УДК 533.6.011

Условия возникновения и величина эффекта высокоскоростного перехлёста в ударно-сжатой смеси газов

Кузнецов М.М.*, Кулешова Ю.Д., Решетникова Ю.Г.***, Смотрова Л.В.******

Московский государственный областной университет,

ул. Радио, 10 а, Москва, 105005, Россия

**e-mail: kuznets-omn@yandex.ru*

***e-mail:juliaybogdanova@mail.ru*

****e-mail: gau1972@mail.ru*

*****e-mail: lilysmotrova@mail.ru*

Аннотация

Даны строгая формулировка и строгое обоснование необходимых и достаточных условий высокоскоростной поступательной неравновесности в аналитической бимодальной модели ударной волны для бинарной смеси газов. Этот вид неравновесности наиболее существенно проявляется в так называемом эффекте «перехлёста». В этом эффекте, как показано в численных исследованиях, концентрация пар молекул с большими относительными скоростями по сравнению с их тепловыми внутри фронта ударной волны значительно превосходит её значение в поступательном равновесии за волной. Приведены также аналитические оценки этого эффекта, учитывающие наличие внутренних степеней свободы у молекул тяжелого компонента в рэлеевской смеси газов.

Ключевые слова: кинетический, уравнение, неравновесный, смесь газов, ударная волна.

1. Введение

Изучение процессов, протекающих в ударных волнах, весьма актуально. В большинстве работ, посвященных данной тематике, рассматривается течения однокомпонентных газов [1]. В предыдущих работах авторов [2,3], в которых были сформулированы аналогичные теоремы для однокомпонентного (простого) газа, отмечалось, что распространение их на случай бинарной ударно-сжатой смеси газов сопряжено с преодолением ряда существенных трудностей.

Главной из них является то, что в смесях газов бимодальное распределение по скоростям молекул не может быть безоговорочно применено для расчёта структуры ударной волны, как это делалось в простом газе. Как правило, область применимости классического бимодального распределения Тамма – Мотт-Смита с постоянными параметрами в виде аппроксимационных макроскопических скоростей и кинетических температур групп молекул в сверхзвуковых и дозвуковых «крыльях» этого распределения ограничены малыми значениями концентраций одного из компонентов смеси [4]. Только в этом случае удаётся сохранить все преимущества бимодальной аппроксимации парциальной функции распределения, как и в случае ударных волн в простом газе и получить простое аналитическое решение задачи.

В силу этого получение необходимых и достаточных условий высокоскоростной поступательной неравновесности для произвольных, в общем случае, значений концентрации компонентов смеси газов становится значительно более сложным.

Тем не менее авторами ранее удалось выделить основной масштабный фактор, от которого зависит главный порядок величины рассматриваемого эффекта [2].

В настоящей работе дано обоснование и строгая формулировка необходимых и достаточных условий высокоскоростной поступательной неравновесности для произвольного состава ударно-сжатых смесей газов с бимодальным распределением молекул. Дана так же численная оценка рассматриваемого эффекта в зависимости от определяющих факторов задачи.

2. Теоремы о необходимых и достаточных условиях эффекта «перехлеста» в эволюции функции распределения пар молекул бинарной смеси газов внутри фронта ударной волны

В бинарных смесях газов с функциями распределения для легкого и тяжелого компонентов можно составить три функции распределения пар молекул по модулю относительной скорости [5]. Этими функциями являются: $G^{(ll)}$ - функция распределения пар внутри легкого компонента, вторая - $G^{(lh)}$ - функция пар легкий-тежелый компонент, третья - $G^{(hh)}$ – функция пар тяжелый - тяжелый компонент. Усреднение данных функций, умноженных на то или иное сечение химической реакции (зависящей так же от модуля относительной скорости) дает константу скорости этой реакции.

Функции пар молекул получаются на основе интегрирования произведения двух одночастичных функций для компонентов бинарной смеси. Для формулировки искомых теорем, используется аппроксимация Тамм-Мотт-Смита. Согласно этой аппроксимации каждая из одночастичных функций представляет из себя линейную комбинацию (суперпозицию) «холодного»/«горячего» максвелловского распределения в ударной волне, на входе («холодного»), на выходе («горячего») соответственно.

Аналитические исследования, проведенные к настоящему моменту, показали, что постоянство по толщине ударной волны вспомогательных макроскопических параметров, играющих роль температуры и скорости в «холодном» и «горячем» крыле Тамм – Мотт-Смитовской аппроксимации в общем случае невозможно в рамках данной аппроксимации [4]. Исключением является случай малой концентрации «легкого» (газ Лоренца) или «тяжелого» (газ Рэлея) компонента, когда предположение о постоянстве частичных макроскоростей и концентраций, входящих в «холодные»/ «горячие» части Тамм – Мотт-Смитовской аппроксимации функции распределения каждого компонента остается справедливым (при исследовании структуры ударной волны).

Заметим, что в нашем исследовании эффекта высокоскоростного перехлеста функции распределения пар молекул интересен как раз случай не только малых значений концентраций тяжелого компонента по сравнению с легким, но также и его еще более частный вариант, когда m_h намного превосходит m_l. Именно в этих условиях, как показывают численные исследования, эффект перехлеста оказывается наиболее сильным [5].

Возвращаясь к общему случаю произвольных соотношений концентраций компонентов бинарной смеси и их масс, заметим, что в настоящее время, в численных аналитических исследованиях структуры ударной волны в бинарных смесях на основе распределения Тамм – Мотт-Смита наиболее часто используются три схемы. Общей для всех трех схем является переменность весовых множителей в виде концентраций «холодного» и «горячего» крыла Тамм – Мотт-Смитовского распределения для каждого компонента смеси. Переменность же остальных двух аппроксимационных параметров: макроскоростей пучков молекул и их кинетических температур различна в этих трех схемах.

В наиболее общем случае переменными по толщине волны являются аппроксимационные кинетические температуры и скорости как в «холодном» так и в «горячем» крыльях одночастичных функций распределения.

Однако, из-за большого числа искомых неизвестных макропараметров (в общем случае, не менее восьми) иногда задачу существенно упрощают, сохраняя переменность минимального числа аппроксимационных макропараметров: концентрации, макроскорости и кинетической температуры только в «горячем» или только в «холодном» крыле Тамм – Мотт-Смитовского распределения.

Рассматриваемые теоремы о необходимых и достаточных условиях эффекта высокоскоростного перехлеста относятся к случаю переменности аппроксимационных макропараметров только в «горячем» крыле бимодальных распределений смесей газов, что и составляет главную трудность при их формулировке. Численная же реализация соответствующего эффекта высокоскоростного перехлеста рассматривается для частного случая малых концентраций тяжелого компонента (рэлеевская смесь), где этот эффект наиболее заметен.

Для удобного сопоставления рассматриваемых теорем в случаях простого газа и бинарной смеси приведем краткую сводку результатов, полученных ранее для простого газа [2].

2.1. Простой (однокомпонентный) газ.

Воспользуемся аппроксимацией Тамма – Мотт-Смита для одночастичной функции распределения $F(\chi,c)$ и функции распределения пар молекул $\tilde{G}(\chi,g)$,

$$\boldsymbol{F}(\chi,\mathrm{c}) = \boldsymbol{\chi F_0(c)} + \boldsymbol{(1-\chi)F_1(c)} \tag{1}$$

$$\tilde{G} = \chi^2\widetilde{G_0} + 2\chi(1-\chi)\widetilde{G_{01}} + (1-\chi)^2 \tag{2}$$

где $$\chi = \chi = \frac{n_0}{n_0+n_1} \tag{3}$$

где $\tilde{G} = \frac{G}{G_1},\ \tilde{G} = \frac{G_0}{G_1},\ \widetilde{G_1} = 1,\ \widetilde{G_{01}} = \frac{G_{01}}{G_1}$, $G_0,\ G_1,\ G_{01}$ - соответственно «холодная» (перед волной), «горячая» (за волной) и «перекрестная» моды распределений;

F_0, F_1 - «холодное» и «горячее» распределения перед и за волной;

$$F_i(c) = \left(\frac{m}{2\pi kT_i}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m(c-u_i)^2}{2kT_i}\right] \tag{4}$$

m – масса молекулы; u_i, T_i, n_i – вспомогательные аппроксимационные скорости, температуры и концентрации в холодном (i=0) и горячем крыле Тамма-Мотт-Смитовского распределения (i=1) волной, k - постоянная Больцмана, (c-u_i) - собственная скорость молекулы. Параметры n_i - переменны по ширине ударной волны, u_i, T_i – совпадают с их значениями в состояниях равновесия перед (i=0) и за волной (i=1).

Распределения G_0 и G_1 являются максвелловскими функциями по относительным скоростям g :

$$G_i(g) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{kT_i}\right)^{3/2} g^2 \exp\left[-\frac{mg^2}{4kT_i}\right] \tag{5}$$

Перекрестная мода имеет вид [6]:

$$G_{01}(g) = \left[\frac{m}{2\pi k(T_0+T_1)}\right]^{1/2} \frac{g}{u}\left\{\exp\left[-\frac{m(g-u)^2}{2k(T_0+T_1)}\right] - \exp\left[-\frac{m(g+u)^2}{(T_0+T_1)}\right]\right\} \tag{6}$$

Макроскопические параметры, входящие в соотношения (1) - (3), связаны законами сохранения потоков массы, импульса и энергии в сечениях i = 0 (перед волной) и i = 1 (за волной):

$$\frac{T_1}{T_0} = 1 + m_0(1-\varepsilon_0^2)$$

$$\frac{n_0}{n_1} = \frac{u_1}{u_0} = \varepsilon_0 = \varepsilon(1+m_0^{-1})$$

$$u = u_0 - u_1 = u_0(1-\varepsilon_0)$$

Здесь $m_0 = \varepsilon(1-\varepsilon)^{-1}M_0^2$, $\varepsilon = \frac{\varkappa-1}{\varkappa+1}$, $\varkappa$ - отношение удельных теплоемкостей при постоянном давлении c_p и объеме c_v , $\varkappa = \frac{c_p}{c_v} = (1+\varepsilon)(1-\varepsilon)^{-1}$, M_0 - число Маха перед волной, $M_0 = \frac{u_0}{a_0}$, a_0 - скорость звука перед волной, $a_0 = \sqrt{\frac{\varkappa kT_0}{m}}$.

Выражение (3) позволяет сформулировать следующие теоремы о «перехлесте» сверхскоростной поступательной неравновесности в бимодальной ударной волне.

Теорема 1. (Необходимость и достаточность) Для высокоскоростного превышения («перехлеста», $\tilde{G} > 1$) величины поступательно неравновесной функции распределения пар молекул внутри фронта ударной волны ($0 \le \chi \le \chi_b \le 1$) над соответствующей равновесной величиной за волной *необходимо и достаточно, чтобы величина перекрестной моды $\tilde{G}_{01}$ удовлетворяла соотношению*

$$2\tilde{G}_{01} > 1 + \tilde{G}_0 \tag{7}$$

Теорема 2. (о максимуме относительного «перехлеста» $(\widetilde{G_{max}} - 1)$) Величина сверхскоростного превышения ($\tilde{G} > 1$) в бимодальном однокомпонентном газе при выполнении соотношения (4) достигает своего максимального значения

$$\left(\tilde{G} - 1\right)_{max} = \left(2\tilde{G}_{01} - 1 - \tilde{G}_1\right)\left(\frac{\chi_b}{2}\right)^2 \tag{8}$$

здесь χ_b – значение переменной χ, при котором внутри волны $(0 \le \chi \le 1)$ «обнуляется» эффект перехлеста как и в состоянии «горячего» равновесия за волной при $\chi=0$ [2].

$$\chi_b = 2\left(\widetilde{G_{01}} - 1\right)\left(2\widetilde{G_{01}} - 1 - \widetilde{G_0}\right)^{-1} \tag{9}$$

Справедливость утверждений обеих теорем непосредственно следует из выражения (2), рассматриваемого как квадратное уравнение относительно параметра χ и анализа его дискриминанта на положительную определенность.

2.2. Бинарная смесь газа.

Для обобщения предыдущих результатов, полученных для простого газа, на случай смеси газов соотношение (2) удобно записать, используя значения переменной $\chi = \chi_b$ в следующем виде:

$$\left(\tilde{G}-1\right)=\chi\left(2\widetilde{G_{01}}-1-\widetilde{G_0}\right)(\chi_b-\chi) \qquad (10)$$

Видно, что в интервале ($0\leq\chi\leq\chi_b\leq1$) условие (7) и эффект перехлеста $\left(\tilde{G}-1\right)>0$ следует друг из друга.

Рассмотренные выше теоремы о необходимых и достаточных условиях эффекта высокоскоростного перехлеста в простом газе переносятся, практически дословно) на случай бинарной смеси, когда переменными по ширине ударной волны являются все вспомогательные параметры u_1, T_1, n_1 в «горячем» крыле Тамм–Мотт-Смиттовского распределения. В «холодном» же крыле этого распределения переменной величиной является только концентрация молекул n_0. Далее, для перехода к смеси газов, остаётся только произвести надлежащую замену формул.

Так, формулы (1), (2), (3) заменяются, соответственно, на следующие:

$$\boldsymbol{F}^{(\gamma)}=\boldsymbol{\chi}^{(\gamma)}\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{0}}^{(\gamma)}+\left(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{\chi}^{(\gamma)}\right)\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{1}}^{(\gamma)} \qquad (11)$$

$$\tilde{G}^{(\alpha,\beta)}=\boldsymbol{\chi}^{(\boldsymbol{\alpha})}\chi^{(\beta)}\tilde{G}_0^{(\alpha,\beta)}+\chi^{(\alpha)}\left(1-\chi^{(\beta)}\right)\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)}+\left(1-\chi^{(\alpha)}\right)\chi^{(\beta)}\tilde{G}_{10}^{(\alpha,\beta)}+(1-\chi^{(\alpha)}\left(1-\chi^{(\beta)}\right)\tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)} \qquad (12)$$

$$\chi^{(\gamma)} = \frac{n_0^{(\gamma)}}{n_0^{(\gamma)} + n_1^{(\gamma)}} \tag{13}$$

Здесь: γ – сорт молекул, γ=α,β (в дальнейшем под сортом α будем понимать легкий газ, причем α≡l, под β – тяжелый газ, β≡h.

Функции $G_0^{(\alpha,\beta)}, G_1^{(\alpha,\beta)}$, $G_{01}^{(\alpha,\beta,)}$, $G_{10}^{(\alpha,\beta,)}$ совпадают в простом газе с функциями G_0, G_1, G_{01}, G_{10}, при $\alpha = \beta$, $\widetilde{G^{(\alpha,\beta)}} = \frac{G^{(\alpha,\beta)}}{G_1^{(\alpha,\beta)}}$

Аналогично формулу (10) следует заменить на:

$$\tilde{G}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)} = \eta^{(\alpha)}\left(1 - \eta^{(\alpha)}\right)\left(\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} + \tilde{G}_{\mathbf{10}}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_0^{(\alpha,\beta)}\right)\chi \cdot$$

$$\{-\chi + \chi_b\} \tag{14}$$

где $\boldsymbol{\chi = \chi^{(\alpha)} + \chi^{(\beta)}, \eta = \frac{\chi^{(\alpha)}}{\chi^{(\alpha)}+\chi^{(\beta)}}}$,

$$\boldsymbol{\chi_b = \frac{\eta^{(\alpha)}(\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)}) + \left(1-\eta^{(\alpha)}\right)(\tilde{G}_{10}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)})}{\eta^{(\alpha)}\left(1-\eta^{(\alpha)}\right)(\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)}) + (\tilde{G}_{10}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)}) + (\tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_0^{(\alpha,\beta)})}}.$$

Заметим, что формула (14) непрерывно переходит в формулу (10), поскольку при переходе от смеси к простому газу будет:

$$\chi^{(\alpha)} = \chi^{(\beta)}, \eta = \tfrac{1}{2}, \quad \tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} = \tilde{G}_{\mathbf{10}}^{(\alpha,\beta)} \equiv \widetilde{G_{01}}, \tilde{G}_0^{(\alpha,\beta)} = \widetilde{G_0}, \tilde{G}_1^{(\alpha,\beta)} = 1.$$

Как упоминалось ранее, в простом газе необходимые и достаточные условия эффекта «перехлеста» следовали из формулы (10). Подобно этому, аналогичные условия в случае смеси газов будут следовать из формулы (14).

Более того, текст теорем 1 и 2 сохраняется прежним, а формулы (7) и (8) заменяются на следующие:

$$\left(\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} + \tilde{G}_{10}^{(\alpha,\beta)}\right) > \left(\tilde{G}_{1}^{(\alpha,\beta)} + \tilde{G}_{0}^{(\alpha,\beta)}\right) \qquad (15)$$

$$(\tilde{G}^{(\alpha,\beta)} - \widetilde{G_1}^{(\alpha,\beta)})_{max} = \eta(1-\eta)(\tilde{G}_{01}^{(\alpha,\beta)} + \tilde{G}_{10}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_{1}^{(\alpha,\beta)} - \tilde{G}_{0}^{(\alpha,\beta)})\frac{\chi_b^2}{4} \qquad (16)$$

Заметим однако, что в случае бимодальной смеси газов эффект перехлеста в ударной волне состоит в выполнении локального неравенства: $\tilde{G}^{(\alpha,\beta)} > \widetilde{G_1}^{(\alpha,\beta)}$, поскольку величина $\widetilde{G_1}^{(\alpha,\beta)}$ зависит от координаты внутри ударной волны. В простом же газе аналогичное неравенство будет следующим: $(\tilde{G}-1)$>0. В общем случае, нельзя быть уверенным в том, что всегда $\widetilde{G_1}^{(\alpha,\beta)} \geq 1$. Однако в рэлеевской смеси газов, когда концентрация легкого компонента $n^{(l)}$ значительно превосходит концентрацию тяжелого компонента $n^{(h)}$ всегда будет $\widetilde{G_1}^{(\alpha,\beta)} = 1$ [4].

Для рэлеевской смеси не трудно рассчитать также максимум эффекта высокоскоростного перехлеста, аналогично случаю простого газа. Например, для максимального значения функция распределения пар тяжелого компонента смеси $\widetilde{G^{(h,h)}}$, когда отношение массы молекулы тяжелого компонента m_h к массе молекулы легкого m_l равно двум, можно составить следующую таблицу.

Таблица 1

Максимум “перехлеста” G_{max} в сверхзвуковом потоке

Gas	A	(A2), без учета колебательных степеней свободы молекулы	(A2), с учетом колебательных степеней свободы молекулы	(A3), с учетом вращательных и колебательных степеней свободы молекул	C_8H_{16}
γ	5/3	7/5	9/7	7/6	22/21

ε	1/4	1/6	1/8	1/13	1/43
$\widetilde{G}_{*,\max} = \widetilde{G^{(h,h)}}$	1,86	2.8	11.7	648/392	$6.48 \cdot 10^{16}$

В этой таблице величина ε задавалась в качестве параметра для молекул газов с различным количеством атомов: одноатомных (A), двухатомных (A_2), трехатомных (A_3), и многоатомных (типа C_8H_{16}). Рассмотрены отдельно случаи $\varepsilon = \frac{1}{6}$ (γ=1,4) и $\varepsilon = \frac{1}{8}$ $\left(\gamma = \frac{9}{7}\right)$, соответствующие отсутствию или наличию возбужденных колебательных степеней свободы у двухатомных газов (A_2). Данные значения параметров γ и ε задавались параметрически. Справедливость такого параметрического задания, т.е. завершенность процессов релаксации внутри фронта ударной волны, показана для вращательных степеней свободы в случаях: (A_2) и (A_3) в работе [7].

Работа поддержана грантом РФФИ №17-07-00-945А.

Библиографический список

1. Рыжов Ю.А., Никитченко Ю.А., Парамонов И.В. Численное исследование гиперзвукового обтекания острой кромки на основе модели Навье-Стокса-Фурье // Труды МАИ. 2012. № 55. URL: http://trudy.mai.ru/published.php?ID=30027

2. Кузнецов М.М., Матвеев С.В., Молоствин Е.В., Решетникова Ю.Г., Смотрова Л.В. Высокоскоростная поступательная неравновесность смеси газов в аналитической модели ударной волны // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т.17. №1. URL: http://chemphys.edu.ru/issuse/2016-17-1/articles/613/

3. Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Смотрова Л.В, Решетникова Ю.Г. О максимуме эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударной волне // Вестник МГОУ. Физика-математика. 2016. № 3. С. 84-95.

4. Oberai M.M. A Mott-Smith distribution to describe the structure of a plane shock wave in binary mixture // Phys Fluids.1966. Vol. 9. P.1634-1678.

5. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Распределение молекулярных скоростей во фронте ударной волны в газовых смесях // Механика жидкости и газа. 1990. № 2. С. 144-150.

6. Куликов С.В., Терновая О.Н., Черешнев С.Л. Специфика поступательной неравновесности во фронте ударной волны в однокомпонентном газе // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 3. С. 340-342.

7. Ching Shen, Zhenhua Hu, Wanquan Wu, Xiaoyan Xu. Shock Waves in Gas Mixtures with Internal Energy Relaxation. Rarefied Gas Dynamics // Proceedings of the 17th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics July 8-14, 1990, Aachen, Germany. P. 247-254.