

На правах рукописи



Сергеева Наталья Ивановна

**РАЗРАБОТКА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ
ОПИСАНИЯ ВЫСОКОНЕРАВНОВЕСНЫХ ТЕЧЕНИЙ ГАЗОВЫХ
СМЕСЕЙ**

Специальность: 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель:	Попов Сергей Александрович кандидат физико-математических наук, доцент
Официальные оппоненты:	Кузнецов Михаил Михайлович доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Государственный университет просвещения», г. Москва
	Кусов Андрей Леонидович кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории акционерного общества «Центральный научно-исследовательский институт машиностроения», Московская область, г. Королёв
Ведущая организация:	Федеральное автономное учреждение «Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского», ФАУ «ЦАГИ», Московская область, г. Жуковский

Защита диссертации состоится «19» декабря 2025 года в 10 часов 00 минут на заседании диссертационного совета 24.2.327.08 в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» (МАИ) по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте МАИ по ссылке:
https://mai.ru/events/defence/?ELEMENT_ID=186177

Автореферат разослан «__» _____ 2025 г.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим отправлять по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4, Ученый совет МАИ.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.327.08, д.ф.-м.н., с.н.с.

Гидасов В.Ю.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

В настоящее время весьма актуальной задачей является описание течений, обладающих высокой динамической (поступательной) неравновесностью. К таким течениям относятся, например, высокоскоростные течения, обтекание активных по отношению к газу поверхностей и т.п.. С практической точки зрения наиболее актуальны течения газовых смесей, недостаточно изученные как теоретически, так и экспериментально.

Актуальность моделей течений газовых смесей связана с необходимостью физически адекватного описания разделения компонентов в газовой смеси при торможении высокоскоростных потоков (в ударных волнах) и обтекании активных по отношению к отдельным компонентам поверхностей. Активность поверхности подразумевает процессы конденсации, хемосорбции и т.п.. Существует целый ряд практических задач, требующих такого описания, например, обтекание лобовых поверхностей спускаемых космических аппаратов, химически активных к отдельным компонентам газа, обледенение поверхностей летательных аппаратов, разделение компонентов в конденсационных и криоконденсационных установках и проч..

Степень разработанности темы исследования

Проблема описания высоконеравновесных течений существует как в газовой динамике, так и в динамике плазмы. Существует множество аналитических методов описания процессов, протекающих в смесях. Однако рассмотрение поведения смесей газов аналитически может быть сопряжено со значительными математическими трудностями.

Наиболее распространенным на сегодняшний день методом исследования процессов, происходящих в ударных волнах, является метод прямого статистического моделирования (Direct simulation Monte-Carlo, DSMC) или Монте-Карло. В подобных моделях количество дополнительных допущений минимально, что повышает точность и физическую адекватность модели. При использовании данного метода в качестве элементарного объекта используется отдельная молекула. Однако применение данных методов для практических задач требует значительных вычислительных ресурсов и используется только для расчета течений разреженных газов при умеренных числах Кнудсена ($Kn > 0.1$).

Наряду с методом прямого статистического моделирования в настоящее время активно развивается и используется подход, основанный на решении модельных кинетических уравнения (МКУ), которые являются упрощенным вариантом кинетического уравнения Больцмана. В МКУ за элементарный объект

принимается группа молекул, объединенная определенным кинематическим параметром. Это позволяет упростить решение и понизить размерность задачи. Достоинствами модельных кинетических уравнений является хорошая сходимость с результатами, полученными на основе решения уравнения Больцмана, а также экономичность. Кроме того, рассмотрение модельных кинетических уравнений позволяет получить систему моментных уравнений, применимую к плотным газам. К недостаткам МКУ следует отнести то, что функция распределения молекул по скоростям, в отличие от моделей Монте-Карло, неточно соответствует больцмановской. Однако моменты этой функции (плотность, скорость группового движения, тензор напряжения, вектор теплового потока) определяется значительно точнее, чем моделями механики сплошной среды. В большинстве работ с использованием МКУ использовано модельное кинетическое уравнение БГК. К недостаткам этой модели следует отнести неверное число Прандтля и, как следствие, сильно заниженное время релаксации при описании многоатомных газов. Следует отметить, что большинство течений, основанных на МКУ, записаны для одноатомных и многоатомных, но однокомпонентных газов. Отдельные модели, использующиеся для описания газовых смесей, базируются на модели БГК, но им присущи и все недостатки этой модели. Экспериментальные же работы посвящены в основном разделению профилей плотности, скорости и составляющих температуры в ударной волне двухкомпонентного одноатомного газа.

Другой уровень описания основан на теории сплошной среды. В данной модели за элементарный объект принимается жидкая частица. В качестве характерного примера модели вязкой и теплопроводной среды можно привести модель Навье–Стокса–Фурье или NSF. В течениях, где число Кнудсена мало, а число Рейнольдса невелико, модель NSF также является достаточно информативной. Однако такие модели ограничены малыми числами Кнудсена. К основным недостаткам моделей сплошной среды, применительно к описанию газовых смесей, следует отнести неспособность этих моделей физически адекватно описывать взаимодействие газа с активными поверхностями.

При изучении процессов в высоконеравновесных течениях большое внимание уделяется описанию особенностей, протекающих в ударных волнах. Повышенный интерес к этой задаче связан с тем, что данное физическое явление хорошо изучено экспериментально и позволяет строить относительно простые аналитические и численные решения. При построении моделей высоконеравновесных течений задача о структуре ударной волны рассматривается как основной тест для разрабатываемой модели.

Цель диссертационной работы – разработка физико-математических моделей для описания разделения компонентов газовых смесей в высоконеравновесных течениях и изучение физических эффектов в неравновесных течениях.

Основными задачами, решаемыми в работе, являются:

1. Разработка физико-математических моделей для описания высоконеравновесных течений смеси газов на базе модельного кинетического уравнения.
2. Разработка моментных уравнений на основе полученных модельных кинетических моделей.
3. Разработка комбинированной модели для описания течений в плотных газах.
4. Тестирование полученных моделей на основании сравнения полученных результатов с известными теоретическими, экспериментальными и расчетными данными.
5. Изучение особенностей разделения компонентов смеси в различных видах неравновесных течений.

Объектом исследования являются высоконеравновесные течения смесей газов.

Предмет исследования – физико-математические модели смесей разреженных газов.

Научная новизна работы:

- предложены новые модели для описания течений высокой степени неравновесности на основе модельного кинетического уравнения;
- получена система моментных уравнений на основе модельного кинетического уравнения для смеси газа;
- предложена комбинированная физико-математическая модель для описания течений плотных газов;
- показаны особенности влияния парциального состава смеси на процессы разделения компонентов;
- показаны особенности формирования потока в каналах с поглощающими стенками.

Теоретическая и практическая значимость работы состоит в том, что разработанные физико-математические модели течений и методы их численной реализации могут быть использованы:

- при изучении высоконеравновесных течений;
- при разработке вычислительных ядер инновационных CFD-пакетов.

Методология и методы исследования.

В работе применялся аналитический метод исследования. Для изучения свойств полученной физико-математической модели использовался метод численного эксперимента. Полученные результаты сравнивались с известными экспериментальными и расчетными данными.

Положения, выносимые на защиту

На защиту выносятся следующие научные положения:

1. Модельные кинетические уравнения для описания течений смесей газов высокой степени неравновесности.
2. Система моментных уравнений для смеси газов.
3. Комбинированная физико-математическая модель для смесей плотных газов.
4. Особенности формирования профилей плоских ударных волн смеси газа в зависимости от ее парциального состава.
5. Особенности формирования потока в каналах с поглощающими стенками.

Достоверность результатов исследования подтверждена сравнением полученных данных с данными экспериментальных и расчетных исследований разных авторов.

Личный вклад соискателя. В процессе научной деятельности соискателем лично получены результаты, которые изложены в диссертационной работе. Исследования включают математическую постановку проблемы, разработку физико-математических моделей, создание программ на языке Fortran, обработку и анализ результатов, которые выносятся на защиту. Автор лично подготовил публикации, отражающие содержание диссертации и выступал с докладами по выполненной работе.

Апробация и внедрение результатов.

Основные положения и результаты диссертационной работы доложены и обсуждены на российских и международных научных конференциях:

1. «Авиация и космонавтика 2024». 23-я Международная конференция, г.Москва, доклад «Численное исследование структуры ударных волн в смесях газов с использованием системы моментных уравнений».
2. XXIII международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС 2023), г.Дивноморское, доклад «Модельное кинетическое уравнение для описания смесей одно- и многоатомных газов».

Содержание диссертации изложено в четырех статьях, из них две – в изданиях перечня ВАК. Две статьи опубликованы в международном журнале

«High Temperature», индексируемом в международных реферативных базах данных Web of Science (WoS) и Scopus, издание на русском также входит в Белый список ВАК.

По материалам диссертационной работы зарегистрированы 2 программы для ЭВМ:

- Программа расчета ударной волны смеси двух одноатомных газов с использованием кинетической модели. Свидетельство № 2023666595.
- Программа расчета ударной волны смеси многоатомных газов с использованием кинетической модели. Свидетельство № 2024682040.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, списка сокращений и условных обозначений. Общий объем составляет 105 страниц, включая 47 рисунков. Библиографический список содержит 93 наименования.

Представленная диссертационная работа является одним из результатов комплексной исследовательской работы в области неравновесной газовой динамики, проводимой на кафедре «Аэродинамика, динамика и управление летательных аппаратов» МАИ. Работа выполнена в рамках государственных заданий Минобрнауки России, темы FSFF-2020-0013 и FSFF-2023-0008.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении раскрыта актуальность разработки методов описания течений газовой динамики, показана степень разработанности темы, сформулированы цель и задачи работы, выделены объект и предмет исследования, показана научная и практическая значимость работы, представлена апробация и внедрение результатов.

В первой главе диссертации рассматриваются течения многокомпонентных многоатомных совершенных газов. Для отдельных компонентов газовой смеси использована специальная символика. Параметры рассматриваемого компонента обозначены верхним индексом K . В случае межкомпонентных взаимодействий нижний индекс N обозначает фоновый компонент. Если параметры данной пары компонентов совпадают для обоих компонентов, оба индекса указаны сверху.

Система кинетических уравнений для смеси одноатомных газов записана следующим образом:

$$\frac{\partial f^K}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f^K}{\partial x_\alpha} = \nu^{KK} (f_K^{+K} - f^K) + \sum_{N \neq K} \nu_N^K (f_N^{+K} - f^K).$$

Здесь $f(t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3)$ – функция распределения молекул по скоростям. Повторяющийся подстрочный греческий индекс подразумевает суммирование одночлена по всем значениям соответствующей координаты.

В данной работе в качестве теста рассматривалась задача о профиле ударной волны, имеющего своей целью оценить физическую адекватность разрабатываемого модельного уравнения.

Если газ движется вдоль одной из координатных осей, например оси OX , то можно сократить количество измерений функции распределения, введя в рассмотрение две функции f_n и f_p для каждого из компонентов:

$$f_n(t, x, \xi_x) = \int f d\xi_y d\xi_z,$$

$$f_p(t, x, \xi_x) = \int (c_y^2 + c_z^2) f dc_y dc_z.$$

Здесь и далее $c_i = \xi_i - U_i$ – проекция вектора тепловой скорости молекул. В одномерной задаче очевидно: $c_y = \xi_y$, $c_z = \xi_z$. Функция f_p необходима для вычисления моментов второго и третьего порядков.

Кинетические уравнения при этом принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \begin{matrix} f_n^K \\ f_p^K \end{matrix} \right| + \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \left| \begin{matrix} f_n^K \\ f_p^K \end{matrix} \right| = \nu^{KK} \left| \begin{matrix} f_{nK}^{+K} - f_n^K \\ f_{pK}^{+K} - f_p^K \end{matrix} \right| + \nu_N^K \left| \begin{matrix} f_{nN}^{+K} - f_n^K \\ f_{pN}^{+K} - f_p^K \end{matrix} \right| \quad (1)$$

Здесь ν^{KK} и ν_N^K – частоты KK и KN - столкновений соответственно, а

$$f_{nK}^{+K} = \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T^K}} \exp\left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T^K}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T^K} - 3\right)\right),$$

$$f_{pK}^{+K} = \frac{2R^K T^K n^K}{\sqrt{2\pi R^K T^K}} \exp\left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T^K}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T^K} - 1\right)\right),$$

$$f_{nN}^{+K} = \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_N^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_N^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_N^{+K}} - 3\right)\right),$$

$$f_{pN}^{+K} = \frac{2R^K T_N^{+K} n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_N^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_N^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_N^{+K}} - 1\right)\right),$$

$$(c_N^{+K})_x = \xi_x - U_x^{KN}.$$

Моменты этих функций распределения имеют следующий вид:

$$n^K = \int f_n^K d\xi_x,$$

$$(U^K)_x = \frac{1}{n^K} \int \xi_x f_n^K d\xi_x,$$

$$T^K = \frac{1}{3R^K n^K} \int \left((c^K)_x^2 f_n^K + f_p^K \right) dc_x,$$

$$(q^K)_x = \frac{n^K}{2} \int \left((c^K)_x^3 f_n^K + (c^K)_x f_p^K \right) dc_x,$$

$(p^K)_{xx} = m^K \int (c^K)_x^2 f_n^K dc_x - n^K k T^K$ – неравновесное нормальное напряжение (элемент девиатора напряжений).

Здесь учтено, что $d(c^K)_x = dc_x = d\xi_x$.

Результаты расчетов для смеси аргона и гелия при содержании аргона 13% и числе Маха 2.03, в качестве примера, показаны на Рисунке 1. В расчетах свободный параметр s аппроксимации $\mu = \mu(T^s)$ принимался равным $s = 1$.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку: $\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}$, где

индексы 1 и 2 соответствуют значению параметра перед и за ударной волной. Значение координаты $x/\lambda_\infty = 0$ соответствует середине профиля плотности для соответствующего компонента.

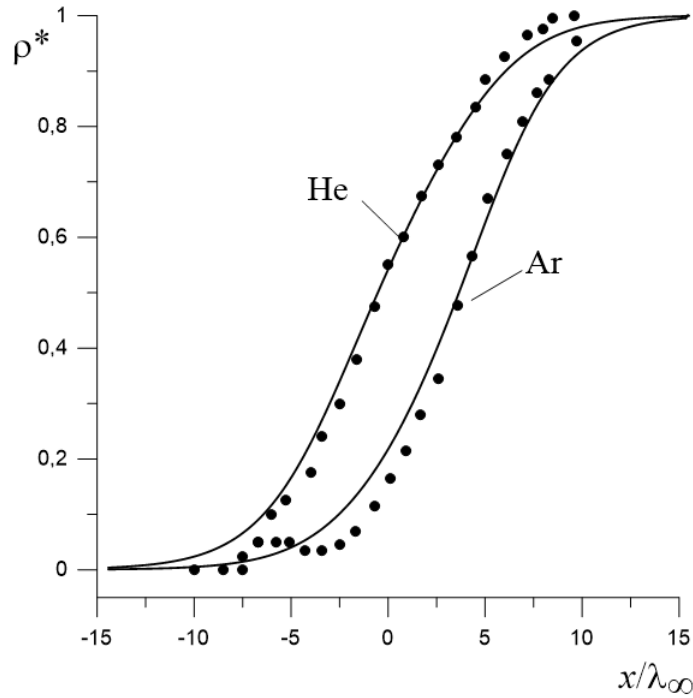


Рисунок 1 – Профили плотности в плоской ударной волне смеси аргона и гелий, содержание аргона 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$: точки – экспериментальные данные (Бочкарев, Ребров, Тимошенко), сплошная линия – решение (1)

При рассмотрении многоатомных молекул возникает необходимость разделения поступательной и вращательной температур газа T_t^K и T_r^K . Если газ движется вдоль одной из координатных осей, обозначаемой как OX, то можно сократить количество измерений функции распределения, введя в рассмотрение три функции f_n, f_p и f_ω для каждого из компонентов:

$$f_n(t, x, \xi_x) = \int f d\xi_y d\xi_z d\varepsilon, \quad f_p(t, x, \xi_x) = \int (c_y^2 + c_z^2) f dc_y dc_z d\varepsilon, \\ f_\omega(t, x, \xi_x) = \int \varepsilon f d\xi_y d\xi_z d\varepsilon.$$

Система кинетических уравнений для компонента K принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} + \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} = \nu^{KK} \begin{vmatrix} f_{nK}^{+K} - f_n^K \\ f_{pK}^{+K} - f_p^K \\ f_{\omega K}^{+K} - f_\omega^K \end{vmatrix} + \nu_N^K \begin{vmatrix} f_{nN}^{+K} - f_n^K \\ f_{pN}^{+K} - f_p^K \\ f_{\omega N}^{+K} - f_\omega^K \end{vmatrix}. \quad (2)$$

Здесь

$$f_{nK}^{+K} = \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_t^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T_t^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T_t^{+K})^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T_t^{+K}} - 3\right)\right),$$

$$f_{pK}^{+K} = \frac{2R^K T_t^{+K} n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_t^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c^K)_x^2}{2R^K T_t^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c^K)_x}{15\rho^K (R^K T_t^{+K})^2} \left(\frac{(c^K)_x^2}{R^K T_t^{+K}} - 1\right)\right),$$

$$f_{nN}^{+K} = \frac{n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_{tN}^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_{tN}^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_{tN}^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_{tN}^{+K}} - 3\right)\right),$$

$$f_{pN}^{+K} = \frac{2R^K T_{tN}^{+K} n^K}{\sqrt{2\pi R^K T_{tN}^{+K}}} \exp\left(-\frac{(c_N^{+K})_x^2}{2R^K T_{tN}^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_x (c_N^{+K})_x}{15\rho^K (R^K T_{tN}^{+K})^2} \left(\frac{(c_N^{+K})_x^2}{R^K T_{tN}^{+K}} - 1\right)\right),$$

$$f_{\omega K}^{+K} = \frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K-1)} k T_r^{+K} f_{nK}^{+K}, \quad f_{\omega N}^{+K} = \frac{5-3\gamma^N}{2(\gamma^N-1)} k T_{rN}^{+K} f_{nN}^{+K},$$

$$(c_N^{+K})_x = \xi_x - U_x^{KN}, \quad R^K = k/m^K, \quad \gamma - \text{показатель адиабаты.}$$

Поступательная и вращательная температуры определяются следующими зависимостями:

$$T_t^K = \frac{1}{3R^K n^K} \int \left((c^K)_x^2 f_n^K + f_p^K \right) dc_x, \quad T_r^K = \frac{2(\gamma^K-1)}{(5-3\gamma^K) n^K} \int f_\omega^K dc_x.$$

Некоторые результаты расчетов показаны на Рисунке 2 и Рисунке 3. В расчетах свободный параметр s принимался равным $s = 0.5$.

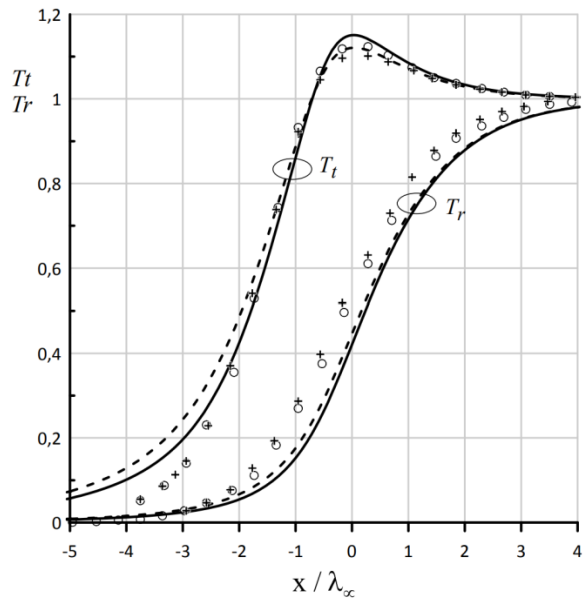


Рисунок 2 – Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%, $M_\infty = 3$, $s = 0.5$: точки – данные, полученные методом Монте-Карло (Todorova, White, Steijl), крестики – азот, кружки – кислород, пунктир – азот, сплошная линия – кислород

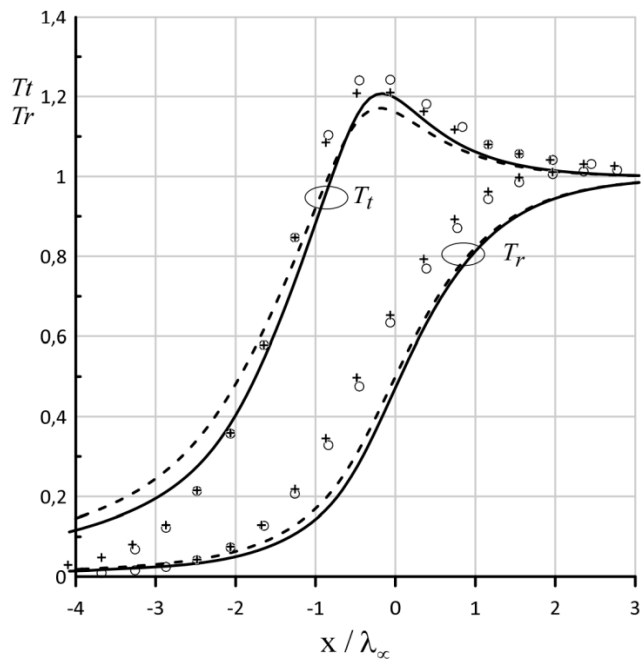


Рисунок 3 – Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%, $M_\infty = 5$, $s = 0.5$: точки – данные, полученные методом Монте-Карло (Todorova, White, Steijl), крестики – азот, кружки – кислород, пунктир – азот, сплошная линия – кислород

Проведенные численные тесты показывают, что разработанная модель дает удовлетворительную сходимость с экспериментальными и расчетными данными для одноатомных и многоатомных газов.

Во второй главе приводится система моментных уравнений K -компонента смеси многоатомных газов. Процедура сведения кинетического уравнения к системе моментных уравнений достаточно традиционна. Применительно к полученному в Главе 1 модельному кинетическому уравнению эта процедура заключается в интегрировании кинетических уравнений с множителями (молекулярным признаком) вида $m^K \xi_i \xi_j \xi_k \dots$ по пространству молекулярных скоростей. Полученная система моментных уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \rho^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial \rho^K}{\partial x_\alpha} + \rho^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} &= 0 \\ \frac{\partial u_i^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\rho^K} \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} &= \sum_{N \neq K} v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K) \\ \frac{\partial T^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial T^K}{\partial x_\alpha} + (\gamma^K - 1) \frac{P_{\alpha\beta}^K}{\rho^K R^K} \frac{\partial u_\beta^K}{\partial x_\alpha} + \frac{\gamma^K - 1}{\rho^K R^K} \frac{\partial q_\alpha^K}{\partial x_\alpha} &= \\ &= \sum_{N \neq K} v_N^K \left(1.5(\gamma^K - 1) T_t^K + \frac{5 - 3\gamma^K}{2} \left(\frac{1}{Z^K} T^{KN} + \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K \right) - \right. \\ &\quad \left. T^K + \frac{\gamma^K - 1}{2R^K} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right) \end{aligned} \right. \quad (3)$$

применима в переходной области и на границе области гидродинамической. Здесь Z (примерно равное 5) – количество упругих столкновений молекулы, приходящихся на одно неупругое.

Для замыкания данной системы необходимо определить поступательную и вращательную температуры, а также напряжения P_{ij}^K и тепловой поток q_i^K . Будем рассматривать эти величины в первом приближении процедуры Чепмена-Энскога (приближение Навье-Стокса):

$$P_{ij}^K = -\frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \left(\frac{\partial u_i^K}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^K}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \left(1 - \frac{5 - 3\gamma^K}{2} Z^K \right) \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha}, \quad (4)$$

$$q_i^K = -\frac{9\gamma^K - 5}{4(\gamma^K - 1)} R^K \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \frac{\partial T^K}{\partial x_i}. \quad (5)$$

В случае чистых, однокомпонентных газов, коэффициент вязкости $\mu = p/v$ не зависит от плотности газа, т.к. давление и частота столкновений прямо пропорциональны концентрации молекул. Представим "эффективный"

коэффициент вязкости компонента смеси μ_{eff}^K , фигурирующий в (4) и (5), в следующем виде

$$\mu_{eff}^K = \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} = \frac{n^K k T^K}{n^K (v^{KK})^I + \sum_{N \neq K} n^N (v_N^K)^I},$$

здесь условные обозначения $(v^{KK})^I$ и $(v_N^K)^I$ подразумевают частоты столкновений одной молекулы класса K с молекулами того же класса и с молекулами класса N . Эти частоты зависят только от температуры и химических свойств компонентов. Нетрудно заметить, что при уменьшении концентрации n^K "эффективный" коэффициент вязкости, а вместе с ним и вязкие члены p_{ij}^K и q_i^K , также уменьшаются и в пределе обращаются в ноль. Таким образом, течение компонента с малой парциальной концентрацией, даже в существенно неравновесной области, близко к невязкому течению.

Для проверки достоверности было выполнено сравнение решения системы моментных уравнений (3) с решением модельного кинетического уравнения (2). На Рисунке 4 и Рисунке 5 показаны зависимости плотности и температуры для углекислого газа. В Главе 2 представлено решение задачи о профиле ударной волны для смеси двух многоатомных газов. Рассматривалась смесь водорода и углекислого газа ввиду большой разницы масс молекул данных газов. Также использовалось модельное кинетическое уравнение Главы 1 для смеси аргон-гелий. На Рисунке 6 и Рисунке 7 показаны зависимости плотности и температуры для смеси водорода и углекислого газа в равных пропорциях при $M_\infty = 2.05$.

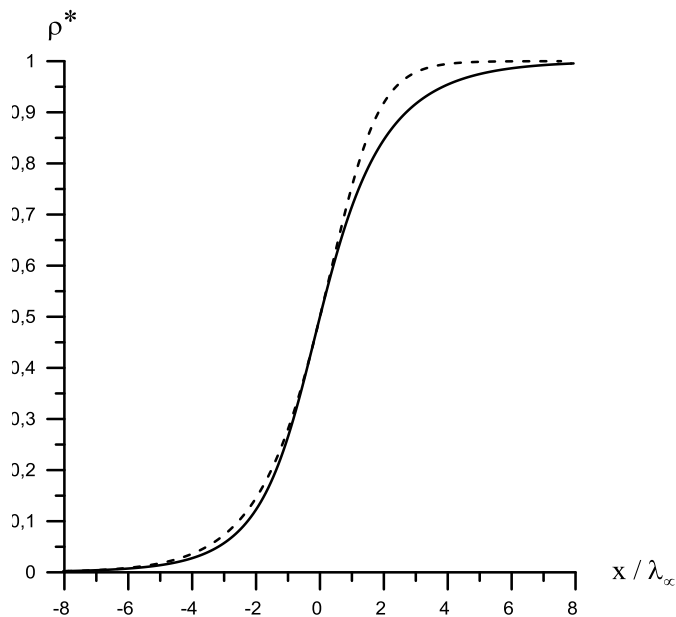


Рисунок 4 – Профили плотности углекислого газа в ударной волне, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения (2), пунктирная линия – решение системы моментных уравнений (3)

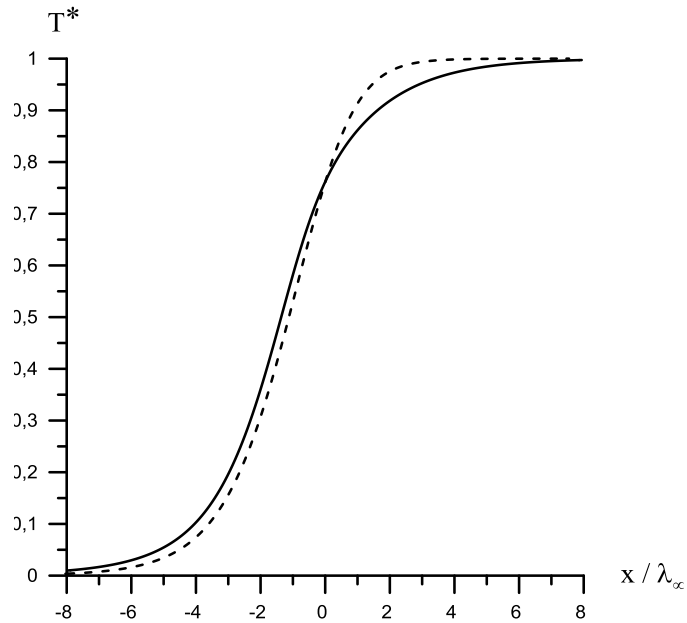


Рисунок 5 – Профили температуры углекислого газа в ударной волне, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения (2), пунктирная линия – решение системы моментных уравнений (3)

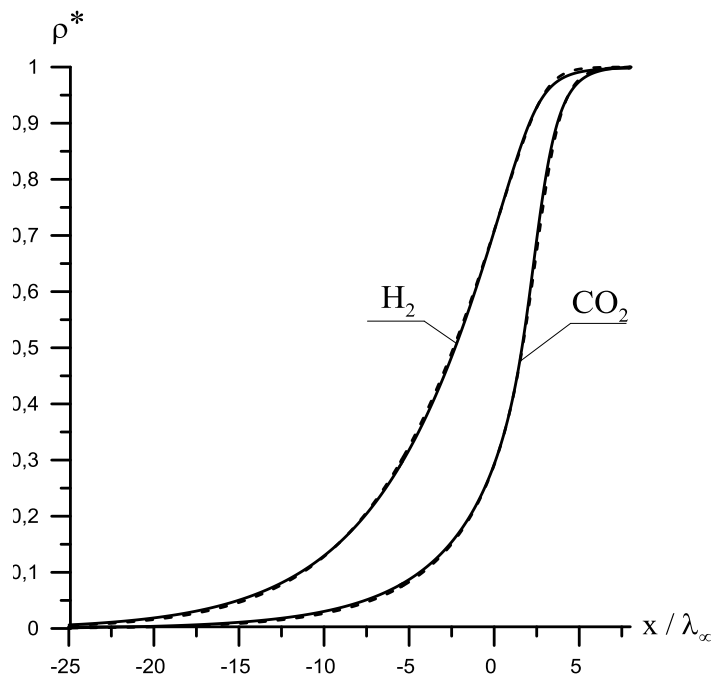


Рисунок 6 – Профили плотности водорода в смеси $\text{H}_2\text{-CO}_2$. Процентное содержание водорода – 50%, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения (2), пунктирная линия – решение системы моментных уравнений (3)

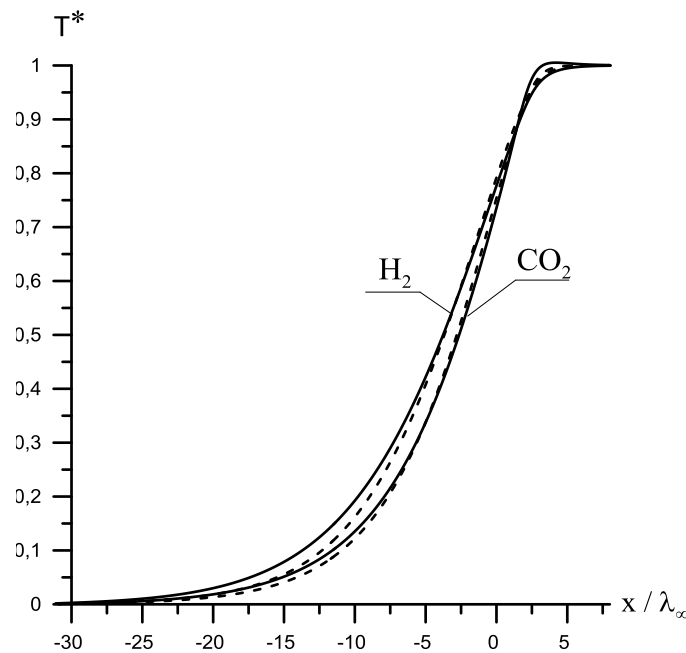


Рисунок 7 – Профили температуры водорода в смеси $\text{H}_2\text{-CO}_2$. Процентное содержание водорода – 50%, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения (2), пунктирная линия – решение системы моментных уравнений (3)

Данные графиков показывают удовлетворительное соответствие результатов, полученных с помощью двух моделей течения газа при расчете смеси газов. При сравнении решений, полученных для чистого углекислого газа, наблюдается значительное расхождение профилей ударной волны. Это связано с приближенным определением вязких членов в моментных уравнениях.

В третьей главе предметом изучения являлось течение внутри плоской ударной волны смесей двухкомпонентных газов в зависимости от их парциальных концентраций. Для большей наглядности результатов расчета размер возмущенной области представлен в виде "ширины" ударной волны δ , характеризующей максимальный угол наклона профиля. Этот параметр измеряется в длинах пробега молекулы в невозмущенном потоке. Отметим, что во многих работах для оценки влияния числа Маха на размер ударной волны используется обратная величина. Схема определения δ представлена на Рисунке 8. Полученные зависимости показывают, что при изменении концентрации компонент наблюдается значительное изменение угла наклона профиля, а следовательно, и ширины возмущенной области. Изменение ширины профилей ударной волны отдельных компонентов смеси в зависимости от их парциальных концентраций n_{part} приведены на Рисунке 9 и Рисунке 10. Видно, что даже небольшое количество примеси в смеси приводит к значительному изменению ширины профиля.

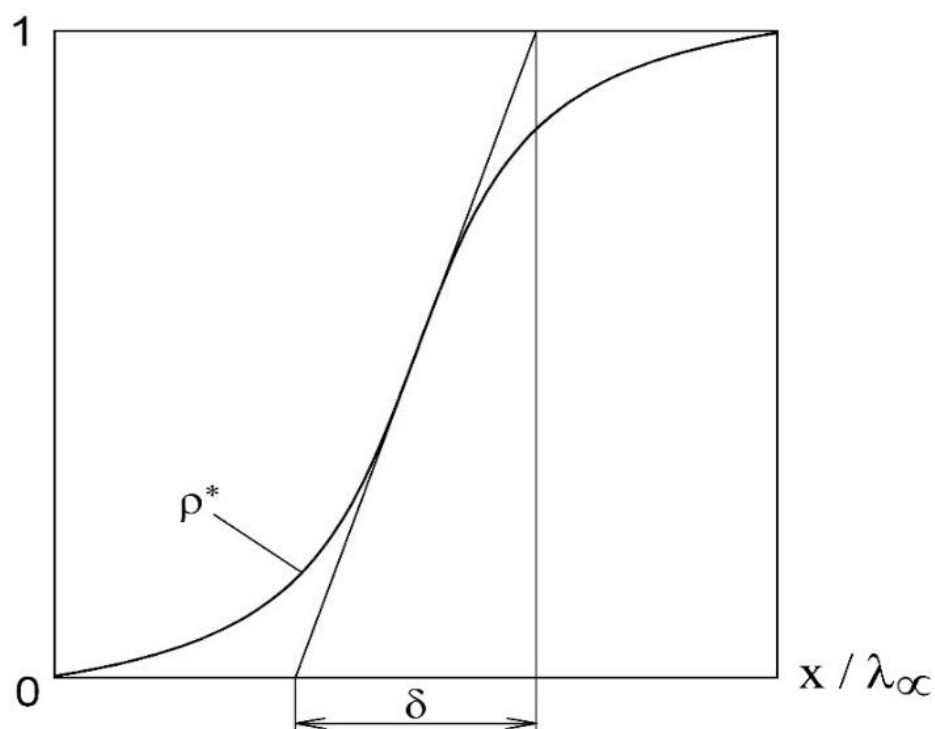


Рисунок 8 – Схема определения ширины профиля в ударной волне

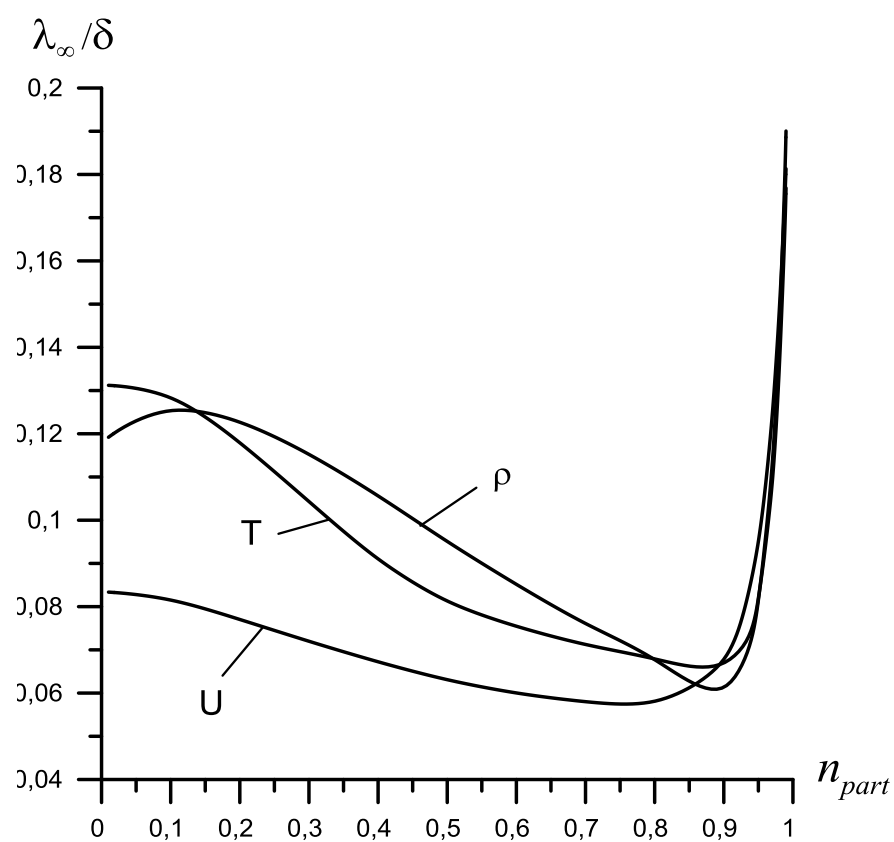


Рисунок 9– Ширина профилей скорости, плотности и температуры в ударной волне для водорода в зависимости от его парциальной концентрации в смеси с углекислым газом

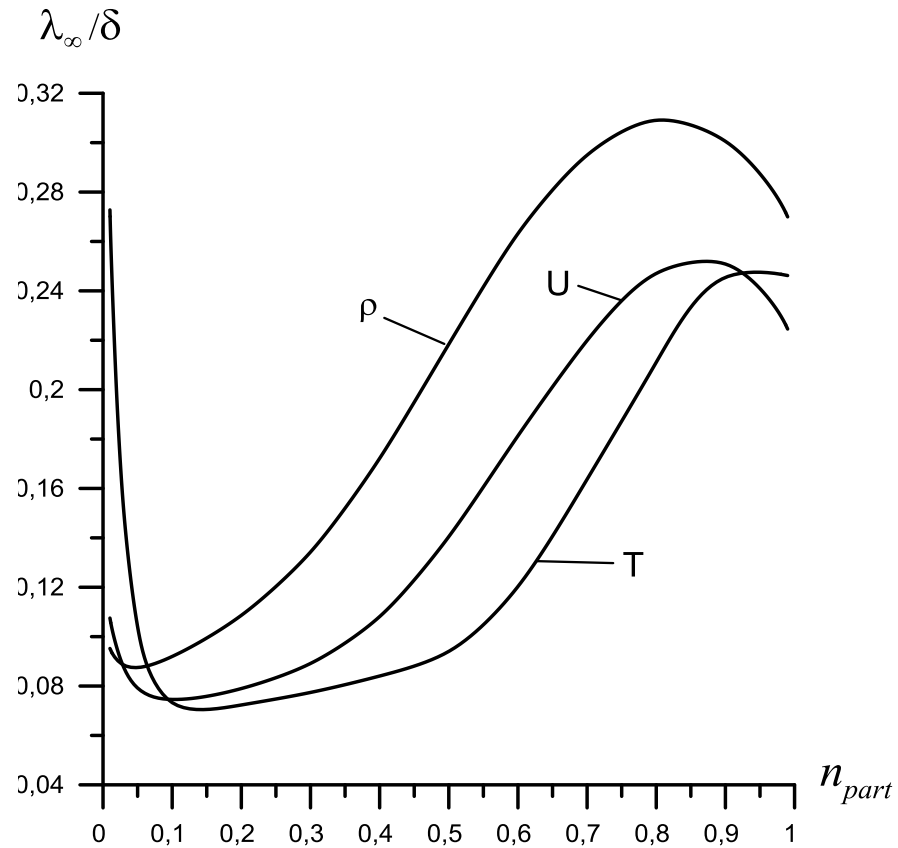


Рисунок 10 – Ширина профилей скорости, плотности и температуры в ударной волне для углекислого газа в зависимости от его парциальной концентрации в смеси с водородом

На Рисунке 11 показаны профили скорости звука a внутри ударной волны в «чистом» водороде и его смеси с углекислым газом, где скорость звука определена как $a = \sqrt{\gamma_{mix} \frac{k T_{mix}}{\tilde{m}}}$. Здесь γ_{mix} , T_{mix} – показатель адиабаты и температура смеси, которые определяются следующим образом:

$$\gamma_{mix} = \frac{\sum_{i=1}^N n_i \frac{\gamma^i}{\gamma^i - 1}}{\sum_{i=1}^N n_i \frac{1}{\gamma^i - 1}}, \text{ где } i - \text{номер компонента, } N - \text{количество компонент;}$$

$$T_{mix} = \sum_{i=1}^N n_i T_i.$$

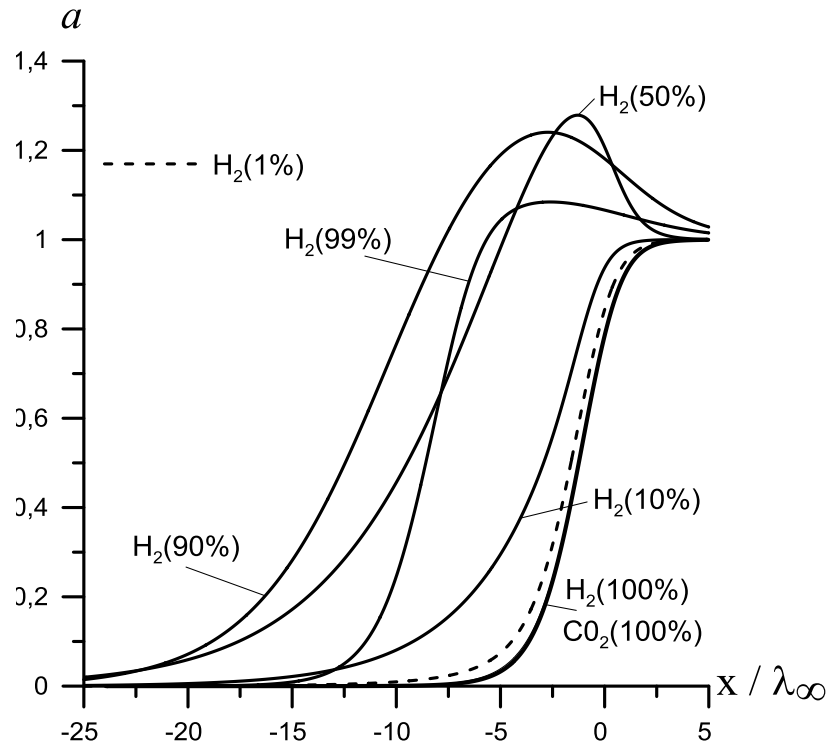


Рисунок 11 – Профили скорости звука в смеси $\text{H}_2\text{-CO}_2$ и в «чистых» газах

Данные графики показывают немонотонное изменение скорости звука в смесях, в отличие от «чистых» газов. Вместе с тем, на профиле температуры смеси отсутствуют немонотонные участки (Рисунок 12).

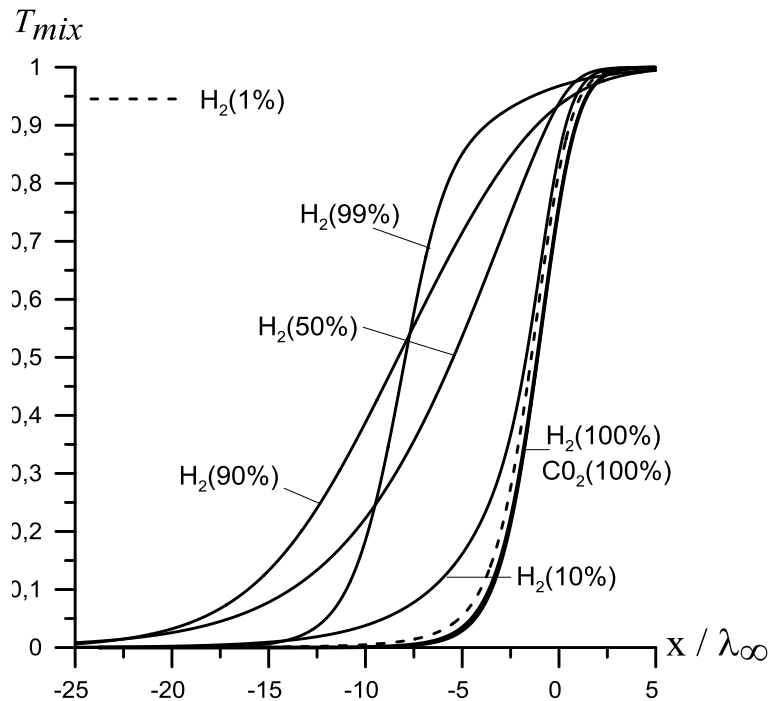


Рисунок 12 – Профили температуры «чистого» водорода и его смесей с углекислым газом.

Немонотонные участки на профилях скорости звука объясняются немонотонным распределением кажущейся массы молекул $\tilde{m}_\infty = \sum \frac{m^K n_\infty^K}{n_\infty}$. На Рисунке 13 показаны зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа.

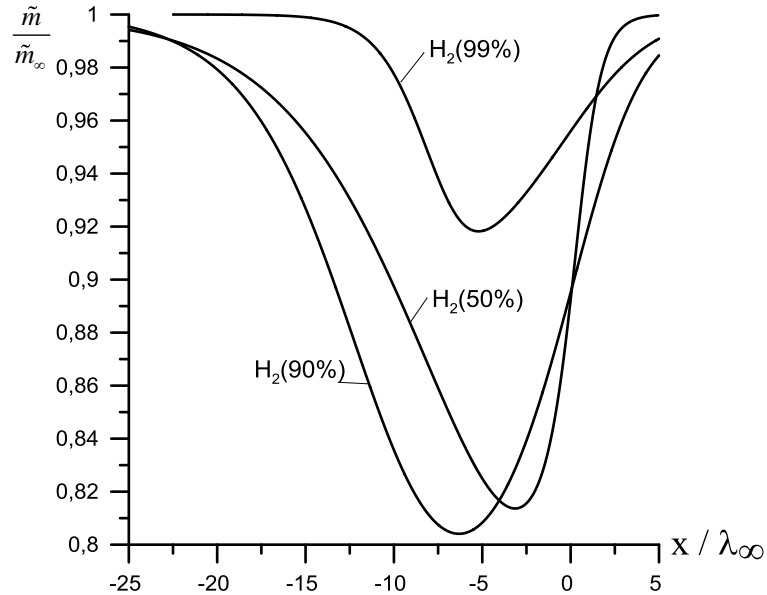


Рисунок 13 – Зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа

Обращает на себя внимание сильное влияние малой примеси тяжелого компонента на профили скорости звука (Рисунок 11) и температуры (Рисунок 12). Аналогичное влияние наблюдается на профилях других параметров газа, а также в смесях одноатомных газов. Малая примесь легкого компонента в значительно меньшей степени влияет на профили тяжелого компонента.

В четвертой главе рассмотрено течение в плоском канале шириной h . Рассчитывалось течение двухкомпонентной смеси газа, один из компонентов которой конденсируется поверхностями стенок. В качестве кинетической модели в пристеночном слое было использовано модельное кинетическое уравнение для смеси газов, ранее полученное в Главе 1. Для сокращения объема памяти вычислительного средства и уменьшения количества вычислительных операций было сделано следующее допущение: производные функции распределения по оси OX существенно меньше производных по оси OY . Кроме этого, рассматривалось стационарное течение.

В этом случае модельное кинетическое уравнение упрощено до вида

$$\xi_y \frac{\partial f^K}{\partial y} = \nu^{KK} (f^{+KK} - f^K) + \nu_N^K (f_N^{+K} - f^K).$$

Таким образом, функция распределения в пространстве скоростей становится одномерной по пространству скоростей $f^K = f^K(x, y, \xi_y)$.

Для кинетической модели использовалась расчетная сетка с увеличенным (по сравнению с гидродинамической сеткой) по оси OX шагом и составляла 5λ . По оси OY применялась сетка с переменным шагом, которая составляла λ в области сшивания и 0.1λ у поверхности канала. Размер кинетической области по оси OY составлял 3λ молекулы. Таким образом, в силу малого размера этой области, кинетическая модель, по существу, лишь формировала граничные условия для гидродинамической модели. Это позволило физически адекватно описать взаимодействие газа с конденсирующей поверхностью. Для решения кинетического уравнения применялся метод с разностями против молекулярного потока в двух направлениях ($\xi_y > 0$ и $\xi_y < 0$).

В качестве гидродинамической модели была использована двухтемпературная модель. Выражения для поступательной и вращательной температур были получены в Главе 2. Полная система уравнений в безразмерном виде для плоского канала для двухкомпонентного газа имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^K}{\partial t} + u_x^K \frac{\partial \rho^K}{\partial x} + u_y^K \frac{\partial \rho^K}{\partial y} + \rho^K \left(\frac{\partial u_x^K}{\partial x} + \frac{\partial u_y^K}{\partial y} \right) = 0 \\ \frac{\partial u_x^K}{\partial t} + u_x^K \frac{\partial u_x^K}{\partial x} + u_y^K \frac{\partial u_x^K}{\partial y} + \frac{1}{\rho^K} \left(\frac{\partial P_{xx}^K}{\partial x} + \frac{\partial P_{xy}^K}{\partial y} \right) = v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_x^N - u_x^K) \\ \frac{\partial u_y^K}{\partial t} + u_x^K \frac{\partial u_y^K}{\partial x} + u_y^K \frac{\partial u_y^K}{\partial y} + \frac{1}{\rho^K} \left(\frac{\partial P_{xy}^K}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}^K}{\partial y} \right) = v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_y^N - u_y^K) \\ \frac{\partial T_t^K}{\partial t} + u_x^K \frac{\partial T_t^K}{\partial x} + u_y^K \frac{\partial T_t^K}{\partial y} + \frac{2}{3} T_t^K \left(\frac{\partial u_x^K}{\partial x} + \frac{\partial u_y^K}{\partial y} \right) + \\ \frac{2}{3} \frac{1}{n^K} \left\{ p_{xx}^K \frac{\partial u_x^K}{\partial x} + p_{xy}^K \left(\frac{\partial u_x^K}{\partial x} + \frac{\partial u_y^K}{\partial y} \right) + p_{yy}^K \frac{\partial u_y^K}{\partial y} + \frac{\partial \varphi_x^K}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_y^K}{\partial y} \right\} = \\ v^{KK} (T_t^{+K} - T_t^K) + v_N^K \left((T_t^{+K} - T_t^K) + \frac{m^K}{3} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right) \\ \frac{\partial T_r^K}{\partial t} + u_x^K \frac{\partial T_r^K}{\partial x} + u_y^K \frac{\partial T_r^K}{\partial y} + \frac{2(\gamma^K - 1)}{(5 - 3\gamma^K)n^K} \left(\frac{\partial \omega_x^K}{\partial x} + \frac{\partial \omega_y^K}{\partial y} \right) = \\ v_K^K (T_r^{+K} - T_r^K) + v_N^K \left((T_r^+)^K - T_r^K \right) \end{array} \right.$$

Здесь $P_{xx}^K = n^K T_t^K + p_{xx}^K$, $P_{yy}^K = n^K T_t^K + p_{yy}^K$,

$$\begin{aligned}
p_{xx}^K &= -\frac{4}{3}\mu_{eff}^K \frac{\partial U_x^K}{\partial x} + \frac{2}{3}\mu_{eff}^K \frac{\partial U_y^K}{\partial y}, & p_{yy}^K &= -\frac{4}{3}\mu_{eff}^K \frac{\partial U_y^K}{\partial y} + \frac{2}{3}\mu_{eff}^K \frac{\partial U_x^K}{\partial x}, \\
p_{xy}^K &= -\mu_{eff}^K \left(\frac{\partial U_x^K}{\partial y} + \frac{\partial U_y^K}{\partial x} \right), \\
\phi_x^K &= -\frac{15}{4} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_t^K}{\partial x}, & \phi_y^K &= -\frac{15}{4} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_t^K}{\partial y}, \\
\omega_x^K &= -\frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K-1)} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_r^K}{\partial x}, & \omega_y^K &= -\frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K-1)} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_r^K}{\partial y}.
\end{aligned}$$

Вязкость компонента определялась в Главе 2 и имела следующий вид

$$\mu_{eff}^K = \frac{n^K T_t^K}{\nu^{KK} + \nu_N^K}.$$

Для решения двухтемпературной модели был использован метод прогонки с разделением по времени. Шаг сетки по обеим координатам принимался постоянным и составлял λ .

На Рисунке 14 показано распределение скорости по оси x для обоих компонентов газа и расход газа для второго компонента. Данные зависимости показывают уменьшение расхода газа для конденсируемого компонента, что объясняется его поглощением стенками канала. Также видно, что на участке от $x = 0$ до $x = 5$ наблюдается снижение скорости обоих компонентов газа. Это объясняется интенсивным поглощением одного из компонентов газа на данном участке, что приводит к эффекту, схожему с происходящим в диффузоре. Кроме того, имеет место эффект межкомпонентного взаимодействия, при котором конденсируемый компонент увлекает к стенке неконденсируемый компонент. После данного участка, в связи с тем, что значительная часть конденсируемого компонента поглощена, происходит увеличение скорости обоих компонентов за счет градиента давлений по длине канала.

На Рисунке 15. показаны линии тока обоих компонентов газа в канале. Видно, что интенсивное поглощение конденсируемого компонента происходит на первой трети длины канала. Также видно слабое отклонение линий тока неконденсируемого компонента от оси симметрии канала за счет межмолекулярных взаимодействий компонентов.

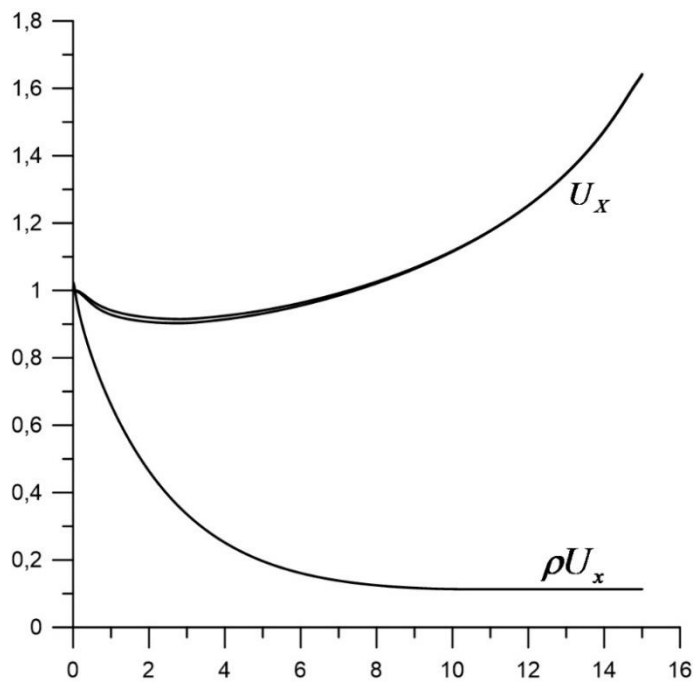


Рисунок 14 – Распределение скоростей обоих компонент и массового расхода конденсируемого компонента по длине канала

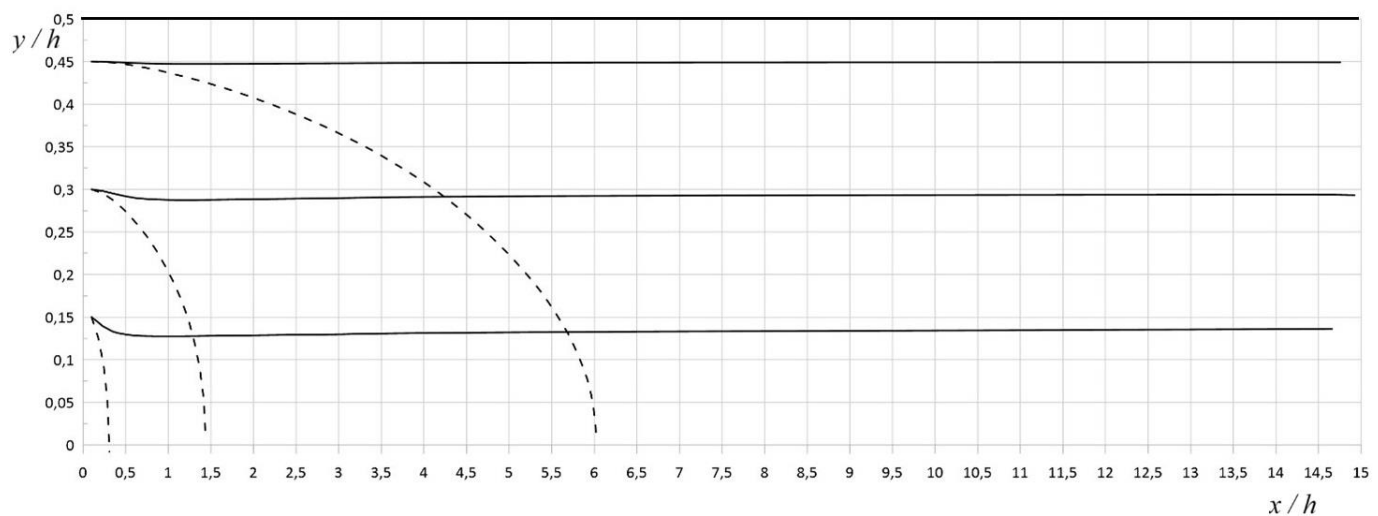


Рисунок 15 – Линии тока в канале: сплошные линии – неконденсируемый компонент, пунктир – конденсируемый компонент; масштаб по оси OY увеличен в 10 раз; линии сетки не соответствуют расчетной сетке; на оси канала ($y = 0.5$) линии тока обоих компонентов, очевидно, совпадают

В заключении представлены основные результаты диссертационной работы, соответствующие поставленной цели и задачам исследования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны физико-математические модели для описания разделения компонентов газовых смесей в высоконеравновесных течениях с применением которых изучены физические эффекты в неравновесных течениях.

Основные новые научные результаты, полученные в диссертационной работе, состоят в следующем:

1. Разработаны физико-математические модели в виде модельного кинетического уравнения, описывающие течения смесей одно- и многоатомных газов.

2. На основе разработанного модельного кинетического уравнения получена система моментных уравнений.

3. Полученные физико-математические модели протестированы на примере задачи о профиле стационарной ударной волны. Решения задачи с использованием модельного кинетического уравнения и системы моментных уравнений дают близкие результаты как между собой, так и с имеющимися экспериментальными и расчетными данными других авторов.

4. Показаны некоторые особенности формирования профилей плоских ударных волн в смесях газов с различным парциальным составом компонентов.

5. Разработана комбинированная физико-математическая модель для описания течений смесей плотных газов. Модель позволяет физически адекватно выставлять граничные условия на конденсирующей поверхности (поглощающей поверхности), не требуя больших объемов памяти и количества вычислительных операций.

6. Выявлены особенности течений смесей газов в каналах с поглощающими стенками. Показано, что за счет конденсации одного из компонентов, а также за счет межкомпонентного взаимодействия скорость неконденсируемого компонента замедляется даже при наличии отрицательного градиента давления вдоль канала.

Перспективы дальнейшей разработки темы

Разработка физико-математических моделей, учитывающих химические реакции в многокомпонентном потоке газа и на обтекаемых поверхностях, распространение их на случай смесей, состоящих из электрически заряженных частиц. Внедрение моделей в существующие и инновационные пакеты программ по вычислительной гидродинамике (CFD).

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Научные статьи в ведущих рецензируемых научных журналах и изданиях, входящих в Перечень Высшей аттестационной комиссии Российской Федерации:

1. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Особенности формирования ударных волн в газовой смеси в зависимости от концентрации ее компонентов // ТВТ. – 2024. – Т. 62. – Вып. 5. – С. 704–712.

2. Никитченко Ю.А., Попов С.А., Сергеева Н.И. Система модельных кинетических уравнений для многокомпонентного газа // ТВТ. – 2023. – Т. 61. – Вып. 5. – С. 736–743.

3. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Построение модели течения многокомпонентного газа в плоском канале с поглощающими стенками // Труды МАИ. – 2025. – № 143. – URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=185642>.

4. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Модельное кинетическое уравнение для смеси одно- и многоатомных газов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. – 2024. – № 1. – С. 56–67. – DOI: 10.18384/2949-5067-2024-1-56-67.

Материалы всероссийских и международных научных конференций:

1. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Модельное кинетическое уравнение для описания смесей одно- и многоатомных газов // Материалы XXIII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2023), 4–10 сентября 2023 г., Дивноморское, Краснодарский край. – М.: Изд-во МАИ. – 2023. – С. 394-396.

2. Сергеева Н.И. Численное исследование структуры ударных волн в смесях газов с использованием системы моментных уравнений // 23-я Международная конференция «Авиация и космонавтика». 18-22 ноября 2024 года. Москва. Тезисы. – М.: Издательство «Перо». – 2024. – С. 260.