , φ_v^β , b_v , ε_v , состоящая из N_0 узлов, причем $(p_x^{\alpha_v}, p_r^{\alpha_v})$ и $(p_x^{\beta_v}, p_r^{\beta_v})$ принадлежат сетке S_i . Выражение для вычисления интеграла столкновений приобретает вид

$$I^{i,\gamma} = \sum_j \sum_{v=1}^{N_i} B_{ij} \left(\delta(p_x^{\alpha_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\alpha_v} - p_r^{i,\gamma}) + \delta(p_x^{\beta_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\beta_v} - p_r^{i,\gamma}) - \delta(p_x^{\alpha'_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\alpha'_v} - p_r^{i,\gamma}) - \delta(p_x^{\beta'_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\beta'_v} - p_r^{i,\gamma}) \right) \times (A_v f^{\beta'_v} f^{\alpha'_v} - f^{\beta_v} f^{\alpha_v}) g_v,$$

Так как $(p_x^{\alpha_v}, p_r^{\alpha_v})$ и $(p_x^{\beta_v}, p_r^{\beta_v})$ лежат на сетке S_i , то f^{α_v} и f^{β_v} равны соответствующим значениям сеточной функции распределения, а $\delta(p_x^{\alpha_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\alpha_v} - p_r^{i,\gamma}) = \delta_{i,\gamma}^{\alpha_v}$ и $\delta(p_x^{\beta_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\beta_v} - p_r^{i,\gamma}) = \delta_{i,\gamma}^{\beta_v}$ есть символы Кронекера. Импульсы после столкновения $(p_x^{\alpha'_v}, p_r^{\alpha'_v})$, $(p_x^{\beta'_v}, p_r^{\beta'_v})$ не лежат на сетке, поэтому значения $f^{\alpha'_v}$, $f^{\beta'_v}$, $\delta(p_x^{\alpha'_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\alpha'_v} - p_r^{i,\gamma})$ и $\delta(p_x^{\beta'_v} - p_x^{i,\gamma})\delta(p_r^{\beta'_v} - p_r^{i,\gamma})$ определяются с помощью процедуры проецирования.

В случае, когда импульсные сетки S_i имеют равномерный шаг Δp одинаковый для всех компонент смеси газов, выполнения условий консервативности можно добиться двухточечным проецированием. В этом случае схема проецирования, за исключением оперирования в импульсном пространстве вместо скоростного, не отличается от схемы, применяемой для однокомпонентного газа. Процедура подробно описана в работе [9]. Каждый импульс после столкновения аппроксимируется двумя узлами на сетке, δ -функции заменяются на комбинацию проекторов в две пары ближайших к $(p_x^{\alpha'_v}, p_r^{\alpha'_v})$ и $(p_x^{\beta'_v}, p_r^{\beta'_v})$ узлов (см. рис. 1а), а значения функций распределения $f^{\alpha'_v}$, $f^{\beta'_v}$ определяются интерполяцией по зна-

чениям функции распределения в тех же узлах. Для обеспечения консервативности по энергии вводится коэффициент вкладов r_ν . Консервативность по импульсу выполняется автоматически благодаря равномерному одинаковому для всех компонент смеси шагу Δp .

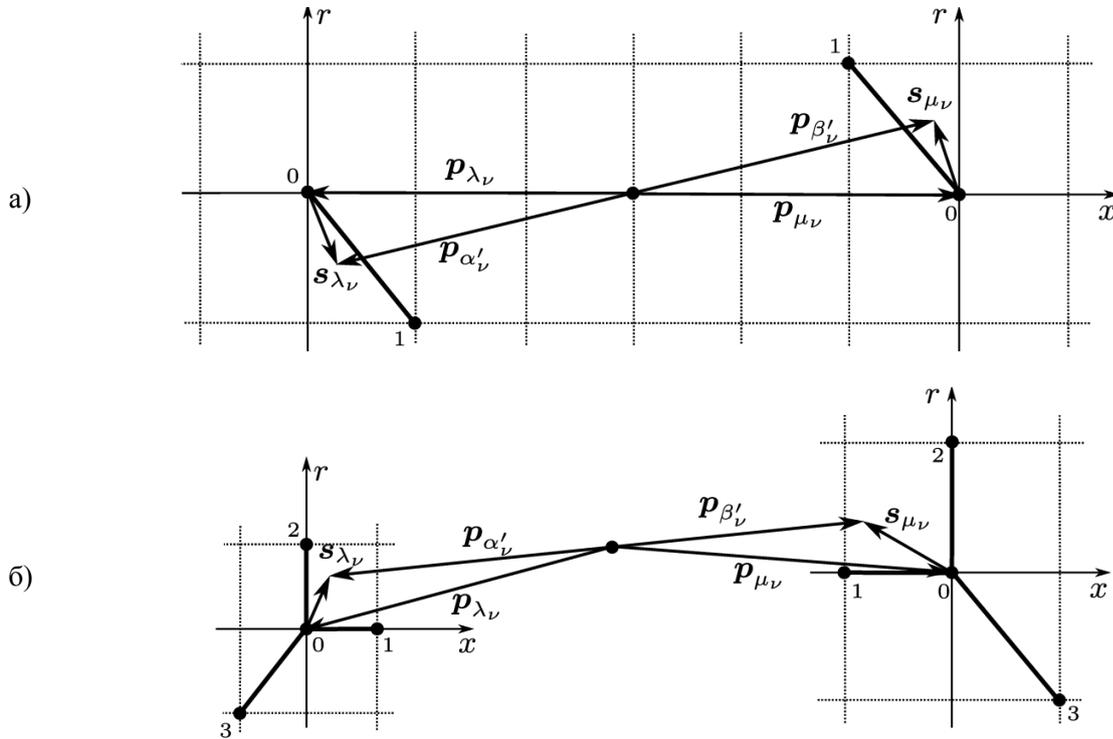


Рис. 1. Шаблоны проецирования: а) двухточечное, б) четырехточечное.

Однако для смесей со значительным отношением масс требование одинакового шага для всех компонент смеси приводит к значительному вынужденному увеличению сетки для тяжелой компоненты газа. Нетрудно показать, что для трёхмерного пространства импульсов число узлов растёт согласно зависимости $N_i \sim (m_i/m_{\min})^{3/2}$, а для рассматриваемого здесь случая цилиндрической симметрии как $N_i \sim (m_i/m_{\min})$.

Поэтому рассмотрим схему проецирования для случая, когда импульсные сетки обладают равномерным, но различным для каждой компоненты, шагом $(\Delta p_{i,x}, \Delta p_{i,r})$. Построим схему проецирования для импульса $(p_x^{\alpha'\nu}, p_r^{\alpha'\nu})$, для импульса $(p_x^{\beta'\nu}, p_r^{\beta'\nu})$ рассуждения аналогичны.

Для обеспечения сохранения массы, продольной и радиальной компоненты импульса и энергии минимальное количество узлов проецирования равно четырем. Используемый шаблон $\Lambda = \{0,1,2,3\}$ проецирования показан на рис. 1б, где $s_*^{\lambda\nu} = (p_*^{\lambda\nu} - p_*^{\alpha'\nu})/\Delta p$, $s_*^{\mu\nu} = (p_*^{\mu\nu} - p_*^{\beta'\nu})/\Delta p$, а $(p_x^{\lambda\nu}, p_r^{\lambda\nu})$, $(p_x^{\mu\nu}, p_r^{\mu\nu})$ – ближайшие к $(p_x^{\alpha'\nu}, p_r^{\alpha'\nu})$, $(p_x^{\beta'\nu}, p_r^{\beta'\nu})$ импульсы на сетке. Стоит отметить, что все четыре узла проецирования не могут быть выбраны из вершин в квадрате, окружающем импульс $(p_x^{\alpha'\nu}, p_r^{\alpha'\nu})$, так как в таком случае имеет место несовместная система уравнений для коэффициентов проецирования. Для шаблона на рис. 1б коэффициенты проецирования, определяющие представление δ -функций в виде

$$\delta(p_x^{\alpha'\nu} - p_x^{i,\gamma}) \delta(p_r^{\alpha'\nu} - p_r^{i,\gamma}) = \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda,a} \delta_{i,\gamma}^{\lambda\nu + s_a},$$

(s_a – вектор смещения a -ого узла шаблона) равны

$$r_{\lambda,0} = 1 - \frac{1}{4}p - \frac{3}{4}q, \quad r_{\lambda,4} = -\frac{1}{4}(p - q), \quad r_{\lambda,1} = |s_{\lambda x}| + r_{\lambda,4}, \quad r_{\lambda,2} = |s_{\lambda r}| + r_{\lambda,4},$$

$$p = |s_{\lambda x}| + |s_{\lambda r}|, \quad q = s_{\lambda x}^2 + s_{\lambda r}^2.$$

Непосредственной подстановкой коэффициентов вкладов в приведенные ниже выражения можно убедиться в том, что приведенная схема обладает свойством консервативности

$$\sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda,a} = 1, \quad \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda,a} p_x^{\lambda_\nu + s_a} = p_x^{\alpha'_\nu}, \quad \sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda,a} p_r^{\lambda_\nu + s_a} = p_r^{\alpha'_\nu},$$

$$\sum_{a \in \Lambda} r_{\lambda,a} \left((p_x^{\lambda_\nu + s_a})^2 + (p_r^{\lambda_\nu + s_a})^2 \right) = (p_r^{\alpha'_\nu})^2.$$

Значения функций распределения $f^{\alpha'_\nu}$, $f^{\beta'_\nu}$ находятся путем интерполяции функции распределения. Для обеспечения равенства нулю интеграла столкновений от максвелловской функции распределения применяется интерполяция следующего вида:

$$f^{\alpha'_\nu} = \prod_{a \in \Lambda} (f^{\lambda_\nu + s_a})^{r_{\lambda,a}}.$$

Более подробное описание многоточечной схемы проецирование дано в работе [10]. В ней также даны расширенные шаблоны, дополнительно сохраняющие при проецировании тензор потока импульса и вектор потока энергии. Все расчеты, представленные в данной работе, выполнены с использованием описанной выше 4-х точечной схемы.

4 Точность вычислений

Для определения дискретизации, необходимой для получения достаточно точных результатов, была проведена серия расчетов при варьировании шага пространственной сетки h_x и шага импульсной сетки Δp^α . Был рассмотрен случай ударной волны с числом Маха $M = 3$ в бинарной смеси газов твердых сфер с отношением масс $m^\alpha/m^\beta = 1/2$ при равной концентрации молекул смеси $n^\alpha = n^\beta$. Результаты расчетов показаны на рис. 2. На рис. 2а представлена зависимость обратной ширины ударной волны от пространственного шага h_x . Обратная ширина ударной волны определяется формулой

$$\delta = \frac{\lambda_1}{L} = \frac{\lambda_1}{n_2 - n_1} \left(\frac{dn}{dx} \right)_{\max},$$

где $\lambda_1 = 1/\sqrt{2\pi} b_0^2 (n_1^\alpha + n_1^\beta)$ – характерная длина свободного пробега в невозмущенном (до ударной волны) газе, $n_1 = n_1^\alpha + n_1^\beta$, $n_2 = n_2^\alpha + n_2^\beta$. Положения рассчитанных значений аппроксимируется квадратичной зависимостью (пунктирная линия). Это находится в согласии с порядком точности $O(h_x^2)$ используемой численной схемы для уравнения адвекции. На рис. 2б представлена зависимость величины δ от шага импульсной сетки легкой компоненты смеси Δp^α . Шаг Δp^β при этом в $\Delta p^\beta/\Delta p^\alpha = \sqrt{m^\beta/m^\alpha} = \sqrt{2}$ раз больше, тем самым достигается равное число импульсных узлов в сетках для легкой и тяжелой компоненты. Здесь также имеет место квадратичная зависимость ошибки от шага дискретизации. При расчетах ширины ударной волны применялась 5-ти точечная центральная схема численного дифференцирования с шагом $h_{\text{diff}} = 0.2\lambda_1$.

Видно, что по пространственному шагу ошибка менее 1% достигается при $h_x = 0.2$, по импульсному шагу – при $\Delta p^\alpha = 0.4$. Это соответствует тому, что на радиусе импульсной сетки умещается 20 узлов, а общее число узлов в сетках равно $N^\alpha = N^\beta = 1264$. Данные параметры дискретизации были выбраны за основу при проведении дальнейших расчетов.

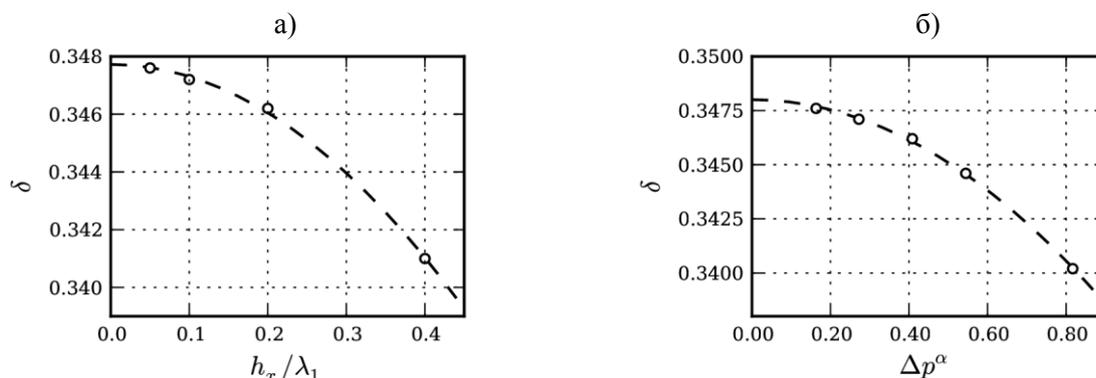


Рис. 2. Значение обратной ширины ударной волны δ для $M = 3$, $m^\alpha/m^\beta = 1/2$ в зависимости от: а) пространственного шага h_x , б) шага импульсной сетки Δp^α .

5 Сравнение с расчетными данными

В данном разделе представлены сравнения наших результатов с расчетными данными, полученными на основе прямого решения уравнения Больцмана в других работах. Все расчеты проведены для газа твердых сфер.

На рис. 3 показано сравнение с данными из работы [12], где расчет был проведен методом, который является расширением метода Ohwada [13] на смеси газов. Метод основан на разложении радиальной части функции распределения по полиномам Лагерра и применим для задач, обладающих цилиндрической симметрией в пространстве скоростей. На графиках значения макропараметров нормированы, данные [12] показаны точками, сплошной линией показаны результаты, полученные проекционным методом. На рис. 3б, где расчет проведен для меньшего содержания тяжелого газа ($n^\alpha/n^\beta = 9/1$), имеет место немонотонность температуры T^β .

На рис. 4, 5 показано сравнение с данными [14] и [15] соответственно, где расчеты были выполнены проекционным методом. Отличием является то, что в этих работах применялась двухточечная схема, что приводило к вынужденному увеличению числа импульсных узлов. Это особенно существенно для расчета 4а, где молекулы бинарной смеси газов обладают большим отношением масс $m^\alpha/m^\beta = 1/10$. В настоящей работе применяется многоточечный метод лишенный данного недостатка.

Результаты сравнения показывают полное соответствие с данными работы [12] и хорошее согласие с работой [14]. Наблюдается небольшое отличие графиков температур для сильной ударной волны $M = 6$, показанное на рис. 4б. С данными работы [15] согласие удовлетворительное. Отсутствие данных о дискретизации затрудняет выявление причин некоторого отличия результатов.

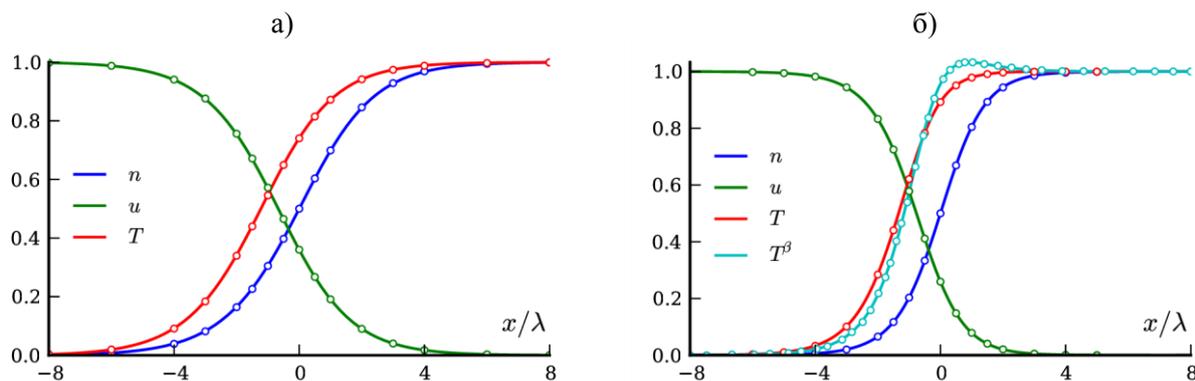


Рис. 3. Сравнение с расчетными данными [12]: а) $M = 2$, $m^\alpha/m^\beta = 1/4$, $n^\alpha = n^\beta$, б) $M = 3$, $m^\alpha/m^\beta = 1/2$, $n^\alpha/n^\beta = 9/1$.

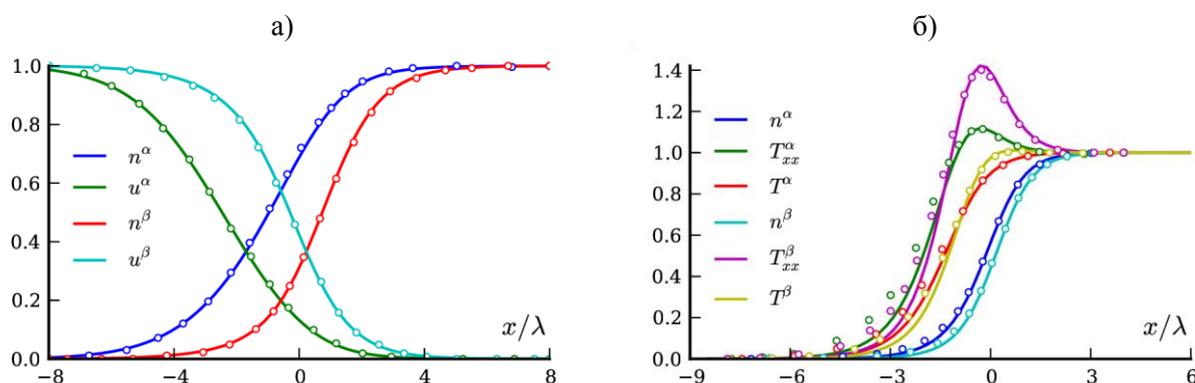


Рис. 4. Сравнение с расчетными данными [14] $n^\alpha = n^\beta$: а) $M = 3$, $m^\alpha/m^\beta = 1/10$, б) $M = 6$, $m^\alpha/m^\beta = 1/2$.

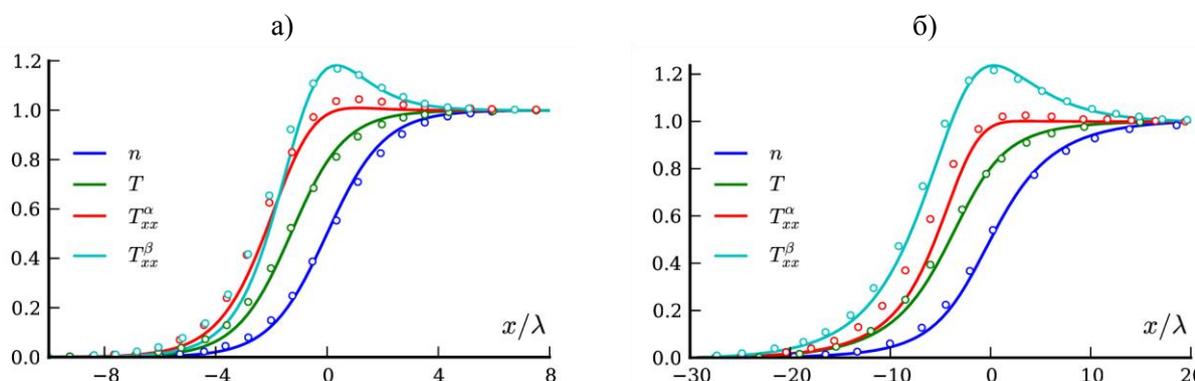


Рис. 5. Сравнение с расчетными данными [15] $n^\alpha = n^\beta$: а) $M = 2$, $m^\alpha/m^\beta = 1/2$, $d^\alpha = d^\beta$ б) $M = 2$, $m^\alpha = m^\beta$, $d^\alpha/d^\beta = 1/10$.

6 Сравнение с экспериментальными данными

На рис. 6 приводится сравнение расчетных значений макропараметров с экспериментальными данными из работы [16]. Рассматривается ударная волна в смеси аргона и гелия. В отличие от примеров, приведенных выше, в которых использовался потенциал твердых сфер, здесь расчет проведен для реалистичного потенциала – потенциала Леннард-Джонса. Детали метода расчета импульсов после столкновения в случае потенциалов отличных от потенциала твердых сфер можно найти в работе [17]. При моделировании использовались следующие параметры потенциала Леннард-Джонса: $\varepsilon^{\text{He}} = 10.2 \text{ K}$, $\varepsilon^{\text{Ar}} = 124 \text{ K}$, $\sigma^{\text{He}} =$

2.576 Å, $\sigma^{\text{Ar}} = 3.416 \text{ Å}$ [18]. Параметры взаимодействия различных молекул были получены исходя из комбинационных соотношений: $\varepsilon^{\text{He,Ar}} = \sqrt{\varepsilon^{\text{He}}\varepsilon^{\text{Ar}}}$, $\sigma^{\text{He,Ar}} = (\sigma^{\text{He}} + \sigma^{\text{Ar}})/2$.

Показаны сравнения распределений скорости газа, продольной и поперечной температур. В эксперименте скорость газа измерялась по доплеровскому сдвигу спектральных линий. Температура определялась по доплеровскому уширению путем подбора функций распределения вида $f(\Delta\nu) = \exp(-0.5m(\Delta\nu)^2/kT)(1 - K^2(\Delta\nu))$ и последующим численным интегрированием подобранной функции. Продольная координата x обезразмеривается на величину $L = \eta_1/\rho_1 u_1$, где η_1 – вязкость смеси при температуре T_1 ; ρ_1 , u_1 , T_1 – плотность, скорость, температура газовой смеси перед фронтом ударной волны.

Сравнение показывает хорошее согласие расчетных данных с экспериментальными по скорости газа. Для распределений температуры различие больше, что возможно связано с предположением о виде функции распределения в неравновесной области.

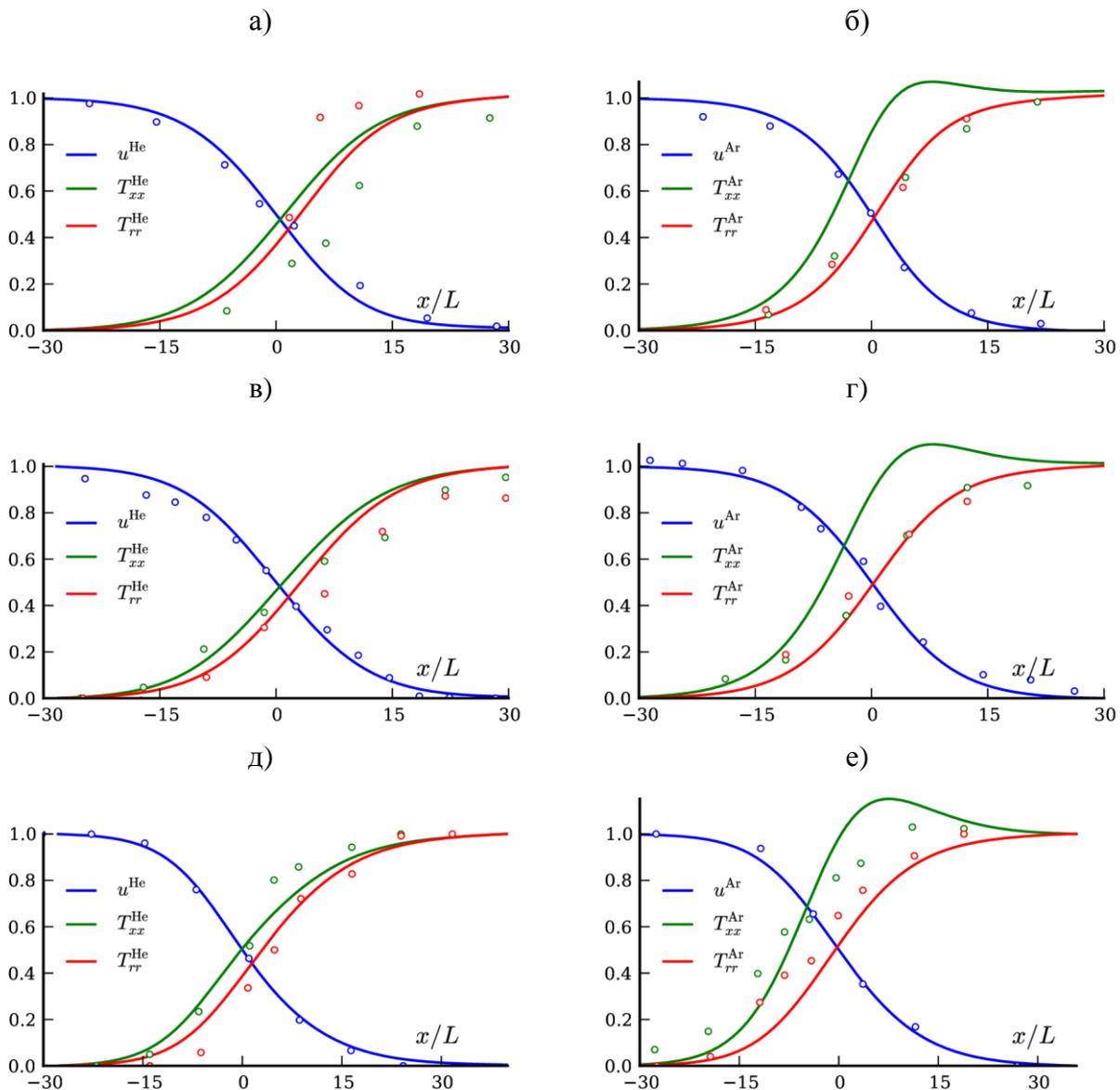


Рис. 6: Сравнение расчетных скорости u , продольной T_{xx} и поперечной T_{rr} температур с экспериментальными данными в смеси с молярным содержанием а), б) 44% аргона и 56% гелия, $M = 1.58$, в), г) 24.7% аргона и 75.3% гелия, $M = 1.63$, д), е) 11.5% аргона и 88.5% гелия, $M = 1.65$.

Приведем сравнение с экспериментальными данными [19]. В работе [19] изучена структура ударной волны в смеси газов гелия и ксенона, причем содержание ксенона в смеси значительно меньше содержания гелия. Численное моделирование эксперимента проведено в работах [20-22]. В работах [20, 21] применяется модель твердых сфер, в [22] улучшенная модель VHS. Нами используется потенциал Леннарда-Джонса, параметры которого для ксенона равны: $\varepsilon^{Xe} = 229$ К, $\sigma^{Xe} = 4.055$ А [18]. Параметры взаимодействия различных молекул были получены исходя из комбинационных соотношений: $\varepsilon^{He,Xe} = \sqrt{\varepsilon^{Xe}\varepsilon^{He}}$, $\sigma^{He,Xe} = (\sigma^{He} + \sigma^{Xe})/2$.

На рис. 7а показано сравнение для случая ударной волны $M = 3.89$ с молярными концентрациями газов 97% гелия и 3% ксенона. На рис. 7б показано сравнение для случая $M = 3.61$ в газе, состоящем на 98.5% из гелия и 1.5% из ксенона. Рассчитанные данные представлены сплошной линией, кругами показаны экспериментальные данные. Дополнительно треугольниками отображены данные из работы [22], полученные методом статистического моделирования. Видно хорошее совпадение с экспериментом графиков плотности ксенона на рис. 7а, на рис. 7б совпадение графиков плотности ксенона несколько хуже. Различие графиков плотности для гелия состоит в том, что на экспериментальных графиках имеется максимум. Мы предполагаем, что это связано с погрешностью экспериментальных данных. С данными статистического моделирования [22] наблюдается хорошее согласие как по плотности гелия, так и по плотности ксенона. Приведенные результаты отличаются от результатов работ [20, 21] по расстоянию между точками, соответствующими уровню $n^{He,Xe} = 0.5$, приблизительно в два раза. Причиной различия может быть то, что в данных работах моделирование проведено с использованием потенциала твердых сфер, и отношение диаметров гелия к ксенону берется равным 0.443 согласно [23].

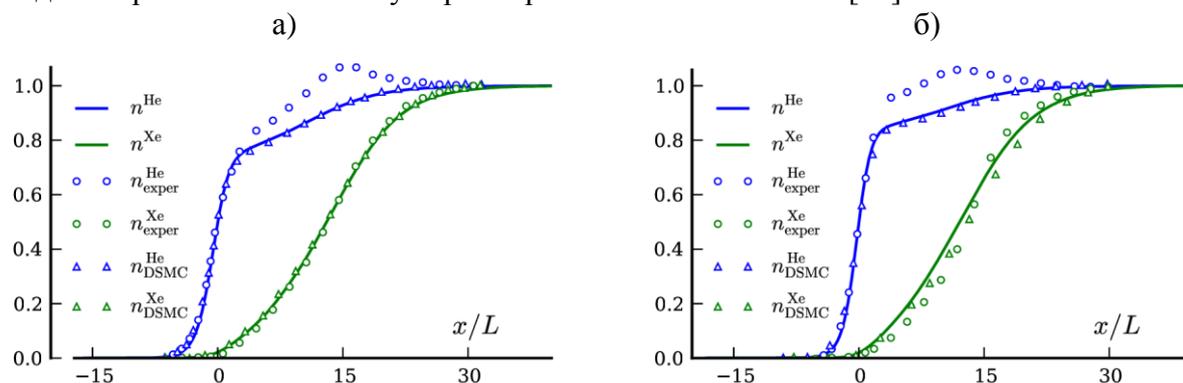


Рис. 7. Сравнение с экспериментальными данными: а) $M = 3.89$, 97% He + 3% Xe; б) $M = 3.61$, 98.5% He + 1.5% Xe.

7 Исследование высокоэнергетических столкновений в ударной волне

В данном разделе исследуется вопрос о высокоэнергетических столкновениях во фронте ударной волны. Частота высокоэнергетических столкновений рассчитывается по следующей формуле:

$$Q_R^{ij}(x) = \int f_i f_j g H(g - g_R) b db d\varepsilon d^3p d^3p_1, \quad g = \left| \frac{p}{m_i} - \frac{p_1}{m_j} \right|.$$

Здесь $H(g - g_R)$ – функция Хевисайда $H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$

Интеграл $Q_R^{ij}(x)$ является функционалом, определяющим частоту столкновений в единице объема молекул i -го сорта с молекулами j -го сорта, энергия которых превышает заданный величиной g_R порог.

На рис. 8 представлены результаты для смеси с отношением масс $m^\alpha/m^\beta = 1/33$ и отношением концентраций $n^\alpha/n^\beta = 500/1$. На графике макропараметров для тяжелой компоненты наблюдается существенное превышение температуры во фронте ударной волны. На нижнем графике показаны величины $Q_R^{ij}(x)$, приведенные к такому же виду, как и макропараметры $Q_R^{ij*}(x) = (Q_R^{ij}(x) - Q_R^{ij}(-\infty))/(Q_R^{ij}(+\infty) - Q_R^{ij}(-\infty))$. Видно, что функционал для легкого газа $Q_R^{\alpha\alpha}(x)$ является монотонным. $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ имеют максимум — при $g_R = 5\sqrt{(m_i + m_j)kT_2/m_i m_j}$, значения $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ во фронте превышают их значения за УВ в 18 и 35 раз, соответственно. На рис. 9 дано сравнение $Q_R^{\alpha\alpha}(x)$, $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ с функционалами $Q_{R\text{Maxwell}}^{\alpha\alpha}(x)$, $Q_{R\text{Maxwell}}^{\alpha\beta}(x)$, $Q_{R\text{Maxwell}}^{\beta\beta}(x)$, вычисленными по максвелловским функциям с макропараметрами $n^\alpha(x)$, $u^\alpha(x)$, $T_{xx}^\alpha(x)$, $T_{rr}^\alpha(x)$ и $n^\beta(x)$, $u^\beta(x)$, $T_{xx}^\beta(x)$, $T_{rr}^\beta(x)$. Для $Q_R^{\alpha\beta}(x)$, $Q_R^{\beta\beta}(x)$ положение максимумов совпадает. Величины максимума для $Q_R^{\beta\beta}(x)$ также приблизительно совпадают. Таким образом, наличие максимума функционала для тяжелой компоненты в большей степени связано именно с величиной продольной температуры.

На рис. 10 показаны продольные сечения функции распределения в различных точках фронта ударной волны. На графиках функции распределения для легкого газа особенности не наблюдаются. При $x > 2$ функция распределения совпадает с максвелловской за ударной волной. Для тяжелого газа распределение представляет большой интерес. Максвелловские функции распределения до УВ и за УВ сильно сдвинуты одна относительно другой в пространстве скоростей. Скорости газа до и за УВ относительно фронта равны $u_1 = 6.455$ и $u_2 = 1.807$, в то время как параметры ширины максвеллианов для тяжелого газа $\Delta u_1 \approx 4\sqrt{T_1/m^\beta} = 0.68$ и $\Delta u_2 \approx 4\sqrt{T_2/m^\beta} = 4\sqrt{8.68/31.02} = 2.10$. Таким образом, в данном случае характерная скорость столкновений молекул в ударной волне существенно больше тепловой скорости. В области неравновесности максвелловские функции трансформируются, причем эта трансформация происходит без возникновения «бимодальных» распределений. Это говорит о том, что обоснованность анализа данной задачи на основе метода Тамма — Мотт-Смита сомнительна. Максимумы T^β , T_{xx}^β и $Q_R^{\beta\beta}$ находятся приблизительно в точке $x = 9$. Функция распределения в данной точке наиболее размыта.

При умеренном отношении концентраций превышение числа пороговых столкновений не наблюдается. На рис. 11, 12 показан случай равных концентраций $n^\alpha = n^\beta$. Видно, что здесь функции распределения для тяжелой компоненты до и после УВ не сдвинуты так, как в предыдущем случае и качественно не отличаются от функций распределения легкой компоненты. Макропараметры ударной волны и функционалы для промежуточного случая $n^\alpha/n^\beta = 50/1$ показаны на рис. 13. Наблюдается превышение $Q_R^{\beta\beta}$ в 2 раза по отношению к значению за УВ.

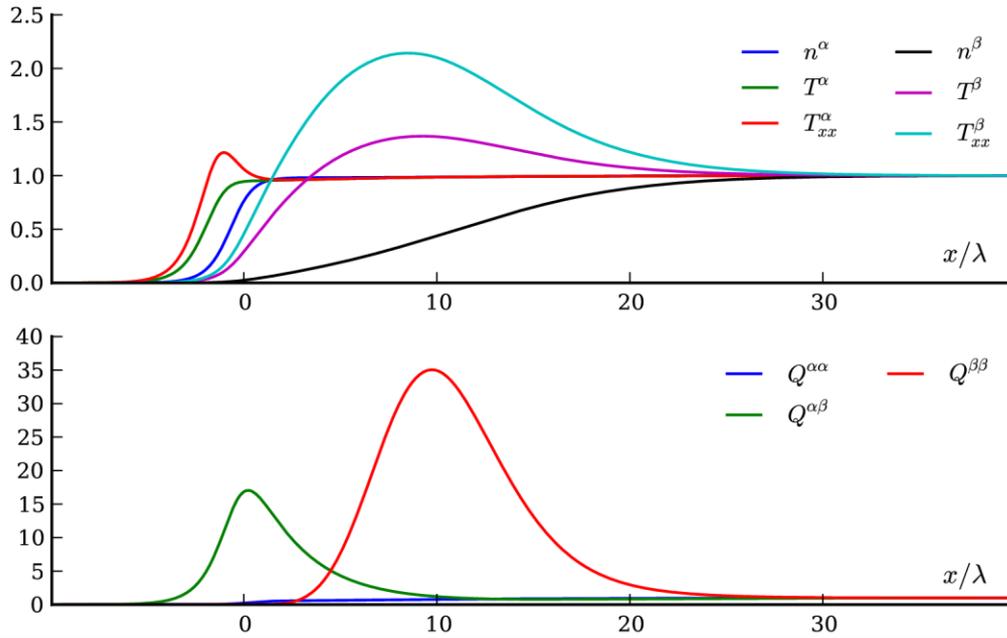


Рис. 8. $M = 5$, $m^\alpha/m^\beta = 1/33$, $n^\alpha/n^\beta = 500/1$.

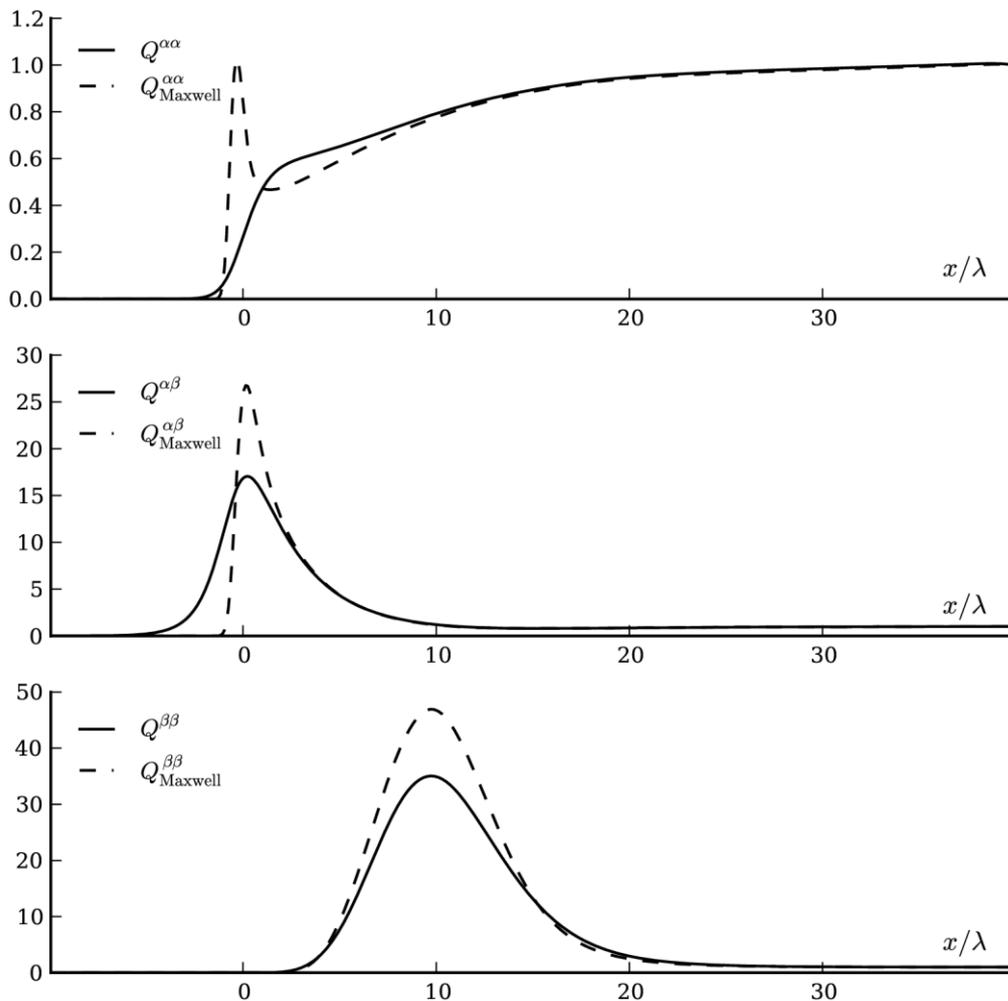


Рис. 9. Сравнение функционалов $Q^{ij}_R(x)$ с функционалами, вычисленными по максвелловским функциям.

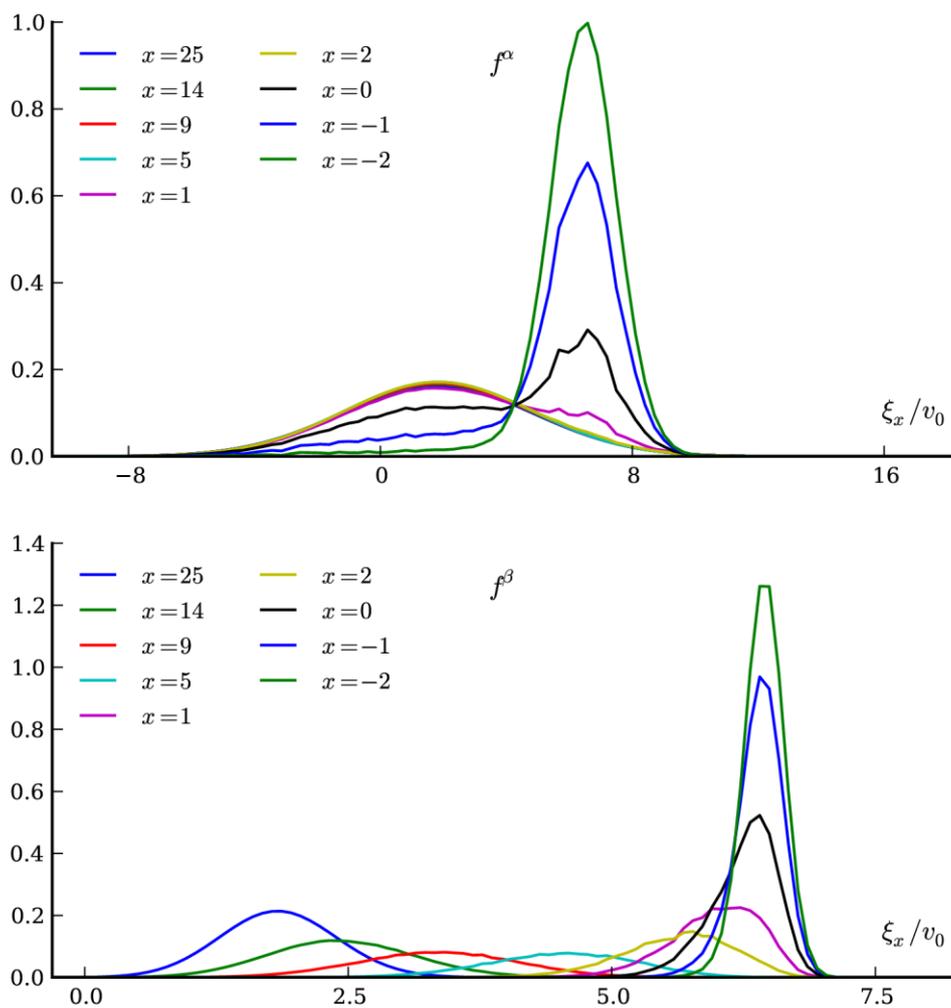


Рис. 10. Функция распределения по скоростям в продольном сечении в различных точках при $M = 5$, $m^\alpha/m^\beta = 1/33$, $n^\alpha/n^\beta = 500/1$.

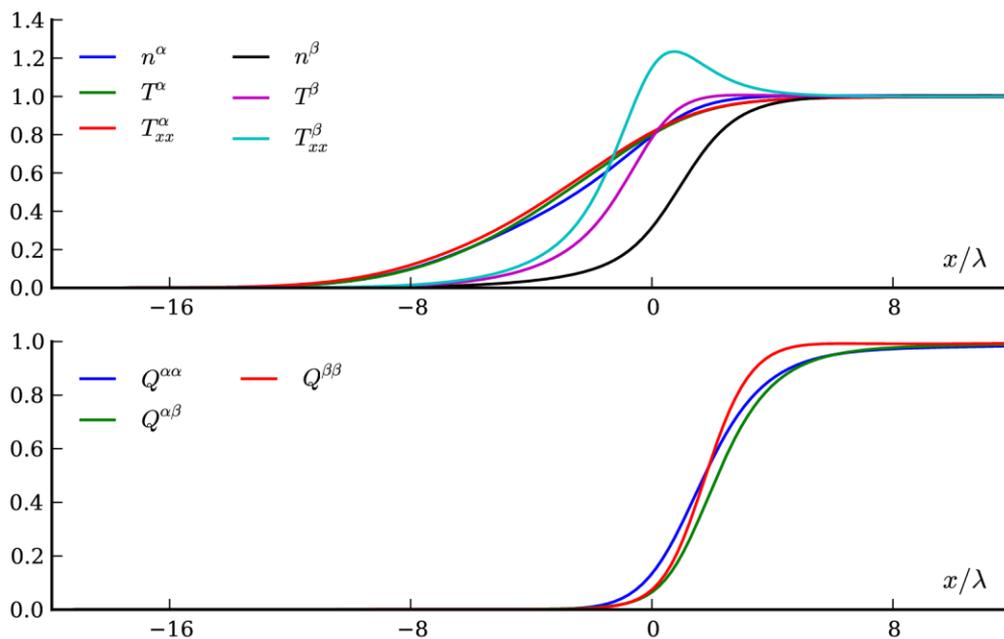


Рис. 11. $M = 5, m^\alpha/m^\beta = 1/33, n^\alpha = n^\beta$.

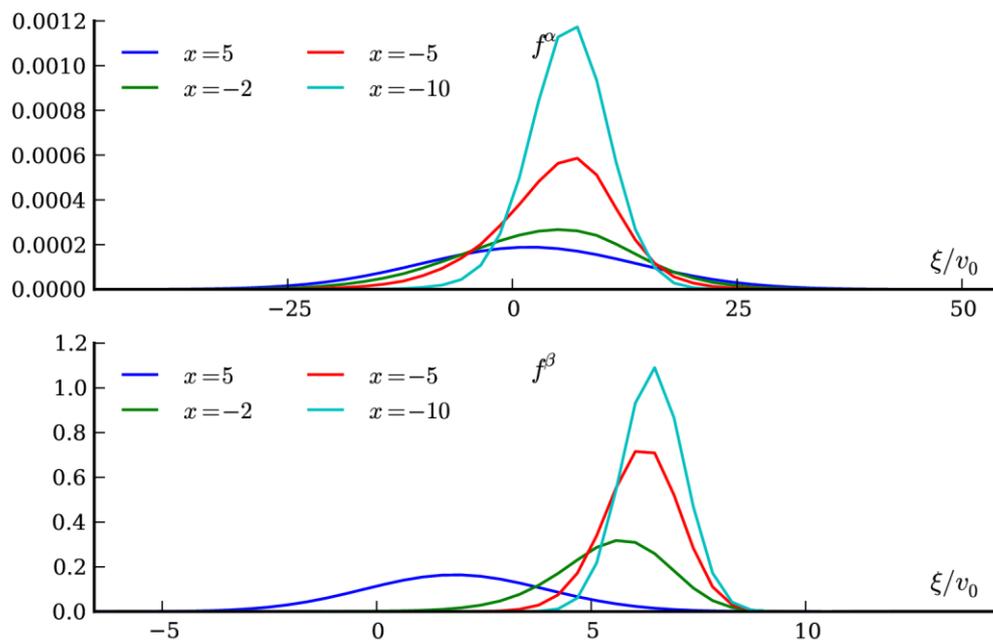


Рис. 12. Функция распределения по скоростям в продольном сечении в различных точках при $M = 5, m^\alpha/m^\beta = 1/33, n^\alpha = n^\beta$.

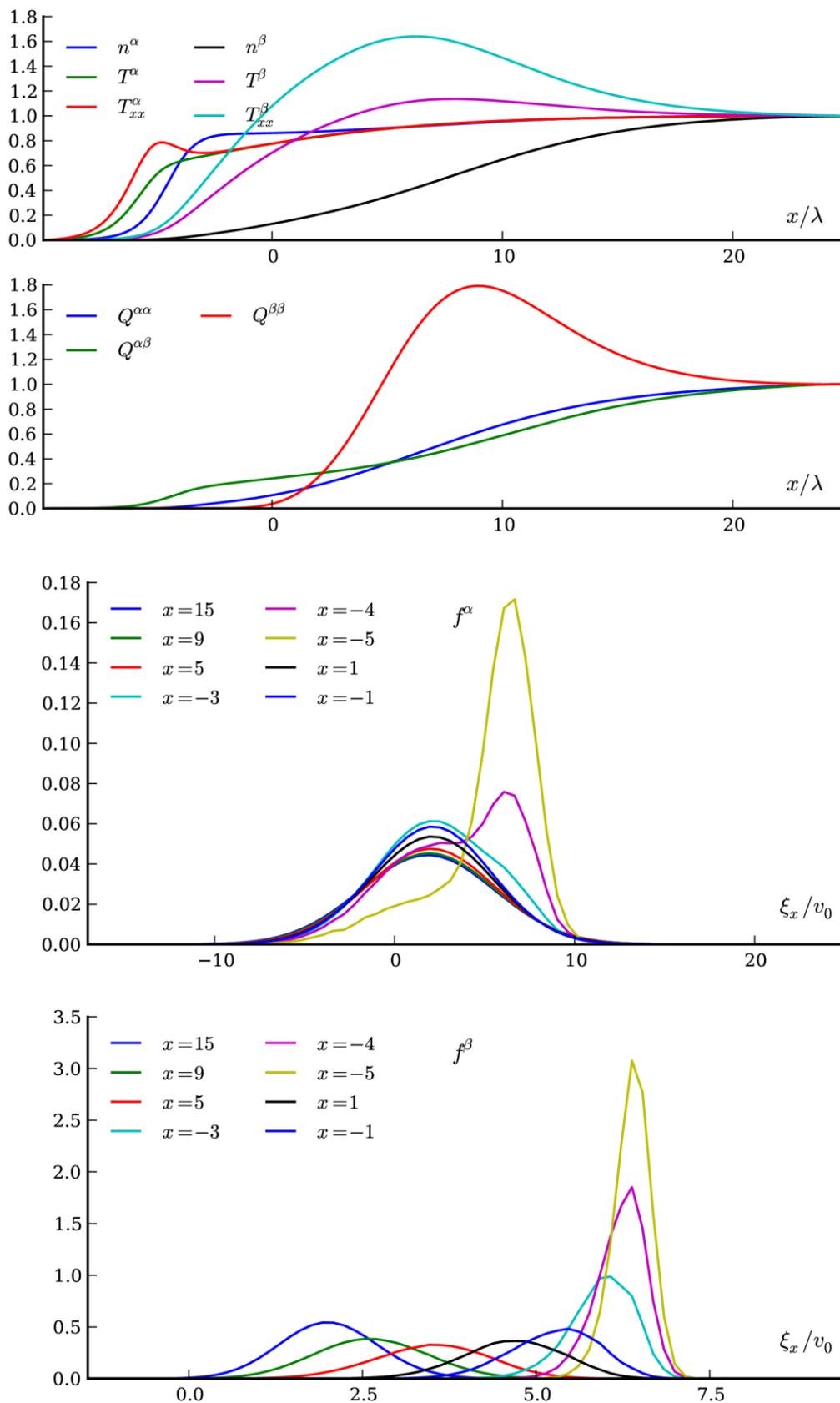


Рис. 13. $M = 5$, $m^\alpha/m^\beta = 1/33$, $n^\alpha/n^\beta = 50/1$.

8 Заключение

В работе исследована структура ударной волны в смеси газов на основе решения уравнения Больцмана. Проведены расчёты структуры УВ при большом отношении молекулярных масс компонент смеси. Кроме традиционно рассчитываемых макропараметров газа, вычислена величина функционала от решения кинетического уравнения, который определяет частоты над-пороговых столкновений молекул. Подтверждено, обнаруженное ранее другими авторами [2-8], превышение частоты высокоэнергетических столкновений во фронте УВ относительно ее значения в равновесной области за фронтом. Рассмотрено влияние на величину этого превышения отношения концентраций компонент газа. Рассчитаны функции распределения молекул по скоростям для компонент смеси. Эффект превышения частоты столкновений во фронте УВ может приводить к инициализации высокопороговых химических реакций, возбуждению электронных уровней и к ионизации компонент смеси. Расчеты проведены в разработанной авторами проблемно-моделирующей среде, предназначенной для расчета течений разреженного газа. Надежность численных результатов подтверждается параметрическим анализом точности и сравнением с другими работами.

Расчеты для умеренных чисел Маха и умеренных отношений масс потребовали не более 1 часа на персональном компьютере с частотой 3ГГц. Расчеты для больших отношений масс были выполнены за 12 часов на 4-х узлах кластера МФТИ-60 кафедры информатики Московского физико-технического института (ГУ).

Одним из возможных направлений дальнейшей работы является исследование высокоэнергетических процессов в ударных волнах в смесях двухатомных газов с учётом внутренних степеней свободы молекул газа.

Литература

1. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. В. Ю. Великодный, А. В. Емельянов, А. В. Еремин. Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны // ЖТФ, 1999, Т. 69(10), С. 23–33.
3. Емельянов Ар.В., Ефремов В.П., Зиборов В.С., Фортвов В.Е., Шумова В.В. Ионизации во фронте слабой ударной волны с малой примесью гексакарбонила молибдена // Физико – химическая кинетика в газовой динамике. 2007, Т. 5.
www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-07-26-001.pdf
4. Козлов П.В., Лосев С.А., Романенко Ю.В. Поступательная неравновесность во фронте ударной волны в смеси аргона и гелия // Письма в ЖТФ. 2000, Т. 26(22), С. 69–75.
5. Великодный В.Ю., Качармин С. В. Структура ударных волн в трехкомпонентных газовых смесях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010, Т. 10.
www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-21-001.pdf
6. С. В. Куликов. Эволюция хвостов распределений скоростей для газовых смесей во фронте ударной волны и влияние неравновесности на реакцию H_2 с O_2 // Матем. модел., 1999, Т. 11, № 3, С. 96-104.
7. С. В. Куликов. Моделирование ускорения газовых химических реакций во фронте ударной волны // Изв. РАН. МЖГ, 2001, № 5, С. 177–185.
8. Емельянов А. В., Еремин А. В., Куликов С. В. О природе неравновесного излучения молекул йода во фронте ударной волны // ЖТФ, 2013, Т. 83, № 5, С. 24–29.
9. Ф. Г. Черемисин. Решение кинетического уравнения Больцмана для высокоскоростных течений // ЖВМ и МФ, 2006, Т. 46, № 2, С. 329–343.
10. O. I. Dodulad, F. G. Tcheremissine. Multipoint conservative projection method for computing the Boltzmann collision integral for gas mixtures // In 28th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2012, AIP Conf. Proc. 1501, P. 302–309.
11. Н. М. Коробов. Теоретикочисловые методы в приближенном анализе // М.: Физматгиз, 1963.

12. S. Kosuge, K. Aoki, S. Takata. Shock-wave structure for a binary gas mixture: finite-difference analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *European Journal of Mechanics, B/Fluids* 20, P. 87–126, 2001.
13. T. Ohwada. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules // *Phys. Fluids A*, 5, P. 217–234, 1993.
14. A. A. Raines, F. G. Tcheremissine. Structure of shock waves // In *High temperature phenomena in shock waves*, edited by Raymond Brun, Berlin Heidelberg: Springer, 2012, P. 231–269.
15. G. Qian, R. K. Agarwal, C. D. Wilson. Computation of Shock Waves in Inert Binary Diatomic Gas Mixtures in Non-equilibrium Using the Generalized Boltzmann Equation // In *3rd AIAA Thermophysics Conference*, 2012.
16. Harnett, Muntz. Experimental investigations of normal shock wave velocity distribution functions in mixture of argon and helium // *Phys. Of Fluids*, 1972, V. 12, N. 4, P. 565-572.
17. Yu. A. Anikin, O. I. Dodulad, Yu. Yu. Kloss, D. V. Martynov, P. V. Shuvalov, F. G. Tcheremissine. Development of applied software for analysis of gas flows in vacuum devices // *Vacuum*, 86(11), P. 1770–1777, 2012.
18. Дж. Гиршфельд, Ч. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей // М.: Издательство Иностранной Литературы, 1961.
19. A. S. Gmurczyk, M. Tarczynski, Z. A. Walenta. Shock wave structure in the binary mixtures of gases with disparate molecular masses // In *11th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, 1978, V. 1, P. 333–341.
20. B. Schmidt, M. Worner. Problems with the Computation of the Shock Structure in Binary Gas Mixtures Using the Direct Simulation Monte Carlo Method // *Acta Mechanica*, 1983, 46, P. 49-55.
21. Куликов С.В., Соловьева М.Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // *Ж. В. М. и М. Ф.*, 1988, Т. 28, № 12, С. 1867-1873.
22. C. Chung, K. J. De Witt, D. Jeng, P. F. Penko. Internal Structure of Shock Waves in Disparate Mass Mixture // *J. Thermophysic*, 1993, V. 7, N. 4, P. 742-744.
23. Г. Берд. Молекулярная газовая динамика // М.: Мир, 1981.

Статья поступила в редакцию 25 марта 2013 г.