The High-Velocity Translation NonequilibiuminAnaliticalShock Wave Modelin a GasMixture

M.M. Kuznetsov, S.V. Matveev, E.V. Molostvin, Yu.G. Reshetnikova, L.V. Smotrova

Moscow Region State University, Moscow, 105005, Russia
kuznets-omn@yandex.ru

Abstract

Two theorems on maximum of the relative high-velocity "overshoot" in the relative velocity distributions of pairs of particles in the one-component gas in bimodal hypersonic shock wave are proved. This method is extended to the analytical study of the shock wave in a mixture of two gases with internal degrees of freedom.

Keywords: kinetic, equation, nonequilibrium, gas mixture, shock wave.

Maximum "overshoot" G_{max}in the hypersonic flow

Gas	A	(A_2) linear, none vibration	(A_2) linear, with vibration	(A_3) nonlinear	Equilibrium dissociating, air	C_8H_{16}
γ	5/3	7/5	9/7	7/6	11/10	22/21
ε	1/4	1/6	1/8	1/13	1/21	1/43
$\tilde{G}_{*,\max}$	1.31	2.37	4.84	36/28	1226	3.6×10^{8}

УДК533.6.011

Высокоскоростная поступательная неравновесность смеси газов в аналитической модели ударной волны

М.М. Кузнецов, С.В. Матвеев, Е.В. Молоствин, Ю.Г. Решетникова, Л.В. Смотрова

Московский государственный областной университет, Москва,105005, ул. Радио, 10а
kuznets-omn@yandex.ru

Аннотация

Доказаны две теоремы о максимуме относительной величины высокоскоростного «перехлеста» функции распределения пар молекул в однокомпонентном газе в бимодальной гиперзвуковой ударной волне. Метод распространен на аналитическое исследование ударной волны в бинарной смеси газов с внутренними степенями свободы.

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

1. Введение

Работа посвящена аналитическому исследованию эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в сильных ударных волнах, когда относительная скорость молекул, сталкивающихся внутри фронта ударной волны, значительно превосходит по величине скорость звука в газовом потоке перед волной. Несмотря на протекшие три десятилетия с начала исследования этого эффекта (в основном численных), в его понимании остается все еще много невыясненных вопросов, в разрешении которых свою полезную роль может сыграть аналитическая бимодальная модель ударной волны. С точки зрения практических приложений наибольший интерес представляет исследование т.н. высокопороговой, высокоскоростной поступательной неравновесности, возникающей при протекании неравновесных химических реакций с высокими энергиями активации в сильно сжатых газовых смесях. Эффект высокоскоростной поступательной неравновесности в ударно сжатой смеси газов был установлен ранее в численных исследованиях структуры ударных волн методом статистического моделирования Монте-Карло [1].

Однако и при рассмотрении структуры сильных ударных волн в однокомпонентных, многоатомных газах с неупругими столкновениями можно, как оказалось, установить существенное, четко определенное свойство высокоскоростной поступательной неравновесности, с необходимостью следующее из аналитической бимодальной модели ударной волны. Это свойство, по-видимому, сводится к тому, что в высокоскоростном «хвосте» бимодальной Тамм – Мотт – Смитовской функции распределения пар молекул, известный ранее [1] эффект «перехлеста», т.е. преобладания числа N_{neq} высокоскоростных пар внутри фронта волны над числом N_{eq} в поступательно равновесной зоне за фронтом, имеет строгий максимум по величине $N_{\mathrm{neq}}/N_{\mathrm{eq}}$, зависящий от степени сжатия в сильной ударной волне [2].

В данной работе показано, что эффект «перехлеста» в эволюции функции распределения пар молекул компонентов бинарной смеси газов внутри фронта ударной волны может быть рассмотрен также аналитически.

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

Воспользуемся аппроксимацией Тамма – Мотт – Смита для одночастичной функции распределения $F(b,c)$ и функции распределения пар молекул $\tilde{G}(\bar{g},b)$, следуя работе [3]

$$F(b,c)=\left[(1-b)n_0F_0(c)+bn_1F_1(c)\right]\left[(1-b)n_0+bn_1\right]^{-1}. \tag{1}$$

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

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

m – масса молекулы; u_i,T_i,n_i – скорости, температуры и концентрации газового потока перед ($i=0$) и за ($i=1$) волной; k – постоянная Больцмана; $(c-u_i)$ – собственная скорость молекулы; коэффициент b задавался параметрически в интервале $0\le b\le 1$ при прохождении газа через фронт ударной волны [3].

Величина относительной функции распределения $\tilde{G}(\bar{g},b)$ пар молекул имеет вид

$$\tilde{G}=\left[(1-b)^2\varepsilon_0^2\tilde{G}_0+b^2+2b(1-b)\varepsilon_0\tilde{G}_{01}\right]\left[\varepsilon_0+(1-\varepsilon_0)b\right]^{-2}, \tag{3}$$

где $\tilde{G}=\dfrac{G}{G_1},\tilde{G}_0=\dfrac{G_0}{G_1},\tilde{G}_1=1,\ \tilde{G}_{01}=\dfrac{G_{01}}{G_1};G_0,G_1,G_{01}$ – соответственно «холодная» (перед волной), «горячая» (за волной) и «перекрестная» моды распределений.

Распределения G_0 и G_1 являются максвелловскими функциями по относительным скоростям g

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

Перекрестная мода имеет вид [3]

$$G_{01}(g)=\left[\frac{m}{2\pi k(T_0+T_1)}\right]^{3/2}\frac{g}{u}\left\{\exp\left[-\frac{m(g-u)^2}{2k(T_0+T_1)}\right]-\exp\left[-\frac{m(g+u)^2}{(T_0+T_1)}\right]\right\}.$$

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)

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

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

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

Здесь $$m_0=\varepsilon(1-\varepsilon)^{-1}M_0^2;\quad \varepsilon=\frac{\gamma-1}{\gamma+1};$$

γ – отношение удельных теплоемкостей при постоянном давлении c_p и объеме c_v; $\gamma = \dfrac{c_p}{c_v} = (1+\varepsilon)(1-\varepsilon)^{-1}$; M_0 – число Маха перед волной, $M_0 = \dfrac{u_0}{a_0}$; a_0 – скорость звука перед волной, $a_0 = \sqrt{\dfrac{\gamma k T_0}{m}}$.

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

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

$$2\tilde{G}_{01} > 1 + \tilde{G}_0 . \tag{4}$$

Теорема 2. Величина сверхскоростного превышения ($\tilde{G}_{\max} > 1$) в бимодальном однокомпонентном газе при выполнении соотношения (4) достигает своего максимального значения

$$\tilde{G} = \tilde{G}_{\max} = \frac{\tilde{G}_{01}^2 - \tilde{G}_0}{2\tilde{G}_{01} - 1 - \tilde{G}_0} .$$

Справедливость утверждений обеих теорем непосредственно следует из выражения (3), рассматриваемого как квадратное уравнение относительно параметра b и анализа его дискриминанта на положительную определенность. Для представления о том, как выполняется неравенство (4), рассмотрим асимптотический гиперзвуковой предельный переход в параметрах функции распределения пар молекул (3)

$$M_0 \gg 1, \ \left(M_0 \to \infty\right),$$

$$m_0 \equiv \frac{\gamma - 1}{2} M_0^2 = \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} M_0^2 \gg 1, \ \left(m_0 \to \infty\right).$$

Физически этот предельный переход соответствует случаю бесконечно сильной гиперзвуковой ударной волны, когда $M_0 \to \infty$, $T_0/T_1 \to 0$.

В результате для выражений, входящих в формулы (2–3), получим

$$\frac{n_0}{n_1} = \frac{u_1}{u_0} \to \varepsilon ,$$

$$u \to u_0\left(1-\varepsilon\right),$$

$$\tilde{G}_0 \to m_0^{3/2} \exp\left(-\frac{\gamma M_0^2}{4} g^{-2}\right),$$

$$\tilde{G}_{01} \to \sqrt{2}\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\bar{g}^{-1}\left\{1 - \exp\left[\frac{-2g}{\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)}\right]\right\}\exp\left[\frac{2-\left(\bar{g}-2\right)^2}{4\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)}\right].$$

Применение асимптотического гиперзвукового предельного перехода позволяет получить простое аналитическое выражение для величины высокоскоростного «перехлеста» функции пар молекул

$$\tilde{G}_{*,\max} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} e^{1/2\varepsilon},$$

где $\varepsilon = \frac{\rho_0}{\rho_1}$, ε^{-1} – степень сжатия в волне.

Значения этой функции приведены в таблице 1.

Таблица1

Максимум “перехлеста” $G_{\max}$в сверхзвуковом потоке

Газ	A	(A_2) линейный, без вибрации	(A_2) линейный, с вибрацией	(A_3) нелинейный	Равновесный диссоциирующий воздух	C_8H_{16}
γ	5/3	7/5	9/7	7/6	11/10	22/21
ε	1/4	1/6	1/8	1/13	1/21	1/43
$\tilde{G}_{*,\max}$	1.31	2.37	4.84	36/28	1226	3.6×10^8

В этой таблице величина ε задавалась в качестве параметра для случаев молекул газов с различным количеством атомов: одноатомных (A), двухатомных (A_2), трехатомных (A_3), многоатомных (типа C_8H_{16}). В ней также учтен случай равновесного диссоциирующего воздуха с эффективным значением параметра $\varepsilon = \varepsilon_e = \frac{1}{21}\left(\gamma = \gamma_e = \frac{h}{e} = 1.1\right)$ за скачком уплотнения [4] и, кроме того, рассмотрены отдельно случаи $\varepsilon = \frac{1}{6}(\gamma = 1.4)$ и $\varepsilon = \frac{1}{8}\left(\gamma = \frac{9}{7}\right)$, соответствующие отсутствию или наличию возбужденных колебательных степеней свободы у двухатомных газов (A_2).

3. Основные факторы эффекта «перехлеста» в эволюции функции распределения пар молекул бинарной смеси газов внутри фронта ударной волны

Теоремы 1–2 допускают обобщение на случай бинарной смеси газов, с различными, в общем случае, концентрациями n_γ и массами m_γ молекул ($\gamma = \alpha, \beta$). Для этого бимодальное распределение $F(b,c)$, записанное для каждого сорта молекул γ, следует представить в следующем виде:

$$F^{(\gamma)} = n\chi\eta_0 F_0^{(\gamma)} + n(1-\chi)\eta_1 F_1^{(\gamma)}. \qquad (5)$$

Здесь $n = \sum_{(\gamma)} n_0^{(\gamma)} + \sum_{(\gamma)} n_1^{(\gamma)}$, $\chi = \sum_{(\gamma)} n_0^{(\gamma)} \Big/ n$, $\eta_0^{(\gamma)} = n^{(\gamma)} \Big/ \sum_{(\gamma)} n_0^{\gamma}$, $\eta_1^{(\gamma)} = n^{(\gamma)} \Big/ \sum_{(\gamma)} n_1^{\gamma}$.

Функция распределения пар молекул $G^{(\alpha,\beta)}$, вычисленная аналогично функции (3) на основе соотношения (5), может быть записана, как и в однокомпонентном (простом) газе, в форме полинома второй степени по параметру χ

$$G^{(\alpha,\beta)} = \chi^2 Q_0^{(\alpha,\beta)} + 2\chi(1-\chi)\left[\left(Q_{01}^{(\alpha,\beta)} + Q_{10}^{(\alpha,\beta)}\right)\right] + (1-\chi)^2 Q_1^{(\alpha,\beta)}, \qquad (6)$$

$$Q_0^{(\alpha,\beta)} = n^2\eta_0^{(\alpha)}\eta_0^{(\beta)} G_0^{(\alpha,\beta)}; \quad Q_1^{(\alpha,\beta)} = n^2\eta_1^{(\alpha)}\eta_1^{(\beta)} G_1^{(\alpha,\beta)},$$

$$Q_{01}^{(\alpha,\beta)} = \left(\frac{n^2}{2}\right)\eta_0^{(\alpha)}\eta_1^{(\beta)}G_{01}^{(\alpha,\beta)}, \quad Q_{10}^{(\alpha,\beta)} = \left(\frac{n^2}{2}\right)\eta_1^{(\alpha)}\eta_0^{(\beta)}G_{10}^{(\alpha,\beta)}.$$

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 $\alpha = \beta$.

Выражение (6) позволяет исследовать на экстремум (максимум) функцию пар молекул (6), отнесенную к поступательно равновесному значению этой функции за ударной волной

$$\tilde{G}^{(\alpha,\beta)} = \frac{G^{(\alpha,\beta)}}{G_1^{(\alpha,\beta)}}.$$

Соотношения (5–6) оказываются эффективными в случае бинарной смеси газов с несильно отличающимися отношениями масс и концентраций обоих компонентов

$$1 < \frac{m_\alpha}{m_\beta} < 2, \qquad 1 < \frac{n_\alpha}{n_\beta} < 2. \tag{7}$$

Окончательная количественная формулировка результатов для смеси газов, аналогичная табл. 1 для однокомпонентного газа, требует для своей реализации применения численных методов. Связано это с тем, что парциальные температуры и макроскопические скорости газа в дозвуковых «крыльях» бимодальных распределений по скоростям молекул оказываются в случае смеси газов, в отличие от однокомпонентного газа, принципиально переменными, а не постоянными [5].

Численные исследования эффекта «перехлеста» в бинарной смеси газов, проведенные ранее в работах [1, 6], показали, что наиболее существенным он становится в случае выполнения неравенств, более сильных, чем (7)

$$\frac{m_\alpha}{m_\beta} < \frac{1}{10}, \qquad \frac{n_\alpha}{n_\beta} > 100, \tag{8}$$

где величины с индексом α относятся к легкому газу, а с индексом β – к тяжелому.

Функции распределения пар компонент $G^{(\alpha,\beta)}$ при $\beta = \alpha$ (легкого компонента) и при $\beta \neq \alpha$ (легкого – тяжелого) обнаруживают при своей эволюции внутри фронта ударной волны эффект высокоскоростного «перехлеста», количественно близкий к соответствующему эффекту в однокомпонентном газе. Наиболее сильный эффект наблюдается для функции $G^{(\alpha,\beta)}$ при $\alpha = \beta$ (тяжелого компонента).

Можно показать, анализируя соотношения (7–8), что усиление эффекта «перехлеста» у тяжелого компонента связано с тем, что мода $G_{01}^{(\alpha,\beta)}$ содержит в показателе экспоненты отношение массы тяжелого компонента к равновесной температуре газа за ударной волной, определяемой в силу соотношений (8) преобладанием легкого компонента в смеси газов.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-07-00277_а

Литература

1. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Поступательная релаксация в ударных волнах // Черноголовка, Препринт ОИХФ АН СССР. 1991. 68 с.
2. KuznetsovM.M., KuleshovaYu.D. Increase in rates of Kinetic Processes inside the Bimodal Hypersonic Shock Wave// HeatTransRes. – 2012. – Vol. 43. – I.3. – Pp. 228–236.

3. 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.
4. Агафонов В.П., Вертушкин В.К., Гладков А.А., Полянский О.Ю. Неравновесные физико-химические процессы в газодинамике. – М.: Машиностроение, 1972, 344с.
5. Oberai M.M. A Mott-Smith distribution to describe the structure of a plane shock wave in binary mixture // Phys Fluids. 1966. Vol.9. Pp. 1634–1637.
6. Башлыков А.М., Великодный В.Ю. Структура ударных волн в газовой смеси // Журнал технической физики. 1991. Т. 61. №8. С. 33–42.

Статья поступила в редакцию 24 марта 2016 г.