

Численное моделирование акустической неустойчивости в неравновесном колебательно-возбужденном газе

© С.С. Храпов, Г.С. Иванченко, В.П. Радченко, А.В. Титов

Волгоградский государственный университет,
400062 Волгоград, Россия
e-mail: khrapov@volsu.ru

Поступило в Редакцию 19 мая 2023 г.
В окончательной редакции 7 июля 2023 г.
Принято к публикации 30 октября 2023 г.

На основе газодинамических методов проведено численное моделирование нелинейной динамики звуковых волн в колебательно-возбужденном неравновесном газе и исследованы основные стадии эволюции акустической неустойчивости. Показано, что в численных моделях линейный режим с экспоненциальным законом роста амплитуды возмущений хорошо согласуется с линейным анализом устойчивости, а на нелинейной стадии развития акустической неустойчивости происходит формирование системы ударных волн. Продемонстрированы эффекты нелинейного насыщения интенсивности ударных волн, обусловленные стабилизацией акустической неустойчивости.

Ключевые слова: неравновесный газ, колебательная релаксация, акустическая неустойчивость, численное моделирование, метод CSPH-TVD.

DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56805.f213-23

Введение

Свойства неравновесных сред важны для понимания физических процессов, происходящих, например, в колебательно-возбужденном газе [1]. При определенных условиях неравновесная среда становится акустически активной, т.е. амплитуда звуковых волн в ней нарастает [2–4]. Акустическая неустойчивость в неравновесном колебательно-возбужденном газе может приводить к [2]: сверхотражению звуковых волн на границе раздела равновесной и неравновесной сред; возбуждению встречного акустического ветра; появлению новых свойств параметрических взаимодействий звуковых, вихревых и энтропийных мод; изменению критического числа Рейнольдса ламинарно-турбулентного перехода, структуры пограничного слоя, коэффициентов аэродинамического сопротивления; изменению структуры, скорости и условий устойчивости ударных волн, а также параметров течения за фронтом детонационных волн.

Важным инструментом исследования процессов и явлений в газоплазменных средах наряду с физическим экспериментом является вычислительный эксперимент, основанный на решении уравнений гидродинамики хорошо апробированными численными методами [5–7]. Для оценки адекватности численных алгоритмов, используемых при численном моделировании неустойчивых газодинамических течений, необходимо сравнивать полученные результаты моделирования с линейным анализом устойчивости [8].

Цель настоящей работы — разработка численной модели (инструмента) для исследования нелинейной динамики акустической неустойчивости в колебательно-возбужденном газе с различными моделями релаксации

на основе методов численного газодинамического моделирования.

1. Математическая модель колебательно-возбужденного газа

В настоящей работе ограничимся рассмотрением модели однокомпонентного колебательно-возбужденного газа с экспоненциальной релаксацией Ландау–Теллера [2,3,9] в одномерном приближении

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{G}, \quad (1)$$

где $\mathbf{U} = \{\rho, \rho u, \rho \varepsilon, \rho \varepsilon_v\}^T$ — вектор консервативных переменных, $\varepsilon = 0.5u^2 + p/[(\gamma - 1)\rho]$, ρ , u и p — плотность, скорость и давление газа соответственно, γ — показатель адиабаты, ε_v — удельная колебательная энергия молекул газа, $\mathbf{F} = \{\rho u, \rho u^2 + p, (\rho \varepsilon + p)u, \rho \varepsilon_v u\}^T$ — вектор плотности потока величины \mathbf{U} ,

$$\mathbf{G} = \{0, \rho g, \rho(\varepsilon_v - \varepsilon_v^e)/\tau - \rho \Lambda + \rho u g, \rho(\varepsilon_v^e - \varepsilon_v)/\tau + \rho Q\}^T,$$

ε_v^e — равновесное значение удельной колебательной энергии, τ — время колебательной релаксации, Q и Λ — удельные мощности нагрева (накачки) и охлаждения (теплоотвода) соответственно. Система (1) замыкается уравнением состояния идеального газа: $p = R \rho T$, где $R = R_*/\mathcal{M}$ — газовая постоянная, R_* — универсальная газовая постоянная, \mathcal{M} — молярная масса газа.

В двухтемпературном приближении удельная колебательная энергия молекул газа ε_v и ее равновесное значение ε_v^e являются функциями колебательной T_v и термо-

динамической T температур соответственно [3,7,10]:

$$\varepsilon_v(T_v) = \frac{R\theta_v}{\exp(\theta_v/T_v) - 1}, \quad \varepsilon_v^e \equiv \varepsilon_v(T) = \frac{R\theta_v}{\exp(\theta_v/T) - 1}, \quad (2)$$

где θ_v — характеристическая колебательная температура газа. Формулы (2) записаны для одной колебательной моды. Если многоатомная молекула имеет несколько колебательных мод, то полную колебательную энергию газа (при учете только первого энергетического уровня каждой моды) можно представить в виде суммы [10]:

$$\varepsilon_v = \sum_{\ell} r_{\ell} \varepsilon_{v,\ell} \quad \text{и} \quad \varepsilon_v^e = \sum_{\ell} r_{\ell} \varepsilon_{v,\ell}^e,$$

где ℓ — номер моды, а r_{ℓ} — степень вырождения ℓ -моды.

В газодинамических расчетах для времени колебательной релаксации обычно применяется модель Милликена–Уайта [7,11], которая при температурах ниже 3000 К хорошо согласуется как с экспериментальными данными, так и с выводами кинетической теории [12]. Существуют и другие более точные модели расчета времени релаксации при более высоких температурах [10,13–15]. Применяются также модели, основанные на аналитических аппроксимациях экспериментальных данных [10]. В общем случае для времени колебательной релаксации можно записать

$$\tau(\hat{p}, T) = \frac{1}{\hat{p}} \frac{\exp(a_0 + a_1 T^{-1/3} + a_2 T^{-2/3} + a_3 T^{1/3} + n \ln T)}{1 - m \exp(-\theta_{\star}/T)}, \quad (3)$$

где $\hat{p} = p/p_A$ — давление в единицах атмосферного давления ($p_A = 101\,325$ Па), θ_{\star} — минимальная из характеристических температур колебательных мод [15], коэффициенты a_k и n определяются экспериментально [10,16] или рассчитываются с использованием полупырических формул [11,15], а параметр m позволяет учитывать ($m = 1$) или не учитывать ($m = 0$) поправку кинетической теории [15].

2. Результаты численного моделирования

Для численного моделирования нелинейной динамики неустойчивых звуковых волн в неравновесном колебательно-возбужденном газе (1)–(3) воспользуемся методом CSPH-TVD (Combined Smoothed Particle Hydrodynamics–Total Variation Diminishing, [17,18]), который обладает вторым порядком точности по пространственной координате и времени. Будем рассматривать динамику неустойчивых звуковых волн на фоне начального стационарного и однородного распределения параметров течения ($f_0 = \text{const}$) покоящегося газа ($u_0 = 0$), а также ограничимся моделью с постоянными, не зависящими от плотности и температуры, значениями функций нагрева и охлаждения. Тогда из уравнений баланса

энергии в (1) для начального состояния получим следующие соотношения: $Q_0 = \Lambda_0$ и $\varepsilon_v(T_{v0}) - \varepsilon_v^e(T_0) = \tau_0 Q_0$. Из последнего уравнения можно определить начальную неравновесность среды, т.е. найти колебательную температуру $T_{v0} \neq T_0$, которая для случая двухатомных молекул с одной колебательной модой может быть с учетом (2) выражена как

$$T_{v0} = T_0 \bar{\theta}_v \left[\ln \frac{\bar{\theta}_v \exp \bar{\theta}_v + S (\exp \bar{\theta}_v - 1)}{\bar{\theta}_v + S (\exp \bar{\theta}_v - 1)} \right]^{-1},$$

где

$$\bar{\theta}_v = \frac{\theta_v}{T_0}, \quad S = \frac{\tau_0 Q_0}{RT_0}$$

— безразмерный параметр, характеризующий степень неравновесности среды в [2,3,17].

Поскольку в настоящей работе мы не рассматриваем конкретную газовую среду, а исследуем основные закономерности нелинейной эволюции акустической неустойчивости в зависимости от параметров модели релаксации, то имеет смысл перейти в уравнениях (1)–(3) к безразмерным величинам. Это позволит уменьшить количество калибровочных коэффициентов нашей численной модели и упростить процедуру сравнения результатов численного моделирования с линейным анализом устойчивости в [2,3,17]. Введем следующие характерные масштабы численной модели: $l_t = \tau_0$, $l_u = c_{s0} = \sqrt{\gamma p_0 / \rho_0}$, $l_x = c_{s0} \tau_0$, $l_T = T_0$, $l_p = p_0$, $l_{\rho} = \rho_0 / \gamma$. Далее будем использовать безразмерные величины $\bar{f} = f/l_f$, тогда с учетом уравнения состояния для времени релаксации из (3) получим:

$$\bar{\tau}(\bar{\rho}, \bar{T}) = \frac{\gamma}{\bar{\rho}} \exp \left\{ \bar{a}_1 \bar{T}^{-1/3} + \bar{a}_2 \bar{T}^{-2/3} + \bar{a}_3 \bar{T}^{1/3} + (n-1) \ln \bar{T} \right\} \frac{1 - m \exp(-\bar{\theta}_{\star})}{1 - m \exp(-\bar{\theta}_{\star}/\bar{T})}, \quad (4)$$

где $\bar{a}_1 = a_1 T_0^{-1/3}$, $\bar{a}_2 = a_2 T_0^{-2/3}$, $\bar{a}_3 = a_3 T_0^{1/3}$, а параметр a_0 исключается из рассмотрения.

Акустическая неустойчивость в колебательно-возбужденном газе может возникать при определенных значениях параметров $\tau_{\rho} = \partial \ln \tau / \partial \ln \rho$, $\tau_T = \partial \ln \tau / \partial \ln T$ и степени неравновесности среды S . Поскольку в рассматриваемой модели (4) $\tau_{\rho} = -1$, то условия, при которых звуковые волны неустойчивы, имеют вид [2,3,17]: $\tau_T < \gamma_1^{-1}$ и $S > \gamma_1 C_v (1 - \gamma_1 \tau_T)^{-1}$, где $\gamma_1 = \gamma - 1$, $C_v = R^{-1} \partial \varepsilon_v^e / \partial T$. Таким образом, начальное распределение параметров газовой среды и интенсивности нагрева должны удовлетворять этим условиям, обеспечивающим возможность нарастания амплитуды акустических волн на начальной линейной стадии эволюции по закону $\propto \exp(\bar{\alpha} \bar{x})$, где $\bar{\alpha} = \alpha c_{s0} \tau_0$ — безразмерный акустический инкремент. Максимальное значение акустического инкремента достигается на частотах $\bar{\omega} = \omega \tau_0 \approx 2\pi$ и определяется как $\bar{\alpha}_{\max} \approx \gamma_1 [S(1 - \gamma_1 \tau_T) - \gamma_1 C_v] / (2\gamma)$ [2,3].

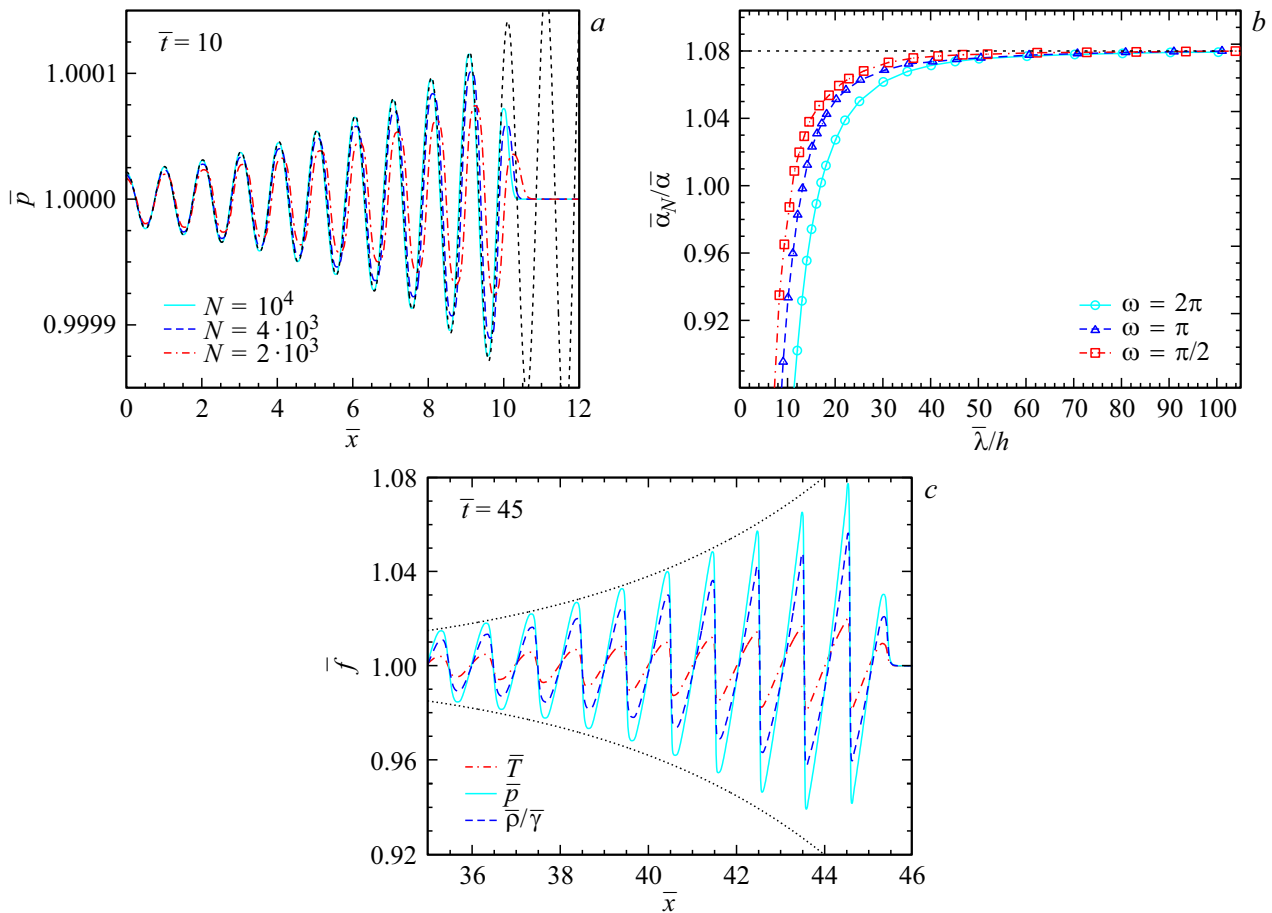


Рис. 1. Квазилинейная стадия эволюции неустойчивых звуковых волн. *a* — распределения давления в акустической волне на сгущающихся сетках (линейная стадия); *b* — зависимости отношения $\bar{\alpha}_N/\bar{\alpha}$ от пространственного разрешения $\bar{\lambda}/h$ для различных значений частоты $\bar{\omega}$; *c* — распределения давления, плотности и температуры во время переходной (квазилинейной) стадии. Точечная линия соответствует решениям линейной модели.

Численные эксперименты проводились для различных частот возмущений $\bar{\omega} = (0.5, 1, 2)\pi$. Расчетная область $\bar{x} \in [0, \mathcal{L}]$ ($\mathcal{L} = 100$) покрывалась ячейками размером $h = \mathcal{L}/N$, а количество расчетных ячеек задавалось в пределах $N = 10^3 - 10^4$. Источник вынужденных возмущений, локализованный в начале координат ($|\bar{x}| < \bar{\lambda}/4$), задан в виде $\bar{g}(\bar{x}, \bar{t}) = \hat{g} \sin(\bar{\omega}\bar{t})$, где $\bar{\lambda} = 2\pi/\bar{\omega}$ — безразмерная длина волны возмущений, $\hat{g} \approx 10^{-4}$ — амплитуда возмущающей удельной силы. В качестве краевых условий в численных экспериментах будем использовать на левой границе условие „твердая стенка“, а на правой — „условие свободного протекания“. Для демонстрации основных стадий эволюции акустической неустойчивости выбраны следующие базовые параметры численной модели: $\gamma = 1.4$, $\bar{a}_1 = 10$, $\bar{a}_2 = \bar{a}_3 = n = m = 0$, $\bar{\theta} = \bar{\theta}_* = 6$, $\bar{\omega} = 2\pi$, $N = 10^4$. Далее по умолчанию применяются эти базовые значения.

Квазилинейная стадия эволюции неустойчивых акустических волн представлена на рис. 1. К моменту времени $\bar{t} = 10$ (рис. 1, *a*) источник генерирует волновой пакет с десятью максимумами и начальной амплитудой относительных возмущений давления и плотности $\sim 10^{-5}$.

Как видно из рис. 1, *a*, сгенерированный волновой пакет представляет собой гармоническую волну с экспоненциально возрастающей амплитудой, за исключением лишь первого максимума, который граничит с невозмущенной средой и является передним (правым) фронтом волнового пакета. Для сравнения с линейным анализом устойчивости [2,3] на этом рисунке представлены результаты моделирования на последовательности сгущающихся сеток, демонстрирующие сходимость численного решения к решению линейной модели: $\tilde{f} = \hat{f}_0 \exp(\bar{\alpha}\bar{x}) \sin(\bar{k}\bar{x})$, где \hat{f}_0 — начальная амплитуда возмущений, \bar{k} — безразмерное волновое число. Важной характеристикой при моделировании динамики неустойчивых звуковых волн, влияющих на скорость роста возмущений в численном эксперименте, является пространственное волновое разрешение, т.е. количество ячеек приходящееся на длину волны ($\bar{\lambda}/h$). На рис. 1, *b* для различных частот показана зависимость от $\bar{\lambda}/h$ величины акустического инкремента $\bar{\alpha}_N$, получаемого в численном эксперименте, по отношению к $\bar{\alpha}$ из линейной модели. Видно, что при значениях $\bar{\lambda}/h > 50$ различия в скорости роста амплитуды волн в

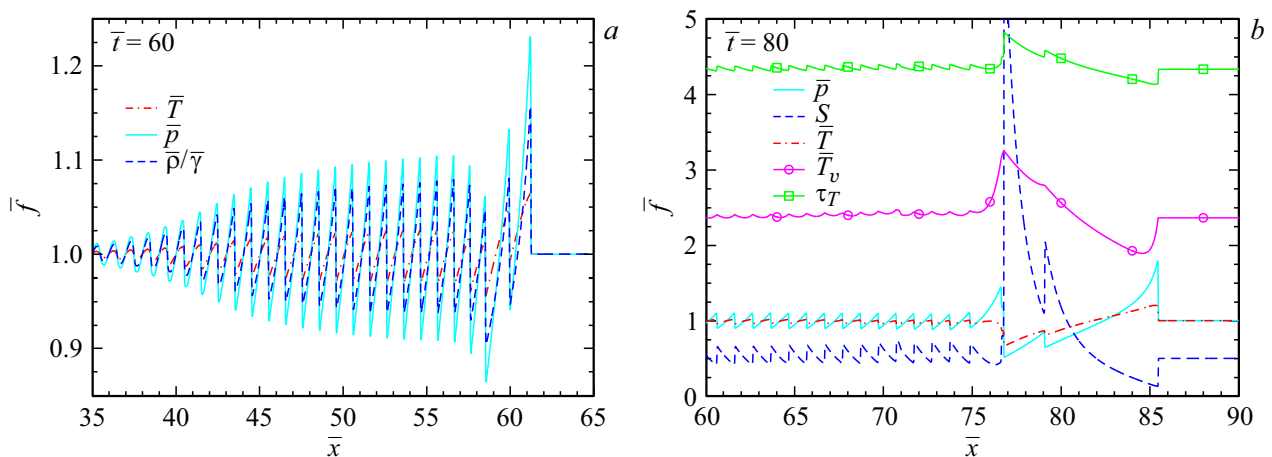


Рис. 2. Нелинейная стадия эволюции неустойчивых звуковых волн. Показаны пространственные распределения безразмерных параметров \bar{f} в акустической волне в различные моменты времени.

линейной и численной моделях составляют менее 1%. Эволюцию неустойчивых акустических волн в момент времени $\bar{t} = 45$ (рис. 1, *c*) можно охарактеризовать как переходную стадию от линейного к нелинейному режиму, на которой происходит нелинейное укручение фронтов волн и линейный синусоидальный профиль деформируется в нелинейный „пилообразный“.

Нелинейная стадия эволюции акустической неустойчивости показана на рис. (2). К моменту времени $\bar{t} = 60$ (рис. 2, *a*) происходит нелинейное насыщение относительной амплитуды возмущений на уровне $\sim 2.5\text{--}10\%$ ($\bar{f}_{\max} \sim 1.025\text{--}1.1$), а весь волновой пакет приобретает „пилообразную“ форму. На данном этапе неустойчивые звуковые волны формируют мелкомасштабную систему ударных волн (УВ) с практически одинаковой амплитудой и пространственным масштабом (расстоянием между фронтами) $\sim \bar{\lambda}$. Как видно из рис. 2, *a*, на границе волнового пакета амплитуда ударных волн начинает изменяться за счет нелинейного взаимодействия с соседними УВ внутри волнового пакета и невозмущенным газом. Амплитуда и скорость первого максимума возрастают, что приводит к расширению волнового пакета. Из рис. 2, *b* видно, что при дальнейшем распространении системы УВ в пространстве нелинейные эффекты расширения волнового пакета и взаимодействия соседних УВ усиливаются. К моменту времени $\bar{t} = 80$ давление на переднем фронте волнового пакета (первый максимум) возрастает до значения $\bar{f}_{\max} \approx 1.8$, а расстояние между первым и вторым максимумами увеличивается приблизительно в 6.5 раз. На данном этапе эволюции между первым и третьим максимума формируется область пониженного давления и температуры с минимумом в окрестности третьего максимума. В результате степень неравновесности существенно возрастает ($S_{\max} > 5$), что приводит к дополнительному нелинейному усилению неустойчивости и исчезновению эффекта нелинейного насыщения в этой области. Изменения других параметров модели таких как τ_T и \bar{T}_v , также способствуют эф-

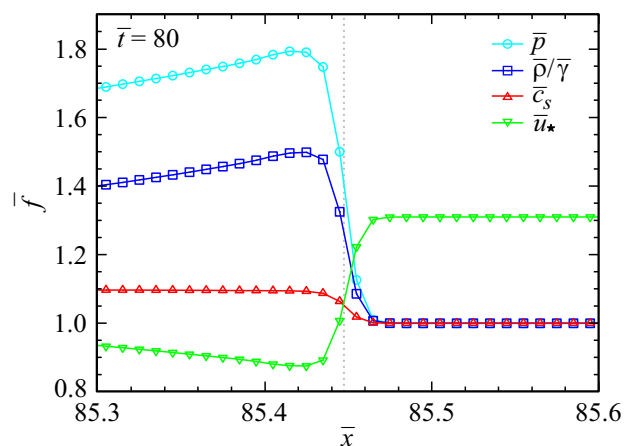


Рис. 3. Структура УВ в области первого максимума волнового пакета в момент времени $\bar{t} = 80$ (см. рис. 2, *b*), где $\bar{u}_* = |\bar{u} - \bar{u}_1|$ — скорость натекания газа на фронт УВ, \bar{u}_1 — скорость УВ (первого максимума волнового пакета).

фекту нелинейного усиления неустойчивости. Детальное исследование этих эффектов, включая возможное развитие в этой области тепловой неустойчивости, выходит за рамки настоящей работы.

Структура ударной волны, сформировавшейся к моменту времени $\bar{t} = 80$ на переднем фронте волнового пакета, показана на рис. 3. Газ натекает на фронт волны справа со сверхзвуковой скоростью $\bar{u}_* = |\bar{u} - \bar{u}_1|$ (где \bar{u}_1 — скорость УВ) и числом Маха $\mathcal{M} = \bar{u}_*/\bar{c}_s \approx 1.3$, а после перехода через звуковую точку на фронте УВ течение становится дозвуковым ($\mathcal{M} \approx 0.8$). Ширина фронта УВ в данном численном расчете составляет около 5 ячеек, что соответствует $\sim 0.05\bar{\lambda}$. Аналогичная структура ударных волн образуется и в окрестности других максимумов волнового пакета, но с меньшими амплитудами возмущений и отклонениями числа Маха от единицы ($\mathcal{M} \sim 1.08$).

Выводы

На основе численного газодинамического метода CSPH-TVD разработан программный комплекс для исследования нелинейной динамики акустической неустойчивости в колебательно-возбужденном газе с различными моделями релаксации. Исследована динамика неустойчивых звуковых волн в неравновесном газе на линейной и нелинейной стадиях развития акустической неустойчивости. На линейной стадии показана сходимости численных решений нашей модели к результатам линейного анализа устойчивости. Нелинейная стадия характеризуется формированием системы УВ с почти постоянной амплитудой приблизительно для десяти максимумов волнового пакета. В окрестности переднего фронта волнового пакета обнаружен эффект нелинейного усиления неустойчивости, приводящий к быстрому охлаждению газа и требующий более детального дальнейшего исследования с различными моделями колебательной релаксации, нагрева и охлаждения.

В работе представлены численные расчеты для значений параметров, соответствующих двухатомному газу H_2 при температуре $T_0 \approx 1000$ К и давлении $p_0 = p_A$ [16]. Построенную численную модель можно использовать для исследования динамики акустической неустойчивости и в газах с несколькими колебательными модами, например, CO_2 , предварительно определив полную колебательную энергию газа. В некотором приближении нашу модель можно применять и для смесей газов, предварительно рассчитав усредненные/эффективные значения параметров модели для смеси, что позволит на качественном уровне определить основные закономерности эволюции акустической неустойчивости в таких средах, а затем при необходимости уточнить решения в рамках более сложной многокомпонентной модели.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (РНФ) № 23-21-00401, <https://rscf.ru/project/23-21-00401/>

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.И. Осипов, А.В. Уваров. УФН, **162**(11), 1 (1992). DOI: 10.3367/UFNr.0162.199211a.0001
- [2] В.Г. Макарян, Н.Е. Молевич. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **3**, id. 84 (2005). <http://chemphys.edu.ru/issues/2005-3/articles/84/>
- [3] V.G. Makaryan, N.E. Molevich. Plasma Sources Sci. Technol., **16**(1), 124 (2007). DOI: 10.1088/0963-0252/16/1/017
- [4] D. Zavershinskii, N. Molevich, S. Belov, D. Riashchikov, AIP Conf. Proc., **2304**(1), id. 020028 (2020). DOI: 10.1063/5.0034849
- [5] Т.Г. Елизарова, А.А. Злотник, М.А. Истомина. АЖ, **95**(1), 11 (2018). DOI: 10.7868/S0004629918010012
- [6] М.А. Бутенко, И.В. Беликова, Н.М. Кузьмин, С.С. Хохлова, Г.С. Иванченко, А.В. Тен, И.В. Кудина. Математическая физика и компьютерное моделирование, **25**(3), 73 (2022). DOI: 10.15688/mpcm.jvolsu.2022.3.5
- [7] Г.В. Шоев, Е.А. Бондарь, Г.П. Облапенко, Е.В. Кустова. Теплофизика и аэромеханика, **23**(2), 159 (2016).
- [8] A.V. Khoperskov, S.S. Khrapov, E.A. Nedugova. Astronomy Lett., **29**(4), 246 (2003). doi.org/10.1134/1.1564856
- [9] L. Landau, E. Teller. Phys. Z. Sowjetunion, **10**, 34–43 (1936).
- [10] А.А. Косарева, Е.А. Нагнибеда. Вестник СПбГУ, Сер. 1, **3**(61), 468 (2016).
- [11] R.C. Millikan, D.R. White. J. Chem. Phys., **39**, 3209 (1963).
- [12] Е.В. Кустова, Г.П. Облапенко, И.З. Шарафутдинов. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **16**, id. 536 (2015). <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/536/>
- [13] Б.Ф. Гордиец, А.И. Осипов, Е.В. Ступоченко, Л.А. Шелепин. УФН, **108**(4), 655 (1972).
- [14] C. Park. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. (J. Wiley and Sons, NY., Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1990).
- [15] Э.А. Ковач, С.А. Лосев, А.Л. Сергиевская, Н.А. Храпак. Физико-химическая кинетика в газовой динамике, **10**, id. 332 (2010). <http://chemphys.edu.ru/issues/2010-10/articles/332/>
- [16] В.Е. Алемасов, А.Ф. Дрегаллин, А.П. Тишин, В.А. Худяков, В.Н. Костин. *Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания*, (ВИНИТИ, АН СССР, М. 1980), т. 10, № 1, 379 с.
- [17] S. Khrapov, A. Khoperskov. J. Conference Series, **973**, 012007 (2018). DOI: 10.1088/1742-6596/973/1/012007
- [18] S. Khrapov, A. Khoperskov, S. Khoperskov. J. Conference Series, **1392**, 012041 (2019). DOI: 10.1088/1742-6596/1392/1/012041