

УДК 533.72

© 2003 г. В. С. ГАЛКИН, С. В. РУСАКОВ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СТРУКТУРЫ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В БИНАРНОЙ СМЕСИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Результаты расчетов методом установления структуры сильной ударной волны в смесях Ne–Ar, He–Ar, He–Ne, He–Xe при помощи системы уравнений Навье–Стокса, полной и модифицированных систем уравнений Барнетта сравниваются с результатами метода прямого статистического моделирования. Анализируется область применимости этих систем уравнений для расчета профилей газодинамических переменных в зависимости от отношения масс молекул, а также начальных концентраций.

Ключевые слова: структура ударной волны, бинарная смесь инертных газов, барнеттовы модели, уравнения Барнетта.

Рассматриваемые здесь ненавье–стоксовы макроскопические модели основаны на уравнениях Барнетта. История и результаты применения этих уравнений изложены в обзоре [1] (см. также [2]). Кратко рассмотрим последние результаты этого направления.

Почти во всех расчетах изучались процессы в простом газе, хотя, например, для гиперзвуковых приложений основной интерес вызывают высокотемпературные течения смесей газов [3]. Недавно получены уравнения Барнетта для многокомпонентных смесей многоатомных газов в случае легких обменов поступательной и внутренней энергиями молекул [4, 5], затем [6, 7] использованы частные случаи этих уравнений.

Продолжен анализ эффектов, частично или полностью обусловленных теми или иными членами формул для барнеттовых вкладов в переносные свойства при числе Кнудсена $\text{Kn} \rightarrow 0$. Первый пример – дисперсия звука высокой частоты ω [1]. При $\text{Kn} \ll 1$ для фазовой скорости v имеем

$$\frac{v}{v_0} - 1 = -d\text{Kn}^2 + O(\text{Kn}^4), \quad v_0 = \sqrt{\frac{5k}{3m}T}, \quad \text{Kn} = \frac{\omega\eta_0}{p_0}$$

где η_0, p_0 – коэффициент сдвиговой вязкости и давление в невозмущенном газе. В коэффициент дисперсии $d = d_1 + d_2$ дают вклады приближения Навье–Стокса (d_1) и Барнетта (d_2). Тщательное сравнение теоретических значений d_1 и d с экспериментальными данными для инертных газов показали высокую точность теории [8]. Даны обзоры последующих работ и анализ применимости методов Чепмена–Энскога и Гильберта [9]. Удалось получить решение задачи о распространении звука при произвольном числе Kn методом прямого статистического моделирования [10].

Другой пример – задача о структуре слабой ударной волны в простом газе, решаемая в виде рядов по степеням параметра $\epsilon \sim \text{Kn}$, пропорционального ее интенсивности. Члены порядка ϵ даются уравнениями Навье–Стокса с постоянными коэффициентами переноса. Переменность последних и вклад линейных слагаемых барнеттовых переносных свойств учитываются в членах порядка ϵ^2 , определяющих параметры асимметрии профилей плотности Q_ρ и температуры Q_T . Учет барнеттова вклада обеспечи-

вает правильный знак производной dQ/dM при числе Маха перед волной $M = 1$. Более того, результаты расчетов Q при помощи уравнений Барнетта (в отличие от уравнений Навье–Стокса) близки к результатам метода прямого статистического моделирования для $M \leq 2$ [1]. Эти две задачи решены для бинарной смеси одноатомных газов [11] и для многоатомного газа [6]. Вращательные степени свободы молекул увеличивают относительный вклад приближения Барнетта в коэффициент дисперсии d с ростом отношения времен вращательной и поступательной релаксаций Z_0 , т.е. с ростом температуры. Для одноатомного газа $d_1/d_2 = 1.9$, для двухатомного газа $d_1/d_2 = 2.07$ и 0.511 при $Z_0 = 3$ и 20 соответственно [6]. Более резко возрастает этот вклад в параметры асимметрии Q [6].

Важный пример барнеттова эффекта, отсутствующего в приближении Навье–Стокса, – “продольный” тепловой поток в сдвиговых течениях, когда u_x, T зависят только от поперечной координаты y , а $u_y = 0$. Используя формулу (2.3) [1], найдем

$$q_x^{(2)} = \frac{\eta^2}{\rho} \left(\theta_4 \frac{d}{dy} + \frac{\theta_5 dT}{T dy} \right) e_{xy} = \frac{\eta^2}{2\rho T} (\theta_5 - \theta_4 \partial_T \eta) \frac{dT du_x}{dy dy} + \frac{\eta}{\rho} \theta_4 \frac{d}{dy} \eta e_{xy} \quad (0.1)$$

При $Kn \rightarrow 0$ (в приближении Навье–Стокса) напряжение сдвига постоянно, т.е. последнее слагаемое в (0.1) равно нулю. Окончательно продольный тепловой поток¹

$$q_x^{(2)} = \frac{\eta^2}{2\rho T} (\theta_5 - \theta_4 \partial_T \eta) \frac{dT du_x}{dy dy} \approx \frac{105 \eta^2 dT du_x}{8 \rho T dy dy}, \quad \partial_T \eta = \frac{d \ln \eta}{d \ln T} \quad (0.2)$$

Здесь использованы формулы (2.5) [1] для θ в низшем приближении по полиномам Сонина.

Ранее (см. [1]) подтверждение существования этого потока и анализ области его применимости по Kn и другим параметрам проводились в рамках модельных кинетических уравнений. В [12] для этого использован метод прямого статистического моделирования, причем не только для плоского течения Куэтта с различными температурами пластин, но и для пограничного слоя на плоской изотермической пластине под нулевым углом атаки при большом числе Маха M_∞ .

Для сдвиговых течений смеси газов имеют место также продольные диффузионные потоки, в формулы для продольных потоков добавляются слагаемые, содержащие производную по y от концентраций.

Рассмотренный эффект нелинейный. Остановимся на результатах исследования стационарных процессов в газах, линеаризованных относительно состояния покоя (когда $M \ll 1$, $Re \ll 1$, $Kn \ll 1$). К таковым относятся, например, течения слаборазреженного газа в бесконечном плоском канале под действием продольных градиентов давления p или температуры T . Линеаризуя исходное выражение для $q_x^{(2)}$, учитывая $\nabla \mathbf{u} = 0$, находим, что в (0.1) остается только последнее слагаемое. Используя уравнение Стокса, получаем

$$q_x^{(2)} = \theta_4 \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (0.3)$$

Принципиальным результатом для рассматриваемых стационарных процессов является вырождение ряда Чепмена–Энскога [13]. Система уравнений сохранения сводится к таковой в приближении Стокса

$$\nabla \mathbf{u} = 0, \quad \Delta x_k = 0, \quad \nabla p = \eta \Delta \mathbf{u}, \quad \Delta T = 0 \quad (0.4)$$

¹ В [1] приведена приближенная формула для этого потока (опущено слагаемое с θ_4); в подписях к фиг. 3 [1] должно быть: 2 – решение методом прямого статистического моделирования; 3 – решение уравнений Барнетта.

где $k = 1, 2, 3, \dots, S - 1$, S – число компонентов смеси, Δ – лапласиан. Для простого газа тепловой поток

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \theta_4 \frac{\eta}{\rho} \nabla p \quad (0.5)$$

где первое слагаемое – закон Фурье, второе дается приближением Барнетта, как и (0.3). Напомним, что (0.5) справедливо вне кнудсеновских слоев на стенках канала. При формулировке интегральных соотношений взаимности Онзагера необходим учет как барнеттова вклада (0.3), так и эффектов кнудсеновских слоев. Действительно, расход и поток энергии газа вдоль канала запишутся соответственно в виде [14]

$$Q_m = -\Lambda_{mm} \frac{p'}{T} - \Lambda_{mq} \frac{T'}{T^2}, \quad Q_q = -\Lambda_{qm} \frac{p'}{T} - \Lambda_{qq} \frac{T'}{T^2} \quad (0.6)$$

где выполняется соотношение Онзагера $\Lambda_{mq} = \Lambda_{qm}$ (штрихами обозначены производные по x). В асимптотически (Кн $\rightarrow 0$) главном приближении первое слагаемое для Q_m соответствует течению Пуазейля, второе обусловлено температурным скольжением. В первое слагаемое для Q_q дают вклады приближение Барнетта и поток тепла в кнудсеновском слое (механокалорический эффект), второе обусловлено законом Фурье. В случае смеси газов тепловой и диффузионные потоки будут еще зависеть и от производных от концентраций.

Важно подчеркнуть, что в нестационарном случае в соотношениях (0.4)–(0.6) (кроме уравнения неразрывности) будут содержаться бесконечные ряды, даваемые методом Чепмена–Энскога. В стационарном случае “вырождаются” уравнения сохранения и формулы для переносных свойств, но не функции распределения [13].

Широкий круг вопросов теории стационарных линейризованных процессов рассматривается в [14]. Систематический анализ барнеттовых эффектов для молекулярных газов в магнитном поле дан в [15].

Перейдем к нелинейным процессам. Большое внимание уделено [1] медленным неизотермическим течениям газа, когда при Кн $\rightarrow 0$ в уравнении импульса барнеттовы температурные напряжения основного порядка величины. Для течений смесей газов необходим, вообще говоря, учет напряжений, обусловленных пространственными производными от концентраций. Дан [4] вывод общих уравнений медленных течений смесей многоатомных газов, содержащих указанные напряжения. Порядок уравнения сохранения импульса такой же, как и в приближении Навье–Стокса, однако уравнение не приводится к виду, аналогичному уравнению сохранения импульса медленных неизотермических течений газа. В последнем случае справедлива теорема о покое газа, заключенного между параллельными пластинами, концентрическими круговыми цилиндрами и концентрическими сферами, имеющими различные однородные температуры, когда температурные напряжения уравниваются давлением. Однако в общем случае [4] такая теорема не доказана.

Принципиальное значение имеют эксперименты по нелинейному эффекту термомолекулярной разности давлений [1, 16]. Путем численного анализа этого эффекта при помощи макроскопических уравнений показано [17], что в отличие от уравнений Навье–Стокса уравнения медленных неизотермических течений дают правильный знак эффекта, но количественно справедливы для очень малых Кн. В экспериментах использовались двухатомные газы (воздух, азот). В связи с этим получены оценки влияния (~10%) вращательных степеней свободы молекул на коэффициенты перед теми слагаемыми уравнения сохранения импульса нестационарных медленных неизотермических течений неоднородного газа, которые обусловлены температурными напряжениями [5].

Большой интерес вызвало применение уравнений Барнетта для расширения области применимости сплошносредного описания по Kn (структура сильной ударной волны, обтекание гиперзвуковым потоком). С целью подавления коротковолновой неустойчивости этих уравнений были введены эмпирические демпфирующие слагаемые, повышающие порядок системы уравнений, но слабо влияющие на решение. С помощью полученных таким образом “расширенных” уравнений Барнетта рассчитан ряд задач гиперзвукового обтекания тел [18]. Эти уравнения уточняют уравнения Навье–Стокса, но не столь кардинально, как в случае структуры ударной волны. Значительное уточнение имеет место для профиля температуры в передней части головного скачка уплотнения. Однако остается нерешенной проблема граничных условий, не рассмотрены достаточно полно вопросы устойчивости.

В связи с этим был поставлен вопрос о модификации метода Чепмена–Энскога, приводящей к переразложению по Kn цепочки уравнений сохранения относительно подходящего базиса [19] (см. также [9]). В качестве этого базиса выбрана система усеченных уравнений Барнетта. На следующей итерации решается система усеченных неоднородных уравнений Барнетта. Согласно [2], в первой системе учитываются те барнеттовы слагаемые тензора напряжений и вектора теплового потока, которые содержат парные произведения производных

$$\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{u}\right) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{u}\right), \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{u}\right)$$

соответственно, не вызывающие коротковолновую неустойчивость. Порядок системы равен порядку системы уравнений Навье–Стокса, одинаковы фазовые картины структуры ударной волны [2]. Остальные барнеттовы слагаемые включаются в неоднородную часть второй системы, дающей результаты для структуры ударной волны, близкие к результатам полной системы уравнений Барнетта.

Далее [7] впервые проведен расчет структуры сильной ударной волны в бинарной смеси одноатомных газов в рамках приближения Барнетта. Вместо интегрирования вверх по потоку [2] применен метод установления, что дало, в частности, возможность рассмотреть поведение приближенного решения полной системы уравнений Барнетта перед потерей устойчивости. Рассмотрено влияние на решение при больших M того факта, что при $M = \infty$ имеет место передний фронт ударной волны, на котором рвутся производные. Сравниваются результаты расчетов профилей газодинамических переменных при помощи уравнений Навье–Стокса, барнеттовых моделей и метода прямого статистического моделирования для предельных законов межмолекулярного взаимодействия (максвелловские молекулы и упругие сферы).

Для профилей температуры и массовой плотности при соизмеримых массах и диаметрах молекул получены те же выводы, что и для простого газа [2]. Простейшая барнеттова модель (усеченные уравнения Барнетта) имеет достаточно высокую точность для профилей температуры и массовой плотности в ударной волне. Этот результат может быть важен для задач гиперзвукового обтекания тел. Такие же выводы имеют место для профилей концентраций в случае максвелловских молекул, однако в случае молекул – упругих сфер различия барнеттовых и навье-стоксовых результатов невелики.

Как и ожидалось, точность барнеттовых моделей (по сравнению с методом прямого статистического моделирования) ухудшается с увеличением различия масс молекул. Ухудшение точности принципиальным образом зависит от законов межмолекулярного взаимодействия. Следовательно, необходим дальнейший анализ области применимости барнеттовых моделей с использованием реальных законов межмолекулярного взаимодействия. С этой целью ниже рассматриваются смеси инертных газов с отношением масс молекул примерно от двух до тридцати. Сравниваются ре-

зультаты решений систем уравнений Навье–Стокса, систем усеченных и неоднородных усеченных уравнений Барнетта и результаты метода прямого статистического моделирования. Используются численные методики и обозначения [7].

1. Исходные соотношения. Следуя [7], выпишем уравнения для одномерного нестационарного случая. Система усеченных уравнений Барнетта имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho_1 (u + V_{1x}^{(1)} + V_{1x}^A) = 0, \quad \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p + \pi_{xx}^{(1)} + \pi_{xx}^A) = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{3}{2} p \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[u \left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{5}{2} p + \pi_{xx}^{(1)} + \pi_{xx}^A \right) + h_x^{(1)} + h_x^A + \frac{5}{2} p_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_2} \right) (V_{1x}^{(1)} + V_{1x}^A) \right] = 0$$

Обозначим левые части уравнений (1.1) через L_0, L_1, L_2, L_3 соответственно. Тогда неоднородные усеченные уравнения Барнетта запишутся так

$$L_0 = 0, \quad L_1 = -\frac{\partial}{\partial x} (\rho_1 V_{1x}^B) \Big|_0, \quad L_2 = -\frac{\partial}{\partial x} (\pi_{xx}^B) \Big|_0$$

$$L_3 = -\frac{\partial}{\partial x} \left(u \pi_{xx}^B + h_x^B + \frac{5}{2} p_1 \left(1 - \frac{m_1}{m_2} \right) V_{1x}^B \right) \Big|_0 \quad (1.2)$$

Задача сначала решается при помощи системы уравнений (1.1). На этом решении вычисляются правые части в (1.2), затем задача решается при помощи системы (1.2) при тех же граничных условиях. Используются обозначения [7]: ρ – массовая плотность; u – среднемассовая скорость; $p = nkT$; $\rho_i = n_i m_i$; m_i, n_i – масса молекулы и числовая плотность i -ого сорта, $i = 1, 2$. Опуская слагаемые с верхним индексом A , получаем уравнения Навье–Стокса, когда диффузионная скорость, напряжение, приведенный тепловой поток равны

$$V_{1x}^{(1)} = -\frac{m_2 n}{x_1 \rho} D_{12} \left(\frac{\partial x_1}{\partial x} + k_p \frac{\partial \ln p}{\partial x} + k_T \frac{\partial \ln T}{\partial x} \right), \quad k_p = x_1 x_2 (m_2 - m_1) \frac{n}{\rho}$$

$$\pi_{xx}^{(1)} = -\frac{4}{3} \eta \frac{\partial u}{\partial x}, \quad h_x^{(1)} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + p \frac{\rho}{\rho_2} k_T V_{1x}^{(1)}, \quad x_i = \frac{n_i}{n} \quad (1.3)$$

В (1.3) $D_{12}, \eta, \lambda, k_T$ – коэффициенты бинарной диффузии, вязкости и теплопроводности, термодиффузионное отношение.

Ранее [7] приведены общие выражения для барнеттовых коэффициентов переноса, здесь приведем “рабочие” формулы для них [5]. Барнеттовы вклады в напряжение таковы

$$\pi_{xx}^A = \xi u'^2, \quad \xi = \sum \frac{8 \eta_i^2}{9 p_i} (2 - \partial_T \eta_i) \quad (1.4)$$

$$\pi_{xx}^B = \frac{2}{3} \left\{ -\xi_2 \left(\frac{p'}{\rho} \right)' + \xi_4 T''' + \xi_5 T''^2 + \xi_6 p' T'' + \xi_7 d'_{1x} + \right.$$

$$\left. + (\xi_8 x'_1 + \xi_9 d'_{1x}) T'' + (\xi_{10} p' + \xi_{11} x'_1 + \delta \xi_{12}^* d'_{1x}) d'_{1x} \right\} \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned}
\xi_2 &= \sum \frac{2\eta_i^2}{p_i}, \quad \xi_3 = 4\xi_2, \quad \xi_4 = \sum \frac{4\eta_i}{5p_i}\psi_i, \quad \psi_i = \lambda'_i + \frac{5}{2}\omega_i D_T \\
\xi_5 &= \sum \frac{4\eta_i}{5p_i} \frac{\partial \psi_i}{\partial T}, \quad \xi_6 = -\sum \frac{2\rho_i \eta_i}{\rho p_i T} \omega_i D_T, \quad \xi_7 = \sum 2\eta_i \chi_i \\
\xi_8 &= \sum \frac{8\eta_i}{6p_i} \frac{\partial \psi_i}{\partial x_1}, \quad \xi_9 = \sum \frac{2\eta_i}{T} \frac{\partial (T\chi_i)}{\partial T}, \quad \chi_i = \frac{\omega_i}{kn_i} D_{12} - \frac{\delta\gamma_i}{n} \\
\xi_{10} &= -\sum \frac{2m_i \eta_i}{\rho k p_i} \omega_i D_{12}, \quad \xi_{11} = \sum \frac{4\eta_i}{n_i} \frac{\partial (n_i \chi_i)}{\partial x_1}
\end{aligned} \tag{1.6}$$

Величина $\delta\xi_{12}^*$ вычисляется по формуле (4.4) работы [9], D_T – коэффициент термодиффузии, λ'_i – парциальный коэффициент теплопроводности компонента i [5]. В формулах (1.4), (1.5), (1.7) штрихи над u , T , p , ρ , x_1 , d_{1x} означают частные производные по x .

Барнеттовы вклады в векторные переносные свойства запишем так

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} h_x^A \\ V_{1x}^A \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Phi_1^h \\ \Phi_1^v \end{pmatrix} u' T' \\
\begin{pmatrix} h_x^B \\ V_{1x}^B \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Phi_2^h + \delta\gamma_9^* \\ \Phi_2^v \end{pmatrix} u' x'_1 + \begin{pmatrix} \Phi_3^v \\ \Phi_3^v \end{pmatrix} u'' + \begin{pmatrix} \Phi_4^h + \frac{k_p}{p} \delta\gamma_9^* \\ \Phi_4^v \end{pmatrix} u' p'
\end{aligned} \tag{1.7}$$

В отличие от (1.18), (1.19) [7] слагаемые с $u' x'_1$ помещены в правые части второго и четвертого уравнения (1.2) в силу их слабого влияния на решение. Коэффициент $\delta\gamma_9^*$ рассчитывается по формуле (4.4) работы [4]. Входящие в (1.7) коэффициенты даются формулами

$$\begin{aligned}
\Phi_1^h &= \sum \frac{\Omega_i}{4T} \left\{ \lambda_i'^2 \beta_i + \frac{5}{2} (\omega_i D_T)^2 (3 - 7\partial_T D_T) - \frac{4k\eta_i}{m_i} \left[\lambda_i' \partial_T (T^{7/2} \eta_i) + \omega_i D_T \left(\frac{5}{2} \partial_T \eta_i + \frac{m_i \lambda_i'}{k\eta_i} \right) \right] \right\} \\
\Phi_2^h &= \sum \Omega_i \left\{ \omega_i D_{12} \lambda_i' + \frac{k}{m_i} \frac{\partial \eta_i}{\partial x_1} (2\lambda_i' + 5\omega_i D_T) + \frac{5}{8} \omega_i^2 D_T D_{12} (3 - 2\partial_T D_{12}) - \frac{5\Theta_i \beta_i \lambda_i'}{8m_i} \right\} \\
\Phi_3^h &= \sum \frac{\Omega_i}{2} \left\{ -\lambda_i'^2 - \frac{5}{2} (\omega_i D_T)^2 + \frac{2k\eta_i}{m_i} \left(\lambda_i' + \frac{5}{2} \omega_i D_T \right) + \frac{25}{4} k_p \frac{m_i}{k} (\Theta_i \lambda_i' - \omega_i^2 D_T D_{12}) \right\} \\
\Phi_4^h &= \sum \Omega_i \left\{ -\frac{\eta_i \lambda_i'}{\rho T} + \left[\omega_i D_{12} \lambda_i' + \frac{5}{8} \omega_i^2 D_T D_{12} (15 - 2\partial_T D_{12}) - \frac{5}{8} \Theta_i \lambda_i' (83 - 10\partial_T \delta\gamma_i) \right] \frac{k_p}{p} \right\} \\
\Phi_1^v &= \sum \frac{\Psi_i}{T} \left\{ -\Theta_i \lambda_i' \beta_i + \omega_i^2 D_{12} D_T (3 - 7\partial_T D_T) - \frac{4k\eta_i}{m_i} \left(\Theta_i \left[\partial_T (T^{7/2} \eta_i) + \frac{\omega_i D_T}{k\eta_i} \right] - \omega_i D_{12} \partial_T \eta_i \right) \right\}
\end{aligned} \tag{1.8}$$

$$\Phi_2^V = \sum \Psi_i \left\{ (\omega_i D_{12})^2 (3 - 2\partial_T D_{12}) + \frac{1}{2} \Theta_i^2 (23 - 10\partial_T \delta\gamma_i) + \frac{8k\partial\eta_i}{m_i \partial x_1} (\omega_i D_{12} - \Theta_i) - 4\Theta_i \omega_i D_{12} \right\}$$

$$\Phi_3^V = \sum 2\Psi_i \left\{ \Theta_i \lambda_i' - \omega_i^2 D_{12} D_T + \frac{2k\eta_i}{m_i} (\omega_i D_{12} - \Theta_i) - \frac{5}{2} k_p \left[(\omega_i D_{12})^2 + \frac{5}{2} \Theta_i^2 \right] \right\} \quad (1.9)$$

$$\Phi_4^V = \sum \Psi_i \left\{ -\frac{4\Theta_i \eta_i}{T\rho} + \left[(\omega_i D_{12})^2 (15 - 2\partial_T D_{12}) - 4k\delta\gamma_i \omega_i D_{12} + \Theta_i^2 \left(\frac{83}{2} - 5\partial_T \delta\gamma_i \right) \right] \frac{k_p}{p} \right\}$$

$$\Psi_i = \frac{\rho_2 m_i}{3k^2 p_i \rho n}, \quad \Omega_i = \frac{8m_i}{15k^2 n_i}, \quad \Theta_i = kx_i \delta\gamma_i, \quad \beta_i = \frac{23}{5} - 2\partial_T \lambda_i'$$

Входящие в правые части выражений (1.4), (1.6), (1.8), (1.9) величины определены в [5]. Символ Σ означает суммирование по i от 1 до 2, оператор $\partial_T N = \partial \ln N / \partial \ln T$.

2. Моделирование взаимодействия молекул. Как и в [7], в методе прямого статистического моделирования использована VSS-модель взаимодействия одноатомных частиц ("мягкие" упругие сферы переменного диаметра d_{ij} [20, 21]). Предполагается, что межмолекулярный потенциал степенной

$$U_{ij} = e_{ij}^* r^{-v_{ij}} \quad (2.1)$$

где r – расстояние между частицами, вектор относительной скорости после столкновения равномерно распределен по телесному углу 4π (как и в случае молекул – упругих сфер). Диаметр "псевдосферы" d_{ij} равен минимальному r при лобовом столкновении

$$d_{ij} = \pi \left(\frac{2e_{ij}^*}{m_{ij}} \right)^{1/v_{ij}} g^{-2/v_{ij}}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad (2.2)$$

где g – модуль относительной скорости сталкивающихся частиц. Угол отклонения относительной скорости χ_{ij} зависит от d_{ij} и прицельного расстояния b_{ij}

$$\cos \left(\frac{\chi_{ij}}{2} \right) = \left(\frac{b_{ij}}{d_{ij}} \right)^{1/\alpha_{ij}} \quad (2.3)$$

В случае молекул – упругих сфер эмпирический параметр $\alpha_{ij} = 1$. Параметры VSS-модели $N_{ij} = (e_{ij}^*, v_{ij}, \alpha_{ij})$ постоянны.

С учетом (2.1)–(2.3) эффективные сечения рассеивания (Ω – интегралы), через которые выражаются коэффициенты переноса [22], запишутся в виде

$$\Omega_{ij}^{(l,r)} = \left(\frac{\pi kT}{2m_{ij}} \right)^{1/2} \left(\frac{e_{ij}^*}{kT} \right)^{2/v_{ij}} \Gamma \left(r + 2 - \frac{2}{v_{ij}} \right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-2)^m l(l-1)\dots(l-m)}{(\alpha_{ij}+1)(\alpha_{ij}+2)\dots(\alpha_{ij}+1+m)} \quad (2.4)$$

Здесь Γ – гамма-функция. С помощью (2.4) находим формулы для отношений приведенных Ω -интегралов [22]

$$A_{ij}^* = \left(1 - \frac{2}{3v_{ij}} \right) \frac{3\alpha_{ij}}{2 + \alpha_{ij}}, \quad B_{ij}^* = 1 + \frac{4}{3v_{ij}} (v_{ij} - 1), \quad C_{ij}^* = 1 - \frac{2}{3v_{ij}}$$

Для простых газов, составляющих смеси, параметры $N_{ii} \equiv N_i$ находятся при помощи экспериментальных значений коэффициентов вязкости и самодиффузии при не-

которой характерной температурой T_r и показателя $s_i = 1/2 + 2/v_i$ степенной зависимости вязкости от температуры [22]. При $i \neq j$ $N_{ij} \equiv N_{12}$, показатель v_{12} берется из опыта либо приравнивается величине $1/2(v_1 + v_2)$. Для определения двух оставшихся параметров используется эмпирическое значение коэффициента бинарной диффузии при $T = T_r$ и вводится понятие эффективного диаметра σ . Последний определяется приравниванием найденного в рамках VSS-модели выражения для средней длины свободного пробега частиц в покоящемся газе, аналогичному выражению в случае молекул – упругих сфер

$$l = \sum_{i=1}^2 x_i \left\{ \sum_{j=1}^2 \left(\frac{m_{ij}}{\pi \sigma_{ij}^2 n_j m_i} \right)^{1/2} \right\}^{-1}$$

Тогда [20, 21]

$$\sigma_{ij}^2 = \pi \left(\frac{e_{ij}^*}{kT} \right)^{2/v_{ij}} \Gamma \left(2 - \frac{2}{v_{ij}} \right)$$

Искомую связь дает равенство $\sigma_{12} = 1/2(\sigma_1 + \sigma_2)$ при $T = T_r$. Эффективный диаметр зависит от T .

В [20] приведены N_{ij} для различных бинарных смесей, в том числе и для смесей инертных газов. Последние использованы при получении приведенных ниже результатов.

Степень приближенности VSS-модели усиливается ограниченностью необходимой базы экспериментальных данных по температуре. Это особенно значимо для задачи о структуре сильной ударной волны. При принятом ниже значении $T(-\infty) = 100$ К уже для числа Маха набегающего потока $M = 5$ температура в волне значительно выше комнатной, тем более при $M = 11$. В силу сказанного приведенные ниже результаты носят скорее качественный, нежели количественный характер.

3. Результаты расчетов. Задача решалась при следующих условиях перед волной ($x = -\infty$): $M = 4$ и 11 ; $T = 100$ К; $n_1 = n_2$ или $\rho_1 = \rho_2$ (т.е. $x_1(-\infty) = 1/2$ или $c_1(-\infty) = 1/2$, где $c_1 = \rho_1/\rho$). Нижними индексами 1, 2 обозначены параметры легкого и тяжелого компонентов соответственно. Для смесей Ne–Ar, He–Ne, He–Ar, He–Xe отношения масс частиц смеси $m_2/m_1 \approx 2, 5, 10, 30$. Применяются обозначения [7], в частности

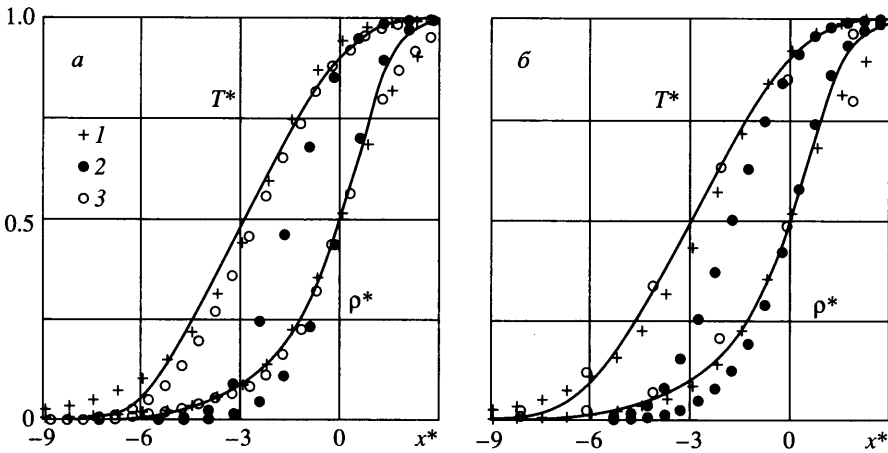
$$\rho^* = \frac{\rho(x^*) - \rho(-\infty)}{\rho(\infty) - \rho(-\infty)}, \quad T^* = \frac{T(x^*) - T(-\infty)}{T(\infty) - T(-\infty)}$$

$$x_i^* = \frac{x_i(x^*) - x_i(-\infty)}{x_i(\infty) - x_i(-\infty)}, \quad x^* = \frac{x}{l_0}$$

где l_0 – средняя длина свободного пробега частиц смеси перед волной.

Расчетные методики изложены ранее [7]. Подчеркнем, что решения уравнений Барнетта проведены на грубой сетке [7].

Результаты расчета профилей массовой плотности ($\rho \sim 1/u$) и температуры подтверждают, в основном, выводы [7]. При $m_2/m_1 \sim 1$ (фиг. 1) барнеттовы модели кардинально уточняют навье-стоксову модель, так как результаты значительно ближе к результатам расчетов методом прямого статистического моделирования. Результаты решения системы неоднородных усеченных уравнений Барнетта (1.2) близки к результатам решения полной системы уравнений Барнетта и здесь не приводятся. Точность наиболее простой барнеттовой модели – системы усеченных уравнений Барнетта (1.1) – существенно хуже лишь для значений ρ^* , близких к единице. Однако в случае задач гиперзвукового обтекания тел интерес к барнеттовым моделям обусловлен тем, что они уточняют профиль температуры в передней части ударного слоя; математические свойства модели (1.1) принципиально ближе к свойствам сис-



Фиг. 1. Профили приведенных температуры и массовой плотности при $M = 5$, $x_1(-\infty) = 1/2$: а) – Ne–Ar; б) – Ne–Ne. Сплошные кривые – усеченные уравнения Барнетта; 1 – метод прямого статистического моделирования; 2 – уравнения Навье–Стокса; 3 – уравнения Барнетта

темы уравнений Навье–Стокса по сравнению с остальными барнеттовыми моделями [7]. Эти факты вызывают преимущественный интерес именно к системе усеченных уравнений Барнетта (1.1).

С ростом m_2/m_1 барнеттовы модели теряют точность (по сравнению с навье-стоксовой), завышая значения T^* в основной части структуры ударной волны (фиг. 2а). В гораздо меньшей мере это свойственно усеченным уравнениям Барнетта [7]. По этой причине на фиг. 2 приведены результаты только этой модели.

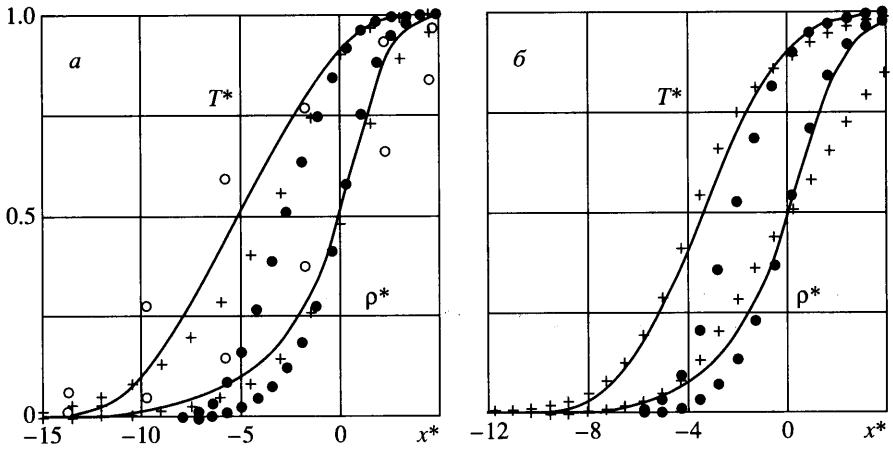
Область применимости рассматриваемых моделей определяется также законами межмолекулярного взаимодействия [7] и условиями перед волной. Эта область для модели (1.1) шире в случае $c_1(-\infty) = 1/2$ по сравнению со случаем $x_1(-\infty) = 1/2$ (фиг. 2). Однако при $m_2/m_1 \approx 30$ (фиг. 3) она не отражает качественную особенность поведения профилей T^* , ρ^* , даваемых методом прямого статистического моделирования: резкое изменение dT^*/dx^* , $d\rho^*/dx^*$ при $x^* \approx -5$. Эта особенность содержится в аналогичных результатах [20]. Она объясняется следующим (фиг. 4): если при $m_2/m_1 \approx 2$ экстремумы зависимостей от x^* отношений средних скоростей u_2/u_1 и температур T_2/T_1 и парциальных напряжений π_i компонентов смеси расположены вблизи $x^* = 0$, то при $m_2/m_1 \approx 30$ – вблизи $x^* = -5$ (фиг. 4). Средние скорости u_i , температуры T_i , безразмерные напряжения π_i компонентов смеси определяются формулами

$$u_i = \frac{1}{n_i} \int \xi_{ix} f_i d\xi_i, \quad T_i = \frac{m_i}{3kn_i} \int c_{ix}^2 f_i d\xi_i, \quad \pi_i = \frac{m_i}{p(-\infty)} \int \left(c_{ix}^2 - \frac{1}{3} c_i^2 \right) f_i d\xi_i$$

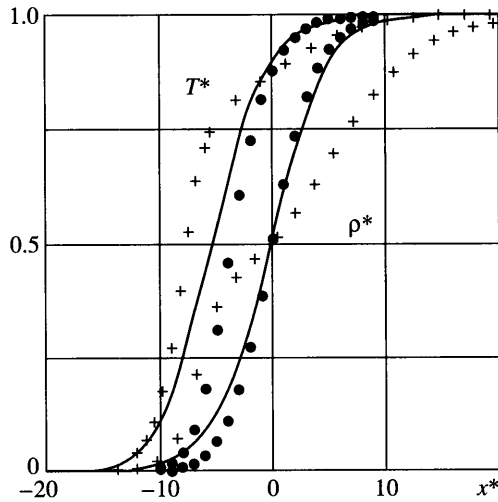
$$c_{ix} = \xi_{ix} - u_i, \quad c_i^2 = c_{ix}^2 + \xi_{iy}^2 + \xi_{iz}^2$$

Здесь ξ_i – вектор скорости частицы i -ого компонента ($i = 1, 2$); f_i – функция распределения; y, z – координаты, перпендикулярные к x .

Данные на фиг. 1–4 получены при $M = 5$. Увеличение M до 11 не изменяет сделанных выводов. К условиям перед волной наиболее чувствителен профиль температуры (фиг. 5, на которой приведены результаты расчетов при помощи модели (1.1)).



Фиг. 2. Профили приведенных температуры и массовой плотности смеси He–Ag при $M = 5$: а) $-c_1(-\infty) = 1/2$; б) $-c_1(-\infty) = 1/2$. Обозначения те же, что и на фиг. 1

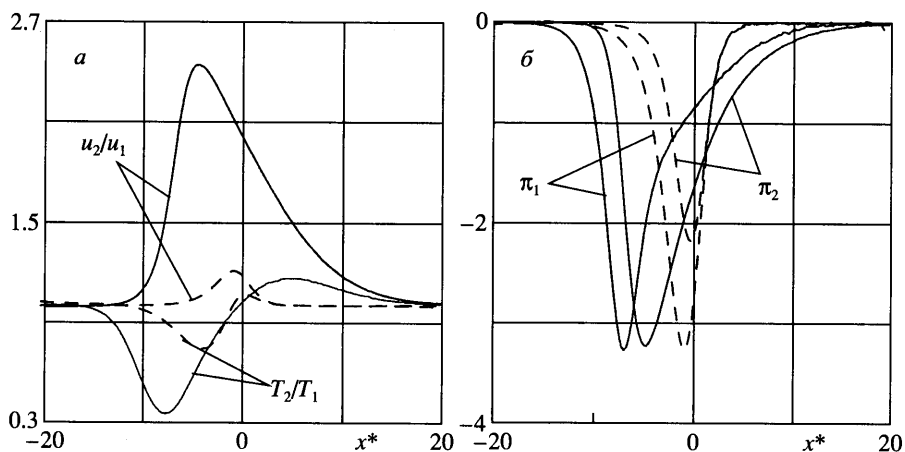


Фиг. 3. Профили приведенных температуры и массовой плотности смеси He–He при $M = 5$, $c_1(-\infty) = 1/2$. Обозначения те же, что на фиг. 1

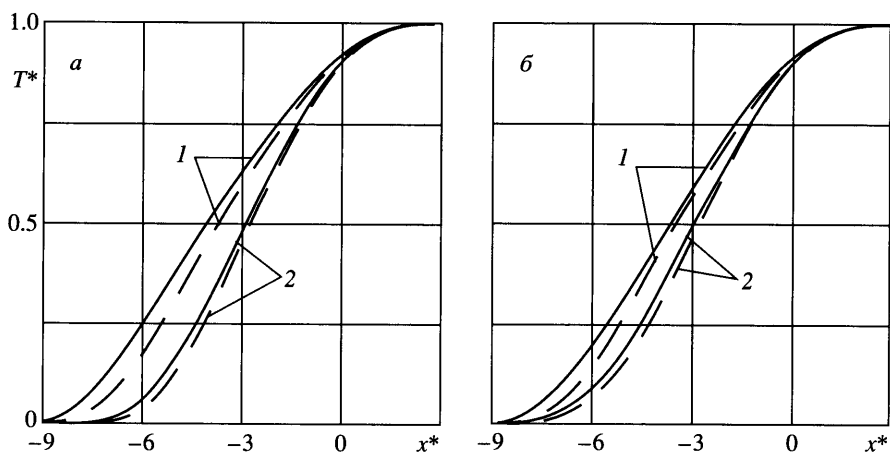
В отличие от T и ρ молярные концентрации x_i компонентов изменяются слабо, область применимости барнеттовых моделей по m_2/m_1 значительно меньше [7]. При $m_2/m_1 \approx 2$ они уточняют навье-стоксову модель (фиг. 6), но при $m_2/m_1 > 5$ теряют силу (фиг. 7, при $x_1(-\infty) = 1/2$ точность барнеттовых моделей гораздо ниже).

Отметим, что внутри волны значения молярных долей x_i выше или ниже их значений перед волной $x_i(-\infty)$. В соответствии с этим x_i^* больше или меньше нуля.

Как подчеркивалось ранее [7], данные макромодели основаны на одножидкостном представлении, т.е. на предположении, что u_2/u_1 , T_2/T_1 достаточно слабо отли-



Фиг. 4. Профили отношений средних скоростей и температур (а) и напряжений (б) компонентов при $M = 5$, $c_1(-\infty) = 1/2$. Сплошные кривые – смесь Ne–Xe; штриховые – Ne–Ar



Фиг. 5. Профили приведенной температуры. а) – Ne–Ar; б) – Ne–Ne. Сплошные кривые – $c_1(-\infty) = 1/2$; штриховые – $c_1(-\infty) = 1/2$. 1 – $M = 11$; 2 – $M = 5$

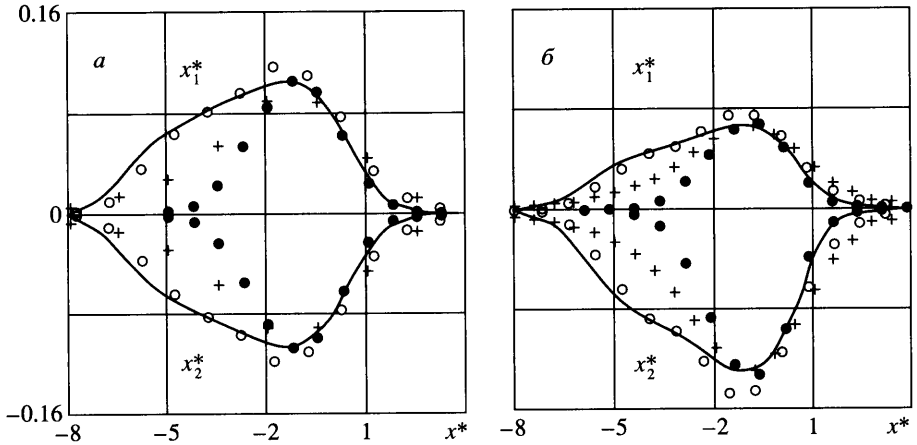
чаются от единицы. Однако, согласно проведенным расчетам методом прямого статистического моделирования для смесей Ne–Ar, Ne–Ne, Ne–Ar, Ne–Xe, соответственно имеем

$$\max \frac{u_2}{u_1} = 1.20(1.20), 1.55(1.70), 1.76(2.00), 1.82(2.44)$$

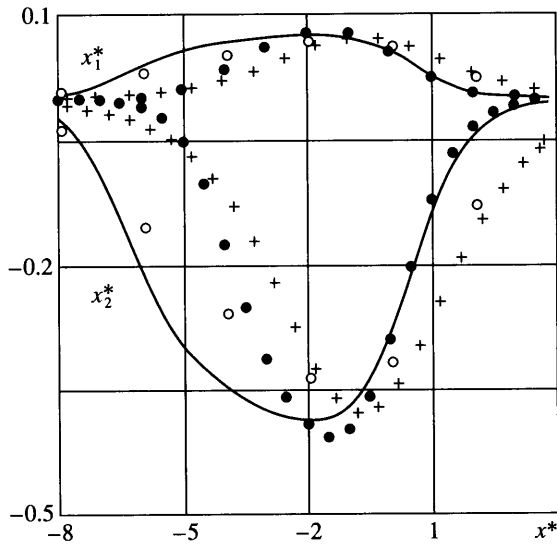
$$\max \frac{T_1}{T_2} = 1.33(1.33), 1.73(1.85), 2.00(2.17), 2.17(2.86)$$

Первыми числами даются значения указанных величин внутри ударной волны при $x_1(-\infty) = 1/2$, вторыми (в скобках) – при $c_1(-\infty) = 1/2$, $M = 5$.

Заключение. При отношении масс частиц бинарной смеси инертных газов $m_2/m_1 \approx 5$ барнеттовы модели значительно лучше согласуются с результатами расчетов про-



Фиг. 6. Профили приведенных числовых плотностей смеси Ne-Ar при $M = 5$: а) $x_1(-\infty) = 1/2$; б) $c_1(-\infty) = 1/2$. Обозначения те же, что на фиг. 1



Фиг. 7. Профили приведенных числовых плотностей смеси He-Ne при $M = 5$ и $c_1(-\infty) = 1/2$. Обозначения те же, что на фиг. 1

филей T^* , ρ^* методом прямого статистического моделирования, чем уравнения Навье–Стокса. Область применимости моделей зависит от законов межмолекулярного взаимодействия [7] и от условий перед волной. Система усеченных уравнений Барнетта имеет большую область применимости по сравнению с другими барнеттовыми моделями [7], особенно при близких значениях массовых плотностей компонентов перед волной, когда она дает хорошие результаты даже для смеси Ne-Ar ($m_2/m_1 \approx 10$). Область применимости барнеттовых моделей для профилей молярных концентраций значительно более узкая [7]. Использованные здесь и в [7] макромодели основаны на одножидкостном представлении, т.е. в предположении о малости относительных различий средних скоростей u_i и температур T_i компонентов смеси. Однако с

ростом m_2/m_1 отношения u_2/u_1 , T_2/T_1 растут (>2 для смеси He–Xe) и необходим переход к двухжидкостному представлению.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 02-01-00501), программы “Государственная поддержка ведущих научных школ” (НШ – 1984.2003.1) и Министерства образования РФ (Е02-40-52).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галкин В.С., Шавалиев М.Ш. Газодинамические уравнения высших приближений метода Чепмена–Энскога // Изв. РАН. МЖГ. 1998. № 4. С. 3–28.
2. Бузькин О.Г., Галкин В.С. О модификациях газодинамических уравнений высших приближений метода Чепмена–Энскога // Изв. РАН. МЖГ. 2001. № 3. С. 185–199.
3. Cheng H.K., Emanuel G. Perspective on hypersonic nonequilibrium flow // AIAA Journal. 1995. V. 33. № 3. P. 386–400.
4. Галкин В.С. Уравнения Барнетта для многокомпонентных смесей многоатомных газов // ПММ. 2000. Т. 64. Вып. 4. С. 590–604.
5. Галкин В.С., Жаров В.А. О переносных свойствах газов в приближении Барнетта // ПММ. 2002. Т. 66. Вып. 3. С. 434–447.
6. Галкин В.С., Жаров В.А. Решение задач о распространении звука и структуре слабой ударной волны в многоатомном газе при помощи уравнений Барнетта // ПММ. 2001. Т. 65. Вып. 3. С. 467–476.
7. Галкин В.С., Русаков С.В. Барнеттовы модели структуры сильной ударной волны в бинарной смеси одноатомных газов // ПММ. 2003. Т. 67. Вып. 1. С. 65–74.
8. Foch J.D., Ford G.W. The dispersion of sound in monatomic gases // Studies in Statistical Mechanics / Eds J. De Bour and G.E. Uhlenbeck. Amsterdam: North-Holland, 1970. V. 5. P. 103–231.
9. Галкин В.С., Носик В.И. О модификации уравнений Барнетта на примере задачи о распространении звука // Изв. РАН. МЖГ. 1999. № 3. С. 126–133.
10. Hadjiconstantinou N.G., Garsia A.L. Molecular simulations of sound wave propagation in simple gases // Phys. Fluids. 2001. V. 13. № 4. P. 1040–1046.
11. Шавалиев М.Ш. Исследование структуры слабой ударной волны и распространения малых возмущений в смесях газов при помощи уравнений Барнетта // ПММ. 1999. Т. 63. Вып. 3.
12. Erofeev A.I., Friedlander O.G. Macroscopic relations in rarefied shear flows // Rarefied Gas Dynamics: Proc. 22nd Intern. Symp. Eds T.J. Bartel and M.A. Gallis. N. Y. Amer. Instit. Phys. 2001.
13. Галкин В.С. Вырождение рядов Чепмена–Энскога для переносных свойств в случае медленных стационарных течений слаборазреженных газов // Изв. АН СССР. МЖГ. 1988. № 4. С. 157–163.
14. Жданов В.М., Ролдугин В.И. Неравновесная термодинамика и кинетическая теория разреженных газов // Успехи физ. наук. 1998. Т. 168. № 4. С. 407–438.
15. McCourt F.R.W., Beenakker J.J.M., Kohler W.E., Kuscer I. Nonequilibrium Phenomena in Polyatomic Gases. V. 2. Oxford: Clarendon Press, 1991. 350 p.
16. Alexandrov V., Boris A., Freedlander O., Kogan M., Nikolsky Yu., Perminov V. Thermal stress effect and its experimental detection // Rarefied Gas Dynamics: Proc. 20th Intern. Symp. Beijing. Pekin: Univ. Press. 1997. V. 1. P. 79–84.
17. Александров В.Ю. Численное исследование влияния температурных напряжений на нелинейный эффект термомолекулярной разности давлений // Изв. РАН. МЖГ. 2002. № 6.
18. Agarwal R., Yun K.-Y., Balakrishnan R. Beyond Navier-Stokes: Burnett equations for flows in the continuum – transition regime // Phys. Fluids. 2001. V. 13. № 10. P. 3061–3085.
19. Бузькин О.Г., Галкин В.С., Носик В.И. Модификации уравнений Барнетта и задача о структуре ударной волны // Изв. РАН. МЖГ. 1998. № 3. С. 164–176.
20. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 458p.
21. Koura K., Matsumoto H. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lenard–Jones potential // Phys. Fluids. 1991. V. 3. № 10. P. 2459–2465.
22. Ferziger J.I., Kaper H.G. Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. London: North-Holland, 1972 = Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554с.