

УДК 533.7

СТРУКТУРА УДАРНЫХ ВОЛН В ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

Великодный В.Ю., Качармин С. В.

*Институт прикладной механики РАН, г. Москва***Vvelikodny@mail.ru****Аннотация**

На основе решения уравнения Больцмана для газовых смесей обобщенным методом Тамма – Мотт-Смита решена задача о структуре плоской ударной волны в трехкомпонентной газовой смеси с сильно различающимися массами частиц. Получены профили парциальных скоростей, температур, параллельных и поперечных температур, профили тепловых потоков и вязких напряжений, при разных величинах масс компонентов, парциальных концентраций, сечений столкновений, различных моделях потенциала взаимодействия и при числах Маха $M=2 \div 10$. Проведено сравнение с аналогичными расчетами на основе уравнений многотемпературной, многоскоростной газодинамики и методом прямого численного моделирования Монте-Карло. С целью апробации метода, для частного случая – исчезающее малой примеси третьего компонента (двухкомпонентная смесь) проведено сравнение с экспериментальными данными и различными численными методами.

STRUCTURE OF SHOCK WAVES IN THREE COMPONENT GASEOUS MIXTURES

On the base of Boltzmann equation for gaseous mixtures by generalized Tamm-Mott-Smith's method the problem of plane shock wave structure in three component gaseous mixture with essentially different mass of particles is solved. Were received profiles of potential velocities, temperatures, parallel and transverse temperatures. Profiles of heat fluxes and viscous stresses at different values of component's mass, partial concentrations, cross-section of collision, different models of interaction's potential and Mach number in interval $M=2 \div 10$. Comparison with similar calculations on the base of multi temperatures, multi velocity gas – dynamics equations and method of straight numerical Monte-Carlo modeling was conducted. With aims of approbation of presented approach for particular case of vanishingly small third component (two component mixture) was fulfilled comparison with experimental data and variety of calculation methods.

I. Введение.

Задача о структуре плоской ударной волны в трехкомпонентной смеси газов представляет интерес, как в фундаментальном, так и в прикладном плане. Особенно ярко эффекты поступательной неравновесности (сильное разделение парциальных скоростей и поступательных температур компонентов смеси) проявляются при большом различии масс компонентов [1,2]. К сожалению, авторам неизвестны работы по экспериментальному исследованию эффектов разделения парциальных скоростей и температур в трехкомпонентной смеси. Для двух компонентных смесей, в экспериментальном плане, этому вопросу посвящено также ограниченное число работ [3-7]. Имеется большое количество работ теоретического плана по исследованию эффектов поступательной неравновесности (разделение парциальных скоростей и температур) в двухкомпонентных газовых смесях на основе различных подходов (см., например, [8-13]). В работах [8,9,12] дан подробный анализ разных подходов и большой обзор литературы на данную тему. Можно выделить три направления теоретических исследований двухкомпонентных смесей: подход на основе решения уравнений многотемпературной, многоскоростной газодинамики [12], различные вариации методов Монте – Карло [11,13], решение системы кинетических уравнений Больцмана [8-10]. Все три под-

хода дают удовлетворительное описание эффектов разделения компонентов в газовых смесях с сильно различающимися массами. Однако описание более тонких эффектов, таких как влияние хвостов функции распределения на кинетику физико – химических превращений и вычисление высших моментов от функции распределения на основе [12] проблематично. Дальше позволяют продвинуться в этом направлении методы Монте – Карло [2,13]. Однако при увеличении порога энергии активации физико – химических превращений очень быстро нарастает время расчетов. Прямое численное решение уравнения Больцмана [9] приводит к аналогичным проблемам. Один из авторов данной работы на протяжении многих лет развивает подход, основанный на приближенном решении системы уравнений Больцмана. Функция распределения аппроксимируется двумя или большим количеством максвеллианов [9,14]. Этот подход оказался плодотворным для описания влияния эффектов поступательной неравновесности на кинетику физико – химических превращений, так как он позволяет при приемлемых затратах машинного времени теоретически исследовать высокопороговые процессы [15]. Для практических приложений, конечно наибольшее значение имеют физико –химические процессы во фронте ударных волн. Поэтому этому вопросу посвящено значительно большее число экспериментальных работ (см. [15-23]). Следует отметить особую значимость работы [23], так как она поставила точку в долголетнем споре о том, что действительно ли эффекты поступательной неравновесности во фронте ударной волны влияют на кинетику физико – химических превращений? Оппоненты на то время указывали на другие возможные причины эффекта. Это было обусловлено тем, что имеющимся на то время измерительным оборудованием нельзя было исследовать процесс прямо в зоне поступательной неравновесности. Именно в [23] эффект был измерен прямо в зоне поступательной неравновесности. Разработка теории сдерживается из-за того, что при увеличении порога физико – химического процесса резко возрастает время счета. Теоретические работы в этом направлении развиваются в работах [2, 14, 24-28]. Причем, в [2] методом Монте -Карло влияние эффектов поступательной неравновесности на кинетику физико – химических превращений исследовалось уже в трехкомпонентных смесях. Аналогичные исследования на основе решения уравнения Больцмана проводились в [28]. Однако эта работа была опубликована в малодоступном издании и в виде краткого сообщения. Исследование процессов разделения компонентов имеет больше академический, фундаментальный характер. Поэтому изложенный в данной работе материал (физико - химические процессы не рассматриваются) имеет фундаментальный, познавательный и методический характер. Проводится сравнение с результатами других теоретических подходов [1,2]. В вырожденном случае - исчезающе малой концентрации третьего компонента проводится сравнение с экспериментом [4]. Вычисляются высшие моменты от функции распределения: поперечные и продольная парциальные температуры, парциальные тензор вязких напряжений, тепловые потоки. Учет физико – химических превращений для трех компонентных смесей предполагается изложить в следующих публикациях.

2. Постановка задачи и метод решения.

Система кинетических уравнений Больцмана для газовых смесей, описывающая пространственную эволюцию парциальных функций распределения $f_i(X, v^i)$ (стационарный одномерный случай), имеет вид см. [29-31]:

$$v_x^i \frac{\partial f_i}{\partial X} = \sum_j \int \int \int \dots (f_i' f_j' - f_i f_j) |g_{ji}| \sigma(|g_{ji}|, \chi) d^2 \Omega d^3 v_j, \quad (1)$$

где v_i - молекулярная скорость, $\sigma(|g_{ji}|, \chi)$ - дифференциальное сечение рассеяния, Ω - телесный угол, X - пространственная переменная $g_{ji} = v_j - v_i$ - относительная молекулярная

скорость. Решение (1), описывающее структуру ударных волн в газовой смеси, удастся найти в общем виде только численно. Известны приближенные аналитические решения (1) для случаев исчезающе малой примеси одного из компонентов для бинарной смеси газов – Дьяков С.П. (см. Успехи физических наук 1993. Том. 163. №9. С. 109-116.).

В данной работе система уравнений (1) решается методом Тамма - Мотт-Смита, обобщенным на газовые смеси [8]. Искомые функции распределения ищутся в виде (см. [8]):

$$f_i = n_s^i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_s^i} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_i (v^i - u_s^i)^2}{2k T_s^i} \right\} + n_\tau^i \left(\frac{m_i}{2\pi k T_\tau^i} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_i (v^i - u_\tau^i)^2}{2k T_\tau^i} \right\}, \quad (2)$$

где k - константа Больцмана, m_i - масса i -го компонента, $n_s^i, n_\tau^i, u_s^i, u_\tau^i, T_s^i, T_\tau^i$ - параметры, входящие в функцию распределения – пояснения см. ниже.

При этом налагаются следующие граничные условия (если мы начинаем интегрирование (1) с $-\infty$):

$$\begin{aligned} n_s^i(-\infty) = n_\tau^i(+\infty) = 0, T_s^i(-\infty) = T_1, \\ n_\tau^i(-\infty) = 0, n_s^i(+\infty) = n_2^i, u_s^i(-\infty) = u_1, \end{aligned} \quad (3)$$

и дополнительные условия $T_\tau^i(X) = T_2, u_\tau^i(X) = u_2, n_s^i, n_\tau^i, u_s^i, T_s^i$ в формуле (2) переменные и зависят от X . При интегрировании (1) с $(+\infty)$ имеем

$$\begin{aligned} n_s^i(-\infty) = n_\tau^i(+\infty) = 0, T_\tau^i(+\infty) = T_2, \\ n_\tau^i(-\infty) = 0, n_s^i(+\infty) = n_2^i, u_\tau^i(+\infty) = u_2, \end{aligned} \quad (4)$$

и $T_s^i(X) = T_1, u_s^i(X) = u_1$, для этого случая в (2) $n_\tau^i, n_s^i, u_\tau^i, T_\tau^i$ - переменные и зависят от X . Величины - n_1^i и n_2^i - парциальные концентрации; u_1 и u_2 - скорости; T_1 и T_2 температуры в равновесии на $-\infty$ и $+\infty$ соответственно.

Их связь определяется из соотношений Рэнкина - Гюгоню:

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{(5M_1^2 - 1)(M_1^2 + 3)}{16M_1^2}, \frac{u_2}{u_1} = \frac{4M_1^2}{M_1^2 + 3}, M_1^2 = \frac{3}{5} \frac{u_1^2}{kT_1} \frac{\rho_1^i + \rho_1^j + \rho_1^k}{n_1^i + n_1^j + n_1^k} \quad (5)$$

где M_1 - число Маха газовой смеси в набегающем потоке, ρ_i - плотность i -го компонента.

Верхние индексы в (2) – (5) обозначают сорт молекул. Несколько различные граничные и дополнительные условия (3), (4) обусловлены тем, что на $-\infty$ и $+\infty$ в уравнениях переноса для величин, входящих в (1), имеются особенности. Так как заранее неизвестен тип особенности, то приходится анализировать решение в окрестности как $-\infty$ так и $+\infty$, затем уже начинать численное интегрирование. Более подробно этот вопрос рассмотрен в [8].

В данной работе, следуя [8], решение задачи ищется в общем виде (2)-(4). Подставляя (2) в (1) и умножая (1) на соответствующие моменты ($\Psi^i = 1, m_i v_x^i, m_i v^i{}^2, m_i v_x^i{}^2$) с последующим интегрированием по всему пространству скоростей, получаем систему уравнений для определения величин, входящих в функцию распределения (2),

$$\frac{d}{dX} \{ n_s^i u_s^i + n_\tau^i u_\tau^i \} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{d}{dX} \{ \rho_s^i u_s^i{}^2 + \rho_\tau^i u_\tau^i{}^2 + n_s^i k T_s^i + n_\tau^i k T_\tau^i \} = Q(m_i v_x^i), \quad (7)$$

$$\frac{d}{dX} \left\{ \rho_s^i u_s^{i3} + \rho_\tau^i u_\tau^{i3} + 5k(n_s^i u_s^i T_s^i + n_\tau^i u_\tau^i T_\tau^i) \right\} = Q(m_i v^{i2}), \quad (8)$$

$$\frac{d}{dX} \left\{ 2k(n_s^i u_s^i T_s^i + n_\tau^i u_\tau^i T_\tau^i) \right\} = Q(m_i v_X^{i2}), \quad (9)$$

где

$$Q^i(m_i V_i) = -m_{ij} \sum_{p,r} n_p^i n_r^j (u_p^i - u_r^j) \xi_{pr}^{ij} \Omega_{pr}^{(1,1)ij} - m_{ik} \sum_{p,r} n_p^i n_r^k (u_p^i - u_r^k) \xi_{pr}^{ik} \Omega_{pr}^{(1,1)ik}, \quad (10)$$

$$Q(m_i v^{i2}) = -2m_{ij} \sum_{p,r} \left\{ n_p^i n_r^j \Omega_{pr}^{(1,1)ij} \left[\frac{3k(T_p^i - T_r^j)}{m_i + m_j} \xi_{1pr}^{ij} + (u_p^i - u_r^j)(u_p^i \beta_{rp}^{ji} + u_r^j \beta_{pr}^{ij}) \xi_{pr}^{ij} \right] \right\} - \\ - 2m_{ik} \sum_{p,r} \left\{ n_p^i n_r^k \Omega_{pr}^{(1,1)ik} \left[\frac{3k(T_p^i - T_r^k)}{m_i + m_k} \xi_{1pr}^{ik} + (u_p^i - u_r^k)(u_p^i \beta_{rp}^{ki} + u_r^k \beta_{pr}^{ik}) \xi_{pr}^{ik} \right] \right\}, \quad (11)$$

$$Q(m_i v_X^{i2}) = m_{ii} (u_s^i - u_\tau^i)^2 \xi_{11s\tau}^{ii} n_s^i n_\tau^i \Omega_{s\tau}^{(1,1)ii} + \\ + 2 \sum_{p,r} \left\{ n_p^i n_r^j \Omega_{pr}^{(1,1)ij} \left[-\frac{4k(T_p^i - T_r^j)}{m_i + m_j} \xi_{2pr}^{ij} + \frac{1}{2} \mu_{ji} (u_p^i - u_r^j)^2 \xi_{11pr}^{ij} \right] \right\} + \\ + 2 \sum_{p,r} \left\{ n_p^i n_r^k \Omega_{pr}^{(1,1)ik} \left[-\frac{4k(T_p^i - T_r^k)}{m_i + m_k} \xi_{2pr}^{ik} + \frac{1}{2} \mu_{ki} (u_p^i - u_r^k)^2 \xi_{11pr}^{ik} \right] \right\} \quad (12)$$

где индексы p и r пробегают значения s и τ,

$$\beta_{rp}^{ji} = \frac{V_{jr}^2}{V_{jr}^2 + V_{ip}^2}, V_{jr}^2 = \frac{2kT_r^j}{m_j}, \mu_{ji} = \frac{m_j}{m_i + m_j}, m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$$

k – константа Больцмана, $\Omega_{pr}^{(1,1)ik}$ - омега интеграл Чепмена –Каулинга [31].

Выражения для функций ξ_{pr}^{ij} , ξ_{2pr}^{ij} , ξ_{1pr}^{ij} , ξ_{11pr}^{ij} для произвольных межмолекулярных потенциалов взаимодействия представляются в виде рядов [29,30]. Для потенциалов взаимодействия молекул $\phi \sim 1/r^v$ возможны представления их в виде специальных функций [8], на чем остановимся подробнее ниже. Согласно (3), при интегрировании системы уравнений переноса (6) – (9) для величин, входящих в (2), от $X = -\infty$ величины: $u_\tau^i = u_2$, $T_\tau^i = T_2$, $u_\tau^j = u_2$, $T_\tau^j = T_2$, $u_\tau^k = u_2$, $T_\tau^k = T_2$. В результате имеем для трехкомпонентной смеси замкнутую систему двенадцати уравнений для двенадцати неизвестных n_s^i , n_τ^i , u_s^i , T_s^i , n_s^j , n_τ^j , u_s^j , T_s^j , n_s^k , n_τ^k , u_s^k , T_s^k . Аналогичную систему имеем при интегрировании с $+\infty$. При этом используем (4). В конечном итоге задача сводится к решению девяти нелинейных дифференциальных уравнений с особыми точками на границах. Для того чтобы иметь возможность применить численные методы для решения этой задачи, необходимо линеаризовать систему уравнений (6) – (9) в окрестности особых точек, а затем найти собственные значения и собственные векторы линейной системы. Если собственные значения ненулевые, что проверялось в широком диапазоне изменения параметров смеси и потока, то линейная задача аппроксимирует нелинейную в окрестности особой точки (см. [8]). В резуль-

тате мы имеем аналитическое решение в окрестности особой точки и, следовательно, можем стартовать из нее, а затем уже применить для интегрирования нелинейной системы метод Рунге-Кутты четвертого порядка. Определенные трудности представляет вычисление функций $\xi_{pr}^{ij}, \xi_{2pr}^{ij}, \xi_{1pr}^{ij}, \xi_{11pr}^{ij}$ даже для степенного потенциала взаимодействия $\varphi \sim 1/r^\nu$. В этом случае имеем следующую связь для них:

$$\xi_2 = \frac{1}{2} \xi, u^2 \xi_2 = \frac{3}{2} (\xi_1 - \xi), \xi_{11} = \frac{A_2(\nu)}{A_1(\nu)} \xi_2,$$

где $u^2 = \frac{(u_p^i - u_r^j)^2}{(V_{ip}^2 + V_{jr}^2)}$, значения величин $A_2(\nu)$ и $A_1(\nu)$ приведены в [31]. Таким образом, нам необходимо знать ξ_1, ξ . Эти функции могут быть представлены в виде

$$\xi_1 = \frac{\exp(-u^2)}{\Gamma(3 - \frac{2}{\nu})} \int_0^\infty \frac{(\sqrt{t})^{3 - \frac{4}{\nu}} \exp(-t)}{2u} sh(2u\sqrt{t}) dt,$$

$$\xi = \frac{3}{2} \frac{\exp(-u^2)}{\Gamma(3 - \frac{2}{\nu})} \int_0^\infty \frac{t^{1 - \frac{2}{\nu}} \exp(-t)}{2u^2} \left\{ ch(2u\sqrt{t}) - \frac{sh(2u\sqrt{t})}{2u\sqrt{t}} \right\} dt,$$

где $\Gamma(X)$ - гамма функция.

Оба интеграла вычисляются, а результаты представляются через функции параболического цилиндра, которые в свою очередь выражаются через вырожденные гипергеометрические функции [32]. Таблицы этих функций представлены в [33]. Наиболее простым образом функции ξ_1 и ξ выражаются для максвелловского потенциала взаимодействия молекул $\nu = 4$. Для моделей потенциалов взаимодействия молекул – Ленарда – Джонса и (6- \exp) – модифицированного потенциала Бакингема [31] в первых нескольких членах рядов $\xi_1, \xi, \xi_2, \xi_{11}$ [29] берутся табличные значения $\Omega_{pr}^{(1,1)ij}$ (см. [31]). Для остальных членов ряда используем предположение

$$\Omega_{pr}^{(l,n)ij} = \frac{\Gamma(n + 3 - \frac{2}{\nu})}{\Gamma(3 - \frac{2}{\nu})} \Omega_{pr}^{(l,1)ij},$$

где $\nu = 12$ и $\nu = \infty$ соответственно.

Переменные, входящие в функцию распределения (2), сами по себе особого физического смысла не имеют. Представляют интерес моменты от функций распределения

$$n^i = n_s^i + n_\tau^i, \tag{13}$$

$$u^i = \frac{u_s^i n_s^i + u_\tau^i n_\tau^i}{n^i}, \tag{14}$$

$$T^i = \frac{T_s^i n_s^i + T_\tau^i n_\tau^i}{n^i} + \frac{\rho_s^i W_s^{i2} + \rho_\tau^i W_\tau^{i2}}{3kn^i}, \tag{15}$$

$$T_\perp^i = \frac{1}{3} \frac{T_s^i n_s^i + T_\tau^i n_\tau^i}{n^i}, T_\parallel^i = 3T^i - 2T_\perp^i, \tag{16}$$

$$\sigma_{\parallel}^i = -\frac{2}{3}(\rho_s^i W_s^{i2} + \rho_\tau^i W_\tau^{i2}), \sigma_{\perp}^i = \frac{1}{2}\sigma_{\parallel}^i, \quad (17)$$

$$q_x^i = \frac{5}{2}T_s^i n_s^i k W_s^i + \frac{5}{2}T_\tau^i n_\tau^i k W_\tau^i + \frac{\rho_s^i W_s^{i3}}{3} + \frac{\rho_\tau^i W_\tau^{i3}}{3}, \quad (18)$$

где n^i , u^i , T^i - парциальные концентрации, скорость, и температура соответственно; T_{\perp}^i и T_{\parallel}^i - парциальные поперечная и продольная температуры; σ_{\perp}^i и σ_{\parallel}^i - парциальные тензоры поперечных и продольных напряжений; q_x^i - парциальный тепловой поток.

Значения величин T^i , T_{\perp}^i , T_{\parallel}^i , σ_{\parallel}^i , q_x^i зависит от выбора системы координат (см. [8]), так как от этого зависят значения величин диффузионных скоростей

$$W_s^i = u_s^i - U, \quad (19)$$

Если выбирать системы координат для определения величин (13)-(18) относительно собственного движения каждого компонента в отдельности, как это было сделано в [1,2], то в (19) $U = u^i$. Однако при этом возникают «нефизические» области при сравнении профилей парциальных и средней температур, так как последняя вычисляется в системе отсчета относительно движения смеси в целом [10]. Исследования, проведенные в [10], показали, что системах отсчета относительно средней или среднемассовой скоростей для всей смеси в целом этот недостаток устраняется. Если это не оговорено специально, то будем использовать систему координат относительно среднемассовой скорости. Для удобства представления результатов расчетов моменты от функций распределения будем представлять в безразмерном виде

$$\hat{V}^i = \frac{u^i - u_2}{u_1 - u_2}, \hat{T}^i = \frac{T^i - T_1}{T_2 - T_1}, \hat{n}^i = \frac{n^i - n_1}{n_2 - n_1}$$

$$\hat{\sigma}_{\parallel}^i = \frac{\sigma_{\parallel}^i}{n_1 k T_1}, \hat{q}_X^i = \frac{q_X^i}{n_1 k T_1 u_1}, \hat{n} = \frac{n - n_1}{n_2 - n_1}$$

где $n = n^i + n^j + n^k$.

Здесь и далее координата профиля ударной волны обезразмеривается на длину свободного пробега λ на $-\infty$

$$\lambda_{-\infty}^i = \frac{1}{\pi \left(n_1^i d_{ii}^2 \Omega_{ii}^{*(2,2)} \sqrt{2} + n_1^j d_{ij}^2 \Omega_{ij}^{*(2,2)} \sqrt{\frac{m_i + m_j}{m_j}} + n_1^k d_{ik}^2 \Omega_{ik}^{*(2,2)} \sqrt{\frac{m_k + m_i}{m_k}} \right)}$$

$$\lambda = \frac{n_1^i \lambda_{-\infty}^i + n_1^j \lambda_{-\infty}^j + n_1^k \lambda_{-\infty}^k}{n_1^i + n_1^j + n_1^k}, \quad (20)$$

где d_{ij} - эффективный диаметр молекул, $\Omega_{ij}^{*(2,2)}$ - безразмерная величина интеграла Чепмена –Каулинга [31].

На рис. 1 – 2 представлено сравнение скоростей и температур компонент смеси с данными, полученными в [2] при числе Маха $M_1=4$, относительных - массах частиц m_i , концентрациях частиц – n_i , диаметрах частиц d_i , $m_2 / m_1 = 20$, $m_3 / m_2 = 4$, $n_1 / n_2 = 100$, $n_3 / n_2 = 1$, $d_2 / d_1 = 2$, $d_3 / d_2 = 1$. Потенциал –«твердые сферы».

Отличие результатов данной работы от результатов [2] по – видимому обусловлено тем, что для модели потенциала взаимодействия «твердые сферы» в методе Монте – Карло как бы «смягчается» потенциал, поэтому ширина ударной волны получается больше.

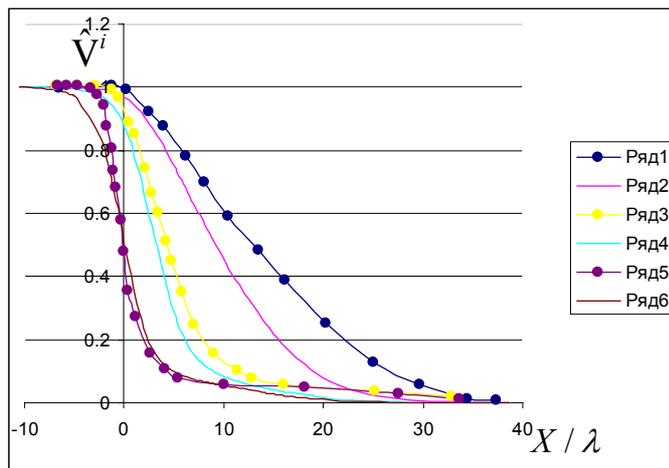


Рис.1. Сравнение скоростей компонент смеси (1 – \hat{V}^3 по [2], 2 – \hat{V}^3 (данная работа), 3 – \hat{V}^2 по [2], 4 – \hat{V}^2 (данная работа), 5 – \hat{V}^1 по [2], 6 – \hat{V}^1 (данная работа)

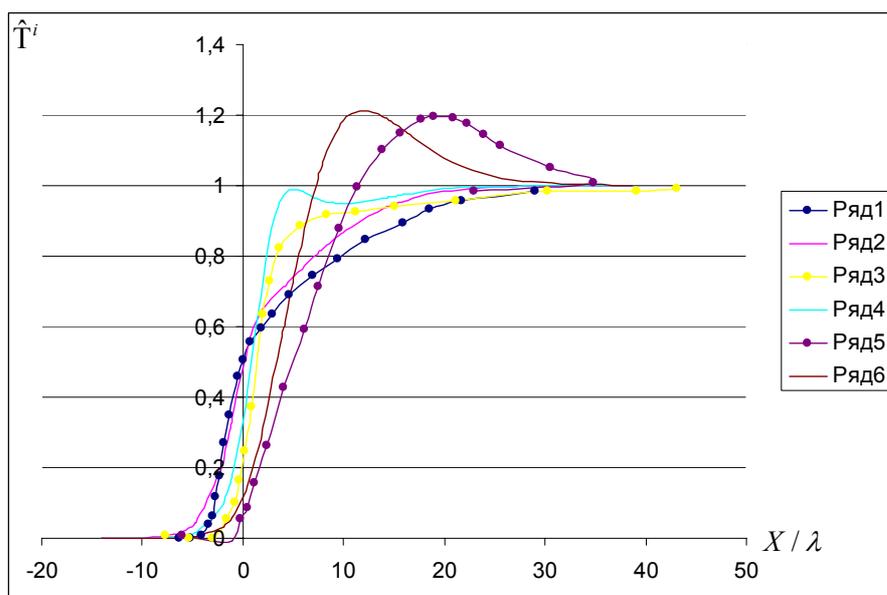


Рис.2. Сравнение температур компонент смеси (1 – \hat{T}^1 (данная работа), 2 – \hat{T}^2 (данная работа), 3 – \hat{T}^3 (данная работа), 4 – \hat{T}^1 по [2], 5 – \hat{T}^2 по [2], 6 – \hat{T}^3 по [2])

На рис. 3 – 4 представлено сравнение скоростей и температур компонент смеси с данными, полученными в [1] при числе Маха $M_0=3$ и соотношении параметров смеси $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $d_2/d_1=2$, $d_3/d_2=1$. Потенциал – «твердые сферы».

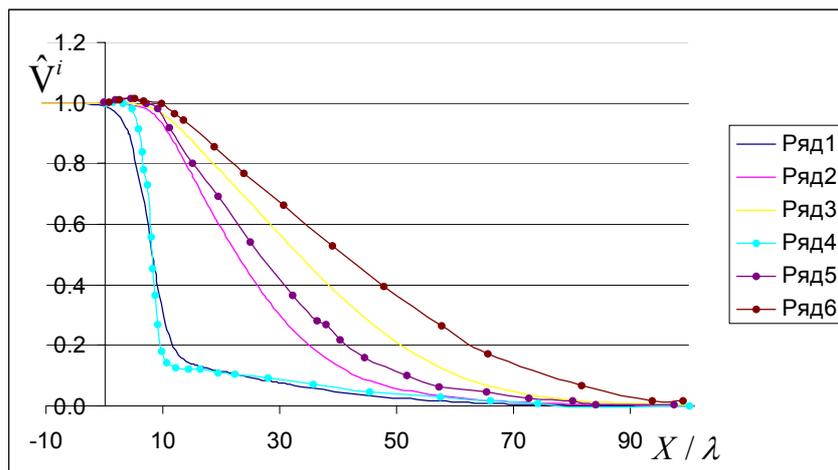


Рис.3. Сравнение скоростей компонент смеси (1 – \hat{V}^1 (данная работа), 2 – \hat{V}^2 (данная работа), 3 – \hat{V}^3 (данная работа), 4 – \hat{V}^1 по [1], 5 – \hat{V}^2 по [1], 6 – \hat{V}^3 по [1])

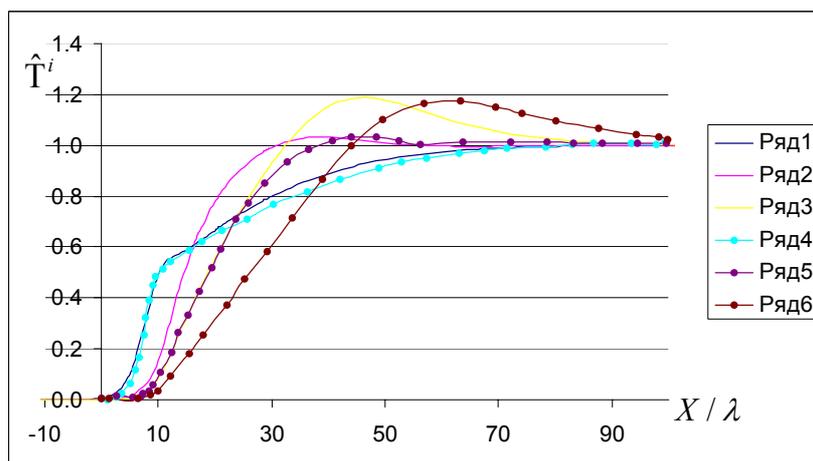


Рис.4. Сравнение температур компонент смеси с результатами [1] (1 – \hat{T}^1 (данная работа), 2 – \hat{T}^2 (данная работа), 3 – \hat{T}^3 (данная работа), 4 – \hat{T}^1 по [1], 5 – \hat{T}^2 по [1], 6 – \hat{T}^3 по [1])

Отличие результатов [1] и данной работы обусловлено тем, что в уравнениях переноса для парциального импульса и парциальных температур [1] в качестве основных учтены члены, которые получаются для максвелловского потенциала взаимодействия. Наибольшая погрешность в этом случае получается как раз для потенциала взаимодействия «твердые сферы» (см. [34]). Для более мягких потенциалов (в случае степенной модели $\varphi \sim 1/r^\nu$), при $\nu \rightarrow 4$ погрешность снижается [34]. На рис. 5 представлено сравнение изменения профилей парциальных концентраций компонент смеси (для разных потенциалов взаимодействия $\varphi \sim 1/r^\nu$, при $\nu = \infty$, $\nu = 14$, $\nu = 8$) с данными, полученными в [4]. Нами для апробации метода рассмотрена трехкомпонентная смесь, но с исчезающе малой концентрацией третьего компонента, при параметрах: $M_0 = 3,61$, $m_2 / m_1 = 32,75$, $m_3 / m_1 = 37,5$, $n_1 / n_2 = 65,667$, $n_3 / n_1 = 10^{-6}$, $\sigma_2 / \sigma_1 = 1,582$, $\sigma_3 / \sigma_2 = 1$,

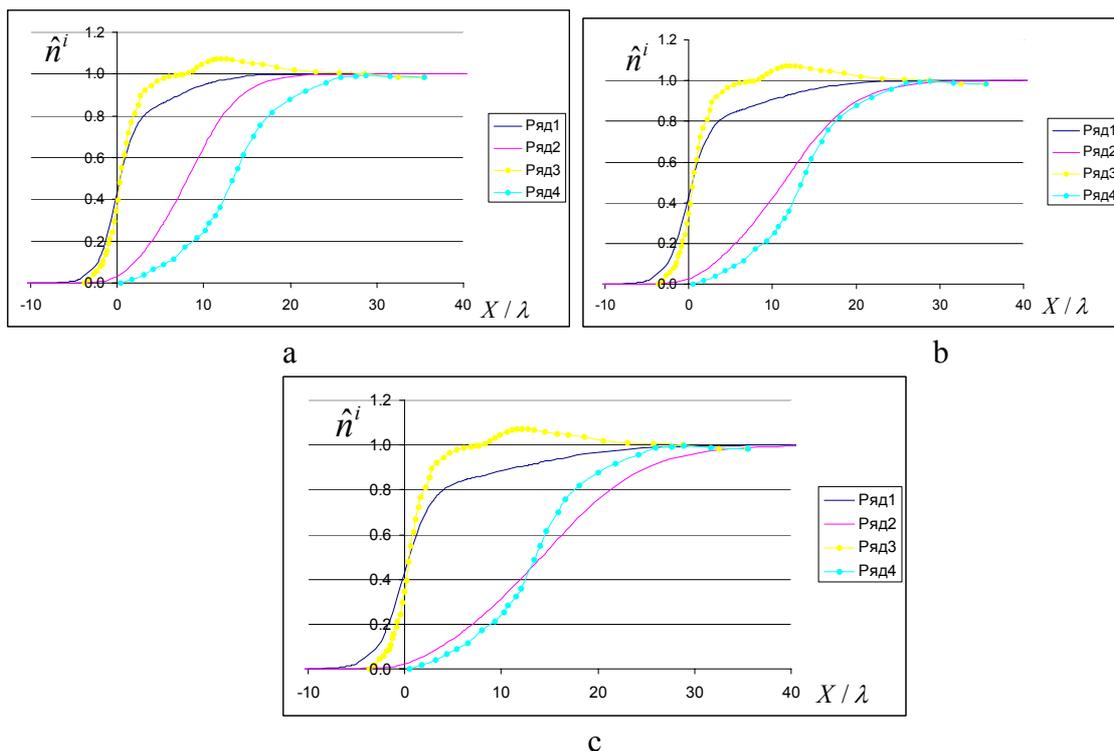


Рис.5. Сравнение концентраций компонент смеси полученных в эксперименте [4] и данной работе при различных моделях потенциала $\phi \sim 1/r^\nu$: а – $\nu = \infty$, б – $\nu = 14$, с – $\nu = 8$ (1 – \hat{n}^1 (данная работа), 2 – \hat{n}^2 (данная работа), 3 – \hat{n}^1 по [4], 4 – \hat{n}^2 по [4])

Сравнение с экспериментальными [4] данными показывает удовлетворительное согласие расчетов при $\nu = 14$. Нефизическое превышение профиля концентрации легкого компонента в задней части фронта ударной волны в [4] обусловлено, как впоследствии пояснили авторы работы [4], недостаточной точностью измерений. Этот недостаток был впоследствии устранен в работе этих же авторов в [6]. На рис. 6 показана зависимость максимального превышения пика температуры «тяжелых» компонентов в трех компонентной смеси в зависимости от числа Маха M_0 , при соотношении параметров смеси $m_2 / m_1 = 100$, $m_3 / m_2 = 2$, $n_1 / n_2 = 300$, $n_3 / n_2 = 1$, $\sigma_2 / \sigma_1 = 2$, $\sigma_3 / \sigma_2 = 1$ $\nu = \infty$.

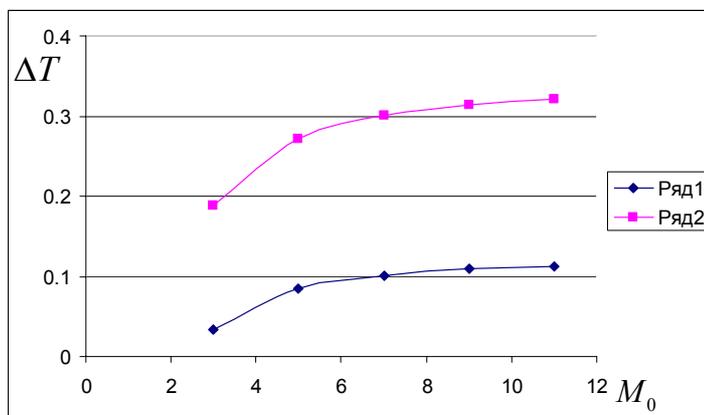


Рис.6. Зависимость скачка температуры $\Delta T^i = T_{\max}^i - T_2$ от числа Маха M_0 (Ряд 1 – компонент n_2 , Ряд 2 – компонент n_3)

Так же как и для двухкомпонентной смеси [13], имеем монотонное увеличение ΔT^i с увеличением числа Маха.

На рис. 7 показано изменение параллельных составляющих температур компонент смеси T_{\parallel}^i в системе координат, связанной с собственной скоростью u^i компонент смеси, при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

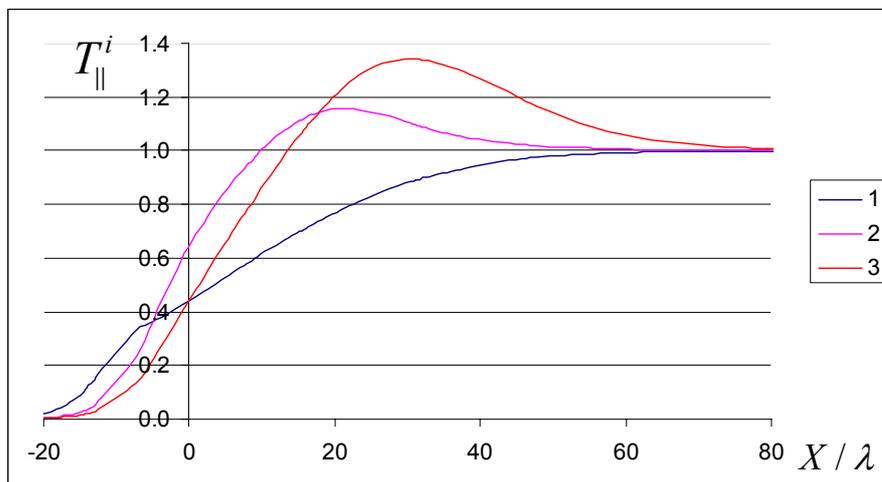


Рис.7. Изменение параллельных составляющих температур компонент смеси T_{\parallel}^i (1 – T_{\parallel}^1 , 2 – T_{\parallel}^2 , 3 – T_{\parallel}^3)

На рис. 8 показано изменение температур компонент смеси в системе координат, связанной с центром масс компонент (относительно среднемассовой скорости) T_0^i , при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

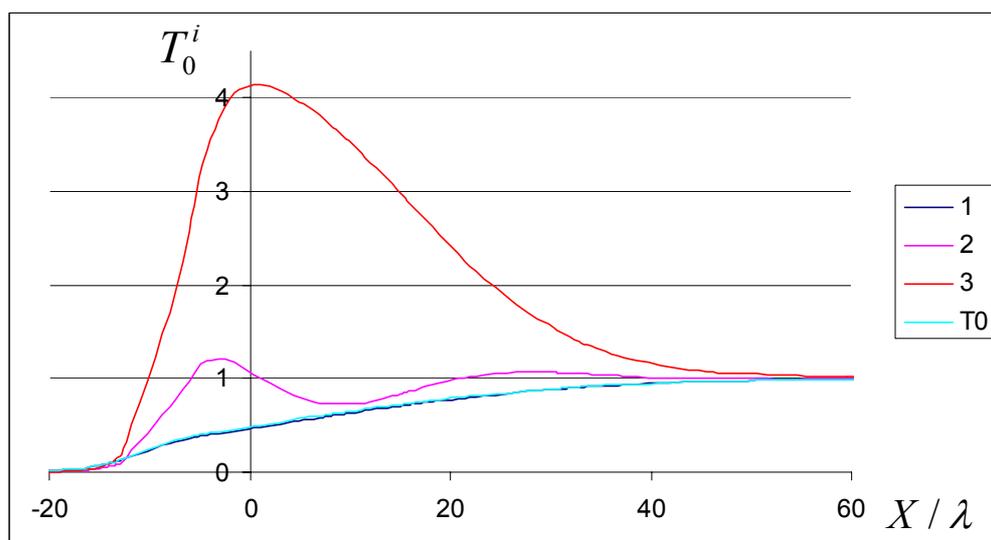


Рис.8. Изменение температур компонент смеси в системе координат связанной с центром масс компонент T_0^i (1 – T_0^1 , 2 – T_0^2 , 3 – T_0^3 , T_0 – средняя температура смеси)

Переход к системе координат, связанной со среднемассовой скоростью, обусловлен тем, что при сравнении профилей парциальных температур, вычисленных в системах координат относительно парциальных скоростей, и средней температуры смеси возникают нефизические области в поведении средней и парциальных температур (см. [8]). Переход в систему координат, связанную со среднемассовой скоростью смеси или средней скорости смеси устраняет этот недостаток (см. [8]).

На рис. 9 показано изменение параллельных составляющих температур компонент смеси в системе координат связанной с центром масс компонент $T_{||}^i$ при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

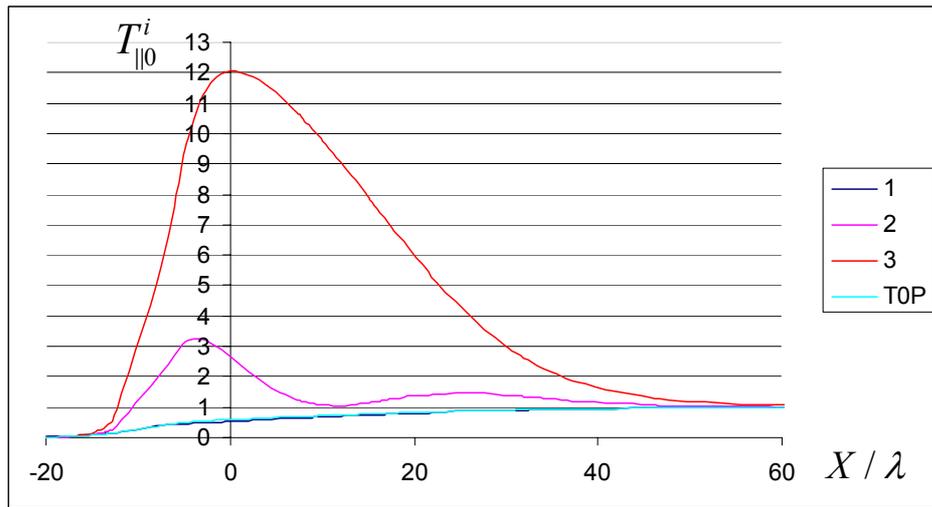


Рис.9. Изменение параллельных составляющих температур компонент смеси в системе координат связанной с центром масс компонент $T_{||}^i$ (1 – $T_{||}^1$, 2 – $T_{||}^2$, 3 – $T_{||}^3$, $T_{||0}$ – среднее значение параллельной составляющей температуры смеси)

На рис. 10 показано изменение перпендикулярных составляющих температур компонент смеси T_{\perp}^i при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

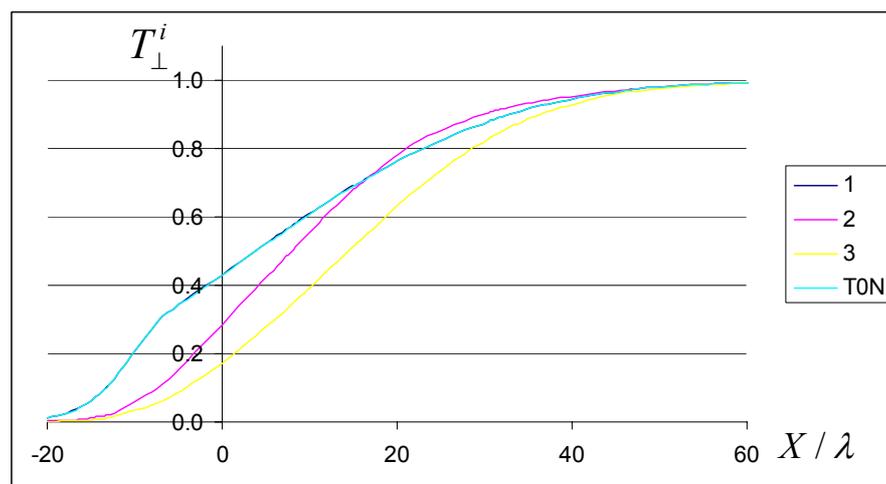


Рис.10. Изменение перпендикулярных составляющих температур компонент смеси T_{\perp}^i (1 – T_{\perp}^1 , 2 – T_{\perp}^2 , 3 – T_{\perp}^3 , $T_{\perp0}$ - перпендикулярная температура для всей смеси в целом)

Поведение в профилях параллельной температур и перпендикулярных температур возникают те же характерные особенности, как и для этих же параметров в двухкомпонентной смеси (см. [8-13]).

На рис. 11 показано изменение тензора напряжений компонент смеси S^i в собственных системах координат компонент при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu = \infty$.

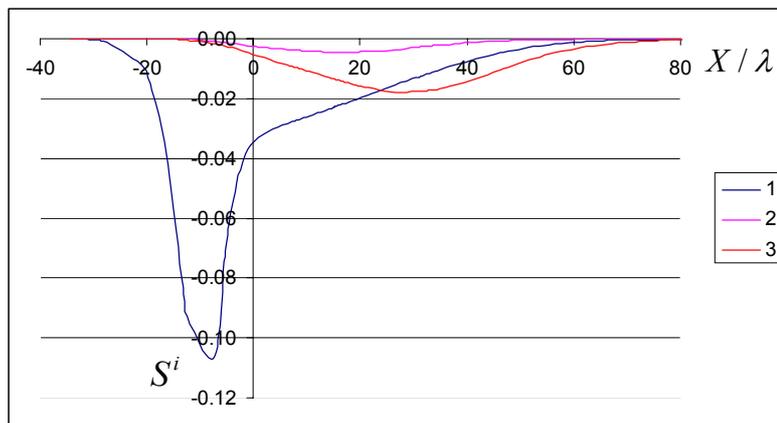


Рис.11. Изменение тензора напряжений компонент смеси S^i в собственных системах координат компонент ($1 - S^1$, $2 - S^2$, $3 - S^3$)

На рис. 12 показано изменение тензора напряжений компонент смеси S_0^i в системе координат центра масс смеси при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu = \infty$.

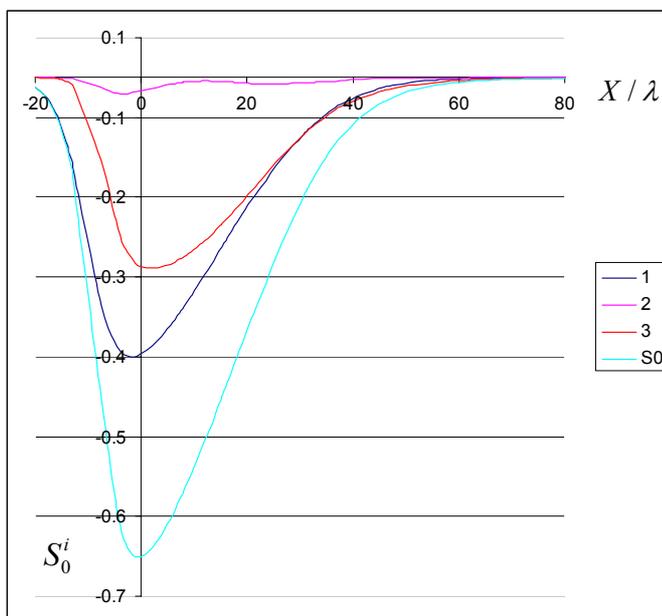


Рис.12. Изменение тензора напряжений компонент смеси S_0^i в системе координат центра масс смеси ($1 - S_0^1$, $2 - S_0^2$, $3 - S_0^3$, S_0 – тензор напряжений смеси в целом)

Поведение парциальных тензоров напряжений во фронте ударной волны для трехкомпонентной смеси, аналогично поведению этих характеристик для двухкомпонентной (см., например, [10]).

На рис. 13 показано изменение теплового потока компонент смеси Q^i в собственных системах координат компонент при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

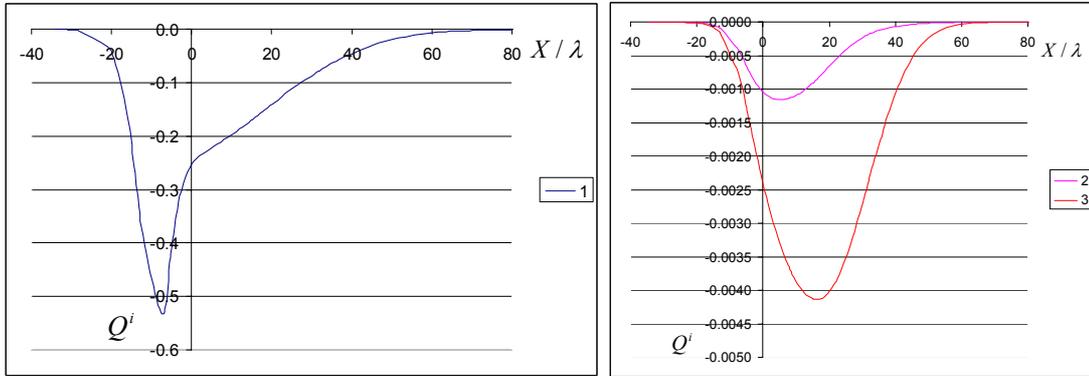


Рис.13. Изменение теплового потока компонент смеси Q^i в собственных системах координат компонент (1 – Q^1 , 2 – Q^2 , 3 – Q^3)

На рис. 14 показано изменение теплового потока компонент смеси Q_0^i в системах координат центра масс смеси при параметрах: $M_0=3$, $m_2/m_1=100$, $m_3/m_2=2$, $n_1/n_2=300$, $n_3/n_2=1$, $\sigma_2/\sigma_1=2$, $\sigma_3/\sigma_2=1$, $\nu=\infty$.

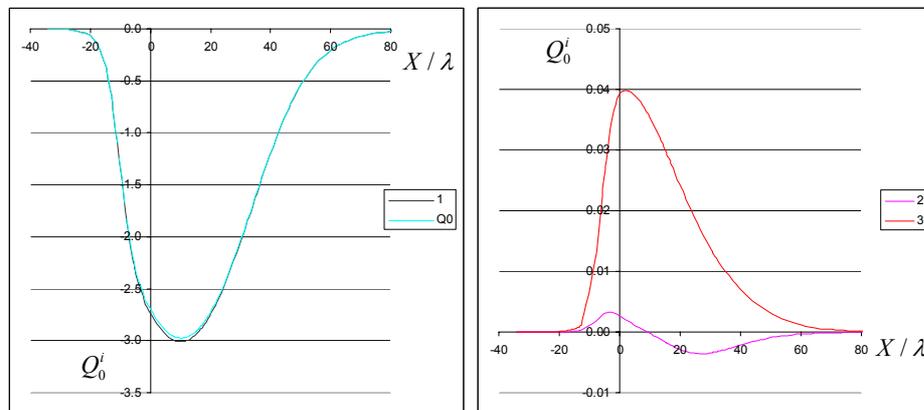


Рис.14. Изменение теплового потока компонент смеси Q_0^i в системе координат центра масс смеси (1 – Q_0^1 , 2 – Q_0^2 , 3 – Q_0^3 , Q_0 – тепловой поток смеси)

Для поведения профилей тепловых потоков для трехкомпонентной смеси присущи те же особенности, что и для двухкомпонентной (см. [10]). Перенос тепла происходит не только из-за градиента температур, но и из-за больших относительных диффузионных скоростей. Поэтому как видно из графиков для парциальных температур в разных системах координат и парциальных тепловых потоков зависимость $Q^i = -\lambda^i \nabla T^i$ может не выполняться из-за того, что в данном случае $Q^i = -\lambda^i \nabla T^i + \beta^i (u^i - u^j)$ (см., например, [34]).

Заключение:

1. Разработана методика решения системы кинетических уравнений Больцмана, основанная на обобщении методов Тамма – Мотт- Смита, позволяющая учитывать высокоскоростные хвосты функции распределения и описывать высокопороговые физико – химические процессы в ударных волнах при учете в правой столкновительной части кинетических уравнений неупругих членов.
2. Проведено тестирование методики решения системы уравнений Больцмана для трехкомпонентных смесей путем сравнения с известными теоретическими расчетами на основе различных подходов и в вырожденном случае – с экспериментом (для исчезающе малой концентрации третьего компонента). Проведена сравнительная характеристика результатов.
3. Проведены расчеты высших моментов от функции распределения, параллельных и перпендикулярных парциальных температур, парциальных тепловых потоков, вязких напряжений. Проведен анализ поведения профилей этих величин во фронте ударной волны.
4. Проведены расчеты различных характеристик, характеризующих поступательную неравновесность во фронте ударной волны в трехкомпонентной газовой смеси, при разных числах Маха и потенциалах взаимодействия частиц. Проведен анализ результатов.

Литература :

1. Ruyev G.A., Fomin V.M., Shavaliyev M. Sh. Shock – Wave Structure in a Ternary Disparate – Mass Mixture. : In. Rarefied Gas Dynamics. Weinheim, New York, Basel, Cambridge.: VCH Verlagsgesellschaft mbH., Ed. By Alfred E. Beylich. 1991. Vol. 1, pp. 183-190.
2. Куликов С.В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны// МЖГ. 1997. №4. С. 171-178.
3. Harnett L.N., Muntz E.P. Experimental investigation of normal shock wave velocity distribution functions in mixtures of argon and helium//Phys. Fluids. 1972. V. 15, №4, pp. 565 -572.
4. Gmurczyk A. S., Tarczynski M., Walenta Z.A. Shock wave structure in the binary mixtures of gases with disparate molecular masses: In. Rarefied Gas Dynamics. Paris: Commissariat A.L.' Enerque Atomique. 1979. Vol. 1, pp. 323-331.
5. Schmidt B., Seiler F., Warner M. Shock structure near a wall in pure inert gas and in binary inert – gas mixtures// J. Fluid Mech. 1984. Vol. 143, pp. 305-326.
6. Herczynnski R., Tarczynski M., Walenta Z.A. Shock waves in binary gas mixture: Proc. Of the 15th Int. Symp. On Shock Waves and Shock Tubes. Stanford. Univ. Press. 1986. Pp. 713-719.
7. Бочкарев А.А., Ребров А.К., Тимошенко Н.И. Структура ударной волны в смеси Ar-He //Из. СО АН СССР. 1976. №3. Вып. 1. С. 76-80.
8. Башлыков А.М., Великодный В.Ю. Структура ударных волн в газовой смеси//ЖТФ. 1991. Том. 61. №8. С. 33-42.
9. Райнес А.А. Численное исследование температурных макропараметров в ударной волне в бинарной смеси газов на базе кинетического уравнения Больцмана//МЖГ. 2003. №1. С. 154-164.
10. Башлыков А.М., Великодный В.Ю. Неравновесные процессы в профиле ударной волны//Письма в ЖТФ. 1989. Том. 15. Вып. 5. С. 24-28.
11. Куликов С.В., Соловьева М.Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси//ЖВМ и МФ. 1988. Том. 28. №12. С. 1867-1873.
12. Руев Г.А., Фомин В.М., Шавалиев М.Ш. Структура ударных волн в смесях с сильно различающимися массами//ЖПМ и ТФ. 1989. №4. С. 26-33.
13. Bird G.A. Shock wave structure in gas mixtures: In. Rarefied Gas Dynamics. Tokyo. 1984. Vol. 1, pp. 175-182.

14. Velikodnyi V. Yu. Influence of translational non-equilibrium effects on kinetic of physical – chemical transformations in shock waves//Fifteenth international conference on MHD energy conversion and Sixth international workshop on magnetoplasma aerodynamics. Moscow. May. 24-27. 2005. Vol. 3, pp. 837-839.
15. Битюрин В.А., Быков А.А., Великодний В.Ю., Дыренков А.В., Толкунов Б.Н. Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия ударной волны на дейтерированную пористую жидкость// Физико –химическая кинетика в газовой динамике. 11 С., www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-12-126-001/pdf
16. Великодний В.Ю., Емельянов А.В., Еремин А.В. Неадиабатическое возбуждение молекул йода в зоне поступательной неравновесности ударной волны// ЖТФ. 1999. №16. С. 23.
17. Divakov O.G., Velikodnyi V.Yu., Eremin A. V., Ziborov V. S. Nonequilibrium ignition of H₂/O₂ deluter mixtures in the weak shock wave front// IV Int. Schol-Seminar. Nonequilibrium processes and their Application. 1998. Minsk. Belarus. Pp. 155-160.
18. Диваков Щ.Г., Еремин А.В., Зиборов В.С., Фортвов В.Е. Наравновесное воспламенение кислородо - водородных смесей во фронте слабой ударной волны//ДАН РАН, 2000, т.373. № 4. с.487-490.
19. Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Хомик С.В., Попов О.Е., Кушарин А.Ю., Агафонов Г.Л. Самовоспламенение смесей водород – кислород при высоком начальном давлении// ДАН РАН. 1996, т.349, № 4, с.482-485
20. Genich A.P., Kulikov S.V., Manelis G.B., Chereshnev S.L. Thermophysiucs of translational relaxation in shock waves in Gases // Sov. Tech. Rev. В Therm. Phys. 1992. v.4, pp. 1-69.
21. Баженова Т.В., Гвоздева Л.Г., Лобастов Ю.С., Набоко И.М., Немков Р.Г., Предводителева О.А. Ударные волны в реальных газах. М.: Наука. 1968, с.189
22. 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, вып.22, с.69-75.
23. 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. 8с. www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-07-26-001.pdf
24. Великодний В.Ю. Решение уравнения Больцмана для задачи о структуре фронта ударной волны.//XII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2003). Тез. докл. т.1, 2003, с.144-145.
25. Velikodniy V.Yu. The effect of translational nonequilibrium in a shock wave on initiation of the H₂ +Cl₂ reaction// Chem.Phys. Reports 2001. Vol.19(4). P.787-792.
26. Velikodniy V. Yu., Bityurin V.A. The effect of translational nonequilibrium on the kinetic of physicochemical conversion in the shock wave front// Chem. Phys. Reports. 1997. Vol.16(9), pp. 1521-1531.
27. Bird G.A. Collision rates and collisional energy distributions within shock waves//Proceedings of the Tenth International Shock Tube Symposium. Ed. Kyoto University. Japan. 1975. Pp. 284-286.
28. Velikodny V. Yu. , Bityurin V. A. On peculiarities of high threshold physical–chemical transformations within a traslational non-equilibrium region in a shock wave front//21–th Int. Symp. RGD. Marscille (France) 26- 31 July 1998. Book of Abstracts. Volume II. Pp.233-234.
29. Velikodnyy V. Yu. Calculation of the coefficients of component interaction in gas mixtures. // Fluid Mechanics- Soviet Research. 1990. vol. 19. N 2. Pp. 63-68.

30. Великодный В.Ю. Уравнения движения газовой смеси при наличии химических реакций. //ЖТФ. 1990. Т. 60. Вып. 4. С. 22-30.
31. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М: Наука. 1976. 554 С.
32. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. Т.1,800 С.
33. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука. 1979. 830 С.
34. Великодный В.Ю. Уравнения переноса многокомпонентных газовых смесей и сильно неравновесных газов. – Дис. На соискание уч. ст. к. ф.–м.н. М. 1982. 179 С.

Статья поступила в редакцию 8 октября 2009 г.