

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)»

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

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

кандидат физико-математических наук,

доцент Попов Сергей Александрович

Москва – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1 МОДЕЛЬНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СМЕСИ ГАЗОВ.....	12
1.1 Построение кинетического уравнения для смеси одноатомных газов	13
1.2 Тестирование модели	21
1.3 Результаты расчетов для одноатомных газов	25
1.4 Распространение кинетического уравнения на смеси многоатомных газов ..	36
1.5 Тестирование модели	40
1.6 Заключение по Главе 1	46
ГЛАВА 2 ПОСТРОЕНИЕ СИСТЕМЫ МОМЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ И УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ СМЕСЕЙ ГАЗОВ.....	48
2.1 Построение системы моментных уравнений	48
2.2 Тестирование моментных уравнений на примере задачи о профиле плоской ударной волны.....	56
2.3 Заключение по Главе 2	61
ГЛАВА 3 ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН В ГАЗОВОЙ СМЕСИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ЕЕ КОМПОНЕНТОВ.....	62
3.1 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 2.05	63
3.2 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 3.0	70
3.3 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 4.0	72

3.4 Профили ударной волны в смесях гелия и аргона при числе Маха = 5.....	74
3.5 Профили ударной волны в смесях аммиака и углекислого газа при числе Маха =2.05	78
3.6 Заключение по Главе 3	80
ГЛАВА 4 ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ТЕЧЕНИЯ	
МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА В КАНАЛЕ С ПОГЛОЩАЮЩИМИ	
СТЕНКАМИ	82
4.1 Постановка задачи	82
4.2 Физико-математическая модель.....	84
4.3 Анализ полученных результатов.....	87
4.4 Заключение по Главе 4	89
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	91
Перспективы дальнейшей разработки темы	93
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ	94
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	96

ВВЕДЕНИЕ

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) при 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

Проблема описания высоко неравновесных течений смесей газов существует как в газовой динамике, так и в динамике плазмы [1-2].

Существует множество методов описания процессов, протекающих в смесях. Так, имеется ряд работ аналитического плана по исследованию течения смесей двух- и трехкомпонентных газов [3-8] в ударных волнах. В этих работах были получены профили ударной волны для двух- и трехкомпонентных газов. В работах [7-9] используется бимодальное распределение Тамма – Мотт-Смита. Помимо работ по ударным волнам, имеются работы, посвященные течениям в

канале [10-12]. В них показано, что 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 Монте-Карло (Direct simulation Monte-Carlo, DSMC). 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. Расчет с использованием данных моделей осложнен повышенной трудоемкостью. В работах, связанных со статистическим моделированием неравновесных течений многокомпонентных газов, например, [13-20], решается задача об ударной волне. Помимо ударных волн, методами Монте-Карло также решаются задачи о течении в микроканалах [21 - 22]. 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. МКУ — это упрощённые уравнения, которые заменяют интеграл столкновений в кинетических уравнениях, обобщающих уравнение Больцмана. В МКУ моделях за элементарный объект принимается группа (класс) молекул, объединенная определенным кинематическим параметром. Это позволяет:

- Упростить решение задач — модельное уравнение не содержит пятикратный интеграл столкновений, в отличие от уравнения Больцмана;
- Понизить размерность задачи — для пространственно-одно- и двухмерных задач специальная структура модельного интеграла столкновений позволяет

интегрировать по одной или нескольким компонентам вектора молекулярной скорости.

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 больцмановке. Однако моменты этой функции (плотность, скорость группового движения, тензор напряжений, вектор теплового потока) определяются значительно точнее, чем моделями механики сплошной среды.

Некоторые виды модельных кинетических уравнений рассматриваются в работах [23, 24]. В данных работах проводится численное сравнение решений модельных уравнений с решением полного уравнения Больцмана и рассматриваются уравнения Бхатнагара–Гросса–Крука (БГК, BGK), эллипсоидальная статистическая модель (ES) и модель Шахова (s-модель). Среди моделей, описывающих течение многоатомных газов стоит также отметить модели [25] и [26]. Работы [27-31] связаны с различными способами построения модельных кинетических уравнений. В работах [29, 30] строится модельное кинетическое уравнение для двухкомпонентного газа, компоненты которого сильно отличаются по массе. Достаточно полный обзор работ, посвященных моделированию течений многокомпонентных газов с помощью БГК-модели дан в [31]. В большинстве работ использовано МКУ БГК [32-40]. К недостаткам этой модели следует отнести неверное число Прандтля и, как следствие, сильно заниженное время релаксации при описании многоатомных газов. Также построение МКУ для смесей газов рассмотрено в работах [41-45]. В работе [45] используются МКУ для решения задачи о течении в микроканале.

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 со всеми недостатками этой модели.

Экспериментальные работы посвящены в основном разделению профилей плотности, скорости и составляющих температуры в ударной волне двухкомпонентного одноатомного газа. В частности, имеется множество статей по экспериментальным исследованиям структуры ударных волн в смесях аргона и гелия [46-49].

Другой уровень описания основан на теории сплошной среды. В данной модели за элементарный объект принимается жидкая частица. В течениях, где число Кнудсена мало, а число Рейнольдса невелико, модель Навье-Стокса (NSF) также является достаточно информативной. Однако такие модели ограничены малыми числами Кнудсена. Более того, модели сплошной среды не описывают взаимодействие с поглощающей поверхностью физически корректно. Вместе с тем, методы молекулярно-кинетической теории достаточно корректно описывают взаимодействия газа с активными поверхностями, как выделяющими, так и поглощающими газ [50-57]. Так, в работах [51, 52] применяются комбинированные модели, где в пристеночных областях на расстоянии несколько длин свободного пробега молекулы от поверхности применяется какая-либо из моделей молекулярно-кинетической теории. Такие модели позволяют даже в плотных средах описывать взаимодействие газа с поверхностью на молекулярно-кинетическом уровне.

Широкое распространение получила 13-моментная система Грэда [58-60]. Помимо этого, имеется множество работ с использованием процедуры Чепмена-Энскога [61-64]. Различные способы получения моментных уравнений и уравнений гидродинамики для газовых смесей представлены в работах [65-76].

При изучении процессов высоко неравновесных течений большое внимание уделяется описанию процессов, протекающих в ударных волнах. Имеется большое количество работ, посвященных рассмотрению структуры ударной волны. 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 разрабатываемых моделей. Достаточно подробный анализ структуры ударных волн проведен в монографии [77]. Также в работах [78-81] задача о структуре ударной волне решается различными методами.

На основе приведённого обзора можно сформулировать цель и основные задачи настоящей работы.

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

Основные задачи работы:

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 уравнений.
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.

Объект исследования – 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 новая 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.

Физико-математические модели течения и методы их численной реализации могут быть использованы:

- при изучении сильно неравновесных 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 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. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором либо при его непосредственном участии.

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».

Результаты работы используются в учебном процессе МАИ:

– в курсе «Динамика неравновесных сред», читаемом студентам направления 24.03.04 профиля «Вычислительная и экспериментальная аэрогидродинамика»;

– в курсе «Современные модели неравновесных течений», читаемом аспирантам специальности 2.5.12. Аэродинамика и процессы теплообмена летательных аппаратов;

– в курсе «Основы молекулярно-кинетической теории», читаемом студентам специальности направления 24.05.07 специализации «Вычислительная и экспериментальная аэрогидродинамика ЛА».

Содержание диссертации изложено в четырех статьях, из них две [88, 93] – в изданиях перечня ВАК. Две статьи [85, 89] 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 [86]. Свидетельство № 2023666595.

– Программа расчета ударной волны смеси многоатомных газов с использованием кинетической модели [90]. Свидетельство № 2024682040.

Структура и объем диссертации

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.

ГЛАВА 1 МОДЕЛЬНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СМЕСИ ГАЗОВ

В Главе рассматриваются течения многокомпонентных многоатомных совершенных газов. Независимо от количества компонентов рассматриваются только парные межмолекулярные столкновения.

Для отдельных компонентов газовой смеси использована специальная символика. Будем считать, что молекула рассматриваемого компонента (пробная молекула класса K) движется относительно молекул другого компонента (фоновые молекулы класса N) со средней скоростью $\bar{g}$. Параметры рассматриваемого компонента будем обозначать верхним индексом K . В случае межкомпонентных взаимодействий нижний индекс будет обозначать фоновый компонент. Если параметры данной пары компонентов совпадают для обоих компонент, оба индекса будут указаны сверху. Например, средняя скорость K -молекул (пробных молекул) относительно фонового газа из N -молекул (фоновых молекул) обозначается как $\bar{g}_K^N = \bar{g}_N^K \equiv \bar{g}^{KN}$.

В качестве базового модельного кинетического уравнения используется однокомпонентная модель работы [26].

Настоящая модель имеет следующие особенности. Учитывая, что модельные кинетические уравнения релаксационного типа используют интеграл обратных столкновений в сильно упрощенном виде по сравнению с интегралом Больцмана, описание процессов межкомпонентных взаимодействий проводится на уровне осредненных величин тепловой и относительной скорости молекул. Эффективное сечение и частота межмолекулярных столкновений определяется по аналогии с временем релаксации Максвелла. Такой подход, отличающий данную модель от известных, позволяет получить относительно простые зависимости для интеграла столкновений, не сильно выходя за пределы допущений модельного уравнения.

1.1 Построение кинетического уравнения для смеси одноатомных газов

Рассмотрим процесс межмолекулярных столкновений в однокомпонентном газе. Эффективное сечение столкновений $\sigma = \frac{\pi}{4}d^2$, где d – условный диаметр молекул (Рисунок 1.1). Относительная скорость движения молекул $\bar{g}$ в этом случае может быть ассоциирована со средней скоростью теплового движения $\bar{c}$:

$$\bar{g} \approx \bar{c} = \bar{c}_\infty \sqrt{\frac{T}{T_\infty}}.$$

Здесь $\bar{c}_\infty$ – тепловая скорость в невозмущенном потоке.

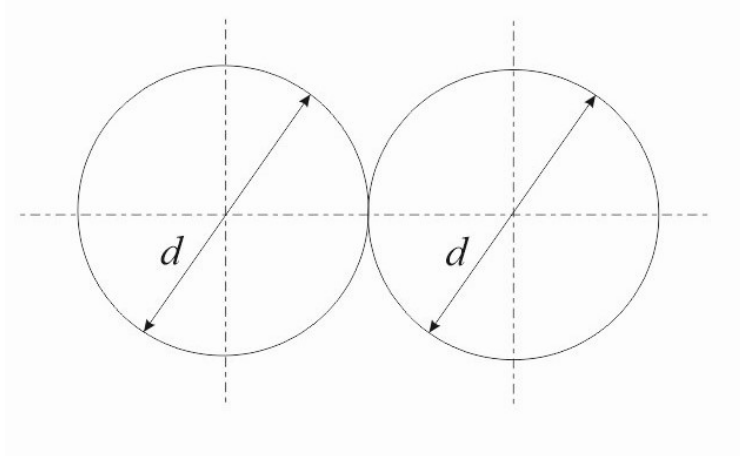


Рисунок 1.1 – Межмолекулярные столкновения в однокомпонентном газе

Средняя длина свободного пробега молекулы может быть выражена как

$$\bar{\lambda} = \frac{\bar{c}}{n\sigma\bar{g}} \approx \frac{1}{n\sigma},$$

где σ – эффективное сечение столкновения.

Связь эффективного сечения столкновений с коэффициентом вязкости на уровне элементарной кинетической теории [84] может быть найдено следующим образом:

Плотность потока касательного импульса через сечение y_0 согласно кинетической теории:

$$P_{xy} = \frac{1}{2} \rho \bar{c} \left(U_{x0} - \frac{\partial U_x}{\partial y} \bar{\lambda} \right) + \frac{1}{2} \rho (-\bar{c}) \left(U_{x0} + \frac{\partial U_x}{\partial y} \bar{\lambda} \right) = -\rho \bar{c} \frac{\partial U_x}{\partial y} \bar{\lambda}.$$

Плотность потока касательного импульса через сечение y_0 согласно теории механики сплошной среды:

$$P_{xy} = -\mu \frac{\partial U_x}{\partial y}.$$

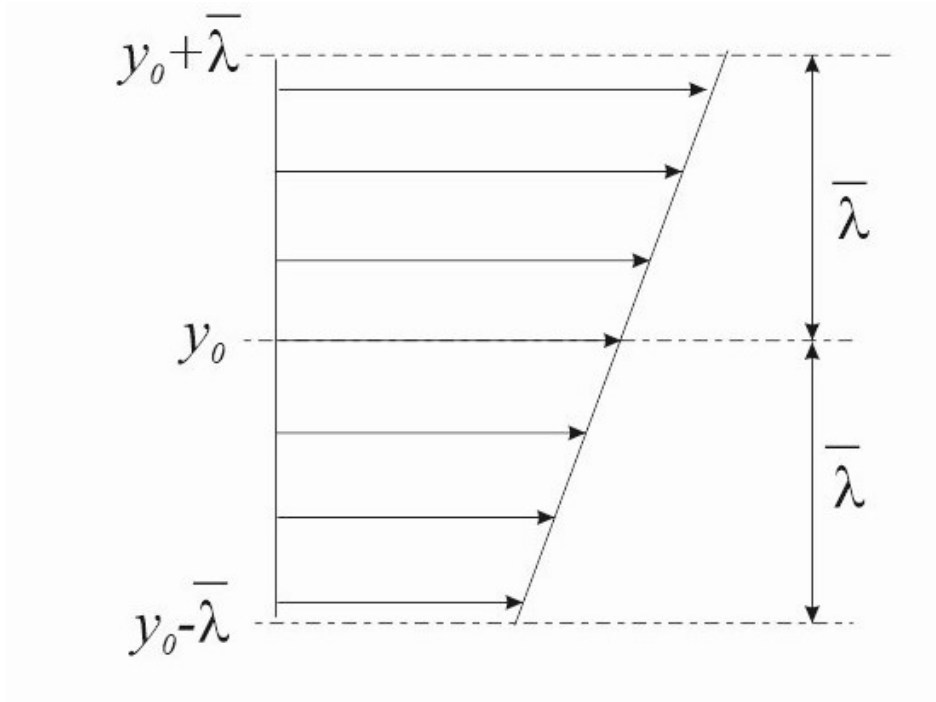


Рисунок 1.2 – К поиску плотности потока касательного импульса через сечение y_0

Тогда выражение для коэффициента вязкости может быть записано следующим образом

$$\mu = \rho \bar{c} \bar{\lambda},$$

$$\mu = m n \bar{c} \bar{\lambda} = m \bar{c}_\infty \sqrt{\frac{T}{T_\infty}} \frac{1}{\sigma}.$$

Если для коэффициента вязкости принять степенной закон:

$$\mu = \mu_\infty \left(\frac{T}{T_\infty} \right)^s,$$

то условный диаметр молекул может быть выражен как

$$d = \sqrt{\frac{\sigma}{\pi}} = \sqrt{\frac{m\bar{c}_{\infty}}{\pi\mu_{\infty}}} \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^{0.25-s/2}.$$

Тогда выражение для частоты столкновений молекул примет вид:

$$\nu = \sigma \bar{c} n = mn \frac{\bar{c}_{\infty}}{\mu_{\infty}} \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^{1-s},$$

где s – свободный параметр модели вязкости.

Модельное кинетическое уравнение для частоты столкновений использует первое приближение процедуры Чепмена-Энскога

$$\nu = \frac{nkT}{\mu}.$$

Из двух последних выражений следует:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{kT}{m}}.$$

По аналогии с однокомпонентным газом определим основные параметры смеси. Условный диаметр одного компонента, например K -компонента, смеси:

$$d^K = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (m^K kT_{\infty})^{0.25} \frac{1}{\sqrt{\mu_{\infty}^K}} \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^{0.25-sK/2}. \quad (1.1)$$

В этом выражении и ниже sK – показатель степени для компонента K .

Частота столкновений K -молекул между собой (K - K столкновений)

$$\nu_K^K = \nu^{KK} = \frac{n^K kT_{\infty}}{\mu_{\infty}^K} \left(\frac{T^K}{T_{\infty}} \right)^{1-sK}. \quad (1.2)$$

При определении частоты межкомпонентных столкновений ν_N^K следует учесть, что эффективное сечение столкновений выражается как

$$\sigma^{KN} = \frac{\pi}{4} (d^K + d^N)^2, \quad (1.3)$$

где d^K и d^N – условные диаметры молекул соответствующих компонентов (Рисунок 1.3).

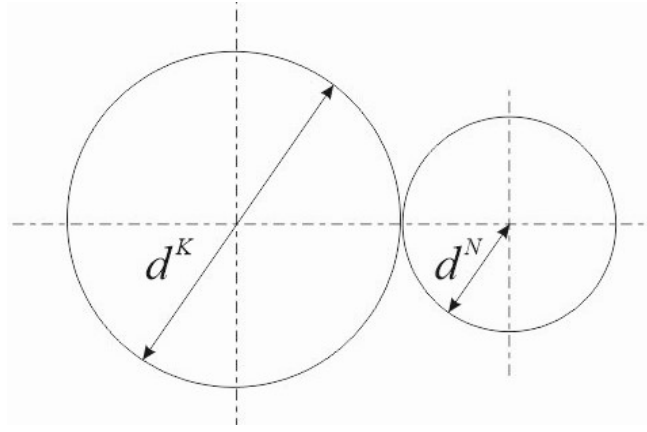


Рисунок 1.3 – Межмолекулярные столкновения в многокомпонентном газе

Компоненты в общем случае движутся с различными групповыми скоростями $\mathbf{U}^K$ и $\mathbf{U}^N$. Относительная скорость движения компонентов определена как $\Delta \mathbf{U}_N^K = \mathbf{U}^K - \mathbf{U}^N$.

В рамках используемого приближения средние тепловые скорости $\bar{c}^K$ и $\bar{c}^N$ рассматриваются как положительно определенные изотропные величины. С этой точки зрения целесообразно рассмотреть эффективную групповую скорость $U^{KN} = |\Delta \mathbf{U}^{KN}| \cos \beta$, которая является проекцией $\Delta \mathbf{U}^{KN}$ на одно из возможных направлений средних тепловых скоростей $\bar{c}^K$ и $\bar{c}^N$. На Рисунке 1.4 такое направление показано пунктирной линией в условной плоскости OU_xU_y , содержащей эту линию и вектор $\Delta \mathbf{U}^{KN}$.

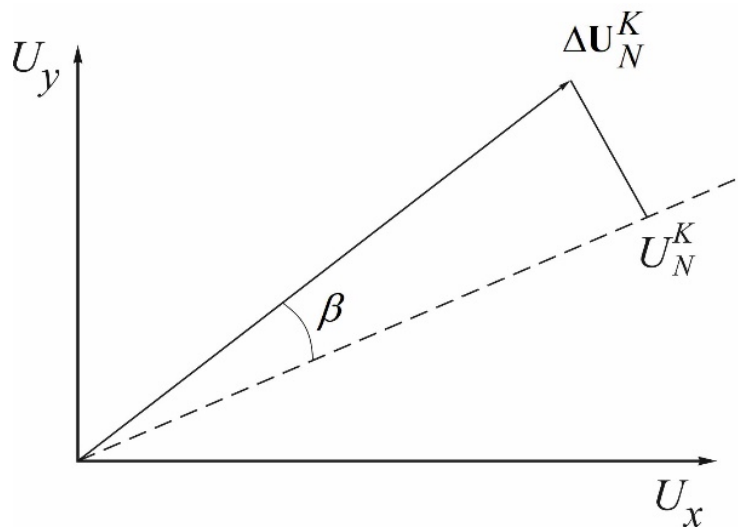


Рисунок 1.4 – Схема определения эффективной групповой скорости

Поскольку частота межмолекулярных столкновений ν_N^K определяется общим количеством столкновений молекул, движущихся во всевозможных направлениях со средней тепловой скоростью $\bar{c}^K$, введем среднюю положительно определенную групповую скорость

$$U^{KN} = \int_0^{\pi/2} |\Delta U^{KN}| \cos \beta d\beta = \frac{2}{\pi} |\Delta U^{KN}|.$$

Считая все направления теплового движения равновероятными, что является достаточно сильным допущением для высоконеравновесных течений, средняя скорость пробной молекулы относительно фоновых молекул, т.е. $\bar{g}^{KN}$, может быть вычислена как среднее значение относительных скоростей, полученное для восьми комбинаций $\pm \bar{U}^{KN}$, $\pm \bar{c}^K$, $\pm \bar{c}_N$:

$$\bar{g}^{KN} = \frac{1}{8} \left(\begin{aligned} &|\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N| + \\ &|-\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |-\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + |-\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |-\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N| \end{aligned} \right).$$

Здесь учтено, что $\bar{g}^{KN}$ и восемь ее возможных значений положительно определенные величины. Из выражения для суммы восьми слагаемых следует очевидное соотношение $\bar{g}_K^N = \bar{g}_N^K = \bar{g}^{KN}$.

Среди восьми слагаемых этого уравнения есть взаимно равные комбинации:

$$\begin{aligned} |\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N| &= |-\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N|, \\ |\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N| &= |-\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N|, \\ |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N| &= |-\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N|, \\ |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N| &= |-\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N|. \end{aligned}$$

Тогда $\bar{g}^{KN}$ может быть вычислена как

$$\bar{g}^{KN} = \frac{1}{4} \left(|\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N| \right).$$

В данном выражении для первого и второго слагаемых можно показать, что если

$$\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K > \bar{c}_N,$$

тогда

$$2(\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K) + \bar{c}_N - \bar{c}_N = 2(\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K).$$

Также если

$$\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K < \bar{c}_N,$$

тогда

$$\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N - \bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N = 2\bar{c}_N.$$

Следовательно

$$|\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N| = 2 \max(|\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K|, \bar{c}_N).$$

Аналогично рассмотрим третье и четвертое слагаемые:

Можно показать, что если

$$\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K > \bar{c}_N,$$

тогда

$$2(\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K) + \bar{c}_N - \bar{c}_N = 2(\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K).$$

Также если

$$0 < \bar{U}^{KN} < \bar{c}^K < \bar{c}_N,$$

тогда

$$\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N - \bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N = 2\bar{c}_N.$$

Если

$$0 > \bar{U}^{KN} - \bar{c}^K \text{ и } |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K| < \bar{c}_N, \text{ то}$$

$$\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N - \bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N = 2\bar{c}_N.$$

И если $0 > \bar{U}^{KN} - \bar{c}^K$ и $|\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K| > \bar{c}_N$, то

$$-\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K - \bar{c}_N + \bar{U}^{KN} + \bar{c}^K + \bar{c}_N = 2(\bar{U}^{KN} - \bar{c}_N).$$

Следовательно

$$|\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K + \bar{c}_N| + |\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K - \bar{c}_N| = 2 \max(|\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K|, \bar{c}_N).$$

Тогда выражение для $\bar{g}^{KN}$ приобретает следующий вид

$$\bar{g}^{KN} = \frac{1}{2} \left(\max(|\bar{U}^{KN} + \bar{c}^K|, \bar{c}_N) + \max(|\bar{U}^{KN} - \bar{c}^K|, \bar{c}_N) \right).$$

Частота межкомпонентных столкновений с учетом (1.1) и (1.3)

$$\nu_N^K = \sigma^{KN} \bar{g}^{KN} n^N = \frac{n^N k T_\infty}{4 \tilde{\mu}_\infty} \frac{\bar{g}^{KN}}{\sqrt{\frac{k T_\infty}{\tilde{m}_\infty}}} \left(\sqrt{\frac{\tilde{\mu}_\infty}{\mu_\infty^K}} \left(\frac{m^K}{\tilde{m}_\infty} \right)^{0.25} \left(\frac{T^K}{T_\infty} \right)^{0.25-sK/2} + \sqrt{\frac{\tilde{\mu}_\infty}{\mu_\infty^N}} \left(\frac{m^N}{\tilde{m}_\infty} \right)^{0.25} \left(\frac{T^N}{T_\infty} \right)^{0.25-sK/2} \right). \quad (1.4)$$

В этом выражении $\tilde{m}_\infty = \sum \frac{m^K n_\infty^K}{n_\infty}$ – кажущаяся масса молекулы, $\tilde{\mu}_\infty$ –

вязкость смеси в невозмущенном потоке, определяемая по аппроксимации Вильке [87]. Сумма вычисляется по всем компонентам смеси.

В процессе KN -столкновений групповая скорость молекул, участвующих в этих столкновениях, может релаксировать до предельного значения $\mathbf{U}^{KN}$. Если в KN -столкновениях участвуют n^{KN} молекул каждого компонента, то закон сохранения импульса требует

$$\mathbf{U}^{KN} (m^K n^{KN} + m^N n^{KN}) = \mathbf{U}^K m^K n^{KN} + \mathbf{U}^N m^N n^{KN},$$

$$\mathbf{U}^{KN} = \frac{\mathbf{U}^K m^K + \mathbf{U}^N m^N}{m^K + m^N}.$$

По аналогии с работой [26] предусмотрим вариант неполной релаксации, при которой групповая скорость молекул K -компонента, участвующих KN -столкновениях $\mathbf{U}_N^{+K}$, частично сохранит свое прежнее значение:

$$\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^K + \frac{\tau_p}{\tau_U} (\mathbf{U}^{KN} - \mathbf{U}^K). \quad (1.5)$$

Параметр $\frac{\tau_p}{\tau_U}$, имеющий смысл отношения времени релаксации напряжений

к времени релаксации групповой скорости, является свободным параметром модели, определяемым в процессе тестирования модельного кинетического

уравнения. Он может принимать значения $\frac{\tau_p}{\tau_U} \leq 1$. При $\frac{\tau_p}{\tau_U} \geq 1$ подразумевается

полная релаксация, т.е. $\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^{KN}$. Нетрудно убедиться в выполнении закона сохранения импульса в случае неполной релаксации:

$$\mathbf{U}^{KN} \left(m^K n^{KN} + m^N n^{KN} \right) = \mathbf{U}_N^{+K} m^K n^{KN} + \mathbf{U}_K^{+N} m^N n^{KN}.$$

Температура тех частей компонентов, которые участвуют в KN -столкновениях, может релаксировать до предельного значения T^{KN} . Из закона сохранения энергии следует:

$$T^{KN} = \frac{1}{2} \left(T^K + \frac{m^K}{2k} (\mathbf{U}^K - \mathbf{U}^{KN})^2 + T^N + \frac{m^N}{2k} (\mathbf{U}^N - \mathbf{U}^{KN})^2 \right) = \\ \frac{T^K + T^N}{2} + \frac{1}{6k} \frac{m^K m^N}{m^K + m^N} (\mathbf{U}^K - \mathbf{U}^N)^2.$$

В случае неполной релаксации

$$T_N^{+K} = T^K + \frac{\tau_p}{\tau_T} (T^{KN} - T^K).$$

Параметр $\frac{\tau_p}{\tau_T}$ связан с параметром $\frac{\tau_p}{\tau_U}$ следующим соотношением:

$$\frac{\tau_p}{\tau_T} = \frac{\tau_p}{\tau_U} \left(2 - \frac{\tau_p}{\tau_U} \right).$$

Систему кинетических уравнение для смеси одноатомных газов запишем по аналогии с модельным кинетическим уравнением [26]. Уравнение K -компонента [85]:

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

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. Функции равны:

$$f_K^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T^K)^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{c}^K)^2}{2R^K T^K} \right) \left(1 + \frac{(q^K)_\alpha (c^K)_\alpha}{3\rho^K (R^K T^K)^2} \left(\frac{(\mathbf{c}^K)^2}{5R^K T^K} - 1 \right) \right),$$

где $\rho^K = m^K n^K$, $R^K = k/m^K$, $\mathbf{c}^K = \xi - \mathbf{U}^K$, $\mathbf{q}^K$ – тепловой поток;

$$f_N^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T_N^{+K})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{c}_N^{+K})^2}{2R^K T_N^{+K}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_\alpha (c_N^{+K})_\alpha}{3\rho^K (R^K T_N^{+K})^2} \left(\frac{(\mathbf{c}_N^{+K})^2}{5R^K T_N^{+K}} - 1\right)\right),$$

где $\mathbf{c}_N^{+K} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{U}_N^{+K}$.

Частоты столкновений v^{KK} и v_N^K определены уравнениями (1.2) и (1.4). Система кинетических уравнений содержит уравнения всех компонентов, связанные правыми частями.

1.2 Тестирование модели

В данной работе задача о профиле ударной волны рассматривалась в качестве теста, имеющего своей целью оценить физическую адекватность разрабатываемого модельного уравнения. В этой связи детальное изучение процессов, протекающих в многокомпонентных ударных волнах, не рассматривалось. Задача решалась для двух- и трехкомпонентного газа.

Выбранная задача хорошо изучена как теоретически, так и экспериментально. На профиле ударной волны имеет место высоко неравновесное течение, характеризующиеся значительным разделением профилей отдельных компонентов смеси. Кроме этого, решение задачи весьма чувствительно к выполнению законов сохранения массы, импульса и энергии. Даже небольшие неточности в выполнении этих законов не позволяют получить гладкие профили в нижней по потоку области течения.

Если газ движется вдоль одной из координатных осей, например оси x_1 , обозначаемой далее как x ($x_2=y$, $x_3=z$), 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 принимают вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{f_n^K}{f_p^K} \right| + \xi_x \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left| \frac{f_n^K}{f_p^K} \right| = \nu^{KK} \left| \frac{f_{nK}^{+K} - f_n^K}{f_{pK}^{+K} - f_p^K} \right| + \nu_N^K \left| \frac{f_{nN}^{+K} - f_n^K}{f_{pN}^{+K} - f_p^K} \right|. \quad (1.6)$$

Здесь

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

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

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

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

$$(c_N^{+K})_x = \xi_x - (U_N^{+K})_x = \xi_x - (U^K)_x - \frac{\tau_p}{\tau_U} \left((U^{KN})_x - (U^K)_x \right).$$

Моменты этих функций распределения имеют следующий вид:

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

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

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

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

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

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

Задача решается в стационарной постановке и формулируется следующим образом. Решение кинетического уравнения строилось как первая краевая задача. На границах вычислительной области задавались условия невозмущенного потока и условия Ренкина-Гюгоннио. Размер расчетной области составляет несколько десятков длин свободного пробега молекулы в невозмущенном потоке.

Учитывалось, что групповые скорости и температуры на границах, находящихся в условиях равновесия, одинаковы для обоих компонентов. Скорость звука и, следовательно, число Маха в невозмущенном потоке, определялись по кажущейся массе молекул $\tilde{m}_\infty$. Из условий равновесия газовой среды на границах вычислительной области следует, что парциальные концентрации $n^K / (n^K + n^N)$ и $n^N / (n^K + n^N)$ за ударной волной соответствуют их значениям в невозмущенном потоке.

Для приведения уравнений к безразмерной форме использовались следующие масштабы (лемниската – символ невозмущенного потока):

скорость – $\sqrt{RT_\infty}$,

время – p_∞ / μ_∞ ,

геометрический размер – $\sqrt{RT_\infty} \frac{p_\infty}{\mu_\infty}$,

масса – $\tilde{m}_\infty$,

вязкость – μ_∞ - вязкость смеси,

концентрация – n_∞ ,

плотность – ρ_∞ ,

температура – T_∞ ,

напряжение – $n_\infty kT_\infty$.

Для численного решения задачи использовался метод прогонки с нестационарным членом и с шагом по времени Δt . Геометрическая сетка имела постоянный шаг $\Delta x = 0.1\lambda_\infty$. Конечно-разностный шаблон, по аналогии с [26], формировался на четырех узлах расчетной сетки со смещением против потока (молекулярного потока).

Локальная производная имеет вид:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial t} \right|_i = \frac{F_i^n - F_i^{n-1}}{\Delta t},$$

где F_i^{n-1} – значение искомой функции на предыдущем шаге по времени Δt .

Конечно-разностная аппроксимация производной в i -ом узле геометрического пространства и j -ом узле пространства скоростей проводилась следующим образом (два узла вверх по потоку):

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{1}{6\Delta x} (F_{i-2,j} - 6F_{i-1,j} + 3F_{i,j} + 2F_{i+1,j}), \xi_x > 0$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{1}{6\Delta x} (2F_{i-1,j} + 3F_{i,j} - 6F_{i+1,j} + F_{i+2,j}), \xi_x < 0$$

где $F_{i,j}$ – искомая функция.

В результате для $\xi_x \geq 0$ и $\xi_x \leq 0$ были получены 4-х диагональные матрицы. Для численного решения разностной задачи с такой матрицей высокоэффективен метод прогонки. Особенности метода прогонки:

1. Несмотря на то, что метод решения нестационарен, он не требует запоминания значения искомой функции на предыдущем временном шаге. Правые части уравнения вычисляются на первом этапе прогонки (прямая прогонка) по текущим значениям $F_{i,j}$.

2. При продвижении решения по времени вычислительная погрешность не накапливается, что является характерным свойством первой начально краевой задачи. В численных тестах законы сохранения выполнялись с точностью до шестого знака. Вычислительная погрешность определяется в основном погрешностью численного интегрирования по пространству скоростей.

При $\xi_x \geq 0$ в i -ом узле расчетной сетки конечно-разностный аналог кинетического уравнения (1.6) имеет вид:

$$\begin{aligned} & 1/6 \text{Ku} \cdot F_{i-2} - \text{Ku} \cdot F_{i-1} + \left(1 + 0.5 \text{Ku} + \Delta t (\nu^{KK} + \nu_N^K)\right) F_i + 1/3 \text{Ku} = \\ & = \Delta t (\nu^{KK} F_K^{+K} + \nu_N^K F_N^{+K}) + F_i^{j-1}, \end{aligned}$$

при $\xi_x \leq 0$ в i -ом узле расчетной сетки конечно-разностный аналог кинетического уравнения (1.6) имеет вид:

$$\begin{aligned} & 1/6 \text{Ku} \cdot F_{i+2} - \text{Ku} \cdot F_{i+1} + \left(1 + 0.5 \text{Ku} + \Delta t (\nu^{KK} + \nu_N^K)\right) F_i + 1/3 \text{Ku} = \\ & = \Delta t (\nu^{KK} F_K^{+K} + \nu_N^K F_N^{+K}) + F_i^{j-1}. \end{aligned}$$

Здесь $\text{Ku} = \xi_x \Delta t / \Delta x$ – аналог числа Куранта для фиксированного значения ξ_x , F_i^{j-1} – значение искомой функции на предыдущем шаге по времени. Значения ν^{KK} , ν_N^K , F_K^{+K} , F_N^{+K} также вычислялись на предыдущем шаге по Δt .

1.3 Результаты расчетов для одноатомных газов

Показанные на графиках профили ударной волны построены для смеси аргона и гелия при различных числах Маха. Для сравнения использованы экспериментальные данные работ [46] и [47]. Данные этих работ получены в вакуумной аэродинамической трубе с использованием электронного пучка для измерения плотности набегающего потока.

На Рисунках 1.5–1.8 показаны профили плотности и составляющих температуры для смеси аргона и гелия при парциальных концентрациях 13% и 50% аргона и при различных значениях параметра τ_p / τ_U . Данные работы [46] для концентрации 94% аргона не использовались ввиду большого разброса экспериментальных точек. Свободный параметр модели, определяющий зависимость коэффициента вязкости от температуры, принимался одинаковым для обоих компонентов: $s = s_K = s_N$.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \quad T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}.$$

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

Расчеты выполнялись с использованием программного пакета [86].

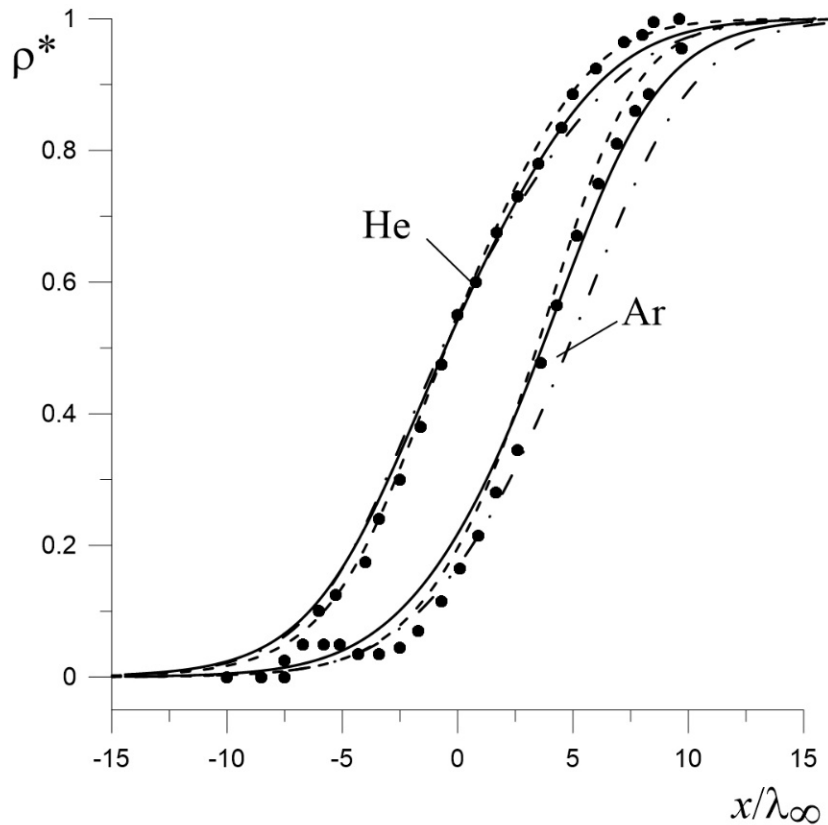


Рисунок 1.5 – Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$: точки – экспериментальные данные [46], сплошная линия – $\tau_p/\tau_U = 1$, пунктир – $\tau_p/\tau_U = 0.8$, штрихпунктир – $\tau_p/\tau_U = 0.6$

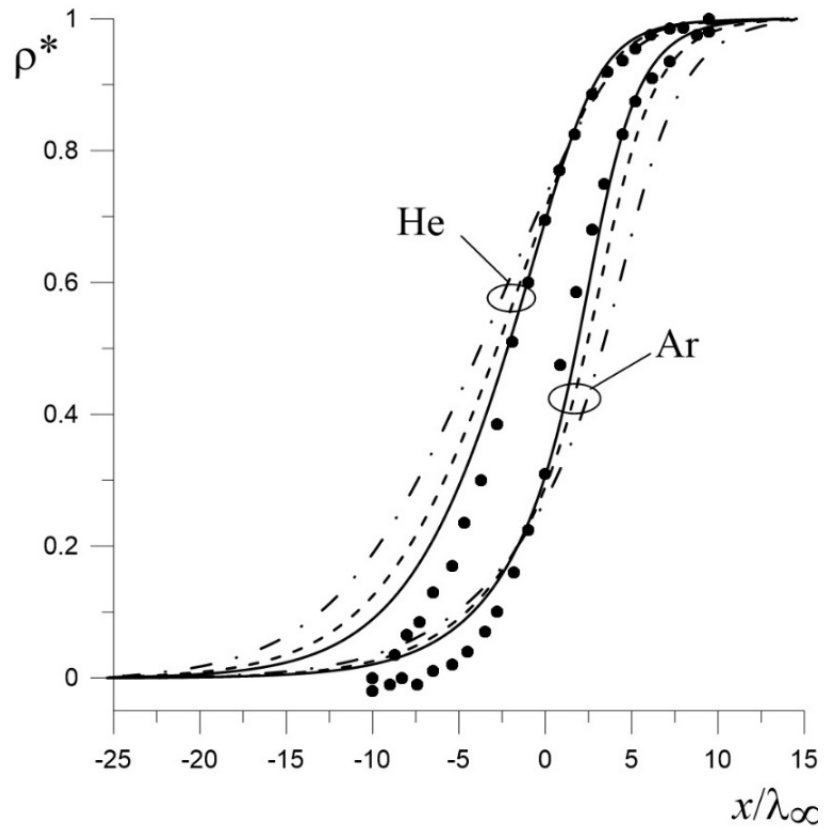


Рисунок 1.6 –Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 50%, $M_\infty = 2.05$, $s = 1$: точки – экспериментальные данные [46], сплошная линия– $\tau_p/\tau_U = 1$, пунктир – $\tau_p/\tau_U = 0.8$, штрихпунктир– $\tau_p/\tau_U = 0.6$

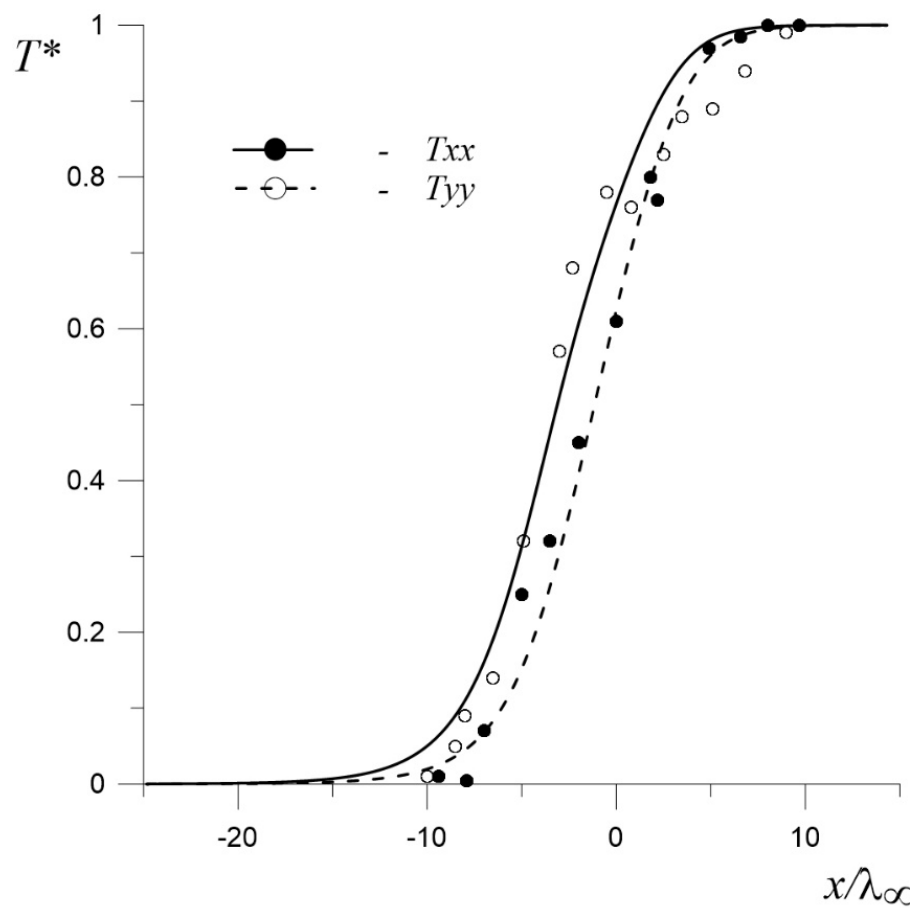


Рисунок 1.7 –Профили температуры гелия в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 13%, $M_\infty = 2.03, s = 1, \tau_p/\tau_U = 1$; точки – экспериментальные данные [46]

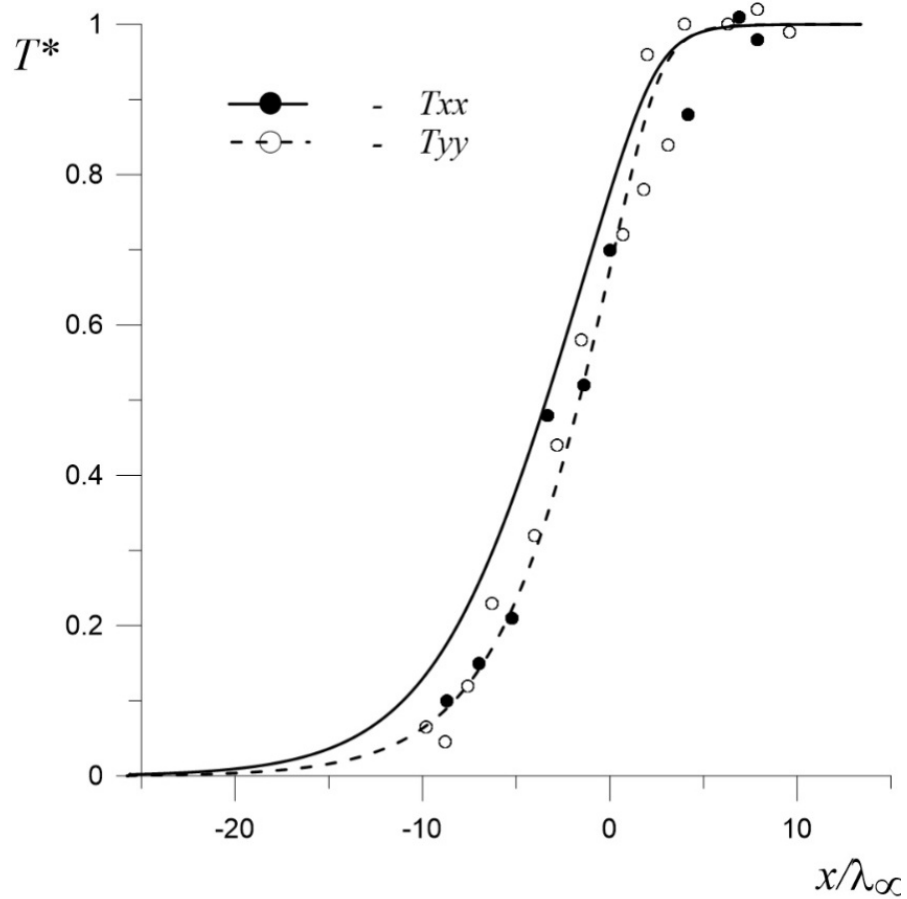


Рисунок 1.8 – Профили температуры гелия в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 50%, $M_\infty = 2.05$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$; точки – экспериментальные данные [46]

Профили на Рисунке 1.5 и Рисунке 1.6 показывают что лучшее соответствие экспериментальным данным наблюдается при $\tau_p/\tau_U = 0.8 \dots 1.0$. Замедление релаксационного процесса, $\tau_p/\tau_U < 0.8$, приводит к большему отклонению расчетных профилей от экспериментальных. Если принять $\tau_p/\tau_U = 1$, то (1.6) упростится, т.к. $\mathbf{U}_N^{+K} = \mathbf{U}^{KN}$ и $T_N^{+K} = T^{KN}$. Тогда

$$f_N^{+K} = \frac{n^K}{(2\pi R^K T^{KN})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{c}^{KN})^2}{2R^K T^{KN}}\right) \left(1 + \frac{(q^K)_\alpha (c^{KN})_\alpha}{3\rho^K (R^K T^{KN})^2} \left(\frac{(\mathbf{c}^{KN})^2}{5R^K T^{KN}} - 1\right)\right),$$

где $\mathbf{c}^{KN} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{U}^{KN}$.

Профили на Рисунке 1.7 и Рисунке 1.8 не противоречат экспериментальным данным.

На Рисунках 1.9-1.11 показаны сравнительные профили скорости в ударной волне для смеси аргона и гелия при парциальных концентрациях 11.5%, 24.7% и 44% аргона. Сравнение проводится с данными работы [47]. Скорость, приведенная на данных рисунках, отнесена к единичному отрезку:

$$U^* = \frac{U - U_2}{U_1 - U_2}.$$

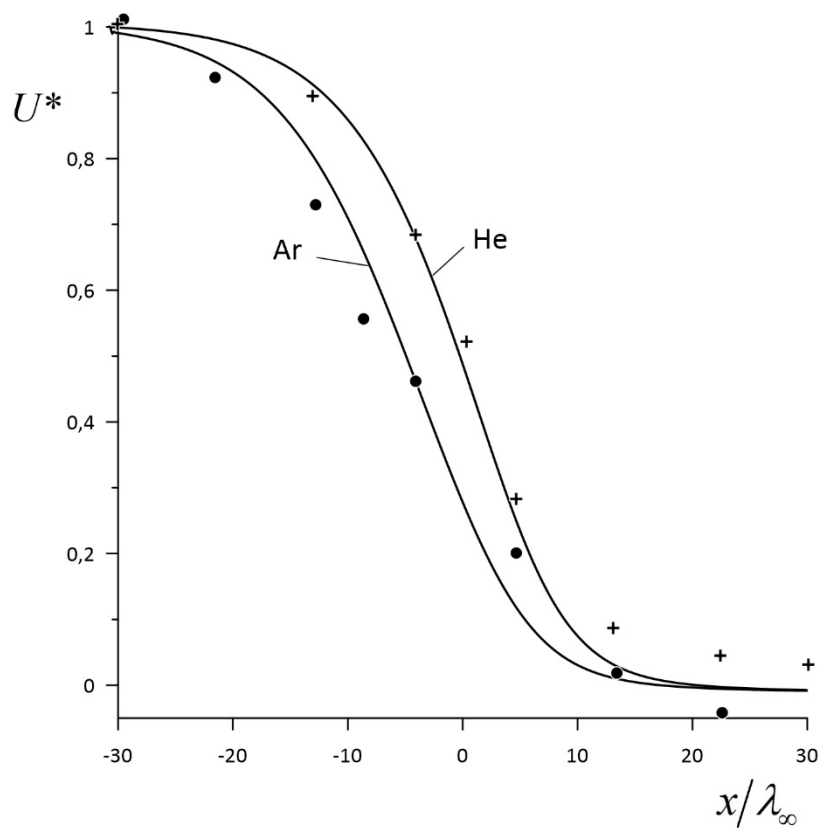


Рисунок 1.9 – Профили скорости в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 44%, $M_\infty = 1.5$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – экспериментальные данные [47], сплошная линия – разрабатываемая модель

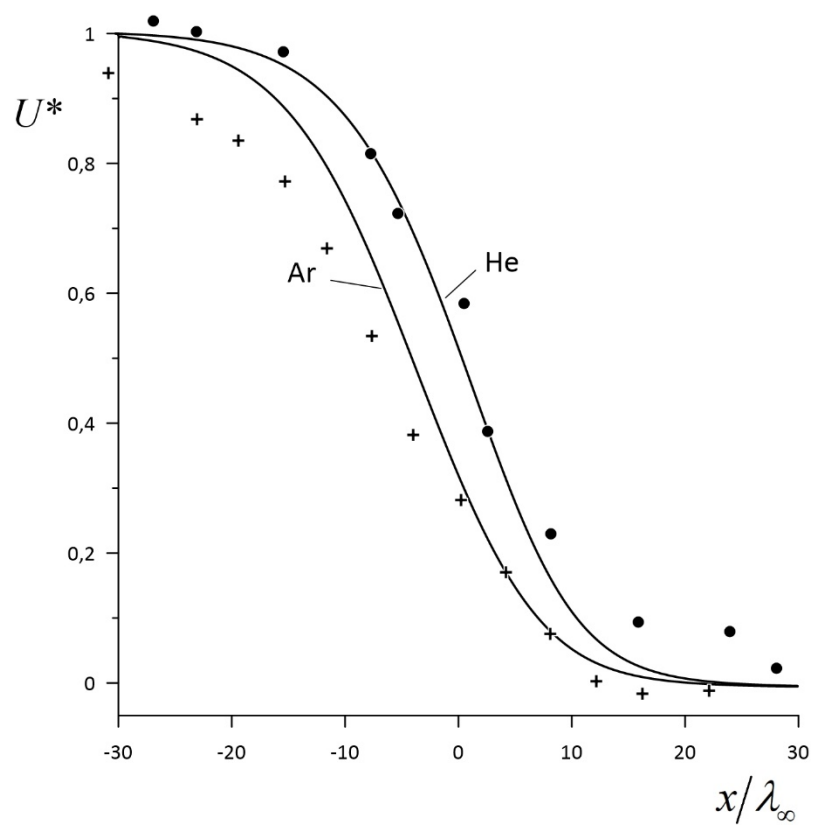


Рисунок 1.10 – Профили скорости в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 24.7%, $M_\infty = 1.5$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – экспериментальные данные [47], сплошная линия – разрабатываемая модель

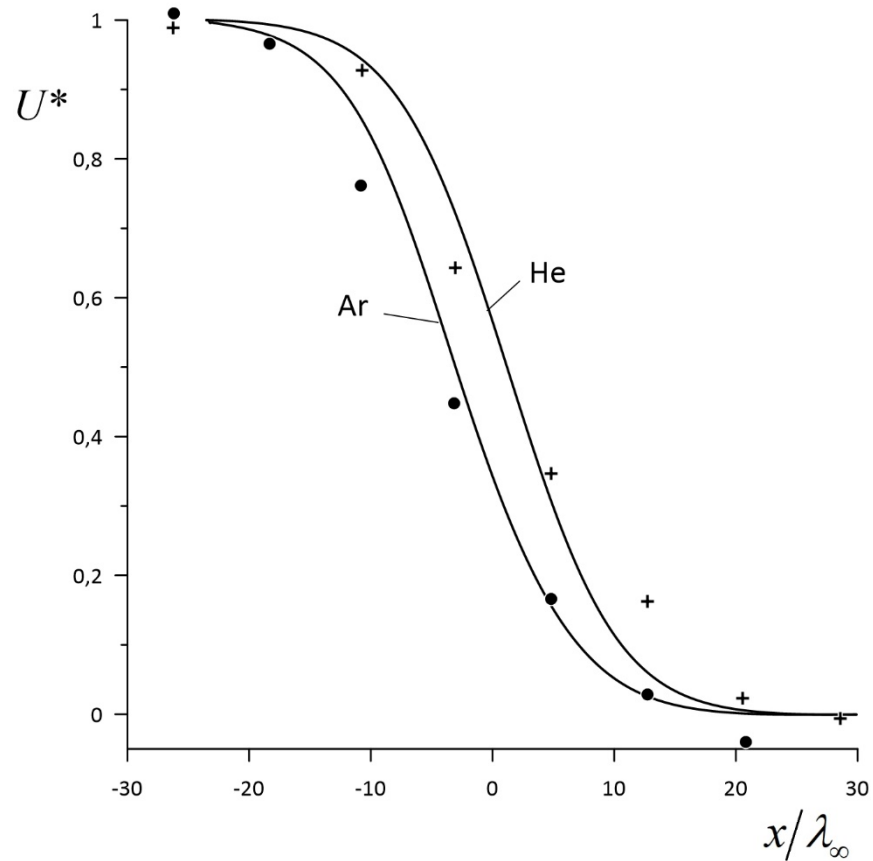


Рисунок 1.11 – Профили скорости в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 11.5%, $M_\infty = 1.5$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – экспериментальные данные [47], сплошная линия – разрабатываемая модель

Результаты, показанные на Рисунках 1.9-1.11, несмотря на значительный разброс экспериментальных данных, не противоречат результатам, полученным с помощью разрабатываемой модели.

На Рисунке 1.12 и Рисунке 1.13 показаны сравнительные профили скорости и температуры для смеси аргона, неона и гелия, полученные методом прямого статистического моделирования [87] и с использованием разрабатываемой модели. Расчеты выполнялись с использованием программного пакета [86].

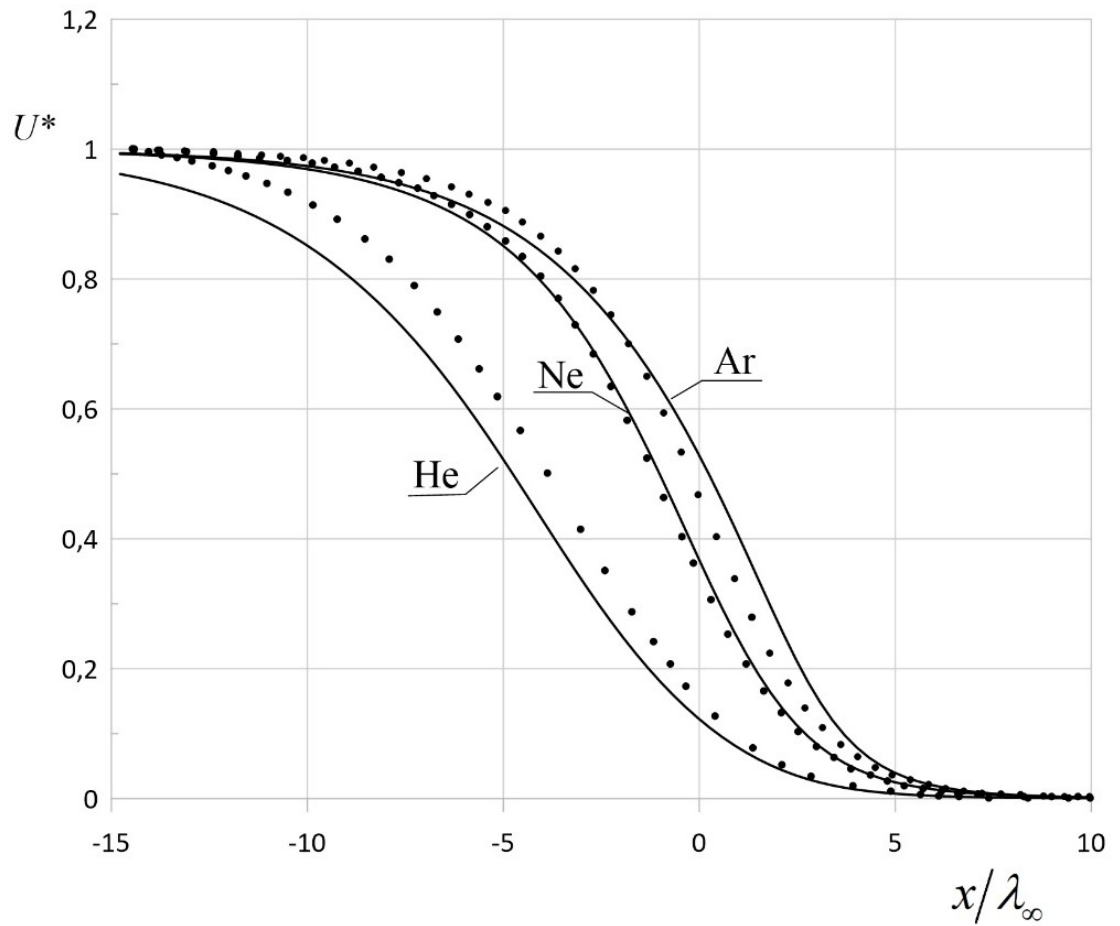


Рисунок 1.12 – Профили скорости в плоской ударной волне
 трехкомпонентного газа, $M_\infty = 2.5$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – данные работы [87],
 сплошная линия – разрабатываемая модель

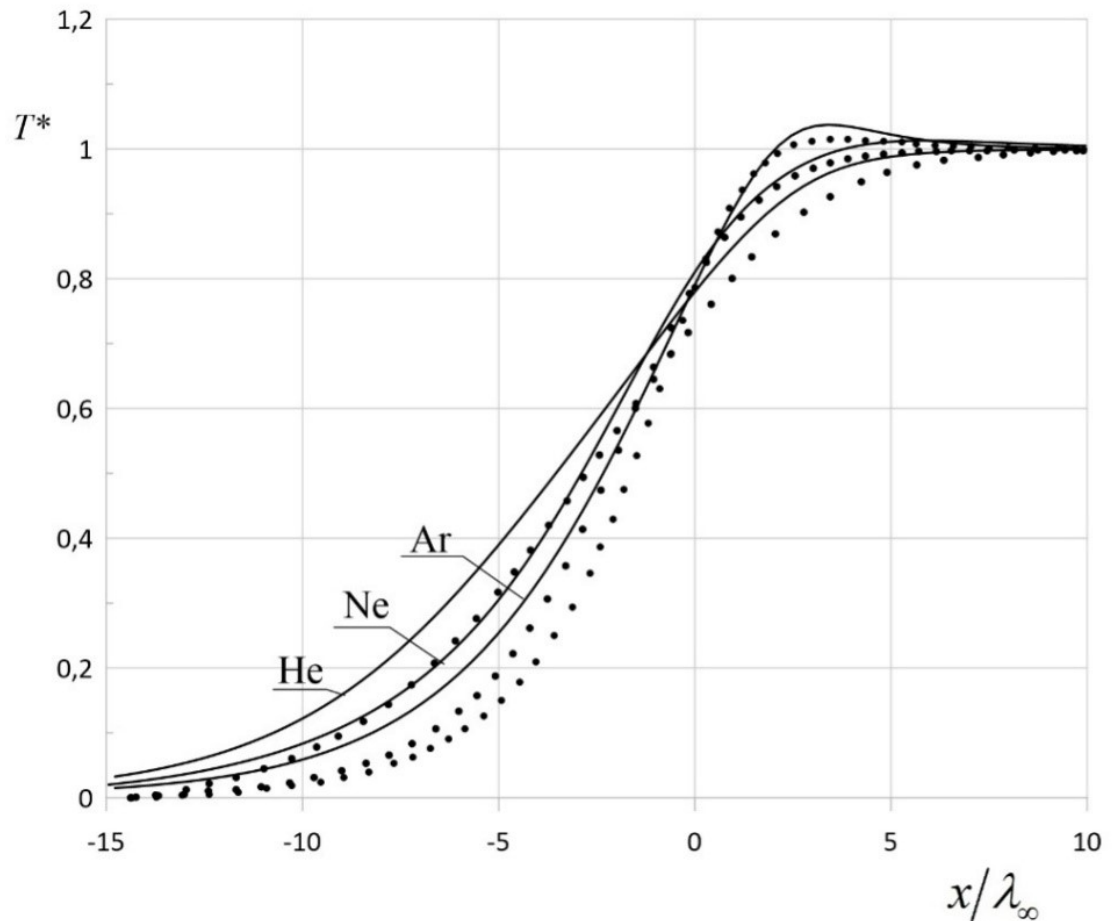


Рисунок 1.13 – Профили температуры в плоской ударной волне трехкомпонентного газа, $M_\infty = 3$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – данные работы [87], сплошная линия – разрабатываемая модель

На Рисунке 1.14 и Рисунке 1.15 показаны сравнительные профили плотности и теплового потока для смеси аргона и гелия, полученные с использованием БГК-модели и разрабатываемой модели.

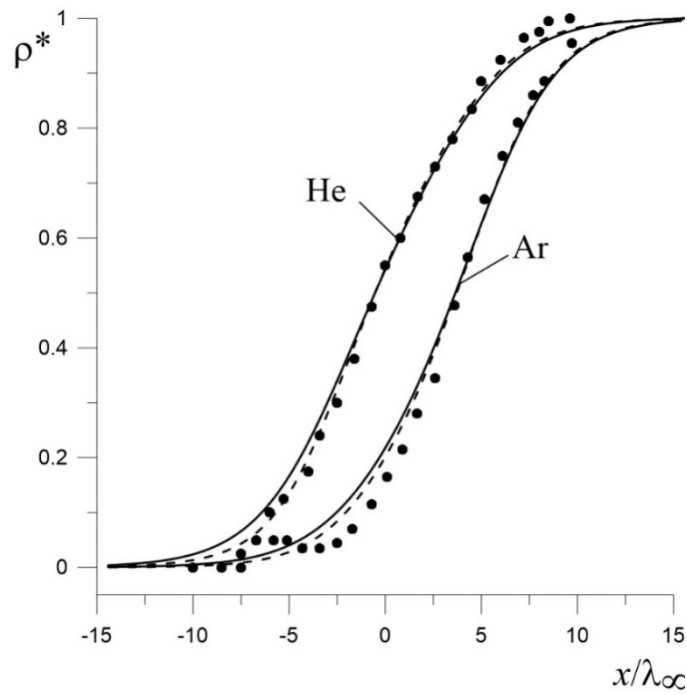


Рисунок 1.14 – Профили плотности в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: точки – экспериментальные данные [46], сплошная линия – разрабатываемая модель, пунктир – модель БГК

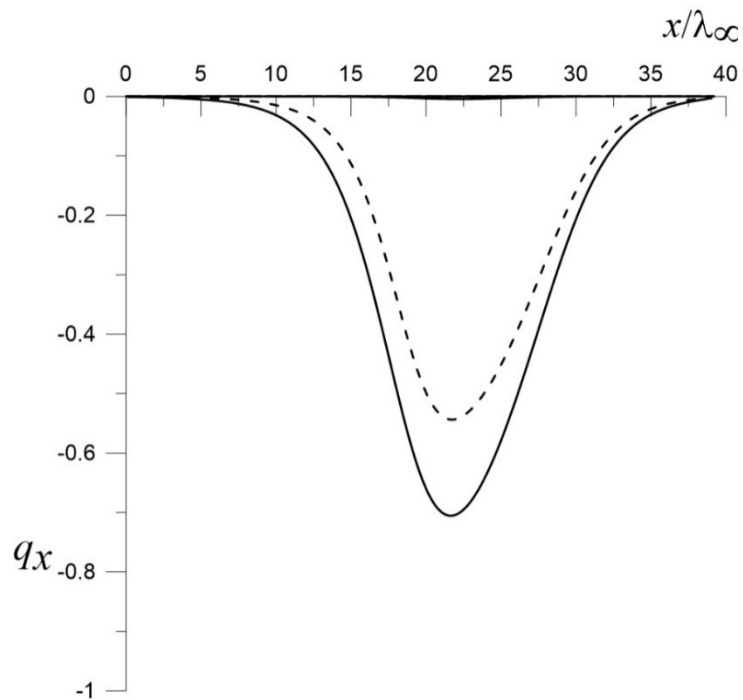


Рисунок 1.15 – Профили теплового потока в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание аргона 13%, $M_\infty = 2.03$, $s = 1$, $\tau_p/\tau_U = 1$: сплошная линия – разрабатываемая модель, пунктир – модель БГК

Профили плотности обеих моделей практически совпадают. Профили теплового потока существенно отличаются, что является известным фактом, связанным с неверным числом Прандтля БГК-модели.

1.4 Распространение кинетического уравнения на смеси многоатомных газов

При рассмотрении многоатомных молекул возникает необходимость разделения поступательной и вращательной температур газа.

Термодинамическая температура определяется выражением

$$T^K = \frac{3}{2}(\gamma^K - 1)T_t^K + \frac{5 - 3\gamma^K}{2}T_r^K.$$

По аналогии с работой [26] температура молекул, испытавших одно столкновение, могут быть представлены следующим образом:

$$T_t^{+K} = T^K + \frac{5 - 3\gamma^K}{2} \frac{Z^K - 1}{Z^K} (T_t^K - T_r^K), \quad (1.7)$$

$$T_r^{+K} = T^K + \frac{3}{2}(\gamma^K - 1) \frac{Z^K - 1}{Z^K} (T_t^K - T_r^K). \quad (1.8)$$

В данных выражениях Z – параметр столкновений. Данный параметр показывает, сколько столкновений в среднем приходится на одно неупругое столкновение. Его значение примерно равно 5.

Рассмотрим столкновения молекул разных компонентов – межкомпонентные столкновения или KN -столкновения. Ранее показано, что в рамках приближения МКУ групповая скорость молекул, испытавших одно межкомпонентное столкновение U^{KN} , может быть определена на основе закона сохранения импульса без учета неполной релаксации групповых скоростей компонентов U^K и U^N , имевших место до столкновения

$$U^{KN} = \frac{m^K}{m^K + m^N} U^K + \frac{m^N}{m^K + m^N} U^N. \quad (1.9)$$

С учетом этого допущения закон сохранения энергии взаимодействующих компонентов принимает вид

$$c_v^{KN} 2n^{KN} m^{KN} T^{KN} + 2n^{KN} m^{KN} T^{KN} \frac{(U^{KN})^2}{2} = c_v^K 2n^{KN} m^K T^K + n^{KN} m^K \frac{(U^K)^2}{2} + c_v^N n^{KN} m^N T^N + n^{KN} m^N \frac{(U^N)^2}{2}. \quad (1.10)$$

Здесь T^{KN} – термодинамическая температура обоих компонентов после KN -столкновения, $c_v^{KN} = \sum \rho^K n^K c_v^K$, c_v^K и c_v^N – изохорные теплоемкости, n^{KN} – концентрация молекул каждого компонента, участвующего в KN -столкновениях, m^K и m^N – молекулярные массы рассматриваемого и фонового компонентов соответственно.

Из (1.9) и (1.10) следует, что

$$T^{KN} = \frac{1}{1 + \frac{\gamma^K - 1}{\gamma^N - 1}} T^K + \frac{1}{1 + \frac{\gamma^N - 1}{\gamma^K - 1}} T^N + \frac{1}{2k} \frac{\gamma^K - 1}{1 + \frac{\gamma^K - 1}{\gamma^N - 1}} \frac{m^K m^N}{m^K + m^N} (U^K - U^N)^2. \quad (1.11)$$

Для определения поступательной и вращательной температур молекул, участвующих в KN -столкновениях, примем следующее допущение: после межкомпонентных столкновений поступательные температуры обоих компонентов равны T_t^+ , вращательные температуры компонентов различны и определены как

$$(T_t^+)_N^K = T_r^K + \frac{1}{Z^K} (T^{KN} - T_r^K) = \frac{1}{Z^K} T^{KN} + \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K, \quad (1.12)$$

$$(T_t^+)_K^N = T_r^N + \frac{1}{Z^N} (T^{KN} - T_r^N) = \frac{1}{Z^N} T^{KN} + \frac{Z^N - 1}{Z^N} T_r^N. \quad (1.13)$$

Эти температуры имеют тот же физический смысл, что и температуры, определенные зависимостями (1.7) и (1.8). Баланс энергии теплового движения молекул, заключенных в единице объема, может быть записан следующим образом

$$kn^{KN} T^{KN} = 3kn^{KN} T_t^+ + kn^{KN} \frac{5 - 3\gamma^K}{2(\gamma^K - 1)} (T_r^+)_N^K + kn^{KN} \frac{5 - 3\gamma^N}{2(\gamma^N - 1)} (T_r^+)_K^N.$$

Общая для компонентов температура T_t^+ определена выражением

$$T_t^+ = \frac{1}{3} \left\{ \left[\left(1 - \frac{5-3\gamma^K}{2} \frac{1}{Z^K} \right) \frac{1}{\gamma^K - 1} + \left(1 - \frac{5-3\gamma^N}{2} \frac{1}{Z^N} \right) \frac{1}{\gamma^N - 1} \right] T^{KN} - \left[\frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K - 1)} \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K - \frac{5-3\gamma^N}{2(\gamma^N - 1)} \frac{Z^N - 1}{Z^N} T_r^N \right] \right\}.$$

В этом случае модель в общем виде будет записана следующим образом.

МКУ для смеси многоатомных газов имеет вид:

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

здесь $f(t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \varepsilon)$ – функция распределения молекул по скоростям, фазовое пространство которой расширено энергией вращения молекулы ε .

Чтобы оценить физическую адекватность разрабатываемого МКУ была решена задача о профиле ударной волны. Задача решалась для двухкомпонентного газа.

Если газ движется вдоль одной из координатных осей, обозначаемой далее как x , то можно сократить количество измерений функции распределения, введя в рассмотрение три функции f_n, f_p и f_ω для каждого из компонентов:

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

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

$$f_\omega(t, x, \xi_x) = \int \varepsilon f d\xi_y d\xi_z d\varepsilon.$$

Система кинетических уравнений для компонента K принимают вид [89]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} + \xi_x \frac{\partial}{\partial x} \begin{vmatrix} f_n^K \\ f_p^K \\ f_\omega^K \end{vmatrix} = \nu^{KK} \begin{vmatrix} f_{nK}^{+K} - f_n^K \\ f_{pK}^{+K} - f_p^K \\ f_{\omega}^{+K} - f_\omega^K \end{vmatrix} + \nu_N^K \begin{vmatrix} f_{nN}^{+K} - f_n^K \\ f_{pN}^{+K} - f_p^K \\ f_{\omega}^{+K} - f_\omega^K \end{vmatrix}. \quad (1.14)$$

Здесь

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

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

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

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

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

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

$$(c_N^{+K})_x = \xi_x - (U^{KN})_x,$$

$$R^K = k/m^K.$$

Моменты функции распределения при этом имеют следующий вид:

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

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

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

$$T_r^K = \frac{2(\gamma^K-1)}{(5-3\gamma^K)n^K} \int f_{\omega}^K dc_x,$$

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

$$(p^K)_{xx} = m^K \int (c^K)_x^2 f_n^K dc_x - n^K kT^K,$$

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

1.5 Тестирование модели

Решение кинетического уравнения строилось как первая начально-краевая задача по аналогии с разделом 1.2. На границах вычислительной области задавались условия невозмущенного потока и условия Ренкина-Гюгонио. Учитывалось, что групповые скорости и температуры на границах, находящихся в условиях равновесия, одинаковы для обоих компонентов. Скорость звука и, следовательно, число Маха в невозмущенном потоке, определялись по кажущейся массе молекул и показателю адиабаты смеси.

На Рисунке 1.16 и Рисунке 1.17 приведены профили температур для смеси гелия, водорода и кислорода при $M_\infty = 2.5$. Свободный параметр модели, определяющий зависимость коэффициента вязкости от температуры, принимался $s = 0.5$ и $s = 1$. Параметр столкновений принимался как $Z^K = Z^N = 5$. Для сравнения использованы расчетные данные работы [19], где данные были получены методом прямого статистического моделирования. Относительные концентрации компонент гелия, кислорода и водорода составляют 85%, 5% и 15 % соответственно.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}.$$

Значение координаты $x/\lambda_\infty = 0$ соответствует середине профиля суммарной плотности.

Расчеты выполнялись с использованием программного пакета [90].

Полученные зависимости показывают, что наблюдается расхождение данных работы [19] и данных, полученных по разрабатываемой модели. Профили, полученные методом прямого статистического моделирования более «крутые».

При значении параметров $s=0.5$ в зависимостях вязкостей компонентов $\mu = \mu_{\infty} \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^s$ рассчитанные профили приближаются к данным работы [19], как показано на Рисунке 1.17. В этой работе использовалась модель классического ротатора, что соответствует $s=0.5$.

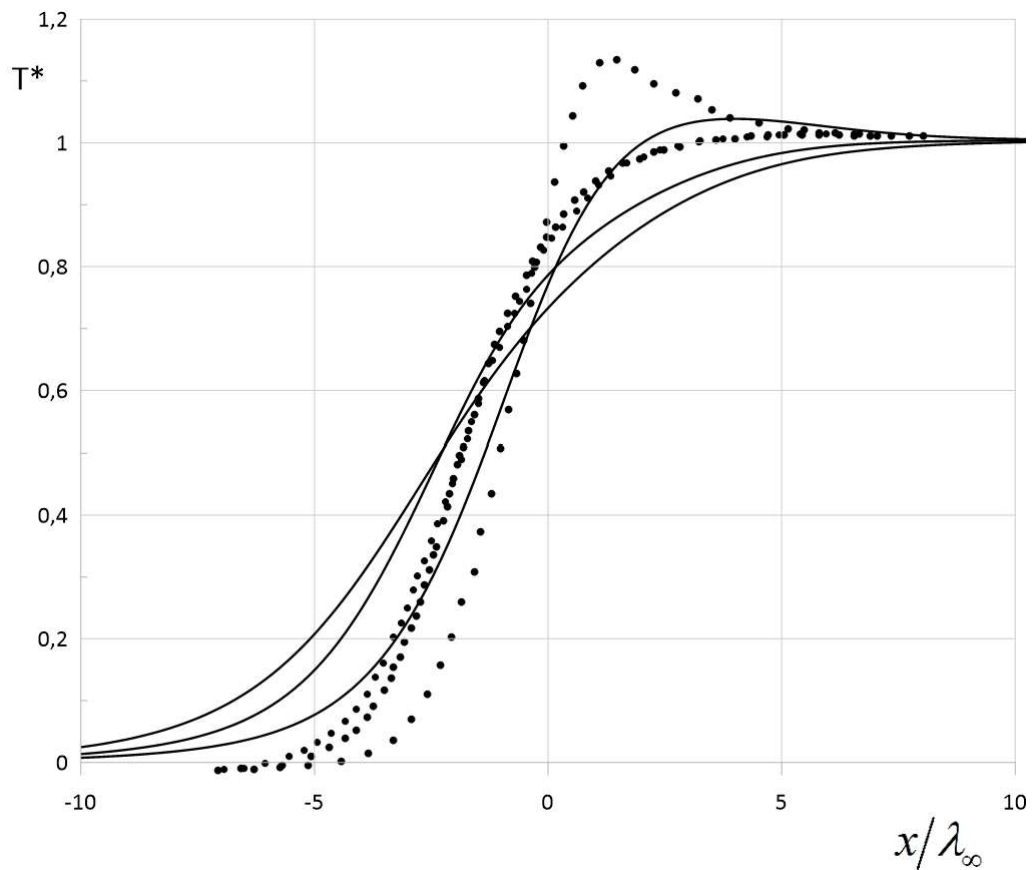


Рисунок 1.16 – Профили температур смеси гелия, водорода и кислорода в плоской ударной волне трехкомпонентного газа, $M_{\infty} = 2.5$, $s = 1$: точки – данные работы [19], сплошные линии – разрабатываемая модель

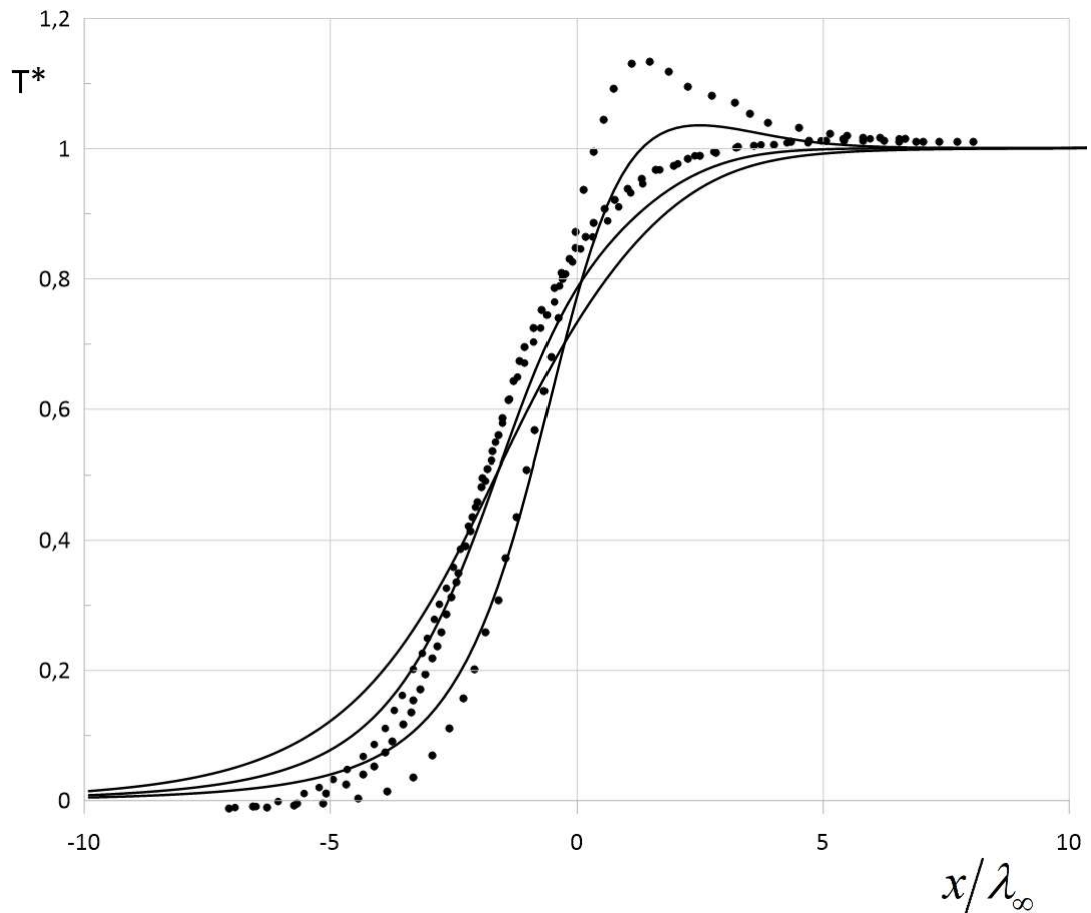


Рисунок 1.17 – Профили температур смеси гелия, водорода и кислорода в плоской ударной волне трехкомпонентного газа, $M_\infty = 2.5$, $s = 0.5$: точки – данные работы [19], сплошные линии – разрабатываемая модель

Ниже на Рисунке. 1.18 и Рисунке 1.19 приведены профили поступательной и вращательной температур, построенные для смеси азота и кислорода при $M_\infty = 3$ и $M_\infty = 5$. Свободный параметр модели, определяющий зависимость коэффициента вязкости от температуры, принимался $s = 0.5$. Параметр столкновений принимался как $Z^K = Z^N = 5$. Для сравнения использованы расчетные данные работы [81], где данные были получены методом прямого статистического моделирования.

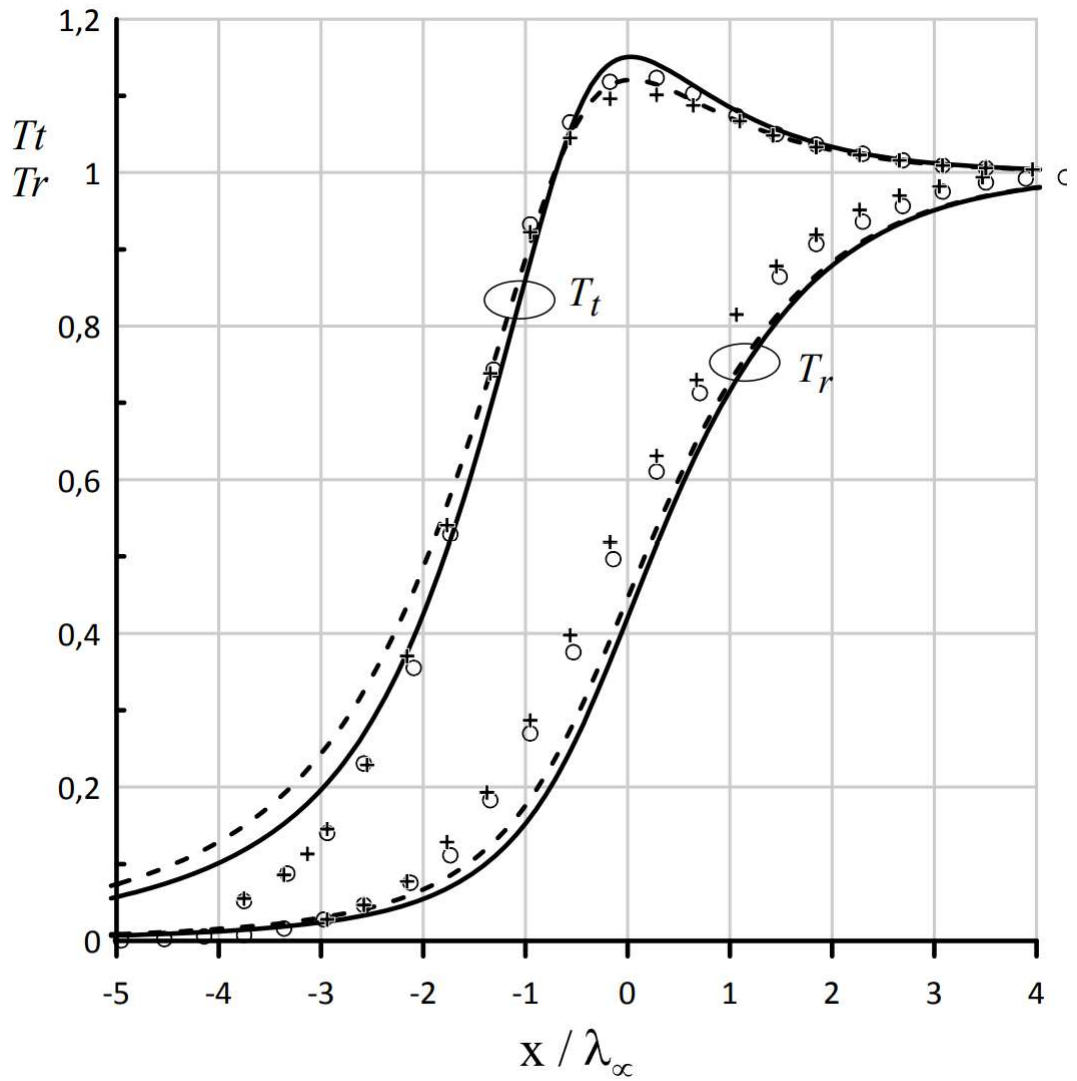


Рисунок 1.18 – Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%, $M_{\infty} = 3$, $s = 0.5$: точки – данные работы [81], крестики – азот, кружки – кислород. пунктир – азот, сплошная линия – кислород

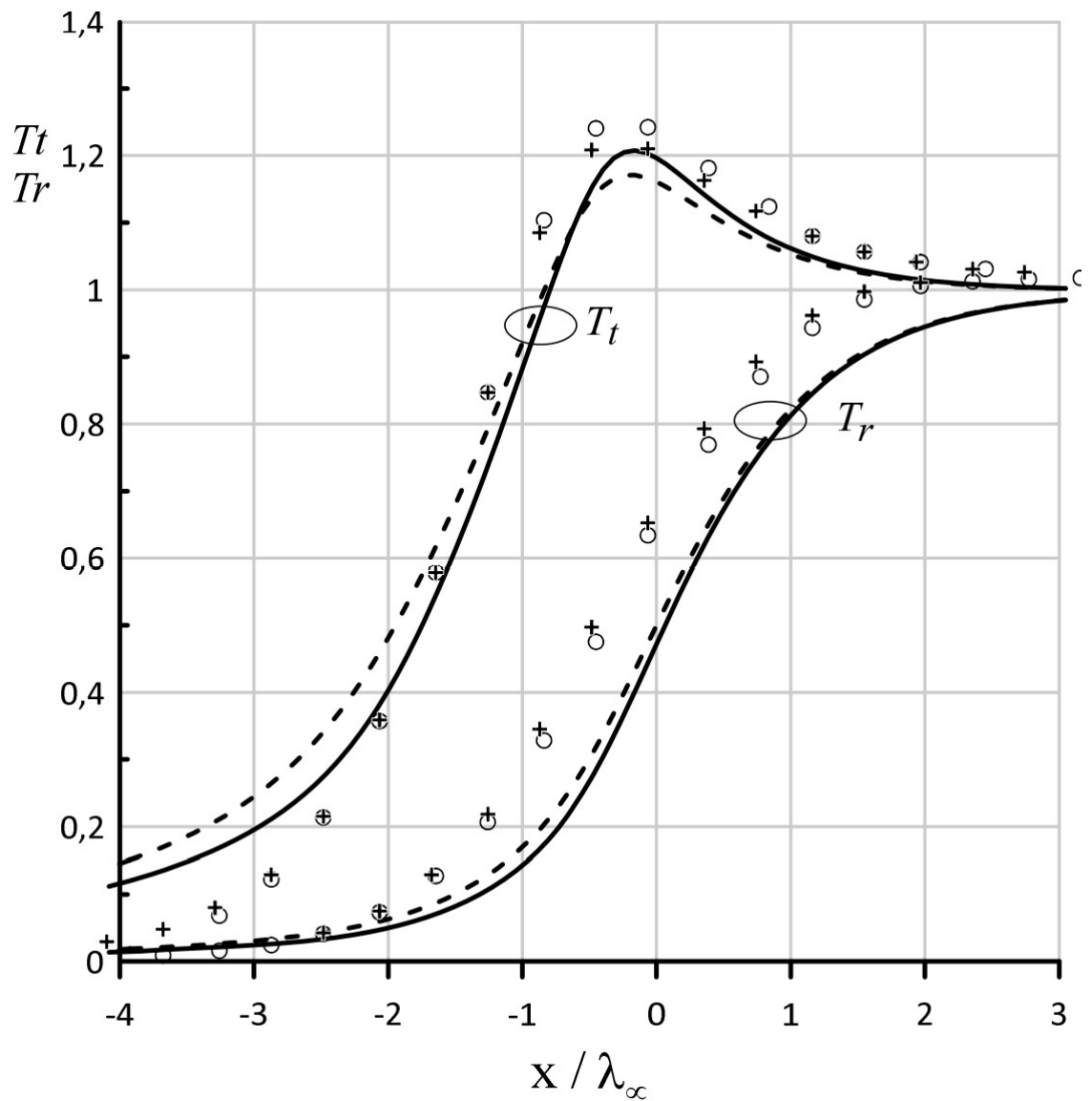


Рисунок 1.19 – Профили поступательной и вращательной температур смеси азота и кислорода в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание азота 80%, $M_\infty = 5$, $s = 0.5$: точки – данные работы [81], крестики – азот, кружки – кислород, пунктир – азот, сплошная линия – кислород

Так как массы молекул азота и кислорода различаются незначительно, то на Рисунках 1.18 и 1.19 наблюдается слабое расхождение профилей поступательных и вращательных температур компонент.

На Рисунке 1.20 и Рисунке 1.21 показаны результаты расчета с применением полученной модели для смеси водорода и углекислого газа для числа Маха $M_\infty = 3$ с содержанием компонент в смеси в равных пропорциях.

Полученные зависимости показывают, что использование данной модели для течений содержащий компоненты с большой разницей молекулярных масс приводит к такого рода зависимостям, на которых наблюдается сильное опережение одного компонента и других

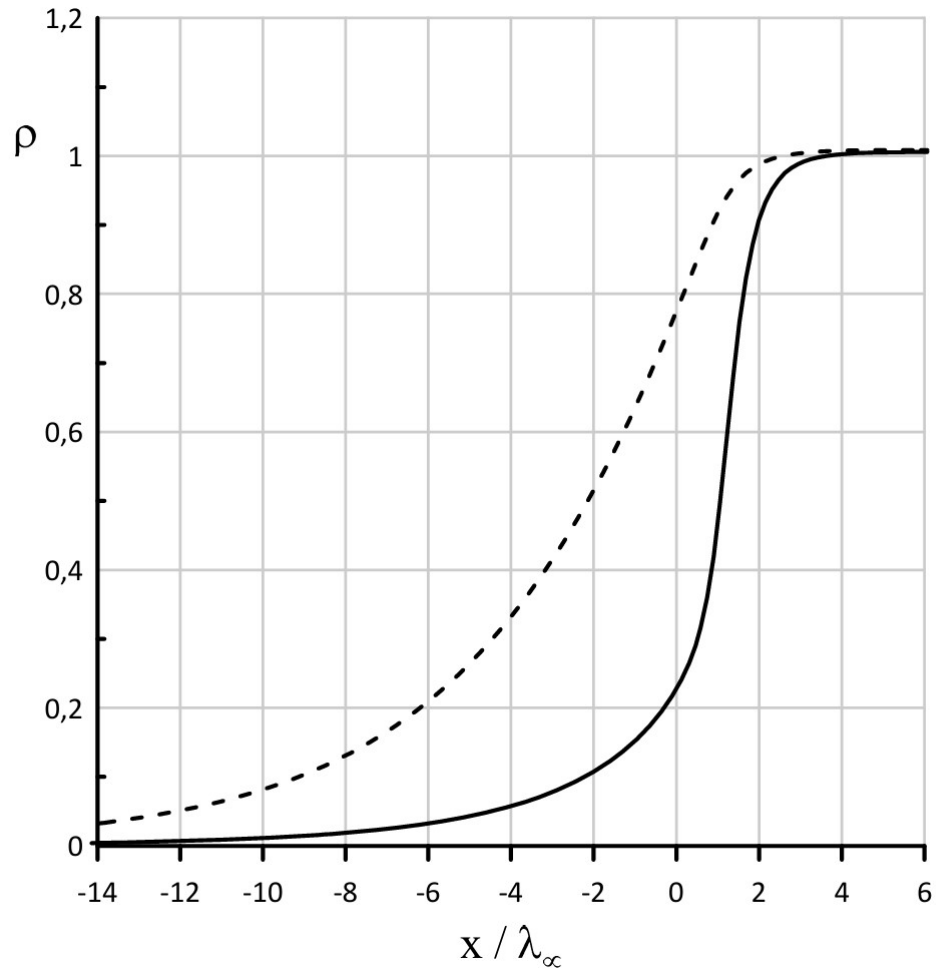


Рисунок 1.20 – Профили плотности смеси водорода и углекислого в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание водорода 50%, $M_\infty = 3$, $s = 0.5$: пунктир – водород, сплошная линия -углекислый газ

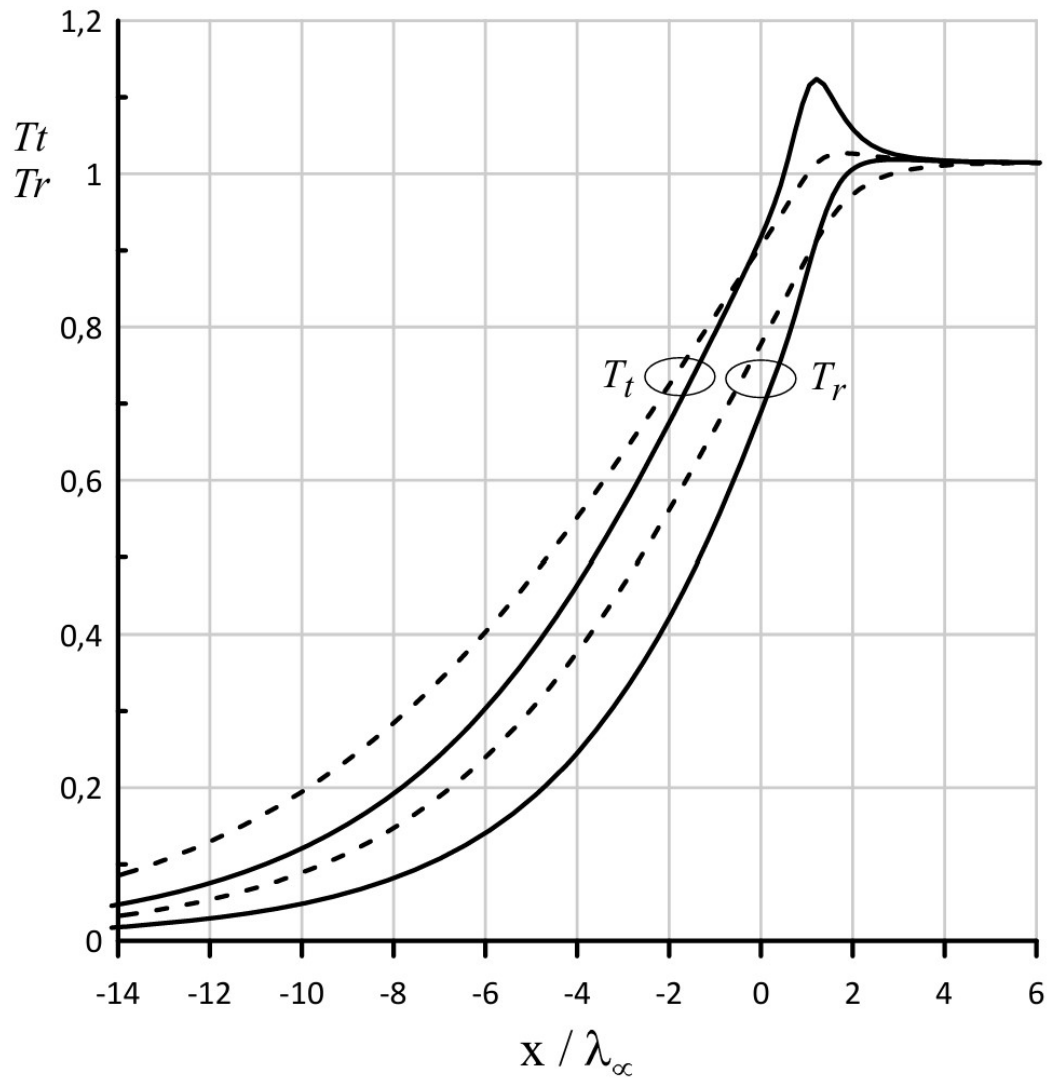


Рисунок 1.21 – Профили поступательной и вращательной температур смеси водорода и углекислого в плоской ударной волне двухкомпонентного газа, содержание водорода 50%, $M_\infty = 3$, $s = 0.5$: пунктир – водород, сплошная линия – углекислый газ

1.6 Заключение по Главе 1

Проведенные численные тесты показывают, что разработанная модель дает удовлетворительную сходимость с экспериментальными и расчетными данными для одноатомных и многоатомных газов. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показывает, что лучшее соответствие экспериментальным данным наблюдается при $\tau_p/\tau_U = 0.8...1.0$. Сравнение

расчетов с использованием разрабатываемой модели и расчетов с использованием методов Монте-Карло показывает, что лучшее совпадение профили ударных волн имеет место при $s = 0.5$, что соответствует модели молекул твердых сфер.

Основные отличия разработанной модели от известных модельных кинетических уравнений для смеси газов заключаются в следующем.

- Относительная скорость движения молекул разных компонентов выражена через осредненные величины тепловых и групповых скоростей, что приводит к достаточно простым выражениям для частоты межмолекулярных столкновений и повышает экономичность модели с точки зрения количества вычислительных операций.

- Частота столкновений различных компонентов содержит коэффициент вязкости смеси, определяемый только в невозмущенном потоке по известным табличным данным для данного состава смеси. В результате отпадает необходимость в использовании аппроксимаций этого коэффициента, зачастую весьма сложных, в зависимости от парциального состава и температуры.

ГЛАВА 2 ПОСТРОЕНИЕ СИСТЕМЫ МОМЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ И УРАВНЕНИЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ СМЕСЕЙ ГАЗОВ

2.1 Построение системы моментных уравнений

В Главе на основе модельного кинетического уравнения для смеси многоатомных газов получена система моментных уравнений для каждого компонента смеси многоатомных газов.

Система модельных кинетических уравнений (1.14) позволяет построить системы моментных уравнений. Ограничимся моментной системой неполного второго порядка, т.е. системой уравнений сохранения массы, импульса и энергии.

Процедура сведения кинетического уравнения к системе моментных уравнений достаточно традиционна. Применительно к (1.14) 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 будет применима в переходной области и на границе области гидродинамической.

Интегрирование первого уравнения (1.14) с множителем m^K позволяет получить моментное уравнение закона сохранения массы (уравнение неразрывности):

$$m^K \frac{\partial}{\partial t} \int f_n^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int m^K \xi_\alpha f_n^K d\bar{\xi} = \nu_K^K m^K \int (f_{nK}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi} + \nu_N^K m^K \int (f_{nN}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi};$$

$$\frac{\partial \rho^K}{\partial t} + \frac{\partial \rho^K u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = 0 \text{ или}$$

$$\frac{\partial \rho^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial \rho^K}{\partial x_\alpha} + \rho^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = 0. \quad (2.1)$$

Интегрирование уравнения с множителем $m^K \xi_i$ позволяет получить уравнение закона сохранения импульса (уравнение движения).

$$\begin{aligned}
& m^K \frac{\partial}{\partial t} \int \xi_i f_n^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int m^K \xi_\alpha \xi_i f_n^K d\bar{\xi} = v_K^K m^K \int \xi_i (f_{nK}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi} ; \\
& + v_N^K m^K \int \xi_i (f_{nN}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi} \\
& \frac{\partial \rho^K u_i^K}{\partial t} + \frac{\partial (\rho^K u_i^K u_\alpha^K + P_{i\alpha}^K)}{\partial x_\alpha} = \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K). \quad (2.2)
\end{aligned}$$

Это уравнение может быть выражено относительно групповой скорости u_i^K следующим образом:

$$\rho^K \frac{\partial u_i^K}{\partial t} + u_i^K \frac{\partial \rho^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial \rho^K u_i^K}{\partial x_\alpha} + u_i^K \frac{\partial \rho^K u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K).$$

В данном уравнении в правой части второе и четвертое слагаемые представляют собой уравнение неразрывности, умноженное на u_i^K . Окончательно можно получить дифференциальное уравнение для групповой скорости:

$$\frac{\partial u_i^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\rho^K} \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \sum_{N \neq K} v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K). \quad (2.3)$$

Уравнение энергии может быть получено с помощью моментного уравнения для напряжений. Получим это уравнение интегрированием второго уравнения системы (1.14) с множителем $m^K \xi_i \xi_j$.

$$\begin{aligned}
& m^K \frac{\partial}{\partial t} \int \xi_i \xi_j f_p^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int m^K \xi_\alpha \xi_i \xi_j f_p^K d\bar{\xi} = v_K^K m^K \int \xi_i \xi_j (f_{pK}^{+K} - f_p^K) d\bar{\xi} ; \\
& + v_N^K m^K \int \xi_i \xi_j (f_{pN}^{+K} - f_p^K) d\bar{\xi} \\
& \frac{\partial}{\partial t} (P_{ij}^K + \rho^K u_i^K u_j^K) + \partial (2\varphi_{\alpha ij}^K + u_j^K P_{i\alpha}^K + u_i^K P_{j\alpha}^K + u_\alpha^K P_{ij}^K + \rho u_\alpha^K u_i^K u_j^K) = \\
& = v^{KK} p_{ij}^K + v^{KK} \delta_{ij} \rho^K R^K (T_t^{+K} - T_t^K) - \sum_{N \neq K} v_N^K p_{ij}^K + \\
& \sum_{N \neq K} v_N^K \rho^K \left\{ \delta_{ij} R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + u_i^K (u_j^{KN} - u_j^K) \right\}
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(P_{ij}^K + \rho^K u_i^K u_j^K \right) + \partial \left(2\varphi_{\alpha ij}^K + u_j^K P_{i\alpha}^K + u_i^K P_{j\alpha}^K + u_\alpha^K P_{ij}^K + \rho u_\alpha^K u_i^K u_j^K \right) = \\ & = - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K \right) p_{ij}^K + \sum_{N \neq K} v_N^K \left(\delta_{ij} \rho^K R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + \rho^K (u_i^{KN} - u_j^{KN} - u_i^K u_j^K) \right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Просуммируем уравнение (2.2) для импульсов $\rho^K u_i^K$ и $\rho^K u_j^K$, умноженные на u_j^K и u_i^K соответственно

$$\begin{cases} u_j^K \frac{\partial \rho^K u_i^K}{\partial t} + u_j^K \frac{\partial \rho^K u_i^K u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + u_j^K \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \rho^K u_j^K \sum_{N \neq K} v_N^K (u_i^{KN} - u_i^K) \\ u_i^K \frac{\partial \rho^K u_j^K}{\partial t} + u_i^K \frac{\partial \rho^K u_j^K u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + u_i^K \frac{\partial P_{j\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \rho^K u_i^K \sum_{N \neq K} v_N^K (u_j^{KN} - u_j^K) \end{cases}.$$

В итоге получаем преобразованное выражение для групповых потоков импульса

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho^K u_i^K u_j^K}{\partial t} + \frac{\partial \rho^K u_i^K u_\alpha^K u_j^K}{\partial x_\alpha} + u_j^K \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} + u_i^K \frac{\partial P_{j\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \\ & \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \left[u_j^K (u_i^{KN} - u_i^K) + u_i^K (u_j^{KN} - u_j^K) \right] \end{aligned} \quad (2.5)$$

После вычитания из уравнения (2.4) уравнения (2.5) получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_{ij}^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K P_{ij}^K}{\partial x_\alpha} + P_{i\alpha}^K \frac{\partial u_j^K}{\partial x_\alpha} + P_{j\alpha}^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + 2 \frac{\partial \varphi_{\alpha ij}^K}{\partial x_\alpha} = - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K \right) p_{ij}^K + \\ & \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \left(\delta_{ij} R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + u_i^{KN} u_j^{KN} - u_i^K u_j^K - u_j^K (u_i^{KN} - u_i^K) - u_i^K (u_j^{KN} - u_j^K) \right) \end{aligned}.$$

С учетом того, что $u_i^{KN} - u_i^K = \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K)$, уравнение примет вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_{ij}^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K P_{ij}^K}{\partial x_\alpha} + P_{i\alpha}^K \frac{\partial u_j^K}{\partial x_\alpha} + P_{j\alpha}^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + 2 \frac{\partial \varphi_{\alpha ij}^K}{\partial x_\alpha} = - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K \right) p_{ij}^K + \\ & \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \left(\delta_{ij} R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (u_i^N - u_i^K) (u_j^N - u_j^K) \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

С учетом того, что $p_{ij}^K = P_{ij}^K - \delta_{ij} 1/3 P_{\alpha\alpha}^K = P_{ij}^K - \delta_{ij} p^K$, где p – давление газа, найдем свертку уравнения (2.6)

$$\frac{\partial p^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K p^K}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} P_{\alpha\beta}^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\beta} + 2 \frac{\partial \phi_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = v^{KK} \rho^K R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + \sum_{N \neq K} v_N^K \rho^K \left\{ R^K (T_t^{+K} - T_t^K) + \frac{1}{3} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K) \right\}. \quad (2.7)$$

Из уравнения (2.7) получим уравнение для поступательной температуры T_t^K

$$\frac{\partial T_t^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial T_t^K}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} T_t^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} \frac{P_{\alpha\beta}^K}{\rho^K R^K} \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + \frac{2}{3} \frac{1}{\rho^K R^K} \frac{\partial \phi_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = v^{KK} (T_t^{+K} - T_t^K) + \sum_{N \neq K} v_N^K \left((T_t^{+K} - T_t^K) + \frac{1}{3 R^K} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right). \quad (2.8)$$

Чтобы получить выражение для вращательной температуры T_r^K проинтегрируем третье уравнение системы (1.14) без множителя, т.к. функция f_r^K является интегралом исходной функции распределения с множителем ε по пространству энергий вращения молекулы.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f_\omega^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int \xi_\alpha f_\omega^K d\bar{\xi} = v_K^K \int (f_{\omega K}^{+K} - f_\omega^K) d\bar{\xi} + v_N^K \int (f_{\omega N}^{+K} - f_\omega^K) d\bar{\xi};$$

$$\frac{\partial T_r^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial T_r^K}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\frac{5-3\gamma^K}{2(\gamma^K-1)} \rho^K R^K} \frac{\partial \omega_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = v_K^K (T_r^{+K} - T_r^K) + \sum_{N \neq K} v_N^K \left((T_r^+)^K - T_r^K \right). \quad (2.9)$$

Сложим уравнения (2.8) и (2.9) с множителями $\frac{3}{2}(\gamma^K - 1)$ и $\frac{5-3\gamma^K}{2}$

соответственно

$$\frac{\partial T^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial T^K}{\partial x_\alpha} + (\gamma^K - 1) \frac{P_{\alpha\beta}^K}{\rho^K R^K} \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} + \frac{\gamma^K - 1}{\rho^K R^K} \frac{\partial q_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = \sum_{N \neq K} v_N^K \left(1.5(\gamma^K - 1) T_t^K + \frac{5-3\gamma^K}{2} \left(\frac{1}{Z^K} T^{KN} + \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K \right) - \left(T^K + \frac{\gamma^K - 1}{2 R^K} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right) \right). \quad (2.10)$$

Таким образом, для решения первой краевой задачи, к которой относится задача о профиле ударной волны, систему моментных уравнений целесообразно представить в следующем виде:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial \rho^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial \rho^K}{\partial x_\alpha} + \rho^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = 0 \\ & \frac{\partial u_i^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\rho^K} \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} = \sum_{N \neq K} v_N^K \frac{m^N}{m^K + m^N} (u_i^N - u_i^K) \\ & \frac{\partial T^K}{\partial t} + u_\alpha^K \frac{\partial T^K}{\partial x_\alpha} + (\gamma^K - 1) \frac{P_{\alpha\beta}^K}{\rho^K R^K} \frac{\partial u_\beta^K}{\partial x_\alpha} + \frac{\gamma^K - 1}{\rho^K R^K} \frac{\partial q_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = \\ & = \sum_{N \neq K} v_N^K \left(1.5(\gamma^K - 1) T_i^K + \frac{5 - 3\gamma^K}{2} \left(\frac{1}{Z^K} T^{KN} + \frac{Z^K - 1}{Z^K} T_r^K \right) - \right. \\ & \quad \left. T^K + \frac{\gamma^K - 1}{2R^K} \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right) \end{aligned} \right. \quad (2.11)$$

Для замыкания системы (2.11) 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).

В ряде работ показано, что если в качестве характерного размера при обезразмеривании задачи принять некоторый макроскопический размер L , определяющий число Кнудсена как $Kn = \lambda_\infty / L$, где λ_∞ – средняя длина свободного пробега молекулы в невозмущенном газе, то неравновесные величины Φ_{ijk}^K и p_{ij}^K будут порядка Kn , а частоты столкновений v^{KK} и v_N^K порядка $1/Kn$. В безразмерном уравнении движения системы (2.11) разность скоростей $u_i^N - u_i^K$ также имеет порядок Kn , в противном случае при $Kn \rightarrow 0$ в плотных газах правая часть уравнения будет неограниченно возрастать.

Указанные обстоятельства позволяют определить неравновесные напряжения в первом приближении. Для этого воспользуемся уравнением для напряжений (2.6) и его сверткой (2.7). вычтем из уравнения (2.6) треть его свертки. В результате получим

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial p_{ij}^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K p_{ij}^K}{\partial x_\alpha} + (\delta_{i\alpha} p^K + p_{i\alpha}^K) \frac{\partial u_j^K}{\partial x_\alpha} + (\delta_{j\alpha} p^K + p_{j\alpha}^K) \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} - \delta_{ij} \frac{2}{3} (\delta_{\alpha\beta} p^K + p_{\alpha\beta}^K) \frac{\partial u_\beta^K}{\partial x_\alpha} + \\
& 2 \frac{\partial \Phi_{aij}^K}{\partial x_\alpha} - \delta_{ij} \frac{\partial \Phi_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K \right) p_{ij}^K + \\
& \rho^K \sum_{N \neq K} v_N^K \left(\frac{m^N}{m^K + m^N} \right)^2 \left((u_i^N - u_i^K)(u_j^N - u_j^K) - \delta_{ij} \frac{1}{3} (\mathbf{u}^N - \mathbf{u}^K)^2 \right)
\end{aligned} \quad (2.12)$$

В первом приближении (2.12) содержит только старшие по порядку величины члены, т.е. члены порядка Kn должны быть опущены:

$$p^K \left(\frac{\partial u_i^K}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^K}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \frac{2}{3} p^K \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha} = - \left(v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K \right) p_{ij}^K. \quad (2.13)$$

Здесь учтено, что частоты v_K^K и v_N^K имеют порядок $1/Kn$, а произведение разности скоростей – Kn^2 . Выражение (2.13) получено для одноатомного газа. В многоатомных газах необходимо учитывать влияние объемной вязкости газа. Для газов любой атомарной структуры выражение (2.13) принимает следующий вид:

$$p_{ij}^K = - \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \left(\frac{\partial u_i^K}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^K}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \left(1 - \frac{5-3\gamma^K}{2} Z^K \right) \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha}. \quad (2.14)$$

В однокомпонентном газе уравнения напряжений имеют вид:

$$p_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \mu \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} Z \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}$$

или

$$p_{ij} = -\frac{p}{v} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{p}{v} \left(1 - \frac{5-3\gamma}{2} Z \right) \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}.$$

Из сравнения данных выражений с (2.14) следует, что отличия заключаются только в коэффициенте вязкости, который включает сумму частот столкновений.

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 (2.14), в следующем виде

$$\mu_{eff}^K = \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} = \frac{n^K k T^K}{n^K (v^{KK})^1 + \sum_{N \neq K} n^N (v_N^K)^1}. \quad (2.15)$$

здесь условные обозначения $(v^{KK})^1$ и $(v_N^K)^1$ 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 (см. (2.16)), 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.

Тепловой поток в первом приближении для смеси может быть определен в соответствии с работой [91].

Найдем моментное уравнение для моментов третьего порядка ϕ_{ijk}^K и ω_i^K путем интегрирования первого уравнения системы (1.14) с множителем $m^K \xi_i \xi_j \xi_k$ и третьего уравнения с множителем ε .

$$\begin{aligned} m^K \frac{\partial}{\partial t} \int \xi_i \xi_j \xi_k f_n^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int m^K \xi_\alpha \xi_i \xi_j \xi_k f_n^K d\bar{\xi} &= v_K^K m^K \int \xi_i \xi_j \xi_k (f_{nK}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi} \\ + v_N^K m^K \int \xi_i \xi_j \xi_k (f_{nN}^{+K} - f_n^K) d\bar{\xi} \\ \frac{\partial}{\partial t} \int \varepsilon f_\omega^K d\bar{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int \varepsilon \xi_\alpha f_\omega^K d\bar{\xi} &= v_K^K \int \varepsilon (f_{\omega K}^{+K} - f_\omega^K) d\bar{\xi} \\ + v_N^K \int \varepsilon (f_{\omega N}^{+K} - f_\omega^K) d\bar{\xi} \end{aligned}$$

После интегрирования получаем выражения для моментов третьего порядка, в правой части которых опущены члены второго порядка малости.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{ijk}^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K \phi_{ijk}^K}{\partial x_\alpha} + \phi_{ij\alpha}^K \frac{\partial u_k^K}{\partial x_\alpha} + \phi_{ik\alpha}^K \frac{\partial u_j^K}{\partial x_\alpha} + \phi_{jk\alpha}^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} \\ - \frac{1}{2} T_{ij}^K \frac{\partial P_{k\alpha}^K}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2} T_{ik}^K \frac{\partial P_{j\alpha}^K}{\partial x_\alpha} - \frac{1}{2} T_{jk}^K \frac{\partial P_{i\alpha}^K}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial M_{ijk\alpha}^{K(4)}}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{3} (v^{KK} + v_N^K) \phi_{ijk}^K \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \omega_i^K}{\partial t} + \frac{\partial u_\alpha^K \omega_i^K}{\partial x_\alpha} + \omega_i^K \frac{\partial u_i^K}{\partial x_\alpha} + P_{i\alpha}^K \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{E_\Omega^K}{\rho^K} \right) = (v^{KK} + v_N^K) \omega_i^K,$$

где $M_{ijk\alpha}^{K(4)}$ – момент четвертого порядка

Свертка Φ_{ijk}^K (ϕ_i^K) представляет собой поток тепла, переносимый поступательными степенями свободы, ω_i^K – поток тепла, переносимый вращательными степенями свободы. Их сумма представляет собой полный тепловой поток q_i^K .

В первом приближении выражение для ϕ_i^K может быть получено с учетом (2.15)

$$\begin{aligned} \phi_i^K &= -\frac{15}{4} R^K \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \frac{\partial T_i^K}{\partial x_i}, \\ \omega_i^K &= -\left(\frac{C_p^K (9\gamma^K - 5)}{4\gamma^K} - \frac{15}{4} R^K \right) \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \frac{\partial T_r^K}{\partial x_i}. \end{aligned}$$

Таким образом, выражение для тепловых потоков

$$q_i^K = -\frac{9\gamma^K - 5}{4(\gamma^K - 1)} R^K \frac{p^K}{v^{KK} + \sum_{N \neq K} v_N^K} \frac{\partial T^K}{\partial x_i}. \quad (2.16)$$

Зависимости (2.14) и (2.16) очевидно представляют собой известные законы Стокса и Фурье. В последнем для числа Прандтля использована аппроксимация Эйкена

$$\text{Pr} = \frac{4\gamma}{9\gamma - 5}.$$

Температуры определены как в работе [91]

$$\begin{aligned} T_t^K &= T^K - \frac{5 - 3\gamma^K}{3} Z^K \frac{\mu_{eff}^K}{R^K \rho^K} \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha}; \\ T_r^K &= T^K + (\gamma^K - 1) Z^K \frac{\mu_{eff}^K}{R^K \rho^K} \frac{\partial u_\alpha^K}{\partial x_\alpha}. \end{aligned}$$

Полученные соотношения показывают, что разность поступательной и вращательной температур компонента K , также как и вязкие члены p_{ij}^K и q_i^K , стремятся к нулю при малой концентрации этого компонента в смеси газов.

2.2 Тестирование моментных уравнений на примере задачи о профиле плоской ударной волны

В данной работе решалась задача о профиле ударной волны для смеси двух многоатомных газов. Рассматривается смесь водорода и углекислого газа ввиду большой разницы масс молекул данных газов. Кроме этого использовалось модельное кинетическое уравнение главы 1 для смеси аргон-гелий.

Решение кинетического уравнения строилось как первая краевая задача. На левой границе вычислительной области задавались условия невозмущенного потока, на правой - условия Ренкина-Гюгонио. Конечно-разностный шаблон строился на четырех узлах расчетной сетки, аналогично гл. 1. Шаг по пространству скоростей имел постоянное значение $\Delta\xi$. Для численного решения задачи использовался метод установления с шагом по времени Δt и постоянным шагом геометрической сетки Δx .

Для решения системы моментных уравнений конечно-разностный шаблон формировался на трех узлах расчетной сетки.

В главе 1 было приведено сравнение профилей ударной волны одноатомных газов с экспериментальными данными различных авторов. Там же проведено сравнение с расчетами многоатомных газов, полученными с помощью методов прямого статистического моделирования. Было получено удовлетворительное совпадение результатов.

Для проверки достоверности полученной в этой главе системы моментных уравнений (2.11), приводится сравнение с решением модельного кинетического уравнения (1.14). На Рисунке 2.1 и Рисунке 2.2 показаны зависимости плотности и температуры для углекислого газа. На Рисунке 2.3 и Рисунке 2.4 показаны зависимости плотности и температуры для смеси водорода и углекислого газа в

равных пропорциях при $M_\infty = 2.05$. Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1},$$

$$T^* = \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}.$$

На всех, приведенных ниже графиках, положение нуля геометрической координаты соответствует центру профиля плотности. На графиках смесей – центру профиля плотности смеси.

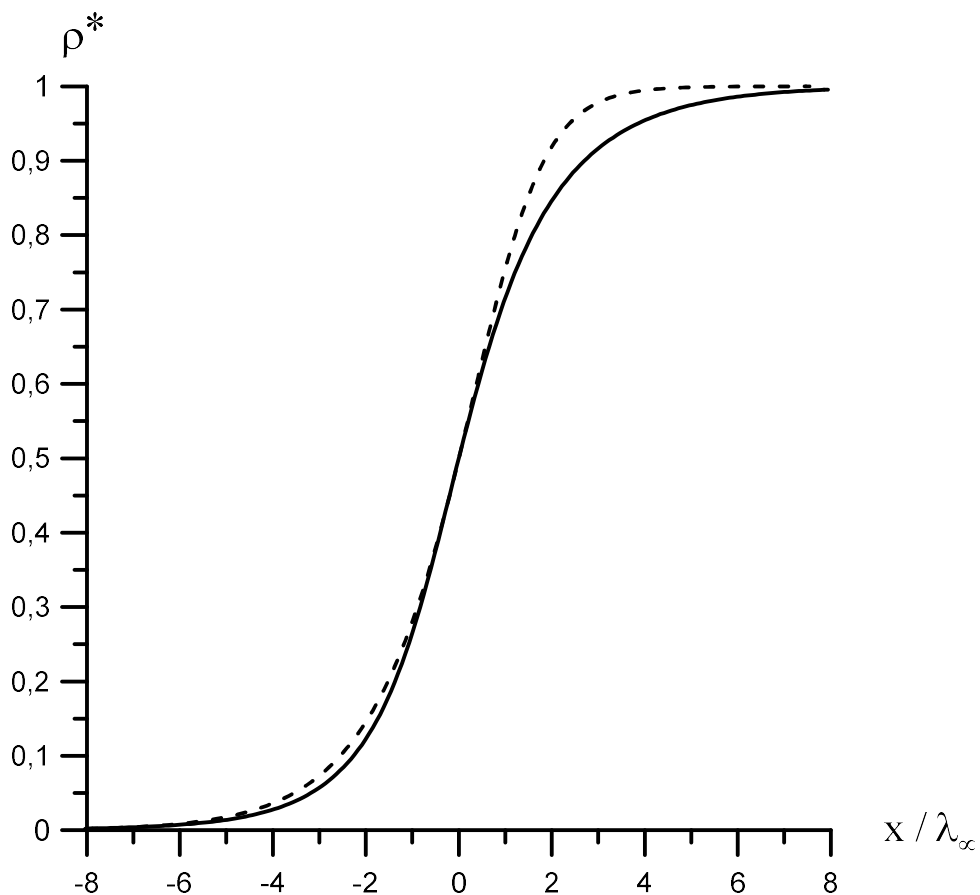


Рисунок 2.1 – Профили плотности углекислого газа в ударной волне, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения, пунктирная линия – решение системы моментных уравнений

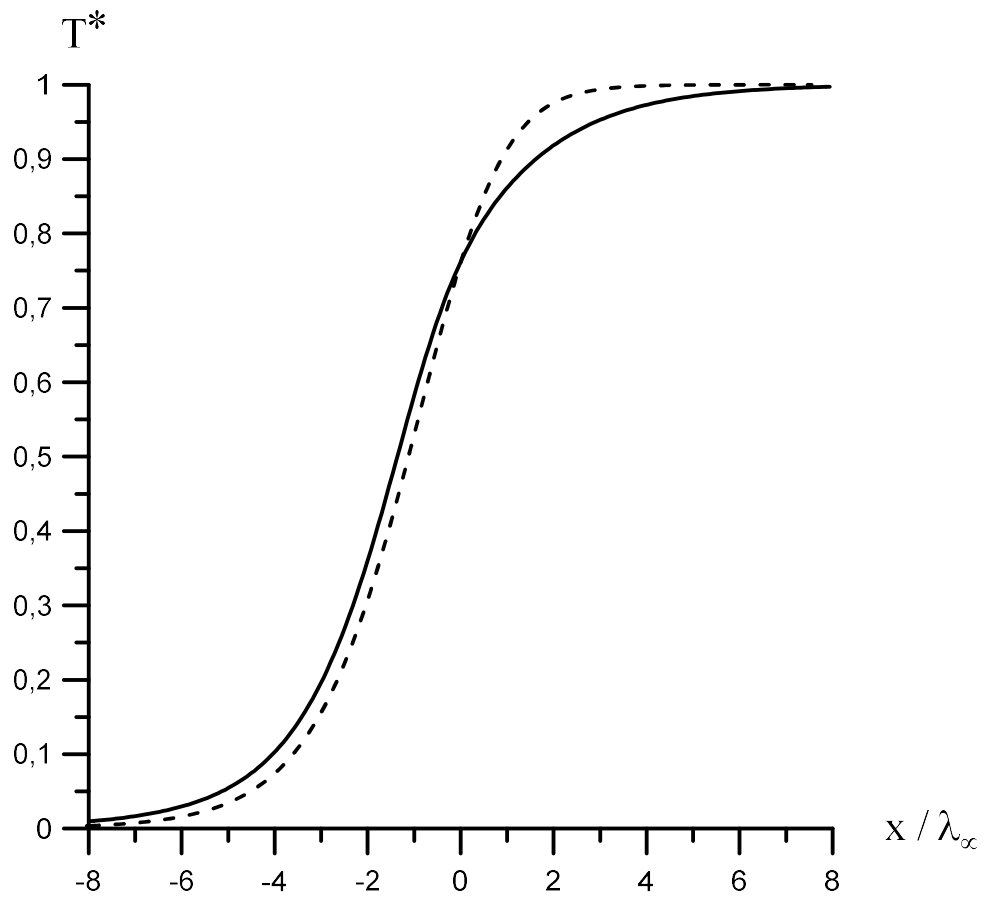


Рисунок 2.2 – Профили температуры углекислого газа в ударной волне, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения, пунктирная линия – решение системы моментных уравнений

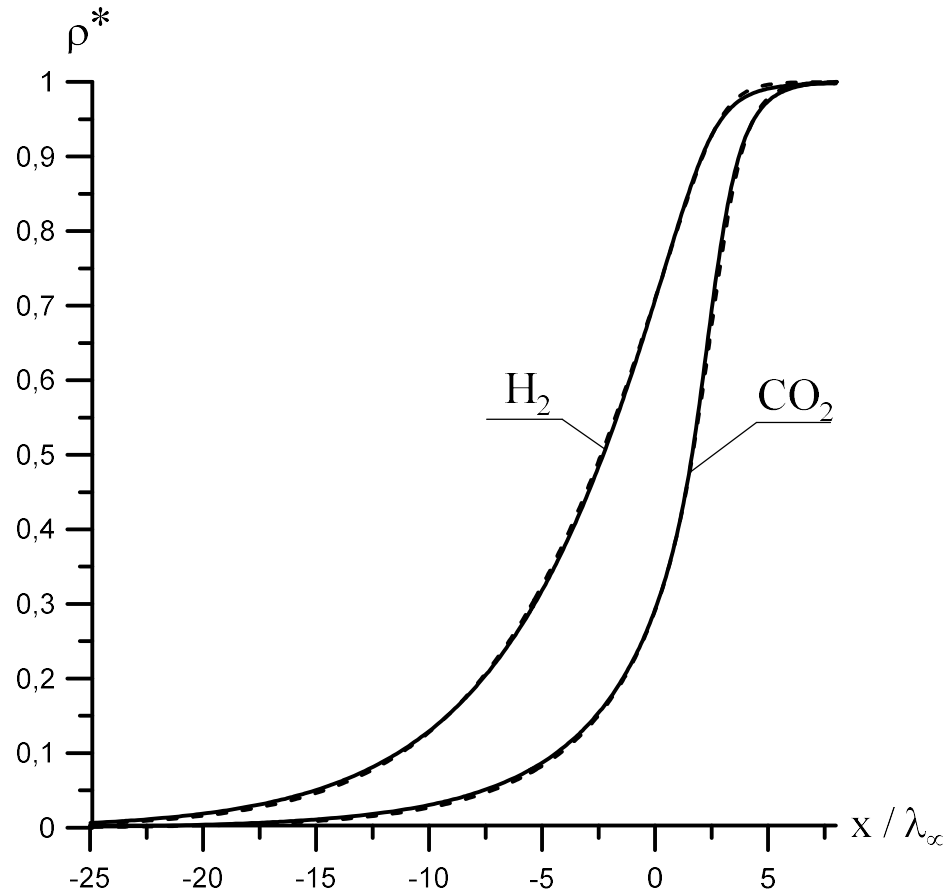


Рисунок 2.3 – Профили плотности водорода в смеси $\text{H}_2\text{-CO}_2$. Процентное содержание водорода – 50%, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения, пунктирная линия – решение системы моментных уравнений

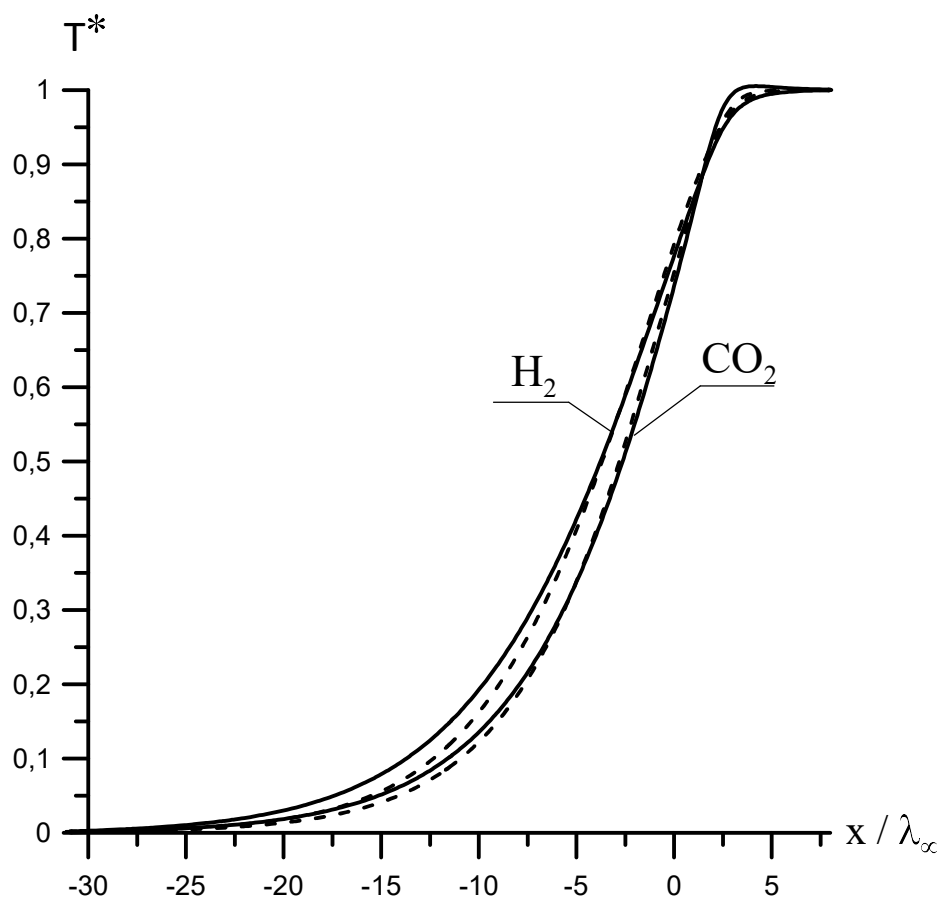


Рисунок 2.4 – Профили температуры водорода в смеси $\text{H}_2\text{-CO}_2$. Процентное содержание водорода – 50%, число Маха – 2.05: сплошная линия – решение модельного кинетического уравнения, пунктирная линия – решение системы моментных уравнений

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 расчетах смеси газов вязкие члены, разумеется также присутствуют, но оказывают меньшее влияние на решение, чем члены, описывающие межкомпонентные взаимодействия (релаксационные члены). Отметим, что релаксационные члены получены как моменты интеграла столкновений кинетического уравнения без каких-либо дополнительных допущений.

2.3 Заключение по Главе 2

В Главе 2 на основе модельного кинетического уравнения для смеси многоатомных газов получена система моментных уравнений для каждого компонента газа. Показано, что решения задачи о профиле ударной волны с использованием модельного кинетического уравнения и системы моментных уравнений дают близкие результаты.

Применение моментных уравнений существенно сокращает объем памяти и количество вычислительных операций, так как данная система не содержит пространство молекулярных скоростей.

ГЛАВА 3 ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН В ГАЗОВОЙ СМЕСИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ЕЕ КОМПОНЕНТОВ

В Главе 3 предметом изучения является течение внутри плоской ударной волны смесей двухкомпонентных газов в зависимости от их парциальных концентраций.

Расчет параметров смеси с малой концентрацией одного из компонент представляет существенный интерес и вызывает определенные трудности. Например, в работе [19] методом прямого статистического моделирования получены следующие результаты (Рисунок 3.1).

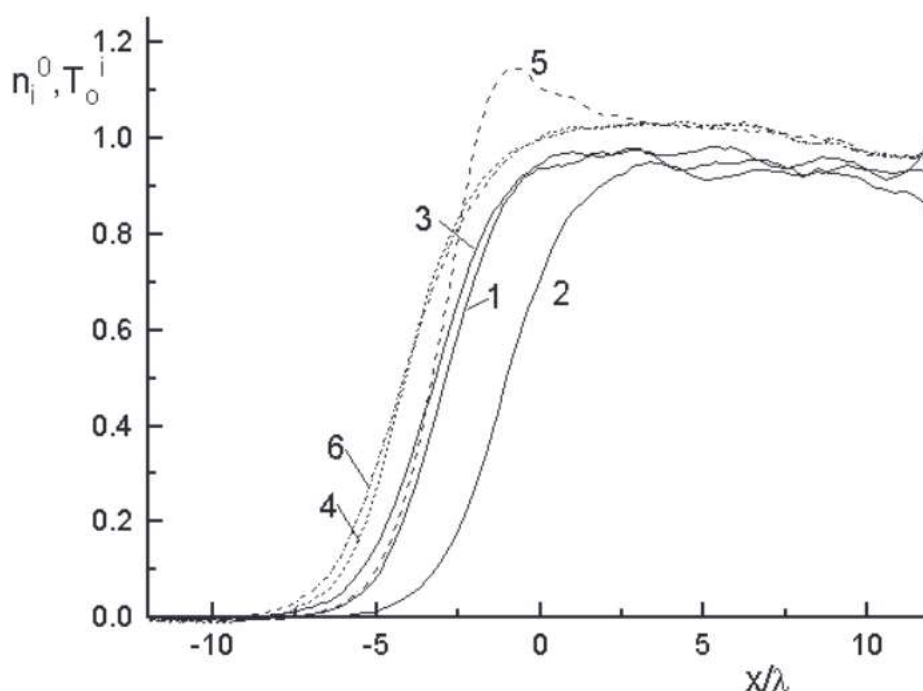


Рисунок 3.1 – Профили концентрации и температуры, полученные для смеси с использованием методов прямого статистического моделирования [19]; соотношение мольных концентраций 17:1:2; на рисунке концентрации: 1 - He; 2 - O₂; 3 - H₂; температура: 4 - He; 5 - O₂; 6 – H₂

Применение модельных кинетических и моментных уравнений, как будет показано ниже, позволяют улучшить результаты подобных расчетов.

Для определения влияния соотношения парциальных концентраций на распределение параметров газа в профиле ударной волны проведены серийные расчеты смесей водорода-углекислый газ и углекислый газ-аммиак в интервале парциальных концентраций от 0.01 до 0.99. В серийных расчетах использовалась система моментных уравнений (2.11) и модельное кинетическое уравнение (1.14). Основное внимание уделено размеру возмущенной области ("ширине" ударной волны) и профилю скорости звука.

3.1 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 2.05

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 3.2.

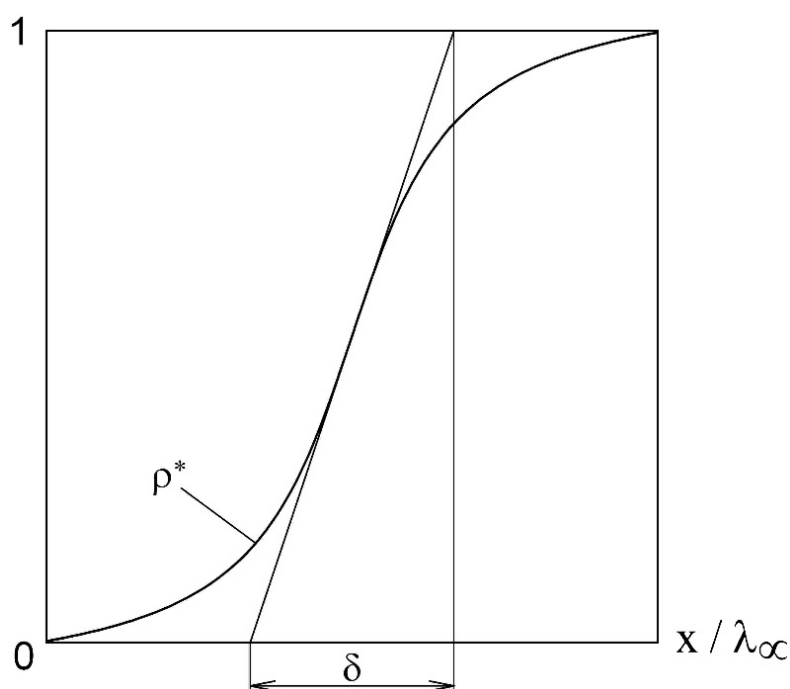


Рисунок 3.2 – Схема определения ширины профиля в ударной волне

На Рисунке 3.3. и Рисунке 3.4 показаны профили плотности в плоской ударной волне для компонент смеси водорода и углекислого газа при их различных парциальных концентрациях при $M=2.05$. Взаимное расположение профилей легкого и тяжелого компонентов было показано в главах 1 и 2.

Рассчитанные профили приведены к единичному отрезку:

$$\rho^* = \frac{\rho - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}, \text{ где индексы 1 и 2 соответствуют значению параметра перед и за}$$

ударной волной. Значение координаты $x/\lambda_\infty = 0$ соответствует середине профиля плотности для соответствующего компонента.

Полученные зависимости показывают, что при изменении концентрации компонентов смеси наблюдается значительное изменение угла наклона профиля, а следовательно, и ширины возмущенной области.

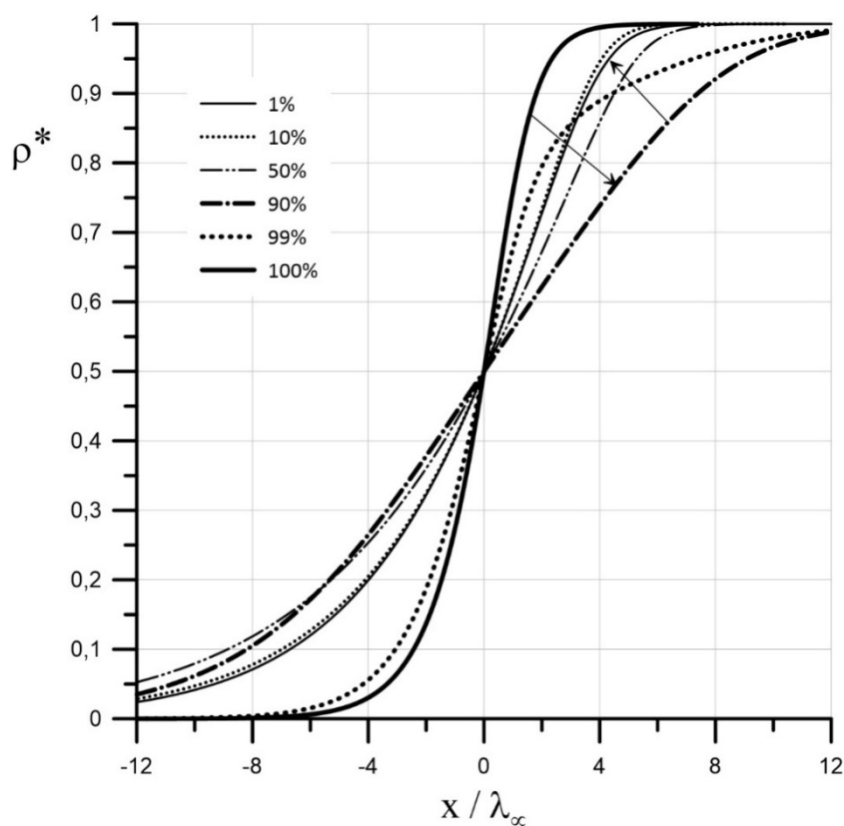


Рисунок 3.3 – Профили в плоской ударной волне для водорода в смеси с углекислым газом

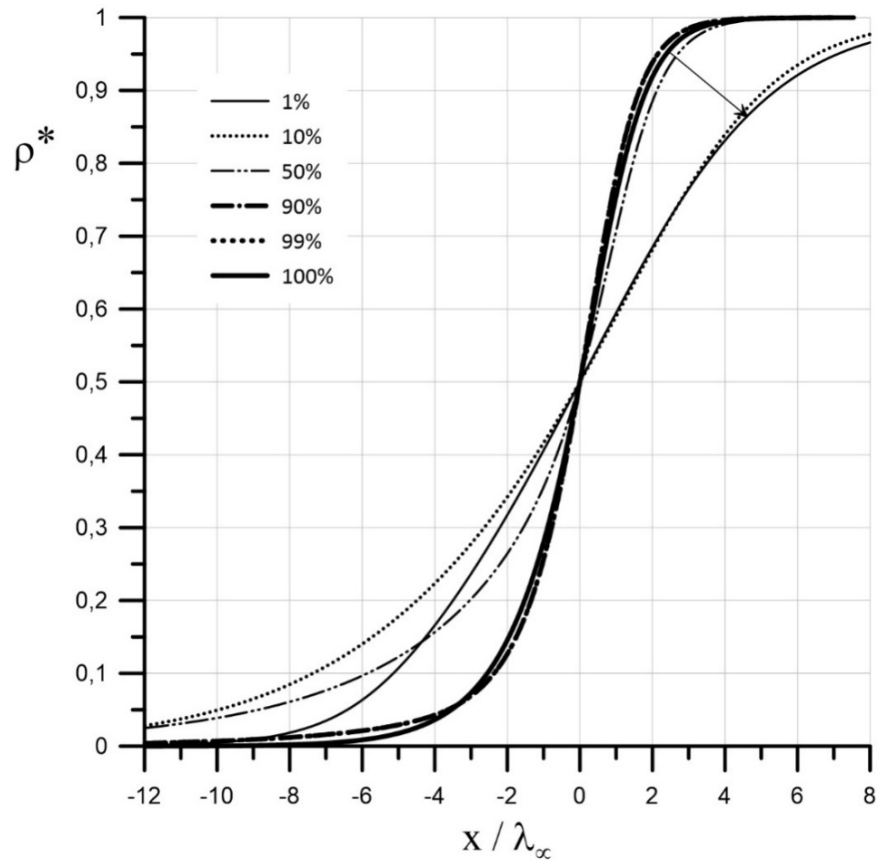


Рисунок 3.4 – Профили в плоской ударной волне для углекислого газа в смеси с водородом

Изменение ширины профилей ударной волны отдельных компонентов смеси в зависимости от их парциальных концентрации n_{part} приведены на Рисунке 3.5 и Рисунке 3.6. Видно, что даже небольшое количество примеси в смеси приводит к значительному изменению ширины профиля.

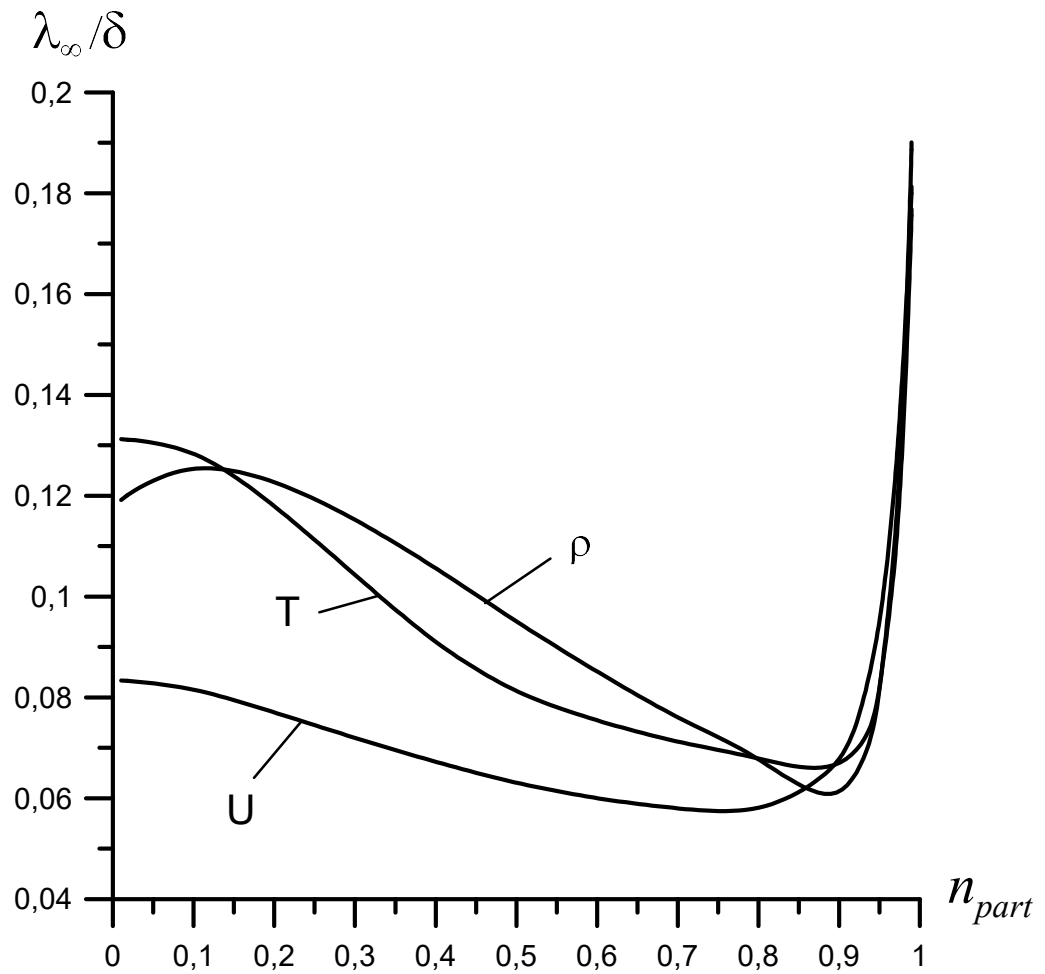


Рисунок 3.5 – Ширина профилей скорости, плотности и температуры в ударной волне для водорода в зависимости от его парциальной концентрации в смеси с углекислым газом

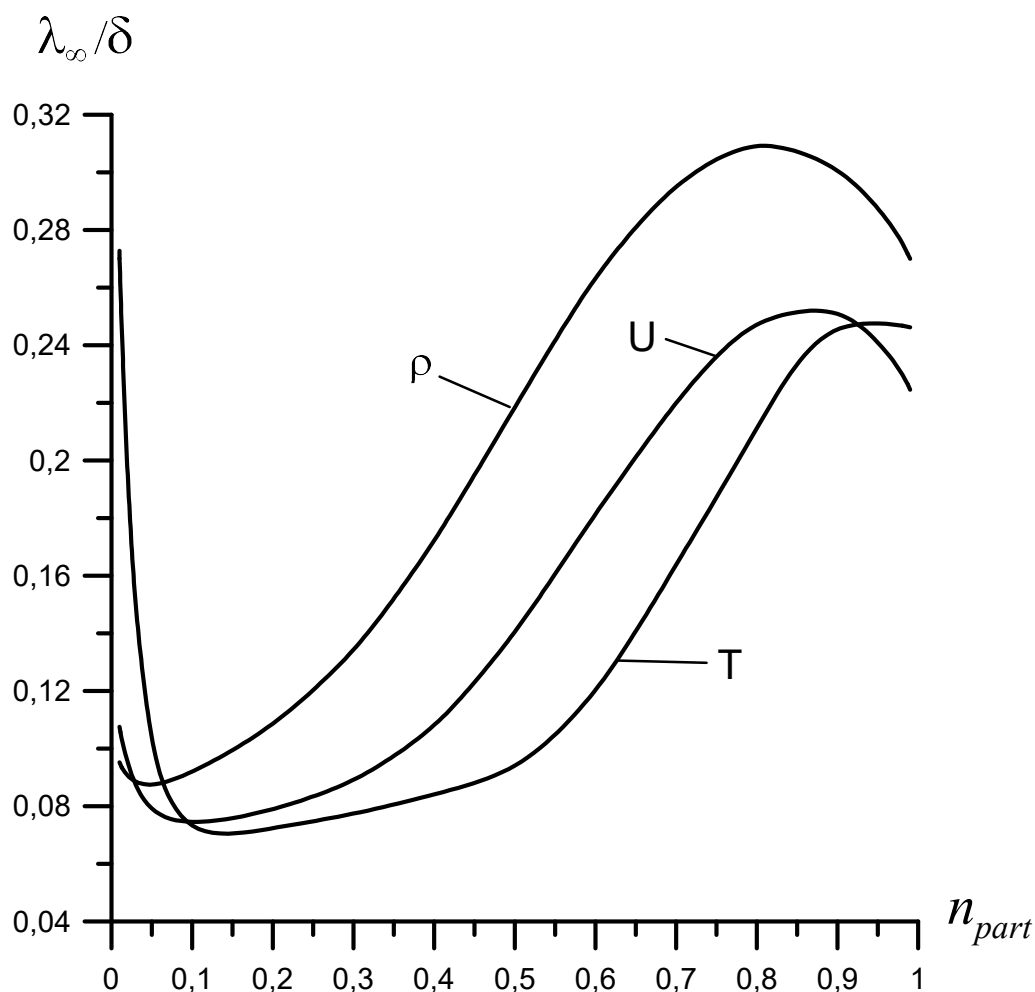


Рисунок 3.6 – Ширина профилей скорости, плотности и температуры в ударной волне для углекислого газа в зависимости от его парциальной концентрации в смеси с водородом

На Рисунке 3.7 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:

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

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

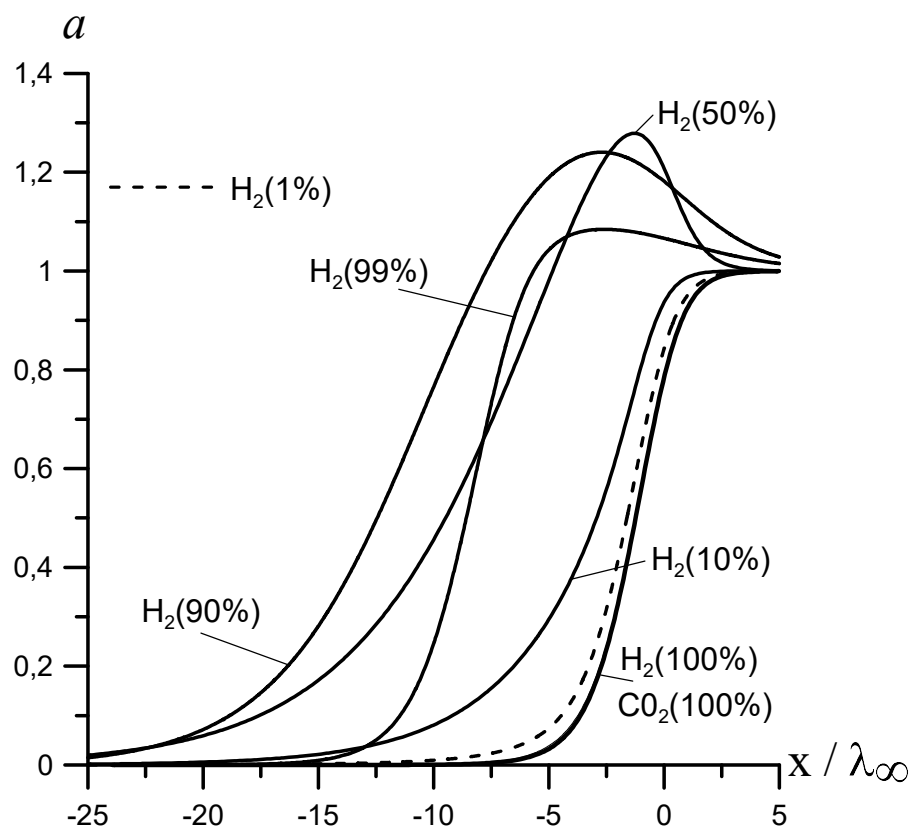


Рисунок 3.7 – Профили скорости звука в смеси H_2 - CO_2 и в «чистых» газах

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 3.8).

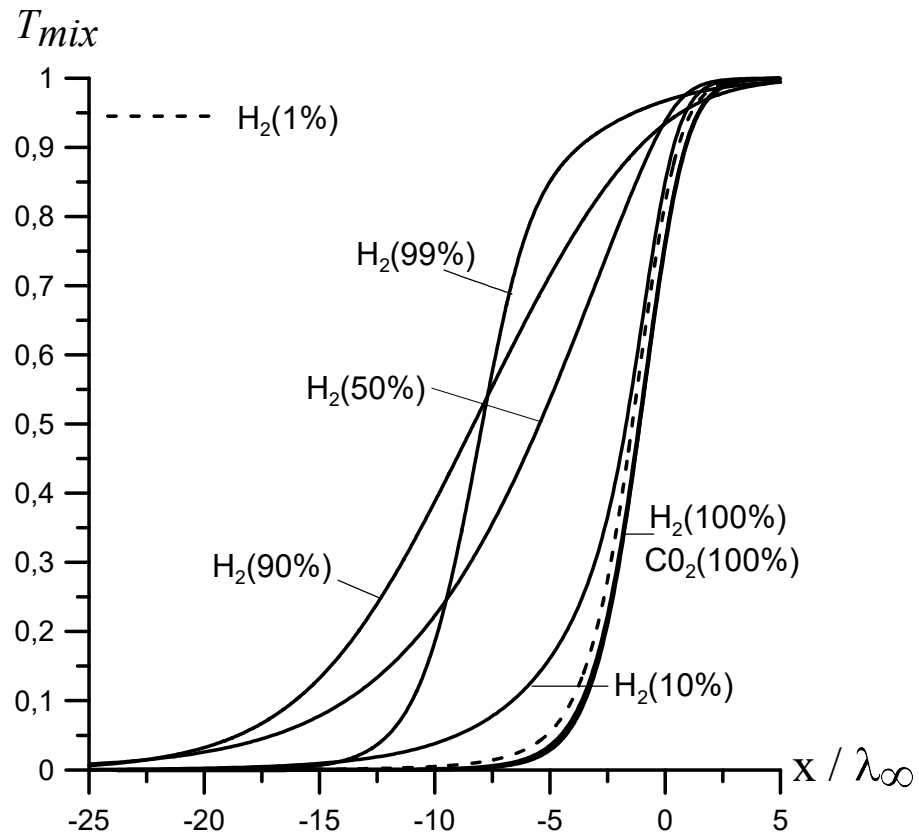


Рисунок 3.8 – Профили температуры «чистого» водорода и его смесей с углекислым газом

Немонотонные участки на профилях скорости звука объясняются немонотонным распределением кажущейся массы молекул $\tilde{m}$ в профиле ударной волны. На Рисунке 3.9 показаны зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа.

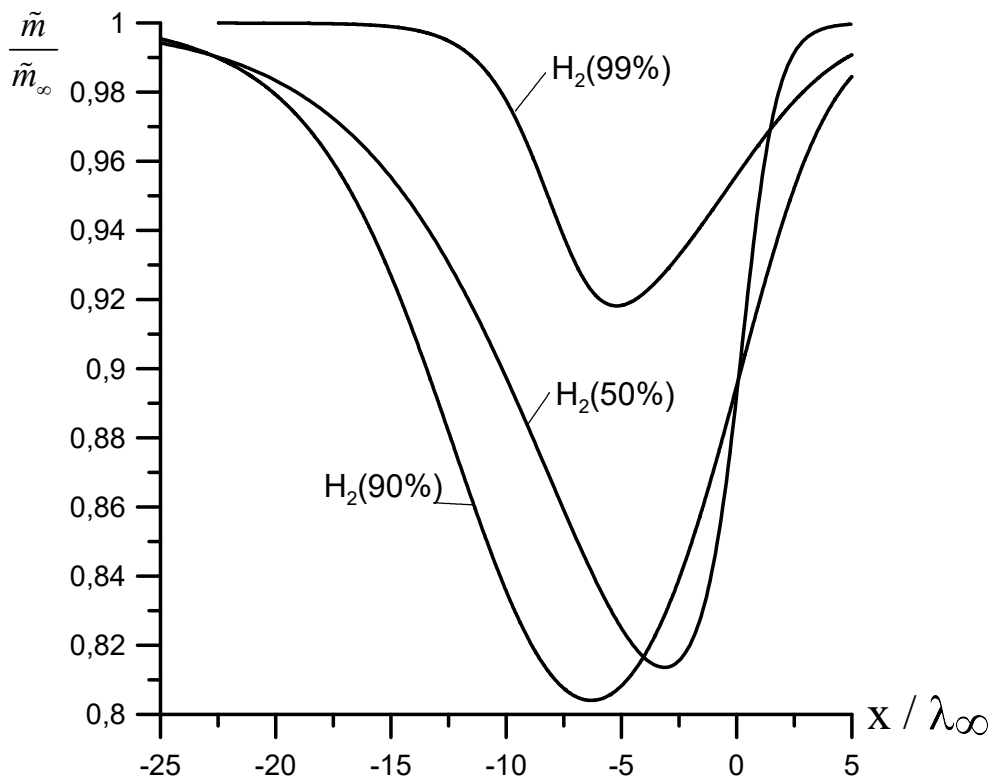


Рисунок 3.9 – Зависимости относительной кажущейся массы молекул в смесях водорода и углекислого газа

Обращает на себя внимание сильное влияние малой примеси тяжелого компонента на профили скорости звука рис. 3.7 и температуры рис. 3.8. 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.

3.2 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 3.0

На Рисунке 3.10. и Рисунке 3.11 показаны профили плотности в плоской ударной волне для компонент смеси водорода и углекислого газа при их различных парциальных концентрациях при $M = 3$. В расчетах использовалась система моментных уравнений (2.11). Данные зависимости показывают сильное влияние соотношения компонент в примеси, как и при $M = 2.05$. Однако, наличие малого количества тяжелой примеси в смеси при данном числе Маха приводит к

сильным «деформациям» профилей. Эти искажения проявляются за счет того, что поступательные и вращательные температуры газа, а также неравновесные напряжения и тепловые потоки в данной модели представлены в гидродинамическом приближении.

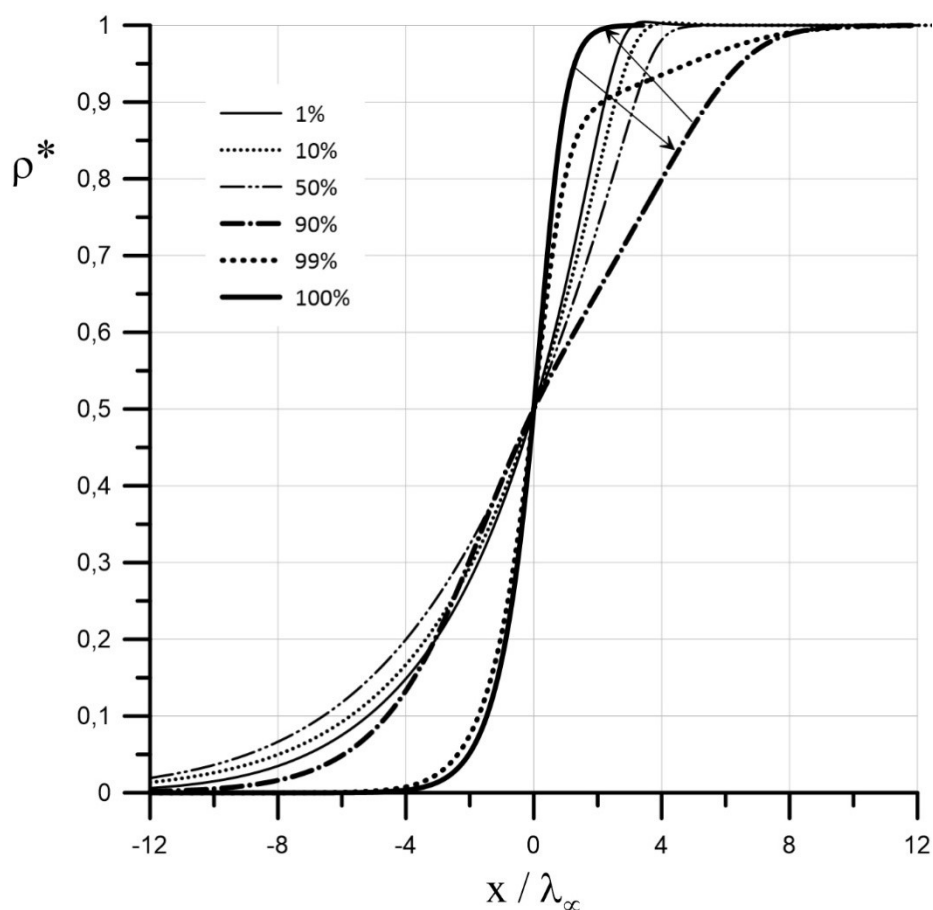


Рисунок 3.10 – Профили в плоской ударной волне для водорода в смеси с углекислым газом

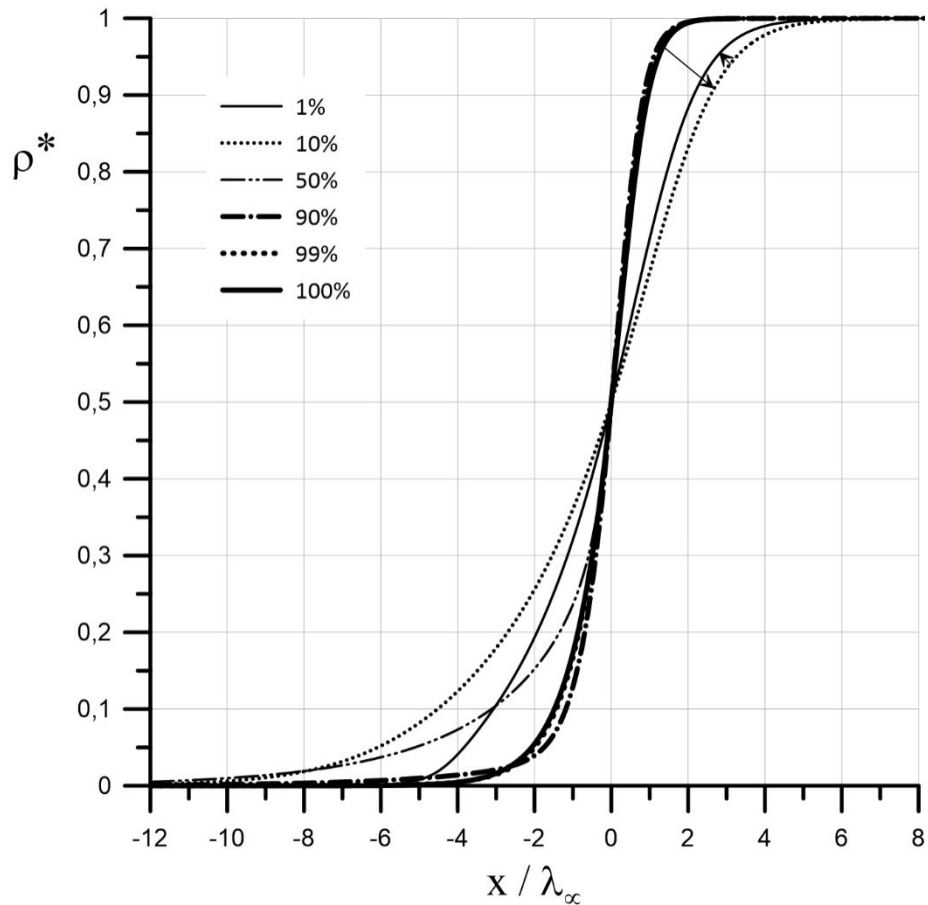


Рисунок 3.11 – Профили в плоской ударной волне для углекислого газа в смеси с водородом

3.3 Профили ударной волны в смесях водорода и углекислого газа при числе Маха = 4.0

На Рисунке 3.12. и Рисунке 3.13 показаны профили плотности в плоской ударной волне для компонент смеси водорода и углекислого газа при их различных парциальных концентрациях $M = 4$. На данных графиках также видны сильные искажения профилей плотности легкого компонента при малых относительных концентрация тяжелой примеси в смеси.

Следовательно, с ростом числа Маха (и с ростом степени неравновесности в ударной волне) несоответствие поступательной и вращательной температур сильнее сказывается на результатах расчетов.

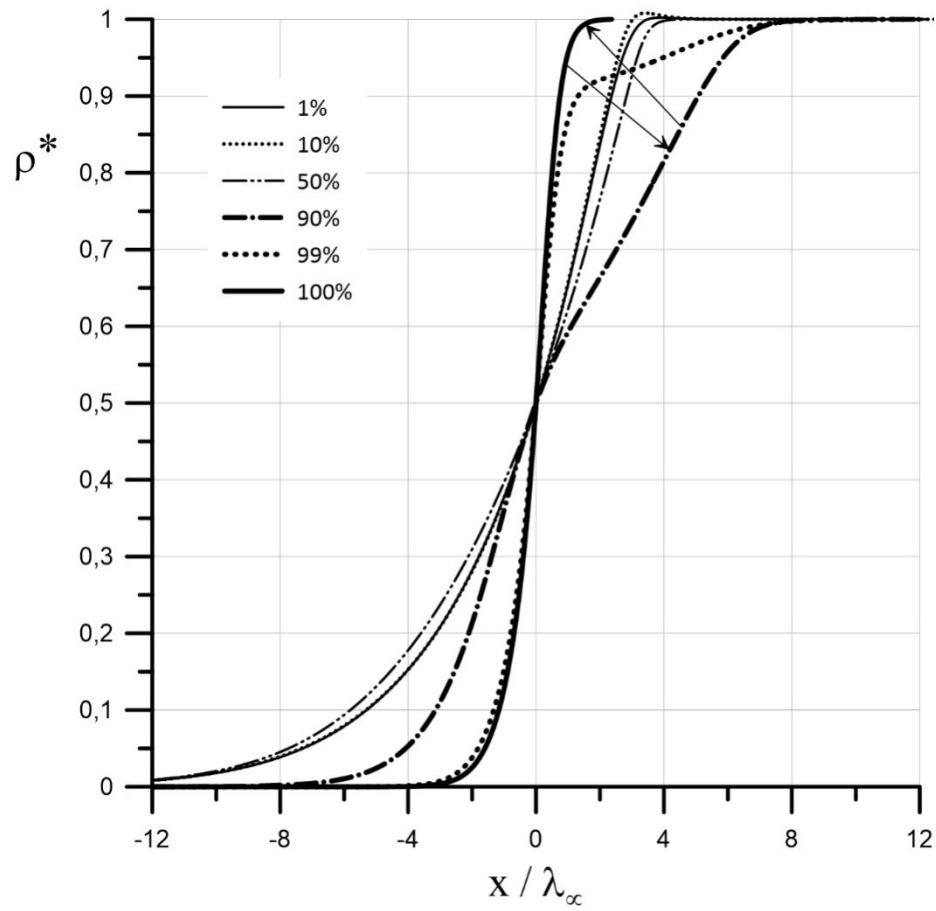


Рисунок 3.12 – Профили в плоской ударной волне для водорода в смеси с углекислым газом

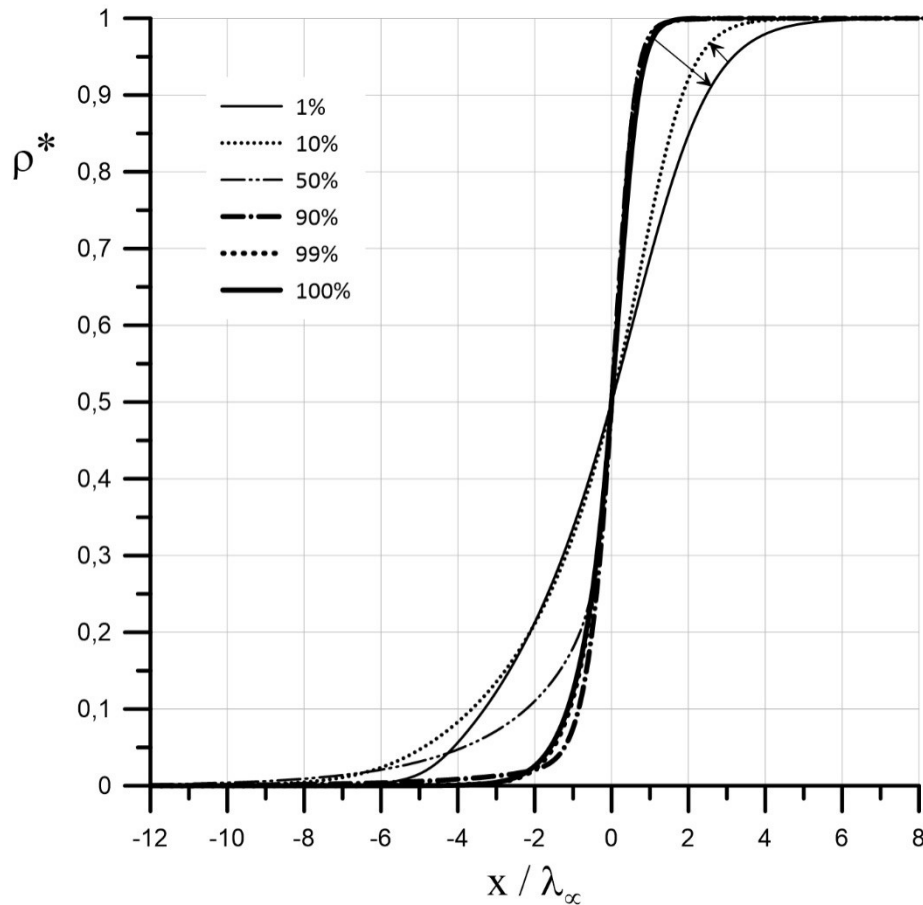


Рисунок 3.13 – Профили в плоской ударной волне для углекислого газа в смеси с водородом

3.4 Профили ударной волны в смесях гелия и аргона при числе Маха = 5

На Рисунке 3.14 и Рисунке 3.15 показаны профили плотности в плоской ударной волне для компонент смеси гелия и аргона при их различных парциальных концентрациях для $M = 5$. Массы молекул гелия и водорода отличаются в 10 раз. На данных рисунках приведены результаты расчета на основе решения системы моментных уравнений (2.11).

Приведенные зависимости показывают, что при малых концентрациях легкого компонента в смеси наблюдается «овершот» в профиле плотности для легкого компонента. Видимо, это явление является следствием метода решения. Как указывалось выше, для решения системы моментных уравнений используется

метод прогонки с нестационарным членом. Хорошая обусловленность матрицы в этом методе достигается за счет вязкого члена. Как указано выше, эффективный коэффициент вязкости μ_{eff}^K при малых концентрациях компонента уменьшается, что негативно сказывается на обусловленности матрицы.

Также при малом содержании тяжелого компонента в смеси наблюдается искривление профилей плотности, как и для смесей многоатомных компонентов на Рисунках 3.12 и 3.13.

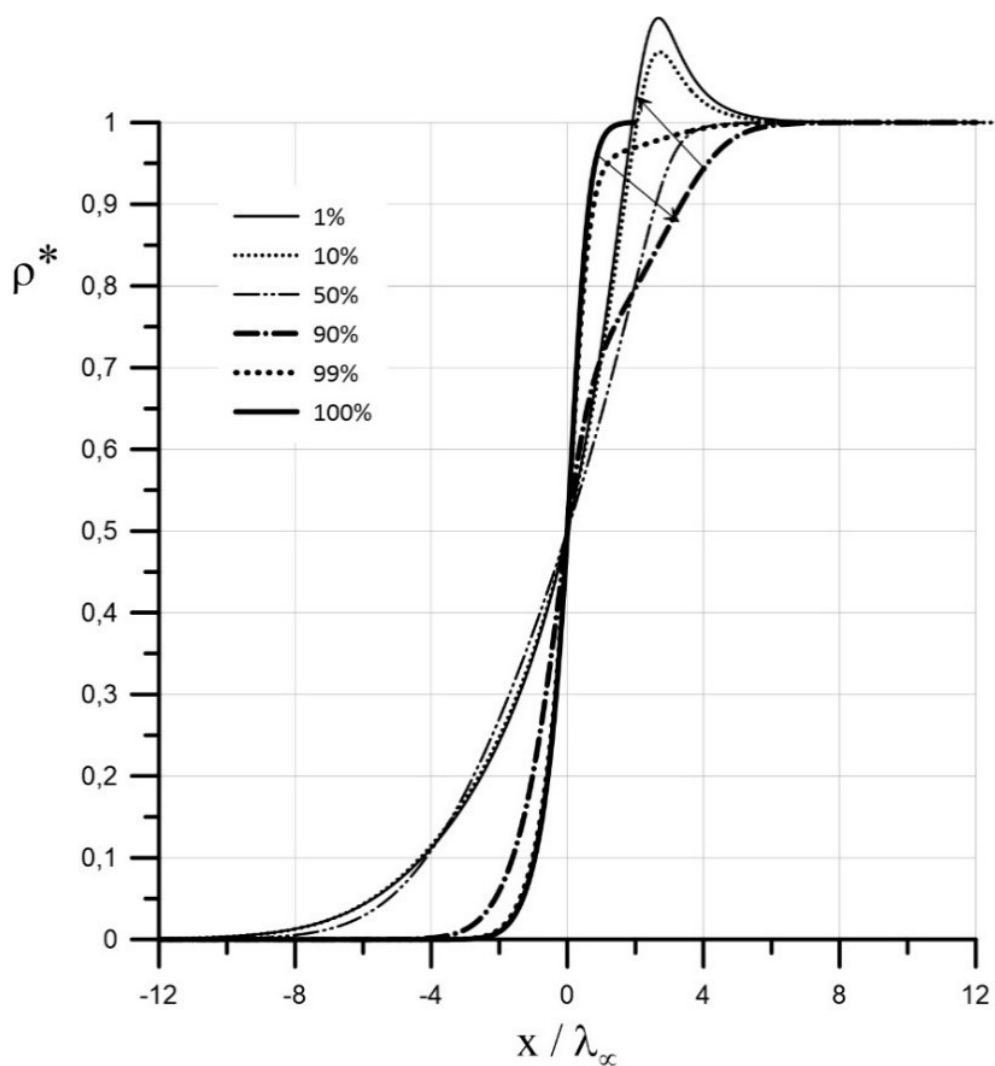


Рисунок 3.14 – Профили в плоской ударной волне для гелия в смеси с аргоном

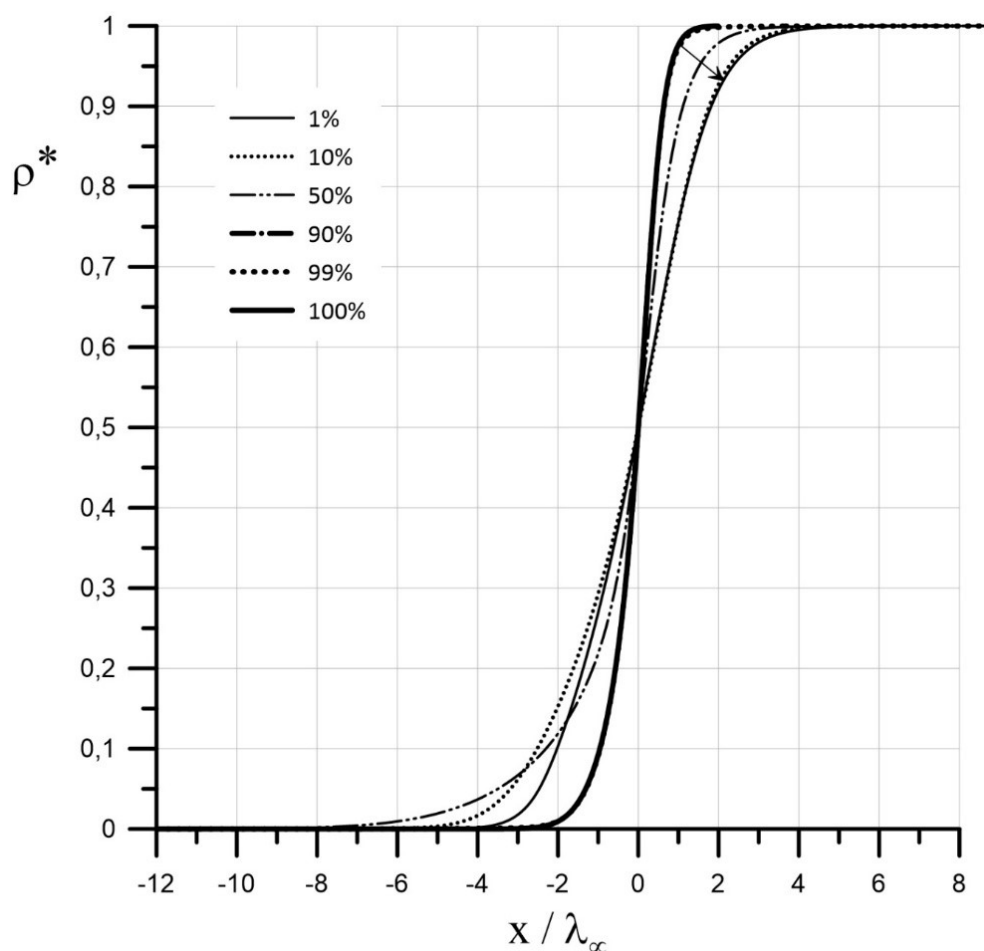


Рисунок 3.15 – Профили в плоской ударной волне для аргона в смеси с гелием

На Рисунках 3.16 и 3.17 приведены результаты расчета для смеси гелия и аргона с использованием кинетической модели. Данные зависимости также показывают наличие «овершота» в профиле плотности для легкого компонента при малом содержании тяжелого компонента и искривление профилей плотности при малом содержании легкого компонента. Однако, на профилях, полученных с помощью кинетической модели, указанные эффекты выражены в меньшей степени.

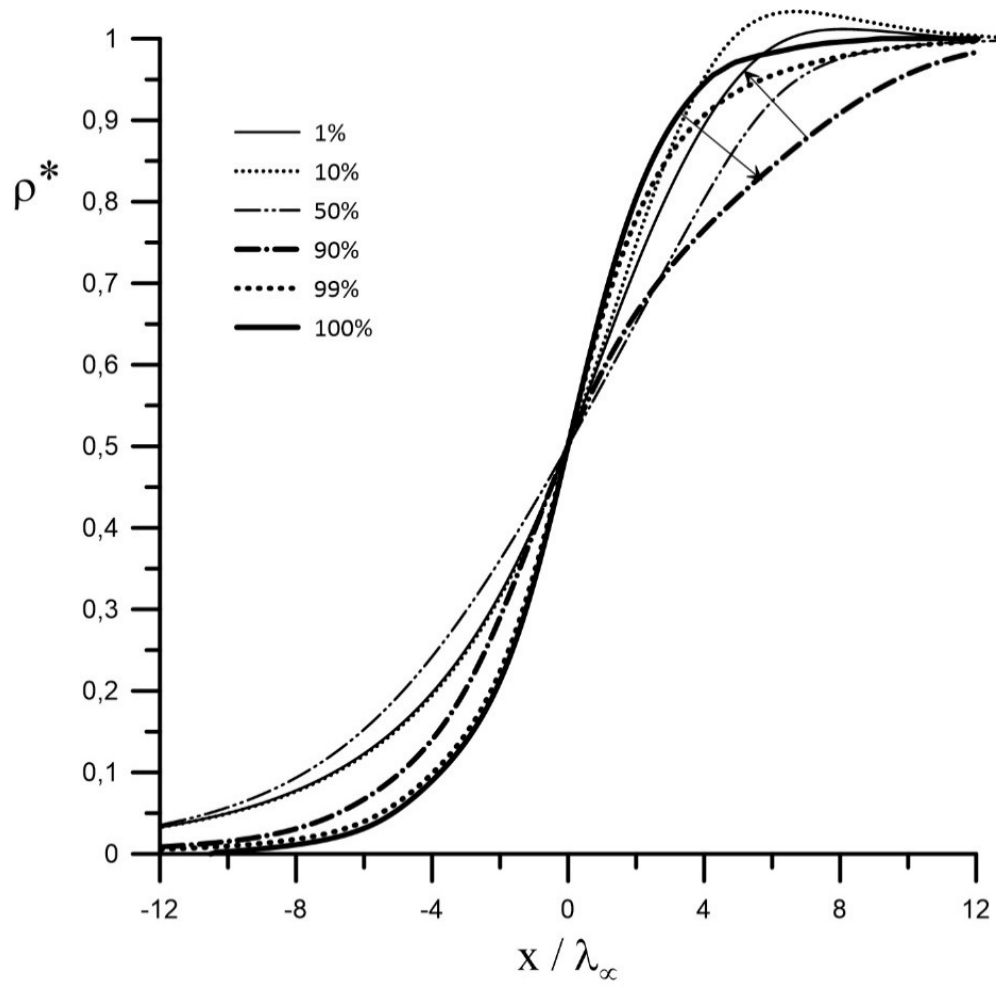


Рисунок 3.16 – Профили в плоской ударной волне для гелия в смеси с аргоном

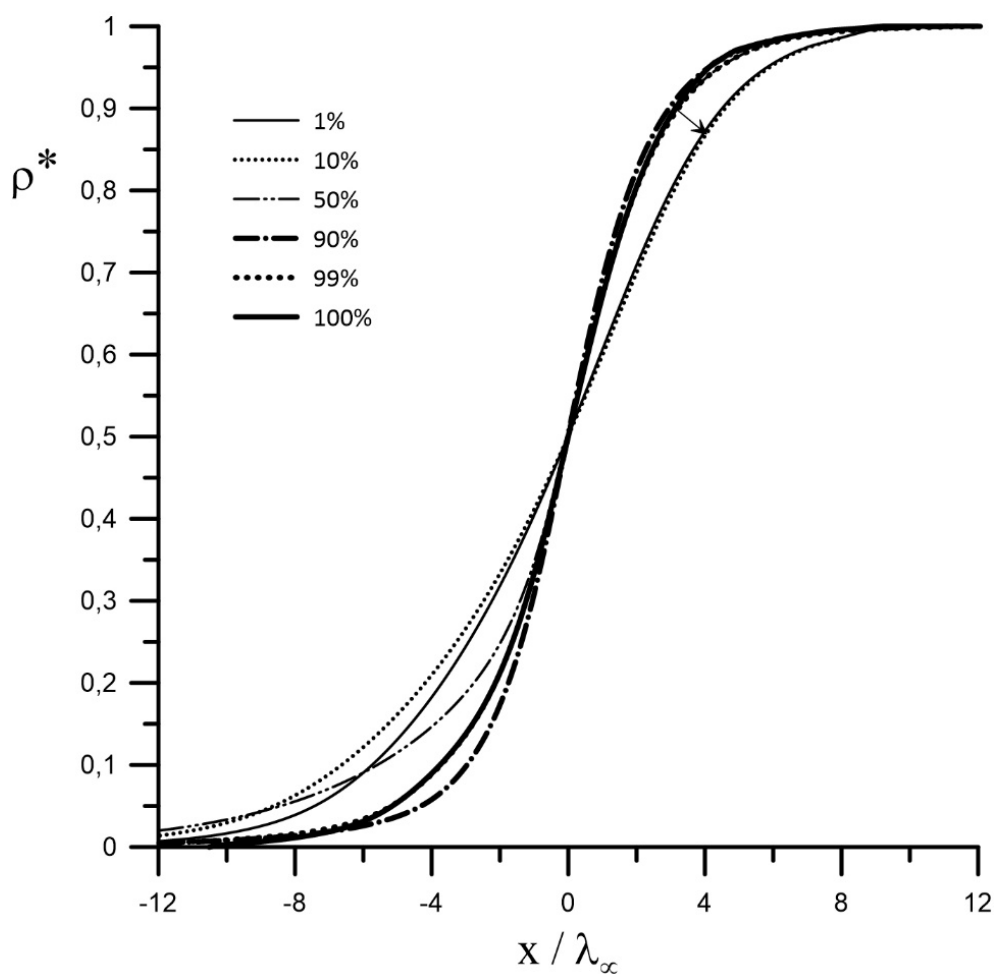


Рисунок 3.17 – Профили в плоской ударной волне для аргона в смеси с гелием

3.5 Профили ударной волны в смесях аммиака и углекислого газа при числе Маха =2.05

На Рисунке 3.18. и Рисунке 3.19 показаны профили плотности в плоской ударной волне для компонент смеси аммиака и углекислого газа при их различных парциальных концентрациях. Соотношение молекулярных масс компонент составляет ≈ 2.6 . Данные зависимости показывают, что при небольшом соотношении относительных масс молекул смеси, соотношение парциальных концентраций компонент смеси слабо влияет на ширину ударной волны.

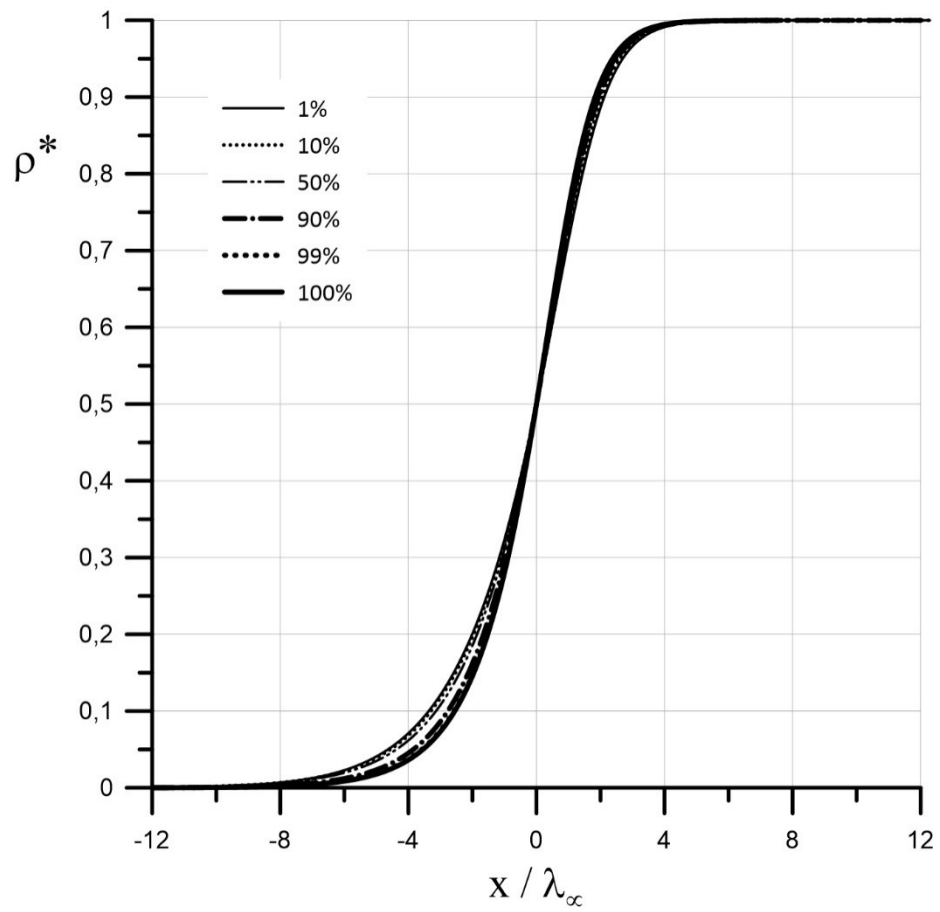


Рисунок 3.18 – Профили в плоской ударной волне для аммиака в смеси с углекислым газом

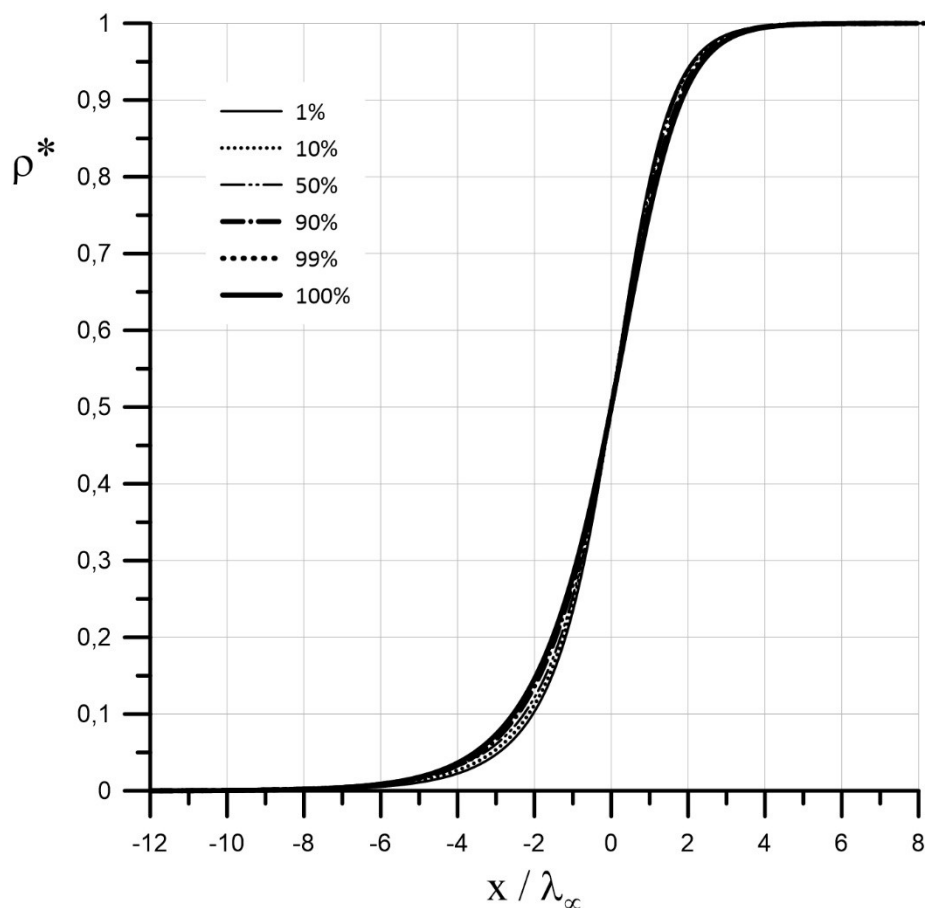


Рисунок 3.19 – Профили в плоской ударной волне для углекислого газа в смеси с аммиаком

3.6 Заключение по Главе 3

Результаты расчетов показали значительное влияние соотношения парциальных концентраций компонентов на размер возмущенной области. Были выявлены немонотонные участки на профилях скорости звука. Установлена причина возникновения немонотонности.

В результате серии численных тестов установлены следующие закономерности:

- парциальный состав газовой смеси существенно влияет на размер и форму профилей плотности, скорости, температуры и скорости звука;
- малая примесь тяжелого компонента значительно изменяет размер и форму профилей легкого компонента;

- профили скорости звука содержат немонотонные участки, возникновение которых связано с существенно немонотонным изменением кажущейся массы молекул;

- при формировании профиля компонента с малой парциальной концентрацией влияние вязких членов (девиатора напряжений и теплового потока) этого компонента мало;

- указанные выше эффекты существенно зависят от соотношения молекулярных масс.

ГЛАВА 4 ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ТЕЧЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА В КАНАЛЕ С ПОГЛОЩАЮЩИМИ СТЕНКАМИ

4.1 Постановка задачи

В некоторых работах, упомянутых во введении, движение газов в канале описывалось с помощью методов механики сплошной среды, что справедливо для малых чисел Кнудсена. Однако, в сильнонеравновесных областях при числах Кнудсена $Kn \approx 10^{-2}$ модели сплошной среды выдают значительные ошибки. Более того, модель сплошной среды не описывает взаимодействие с поглощающей поверхностью физически корректно. Вместе с тем, методы молекулярно-кинетической теории достаточно корректно описывают взаимодействия газа с активными поверхностями, как выделяющими, так и поглощающими газ [52]. В МКТ молекулярные потоки, падающие на поверхность и отраженные от нее, рассматриваются отдельно. При этом характеристики молекулярных потоков, отраженных от поверхности, определяются с учетом свойств поверхности.

Весьма перспективными являются комбинированные методы, описывающие течения газов методами сплошной среды в областях с малыми числами Кнудсена. В пристеночных областях на расстоянии несколько длин свободного пробега молекулы от поверхности записывается какая-либо из моделей молекулярно-кинетической теории [53, 54]. Такие модели позволяют даже в плотных средах описывать взаимодействие газа с поверхностью на молекулярно-кинетическом уровне.

В данной главе рассмотрено течение в плоском канале шириной h . Рассчитывается течение двухкомпонентной смеси газа, один из компонентов которой конденсируется поверхностями стенок. Температура стенок канала меньше, чем температура на входе в канал. Расчетная область канала построена следующим образом. Имеется пристеночная область, где решается модельное кинетическое уравнение для смеси газов, полученное в Главе 1. Также имеется

область, где решаются уравнения двухтемпературной модели [92]. На границе между областями находится область сшивания кинетической и гидродинамической моделей.

Схема задачи показана на Рисунке 4.1. В силу симметрии канала рассматривается нижняя его половина. Поток движется слева направо.

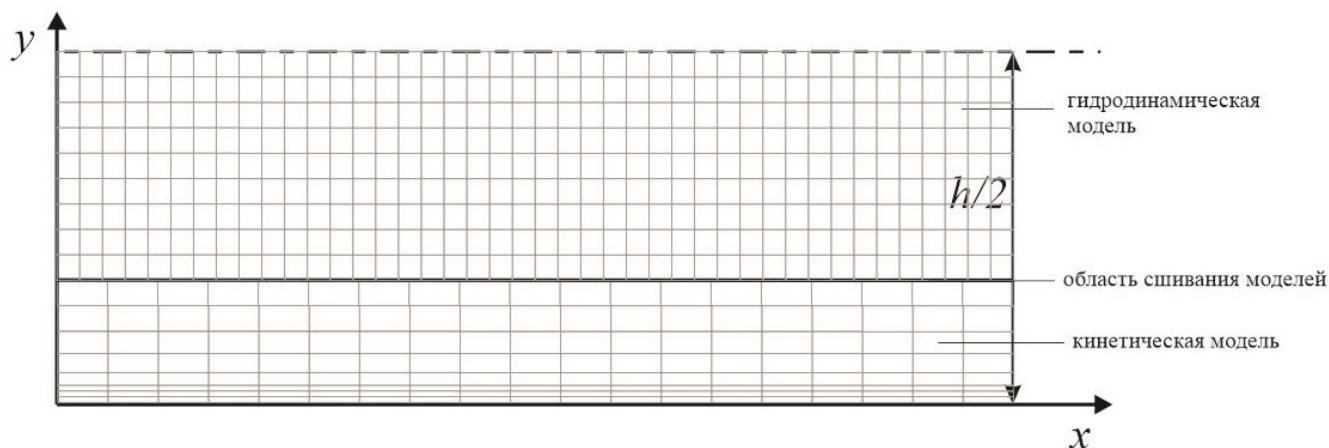


Рисунок 4.1 – Схема расчетной области

Граничные условия на входе и выходе из канала были поставлены следующим образом: на левой границе заданы плотность газа и постоянное по сечению давление, на правой границе задано распределение скорости неконденсируемого компонента смеси. Распределение скорости конденсируемого компонента задается на левой границе и принимается равным распределению неконденсируемого компонента, полученного после очередного шага по времени в процессе численного решения.

Граничные условия на поверхности канала выставлялись следующим образом: - для неконденсируемого компонента принимался диффузный закон отражения молекул;

- для конденсируемого компонента, в случае его конденсации, плотность и давление принимались равными давлению насыщенного пара этого компонента; если плотность молекулярного потока, падающего на поверхность становилась меньше плотности молекулярного потока, создаваемого жидкой фазой, то принимался диффузный закон отражения молекул от поверхности.

В качестве единиц измерения физических величин, входящих в систему уравнений, приняты:

скорость – $\sqrt{RT_A}$,

время – $h/\sqrt{RT_A}$,

геометрический размер – h ,

длина свободного пробега – $\frac{\mu_A}{p_A}\sqrt{RT_A}$,

число Кнудсена – $\frac{\mu_A}{p_A\sqrt{RT_A}h}$,

вязкость – μ_A ,

концентрация – n_A ,

плотность – ρ_A ,

температура – T_A ,

напряжение – $\rho_A RT_A$, где индекс «А» означает параметры атмосферы.

Давление на входе в канал составляло 1.2, число Кнудсена 10^{-2} , что соответствует каналу с поперечным сечением примерно 1 мм. Удлинение канала принято равным 15.

4.2 Физико-математическая модель

В качестве кинетической модели в пристеночном слое было использовано модельное кинетическое уравнение для смеси газов, ранее полученное в Главе 1 (1.14). Модельное кинетическое уравнение K -компонента смеси двух многоатомных газов в случае плоского течения в канале имеет вид:

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

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, рассматривается стационарное течение.

В этом случае модельное кинетическое уравнение может быть 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 сетка с увеличенным (по сравнению с гидродинамической сеткой) по оси OX шагом и составляла 5λ (Рисунок 4.1). По оси OY применялась сетка с переменным шагом, которая составляла λ 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. Подробное описание модели приведено в работе [92]. Выражения для поступательной и вращательной температур были получены в Главе 2 (2.8) и (2.9)).

Полная система уравнений в безразмерном виде для плоского канала и двухкомпонентного газа имеет следующий вид:

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

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

$$p_{xx}^K = -\frac{4}{3} \mu_{eff}^K \frac{\partial U_x^K}{\partial x} + \frac{2}{3} \mu_{eff}^K \frac{\partial U_y^K}{\partial y}, \quad p_{yy}^K = -\frac{4}{3} \mu_{eff}^K \frac{\partial U_y^K}{\partial y} + \frac{2}{3} \mu_{eff}^K \frac{\partial U_x^K}{\partial x},$$

$$p_{xy}^K = -\mu_{eff}^K \left(\frac{\partial U_x^K}{\partial y} + \frac{\partial U_y^K}{\partial x} \right),$$

$$\varphi_x^K = -\frac{15}{4} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_t^K}{\partial x}, \quad \varphi_y^K = -\frac{15}{4} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_t^K}{\partial y},$$

$$\omega_x^K = -\frac{5 - 3\gamma^K}{2(\gamma^K - 1)} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_r^K}{\partial x}, \quad \omega_y^K = -\frac{5 - 3\gamma^K}{2(\gamma^K - 1)} \frac{\mu_{eff}^K}{m^K} \frac{\partial T_r^K}{\partial y}.$$

Вязкость компонента определяется в Главе 2 и имеет следующий вид (см. (2.15)):

$$\mu_{eff}^K = \frac{n^K T_t^K}{v^{KK} + v_N^K}.$$

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

4.3 Анализ полученных результатов

При проведении расчетов температура поверхности принималась 274 К, а давление насыщенного пара конденсируемого компонента 0.01 кПа.

На Рисунке 4.2 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.

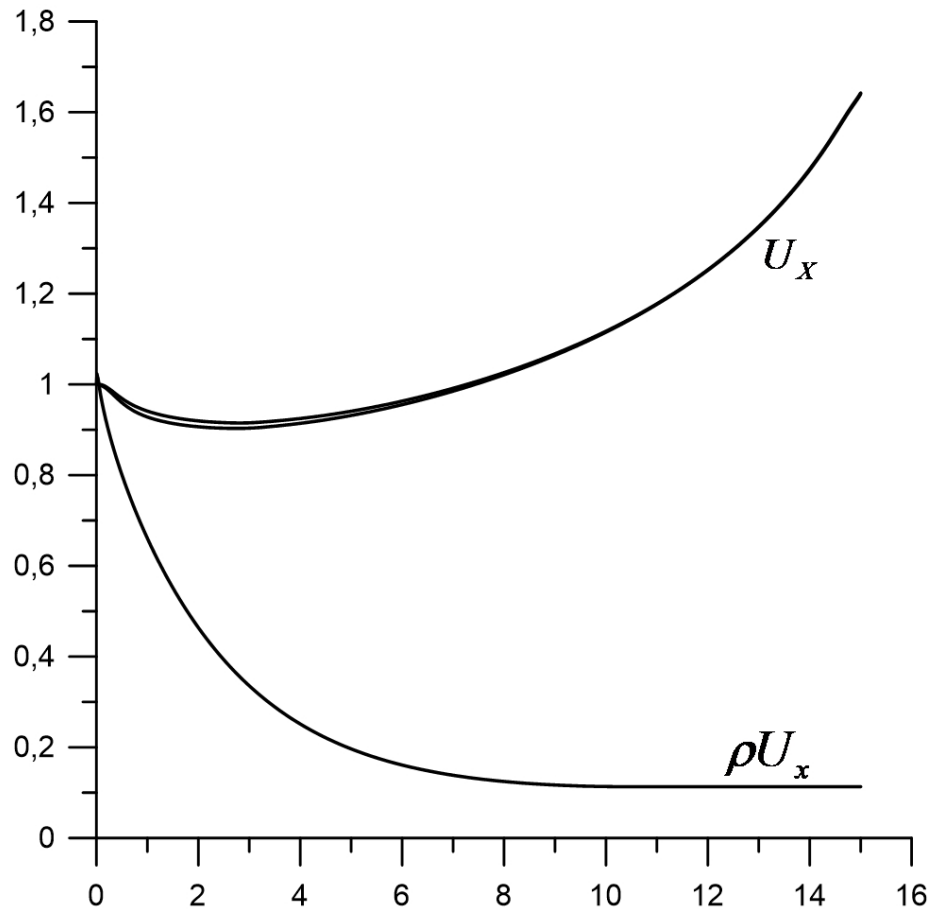


Рисунок 4.2 – Распределение скоростей обоих компонент и массового расхода конденсируемого компонента по длине канала

На Рисунке 4.3. 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.

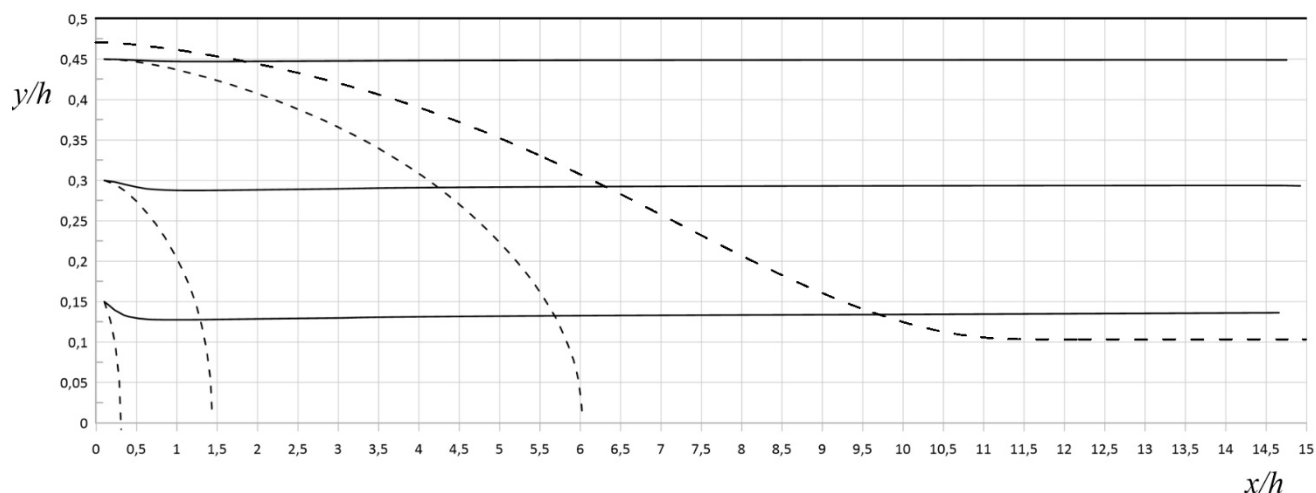


Рисунок 4.3. – Линии тока в канале: сплошные линии – неконденсируемый компонент, пунктир – конденсируемый компонент; масштаб по оси y увеличен в 10 раз; линии сетки не соответствуют Рисунку 4.1; на оси канала ($y = 0.5$) линии тока обоих компонентов, очевидно, совпадают

Обращает на себя внимание линия тока конденсируемого компонента при $y=0.47$. При $x=10.65$ процесс конденсации прекращается, так как плотность молекулярного потока, падающего на поверхность становится меньше плотности потока, создаваемого потенциально возможной жидкой фазой. В этом случае для конденсируемого компонента, также как и для неконденсируемого, на поверхности канала реализуются условия непротекания.

4.4 Заключение по Главе 4

Разработана физико-математическая модель сильнонеравновесного течения в канале с поглощающими стенками. Разработанная модель позволяет физически адекватно выставлять граничные условия на конденсирующей поверхности (поглощающей поверхности), не требуя больших объемов памяти и количества вычислительных операций.

Показано, что за счет конденсации одного из компонентов, а также за счет межкомпонентного взаимодействия скорость второго компонента замедляется даже при наличии отрицательного градиента давления вдоль канала.

Ввиду отсутствия литературных источников, в которых рассматривается такой тип течения в данной постановке, результаты проведенных расчетов следует рассматривать как качественную оценку процессов, протекающих в канале с конденсирующими стенками. Количественные соотношения параметров в значительной степени зависят от выбора свободных параметров модели, в частности от значений s и Z . В данной работе значения этих параметров выбраны по аналогии с течениями в ударных волнах, то есть в течениях другого типа.

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 МКУ получена система моментных уравнений.
3. Полученные физико-математические модели протестированы на примере задачи об ударной волне.
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.
6. Выявлены особенности течений смесей газов в каналах с поглощающими стенками.

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

Основные отличия разработанной модели от известных МКУ для смеси газов заключаются в следующем:

- Относительная скорость движения молекул разных компонентов выражена через осредненные величины тепловых и групповых скоростей, что приводит к достаточно простым выражениям для частоты межмолекулярных столкновений и повышает экономичность модели с точки зрения количества вычислительных операций.

- Частота столкновений различных компонентов содержит коэффициент вязкости смеси, определяемый только в невозмущенном потоке по известным табличным данным для данного состава смеси. В результате отпадает необходимость в использовании аппроксимаций этого коэффициента, зачастую весьма сложных, в зависимости от парциального состава и температуры.

Решения задачи о профиле ударной волны с использованием модельного кинетического уравнения и системы моментных уравнений дают близкие результаты.

Применение моментных уравнений существенно сокращает объем памяти и количество вычислительных операций, так как данная система не содержит пространство скоростей.

Результаты расчетов профилей ударных волн смесей с различным парциальным составом показали значительное влияние соотношения парциальных концентраций компонентов на размер возмущенной области. Были выявлены немонотонные участки на профилях скорости звука. Установлена причина возникновения немонотонности. В результате серии численных тестов установлены следующие закономерности:

- Парциальный состав газовой смеси существенно влияет на размер и форму профилей плотности, скорости, температуры и скорости звука.

- Малая примесь тяжелого компонента значительно изменяет размер и форму профилей легкого компонента.

- Профили скорости звука содержат немонотонные участки, возникновение которых связано с существенно немонотонным изменением кажущейся массы молекул.

- При формировании профиля компонента с малой парциальной концентрацией влияние вязких членов этого компонента мало.

- Указанные выше эффекты существенно зависят от соотношения молекулярных масс.

Разработана физико-математическая модель сильнонеравновесного течения в канале с поглощающими стенками. Разработанная модель позволяет физически

адекватно выставлять граничные условия на конденсирующей поверхности (поглощающей поверхности), не требуя больших объемов памяти и количества вычислительных операций.

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

Разработанные в работе физико-математические модели для описания разделения компонентов газовых смесей в высоконеравновесных течениях могут быть внедрены в существующие и инновационные пакеты программ по вычислительной гидродинамике (CFD). Модели газовых смесей могут быть доработаны и расширены на случай смесей, состоящих из электрически заряженных частиц.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

- МКУ – модельное кинетическое уравнение;
- CFD – Computational Fluid Dynamics (вычислительная гидродинамика);
- МКТ – молекулярная кинетическая теория;
- δ_{ij} – символ Кронекера (тензорная единица);
- n – концентрация молекул;
- m – масса молекулы;
- ρ – плотность газа;
- u_i – проекция вектора макроскопической скорости газа;
- T – термодинамическая температура;
- T_t – температура поступательных степеней свободы молекулы;
- T_r – температура вращательных степеней свободы молекул;
- $\theta = T_t - T_r$;
- $p = \rho RT$ – термодинамическое давление;
- $p^m = \rho RT_t$ – механическое давление;
- P_{ij} – компонент тензора напряжений;
- $p_{ij}^m = P_{ij} - \delta_{ij} p^m$ – компонент тензора неравновесных механических напряжений (девиатора напряжений);
- $p_{ij} = P_{ij} - \delta_{ij} p$ – компонент тензора неравновесных термодинамических напряжений (девиатора напряжений);
- q_i – проекция вектора теплового потока;
- φ_i – проекция вектора теплового потока, обусловленного только поступательным движением молекул;
- ω_i – проекция вектора теплового потока, обусловленного переносом вращательной энергией молекул;
- k – постоянная Больцмана;
- R – удельная газовая постоянная;

$\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ – показатель адиабаты;

Pr – число Прандтля;

M – число Маха;

Kn – число Кнудсена;

$\xi_i = c_i + u_i$ – молекулярная, тепловая и групповая (макроскопическая) скорости;

ε – внутренняя энергия молекулы;

$f = f(t, x_1, x_2, x_3, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \varepsilon)$ – одночастичная функция распределения молекул по скоростям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сон К.Э. Редуцирование полной системы уравнений химической кинетики для течений многокомпонентных высокотемпературных газов на основе метода частичного локального равновесия // ТВТ. – 2020. – Т. 58. – № 1. С. 81-93.
2. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. Трехкомпонентная химическая модель неидеальной плазмы «для пользователей» // ТВТ. – 2021. – Т. 59. – № 1. С. 1-9.
3. Великодный В.Ю., Качармин С.В. Структура ударных волн в трехкомпонентных газовых смесях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2010. – Т. 10. – URL: <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/326/>.
4. Демидов И.В., Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Тихоновец А.В. Асимптотически точное значение функции распределения пар молекул в ударно-сжатой сильно диспергированной смеси газов // IX Поляковские чтения: материалы Международной научной конференции по механике, Санкт-Петербург, 9–12 марта 2021 г. – СПб.: Изд-во ВВМ. – 2021. – С. 471.
5. Владимирова Е.Я., Кузнецов Г.В., Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Сатюков Д.Г., Халиков Р.Ф. Аналитические свойства функций распределения по относительным скоростям молекул в ударно-сжатой бинарной смеси газов // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. – 2025. – № 1. – С.52-65.
6. Harris W.E., Bienkovski G.K. An asymptotic theory of shock structure in binary gas mixtures of disparate masses. // In "Rarefied gas dynamics" (Academic Press). – 1969. – Vol. – № 6. – P. 397-405.
7. Кузнецов М.М., Матвеев С.В., Молостин Е.В., Решетникова Ю.Г., Смотрова Л.В. Высокоскоростная поступательная неравновесность смеси газов в аналитической модели ударной волны // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2016. – Т. 17. – № 1. – URL: <http://chemphys.edu.ru/issue/2016-17-1/articles/613/>.

8. Кузнецов М.М., Кулешова Ю.Д., Смотров Л.В, Решетникова Ю.Г. О максимуме эффекта высокоскоростной поступательной неравновесности в ударной волне // Вестник МГОУ. Физика-математика. – 2016. – № 3. – С. 84-95.
9. Башлыков А.М., Великодный В.Ю. Неравновесные процессы в профиле ударной волны // Письма в ЖТФ. – 1989. – Т. 15. – Вып. 5. – С. 24–28.
10. Гулакова С.В., Попов В.Н. Аналитическое решение уравнения Вильямса в задаче о течении Пуазейля с использованием зеркально-диффузной модели взаимодействия молекул газа со стенками канала // Журнал технической физики. – 2015. – Т. 85. – Вып. 4. – С. 1-6.
11. Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитические решения граничных задач для кинетических уравнений. – М.: МГОУ, 2004. – 286 с.
12. Garcia R.D.M., Siewert C.E. The McCormack model for gas mixtures: Plane Couette flow // Physics of Fluids. – 2005. – Vol. 17. – № 3. – Art. 037102.
13. G. A. Bird The structure of normal shock waves in a binary gas mixture // J. Fluid Mech. – 1968. – Vol. 31. – Part 4. – P. 657-668.
14. Куликов С.В., Соловьева М.Е. Об эффективности статистического моделирования ударной волны в газовой смеси // ЖВМиМФ. -- 1988. – Т. 28. – №12. – С. 1867-1873.
15. Куликов С.В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны // МЖГ. – 1997. – № 4. – С. 171-178.
16. Райнес А.А. Численное исследование температурных макропараметров в ударной волне в бинарной смеси газов на базе кинетического уравнения Больцмана // МЖГ. – 2003. – № 1. – С. 154-165.
17. Куликов С.В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны// МЖГ. – 1997. – №4. – С. 171-178.
18. Raines, A.A. Study of a shock wave structure in gas mixtures on the basis of the Boltzmann equation // Eur. J. Mech. B Fluids. -- 2002. – Vol. 21. – P. 599–610.
19. Куликов С.В., Берзигияров П.К. Статистическое моделирование поступательной неравновесности газовой смеси во фронте ударной волны на

многопроцессорных компьютерах // Выч. мет. программирование. – 2002. – Т. 3. – Вып. 1. – С. 144–149.

20. Raines A.A. Numerical Solution of One-Dimensional Problems in Binary Gas Mixture on the Basis of the Boltzmann Equation // AIP Conference Proceedings. – 2003. – Vol. 663. – P. 67-76. – DOI:[10.1063/1.1581527](https://doi.org/10.1063/1.1581527)

21. Sabouri M., Darbandi M. Numerical study of species separation in rarefied gas mixture flow through micronozzles using DSMC // Phys. Fluids. – 2019. – Vol. 31. – Art. 042004. – DOI: [10.1063/1.5083807](https://doi.org/10.1063/1.5083807).

22. Liu M., Zhang X., Zhang G., Chen Y. Study on micronozzle flow and propulsion performance using DSMC and continuum methods // Acta Mechanica Sinica/Lixue Xuebao. – 2006. – Vol. 22. – P. 409-416. – DOI: [10.1007/s10409-006-0020-y](https://doi.org/10.1007/s10409-006-0020-y).

23. Фролова А.А. Численное сравнение решений кинетических модельных уравнений // Математика и Математическое моделирование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. – 2015. – № 6. – С. 61-77.

24. Титарев В.А., Фролова А.А. Применение модельных кинетических уравнений для расчетов сверх- и гиперзвуковых течений молекулярного газа // Известия РАН. Механика жидкости и газа. – 2018. – № 4. – С. 95–112.

25. Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы // Изв. АН СССР. – МЖГ. – 1975. – № 6. – С. 107-115.

26. Никитченко Ю.А. Модельное кинетическое уравнение многоатомных газов. // ЖВМ и МФ. – 2017. – Т. 57. – № 11. – С. 1882–1894.

27. Todorova B.N., Steijl R. Derivation and numerical comparison of Shakhov and ellipsoidal statistical kinetic models for a monoatomic gas mixture // Eur. J. Mech., B: Fluids. – 2019. – Vol. 76. – P. 390-402.

28. Ворошилова Ю.Н. Модельные кинетические уравнения и описание газовых потоков на разных стадиях релаксации // Вестник Санкт-Петербургского

университета. Математика. Механика. Астрономия. – 2018. – Т. 5 (63), Вып. 2. – С. 278-286.

29. Oguchi H. A kinetic model for a binary mixture and its application to a shock structure // *Rarefied Gas Dynamics: Proceedings*. – New York: Academic Press, –1967. – Vol. 1. – P. 745-758.

30. Abe K., Oguchi H. Shock wave structure in binary gas mixture // *Rarefied Gas Dynamics: Proceedings of the 6th International Symposium* / Ed. by L. Trilling, H.Y. Wachman. – New York: Academic Press. – 1969. – Vol. 1. – Part 2. – P. 425-429.

31. Pirner M. *Kinetic Modeling of Gas Mixtures*. Würzburg: Würzburg University Press. – 2018. – 222 p.

32. Bisi M., Travaglini R. A BGK model for mixtures of monoatomic and polyatomic gases with discrete internal energy // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2020. – Vol. 547. – Art. 124441. – DOI: 10.1016/j.physa.2020.124441.

33. Bisi M., Monaco R., Soares A.J. A BGK model for reactive mixtures of polyatomic gases with continuous internal energy // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. – 2018. – Vol. 51. – № 12. – Art. 125501. – DOI: 10.1088/1751-8121/aaac54.

34. Haack J., Hauck C., Klingenberg C., Pirner M., Warnecke S. A consistent BGK model with velocity-dependent collision frequency for gas mixtures // *Journal of Statistical Physics*. – 2021. – Vol. 184. – Art. 31. – DOI: 10.1007/s10955-021-02816-z.

35. Haack J.R., Hauck C.D., Murillo M.S. A conservative, entropic multispecies BGK model // *Journal of Statistical Physics*. – 2017. – Vol. 168. – P. 826–856. – DOI: 10.1007/s10955-017-1826-7.

36. Garzó V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas // *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*. – 1989. – Vol. 1, № 3. – P. 380–383. – DOI: 10.1063/1.857458.

37. Sofonea V., Sekerka R. BGK models for diffusion in isothermal binary fluid systems // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2001. – Vol. 293. – № 3–4. – P. 494–520. – DOI: 10.1016/S0378-4371(00)00556-4.
38. Andries P., Aoki K., Perthame B. A consistent BGK-type model for gas mixtures // *Journal of Statistical Physics*. – 2002. – Vol. 106. – № 5–6. – P. 993–1018. – DOI: 10.1023/A:1014033703134.
39. Bobylev A.V., Bisi M., Groppi M., Spiga G., Potapenko I.F. A general consistent BGK model for gas mixtures // *Kinetic and Related Models*. – 2018. – Vol. 11, № 6. – P. 1377–1393. – DOI: 10.3934/krm.2018054.
40. Hamel B.B. Kinetic model for binary gas mixtures // *Physics of Fluids*. – 1965. – Vol. 8. – № 3. – P. 418–425. – DOI: 10.1063/1.1761239.
41. Ларина И.Н., Рыков В.А. Метод расщепления второго порядка точности для решения уравнения Больцмана // *Математическое моделирование*. – 2002. – Т. 14. – № 8. – С. 96–101.
42. Ларина И.Н., Рыков В.А. Метод численного решения уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена // *Математическое моделирование*. – 2000. – Т. 12. – № 6. – С. 109–114.
43. Рудяк В.Я. О выводе кинетического уравнения типа Энского для плотного газа // *Теплофизика высоких температур*. – 1985. – Т. 23. – № 2. – С. 268–272.
44. Руев А.Г., Федоров А.В., Фомин В.М. Особенности структуры ударной волны в смесях газов с сильно различающимися массами молекул // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2002. – Т. 43. – № 4. – С. 47–57. – Парал. загл. англ.: *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* – 2002. – Vol. 43. – № 4. – P. 529–537.
45. Lorenzani S. A microchannel flow application of a linearized kinetic Bhatnagar-Gross-Krook-type model for inert gas mixtures with general intermolecular forces // *Physics of Fluids*. – 2019. – Vol. 31. – DOI: [10.1063/1.5098013](https://doi.org/10.1063/1.5098013).
46. Бочкарев А.А., Ребров А.К., Тимошенко Н.И. Структура ударной волны в смеси Ar-He // *Изв. СО АН СССР*. – 1976. – № 3. – Вып. 1. – С. 76–80.

47. Harnett, L.M., Muntz, E.P. Experimental investigation of normal shock wave velocity distribution functions in mixtures of Argon and Helium // *Phys. Fluids*. – 1972. – Vol. 15. – P. 565–572.

48. Gmurczyk A.S., Walenta Z.A. Experimental investigation of shock-wave structure in hydrogen-xenon mixture // *Archives of Mechanics*. – 1981. – Vol. 33.–№ 4. – P. 501–510.

49. Center B. E. Measurements of shock-wave structure in helium-argon mixtures // *Phys. Fluids*. – 1967. – Vol. 10. – № 8. – P. 1777-1784.

50. Хатунцева О.Н. Об учете влияния стохастических возмущений на решения уравнений Навье–Стокса в задаче Хагена–Пуазейля // *Труды МАИ*. – 2018. – № 100. – URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=93311>.

51. Хатунцева О.Н. О нахождении критического числа Рейнольдса ламинарно-турбулентного перехода в задаче Хагена-Пуазейля // *Труды МАИ*. – 2018. – № 101. – URL: <https://trudymai.ru/published.php?ID=96567>.

52. Баранцев Р.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. – М.: Наука. – 1975. –343 с.

53. Глинкина В.С., Никитченко Ю.А., Попов С.А., Рыжов Ю.А. О коэффициенте лобового сопротивления сорбирующей пластины, установленной поперек потока // *Известия РАН. МЖГ*. – 2016. – № 6. – С. 77–84; англ.пер: Glinkina V.S., Nikitchenko Yu.A., Popov S.A., Ryzhov Yu.A. Drag Coefficient of an Absorbing Plate Set Transverse to a Flow // *Fluid Dynamics*, November. – 2016, – Vol. 51. – Issue 6, – P 791–798.

54. Никитченко Ю.А., Попов С.А., Тихоновец А.В. Комбинированная кинетико-гидродинамическая модель течения многоатомного газа // *Математическое моделирование*. – 2019. – Т. 31. – № 2. – С. 18-32. – Парал. загл. англ.: Nikitchenko Yu.A., Popov S.A., Tikhonovets A.V. Composed kinetic-hydrodynamic model of polyatomic gas flow // *Mathematical Models and Computer Simulations*. – 2019. – Vol. 31, №. 2. – P. 18-32.

55. Никитченко Ю.А. Модель течения газа вблизи поверхности раздела сред / Ю.А.Никитченко // Математическое моделирование. – 2003. – Т.15. – № 8. – С. 88-98.
56. Никитченко Ю.А. Сравнение различных моделей течения газа в широком интервале чисел Кнудсена // Математическое моделирование. – 2004. – Т. 16. – № 8. – С. 77-93.
57. Никитченко Ю.А. Феноменологическая модель граничных условий на твердой поверхности // Вестник МАИ. – 2012. – Т. 19. – № 3. – С. 5-14.
58. Савков С.А., Юшканов А.А. О зависимости коэффициентов скольжения от характера взаимодействия молекул газа с твердой поверхностью // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. – 1986. – № 5. – С. 149-152.
59. Поддоскин А.Б., Юшканов А.А., Яламов, Ю.И. О кинетических коэффициентах в граничной задаче скольжения многоатомного газа с вращательными степенями свободы // ТВТ. – 2001. – Т. 39. – Вып. 6. – С. 977–985
60. Struchtrup, H. Regularization of Grad's 13 moment equations: Derivation and linear analysis / H. Struchtrup, M.Torrilhon // Physics of fluids. – 2003. – V. 15, – № 9. – P. 2668-2680.
61. Тимохин М.Ю. Применение системы моментных уравнений R13 для численного моделирования газодинамических течений // Вестник Нижегородского университета. – 2011. – № 4. – С. 1168-1176.
62. Gupta V.K., Torrilhon M. Higher order moment equations for rarefied gas mixtures // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 2015. – Vol. 471. – № 2177. – Art. 20140754. – DOI: 10.1098/rspa.2014.0754.
63. Галкин В.С., Коган М.Н., Макашев Н.К. Обобщенный метод Чепмена–Энскога: часть 1. Уравнения неравновесной газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. – 1974. – Т. 5. – № 5. – С. 66-76.
64. Галкин В.С., Коган М.Н., Макашев Н.К. Обобщенный метод Чепмена–Энскога: часть 2. Уравнения многоскоростной многотемпературной смеси газов // Ученые записки ЦАГИ. – 1975. – Т. 6. – № 1. – С. 15-27.

65. Галкин В.С., Шавалиев М.Ш. Газодинамические уравнения высших приближений метода Чепмена–Энскога // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 1998. – № 4. – С.3-28.
66. Fernandez de la Mora J., Fernandez Feria R. Two-fluid Chapman-Enskog theory for binary gas mixtures // Physics of Fluids. – 1987. – Vol. 30. – № 7. – P. 2063-2071. – DOI: 10.1063/1.866141.
67. Галкин, В.С. Вывод уравнений медленных течений смесей газов из уравнений Больцмана // Ученые записки ЦАГИ. – 1974. – Т. 5. – № 4. – С. 40-47.
68. Алексеев Б. В., Полев В. В. Расчет структуры ударной волны с помощью уравнений гидродинамики повышенной точности // ТВТ. – 1990. – Т. 28. – Вып. 3. – С. 614– 616.
69. Ruggeri T., Simić S. Non-equilibrium diffusion temperatures in mixture of gases via Maxwellian iteration // Ricerche di Matematica. – 2017. – Vol. 66. – P. 293–312. – DOI: 10.1007/s11587-016-0301-0.
70. Kamali R., Emdad H., Alishahi M.M. A New Set of Conservation Equations Based on the Kinetic Theory Applied to Gas Mixture Problems // Scientia Iranica. – 2007. – Vol. 14. – № 5. – P. 458–466.
71. Kosuge S. Model Boltzmann equation for gas mixtures: Construction and numerical comparison // European Journal of Mechanics – B/Fluids. – 2009. – Vol. 28. – P. 170–184.
72. Morse T.F. Kinetic Model Equations for a Gas Mixture // Physics of Fluids. – 1964. – Vol. 7. – № 12. – P. 2012–2020. – DOI: 10.1063/1.1711112.
73. Brini F. Heat transfer in a binary gas mixture between two parallel plates: an application of linear extended thermodynamics // Acta Mechanica. – 2011. – Vol. 220. – P. 87–105. – DOI: 10.1007/s00707-011-0465-3.
74. Bianca C., Dogbe C. On the Boltzmann gas mixture equation: linking the kinetic and fluid regimes // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2015. – Vol. 28. – № 1–3. – P. 1–15. – DOI: 10.1016/j.cnsns.2015.05.015.

75. Bianca C., Dogbe C. Recovering Navier-Stokes equations from asymptotic limits of the Boltzmann gas mixture equation // *Communications in Theoretical Physics*. – 2016. – Vol. 66. – № 3. – P. 335–348.
76. Струминский В.В., Шавалиев М.Ш. Явления переноса в многоскоростных и многотемпературных смесях газов. // *ПММ*. – 1986. – Т.50. – Вып. 1. – С. 83-90.
77. Струминский В.В. Влияние диффузионной скорости на течение газовой смеси. // *ПММ*. – 1974. – Т.38. – Вып. 2. – С. 203-210.
78. Aoki K., Bisi M., Groppi M., Kosuge S. Two-temperature Navier-Stokes equations for a polyatomic gas derived from kinetic theory // *Physical Review E*. – 2020. – Vol. 102. – Art. 023104. – DOI: 10.1103/PhysRevE.102.023104.
79. Киселев С.П., Руев Т.А., Фомин В.М., Шавалиев М.Ш., Трунев А.П. Ударно-волновые процессы в двухкомпонентных и двухфазных средах. – Новосибирск: СО РАН, «Наука». – 1992. – 261 с.
80. Руев А.Г., Федоров А.В., Фомин В.М. Особенности структуры ударной волны в смесях газов с сильно различающимися массами молекул // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2002. – Т. 43. – № 4. – С. 47-57. – Парал. загл. англ.: Ruev A.G., Fedorov A.V., Fomin V.M. Features of shock wave structure in gas mixtures with strongly differing molecular masses // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. – 2002. – Vol. 43. – № 4. – P. 529-537.
81. Todorova B.N., White C., Steijl R. Modeling of nitrogen and oxygen gas mixture with a novel diatomic kinetic model // *AIP Advances*. – 2020. – Vol. 10. – DOI: 10.1063/5.0021672.
82. Куликов С.В. Поступательная неравновесность трехкомпонентного газа во фронте ударной волны // *МЖГ*. – 1997. – № 4. – С. 171-178.
83. Kosuge S., Kuo H.-W., Aoki K. A kinetic model for a polyatomic gas with temperature-dependent specific heats and its application to shock-wave structure // *J. Stat. Phys.* – 2019. – Vol. 177. – P. 209–251.
84. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. – М.: Наука. – 1967. – 440 с.

85. 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.

86. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Программа расчета ударной волны смеси двух одноатомных газов с использованием кинетической модели // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2023666595, 02.08.2023.

87. Brun, Raymond High Temperature Phenomena in Shock Waves. – Springer. – 2012. – 343 p.

88. 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.

89. 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.

90. Никитченко Ю.А., Сергеева Н.И. Программа расчета ударной волны смеси многоатомных газов с использованием кинетической модели // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2024682040, 17.09.2024.

91. Никитченко Ю.А. Модели неравновесных течений. – М.: Изд-во МАИ. – 2013. – 160 с.

92. Никитченко Ю.А. О целесообразности учета коэффициента объемной вязкости в задачах газовой динамики. // Изв. РАН. – МЖГ. – 2018. – № 2. – С. 128-138.

93. 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>.