

УДК 533.6.011.72

© 1990 г.

ГЕНИЧ А. П., КУЛИКОВ С. В., МАНЕЛИС Г. Б.,
ЧЕРЕШНЕВ С. Л.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СКОРОСТЕЙ ВО ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

Фронт ударной волны — это узкая зона, разделяющая начальное состояние полностью равновесного газа от состояния сжатого и нагретого газа, в котором завершена поступательная релаксация и установилось новое максвелловское распределение скоростей молекул.

Детальная структура этой релаксационной зоны исследуется на молекулярно-кинетическом уровне с начала 70-х годов. Основные успехи здесь достигнуты численным методом прямого статистического моделирования Монте-Карло [1]. Функции распределения молекулярных скоростей внутри фронта волны в однокомпонентном газе изучены этим методом в [2–4], численным решением уравнения Больцмана в [5, 6] и экспериментально в [7]. Было показано, что распределение скоростей частиц в неравновесной зоне имеет немасвелловскую бимодальную форму. Кинетическая температура вдоль направления потока немонотонна и превышает свое равновесное значение за волной вниз по потоку.

Задача о структуре фронта ударной волны в газовой смеси более сложна. Ее сложность состоит в трудности вычисления функции распределения молекулярных скоростей для смеси и особенно для тех компонентов, концентрация которых мала. Такие расчеты выполнены только методом прямого статистического моделирования [8, 9]. В [8] в отличие от [9] исследовано влияние параметров двухкомпонентного потока на поступательную неравновесность во фронте волны. Главное внимание автор [8] обращает на термическую неравновесность — немонотонный профиль кинетической температуры тяжелого компонента с максимумом, превышающим равновесную температуру за волной. Неравновесные распределения молекулярных скоростей прослеживаются по числу столкновений с относительной поступательной энергией, превышающей заданную. Вероятно, в силу ограниченных возможностей применяемой разновидности метода в [8] не изучена структура фронта волны в смесях с сильно различающимися массами и концентрациями компонентов, где неравновесность особенно значительна.

Цель настоящей работы восполнить этот пробел и представить результаты систематических расчетов распределения молекулярных скоростей во фронте ударной волны в двухкомпонентном газе, используя современные модификации метода статистического моделирования. Расчеты проведены для чисел Маха M от 1,5 до 10, отношения масс компонентов m_h/m_l от 2 до 60, отношения числовых плотностей тяжелого и легкого компонентов n_h/n_l от 100 до 0,0002.

1. В работе используется нестационарный метод статистического моделирования с постоянными весовыми множителями. Построенный вычислительный алгоритм основан на синтезе идей расщепления в трактовке Берда [1], моделирования этапа столкновений строго марковскими схемами [10] и использовании весовых множителей для многокомпонентных смесей [11]. Алгоритм и его апробация на задаче о структуре фронта ударной волны в многокомпонентном газе подробно описаны в [9, 12].

Кратко существо метода состоит в следующем:

Моделируемая среда заменяется системой модельных частиц. В первый момент времени в соответствии с начальными условиями данные частицы имеют заданные скорости и распределены по ячейкам, на которые разбито исследуемое пространство. Полагается, что столкновения парные и могут происходить с определенной вероятностью только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: изменение только положения частиц вследствие перемещения

с неизменными скоростями; изменение только скоростей частиц в результате их столкновений.

Для этапа столкновений частиц в ячейках используются схемы, построенные на основе модели релаксации пространственно однородного газа Каца — Пригожина (бернуллиевая и урновое схемы). Такие строго марковские схемы моделирования столкновений лучше аппроксимируют уравнение Больцмана и позволяют использовать небольшое число модельных частиц. Дополнительно в схемы вводятся постоянные весовые множители η_i , позволяющие рассматривать газовые смеси с малыми долями одного из компонентов. При этом концентрация реальных частиц n_i сорта i связана с числом модельных частиц N_i в ячейке объема V соотношением

$$n_i = N_i \eta_i / V \quad (1.1)$$

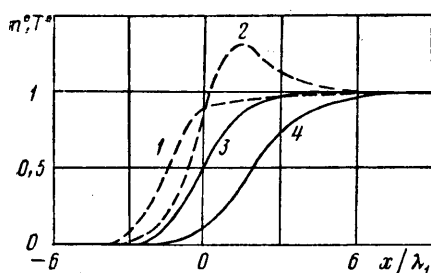
Моделирование плоской стационарной ударной волны проводилось в трехмерном пространстве скоростей и одномерном — координат. В начальный момент ударная волна задавалась в виде поверхности разрыва. Соотношение средних чисел модельных частиц каждого сорта в ячейках вверх и вниз по потоку (N_1 и N_2 соответственно) определялось из условия непрерывности $N_1 u_1 = N_2 u_2$, где u_1 и u_2 — скорости газа вверх и вниз по потоку соответственно. При этом N_1 (или N_2) одинаковы для всех компонентов независимо от соотношения их реальных концентраций n_{i1} (или n_{i2}). Весовые множители частиц каждого сорта определялись через концентрации из соотношения (1.1). Начальные скорости разыгрывались согласно максвелловским функциям распределения в соответствующих равновесных потоках. При эволюции модельной системы частицы, покидающие область моделирования, исключались из рассмотрения, а внутрь области (в соответствии с условиями на бесконечности вверх и вниз по потоку) вводились новые частицы. После установления стационарного состояния производилась выборка параметров потока для накопления статистики.

В большинстве расчетов модельные частицы представлялись в виде жестких сфер с отношением диаметров частиц легкого и тяжелого компонентов 0,598 (как у He и Ar). Лишь в одном, ниже оговоренном случае (разд. 6) взаимодействие частиц описывалось степенным потенциалом. Частицы отталкивались с силой $F = \chi_{ij}/r_{ij}^{12}$, где r_{ij} — расстояние между частицами сортов i и j . Значения χ_{ij} определялись из экспериментальной вязкости для каждого компонента, а χ_{ij} — из экспериментального коэффициента диффузии смеси Ar и He [12, 13].

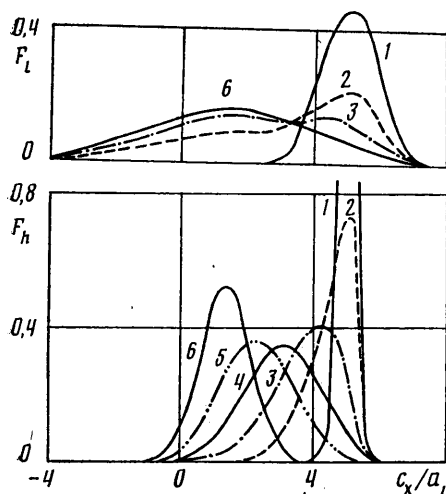
2. Ниже приведены результаты моделирования ударной волны для $M = 5$ в смеси с малой концентрацией тяжелого компонента ($n_h/n_l = 0,01$). Отношение масс $m_h/m_l = 10$. Этап столкновений моделировался по схеме испытаний Бернулли [9]. Модельное пространство разбивалось на 160 ячеек размером $\Delta x = 0,15 \lambda_1$, где λ_1 — средняя длина свободного пробега в смеси перед волной. Среднее число модельных частиц каждого сорта в ячейке перед волной $N_i = 6$. Временной шаг расщепления $\Delta t = 0,1 \lambda_1/v$, где v — наиболее вероятная тепловая скорость частиц легкого компонента перед волной.

На фиг. 1 сплошными кривыми изображены профили относительных концентраций компонентов $n^\circ = (n - n_l)/(n_h - n_l)$ и штриховыми — профили относительных кинетических температур компонентов $T^\circ = (T - T_1)/(T_2 - T_1)$. Индексы 1 и 2 в формулах относятся к параметрам среды вверх и вниз по потоку. Кривые 1 и 3 соответствуют легкому компоненту, а 2 и 4 — тяжелому. Видно, что компоненты смеси разделяются во фронте. Передняя часть волны обогащена легким компонентом, тяжелые частицы тормозятся медленнее, профиль их концентрации более пологий. Такая сепарация компонентов смеси хорошо известна и отмечалась ранее как в теоретических, так и экспериментальных работах. Температура тяжелого компонента немонотонна вдоль по потоку и превышает свое равновесное значение за волной. Это качественно соответствует результатам, полученным в [8, 9, 14]. В приведенных здесь и ниже расчетах среднеквадратичные относительные ошибки определения профилей концентраций и температур не превышали 1 и 5% соответственно.

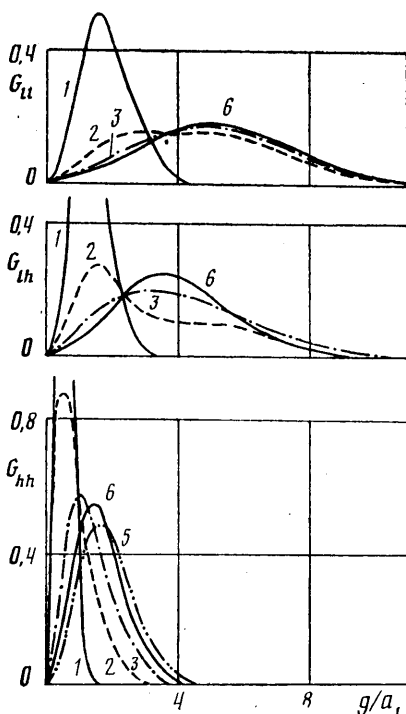
На фиг. 2 представлены функции распределения частиц по продольным скоростям c_x для легкого (F_l) и тяжелого (F_h) компонентов в различных сечениях волны. Скорости нормированы на скорость звука в смеси перед волной a_1 , а сами функции нормированы так, что интеграл от них по скорости равен единице. Кривые 1 и 6 соответствуют равновесным распределениям вверх и вниз по потоку при $x/\lambda_1 = -8,3$ и 13,0, кривые 2, 3, 4, 5 —



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3

неравновесным распределениям при $x/\lambda_1 = -0,7; 0,1; 0,8; 1,6$ соответственно. Распределения в легком газе (F_l), которого 99%, мало отличаются от распределения в однокомпонентном газе. Вблизи центра волны неравновесная функция как бы сохраняет память о скоростях потока вверх и вниз по течению. Это отражается в ее бимодальной форме. Распределения в тяжелом газе (F_h) имеют малую ширину, обусловленную большой массой частиц. В процессе эволюции F_h не расщепляется на две моды. Газ тяжелых частиц ведет себя как высокоскоростной молекулярный пучок, который тормозится в резервуаре легких частиц. Параметры распределения (полуширина, высота в максимуме) ведут себя по мере продвижения в глубь волны немонотонно, свидетельствуя о перегреве тяжелых частиц в неравновесной зоне.

Распределения частиц по поперечным скоростям везде близки к максвелловской функции с локальной поперечной температурой компонентов.

Столкновительные процессы в рассматриваемой смеси характеризуются тремя функциями распределения пар частиц по относительным скоростям g : $G_u(g)$, $G_{hh}(g)$, $G_{th}(g)$. Две первые характеризуют распределения внутри каждого из компонентов, третья — внутри совокупности смешанных пар. На фиг. 3 представлена эволюция этих функций во фронте волны. (Функции получены в тех же сечениях, что и на фиг. 2, соответствующие кривые имеют ту же нумерацию.) Эволюция $G_u(g)$ повторяет эволюцию соответствующего распределения в однокомпонентном газе [9]. Область пространства, где эта функция существенно неравновесна, занимает переднюю кромку волны. По мере продвижения в глубь волны неравновесность появляется в распределении смешанных пар частиц (G_{th}). Об-

часть ее локализации примерно соответствует максимуму сепарации компонентов. В этой зоне легкий газ уже нагрет, а скорости частиц тяжелого газа еще мало отличаются от исходных. Статистика столкновений смешанных пар имеет бимодальный характер. Доля сильных столкновений в области «хвоста» распределения превосходит эту же величину в равновесии вниз по потоку. Наконец, задняя кромка волны характеризуется существенной неравновесностью внутри тяжелого компонента (G_{hh}). Это область самого сильного отклонения от равновесия. Уже при невысоких скоростях относительного движения тяжелых частиц отчетливо виден «перехлест» неравновесной функции над равновесной за волной.

Условимся области фронта волны, в которых та или иная функция распределения превышает в области «хвоста» свои равновесные значения, называть зонами высокоскоростной поступательной неравновесности. В легком компоненте во всем исследуемом интервале относительных скоростей вплоть до $g=10a_1$ такой перехлест не наблюдается. Иными словами, зона LL высокоскоростной неравновесности при достигнутой точности вычислительного алгоритма не проявляется. Зоны LH и HH отчетливо прослеживаются на фиг. 3. Существование, что области их локализации в ударной волне не совпадают.

Представления о погрешностях вычисленных распределений дают среднеквадратичные отклонения функций при $x/\lambda_1=13,0$ от их теоретических равновесных значений. Для F_l , F_h и G_l , G_h , G_{hh} они соответственно равны $2,1 \cdot 10^{-3}$; $2,8 \cdot 10^{-2}$ и $1,7 \cdot 10^{-3}$; $1,5 \cdot 10^{-3}$; $5,5 \cdot 10^{-3}$.

3. Далее приведены результаты моделирования ударной волны с $M=5$ в смесях с различным соотношением тяжелого и легкого компонентов для $n_h/n_l=1:500$, $1:100$, $1:30$, $1:10$, $1:1$, $100:1$. Отношение масс m_h/m_l по-прежнему равно 10. В новых расчетах схема моделирования, число и размер ячеек модельного пространства, временной шаг расщепления и среднее число модельных частиц такие же, как и в предыдущем случае. Исключением являлся лишь расчет, выполненный для смеси с $n_h/n_l=100:1$. В этом случае этап столкновений моделировался по урновой схеме испытаний [9], $\Delta t=0,0006 \lambda_1/v$.

В предыдущем разделе было показано, что при $n_h/n_l=0,01$ распределение скоростей внутри легкого компонента подобно бимодальному распределению внутри однокомпонентного газа. Внутри тяжелого компонента распределение скоростей узкое, газ тяжелых частиц ведет себя как высокоскоростной молекулярный пучок, который тормозится в резервуаре легких частиц. При $n_h/n_l < 0,01$ функции распределения не зависят от состава, так как доля столкновений между тяжелыми частицами пренебрежимо мала. При увеличении доли тяжелого компонента, когда $n_h/n_l > 0,1$, заметно уменьшается скорость звука в смеси и, следовательно, при неизменном M — скорость потока. Поскольку молекулярные скорости внутри каждого компонента складываются из тепловых скоростей частиц, не зависящих от концентраций, и скоростей потока как целого, влияние последнего в данном случае уменьшается. Распределение молекулярных скоростей внутри легкого компонента (доля которого в этом ряду становится меньше) сохраняет бимодальный характер с возрастающим перекрыванием мод до- и сверхзвукового движения. Распределение скоростей внутри тяжелого компонента (доля которого увеличивается) стремится к распределению внутри однокомпонентного газа. Эффекты поступательной неравновесности в целом уменьшаются. Так, при $n_h/n_l > 0,1$ не обнаруживается зона LH высокоскоростной неравновесности, а при $n_h/n_l > 1$ — и зона HH . Ниже представлены макроскопические характеристики поступательной неравновесности для смесей различного состава: T_h° и T_{hp}° — максимальная относительная температура тяжелого компонента и ее максимальная продольная составляющая во фронте волны; T_{lp}° — максимальная продольная относительная температура легкого компонента; Δ/λ_1 — величина сепарации компонентов в волне (сепарация компонентов определена на уровне $n^\circ=0,5$)

n_h/n_l	1 : 500	1 : 100	1 : 30	1 : 10	1 : 1	100 : 1
Δ/λ_1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,1	1,5
T_h°	1,31	1,31	1,26	1,16	1,00	1,00
T_{hp}°	2,09	2,10	1,90	1,88	1,31	1,31
T_{lp}°	1,20	1,15	1,03	1,00	1,00	1,00

Для всех соотношений концентраций скачок уплотнения легкого газа всегда расположен выше по потоку, чем скачок уплотнения тяжелого. Наименьшая сепарация компонентов в волне наблюдается, когда эффективность столкновений смешанных пар и пар внутри каждого из компонентов выравниваются. Относительная температура тяжелого компонента превышает на 30% равновесную за волной при малых значениях n_h/n_l . В направлении потока превышение температуры составляет уже 200% для тяжелого компонента и 20% для легкого. Однако как только n_h/n_l увеличивается примерно до 0,03, рассеяние потока легких частиц тяжелыми становится более эффективным и продольный перегрев легкого компонента исчезает. Перегрев тяжелого компонента в направлении потока хотя и уменьшается с ростом n_h/n_l , но остается значительным во всем диапазоне концентраций, достигая при $n_h/n_l=100$ 30%, как в однокомпонентном газе. Частично подобные результаты для $M=8$ приведены в [8].

Таким образом, наиболее существенная неравновесность внутри волны проявляется для смесей с малым содержанием тяжелого компонента. Газ легких частиц служит своеобразным ускорителем тяжелых частиц, проникновение которых в область нагретого легкого газа создает сильно неравновесную ситуацию.

4. В данном разделе приведены результаты моделирования ударной волны с $M=5$ в смесях легкого и тяжелого компонентов с различным отношением масс частиц $m_h/m_l=2, 4, 10, 33, 56$. Выбраны смеси с малым содержанием тяжелых частиц: $n_h/n_l=0,01$. Число и размер ячеек модельного пространства, среднее число модельных частиц и временной шаг расщепления прежние. Исключением является смесь с $m_h/m_l=56$. Для этого случая $n_h/n_l=0,002$. Модельная область и среднее число модельных частиц из-за большой сепарации компонентов здесь увеличены вдвое. Отметим, что во всех расчетах, впервые представленных в данном разделе, этап столкновений моделировался по усовершенствованной урновой схеме испытаний [12].

Основной качественный результат расчетов состоит в следующем. Неравновесность в волне увеличивается с ростом отношения масс компонентов. Функции распределения скоростей подобны при $m_h/m_l>4$ случаю, уже рассмотренному в разд. 2. Распределение скоростей внутри тяжелого компонента (масса которого в этом ряду увеличивается) стремится к дельтообразному распределению. При этом отчетливо проявляются зоны высокоскоростной неравновесности.

Ниже представлены макроскопические характеристики поступательной неравновесности для рассмотренных смесей в зависимости от отношения масс компонентов:

m_h/m_l	2	4	10	33	56
Δ/λ_1	0,0	0,6	1,9	7,2	11,5
T_h°	1,05	1,16	1,31	1,35	1,37
T_{hp}°	1,48	1,86	2,10	2,15	2,18
T_{lp}°	1,26	1,26	1,15	1,00	1,00

Сепарация увеличивается прямо пропорционально росту m_h/m_l . Величина сепарации в этом случае характеризует пространственный масштаб поступательной релаксации тяжелого газа. Согласно оценке [15], время поступательной релаксации тяжелого газа линейно зависит от m_h/m_l . Приведенные значения Δ/λ_1 хорошо согласуются с этой оценкой. Профиль температуры тяжелого компонента по-прежнему немонотонный. Тяжелый газ перегревается внутри волны, причем величина перегрева растет с увеличением отношения m_h/m_l . В направлении потока термическая неравновес-

ность выражена ярче. Продольные составляющие температуры и тяжелого и легкого газов в волне превышают равновесные значения температуры вниз по потоку. Однако при увеличении $m_h/m_l > 10$ перегрев легкого газа в продольном направлении исчезает. Даже небольшая доля тяжелых частиц ($\sim 0,002$) эффективно рассеивает поток легких, уменьшая его температурную анизотропию.

Таким образом, с увеличением отношения масс в смеси неравновесные эффекты во фронте ударной волны увеличиваются, проявляясь в первую очередь в тяжелой подсистеме.

5. Далее приведены результаты моделирования ударных волн различной интенсивности с $M=1,5; 2; 3; 5; 10$ в смеси газов с $n_h/n_l=0,002$ и $m_h/m_l=10$. Схема и параметры моделирования такие же, как и в разд. 2. Основной качественный результат расчетов состоит в следующем: неравновесность во фронте увеличивается с ростом интенсивности волны. При $M \geq 2$ отчетливо проявляется зона высокоскоростной неравновесности HH , а при $M \geq 3$ — и зона LH . Распределения скоростей при $M > 2$ подобны случаю, рассмотренному в разд. 2. С ростом числа Маха прямо пропорционально увеличивается и скорость потока и тепловые скорости молекул во фронте, поэтому неравновесные эффекты, достигнув предельных значений, перестают расти. Это также иллюстрируют представленные ниже макроскопические характеристики неравновесности во фронте в зависимости от интенсивности волны:

M	1,5	2	3	5	10
Δ/λ_1	3,2	2,4	2,1	2,0	2,0
T_h°	1,12	1,26	1,26	1,31	1,27
T_{hp}°	1,66	1,86	1,93	2,09	2,05
T_{lp}°	1,00	1,07	1,10	1,20	1,15

6. В данном разделе представлены результаты моделирования ударной волны для $M=5$ в смеси тяжелого компонента с легким при $n_h/n_l=0,01$ и $m_h/m_l=10$. В отличие от предыдущих случаев взаимодействие частиц описывалось степенным потенциалом. Эти расчеты проведены специально для выяснения чувствительности результатов к выбранной модели взаимодействия частиц. Схема и параметры моделирования такие же, как в разд. 2. Лишь временной шаг расщепления для удобства вычислений увеличен вдвое. Поскольку длина свободного пробега, как и для случая твердых сфер, вычислена из экспериментальной вязкости, пространственный масштаб моделирования λ_1 остается прежним. Введение степенного потенциала взаимодействия приводит к зависимости сечения столкновения от относительной скорости сталкивающихся частиц, поэтому ширина ударной волны увеличилась по сравнению с моделью твердых сфер. Несмотря на это, характер и величины эффектов поступательной неравновесности не изменились. Так, распределение скоростей в волне качественно осталось прежним, макроскопические характеристики неравновесности, за исключением сепарации компонентов, не изменились ($T_h^\circ=1,31$; $T_{hp}^\circ=2,07$; $T_{lp}^\circ=1,15$; $\Delta/\lambda_1=2,5$). Таким образом, изменение потенциала моделирования частиц при моделировании практически не влияет на неравновесные эффекты во фронте волны.

Полученные в работе результаты указывают на существование заметной поступательной неравновесности внутри фронта ударной волны в газовых смесях. Показано, что функции распределения молекулярных скоростей в волне существенно отличаются от максвелловских; поступательная неравновесность особенно возрастает в рэлеевском газе при большом отношении масс частиц; доля столкновений частиц с большими относительными скоростями в неравновесной зоне превосходит соответствующую величину вниз по потоку. Особенно ярко это может проявляться за волной в процессах цепного лавинообразного характера, когда даже относительно малая глубина физико-химического превращения в неравновесной зоне может сильно сказаться на характере всего течения в целом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981. 319 с.
2. Bird G. A. Aspects of the structure of strong shock waves // Phys. Fluids. 1970. V. 13. № 5. P. 1172-1177.
3. Bird G. A. Collision rates and collisional energy distributions within shock waves // Mod. Develop. Shock. Tube Res. Proc. 10th Int. Shock Tube Symp. Kyoto, 1975. P. 284-291.
4. Генич А. П., Каспаров Г. Г., Манелис Г. Б., Панов Н. В. О форме распределения абсолютных и относительных скоростей молекул во фронте сильной ударной волны. Одноатомный однокомпонентный газ // ПМТФ. 1978. № 4. С. 3-7.
5. Hicks B. L., Yen S.-M., Reilly B. J. The internal structure of shock waves // J. Fluid Mech. 1972. V. 53. № 1. P. 85-112.
6. Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Структура ударной волны в одноатомном газе при степенных потенциалах взаимодействия // Изв. АН СССР. МЖГ. 1982. № 6. С. 179-183.
7. Holtz T., Muntz E. P. Molecular velocity distribution functions in an argon normal shock wave at Mach number 7 // Phys. Fluids. 1983. V. 26. № 9. P. 2425-2436.
8. Bird G. A. Shock wave structure in gas mixtures // Raref. Gas Dynam. 14th Int. Symp. V. 1. Tokyo, 1984. P. 175-182.
9. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б. и др. Приложение весовых схем статистического моделирования течений многокомпонентного газа к расчету структуры ударной волны // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26. № 12. С. 1839-1854.
10. Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I. Основы построения метода. // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. С. 1195-1208.
11. Королев А. Е., Яницкий В. Е. Прямое статистическое моделирование столкновительной релаксации в смесях газов с большим различием в концентрациях // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1983. Т. 23. № 3. С. 674-680.
12. Куликов С. В., Соловьева М. Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28. № 12. С. 1867-1873.
13. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: Изд-во иностр. лит. 1960. 510 с.
14. Schmidt B., Wörner M. Problems with the computation of the shock structure in binary gas mixtures using the direct simulation Monte Carlo method // Acta Mech. 1983. V. 46. № 1-4. P. 49-55.
15. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980. 512 с.

Москва

Поступила в редакцию
20.II.1989