Прямое статистическое моделирование динамики сильнонедорасширенной струи с частицами

© *Н.Ю. Быков*[1], *Ю.Е. Горбачев*[2], *Д.Д. Ковалев*[2], *А.Э. Васильев*[1]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия
[2] Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
E-mail: ddkov187@internet.ru

Поступило в Редакцию 4 мая 2026 г.
В окончательной редакции 23 июня 2026 г.
Принято к публикации 23 октября 2026 г.

Методом прямого статистического моделирования проведен расчет сверхзвуковой сильнонедорасширенной струи с частицами. Рассмотрено истечение струи смеси гелий–ксенон (отношение масс компонентов 32.8) в гелий и кластеризующейся струи аргона в аргон в околоконтинуальном и переходном по числу Кнудсена режимах. Получены данные о газодинамических параметрах смеси и компонентов. Для переходного режима продемонстрирован неравновесный характер течения в дальнем поле струи как для смеси He–Xe, так для смеси мономеры–кластеры аргона. Показано, что изменение параметров течения может существенно поменять поведение кластеров.

Ключевые слова: сверхзвуковая струя, затопленная струя, кластеры, смесь газов, DSMC.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.24.64020.9661k

Исследование процессов истечения сверхзвуковых струй газа с частицами разной природы в разреженное пространство имеет важное значение для решения актуальных задач аэрокосмической техники, вакуумной техники и астрофизики. Расширение затопленной сверхзвуковой струи в общем случае сопровождается формированием скачков уплотнения, слоев смешения, характерных областей разгона/торможения газа. Структура такого течения и его параметры для струй газа без учета процессов конденсации и наличия дисперсной фазы изучены достаточно полно и изложены в ряде статей и монографий (см., например, [1,2]). Наличие частиц в струе, по массе существенно превышающих массу атомов/молекул несущего газа, приводит к изменению параметров течения. В свою очередь наличие ударно-волновой структуры влияет на параметры двигающихся в потоке частиц, в особенности если частицы являются кластерами, способными расти и испаряться в газовой фазе [3].

Понимание динамики кластеров и их трансформации в сверхзвуковой затопленной струе представляется актуальным и для интерпретации результатов экспериментальных наблюдений. В зависимости от параметров торможения газа в источнике и геометрии сопла на начальном участке расширяющейся струи происходит рост кластеров (агрегатов, состоящих из десятков и даже сотен атомов) [4]. В дальнем поле струи за скачками уплотнения в ряде экспериментов, связанных с зондированием струи электронным пучком, наблюдается слабо угасающее послесвечение, которое отличается от послесвечения „традиционной“ струи [5]. Предполагается, что источником данного излучения являются кластеры, преодолевшие скачки уплотнения. Поток излучающих кластеров в дальнем поле течения получил название „кластерного следа“. При истечении в разреженное пространство на существенном удалении от источника могут проявляться эффекты разреженности, и открытым остается вопрос о том, насколько газодинамические параметры кластеров в „следе“ могут отличаться от параметров несущего газа.

Следует отметить, что численное исследование струй с процессами кластеризации, истекающих в разреженное пространство, предпочтительно проводить с использованием кинетических подходов (например, метода DSMC — the direct simulation Monte Carlo method, метод прямого статистического моделирования Монте-Карло) с целью учета возможных неравновесных эффектов. Однако моделирование на основе кинетического подхода струйных течений, соответствующих условиям эксперимента с „кластерным следом“, при которых средний размер кластера g в струе превышает десять мономеров (малые числа Кнудсена), затруднено с вычислительной точки зрения.

Настоящая работа посвящена численному исследованию методом прямого статистического моделирования динамики сильнонедорасширенных сверхзвуковых струй с малыми кластерами ($g < 5$) или малой примесью атомов, масса которых существенно превышает массу атомов несущего газа. Последний случай представляет самостоятельный интерес, а также способствует лучшему пониманию динамики кластеров размера $g > 10$ в кластеризующейся струе.

Целью работы является определение параметров указанных струй в зависимости от степени разреженности течения и выявление возможных неравновесных эффектов.

В работе рассматривается истечение газа из источника в затопленное пространство через отверстие диаметра D. В зависимости от варианта расчета истекающий газ представляет собой: 1) смесь инертных газов He

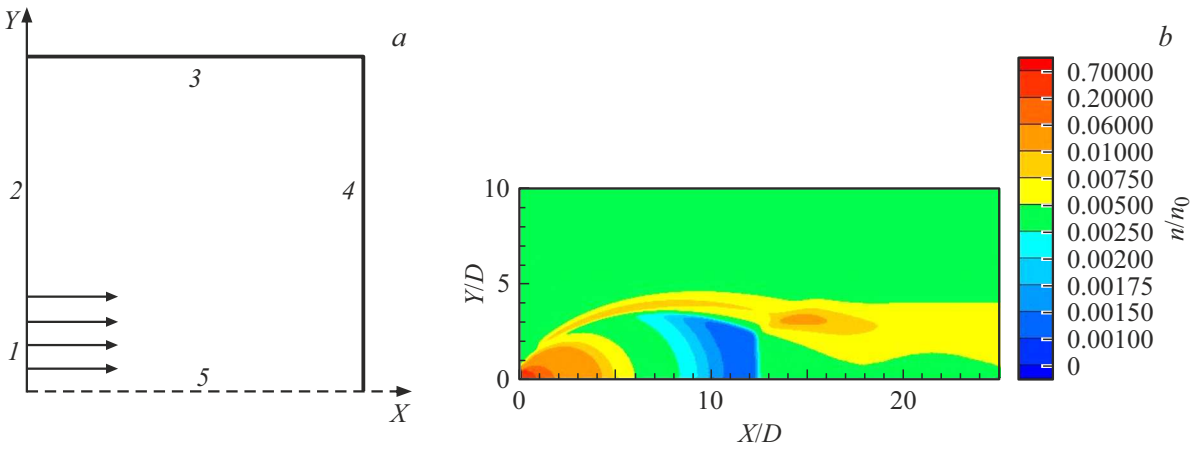


Рис. 1. Схема расчета (a) и распределение концентрации смеси He–Xe для варианта 1 (b).

Варианты расчета

Вариант	Газ	Конденсация	Kn_D	Kn_L
1	He–Xe	Нет	$2.2 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-3}$
2	He–Xe	Нет	$4.4 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$
3	Ar	Да	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$6.1 \cdot 10^{-3}$
4	Ar	Да	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$

и Xe (отношение массы атома Xe к массе атома He $R_m = m_{\mathrm{Xe}}/m_{\mathrm{He}} = 32.8$); 2) аргон. Параметры торможения газа в источнике (концентрация n_0 и температура T_0) известны. В случае смеси He–Xe мольная доля Xe составляет $X_{\mathrm{Xe}} = 0.015$, что соответствует массовой доле 0.33. Газ окружающего пространства: 1) гелий (в случае истечения смеси He–Xe); 2) аргон (в случае истечения аргона). Его концентрация и температура n_∞ и T_∞ соответственно. Предполагается $n_0 \gg n_\infty$, $T_\infty = T_0$. Задача решается в упрощенной осесимметричной постановке. Течение внутри источника не рассматривается. На граничной поверхности *1* (рис. 1, a), разделяющей источник и область затопленного пространства, ставятся условия звукового истечения: $M = c_*/a_* = 1$ (c_* — скорость потока, a_* — локальная скорость звука). Функция распределения по скоростям на границе *1* полагается максвелловской. На границе *2* предполагается диффузное отражение атомов с полной аккомодацией энергии и температурой T_0. На удаленных границах *3* и *4* параметры соответствуют параметрам окружающего газа n_∞, T_∞; *5* — ось симметрии.

Процесс истечения газа в разреженное пространство характеризуется двумя числами Кнудсена [1,6], определяющими степень разреженности струи и характер взаимодействия струи с газом затопленного пространства

$$Kn_D = \frac{\lambda_0}{D}, \qquad Kn_L = \frac{\lambda_\infty}{L}. \tag{1}$$

Здесь λ_0 — средняя длина свободного пробега, определенная по параметрам торможения в источнике, λ_∞ — средняя длина свободного пробега на бесконечности, L — характерный размер струи. В рассматриваемых вариантах в качестве характерного размера принимается расстояние до диска Маха, определяемое как [7]:

$$\frac{L}{D} = 0.67\sqrt{N}, \tag{2}$$

где $N = p_0/p_\infty$, p_0 и p_∞ — давление газа в источнике и на бесконечности. В работе рассмотрены четыре варианта расчета (см. таблицу). Для всех вариантов расчета параметр $N = 313.2$ ($N^{1/2} = 17.7$). Варианты 1 и 2 соответствуют истечению смеси He–Xe, варианты 3 и 4 — струе аргона. Варианты различаются степенью разреженности течения. Для вариантов 1 и 3 $Kn_D \ll 1$ и $Kn_L \ll 1$ — режим течения в струе и области смешения с внешним газом гидродинамический (сплошносредный), для вариантов 2 и 4 $Kn_D \ll 1$ и $Kn_L \approx 0.1$ — режим взаимодействия струи и внешнего газа переходный.

В случае истечения струи аргона в расчете учитывались процессы формирования кластеров. В работе использована модель кластеризации, представленная в [8]. Аналогично [3] с целью искусственной „генерации“ кластеров размера $g > 2$ процесс кластеризации регулировался в окрестности среза сопла.

Метод расчета — DSMC. В расчетах использована VHS-модель столкновений (variable hard sphere, модель твердых сфер переменного диаметра) с параметрами из работы [9]. Вычислительные параметры, необходимые для учета процесса кластеризации, соответствовали [8].

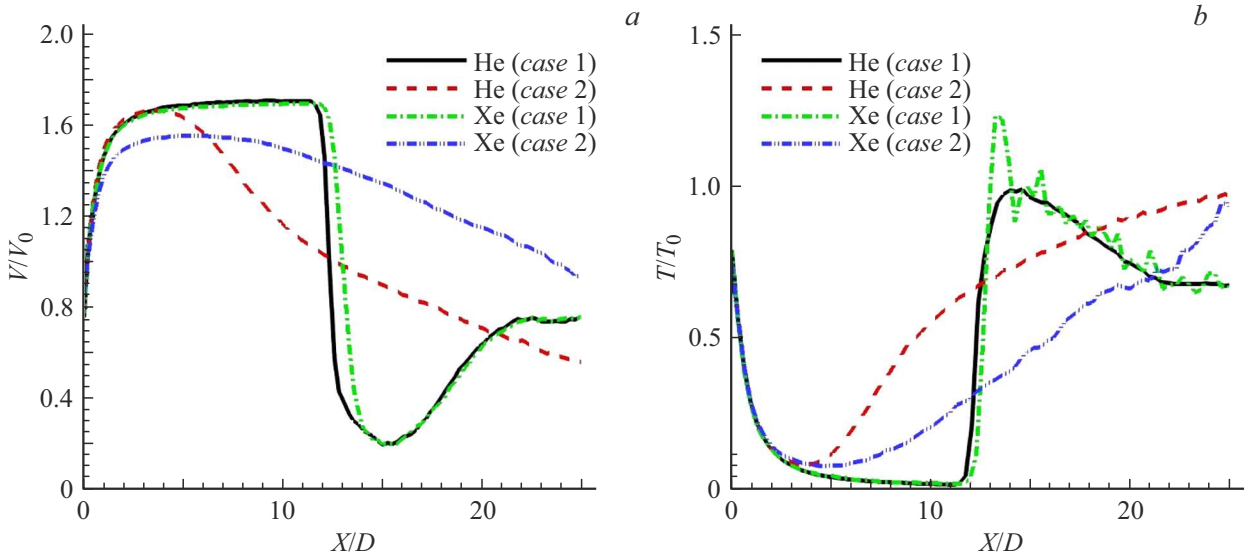


Рис. 2. Осевые распределения скорости (a) и температуры (b) компонентов смеси He–Xe для вариантов 1 и 2.

Использован собственный параллельный код DSMC на базе алгоритма декомпозиции расчетной области.

В случае гидродинамического режима (Kn_D, $Kn_L \ll 1$) при истечении сверхзвуковой струи в затопленное пространство в поле течения наблюдается ударно-волновая структура, включающая висячие скачки и диск Маха, которая в зависимости от степени нерасчетности может носить периодический характер (содержать несколько „бочек“). Сначала рассмотрим взаимодействие струи с окружающим газом в околосплошносредном режиме течения для смеси He–Xe (вариант 1). Расстояние до диска Маха, согласно (2), равно $L/D = 12$. В расчетах в рассматриваемом диапазоне параметров скачок имеет некоторую толщину, плотность начинает возрастать начиная с расстояния $L/D = 12$, максимальный градиент плотности соответствует координате $L/D = 12.5$ (рис. 1, b).

До скачка в области свободного расширения струи атомы He и Xe двигаются согласованно, их скорости и температуры совпадают (рис. 2). Аналогичный вывод можно сделать и для движения компонентов смеси за скачком: скорости и температуры He и Xe совпадают при $X/D \gtrsim 14$.

Наличие двух компонент в газовой смеси с существенно различающимися массами атомов приводит к проявлению неравновесных эффектов в области скачка. Для малых значений числа Kn_L рост плотности и температуры, а также падение скорости для Xe происходят с небольшой задержкой (рис. 2). С этой точки зрения наличие существенно отличающейся по массе примеси приводит к некоторому росту зоны поступательной релаксации. Следует обратить внимание на „всплеск“ температуры тяжелого компонента в области скачка (относительно температуры легкого основного компонента смеси). Интенсивность скачка в рассматриваемом случае составляет примерно $J = p_b/p \approx 250$ (p_b, p — давление за скачком и перед ним соответственно). Температура гелия в скачке возрастает более чем в 60 раз. Максимальное значение температуры Xe оказывается на 30 % выше.

Качественно схожее поведение параметров наблюдается при решении классической задачи о структуре ударной волны в смеси газов с разными массами [10].

Основное отличие случая истечения „однокомпонентной“ струи аргона с формирующимися в газовой фазе кластерами от случая истечения струи смеси инертных газов с большим отношением масс компонентов заключается: 1) в возможности кластеров разрушаться/испаряться, уменьшая свой размер (число мономеров в кластере); 2) в выделении/поглощении энергии связи в ходе реакций кластерообразования.

На рис. 3 представлено изменение скорости и температуры атомов аргона и кластеров размера $g = 3$ на оси струи (вариант 3, $Kn_L \ll 1$, давление $p_0 = 20\,\text{kPa}$). Протекание реакций на начальном участке струи приводит к выделению энергии в поток, росту температуры и в меньшей степени скорости смеси. Малая степень разреженности для этого варианта предопределяет равновесие кластеров и мономеров на начальном участке. Видно, что по аналогии со смесью He–Xe в начале ударной волны наблюдается некоторое „запаздывание“ падения скорости и роста температуры. На распределении температуры присутствует максимум. При прохождении центрального скачка происходит разрушение кластеров, связанное с ростом температуры. На графиках скорости и температуры соответствующие кривые за локацией скачка отсутствуют. Высокая скорость испарения предопределяется большим ростом температуры газа в скачке.

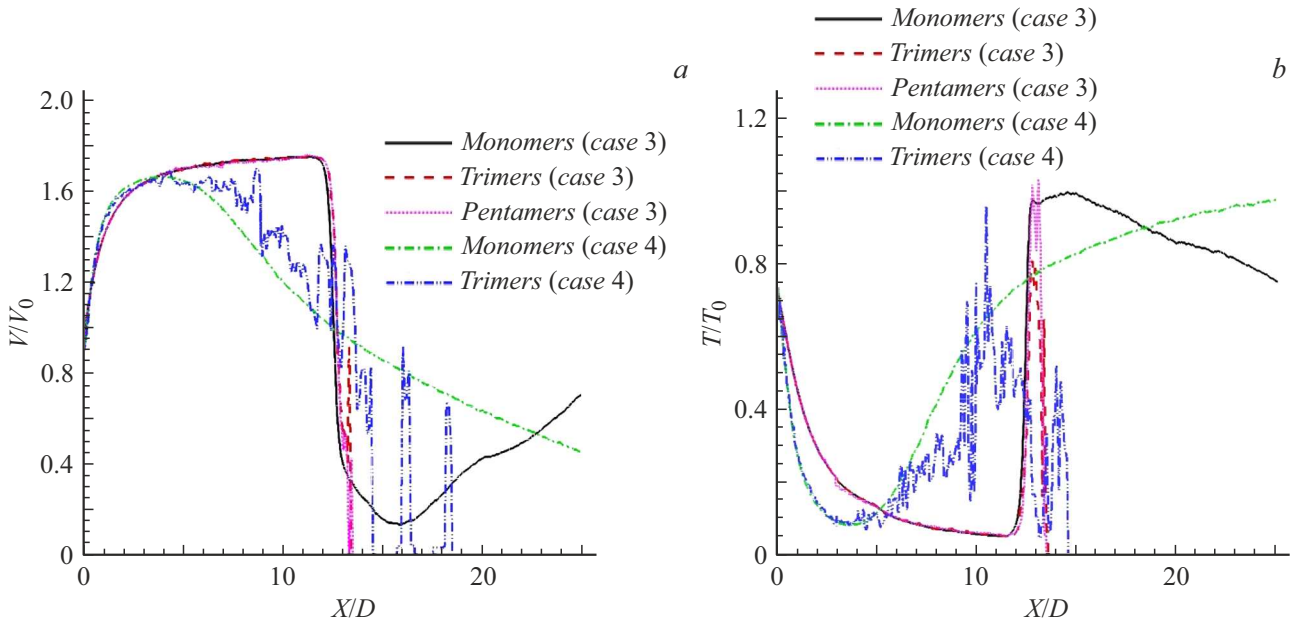


Рис. 3. Осевые распределения скорости (a) и температуры (b) компонентов смеси мономеры–кластеры аргона для вариантов 3 и 4.

Для случая $Kn_L \approx 0.1$ картина течения существенно меняется (варианты 2 и 4). Центральный скачок уплотнения размывается, оценка его положения по точке, соответствующей началу роста плотности в струе, не совпадает с оценкой согласно (2).

Область согласованного движения компонентов смеси He–Xe (вариант 2) с одинаковыми скоростями и температурами на начальном участке струи существенно уменьшается и составляет порядка $L/D \approx 3$. В дальнем поле течения ($X/D \approx 25$) скорости и температуры компонентов продолжают существенно различаться. Таким образом, для рассмотренного значения числа Кнудсена существенная область течения является неравновесной.

Параметры разреженной струи, в которой протекают процессы кластерообразования (вариант 4), при $Kn_L \approx 0.1$ также существенно отличаются от аналогичных при гидродинамическом режиме ($Kn_L \ll 1$). Основное отличие заключается в отсутствии скачкообразного разрушения кластеров. Кластеры продолжают разрушаться за счет столкновений с атомами буферного газа до расстояния $X/D \approx 17$. Концентрации кластеров меняются монотонно (с учетом статистического разброса). Кластеры формируются в самой струе с учетом законов сохранения импульса и энергии. Их скорости и температуры оказываются ближе к скоростям и температурам мономеров (в отличие от различия этих параметров у гелия и ксенона). Однако различия между параметрами кластеров и атомов аргона также существенны в дальнем поле струи при $X/D > 6$.

Таким образом, поведение кластеров в сверхзвуковой затопленной струе аргона при больших значениях характерного числа Kn_L (переходный и околомолекулярный режимы течения) схоже с поведением тяжелого компонента в смеси инертных газов с большим отношением масс компонентов. В дальнем поле струи наблюдается зона неравновесного течения, характеризующаяся различием скоростей и поступательных температур кластеров и мономеров. Для малых значений Kn_L при отношении масс компонентов около 30 в дальнем поле струи наблюдается согласованное (с одинаковыми скоростями и температурами) движение различных компонентов смеси. Различия проявляются в области ударной волны. В струе с кластеризацией кластеры частично/полностью разрушаются за центральным скачком, течение мономеров и кластеров в дальнем поле струи также является согласованным.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект 22-11-00080-П, https://rscf.ru/en/project/22-11-00080/) при использовании вычислительного ресурса СКЦ СПбПУ Петра Великого.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] В.Г. Дулов, Г.А. Лукьянов, *Газодинамика процессов истечения* (Наука, Новосибирск, 1984).

[2] В.С. Авдуевский, Э.А. Ашратов, А.В. Иванов, У.Г. Пирумов, *Газодинамика сверхзвуковых неизобарических струй* (Машиностроение, М., 1989), с. 61–68.

[3] Н.Ю. Быков, Ю.Е. Горбачев, Д.Д. Ковалев, В.В. Мизина, Изв. РАН. Механика жидкости и газа, № 6, 88 (2025). https://mzg.ipmnet.ru/ru/Issues/2025/6/88
[4] O.F. Hagena, Surf. Sci., **106** (1-3), 101 (1981). DOI: 10.1016/0039-6028(81)90187-4
[5] К.А. Дубровин, А.Е. Зарвин, В.В. Каляда, А.С. Яскин, Письма в ЖТФ, **46** (7), 32 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.07.49217.18011 [K.A. Dubrovin, A.E. Zarvin, V.V. Kalyada, A.S. Yaskin, Tech. Phys. Lett., **46** (4), 335–338 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020040057].
[6] N.Y. Bykov, Yu.E. Gorbachev, S.A. Fyodorov, Front. Mech. Eng., **9**, 1216927 (2023). DOI: 10.3389/fmech.2023.1216927
[7] H. Ashkenas, F.S. Sherman, *Rarefied gas dynamics* (Academic Press, N.Y., 1965), p. 84–105. https://ntrs.nasa.gov/citations/19660017917
[8] N.Y. Bykov, S.A. Fyodorov, Yu.E. Gorbachev, Phys. Fluids, **36** (8), 087134 (2024). DOI: 10.1063/5.0222569
[9] G.A. Bird, *The DSMC method* (CreateSpace Independent, 2013).
[10] О.И. Додулад, Ю.Ю. Клосс, Ф.Г. Черемисин, Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **14** (1), (2013). http://chemphys.ipmnet.ru/issues/2013-14-1/articles/211/