

Краткие сообщения

03

Численное изучение поступательной неравновесности в смеси He и Xe методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования

© С.В. Куликов

Институт проблем химической физики РАН,
142432 Черноголовка, Московская область, Россия
e-mail: kuls@icp.ac.ru

(Поступило в Редакцию 13 января 2016 г. В окончательной редакции 14 ноября 2016 г.)

Изучены распределения пар частиц по относительным скоростям во фронте ударной волны для случая малой добавки Хе в Не. Оказалось, что величины распределений по относительным скоростям для пар атомов Хе значительно (вплоть до 10^9) превышают их равновесные значения за волной в узкой зоне фронта при больших скоростях в области относительно малых (равных 2) чисел Маха ударной волны. Величины распределений пар из атомов Не и Хе по относительным скоростям таким свойством не обладают.

DOI: 10.21883/JTF.2017.06.44520.1735

Введение

Изучение поступательной неравновесности, а именно распределений пар частиц по относительным скоростям (g) во фронте ударной волны очень важно для понимания пороговых физико-химических процессов инициируемых ударной волной. В [1] сделана попытка обобщения имеющихся в этой области результатов, полученных методом Монте-Карло нестационарного статистического моделирования (ММКНСМ) (или direct simulation Monte Carlo (DSMC) в англоязычной литературе). В [2] качественно были подтверждены результаты [1]. Причем представленные в [2] результаты были получены путем численного решения уравнения Больцмана.

Можно рассматривать в качестве меры неравновесности максимальные (обнаруженные при моделировании в различных точках фронта) для данного числа Маха ударной волны (M) величины превышений парных распределений частиц по g соответствующего равновесного распределения по g за волной (MGD). Необходимо подчеркнуть, что величина превышения определяется как отношение этих значений распределений. Суммируя ранее полученные результаты, следует отметить, что при достаточно малом содержании примеси для распределений по g , в случае пар, состоящих из одной частицы легкого газа и одной частицы тяжелой примеси (G_{LH}), величины MGD меньше, чем для случая пар, состоящих только из частиц тяжелой примеси (G_{HH}). Кроме того, при уменьшении концентрации тяжелой примеси значения MGD стремятся к предельным значениям. Последнее очевидно в силу того, что в предельном случае тяжелые частицы перестают сталкиваться между собой.

Ниже представлены результаты моделирования для двух случаев малой добавки Хе в Не при различных значениях M . Приведенные ниже результаты несколько неожиданны, так как свидетельствуют о существовании сильной поступательной неравновесности при относительно малых числах M ударной волны.

Методика моделирования

Расчеты были проведены ММКНСМ [6]. Кратко процедура моделирования состоит в следующем. В первый момент времени модельные частицы, представляющие газовую смесь, имеют в соответствии с начальными условиями заданные скорости и распределены по ячейкам размера Δx , на которые разбито исследуемое пространство координат. Полагается, что столкновения парные и с определенной вероятностью происходят только между частицами, находящимися в одной ячейке.

Процесс эволюции рассматриваемой системы за интервал времени Δt расщепляется на два этапа: 1) только перемещение частиц с неизменными скоростями в промежутке времени Δt ; 2) только изменение скоростей частиц в результате их столкновений в этом же промежутке времени при их фиксированных положениях.

Данный метод моделирования позволяет получать решение уравнения Больцмана, избегая очень трудоемкого решения последнего и предоставляя наиболее полную и достоверную информацию. Кроме того, метод не имеет принципиальных ограничений по ширине спектра энергий столкновений, однако с ростом энергий рассматриваемых реакций резко возрастает вычислительная сложность задачи. Лишь относительно недавно развитие вычислительной техники предоставило возможность существенно продвинуться в область больших энергий.

Рассматривалось одномерное пространство координат и трехмерное пространство скоростей. Иными словами, отслеживалось только движение частиц вдоль потока. А при моделировании столкновений частиц рассматривались все три составляющие их скоростей. Рассматривалась смесь He и тяжелого компонента Xe. Атомы рассматривались как абсолютно упругие твердые сферы. Среднее число частиц в ячейке перед фронтом $N = 12\,000$. Полагалось, что значения параметров потока на границах отрезка моделирования перед и за ударной волной равновесные. Был реализован мелкозернистый параллелизм [6] на восьми процессорах ЭВМ МВС100К Межведомственного суперкомпьютерного центра.

Отношение масс атомов He и Xe, как широко принято, полагалось 1:33, а диаметров 1:2.25 [7]. Последнее отношение получено из измерения взаимной диффузии рассматриваемых газов. Необходимо отметить, что в [8] были экспериментально измерены профили концентраций в смеси 97% He + 3% Xe при $M = 3.89$. Приведенное выше отношение диаметров атомов He и Xe не позволяет воспроизвести эти профили не только в наших, но и в расчетах ряда других исследователей. При этом следует отметить, что полученные в [4,9–11] профили хорошо согласуются между собой, несмотря на то что расчеты были выполнены различными методами. Но в эти расчеты были заложены модели абсолютно жестких и упругих сфер. И все эти упомянутые расчеты дают гораздо меньшую сепарацию компонентов во фронте. От результатов расчетов, приведенных выше, отличаются результаты представленные в [2], которые были получены на основе численного решения уравнения Больцмана с использованием потенциала Леннард–Джонса. Приведенные в [2] профили концентраций в смеси 97% He + 3% Xe при $M = 3.89$ хорошо совпадают с измеренными в [8]. Это настораживает, так как в [4,11] представлено сравнение профилей концентраций в смеси 97.3% He + 2.7% Ar (аналогично малая примесь тяжелого газа в легком) при $M = 2.07$, полученных в результате численного моделирования, с экспериментальными [12]. Причем из данных [4,11] следует, что лучшее соответствие с экспериментом было получено для модели абсолютно жестких и упругих сфер, а модель точечных центров отталкивания давала более пологий профиль Ar (большую сепарацию компонентов во фронте). В [2] сравнение с экспериментом для смеси He–Ar было выполнено только для смесей с содержанием Ar 11.5% и выше для $M \approx 1.6$ по-прежнему с использованием потенциала Леннард–Джонса. А для таких смесей можно использовать как модель абсолютно жестких и упругих сфер, так и модель точечных центров отталкивания или полагать одинаковые параметры взаимодействия атомов как для He, так и для Ar и получать неплохое соответствие с экспериментом [4,11]. В [2] не было проведено сравнение с результатами опытов [12]. Так что вопрос остается открытым. К сожалению, никто из

других экспериментаторов не померил профили компонентов в условиях эксперимента [8] или близких к этим условиям.

Результаты моделирования

В таблице приведены величины MGD для G_{LH} и G_{HH} . Результаты представлены для различных M и для объемных концентраций Xe 1 и 0.5%.

Имеет место сильное увеличение (на 4 порядка) максимального MGD для G_{HH} при уменьшении концентрации Xe с 1 до 0.5%. При этом максимум MGD наблюдается при более низком M ($M = 2$). Следует отметить, что если в [8] приведены правильные профили концентраций, то расчеты с диаметрами атомов, приводящими к этим профилям, дадут еще большие значения MGD [1].

Ниже представлены в качестве иллюстрации результаты, полученные для $M = 2$ при концентрации Xe 0.5%. На рис. 1 показаны профили относительных концентраций $n_i^0 = (n_i - n_{i1}) / (n_{i2} - n_{i1})$ и относительных кинетических температур $T_i^0 = (T_i - T_1) / (T_2 - T_1)$. Здесь индексы 1 и 2 относятся к параметрам газа перед и за ударной волной. Расстояние x нормировано на среднюю длину свободного пробега в смеси перед волной λ , во всех расчетах $\Delta x = 0.15\lambda$. Следует отметить, что профили n_i^0 и T_i^0 , полученные при концентрации Xe 1%, практически совпадают с профилями при 0.5%.

Значения MGD

M		1.8	2	2.5	3	5	7
1%	G_{LH}	–	200	100	10	20	10
	G_{HH}	–	40	6000	2000	$2 \cdot 10^5$	$4 \cdot 10^4$
0.5%	G_{LH}	10	6	20	–	–	–
	G_{HH}	100	10^9	$8 \cdot 10^6$	–	–	–

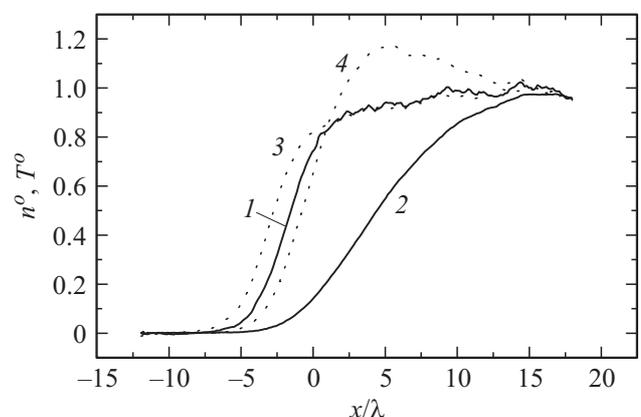


Рис. 1. Относительные профили концентраций и температур компонентов: 1 — n_{He}^0 , 2 — n_{Xe}^0 , 3 — T_{He}^0 , 4 — T_{Xe}^0 .

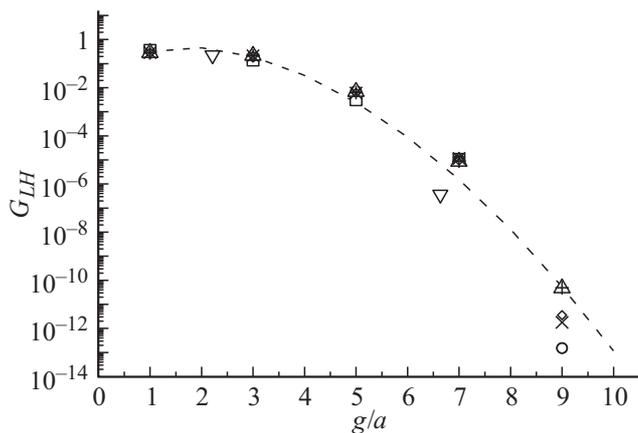


Рис. 2. Распределения G_{LH} по g во фронте ударной волны (пояснение в тексте).

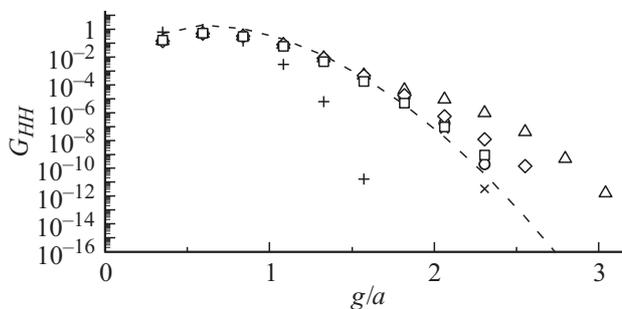


Рис. 3. Распределения G_{HH} по g во фронте ударной волны (пояснение в тексте).

Кроме того, на рис. 2 представлены G_{LH} : --- — равновесное за фронтом, ∇ — при $x = -11.42$, \square — при $x = -3.08$, \circ — при $x = -0.08$, Δ — при $x = 1.42$, \diamond — при $x = 2.92$, \times — при $x = 4.42$, $+$ — при $x = 17.32$. И на рис. 3 представлены G_{HH} : --- — равновесное за фронтом: $+$ — при $x = -11.42$, \times — при $x = 1.42$, \circ — при $x = -0.2.92$, Δ — при $x = 4.42$, \diamond — при $x = 5.92$, \square — при $x = 17.32$. Величины g нормированы на a , где a — скорость звука в потоке перед фронтом. Эти распределения нормированы так, что интегралы от них по g/a равны единице. Представление о точности значений данных распределений можно получить из [1]. При высоких g на хвостах распределений это примерно 50%.

Как видно, во время пересечения газом фронта распределения G_{LH} не сильно превышают даже в области высоких g равновесные значения G_{LH} за волной. Напротив, величины G_{HH} значительно (вплоть до 10^9) превышают их равновесные значения за волной в узкой зоне фронта при больших g . Но моделирование показало, как и следовало ожидать, очень малую вероятность молекулярных столкновений тяжелого компонента с тяжелым. Следовательно, высокоэнергетические хвосты G_{HH} образуются во фронте главным образом в результате столкновений атомов тяжелого компонента Xe с атомами He.

Заключение

Оказалось, что величины G_{HH} значительно (вплоть до 10^9) превышают их равновесные значения за волной в узкой зоне фронта при больших g . Это довольно неожиданный результат. При реализации таких столкновений с высокой энергией относительного движения не исключено сильное возбуждение внутренних степеней свободы He или Xe и даже их ионизация.

Автор благодарен О.Н. Терновой за помощь в обработке результатов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-08-01266а).

Список литературы

- [1] Куликов С.В. // Матем. модел. 1999. Т. 11. № 3. С. 96–104.
- [2] Додулат О.И., Клосса Ю.Ю., Черемисин Ф.Г. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. Электронный журнал. 2013. Т. 4. Вып. 1. <http://www.chemphys.edu.ru>.
- [3] Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б. и др. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26. № 12. С. 1839.
- [4] Genich A.P., Kulikov S.V., Manelis G.B., Chereshnev S.L. // Sov. Tech. Rev. V. Therm. Phys. 1992. Vol. 4. N 1. P. 1. Генич А.П., Куликов С.В., Манелис Г.Б., Черешнев С.Л. Поступательная релаксация в ударных волнах в газах. Препринт ИХФЧ АН СССР. Черногловка. 1991.
- [5] Емельянов А.В., Еремин А.В., Куликов С.В. // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 5. С. 24–29.
- [6] Куликов С.В., Берзигияров П.К. // Вычисл. методы и програм. 2002. Т. 3. № 2. С. 51–56.
- [7] Bird G.A. Molecular gas dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир. 1981.
- [8] Gmurczyk A.S., Tarczynski M., Walenta Z.A. Proceedings of the 11h Rarefied Gasdynamics Symp, Cannes, France. July 1978. 3. 333. Cd. R. Campargue, 1979.
- [9] Schmidt B., Worner M. // Acta Mech. 1983. Vol. 46. N 1–4. P. 49–55.
- [10] Руев Г.А., Фомин В.М., Шавалиев М.Ш. / Численные и аналитические методы в динамике разреженных газов. Тр. VIII Всес. конф. по динамике разр. газов. Москва, 1985. М.: 1986. С. 12–17.
- [11] Куликов С.В., Соловьева М.Е. // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т. 28. № 12. С. 1867–1873.
- [12] Center R.E. // Phys. Fluid. 1967. Vol. 10. N 8. P. 1777–1784.